

(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
2012年6月21日(21.06.2012)



(10) 国際公開番号
WO 2012/081723 A1

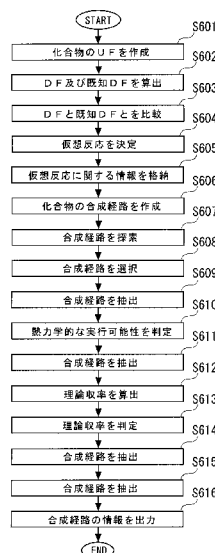
- (51) 国際特許分類:
C12M 1/00 (2006.01) C07C 59/01 (2006.01)
B01J 19/00 (2006.01) C12P 7/40 (2006.01)
C07B 61/00 (2006.01) C12P 7/42 (2006.01)
C07C 51/38 (2006.01) C12P 7/46 (2006.01)
C07C 53/02 (2006.01) C12N 15/09 (2006.01)
- (21) 国際出願番号: PCT/JP2011/079378
- (22) 国際出願日: 2011年12月19日(19.12.2011)
- (25) 国際出願の言語: 日本語
- (26) 国際公開の言語: 日本語
- (30) 優先権データ:
特願 2010-281794 2010年12月17日(17.12.2010) JP
特願 2011-179573 2011年8月19日(19.08.2011) JP
- (71) 出願人(米国を除く全ての指定国について): 三菱化学株式会社(MITSUBISHI CHEMICAL CORPORATION) [JP/JP]; 〒1008251 東京都千代田区丸の内一丁目1番1号 Tokyo (JP).
- (72) 発明者; および
- (75) 発明者/出願人(米国についてのみ): 荒木 通啓 (ARAKI, Michihiro). 宮奥 康平(MIYAOKU, Kohei). 谷口 岳志(TANIGUCHI, Takeshi).
- (74) 代理人: 川口 嘉之, 外(KAWAGUCHI, Yoshiyuki et al.); 〒1030004 東京都中央区東日本橋3丁目4番10号 アクロポリス21ビル6階 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, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

[続葉有]

(54) Title: SYNTHETIC PATHWAY CONSTRUCTING EQUIPMENT, SYNTHETIC PATHWAY CONSTRUCTING METHOD, SYNTHETIC PATHWAY CONSTRUCTING PROGRAM, AND PROCESSES FOR MANUFACTURING 3-HYDROXYPROPIONIC ACID, CROTONYL ALCOHOL AND BUTADIENE

(54) 発明の名称: 合成経路作成装置、合成経路作成方法及び合成経路作成プログラムならびに3-ヒドロキシプロピオン酸、クロトニルアルコールおよびブタジエンの製造方法

[図6]



S601 Production of UFs of compounds
S602 Calculation of DFs and known DFs
S603 Comparison of DFs with known DFs
S604 Determination of imaginary reactions
S605 Storing information on imaginary reactions
S606 Production of synthetic pathways of compounds
S607 Search for synthetic pathways
S608 Selection of synthetic pathways
S609 Extraction of synthetic pathways
S610 Assessment of thermodynamic practicality
S611 Extraction of synthetic pathways
S612 Calculation of theoretical yield
S613 Assessment of theoretical yield
S614 Extraction of synthetic pathways
S615 Extraction of a synthetic pathway
S616 Output of information on the synthetic pathway

(57) Abstract: In order to construct a synthetic pathway of a compound without any limitation on chemical transformation rules, this synthetic pathway constructing equipment is provided with: a conversion section for converting the chemical structures of compounds to universal features (UFs); a calculation section for setting pairs of compounds and subtracting the UF of one of the compounds constituting each pair from the UF of the other to calculate the difference features (DFs); a determination section for comparing DFs of known-reaction pairs of compounds, the reactions related to the known-reaction pairs being known, with DFs of unknown-reaction pairs of compounds, the reactions related to the unknown-reaction pairs being unknown, and thus determining imaginary reactions, which are unknown reactions related to unknown-reaction pairs of compounds that each have the same DF as that of any of the known-reaction pairs of compounds; a synthetic pathway producing section for producing synthetic pathways of compounds using nodes representing compounds and edges representing known reactions and imaginary reactions; and a selection section for selecting synthetic pathways from starting compounds to desired compounds among the synthetic pathways produced above.

(57) 要約: 化学変換則を限定せずに化合物の合成経路を作成する。合成経路作成装置は、化合物の化学構造を数値に変換する変換部と、化合物のペアを作成し、化合物のペアの一方の化合物についての数値から他方の化合物についての数値を減算することにより差分値を算出する算出部と、化合物のペアに関する反応が既知である化合物ペアの差分値と、化合物のペアに関する反応が未知である化合物ペアの差分値とを比較し、差分値が一致する化合物ペアの未知反応を仮想反応として決定する決定部と、化合物を示すノードと、既知反応及び仮想反応のそれぞれを示すエッジと、によって化合物の合成経路を作成する作成部と、出発化合物から目的化合物までの合成経路を、作成された化合物の合成経路から選択する選択部と、を備える。

WO 2012/081723 A1



(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, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, 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, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

- 国際調査報告 (条約第 21 条(3))
- 明細書の別個の部分として表した配列リスト (規則 5.2(a))