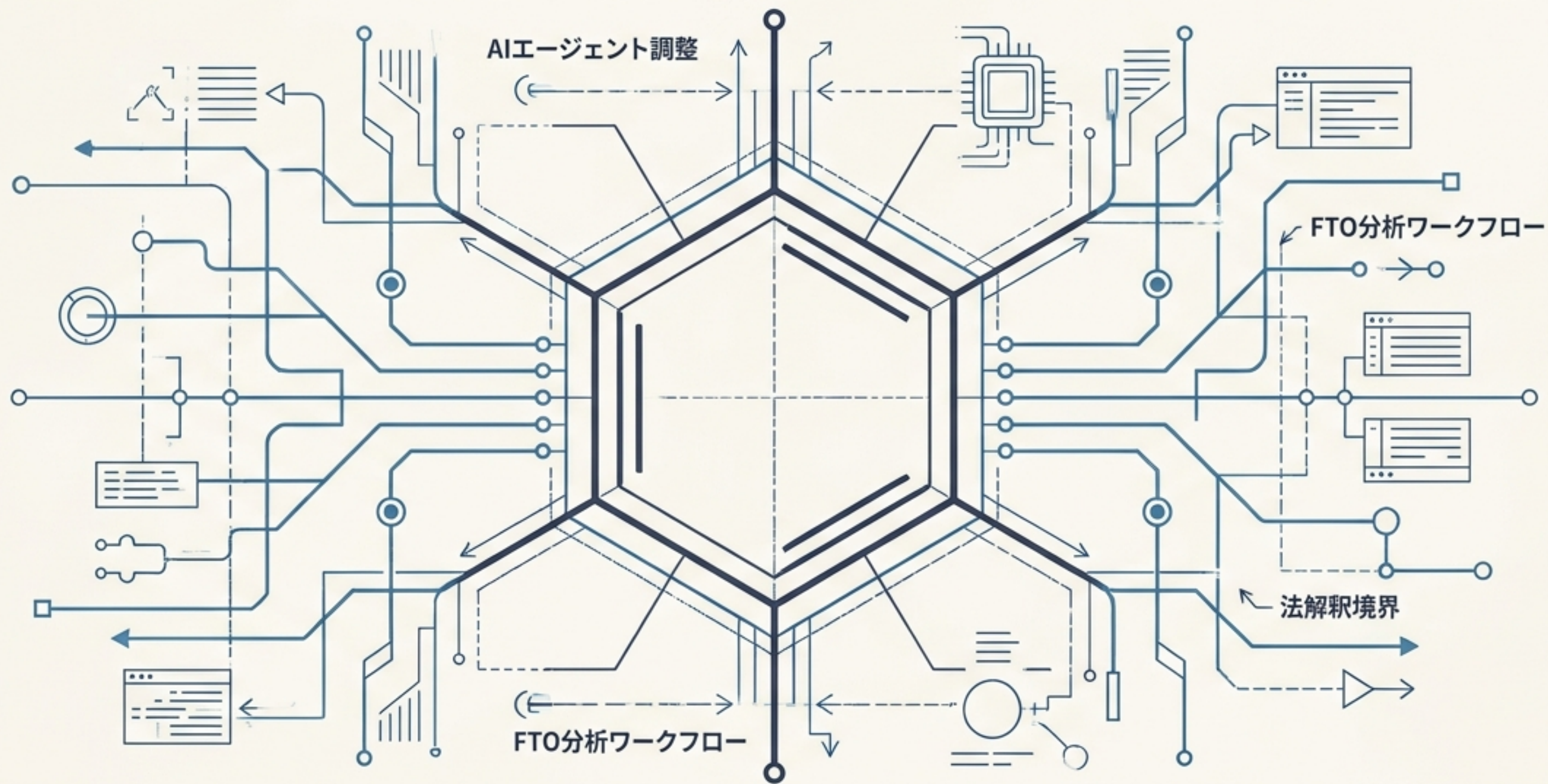
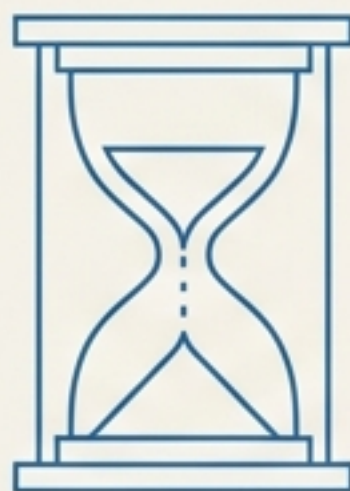


化学知財における「検索」から「自律型協調」へのパラダイムシフト

2026年、AIエージェントがもたらすFTO半自動化の実務と法解釈の境界線

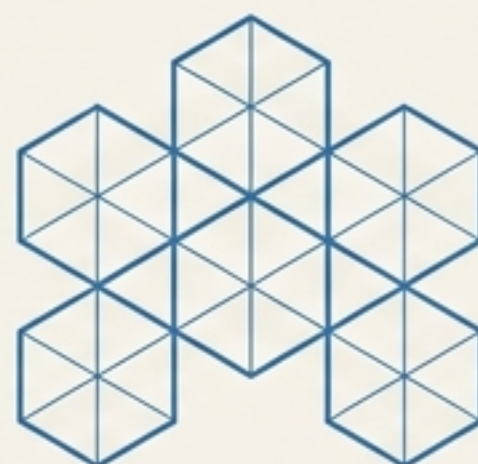


2026年、化学知財を再定義する3つのメガトレンド



自律化 (Autonomy)

従来型の「キーワード検索」から、AIが文脈を解読し外部知識と連携する「能動的パートナー」へ。三井化学の実証では1ヶ月の作業を1日へ圧縮。



マルチエージェント (Multi-Agent)

単一のLLMから、専門機能（構造抽出、置換基照合など）を持つ複数のAIが合議するアーキテクチャへの進化。ハルシネーションを劇的に抑制。



人間との協調 (HITL)

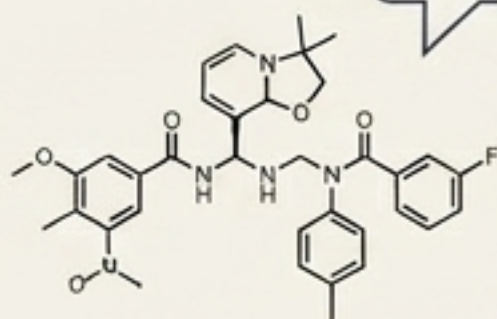
均等論など高度な規範的判断が求められる法解釈において、AIの完全自動化は不可能。「候補抽出のAI」と「法的判断の人間」による完全な協調モデルの確立。

完全自動化を阻んできた「文脈の欠短」と「マーカッシュ地獄」

文脈欠如のブラックボックス

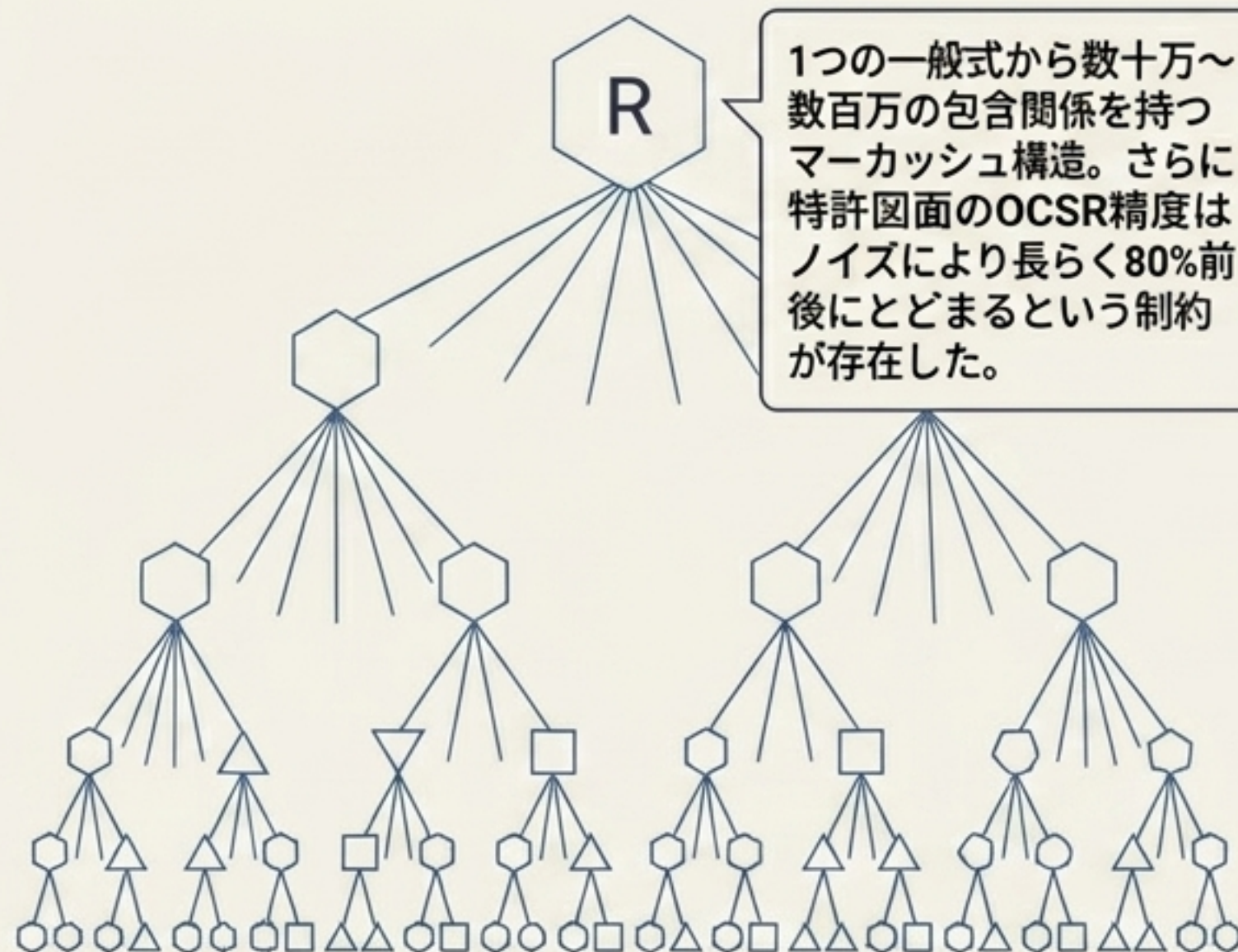
Patents filed by pharmaceutical companies are often written in a way that is difficult to understand. This is because the patent system is designed to protect the inventor's rights, and the language used is often highly technical and legalistic. This makes it difficult for researchers and clinicians to understand the true meaning of the patent, and can lead to confusion and misunderstanding. In some cases, the patent may be written in a way that is intentionally ambiguous, in order to cover a wide range of potential future inventions. This can be a problem for researchers who are trying to develop new drugs, as they may not be able to determine if their work is infringing on the patent. In other cases, the patent may be written in a way that is simply unclear, due to the complexity of the subject matter. This can also be a problem for researchers, as they may not be able to understand the patent and therefore may not be able to avoid infringement. In both cases, the result is that the patent system is not working as intended, and is creating a barrier to innovation.

従来ツールは構造式の一致検索に優れるが、化合物の生物学的活性やクレームの文脈を読解する能力が欠如。人間が行ずつ明細書を読み解く必要があった。

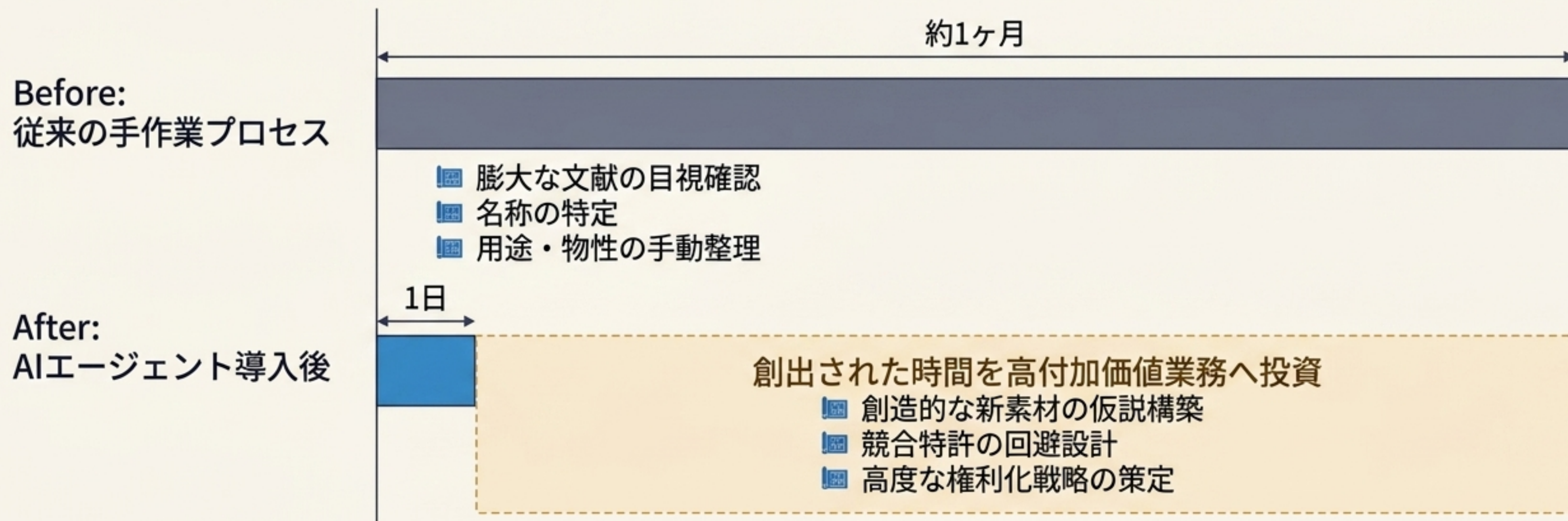


(N) The patent system is designed to protect the inventor's rights, and the language used is often highly technical and legalistic. This makes it difficult for researchers and clinicians to understand the true meaning of the patent, and can lead to confusion and misunderstanding. In some cases, the patent may be written in a way that is intentionally ambiguous, in order to cover a wide range of potential future inventions. This can be a problem for researchers who are trying to develop new drugs, as they may not be able to determine if their work is infringing on the patent. In other cases, the patent may be written in a way that is simply unclear, due to the complexity of the subject matter. This can also be a problem for researchers, as they may not be able to understand the patent and therefore may not be able to avoid infringement. In both cases, the result is that the patent system is not working as intended, and is creating a barrier to innovation.

マーカッシュの爆発 (Markush Explosion)



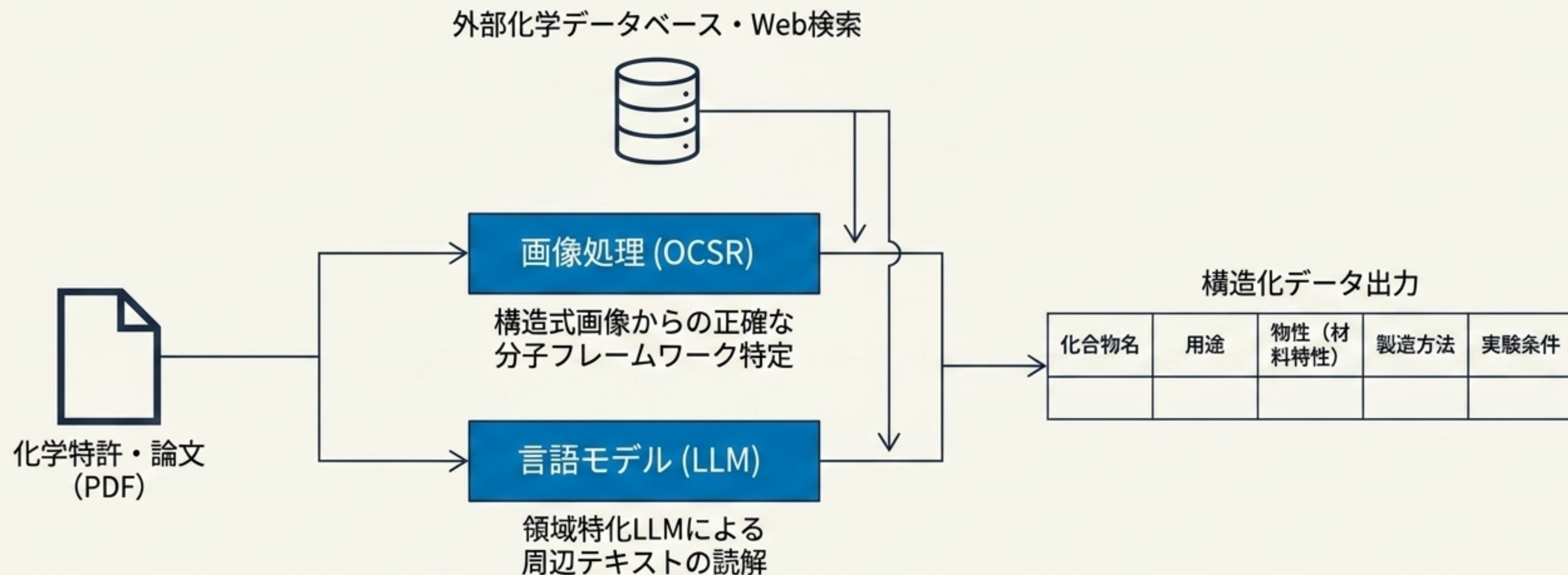
三井化学の実証：「1ヶ月を1日」にする圧倒的生産性革命



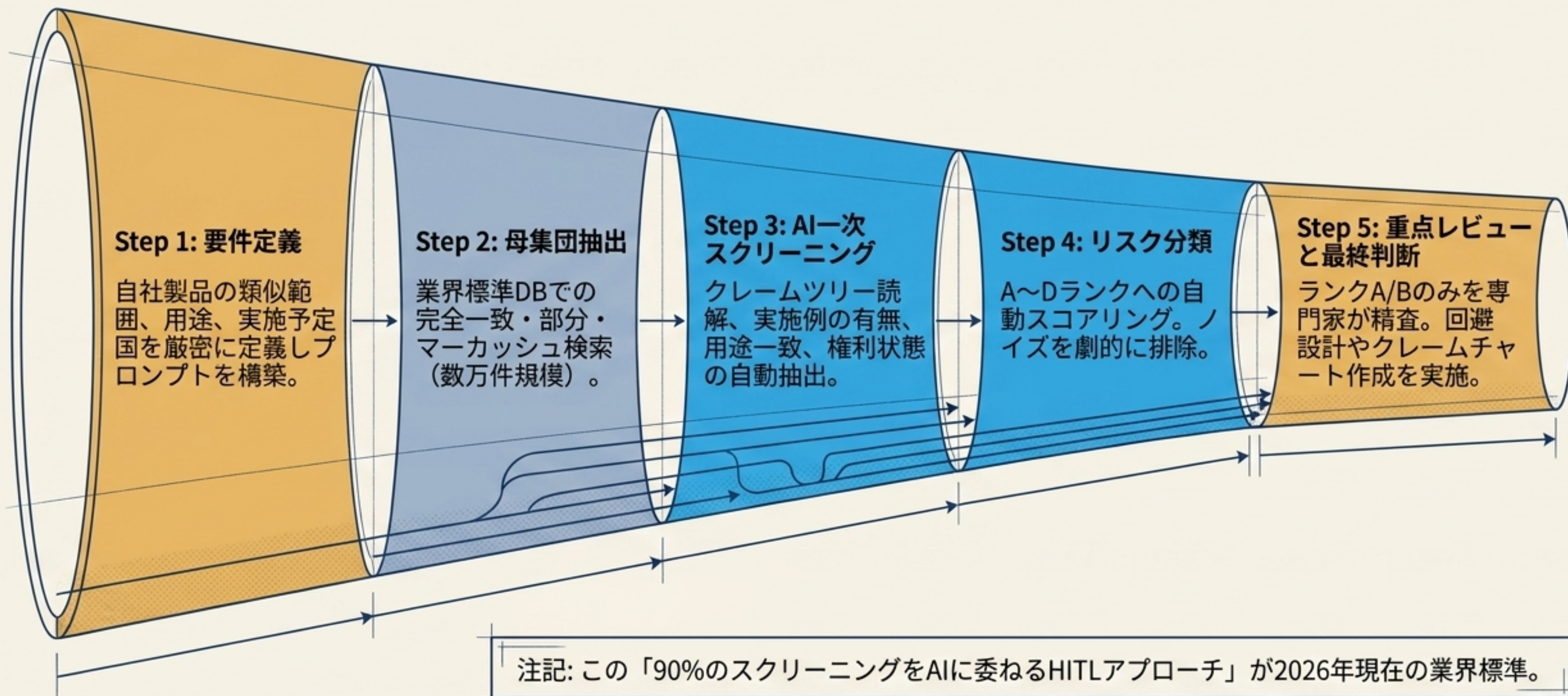
キー・インサイト

MI推進室設立から1,000億円DX投資という経営コミットメントの集大成。2025年度内に実証完了、2026年度中の本格運用を目指す、知財・研究プロセスの本質的な「生産性革命」。

コア・メカニズム1：視覚と言語の融合による「文脈」の自律的抽出



自由実施調査（FTO）半自動化の5ステップ・パイプライン



FTOスクリーニングにおける「抽出」と「解釈」の役割分担

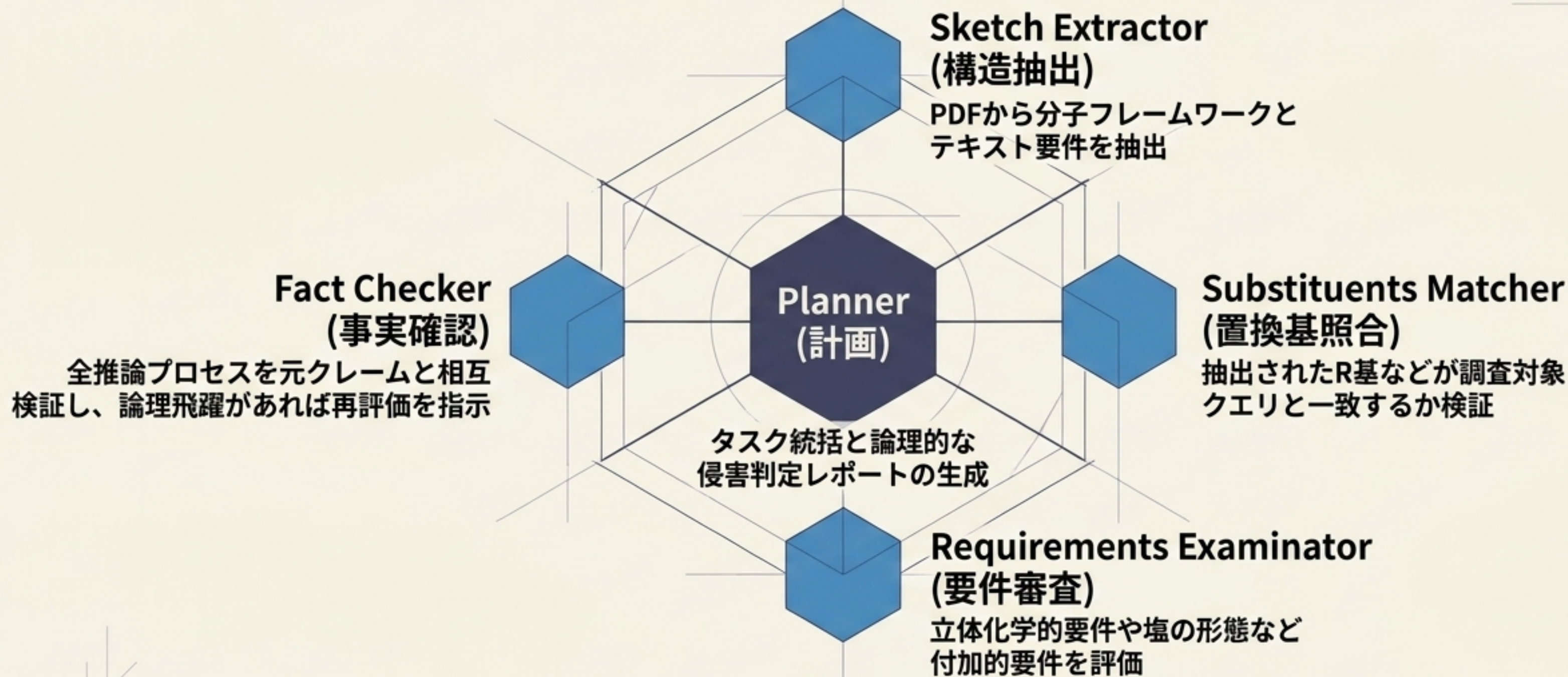
ランク	意味	AIのタスク	人間の対応
A	高リスク	クレーム要件の合致箇所をハ イライト抽出	クレームチャート作成、均等論を 含む高度な鑑定、回避設計の検討
B	中リスク	マーカッシュ包含可能性や類 似実施例の提示	権利状態の精査、詳細読解による 技術的範囲の判断
C	低リスク	関連性の低い用途や製法のフ ラグ付け	分析結果の記録保管（目視のダ ブルチェック程度）
D	無関係	完全にスコープ外の特許を自 動除外	対応不要

補足インサイト

- AIは「判断主体」ではなく、極めて優秀な「候補抽出装置」。
- Dランクの自動除外により、数千件のダミーデータに奪われていた時間を解放。
- Aランク（高リスク）における「均等論」や「回避設計」の判断はAIには担えず、人間（専門家）の専権事項となる。

コア・メカニズム2:

『PatentFinder』に見るマルチエージェント協調アーキテクチャ



複雑な特許解釈という巨大なタスクを、単一LLMに丸投げしない安全設計。

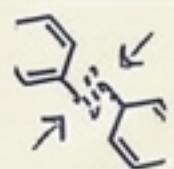
化学構造の「ハルシネーション」を防ぐ 専用ニューラルツール

ハルシネーション防止機構



MarkushParser

図面のマーカッシュ構造をOCSRで機械可読な文字列（SMILES拡張表現等）へ変換。



MarkushMatcher

数十万件のデータで訓練されたモデル。
汎用LLMが陥りやすい「存在しない置換基の捏造」を完全に防ぐ。

MolPatent-240 ベンチマーク成果

+13.8%

ベースライン手法に対するF1スコアの向上



解釈可能性 (Interpretability)

単なる「侵害/非侵害」のバイナリではなく、人間の専門家が追跡・検証可能な「ステップ・バイ・ステップの判定レポート」を出力。

2026年 主要な商用知財・化学AIエージェントのポジショニング

プラットフォーム	コアの強み	主要機能	主なユースケース
CAS Newton	150年分のキュレーションデータに基づく高精度な科学的推薦	対話型コンテキスト維持、ハルシネーション抑制、セキュリティ境界	創薬・材料科学のR&D、高精度な先行技術調査
Patsnap Eureka	API/MCPによる開発者向けエコシステムと構造化ワークフロー	8ステップFTO API、特許特化LLM、LangChain統合	社内知財システムの構築、FTOリスクの自動モニタリング
Summaria	段階的かつインタラクティブな明細書作成と日本法務への適合	Ask/Agent UI、50以上の明細書チェックルール	企業知財部での内製化、特許事務所におけるドラフト作成支援
PatentFinder (Academic)	マーカッシュ解析に特化したマルチエージェント協調フレームワーク	MarkushParser/Matcher、自律的侵害レポート生成	AI創業における新規化合物のスクリーニングと権利抵触判定

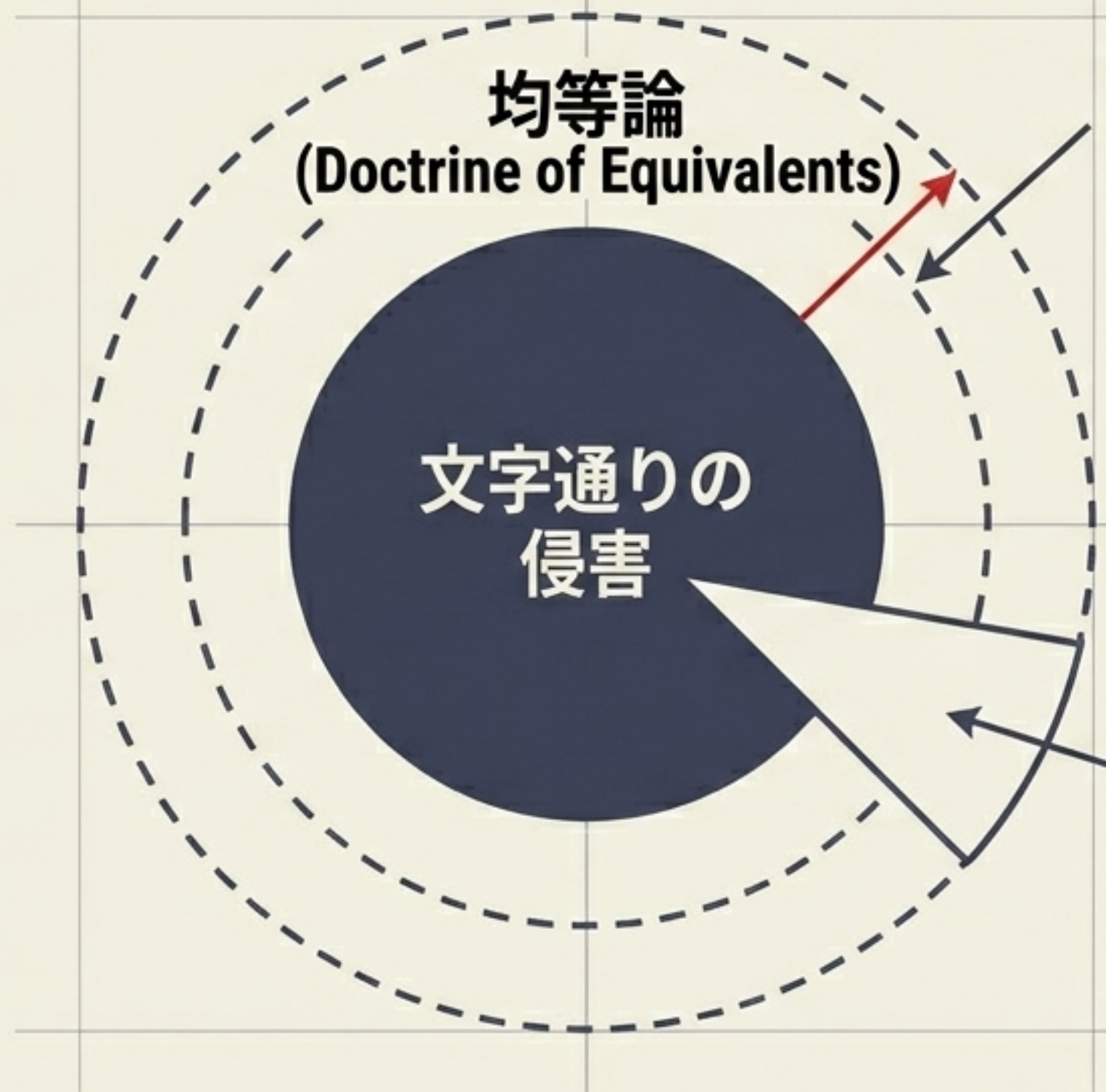
データ基盤とセキュリティ

CAS Newtonは150年分のピアレビュー済みデータのみを基盤とし、他ユーザーへの学習利用を遮断する厳格な境界を構築。

ワークフローへの統合

Patsnapは8ステップのFTO APIを提供。Summariaは人間主体のAsk/Agent UIにより明細書作成を支援し、DeepIP/XLSCOUTは常時モニタリングを実現。

AIが超えられない壁：「均等論」と「禁反言」 のブラックボックス



AIは技術的類似性は計算できるが、法的な均等 (Function-Way-Result) かは判断不能。CAFC判例は「すべての構成要件」に厳格。

禁反言
(Prosecution History Estoppel)

審査過程で意図的に放棄された権利範囲。審査官と出願人のやり取りの背後にある「意図」を現在のAIは完全に確定できない。

生成AIによる明細書作成リスクと極端化のジレンマ

広すぎるクレーム

先行技術に抵触し無効化されるリスク。化学領域における「実施可能要件」違反。マーカッシュを広げすぎると、記載された実施例だけで当業者が実施できないと判断される。



狭すぎるクレーム

競合による容易な回避設計 (Design-around) を許す。熟練弁理士が行う「段階的なフォールバック (従属項の階層構造)」の戦略的視座が汎用AIには欠如。

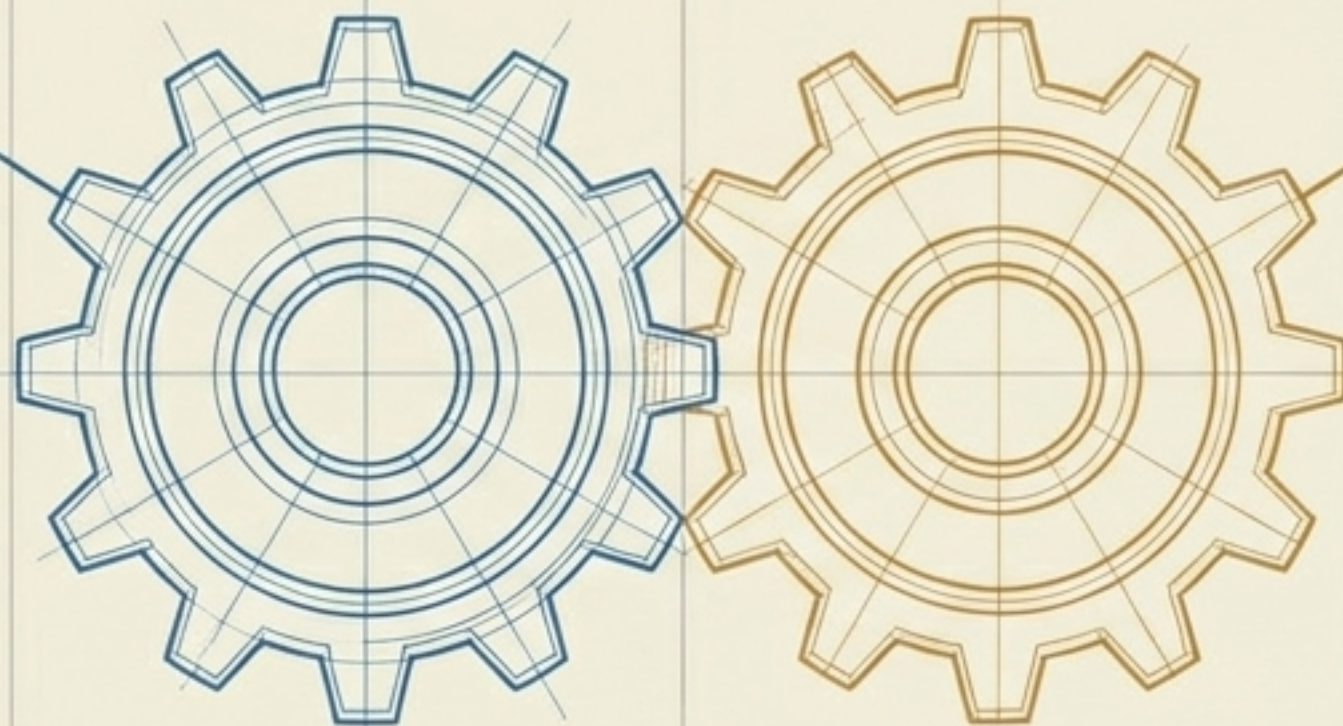
USPTOガイダンス (2025-2026)

AIはあくまで「ツール」であり、「共同発明者」にはなり得ない。法的妥当性を担保する能力は不完全である。

なぜ「Human-in-the-loop (HITL)」が恒久的に不可欠なのか

AIエージェントの領域 (処理能力)

- 圧倒的な速度による一次スクリーニング
- 文脈の解読とマーカッシュ構造の展開
- 技術的類似性のスコアリングとノイズの90%排除



人間の専門家の領域 (規範的判断)

- 衡平性の原理に基づく法解釈
- 均等論の適用判断と審査官の意図推論
- 事業戦略に基づく回避設計
- 化学的妥当性と権利の強靭さの担保

AIは「完璧な裁判官」ではなく「有能な調査官」。
規範的判断を伴う特許実務において、HITLは過渡期の妥協ではなく、最終的な最適解である。

シンセシス：知的財産の完全統合型R&Dモデル

事業部門・R&D（創出）

AIの抽出データを基に、新素材の仮説構築と実験に集中（1カ月→1日で創出された時間を投資）。

知財部・専門家（戦略・保護）

初期段階からR&Dに伴走。AIが抽出した高リスク案件に対し、回避設計や強靱な権利化戦略を設計。



設計・調査・
権利化の同時進行

AIエージェント（基盤）

常時稼働で文献・特許をスクリーニングし、リスクとホワイトスペースをリアルタイムに提示。

結論：次世代の競争優位は「最適な協調」の設計から生まれる

1. AIの進化は完了した

「読めない・使えない」は過去の誤解。マルチモーダルAIは化学特許の文脈とマーカッシュ地獄を既に突破している。

2. 魔法の杖ではない

法解釈、均等論、明細書の戦略的構築において、AIは人間の人間の代替にはならない。

3. 2026年以降の勝者の条件

AIの「圧倒的処理能力」と人間の「規範的判断」をシームレスに結びつける『HITLワークフロー』を、いかに早く実装できるか。

化学産業の未来は、AIという「自律型パートナー」を最も巧みに指揮する司令塔（人間）の手に委ねられている。