

# 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きました。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）。

