



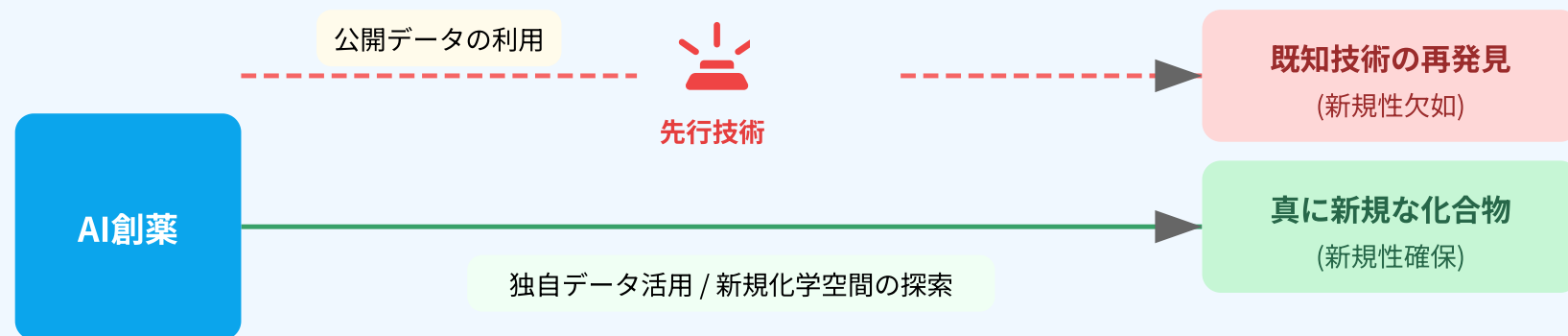
AI創薬時代における特許戦略

研究から権利化へ：実験で勝ち切るAI創薬特許

研究開発チームが実践すべき、AI創薬における特許取得のためのデータ設計、実施例作成、ドラフティング連携の実務手引き。

先行技術の地雷を避ける：学習データと公開情報の棚卸し

AIの学習データに起因する既知技術の再発見リスクを低減し、新規性を確保します。



🔍 AIによる再発見のリスク

AIが既存の膨大なデータを学習に利用するため、既知の構造を再発見する可能性があり、これが新規性欠如による拒絶理由となることがあります。米国では、AI設計のキナーゼ阻害剤が1998年の論文に類似構造が開示されていたため拒絶された事例があります。

🔍 トレーニングデータと公開情報の棚卸し

独自データの活用: 独自のデータセットを用いてAIモデルを訓練し、既知の化合物と重複しない新規領域を探索することが有効です。

新規化学空間の探索: AIを活用して、従来の探索では見つけれなかった新しい化学空間を開拓し、真に新規な化合物を発見する戦略が重要です。

仮説とKPI：どの効果を、どの試験で示すか

AIが予測した効果の信頼性を担保するため、適切な試験データと仮説設定が不可欠です。研究初期からPlausibilityとCredible Utilityを戦略的に確保します。



Plausibilityの要件 (EPO)

「もっともらしさ」の証明

欧州特許庁(EPO)では、AIによる予測のみでは「もっともらしさ」が不足し、拒絶される可能性があります。効果を裏付ける実験データが皆無の場合、進歩性や実施可能要件を満たさないと判断されやすいです。

⚠ 評価の限界

AIによる **in silico**評価 だけでは不十分とされ、信頼性に疑義が呈されることがあります。



Credible Utilityの要件 (USPTO)

「信頼できる用途」の提示

米国特許庁(USPTO)では、医薬用途発明において「特定で実質的かつ信頼できる用途」を示すことが求められます。



試験の組み合わせ

in vitro / in vivo試験データを取得し、明細書に記載することが強く推奨されます。



作用機序の記載

既知の類似化合物から推測される作用機序などを記載し、拒絶リスクを低減できます。

データ完全性：記録・再現性・タイムスタンプ

データ完全性と信頼性の担保

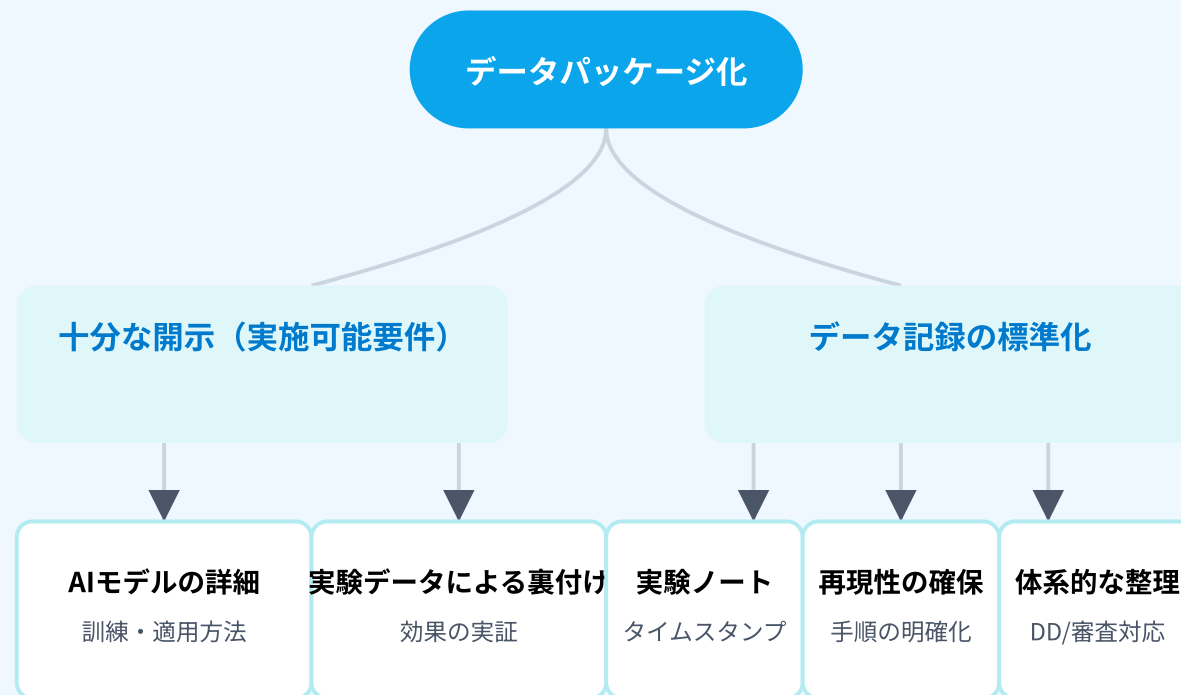
特許審査やデューデリジェンス（DD）で通用する、記録・再現性・タイムスタンプを備えたデータパッケージ化が求められます。

十分な開示（実施可能要件）

AI創薬発明では、アルゴリズム、学習内容、効果の十分な開示が重要。各国特許法は再現性や詳細な裏付けデータを求める傾向にあります。

データ記録の標準化

詳細な実験記録、再現可能な手順、体系的なデータ整理により、データの信頼性と証拠能力を向上させます。



用途特定の型：〇〇疾患候補設計方法の定義

AIモデル・アルゴリズム関連クレームの設計



用途特定の型

AIを単なる数学的手法ではなく、具体的な技術的課題を解決する手段として記載。目的と手段を明確に結びつけ、改良点を強調します。



装置/プログラム請求

有形の構成要素を組み合わせた情報処理装置や、コンピュータ上で実行されるプログラムとして記述し、ハードウェアとの結合を示します。



性能の定量化

予測精度や処理速度など、性能向上を具体的な数値で提示。ベンチマークとの比較により、技術的效果と優位性を客観的に証明します。

装置/プログラム請求の作法

装置/プログラム請求の適切な表現



情報処理装置クレームの活用

ハードウェアとの結合

「〇〇装置であって、ニューラルネットワークを用いた〜処理部を有する」形式で、ハードウェアへの組み込みを示し、自然法則の利用として認められやすくする。

有形の構成要素の包含

欧州や日本では、装置クレームのように有形の構成要素を含むことで、抽象性の批判を効果的に避けることができる。



プログラムクレームの作法

「情報処理方法」との結びつけ

日本では、「ニューラルネットワークを用いた情報処理方法」のように、目的・用途と結び付けて記載することが推奨される。

コンピュータ可読媒体

プログラム自体を請求する場合、「コンピュータ可読媒体に格納されたプログラム」形式で実体を示す。ただし、侵害立証が困難な場合もある。

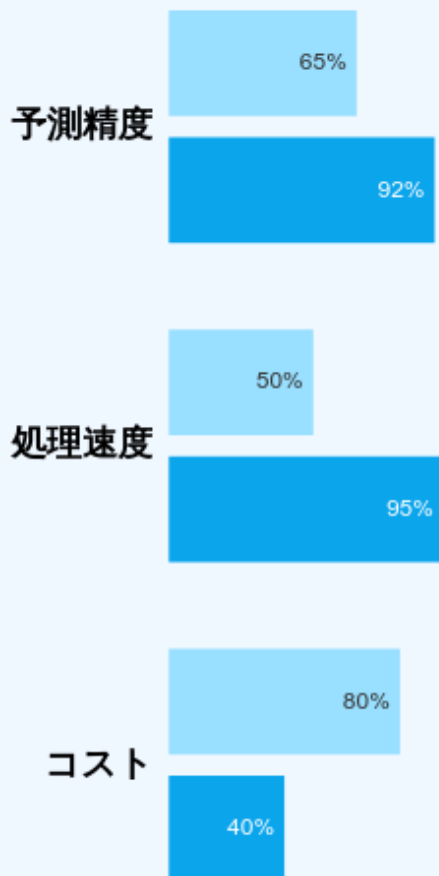


各国基準への対応

各国特許適格性基準に合わせクレーム表現を調整する必要がある。

- **米国:** Alice/Mayoテスト
- **欧州:** 技術的貢献
- **日本:** 自然法則利用の技術的思想
- **中国:** 技術的解決手段

性能の定量化：メトリクスとベンチマーク



AIモデルの性能定量化と進歩性の主張

AIモデルの特許における進歩性を主張するためには、その性能改善を客観的な指標で示し、従来の技術では達成できなかった効果を強調することが重要です。

メトリクスとベンチマークによる性能証明

- 改善幅の明確化:** 予測精度 (AUC, F1スコア)、処理速度、コスト削減効果などを具体的な数値で示します。
- 客観的ベンチマーク:** 公開データセットや業界標準テストを用い、優位性を客観的に評価します。

予測困難性の強調

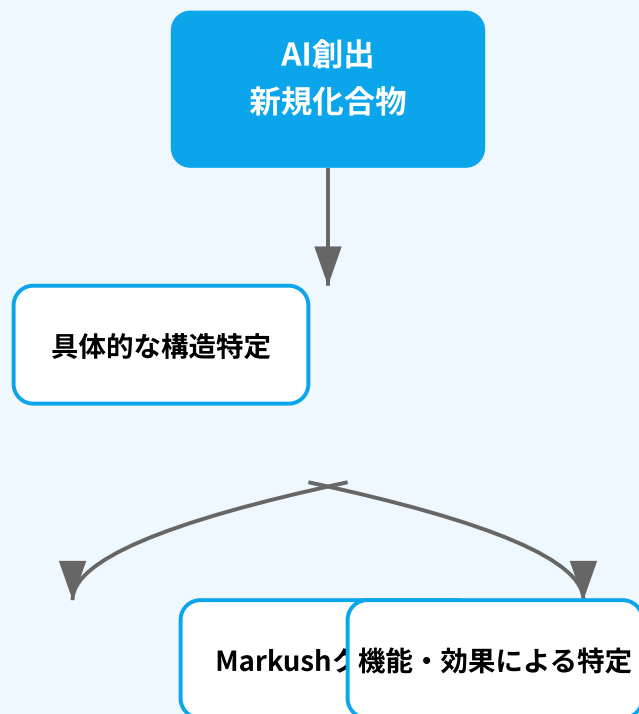
- 「ブラックボックス性」の活用:** 人間には予測困難な有用な結果を進歩性の根拠とします。
- 人間の常識を超える知見:** AIがもたらした非自明な結果（例: re Cyclobenzaprine判例）を強調します。

定量的効果の開示

本発明は、従来の技術と比較して、予測精度が向上し、処理速度が向上し、コストが削減されたことを示す。

化合物の特定：代表化合物と範囲設定

AI生成化合物の特定と範囲設定



具体的な化合物構造の特定

- **化学式による特定:** 「化学式 (I) で表される化合物」のように、具体的な化学式で化合物を特定することが基本です。
- **AI創出候補の選別:** AIが多数の候補構造を生成した場合、最も有望な数種類を個別に特定し、特許出願の対象とします。

Markushクレームの活用と注意点

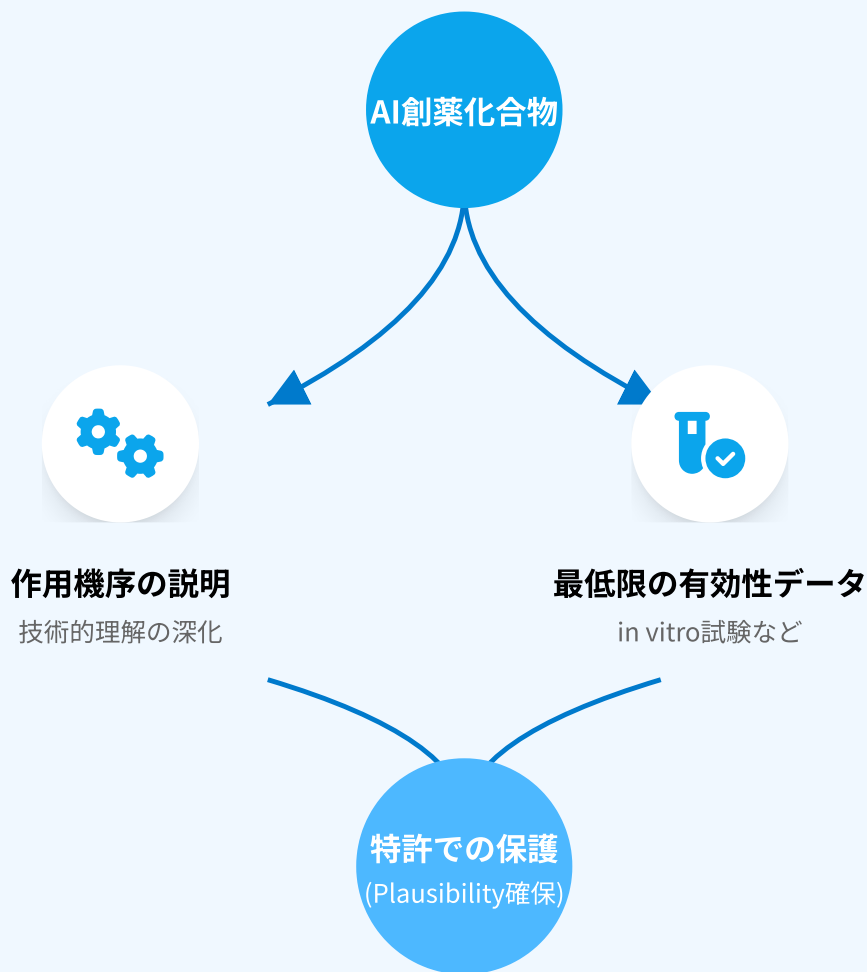
- **Markush形式の利用:** 化合物構造中の置換基に幅を持たせることで、複数の化合物を包括的に保護し、権利範囲を広げます。
- **過度な広さの回避:** 過度に広い場合、進歩性や実施可能要件の問題に直面する可能性があり、合理的な範囲に留めることが望ましいです。

機能・効果による特定

- **特定の機能・効果の記載:** 「IC50値が〇〇M以下である化合物」のように、機能や効果で特定する表現も有効です。
- **機能的クレームの明確性:** 欧米では明確性要件が厳しく、in silico評価のみでは裏付けデータ不足と見なされる場合があります。

機能・効果の証明：アッセイ設計

機能・効果の証明とPlausibilityの確保



作用機序の説明

- **分子レベルでの理解:** AI予測化合物が生体内でどう作用し、どんなメカニズムで効果を発揮するかを詳細に説明。
- **既知のメカニズムとの関連:** 既知の経路との類似点を指摘し、AI予測の信頼性を補強。

最低限の有効性データ

- **in vitro試験の重要性:** 酵素アッセイや細胞実験等のデータを明細書に記載し、Plausibilityを裏付け。
- **Plausibilityの判断 (EPO):** 実験データが皆無の場合、進歩性や実施可能要件で拒絶される可能性。
- **Credible Utilityの要求 (USPTO):** in vitro試験や作用機序の記載で、拒絶リスクを低減。

用途発明：新規適応の立証

AIによる既存薬の新規用途発見における、特許化の主要要件



新規用途の特許化

AIが既存の化合物（既知物質）に対し、新たな適応症を見出した場合、**「化合物XのY疾患の治療用途」**として特許を取得できます。

特に、従来の関連知見から人間では予測し得なかった適用を見出した場合、高い進歩性が認められる可能性があります。



効果の裏付けデータ (Plausibility)

AIの予測だけでは、特に欧州特許庁（EPO）で効果の信頼性に疑義が呈される可能性があります。

出願時には、**in vitro試験の結果**や、既知見から論理的に効果を裏付けるデータを添付することが不可欠です。



Credible Utility (信頼できる用途)

米国特許庁（USPTO）では、**「特定で実質的かつ信頼できる用途」**を示すことが要求されます。

AIによる新規用途発見においても、この要件を満たすための具体的なデータや論理的根拠の提示が重要となります。

補正を見据えたドラフトと段階的権利化

AI創薬特許は出願時点でのデータが限られるため、将来のデータ追加やクレーム強化を見越した明細書構成と、段階的な権利化戦略が重要です。



明細書の十分な開示

発明の全体像: AIの学習データ、モデル、パラメータ、成果物の評価方法等を十分に記載し、発明の再現性と貢献度を明確化。

サポート要件: 特に欧州・米国では、AIの数学的方法や使用データに関する具体的な記載が不足すると指摘を受けやすい。

具体的記載例: AI設計mRNAの特許が製剤の記載不十分で却下された事例もあり、発明を支える十分な情報が必要。



クレーム補正戦略

米国での継続出願 (CIP): 新たなデータを追記したクレームで再審査が可能。柔軟な戦略を立てやすい。

日欧での原則: 新規事項の追加は原則不可。最初の出願明細書に将来の補正の根拠を網羅的に記載することが極めて重要。



段階的な権利化アプローチ

プロビジョナル出願の活用: まず暫定出願でAI設計の多数の化合物を網羅的に押さえ、その後、有望な化合物に絞って本出願を行う。

PCT出願と各国補正: PCT出願でベースを確保し、各国移行時に事情に応じてクレームを最適化。早期権利確保と堅牢な権利化を両立。

共同研究における知財管理の要点

背景/成果の切り分けと発明者記録



背景知財と成果知財の切り分け

背景知財の明確化

共同研究開始前に、各参加者が保有する既存の知的財産（背景知財）を明確に定義し、リストアップします。これは、研究成果の権利帰属を判断する上での出発点となります。

成果知財の定義と帰属

共同研究によって生み出された知的財産（成果知財）の定義、およびその権利の帰属（単独帰属か共有帰属か）を契約で明確に定めます。AI創薬の場合、AIモデル、学習データ、生成化合物、用途などが成果知財となり得ます。



発明者認定のエビデンス整備

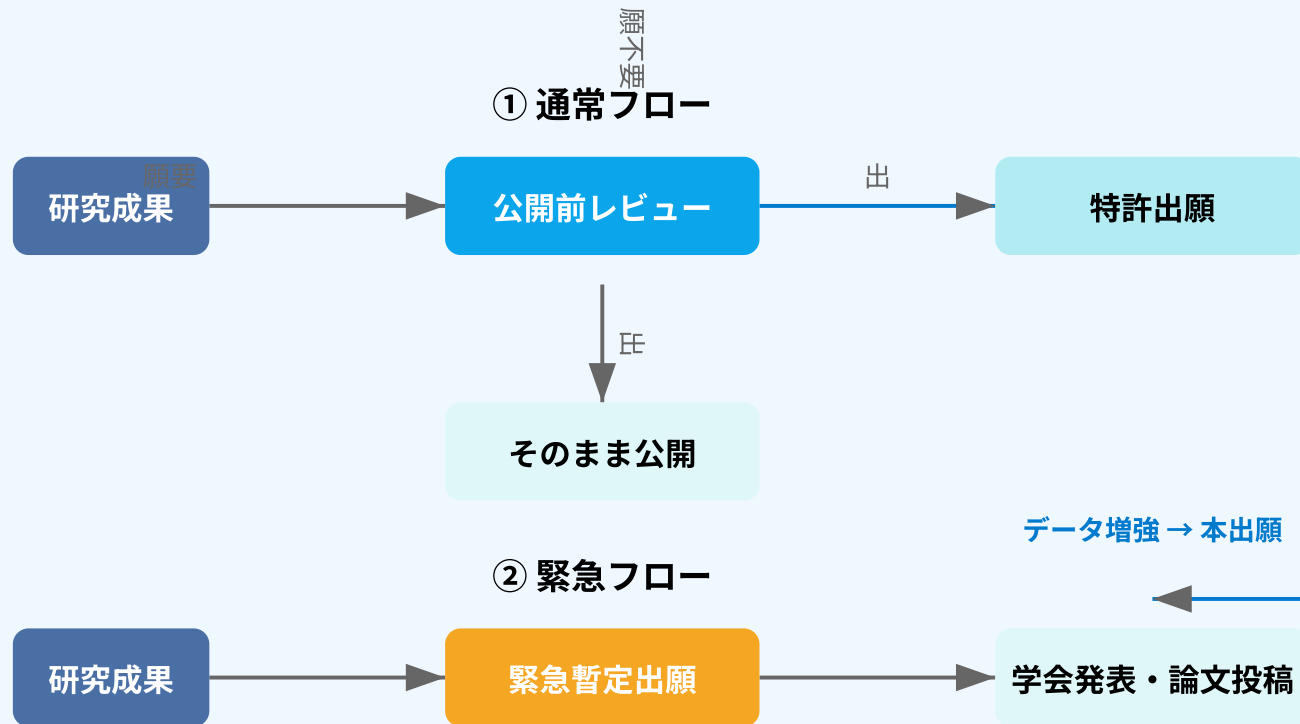
貢献管理: 発明の思想的創作に各研究者がどのように貢献したかを詳細に記録します。これは、特許法上の「発明者」を特定するために重要です。

発明者記録の重要性: 米国、欧州、日本、中国いずれも発明者は自然人のみに限定されており、AIは発明者と認められません。そのため、AIを用いた発明においても、人が果たした役割（データ選定、モデル調整、結果解釈など）を記録し、発明者として主張できるようにすることが重要です。

DABUS事件: AIを発明者とする出願が各国で拒否されたDABUS事件の例からも、人間の貢献を明確にすることが求められます。

公開前レビュー：学会・論文と出願の両立

研究成果の早期公開と知財保護を両立させるための厳格なフローと基準



公開前レビューのフロー

- 学会発表・論文投稿前に必ず知財部門がレビューを実施。
- 発明の新規性喪失を防ぎ、特許出願の可能性を検討。
- 情報提供、レビュー期間、意思決定のプロセスを明確化。

緊急暫定出願の基準

- 他社に先駆けた早期出願が競争優位性に直結。
- 準備が間に合わない場合、暫定出願や早期審査を活用。
- 競合の動き、成果の画期性、公開予定日から出願を判断。
- 暫定出願後、データ増強で本出願のクレームを強化。

データ・コード・モデルの秘匿

AI創薬におけるアルゴリズム、学習データ、モデルは企業の競争力の源泉であり、特許保護が難しい場合は営業秘密として厳重に管理し、アクセス制御を徹底することが不可欠です。



営業秘密保護の重要性

アルゴリズムの秘匿

AIアルゴリズムは特許適格性が認められにくい場合、営業秘密として秘匿し、競合他社による模倣を防ぐ戦略が有効です。

学習データ・モデルの保護

独自の学習データセットや訓練済みモデルは極めて価値の高い資産であり、営業秘密として保護し競争優位性を維持します。



知財契約での明確化

秘密保持契約 (NDA)

共同研究や外部提携時、情報の開示範囲、使用目的、返還・廃棄義務などを明確に定めます。

権利帰属の規定

共同開発されたAIモデルやデータの権利帰属を契約で詳細に規定し、将来的な紛争を回避します。



アクセス管理の実装

物理的・電子的制限

営業秘密へのアクセスを厳格に管理し、権限を最小限に絞り、ログを記録します。

従業員への教育

従業員に対し、営業秘密の重要性、取り扱い方法に関する定期的な教育を実施します。

逆算対策

公開情報からAIモデル等が逆算されないよう、開示内容の範囲を慎重に検討します。

FTOの段階導入：要素分解と回避策

研究開発の早期段階からFTO調査を段階的に導入し、第三者特許侵害のリスクを低減するための回避設計や対応策を講じることが重要です。

→ FTO調査の目的と段階

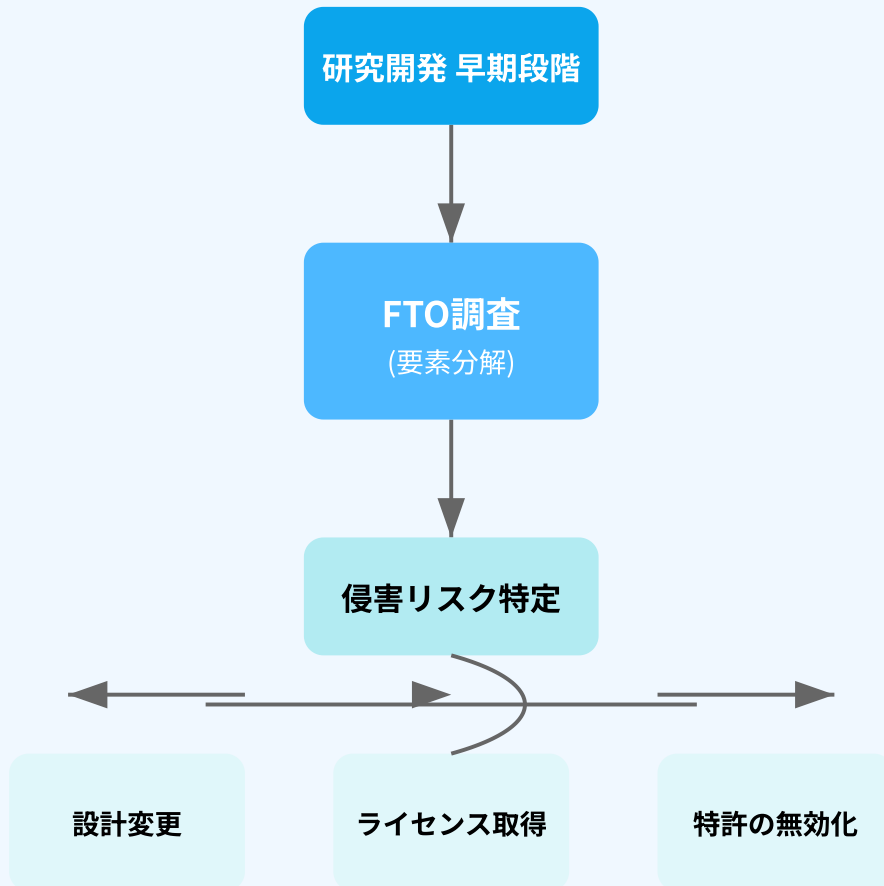
- **早期のリスク特定:** 初期段階の調査で紛争リスクを特定し、回避策の時間を確保します。
- **要素分解と回避策:** 発明の各要素（ターゲット、構造等）を調査し、設計変更の可能性を検討します。

🛡️ 回避策の三本柱

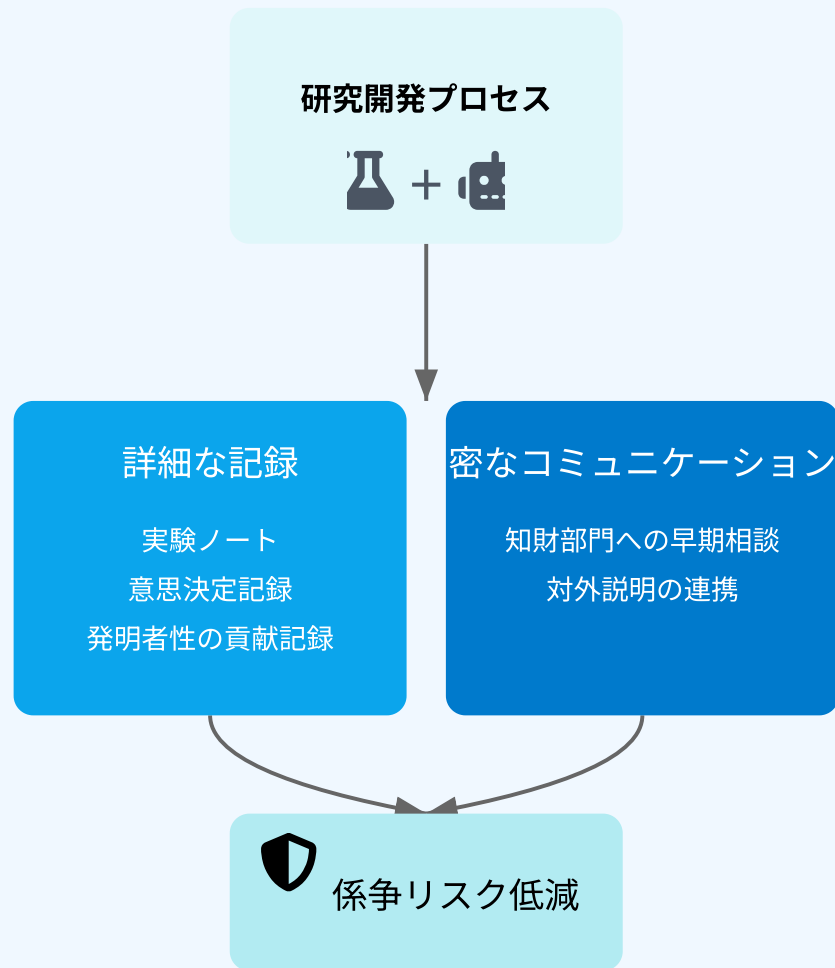
- **設計変更:** 最も直接的な回避策。侵害しないように構造やプロセスを変更します。
- **ライセンス取得:** 権利者からライセンスを取得し、合法的に技術を利用します。
- **特許の無効化:** 先行技術を基に、既存特許の無効審判などを請求します。

🤖 AI創薬におけるFTOの特殊性

AIが生成した化合物やAIアルゴリズム自体が、意図せず既存特許を侵害するリスクも考慮する必要があります。



係争の芽を摘む記録とコミュニケーション



詳細な記録の重要性

- **実験ノートの徹底:** 発明の着想日、進捗性等の重要証拠。AIモデルの訓練データ等も記録。
- **意思決定記録:** AIモデル選択や候補絞り込み等の根拠を記録し、発明の非自明性を後日説明可能に。
- **発明者性に関する記録:** AI関与発明における人間の貢献度を明確化し、発明者認定の根拠とする。

知財部門との密なコミュニケーション

- **早期相談の徹底:** 発明着想時、速やかに知財部門に相談し、特許性やFTOリスクを検討。
- **対外説明のテンプレート化:** 学会発表等の前に知財部門と連携し、開示内容を精査。新規性喪失リスクを防止。