

# 化学分野において、実験例がなくても 特許をとれるのか？

——実験例がなく計算科学のみで記載要件を充足する方法——

特許第1委員会  
第2小委員会\*

**抄 録** 化学分野における特許出願においては、クレームする化合物に関する実験データを実施例として記載するケースが多い一方で、実験例の代わりに計算科学によるシミュレーションデータを記載する特許出願も散見される。このような計算科学を用いた特許出願について、審査段階でどのように記載要件が判断されているか、複数の事例で確認した。その結果、①計算科学によるシミュレーションデータが、実際の実験データと同視できる程度の信頼性を有することについて、明細書に記載するか又は他の文献を用いた論理展開をする必要があること、②計算科学によるシミュレーションデータから導かれる一定の特性等について、発明の効果との関係性を十分に示す必要があること、発明の効果との関係で特性等が複数ある場合は、そのいずれに対しても関係性を示す必要があることがわかった。

## 目 次

- はじめに
- 検討内容及び結論
  - 第一原理計算に着目した事例抽出
  - 計算科学の結果の信頼性の程度
  - 計算科学により示したデータから認められる特性と、発明の効果との関係性
  - まとめ
- 事例1「特願2008-322832」
  - 概要
  - 出願経過
  - 小 括
- 事例2「特願2013-33238」
  - 概要
  - 出願経過
  - 小 括
- 事例3「特願2012-218992」
  - 概要
  - 出願経過
  - 小 括
- 考 察

- 留意点1について
- 留意点2について
- 総 括
- おわりに

## 1. はじめに

近年のシミュレーション技術やAI（人工知能）技術、ビッグデータを用いた技術の発展は目覚ましく、化学分野においても、これらの技術を用いることでコストを大幅に削減して新規の材料を探索する「マテリアルズ・インフォマティクス」が盛んである。マテリアルズ・インフォマティクスを取り入れることで、開発者が実際に実験をするより早く最適化学物質、最適組成などの情報を手に入れることが可能になるため、化学分野の多岐にわたって、マテリアル

\* 2019年度 The Second Subcommittee, The First Patent Committee

ズ・インフォマティクスが利用されている。このような背景から、化学分野における特許出願において、計算科学の結果を用いた特許出願明細書が少なからず見受けられる。

一方、特許庁が公開する平成27年9月改訂版の特許・実用新案審査基準（以下「審査基準」という。）には、「物の発明」に関する実施可能要件について、以下の3点を要件として規定している。

- ①「物の発明」について明確に説明されていること
- ②「その物を作れる」ように記載されていること
- ③「その物を使用できる」ように記載されていること

さらに審査基準では、化学物質に関する技術分野のように、製造方法や使用方法の理解が比較的困難な技術分野においては、「通常、一つ以上の代表的な実施例が必要である」ことが明記されている。そのため、化学物質に関する技術分野においては、製造方法や使用方法を実証した実験データを特許出願明細書に記載する実務者が多いと思われる。

そのような実務者からすれば、実験データがなく計算科学によるデータのみが記載された明細書は、実施可能要件を満たしていないのではないかという疑問を抱くことであろう。特にマテリアルズ・インフォマティクスでは、計算科学のみで新規材料を探索する場合があります、その場合には実際に実験をしていないため、明細書に実験方法等を記載できなかつたり、新規材料の用途を明らかにできなかつたりすることが考えられる。

しかし、計算科学に関する特許出願事例を収集して内容を確認すると、実施可能要件を満たさないと判断される事例もある一方で、実施可能要件違反に関する拒絶理由通知を受けることなく特許査定となった事例も少なからず確認された。

そこで、我々は、実験データがなく計算科学

によるデータのみが記載された明細書の特許出願事例を確認し、実施可能要件違反とする拒絶理由通知を受けた事例と、実施可能要件違反とする拒絶理由通知を受けなかった事例とを比較し、どのような要素がその結論の違いを生み出しているのかを検討することとした。

本稿は2019年度特許第1委員会第2小委員会のメンバーである、宮永修治（小委員長；日産自動車）、稲見典明（小委員長補佐；大日本住友製薬）、太田奈緒子（小委員長補佐；三菱ケミカル）、石関浩子（リコー）、伊東和紀（パナソニック）、大石康博（セイコーエプソン）、水島真依（昭和電工）、三好秀和（生命科学インスティテュート）、山本文隆（住友金属鉱山）が執筆した。

## 2. 検討内容及び結論

### 2.1 第一原理計算に着目した事例抽出

まず、実験データがなく計算科学によるデータのみが記載された明細書の特許出願事例を探索すべく、化学物質における計算科学の代表的な手法の一つである「第一原理計算」に着目して特許出願事例の調査を行った。第一原理計算とは、分子や固体の性質を非経験的に、すなわち電子状態に基づいて計算する方法である<sup>1)</sup>。具体的には、物質に含まれる原子の数や種類を指定することで、量子力学に基づいて電子の状態を計算することができ、ひいては物質の構造や性質を調べることができるというものである。この「第一原理計算」という語が特許出願明細書のいずれかの項目に記載されている特許出願事例を抽出した。

### 2.2 計算科学の結果の信頼性の程度

次に、抽出した特許出願事例について、明細書の記載、審査経過の確認を行ったところ、一部の出願事例において、第一原理計算により得

られる理論値について、実験データで得られるであろう実際の結果と同視できるかどうか疑問があるという点を理由として実施可能要件違反の指摘を受けた事例が確認された。

このような計算科学によるシミュレーションデータの信頼性に着目した実施可能要件違反に関する拒絶理由は、計算科学から得られた結果が、その精度や信頼性という点で十分ではないことを示唆していると解釈することができ、計算科学によるデータのみで実施例を構成したが故に生じる特有の拒絶理由であると考えられる。そこで、我々は実験データがなく計算科学によるデータのみが記載された特許出願事例において、計算科学によるシミュレーションデータの信頼性が、実施可能要件を充足する上で重要な要素になっていると仮定し、この点が争点となった特許出願事例について、3つの事例をピックアップして検討を行った。

### 2.3 計算科学により示したデータから認められる特性と、発明の効果との関係性

ピックアップした3つの事例を確認すると、計算科学により示したデータでは、発明の効果を認めるに足りないという判断をした事例が確認された。発明の効果の記載の問題は、審査基準における実施可能要件充足のための要件に照らすと、「その物を使用できるように記載されていること」という要件に関連する。

そこで、計算科学により示したデータから認められる特性や因子（以下「特性等」という。）と、発明の効果との関係性についても、実施可能要件を充足する上で重要な要素になっていると仮定し、計算科学により示される特性等と発明の効果にも着目して、実施可能要件充足の判断にどのように影響するか検討を行った。

### 2.4 まとめ

後述する事例の説明をより理解しやすくする

ために、我々が分析した結果を先に述べる。「計算科学の結果の信頼性の程度」と「計算科学から導かれる特性等と発明の効果との関係性」の2つの観点で検討を行ったところ、留意点として以下の2点を指摘することができた。

【留意点1】計算科学によるシミュレーションデータが、実際の実験データと同視できる程度の信頼性を有することについて、明細書で記載するか又は他の文献を用いるなどして裏付けをする必要がある。

【留意点2】計算科学によるシミュレーションデータから導かれる一定の特性等について、発明の効果との関係性を十分に示す必

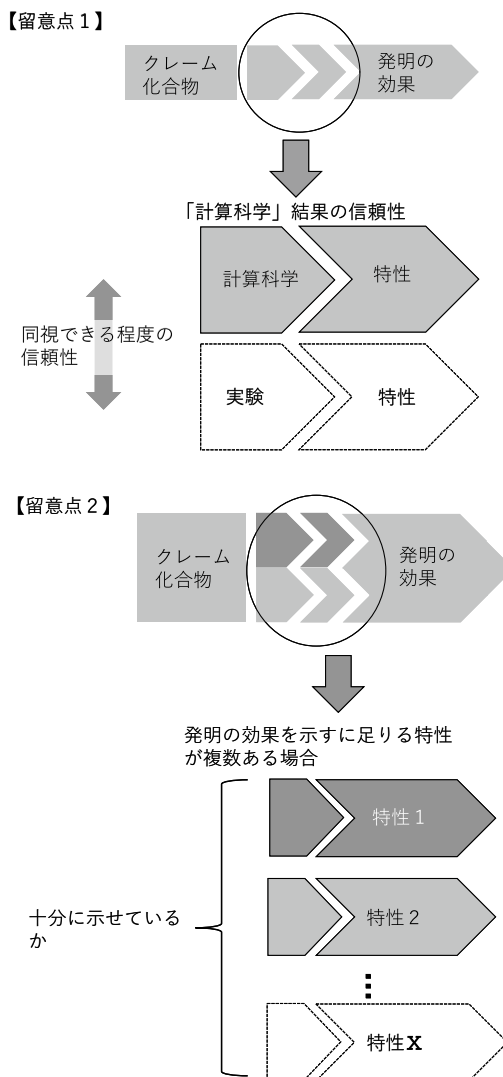


図1 各留意点のまとめ

要がある（関係性を示すにあたり、他の文献等を用いることも考えられる。）。発明の効果と関係する特性等が複数ある場合は、特性等ごとに発明の効果との関係性を示す必要がある。

なお図1の各留意点における上部矢印部分は、クレームする化合物について、計算科学を用いて発明の効果を示すプロセスを図示したものである。

### 3. 事例1「特願2008-322832」

本事例は、計算科学によるシミュレーションデータの信頼性について、明細書に十分な記載をしておらず、その点を根拠に拒絶された出願審査事例である。

#### 3.1 概要

##### (1) 発明概要

本願は、ペロブスカイト型結晶等からなる圧電体材料に関する特許出願である。請求項1においては、圧電体材料中の特定軸（Z方向）における窒素率の値が、 $N_z/N_{xyz} > 1/3$ で示される範囲内に限定される点に特徴を有したクレームとなっている。具体的な特許出願時の請求項1は下記のとおりである。

【請求項1】組成式 $ABO_2N$ （Aは3価の陽イオン、Bは4価の陽イオンを示す。但し、AとBは鉛を除く。）で表されるペロブスカイト型結晶または前記ペロブスカイト型結晶を含むバルク材料からなる圧電体材料であって、前記圧電体材料中に含まれる窒素Nの個数を $N_{xyz}$ とし、 $N_{xyz}$ のうち結晶中の面心位置であってかつ長軸方向に配置された窒素の個数を $N_z$ とすると、 $N_z/N_{xyz} > 1/3$ であることを特徴とする圧電体材料。

##### (2) 実施例

実施例については、第一原理計算と呼ばれる電子状態計算のシミュレーション結果に基づいている。本実施例で示す圧電定数の値は、全て「ABINIT」（VCA（仮想結晶近似）を用いた第一原理計算パッケージプログラムの一つ）を用いて計算を行った結果であり、出願人は、ABINITを用いて、Z方向にある窒素率（ $N_z/N_{xyz}$ ）の構造への依存性と、圧電定数とヤング率の積に対する依存性を調べた。出願人は明細書において、Z方向の窒素率に対する圧電定数、ヤング率の関係について、このような方法で計算した例はなく、この計算の結果、窒素が各方向に等方に配置された状態より、窒素の個数がZ方向に異方性を有する状態の方が、圧電定数とヤング率の積が大きい事が分かったと説明をしている。具体的には、下記の図2などを示し、Z方向の窒素率（横軸）が大きいほど、圧電定数とヤング率の積（右縦軸）が大きくなることを示し、請求項1に記載のパラメータの範囲内である場合に圧電特性が向上することを示している。

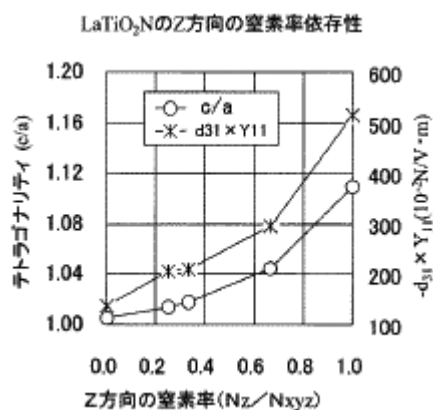


図2 LaTiO<sub>2</sub>Nの計算結果（事例1の図3）

#### 3.2 出願経過

##### (1) 拒絶理由通知

特許庁審査官から明確性要件違反（36条6項

2号)及び実施可能要件違反(36条4項1号)を理由とする拒絶理由通知が出された。以下に拒絶理由通知の内容を抜粋する。

…【0024】～【0030】に第一原理計算の1つであるVCAと呼ばれる手法を用いて、電子状態を計算した旨の記載はある。しかしながら、 $N_z$ 、 $N_{xyz}$ 及び、図2以降で $N_z/N_{xyz}$ の横軸に対する縦軸の物性値とした圧電定数、ヤング率いずれも、電子状態とは別のことであるから、仮に電子状態を求め得たとしても、これら値を得られないことも技術常識である。また、第1原理計算は、完全に理論から演繹されるシミュレーションであり、現実との整合性が保証されていない。少なくともセラミックス分野において、第1原理計算による構造・物性予測は、既知材料の物性予測が学問的に行われている程度である。特許出願明細書に要求されるような、未知の材料の構造や物性について追試可能な結果を得る手法としてみると、第1原理計算によるセラミックスの構造・物性予測は、実際の試料を用いた実験に代わるものでないことは技術常識である…上記各技術常識を勘案すると、第1原理計算についての記載を勘案しても、請求項の意味内容を理解できない。

…【0024】記載のシミュレーションにつき、【0030】では、「このような方法で計算した例はない。」と記載されており、また、この出願の明細書においても、該シミュレーションの正しさを実験的に検証していない。また、上記1.なお書きで指摘したように、第1原理計算を用いたシミュレーションは、セラミックス分野において、実際の試料を用いた実験に代わるものでないことは技術常識である。該シミュレーションが実際に正しい結果をもたらすかは不明であり、そのような発明の実施は、請求項1-7記載の任意の材料に

対するシミュレーション結果の実験的確認という、当業者に要求される試行錯誤を超えることを要するから、発明の詳細な説明が、当業者が発明を実施しうる程度に明確且つ十分に記載されていない。

拒絶理由通知の趣旨としては、出願人は明細書において、第一原理計算により電子状態を計算しているが、現実との整合性が保証されていないうえ、電子状態と、 $N_z$ 、 $N_{xyz}$ 、圧電定数、及びヤング率などのパラメータとは別のことであるという指摘である。現実との整合性に関する点は、計算科学によるシミュレーションデータが、仮に実験を行った場合の実験結果と同視できるとは言えないという趣旨であり、計算科学によるシミュレーションデータの信頼性に関する指摘と理解できる。

## (2) 出願人の対応

上記拒絶理由通知に対し、出願人は意見書において次のとおり反論を行った。

…また近年、急速に発展したシミュレーションの有効性を端的に説明した登録特許文献に、特許第4365495号公報があります。特許第4365495号の0023には第一原理計算を用いた旨の記載があり、当文献の図2および図5はその計算結果に対応し、特許第4365495号の請求項1記載の発明を裏付けるものとなっています。

したがいまして、本願の請求項の意味内容は十分理解できるものと思料いたします。…

「第一原理計算で導出した圧電定数が実験値と同等」を説明する刊行物として、提出文献1を提出いたします。…近年、圧電特性に関するシミュレーション技術は非常に発達しており、当該資料10ページ目のtable3に圧電定数の計算値と実験値が比較されていま

す。圧電定数 $e_{31}$ ,  $e_{33}$ , 良く一致していることが確認できると思料します。

そのことを踏まえ、本願発明にて利用したパッケージプログラムABINITに関するD. Vanderbilt氏の論文を提出いたします（提出文献2）。またABINITを用いて算出した圧電特性に関するシミュレーション結果と実験結果とを比較した文献した（提出文献3）を提出します。

提出文献3のp2931に記載のtable 1は、圧電材料に関するシミュレーション結果と実験データとを比較したものです。table 1における $d_{31}$ ,  $d_{33}$ は実験値と良く一致していることが分かります。table 1における $d_{31}$ ,  $d_{33}$ の比較値として参照されるi文献すなわち[Ref21]は、信用度が高く国際的に広く使われる物性データベースであるランドルト・ベルンシュタインです。

このことから、近年の技術進歩に伴い、圧電特性に関するシミュレーション結果と実験結果との整合性は十分にとられており、当業者に要求される試行錯誤の範囲内で、本願発明は十分に実施できると思料します。

従いまして、発明の詳細な説明は当業者が発明を実施しうる程度に明確かつ十分に記載されていると思料します。…

出願人は、上記記載の拒絶理由通知に対して、電子状態に関する第一原理計算の結果が、圧電特性と関連するデータであることについて、他の特許文献や非特許文献を用いることで説明を試みたことが確認できる。

### (3) 拒絶査定

前述の出願人による反論に対し、特許庁審査官は、拒絶査定を出した。審査官は拒絶査定の理由として主に次の点を指摘した。

…また、意見書1. について（ハ）において、特許第4365495号公報の【0023】で「第1原理計算」を用いた旨の記載を挙げて、「本願の請求項1記載の発明」を裏付ける旨主張する。しかしながら、該特許公報は、この出願とは材料が異なるし、【0026】で試料を「作製し、…帯磁率の測定」をした旨の記載があり、この出願の【0028】「圧電定数の値は全て、「ABINIT」を用いて計算を行った結果」に比して実験的確認の点でも事情が大きく異なるので、該主張では、1. の点は解消しない。…

出願人は、意見書2. および3. について、において、提出文献1-3を挙げて請求項1の $ABO_2N$ , 請求項4の $A'B'O_2N$ について、実験結果と整合する圧電特性値が第1原理計算により得られる旨主張する。しかしながら、文献2は計算方法の説明で実験との対比はないし、文献1で用いる $PbTiO_3$ や $BaTiO_3$ 等、文献3で用いる $Be-Zn-O$ と、この出願とは、窒素の有無はじめ用いた材料が大きく異なるので、仮に、該文献記載の材料では実験値と整合した計算ができるとしても、請求項1, 4記載の材料と同視できないから、該主張では、2, 3の点は解消しない。…

このように、審査官は、出願人が意見書において引用した文献から、第一原理計算による結果が実験値と同視することはできないと判断して、拒絶査定を發出している。

### 3. 3 小 括

本願のクレームは、Z方向の窒素率が特定の範囲内( $N_z/N_{xyz} > 1/3$ )であることに特徴のある圧電体材料についての物の発明であり、出願人は、計算科学（第一原理計算）を用いて、Z方向の窒素率とヤング率・圧電定数との関係について記載をしていた。一方で、第一原理計

算の結果が仮に実験を行った場合の実験値と同視できるかどうかということについては、明細書において十分な記載をしていなかったため、明確性及び実施可能要件が認められなかった。第一原理計算の結果が実験値と同視できることが技術常識であればまだしも、そうでなかった本件においてはこの点については丁寧に記載をすべきであったと思われる。

出願人は、意見書において公知文献を引用して第一原理計算の結果と圧電定数との関係について論理構築を試みたものの、結局拒絶された。意見書において公知文献を用いた反論手法自体は失当な対応ではなかったが、引用した文献が、第一原理計算の結果の信頼性を示すに十分なものではなかったために、拒絶査定となった。このことから、計算科学によるシミュレーションデータが実験値と同視できる程度に信頼できるものであることを明細書上示すことができればそれに越したことはないが、明細書に記載しなかった場合であっても、第一原理計算の結果が実験値と同視できることが技術常識でなければ、審査官に拒絶された場合に備え、公知文献等を用いてこの点を論理的に説明できるようにしておく必要があったと考えられる。

## 4. 事例2「特願2013-33238」

本事例は、計算科学によるシミュレーションデータの信頼性について、明細書上に十分な記載をしていたものの、計算科学で示した効果が、発明の効果を示す上で不十分であったとして拒絶された出願審査事例である。

### 4.1 概要

#### (1) 発明概要

本願発明は、ナトリウム二次電池用の正極活物質に関するものである。本願請求項1は、下記の内容である。

#### 【請求項1】

一般式 $\text{Na}_5\text{Mn}_{(1-x)}\text{M}_x\text{O}_4$ で表されるナトリウム二次電池用正極活物質であって、前記一般式中の前記Mは、Fe, Ni, Co, Ti, V, Crのいずれかの遷移金属であるとともに、前記一般式中のxは、前記Mをこれらの遷移金属のいずれかで表記したときの化学式中で1.6個以上のNaが酸化還元反応に寄与するように規定されていることを特徴とするNa二次電池用正極活物質。

### (2) 実施例

まず、第1の実施例として、「 $\text{Na}_5\text{Mn}_{(1-x)}\text{Fe}_x\text{O}_4$ 」( $0 < x \leq 0.2$ )が特定されている。具体的には、「 $\text{Na}_5\text{Mn}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{O}_4$ 」の特性として、約130mAh/g程度の容量が得られると示されている。

次に、第2の実施例として、「 $\text{Na}_5\text{Mn}_{(1-x)}\text{Ni}_x\text{O}_4$ 」( $0 < x \leq 0.4$ )が特定されている。具体的には、「 $\text{Na}_5\text{Mn}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{O}_4$ 」の特性として、約180mAh/g程度の容量が得られると示されている。

ここでポイントとなるのが、本願の実施例の全てが、実際の実験によるものではなく（すなわち、実際に製造した物について、その効果を確認したものではなく）、計算科学のみに基づくものである点である。具体的には、第一原理計算の結果に基づいて、実施例に関する正極活物質の特性と、本願の発明の効果である「安価で高性能な二次電池となること」と、を示したものである。

### 4.2 出願経過

#### (1) 拒絶理由通知

本願の審査段階において、実施可能要件およびサポート要件を満たしていないとする、下記の拒絶理由が示された。なお、以下の拒絶理由は、本願の拒絶査定においても示された。

＜拒絶理由の抜粋＞

…，実際に製造した正極活物質について，安価で高性能なナトリウム二次電池を得ることができる（段落0010）という効果を奏する旨確認したものではない。…，実際の製造した正極活物質についての対比検討がなされておらず，前記仮定が正しいのかどうか，当業者にとって不明である。…発明の詳細な説明の段落0004に記載の先行技術文献である特開2010-40311号公報…の段落0086-0089の実施例2，3には，同一組成の正極活物質であるにもかかわらず，充放電性能評価において，ナトリウム二次電池の正極としての相対放電容量が異なる場合が記載されているから，本願請求項1の前記一般式で規定される正極活物質は，前記先行技術文献に記載の製造方法により同じ組成のものを実際に製造したとしても，必ずしも第一原理計算により得られる容量と一致するとは云えない。…発明の詳細な説明では，第一原理計算を用いて計算された結果に基づく正極活物質が開示されているに過ぎず，具体的に製造された正極活物質が前記課題を解決できることを確認していないから，前記先行技術文献を含む出願時の技術常識を考慮しても，前記本願発明の課題を解決できるとは云えず，請求項1は，発明の詳細な説明に記載した範囲を超えて特許を請求するものである。

(2) 出願人の主張

上記の拒絶理由に基づく拒絶査定に対して，出願人は，審判請求書において，下記の主張を行った。

＜審判請求書での主張の抜粋＞

…(カ)リチウム二次電池の正極活物質(LiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>)の特性を第一原理計算によって

求めたところ，平均動作電位および容量の値が，実際に製造されたLiMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>の評価値（筆者注釈：公知の評価値）と概ね一致した。（段落0020）…上記（カ）の記載から，ナトリウム二次電池の正極活物質の特性を求める場合にリチウム二次電池の正極活物質の特性を求める場合と比較して，第一原理計算の信頼度の高さを揺るがす要因となりうる特段の事情は見受けられません。したがって，第一原理計算によって組成が決定された本願発明に係る正極活物質が用いられたナトリウム二次電池の平均動作電位および容量の評価値は，第一原理計算の計算結果と概ね一致いたします。…（g）上記の通り，「各元素を所望の組成に応じた配合比で混合して焼成することで得られる正極活物質が，シミュレーション通りの特性を示すかどうか」は，本願の発明の技術的範囲に含まれません。第一原理計算によって得られる正極活物質の特性の値はそもそも近似値に過ぎず（段落0012），具体的に製造された正極活物質の特性の評価値は，製造ラインにおいて所定の歩留まり率を達成するための下限値さえ満たしていれば，ばらつきがあっても差し支えないからです。…

(3) 審判段階における拒絶理由

上記の出願人の主張により，計算科学の信頼性に関する拒絶理由は，審判段階では示されることはなかった。しかしながら，審判段階では，下記の拒絶理由が示された。出願人は，下記の拒絶理由通知に応答することはなく，本件は特許登録には至らなかった。

＜審判段階での拒絶理由の抜粋＞

カ …本願発明の正極活物質をどのように作るかは，発明の詳細な説明の記載及び出



願時の技術常識を考慮することによって、当業者が理解できるものと思料いたします。実際、本願発明の正極活物質の製造する際に考慮する必要がある製造条件…は、いずれも設計事項に過ぎず、仮に、例示されている製造条件のすべてについて試行錯誤が必要であるとしても、その試行錯誤の組み合わせは有限であり、個々の製造条件について順を追って好ましく管理、設定していけば、考えられる組み合わせの数よりも遥かに少ない試行回数で、全ての製造条件が最適化されます。」

…しかしながら、上記主張において、仮に「組み合わせは有限」であるとしても、組み合わせの数が数十、数百を超えて、数千、数万ともなれば、現実的な時間内で最適値を求めることができるとはいえないし、「好ましく管理、設定」とは、具体的にどのような方針に基いて管理、設定するのかについて本件発明の詳細な説明には何ら記載も示唆もされていない。

ク したがって、本件発明の詳細な説明の記載に基いて、「リチウム二次電池に代替可能なナトリウム二次電池に使用することができる実用的な正極活物質」及び「その正極活物質を備えたナトリウム二次電池」並びに「安価で高性能な二次電池」が提供できるとはいえない。以上のことから、本件出願の発明の詳細な説明は、当業者が請求項1及び2に係る発明を実施することができる程度に明確かつ十分に記載されたものでない。

### 4.3 小 括

#### (1) 計算科学結果の信頼性を示すための知見

本願明細書の記載（【0020】…Li二次電池用の正極活物質として特性が既知の $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ の特性を第一原理計算により求めた。）、および、上述の「4.2(2) 出願人の主張」で示した内容

の通り、本願の出願人は、「公知の正極活物質（ $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ ）の特性を第一原理計算によって求め、これが実際に製造された $\text{LiMn}_2\text{O}_4$ の公知の評価値と概ね一致することを示す」ことで、第一原理計算の信頼性を確認している。

すなわち、単に発明に関する新規化合物の特性のみを計算科学で示すのではなく、まず、公知の化合物について、その公知の特性値と同等の計算結果を計算科学により得ることができる「検証」を行っている。これにより、計算科学による計算のみでも、実際に製造した物の評価に代わりうることを示している。

このように、計算科学の信頼性・精度の検証結果を明細書に記載しておくことは、「実際の実験・評価で特定される特性」と「計算科学で特定される特性」とが同視できることを示すために、有用であると言える。

#### (2) 「発明の効果」についての留意事項

本願の審査においては、「電池の高性能化」という「発明の効果」を奏するためには、第一原理計算で特定できる「正極活物質の組成」のみではなく、「正極活物質の製造条件」も影響する点が争点となった。

より詳細には、本願では、「活物質の組成」だけでなく、「活物質の製造条件」との組み合わせにより奏することができる「電池の高性能化」を、「発明の効果」として主張していた。一方で、計算科学（第一原理計算）のみでは、「活物質の製造条件」と「電池の高性能化」との間の関係性を示すことができていなかった。加えて、当該「活物質の製造条件」が本願明細書に記載されていなかった。このため、上述の「4.2(3) 審判段階における拒絶理由」を受ける結果となった。

このように、計算科学のみで「発明の効果」を奏することを示す場合には、その範囲に留意する必要がある。

## 5. 事例3「特願2012-218992」

本事例は、計算科学によるシミュレーションデータの信頼性について、明細書上に十分な記載をしており、拒絶されず特許査定となった出願審査事例である。

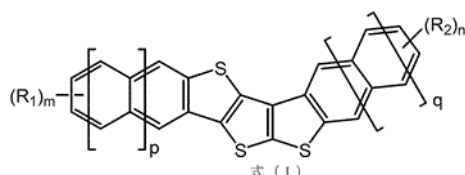
### 5.1 概要

#### (1) 発明概要

本願発明は、非対称ジエチノチオフェン構造を有することを特徴とする半導体化合物に関するものである。本願請求項1は、下記の内容である。

#### 【請求項1】

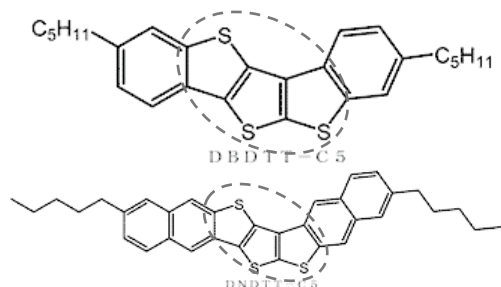
式(I)の構造を有し、



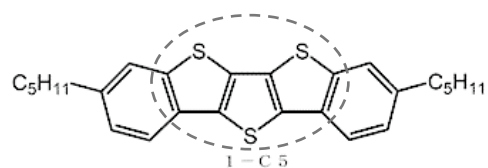
式中、 $R_1$ および $R_2$ は、それぞれ独立して、アルキル、置換アルキル、アルケニル、置換アルケニル、アルキニル、置換アルキニル、アリール、置換アリール、ヘテロアリール、置換ヘテロアリール、アルコキシ、アルキルチオ、シアノ(CN)、ハロゲンから選択され、 $m$ は、 $R_1$ 側鎖の数であり、 $0 \sim 6$ の整数であり、 $n$ は、 $R_2$ 側鎖の数であり、 $0 \sim 6$ の整数であり、 $p$ および $q$ は、独立して、 $0$ または $1$ である、半導体化合物。

#### (2) 実施例

まず分子モデリングにより、以下の構造式



で示される2物質と、既知の半導体化合物であり対称ジエチノチオフェン構造を有する以下の化合物と



を比較している。そして、各化合物のバンドギャップの値が、それぞれ $3.00\text{eV}$ 、 $2.37\text{eV}$ 、 $2.75\text{eV}$ と近いことから、これらの化合物がよく似た電荷輸送能を持つと示されている。

次いで、前述の化合物の固体状態での三次元構造シミュレーションにより、分子が $\pi-\pi$ スタッキングによって積み重なった状態で整列し、電荷輸送に適した結晶多形を形成することが示されている。

ここでポイントとなるのが、前述の化合物を実際に製造して発明の効果、すなわち電荷輸送能を持つことが示されているわけではない点である。化合物が有する電荷輸送能は、分子モデリングと三次元構造シミュレーションを用いた計算科学のみに基づいて検証されている。

### 5.2 出願経過

本願は、早期審査請求の結果、拒絶理由通知を受けることなく、そのまま登録された。

### 5.3 小括

本願実施例で示した内容の通り、本願の出願人は、公知の半導体化合物(1-C5)と新規化合物(DBD TT-C5およびDND TT-C5)のバンドギャップの値が近いことを計算科学によって示すことで、新規化合物が公知の半導体化合物(1-C5)と同等の電気特性を持つことを示している。このことにより、計算科学によるシミュレーションデータが、実験を行った場合の実験値と同視できる程度の信頼性を有することを示している。

さらに、新規化合物が電荷輸送に適した結晶構造をとることを計算科学によって示し、半導体化合物としての有用性を示している。すなわち、半導体化合物の電荷輸送能に寄与する特性等が複数考えられる場合、それらの複数の特性等のいずれについても計算科学により検証されているかを確認する必要がある。

また、分子モデリングが近似モデルである以上、計算科学により求められるバンドギャップの値は実験値とは一致しないことが技術常識であり、計算科学のみで化合物の電気特性を示すには不十分である。このような場合に、類似構造を有し、かつ公知の半導体化合物の計算値と新規化合物の計算値とを比較することは、計算科学によるバンドギャップの値と電気特性との関係性を示すうえで、有用であると言える。

## 6. 考 察

以上検討した3事例から、留意点として以下の2点を指摘することができる(図3)。

**【留意点1】**計算科学によるシミュレーションデータが、実際の実験データと同視できる程度の信頼性を有することについて、明細書で記載するか又は他の文献を用いるなどして裏付けをする必要がある。

**【留意点2】**計算科学によるシミュレーションデータから導かれる一定の特性等について、発明の効果との関係性を十分に示す必要がある(関係性を示すにあたり、他の文献等を用いることも考えられる)。発明の効果と関係する特性等が複数ある場合は、特性等ごとに発明の効果との関係性を示す必要がある。

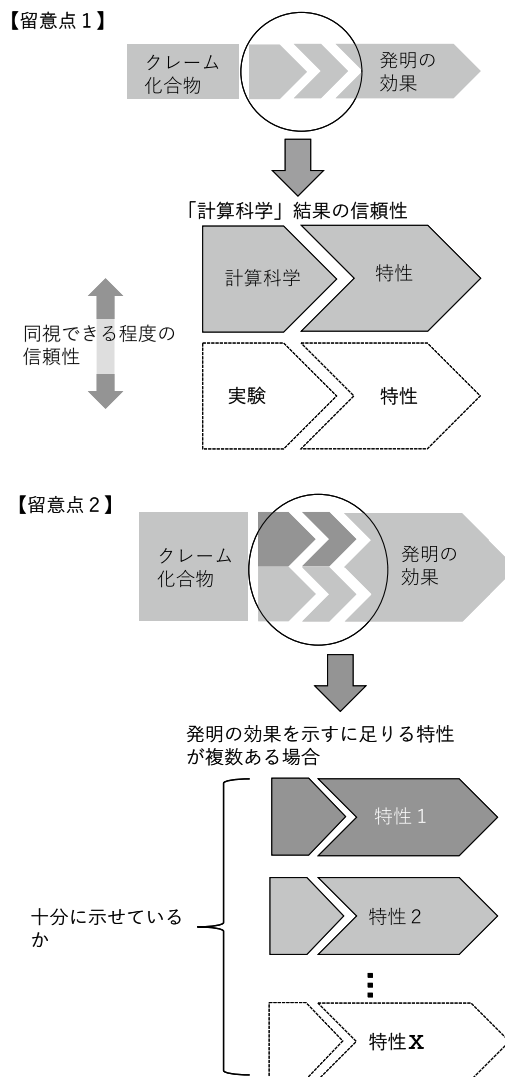


図3 各留意点のまとめ

上記検討した3事例と留意点との関係を表1にまとめた。事例1については、留意点1および2のいずれも記載が不足していた事例である。事例2については、活物質の組成において信頼性に関する記載がなされていたものの、性状に関する記載が不足していた、すなわち、留意点2を充足しない事例である。最後に事例3は、留意点1および2のいずれの条件も満たすように記載がなされていた事例である。

### 6.1 留意点1について

#### (1) シミュレーションデータの「信頼性」

事例1において出願人は、計算科学のシミュ

表1 留意点との関係において各事例を簡略的にまとめた表

	事例1	事例2		事例3	
発明の効果	圧電特性	安価で高性能な二次電池		電荷輸送能	
効果の発現に寄与する特性	組成 (Nz/Nxyz)	活物質の組成	性状	分子構造	結晶構造
特性に関する記載の充足性 (留意点2 関連)	? 不明	○ 有り	× 無し	○ 有り	○ 有り
シミュレーションの信頼性 に関する記載の有無 (留意点1 関連)	× 無し	○ 有り	× 無し	○ 有り	○ 有り

レーションデータについて、仮に実験を行った場合の実験結果との関係で同視できる程度の信頼性を有することを明細書に明確に示さなかった。しかも、その点の指摘を受けた拒絶理由通知に対して応答する段階でも、文献を用いて計算科学によるシミュレーションデータの信頼性を示すことを試みるもそれに成功しなかった。この事例から、【留意点1】計算科学によるシミュレーションデータが、実際の実験データと同視できる程度の信頼性を有することについて、明細書で記載するか又は他の文献を用いた論理展開をする必要があるということが言える。

## (2) 「信頼性」の程度について

計算科学によるシミュレーションデータが、実際の実験データと同視できる程度の信頼性を有することについてどの程度まで明細書に具体的に記載すべきかという点は、事例2及び3が参考になる。

これらの事例では、クレームする未知の化合物について、出願人は計算科学によるシミュレーションデータの信頼性を示すにあたり、効果が既に知られている既知化合物についても同様の計算科学によりシミュレーションデータを取得し、その結果も併せて明細書に記載していた。そして、クレームする未知化合物と効果が知られている既知化合物のシミュレーションデータが類似することを示すことで、言わば実験に等しい実証を行った。

事例2, 3において、審査官は計算科学によるシミュレーションデータの信頼性は否定しておらず、このようにしてデータの「信頼性」を示すことは、実施可能要件違反となる可能性が低くなる論証方法として非常に有用であることがわかった。このことは、特許制度が発明内容の公開と引き換えに独占権を付与する制度であるという特許制度の本質からすれば、至極当たり前かもしれない。しかしシミュレーションデータの「信頼性」についてどの程度具体的に記載する必要があるかということは実務者レベルにおいては非常に気になる問題であり、一審査事例と言えども、実務上参考になると思われる。

## 6. 2 留意点2について

### (1) 計算科学のシミュレーションデータの信頼性について

事例2, 事例3のいずれにおいても、クレームする化合物の効果を示すため、計算科学を用い、かつ用いた計算科学のシミュレーションデータが信頼性を有することを明細書において示している。その意味において、どちらの事例も留意点1に記載の「信頼性」については一応示すことができている。しかし、事例2と事例3とでは、計算科学等を用いて示した特性等の、発明の効果に対する位置付けが異なっており、この点が結果の違いに影響を及ぼしていると考えられる。以下において説明する。

## (2) 発明の効果とそれを構成する特性等について

事例2では、発明の効果である「電池の高性能化」は、正極活物質の組成比だけで単純に決まるものではなく、正極活物質の製造条件に大きく左右され得るものであった。出願人は計算科学のシミュレーションデータを示しつつ、「正極活物質の組成」と「電池の高性能化」との関係性を示した。しかし、「正極活物質の製造条件」と「電池の高性能化」に関しては関係性を示せず、発明の効果との関係を的確に論理展開をすることができなかった。つまり、発明の効果に影響する複数の特性等のうち、一部の特性等について、発明の効果との関係性を示さなかったため、計算科学のシミュレーションデータを用いて示した他の一部特性等のみから、クレームした組成物が本当に発明の効果を有するのかに疑義が生じてしまった。

一方事例3では、出願人は、発明の効果に係る電荷輸送能を構成する特性等として、「バンドギャップ」と「固体状態での構造」という複数の特性等との関係性を検討しており、いずれの特性等の観点からも、クレームする化合物が電荷輸送能を有することを検証している。このように、事例3で出願人は、発明の効果に影響する複数の特性等のいずれの特性等についても、計算科学によるシミュレーションデータを用いる等して、クレームする化合物が発明の効果を有することを示すことに成功した。

以上の2事例から、【留意点2】として、計算科学によるシミュレーションデータから導かれる特性等があるが、この特性等について発明の効果を示す上で十分な特性等である必要があるといえる。この点が不十分な場合は、発明の効果を示すために必要な他の特性等との関係性について、明細書に記載するかあるいは他の文献を用いた論理展開をする必要がある。

なお事例1では、出願人は、「垂直方向の窒

素率」「ヤング率」「圧電定数」という3つの特性等を用いて、発明の効果である「圧電特性の向上」を示そうとした。しかし、「垂直方向の窒素率」に対する「圧電定数」、「ヤング率」の関係性について、何ら知られておらず、これらの特性等と発明の効果である「圧電特性の向上」との関係性は示されていない。

## 6.3 総括

以上に示したとおり、実験例を明細書に記載せず計算科学の結果のみ明細書に記載する場合には、先に述べた点に留意する必要がある。ただ、当然ではあるが、この点に留意すれば実施可能要件を充足することにはならず、物の発明については、実施可能要件として審査基準に記載の要件を満たすよう発明の詳細な説明に記載しなければならない。したがって、実際に製造を行っていない場合であっても、クレームする化合物を製造できると当業者が予想できる製造条件を記載しておく必要があることにも留意されたい。

## 7. おわりに

化学分野の実務者にとって、実験例が一切なく、計算科学の結果のみが記載された明細書は、審査基準の記載に照らすと、率直なところ「そのような明細書が許されるのか？」と感じる実務担当者もいるであろう。そのような特許出願事例について、計算科学と実際の結果との「相関性」という点に着目して留意点をまとめた論稿はあまり見られなかった。その点において、本稿は化学分野の実務者にとって有用な情報になると期待している。

また、計算科学によるシミュレーションは、仮想実証を行うにあたりシミュレーションデータの信頼性が問題になるという点でAIと共通する点もある。なお「特許・実用新案審査基準」事例集に掲載されたAI関連技術に関する事例

本文の複製、転載、改変、再配布を禁止します。

51（嫌気性接着剤組成物）には学習済みモデルの予測精度が問題となった事例が紹介されており、本稿での検討結果と類似する点がある。今後、発明の効果をAIで示すような特許出願事例があった場合に、本稿で示した結論は大いに参考になるであろう。

#### 注 記

- 1) 長倉三郎 井口洋夫 江沢洋 岩村秀 佐藤文隆 久保亮五 編集, 岩波理化学辞典 (第5版), p.799 (1998) 岩波書店

(原稿受領日 2020年7月23日)

