

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2020年10月22日(22.10.2020)



(10) 国際公開番号

WO 2020/213417 A1

(51) 国際特許分類:
G01N 33/15 (2006.01) G16B 35/20 (2019.01)
G01N 33/50 (2006.01) G16B 40/00 (2019.01)
G16B 15/30 (2019.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2020/015198

(22) 国際出願日: 2020年4月2日(02.04.2020)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2019-078090 2019年4月16日(16.04.2019) JP

(71) 出願人: 富士フイルム株式会社 (FUJIFILM CORPORATION) [JP/JP]; 〒1068620 東京都港区西麻布2丁目2番30号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: 津村 享佑 (TSUMURA, Kyosuke); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 中林 淳

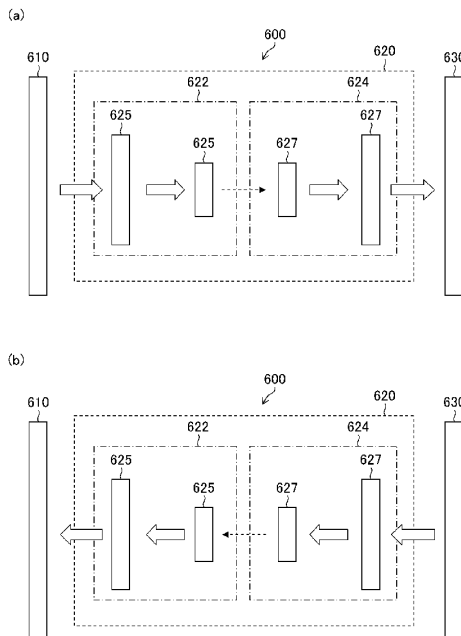
(NAKABAYASHI, Jun); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP). 大平 詩野 (OHIRA, Shino); 〒2500193 神奈川県南足柄市中沼210番地 富士フイルム株式会社内 Kanagawa (JP).

(74) 代理人: 松浦 憲三 (MATSUURA, Kenzo); 〒1630223 東京都新宿区西新宿二丁目6番1号 新宿住友ビル23階 私書箱第176号 新都心国際特許事務所 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ,

(54) Title: FEATURE VALUE CALCULATION METHOD, FEATURE VALUE CALCULATION PROGRAM, FEATURE VALUE CALCULATION DEVICE, SCREENING METHOD, SCREENING PROGRAM, AND COMPOUND CREATION METHOD

(54) 発明の名称: 特徴量算出方法、特徴量算出プログラム、特徴量算出装置、スクリーニング方法、スクリーニングプログラム、及び化合物創出方法



(57) Abstract: One purpose of this invention is to provide a method, program, and device that make it possible to calculate a feature value that accurately represents the chemical properties of a structure of interest. Another purpose of this invention is to provide a method and program that make it possible to efficiently screen for a drug candidate compound using a feature value. Another purpose of this invention is to provide a method that makes it possible to efficiently create the three-dimensional structure of a drug candidate compound using a feature value. Similarity between the degrees of probe accumulation of structures of interest indicates similarity between the chemical properties of the structures of interest; that is, structures of interest having similar feature values calculated according to a first embodiment have similar chemical properties. Therefore, the first embodiment makes it possible to calculate a feature value that accurately represents the chemical properties of a structure of interest.

[続葉有]

WO 2020/213417 A1

NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT,
QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL,
ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG,
US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

- (84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 一 国際調査報告(条約第21条(3))

(57) 要約: 本発明は、対象構造体の化学的性質を的確に示す特徴量を算出できる方法、プログラム、及び装置を提供することを目的とする。また、本発明は特徴量を用いて医薬候補化合物のスクリーニングを効率よく行うことができる方法及びプログラムを提供することを目的とする。また、本発明は特徴量を用いて医薬候補化合物の立体構造を効率よく創出することができる方法を提供することを目的とする。対象構造体どうしでプローブの集積度合いが類似であることはそれら対象構造体の化学的性質が類似していることを示す。すなわち、第1の態様により算出される特徴量が類似な対象構造体は類似の化学的性質を示す。したがって第1の態様により対象構造体の化学的性質を的確に示す特徴量を算出することができる。