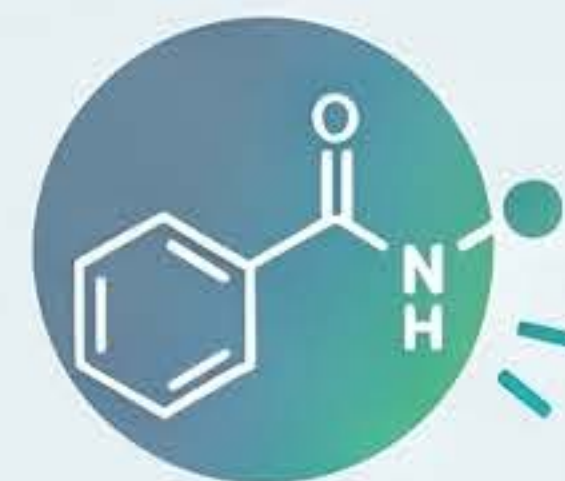


生成AI×化学構造式：2025年から2026年への劇的進化

2025年（第34回）



機能の一部

生成AIは「機能の一部」
として化学式に触れる程度

入力（入口）



テキスト・キーワード中心

出力（出口）



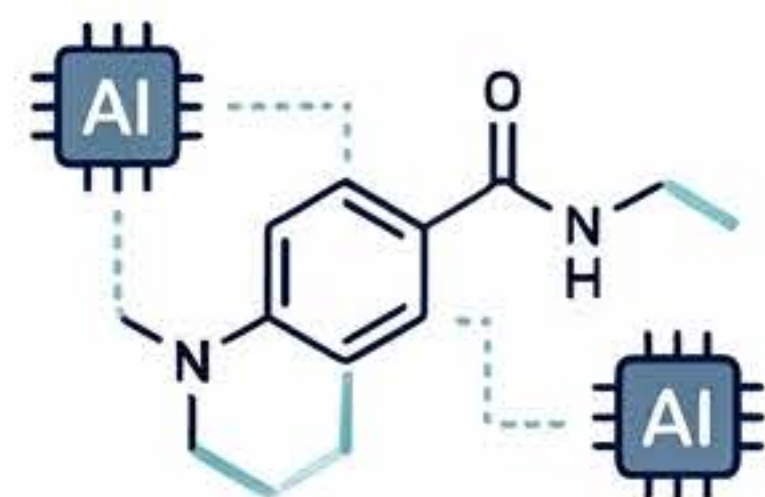
文章・要約の生成が中心

検索・検証



専用基盤とAIが別系統

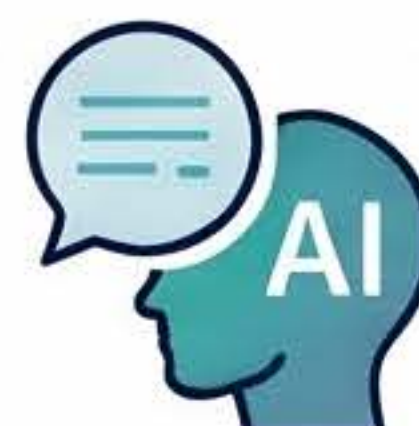
2025年のパラダイム



2026年（第35回）

展示の主役

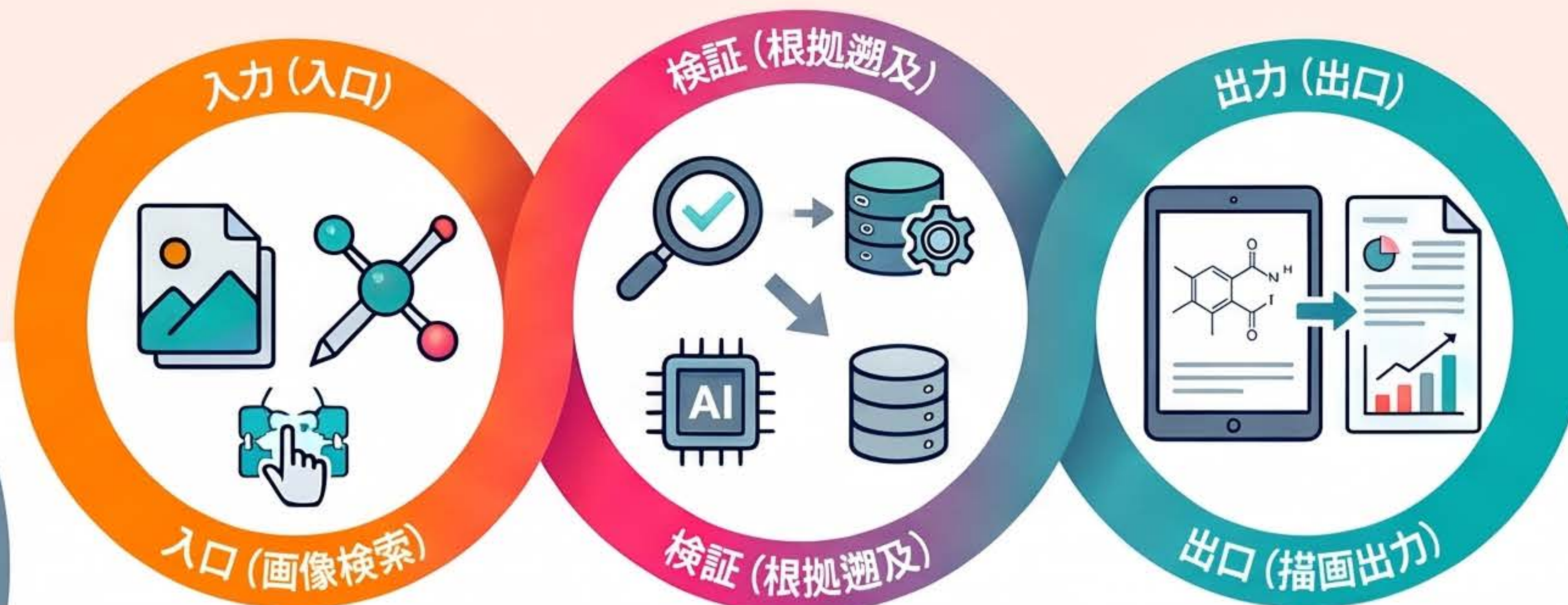
2026年は化学構造式の認識や検索
そのものを主題とする発表が急増



専用基盤とエージェントAIの接近

CAS Newton等の登場により、厳密な
検索と自然言語対話が融合しました。

構造式活用の三方向への具体化



構造式画像・SMILES
SMILES等からの検索

科学データに基づく
「検証可能」なAI

構造式の描画・
文書への自動出力

2026年の主要ソリューションと実務への含意

日韓の先端ツールが実演を主導

keywert (韓国) CAS アイビーリサーチ

構造式特化機能を披露

自社化合物による
「体験型」実演の登場

来場者が自社データを持ち込んで
精度を試す形式が注目を集めました

依然として残る
「専門家の介在」

Markush解釈やFTO判断の完全自動化
は未達であり、人の検証が必須です

