## AI のるつぼ:医薬品・化学イノベーション における強靭なグローバル特許戦略の構築

Gemini Deep Research

## エグゼクティブサマリー

本レポートは、人工知能(AI)が医薬品および化学分野の研究開発を再定義する中で、企業が直面する知的財産(IP)の複雑な課題について、経営層向けの戦略的分析を提供する。中核的な課題は、AI の確率論的で「ブラックボックス」的な性質と、人間中心で厳格な既存の特許法理との間に存在する根本的な乖離である。この課題を克服することが、AI 創薬時代における競争優位性の源泉となる。

米国特許商標庁(USPTO)、欧州特許庁(EPO)、日本国特許庁(JPO)は、この新しい技術パラダイムに対してそれぞれ異なるアプローチを採用しており、グローバルな事業展開を行う企業には、各法域の思想的背景を理解した上で、多角的な視点から特許出願明細書を作成する戦略が不可欠である。USPTOは「人間による多大な貢献」を重視し、EPOは「技術的効果」を絶対的な要件とし、JPOは「ハードウェアとソフトウェアの協働」を求める。これらの要件を同時に満たす「三言語」対応の特許戦略が、グローバルな権利保護の鍵を握る。

本レポートで提示する戦略的必須事項は三つの柱から成る。第一に、人間の発明への貢献を証明するための、プロンプト設計から AI 出力の評価・改良に至るまでの全プロセスの徹底的な文書化。第二に、AI が生み出した最終生成物(化合物や治療法)は特許で保護し、その生成プロセス(AI モデルのアーキテクチャや独自の学習データ)は営業秘密として秘匿する、ハイブリッド型の IP 保護モデルの構築。第三に、これらの戦略を組織全体で実行するための、明確な役割定義、契約管理、発明開示プロセスを含む、積極的な社内 IP ポリシーの策定である。

結論として、AI 創薬時代における成功は、AI モデルの計算能力そのものよりも、その生成物を保護するために構築される戦略的・法的な枠組みの堅牢性に大きく依存する。AI を単なるツールとしてではなく、IP 戦略と一体化した経営資源として捉え、本レポートで詳述する法的・技術的課題に積極的に対処することが、未来の市場を勝ち抜くための絶対条件となる。

## I. 新たなフロンティア: AI 駆動型研究開発における特許 性の基礎的ハードル

本セクションでは、ライフサイエンス分野における AI 支援型特許出願の根底にある 3 つの基本的な法的課題を確立する。表面的な規則を超え、それぞれの課題が持つ深い戦略的意味を探求する。

#### A. 人間の必須要件:機械認知時代における発明者性の定義

AI 支援発明に関する特許戦略の出発点は、誰が「発明者」たり得るかという根本的な問いである。世界中の特許制度は、歴史的に人間の創造的活動を奨励することを目的として構築されており、この原則はAI 時代においても揺らいでいない。

#### 中核原則: AI は発明者になれない

AI システム自体が特許の発明者として記載されることは認められない。この原則は、AI システム「DABUS」を発明者として記載した一連の特許出願が、米国(Thaler v. Vidal 事件)、欧州、英国、日本、オーストラリアを含む世界各国の特許庁および裁判所によって一貫して拒絶されたことで、国際的に確固たるものとなった 1。特許法は、あくまで

人間の創意工夫にインセンティブを与え、報いるために設計されているからである<sup>2</sup>。

#### 真の戦場:「人間による多大な貢献」

したがって、法的な論点は、人間の関与が必要かどうかではなく、どの程度の人間の貢献があれば発明者として認められるか、という点に移る。この点に関して、USPTO が 2024 年 2 月に公表した「AI 支援発明の発明者資格ガイダンス」は、極めて重要な指針を示している。このガイダンスは、AI 支援発明であっても、少なくとも一人の自然人が各請求項の発明の概念形成に「多大な貢献(significant contribution)」を果たしていれば、特許性を有することを明確にした 1。

Pannu ファクターによる「多大な貢献」の分析

USPTO は、「多大な貢献」の有無を判断するにあたり、共同発明者性の判断で伝統的に用いられてきた\*Pannu v. Iolab Corp.\*事件の判例に基づく3つの要素(Pannu ファクター)を適用するとしている11。発明者と認められるためには、以下のすべてを満たす必要がある。

- 1. 発明の概念形成または実施化に対して、何らかの重要な方法で貢献したこと。
- 2. 発明全体と比較して、質的に些細ではない貢献をしたこと。
- 3. 他の発明者に対して、周知の概念や技術水準を単に説明する以上の貢献をしたこと。

実務上の適用: 貢献とみなされる行為、みなされない行為 この基準に基づくと、以下のような行為が発明者性の判断に影響を与える。

#### • 不十分な貢献:

- 単に課題を認識し、それを AI システムに提示するだけでは、発明の概念形成への貢献 とはみなされない<sup>2</sup>。
- o AI システムを単に所有または監督しているだけでは、発明者とは認められない。
- AI の出力を認識し、その価値を評価しただけでも、特にその有用性が当業者にとって 自明である場合には、発明者とはならない<sup>2</sup>。

#### ● 十分な貢献:

- 特定の課題に対して特定の解決策を引き出すために、具体的かつ詳細なプロンプトを 構築すること <sup>6</sup>。
- $\circ$  AI の出力に対して、重要な修正や改良を加えること  $^2$ 。
- 。 特定の課題を解決する目的で、AI システムを設計、構築、またはトレーニングすること  $^6$ 。

#### 新たな立証責任の発生

USPTO は、このガイダンスが発明者性に関する「基準を厳格化するものではない」と公式に述べている 19。しかし、実務上の現実は、AI の使用が発明者に対して

事実上の立証責任の加重をもたらしている点にある。従来のツール(例えば、計算機や化合物 ライブラリのスクリーニングソフトウェア)の使用が人間の発明への貢献を疑わせることはな かった。しかし、AI はその生成能力ゆえに、異なる見方をされる。審査や訴訟の場面では、主要な創造的役割を担ったのは人間ではなく AI であるという前提が、暗黙のうちに形成される可能性がある。これにより、出願人は、自らの「多大な貢献」を積極的かつ綿密に文書化し、立証する責任を負うことになる。

この変化は、研究開発の記録方法に重大な影響を及ぼす。単に課題を AI に提示するだけでは発明者性が不十分であるというガイダンスの明確な線引き <sup>6</sup> は、研究者が自身の知的貢献の証拠を残す必要性を高める。反復的なプロンプト設計のプロセス、特定の AI 出力をさらなる開発対象として選択した論理的根拠、そして AI 生成後に行われた人間主導の修正。これらを記録した実験ノートは、もはや単なる実験記録ではなく、発明の概念が人間の精神から生まれたことを証明する極めて重要な法的文書へとその性質を変える。これは、研究開発ドキュメンテーションの本質における、AI 時代特有の深刻な変化である。

## B. ブラックボックスの解明:記載要件と実施可能要件の充足

特許制度は、発明の独占権を与える代償として、その技術内容を社会に開示することを求める。この「開示の代償」は、特許法における記載要件(Written Description )と実施可能要件

(Enablement) として具体化されている。AI 支援発明は、この点で特有の課題を突きつける。

中核的対立:AI の確率論的性質と法の再現性要求

特許法は、その発明の属する技術の分野における通常の知識を有する者(当業者、POSA)が、その発明を実施(製造および使用)できる程度に、明細書に発明の詳細な説明を記載することを要求している(米国特許法第 112 条)1。一方で、現代の AI モデルの大きな利点の一つは、人間の創造性を模倣し、同じ入力から多様で実行可能な異なる出力を生成できる確率論的な性質にある。この本質的な予測不可能性は、法が要求する再現性の要件と真っ向から対立する1。

「ブラックボックス」問題

複雑なニューラルネットワークの内部プロセスを決定論的に説明することは、しばしば不可能である。この「ブラックボックス」問題は、発明がどのように機能するかを第 112 条が求める水準で説明することを困難にする 1。

開示における戦略的解決策

この課題に対処するため、出願人は以下の戦略を採る必要がある。

- 1. **入力と出力に焦点を当てる**: 特許出願明細書は、制御および観察可能な要素、すなわち、 モデルへの具体的な入力、出力に対して行われた処理、そして具体的な結果に焦点を当て るべきである <sup>1</sup>。
- 2. モデルパラメータの文書化と制御: 再現性を高めるため、発明者は使用した正確なプロンプト、AI モデルの具体的なバージョンを記録し、モデルのサンプリングパラメータを制御する必要がある。これには、出力のランダム性や多様性を司る top-k、top-p、temperature といった設定が含まれる。これらの値を低く設定することで、出力はより限定的かつ予測可能になり、実施可能要件の充足に寄与する。
- 3. **学習データ特性の開示**: 特に欧州特許庁(EPO)では、技術的効果が学習データに依存する場合、データセットそのものの開示は不要だが、当業者が同様のデータセットを作成できる程度に、その*特性*を詳細に開示することが求められる<sup>21</sup>。

#### イノベーションと特許性の戦略的トレードオフ

実施可能要件を満たすために AI の出力を再現可能にするという要求は、イノベーションの目標とは逆行しかねない戦略的選択を企業に強いる。特許性を確保するために、企業は AI の創造的可能性を意図的に抑制し、より予測可能で、したがってより説明しやすい出力を生成するように AI を「単純化」する必要に迫られるかもしれない。

この状況は、研究開発戦略における新たなジレンマを生む。最も画期的な発見は、AI モデルが高い可変性(高い temperature や top-p 設定)で動作し、従来とは異なる化学空間を探索する中で生まれる可能性がある」。しかし、そのようなモデルからの出力は、定義上、安定した再現が困難であり、実施可能要件違反(第 112 条に基づく拒絶や無効)という重大なリスクを伴う」。このリスクを軽減するため、法務部門は研究開発チームに対し、当業者が結果を再現できるよう、可変性パラメータを下げるよう助言するだろう」。これにより、AI の探索能力を最大

化したい研究開発チームと、その能力を制約してでも得られた IP の防御可能性を確保したい法務チームとの間に、根本的な緊張関係が生まれる。この AI 時代特有の弁証法の中で、最適なバランス、すなわち、新規性と進歩性を満たすに足る創造性と、実施可能要件を満たすに足る予測可能性を両立させる地点を見出すことが、勝利への鍵となる。

#### C. 自明性の再定義: AI が予測不可能なものを予測する時

特許を取得するためのもう一つの重要な要件は、発明が「非自明 (non-obvious)」であること、すなわち、その分野の当業者にとって先行技術から容易に思いつくものではないことである。AI の高度な予測能力は、この非自明性の判断に新たな複雑さをもたらしている。

#### 課題:AIによる予測と自明性

AI モデルは、膨大な先行技術データを解析し、既知の化合物への改良や、新たな用途を提案することができる。これらの提案は、後から見れば自明であったと判断されるリスクをはらむ 1。実際に 2024 年には、AI が設計したキナーゼ阻害剤に関する特許が、1998 年の化合物との構造的類似性を理由に拒絶されており、このリスクが現実のものであることを示している 4。 対抗策: AI の「ブラックボックス」を非自明性の根拠とする

発明が非自明であると認められるためには、先行技術が「成功の合理的期待(reasonable expectation of success )」を与えなかったことを示す必要がある。もし AI モデルが、確立された構造活性相関から逸脱するような予期せぬ治療用途を特定した場合、その発見は非自明であると主張できる可能性がある。

判例からの示唆: In re Cyclobenzaprine 事件

AI 登場以前の判例ではあるが、連邦巡回控訴裁判所(CAFC)の In re Cyclobenzaprine 事件の判決は、この点について強力な類推の根拠を提供する。同裁判所は、先行技術には重要な薬物動態/薬力学(PK/PD)関係に関する知見が欠けており、当業者は成功の合理的期待を持てなかったとして、新しい薬物製剤を非自明であると判断した 4。この論理は、AI が未知の生物学的関係を発見した創薬発明に直接適用可能である。AI の「ブラックボックス」内での推論プロセスが、人間の専門家の予測からいかに逸脱しているかを明確に説明できれば、それが非自明性の強力な証拠となり得る 4。

## Ⅱ. グローバル・パッチワーク:米国、欧州、日本の特許 庁の航海術

本セクションでは、最も重要な3つの特許法域の比較分析を行い、それぞれの思想的相違点を 浮き彫りにし、グローバルに有効な特許出願明細書を作成するための指針を提供する。

#### A. 米国(USPTO): 人間による貢献と実用的な応用の重視

米国の特許制度は、発明のプロセスにおける人間の役割と、発明がもたらす具体的な利益に重きを置いている。

#### 発明者性

USPTO の審査において最も重要なのは、セクション I.A で詳述した通り、自然人による「多大な貢献」である 1。

主題適格性(米国特許法第 101 条)

Al 関連発明は、Alice/Mayo フレームワークとして知られる二段階のテストによって主題適格性が判断される 26。

- 1. ステップ 1: 請求項は、判例法上の例外(抽象的アイデア、自然法則、自然現象)に向けられているか? AI アルゴリズムはしばしば抽象的な数学的概念として、また AI が発見した相関関係(例:バイオマーカーと疾患の関連性)は自然法則として扱われる傾向がある1。
- 2. ステップ 2: もしそうであれば、請求項は、その例外を特許適格な\*実用的な応用 (practical application ) \*へと転換する「発明概念 (inventive concept )」を含んでいるか? <sup>29</sup>。単に既知のプロセスに AI を適用するだけでは不十分であり、請求項はコンピュータ機能の改善や特定の治療方法など、具体的な技術的応用を示す必要がある <sup>1</sup>。

#### 最近のガイダンス(2024 AI SME Update)

USPTOは、発明のプロセスで AI を使用したという事実自体は適格性の判断に影響せず、あくまで判断の対象は請求項に記載された発明そのものであることを明確にした 31。また、審査官に対し、人間の精神内で実行することが現実的でないタスクを「精神的プロセス」として安易に拒絶しないよう注意を促した 28。

## B. 欧州特許庁(EPO): 「技術的性格」の至上主義

EPO の審査実務は、発明が具体的な技術分野において貢献するという「技術性」を一貫して要求する。

#### 中核的要件

AI 発明を含むすべての発明は、「技術的性格(technical character)」を有し、「技術的課題(technical problem)」を解決し、「技術的効果(technical effect)」を生み出さなければならない34。AI モデルは本質的に数学的なものであるため、「それ自体(as such)」では特許の対象とならない36。

#### COMVIK アプローチ

EPO は、発明の進歩性を判断する際に、発明の技術的性格に貢献する特徴のみを考慮する (COMVIK アプローチ) 37。AI アルゴリズムが、特定の技術的目的(例:医療スキャナーからの画像データの処理)に応用されたり、特定の技術的実装(例:専用ハードウェア上での実行)に適合されたりする場合、それは技術的性格への貢献とみなされる 39。

#### 厳格な開示要件

EPO は、請求項の範囲全体にわたって技術的効果を再現するために不可欠な場合、数学的手法や学習データの特性について詳細な開示を要求する 21。これは米国の基準よりも高いハードルである。

#### 発明者性

USPTO と同様に、EPO も人間の発明者を要求しており、DABUS の出願を拒絶している 3。

# C. 日本国特許庁(JPO):「自然法則」とハードウェア・ソフトウェアの協働

日本の特許法は、発明が自然界の法則を利用した技術的思想であることを基本とし、その具体的な実現形態を重視する。

#### 中核的要件

発明は「自然法則を利用した技術的思想の創作のうち高度のもの」と定義される **40**。ソフトウェア関連発明については、これが「ハードウェア資源を用いて具体的に実現されている」情報処理であると解釈される **40**。

#### 特許適格性

学習済みモデルに関する請求項は、特定の機能を実行するためにハードウェアと協働することが示されていない場合、単なる情報の提示(データやパラメータの集合)とみなされ、発明に該当しないとして拒絶されるリスクがある 40。「コンピュータを~として機能させるためのプログラム」といった形式で請求項を記載することが、一般的な戦略となっている 42。

#### 進歩性および実施可能要件

JPO は、AI 関連発明に関する多数の詳細な審査事例を公表しており、その基準の明確化に努めている 40。特に化学分野の発明においては、学習済みモデルによる予測結果だけでは実施可能要件やサポート要件を満たすには不十分で、実際の実験データが求められることがある、との見解が示されている 40。

#### 発明者性

東京地方裁判所および知的財産高等裁判所は、JPO の DABUS 出願拒絶を支持し、発明者は自然人でなければならないとの判断を下している 3。

#### D. 戦略的統合とグローバル出願

主要特許庁間の思想的な違いは、グローバルな権利化を目指す企業に対し、単一の出願戦略では不十分であることを示唆している。成功のためには、各法域の「言語」を話す、多面的なアプローチが必要となる。

#### 「三言語」対応の特許出願明細書

主要な特許庁間の思想的な相違は、画一的な出願書類が少なくとも一つの法域で困難に直面することを意味する。成功するグローバル出願は、各特許庁の言語を同時に話すように、いわば「三言語」で作成されなければならない。

この戦略的アプローチは、各特許庁が何を重視しているかを深く理解することから始まる。

- 1. USPTO は、発明概念における人間の役割に執着する<sup>6</sup>。したがって、明細書の「背景技術」や「発明を実施するための形態」のセクションは、人間が解決しようとした課題、プロンプトの巧妙さ、AI の出力に対する批判的分析など、人間の創意工夫の物語として記述されなければならない。
- 2. EPO は、発明が現実世界で生み出す技術的効果に執着する <sup>34</sup>。したがって、出願書類は、技術的課題(例:タンパク質構造予測における遅延の削減)を明確に述べ、AI の特定の特徴がどのように測定可能な技術的解決策(例:結合親和性予測の向上による治療効果の改善)を達成するかを詳述する必要がある。
- 3. JPO は、発明の*具体的な実装*に執着する <sup>40</sup>。 したがって、請求項と明細書は、AI ソフトウェアとハードウェア資源を明確に結びつけ、それらが協働してデータを処理し、結果を達成する様を記述しなければならない。

成功する出願は、これら三つの物語を一つの調和した文書に織り込む。それは、USPTO のために人間の発明者の物語を語り、JPO のために特定のハードウェア・ソフトウェアシステムの物語を語り、そして EPO のために具体的な技術的課題解決の物語を語るのである。

#### 表 1: AI 特許性フレームワークの比較分析(USPTO、EPO、JPO)

この表は、複雑な法制度の状況を一覧できる戦略的要約を提供し、経営層が主要市場における主要な相違点と課題を迅速に把握することを可能にする。これは、グローバルな出願戦略を計画し、リソースを配分するための重要なツールとして機能する。C レベルの役員や投資家は、市場横断的なリスクと機会を理解する必要がある。長文の法的分析は、中核的な相違点を見えにくくすることがある。比較を表形式で構成することにより、ガイダンスや判例の膨大な情報を、明確で比較可能なデータポイント(例:「適格性の主要なテストは何か?」)に集約す

る。この形式は、ある発明が EPO の高い技術的ハードルを越えるのに十分な強度を持つか、あるいは USPTO のフレームワークにより適しているかといった、迅速で高レベルの意思決定を促進する。

パラメータ	米国特許商標庁 (USPTO)	欧州特許庁 (EPO)	日本国特許庁 (JPO)
発明者性の基準	各請求項に「多大な 貢献」をした自然人	人間であることが必 須。AI は発明者に なれない <sup>36</sup>	自然人であることが 必須。発明は人間の 創造的活動である <sup>3</sup>
主題適格性テスト	Alice/Mayo の 2 段 階テスト: 1)判例 法上の例外か? 2) 実用的な応用を生み 出す発明概念がある か? <sup>26</sup>	「技術的性格」:技 術的課題を技術的効 果をもって解決する 必要がある <sup>34</sup>	「自然法則を利用した技術的思想の創作」。ソフトウェアとハードウェアの協働が要求される 40
開示における主要 な焦点	人間の貢献、プロン プト、論理的根拠の 文書化 <sup>1</sup>	技術的効果に不可欠 な場合のアルゴリズ ムと学習データ特性 の詳細な説明 <sup>21</sup>	具体的な実装の詳 細。ソフトウェア処 理とハードウェア資 源の明確な連携 <sup>40</sup>
ツールとしての <b>Al</b> の位置づけ	明確に許可。焦点は 使用されたツールで はなく、人間の貢献 にある <sup>2</sup>	許可されるが、AI ツールの応用は本質 的に技術的でなけれ ばならない <sup>36</sup>	許可。コンピュータ ソフトウェア (CS) 関連発明の 一種と見なされる <sup>47</sup>
画期的なガイダンス	AI 支援発明の発明 者資格ガイダンス (2024 年 2 月) <sup>9</sup> ; 2024 AI SME Update <sup>31</sup>	EPO 審査便覧(毎 年更新) <sup>21</sup>	JPO AI 関連技術の 審査事例(2024 年 3 月更新) <sup>44</sup>

## Ⅲ. モデル別分析:技術に合わせた IP 戦略の調整

本セクションでは、セクション I の一般原則を、基盤となる論文で特定された創薬に使用される特定の AI モデルタイプに適用し、分析を深める  $^{1}$ 。

#### A. 生成 AI (GAI):デノボ分子構造の保護

#### 機会

GAI は、自然界に存在しない全く新しい化学構造を創出する能力を持ち、これは新規性を主張する上で強力な基盤となる 1。新しい食品容器のデザインや非常灯を生成した DABUS システムは、この能力の好例である 5。

リスク:自明性

GAI が生成した分子が、先行技術や自身の学習データに含まれる既知の構造の自明な変形であるとみなされることが、主要なリスクである 1。構造の類似性が高いと、自明であるとの推定が働きやすくなる。

#### 戦略

特許出願においては、その新規分子が持つ予期せぬ特性や予測不可能な有用性を強調しなければならない。たとえ構造が類似していても、当業者は結果として得られる治療上の利益を合理的に期待できなかったため、特定の改変を行う動機がなかった、と主張すべきである。AIがその化合物に対して「ありそうもない標的や適応症」を発見したという事実は、非自明性の強力な証拠となる 1。

# B. グラフニューラルネットワーク(GNN)および予測モデル:主題適格性の航海

#### 技術

GNN は、原子をノード、結合をエッジとして表現する分子構造の分析に特化している。分子の特性、挙動、相互作用の予測に優れている 1。

法的罠:抽象的アイデアと自然法則

GNN の予測そのもの、例えば分子の部分構造と毒性の相関関係や、バイオマーカーと疾患の関連性を特定するだけの請求項は、米国特許法第 101 条の下で、特許不適格な抽象的アイデア(数学的モデル)または自然法則(自然な相関関係)として拒絶される高いリスクを伴う 1。 Ex parte Michalek 事件における PTAB の決定は、この典型例である。この事件では、AI ベースの肺がん予測ツールに関する請求項が、新規性・進歩性が認められたにもかかわらず、主題適格性を理由に拒絶された 33。

戦略:実用的な応用を請求する

請求項は、モデルの出力が実用的かつ現実世界で応用される様を記載するように作成されなければならない。

- 不適切な請求項:「GNN モデルを用いて薬物間相互作用を特定する方法。」
- 適切な請求項:「患者における疾患の治療方法であって、薬剤 A および薬剤 B を投与し、 患者の代謝データを GNN モデルで分析して有害な相互作用を予測し、有害な相互作用が 予測された場合に薬剤 A の投与量を変更することを含む、前記方法。」(「に基づく)。

この戦略は、抽象的アイデアを具体的な治療方法に統合し、Alice/Mayo テストの要件を満たすものである 29。

## C. トランスフォーマーモデル:新規用途と配列の特許化

#### 技術

トランスフォーマーモデルは、系列データにおける文脈やパターンの理解に優れており、科学文献の分析、アミノ酸配列からのタンパク質機能の予測、既知の医薬品の新規用途の特定などに強力なツールとなる 1。

#### 法的制約

既知の化合物の新規用途を発見しても、その化合物自体が再度特許の対象となるわけではない (In re Gleave 事件) 1。

戦略:使用方法を請求する

発明は、その化合物の新規な使用方法として請求されなければならない。例えば、「アルツハイマー病の治療方法であって、治療上有効な量の[既知の化合物 X]を投与することを含む、前記方法。」のように記載する。

#### 自明性の克服

鍵となるのは、その新規用途が予期せぬものであり、非自明であったことを示すことである。トランスフォーマーモデルが、その化合物の既知の特性と矛盾するか、または示唆されていない用途を特定した場合、これは In re Cyclobenzaprine 事件の論理と同様に、非自明性を主張する強力な根拠となる 4。タンパク質配列の場合、発明は、改変された免疫原性など、望ましいが非自明な特性を持つ配列を生成する新規な方法にあるかもしれない 55。

# IV. 先行技術の流砂: AI 学習データと公衆アクセス可能性

本セクションでは、極めて重要かつ未来志向の問い、すなわち「発明を生み出すために使用されたデータが、その発明を無効にするために使用され得るか?」について考察する。

## A. 先行技術の性質

先行技術とは、特許の有効出願日より前に「特許され、印刷された刊行物に記載され、公に使用され、販売され、またはその他公衆に利用可能であった」あらゆる情報を指す(米国特許法第 102 条) $^1$ 。これには、特許、学術論文、ウェブサイト、さらにはソーシャルメディアの投稿も含まれる $^{58}$ 。

## B. 学習データのジレンマ

AI モデルは、公開されている科学文献や特許データベースの全コーパスを含む、膨大なデータセットで学習される<sup>1</sup>。これは、2 つの重大な問いを提起する。

- 1. AI が生成したコンテンツは先行技術になり得るか? 答えはイエスである。AI が生成したコンテンツ(例:ブログ記事、技術論文)が公衆にアクセス可能な状態になれば、それは「印刷された刊行物」と見なされ、先行技術として引用され得る 56。
- 2. 学習データそのものが先行技術として引用され得るか? これはより複雑な問題である。鍵となるのは「公衆アクセス可能性(public accessibility)」という法的基準であり、これは当業者が合理的な努力をもってその文献を特定できることを要求する 1。

## C. アクセス可能性のスペクトラム

- 明確に公衆アクセス可能: 公開ウェブサイト、オープンアクセスジャーナル、公開特許データベースからスクレイピングされたデータは、アクセス可能であり、先行技術を構成する1。
- **グレーゾーン:プロプライエタリなデータベース**:多くの企業は、学習のためにライセンス契約を結んだプロプライエタリなデータベース(例:特定の化学ライブラリ)を使用している <sup>1</sup>。この情報は一般公衆にはアクセスできない。

非対称な先行技術ランドスケープ

特許審査の実務において、危険な非対称性が生まれつつある。USPTO の審査官は、先行技術調査に際して、公には利用できない商用データベースを使用することが知られている 62。これにより、審査官が出願人や一般公衆がアクセスできないプロプライエタリなデータベース内の文献を根拠に、特許出願を拒絶するというシナリオが生まれ得る。これは、「公衆に利用可能」な先行技術という定義そのものに挑戦するものである。

この状況は、新たな予測不可能なリスク要因を特許審査プロセスにもたらす。

- 1. 「印刷された刊行物」の法的基準は、公衆アクセス可能性である <sup>61</sup>。
- 2. ある企業が、公衆にアクセスできないプロプライエタリなライセンスデータセットで AI を学習させ、新規化合物を生成する。
- 3. 彼らが特許を出願すると、USPTO の審査官は、自身のアクセス権を持つ別のプロプライエタリな検索ツール(例: IEEE のデータを含む Innovation Q Plus)を使用して、そのツールの非公開コーパス内に類似の構造を発見する <sup>63</sup>。
- **4.** 審査官は拒絶理由を通知する。出願人は今、法的にアクセスも独立した検証もできない先 行技術文献に対して反論するという困難な立場に置かれる。

この非対称性は、企業が自社の先行技術調査を公開データベース以外にも拡大し、特許庁の調査環境を再現しようと試みる必要性を示唆するかもしれないが、それはコストがかかり、不可能に近い作業である。また、このような拒絶の公正性と法的妥当性について、根本的な法的問題を提起する。

## V. 戦略的プレイブック:強靭な社内 IP フレームワークの 構築

本セクションでは、これまでの法的分析を、AI 創薬分野で事業を展開する企業のための具体的かつ実行可能な戦略に落とし込む。

## A. 証拠としての発明プロセス:文書化と記録管理

#### 必須事項

発明者性の異議申し立てに対抗するため、企業はあらゆる重要な段階で人間による多大な貢献 を証明する、堅牢な証拠記録を作成しなければならない 1。

#### ベストプラクティス

- 1. **プロンプトの自動追跡**: すべてのプロンプトを、メタデータ(作成者、日時)やプロンプト設計・反復の論理的根拠とともに記録するシステムを導入する<sup>1</sup>。
- 2. 「なぜ」を文書化する: 人間の発明者の思考プロセスを記録する。なぜ特定の課題が選ばれたのか? なぜ AI の出力が特定の方法で改良されたのか? AI を導き、あるいはその出力を修正するために、どのような人間特有の専門的洞察が用いられたのか? 「。
- 3. **バージョン管理**: 実施可能要件を裏付けるため、AI モデルのバージョン、そのアーキテクチャ、そして発明的な出力を生成するために使用された特定のパラメータ(top-k、temperature など)を綿密に追跡する<sup>1</sup>。
- 4. プロンプトにおける「発明的な」言葉遣いを避ける: 万全を期すため、科学者には「優秀な化学者として振る舞い、新しい分子を発明せよ」といった、AI に発明の主体性を与えるようなプロンプトを避けるよう指示する。

## B. イノベーションチームの設計:発明者とデータサイエンティストの役割 定義

#### リスク

課題を定義する科学者(発明者)と、AI ツールを最適化するデータサイエンティストとの境界 線は曖昧になりがちである。USPTOは、特定の課題解決のために AI を設計、構築、またはト レーニングした人物が発明者になり得ると述べており 1、これは発明者性の誤認定と特許無効 のリスクを生む。

#### 戦略:明確な役割分担

- 1. ポリシーによる役割定義: 社内の AI ポリシーにおいて、データサイエンティストの役割を、実験を設計するのではなく実行する研究技術者に類似するものとして明確に定義する。彼らの焦点は、実装、コーディング、データ処理にあり、中核的な発明概念にはない、と定めるべきである¹。
- 2. 契約による形式化: データサイエンティストの雇用契約や業務委託契約には、彼らの役割が発明ではなく技術サポートであることを明記し、万一の場合に備えて、彼らが生み出した IP の権利を会社に強制的に譲渡する条項を含める 1。
- 3. **記録による物語の統制**: 会議の議事録、電子メール、発明開示書は、一貫して、主任科学者/発明者が AI の使用を指示し、出力に関する重要な決定を下したことを示すものでなければならない 1。

## C. ハイブリッド防衛:特許と営業秘密の統合

#### 中核戦略

最も洗練され、防御力の高いIP戦略は、特許か営業秘密かの二者択一ではなく、両者を協調させて階層的な保護を構築することである。

特許で保護すべきもの

AI の出力。これには、新規医薬品化合物、新規製剤、特定の治療方法が含まれる。これらは、 根底にある AI プロセスを開示することなく保護できる、個別具体的な発明である 65。

営業秘密として保護すべきもの

出力を生成するために使用されたプロセス。これが企業の「秘伝のタレ」であり、以下のようなものが含まれる。

- AI モデルの独自のアーキテクチャ
- 独自にキュレーションされたプロプライエタリな学習データセット
- 精密に調整されたモデルの重みとハイパーパラメータ
- 高度に最適化され、効果的なシステムプロンプト<sup>1</sup>

#### 業界事例

- アストラゼネカ: スタンフォード大学などのパートナーと協働し、AWS を利用して統一データハブを構築、データを FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) 原則に準拠させている。同社の戦略は、AI を研究開発を加速させる「思考のパートナー」として活用しつつ、主要なプロセスとデータソースを保護することに焦点を当てているように見える <sup>69</sup>。
- **エクセンシア**: 同社のビジネスモデルは、共同研究およびライセンス契約に基づいており、AI が生成した発見に関する IP 権は契約によって慎重に規定される。彼らが受け取る契約一時金やマイルストーン支払いは、同社の中核となる AI プラットフォームが非常に価値の高い保護された資産(おそらくは営業秘密)であり、その出力がパートナーにライセンス供与されていることを示唆している <sup>74</sup>。

「プラットフォーム vs. プロダクト」の **IP** 二元性

このハイブリッドな特許/営業秘密モデルは、AI 創薬企業が直面する根本的なビジネス上の二元性を反映している。すなわち、彼らは同時にテクノロジープラットフォーム企業であり、治療薬製品企業でもある。IP 戦略は、その両方を保護しなければならない。

この二元性を理解することは、IP 戦略の核心を突く。

- 1. 企業の長期的な競争優位性は、その AI プラットフォーム、すなわち独自のアルゴリズム、データ、ワークフローにある。これがイノベーションのエンジンである。これを特許で開示することはリスクが高く、困難である。したがって、プラットフォームに対しては営業秘密による保護が最重要となる 66。
- 2. 企業の価値は、プラットフォームが生成する製品、すなわち医薬品候補を通じて実現される。これらの製品は、市場での独占権を確保し、販売やライセンス供与を通じて収益を生

み出すために、特許によって保護されなければならない <sup>74</sup>。

- 3. プラットフォームを営業秘密で保護しなければ、競合他社に「エンジン」を模倣される。 製品を特許で保護しなければ、競合他社に「出力」をコピーされる。
- 4. したがって、成功する戦略には、並行して管理される 2 つの異なる、しかし相互に関連した IP ワークストリームが必要となる。すなわち、AI プラットフォームのための営業秘密プロトコルと、それが発見する治療資産のための特許出願パイプラインである。これは、従来の製薬企業が直面してきたものよりも、はるかに複雑な IP 管理の課題である。

# **D.** 積極的なポリシー策定: コーポレートガバナンスのためのチェックリスト

これまでの分析に基づき、企業は以下を含む包括的な社内 AI・IP ポリシーを導入すべきである。

- **1. プロンプトエンジニアリングと追跡**: プロンプト、その論理的根拠、メタデータを記録する自動システムの利用を義務付ける <sup>1</sup>。
- 2. **学習データのキュレーション**: 公開データとプロプライエタリデータの使用に関する明確 なポリシーを定め、データソースと前処理のステップを文書化する <sup>1</sup>。
- 3. **役割の定義**:「発明者」と「データサイエンティスト」の役割を明確に定義し、職務記述 書や契約書に反映させる<sup>1</sup>。
- 4. 発明開示プロセス: 発明者に AI システムとの対話内容を詳述し、「多大な貢献」を説明し、関連するプロンプトのログを添付することを具体的に要求する、改訂版の発明開示フォームを導入する 1。
- 5. **ハイブリッド IP 評価**: AI 駆動型のすべてのイノベーションについて、特許、営業秘密、またはその両方による保護の可能性を評価する正式なレビュープロセスを設ける <sup>66</sup>。

## VI. 結論と将来展望

#### 中核的必須事項の要約

AI 創薬時代に勝利を収めるためには、純粋に科学的な焦点から、技術と法を統合した戦略へのパラダイムシフトが求められる。その成功の柱は、文書化による人間の創意工夫の証明、断片化したグローバルな特許ランドスケープを個別に調整された出願で航海する能力、そして洗練されたハイブリッド IP 保護モデルの実装である。

#### 将来展望

- **進化する法基準**: 特許庁からの現行のガイダンスは反復的なものであり、技術の進歩や司 法判断の前例に応じて進化し続けるだろう<sup>2</sup>。企業は機敏性を保ち、これらの変化を注意 深く監視し続けなければならない。
- 説明可能な AI (XAI) の台頭: AI モデルが「ブラックボックス」でなくなるにつれて、AI の推論プロセスを説明する能力は、実施可能要件の課題を緩和するかもしれない。しかし、同時に、「驚くべき結果」がより予測可能になることで、非自明性を主張することがより困難になる可能性もある。
- 立法的介入の可能性: AI 支援発明を人間中心のモデルに押し込める現行の法的枠組みは、大きな緊張にさらされている。長期的には、AI が生成した発明のための sui generis (独自の) 保護形態を創設するか、発明者性を正式に再定義するために、立法的な変更が必要になるかもしれない<sup>3</sup>。これらの政策議論に積極的に参加する企業は、将来の IP ランドスケープを形成する上で、より有利な立場に立つことができるだろう。

#### 引用文献

- 1. Navigating the Future\_ Ensuring Patenta...pdf
- 2. Inventorship Guidance for AI Assisted Inventions Federal Register, 9月 14, 2025 にアクセス、
  - https://www.federalregister.gov/documents/2024/02/13/2024 02623/inventorship-guidance-for-ai-assisted-inventions
- 3. Al as an Inventor of Patents? IP High Court Judgment and the 2025 IP Strategic Program, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.aippi.org/news/ai -as-an-inventor-of-patents-ip-high-court-judgment-and-the-2025-ip-strategic-program/">https://www.aippi.org/news/ai -as-an-inventor-of-patents-ip-high-court-judgment-and-the-2025-ip-strategic-program/</a>
- 4. Al Meets Drug Discovery But Who Gets the Patent? DrugPatentWatch, 9 月 14, 2025 にアクセス、<a href="https://www.drugpatentwatch.com/blog/ai-meets-drug-discovery-but-who-gets-the-patent/">https://www.drugpatentwatch.com/blog/ai-meets-drug-discovery-but-who-gets-the-patent/</a>
- 5. Generative AI, drug discovery, and US patent law | DLA Piper, 9月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.dlapiper.com/en au/insights/publications/synthesis/2024/generative -ai-drug-discovery-and-us-patent-law">https://www.dlapiper.com/en au/insights/publications/synthesis/2024/generative -ai-drug-discovery-and-us-patent-law</a>
- 6. Use of Al Does Not Preclude Patentability, USPTO Guidance Affirms | Intelligence, 9月14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.shb.com/intelligence/client-alerts/ip-alerts/vogel-uspto-guidance-ai">https://www.shb.com/intelligence/client-alerts/ip-alerts/vogel-uspto-guidance-ai</a>
- 7. Artificial Intelligence and Patent Law | Congress.gov, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.congress.gov/crs product/LSB11251
- 9. USPTO Sets Forth Criteria for Al-Assisted Inventorship Publications Morgan

- Lewis, 9 月 14,2025 にアクセス、 https://www.morganlewis.com/pubs/2024/02/uspto-sets-forth-criteria-for-aiassisted-inventorship
- 10. USPTO issues inventorship guidance and examples for AI-assisted inventions, 9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.uspto.gov/subscription-center/2024/uspto-issues-inventorship-guidance-and-examples-ai-assisted-inventions">https://www.uspto.gov/subscription-center/2024/uspto-issues-inventorship-guidance-and-examples-ai-assisted-inventions</a>
- 11. Navigating the USPTO's AI inventorship guidance in AI-driven drug discovery PMC, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC12317375/
- 12. USPTO provides guidance on the patentability of AI-assisted inventions | White & Case LLP, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.whitecase.com/insight-alert/uspto-provides-guidance-patentability-ai-assisted-inventions">https://www.whitecase.com/insight-alert/uspto-provides-guidance-patentability-ai-assisted-inventions</a>
- 13. Al and inventorship guidance: Incentivizing human ingenuity and investment in AI-assisted inventions | USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.uspto.gov/blog/ai-and-inventorship-guidance-incentivizing
- 14. A Brief Explanation of the USPTO's Useful New AI-Assisted Invention Guidance, 9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.hunton.com/insights/legal/a-brief-explanation-of-the-usptos-useful-new-ai-assisted-invention-guidance">https://www.hunton.com/insights/legal/a-brief-explanation-of-the-usptos-useful-new-ai-assisted-invention-guidance</a>
- 15. Patent inventorship requires "significant contribution" by human Nixon Peabody LLP, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.nixonpeabody.com/insights/alerts/2024/02/15/patent-inventorship-requires-significant-contribution-by-human">https://www.nixonpeabody.com/insights/alerts/2024/02/15/patent-inventorship-requires-significant-contribution-by-human</a>
- 16. Inventorship guidance for AI-assisted inventions | USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/inventorship-guidance-for-ai-assisted-inventions.pdf">https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/inventorship-guidance-for-ai-assisted-inventions.pdf</a>
- 17. Artificial intelligence (AI) guidance update USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/business-methods-ai-guidance-sept-2024.pdf">https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/business-methods-ai-guidance-sept-2024.pdf</a>
- 18. USPTO Requires 'Significant Human Contributions' to Patent...- Fenwick, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.fenwick.com/insights/publications/uspto-requires-significant-human-contributions-to-patent-ai-assisted-inventions">https://www.fenwick.com/insights/publications/uspto-requires-significant-human-contributions-to-patent-ai-assisted-inventions</a>
- 19. FAQs on Inventorship Guidance for AI-assisted Inventions USPTO, 9 月 14,2025 にアクセス、https://www.uspto.gov/initiatives/artificial-intelligence/faqs
- 20. Patent Disclosures in the Age of Artificial Intelligence | Stanford Law School, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://law.stanford.edu/press/patent-disclosures-in-the-age-of-artificial-intelligence/">https://law.stanford.edu/press/patent-disclosures-in-the-age-of-artificial-intelligence/</a>
- 21. EPO updates guidelines for examining AI inventions Patent Lawyer Magazine, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://patentlawyermagazine.com/epo-updates-guidelines-for-examining-ai-inventions/">https://patentlawyermagazine.com/epo-updates-guidelines-for-examining-ai-inventions/</a>
- 22. Updated Guidelines for Al Inventions Hamilton, Brook, Smith & Reynolds, P.C., 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.hbsr.com/news-insights/updated-

#### guidelines-for-ai-inventions

- 23. In re Cyclobenzaprine Hydrochloride Extended-Release Capsule Patent Litigation (Fed. Cir. 2012) | McDonnell Boehnen Hulbert & Berghoff LLP JDSupra, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.jdsupra.com/legalnews/in-re-cyclobenzaprine-hydrochloride-exte-59687/">https://www.jdsupra.com/legalnews/in-re-cyclobenzaprine-hydrochloride-exte-59687/</a>
- 24. In Re Cyclobenzaprine Hydrochloride Extended-Release Capsule Patent Litigation, 9 月 14,2025 にアクセス、
  <a href="https://www.robinskaplan.com/newsroom/insights/in-re-cyclobenzaprine-hydrochloride-extended-release-capsule-patent-litigation">https://www.robinskaplan.com/newsroom/insights/in-re-cyclobenzaprine-hydrochloride-extended-release-capsule-patent-litigation</a>
- 25. IN RE: CYCLOBENZAPRINE HYDROCHLORIDE EXTENDED-RELEASE CAPSULE PATENT LITIGATION. (2012) FindLaw Caselaw, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://caselaw.findlaw.com/court/us-federal-circuit/1608878.html
- 26. 210 6-Patent Subject Matter Eligibility USPTO,9 月 14,2025 にアクセス、 https://www.uspto.gov/web/offices/pac/mpep/s2106.html
- 27. The Impact of Uncertainty Regarding Patent Eligible Subject Matter for Investment in U.S. Medical Diagnostic Technologies, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://scholarlycommons.law.wlu.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=4762&context=wlulr">https://scholarlycommons.law.wlu.edu/cgi/viewcontent.cgi?article=4762&context=wlulr</a>
- 28. USPTO Raises Bar for § 101 Rejections in AI Patents Dykema, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.dykema.com/news-insights/uspto-raises-bar-for-101-rejections-in-ai-patents.html">https://www.dykema.com/news-insights/uspto-raises-bar-for-101-rejections-in-ai-patents.html</a>
- 29. Patenting biomarker-related AI/machine-learning innovations Norton Rose Fulbright, 9 月 14,2025 にアクセス、
  <a href="https://www.nortonrosefulbright.com/en/knowledge/publications/feae79ea/patenting-biomarker-related-ai-machine-learning-innovations">https://www.nortonrosefulbright.com/en/knowledge/publications/feae79ea/patenting-biomarker-related-ai-machine-learning-innovations</a>
- 30. Overcoming Patent Challenges for Al/ML-Assisted Life Sciences (TechBio) Inventions: Strategies for Navigating Section 101 at the US Patent & Trademark Office | Mintz, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.mintz.com/insights-center/viewpoints/2231/2024-12-04-overcoming-patent-challenges-aimlassisted-life-sciences">https://www.mintz.com/insights-center/viewpoints/2231/2024-12-04-overcoming-patent-challenges-aimlassisted-life-sciences</a>
- 31. 2024 Guidance Update on Patent Subject Matter Eligibility, Including on Artificial Intelligence USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/ai-sme-update-2024.pdf
- 32. Understanding the 2024 USPTO Guidance Update on AI Patent Eligibility | Mintz, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.mintz.com/insights-center/viewpoints/2231/2024-07-24-understanding-2024-uspto-guidance-update-ai-patent">https://www.mintz.com/insights-center/viewpoints/2231/2024-07-24-understanding-2024-uspto-guidance-update-ai-patent</a>
- 33. PTAB Rejects AI-Driven Medical Patent Not for Novelty, But Eligibility, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.sheppardhealthlaw.com/2025/05/articles/artificial-intelligence/ptab-rejects-ai-driven-medical-patent-not-for-novelty-but-eligibility/">https://www.sheppardhealthlaw.com/2025/05/articles/artificial-intelligence/ptab-rejects-ai-driven-medical-patent-not-for-novelty-but-eligibility/</a>
- 34. Key Strategies for Obtaining Patents Under the EPO's New Al Guidelines Mintz,

- 9月14,2025 にアクセス、<u>https://www.mintz.com/insights-center/viewpoints/2231/2019-01-17-key-strategies-obtaining-patents-under-epos-new-ai</u>
- 35. Updated European Patent Office Examination Guidelines for AI Inventions Secerna LLP, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.secerna.com/insights/news/updated-european-patent-office-examination-guidelines-for-ai-inventions/">https://www.secerna.com/insights/news/updated-european-patent-office-examination-guidelines-for-ai-inventions/</a>
- 36. Artificial intelligence | epo.org European Patent Office, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.epo.org/en/news-events/in-focus/ict/artificial-intelligence
- 37. Technical contribution crucial in Alpatent | V.O. Patents & Trademarks, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.vo.eu/news/technical-contribution-crucial-in-ai-patent/">https://www.vo.eu/news/technical-contribution-crucial-in-ai-patent/</a>
- 38. What is Patent Drafting at the EPO? AI-related Inventions Solve Intelligence, 9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.solveintelligence.com/blog/post/patent-drafting-at-the-epo">https://www.solveintelligence.com/blog/post/patent-drafting-at-the-epo</a>
- 39. EPO Guidelines for Examination 2025 Solve Intelligence, 9 月 14,2025 にアクセス、https://www.solveintelligence.com/blog/post/epo-guidelines-2025
- 40. Latest updates on JPO's examination guidelines on AI-related inventions, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.managingip.com/article/2dpq33i12uao4731fb7y8/sponsored-content/latest-updates-on-jpos-examination-guidelines-on-ai-related-inventions">https://www.managingip.com/article/2dpq33i12uao4731fb7y8/sponsored-content/latest-updates-on-jpos-examination-guidelines-on-ai-related-inventions</a>
- 41. A Comparative Study on the Examination Practice of AI-related Patent Applications from a Multination | Article | Chambers and Partners, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://chambers.com/articles/a-comparative-study-on-the-examination-practice-of-ai-related-patent-applications-from-a-multination">https://chambers.com/articles/a-comparative-study-on-the-examination-practice-of-ai-related-patent-applications-from-a-multination</a>
- 42. AI 関連特許の審査基準と実務上の留意点 弁理士が解説する最新動向,9 月 14, 2025 にアクセス、
  https://www.evorix.jp/blog/ai%E9%96%A2%E9%80%A3%E7%89%B9%E8%A8%B1%E3%81%AE%E5%AF%A9%E6%9F%BB%E5%9F%BA%E6%BA%96%E3%81%A8%E5%AE%9F%E5%8B%99%E4%B8%8A%E3%81%AE%E7%95%99%E6%84%8F%E7%82%B9-%E5%BC%81%E7%90%86%E5%A3%AB%E3%81%8C%E8%A7%A3%E8%AA%AC%E3%81%99%E3%82%8B%E6%9C%80%E6%96%B0%E5%8B%95%E5%90%91
- 43. AI 関連発明の特許出願状況と日本特許庁における取り扱い,9月14,2025 にアクセス、<a href="https://www.soei.com/wp-content/uploads/2020/11/%E7%9F%A5%E8%B2%A1%E6%83%85%E5%A0%B1%E6%88%A6%E7%95%A5%E5%AE%A4%EF%BC%BF%E9%BB%92%E6%9C%A8.pdf">https://www.soei.com/wp-content/uploads/2020/11/%E7%9F%A5%E8%B2%A1%E6%83%85%E5%A0%B1%E6%88%A6%E7%95%A5%E5%AE%A4%EF%BC%BF%E9%BB%92%E6%9C%A8.pdf</a>
- 44. Patent Examination Case Examples pertinent to AI-related technologies, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  - https://www.jpo.go.jp/e/system/laws/rule/guideline/patent/ai jirei e.html
- 45. AI 関連技術に関する特許審査事例について | 経済産業省 特許庁,9 月 14,2025 に

- アクセス、https://www.jpo.go.jp/system/laws/rule/guideline/patent/ai jirei.html
- 46. AI-Related Inventions in Japan, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.jpaa.or.jp/en/cms/wp-content/uploads/2024/09/IPO2024AI-Related-Inventions-in-Japan.pdf">https://www.jpaa.or.jp/en/cms/wp-content/uploads/2024/09/IPO2024AI-Related-Inventions-in-Japan.pdf</a>
- 47. Examination Guideline for AI-related inventions by JPO,9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.jpaa.or.jp/en/cms/wp-content/uploads/2024/02/Examination-Guideline-for-AI-related-inventions-by-JPO.pdf">https://www.jpaa.or.jp/en/cms/wp-content/uploads/2024/02/Examination-Guideline-for-AI-related-inventions-by-JPO.pdf</a>
- 48. FragNet: A Graph Neural Network for Molecular Property Prediction with Four Layers of Interpretability arXiv, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://arxiv.org/html/2410.12156v1
- 49. Chain-aware graph neural networks for molecular property prediction PubMed Central, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11494371/
- 50. Graph neural networks for molecular and materials representation OAE Publishing Inc., 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.oaepublish.com/articles/jmi.2023.10
- 51. Add-GNN: A Dual-Representation Fusion Molecular Property Prediction Based on Graph Neural Networks with Additive Attention MDPI, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.mdpi.com/2073-8994/17/6/873
- 52. Transformer models in biomedicine PMC PubMed Central, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC11287876/
- 53. Towards Controllable Protein Design with Conditional Transformers arXiv,9 月 14,2025 にアクセス、https://arxiv.org/pdf/2201.07338
- 54. MSA-Regularized Protein Sequence Transformer toward Predicting Genome-Wide Chemical-Protein Interactions: Application to GPCRome Deorphanization, 9月14,2025 にアクセス、https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC8154251/
- 55. US20230054552A1 Optimizing Proteins Using Model Based Optimizations Google Patents, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://patents.google.com/patent/US20230054552A1/en">https://patents.google.com/patent/US20230054552A1/en</a>
- 56. Prior Art and Al-Generated Content Klemchuk, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.klemchuk.com/ideate/prior-art-ai-generated-content
- 57. What you need to know about prior art in patents PatentPC, 9 月 14, 2025 にアクセス、 https://patentpc.com/blog/what-you-need-to-know-about-prior-art-in-patents
- 58. What Qualifies as "Prior Art" When Applying for a Patent? Nolo, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.nolo.com/legal-encyclopedia/what-qualifies-as-prior-art-when-applying-for-a-patent.html">https://www.nolo.com/legal-encyclopedia/what-qualifies-as-prior-art-when-applying-for-a-patent.html</a>
- 59. Prior Art Search USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/Basics-of-Prior-Art-Searching.pdf">https://www.uspto.gov/sites/default/files/documents/Basics-of-Prior-Art-Searching.pdf</a>
- 60. Top 5 Potential Implications of AI-Generated Prior Art on Patent Law | Sterne Kessler, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.sternekessler.com/news-

- <u>insights/insights/top -5-potential-implications-of-ai-generated-prior-art-on-patent-law/</u>
- 61. 2128-"Printed Publications" as Prior Art USPTO, 9 月 14, 2025 にアクセス、https://www.uspto.gov/web/offices/pac/mpep/s2128.html
- 62. The Role of Patent Office Databases in Prior Art Searches PatentPC, 9 月 14, 2025 にアクセス、<a href="https://patentpc.com/blog/the-role-of-patent-office-databases-in-prior-art-searches">https://patentpc.com/blog/the-role-of-patent-office-databases-in-prior-art-searches</a>
- 63. Does the United States Patent Office Protect Unpublished Applications When Searching the Internet and Artificial Intelligence Databases for Prior Art? | Sterne Kessler, 9月14, 2025 にアクセス、https://www.sternekessler.com/news-insights/insights/does-the-united-states-patent-office-protect-unpublished-applications-when-searching-the-internet-and-artificial-intelligence-databases-for-prior-art/
- 64. How To Patent Real-World Applications Of ChatGPT Enabled By Prompt Engineering, 9 月 14,2025 にアクセス、<a href="https://patentpc.com/blog/how-to-patent-real-world-applications-of-chatgpt-enabled-by-prompt-engineering">https://patentpc.com/blog/how-to-patent-real-world-applications-of-chatgpt-enabled-by-prompt-engineering</a>
- 65. What is the IP Risk Profile in AI Drug Discovery? | Fenwick, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.fenwick.com/insights/publications/what-is-the-ip-risk-profile-in-ai-drug-discovery">https://www.fenwick.com/insights/publications/what-is-the-ip-risk-profile-in-ai-drug-discovery</a>
- 66. 10 Best Practices for Artificial Intelligence- Related Intellectual Property Covington & Burling LLP, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.cov.com/-/media/files/corporate/publications/2020/07/10-best-practices-for-artificial-intelligence-related-intellectual-property.pdf?ref=hir.harvard.edu">https://www.cov.com/-/media/files/corporate/publications/2020/07/10-best-practices-for-artificial-intelligence-related-intellectual-property.pdf?ref=hir.harvard.edu</a>
- 67. Protecting AI Innovation: Why Trade Secrets are Outpacing Patents in IP Portfolios, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.rmmagazine.com/articles/article/2025/07/17/protecting-ai-innovation-why-trade-secrets-are-outpacing-patents-in-ip-portfolios">https://www.rmmagazine.com/articles/article/2025/07/17/protecting-ai-innovation-why-trade-secrets-are-outpacing-patents-in-ip-portfolios</a>
- 68. Patentability and predictability in AI-assisted drug discovery Akin Gump, 9 月 14, 2025 にアクセス、
  <a href="https://www.akingump.com/a/web/kAJxgkjHh1XoyABdxDtAf1/8MiCMH/patentability-and-predictability-in-ai-assisted-drug-discovery-web-v3.pdf">https://www.akingump.com/a/web/kAJxgkjHh1XoyABdxDtAf1/8MiCMH/patentability-and-predictability-in-ai-assisted-drug-discovery-web-v3.pdf</a>
- 69. Unlocking the future of drug discovery through advances in AI AstraZeneca, 9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.astrazeneca.com/what-science-can-do/topics/data-science-ai/unlocking-future-drug-discovery-through-AI-advances.html">https://www.astrazeneca.com/what-science-can-do/topics/data-science-ai/unlocking-future-drug-discovery-through-AI-advances.html</a>
- 70. Advancing data and artificial intelligence AstraZeneca, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.astrazeneca.com/sustainability/ethics-compliance/data-and-ai-ethics.html">https://www.astrazeneca.com/sustainability/ethics-compliance/data-and-ai-ethics.html</a>
- 71. AstraZeneca director says AI must be a "thought partner" in drug discovery, 9 月 14,2025 にアクセス、 <a href="https://www.pharmaceutical-technology.com/news/astrazeneca-director-says-ai-must-be-a-thought-partner-in-drug-discovery/">https://www.pharmaceutical-technology.com/news/astrazeneca-director-says-ai-must-be-a-thought-partner-in-drug-discovery/</a>

- 72. Unlocking the potential of data and AI -driven drug discovery & development AstraZeneca, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.astrazeneca.com/what-science-can-do/topics/data-science-ai/unlocking-potential-data-ai-driven-drug-discovery-development.html">https://www.astrazeneca.com/what-science-ai/unlocking-potential-data-ai-driven-drug-discovery-development.html</a>
- 73. AstraZeneca's Drug Design Program Built using AWS wins Innovation Award, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://aws.amazon.com/blogs/industries/astrazenecas-drug-design-program-built-using-aws-wins-innovation-award/">https://aws.amazon.com/blogs/industries/astrazenecas-drug-design-program-built-using-aws-wins-innovation-award/</a>
- 74. Exscientia and Sanofi establish strategic research collaboration to develop Aldriven pipeline of precision-engineered medicines, 9 月 14,2025 にアクセス、<a href="https://www.sanofi.com/en/media-room/press-releases/2022/2022-01-07-06-00-00-2362917">https://www.sanofi.com/en/media-room/press-releases/2022/2022-01-07-06-00-00-2362917</a>
- 75. Research Collaboration Agreement between Exscientia AI Ltd. | RECURSION PHARMACEUTICALS, INC. | Business Contracts | Justia, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://contracts.justia.com/companies/recursion-pharmaceuticals-inc-12541/contract/1316194/">https://contracts.justia.com/companies/recursion-pharmaceuticals-inc-12541/contract/1316194/</a>
- 76. Research Collaboration and Licence Option Agreement, dated June SEC.gov, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://www.sec.gov/Archives/edgar/data/1865408/000110465921116988/tm2119783d9">https://www.sec.gov/Archives/edgar/data/1865408/000110465921116988/tm2119783d9</a> ex10-7.htm
- 78. Protecting Inventions Relating to Artificial Intelligence: Best Practices Authors 1 Frank Chau, 9 月 14, 2025 にアクセス、 <a href="https://ipo.org/wp-content/uploads/2022/02/AI-Patenting">https://ipo.org/wp-content/uploads/2022/02/AI-Patenting</a> white-paper final.pdf