

N6 共通基盤科学技術

N6.04 データ駆動型物質・材料開発

キーワード：インフォマティクス、AI、機械学習、ロボット、自動化、自律化、Self-Driving Lab（自動運転ラボ）、基盤モデル、Digital Transformation（DX）

本領域の論文・特許のデータについては以下をご参照ください

・ダッシュボード版：<https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2025-FR-02.html>

・PDF版：https://www.jst.go.jp/crds/pdf/2025/FR/CRDS-FY2025-FR-03/CRDS-FY2025-FR-03_41N604.pdf

1. 研究開発領域の定義

マテリアル分野の全ての研究開発プロセスにおいて、データとAIを活用し、新しいマテリアルの発見や特性向上を効率的に進めることを目指す領域である。そのためには、AIを用いた多様なデータの生成・収集を行い、それをAIが活用可能な形で統合することが必要である。AIが制御する自動自律研究開発システムにおいては、人間の知識や経験・勘をデジタル化し、これらを組み合わせることでAIシステムを高度化していくこと（Human-in-the-loop）が重要である。また、研究開発計画の立案を含めた研究開発そのもののAIによる自律化（マテリアル分野の「AIサイエンティスト」創出）を進めることも重要である。そのためにはマテリアル分野特有のAI技術の研究開発や、マテリアル分野特化型の基盤モデルを構築し活用することが必要である。

2. 本領域の意義

バイオ分野の長年の課題であったタンパク質の立体構造を予測するAIである「AlphaFold」の研究開発者が、2024年のノーベル化学賞を受賞したことに象徴されるように、科学を推進する担い手としてのAI、「AI for Science」の流れは急速に加速している。この領域も今後は、AI駆動型研究開発という名称に変わっていくと考えられる。このAI for Scienceの流れをマテリアル分野に取り入れるためには、AIがマテリアル研究開発における推論を正しく行うための良質かつマルチモーダルなデータが必要である。これには、物性シミュレーションによる計算データ、ロボットを用いた自動自律実験による実験データ、文献を含む既存データなど、大量のデータをハイスループットで生成・収集することが不可欠である。これは、マテリアル分野が、広大な探索空間を有する一方で、現状ではデータが限られているという特徴を持つためである。また、日本はマテリアル分野の研究開発力に従来から一定の強みを持っており、こうした研究開発者の知識や経験・勘をデジタル化し、それらのデータを活用可能な形で統合することが重要である。これらのデータとAIを活用することにより、人間の能力だけでは困難な材料やプロセスの広大な空間を効率的に探索することが可能となる。この発展より、SDGsの達成やSociety 5.0の実現に向け、ますます高度化するマテリアル研究開発に対する要求に答えることができる。本領域を進めることは、日本におけるマテリアル分野の研究開発者数の減少に対処するためにも非常に重要であり、国際競争力の強化に大きく貢献すると期待される。

3. 研究開発の動向

3.1 概要

マテリアル分野におけるデータ駆動型研究開発において、2011年に米国が発表した国家的取り組みである「Materials Genome Initiative（MGI）」は、画期的な出来事であった¹⁾。MGIは、材料開発に要する期間を半減するという目標を掲げ、材料イノベーションの基盤として計算・実験・データインフォマティクスを統合する新たなプラットフォーム構築を提案した。プラットフォーム化する上でデータの相互運用が重要であり、

欧州を中心に Findable, Accessible, Interoperable, Reusable (FAIR) 原則¹に基づいたデータ管理が導入されている。また、FAIR原則を国際的に実装するための取り組みも欧州を起点に始まっている。Open Databases Integration for Materials Design (OPTIMADE) は、複数の材料データベースを共通の Application Programming Interface (API) で接続するための国際標準であり、欧米の多くの材料データベースシステムが参加している。日本では、2010年代後半に、科学技術振興機構 (JST) による物質・材料研究機構 (NIMS) の「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ (MI²)」(2015年度～2019年度) や、新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) による産業技術総合研究所 (AIST) の「超先端材料超高速開発基盤技術 (超超) プロジェクト」(2016年度～2021年度) などのマテリアルズインフォマティクスの大型国家プロジェクトが実施された。これにより、計算・プロセス・計測の三位一体の開発や、産業界との密接な連携といった、日本独自の動きが展開された。また、これらのプロジェクトの一環として、「MatNavi」や「AIST Materials Gate データプラットフォーム (DPF)」といった無機材料、高分子、金属など多様な材料に関するデータベースが構築された。これらの取り組みは、2021年のマテリアル革新力強化戦略におけるデータ駆動型研究開発の促進の提言へとつながり、これに基づく文部科学省の「マテリアル DX プラットフォーム」や経済産業省の「マテリアル・プロセスイノベーション (MPI) プラットフォーム」といった「マテリアル Digital Transformation (DX)」基盤の構築が進展している。

本領域の重要な潮流は、AI技術による自動自律実験である。2020年には、英国のリバプール大学による「A mobile robotic chemist (光触媒)²⁾」、カナダのブリティッシュ・コロンビア大学などによる「Self-driving laboratory (有機薄膜)³⁾」、日本の東京科学大学などによる「Autonomous materials synthesis (無機薄膜)⁴⁾」といった、AIとロボットを利用した自律的な連続運転実験が相次いで報告された。自動自律実験における開発要素は多岐にわたるため、共通領域を協調して進めようという潮流、標準化活動が生まれている。カナダでは2021年に材料や物質の発見を加速することを目的とした産学官連携のコンソーシアムである Acceleration Consortium (AC) がトロント大学を中心に発足した。2023年にはカナダ政府の Canada First Research Excellence Fund (CFREF) から7年間で約2億カナダドルが投入されることが発表されている。米国においても、2020年に大統領科学技術諮問会議 (PCAST) の提言で、「材料の発見と実用化を加速するために、AI、ロボティクス、ハイスループット合成・評価を統合した自律実験プラットフォームへの投資を行うべきである」と述べられ、MGIを再活性化し、拡大することが提案された。2021年には、5年間を見据えた MGI Strategic Plan 2021 が発表され、計算や実験などのデータインフラの統合を目指す Materials Innovation Infrastructure (MII) が掲げられた。2024年には、AIによる自律化、自動化を統合した Autonomous MII (AMII) 構想に発展し、これを半導体分野から始めるとして、Creating Helpful Incentives to Produce Semiconductors and Science Act of 2022 (CHIPS) AI/AE for Rapid, Industry-informed Sustainable Semiconductor Materials and Processes (CARISSMA) が発表された。CHIPS法は、米国の半導体産業を強化するための法律であり、そのうちの1億ドルが CARISSMA に投資される。日本でも、2025年6月に改訂されたマテリアル革新力強化戦略において、日本の強みであるデータ基盤を活用したデータ共有の加速、AIの活用・ロボティクスとの融合、データ駆動型研究開発の普及など、「マテリアル DX」のさらなる推進が掲げられている。

2023年には、生成AIによる新規物質の提案とAI制御による自動自律実験を一体化した事例が報告された。Google DeepMindは、大量の第一原理計算の結果をグラフニューラルネットワークモデルに学習させた機械学習モデル Graph Networks for Materials Exploration (GNoME) を開発し、220万種の新規化合物を見つけ、そのうち38万種は安定構造であると報告した⁵⁾。カリフォルニア大学バークレー校とローレンスバークレー国立研究所の Autonomous Laboratory (A-Lab) は、この結果を基に、ロボットを用いた自動

1 2014年の国際コミュニティによるワークショップで議論された。

自律実験の17日間の連続運転において、41の化合物を実際に合成した⁶⁾。このプラットフォームでは、文献に基づいてトレーニングされた自然言語モデルによって合成レシピが提案され、得られた実験結果を学習して最適化されている。この事例は、計算と実験の統合にとどまらず、AI技術による研究開発計画の自律的な立案とその実行という本領域における新たな潮流を示しており、現在、急速に進展している。

3.2 トピックス

• マテリアル分野特有のAI技術の高度化

マテリアル研究開発の基礎である結晶構造を機械学習モデルで網羅的に生成し、その安定性をエネルギー計算によって評価する研究が進んでいる。前節に挙げたGNoME以外にもMicrosoftから拡散モデルをベースとした生成モデルMatterGenが提案されている⁷⁾。これらのモデルは網羅的な探索を行っているが、結晶構造探索は空間対称性の制約を受けるので、これを拘束条件として効率的に探索する機械学習モデルShotgun crystal structure prediction (ShotgunCSP) が統計数理研究所から提案されている⁸⁾。機械学習モデルによって生成された構造の安定性評価は高速に行う必要があるため、機械学習ポテンシャルが使われることが多い。MicrosoftはトランスフォーマーベースのGraphormerを開発し、2024年にMatterSimという機械学習原子間ポテンシャルをファインチューニング可能な形で公開している⁹⁾。日本でもMatlantis社が汎用性の高い機械学習ポテンシャルによるクラウドサービスを提供している²⁾。

• 大規模言語モデル（LLM）とマルチモーダル基盤モデル

2017年のGoogleによるTransformerの提案と大規模言語モデル（LLM）への実装、2020年のOpenAIによるLLMの汎化性能に関するスケールリング則の発見はAI技術に大きな変革をもたらした。これらのAI技術は、文献からの材料データ抽出などにとどまらず、例えば、実験室内の実験画像を取り込むことで、リアルタイムに実験ノートやプロセスフロー図を自動生成することを可能にしている¹⁰⁾。研究開発者の知識や経験・勘のデジタル化が重要視される中、これらの技術は、フィジカル空間とサイバー空間をつなぐ鍵となるツールとして大きな期待を寄せられている。現在、材料特化型の基盤モデルを構築が世界中で急速に進展している。分子科学に関しては化学専用のLLMであるChemistry Domain Foundation Model (ChemDFM)¹¹⁾やMultimodal Molecular Foundation Model (MolFM)¹²⁾などが提案されている。また、一貫したAI制御プラットフォームとしては、ChemCrow¹³⁾やAutonomous Research System (ARES)¹⁴⁾が提案されている。このような技術はAIエージェントと呼ばれ、研究開発全体をAIが自律的に駆動するものである。マテリアル分野においては設計・探索のみならず専門性が重要な役割を果たす合成・評価・分析までを一貫して扱うことが要求されるので、研究開発者の智慧を組み合わせること、いわゆるHuman-in-the-Loopの研究が進んでいる。日本においても、2024年から理化学研究所の科学研究基盤モデル開発プログラム（Advanced General Intelligence for Science Program: AGIS）において科学技術向け基盤モデルの開発、すなわちAI for Scienceが開始されており、AIエージェントの開発に取り組んでいる。

• 日本における自動自律実験の動向

日本においては1980年代から化学メーカーを中心に化学薬品の自動合成研究がなされてきた。しかし、コストパフォーマンスの面で課題があり、広く普及するまでには至らなかった。その後、ロボット機器のコストダウンや制御技術の進歩により、日本でも産官学で急速に実験の自動化が進んでいる。海外の自動自律実験の潮流と同様に、日本でも共通領域を協調して推進しようとする動きが生まれており、例えば、2023年には、40社を超える関連企業が参加してデジタルラボラトリー研究会（代表：東京大学 一杉太郎教授）が設立され

2 2025年10月時点で、96元素に対応。Matlantis, <https://matlantis.com/ja/>（2025年10月6日アクセス）。

ている³。また、ロボットや各種製造・計測機器を統合するオーケストレーションソフトウェアとも呼ばれるミドルウェアも自動自律実験の重要な要素であり、NIMSからNIMOというオープンソフトウェアライブラリが提供されている⁴。具体的な方法については検討の余地があるが、標準化もオープン化の前提となる重要な要素である。日本分析機器工業会（JAIMA）は、2024年にデータの共有・交換のためのJIS規格（JIS K 0200）「Measurement Analysis Instrument Markup Language: MaiML（マイムル）」を制定した。また、欧州の団体と連携し、「Laboratory and Analytical Device Standard Open Platform Communications- Unified Architecture（LADS OPC-UA）」という機器間コミュニケーションの標準化にも取り組んでいる。これらの取り組みは、プラグアンドプレイ方式のモジュール化を推進し、機器の柔軟性や拡張性を向上させることによって、コストと時間の削減を実現することに寄与する。また、廃棄物削減を意識したサンプル形状やサンプルフォルダなどの物理的標準化も重要であり、各種材料やシステムに応じた創意工夫が進められている。日本においては機器を中心とした研究開発が進んでいるが、欧米が進めている生成AIによる研究そのものの自動自律化への取組は今後の課題である。

3.3 課題

本領域には、AI技術によって材料研究開発を自動自律的に進めようとする方向性と、自動自律研究開発の手法やその技術基盤を高度化しようとする2つの方向性が存在する。これらの方向性をバランスよく進めることが重要である。マテリアル特化型基盤モデルを構築することと、それを活用して材料研究開発を推進することの両方が重要であり、両者を両輪のように連携させて進める必要がある¹⁵。日本は、データ基盤に一定の強みがあるものの、マテリアル特化型基盤モデルを構築するためには、さまざまなデータを統合するための技術を開発し、計算、実験、文献データをはじめ、異種材料データの統合をも進めていく必要がある。放射光施設である「Spring-8」や「NanoTerasu」、大強度陽子加速器施設「J-PARC」のデータ基盤の整備も始まっており、それらの活用も期待される。

データ基盤の整備とともに注目すべき流れとして、マテリアル向け生成AIの基礎となるLLMの開発競争が挙げられる。米国は豊富な研究開発資源を有する巨大IT企業が大規模なLLMを構築している。具体的にはOpenAIのGPT-5、GoogleのPaLM2、MetaのLlama2等である。前2者がソース非公開でサービス提供されているのに対して、Llama2や中国のDeepSeek、Qwen2などはオープンソースとして提供されている。日本においてはPreferred NetworksがPLaMoを、また、産官学が共同して富岳を使用して構築したFugaku-LLMなどがあり、特に日本語能力に優れているとされている。これら高性能LLMの開発には多大な開発資源が必要であるため、将来的に寡占化が進むことが予測される。日本としてAI for Scienceに向けた大規模LLMの開発戦略が問われている。

これらの課題を克服するためには、産官学にまたがるオープンな組織でAI技術による研究開発の自動自律化を進めていく必要がある。材料研究開発の自動自律化拠点には、材料・AI・ロボット分野などの多様なアカデミアや、ロボット・製造・計測機器メーカー、素材メーカーといった業種・業界をまたがる形での参画が必要である。この拠点では、ビジョンを共有し、共同でロードマップやベンチマークを設定する、また、オープン化およびその前提となる標準化を推進するための議論、共同開発、技術検証の場を提供する、さらに、マテリアル研究の自動自律化に関する基盤を構築し、そのノウハウを共有し、蓄積、発信することによって、AI技術による自動自律化の社会実装を推進することが望まれる。もちろん、参画者の目的や材料分野によっても状況が異なるという点に留意する必要がある。素材産業、化学品業界では国内でも各社間の競争がみら

3 2024年10月時点の会員、民間企業：44社、研究機関等：4団体。デジタルラボラトリー研究会、<https://digital-laboratory.jp/>（2025年7月24日アクセス）。

4 AIとロボット実験をモジュールとして扱い、自動材料探索を行うためのPythonライブラリ。NIMO, <https://github.com/NIMS-DA/nimo>（2025年7月24日アクセス）。

れるが、こうした企業が安心して参画できるようにするためには秘匿計算技術の導入、暗号技術の研究、データは共有せず学習モデルのみを共有する連合学習の実装などが必要である。

このような拠点や組織の設立は、本領域における日本の国際的プレゼンスを高め、国際連携や協議への参加を促進する上で重要である。また、これらの拠点や組織は、人材育成の役割も果たす必要がある。複数の専門性を持つ人材やシステム全体を把握できる人材、エンジニアリング人材を育成し、評価する仕組みの構築を一体で進めることが肝要である。特に、ロードマップやグランドチャレンジなどのベンチマークを共有することは、AIなど他分野の専門家の人材流入を促進する上で効果的であると考えられる。

経済安全保障の観点では、データ・AI駆動型物質・材料開発は幅広い物質・材料分野に適用可能であり、研究開発手法にイノベーションを起こす革新性が高いものである一方で、寡占性の高い技術でもあるため、パワーゲーム化しやすい。データ共用ルール整備や共同研究相手選定などに留意する必要がある。

3.4 各国・地域の取り組み

【日本】

2021年に統合イノベーション戦略推進会議が決定したマテリアル革新力強化戦略を踏まえ、文部科学省では、①データ創出基盤：マテリアル先端リサーチインフラ事業（ARIM）、②データ中核拠点（MDPF）、③データ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（DxMT）が連携する「マテリアルDXプラットフォーム」の構築が始まった。ARIMによってデータを作り、MDPFにデータを集め、それをDxMTで活用するというスキームを想定しており、DxMT内ではAI駆動の材料開発への取り組みがみられる。また、経済産業省では、産業総合技術研究所にマテリアル・プロセスイノベーション（MPI）プラットフォームを構築し、材料の製造プロセスデータを収集し活用するための基盤整備を進めている。2025年6月に改訂されたマテリアル革新力強化戦略では、取り組むべきアクションとして、日本の強みであるこれらのデータ基盤を活用したデータ共有の加速、AIの活用・ロボティクスとの融合、データ駆動型研究開発の普及など、「マテリアルDX」のさらなる推進が掲げられている。また、イノベーションの継続的な創出のために、マテリアルDXを支えるエンジニアリングおよびマネジメント人材の育成・確保、オープンな大型研究施設や最先端共用設備などの整備、それに伴う国際プレゼンスの強化が必要とされている。

近年開始された関連プロジェクトとしては、JST戦略的創造研究推進事業 個人型研究（さきがけ）「AI・ロボットによる研究開発プロセス革新のための基盤構築と実践活用」（2024年～）、理化学研究所の科学研究基盤モデル開発プログラム（Advanced General Intelligence for Science Program: AGIS）（2024年～）などがある。いずれも材料分野に特化したプロジェクトではないが、材料分野が重要なターゲット領域となっている。2025年5月には、日本の多数の関連研究者が参加し、「Self-driving laboratories (SDL) in Japan」という論文を発表した¹⁶⁾。この論文では、日本のSDL開発における標準化、研究コミュニティ、産業応用などの取り組みを取り上げている。

[評価* 基礎研究：現状○/トレンド△、応用研究・開発：現状○/トレンド△]

【米国】

2020年の大統領科学技術諮問委員会（PCAST）の提言において、Materials Genome Initiative (MGI)（2011年～）を再活性化し、拡大することが提案された。これに基づき、2021年には、5年間を見据えたMGI Strategic Plan 2021が発表された。この計画では、計算や実験などのデータインフラの統合を目指すMaterials Innovation Infrastructure (MII)が掲げられ、2024年にはAIによる自動自律化システムを統合したAutonomous MII (AMII)構想へと発展している。また、グランドチャレンジ方式によるMII促進が掲げられ、2024 MGI Challengesにつながっている。AMIIの導入は半導体分野から始められ、CARISSMAプログラムへの1億ドルの投資が発表された。このプログラムは、MGIを推進してきたNational Institute of Standards and Technology (NIST)が主導する。NISTは、2020年にAI・量子計算を含

む計算・実験を統合する材料設計総合基盤として「Joint Automated Repository for Various Integrated Simulations (JARVIS)」も発表している。

AI for Scienceは大規模LLMを基盤にしているが、米国のビッグテックがソース非公開のLLMを提供する一方で、アルゴンヌ国立研究所を中心にTrillion Parameter Consortiumが国際プロジェクトとして開始されている。マテリアルのみならず、創薬・医療、地球科学・防災、基礎科学での議論が進んでおり、日本からは理研が参加している。

[評価* 基礎研究：現状◎/トレンド△、応用研究・開発：現状○/トレンド△]

【欧州】

FAIR data infrastructure for condensed MATter physics (FAIRmat) は、計算材料科学における世界最大級のデータインフラである Novel Materials Discovery (NOMAD) Laboratory を発展させたものであり、2021年にスタートしたドイツの国家研究データインフラ (Nationale Forschungsdateninfrastruktur: NFDI) コンソーシアムである。NIST (米国)、上海大学 (中国)、IT Center for Science (CSC) (フィンランド) など、世界の主要な機関と覚書を交わしており、国際的な活動を推進している。自動自律実験に関しては、2018年に英国のリバプール大学とユニリーバの共同でMaterials Innovation Factoryが発足している。また、ドイツの産業団体 (Spectaris) を中心に、「LADS OPC-UA」という機器間コミュニケーションの国際標準を推進している。

[評価* 基礎研究：現状◎/トレンド△、応用研究・開発：現状○/トレンド→]

【中国】

2016年8月に発表された第13次5カ年科学技術イノベーション計画において、国際競争力を持つ近代的産業技術システムの構築を目指すための「新材料技術」の中に「材料ゲノム工学 (MGE)」が明記された。ここでは、計算、実験、データベースの3つのプラットフォームを構築し、新材料研究開発サイクルおよびコストの半減を達成するという目標が掲げられている¹⁷⁾。この国家重点研究開発計画の一環として、北京科技大学を中心に構築されたデータベース (MGEDATA) は、2020年に国家レベルで構築された国家材料ゲノム工学データ提出・管理サービスプラットフォーム (NMDMS) に統合された。NMDMSは77種類の材料カテゴリを持ち、1,800万件以上のデータを有する世界最大級のデータベースとなっている。また、NMDMSは2024年の全国人民代表大会 (全人代) で示された「人工知能 (AI) +」政策を受けて建設が発表された「新素材ビッグデータセンター」⁵⁾と連携し、新素材産業のデジタル化・データ化を推進する。自動化についても、2016年にドイツの産業用ロボットおよびオートメーション機器の大手メーカー「KUKA」が中国資本に買収され、進展しているものと考えられる。

2024年にDeepSeekからソース公開のLLM、DeepSeek-V2がリリースされた。ここには革新的なアルゴリズムの実装は特にみられないが、エンジニアリングを徹底して行い、ボトルネックを排除し、軽量であるにもかかわらず、高性能な汎化性能を得ている。今後、こうした研究開発現場で使いやすいLLMをベースとしたAIエージェントシステムがマテリアル分野を含めた諸分野に展開されるものと予想される。

[評価* 基礎研究：現状◎/トレンド△、応用研究・開発：現状○/トレンド△]

【韓国】

2022年に科学技術情報通信部 (MSIT) が、国家レベルの材料データプラットフォーム「Korea

5 2025年10月時点で、約4500万データの登録。新材料大数据中心, <https://www.matbd.cn/> (2025年10月6日アクセス)。

Materials Data Station (K-MDS)⁶を公開した。MSITの研究機関である科学技術情報研究院 (KISTI) が構築・運用しており、科学技術研究院 (KIST)、標準科学研究院 (KRIS)、材料研究院 (KIMS) がそれぞれエネルギー/環境、スマート/IT、構造/安全材料のデータを担当している。これにより、拠点間の連携を強化し、データ駆動型材料研究において米国、EU、日本などの諸外国に追いつくことや、材料研究革新エコシステムの創出に貢献することを掲げている。自動自律実験については、テクノロジー企業である Samsung Electronics 社が無機化合物のAI駆動ロボット合成¹⁸⁾を報告している。

[評価* 基礎研究：現状△/トレンド↗、応用研究・開発：現状○/トレンド↗]

*基礎研究：大学・国研などでの基礎研究の範囲、応用研究・開発：技術開発（プロトタイプの開発含む）の範囲
 現状（日本の現状を基準にした評価ではなく、CRDSの調査・見解による評価）：
 ◎ 特に顕著な活動・成果が見えている ○ 顕著な活動・成果が見えている、
 △ 顕著な活動・成果が見えていない × 特筆すべき活動・成果が見えていない
 トレンド（ここ1～2年の研究開発水準の変化）：↗上昇傾向、→現状維持、↘下降傾向

参考文献

- 1) 国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター『戦略プロポーザル データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）』（2013年8月），<https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2013-SP-01.html>（2025年8月27日アクセス）。
- 2) Benjamin Burger, et al., “A mobile robotic chemist,” *Nature* 583, no. 7815 (2020): 237-241, <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2442-2>.
- 3) Benjamin P. MacLeod, et al., “Self-driving laboratory for accelerated discovery of thin-film materials,” *Science Advances* 6, no. 20 (2020): eaaz8867, <https://doi.org/10.1126/sciadv.aaz8867>.
- 4) Ryota Shimizu, et al., “Autonomous materials synthesis by machine learning and robotics,” *APL Materials* 8, no. 11 (2020): 111110, <https://doi.org/10.1063/5.0020370>.
- 5) Amil Merchant, et al., “Scaling deep learning for materials discovery,” *Nature* 624, no. 7990 (2023): 80-85, <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>.
- 6) Nathan J. Szymanski, et al., “An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of novel materials,” *Nature* 624, no. 7990 (2023): 86-91, <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>.
- 7) Claudio Zeni, et al., “A generative model for inorganic materials design,” *Nature* 639, no. 8005 (2025): 624-632, <https://doi.org/10.1038/s41586-025-08628-5>.
- 8) Chang Liu, et al., “Shotgun crystal structure prediction using machine-learned formation energies,” *npj Computational Materials* 10, no. 1 (2024): 298, <https://doi.org/10.1038/s41524-024-01471-8>.
- 9) Han Yang, et al., “MatterSim: A Deep Learning Atomistic Model Across Elements, Temperatures and Pressures,” arXiv, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2405.04967>（2025年8月27日アクセス）。
- 10) Kan Hatakeyama-Sato, et al., “Automated experiment and data generation by foundation models for synthesizing polyamic acid particles,” ChemRxiv, <https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-zfwxg>（2025年8月27日アクセス）。

6 2025年10月時点で、約100万データの登録。K-MDS, <https://kmds.re.kr/en/web/guest>（2025年10月6日アクセス）。

- 11) Zihan Zhao, et al., “Developing ChemDFM as a large language foundation model for chemistry,” *Cell Reports Physical Science* 6, no. 4 (2025): 102523, <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2025.102523>.
- 12) Yizhen Luo, et al., “MolFM: A Multimodal Molecular Foundation Model,” arXiv, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2307.09484>.
- 13) Andres M. Bran, et al., “ChemCrow: Augmenting large-language models with chemistry tools,” arXiv, <https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.05376>.
- 14) Pavel Nikolaev, et al., “Autonomy in materials research: a case study in carbon nanotube growth,” *npj Computational Materials* 2, no. 1 (2016): 16031, <https://doi.org/10.1038/npjcompumats.2016.31>.
- 15) 国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター『俯瞰ワークショップ報告書 材料研究開発における自動自律化の現在と将来(2025年)』(2025年7月)
<https://www.jst.go.jp/crds/report/CRDS-FY2025-WR-01.html> (2025年8月27日アクセス)。
- 16) Naruki Yoshikawa, et al., “Self-driving laboratories in Japan,” *Digital Discovery* 4 (2025): 1384-1403, <https://doi.org/10.1039/D4DD00387J>.
- 17) 中国政府网, “国务院关于印发“十三五”国家科技创新规划的通知,”
https://www.gov.cn/zhengce/content/2016-08/08/content_5098072.htm (2025年7月12日アクセス)。
- 18) Jiadong Chen, et al., “Navigating phase diagram complexity to guide robotic inorganic materials synthesis,” *Nature Synthesis* 3, no. 5 (2024): 606-614, <https://doi.org/10.1038/s44160-024-00502-y>.

謝辞

本報告書の作成にあたっては、学協会、大学、民間企業、公的機関など様々な方々にご協力を賜った。情報提供者の一覧を下記URLに示す。

<https://doi.org/10.82643/crds-fr-n009>

本書について、著作権法で認められる範囲でのご利用についてはJSTのポリシー (https://www.jst.go.jp/site_policy.html) に従い、以下のクレジットを明記してください。本書に関するお問い合わせは crds@jst.go.jp までご連絡ください。

Regarding the use of this report within the scope permitted by copyright law, please follow the policy outlined here (<https://www.jst.go.jp/EN/copyright.html>) and clearly indicate the following credit. For inquiries regarding this report, please contact crds@jst.go.jp.

国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター, 研究開発の俯瞰報告書 ナノテクノロジー・材料分野～領域別動向編～(2026年), 共通基盤科学技術, データ駆動型物質・材料開発, 令和7年12月, CRDS-FR-N604-202512.
<https://doi.org/10.82643/crds-fr-n-ft-ddmd>

Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency, Trends Report by Discipline, Nanotechnology/Materials Research Field (2026), Fundamental Technologies, Data-Driven Materials Development, December 2025, CRDS-FR-N604-202512.
<https://doi.org/10.82643/crds-fr-n-ft-ddmd>