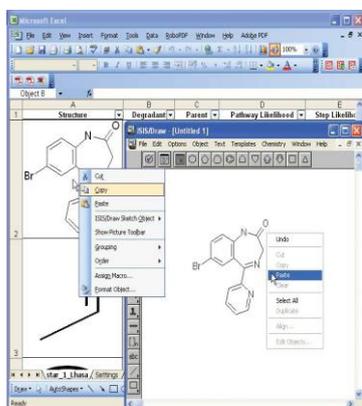


A sophisticated program for the forced degradation pathways of organic compounds



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。

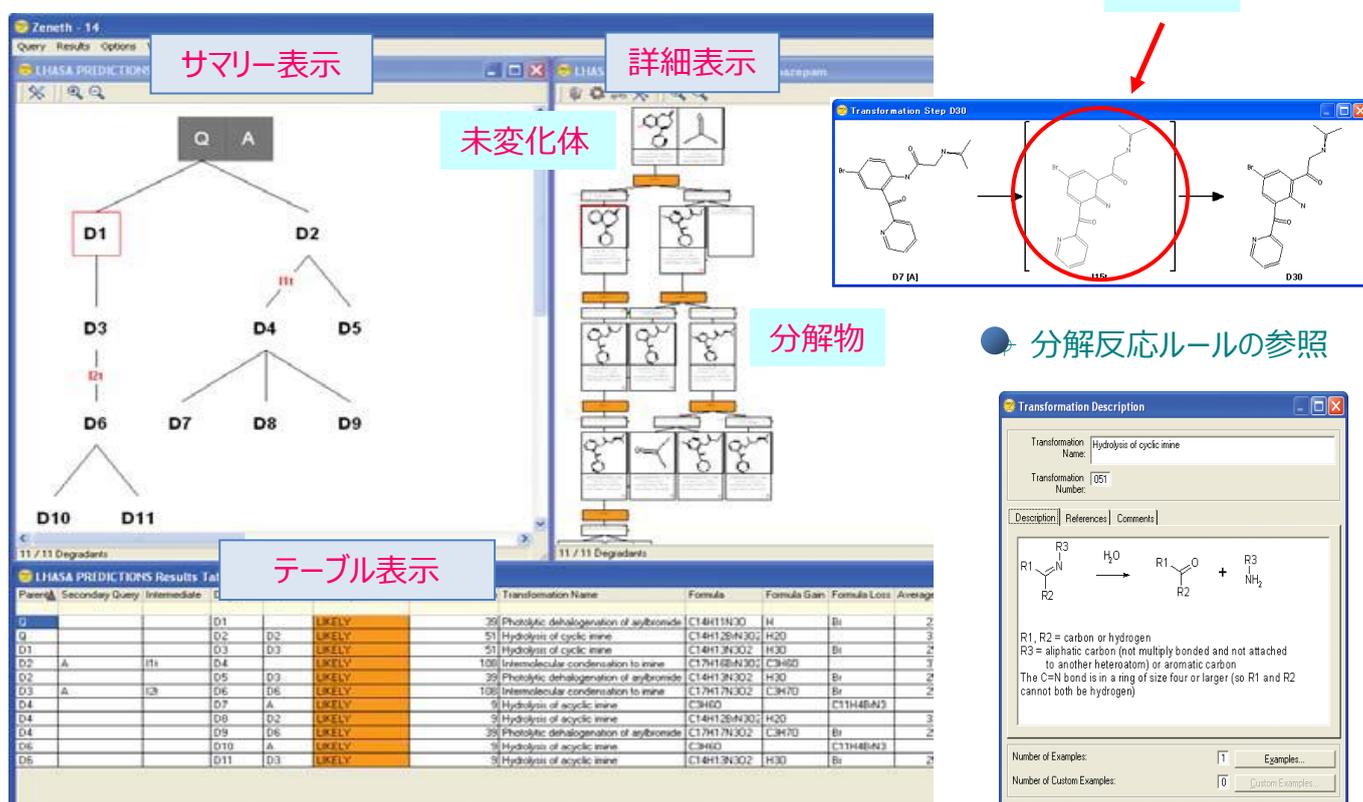
Zeneth は、化合物の部分構造と、その部分構造の各種分解環境（温度、酸或いはアルカリ存在下、ラジカル共存下、光条件下等）における分解反応を蓄積した知識ベースを基に、化合物の定性的な分解反応を予測します。予測結果では、分解生成物の構造以外に、分解経路、適応された知識ベース及びその知識に関連する既知の分解反応データも参照することができます。

Zeneth を用いることで、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予測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には、現在 492 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）のナレッジが収録されています。知識ベースは、Collaborative グループのメンバーから提供された情報や文献、ユーザーミーティングで話し合われた内容等をもとに Lhasa 社 1 で作成されます。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 社により定期的にチェックされております。

● 分解経路の予測



サマリー表示

詳細表示

未変化体

中間体

分解物

分解反応ルールの参照

テーブル表示

Parent	Secondary Query	Intermediate	Transformation Name	Formula	Formula Gain	Formula Loss	Average
Q		D1	39 Photolytic dehalogenation of arylbromide	C14H11N3O	H	Br	2
Q		D2	51 Hydrolysis of cyclic imine	C14H13N3O2	H2O		3
D1		D3	51 Hydrolysis of cyclic imine	C14H13N3O2	H3O	Br	2
D2	A	D4	108 Intermolecular condensation to imine	C17H16N3O2	C3H6O		3
D2		D5	39 Photolytic dehalogenation of arylbromide	C14H13N3O2	H3O	Br	2
D3	A	D6	108 Intermolecular condensation to imine	C17H17N3O2	C3H7O		2
D4		D7	51 Hydrolysis of acyclic imine	C13H10			3
D4		D8	51 Hydrolysis of acyclic imine	C14H12N3O2	H2O		3
D4		D9	39 Photolytic dehalogenation of arylbromide	C17H17N3O2	C3H7O	Br	2
D6		D10	51 Hydrolysis of acyclic imine	C13H10			3
D6		D11	51 Hydrolysis of acyclic imine	C14H13N3O2	H3O	Br	2

Transformation Description

Transformation Name: Hydrolysis of cyclic imine

Transformation Number: 051

Description | References | Comments

$$\begin{array}{c} R^3 \\ | \\ R^1 - C = N \\ | \\ R^2 \end{array} + H_2O \longrightarrow \begin{array}{c} R^3 \\ | \\ R^1 - C = O \\ | \\ R^2 \end{array} + R^3 - NH_2$$

R1, R2 = carbon or hydrogen
R3 = aliphatic carbon (not multiply bonded and not attached to another heteroatom) or aromatic carbon
The C=N bond is in a ring of size four or larger (so R1 and R2 cannot both be hydrogen)

Number of Examples: 1 | Examples...

Number of Custom Examples: 0 | Custom Examples...

