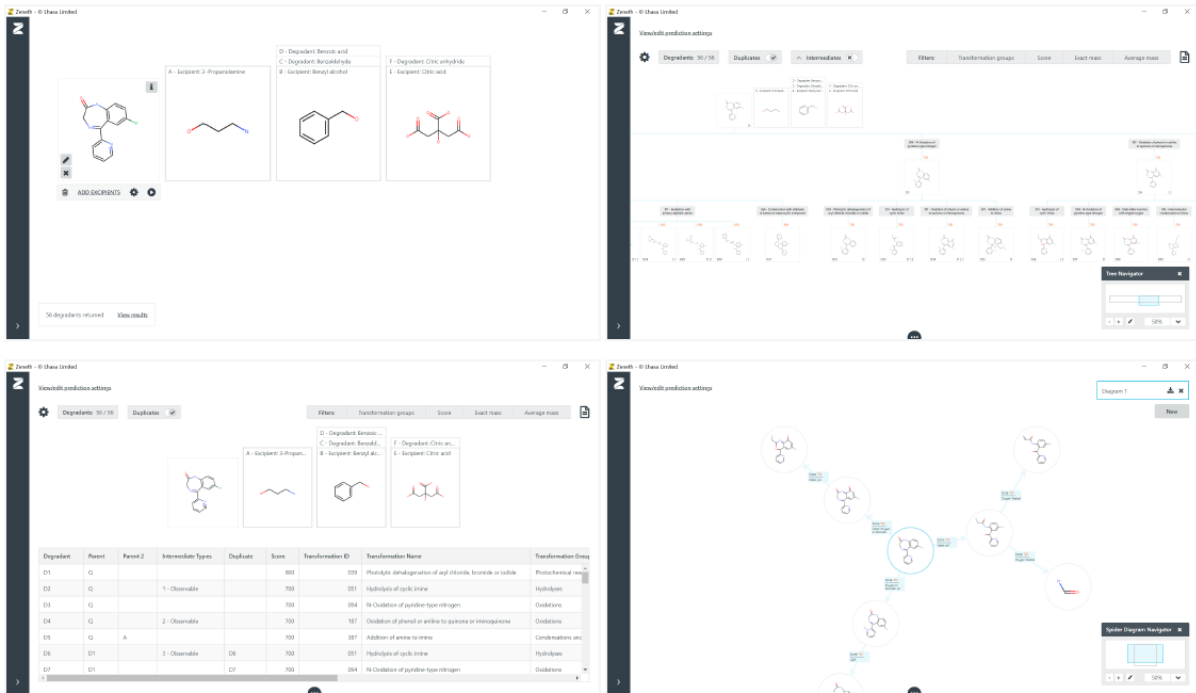


Zeneth8 업그레이드 안내

New UI

Zeneth는 사용자의 편의를 위해 완전히 새로운 인터페이스로 변경되었습니다. 예를 들어, Tree(트리)에서 이제 필터링이 쉬워졌습니다. Intermediates와 switch condition sets을 확인해보십시오.



The screenshots illustrate the new user interface for Zeneth8. The top-left view shows a central chemical structure with four surrounding boxes labeled A, B, C, and D, each containing a different chemical structure. The top-right view displays a complex reaction network with various chemical structures connected by arrows, representing a reaction pathway. The bottom-left view shows a table with columns for 'Dependent', 'Parent', 'Parent ID', 'Intermediate Types', 'Duplicate', 'Score', 'Transformation ID', 'Transformation Name', and 'Transformation Group'. The bottom-right view shows a detailed reaction scheme with a central chemical structure and several arrows pointing to other structures, representing a specific reaction step.

Dependent	Parent	Parent ID	Intermediate Types	Duplicate	Score	Transformation ID	Transformation Name	Transformation Group
03	0				200	039	Phenolic dehalogenation of aryl chlorides, bromides or nitriles	Phenol-based rxns
03	0		1. Oxazole		200	031	Hydrides of cyclic imine	Hydrides
04	0		2. Oxazole		200	034	W Oxidation of pyridine-type nitrogen	Oxidations
04	0				200	037	Oxidation of pyridine or pyridine to quinoxaline or naphthoquinone	Oxidations
05	0	A			200	037	Addition of amine to imine	Condensations and
05	0		3. Oxazole	DN	200	031	Hydrides of cyclic imine	Hydrides
07	0				200	034	W Oxidation of pyridine-type nitrogen	Oxidations

New Platform

업그레이드의 일환으로 Zeneth는 다른 플랫폼에 구축되어 처리 속도가 빨라졌습니다. 이러한 변화는 또한 지식 향상을 포함한 이후의 개발 작업을 더 쉽게 만들 것입니다.

Built-In Structure Editor

이제 구조는 프로그램 내에서 직접 그리고 편집할 수 있게 되어 쿼리 구조와 사용자 지정 첨가물을 예측에 쉽게 추가할 수 있게 되었습니다.

Saved Predictions

결과는 프로그램 내에 자동으로 저장되며 예측 화면을 통해 액세스할 수 있습니다.

Scoring Methodology

확률(Likelihood)은 레이블이 아닌 0-1000의 척도로 숫자 점수로 표현됩니다. 이를 통해 보다 세분화된 값을 제공할 수 있습니다. 점수별 Zeneth7 확률 파라미터는 아래와 같습니다.

0	Impossible
1-199	Very Unlikely
200-399	Unlikely
400-599	Equivocal
600-799	Likely
800-999	Very Likely
1000	Certain

Reasoning

상대적 추리(reasoning)가 제거되고 절대적 추리가 정량적 채점으로 대체되었습니다. 정량적 채점은 이전 페이지의 "Scoring Methodology" 을 참조하십시오.

Transformation Groups

Transformations은 아래 6그룹으로 분류됩니다.

- Condensations and additions
- Eliminations and fragmentations
- Hydrolyses
- Isomerisations and rearrangements
- Oxidations
- Photochemical reactions

예측에서 그룹을 포함하거나 제외할 수 있으며, 변환 그룹을 기반으로 결과를 필터링할 수 있습니다.

Condition Triggers

조건 트리거(Condition Triggers)에 대한 정보는 프로그램 내에서 쉽게 이용할 수 있습니다. 변환하는데 필요한 조건이 표시되며, pH와 온도도 확률(likelihood)에 영향을 줄 때마다 나열됩니다.

Tree Navigator

Tree Navigator는 트리(Tree)를 쉽게 탐색할 수 있습니다.

Enhanced Pathway View

경로 뷰가 향상되었으며 Reaction site의 강조 표시가 이 뷰에서 가능합니다.

Spider Diagram

관심 있는 분류를 표시하는 스파이더 다이어그램을 생성할 수 있으며 프로그램에서 확장 가능한 벡터 그래픽(SVG) 파일로 내보내서 다른 프로그램(예: PowerPoint)에 추가할 수 있습니다.

Search and Filter on Excipients/Counterions

부형제(Excipients)와 반대이온(counterions)은 이름으로 검색될 수 있습니다. 또한 종류(regular, polymer 또는 salt)에 따라 필터가 가능합니다.

C-H BDE Predictor

C-H BDE(탄소-수소 결합의 결합 분리 에너지, bond dissociation energy of carbon-hydrogen bonds)에 대한 property 예측변수가 통합되었습니다. 이것은 대부분의 transformations(radical initiator에 의한 hydrogen abstraction)에서 사용됩니다. Fig.1은 S자형 함수를 사용하여 BDE 값을 점수로 변환하는 방법을 보여줍니다. 예측된 BDE 값은 각각 83.5, 90, 92, 94, 100.5kcal/mol로 900, 700, 500, 300, 100으로 산출됩니다.

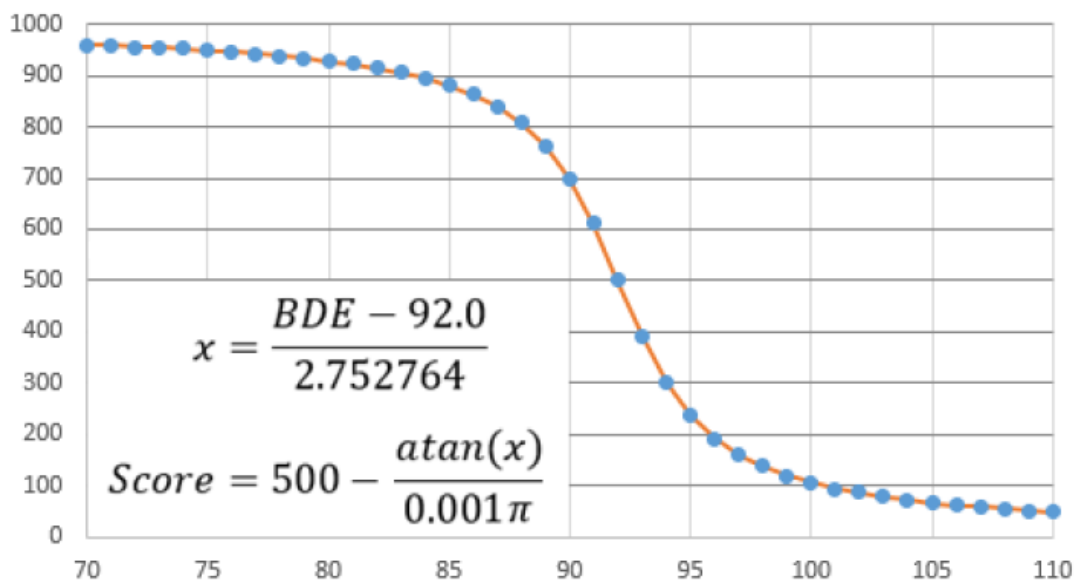


Figure 1. Conversion of BDE values (in kcal/mol) into scores. "atan" is the arctangent function.

pKa Predictor

pKa에 대한 property predictor가 통합되었습니다. 현재 electron-withdrawing group에 대한 H-베어링 카본 알파(H-bearing carbon alpha)의 산도를 평가하는 데만 적용되며, 하나의 변환에 사용됩니다.

Post-Transformation Structure Checker

transformations으로 생성된 Product는 현재 화학적 유효성 검사를 받습니다.

구조체커(structure checker)는 Product가 "불가능한" 기능을 포함할 경우 폐기됩니다. 이러한 기능의 예는 다음과 같습니다(탄화수소 버전에 한해 설명).

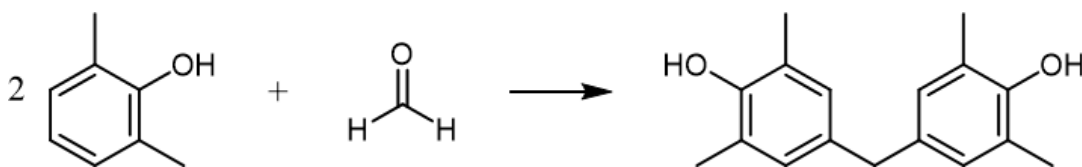


Enhanced Stereochemical Functionality

프로그램은 이제 (예를 들어) SN2 반응과 함께 stereochemical inversion을 적용할 수 있게 되었습니다. 게다가 stereocentre나 이중 결합의 inversion에 영향을 미치는 transformations은 정의되었을 때만 적용됩니다.

Three-Component Reactions

3개 component reactions을 처리할 수 있는 기능이 추가되었습니다. 현재는 반응물 중 하나를 두 번 사용하는 소수의 변환(예: 변환 z509(포름알데히드를 포함한 페놀을 2,2'- 또는 4,4'-메틸렌디페놀로 응축)에 적용됩니다.



Treatment of Aromaticity

Zeneth7에서는 pyrazine이나 thiazole과 같은 "강력한" 방향족 고리만 방향족으로 간주되었습니다. 4-pyranone, uracil, tropone, azulene과 같은 "약한" 방향족 고리는 방향족이 아닌 것으로 보여져 종종 차선의 예측이 이루어졌습니다. Zeneth 8에서는 이러한 고리형식도 방향족으로 처리되고 있습니다. 현재 이 프로그램은 "강력한" 방향족과 "약한" 방향족 고리를 구분하지 않습니다.