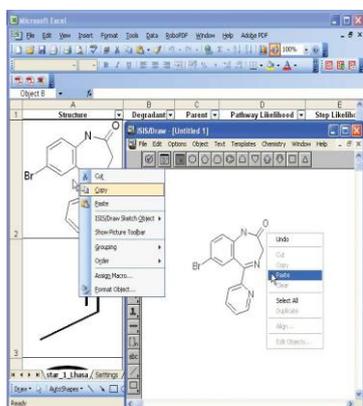


A sophisticated program for the forced degradation pathways of organic compounds



## 分解生成物予測ソフトウェア

### ● 構造入力



Zenethは、化合物の構造からその分解生成物を予測する知識ベースのエキスパートシステムです。

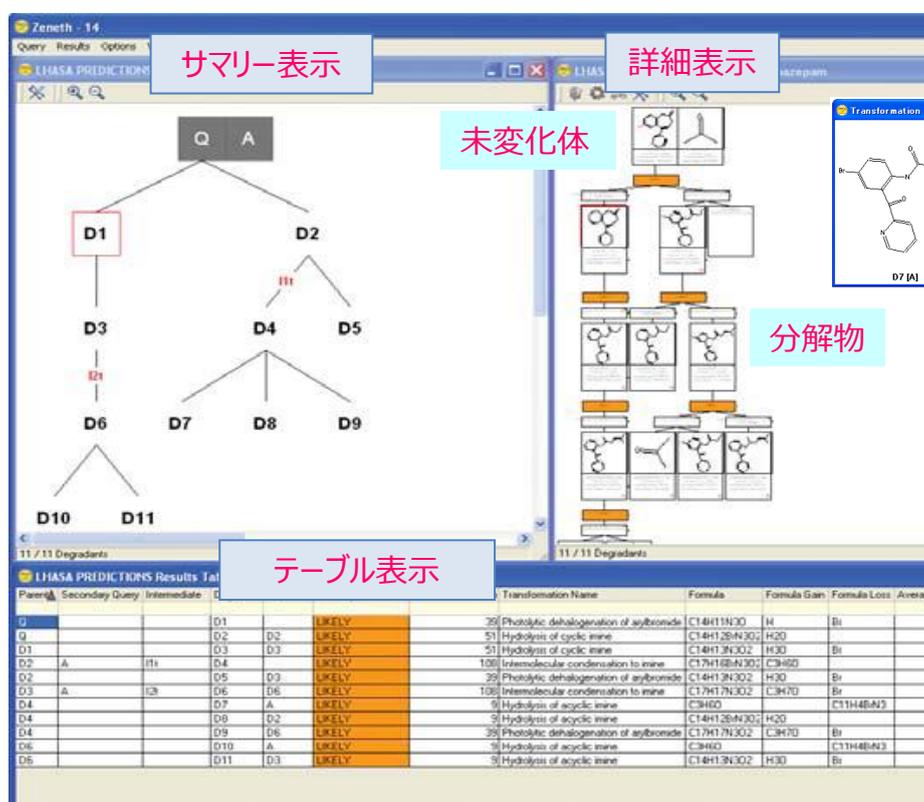
Zenethは、多くの知見から得られる化合物の部分構造と各種分解環境（温度、酸或いはアルカリ存在下、ラジカル共存下、光条件下等）の経験則を定義した知識ベースにより、定性的分解予測を行います。予測結果では、分解生成物の構造以外に、分解経路、適応された知識及びその知識に関連する既知の分解反応データも参照することができます。

CMC分野では、化合物の安定性試験を実施する前に、化合物の安定性に関する情報を得ることができます。予想される分解物構造を知ることによって分解物構造推定作業の効率が向上します。

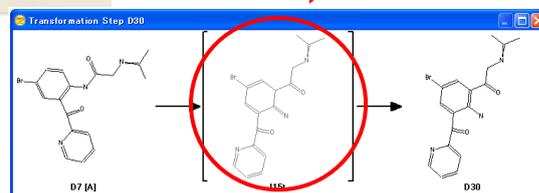
### ● 知識ベース

Zenethで用いられる知識ベースは、ユーザに公開されており、現在215種の分解反応（加水分解反応、酸化反応、縮合反応、異性化反応、転移反応等）ルールが収録されています。知識ベースの作成には、Collaborative グループのメンバーから提供された情報や文献、ユーザミーティングで話し合われた内容をもとにLhasa社が作成し、作成されたルールの妥当性は、同グループメンバー、並びにLhasa社によりチェックされています。

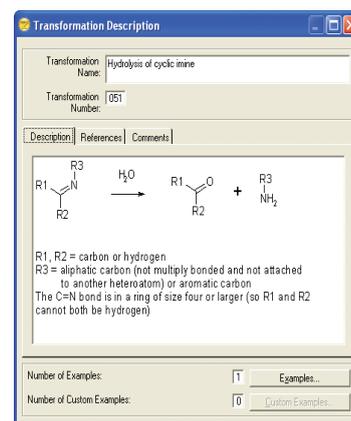
### ● 分解経路の予測



中間体

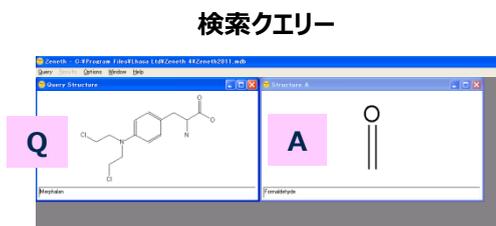


### ● 分解反応ルールの参照

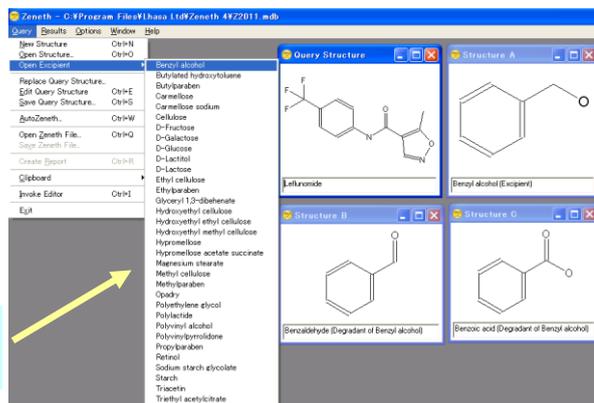


## ● 複数分子が関与する分解反応の予測

ユーザーは、主クエリー化合物 (Q) の他に、分解反応に関与する複数の副化合物 (A、B、...) を指定することができます。製剤化で検討される代表的な賦形剤、添加剤を副化合物に指定することもできます。選択された組み合わせにおける分解反応を予測します。



登録済賦形剤  
及び添加剤



## ● 分解生成物の構造推定をサポート

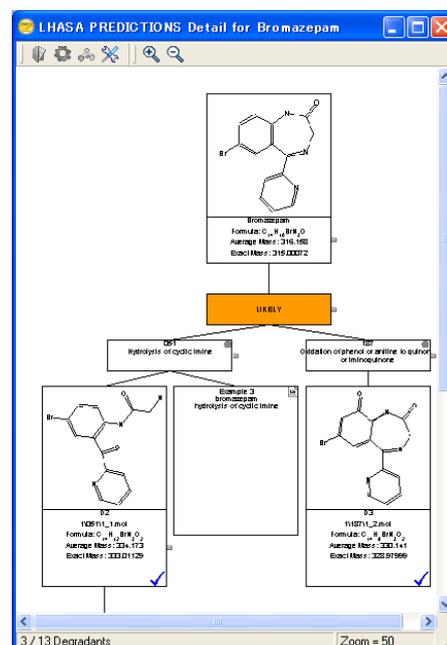
予測分解物の構造が表示され、その平均分子量及び精密質量の値が計算されます。これらの情報を用いることで、NMR 或いは MS データを使った分解物の推定作業が効率的に行えます。

Mass difference

18.0106  
13.9793

Mass tolerance: 0.25

## ● Mass Filtering機能



## ● 知識ベースの構築

知識ベースの構築にはKnowledge base editorというツールが用意されており、ユーザは独自の分解反応ルールを作成することが可能です。

## ● システム稼動環境

項目	Requirements
CPU	Intel Pentium/Celeronファミリー、AMD K6/Athlon/Duronファミリー
ハードディスク空き容量	最低750MB
メモリ	最低1GB (2GB推奨)
Operating System	Microsoft Windows XP SP3, Windows Vista SP2, Windows 7
化合物構造描画ツール	ISIS/Draw 2.5, Symyx Draw 3.1, Symyx Draw 3.2