

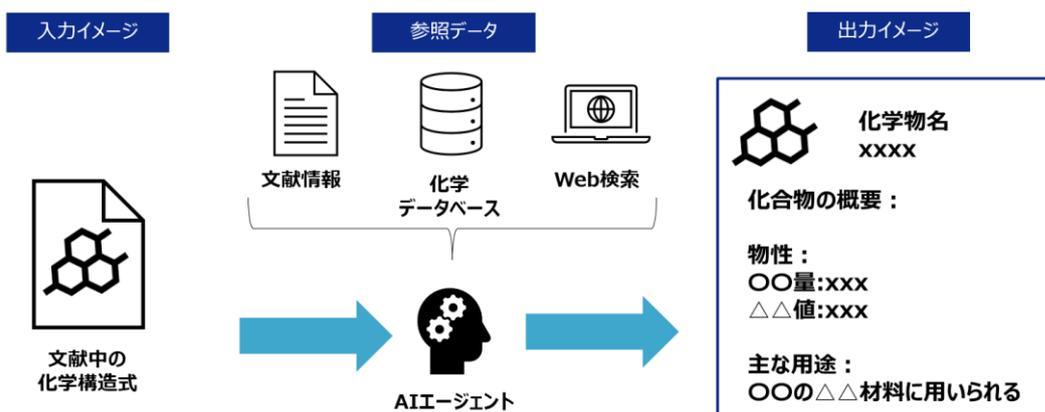
2026年3月2日
三井化学株式会社

三井化学、研究開発の文献調査を革新する生成 AI エージェントを開発 ～化学構造式から化合物情報を自律抽出、文献調査時間を 80%以上削減～

三井化学株式会社（本社：東京都中央区、社長：橋本 修）は、学術文献や研究報告書に記載された化学構造式から化合物に関する情報を自律的に調査・整理する生成 AI エージェントシステムを独自に開発し、社内での実証実験を開始しました。初期検証において、研究者の文献調査時間を 80%以上削減できることを確認できたことから 2025 年度内に実証実験を完了し、2026 年度からの本格運用を目指します。

化学分野の研究開発において、特許文献や学術論文から化合物の情報を調査する作業は不可欠です。しかし、複雑な構造をもつ高分子や有機化合物の場合、構造式を見ただけで化合物名を正確に特定することは困難です。従来、研究者は膨大な文献の一つひとつを確認しながら、構造式と化合物名の対応関係を手作業で調べる必要があり、多大な時間と労力を要していました。この度、当社が独自に開発した生成 AI エージェントシステムを用い、当社の研究者や技術者が持つ化学の専門知識を組み合わせることで、従来の手法では実現できなかった高度な文献調査の自動化を実現しました。

本システムでは、これまで困難だった化学構造式の AI による読み取りを可能にしており、AI エージェントが文献中の画像情報とテキスト情報を統合的に活用し、化合物に関する情報を自律的に判断・抽出します。化合物名の特定にとどまらず、文献中に記載されている用途、物性、製造方法、実験条件などの関連情報も同時に取得できます。さらに、必要に応じて化学データベースや Web 検索情報を参照することで、より包括的な化合物情報を出力します。また、研究者のニーズに合わせたレポート作成機能を備えており、調査結果を整理された形式で出力することで、後続の分析作業や意思決定を支援します。



初期検証では、本システムを活用した文献調査において、研究者の調査時間が 80%以上削減される効果を確認しました。従来 1 カ月程度を要していた文献調査が 1 日程度に短縮され、研究者はより創造的な研究開発活動に注力できるようになります。

三井化学は、今後も最先端のデジタル技術を活用して化学の力で社会課題を解決し、多様な価値の創造を通じて持続可能な社会に貢献してまいります。

以上

<お問い合わせ先>

三井化学株式会社 コーポレートコミュニケーション部 TEL : 03-6880-7500

お問合せフォーム https://form.mitsuichemicals.com/corporate/cc_pr_csr_ja