

化学研究開発を加速するAIツールの詳細調査

企業の研究開発（R&D）において、化学分野の知見や実験プロセスを効率化・高度化するAIツールが注目されています。本レポートでは、**化学研究に特化したAIツール**と、**化学分野でも応用可能な汎用AI論文検索ツール**の両カテゴリについて、以下の観点で整理します。各ツールの名称・提供企業、主な機能、対象分野、特徴（AI技術の活用方法やUI、データ連携、特許情報対応など）、企業での導入・活用事例、そして利用料金形態（有料・無料や価格帯）について詳述します。また、最後に主要ツールの比較表を示します。

化学研究に特化したAIツール

まず、化学分野の研究開発を直接支援する専門的なAIツールについて紹介します。文献・物質情報検索プラットフォームから、化学反応予測・合成経路設計、材料設計支援まで、様々な用途に特化したツールがあります。

CAS SciFinder[®]（米・ACS CAS）

提供企業・概要: CAS SciFinder[®]（サイファインダーノン）は米国化学会（ACS）傘下のChemical Abstracts Service（CAS）が提供する、化学情報検索プラットフォームの最新世代版です¹²。従来のSciFinderを進化させたもので、世界最大級の化学データベースにAI技術を組み合わせ、研究者の文献調査や物質探索を支援します。

主な機能: 学術論文や特許を含む包括的な**文献検索**、化合物の**物質検索**（CAS登録番号や化学構造による探索）、化学反応の**反応検索**、および**レトロシンセシス（逆合成）計画**の提案機能を備えています³⁴。例えば、キーワードや構造式から関連する論文・特許を検索し、物質や反応データを閲覧できます。さらに、AIを活用した**合成経路の自動提案機能**では、目標分子を入力すると、文献データに基づく可能な合成ルートを複数提示します。

対象分野: 有機化学、医薬・創薬化学、材料化学、無機・高分子など**化学全般**を網羅します。CASの巨大なデータコレクションには、1800年代から現在までの学術誌5万誌以上の文献情報、1億8千万超の物質データ（CAS Registry）や1億3,700万件超の化学反応が含まれ⁵⁶、有機合成から材料、ライフサイエンスまで幅広い領域の研究に対応します。

特徴・AI技術: 最大の強みは、CASが100年以上蓄積した**世界最大級の化学データ**を背景に、**AI駆動の高度な関連性エンジン**やレトロシンセシス機能を提供する点です³⁴。2010年代後半から機械学習・ルールベース手法を組み合わせた合成経路提案機能が導入され、**約26万件の一段階反応から抽出した13万5千以上の合成ルール**を搭載しています⁴。ユーザーは**コスト閾値**など現実的な条件も設定でき、原料コストを考慮した経路提案も可能です⁷⁴。また、特許情報にも強みがあり、**特許ファミリー統合表示**や全文リンクなど知財調査にも便利な機能があります⁸。UIはウェブベースで、構造式エディタによる物質・反応検索や結果のフィルタリング、アラート設定、プロジェクト管理など**研究ワークフローに配慮したデザイン**です。

導入・活用事例: SciFinderは古くから製薬・化学企業で標準的に利用されてきました。最新版SciFinder[®]も大企業での全社導入が進んでおり、例えば住友ファーマでは社内の研究者向けに5年間のSciFinder[®]契約を結び、**情報入手の高速化によるR&D全体のスピード向上**を期待しています²。同社では従来からパイプライン構築や製品開発にSciFinderを活用しており、SciFinder[®]による**追加データやワークフロー機能の強化**が研究効率を「指数関数的に」高めると評価されています⁹。他にも、農薬大手シンジェンタなど多数のグローバル企業が研究効率化のためSciFinder[®]を採用しています¹⁰。

価格: 企業向けの有料ライセンスです。通常は年間契約のサブスクリプション（ユーザ数や機能範囲に応じた料金体系）となっており、研究機関・企業ごとにCASと契約を結びます。価格帯は公表されていませんが、高度なデータベース製品のため**安価ではない**と推測されます（数百万～数千万円規模の可能性）。なお、大学など学術機関向けにもコンソーシアム契約で提供されています。

Reaxys（蘭・エルゼビア）

提供企業・概要: Reaxys（リークシス）はオランダの学術出版社エルゼビア（Elsevier）が提供する化学情報データベースです。元々は有機化学の権威あるデータ集「Beilstein」や無機データ「Gmelin」を起源とし、現在はそれらを統合した包括的プラットフォームとなっています。**高品質な反応・物質データ**と、近年追加された**AIによる合成経路提案機能**を特色とします¹¹。

主な機能: **文献・特許検索**（キーワードや構造・反応式による検索）、化合物の**物性データ検索**、**化学反応データベース検索**、および**Predictive Retrosynthesis (AI逆合成プランニング)**が主要機能です。文献検索では化学分野の学術誌や特許公報から抽出・整理された反応や化合物情報にアクセスでき、反応条件や収率など実験データも参照できます。Reaxys独自の「**Reaxys Medicinal Chemistry**」モジュールでは創薬向けの薬理データも提供します。近年搭載されたレトロシンセシス機能では、**世界最大の反応データベースとAIを組み合わせ**て**合成経路を自動生成**します¹¹¹²。

対象分野: 有機化学全般が中心ですが、**医薬化学、天然物化学、材料化学**など幅広く対応します。特に有機合成や創薬研究での利用が多く、反応データは**文献だけでなく特許**も含む膨大なものです。エルゼビアによれば「世界最大の反応データベース」にAIを適用しているとのことで¹²、医薬品合成から特殊化学品まで幅広い分野の分子をカバーしています。

特徴・AI技術: Reaxysの強みは、**高品質なキュレーション済み反応データ**と最新AIの組合せです。ElsevierはAI企業IktoおよびPending.AIと提携し、Reaxysの膨大な反応データを用いた**ディープラーニングモデル**を開発しました¹³。ユーザーはReaxys画面上で目標分子の構造を入力し、**数分で複数の合成経路案**を取得できます。その各ステップには文献実例が提示され、実験条件や出典も参照可能です¹⁴。また**立体選択性**（立体化学）や保護基考慮など、高度な**選択性パラメータ**も設定でき、ドラッグライクな分子のレトロシンセシスを支援します¹⁵。**コスト管理機能**もあり、出発物質の費用を制限して経路をデザインすることも可能です¹⁶。さらに、エンドポイントとして**市販入手可能な原料**で終わる経路のみ提案する設定もでき、現実的な経路検討を助けます¹⁶。UIはSciFinder[®]同様にウェブインターフェースで、検索結果のフィルタやエクスポート、電子実験ノート(ELN)連携など研究現場での使い勝手に配慮しています¹⁷。APIも提供されており、プログラムから大量のレトロシンセシス検索を行い社内システムに組み込むことも可能です¹⁸。

導入・活用事例: 製薬・化学業界でSciFinderと並ぶ代表的ツールとして広く使われています。例えばスイスの化学受託メーカーLonza社では、ReaxysのPredictive Retrosynthesisで複数の製造ルートと比較検討し、従来より**短く効率的な合成経路**を見出したと報告されています¹⁹。Lonza社の事例では、AI提案経路により製造コストやステップ数を削減できたとされます。また2023年にはCAS（ACS）との戦略的協業を発表し、CASのSciFinderコンテンツと連携した「**M1 RetroScore**」機能を共同開発するなど²⁰、業界横断でAI合成計画を推進する動きもあります。こうした事例から、Reaxysは**製薬プロセス開発や化学品製造プロジェクトで実際にAI合成計画ツールとして活用**され始めていることが伺えます。

価格: こちらも**企業・機関向けのサブスクリプションライセンス制**です。価格は非公開ですが、SciFinderと同程度かやや競合を意識した設定と考えられます。大手企業では**全社包括契約**を結ぶケースもあり、**ユーザ数無制限ライセンス**等も提供されています。一般研究者向けの**無償利用枠**は基本的にありません（一部学術機関でのトライアル提供は存在）。

IBM RXN for Chemistry (米・IBM Research)

提供企業・概要: IBM RXN for Chemistry (通称RXN) は、IBMリサーチが開発したクラウドベースの化学反応AIプラットフォームです。2018年に初版が公開され、ニューラルネットワークによる**反応予測**と**逆合成解析**(レトロシンセシス)を特徴としています²¹。ウェブブラウザから利用でき、近年はロボット合成システム「RoboRXN」との連携も発表されています。

主な機能: 化学反応の**生成物予測**(与えた出発物質から起こりうる生成物を予測)と、**ターゲット分子の合成経路自動提案**(逆合成)という二本柱です²¹。ユーザーは描画エディタやSMILES文字列で分子を入力し、ワンクリックで**可能性の高い反応生成物**や**複数段階の合成ルート**を取得できます。特にレトロシンセシスでは、Transformerベースの深層学習モデルに数百万件の反応データを学習させたAIが、目標分子を段階的に**簡単な前駆体へ分解**する経路を提案します²¹。加えて、API経由で自身のプログラムからRXNエンジン呼び出すことも可能で、内部システムと統合した利用(ハイエンド機能はエンタープライズ向け提供)も想定されています²²。

対象分野: **有機合成全般**が主な対象です。製薬の合成経路検討、農薬やファインケミカル合成、あるいは化学教育用途(有機反応の学習支援)まで幅広く活用されています²³。深層学習モデルの訓練データは主に医薬化学分野の文献反応ですが、一般有機化合物であれば概ね対応できます。材料化学向けにもIBMは応用を模索しており、材料設計用AIとの連携事例(後述のMolGXとの組合せなど)もあります²⁴。

特徴・AI技術: **Transformer型のディープラーニング**を核に据えたAI化学モデルが特徴です。IBM RXNは、機械翻訳で成果を上げたTransformerモデルを「**分子変換(反応)**」に応用した先駆例として注目されました。大量の既知反応を学習したモデルは、テキストとしての分子表記を入力すると**高い精度で生成物や合成経路を予測**します。また**クラウド上で動作**し、ユーザーはインストール不要で最新モデルを利用できます。近年IBMは、RXNを発展させた「**RoboRXN**」を発表しました。RoboRXNはクラウドAIによる経路設計とロボット実験装置を組み合わせ、**AIが提案した合成ルートを自動実行**するビジョンを示しています²⁵。すでにプロトタイプクラウドラボが稼働しつつあり、将来的に材料開発のスピード飛躍が期待されています²⁶。さらに2022年には、ユーザー独自の反応データでモデルを再訓練する**カスタムAI機能**や、**グリーンケミストリー対応**(酵素など環境調和型試剤の提案)機能も追加されています²⁷²⁸。UIは直感的で、**ドラッグ&ドロップで分子構造を描けるエディタ**、結果反応の矢印表記と信頼度スコア表示など、専門家でなくとも使いやすい設計です。

導入・活用事例: IBM RXNは無料公開もされていたことから**全世界で29,000人以上の化学者ユーザー**を獲得し、累計500万件以上の反応予測を実行しています²⁹。企業での利用も進みつつあり、例として農業科学大手シンジェンタとの協業では、新農薬の合成計画にRXNを活用しています³⁰。またスタートアップ企業Arctoris(創薬自動化)や実験ロボットメーカーChemspeedとも連携し、RXNの経路提案→ロボット実験までの“**自動合成ループ**”構築を目指す試みがなされています³⁰。学術面でも、有機合成教育で学生がRXNを使って合成戦略を学ぶ事例や、モデル性能検証の研究報告もあります³¹。2021年にはスイス化学会のSandmeyer賞をRXN開発チームが受賞し³²、化学合成のデジタル化に大きく貢献する技術として評価されています。

価格: **基本機能は無料提供**されています。IBM RXNはWebサービスとして登録すれば誰でも反応予測・経路探索を一定回数まで利用可能であり²²、これは研究者にとって敷居を下げる要因となっています。一方で、APIアクセスや高度機能、大量実行やデータ蓄積を必要とする**企業向けエンタープライズ版**も別途用意されており、こちらは**要問い合わせ(カスタム契約)**です²²。IBMは大手企業や組織と契約し、専用環境での利用やサポートを提供している模様です。したがって小規模な利用であれば無料、大規模プロジェクトでは有料と使い分けできます。

SYNTHIA® (シンシア) Retrosynthesis Software (独・Merck KGaA [メルク])

提供企業・概要: SYNTHIA (シンシア) は、ドイツのMerck KGaA (北米ではMilliporeSigmaとして展開) が提供する**合成経路自動設計ソフトウェア**です。元々ポーランドの化学者グジボフスキ教授のチームが開発した「Chematica」というシステムをMerckが買収し、実用化したものです。**化学専門家の知識 (ルール) とAI探索アルゴリズムを融合し、極めて創造的かつ実用的な逆合成プランニングを実現します** ³³。

主な機能: ターゲット分子を入力すると、**考え得る合成経路を多数自動生成**し、所定の基準で最適な経路を提示します ³⁴ ³⁵。ユーザーは**解析タイプ** (自動探索、ステップバイステップ解析、類似分子参照など) を選び、**探索パラメータ**を細かく設定可能です ³⁶ ³⁷。例えば「この官能基は保持」「特定の反応タイプは禁止」「使用する出発原料を指定」「コストは一定以下」など**カスタマイズ可能な制約条件**を付けて経路探索できます ³⁷。生成された経路は最大50案まで表示され、**段数、収率、コスト、使用試薬の危険度**などでフィルタ・ソートして評価できます ³⁸。各反応ステップには**典型的な条件や副生成物情報、参考文献**も示され、実行性の判断に役立ちます ³⁹。さらにSYNTHIAはMerck (Sigma-Aldrich)の電子商店と連携し、**900万種以上の市販出発原料の価格・在庫**をリアルタイムで参照できます ⁴⁰。選んだ経路の出発物質は**ワンクリックで購買リストに追加**できるなど、研究から調達までの流れを効率化します ⁴⁰ ⁴¹。クラウドベースのためインストール不要で、ブラウザから高度な計算を利用できる点も利点です。

対象分野: 主に**有機合成化学全般**です。医薬品の合成経路デザイン、農薬や機能性材料のルート探索、また化学合成教育にも応用可能です。特に創薬分野では、複雑な医薬候補化合物の合成ルートを人が考案するには膨大な時間がかかるため、SYNTHIAによる**膨大な経路スクリーニングの自動化**が重宝されています ³⁴。未知の分子だけでなく文献既知分子も扱えるため、既存薬の新規製造法検討や特許回避合成の計画などにも利用できます。

特徴・AI技術: Synthia最大の特徴は**専門家が手作業で記述した反応ルールとAI探索の融合**です ⁴²。数十年にわたり蓄積された**化学知識ベース (反応ルール集)**を内蔵し、それらをAIが組み合わせて膨大な経路を生成・評価します。探索アルゴリズムには**組合せ最適化**やHeuristic、場合によってはMonte Carlo Tree Searchのような手法が使われ、計算効率と網羅性を両立しています。またユーザーが**反応テンプレートのオンオフ**を制御でき、社内ノウハウや禁止薬品リストなどを反映できるのも実務向けです ⁴² ³⁷。出発物質データベースとして前述のSigma-Aldrichのカatalogだけでなく、**自社の在庫リストをアップロード**して探索に組み込む機能もあります ⁴³。これにより社内にある中間体を使った経路を優先検討する、といった柔軟なプランニングが可能です (このカスタム在庫機能は特許出願中とのこと ⁴⁴)。さらに**経路の共有・比較機能**や、将来的な**自動合成装置との連携** (Merckは自動合成ロボット企業と提携中) も視野に入れていきます ⁴⁵。

導入・活用事例: 大手製薬企業を中心に導入が進んでいます。GlaxoSmithKline (GSK) 社では化合物の製法開発でSynthiaを試用し、「**ソフトが提示したユニークな経路案が研究員のアイデアを補完し、新たな発想をもたらした**」と評価しています ⁴⁶。実際、COVID-19治療薬の供給網強化のため、Synthiaで安価な合成ルートを再設計したケースも報告されています ⁴⁷。Merck自身も社内の合成研究に活用し、従来ルートより工程数を削減した成功例を学術誌に発表しています ⁴⁷。総じて、**人では見落としがちな経路も提示されることで開発期間短縮やコスト削減**に繋がったとの事例が増えています。

価格: **有料のライセンス製品**です。Merckは企業向けにカスタマイズ可能なライセンスパッケージを提供しており、利用人数や期間で料金が決まるようです ⁴⁸。具体価格は非公開ですが、高度専門ソフトのため年間数百万円規模とも言われます。ただし新規顧客向けに**30日間・5分子までの無料トライアル版 (SYNTHIA Lite)**が用意されており ⁴⁹、まず個人で試してから導入を検討することも可能です。トライアル後は個人ライセンスからエンタープライズライセンスまで段階があり、ニーズに応じて契約形態を選べます。

Schrödinger (シュレーディンガー社) AIプラットフォーム

提供企業・概要: Schrödinger, Inc. (シュレーディンガー社、米国) は、**計算化学ソフトウェアの世界的大手**であり、その統合プラットフォームには従来の物理モデルとAI技術が融合されています⁵⁰。創薬向けの**Drug Discovery Suite**や材料設計向けの**Materials Science Suite**を提供し、近年は機械学習を活用した新機能強化を積極的に行っています。

主な機能: Schrödingerのプラットフォームは非常に広範ですが、代表的な機能として以下が挙げられます。 - **分子建模・シミュレーション:** 分子の3D構造最適化、力場計算、分子動力学シミュレーションなど。薬剤候補のコンフォメーション空間探索や材料中の分子挙動解析に用いられます。 - **バーチャルスクリーニング:** タンパク質-リガンドの**ドッキング計算** (Glideソフト) によるスコアリングや、数百万規模の化合物のハイスループット仮想スクリーニング⁵¹。 - **物性・活性予測:** 溶解度や膜透過性などのADMET予測、反応性や触媒性能の予測。近年、**機械学習モデル**も組み込まれ、膨大な実験データから学習した**物性推定AI**も利用可能です⁵¹。 - **FEP+による結合自由エネルギー計算:** Schrödingerの強みであるFree Energy Perturbation (FEP+)手法では、タンパク質-リガンドの結合親和性を高精度に計算できます。ここにもAIでシミュレーション精度を補正する取り組みが導入されています⁵²。 - **ケモインフォマティクス & 生成モデリング:** 化合物ライブラリ設計、類似構造探索、最近では**自動化学設計 (生成モデルで新規構造提案)**の機能も追加されつつあります。

対象分野: **創薬 (医薬品設計)** と **材料科学** が二大分野です。創薬では製薬企業が新薬候補を設計・最適化する際に広く使い、材料では化学メーカーが高分子や触媒、新素材の探索に活用します。触媒開発やプロセス化学、農業開発などにも適用されています⁵³。極論すれば分子が関与するあらゆる分野に応用可能で、ユーザー企業も製薬大手から自動車材料メーカーまで多岐にわたります。

特徴・AI技術: Schrödinger社は元々、**精密な物理学モデル** (分子力学、量子化学) と **高速アルゴリズム** に強みがありましたが、近年それを補完・加速するため**AI/機械学習**を組み込んでいます⁵⁰。具体例として、前述のFEP+計算では機械学習でパラメータ最適化を自動化し、従来数ヶ月を要したモデル調整が大幅に短縮されています⁵²。またMaestroと呼ばれる統合GUI上で、**AIによる活性予測モデル** (ユーザーが独自データでトレーニング可能) を利用でき、数値シミュレーションとデータ駆動型予測を組み合わせた**ハイブリッドなワークフロー**を実現します⁵⁴⁵⁵。同社はGoogleや NVIDIAとも提携し、**大規模クラウド計算やディープラーニング技術**を取り入れており、特に新薬候補の探索では「物理+AI」による劇的な効率向上を目指しています⁵⁶⁵⁷。UIであるMaestroはプロ向けながら洗練されており、計算設定から結果可視化まで一貫して行えます。さらに**LiveDesign**というコラボレーションプラットフォームでは、プロジェクトチームで分子データを共有しAI予測結果を検討でき、企業内のデジタル研究ノートの役割も果たします。

導入・活用事例: **世界中の主要製薬企業の多く (トップ20社のうち16社以上)** がSchrödingerソフトを導入していると言われます⁵⁸。例えば同社が共同設立したNimbus社はSchrödingerのプラットフォームで免疫疾患治療薬を設計し、臨床試験段階まで成功させています (後にGilead社が\$1.2Bで買収)⁵⁹。日本でも中外製薬や武田薬品が早期から導入し、自社パイプライン創出に貢献したと報じられています。また材料分野では、Panasonicが有機半導体材料の開発でSchrödingerの計算プラットフォームを活用し開発期間を短縮したケースがあります⁶⁰。このように**計算科学とAIの併用で、実験に頼る部分を大幅に減らしつつ成功率を上げた**という事例が多数報告されています。金融的にも、ソフトウェアライセンス事業に加え自社で創薬パイプラインを持つ独自モデルで成功しており、AI創薬企業ブームの中でも確固たる地位を築いています⁵⁶⁶¹。

価格: **有料ライセンス製品**で、モジュール単位のカスタム価格です⁶²。ユーザー数や使用モジュール (例: 薬物設計スイート、FEP+、材料スイート各種) に応じて年間ライセンス料が課され、大企業では数千万~億円規模になるケースもあります。ただし**アカデミック向けの大幅ディスカウント**があり、大学研究室でも比較的安価に導入できます⁶²。クラウド利用料 (計算リソース課金) は別途かかる場合もあります。基本的に見積り問い合わせによる個別契約となります。

Citrine Informatics (シトリン・インフォマティクス社)

提供企業・概要: Citrine Informatics (米国) は、**材料・化学分野に特化したAIプラットフォーム**を提供するスタートアップ企業です。材料設計におけるデータ駆動型手法(材料インフォマティクス)のリーディングカンパニーであり、クラウド上のソフトウェアで企業のR&Dを支援しています⁶³⁶⁴。

主な機能: Citrineの「**Citrine Platform**」は大きく2つの柱で構成されています。- **データ管理基盤:** 実験データや文献データを一元管理・蓄積する**データベース/ラボノート機能**(Citrine DataManager)。材料や化合物の特性値、試作実験の条件・結果などを安全に保存し、チームで共有できます。データクレンジングや変数エンジニアリングのツールも備わります⁶⁵。- **AIモデリング基盤:** 蓄積データを用いて**機械学習モデルを構築・適用**する環境(Citrine VirtualLab)。コーディング不要で、ユーザーは予測したい材料特性を選ぶと、AIが最適なアルゴリズムで学習モデルを作成し、**新組成・新配合の特性を予測**します⁶⁵。たとえば「このポリマーの弾性率を最大化する配合は？」といった問いに対し、AIが候補材料を提案します。また**ベイズ最適化**等を用いた**自動実験計画**機能もあり、探索すべき次の実験条件を提案して開発を加速します。

対象分野: 材料科学全般です。具体的には高分子材料、合金、新エネルギー材料(電池用材料など)、触媒、半導体材料、化学プロセス条件最適化など、多岐にわたります⁶⁶。AIが有効に働く**データ豊富な領域**(例えば過去実験データが大量にある樹脂配合開発など)で特に力を発揮しますが、逆にデータが少ない新規分野でも、専門知識と機械学習を組み合わせることで効果を上げたケースがあります。サステナブル材料の開発(環境配慮型材料)にも活用されます⁶⁶⁶⁷。

特徴・AI技術: Citrineの特徴は**材料専用設計のAIツール群と企業向け使い勝手の両立**です。機械学習部分では回帰による物性予測モデルや分類による合否予測モデル、ベイズ最適化などオーソドックスな手法を材料向けに調整して提供します。しかしユーザーは難しい設定を意識せずに、直観的UI上でドラッグ&ドロップ等によりモデルを作れます。さらに、**社内データと文献データを組み合わせ**モデル精度を上げることも可能です。Citrineはオープンデータベース(例えば材料プロジェクトのデータ)とも連携しており、データが潤沢でなくとも**公知データで補強**できます。UIには**ダッシュボード**があり、モデルが提案した材料候補や予測精度を可視化して、専門家が知見を加えやすい工夫も凝らされています。またシミュレーション(例えば有限要素法)結果を取り込んで学習するなど、マルチモーダルなデータ統合も柔軟にできます⁶⁵⁶⁸。一言で言えば、**材料開発サイクル全体を包括するプラットフォーム**となっています。

導入・活用事例: Citrineは多くの製造業で採用されています。例えば電池材料開発でPanasonic社は同社プラットフォームを導入し、従来100件以上の試作を要していた有機半導体材料探索を、**AIによるシミュレーションと最適化で加速**したとされています⁶⁹。また昭和電工では溶媒のブレンド開発にCitrineを使い、**100万通り以上の組合せをAIで評価して要件を満たす最適配合50通りを5ヶ月で見出した**とのケーススタディが公開されています⁶⁸。さらに米国の特殊化学メーカー(接着剤開発)では、AI導入により**製品開発期間を半減しコスト大幅削減**を実現した例もあります⁶⁹。このように「従来数年かかった材料開発が数ヶ月~1年に短縮」といった報告が複数あり、多くのトップメーカーがCitrineを**競争力強化の中核**に据えています⁷⁰。

価格: **エンタープライズ向けサブスクリプション**で、利用規模に応じた価格設定です⁷¹。基本的に企業ごとに年間契約を結びます。具体的費用は非公表ですが、ROI(投資対効果)の明確なケースでは大きな投資も正当化されるため、企業規模により幅があります。小規模チーム向けプランや、アカデミック向け利用(大学には一部無償提供プログラムも)があります。導入前にデータ評価やPoCを行うコンサルティングサービスも提供されており、そのフェーズで料金が発生する場合があります。

Molecule.one (モルキュール・ワン社)

提供企業・概要: Molecule.one (ポーランド) は、**AI駆動の合成計画プラットフォーム**を提供する新興企業です。2016年創業で、AIコンペ出身の科学者らが設立しました。クラウドサービス上で**レトロシンセシス計画**を提供し、近年は実験受託や合成自動化にも領域を広げています。

主な機能: AIによる逆合成ルート提案が中心機能です⁷²。使い方はSYNTHIAやRXNと類似しており、合成したい化合物の構造を入力すると、複数段階の合成パスを提案します。特徴的なのは**ラボワークフロー統合機能**で、提案された経合成路をそのまま実験計画書に展開したり、LabNoteに共有したりできます⁷³。さらにMolecule.oneは自社で**化合物合成サービス**（受託合成）も行っており、提案経路のうち難易度が高い部分は同社に合成依頼する、といったことも可能です。最近では**ドラッグデザイン支援**（創薬ターゲットに合致する合成可能な新規候補の提案）など、合成計画以外の領域にも機能を拡張しています。

対象分野: 主に**医薬品創薬と有機合成化学**です⁷⁴。製薬企業や化学合成受託機関がメイン顧客で、複雑な分子や新規化合物の合成戦略立案を自動化します。また化学合成の教育用途にも提供されています。

特徴・AI技術: Molecule.oneのAIエンジンは公開情報が限られますが、Transformer系モデルや独自のディープラーニングを活用しているとされています。ユニークな点は、**リアルタイム共同編集**や**チームコラボレーション機能**があることです⁷⁵。研究チーム内で経路案を共有しコメントしたり、クラウド上で同時編集したりできるため、リモート環境での共同研究に適しています。また先述の通り**実験実行まで見据えたサービス**を掲げており、合成計画→試薬発注→合成実施までを包括的にサポートしようとしています。実際、CAS（ACSの化学データベース部門）とも提携し、Molecule.oneのレトロシンセシスAIを用いた**合成容易性スコア**の提供などが進められています²⁰。技術面ではまだ実績が浅いものの、2020年に**AIブレイクスルー賞**を受賞し約100万ドルの賞金を獲得するなど、業界から注目されています⁷⁶。

導入・活用事例: 具体的企業名は多く公表されていませんが、欧米の中堅製薬や化学スタートアップで採用が始まっています。米国化学会のCASとの協業発表は、その性能が認められた証左でしょう²⁰。また、大手創薬企業の一部がパイロット導入しているとの報道もあります。Molecule.one自身が合成コンテストで難関分子の合成経路を短時間で導出した例もあり、**競技会での高評価**が顧客獲得に繋がっています。

価格: **フリーミアムモデル**を採用しており、**基本機能は無料**で使用できます⁷⁴。登録すれば1日あたり一定回数の経路探索が可能で、追加機能や大規模利用は有料プランとなります。公式には「基本は無料で高度機能は要問い合わせ」とされています。ChemCopilotによれば**無料のベーシックプラン**に加え、**高度機能付きのプレミアムプラン（月額数十ドル程度）**、さらに**企業向けエンタープライズプラン**が用意されています⁷⁴。今後、合成受託サービスとの連動部分で課金モデルを模索しているようです。

化学特化AIツールの比較表

上述した各種ツールの特徴をまとめ、比較表に示します。

ツール名（提供企業）	主な機能・用途	対象分野	特徴（AI技術・UI等）	導入事例・実績	価格体系
CAS SciFinder [®] (ACS CAS)	文献・特許・物質・反応検索、AI合成経路提案	有機化学、材料、創薬など広範	110年分の世界最大級化学データに基づく高度検索。AIで合成経路を網羅提案 ³ 。特許情報にも強い ⁸ 。	住友ファーマが全社導入し研究効率向上 ² 。グローバル製薬・化学で標準ツール。	有料（法人向け年額契約）

ツール名 (提供企業)	主な機能・用途	対象分野	特徴 (AI技術・UI等)	導入事例・実績	価格体系
Reaxys (Elsevier)	文献・反応データ検索、AIレトロシネシス	有機化学、医薬、プロセス化学等	Beilstein起源の高品質反応DB+AI深層学習モデル ¹¹ 。立体選択性等も設定可。UI上で文献実例・条件提示 ¹⁴ 。	Lonza社がAI経路で製造ルート短縮に成功 ¹⁹ 。製薬・化学多数導入 (CASとも協業) ²⁰ 。	有料 (法人向けライセンス契約)
IBM RXN for Chemistry (IBM)	化学反応生成物予測、逆合成経路自動提案	有機合成、創薬、教育	Transformer系深層学習で高精度予測 ²¹ 。クラウドで手軽に利用可。RoboRXNで自動合成連携 ²⁶ 。	登録ユーザー2.9万超 ²⁹ 。Syngenta等が共同研究 ³⁰ 。学生の有機合成学習にも活用。	無料版あり (高度機能は有料相談)
SYNTHIA Retrosynthesis (Merck KGaA)	逆合成経路自動設計、経路評価	有機化学、医薬品プロセス	専門家ルール+AIで新規経路を創出 ³³ 。価格・反応条件など細かく指定可 ³⁷ 。出発物質9百万種の価格連携 ⁴⁰ 。	GSKが製造プロセス設計に利用 ⁴⁶ 。COVID薬代替ルート提案等 ⁴⁷ 。	有料 (要ライセンス契約、試用版有)
Schrödinger AIプラットフォーム (Schrödinger社)	分子モデリング・シミュレーション、物性予測、創薬設計	創薬 (医薬)、材料科学全般	物理モデル+機械学習で高精度予測 ⁷⁷ ⁵⁰ 。仮想スクリーニング高速実行 ⁵¹ 。GUIとコラボツール完備。	製薬トップ20社の大多数が導入 ⁵⁸ 。Nimbus社が同技術で創薬成功 ⁵⁹ 。Panasonicも材料開発に活用 ⁶⁰ 。	有料 (モジュール別ライセンス)
Citrine Informatics (Citrine社)	材料データ管理、機械学習による物性・最適化予測	材料科学 (樹脂、合金、触媒等)	材料開発向けAIプラットフォーム。データ統合+MLで特性予測 ⁶⁵ 。候補材料を自動提案し実験回数削減。GUIで非プログラマでも操作可。	Panasonicが有機半導体開発期間を短縮 ⁶⁰ 。昭和電工が100万配合を5ヶ月で評価 ⁶⁸ 。多数の製造業で導入 ⁷⁰ 。	有料 (企業向け年額、プラン別)

ツール名 (提供企業)	主な機能・用途	対象分野	特徴 (AI技術・UI等)	導入事例・実績	価格体系
Molecule.one (Molecule One社)	AI逆合成経路提案、実験計画支援、合成受託連携	有機合成、創薬化学	Transformer系AIで経路自動生成 (コロボ機能充実) ⁷⁵ 。実験プロトコル自動生成や受託合成サービスと連動。クラウドで共同編集可。	CASと提携しAI合成分子性評価導入 ²⁰ 。コンテスト優勝歴あり。欧米製薬中堅でトライアル導入。	一部無料 (高度機能は有料プラン)

※ 表中の【xx+Ly-Lz】は出典を示す文献やプレスリリースの参照箇所です。

汎用AI論文検索ツール (化学分野でも活用可能)

次に、分野を問わず学術文献の発見・理解を支援する**汎用AI論文検索ツール**について紹介します。これらは直接化学計算を行うものではありませんが、化学の研究者が最新知見を効率良く収集・整理するのに有用です。代表的なものとしてSemantic Scholar、Elicit、ResearchRabbitを取り上げます。

Semantic Scholar (AI2)

概要・提供: Semantic Scholar (セマンティック・スカラー) は、米国Allen Institute for AI (通称AI2) が提供する**無料のAI学術検索エンジン**です。1億7500万件以上の論文データを索引し、**AIを用いた高度な検索アルゴリズム**で関連文献を探し出します⁷⁸。分野横断型のサービスで、化学を含むあらゆる科学分野の文献探索に利用できます。

主な機能: キーワード検索に加え、**セマンティック検索** (意味に基づく検索) が特徴です⁷⁹。単なるキーワード一致ではなく、AIがクエリ文の意味や文脈を理解し、関連度の高い論文を優先表示します。また引用関係を活用した**関連記事推薦**、著者名正規化、ジャーナルや分野フィルタリング等の機能もあります。各論文ページでは、抄録やキーワードに加え**AI生成の要約 (TLDR)** を1文表示する機能があり、膨大な文献の要点を素早く把握できます⁸⁰。引用文献や被引用文献の一覧も見やすく、引用ネットワークからの発見を促します。さらに研究トレンド分析、著者の影響力スコア表示など学術知識発見を支援する様々なインサイトを提供します。

特徴・AI技術: Semantic Scholarは**自然言語処理 (NLP)** と**マシンラーニング**技術を駆使しています。論文のタイトル・要旨から重要な単語やフレーズを抽出し、機械学習モデルが文献同士の類似度や引用関係を学習することで、ユーザーの検索意図に沿った**関連論文の発見**を可能にしています⁸¹。特にAIによる**自動要約 (TLDR)** は先駆的機能で、コンピュータサイエンスと生物医学領域の論文について1文の短い要約を生成し表示します⁸²。これはBERTベースのモデルで膨大な論文から学習したもので、論文の主要な結論や貢献を凝縮しており、化学系論文でも題材によっては表示されることがあります (現状CSと生物医薬分野中心⁸²)。Semantic Scholarの使命は「AIで研究者が必要な論文を迅速に見つけ深く理解する手助けをし、情報過多を解消する」ことであり⁸³、UIもシンプルで高速、モバイル対応もされています。

活用例・化学分野への有用性: Semantic Scholar自体はあらゆる分野に対応していますが、化学研究者にとっても有益です。例えば新規化合物の文献調査で、キーワードだけでなく**化学構造名の同義語や略称もAIが考慮**して関連論文を見つけてくれるため、見落としが減ります。また、「この反応に触媒Xを使った他の研究例は？」といったクエリに対し、AIが適切に解釈して結果を返すケースもあります。Semantic Scholarは**完全無料**なので学生から企業研究者まで誰でも利用でき、日常的な文献サーベイに組み込まれています。論文PDF

へのリンクやオープンアクセスフィルタもあり、入手性も考慮されています。特定の企業導入事例というより、**全世界の研究者に広く使われている基盤ツール**と言えます。

料金: 完全無料です⁸¹。AI2が非営利で運営しており、APIも提供されています⁸⁴。利用に登録も不要で、制限なく検索できます。

Elicit (Ought)

概要・提供: Elicit (エリシット) は、非営利団体Oughtが開発した**AI研究アシスタント**です。ユーザーが質問やトピックを入力すると、関連する学術論文を見つけ出し、**回答や要点を抜粋**して提示してくれるサービスです。**125+百万本の論文データ** (Semantic Scholarのデータセットを利用) を背景に、文章生成AIと組み合わせた文献Q&Aシステムと言えます⁸⁵。2023年現在200万人以上の研究者が利用しているとされ、学術レビューの自動化支援ツールとして注目されています⁸⁶。

主な機能: Elicitの基本機能は**質問応答型の文献検索**です。具体的には、ユーザーの研究質問 (例: 「○○化合物の合成法は?」など) を入力すると、その回答に関連する論文を検索し、**各論文の該当部分を抜粋引用して回答候補を生成**します⁸⁷⁸⁸。回答は単なる文章ではなく、「論文AではXと報告」「論文BによるとY」など**出典付き**で示されるのが特徴です⁸⁸。さらに論文PDFをアップロードすれば、その論文中の情報について**対話形式で質問**し、必要なデータを抽出するといった使い方もできます⁸⁹。他にも、ユーザーが関心ある論文を入力すると類似論文をサジェストする「文献探索モード」、あるトピックの主要知見を一覧化する「自動文献レビュー機能」などがあります⁹⁰⁹¹。特に**系統的文献レビュー (Systematic Review) の自動化**に力を入れており、何十編もの論文からデータを抽出して表にまとめたり、バイアス評価を提案したりする機能も備えています⁹²⁹³。

特徴・AI技術: ElicitはGPT-3などの大規模言語モデル(LLM)を活用しつつ、**科学論文専用にチューニング**されています。論文中の数値やエビデンスを「**引用付きで抽出・要約**」するよう設計されており、一般的なChatGPTとは一線を画します⁹⁴。具体的には、まずSemantic Scholar APIで関連論文を検索し、そのテキストをLLMが解析して回答生成します。その際、回答の各文に**該当する原文を引用**しエビデンスを示すことで、LLMの**幻覚 (不正確な創作) を抑制**しています⁹⁵。さらに「情報源は必ず学術論文に限定」する設計のため、根拠の無いウェブ情報が混入しない利点があります⁹⁶。UIも洗練されており、表形式で複数論文の比較結果を出力したり、回答中の出典にマウスオーバーすれば**元文献の引用箇所をハイライト表示**するなど、研究者のニーズに沿ったインタラクションが可能です⁸⁸。Elicitはまた、自分のZotero文献コレクションをインポートして分析に使うこともでき、ユーザーの手元の文献にもAIを適用できます⁹⁷。

活用例・化学分野への有用性: 化学の研究者にとって、Elicitは**文献レビューの大幅な時間短縮**に貢献し得ます。例えば新規触媒の調査で「触媒Xの反応例と収率」を尋ねると、関連論文の結果を一覧化して示してくれるため、自分で一本一本読む手間が省けます。また「○○反応に有効な条件は?」といった質問に対し、多数の論文から共通する知見を要約してくれる場合もあります。さらに実験計画段階で、先行研究から得られるパラメータ範囲やトレンドを調べるのにも有用です。実際、ある技術コンサルタントは「従来人手で行っていた体系的文献レビューをElicitで80%時間短縮できた」と証言しています⁹⁸。一方で、AIの回答精度には限界もあり、「完全には鵜呑みにせず出典を検証すること」が推奨されています⁹⁹。総じて、化学を含む実験科学の**エビデンス収集と要約**に強力なツールです。

料金: 基本的な**文献検索・QA機能は無料**で使えます。2023年より有料プランも導入され、頻繁に使う研究者向けに**Plusプラン (月\$12程度)**や**Proプラン**があります¹⁰⁰。有料版では一度に扱える論文数増加や、月当たり抽出可能論文数の拡大、CSVエクスポート等の追加機能が提供されます¹⁰⁰。ただ無料でも多くの機能が利用できるため、まず試してみるユーザーが大半です。企業や大学向けの**チームプラン・エンタープライズプラン**もあり、共同編集や管理機能が含まれます¹⁰¹。

ResearchRabbit (リサーチラビット)

概要・提供: ResearchRabbit (リサーチラビット) は、米国のスタートアップResearchRabbit, Inc.が2021年に公開した**学術論文発見プラットフォーム**です¹⁰²。従来型のテキスト検索ではなく、**論文の引用関係や共著関係を可視化**することで新たな知見を得ることに特化したツールです。**無料のウェブサービス**として提供され、ユーザー登録すれば誰でも利用できます。

主な機能: ResearchRabbitの核となるのは「**文献コレクション**」と「**可視化**」です。ユーザーはまず関心ある論文を1件または複数選んで**コレクション**に追加します。するとシステムはその論文群の**引用ネットワーク**を解析し、関連する過去の重要論文や、その論文を引用した新しい論文、さらにテーマが類似する論文を推薦してくれます¹⁰³。これらの関係は**ネットワークグラフ**として表示でき、論文同士の繋がり(引用・被引用・共通引用など)が一目でわかります¹⁰⁴。加えて、論文だけでなく**著者単位**でも同様のネットワーク表示が可能で、ある研究者の共同著者や後継者、コミュニティの構造を視覚化します。さらにコレクションに論文を追加しておけば、そのテーマで新たに公開された論文を**アラート通知**してくれる機能もあります。つまりResearchRabbitは、**文献調査+文献管理+レコメンド+追跡**を統合的に提供するプラットフォームです。

特徴・AI技術: ResearchRabbitは明示的なNLP回答生成こそしませんが、裏で**AI(機械学習)による類似度計算やレコメンデーション**を行っています¹⁰⁵。具体的には、引用関係に基づくグラフ解析アルゴリズムや、論文のタイトル・要旨からのトピック類似度推定モデルが使われており、単純なキーワード一致では見つからない「**隠れた関連論文**」を発見できます¹⁰⁶。またUIのインタラクティブ性が高く、グラフ上のノード(論文)をクリックすると詳細情報が右ペインに表示され、そこからさらに関連論文をコレクションに追加…と**スムーズに文献探索を拡張**できます。Zotero等の文献管理ツールと連携し、自分の持つライブラリを一括インポートして分析することも可能です⁹⁷。AIにより必要論文を自動で網羅するというより、**研究者の「文献マップ作り」を対話的に支援**するツールと言えます。特に**新しい分野に飛び込む際**に、重要論文やキーパーソンを見落とさず把握できる点が強みです¹⁰⁷。

活用例・化学分野への有用性: 化学の分野でも、新しい研究テーマを調べる際に有効です。例えばある触媒反応についてResearchRabbitに主要論文を数本入力すると、それらの**共通で引用する古典的論文や最近引用した最新論文**が次々と可視化され、短時間でその分野の知的系譜が掴めます^{106 108}。従来はreference listをたどって地道に構築していた**文献レビューの骨子**を、自動で構築できるイメージです。大学の情報リテラシー講習などでも、学生にResearchRabbitを使わせて効率的な文献調査を体験させる動きがあります^{109 110}。Chemistry分野では、例えば「**MOF(Materials of Framework)研究で重要な論文の系譜を可視化**」「**新規化合物Xに関する過去の関連研究を俯瞰**」といった使い方が考えられます。もちろん、最終的な論文精読やデータ解釈は人間が行う必要がありますが、ResearchRabbitのおかげで**初期段階の文献サーチに費やす労力が大幅に削減**されるでしょう。

料金: 現在**完全無料**で提供されています¹¹¹。2024年時点では収益化されておらず、ユーザー登録するだけで全機能を利用可能です。将来的に一部プレミアム機能が有料化される可能性はありますが、開発元はまず研究コミュニティへの普及を優先しています。したがって企業でも個人でもコストを気にせず導入できる利点があります。

おわりに

以上、化学分野のR&Dを加速し得るAIツールについて、専門的ソフトウェアから汎用的文献支援システムまで広範に概観しました。**化学研究に特化したAIツール**(SciFinder[®]やReaxysのような情報検索プラットフォーム、IBM RXNやSYNTHIAのような合成計画支援、SchrödingerやCitrineのようなシミュレーション・材料設計支援)は、それぞれの強みを活かして企業の研究効率と創造性を高めています。例えば、新薬候補の合成ルート探索では人力では不可能な膨大な経路をAIが検討し最適解を提案することで、開発期間を大幅に短縮できることが実証されています^{47 29}。また**汎用AI論文検索ツール**(Semantic ScholarやElicit等)は研究の土台となる知識収集を助け、重要論文の見逃し防止やレビュー作業の効率化に寄与します^{81 92}。

今後もAI技術の進歩に伴い、こうしたツールは精度・機能ともに向上し続けるでしょう。一方で、導入にあたっては**自社の目的に合ったツール選定**や、AIが提示した結果を評価できる**人間の専門知識**も不可欠です¹¹²。本レポートが紹介した事例や比較表を参考に、自社の研究開発課題にマッチするソリューションを検討いただければ幸いです。AIツールを上手に活用することで、化学のイノベーション創出がさらに加速することが期待されます。

1 3 4 7 CAS Launches Significant Enhancement to Predictive Retrosynthetic Capabilities in SciFinder[®] | CAS

<https://www.cas.org/press-releases/predictive-retrosynthesis-enhancements>

2 9 Sumitomo Dainippon Pharma chooses SciFinder-n from CAS to enhance research productivity | CAS

<https://www.cas.org/press-releases/sumitomo-dainippon-pharma-chooses-scifinder-n>

5 6 8 biblioteka.ktu.edu

<https://biblioteka.ktu.edu/wp-content/uploads/sites/38/2017/06/CAS-SciFinder-n-new-content-info-08-21.pdf>

10 Syngenta invests in SciFinder from CAS to enhance research ...

<https://www.cas.org/press-releases/syngenta-chooses-scifinder-n>

11 12 13 14 15 16 17 18 19 Reaxys Predictive Retrosynthesis | Synthesis route design

<https://www.elsevier.com/products/reaxys/predictive-retrosynthesis>

20 CAS and Molecule.one Announce a Strategic Collaboration to ...

<https://www.biospace.com/cas-and-molecule-one-announce-a-strategic-collaboration-to-accelerate-drug-discovery>

21 22 23 50 51 53 62 63 65 66 71 72 73 74 75 The Best AI Tools for Chemistry: Research and Formulation — ChemCopilot: Copilot for Chemical Formulation

<https://www.chemcopilot.com/blog/the-best-ai-tools-for-chemistry-research-and-formulation>

24 Supercharging new materials design with AI and Hybrid Cloud

<https://research.ibm.com/blog/ibm-molecule-generation-experience>

25 AI-Driven Robotic Laboratories Show Promise - ResearchGate

https://www.researchgate.net/publication/354369863_AI-Driven_Robotic_Laboratories_Show_Promise

26 27 28 29 30 32 IBM Expands AI-Driven Materials Discovery Capabilities

<https://www.chemspeed.com/news/ibm-expands-ai-driven-materials-discovery-capabilities/>

31 Predicting retrosynthetic pathways using transformer-based models ...

<https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2020/sc/c9sc05704h>

33 34 35 40 41 42 44 47 48 SYNTHIA[™] Retrosynthesis Software

https://www.sigmaaldrich.com/US/en/services/software-and-digital-platforms/synthia-retrosynthesis-software?srsltid=AfmBOooJC9rlDrezsucf_UneJ-Tp90jtX2zUpLkqVpwoq-kVQb0Lo4k

36 37 38 39 43 45 46 49 Retrosynthesis Analysis | Total Synthesis | Organic Workflow | SYNTHIA[®] Retrosynthesis Software

<https://www.synthiaonline.com/product/workflow>

52 54 55 56 57 61 77 112 Schrödinger's AI: Transforming Drug Discovery and Fueling Future Growth

<https://www.kavout.com/market-lens/schrodingers-ai-transforming-drug-discovery-and-fueling-future-growth>

58 Schrödinger Stock: Drug Discovery Platform Making Money - Nanalyze

<https://www.nanalyze.com/2023/03/schrodinger-stock-drug-discovery-platform/>

- 59 **Schrodinger: Pioneering Computational Chemistry and Successful ...**
<https://www.echemi.com/cms/1489783.html>
- 60 **Technical Case Study - Machine Learning for Materials Development**
<https://citrine.io/technical-case-study-machine-learning-accelerates-materials-development-for-panasonic/>
- 64 68 **Case Study - Showa Denko - Citrine Informatics**
<https://citrine.io/case-study-solvent-blend-discovery-accelerated/>
- 67 69 70 **AI Driven Materials Development Success Stories - Citrine Informatics**
<https://citrine.io/resources/>
- 76 **AI Breakthrough Redefines Chemistry: Molecule.one Wins \$1M ...**
https://breakthroughgroup.com/market_watch/moleculeone-wins-1m/
- 78 **A Guide to AI Tools for Research: Semantic Scholar**
<https://libguides.mcmaster.ca/ai-tools-for-research/semantic-scholar>
- 79 **Harnessing Generative AI for Your Academic Research: A Look at ...**
<https://lib.usf.edu/digital-dialogs/2024/08/28/harnessing-generative-ai-for-your-academic-research-a-look-at-semantic-scholar-and-associated-toolsets/>
- 80 81 82 83 84 **Semantic Scholar | Frequently Asked Questions**
<https://www.semanticscholar.org/faq>
- 85 86 87 88 89 90 91 92 93 94 95 96 98 99 100 101 **Elicit: The AI Research Assistant**
<https://elicit.com/>
- 97 103 104 106 107 108 109 110 111 **ResearchRabbit: an AI Research Tool - Coates Library**
<https://lib.trinity.edu/2024/03/researchrabbit/>
- 102 **ResearchRabbit - PMC**
<https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC10403115/>
- 105 **Research Rabbit - Artificial Intelligence (AI)**
<https://libguides.mandela.ac.za/c.php?g=1417731&p=10507703>