

# 三井化学の化学構造式文献調査 AI エージェントと 化学構造式×AI 特許調査ツールの実務比較

—— 2026 年スナップショット ——

2026 年 4 月 29 日

## エグゼクティブ・サマリー

三井化学は 2026 年 3 月 2 日、化学構造式を含む文献から化合物情報を自律的に調査・整理する独自開発の生成 AI エージェントを社内で実用検証中であると発表し<sup>1</sup>、続いて 2026 年 4 月 8 日に本格稼働を開始した<sup>2</sup>。この取り組みの中心的なキャッチコピーが「文献調査時間を 80%以上削減（1 カ月→1 日）」であり、化学業界における生成 AI エージェント活用の象徴的事例として大きな注目を集めている。

一方、商用ベンダー（CAS/Elsevier/Clarivate/Patsnap/Patentfield/パテント・インテグレーション/島津 Genzo AI/XLSCOUT/IPRally など）も 2025 年に相次いで AI 機能を強化しており<sup>10,11,16,17,15</sup>、加えてオープンソース/学術側でも DECIMER/MolScribe/PatCID/MarkushGrapher/PatentAgent/PatentFinder 等の重要な進展があった<sup>27,28,31,33,38,39</sup>。本レポートでは、これら一次情報を基に、三井化学の AI エージェントの位置づけと、化学構造式×AI 特許調査ツールとの実務的な比較を整理する。

## 1. 三井化学の AI エージェント詳細

### 1.1 公式プレスリリースの核心情報

三井化学は 2026 年 3 月 2 日付の公式リリースで次の事実を公表している<sup>1</sup>。対象業務は学術文献・研究報告書に記載された化学構造式から化合物に関する情報を自律的に調査・整理すること（FTO 調査やマーカッシュ侵害判断ではなく、研究開発のための文献調査・化合物情報抽出が主目的）である。抽出対象は化合物名の特定にとどまらず、文献中に記載された用途、物性、製造方法、実験条件などの関連情報であり、必要に応じて化学データベースや Web 検索情報を参照し、より包括的な化合物情報を出力する。初期検証で研究者の調査時間が 80% 以上削減され、従来 1 カ月程度を要していた文献調査が 1 日程度に短縮された。

### 1.2 「1 カ月を 1 日に」が指す業務の正体

日経クロステックの続報により、対象業務がより具体的に整理できる<sup>2</sup>。三井化学では新製品アイデア探索や顧客提案検討のため、研究開発・営業担当者が特許文献や論文を調査する。1 つの新製品開発で 1 万件の文献を参照することもあり、膨大な時間が課題であった。AI エージェントは 1 万件の文献を PDF で入力すると、文献の内容をまとめたレポートや傾向分析レポートを作成する。情報不足を判断すると自律的に外部の化学データベースや Web サイトを検索して内容を補強する。

つまり「1 カ月を 1 日に」が指すのは、先行技術調査・新規用途探索・IP ランドスケープ的なりサーチであり、FTO 法的判断や均等論評価とは性質が異なる点に注意が必要である。

### 1.3 使用している AI 技術

公式リリースは技術スタックを明示していないが、関連報道と過去の三井化学の AI 開発履歴から推定できる。三井化学は 2023 年 4 月以降、Microsoft Azure OpenAI Service 上の GPT（GPT-3.5/GPT-4）を採用しており、IBM Watson と組み合わせて新規用途探索 AI を構築してきた<sup>4,5,6,7</sup>。今回の文献調査 AI も同社内基盤の延長線上にある。「文献中に画像として記載されている化学構造式と、本文とを同時に処理する」マルチモーダル生成 AI で

あり<sup>3</sup>、「これまで困難だった化学構造式の AI による読み取りを可能にしている」と表現されている。OCSR (Optical Chemical Structure Recognition) 相当の機能を内製または既存技術と組み合わせて実装していると推察される。

また、2024 年 12 月には化学分野特有業務向け生成 AI チャット・プラットフォームとして、実験結果の表の読み取りや化学構造式の理解に対応し、業務時間 80%削減を達成した特許チャットを発表している<sup>8</sup>。今回の AI エージェントはこの基盤の延長上にある。

#### 1.4 同社の AI 開発タイムライン (化学領域)

時期	取り組み	効果
2022 年 6 月	IBM Watson による新規用途探索の全社展開開始	20 部門利用、100 以上の新規用途発見
2023 年 4 月	Azure OpenAI (GPT-4) と IBM Watson の融合実証開始[5]	—
2023 年 9 月	GPT×Watson 融合の成果発表[4]	辞書 10 倍、抽出効率 3 倍、発見数 2 倍
2024 年 12 月	化学分野特有業務向け生成 AI チャット発表[8]	業務時間 80%削減
2026 年 3 月	構造式対応文献調査 AI エージェント発表[1]	調査時間 80%以上削減
2026 年 4 月	同 AI エージェント本格稼働[2]	—

#### 1.5 他の化学メーカーの類似 AI 状況

住友化学・旭化成・三菱ケミカルは 2018 年以降「マテリアルズ・インフォマティクス (MI)」を全社展開しているが、これは新素材設計のための AI 活用であり、特許文献中の化学構造式を読み取るための AI エージェントとは性質が異なる。2021 年には NIMS、旭化成、三菱ケミカル、三井化学、住友化学が「化学マテリアルズ・オープンプラットフォーム」を組み、材料物性予測 AI 技術を共同開発した<sup>46</sup>。太陽インキ製造は 2022 年に AI Samurai 社のセミナーで化学分野における特許出願戦略と AI の活用をテーマに事例を発表している<sup>48</sup>。「化学構造式を含む文献調査 AI エージェントを社内で開発し、本格稼働させた」と明示的に公表しているのは、2026 年 4 月時点で三井化学が国内化学大手で初の事例となる可能性が高い。

## 2. 化学構造式検索の既存サービス最新状況（2025-2026年）

### 2.1 CAS SciFinder / STN

CASは2025年に相次いでAI機能を強化した。2025年8月にSciFinderの「最も大規模なAI統合」となる次世代版を発表し、自然言語クエリ、AIサマリー、パーソナライゼーションを統合した<sup>10</sup>。同年10月にはアジェンティックAI体験の追加を発表し、CAS Content Collectionに基づく知的エージェントを導入した<sup>11</sup>。一方、マーカッシュ検索（MARPAT）は依然としてFTOや包括的検索のためのツールではなく予備的検索にとどまるとの位置づけが各大学ガイドに明記されている<sup>12</sup>。

### 2.2 Patsnap Eureka

2025年にPatsnap Eurekaを「AIネイティブIP・R&Dプラットフォーム」として大規模刷新。174管轄の特許と20億超の構造化データポイントにアクセス可能であり、化学構造式描画から合成・処理ワークフローと製品候補までワンクリックで提示するAIエージェントを提供している<sup>13</sup>。

### 2.3 Derwent / Clarivate

Derwent Chemistry Researchとして、DWPIとWeb of Scienceを統合したAI搭載化学R&D特許検索ソフトを提供。DWPIMに1987年から運用される編集者付き標準化マーカッシュを有する<sup>14</sup>。2025-2026年にはAI SearchをDerwentに提供開始し、1.6億件超の特許レコードに対し意味検索を実現。Clarivateは「ファーストパス特許性/FTO評価に有効」と位置づけている<sup>15</sup>。

### 2.4 Reaxys (Elsevier)

2025年7月にReaxys AI Search (Beta)をリリースし、自然言語クエリで1億2100万件の文書を横断検索可能とした<sup>16,17</sup>。2025年9月には次世代AI研究ソリューション（アジェンティックAI/推論エンジン統合）を発表し、2026年Q1から商用提供予定としている<sup>18</sup>。

### 2.5 Patentfield AIR

Patentfield 株式会社の生成 AI 調査・分析オプション「Patentfield AIR」は、検索結果母集団に対するワンクリック生成 AI 解析を提供し、大量特許文献の査読・分析時間を約 65%短縮と公表している<sup>19,20</sup>。化学構造式の専用認識モジュールについては本調査時点で公式に明記された機能は確認できなかった。

## 2.6 Summaria

2023 年 4 月発表の特許文書読解アシスタント。クリアランス調査・被侵害品調査・無効資料調査などのスクリーニング、独自分類定義によるタグ付け、要約に対応する<sup>21</sup>。化学構造式の画像認識機能の公式記載は無く、テキスト中心の特許読解支援サービスである。

## 2.7 Genzo AI（島津製作所子会社）

2026 年 4 月 1 日、島津製作所が Genzo AI 株式会社を IP Agent 社と共同設立。知財業務自動化 SaaS として明細書作成・特許翻訳・特許庁審査対応・特許侵害予防・契約書レビューを一体提供し、2030 年度に売上高 15 億円を目標とする<sup>22</sup>。

## 2.8 その他（XLSCOUT / IPRally / AI Samurai）

XLSCOUT は ClaimChart LLM を中心に LLM+生成 AI でクレームチャート自動生成を実現している<sup>23</sup>。IPRally は Graph Transformer 3.0（2025 年）を中核に 1.2 億件超の特許をグラフ空間に埋め込み、化学特許の長文クレームのグラフパース速度を 3-5 倍化した<sup>24,25</sup>。

AI Samurai は大阪大学・北陸先端大発のスタートアップで、AI Samurai ONE/ZERO 等を提供している<sup>26</sup>。

## 2.9 比較サマリー

ツール	構造式画像認識	マーカッシュ	自然言語 AI/Agent	FTO 適合度	出典
三井化学 AI	◎	△	◎（自律 Agent）	△	[1][2]
CAS SciFinder	○	◎	◎（2025 年～）	△	[10][11]
Reaxys	○	○	◎	○	[16][17]
Derwent	◎	◎	◎	○	[14][15]
Patsnap Eureka	◎	○	◎	○	[13]

Patentfield AIR	△	△	◎	○	[19][20]
IPRally	×	×	◎	◎	[24][25]
PatCID (IBM/OSS)	◎	△	×	○	[31][32]

### 3. 化学構造式 AI 認識技術（OCSR）の最新動向

#### 3.1 主要 OCSR モデルのベンチマーク

DECIMER.ai は EfficientNetV2+Transformer ベースで 4 億 5000 万件の合成画像で訓練され、多くのベンチマークで Tanimoto >0.95 を達成している<sup>27</sup>。2024 年論文では手書き構造式認識への拡張も報告された<sup>30</sup>。MolScribe は Image-to-Graph モデルで、原子・結合・幾何配置を明示的に予測し、公開ベンチマークで 76-93%の正確性を示す<sup>28</sup>。2024 年のレビューでは 8 つのオープン OCSR ツールの F1 スコアが 34-93%と幅広く、全カテゴリで一貫して優れる単一ツールは存在しないと結論されている。

#### 3.2 PatCID (IBM Research)

IBM Deep Search チーム（チューリッヒ）が開発し、Nature Communications 2024 で発表。8100 万枚の構造画像と 1400 万のユニーク構造をオープン提供している<sup>31</sup>。ランダム特許セットでの分子取得率は PatCID 56.0%、Reaxys 53.5%、SciFinder 49.5%、Google Patents 41.5%であり、自動 DB（PatCID）が手動 DB と同等以上の取得率を達成している<sup>31,32</sup>。

#### 3.3 MarkushGrapher (CVPR 2025/2026)

マーカッシュ構造の自動解析において、MarkushGrapher が CVPR 2025 で発表された<sup>33</sup>。画像・テキスト・レイアウトを共同エンコードし、マーカッシュバックボーンの CXSMILES グラフと置換基テーブルを自己回帰生成する。MarkushGrapher-2 (CVPR 2026) は ChemicalOCR モジュールを統合しエンドツーエンド処理を実現した<sup>34</sup>。

#### 3.4 マーカッシュ AI 解析の課題（2026 年総説）

Hayes et al. (2026) が Journal of Cheminformatics に発表した総説では、マーカッシュの自動解釈が困難である理由として、画像が機械可読でないこと、変動 R 基、依存規則、スキヤフォールド多様性、不均質なクレーム言語を挙げている<sup>35</sup>。現状は意思決定支援であって法的助言の代替ではないとされており、透明性のあるベンチマーク、解釈可能な制約処理、USPTO 実務に整合したワークフローが今後の課題である。



## 4. FTO（自由実施調査）における AI 活用の最新事例

### 4.1 化学 FTO の自動化レベル

2025 年 7 月の検索者向け実務記事では、FTO 調査で AI が進歩しても「当時、何を知っていたか」を問われるディスカバリーリスクに注意が必要と警告されている<sup>36</sup>。また「生成 AI で特許調査はどこまでできる？化学系調査・スクリーニング編」では、GPT-5 を使い名称・要約・請求項・明細書を読み込ませてスクリーニング工程に有用だが完全置換は困難、人間レビュー前提が結論となっている<sup>37</sup>。

### 4.2 クレームチャート自動生成

XLSCOUT ClaimChart LLM は LLM+Gen AI で侵害証拠チャートを自動生成し、ライセンス候補・ターゲット製品をスコアリングする<sup>23</sup>。このほか Patlytics、Solve Intelligence、Questel 等がクレームチャートの自動生成を提供している。

### 4.3 学術研究：PatentAgent/PatentFinder

PatentAgent (Wang et al., 2024) は医薬特許分析の統合エージェントであり、特許 QA チャットボット (PA-QA)、既存最良比+2.46-8.37%精度向上の OCSR アンサンブル (PA-Img2Mol)、+7.15-7.62%のコア化合物識別 (PA-CoreId) を統合する<sup>38</sup>。PatentFinder (Shi et al., 2024) は 5 エージェント協調で小分子の特許侵害評価を自律実施し、MolPatent-240 ベンチマークで LLM 単独より F1+13.8%、accuracy+12%を達成した<sup>39</sup>。このほか、Sakhinana et al. (2024) が AI オーケストレーション型のマルチエージェント特許ワークフローを提案している<sup>40</sup>。

## 5. 化学×生成 AI の最新論文・研究

### 5.1 特許 AI エージェント

Scientific Reports (2026) では、GPT-4o/Gemini 1.5 Pro/Claude 3.5 Sonnet をエージェントアーキテクチャでベンチマークし Subject-Action-Object 抽出の精度向上を実証した

<sup>41</sup>。PatentAgent<sup>38</sup> および PatentFinder<sup>39</sup> は前節で述べた通りである。

## 5.2 マルチモーダル構造式解析

Doc2SAR は DocSAR-200 ベンチマークで Table Recall 80.78%を達成し、end-to-end GPT-4o に対し+51.48%の向上を示した<sup>42</sup>。BioChemInsight は 181 特許／15 ターゲットに対し平均 90%以上の精度で構造式認識・活性データ抽出を実現した<sup>43</sup>。MARCUS は DECIMER／MolNexTR／MolScribe のアンサンブルに fine-tuned GPT-4 と Human-in-the-loop を組み合わせた天然物文献キュレーションシステムである<sup>44</sup>。

## 5.3 SAR 自動抽出

CheF dataset は 100,000 分子・187,845 特許から 631,077 個の分子-機能ペアを抽出する大規模データセットである<sup>45</sup>。Doc2SAR<sup>42</sup>は前述の通り、OCSR+fine-tuned MLLM の相乗フレームワークにより SAR 情報を高精度で抽出する。

## 6. 三井化学 AI エージェントと商用ツールの実務比較

### 6.1 ポジショニング上の差異

三井化学の AI エージェントは社内特化・自社知識統合・自律エージェント志向である一方、商用ツールは広範な特許 DB・標準化マーカッシュ索引・複数ユーザー利用で勝負している。三井化学はマルチモーダル構造式読取と自律的外部検索を強みとするが、法的最終判断はスコープ外である<sup>1,2,3</sup>。CAS/Derwent/Patsnap 等は構造検索 DB としてマーカッシュに対する優位性を保ちつつ、2025 年から AI 機能を急速に追加している<sup>10,11,14,15,13</sup>。

### 6.2 「1 カ月→1 日」効率化の意味する範囲

公開情報を踏まえると、80%削減・1 カ月→1 日は次の 3 工程の合算と読み取れる：(1) 大量 PDF (最大 1 万件規模) の機械読込・構造式 OCSR・テキスト抽出、(2) 化合物名・用途・物性・製造方法・実験条件の構造化抽出とレポート化、(3) 不足情報の自律的外部検索による補強<sup>2</sup>。これは先行技術調査・新規用途探索・IP ランドスケープ的なりサーチに近く、FTO 法的判断や均等論評価は CAS/Derwent/Patsnap/IPRally/XLSCOUT 等の専門 DB+人間レビューに依存する領域である。

### 6.3 留意すべき点

三井化学の公式リリースおよび日経クロステック報以外、使用 LLM モデル名・OCSR エンジン・パートナー名は公表されていない。「80%以上削減」は初期検証時点の社内ベンチマークに基づくもので、第三者ベンチマークは存在しない。商用ツールの「業務時間 XX%短縮」も多くがベンダー自社評価であり、独立ベンチマークは限定的である。マーカッシュ解釈の LLM 性能は入れ子・条件付き依存に弱いことが確認されており、現時点では意思決定支援にとどめる運用が国際的コンセンサスである<sup>35,39</sup>。

## 7. 結論：化学知財 DX の 2026 年スナップショット

三井化学が 2026 年 4 月 8 日に本格稼働させた化学構造式対応文献調査 AI エージェントは、国内化学大手の中で先駆的事例である<sup>1,2</sup>。同社が 2022 年の IBM Watson 導入から 3-4 年かけて積み上げた「Watson+GPT 融合」「化学分野特有業務向け生成 AI チャット」を土台に、マルチモーダル構造式読取+自律的外部検索+レポート生成を統合した点に独自性がある。

一方で、化学構造式×AI 調査の世界では 2025 年がエポックメイキングな年となった。CAS SciFinder が自然言語 AI+アジェンティック AI へ大規模移行し<sup>10,11</sup>、Reaxys AI Search が登場し<sup>16,17</sup>、Clarivate Derwent が AI Search を商用化し<sup>15</sup>、Patsnap Eureka が AI ネイティブ・プラットフォームに刷新した<sup>13</sup>。学術面では MarkushGrapher (CVPR 2025) でマーカッシュ OCR の実用域が見え始め<sup>33</sup>、PatCID がオープン DB で手動キュレート DB 並みの取得率を達成し<sup>31</sup>、PatentAgent/PatentFinder が侵害評価・コア構造特定を自動化する道筋を提示した<sup>38,39</sup>。

これらの動向を踏まえると、三井化学の取り組みは「研究開発のための先行技術+IP ランドスケープ調査の自動化」という自社経営課題に直結したスコープに最適化された自社開発エージェントであり、FTO・侵害判断・マーカッシュ解釈のような法的高負荷タスクは、依然として商用 DB+専門家レビュー+AI ツールのハイブリッド利用に委ねる構成が現実解と評価できる。

化学知財 DX の今後の焦点は、(1) マーカッシュ法的解釈の信頼性向上<sup>35</sup>、(2) ベンチマークの標準化 (MolPatent-240<sup>39</sup>、DocSAR-200<sup>42</sup>、IP5-M<sup>34</sup>等)、(3) 自社 AI+商用 DB+OSS エンジンを組み合わせたハイブリッド・エージェント設計、(4) ディスカバリー・リスクを織り込んだ AI 利用ログ管理<sup>36</sup>、の 4 点に収斂すると見られる。三井化学のエージェントは、(3)のハイブリッド設計を社内側からドライブする最初の本格事例として、今後の比較基準になる可能性が高い。

## 参考文献

- [1] 三井化学株式会社, 「研究開発の文献調査を革新する生成 AI エージェントを開発」, 2026 年 3 月 2 日.  
<https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2026/>
- [2] 日経クロステック, 「三井化学が構造式含む文献の調査 AI エージェントを本格稼働、1 カ月を 1 日に」,  
2026 年 4 月 8 日. <https://xtech.nikkei.com/atcl/nxt/column/18/00001/11695/>
- [3] Impress DX クロス, 「三井化学、研究開発における文献調査のための AI エージェントを開発」, 2026 年.  
<https://dcross.impress.co.jp/docs/usecase/004586.html>
- [4] 三井化学・日本 IBM, 「生成 AI/GPT 活用により、新規用途の発見数が倍増」, IBM Newsroom, 2023 年 9 月 13 日.
- [5] 三井化学・日本 IBM, 「生成 AI と IBM Watson の融合による新規用途探索の高精度化と高速化の実用検証スタート」, PR TIMES, 2023 年 4 月 12 日.
- [6] 日経クロステック, 「三井化学と日本 IBM が GPT-4 と Watson を組み合わせ実証、製品用途を AI で探索」,  
2023 年 9 月.
- [7] MONOist, 「製品の新規用途発見数を倍に、三井化学が GPT と Watson の組み合わせで実現」, 2023 年 9 月 14 日.
- [8] 三井化学, 「三井化学、生成 AI を活用した特許チャットを開発」, 2024 年 12 月 25 日.  
[https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024\\_1225/](https://jp.mitsuichemicals.com/jp/release/2024/2024_1225/)
- [9] TechnoProducer, 「三井化学の知財戦略と分析 — サステナビリティ時代の基盤としての無形資産管理」.
- [10] CAS (PR Newswire), "CAS SciFinder integrates transformative new science-smart AI capabilities to enhance R&D efficiency and boost innovation", August 4, 2025.
- [11] CAS, "CAS unveils science-smart agentic AI to revolutionize research workflows", October 6, 2025.  
<https://www.cas.org/press-releases/cas-agentic-ai-research-workflows>
- [12] Penn Libraries, "Patents - Getting the Most Out of SciFinder", University of Pennsylvania.
- [13] Patsnap, "Patsnap Eureka Materials: AI-Driven Research", April 2025.  
<https://www.patsnap.com/resources/blog/webinars/patsnap-eureka-materials-ai-driven-research-april-2025/>
- [14] Clarivate, "DWPI chemistry indexing". <https://clarivate.com/intellectual-property/training-support/derwent/dwpi-reference-center/>
- [15] Clarivate (Stock Titan), "Clarivate launches AI-powered patent search solution", 2025.
- [16] Elsevier, "Reaxys AI search: Document discovery through natural language querying release notes for July 2025", Reaxys Support Center.
- [17] Elsevier, "Elsevier launches Reaxys AI Search to accelerate chemistry research with natural language AI", 2025.
- [18] Elsevier (PR Newswire), "Redefining Research: Elsevier Announces Next-Generation AI-Powered Researcher Solution", September 2025.

- [19] Patentfield, 「生成 AI が特許をシンプルに。Patentfield AIR の無料トライアル受付開始」.  
<https://en.patentfield.com/news/275>
- [20] Patentfield, 「Patentfield AIR | 生成 AI 調査・分析オプション」. <https://product.patentfield.com/air>
- [21] @press, 「弁理士、知財担当者の方々に向けた AI による特許文書読解アシスタント『サマリア』提供開始」, パテント・インテグレーション.
- [22] 島津製作所, 「知財業務自動化 SaaS 提供の子会社 Genzo AI を設立」, 2026 年.  
<https://www.shimadzu.co.jp/news/2026/acmnk57uqb3579ay.html>
- [23] XLSCOUT, "ClaimChart LLM: AI Patent Infringement Analysis". <https://xlscout.ai/claimchart-llm/>
- [24] IPRally, "Enhancing Patent Search: Introducing Graph Transformer 2.0", IPRally Blog.
- [25] IPRally, "A leap forward in IPRally's accuracy, efficiency and scalability", 2025.
- [26] AI Samurai, 「特許申請支援システムの株式会社 AI Samurai」. <https://aisamurai.co.jp/>
- [27] Rathfelder, K. et al., "DECIMER.ai: an open platform for automated optical chemical structure identification, segmentation and recognition in scientific publications", J. Cheminformatics, 2023. PMC10439916.
- [28] Qian, Y. & Guo, J., "MolScribe: Robust Molecular Structure Recognition with Image-to-Graph Generation", J. Chem. Inf. Model., 2023.
- [29] arXiv:2604.03476, "Fine-tuning DeepSeek-OCR-2 for Molecular Structure Recognition", 2026.
- [30] Rajan, K. et al., "Advancements in hand-drawn chemical structure recognition through an enhanced DECIMER architecture", PMC11227129, 2024.
- [31] IBM Research, "PatCID: an open-access dataset of chemical structures in patent documents", Nature Communications, 2024.
- [32] TPR International, "PatCID: TPR Explores IBM's New Open-Source Patent Chemical Structure Database", 2025.
- [33] Morin, A., Weber, L. et al., "MarkushGrapher: Joint Visual and Textual Recognition of Markush Structures", CVPR 2025, pp. 14505-14515.
- [34] arXiv:2603.28550, "MarkushGrapher-2: End-to-end Multimodal Recognition of Chemical Structures", CVPR 2026.
- [35] Hayes, E. et al., "AI-assisted interpretation of Markush structures in pharmaceutical patents: a review", J. Cheminformatics, 2026. <https://link.springer.com/article/10.1186/s13321-026-01172-y>
- [36] 酒井美里 / Smartworks Inc., 「AI 時代の侵害予防調査 (FTO) と『ディスカバリー』の基礎知識」, note, 2025 年 7 月.
- [37] 日本 IR, 「生成 AI で特許調査はどこまでできる? 化学系調査・スクリーニング編」, 2025 年 10 月.
- [38] Wang, Y. et al., "PatentAgent: Intelligent Agent for Automated Pharmaceutical Patent Analysis", arXiv:2410.21312, 2024.
- [39] Shi, X. et al., "Intelligent System for Automated Molecular Patent Infringement Assessment (PatentFinder)", arXiv:2412.07819, 2024.

- [40] Sakhinana, S. et al., "Towards Automated Patent Workflows: AI-Orchestrated Multi-Agent Framework", arXiv:2409.19006, 2024.
- [41] Scientific Reports, "From LLMs to AI agents: a systematic benchmark for SAO structure extraction in patent analytics", 2026.
- [42] arXiv:2506.21625, "Doc2SAR: A Synergistic Framework for High-Fidelity Extraction of Structure-Activity Relationships", 2025.
- [43] arXiv:2504.10525, "BioChemInsight: An Online Platform for Automated Extraction of Chemical Structures and Activity Data from Patents", 2025.
- [44] RSC Publishing, "MARCUS: molecular annotation and recognition for curating unravelled structures", Digital Discovery, 2025.
- [45] arXiv:2309.08765, "Mining Patents with Large Language Models Elucidates the Chemical Function Landscape", 2023.
- [46] 住友化学, 「最少の実験回数で高い予測精度を与える汎用的 AI 技術を開発」, 2021 年 10 月 25 日.
- [47] FRONTEO, 「FRONTEO と日華化学、Drug Discovery AI Factory を活用した共創プロジェクトを開始」, PR TIMES, 2024 年.
- [48] airobot-news, 「AI Samurai、『化学分野における特許出願戦略と AI の活用』オンラインセミナー開催」, 2022 年 6 月.