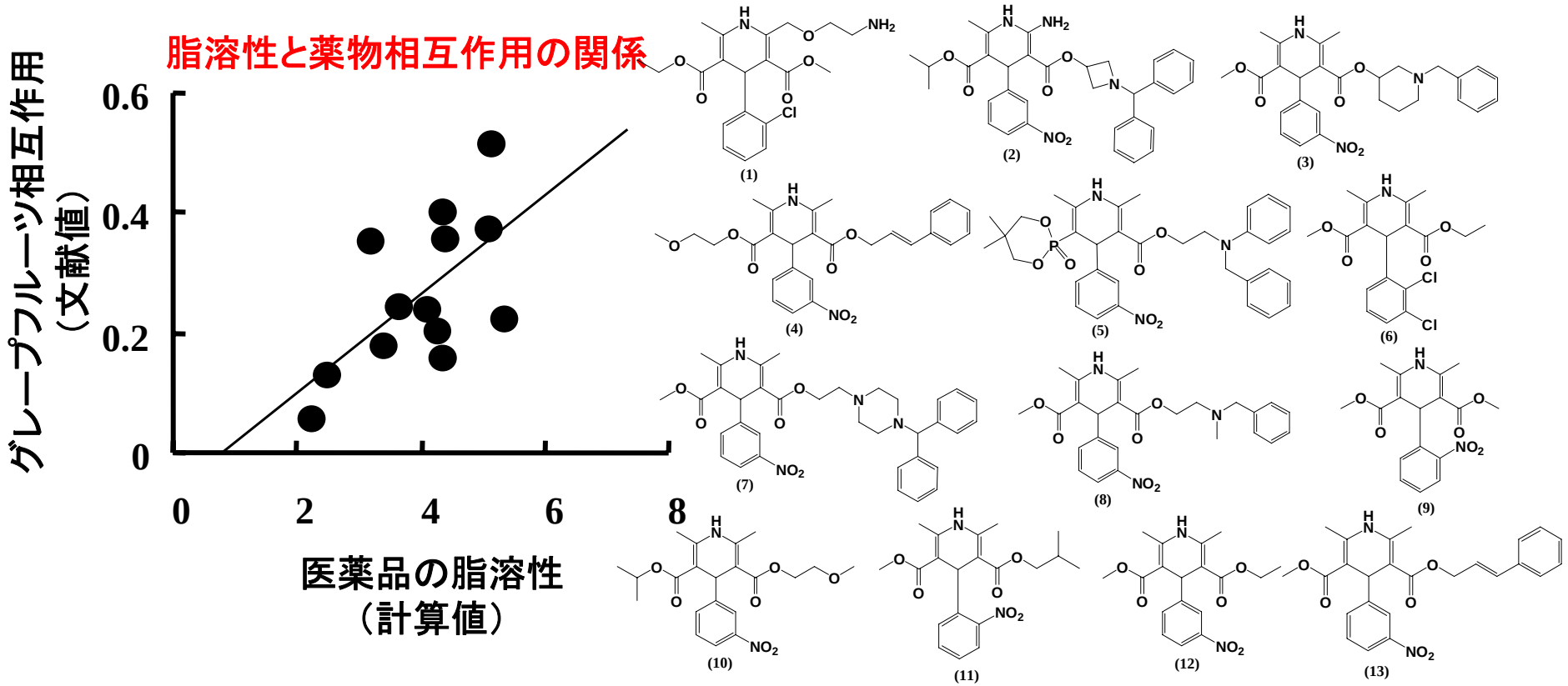
脂溶性（LogP値）とは

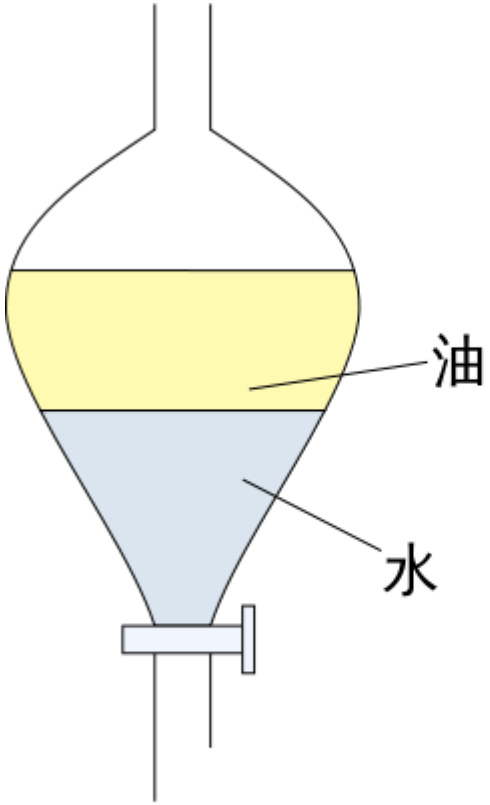
- 化合物の油に対する溶解しやすさの指標
- フラスコ振盪法などにより実験的に測定される。
- 化合物の生理活性や環境毒性を推定する上で最も重要な指標の一つ
- 構造式から脂溶性を推算する方法が、近年のIT技術の進展により多数利用可能
- 本発表では、ネット上のサービスを中心に様々な脂溶性推定法を紹介する

Web上の計算を用いた研究例



Uesawa Y and Mohri K,
Relationship between lipophilicities of 1,4-dihydropyridine derivatives and pharmacokinetic interaction strengths with grapefruit juice.
Yakugaku Zasshi 128(1):117-22(2008).

フラスコ振盪法



① 水とオクタノールを24時間以上混合して飽和する。

② 測定対象物質と共にフラスコに取り振盪する。

③ 遠心分離により相分離する。

④ 各相に含まれる対象物質を定量する。

PubChem

- http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/

PubChem Compound

PubChem Compound | Search

Limits | Advanced search

Celiprolol - Compound Summary (CID 2663)

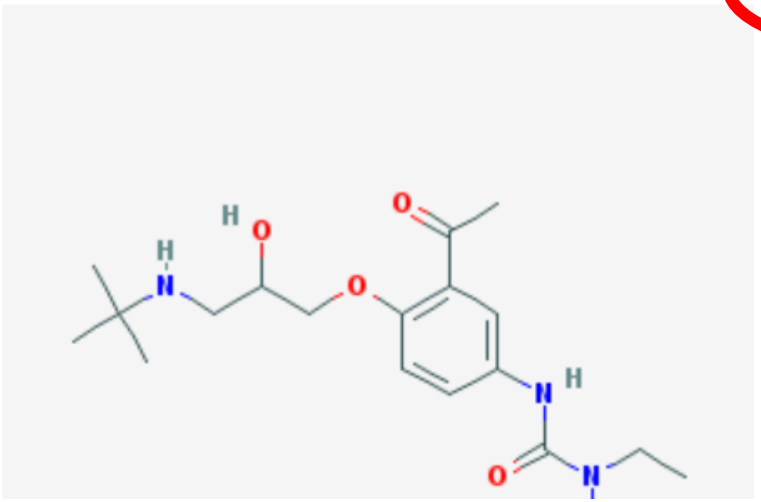
A cardioselective beta-1 adrenergic antagonist that has intrinsic sympathomimetic activity. It is used in the management of ANGINA PECTORIS and HYPERTENSION.

Table of Contents

- Identification and Related Records
- Pharmacology
- Biomedical Effects and Toxicity
- Safety and Handling
- Literature
- Biological Test Results
- Classification
- Chemical and Physical Properties

Expand all contents

2D | 3D



» Links and Re

Properties

Compound ID: 2663

Molecular Weight: 379

Molecular Formula: C

XLogP3: 1.9

H-Bond Donor: 3

H-Bond Acceptor: 5

BioActivity Da

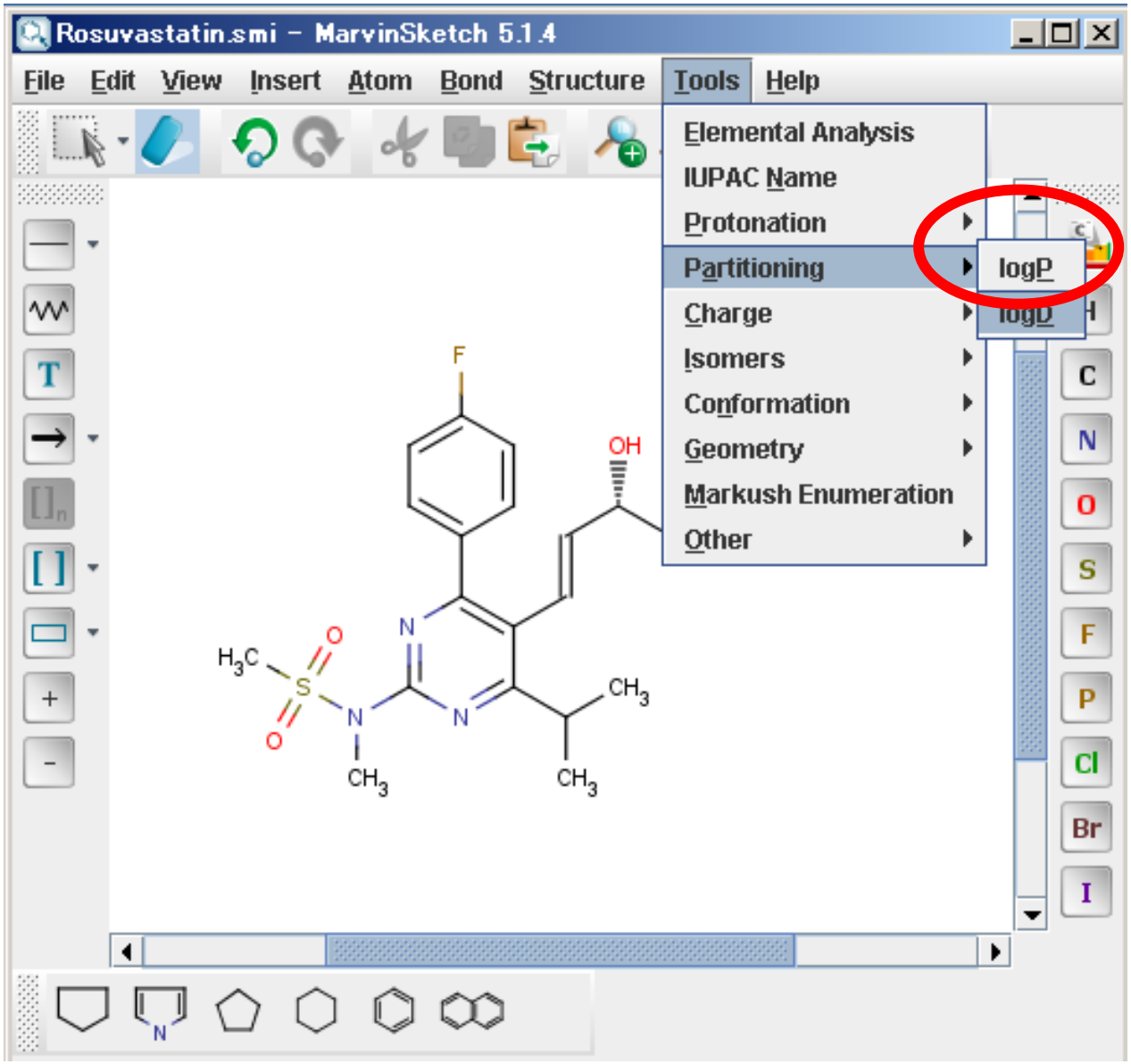
This Compound

with Similar Compoun

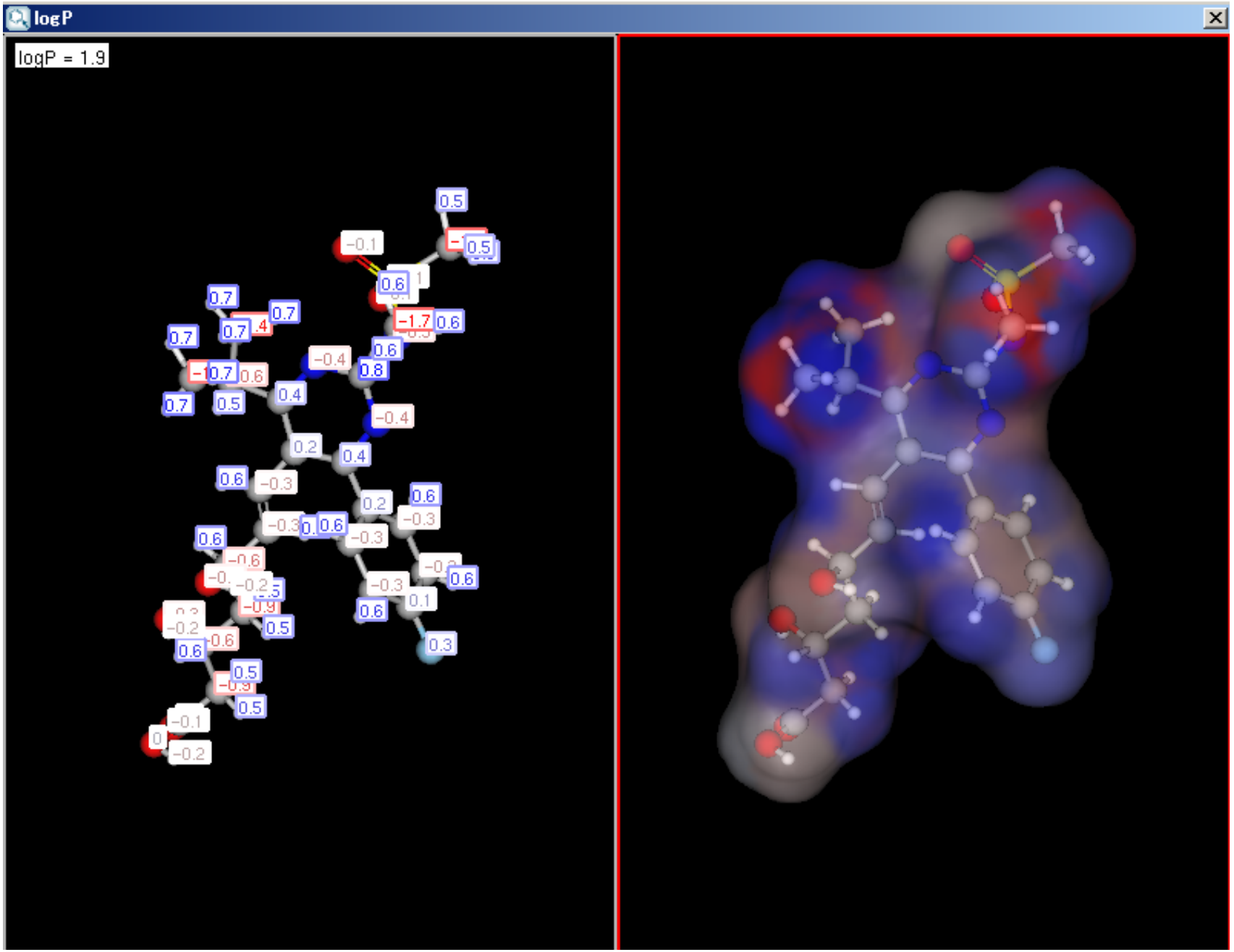
with Similar Conforme

Marvin Sketch

- http://www.chemaxon.com/marvin/sketch/index.php

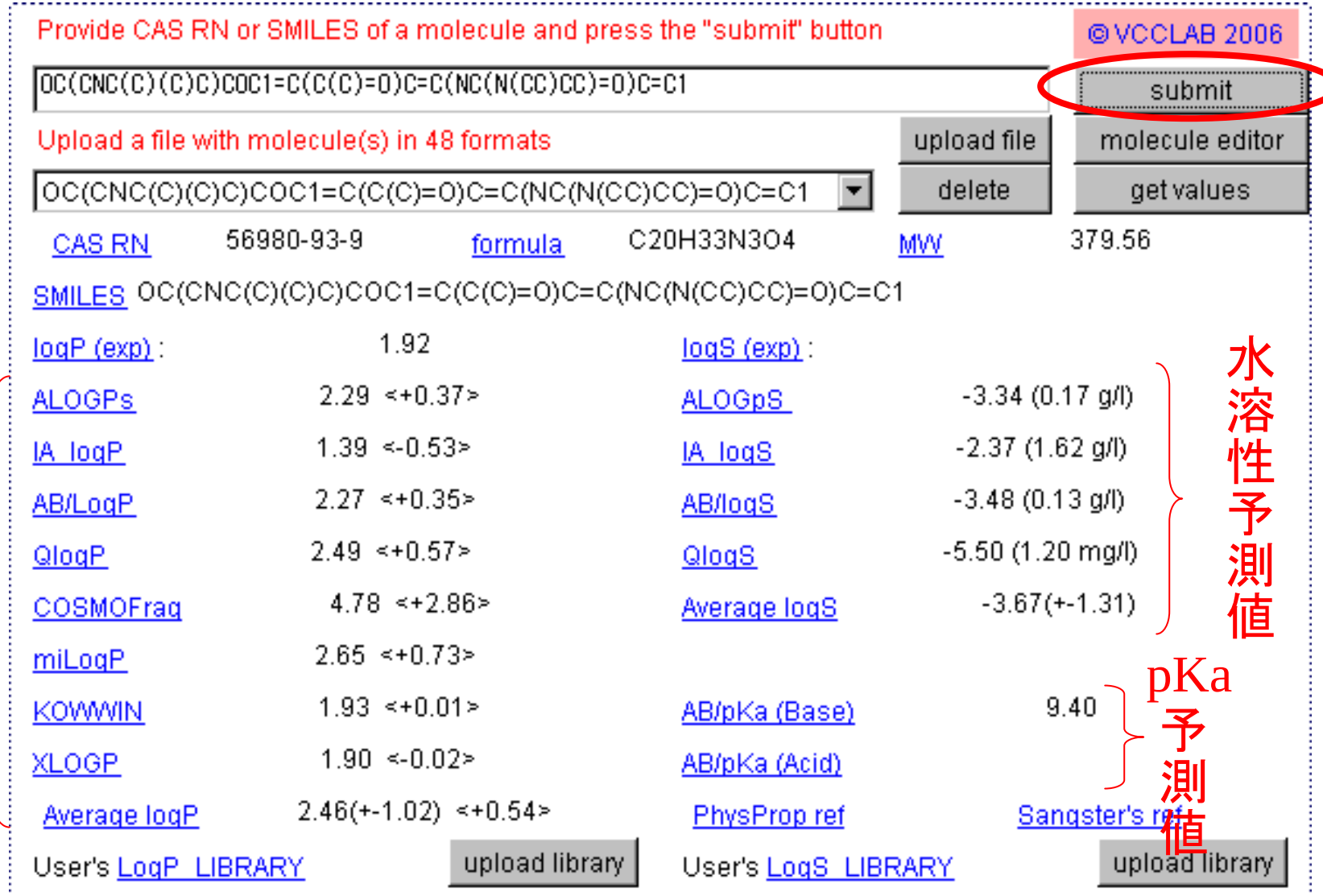


Marvin SketchによるLogP値の推算

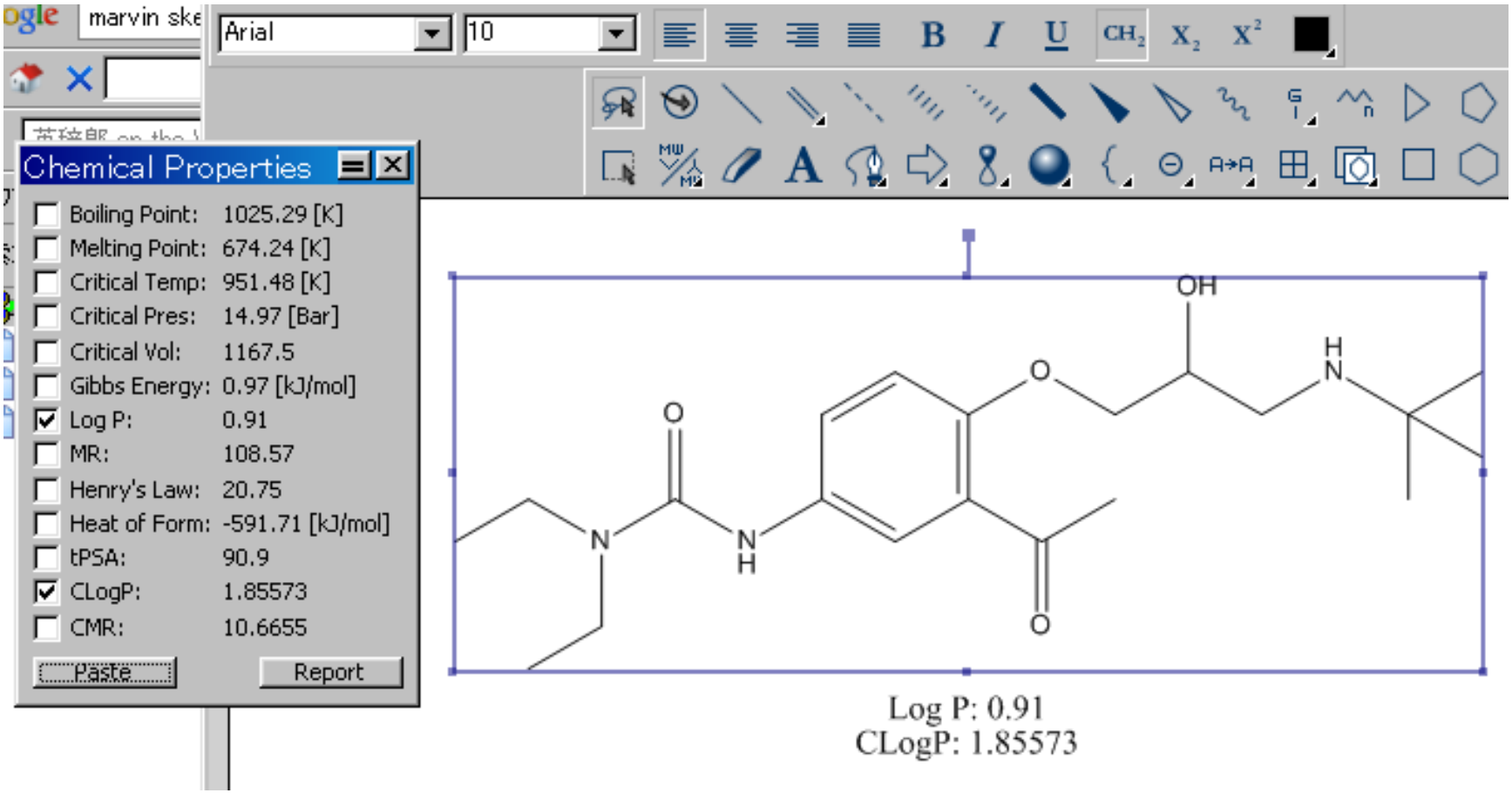


ALOGPS

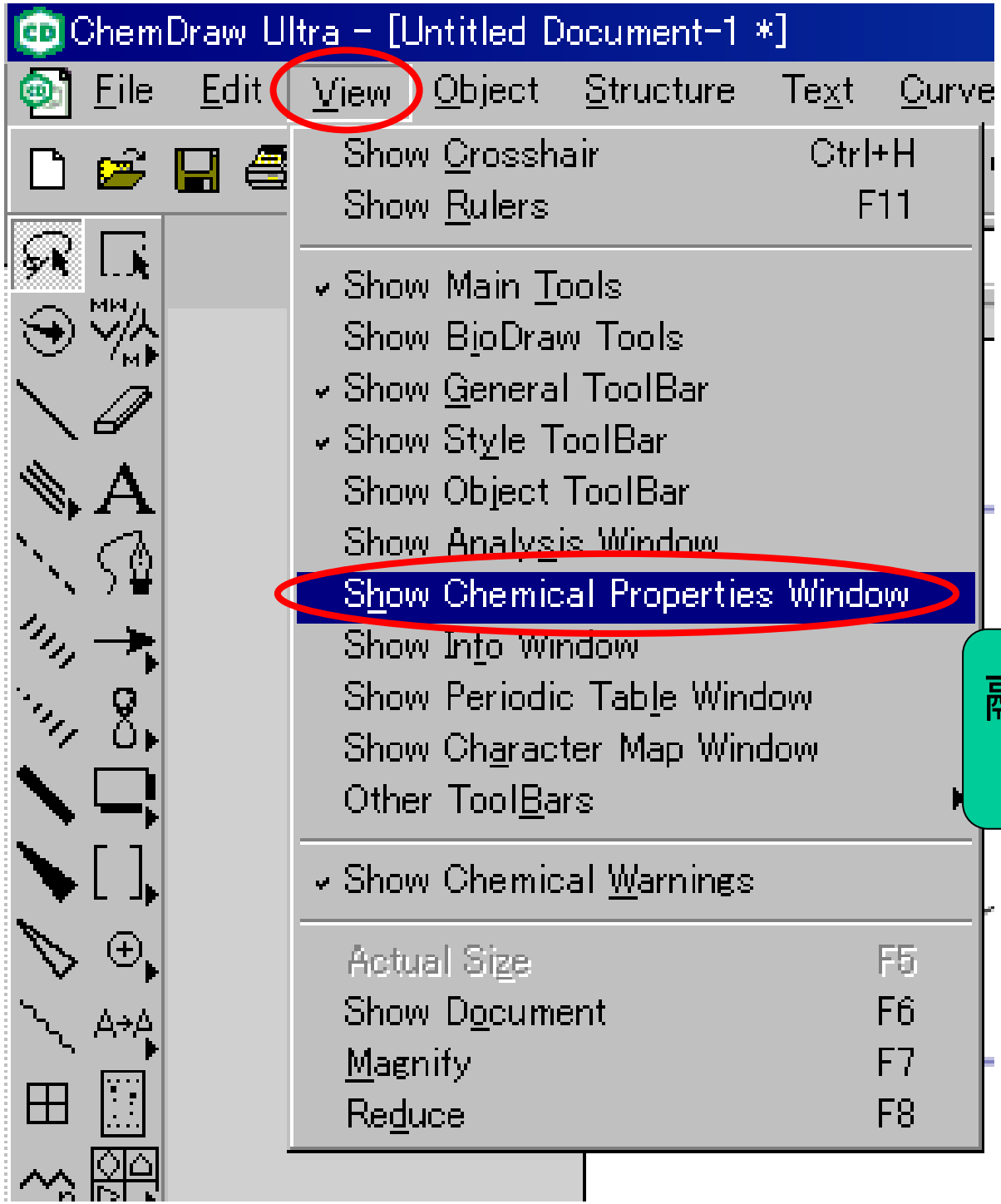
http://www.vcclab.org/lab/alogps/



ChemBioDraw



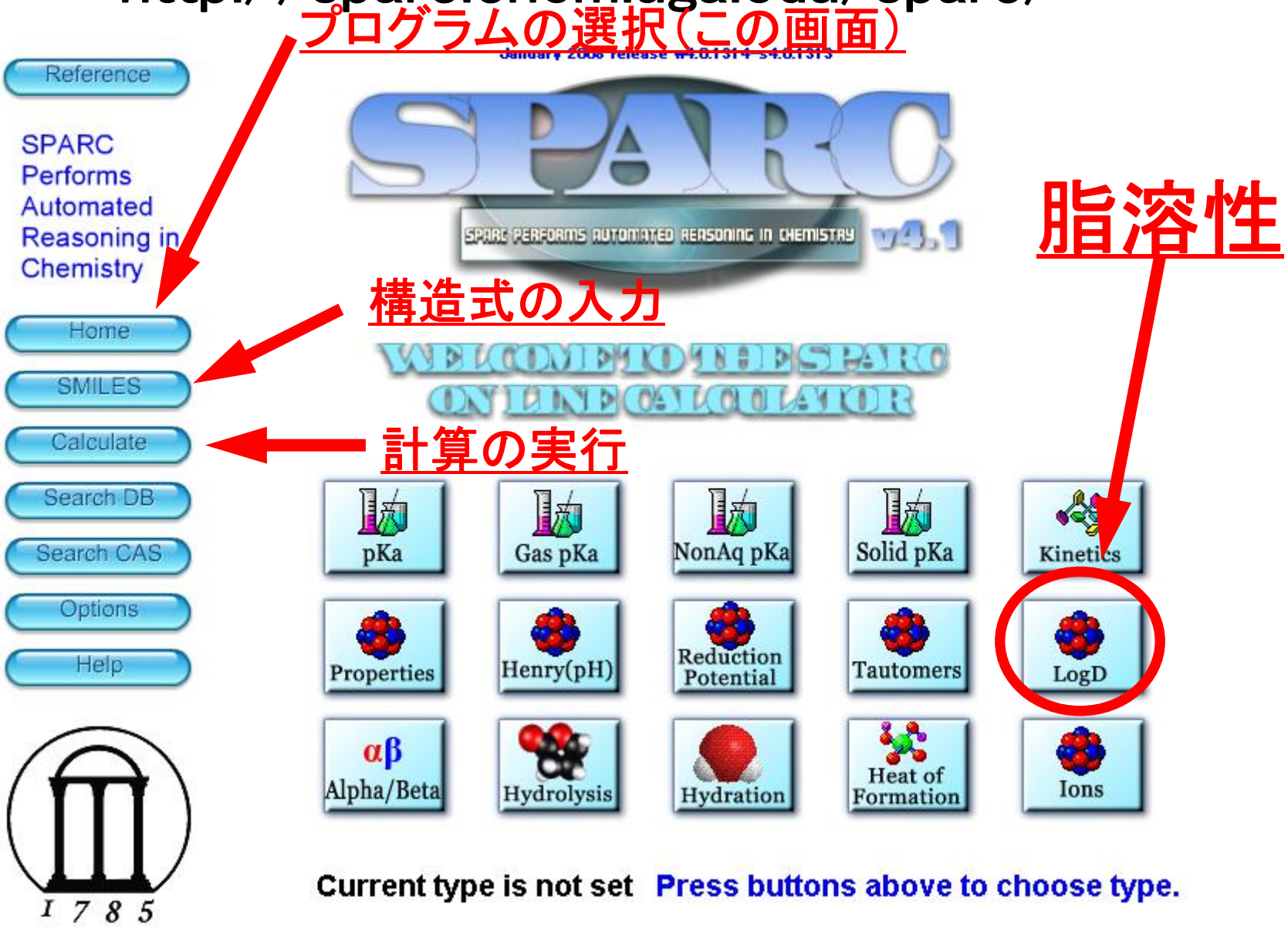
Log P: 0.91
CLogP: 1.85573



融点や脂溶性(logP値)の予測

SPARC on line calculator

http://sparc.chem.uga.edu/sparc/



SPARCによるLogD値の推算