

調査基準日：2026年9月22日

対象：第35回 知財・情報フェア&コンファレンス
(2026) vs 第34回 (2025)

調査・分析：GPT-6 Astra

2026 知財情報フェア インテリジェンス・レポート

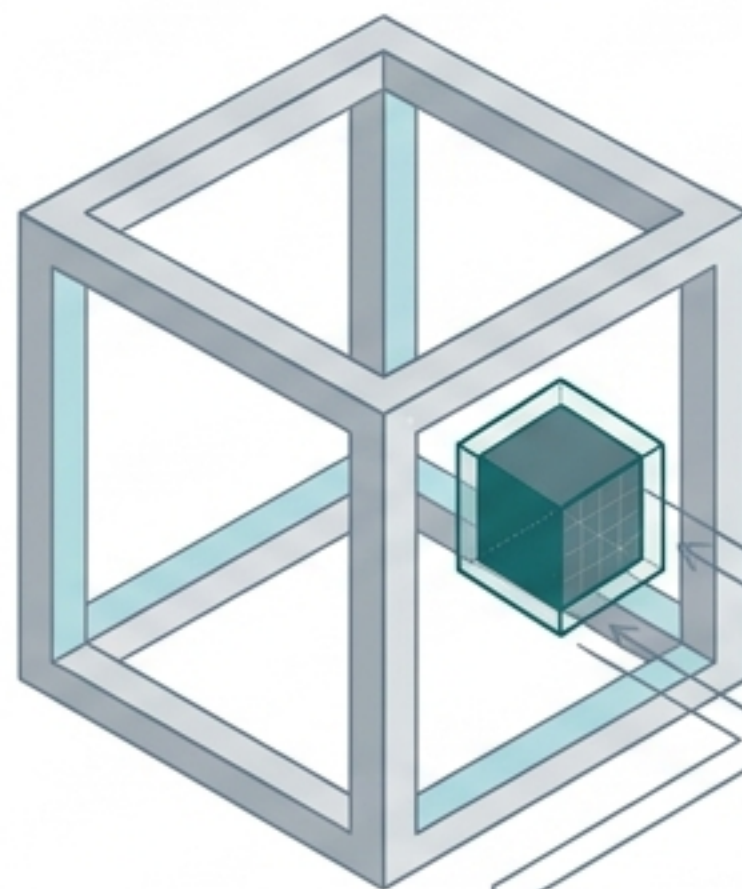
生成AIと化学構造式の現在地：機能の「誕生」からワークフローの「具体化」へ

誤った認識

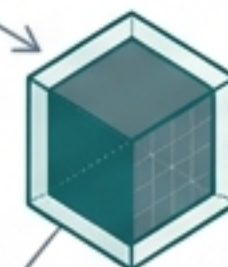


「2026年は生成AIが初めて化学分野に進出した『AI元年』である」

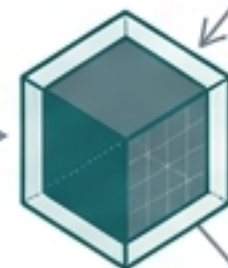
2026年の真実：ワークフローの具体化



2025年時点ですでにMarkushクレーム支援や化学式対応は発表されていた。2026年の真の変化は、機能の「誕生」ではなく、実務における用途の「具体化」である。



画像を入口とする検索



構造式の描画・出力



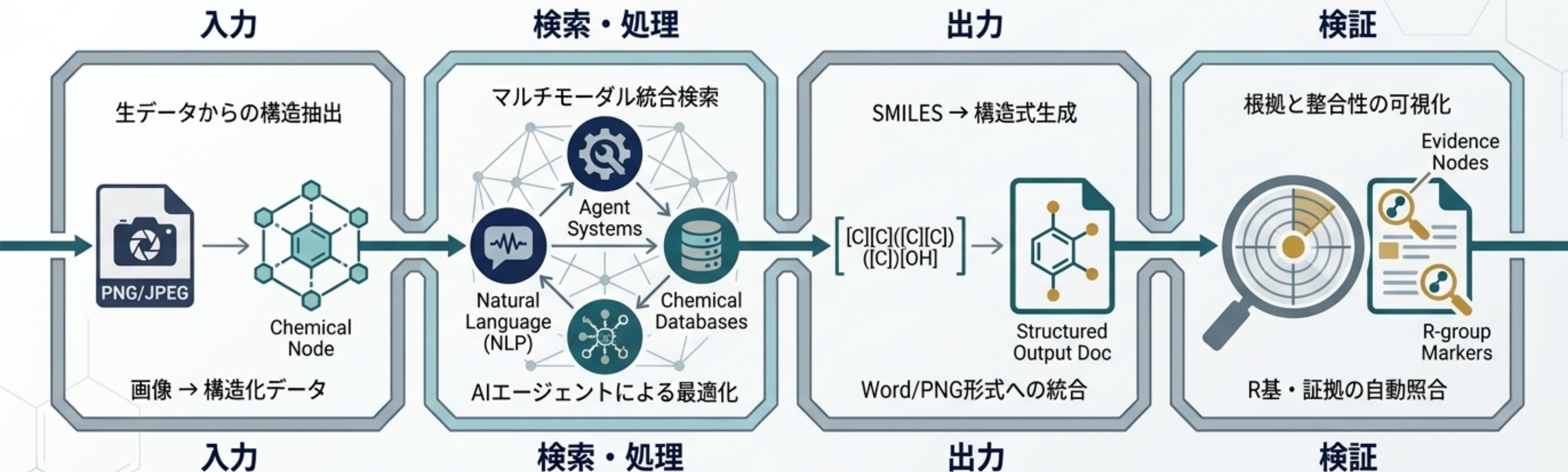
検索過程の検証

2025年から2026年への進化パラダイム

	入力	出力	連携	検証
2025	文章・図面 読解中心	要約・Markush 作成補助	個別エージェント 機能	生成文の品質・ 利便性の訴求
2026	構造式画像を 検索・起案の 「入口」として 明示	構造式を含む 文書と Word/PNGへの 出力工程の 具体化	MCPやAgent Skillsによる 既存ツール・ 前後作業との 連携	検索過程、 根拠、構造と 文章の整合性の 可視化

知財ワークフローの具体化モデル

2026年のプレイヤー達は、このパイプラインの各段階における「断絶」を埋める技術を提示した。



進化 1: 「入力」の視覚化

入力

出力

連携

検証

A Wert Intelligence (keywert Chemistry)



構造式画像と自然言語のハイブリッド検索。

画像から一般名、IUPAC名、SMILESを認識し、物質名＋用途・工程まで検索。

B アイビーリサーチ (AIPs / A-Ipat)



特許専用生成AIと企業内RAGの結合。

クラウドに接続せず、図面・化学式から請求項や実施形態を直接生成。

! 画像から文章を作れることと、化合物の性質を科学的に実証できることは「別の能力」である。

進化 2: 「出力」の描画と実装

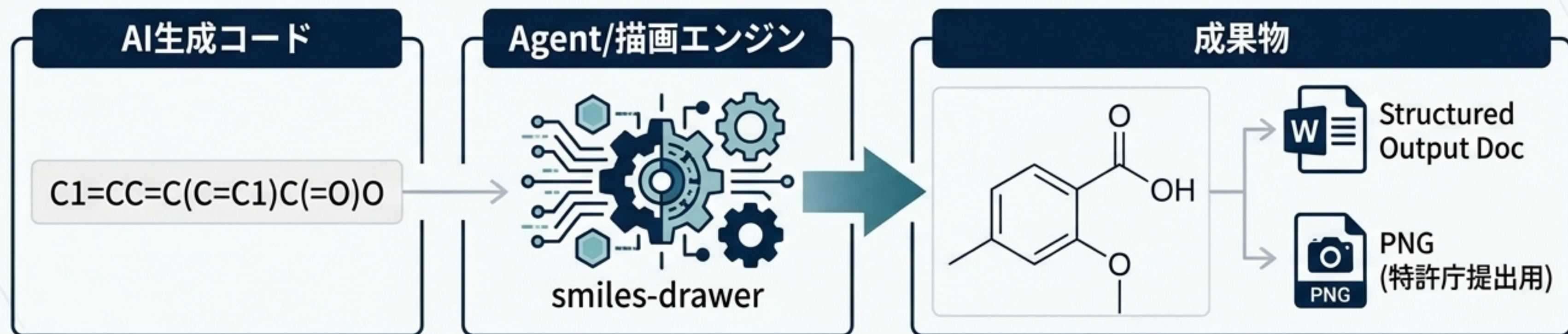
入力

出力

出力

検証

パテント・インテグレーション (サマリア / Summaria)



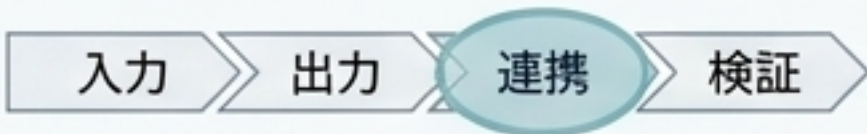
Main Insight

AIが作成したSMILESを内部で描画し、特許文書の成果物として直接WordやPNGへ出力する工程が具体化。

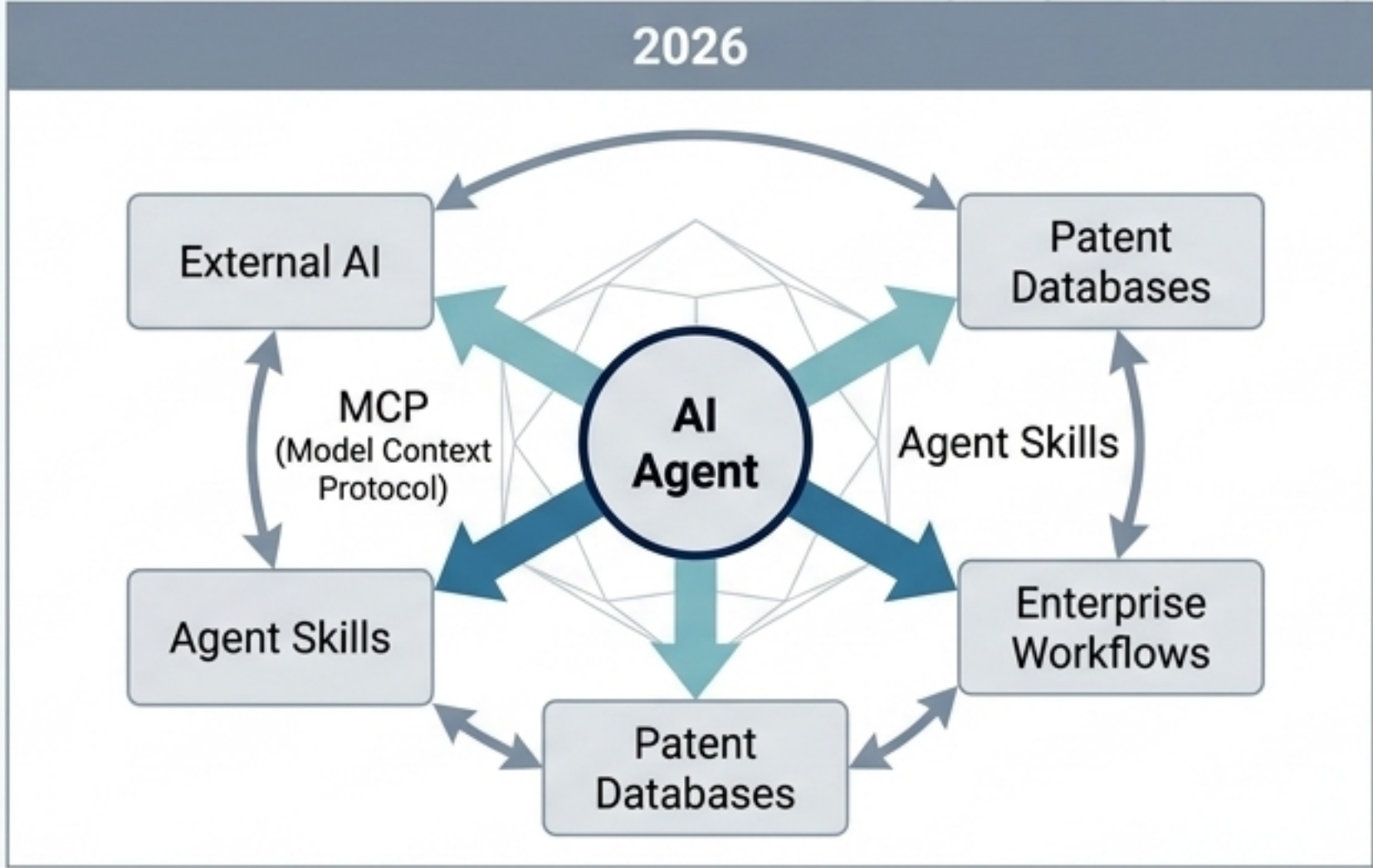
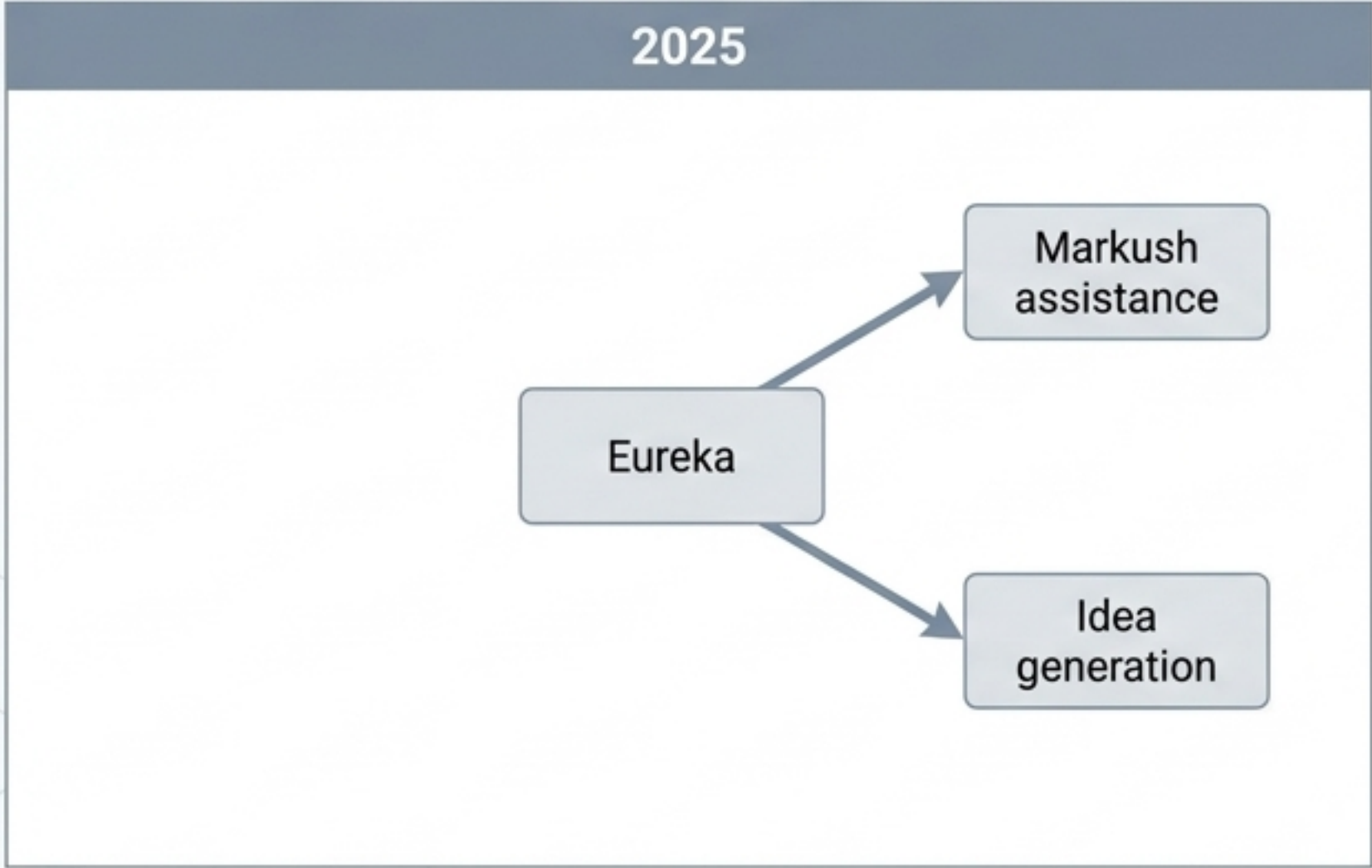
Intelligence Note

2024年からの図面読解機能に加え、構造式を「文書の成果物」として出力する機能が追加された。

進化 3: 個別ツールから「業務連携」へ



Patsnap (Eureka & Analytics)



Main Insight	2025年に提示された個別の化学・知財支援機能が、既存業務や外部ツールへ繋がるアーキテクチャへと進化。
Intelligence Note	2025年時点でMarkushクレーム作成支援は既に存在。2026年の主眼は精度の劇的な向上ではなく、業務パイプラインへの「接続」である。

進化 4: 生成から「根拠の可視化」へ

入力

出力

連携

検証

化学情報協会 / CAS (CAS IP Finder & CAS Newton)

INPUT

INPUT

例: 新しいポリマー合成のための触媒探索、特に環境負荷の低いプロセス。

自然言語の探索を既存の強固な化学情報基盤 (CAS) へ接続。

TRANSPARENT
OUTPUT

The screenshot displays the CAS IP Finder web interface. On the left, there's a sidebar with navigation icons. The main content area shows search results for a query related to polymer synthesis catalysts. It includes a list of search results with chemical structures and associated data. The interface is clean and professional, typical of a scientific database.

Search Strategy

Natural
Language

Keyword
Extraction

CAS
Registry
Mapping

Database Selection
(Cplus, MARPAT)

Processing Steps

Step 1: Semantic Analysis

Step 2: Substructure Search

Step 3: Relevance Ranking

Step 4: Synthesis Route Proposal

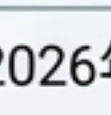
Evidence Citations (SciFinder)

1. J. Am. Chem. Soc. 2023, 145, 1234-1240. (DOI: ...)

2. Patent WO 2024/005678 A1. (CAS RN: ...)

「嘘のないAI」の真意は、誤りが発生しないことではない。
AI検索の戦略、処理過程、根拠を専門家が検証可能な形で『見える化』したことにある。

2026 知財AIベンダー ケイパビリティ・マトリクス

	画像入力	構造式描画・出力	Markush/ 請求項生成	外部ツール 連携/MCP	検索根拠の 可視化
Patsnap (Eureka)					
Wert Intelligence (keywert)					
アイビーリサーチ (AIPs)					
パテント・インテグレーション (サマリア)					
化学情報協会 (CAS IP Finder)					
TTDC (AI Samurai)					

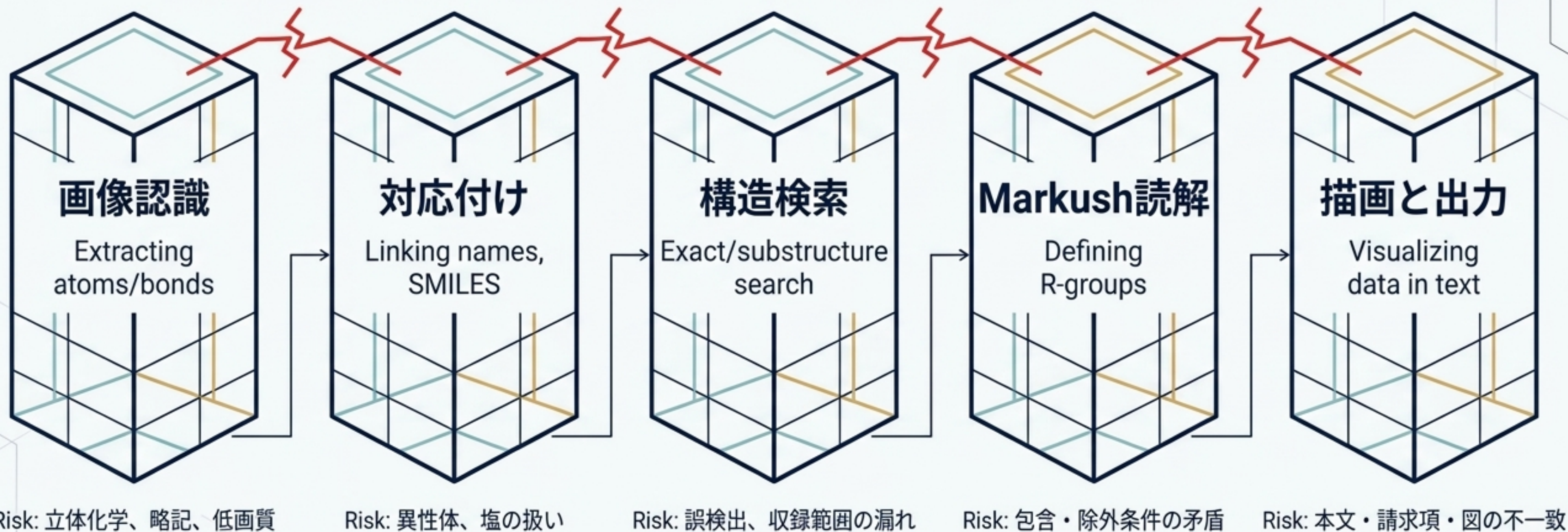
1 2026年の大きな特徴

2 専門家検証のための
必須要件

3 2025年時点でswimyにて
化学式対応済み。AI戦略
全体の支援へ展開。

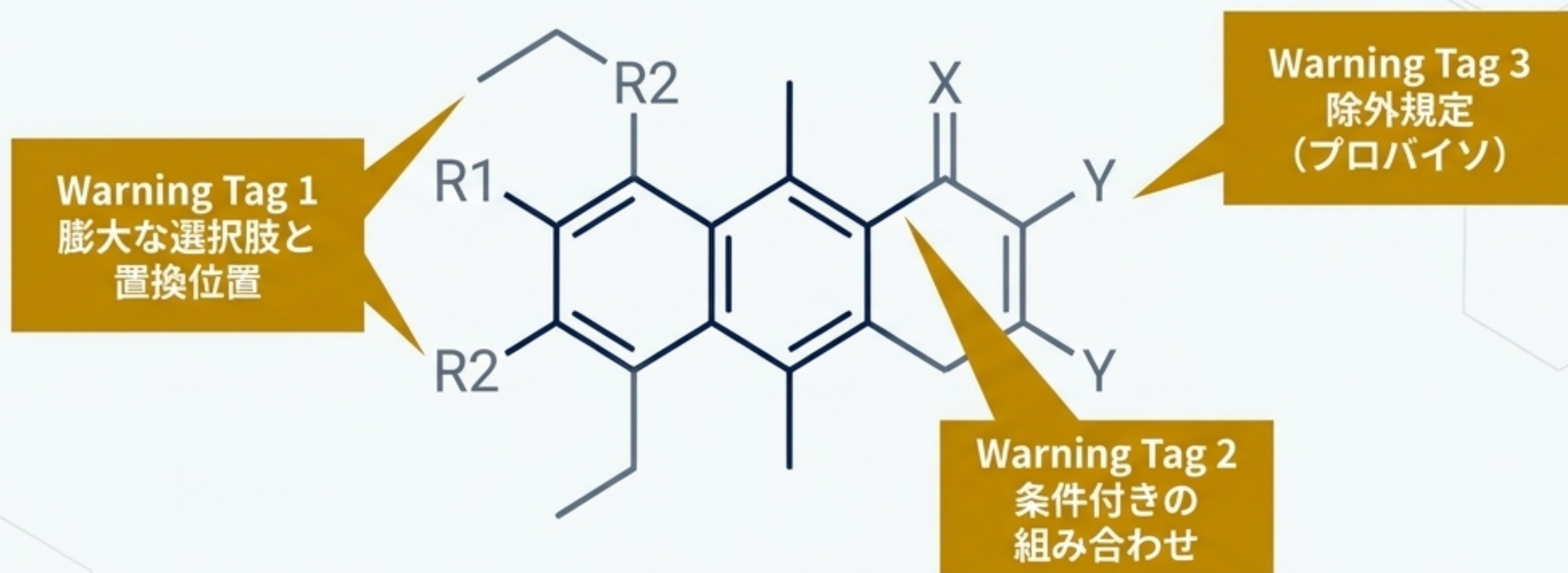
評価の罫：「化学AI」能力のアンバンドリング

「生成AIが化学式を扱える」という説明は、以下の独立した能力に分けて評価する必要がある。



画像をWordに描画できることと、化合物の網羅的検索ができることは同義ではない。

最終的なボトルネック：MarkushとFTOの壁



Core Argument

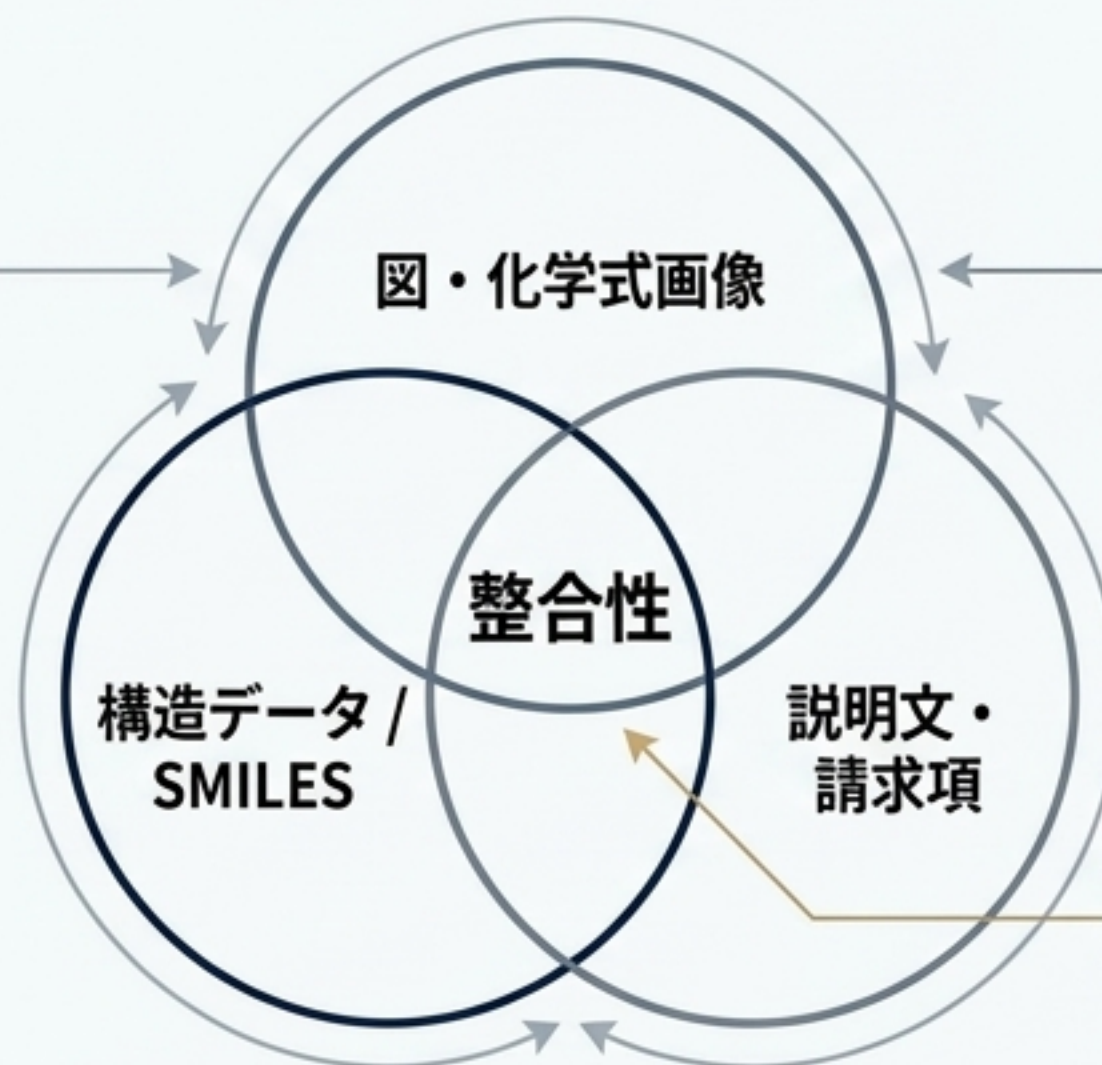
Markushクレームの「作成支援」と、対象化合物が他社権利に入るか調べる「FTO（事業実施の自由）調査」の自動化は全く異なる。

現行マニュアルでもFTOのワークフロー未統合が明示されているケースがある（Patsnap等）。

各社共通のベンチマークは存在せず、自社の包含・除外データセットを用いた個別検証が不可欠。

導入評価の新基準：AI生成速度から「総作業時間」へ

$$\boxed{\text{総作業時間}} = \boxed{\text{AI生成時間}} + \boxed{\text{誤り発見・根拠確認・修正の時間}}$$



見た目が整った文章や構造式でも、置換位置や結合が一つ変われば別の化合物になる。出力間の「整合性」の確認時間が、真のROIを決定する。

化学系知財AI エバリュエーター用診断リスト



☐ 画像の認識耐性

略記、立体化学、電荷、低画質画像から正しい構造データを抽出できるか？

☐ 検索の再現性と追跡

入力表現を変えても結果が安定し、見落としを追跡できるか？

☐ Markush包含の限界値

意図的な包含例・除外例を用いて、条件や例外を正しく処理できるか？

☐ 成果物の相互整合性

構造式、SMILES、図番号、請求項、本文に一切の矛盾がないか？

共通ベンチマークはない。必ず「自社が扱う文献と化合物」を用いて、作業単位でテストすること。

戦略的展望：2027年に向けたIPランドスケープ

事実

分子の創出から権利範囲の判断までが一貫して自律的に完了する段階には、まだ到達していない。

■ DATA ■ NODE



2026年の価値

2026年は、AIがブラックボックスから脱却し、専門家のワークフローに組み込まれる「パイプライン化」の起点となった。

■ DATA ■ NODE



次の一手

ツール選定の勝敗は「AIに何を生成させるか」ではなく、「AIの出力をいかに早く、確実に見破り、検証できるか」にかかっている。

■ DATA ■ NODE

