

知財法務の勘所 Q & A (第101回)

マテリアルズ・インフォマティクスと特許

アンダーソン・毛利・友常法律事務所
弁理士 金山 賢教

Q1

近年、「マテリアルズ・インフォマティクス」と呼ばれる分野が注目されていますが、具体的にどのような技術でしょうか？特に、従来のシミュレーションの技術とどのように異なるのでしょうか？

A1

マテリアルズ・インフォマティクス (Materials Informatics；以下では略語の「MI」とも言います。) とは、機械学習や生成AI、データマイニングといった情報科学を用いて、有機材料、無機材料、高分子材料、金属材料や電池材料など様々な材料開発の効率を向上させるアプローチです。

従来型の材料開発では、主に先行研究や研究者の経験を頼りに材料設計を行っていたため、材料設計した候補材料に対して何度もシミュレーションや実験を行う必要があり、開発に多くの時間が費やされていました。これに対して、MIを用いた材料開発では、情報科学の技術を用いることによって目標性能を満たす材料を効率的に探索することができ、新しい材料の開発期間を大幅に短縮できる可能性があると言われています。以下に、材料探索における従来型材料開発とマテリアルズ・インフォマティクスを比較した概略図を示します（図1）。

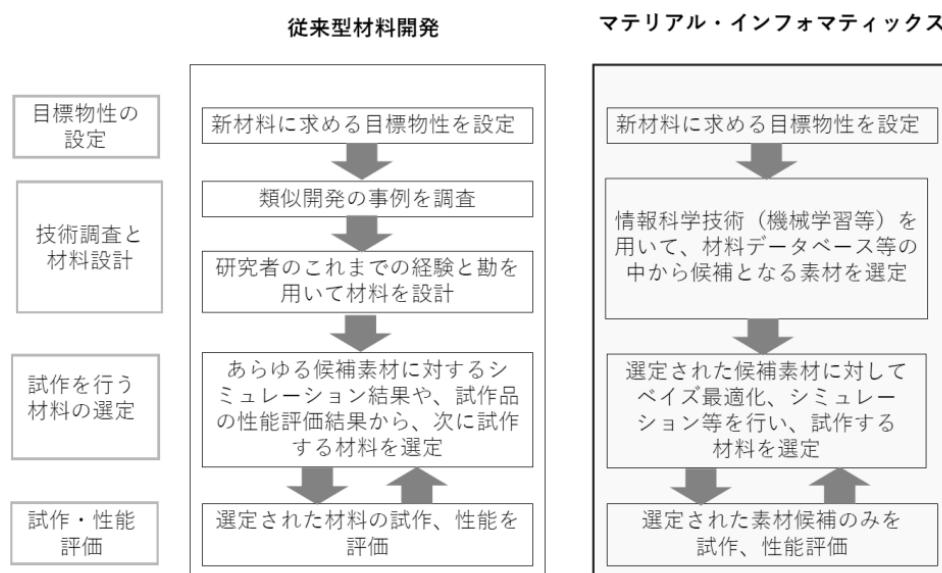


図1

マテリアルズ・インフォマティクスと類似する言葉として、「プロセスインフォマティクス（PI）」がありますが、PIは、材料の製造プロセスの最適化により、コスト削減や品質の向上を目的としたアプローチのことを指しているのに対して、MIは材料の探索や特性予測に焦点を当てた手法であると言われています。

また、MIと類似する概念として「ケモインフォマティクス（CI）」がありますが、CIは化合物の構造や性質の解析やモデルの構築などの分子や化合物に特化し、分子レベルでの解析に焦点を当てているのに対して、MIはバルクとしての材料に焦点をあて、ナノスケールからマクロスケールまでの特性を評価することを特徴としています。つまり、両者は、対象とするデータの種類や応用分野が異なるものと言えます。

ところで、従来から、計算科学を用いたシミュレーション技術を用いて新しい材料を開発する手法が知られており、例えば、鉄鋼や非鉄金属等の金属材料などの開発においてはシミュレーション技術が頻繁に用いられています。例えば、図1でも従来型の材料の開発でも、材料設計の段階から得られた候補材料に対してシミュレーションを行うことが示されています。

このようなシミュレーション手法は、具体的な自然現象に対して、自然科学の支配方程式、例えば、第一原理計算（実験データや経験的なパラメータを使用せず、量子力学の基本法則に基づいて物質の性質を計算する手法）などを計算機で解くことにより実現することができます。つまり、従来から用いられているシミュレーション手法では、既に知られた自然科学的な方程式（例えば、シュレーディンガーの方程式等）を適用して、コンピュータ等を用いて演繹的手法によって物質のさまざまな性質を導き出すことができます。

これに対して、マテリアルズ・インフォマティクスでは第4の科学と言われるデータ科学を用いています。MIでは、機械学習・深層学習においてデータの集合を準備し、そのデータ集合の特徴を示す統計モデルを推定し、別のデータに対して予測を実施します。そして、予測を行うのに、自然科学の支配方程式を必要としません。つまり、支配方程式が明らかでない現象であってもデータから統計モデルを用いて予測を行うことができます。このように、MIは、帰納的な点を重視しており、従来のシミュレーション手法とは異なる新たな科学（第4の科学）であると考えられています¹。

このようなマテリアルズ・インフォマティクスは、比較的最近開発が始まった領域で、米国で2011年にオバマ元大統領がMaterials Genome Initiative（MGI）を発表したことから始まるとされています。その後、欧州・日本・中国等で開発が急速に進められています。例えば、サムスン電子とMITによる全固体電池の材料探索が有名で、計算機によるシミュレーションによって超イオン伝導体となる硫化物系材料を僅か数ヶ月で発見したそうです²。また、日本でも、JST、NEC、東北大学等による決定木を用いたスピノ熱電材料開発³もMIによる開発事例として知られています。

1 藤井幹也、「マテリアルズ・インフォマティクスの意義と新材料開発」、応用物理、2022年、91卷（11号）、p.688-692

2 Y. Mo, et al., Chem. Mat., 24(1), 15-17 (2012)

3 Y. Iwasaki et al., Machine-learning guided discovery of a new thermoelectric material, Sci. Rep., 9, 2751 (2019)

Q2

マテリアルズ・インフォマティクスによる開発の成果は特許で保護されますか？特に、マテリアルズ・インフォマティクスにより得られた新規材料は特許で保護されますか？

A2

1. まず、MIの技術要素として、大別すると、MIのターゲットである材料（MIにより得られた材料）、MIの目的（設計・予測・プロセス・計測等）、MIの要素技術（データ駆動型の人工知能）、MIにより得られる材料の用途（半導体、電池関連、素材、医薬品関連等）が挙げられます。2019年の調査結果になりますが、特許庁が「令和元年度特許出願技術動向調査」においてマテリアルズ・インフォマティクス分野の特許出願の調査分析を発表しており、この中で、日本、米国、欧州、中国等の出願人国籍毎のMI関連の特許出願などの調査結果が示されています。

上記のMIの技術要素の内、MIに用いるのに適した物性などの予測システムや計測方法、機械学習や深層学習を適用したデータ解析手法・手段や、データ処理手段等は、所定の要件を満たせば、AI関連技術として特許による保護が可能です⁴。

一方、MIにより得られた材料自体について特許として保護されるのかは議論があるところと思われます。上記のように、従来型の材料開発では、実験や、自然科学の支配方程式をベースにしたシミュレーションを繰り返して、特定の性能や機能を持つ新規の材料や物質が得られますが、こうして得られた新材料は実験を通してこれら性能を有することが実証されています。

これに対して、MIによる材料開発では、AIをはじめとするデータ科学を駆使して、統計モデルを用いて予測することにより、所定の機能を持つと推定される候補となる材料（材料群）が選定され、更に選定された候補材料群に対してシミュレーションを行い、当該機能を持つと推定される候補材料が選定されます。このような候補材料は、実際に所定の機能を持つか、或いは実際に製造できるかは、この段階においては実験により立証されていませんので特許により保護するべきか否かが問題となると思われます。

また、化学やバイオ分野の特許出願においては、特許請求の範囲に記載された新規物質や新規化合物等が実施例で具体的に記載されているか、発明の詳細な説明や実施例で当該新規物質等の製造方法が具体的に記載されているかが詳細に審査されます。もし、当該新規物質の製造方法が記載されていない場合は実施可能要件を充足しないと認定され、また、特許請求の範囲には非常に広い範囲の新規物質が記載されているのに対して、実施例ではその内的一部しか記載されていない場合はサポート要件を充足しないと認定されます。

このように、化学やバイオ分野の特許出願では、従来の実験やシミュレーション手法をベースにして得られた成果物である新規物質等に対しても記載要件が厳しく適用されますので、MIにより得られた所定の機能を持つと推定される候補材料に対しては記載要件が更に厳しく適用されるべきとの意見が出ることも予想されます。

この点について、MIにより得られた材料については、特許庁が発行したAI関連技術等に関する「特許・実用新案審査ハンドブック」事例集（以下「事例集」とも言います。）の「発明の詳

4 AI関連技術に係る特許出願について、特許・実用新案審査基準を適用したときの運用の例示として、特許・実用新案審査ハンドブックの附属書A・附属書Bに合計25の事例が掲載されています。

細な説明及び特許請求の範囲の記載要件に関する事例」において、「AIによりある機能を持つと推定された物の発明」という位置づけで記載されています。

上記の事例集には、まず、「AIによりある機能を持つと推定されていることのみをもって、記載要件を満たしていないとは判断されない」と記載されており、MIにより得られた材料であっても所定の要件を満たせば特許が可能であることが記載されています。また、同事例集には、AIによりある機能を持つと推定された物を特許請求している場合について、実施可能要件・サポート要件を満たすには、以下の①～③のいずれかが必要であると明記されています。

- ① 実際に製造した物の評価を明細書等でされている。
- ② AIの示す予測値の予測精度が明細書等で検証されている。
- ③ AIによる予測結果が実際に製造した物の評価に代わり得るとの技術常識が出願時にあった。
(以下では、上記の①等を、「要件①」等のようにも言います。)

ここで、同事例集には「AIによりある機能を持つと推定された物の発明」の事例として、要件①～③のいずれも満たさない場合の事例が事例51として記載されており(2019年1月に上記事例集に追加されました)、更に、要件①～③の一部を満たす場合の事例が事例52として2024年3月にAI関連技術の事例の充実化を目的として追加されました。

そこで、事例52の概要について以下にまとめます。

2. 事例52について

(1) 事例52は蛍光発光性化合物に関する特許出願の例で、特許請求の範囲には以下の発明が記載されています(下線は筆者が付けました)。

【請求項1】発光ピーク波長が540nm以上560nm以下であり、蛍光寿命が5μs以上20μs以下である発光特性を有する、蛍光発光性化合物。

【請求項2】化合物Aである、請求項1に記載の蛍光発光性化合物。

【請求項3】化合物Bである、請求項1に記載の蛍光発光性化合物。

また、その明細書には以下の記載があります。

「蛍光発光性化合物は、有機EL素子の発光材料等に使用され、化学構造が異なるさまざまな化合物が公知であるが、発光ピーク波長が540nm以上560nm以下であり、蛍光寿命が5μs以上20μs以下である発光特性を有するものは知られていなかった。」

「本発明は、機械学習の技術を用いて前記発光特性を有する蛍光発光性化合物を提供しようとするものである。」

更に、事例52における明細書には、機械学習について実施例1が記載されており、機械学習によって予測された化合物について実施例2が記載されています。

「実施例1：公知の蛍光発光性化合物の化学構造と発光特性とを対応させたデータを学習データとして機械学習を行い、発光特性から化学構造を予測可能な学習済みモデルを作成した。そして、上記学習済みモデルを用いて、発光ピーク波長が540nm以上560nm以下であり、蛍光寿命が5μs以上20μs以下である発光特性を有する蛍光発光性化合物の化学構造を予測させたところ、新規の化学構造を有する化合物A、Bが予測された。」

「実施例2：化合物Aの製造方法を示し、その製造方法を用いて化合物Aを製造した。」

当該化合物Aの発光特性を測定したところ、発光ピーク波長が545nmであり、蛍光寿命が12μsであった。」

事例52の特許請求の範囲の記載と、実施例の記載の関係を模式的に表した図2を以下に掲載します。

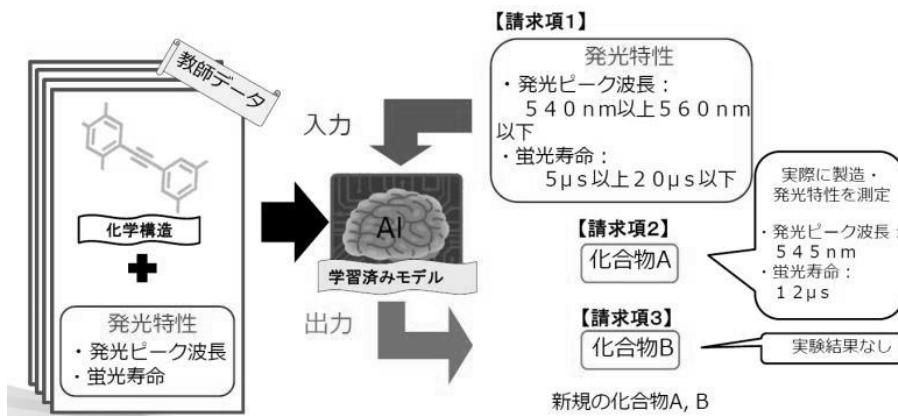


図2

「AI関連技術に関する事例の追加について」(特許序審査第一部調整課審査基準室)から抜粋

(2) また、事例52には、本事例の「前提」として以下のように記載されています。

[前提] 化合物の発明は、一般に化学構造式の情報からその化合物をどのように製造するのか、どのような活性を有するかを理解することが比較的困難であることが出願時の技術常識である。また、化合物の技術分野において、学習済みモデルの予測結果が実際の実験結果に代わりうることは、出願時の技術常識でないものとする。そして、化合物Bの化学構造は、化合物Aや公知化合物の化学構造と類似しておらず、これら化合物の製造方法や発光特性から化合物Bの製造方法や発光特性を推測することは困難であるものとする。

これら明細書の記載と技術常識等の前提から、事例52において、以下の拒絶理由が出されること、及び出願人の対応が示されています。

[拒絶理由の概要]

請求項1、3：実施可能要件違反、サポート要件違反；請求項2：実施可能要件違反、サポート要件違反はない

化合物の発明は、一般に化学構造式の情報からその化合物がどのような活性を有するかを理解することが比較的困難であることが出願時の技術常識であるところ、学習済みモデルの予測結果が実際の実験結果に代わりうるとの技術常識が出願時にあったわけではなく、発明の詳細な説明をみても、本願の学習済みモデルが化合物A以外について高い精度で発光特性を予測できることは検証されておらず、結局、実際に発光特性を測定しない限りその発光特性は不明であり、当業者であっても、化合物A以外の上記予測された化合物が上記目標発光特性を有しているか否かを理解することができないから、化合物A以外については、上記目標発光特性を有する化合物の発明を実施することができる程度に明細書等が記載されているとはいえない。

[出願人の対応]

出願後に、請求項3に係る発明の蛍光発光性化合物を製造し、学習済みモデルの予測を裏付け

る試験結果を記載した実験成績証明書を提出して、本発明の課題を解決できる旨の主張をした場合であっても、発明の詳細な説明の記載不足を補うことにはならず、拒絶理由は解消しない。請求項3を包含する請求項1に係る発明についても同様である。

(3) このように、事例52からは、MIにより得られた材料に関する発明については、要件①の実際に製造した物の評価を出願時の明細書等でされている場合は特許査定を得ることが可能であるものの、出願時の明細書等で実験結果が記載されていない場合は、出願後に試験結果を提出しても、実施可能要件違反、サポート要件違反を解消することができないことが分かります。

この点に関連して、実際にMIにより得られた材料について特許出願されている件について筆者が簡易的な調査を行って確認したところ（J-PlatPatで検索）、MIにより得られた材料について特許査定が得られた発明は、実施例で具体的な実験結果が記載された発明でした。以下にMIにより得られた材料についての特許出願の実際の例をあげます。

3. マテリアルズ・インフォマティクス特許の実際

(1) まず、特願2022-57548（2022年3月30日出願、2025年8月4日特許査定）について、出願時の請求項1では、「一般式(1)で表される構造を含む置換基を少なくとも2つ有するとともに、メチレン基に結合した第1級アミノ基を少なくとも2つ有するアミノ化合物。」と記載しており、明細書の課題解決手段として次のように記載していました。

「本願の発明者らは、低伝送損失に寄与する材料開発を進める中で、前記の機械学習を使用した誘電正接の評価モデルを検討及び採用しながら、従来からの先技技術で開示されてきたアミノ化合物を用いた場合よりも低誘電正接を達成できるような新規なアミノ化合物について鋭意検討した結果、特定の多分岐アルキル構造を有するとともに、メチレン基に結合した第1級アミノ基を所定数有するアミノ化合物を用いることが有効であることを知見して、本発明を完成させた。」

これに対して、第1回拒絶理由通知において、上記の請求項1に対して、サポート要件違反、新規性・進歩性欠如、明確性違反が指摘され、サポート要件について次のように認定されました。

「本願明細書の実施例において、上記課題を解決できることが具体的に示されているのは、化合物A～Gに示される、アミノ化合物に対してごく一部の化合物を使用した場合のみであり、当該化合物以外のアミノ化合物を使用した場合に、上記課題を解決できるか否かについては何ら示されていない。・・・しかしながら、化合物の構造等が異なれば、それによって示される物性も異なることは本願出願時における技術常識であり、本願明細書において、ごく一部の化合物を使用した場合の物性しか記載されていないことを鑑みれば、上記課題を解決するためには、特定の化合物を使用する必要があるものと認められる。」

上記拒絶理由に対して、出願人は、実施例で具体的な化合物の合成例と誘電正接の実測値が示されている化合物に限定して、特許査定が得られました。

(2) 次に、特願2022-45845（2022年3月22日出願、2024年9月18日登録）には、MIの技術を用いて、良好な特性を有し得る化合物を効率的に得ることができる情報処理方法等を提供することを目的とする発明について記載されており、その出願時の特許請求の範囲には、物のクレーム（発光素子、発光性化合物）と製法のクレーム（発光性化合物の製造方法）が記載されていましたが、物のクレームに対して、審査及び拒絶査定不服審判では、明確性、サポート要件、

実施可能要件違反が指摘され、最終的に製法クレームについて特許されました。

この特許出願では、既知の化合物と候補化合物についての複数の分子記述子を入力して、所望の性能であるスペクトル幅を予測する機械学習モデルが用いられています。この特許出願の明細書には、この学習モデルは、複数の分子記述子の値と、スペクトル幅とが対応付けられた訓練データを用意し、当該訓練データを用いて未学習のモデルを機械学習させることにより生成することが記載されています。

ここで、分子記述子とは、化合物の持つ構造的特徴や物理化学的特性等を計算機で扱いやすくするために数値化したもので、公知の種々のソフトウェアを用いて求められますが、本出願ではmordredというソフトウェアにより分子記述子を計算することが記載されています。そして、mordredにより、化合物の構造的特徴や物理化学的特性に関連する複数の分子記述子が算出されます。また、スペクトル幅については、量子化学計算によるスペクトル幅や実測値を用いることが記載されています。

こうして学習モデルから抽出された候補化合物について、所望のスペクトル幅の範囲に含まれる化合物群とそうでない化合物群について、各化合物が有する複数の分子記述子の組み合わせでマッピングして、所望のスペクトル幅の範囲を与えると推測される化合物群の分子記述子の範囲を特定することで、発光性化合物を規定しています。具体的には、発光性化合物に関わるクレームを以下に記載します。

【請求項4】

mordredによる分子記述子のSpDiam_Aが5.0以上、AATSC2cが0.003以下、MATS5sが0.17以下、GATS6cが0.6以上、及びAETA_betaが1.6以下を満たす

発光性化合物。

上記請求項で記載されているSpDiam_A、AATSC2c等は、分子記述子の種類であり、それぞれは、分子構造の複雑さ、環の数、芳香環、ヘテロ元素に関するパラメータであるとされています。

上記請求項4等に対して、拒絶査定不服審判の審理では、複数のmordredによる分子記述子の数値範囲が限定されただけでは、発光性化合物の構造を理解することが困難であるとの明確性違反を指摘されると共に、実施可能要件及びサポート要件違反も指摘され、サポート要件について以下のように認定されました。

「請求項4～6は、複数のmordredの分子記述子により規定される発光性化合物を包括的に記載しているが、発明の詳細な説明には、かかる発光性化合物の具体例として、特定の化合物を記載するのみであり・・・、それ以外の請求項4～6に係る発光性化合物については、何ら具体的に記載していない。そして、・・・、複数のmordredによる分子記述子の数値範囲が限定されただけでは、発光性化合物の構造を理解することは困難であり、請求項4～6に係る発明の範囲まで、発明の詳細な説明に開示された内容を拡張ないし一般化するための根拠も見出せない。」

したがって、請求項4～6に係る発明は、発明の詳細な説明に記載した範囲を超えるものであり、発明の詳細な説明に記載したものでない。」

3. まとめ

このように、事例52や、現在の特許庁の審査の運用からすると、MIにより得られた材料に関する発明については、現時点では、実施可能要件・サポート要件の充足には、実験結果が必須であるということができます。

一方、今後、要件③の「AIによる予測結果が実際に製造した物の評価に代わり得るとの技術常識」が形成されれば、その技術常識に基づいて実施可能要件・サポート要件の判断がされる可能性が出てくることも考えられます。この点については、今後の企業や大学、研究機関等での研究開発の蓄積にもよると思われますが、例えば、使用している学習モデルにおけるAIの予測値の精度等について技術水準と共に明細書中で詳細に記載することで、審査において要件③の充足性について主張する場合の一助になり得ると考えられます。

また、前述の事例52では、請求項2と3で夫々单一の化合物A、Bが特許請求されており、前提として、「化合物Bの化学構造は、化合物Aや公知化合物の化学構造と類似しておらず、これら化合物の製造方法や発光特性から化合物Bの製造方法や発光特性を推測することは困難であるものとする」とされていますが、化合物Aと類似している化合物、或いは、これらを合理的な範囲で含む一般式の化合物について特許請求する場合に、化合物Aと類似する化合物であっても発明の課題を解決し得る具体的な理由を合理的に説明して、单一の化合物よりも広い範囲の特許請求の範囲で権利取得にチャレンジすることも考えられます。

以上