

AI活用ツールによる化学研究開発の加速

本レポートでは、化学分野における研究開発を加速するための企業向けAIツールを主に、学術研究向けツールも含め、有料・無料を問わず代表的なソリューションを取り上げる。論文検索、化学反応予測、物質設計、実験自動化の各カテゴリに分け、それぞれの特徴・主な機能・活用事例を要約付きで報告する。

1. 論文検索支援ツール

1.1 CAS SciFinder-n

SciFinder-nは従来の文献検索機能に加え、AIを用いた自然言語クエリ解釈や逆合成プランナー機能を提供するプラットフォームである。

- **AI駆動自然言語検索**：化合物名や構造式、機能基を含むクエリを自然言語で投入すると、高精度な検索結果を返す^[1]。
- **逆合成プランナー (Retrosynthesis Planner)**：既知・未報告の化学反応を問わず、最適な合成ルートを自動提案し、予測収率を表示する機能を2019年7月にリリースした^[2]。
- **活用事例**：AIによる新規反応の候補選定を行い、研究中断リスクを低減。フィードバック機能によるモデル改良で予測精度を向上させるワークフローが報告されている^[2]。

1.2 Reaxys

Elsevierが提供する化学データベースReaxysは、高品質な反応データと連携したAI駆動逆合成予測を企業向けに展開する。

- **AI逆合成予測モデル**：IktosおよびPending.AIと提携し、膨大な反応データベースを基に機械学習モデルを構築。
- **APIおよびGUI提供**：数百化合物の一括解析やワークフロー統合を可能にする直感的なインターフェイスとAPIを備える^[3]。
- **活用事例**：Lonza社によるケーススタディでは、Reaxys Predictive Retrosynthesisによりステップ数削減やコスト最適化を実現した^[3]。

1.3 Semantic Scholar

Allen Institute for AIが開発する無料の学術文献検索エンジン。主に生命科学・工学分野の論文を対象に、以下の機能を提供する。

- **TLDRs**：AI生成の短縮要約を表示（β版）。
- **Ask this paper**：論文単位で「手法」「結果」などを問いかけられるQA機能（β版）^[4]。

- スキミングハイライト：目標、手法、主要結果を強調表示し、効率的な文献レビューを支援する^[4]。

1.4 Elicit

Ought社のElicitは、125百万件以上の論文を対象にAIを用いた文献検索・データ抽出を行うクラウドサービスである。

- ノートブックワークスペース：プロジェクトごとに検索結果やメタデータを整理可能。
- データ列のカスタマイズ：論文の発行年、被検者数などを抽出し、CSVでエクスポートできる。
- 要約自動生成：各論文の主要知見をAI要約として提示し、メタアナリシスを支援する^[5]。

2. 化学反応予測・逆合成ツール

2.1 SciFinder-n Retrosynthesis Planner

SciFinder-nに搭載されたAI逆合成機能。報告例のない反応も含め、最適ルートと予測収率を提示する^[2]。

2.2 Reaxys Predictive Retrosynthesis

高品質データ×Iktos/ Pending.AIのAIモデルによる逆合成予測。選択性制御やコスト最適化オプションがあり、製薬企業等での導入例が多数ある^[3]。

2.3 IBM RXN for Chemistry

IBMの無料ウェブアプリケーションで、Molecular Transformerに基づくAIモデルを用いる。

- 双方向予測：逆合成・順反応予測ともにサポート。
- Science of Synthesisデータ統合：Thiemeの高品質データで再学習し、精度向上を実現^[6]。
- ユーザーフレンドリー：ChemDraw風エディタやSMILES入力で簡単に利用可能^[7]。

2.4 AiZynthFinder

オープンソースの逆合成解析ツール。モンテカルロ木探索とニューラルネットワークを組み合わせ、ZINCデータベース由来の市販出発物質まで自動分解解析を行う。

- カスタマイズ可能：ポリシーモデルや在庫リストを自由に設定可能^[8] ^[9]。
- GUI/CLI両対応：Jupyter NotebookベースのGUIとコマンドラインツールを提供^[9]。

2.5 ChemAIRS (Chemical.AI)

Chemical.AIのChemAIRS®プラットフォームは、逆合成解析を超えた機能を提供する。

- 合成可能性評価 (SAスコア)：数百万化合物を高速スクリーニング。
- 不純物予測：潜在的な副生成物を可視化し、反応失敗リスクを低減。
- プロセス化学支援：スケールアップ時の条件最適化やコスト解析をサポート^[10]。

2.6 SYNTHIA® (旧Chematica)

Merck KGaAが商用化したChematicaベースの逆合成ソフト。

- **専門家ルール+AI**：50,000以上の合成ルールをコーディング済み。
- **最短・最安経路探索**：複数ルートを生成し、ステップ数・コスト・安全性をフィルタリング可能^{[11] [12]}。
- **学術・企業利用例**：製薬企業や学術機関での全合成計画に採用されている。

3. 新規物質設計支援ツール

3.1 BIOVIA Generative Therapeutics Design

Dassault SystèmesのBIOVIAプラットフォームによるクラウド型生成AIソリューション。

- **V+R アクティブラーニングサイクル**：仮想設計 (Virtual) → 実験検証 (Real) を繰り返し、最適候補を探索。
- **マルチターゲット最適化**：3D QSAR、分子ドッキング、ADMET予測を統合。
- **コスト削減効果**：数百万ドル規模の物理試験コストを削減可能^{[13] [14]}。

3.2 DeepChem

オープンソースのPythonライブラリ群で、機械学習を化学・材料科学に適用する。

- **プリベイクドモデル**：小分子の溶解度、タンパク質結合親和性、物性予測などをサポート。
- **柔軟なフレームワーク**：TensorFlow、PyTorch、JAX対応。研究者自身がモデルを構築・拡張できる^{[15] [16]}。

4. 実験自動化ツール

4.1 Synthace

ChatGPTと統合したライフサイエンス向けデジタル実験プラットフォーム。

- **自然言語インターフェイス**：意図を記述するとAIがプロトコルを設計。
- **実験自動化**：ラボ機器制御まで一貫実行し、実験ログと構造化データを自動収集。
- **活用事例**：T細胞培養のDOEプロトコル設計から実行までをノーコードで実現^[17]。

4.2 Opentrons AI

オープンソースロボットOpentronsシリーズ向けに、

- **プロトコルライブラリ**：数百のプラグアンドプレイの液体ハンドリングプロトコル。
- **生成AIプロトコル開発**：大規模言語モデルでカスタムワークフローを自動生成。
- **コミュニティ検証**：CMUやMITなどの研究機関と連携し、厳密な検証を実施^{[18] [19]}。

4.3 Benchling AI

バイオテックR&D向けクラウドプラットフォームBenchlingに組み込まれたAI機能。

- **Data Entry Assistant** : 非構造化データを構造化し、2週間分のデータ入力作業を短縮。
- **Notebook Check** : 実験ノート初期レビューを自動化し、欠損やエラーを検出。
- **SQL Assistant** : 英語クエリでデータベース照会やダッシュボード作成を支援^[20]。

以上のツール群を適切に組み合わせることで、化学R&Dにおける文献探索、合成計画、分子設計、実験実行の各フェーズを大幅に効率化し、新たなイノベーション創出を加速できる。

森

1. <https://cas-product-help.zendesk.com/hc/en-us/articles/33309887705741-What-are-AI-driven-search-enhancements>
2. <https://www.chem-station.com/chemistenews/2020/01/scifinder-n.html>
3. <https://www.elsevier.com/ja-jp/products/reaxys/predictive-retrosynthesis>
4. <https://www.wur.nl/en/newsarticle/semantic-scholar-an-ai-tool-to-complement-your-literature-search.htm>
5. <https://academiainsider.com/how-to-use-elicit-2/>
6. <https://science-of-synthesis-datasets.thieme.com/science-of-synthesis-ibm-rxn-chemistry/>
7. <https://netdekagaku.com/reactionpredictionibm/>
8. <https://github.com/MolecularAI/aizynthfinder>
9. <https://molecularai.github.io/aizynthfinder/>
10. <https://www.chemical.ai>
11. <https://www.synthiaonline.com/product/platform-overview>
12. <https://en.wikipedia.org/wiki/Chematica>
13. <https://altem.com/biovia-generative-therapeutics-design/>
14. <https://www.3ds.com/products/biovia/generative-therapeutics-design>
15. <https://deepchem.readthedocs.io>
16. <https://github.com/deepchem/deepchem>
17. <https://www.businesswire.com/news/home/20230524005075/en/Synthace-combines-ChatGPT-and-digital-experiments-in-first-step-toward-a-true-AI-scientist>
18. <https://www.synbiobeta.com/read/opentrons-r-introduces-innovative-protocol-library-and-ai-tools-to-boost-lab-automation-and-advance-scientific-r-d>
19. <https://www.generatived.com/news/opentrons-labworks-unveils-new-ai-enhanced-protocol-library>
20. <https://www.anthropic.com/customers/benchling>