

# データ駆動型 材料開発

オントロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御

監修 船津 公人



### 第1節 自律的物質創製技術

東京工業大学 石附 直弥 東京工業大学 清水 亮太 東京工業大学 一杉 太郎

#### 1 はじめに

近年、マテリアルズ・インフォマティクスの進展が目覚ましい<sup>1)-4)</sup>。元素の組み合わせを考えると新物質の候補はほぼ無限に存在するため、機械学習技術を活用し、大きな探索空間の中で物質を開発することが重要である。

しかし、機械学習を用いて新物質開発を行う試みの多くは、物質の組成や構造をコンピュータ上で予測するとどまる<sup>5)</sup>。予測はあくまで予測であり、期待される物性が発現するか否かは、実際に合成してみなければわからない。現実には、実物を最適な条件で合成し、物性を測定し、良好な性能を発揮するか否かの確認を経て、はじめて新物質の開発が完了する。この実物の合成においては、研究者の勘、経験、知識などのノウハウの活用に加え、トライアル&エラーの反復、つまり、実験で得られた“生データ”の活用により最適化されるのが実情である。

このような生データは論文等で公知にはなっておらず、研究室・企業の開発現場で都度生じるものである。巨大IT企業には機械学習技術はあるものの、物質開発における生データの量は多くない<sup>6)</sup>。幸いにして、日本には一線級の物質を開発する企業が多数あり、多くの生データが日々生成している。研究者のノウハウと生データを活かし、機械学習を活用して迅速に物質開発する、これこそが、日本の強みを活かして、物質開発を加速させる道筋である。

そして、生データを効率的に取得する上で、機械学習とロボットを組み合わせることで、自律的な実験を進めるシステムが極めて重要である。とりわけ、取得した開発現場の生データを活用し、トライアル&エラーを全自動で反復して物質開発を行う「自律的物質創製ロボット」が注目されている。この「自律的物質創製ロボット」は、近年、実践例が増えつつあり<sup>7)</sup>、実験的研究の進め方に大きな変革が起きている。

このようなシステムの活用が進むと、1つ大きな疑問が生じる。自律的物質創製ロボットを駆使して発見した物質は、誰が発見者・発明者となるのであろうか。自律的に実験が進むので、“無人”でも新物質ができる。すると、それは人間が発見・発明したと言えるのであろうか？この問いは、論文のオーサーシップや特許の発明者に関わる根源的なものである。物質開発において論文発表や特許取得は極めて重要であり、上記の問いに対して、十分に考察する必要がある。また、研究者のモチベーションにも関わる。

以上の背景を考慮し、本稿では、学術創成と産業競争に直結する自律的物質創製技術について、動向をレビューする。そして、筆者らの最新の取り組みについて概説する。最後に、自律的物質創製ロボットを用いた物質開発における発明・特許について考察し、本技術が社会実装

された後の研究者の役割を考察する。

## 2 自律的物質創製技術の概況と世界的な動向

以下、自律的物質創製ロボットに関わる主なトピックについて概観し、世界的な動向を記す。ここでの「自律的」とは、「ロボットシステムが自ら仮説を立てて新知識を実験的に確かめる」と定義する。つまり、探索・評価・条件判断・次の探索条件へのフィードバックのサイクルが全て自動化され、研究者の介入を一切必要としないものを指す。このようなサイクルが自動化していることを Closed-loop と呼ぶ。

この技術の発展のステージを3つに分類する。

**ステージ1:** 目的とする「物質」が明確であり、それを合成するための実験条件を自動的・自律的に探索し、短期間で最適物質を合成する。一般に、さまざまな実験パラメータを振る場合、多次元空間内の探索となり、人力で実行するのは難しい。そこで、自律的物質創製ロボットの有する圧倒的な実験回数を武器として物質を合成する。目的物質が明確であるため、新物質探索というよりも、合成条件最適化という側面が強い。

**ステージ2:** 目的とする「物性」が明確であり、それを達成する物質を探索する。ステージ1に比べて、物質の組成を大きく振り、構造が異なる物質をも探索する。

**ステージ3:** 人間が全く予想しなかった物質の発見や、新しい学理を構築する<sup>8)</sup>。ステージ2までが実験回数を武器とするのに対し、ステージ3では、科学的な事前知識やマテリアルズ・インフォマティクスを活用し、多次元空間内を俯瞰的に見つつ、戦略的に探索する。そして、新学理につなげる。

現状では、ステージ1については基本技術が確立したとあってよいだろう。原理実証は済み、適用範囲を広げる段階である。そして、ステージ2への取り組みが活発な状況である。本稿では、このステージ2までを主題とする。ステージ3については、端緒についたばかりであり今後の発展が期待される<sup>9)</sup>。

以下、表1に沿って、自律的物質創製ロボットの概況と世界的な動向をレビューする<sup>10)-13)</sup>。化学合成ロボットや評価ロボットに関しては多くの報告があるが<sup>15)</sup>、合成・評価のみならず、その結果を受けた実験条件の改善(フィードバック)までも自動化し、全体をシステム化することが、物質創製のプロセス全体の高速化に極めて重要である。ここでは、自律的物質創製ロボットを実際に構築し、「全自動」で物質を「自律的」に「創製」した例を主として取り上げる。

### 2.1 ステージ1: 目的物質の収率や反応条件等の最適化

ロボットによる自律的物質創製のアイデア自体は化学分野において古くから存在しており、例えば、1978年には、化学反応パラメータを最適化する全自動 Closed-loop ロボットのシステム設計が提案されている<sup>14)</sup>。ただし、この提案はシステム設計にとどまっており、ロボットを用いた実験結果の報告はない。

国立衛生試験所の松田らは1980年代に、ロボットシステムを用いた反応条件の最適化につ

表1 ロボットによる自律的物質創製の主な事例

研究グループ	報告年	ロボット機構	最適化目的 / 創製した物質	変数 / アルゴリズム
松田 <sup>15)16)</sup> (国立衛生試験所)	1987 1988	試験管を操作する アームとハンド	(分析法における呈色の最 大化)(ステージ1)	試薬量, 反応時間等を Simplex法で最適化
B. Maruyama <sup>17)</sup> (米国空軍研究所)	2016	加熱と分光測定を 同一レーザーで実 行	成長速度を最大化したカー ボンナノチューブ(ステー ジ1)	温度, 圧力, ガス組成 を遺伝的アルゴリズム で最適化
A. Clare, R. D. King ら <sup>19)20)</sup> (英国ウェールズ大)	2009	液体処理ロボ, アーム, 培養器な ど	酵母の遺伝子の発見(ス テージ2)	背景知識のインプット と, 仮説, 検証, 評価 の繰返し
A. I. Cooper <sup>21)</sup> (英国リバプール大)	2020	研究室内を移動す る自走式ロボット	光触媒活性を最大化した光 触媒組成物(ステージ2)	組成物の配合比をベイ ズ最適化
C. P. Berlinguette <sup>22)</sup> (カナダ・プリティッ シュコロンビア大)	2020	グリッパー, ピ ペット, アーム	正孔移動度を最大化した正 孔輸送層(ステージ2)	アニール時間とドーパ ント濃度をベイズ最適 化
K. F. Jensen <sup>25)</sup> (米国 MIT)	2010	液体原料によるフ ロー合成	Heck 反応の収率最大化(ス テージ1)	原料試薬比率と温度を Simplex法で最適化
L. Cronin <sup>27)</sup> (英国グラスゴー大)	2015	液体原料によるフ ロー合成	イミン合成の収率最大化 (ステージ1)	原料比率と反応時間を Simplex法で最適化
J. C. deMello <sup>30)</sup> (英国インペリアル・ カレッジ・ロンドン大)	2007	液体原料によるフ ロー合成	発光波長と発光強度を最適 化した無機ナノ粒子(ス テージ2)	試薬量, 反応時間を SNOBFIT法で最適化
X. Zhu <sup>31)</sup> (香港中文大学)	2020	液体原料によるフ ロー合成	円偏光二色性を最大化した 無機ナノ粒子(ステージ2)	原料溶液濃度と温度を SNOBFIT法で最適化
A. G. Wright <sup>32)</sup> (英国 Cyclofluidic)	2013	液体原料によるフ ロー合成	Abl キナーゼ阻害性能が最 大の有機化合物(ステー ジ2)	27 × 10 の原料の中か らランダムフォレスト で選択
一杉, 清水ら <sup>33)</sup> (東工大)	2020	アーム, スパッタ リング, 評価装置	電気抵抗を最小化した Nb ドーブ TiO <sub>2</sub> (ステージ2)	酸素分圧をベイズ最適 化

いて報告している<sup>15)16)</sup>。試薬調整→反応→測定→次の条件生成の繰返しを、コンピュータに接続されたロボットが自動的に行った。ここでは、ロボットアームとハンドにより試験管を操作し、2種の試薬の量と反応時間の計3つをパラメータとして、呈色反応を Simplex 法(Super Modified Simplex(SMS)・改良 SMS(SMS2))を用いて最適化している。グリッドサーチ(網羅的な条件探索)では130回の実験が必要であったが、ロボットシステムでは28回以下の実験で最適化を達成した。物質創製ではなく、分析に用いる呈色反応の最適化が目的であるものの、自律的に探索を行うロボットの先駆けとなる事例である。

無機材料を取り扱う自律的物質創製ロボットとしては、米国空軍研究所の B. Maruyama グ

ループの例が挙げられる。彼らは、化学気相蒸着(CVD)法によるカーボンナノチューブの合成において、Closed-loop プロセスを2016年に達成<sup>17)</sup>している。触媒を付着させたシリコンの柱を基板に予め数千個作製した後に、基板を繰り返し動かしながらレーザー(波長532 nm)で柱を1本ずつ加熱し、個々の柱上に成長条件の異なるカーボンナノチューブを合成した。この加熱レーザーをラマン分光法の励起源としても使用し、成長速度をその場観察している。成長速度の最大化を目的として、温度、圧力、ガス組成を遺伝的アルゴリズムで最適化した。なお、このグループからは、最適化アルゴリズムとしてベイズ最適化を適用したとの続報も存在する<sup>18)</sup>。ただし、これらのシステムは、基板に柱を予め作製しておく必要があること、加熱と合成に同一のレーザーを用いていることなど、汎用性は必ずしも高くない。

## 2.2 ステージ2：目的物性を有する物質の創製

英ウェールズ大のA. Clare, R. D. Kingらによる科学者ロボット「アダム」が発表されたのは2009年である<sup>19)20)</sup>。「アダム」は、酵母に関する事前知識を基に、仮説を立て、仮説検証のための実験を考案・実行し、実験結果を解釈し、新知識が見つかるまでこのサイクルを繰り返すという過程すべてを自動化した。具体的な実験内容は、培地で生育する微生物株の成長曲線の測定であり、新規な酵母の遺伝子を3つ「発見」した。装置は、液体処理ロボット、ロボットアーム、培養器などで構成された。自律的探索ロボットに関する世界的に著名な例であり、マテリアル(材料)創製への基盤となる研究である。

続いて、自走式ロボットを用いてマテリアル創製した事例を紹介する。英国リバプール大学のA. I. Cooperグループは、自走式ロボットが実験室の中を移動し、人間が扱うものと同じ機器を用いた実験を可能とした<sup>21)</sup>。光触媒と添加剤の配合比を変数とし、光触媒活性の最大化を狙った。ベイズ最適化によるClosed-loopを繰り返すことで、最初の配合と比べて6倍高い活性を示す光触媒組成物を見出している。このロボットは、毎日21.5時間稼働し、688回の実験を8日で完了した。人間では数ヵ月かかると考えられる。試薬の秤量では、液体原料に加えて粉体原料にも対応している。

有機薄膜の創製については、カナダ・ブリティッシュコロンビア大のC. P. Berlinguetteグループによって2020年に報告された「Ada」が存在する<sup>22)</sup>。Adaは、グリッパー、ピペット、アームを備えたロボットによって、液体注入や基板搬送ができる。ペロブスカイト太陽電池に用いられる有機正孔輸送材料の正孔移動度について、ドーパントと正孔輸送剤との比率、および、アニール時間を変数として、ベイズ最適化により最大化した。原料の調整、基板上へのスピコート、アニール、UV-vis-NIRスペクトル測定、電流-電圧曲線測定、移動度の計算、ベイズ最適化による次の実験の設計、というClosed-loopを繰り返すことにより、従来は9ヵ月かかっていたものが、5日間できるとしている。

## 2.3 フロー合成装置による自律的物質創製への応用

フロー合成装置を用いた自律的物質創製の応用例は、ステージ1、ステージ2を問わず複数存在する<sup>10)11)23)24)</sup>。ここでは、各グループによる取組の例をいくつか紹介する。なお、フロー合成とは、液体をベースとしたマテリアル合成の手法である。

## 〈ステージ1〉

- (1) 米国 MIT の K. F. Jensen グループによる 2010 年の報告<sup>25)</sup>。この時点での報告内容は、有機反応である Heck 反応の収率最大化を目的として、原料比率と反応時間を独立変数とした反応条件最適化である。実験→HPLC 分析→Simplex 法(Nelder-Mead 法)による次回の実験条件提案を全自動 Closed-loop で行った。この他にも同グループは、最適化アルゴリズムの改良(SNOBFIT(Stable Noisy Optimization by Branch and Fit)法の適用)や、装置のモジュール化(可換化)による種々の反応への適用を報告するなど<sup>26)</sup>、精力的に研究を行っている。
- (2) 英国グラスゴー大の L. Cronin グループによる 2015 年の報告<sup>27)</sup>。イミン合成の収率の最適化を目的とし、原料比率と反応時間を独立変数として、Simplex 法(Nelder-Mead 法)で次回の実験条件を最適化した。フロー合成装置にインライン核磁気共鳴(NMR)を組み込んでいる。なお、同グループは、物質創製を行う自律的物質探索ロボット以外に、有機合成の反応探索実験を自律化したロボットを作製するなど<sup>28)29)</sup>、自律的に探索を行うロボットについて活発に研究を行っている。

## 〈ステージ2〉

- (1) 英国インペリアル・カレッジ・ロンドン大の J. C. deMello グループによる 2007 年の報告<sup>30)</sup>。CdSe ナノ粒子の合成において、反応温度、Cd 前駆体および Se 前駆体の原料溶液の注入速度を独立変数とした SNOBFIT 法により、選択した波長での発光強度の最大化を全自動 Closed-loop で行った。
- (2) 香港中文大学の X. Zhu グループによる 2020 年の報告<sup>31)</sup>。原料溶液濃度と温度を独立変数とした SNOBFIT 法により、円偏光二色性を最大化した CsPbBr<sub>3</sub> ナノ粒子を創製した。装置上の工夫として、クラウド化による遠隔操作や、ロボットアーム活用による物性評価装置への試料の移送が挙げられる。
- (3) 英国の新興企業 Cyclofluidic の A. G. Wright グループによる 2013 年の報告<sup>32)</sup>。Abl キナーゼ阻害性能が最大となる有機低分子化合物の創製。270 通り(27 種×10 種)の原料の組合せにおける反応生成物について、合成→評価→活性予測モデルの更新→次に合成する化合物の決定、という Closed-loop を全自動で回している。活性予測モデルでは、ランダムフォレスト回帰により、構造の異なる原料の種類という離散変数を扱っている。

### 3 無機固体材料の高速開発が可能な自律的物質創製ロボット

第2項では自律的物質創製ロボットを概説した。汎用性のある物質創製手法としては、液体原料や粉体原料による物質創製にとどまっており、無機固体原料から創製した報告はない。その理由として、液体原料や粉体原料では原料搬送・攪拌・加熱の各過程のハンドリングが比較的容易であるのに対し、無機固体材料を原料とする場合は、ハンドリングの難易度が高いことが挙げられる。一方で、例えば、電池材料、触媒材料、半導体デバイスなど、世の中に普及している固体デバイスは無機固体原料を用いて製造することが多い。そのため、汎用性のある手

法で、無機固体原料から無機固体材料を創製する技術が極めて重要である。

そのような背景のもと、筆者らは、無機固体材料を原料とし、さまざまな無機固体材料の高速開発が可能な「自律的物質創製ロボット」の開発に世界で初めて成功した<sup>33)</sup>。本装置は、広く用いられているスパッタ成膜法による自律的物質創製が可能である。以下、詳細を紹介する。

### 3.1 ロボットシステムの詳細説明

構築したシステムの写真を図1(a)に、概念図を図1(b)に示す。システムは「ロボット部」と「機械学習部」から構成される。「ロボット部」では、試料搬送用ロボットアームにより、合成装置や評価装置間で自由に試料を搬送することが可能である。「機械学習部」では、ベイズ最適化<sup>34)</sup>を用いることで、過去の成膜・評価結果から推定される次の最適な合成条件を逐次的に導き、条件最適化を行うことができる。すなわち、「機械学習部」から指示された合成条件に従って「ロボット部」が合成・評価を行い、結果を「機械学習部」に報告し、更新されたデータセットから「機械学習部」が次の条件を再度指示する、という Closed-loop サイクルを回す(図1(c))。望みの物性を指定した後は研究者が介在せず、機械学習アルゴリズムが全ての判断を行って物質合成を完了することが可能である。

### 3.2 具体的な実験手法

ここでは、ガラス基板上的 Nb ドープ TiO<sub>2</sub> 薄膜の電気抵抗<sup>35)-37)</sup>を低抵抗化する例を紹介する。本稿では酸素分圧の最適化に焦点をあて、最も電気抵抗が低くなる TiO<sub>2</sub> 薄膜を作製した。ロードロック内には、あらかじめ、複数枚のガラス基板をストックし、合成と評価は大気非曝露で実行できるように装置を構成した。

合成：ロボットアームがロードロックからガラス基板を1枚取り出し、合成装置へ自動搬送して、TiO<sub>2</sub> 薄膜を自動でスパッタ成膜した。スパッタ成膜とは、高エネルギーガス(ここでは

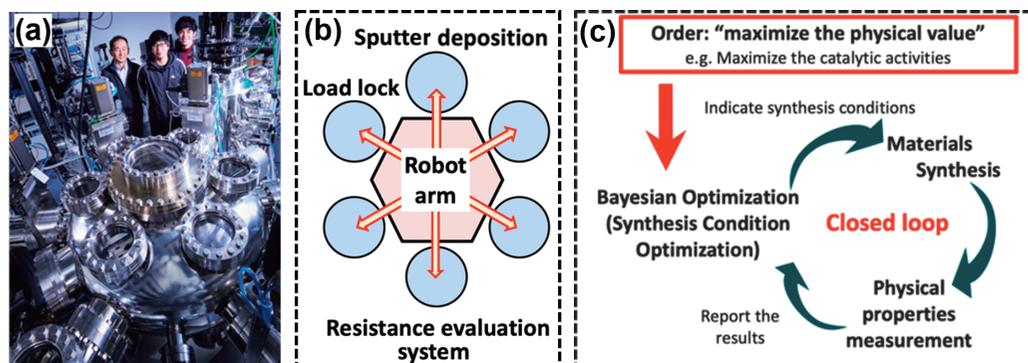


図1 (a)装置写真 (b)装置概略図 (c) Closed-loop cycle 概要 (ベイズ最適化で指示された成膜条件に従い、ロボットが薄膜を搬送・成膜・評価する。これらの成膜・評価・最適化サイクルは上位の統括コンピュータで制御され、研究者が介在する必要がない。)

Ar や O<sub>2</sub> ガス)を原料物質に衝突させ、飛散した原料物質を基板に堆積させる方法である。2種類の Ti : O 比の異なるターゲットとして、Ti<sub>0.94</sub>Nb<sub>0.06</sub>O<sub>2</sub>(T1)、Ti<sub>1.98</sub>Nb<sub>0.02</sub>O<sub>3</sub>(T2)を用い、Ar ガスと Ar(99%)-O<sub>2</sub>(1%)混合ガスの混合比を調整して薄膜内の酸素含有量の最適化を行った。全圧は 0.50 Pa、出力は RF-100 W、蒸着時間は 1 時間、膜厚は ~ 120 nm であった。蒸着中の基板温度は室温とし、蒸着後に 400°C、15 分の加熱処理を行い、薄膜を結晶化させた。

**評価：**合成完了後、室温近くまで ~ 20 分放冷した。その後、電気抵抗自動測定装置に試料を自動搬送し、電極探針を試料に自動で接触させ、2 端子の電気抵抗測定を行った。

**ベイズ最適化：**ベイズ最適化では、目的関数  $f(x)$  へのパラメータ  $x$  の影響が不明な際に、このブラックボックス関数  $f(x)$  を確率的に表現する。今回は、薄膜合成条件である酸素分圧を  $x$ 、得られた薄膜の電気抵抗値 (R) の常用対数値 ( $\log_{10} R$ ) を  $f(x)$  とみなし、 $f(x)$  が小さい薄膜を得るために次にどのような  $x$  の数値で薄膜合成すればよいのか推定した。最初の 3 回の成膜条件は、まばらな条件となるように研究者側であらかじめ設定した。4 回目以降の成膜条件からは、前回の成膜・評価後に、それまでに得られた抵抗率と成膜パラメータのセットから、次回に最適と考えられる成膜パラメータをベイズ最適化により推定し、回りの成膜・評価を行った。このサイクルを繰り返して、収束した時点で最適化完了とした。

### 3.3 結果と考察

図 2(a-c)に Ti<sub>0.94</sub>Nb<sub>0.06</sub>O<sub>2</sub>(T1)ターゲットを用いた際の電気抵抗の酸素分圧依存性を示す。人間が関与することなく、推定→合成→評価→推定という Closed-loop が自動的に回り、自律的に実験が行われた。~ 15 回以降では、「機械学習部」が類似の酸素分圧を指示するようになっており、収束していると判断した。酸素分圧に依存して抵抗値が変化の様子は過去の実験報告と矛盾がない<sup>38)</sup>。このようにして、完全に全自動で、最適な酸素分圧を  $7.29 \times 10^{-4}$  Pa と決定することができた。図 2(d-f)に Ti<sub>1.98</sub>Nb<sub>0.02</sub>O<sub>3</sub>(T2)ターゲットを用いた際の電気抵抗の酸素分圧依存性を示す。こちらも ~ 15 回で最小値である  $2.43 \times 10^{-3}$  Pa のところに収束した。推定曲線が Ti<sub>0.94</sub>Nb<sub>0.06</sub>O<sub>2</sub> のものと比較して右にシフトしており、これは原料ターゲット内の酸素含有量が少ないことと辻褃が合っている。

この全自動 Closed-loop 過程において、特筆すべきことが 2 点ある。1 点目は、探索範囲内に極小領域が 2 つ存在する中で、正しく global minimum を探索できている点である。2 点目は、10 倍程度のスループット向上を達成できた点である。人間の場合は一日当たり 2 試料が作製可能で、土日やミーティング等を考慮すると ~ 1 試料 / 日程度であるが、このロボットシステムでは ~ 10 試料 / 日を実現し、本系では約 1.5 日で電気抵抗最小化を完了した。今回は酸素分圧のみの次元最適化であったが、スパッタ成膜では、成膜温度、スパッタ圧力、ガス流量とその比率、ターゲットへの投入電力など多数のパラメータがある。多次元空間の最適化は人間では難しいが、ベイズ最適化は任意の次元で可能である。次元数が増大すればするほど、ベイズ最適化とロボットの有用性は増す。

図 1(b)の通り、我々が提案したシステムは、ロボットアームを中心に各装置を連結している

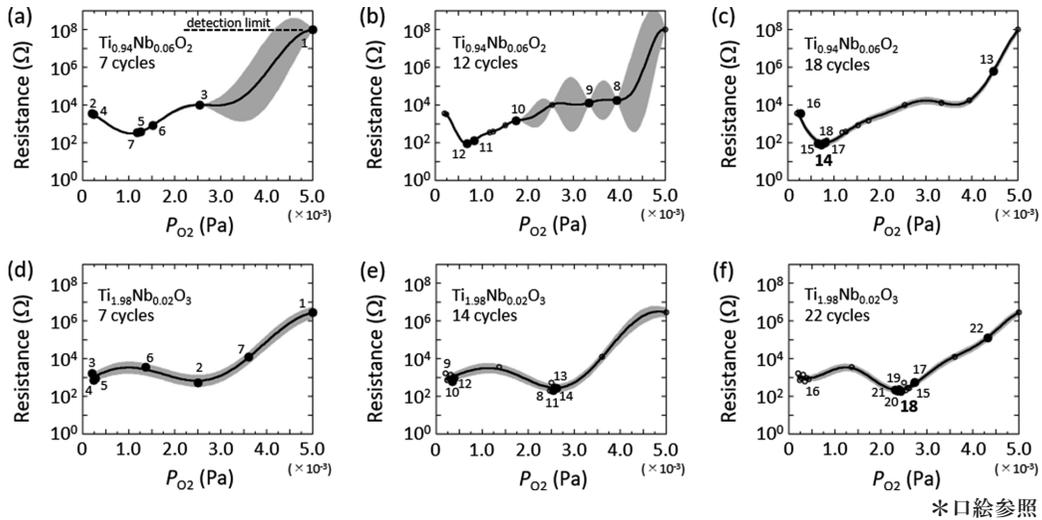


図2 Ti<sub>0.94</sub>Nb<sub>0.06</sub>O<sub>2</sub> ターゲット (a-c) と Ti<sub>1.98</sub>Nb<sub>0.02</sub>O<sub>3</sub> ターゲット (d-f) を用いた電気抵抗のベイズ最適化の過程 (実線は推定曲線, 網掛領域は信用区間を表す。Ti<sub>0.94</sub>Nb<sub>0.06</sub>O<sub>2</sub> ターゲットでは14回目、Ti<sub>1.98</sub>Nb<sub>0.02</sub>O<sub>3</sub> ターゲットでは18回目で最小の抵抗値 ( $R_{\min}$ ) を得た。 $P_{O_2}$  は酸素分圧を表す。)

ので、合成装置、評価装置のモジュール化が可能である。目的に応じて種々の合成装置、評価装置を組み合わせることができるので、汎用性が高いシステムとなっている。そして、評価装置を複数拡張すれば、光学・誘電・磁気特性などのさまざまな物性の自動測定を行うことが可能となる。現実の材料開発では複数の物性のバランスをとることがよく行われているが、その場合は、各物性値に重みづけをした値(例えば、物性値 A × (物性値 B)<sup>2</sup>)をベイズ最適化の最大化または最小化の対象とすることや、複数の物性のパレート解を求める多目的最適化<sup>39)</sup>を行うことが可能であろう。また、材料創製時点では興味がない物性があったとしても<sup>\*1</sup>、その時点で“ついでに”ロボットに測定させておくことで、想定外の物性の発見、すなわち、セレンディピティにつながる可能性がある。さらに、複数の物性の測定によりデータベースが構築できるので、新たな機械学習への活用など、その後の研究開発にも大きく役立つ。

無機材料の場合、微量の元素の組成変化により、絶縁体にも半導体にも金属状態にもなり得る。再現性ある実験のためには、不純物混入や酸化、作業者の属人的な“癖”といった不確定要素を排除する必要がある。しかし、大気非曝露で合成から測定まで完結するロボットは、これらの不確定要素を排除でき、データの質の保証が可能という大きな利点を有している。

## 4 自律的物質創製ロボットを活用した場合の発明および特許に関する考察

有用な物質を発明した場合は特許を取得することが一般的である。では、人間が関与するこ

\*1 従来の研究では、1つの物質を合成すると、自分が興味ある物性だけを評価して、その他の特性を評価しない例が多い。

となく、物質探索が進むとしたら、人間が発明したと言えるのだろうか。自律的物質創製ロボットは特許法上の「発明者」になれるのであろうか<sup>20)</sup>。ここでは、このようなロボットが関わる特許について、特許申請で重要な発明者・記載要件・進歩性の観点で考察<sup>\*2</sup>する(図3)。

#### 4.1 発明者

現在の特許制度において、発明者は人間であることが前提である<sup>40)</sup>。これは、日本に限らず、主要外国庁<sup>(41)~(45)</sup>でも概ね同様である<sup>\*3</sup>。機械学習技術の進展は目覚ましいものの、現在の技術水準では、機械が知能を有するとしても、課題設定やデータ解釈など、発明における人間の寄与はいまだ大きい。機械学習による自律化の程度、翻れば、人間の寄与がどの程度であれば「人間による発明」と言えるのかは議論があるものの<sup>46)</sup>、現時点では、自律的物質創製ロボットは特許法上の発明者にはなれず、それを使いこなした人間が発明者となるであろう<sup>\*4</sup>。

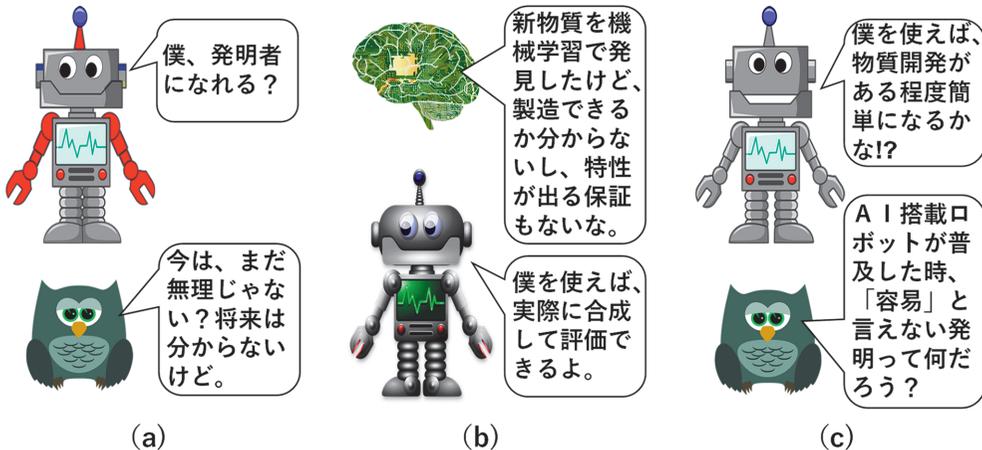


図3 自律的物質創製ロボットを活用した場合の(a)発明者、(b)記載要件、(c)進歩性に関する論点の整理

- \*2 筆者の1人である石附は、特許庁から、東京工業大学物質理工学院に研究生として留学している。本項の内容を含めて、本稿全体は、特許庁としての見解を代表するものでなく、あくまで、研究生としての私見を述べている。
- \*3 本稿執筆の2021年9月時点でホットな話題である。英国サリー大学のAbbottらは、発明者がAIになり得るかを問題提起するため、AIである「DABUS」を発明者とし、各国・地域に特許出願した。これらの出願に対しては、欧米の特許当局や裁判所が、相次いで、AIは発明者になれないとの判断を下した。こうした中で、南アフリカの特許当局は、司法判断を経ずにAIを発明者とした特許を認めた。また、豪州連邦裁判所は、AIが発明者になれるとの判決を出した(高裁で覆る可能性はある)<sup>43)57)</sup>。なお、日本特許庁は、日本国内の出願書類に発明者としてAIを記載することは認めていないと、2021年7月にHP上で公開している。また、特許法等の文言やその解釈は各国・地域で異なるため、AIが発明者であると認められる国と認められない国とは混在し得る。
- \*4 現時点では、ロボットは特許法上の発明者になれないであろうが、AI技術の進化に伴い人間の寄与が大幅に小さくなった場合は、別途議論が必要と思われる。例えば、数千人のプログラマーが少しずつ関わったAI技術が自律的に発明した際に、密接に関与していないために発明者として人間の名前を挙げられず、AIも発明者になれない場合を考える。このような場合は、AI技術の進化に従い、将来起り得る。その場合に、発明者不在により特許を取得できないとしたら、結果として、企業がAI技術に投資しなくなり、産業発展が滞る可能性がある<sup>42)</sup>。しかしながら、AIが無尽蔵に発明をすると、特許が乱立することで企業活動が阻害され、産業発展が滞る恐れもある<sup>46)</sup>。

## 4.2 記載要件

日本における特許出願の記載要件には、特許を受けようとする発明が明確であることに加え、①その分野における通常の知識を有する者(当業者)がその発明を実施可能である程度に説明されていること、②その発明が課題を解決できるという裏付けがあること、などの要件があり、これらを全て必ず満たさなければならない。

機械学習を用いて予測した有用な新物質を、特許を受けようとする発明として記載し、特許出願する場合を考える。この場合のうち、製造と評価を実際に行った実施例が説明されておらず、機械学習による予測精度について検証した説明もない特許出願を仮定して、上記の記載要件①と②に照らし合わせて検討する。①出願時の技術上の常識などにより当業者が製造できたと認められない限り、実際に製造されていないので、特許を受けようとする発明が実施可能である程度に説明されているといえない。また、②機械学習による予測結果が実際の評価結果に代わり得るとの技術上の常識が、当該分野において出願時に存在したと認められない限り、実際に評価がなされていないので、課題を解決できる裏付けがあるともいえない。すなわち、出願時の技術上の常識を考慮したとしても、実施可能であるといえないとき、または、裏付けがあるといえないときは、記載要件に違反するため、特許を取得できない<sup>47)48)</sup>。記載要件に違反し特許を取得できないという考え方は、現時点の技術水準では、機械学習のみで予測された多くの物質に当てはまるかもしれない。

しかし、これまで述べてきた自律的物質創製ロボットは、「実際に物質の製造と物性評価」を行うことができる。そのため、このロボットにより発見された新規物質は、実際に製造した条件と物性評価結果を特許出願に記載することで、特許の記載要件を満足し得る。これは、自律的物質創製ロボットにおける、単なる機械学習や理論計算による物質予測との大きな相違点である。

## 4.3 進歩性

特許を受けようとする発明は「進歩性」を満たす必要がある。では、自律的物質創製ロボットにより「進歩性」の判断は変わるのであろうか？

日本において、「進歩性」を満たす発明とは、特許出願時において当業者が容易に発明できるといえない発明である。進歩性の判断では、①進歩性を否定する要素と、②進歩性を肯定する要素とが総合的に評価される。上記①、②を具体的に考えると、①容易に着想できるといえる論理が成り立つかどうかという進歩性否定要素と、②技術水準からの予測を超える有利な効果が存在するか否かなどという進歩性肯定要素との総合的な評価の上で、当業者が容易に発明することができたか否かで判断される。

ここで、当業者が利用できる程度に高精度の人工知能(AI)が普及した場合、材料開発に高精度AIを活用しようと当業者が考えるのは当然であるから、進歩性のハードルが引き上がるといった指摘は多数<sup>49)-51)</sup>なされている<sup>\*5,\*6</sup>。これを自律的物質創製ロボットに当てはめると、

\*5 進歩性への影響について述べた学説の中には、AIとロボットの組み合わせに言及する例もある<sup>49)</sup>。

\*6 ただし、現時点では、AIの精度が高くないことが一般的であり、特許審査実務上、進歩性の要件は見直されていない<sup>50)</sup>。

現時点ではまだ、このロボットが通常の技術的手段とまではいえないので、進歩性の判断が現時点では変更されないと考えられる。ただし今後は、本ロボットの社会実装が進むにつれて状況は変わり得る。例えば、数値条件を最適化した発明については、本ロボットが活躍可能な場面が少なからず存在するだろう。私見(石附)ではあるが、①本ロボットを用いることで容易に着想できたといえる論理が十分に構築できた場合、②の「有利な効果」の考慮との兼ね合いではあるものの、本ロボットの普及前と比べて進歩性を満たすためのハードルが高くなるかもしれない\*7。

## 5 おわりに—自律的物質創製ロボットの社会実装と研究者の役割

自律的物質創製ロボットは、すでに、社会実装が始まっている。日本のベンチャー企業であるMI-6やCreative AI Roboticsは、このロボットシステムの提供を通じた研究開発の変革を使命としている。SRI インターナショナル<sup>52)53)</sup>は、2020年10月に、創薬・低分子探索に活用できる創薬開発自動化プラットフォームを日本市場へ提供開始した。米国においても、スタートアップ企業であるKebotix<sup>54)55)</sup>が、化学会社バイエルとの協力関係を2021年4月に発表するなど、自律的物質創製ロボットの提供に取り組んでいる。英国リバプール大学のA. I. Cooperらは、2.2で述べた自走式ロボットを提供するためにスピニアウト企業Mobotics<sup>56)</sup>を立ち上げた。自律的物質創製ロボットを活用する動きは国内外で加速している。

ただし、ロボットを活用したといっても、何から何まで自動化されるものではない。研究の課題設定やデータ解釈、用途開拓などは人間の役割として極めて重要である。現在の技術水準では、ロボットを活用して新物質を創製したとしても、人間が、論文の著者になり、特許の発明者になる。さらに、研究には、人間の「勘」「経験」「知識」が活きる。ベイズ最適化を例にとると、実験データの規格化やグリッドの区切り方、ハイパーパラメータの調整等、研究者の勘と経験を活かすところが多数ある。また、「事前知識」を導入して探索範囲を適切に絞ることで、少ない試行回数で物性を最適化できる。研究者は、自律的物質創製ロボットを上手に活用し、創造性の高い研究開発を行うことが重要である。そして、そのような創造性の高い研究開発の結果、人間による発明が生まれ、科学技術や産業の発達に寄与できるだろう。

### 謝 辞

安藤康伸博士(産業技術総合研究所)、小林成氏(東京工業大学・博士課程学生)、中山亮博士(東京工業大学・特任助教)に深く感謝いたします。また、本研究はJST-CREST(JPMJCR1523)、JST-PRESTO(JPMJPR17N6)、科研費(JP18H03876)の支援により行われました。

### 文 献

- 1) 船津公人, 柴山翔二郎: 実践 マテリアルズインフォマティクス, 近代科学社(2020).

\*7 ロボットを活用した場合であっても、容易に発明できると言えない場合(進歩性を満たす場合)も十分あり得る。例えば、発明の課題解決手段(特定のパラメータなど)を着想することがロボットであっても困難な場合や、予想外の有利な効果が得られた場合は、進歩性を満たす発明となり得る。

- 2) 一杉太郎：日本化学会情報化学部会誌, **38**(1), 2 (2020).
- 3) 茂本勇他：マテリアルズ・インフォマティクス Q&A 集—解析実務と応用事例—, 情報機構 (2020).
- 4) 特許出願技術動向調査 マテリアルズ・インフォマティクス, 特許庁 (2020).
- 5) 岩崎悠真：マテリアルズ・インフォマティクス 材料開発のための機械学習超入門, 日刊工業新聞社 (2019).
- 6) 辻井潤一：Japio YEAR BOOK 2019, 12 (2019).
- 7) 永野智己監修・編著：リサーチトランスフォーメーション (RX) ポスト /with コロナ時代, これからの研究開発の姿へ向けて, 国立研究開発法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター (2021).
- 8) 北野宏明：人工知能, **31**(2), 275 (2016).
- 9) 一杉太郎：理論化学会 学会誌「フロンティア」, **3**(3), 171 (2021).
- 10) C. W. Coley et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**(52), 23414 (2020).
- 11) T. Dimitrov et al.: *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11**, 24825 (2019).
- 12) P. S. Gromski et al.: *Trends Chem.*, **2**(1), 4 (2020).
- 13) N. J. Szymanski et al.: *Materials Horizons*, in press, **8**(8), 2169 (2021).
- 14) H. Winicov et al.: *Anal. Chim. Acta*, **103**(4), 469 (1978).
- 15) 松田りえ子他：薬学雑誌, **107**(9), 683 (1987).
- 16) R. Matsuda et al.: *Chem. Pharm. Bull.*, **36**(9), 3512 (1988).
- 17) P. Nikolaev et al.: *npj Comput. Mater.*, **2**, 16031 (2016).
- 18) J. Chang, et al.: *Sci. Rep.*, **10**, 9040 (2020).
- 19) R. D. King et al.: *Science*, **324**, 85 (2009).
- 20) R. D. King: 日経サイエンス, 4月号, 51 (2011).
- 21) B. Burger et al.: *Nature*, **583**, 237 (2020).
- 22) B. P. MacLeod et al.: *Sci. Adv.*, **6**, eaaz8867 (2020).
- 23) D. C. Fabry et al.: *Isr. J. Chem.*, **54**, 341 (2014).
- 24) Z. P. Zhou et al.: *ACS Cent. Sci.*, **3**(12), 1337 (2017).
- 25) J. P. McMullen et al.: *Angew. Chem. Int. Ed.*, **49**(39), 7076 (2010).
- 26) A. C. Bédard et al.: *Science*, **361**, 1220 (2018).
- 27) V. Sans et al.: *Chem. Sci.*, **6**, 1258 (2015).
- 28) J. M. Granda et al.: *Nature*, **559**, 377 (2018).
- 29) S. Asche et al.: *Nat. Comm.*, **12**, 3547 (2021).
- 30) S. Krishnadasan et al.: *Lab Chip*, **7**, 1434 (2007).
- 31) J. Li et al.: *Nat. Comm.*, **11**, 2046 (2020).
- 32) B. Desai et al.: *J. Med. Chem.*, **56**, 3033 (2013).
- 33) R. Shimizu et al.: *APL Mater.*, **8**, 111110 (2020).
- 34) F. Häse et al.: *ACS Cent. Sci.*, **4**(9), 1134 (2018).
- 35) Y. Furubayashi et al.: *Appl. Phys. Lett.*, **86**, 252101 (2005).
- 36) T. Hitosugi et al.: *Phys. Status Solidi A*, **207**(7), 1529 (2010).
- 37) T. Hitosugi et al.: *Appl. Phys. Lett.*, **90**, 212106 (2007).
- 38) N. Yamada et al.: *Thin Solid Films*, **518**, 3101 (2010).
- 39) M. Harada et al.: *J. Mater. Chem. A*, **8**, 15103 (2020).
- 40) 齋藤歩記他：特許庁, **73**(10), 48 (2020).
- 41) クリス・ミズモト：特許庁, **69**(15), 58 (2016).
- 42) A. Chen: 人工知能は特許法の「発明者」になれるのか?, MIT Technology Review, <https://www.technologyreview.jp/s/180862/can-an-ai-be-an-inventor-not-yet/> [最終アクセス 2021.05.12]
- 43) R. Abbott et al.: THE ARTIFICIAL INVENTOR PROJECT, <https://artificialinventor.com/> [最終アク





**データ駆動型材料開発**  
オートロジーとマイニング、計測と実験装置の自動制御

---

発行日 2021年11月30日 初版第一刷発行  
監修者 船津 公人  
発行者 吉田 隆  
発行所 株式会社エヌ・ティー・エス  
〒102-0091 東京都千代田区北の丸公園 2-1 科学技術館 2階  
TEL.03-5224-5430 <http://www.nts-book.co.jp>  
印刷・製本 藤原印刷株式会社

ISBN978-4-86043-759-6

---

© 2021 船津 公人, 他

落丁・乱丁本はお取り替えいたします。無断複写・転写を禁じます。定価はケースに表示しております。本書の内容に関し追加・訂正情報が生じた場合は、(株)エヌ・ティー・エスホームページにて掲載いたします。

\*ホームページを閲覧する環境のない方は、当社営業部(03-5224-5430)へお問い合わせください。