

化学研究開発を革新する AI：企業および学術研究向けツールの戦略的分析

Gemini Deep Research

エグゼクティブサマリー

本レポートは、化学分野における研究開発（R&D）を加速させる人工知能（AI）活用ツールの現状と将来展望について、包括的かつ戦略的な分析を提供する。AI はもはや未来の概念ではなく、化学、製薬、材料科学の分野において R&D のワークフローを根本から変革する現実的な力となっている。本分析では、AI 活用の主要な 4 領域—「情報発見と仮説生成」「化学合成の予測と設計」「マテリアルズ・インフォマティクス（MI）による新規物質設計」「実験の自動化」—に焦点を当て、それぞれの領域で代表的なツールがもたらす価値を詳述する。

主要な結論として、AI 導入の成功は、単一のツール選定以上に、堅牢なデータ戦略の構築に懸かっていることが明らかになった。市場は特定の機能に特化した単一ソリューションから、R&D プロセス全体をカバーする統合プラットフォームへと移行しつつある。成功事例の多くは、AI が研究者を代替するのではなく、その能力を拡張する「人間拡張（Human Augmentation）」モデルを採用しており、人間の専門知識と AI の計算能力を融合させることで最大の効果を発揮している。

本レポートでは、企業が自社の R&D 戦略に最適な AI ツールポートフォリオを構築するためのフレームワークを提示する。これには、研究開発の目標、データの成熟度、そして既存のワークフローとの整合性を考慮したツール選定が含まれる。最終的に、AI の導入は技術的な投資に留まらず、データ中心の文化への変革、学際的な人材の育成、そして研究開発プロセスそのものの再設計を伴う戦略的取り組みであると結論付ける。この新しいパラダイムを積極的に受け入れる企業こそが、未来の革新的な分子や材料を、かつてないスピードと効率で市場に送り出すリーダーとなるであろう。

第 1 部 新しいパラダイム：現代化学研究における AI の役割

化学研究の世界は、データ駆動型科学の台頭により、歴史的な転換点を迎えている。その中核をなすのが人工知能（AI）であり、従来の手法では数十年を要した発見プロセスを劇的に短縮し、コストを削減し、イノベーションの質を向上させる可能性を秘めている¹。このセクションでは、この変革を駆動する基盤技術、主要な応用情報科学分野、そしてAI導入がもたらす具体的なビジネス価値について概説する。

1.1 革命を駆動するコア技術

化学分野におけるAIの活用は、いくつかの基盤技術の組み合わせによって実現されている。これらの技術を理解することは、各ツールの能力と限界を正しく評価する上で不可欠である。

- **機械学習（ML）**：現代化学AIの基盤であり、既存のデータからパターンを学習し、未知のデータに対する予測を行うアルゴリズム群を指す³。物性予測、製造プロセスの最適化、品質予測、異常検知など、幅広いタスクに適用される¹。
- **深層学習（DL）**：多層のニューラルネットワークを用いる機械学習の一分野。特に、画像認識や複雑な非線形関係のモデル化に優れている³。例えば、DuPont社はフィルム製品の表面欠陥検査の自動化にAI画像認識を導入し、検査精度を向上させ、不良品の流出を大幅に削減した³。また、複雑な化学反応の予測や、特定の特性を持つ新材料の効率的な探索にも応用されている¹。
- **自然言語処理（NLP）**：人間の言語をコンピュータが理解・処理するための技術。化学分野では、膨大な数の学術論文や特許といった非構造化テキストデータから、化学物質、反応、物性に関する知見を自動的に抽出・要約するために活用される³。これにより、研究者は情報収集にかかる時間を大幅に削減できる。
- **生成AI**：大規模言語モデル（LLM）や敵対的生成ネットワーク（GAN）に代表される、新しいコンテンツを自ら生成するAI。従来の分析・予測型AIから一歩進み、全く新しい分子構造の提案や、特許クレームの草案作成など、創造的なタスクを実行できる⁵。アクセントの試算によれば、日本の化学業界では労働時間の約3割がLLMによって自動化または大幅に強化される可能性がある⁷。
- **強化学習（RL）**：試行錯誤を通じて、特定の環境下で価値を最大化する行動を学習するAI。化学プラントにおける連続プロセスの動的な最適化など、リアルタイムでの意思決定が求められる場面で活用が期待されている³。

1.2 主要な応用分野：分子から材料、プロセスへ

これらの AI 技術は、化学研究の異なる階層に特化した情報科学分野（インフォマティクス）を通じて応用されている。

- **ケモインフォマティクス (CI)**：主に低分子化合物を対象とし、その構造、物性、反応、生物活性などを情報科学的手法で扱う分野¹⁰。特に創薬分野で中心的な役割を果たしており、AI を用いた候補化合物の高速スクリーニング（バーチャルスクリーニング）、リード化合物の最適化、ADMET（吸収、分布、代謝、排泄、毒性）特性の予測などに活用される¹⁰。創薬プロセスは伝統的にコストが高く、成功率が低い（臨床試験に入った医薬品の約 10%しか承認されない）ため、AI による効率化への期待は極めて大きい¹²。
- **マテリアルズ・インフォマティクス (MI)**：ケモインフォマティクスの考え方を、ポリマー、金属、セラミックスといった材料全般に拡張した分野²。従来の試行錯誤的な材料開発から、目標とする物性から逆算して材料の組成や構造を設計する「逆問題設計 (Inverse Design)」へのパラダイムシフトを可能にする⁸。これにより、開発期間の大幅な短縮と、従来の発想では生まれなかった新材料の発見が期待される。
- **プロセスケミストリー・インフォマティクス**：製造プロセスの最適化に焦点を当てた分野。化学プラントの運転データをリアルタイムで解析し、生産効率の向上、エネルギー消費の削減、予知保全によるダウンタイムの最小化などを実現する³。例えば、BASF 社は AI を活用したエネルギー最適化システムにより、特定のプラントでエネルギー消費を 15%削減し、年間数百万ユーロのコスト削減を達成した³。また、横河電機は化学プラントを 35 日間完全に自動制御することに成功し、人間の介入なしでの効率的な運用を実証している¹。

1.3 AI 導入のビジネスケース：競争上の必須要件

AI の導入は、単なる研究ツールの刷新ではなく、企業の競争力を左右する経営課題となっている。そのビジネスインパクトは、主に以下の 3 点で定量的に示すことができる。

- **R&D サイクルの加速**：AI は開発期間を劇的に短縮する。サムスン社は、従来 5 年かかるとされた全固体電池の材料開発を 1 年で達成した²。旭化成は MI の活用によ

り、複数の製品開発で開発期間を半分以下に短縮している²。製薬業界では、新薬の開発期間が約30%短縮されるとの試算もある¹。

- **抜本的なコスト削減:** 仮想実験 (in silico) により、高価で時間のかかる物理的な実験の回数を大幅に削減できる。産業技術総合研究所 (産総研) は、フレキシブル透明フィルムの開発において、実験回数を25分の1に削減した²。創薬分野においては、AIが2028年までに700億ドル以上のコスト削減をもたらすとの予測もある¹⁸。
- **イノベーションと品質の向上:** AIは、人間の直感や経験則だけでは見つけられないような、全く新しい材料や分子を発見する可能性を拓く²⁰。また、品質管理の高度化にも貢献する。前述のDuPont社の事例や、ENEOSが高性能ポリマーの収率を改善した事例は、AIが製品の品質と生産性の両方を向上させることを示している²。

日本の総合化学メーカーの市場規模は、2030年までに+0.4%増の14.7兆円と予測されており、市場全体が低成長にある中で、AIを活用した効率化と高付加価値製品の開発は、企業の収益性を維持・向上させるための重要な戦略となる²²。旭化成、信越化学工業、住友化学といった国内トップ企業は、いずれもデジタルトランスフォーメーションの一環としてAIやMIへの投資を強化しており、AI活用が競争優位性を確保するための必須要件となりつつあることを示している²²。

これらの動向は、AIが単なる効率化ツールではなく、研究者の能力を増幅させる強力なパートナーであることを示唆している。成功している企業の多くは、AIに全ての判断を委ねるのではなく、AIが生成した膨大な選択肢や予測結果を、経験豊富な研究者が評価・判断する「人間参加型 (Human-in-the-Loop)」のアプローチを採用している²⁴。例えば、アステラス製薬は明確にこのコンセプトに基づいた創薬プラットフォームを構築しており²⁵、横浜ゴムの「HAICoLab」構想も研究者とAIの「協働」を前提としている¹⁶。一方で、純粋な計算科学的アプローチには限界も指摘されている。

GoogleのGNoMEデータベースによる新物質探索は、その規模で注目を集めたが、化学的な専門知識 (ドメイン知識) を欠いた予測には、実験的に合成困難であったり、実用性に乏しいものが含まれるとの批判もある²⁰。

この事実は、AI戦略を立てる上で極めて重要な示唆を与える。最も効果的なAI導入とは、研究者を代替することではなく、彼らの創造性や問題解決能力を最大化するためにAIを「知的なアシスタント」として活用することである²⁶。AIは膨大なデータ空間の探索と非自明な相関関係の発見に長けているが、コスト、安全性、スケールアップといった実用上の制約に関する深い理解は、依然として人間の専門家に委ねられている。したがって、AIへの投資は、単純な人件費削減ではなく、企業にとって最も価値ある資

産である R&D 人材の能力を飛躍的に高めるための戦略的投資と位置づけるべきである。

第 2 部 AI による情報発見と仮説生成の加速

研究開発の第一歩は、既存の知識、すなわち論文や特許を網羅的に調査し、そこから新たな着想を得ることである。AI、特に自然言語処理（NLP）と大規模言語モデル（LLM）の進化は、この情報発見のプロセスを「キーワード検索」から「意味理解に基づく対話」へと変えつつある。さらに、単なる情報検索に留まらず、AI が自ら新しい研究仮説を生成するツールも登場している。

2.1 AI による文献・特許インテリジェンスの高度化

研究者は日々、膨大な量の文献情報に接しており、その中から真に価値ある情報を見つけ出すことは大きな課題である。AI はこの課題に対し、検索精度の向上と情報抽出の自動化という二つの側面から解決策を提供する。

ツール詳細 : CAS SciFinder Discovery Platform

- **概要:** 化学情報の世界的な権威である米国化学会（CAS）の情報部門が提供する、業界標準の情報検索プラットフォーム²⁷。世界のトップ 100 の科学系大学全てで導入され、AstraZeneca のような大手製薬企業も全社的に採用するなど、その信頼性は非常に高い²⁷。
- **AI 統合:** CAS SciFinder の最大の強みは、専門家が 100 年以上にわたり手作業で精査・構造化した高品質なデータベースにある。²⁷"CAS 登録番号 (CAS RN®)" を持つ全ての化学物質を網羅する世界唯一のデータベースを基盤とし、その上に AI 技術を実装している²⁷。具体的には、AI による先行技術文献検索 (Prior Art Analysis)、物質や研究者間の関連性を可視化するナレッジグラフ、化学構造の類似性に基づく特許マップ作成 (Chemscape Analysis) といった機能を提供する

29。この「人間によるキュレーション+AIによる解析」というハイブリッドアプローチが、他の追従を許さない高い検索再現性と信頼性を担保している。

- **活用事例:** 研究者は、ある標的化合物の合成経路を逆合成解析ツールで設計し、その過程で生成される中間体が新規なものかどうかを特許データベースで即座に確認できる。さらに、出発物質の市販品情報（サプライヤー、価格）や、関連物質の規制情報までを同一プラットフォーム上でシームレスに調査可能であり、研究開発のワークフロー全体を劇的に効率化する²⁷。

ツール詳細：AI ネイティブ学術検索エンジン（Elicit, Consensus など）

- **概要:** これらは LLM を基盤としてゼロから設計された新世代の学術文献検索ツールである。研究者の質問に対して、複数の論文から要約を生成し、直接的な回答を提示する能力を持つ³¹。その知識ベースは、主に **Semantic Scholar** のような 2 億件以上の論文を収録するオープンな学術データベースに依存している³¹。
- **機能:** **Elicit** は、文献レビューの自動化、研究テーマに関するブレインストーミング、アップロードした論文の要約・分析といったワークフロー支援に強みを持つ³¹。**Consensus** は、特定の問いに対して科学的コンセンサスが得られているかを、論文中の肯定・否定的な言及を分析して提示する機能に特徴がある³³。
- **ターゲット層:** 主に学術研究者や学生を対象としているが、企業の R&D における初期の探索的調査にも有用である。**Elicit** は月額 10 ドルの有料プラン「**Elicit Plus**」を提供しており、商用利用への展開も進めている³¹。

ツール詳細：特化型 AI 特許プラットフォーム（Patsnap, Patentfield など）

- **概要:** 知的財産（IP）という複雑で専門的な領域に特化して開発されたプラットフォーム。膨大な特許データベースと高度な AI エージェントを組み合わせ、IP 戦略の策定を支援する。
- **Patsnap:** IP および R&D のライフサイクル全体を支援する多様な AI エージェント群を提供する³⁷。例えば、「新規性検索エージェント」による先行技術調査の自動化、「特許ドラフティングエージェント」による明細書草案の生成、「マルクッシュクレーム作成エージェント」による化学特許特有のクレーム作成支援、さらには「材料スカウトエージェント」による特定物性を持つ材料の特許検索など、具体的

なタスクに特化した機能が揃っている³⁸。化学・ライフサイエンス分野に特化したソリューションも提供しており、バイオシーケンス検索や医薬品インテリジェンス分析も可能である³⁸。

- **Patentfield:** 日本発の AI 特許検索・分析プラットフォーム。AI による類似特許検索やデータ可視化機能に加え、GPT や Claude といった生成 AI と連携し、最大 1 万件の特許群の要約を一括で生成する機能を持つ⁴⁰。
- **その他のツール:** MoleculeSearch.ai は、化学構造式 (SMILES 形式) で特許を検索できるユニークなツールである⁴¹。また、PatentAgent は、特許に関する Q&A、特許中の画像からの化学構造抽出、コア構造の特定などを単一のエージェントで実現することを目指す学術的な研究プロジェクトであり、将来の特許分析ツールの方向性を示唆している⁴²。

2.2 自動仮説生成

AI の役割は、既存情報の整理・検索に留まらない。データの中に埋もれた未知の関連性を見出し、全く新しい研究仮説を自ら生成する段階へと進化している。

ツール詳細 : FRONTEO Drug Discovery AI Factory

- **概要:** FRONTEOが独自開発した自然言語処理 AI 「KIBIT」を駆使し、創薬の起点となる新規性の高い仮説を生成することに特化したプラットフォーム⁴³。
- **機能:** 主に PubMed や Springer Nature が提供する数千万報の医学・生物学系論文を解析対象とする⁴³。その最大の特徴は、論文中でまだ直接的に関連が報告されていない遺伝子、疾患、化合物の間の「隠れた関係性」を統計的に予測し、発見する点にある⁴⁴。AI が疾患関連遺伝子ネットワークを構築し、その中で新規性の高い創薬標的候補をリストアップする。このアプローチにより、アブストラクト (論文要旨) で報告されるのを待つことなく、平均で 5 年早く有望な標的分子を発見できる可能性がある⁴³。創薬標的探索だけでなく、既存薬の新たな薬効を見出すドラッグリポジショニングや、遺伝子疾患の治療標的となりうるサプレッサー変異の探索にも応用できる⁴⁵。
- **活用事例:** FRONTEOは、製薬企業 (マルイシ製薬、エーザイ、第一三共など) や大学 (東京科学大学、熊本大学など) と多数の共同研究プロジェクトを推進してい

る⁴⁶。これは、AI が生成した「ドライ（計算科学的）な仮説」を、実際の細胞や動物を用いた「ウェット（実験的）な検証」へと繋げることで、仮説の価値を証明するビジネスモデルである。AI が有望な研究シーズを継続的に供給し、企業はそれを基に効率的に R&D パイプラインを進めることができる。

これらの情報発見ツール群を俯瞰すると、その信頼性が基盤とするデータの性質によって大きく異なることがわかる。これは、企業がツールを選択する上で考慮すべき「信頼性のスペクトラム」を形成している。

スペクトラムの一方の極には、**CAS SciFinder** が存在する。その価値の源泉は、専門家によって長年かけて手作業で検証・構造化された「キュレーション済みデータ」にある²⁷。このため、その情報は「権威的（authoritative）」であり、特許出願や合成計画の最終決定など、高い信頼性が求められる場面での利用に適している。

スペクトラムの中間に位置するのが、**FRONTEO** や **Patsnap** のような AI 特化型プラットフォームである。これらは、網羅的ではあるが構造化されていない大規模データ（論文全文、特許公報）を強力な AI で解析し、人間では見つけられないような「新規の関連性」を発見することに価値がある。しかし、その出力はあくまで「仮説」であり、専門家による検証が不可欠である。

そして、もう一方の極には、**Elicit** のような LLM ネイティブのツールがある。これらは Web 上の学術論文などを知識源としており、探索的な調査には非常に強力だが、情報の正確性には注意が必要である。LLM 特有の「ハルシネーション（もったもらしい嘘の情報を生成する現象）」のリスクや、引用元の解釈間違いの可能性が指摘されている³⁵。

この信頼性のスペクトラムは、先進的な R&D 組織が単一の万能ツールに依存するのではなく、研究開発のフェーズに応じて複数のツールを戦略的に使い分ける「ポートフォリオアプローチ」を取るべきであることを示唆している。すなわち、研究の初期段階では **Elicit** のようなツールで迅速にアイデアを広げ、中期段階では **FRONTEO** のようなプラットフォームで新規性の高い仮説を生成し、そして最終的な検証や権利化の段階では **CAS SciFinder** のような信頼性の高い情報源で事実確認を行う、というワークフローが最も効果的である。戦略的な課題は、各ツールの長所を活かし、短所を補い合うようなインテリジェントな研究プロセスを構築することにある。

第 3 部 In Silico イノベーション：AI による分子・材料設計

AI は情報収集の領域を超え、化学研究の核心である「ものづくり」、すなわち新しい分子や材料の設計そのものを変革している。コンピュータ上でのシミュレーションや予測 (in silico) を通じて、有望な候補を効率的に絞り込み、実験計画を最適化する。このセクションでは、化学合成の計画、そして材料科学における新規物質設計を支援する代表的なプラットフォームを詳述する。

3.1 化学合成の予測と計画

「どうやって作るか」という問いは、化学における根源的な課題である。AI は、ある反応がどのような生成物を与えるかを予測する「順合成予測」と、目的の分子をどのような出発物質からどのような工程で合成できるかを計画する「逆合成解析」の両面で強力なツールとなっている。

ツール詳細 : ChemAIRS® (Chemical.AI)

- **概要:** AI を活用した逆合成解析プラットフォームのリーディングカンパニー。10 年の経験を持つ合成化学者に匹敵する能力を謳う⁵¹。
- **機能:** 中核機能である逆合成解析に加え、順合成予測、合成可能性スコアリング、反応条件の最適化、不純物予測 (90% 以上の精度)、スケールアップを考慮したプロセス化学分析まで、合成化学のワークフローを包括的に支援する⁵¹。複雑な分子の合成経路も 5 分以内に複数提案できる高速性を特徴とする⁵¹。
- **技術:** 6000 万件以上の反応データを学習したデータ駆動型モデルと、官能基の適合性や立体選択性といった化学の専門家ルールを組み合わせたハイブリッドアプローチを採用。これにより、単なる経路提案に留まらない、実験室での実現可能性が高い経路設計を実現している⁵¹。顧客の機密情報を保護するため、オンプレミス (自社サーバー) での導入も可能である⁵²。
- **活用事例:** 製薬大手 Merck 社との共同研究では、複雑な構造を持つ大環状 KRAS 阻害剤の合成において、ChemAIRS が実際に報告された合成経路と酷似したルートを予測した。さらに、論文記載のルートよりも工程数が少ない、より効率的な代替経路も提案し、その実用性を示した⁵¹。

ツール詳細 : AIDDISON® Drug Discovery Platform (Merck/Sigma -Aldrich)

- **概要:** 創薬プロセスに特化した統合プラットフォーム。新規分子の設計 (De Novo 設計) から、仮想的なスクリーニング、合成計画までをシームレスに繋ぐ⁵³。
- **機能:** 生成 AI を用いて標的タンパク質に適合する新規分子構造を設計し、その分子の ADMET 特性 (薬物動態) や結合親和性を予測する。Merck 社が数十年にわたり蓄積した独自の R&D データで学習させた予測モデルや、250 億を超える独自の仮想化合物ライブラリを検索できる点が、他社にはない強みとなっている⁵³。
- **統合性:** 分子設計、物性予測、合成計画といった創薬の各ステップを単一の環境に統合している点が最大の特徴である。これにより、研究者はツールを切り替えることなく、設計から合成までの思考プロセスを中断せずに行うことができ、ワークフローを大幅に効率化する⁵³。

3.2 マテリアルズ・インフォマティクス (MI) プラットフォームによる新規物質設計

MI プラットフォームは、データ駆動型の材料開発を実現するための統合的なエコシステムである。通常、データ管理基盤、予測モデリング機能、実験計画支援機能を一体として提供する。

プラットフォーム比較 : シミュレーションと機械学習の巨人たち

MI プラットフォーム市場は、それぞれ異なる技術的哲学を持つ複数の有力プレイヤーによって形成されている。

- **Matlantis ê (Preferred Networks/ENEOS):**
 - **コア技術:** 汎用原子レベルシミュレータ。深層学習を用いて開発されたニューラルネットワークポテンシャル (NNP) により、従来の第一原理計算 (DFT) に比べて 1 万倍以上の速度で原子レベルのシミュレーションを実行できる¹⁷。その本質は、高品質なシミュレーションデータを大量に生成し、材料の物性や化学反応のメカニズムを解明することにある。

- **活用事例:** ENEOS は、触媒や潤滑油などの新材料開発に Matlantis を活用している。膨大な数の候補材料の組み合わせを高速シミュレーションでスクリーニングすることで、開発を加速させている¹⁷。
- **Citrine Platform (Citrine Informatics):**
 - **コア技術:** 逐次学習 (Sequential Learning) を中核とするプラットフォーム。AI が過去の実験データから学習し、次に実施すべき最も情報価値の高い実験条件を提案することで、目標物性を達成するための実験回数を最小化する⁵⁷。特に、複数の成分を混合する配合 (フォーミュレーション) 設計やプロセス条件の最適化に強みを持つ。
 - **機能:** データを整理・構造化する DataManager、仮想実験と生成 AI による設計を行う VirtualLab、文献検索を支援する Catalyst といったモジュールで構成される⁵⁸。
 - **活用事例:** ある建設工具メーカーは、本プラットフォームを用いて製造プロセスを最適化し、初期実験の設計にかかる時間を 1 週間から 1 日未満に短縮した⁶⁰。別の事例では、わずか 4 週間で 82% の精度を持つ毒性予測モデルを構築した⁶¹。パナソニックは、これを用いて従来比 25% 高い正孔移動度を持つ 4 つの特許出願中有機半導体材料を記録的な速さで発見した⁶²。
- **Uncountable Platform:**
 - **コア技術:** 電子実験ノート (ELN) と研究室情報管理システム (LIMS) を中核に据えた、オールインワンの研究開発データ管理プラットフォーム⁶³。
 - **機能:** その最大の強みは、研究開発の現場で発生するあらゆるデータを構造化し、一元管理することで、組織内のデータサイロを解消する点にある。この整理されたデータ基盤の上で、実験計画法 (DOE)、統計解析、予測モデリングといった AI/ML 機能を活用する⁶³。
 - **活用事例:** SCG Chemicals は Uncountable を導入し、研究開発を 20% 加速させた⁶⁷。Cibimmob Abrasives は製品開発を 25% 以上高速化⁶⁸。自動車部品大手の Cooper Standard は、グローバルな研究開発データを一元化し、製品開発を加速させるために全社展開している⁶³。
- **その他の主要プラットフォーム:**
 - **日立製作所/日立ハイテック:** 分析装置メーカーとしての深いドメイン知識を活かし、「材料開発ソリューション」として総合的なサービスを提供。データ分析コンサルティング、データ管理基盤、MI ツールを組み合わせ、顧客の研究者と伴走しながら課題解決を図るアプローチを特徴とする⁷⁰。
 - **MI-6: miHub** という SaaS 型プラットフォームを提供。ノーコードの直感的なインターフェースとベイズ最適化による実験条件推奨機能の特徴とし、特に日本の素材・化学メーカー (住友ベークライト、クラボウなど) に多くの導入実

績を持つ⁷³。

3.3 オープンソースソフトウェアとデータの重要な役割

これらの商用プラットフォームの多くは、活発なオープンソースのコミュニティによって開発・維持されているソフトウェアや公開データセットを基盤としている。

- **基盤ツールキット：RDKit, Open Babel**
 - **概要:** RDKit は、C++で書かれ、Python から利用できる強力なケモインフォマティクス・機械学習ツールキットである⁷⁵。分子のフィンガープリント生成、部分構造検索、記述子計算といった、化学 AI に不可欠なコア機能を提供する⁷⁷。
 - **ビジネスインパクト:** RDKit は商用利用を許可する **BSD-3-Clause** ライセンスで公開されている⁷⁸。これにより、多くの企業が自社の研究開発ツールや商用ソフトウェアを開発する際に、この高機能で信頼性の高いツールキットを無償で利用でき、開発コストと時間を大幅に削減している。
- **公開データリポジトリ：Materials Project**
 - **概要:** 計算によって得られた膨大な材料物性データを集積したオープンアクセスのデータベース。オープンソースライブラリ **pymatgen** を基盤として開発されている⁷⁹。API を通じて大規模なデータ分析や機械学習モデルの訓練に利用できる⁸¹。
 - **ビジネスインパクト:** 多くのデータは、商用利用も可能なクリエイティブ・コモンズ表示 **4.0 (CC-BY)** ライセンスで提供されている⁸³。これにより、企業は競争前の基礎研究や予測モデルの構築のために、この貴重なデータリソースを活用できる。ただし、**Google DeepMind** の **GNoME** データベースのように、一部のデータセットは非営利目的に限定 (**CC-BY-NC 4.0**) されているため、企業が利用する際には、各データセットのライセンス条件を個別に確認することが極めて重要である⁸³。

これらの MI プラットフォームを深く分析すると、材料開発に対する二つの異なる、しかし補完的な思想的アプローチが浮かび上がる。

一つは**「シミュレーション・ファースト」のアプローチである。この思想を最も純粋に体现するのが **Matlantis**** である⁵⁵。このアプローチの根底には、高精度な大規模原子シミュレーションこそが材料物性を最も正確に理解する道であるという考えがある。

目標は、実験データが乏しい未知の材料領域を探求するために、高品質な計算（in silico）データを大量に生成することである。これは、全く新しい触媒や半導体材料など、基礎的な発見を目指す研究開発に適している。

もう一つは**「データ・ファースト」のアプローチである。これを代表するのが Uncountable や Citrine**である⁵⁸。このアプローチは、企業が長年蓄積してきた「実験データ」こそが最も価値ある資産であると考え、目標は、散在する過去の実験データを構造化・一元化し、そこに機械学習を適用して隠れた法則性を見出し、次の実験を最適化することである。これは、既存の材料系や製品（例：塗料、接着剤、消費者製品）の改良や、配合・プロセス条件の最適化を目指す研究開発に即効性のある価値をもたらす。

この二つのアプローチは、単なる技術的な違いではなく、企業の R&D 戦略そのものを反映する。基礎研究に重点を置く企業は「シミュレーション・ファースト」のプラットフォームから大きな恩恵を受けるだろう。一方、製品の改良や顧客対応の迅速化を重視する企業は、「データ・ファースト」のプラットフォームがより直接的な価値を提供する。長期的には両者を組み合わせたハイブリッドアプローチが理想であるが、初期投資やプラットフォーム選定においては、自社が直面する最も喫緊の課題を解決するアプローチはどちらかを戦略的に見極めることが成功の鍵となる。

表 1：主要な商用 MI・化学 AI プラットフォームの比較分析

プラットフォーム名	提供企業	コア技術/思想	主要なユースケース	ターゲット産業	定量的な成果・事例
Matlantis ^ε	Preferred Networks / ENEOS	シミュレーション・ファースト（超高速原子レベルシミュレータ）	触媒、潤滑油、電池材料などの基礎研究、メカニズム解明	化学、石油、材料	従来の DFT 計算比で 1 万倍以上の高速化 ¹⁷
Citrine Platform	Citrine Informatics	データ・ファースト（逐次学習による実験計画最適化）	配合設計、プロセス最適化、製品改良	化学、素材、半導体、食品	毒性予測モデルを 4 週間で構築（精度 82%） ⁶¹ 。有機半導体開発で移動度 25% 向上 ⁶² 。

<p>Uncountable Platform</p>	<p>Uncountable</p>	<p>データ・ファースト (ELN/LIMS 統合データ基盤)</p>	<p>R&D データの一元管理、ワークフロー効率化、製品開発</p>	<p>化学、素材、自動車、食品、バイオ</p>	<p>SCG Chemicals で R&D を 20% 加速⁶⁷。 Cibimob Abrasives で製品開発を 25% 以上高速化⁶⁸。</p>
<p>日立 材料開発ソリューション</p>	<p>日立製作所 / 日立ハイテク</p>	<p>協働型 (分析装置の知見 + データサイエンス)</p>	<p>材料探索、プロセス改善、品質管理</p>	<p>半導体、電池、素材全般</p>	<p>2017 年以降、数百件の成功事例を構築⁷⁰。製造プロセス改善ソリューションも展開⁸⁴。</p>
<p>miHub®</p>	<p>MI-6 株式会社</p>	<p>データ・ファースト (ベイズ最適化による実験計画)</p>	<p>ノーコードでの実験計画、組成最適化、物性予測</p>	<p>素材、化学、鉄鋼、電機、医薬品</p>	<p>大塚化学で開発期間を半分に短縮⁷³。国内化学メーカーに多数の導入実績⁷⁴。</p>
<p>ChemAIRS®</p>	<p>Chemical.AI</p>	<p>逆合成解析特化 (データ駆動 + 専門家ルール)</p>	<p>新規化合物の合成経路設計、不純物予測、プロセス化学</p>	<p>製薬、化学 (CRO、CDMO 含む)</p>	<p>複雑な分子の合成経路を 5 分以内に生成⁵¹。Merck 社の KRAS 阻害剤の経路予測に成功⁵¹。</p>
<p>AIDDISON®</p>	<p>Merck / Sigma-Aldrich</p>	<p>創薬統合プラットフォーム (De Novo 設計 + 合成計画)</p>	<p>リード化合物探索、ADMET 予測、ヒット化合物最適化</p>	<p>製薬、バイオテクノロジー</p>	<p>Merck 独自の R&D データと 250 億超の仮想化合物ライブラリを活用⁵³。</p>

第4部 ループを閉じる：AIによる物理実験の自動化

AIによるイノベーションは、コンピュータの中だけに留まらない。最終的な目標は、AIが設計した実験をロボットが物理的に実行し、その結果をAIが学習して次の実験を設計するという「クローズドループ」を完成させることである。このパラダイムは、研究開発のあり方を根本から変える可能性を秘めている。

4.1 「セルフドライビング・ラボ」：R&D自動化の究極目標

「セルフドライビング・ラボラトリー」または「自律実験ロボット」とは、AIが実験の計画、実行、分析、そして次の計画立案までを自律的に行うシステムを指す⁸⁵。このシステムの導入は、研究開発に3つの大きな変革をもたらす。第一に、24時間365日の連続稼働による圧倒的なスループットの向上⁸⁶。第二に、人的な操作のばらつきを排除することによる、実験の再現性と信頼性の飛躍的な向上⁸⁷。そして第三に、実験結果からリアルタイムで学習し、即座に次の実験条件を最適化することによる、発見プロセスの劇的な加速である⁸⁸。

このビジョンは、すでに世界中の学術機関や企業で現実のものとなりつつある。英国リバプール大学で開発されたロボット化学者は、人間であれば数ヶ月を要する約700回の光触媒反応実験を、わずか8日間で自律的に完了させた⁸⁸。日本の産業技術総合研究所（AIST）では、ロボットが1ヶ月以上かかるセラミックスの合成実験を1日で実現し、AIと組み合わせることで最適な製造条件の探索を高速化している⁸⁶。

4.2 クラウド・ラボ：サービスとしての実験自動化（LaaS）

自律実験システムを自前で構築するには、多額の設備投資と高度な専門知識が必要となる。この障壁を取り払う新しいビジネスモデルが「クラウド・ラボ」である。これは、遠隔地にある高度に自動化された実験施設に、インターネット経由でアクセスし、実験を依頼・実行できるサービスである³⁰。

サービス詳細 : Emerald Cloud Lab (ECL)

- **概要:** この分野のパイオニアであり、200 種類以上の最先端の分析・合成装置を備えた大規模なライフサイエンス・化学実験施設を、サービスとして提供する³⁰。
- **機能:** ユーザーはウェブブラウザ上の **ECL Command Center** という統合ソフトウェアを通じて、実験を遠隔操作する⁹⁰。液体ハンドリングロボットによるサンプル調製から、**HPLC** や質量分析計、**NMR** による分析、細胞培養、ペプチド合成まで、極めて広範な実験ワークフローをスクリプト化し、ボタン一つで実行できる³⁰。全ての実験手順と生成されたデータは、**Constellation** というナレッジベースに完全なメタデータと共に自動記録され、完璧なトレーサビリティと再現性を保証する³⁰。
- **パートナーシップモデル:** ECL は、カーネギーメロン大学と提携し、世界初の大学内クラウド・ラボを構築している⁸⁵。これは、高価な最先端インフラを学術コミュニティが広く利用できるようにするための新しいモデルであり、今後の普及に向けた試金石となる。

サービス詳細 : Strateos (旧 Transcriptic)

- **概要:** LaaS 分野のもう一つの主要プレイヤー。カリフォルニア州に複数の自動化ラボを構え、遠隔アクセスサービスを提供している⁹²。
- **機能:** Strateos は柔軟なサービスモデルを特徴とする。クライアントは、Strateos が保有する施設を利用するだけでなく (**Control Our Lab**)、Strateos が開発したラボ制御ソフトウェアを導入して、自社内の装置を自動化・一元管理することも可能である (**Control Your Lab**)。さらに、新たに自動化ラボを構築したい企業向けに、設計・建設サービスも提供している (**Build Your Lab**)⁹²。
- **応用分野:** 低分子・抗体医薬品の創薬、ハイスループットスクリーニング、合成生物学など、ライフサイエンス分野に特化した自動化ワークフローを提供している⁹⁴。

クラウド・ラボの登場は、研究開発の経済モデルに構造的な変化をもたらしている。従来、特にバイオテクノロジーや先端材料の分野で新たな研究プロジェクトを立ち上げるには、実験室の建設や高価な装置の購入といった巨額の初期設備投資 (**CAPEX**) が不

可欠であった。しかし、ECL や Strateos のようなクラウド・ラボは、これらの最先端設備を従量課金制やサブスクリプション形式で利用することを可能にする。これにより、研究開発にかかるコストは、固定資産への投資から変動費である事業運営費（OPEX）へと転換される³⁰。

この変化は、化学・ライフサイエンス業界全体に大きな影響を及ぼす。第一に、スタートアップ企業にとっての参入障壁を劇的に下げる。物理的な実験室を一切所有することなく、世界トップクラスの研究を「仮想的」に遂行できるようになるからだ。第二に、大企業にとっては、研究開発の規模を柔軟に拡大・縮小したり、大規模な設備投資のリスクを負うことなく新しい研究領域を試したり、あるいは定型的なハイスループット実験を外部委託して、社内の貴重な研究リソースをより創造的な業務に集中させたりすることが可能になる。これは単なるコスト削減ではなく、研究開発のあり方そのものを、よりアジャイルで効率的なモデルへと変える根本的なパラダイムシフトである。

第 5 部 戦略的実装と将来展望

AI ツールを効果的に導入し、競争優位につなげるためには、技術の理解だけでなく、戦略的な視点からの実装計画が不可欠である。本セクションでは、企業が自社に適したツールを選択するためのフレームワークを提示し、導入における課題、そして化学 R&D の未来像を展望する。

5.1 ツール選定と実装のためのフレームワーク

複雑なツール群の中から最適なものを選択するには、まず自社の状況を客観的に評価する必要がある。以下の 4 つの問いは、そのための出発点となる。

1. **解決すべき課題の種類は何か？** 主な課題は、情報収集・IP 分析（発見）、新規分子・材料の創出（設計）、あるいは既存製品の配合・プロセスの改善（最適化）のいずれにあるか。
2. **データの成熟度はどのレベルか？** 研究開発データは、一元化・構造化されたデータベースに蓄積されているか、それとも個々の研究者の PC 内のスプレッドシートや実験ノートに散在しているか。

3. 自社のコアコンピタンスは何か？ 強みは、第一原理計算などのシミュレーション技術か、それとも長年の経験に裏打ちされた実験的な配合・評価技術か。
4. 内製か、外部委託か（Build vs. Buy）？ 社内にデータサイエンティストやIT 専門家を擁し、オープンソースツールを基盤に自社システムを構築する能力があるか、あるいは実績のある商用プラットフォームを導入する方が現実的か⁹⁵。

これらの自己評価に基づき、第3部で提示した比較分析表（表1）を参照することで、自社のニーズに最も合致する2~3のプラットフォームを候補として絞り込むことができる。これが、具体的なベンダー評価プロセスのための効果的な出発点となる。

5.2 導入の障壁を乗り越える：成功のための3つの柱

AI ツールの導入は、ソフトウェアを購入して終わりではない。その価値を最大限に引き出すには、組織的な変革が不可欠であり、それには3つの重要な柱がある。

- 第1の柱：データ基盤の整備
本レポートで繰り返し指摘してきたように、「Garbage in, garbage out（ゴミを入れればゴミしか出てこない）」はAI活用の大原則である²⁴。AIモデルの性能は、学習データの質と量に完全に依存する。したがって、AI導入の成功は、過去の実験データをデジタル化し、構造化し、一元管理するという地道な努力から始まる。これは後付けの作業ではなく、AI戦略の前提条件である。
- 第2の柱：人材の育成と組織文化
AIツールを使いこなすには、化学や材料科学といったドメイン知識と、データサイエンスの両方に通じた新しいタイプの人材、すなわち「MI研究者」や「コンピューショナルケミスト」が必要となる。旭化成がMI人材を600人規模で育成する計画を掲げているように²、先進企業は既存研究者のリスキリングや、学際的なチームの組成に多大な投資を行っている²³。実験科学者、データサイエンティスト、IT専門家が密に連携し、データを共通言語として対話できる組織文化を醸成することが不可欠である。
- 第3の柱：ワークフローへの統合
AIツールが一部の専門家だけが使う「飛び道具」であってはならない。日常の研究開発ワークフローに深く組み込まれ、全ての研究者が自然に使える状態を目指す必要がある。そのためには、従来の経験と勘に頼った研究スタイルから、データに基づき「仮説→実験→学習→次の仮説」というサイクルを高速で回す文化への転換が求められる。

5.3 化学 R&D の未来像

これらのトレンドが収束した先には、化学研究開発の新たな姿が見えてくる。

- **完全に統合された R&D ループ:** 将来の化学 R&D は、本レポートで概説した各領域がシームレスに連携した、巨大なクローズドループとして機能するだろう。すなわち、AI が論文データから新規仮説を生成し（第 2 部）、その仮説に基づき AI が最適な分子や材料を設計し（第 3 部）、その設計図を基にクラウド・ラボのロボットが自動で実験を行い（第 4 部）、得られた実験結果が即座に AI モデルにフィードバックされて次の仮説・設計を改良する。このループを最も効率的に回せる企業が、業界の覇者となる。
- **LLM によるユニバーサル・インターフェース:** 大規模言語モデル (LLM) は、あらゆる R&D ツールの「共通言語」となるだろう。研究者は、複雑なシミュレーションエンジンやデータベース、実験ロボットを、専門的なコマンドではなく自然言語による対話で操作できるようになる⁹。これにより、高度なツールの利用障壁が劇的に下がり、イノベーションの民主化がさらに進む。
- **協調的なデータエコシステム:** より高性能な AI モデルを開発するためには、より多くのデータが必要となる。この需要は、企業や研究機関の壁を越えた、安全なデータ共有エコシステムの構築を促進するだろう。EAGLYS社が提供する秘密計算技術のように、個々のデータを秘匿したまま、複数の組織がデータを持ち寄って共同で AI モデルを学習させる技術が重要となる⁷³。これにより、業界全体で共通の課題（例：環境規制対応、新素材の基礎物性予測）に取り組む、新たな協業モデルが生まれる可能性がある。

結論

化学、製薬、材料科学の各産業において、AI の導入はもはや選択肢ではなく、競争上の必須要件となった。この変革は、単なる技術の導入に留まらず、研究開発の文化、戦略、そしてインフラそのものの根本的な転換を要求するものである。成功の鍵は、AI に全てを委ねるのではなく、データに基づいた戦略的なアプローチを取り、人間の専門家が持つ深い知見と創造性を AI という強力なツールで増幅させることにある。

本レポートで示したように、情報発見から仮説生成、分子・材料設計、そして実験の自動化に至るまで、R&D のあらゆる段階で AI は価値を提供し始めている。企業は、自社の課題と強みを冷静に分析し、信頼性のスペクトラムや技術的アプローチの違いを理解した上で、最適なツールポートフォリオを構築する必要がある。そして何よりも、その基盤となるデータ戦略と人材育成に継続的に投資し、データ駆動型の研究開発サイクルを組織文化として根付かせることが求められる。

この新しいパラダイムを先駆けて受け入れ、実践する企業こそが、未来社会が求める革新的な化学物質や高機能材料を、かつてないスピードと効率性で生み出し、持続的な成長を遂げるリーダーとなるであろう。

引用文献

1. AI 活用の分析化学 | 最新トレンドと実践法 - Hakky Handbook, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://book.st-hakky.com/industry/ai-evolving-analytical-chemistry>
2. マテリアルズ・インフォマティクスとは？AI 活用方法、国内成功事例や導入事例、材料開発におけるメリット・課題、解決策を解説！, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://ai-market.jp/industry/materials-informatics/>
3. AI×化学工業で業務効率化！活用事例や未来の可能性を徹底解説 - AI Front Trend, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://ai-front-trend.jp/chemical-industry-ai/>
4. AI を活用し化学反応の理解を自動化する仕組みを開発 - 大阪大学 ResOU, 6 月 30, 2025 にアクセス、https://resou.osaka-u.ac.jp/ja/research/2025/20250314_2
5. 【日本】三井化学、ケモインフォマティクスで CrowdChem と協働。R&D 迅速化 | Sustainable Japan, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://sustainablejapan.jp/2023/06/02/mitsui-chemicals-generative-ai/91657>
6. ChatGPT を活用した AI エージェントによる、化学文献のマイニングの進化 | AI-SCHOLAR, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://ai-scholar.tech/articles/large-language-models/ai-agent-chemical-mining>
7. 化学業界における生成 AI の労働力への影響 | アクセンチュア - Accenture, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://www.accenture.com/jp-ja/blogs/chemicals/genai-workforce>
8. AI-driven materials design: a mini-review - arXiv, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://arxiv.org/html/2502.02905v1>
9. ChemChat : 大規模言語モデルと化学の未来、外部ツールとチャットボットとの融合による可能性, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://ai-scholar.tech/articles/large-language-models/chemchat>
10. ケモインフォマティクス市場 - 企業、規模、シェア、分析 - Mordor Intelligence, 6 月 30, 2025 にアクセス、<https://www.mordorintelligence.com/ja/industry-reports/chemoinformatics-market>
11. 『事例でわかる マテリアルズインフォマティクス』出版記念ウェビナー～AI 創薬のためのケモインフォマティクス最前線～ (Zoom オンライン開催・参加無

- 料) | 特別会員開催イベント | LINK-J, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://www.link-j.org/member_event/post-5836.html
12. AI-Driven Drug Discovery: A Comprehensive Review | ACS Omega, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.5c00549>
 13. Revolutionizing Drug Discovery: A Comprehensive Review of AI Applications - MDPI, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.mdpi.com/2813-2998/3/1/9>
 14. マテリアルズインフォマティクスによる材料探索と 6 つの活用事例, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.atx-research.co.jp/contents/2024/07/01/materials-informatics>
 15. マテリアルズ・インフォマティクスのプラットフォーム「D2Materiè」を開発 | PROTERIAL, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.proterial.com/press/2023/n1120.html>
 16. マテリアルズインフォマティクス (MI) がもたらした材料開発の成功例, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.mi-see.com/success-stories/>
 17. マテリアルズ・インフォマティクス (MI) とは? 材料開発の成功事例や課題を解説, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://www.wsew.jp/hub/ja-jp/blog/article_35.html
 18. Merck Launches First Ever AI Solution to Integrate Drug Discovery and Synthesis, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.merckgroup.com/en/news/aiddison-drug-discovery-software-05-12-2023.html>
 19. Merck Launches First Ever AI Solution to Integrate Drug Discovery and Synthesis, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.prnewswire.com/in/news-releases/merck-launches-first-ever-ai-solution-to-integrate-drug-discovery-and-synthesis-302003351.html>
 20. Artificial Intelligence Driving Materials Discovery? Perspective on the Article: Scaling Deep Learning for Materials Discovery | Chemistry of Materials - ACS Publications, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.chemmater.4c00643>
 21. How AI can help in materials innovation – from discovery to design, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.weforum.org/stories/2025/06/ai-materials-innovation-discovery-to-design/>
 22. AI が予測する総合化学メーカー 業界 | 2030 年市場規模推移と主要企業ランキング, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://service.xenobrain.jp/forecastresults/market-size/chemistry>
 23. マテリアルズインフォマティクス (MI) とは? 導入背景と企業の取り組み事例 - AIsmiley, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://aismiley.co.jp/ai_news/mi/
 24. AI for materials discovery | ACS - American Chemical Society, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.acs.org/content/dam/acsorg/membership/acs/benefits/discovery-reports/aimaterials.pdf>
 25. ドラッグディスカバリープラットフォーム | アステラス製薬 - Astellas Pharma Inc., 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.astellas.com/jp/innovation/drug->

[discovery-platform-research](#)

26. CAS SciFinder Discovery Platform - CAS.org, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.cas.org/solutions/cas-scifinder-discovery-platform>
27. 【CAS SciFinder】 1名から使える研究者・技術者向け情報検索ツール, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://www.jaici.or.jp/cas-scifinder-discovery-platform/campaign_cv1/
28. CAS と AstraZeneca が SciFinder の 5 年契約を締結 - PR TIMES, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000021.000004886.html>
29. CAS SciFinder n の特許解析機能 - J-Stage, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://www.jstage.jst.go.jp/article/jkg/73/6/73_230/article/-char/ja/
30. Emerald Cloud Lab: Remote Controlled Life Sciences Lab, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.emeraldcloudlab.com/>
31. Elicit とは?無料で使える論文検索 AI ツールの使い方を解説! - Jitera, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://jitera.com/ja/insights/39379>
32. 【トレンド】 解説! AI を用いた論文検索ツールの現状と注意点 - デジぼち, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://guide.m3dc.co.jp/trend_ai-search-engine-for-thesis
33. AI を活用した論文検索のメリットは?人気ツール 5 選と活用法を徹底解説! - AI Market, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://ai-market.jp/technology/llm-paper-search/>
34. Emerging AI Tools for Literature Review: Comparison of GenAI Tools - HKUST, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://libguides.hkust.edu.hk/AI-tools-literature-review/compare-ai-tools>
35. Trust in AI: Evaluating Scite, Elicit, Consensus, and Scopus AI for Generating Literature Reviews - HKUST Library, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://library.hkust.edu.hk/sc/trust-ai-lit-rev/>
36. 7 Best AI Tools for Research in 2024 | by Simon Sheng | Medium, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://medium.com/@shengsimon4/7-best-ai-tools-for-research-in-2024-dc000f8eafaa>
37. About - Patsnap, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.patsnap.com/about-us/>
38. Patsnap | AI-powered IP and R&D Intelligence, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.patsnap.com/>
39. Login - Patsnap, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://home.patsnap.com/>
40. Patentfield | AI 特許検索・特許分析・特許調査データベース, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://patentfield.com/>
41. How MoleculeSearch.ai Uses Patentsview Data to Fuel Innovation in Drug Discovery And Chemical Research, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://patentsview.org/data-in-action/how-moleculesearchai-uses-patentsview-data-fuel-innovation-drug-discovery-and>
42. PatentAgent: Intelligent Agent for Automated Pharmaceutical Patent Analysis - arXiv, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://arxiv.org/html/2410.21312v1>

43. AI 創薬支援プラットフォーム「Drug Discovery AI Factory」 - ライフ ..., 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://lifescience.fronteo.com/products/drug-discovery-ai-factory/>
44. Publication of White Paper on innovative drug discovery approach using Springer Nature's literature data and FRONTEO's specialized AI engine KIBIT | The Shared Bulletin Board | LINK-J, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.link-j.org/en/bulletinboard/article-45308.html>
45. 新薬開発を革新する研究と AI 活用事例 – 新規性と成功確度の高い候補を創出できる創薬支援サービス - ライフサイエンス AI, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://lifescience.fronteo.com/ddaif/>
46. 医薬品産業を日本の基幹産業へ「FRONTEO 共創型創薬エコシステム」を始動 - PR TIMES, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000625.000006776.html>
47. FRONTEO and Tokyo University of Science begin joint research to identify new drug discovery targets using the "Drug Discovery AI Factory", 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.fronteo.com/en/pr/20250513>
48. FRONTEO and Maruishi Pharmaceutical launch co-creation project for biomarker discovery using Drug Discovery AI Factory | The Shared Bulletin Board | LINK-J, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.link-j.org/en/bulletinboard/article-45218.html>
49. FRONTEO and Axcelead DDP Sign Master Collaboration Agreement for AI Drug Discovery Support Partnership, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://axcelead-us.com/news/fronteo-and-axcelead-ddp-sign-master-collaboration-agreement-for-ai-drug-discovery-support-partnership/>
50. The Role of AI in Drug Discovery: Challenges, Opportunities, and Strategies - PMC, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10302890/>
51. AI を搭載した逆合成解析ソフト『ChemAIRS』のご紹介 無料試用版 ..., 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://accelerate-bio.co.jp/field/detail.php?id=3>
52. ChemAIRS®- AI-Powered Retrosynthesis & Synthetic Pathway Discovery | Chemical.AI, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.chemical.ai/chemairs>
53. AIDDISON®AI 創薬 - Sigma-Aldrich, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.sigmaaldrich.com/JP/ja/services/software-and-digital-platforms/aiddison-ai-powered-drug-discovery>
54. 【2024 年 1 月時点】社内・外向け MI 基盤/アプリを開発している化学メーカー一覧 - note, 6 月 30, 2025 にアクセス、 https://note.com/sankaku_seisaku/n/n59ee757e8e4a
55. Matlantis は、深層学習を活用した原子シミュレーションによって、6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://matlantis.com/ja/>
56. Materials Informatics - 株式会社 Preferred Networks, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.preferred.jp/ja/projects/materials-informatics/>
57. Case Study Semiconductors | Citrine Informatics, 6 月 30, 2025 にアクセス、

- <https://citrine.io/wp-content/uploads/2024/07/Case-Study-Semiconductors.pdf>
58. Citrine Informatics: Chemical & Materials Development Platform, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://citrine.io/>
 59. The AI Platform for Materials & Chemicals - Citrine Informatics, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://citrine.io/platform/>
 60. Case Study (Short) - Discrete - Process Optimization - Citrine Informatics, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://citrine.io/wp-content/uploads/2024/07/Case-Study-Process-Optimization-durable-goods.pdf>
 61. Screen Out Toxic Formulations Using the Citrine AI SaaS Platform, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://citrine.io/screen-out-toxic-formulations/>
 62. Technical Case Study - Machine Learning for Materials Development - Citrine Informatics, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://citrine.io/technical-case-study-machine-learning-accelerates-materials-development-for-panasonic/>
 63. Uncountable: Home, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/>
 64. Platform | Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/cloud-platform>
 65. Designing a Materials Informatics Strategy - Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/designing-a-materials-informatics-strategy>
 66. Integrated Visualizations & Reporting for Enterprise R&D - Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/integrated-visualizations-reporting>
 67. Case Studies | Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/case-studies>
 68. Case Study Tagged Resources - Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.uncountable.com/tags/case-studies>
 69. Case Studies | Uncountable, 6 月 30, 2025 にアクセス、 https://www.uncountable.com/case-studies?4a3ac230_page=3
 70. 化学・素材領域に強い日立ハイテクのマテリアルズインフォマティクス (MI) , 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.mi-seek.com/company-list/hitachi-hightech.html>
 71. 日立ハイテクのデータサイエンティストが語る、材料開発とデータサイエンスの世界「マテリアルズインフォマティクス (MI) 」とは - TECH PLAY, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://techplay.jp/column/1671>
 72. 民間企業 R&D 部門の DX 推進に資するデータサイエンティスト - 職種詳細 | 株式会社日立製作所, 6 月 30, 2025 にアクセス、 https://hitachi.jposting.net/u/job.phtml?job_code=2165
 73. マテリアルズ・インフォマティクス (MI) のプラットフォーム開発企業一覧, 6 月 30, 2025 にアクセス、 <https://www.mi-seek.com/company-list/>
 74. MI プラットフォーム「miHub®」、累計導入数が 100 社を突破。素材・化学メーカー以外への導入も加速 | MI-6 株式会社のプレスリリース - PR TIMES, 6 月 30, 2025 にアクセス、

- <https://prtimes.jp/main/html/rd/p/000000011.000034072.html>
75. Open-Source Cheminformatics Software - RDKit - dkNET, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://dknet.org/data/record/nlx_144509-1/RRID:SCR_014274/resolver/pdf&i=rrid:scr_014274
 76. The official sources for the RDKit library - GitHub, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://github.com/rdkit/rdkit>
 77. A Curated List of Cheminformatics Software and Libraries - Neovarsity, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://neovarsity.org/blogs/curated-list-cheminformatics-software-libraries>
 78. rdkit/license.txt at master - GitHub, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://github.com/rdkit/rdkit/blob/master/license.txt>
 79. Open Science: Revolutionizing Materials Informatics - Number Analytics, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.numberanalytics.com/blog/open-science-revolutionizing-materials-informatics>
 80. Open Source Software - Materials Project, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://next-gen.materialsproject.org/about/open-source-software>
 81. Materials Project API - Swagger UI, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://api.materialsproject.org/docs>
 82. API - Materials Project, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://next-gen.materialsproject.org/api>
 83. Terms of Use - Materials Project, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://next-gen.materialsproject.org/about/terms>
 84. 最適な製造プロセス探索を支援する「製造プロセス改善ソリューション」を開発し、インフォマティクス事業を強化 - 日立製作所, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.hitachi.co.jp/New/cnews/month/2025/01/0123.html>
 85. AI for Science - AI at CMU - Carnegie Mellon University, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://ai.cmu.edu/research-and-policy-impact/ai-for-science>
 86. ロボット実験と AI によりセラミックス化学焼結プロセスの条件探索を高速化 - 産総研, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2023/pr20231018/pr20231018.html
 87. 低コスト自作型材料合成ロボット『FLUID』が化学実験の自動化を加速 - ShareLab NEWS, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://news.sharelab.jp/cases/other-fields/hokudai-ac-fluid-250430/>
 88. 自律的に化学実験するロボット科学者、研究の自動化に成功 8 日間で約 700 回の実験、人間なら数カ月 | Chem-Station (ケムステ), 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.chem-station.com/chemistnews/2020/08/roboticchemist.html>
 89. How Cloud Labs and Remote Research Shape Science | The Scientist, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.the-scientist.com/how-cloud-labs-and-remote-research-shape-science-71734>
 90. Scientific Instrumentation - Emerald Cloud Lab, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://www.emeraldcloudlab.com/instrumentation/>
 91. Carnegie Mellon University and Emerald Cloud Lab to Build World's First

- University Cloud Lab | Make Possible, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://makepossible.cmu.edu/cmu-cloud-lab/>
92. WHO WE ARE OUR PLATFORM AND PRODUCTS - Strateos, 6 月 30, 2025 にアクセス、
https://go.strateos.com/hubfs/Website%20URLs/Media%20Kit/Strateos_CompanyFactSheet_Oct2021%20V2.pdf
93. Strateos Software, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://go.strateos.com/strateos-software>
94. Tissue Technology Product Sheet - Strateos, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://go.strateos.com/tissue-technology-product-sheet>
95. Materials Informatics Platform – Build Versus Buy, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://citrine.io/build-versus-buy/>
96. 化学分野における LLM の革命！外部ツールを活用した統合エンジン「ChemCrow」 | AI-SCHOLAR, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://ai-scholar.tech/articles/large-language-models/chemcrow>
97. マテリアルズインフォマティクス開発の会社 7 社 注目ランキング【2025 年】 - Metoree, 6 月 30, 2025 にアクセス、
<https://metoree.com/categories/8864/>