

定量的構造活性相関データ集

分配係数と置換基定数

Exploring QSAR
Hydrophobic, Electronic, and Steric Constants

C. ハンシュ/A. レオ/D. ホークマン 著
江崎俊之 訳

A4判/384頁/定価13,200円(本体12,000円+税)/ISBN978-4-8052-0959-2

目次

表の使い方

オクタノールLogP
Hammettシグマなど
本書に収録された置換基定数の一覧

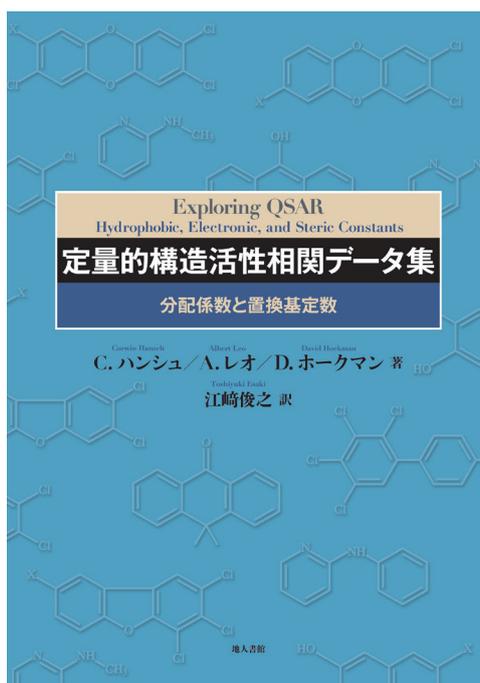
■オクタノールLogP LogPの一覧表

■オクタノールLogPの補注 注釈 (F) 文献 (R)

■Hammettシグマなど 本表に収録された置換基定数の一覧 置換基定数表

■Hammettシグマなどの補注

■溶質構造の描述



オクタノールLogP

| logP | pH | 注釈 | 分子名(官能基置換基) 構造式 |
|------|------|------|-----------------|
| 0.01 | 0.01 | 0.01 | ベンゼン |
| 0.02 | 0.02 | 0.02 | トルエン |
| 0.03 | 0.03 | 0.03 | キシレン |
| 0.04 | 0.04 | 0.04 | ニトロベンゼン |
| 0.05 | 0.05 | 0.05 | フェノール |
| 0.06 | 0.06 | 0.06 | アニリン |
| 0.07 | 0.07 | 0.07 | ピリジン |
| 0.08 | 0.08 | 0.08 | ピペリン |
| 0.09 | 0.09 | 0.09 | ピペリン |
| 0.10 | 0.10 | 0.10 | ピペリン |
| 0.11 | 0.11 | 0.11 | ピペリン |
| 0.12 | 0.12 | 0.12 | ピペリン |
| 0.13 | 0.13 | 0.13 | ピペリン |
| 0.14 | 0.14 | 0.14 | ピペリン |
| 0.15 | 0.15 | 0.15 | ピペリン |
| 0.16 | 0.16 | 0.16 | ピペリン |
| 0.17 | 0.17 | 0.17 | ピペリン |
| 0.18 | 0.18 | 0.18 | ピペリン |
| 0.19 | 0.19 | 0.19 | ピペリン |
| 0.20 | 0.20 | 0.20 | ピペリン |

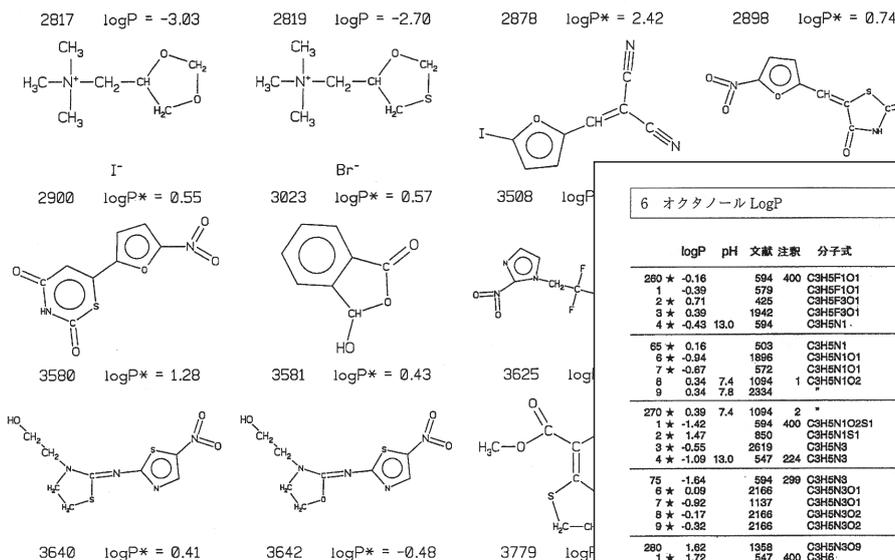
溶質構造の描述

| 2817 | logP = -0.85 | 2819 | logP = -0.78 | 2878 | logP = 2.42 | 2898 | logP = 0.74 |
|------------------------|--------------|------------------------|--------------|------------------------|--------------|------------------------|--------------|
| <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | |
| 2980 | logP = 0.55 | 3023 | logP = 0.57 | 3200 | logP = -0.52 | 3250 | logP = -0.14 |
| <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | |
| 3508 | logP = 1.20 | 3581 | logP = 0.43 | 3620 | logP = 1.55 | 3629 | logP = 0.65 |
| <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | |
| 3640 | logP = 0.41 | 3642 | logP = -0.40 | 3779 | logP = 0.43 | 3800 | logP = 2.15 |
| <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | | <chem>Cc1ccncc1</chem> | |

本書は、先に出版した『定量的構造活性相関—Hansch法の基礎と応用』(2014)の下巻に相当する。上巻は、定量的構造活性相関(QSAR)領域における最も重要な手法であるHansch法の基礎と応用について、そのすべてを解説した参考書であった。著者のHansch博士は、言うまでもなくHansch法の創始者であり、Leo博士はHansch博士の最大の協力者の一人である。創始者によって執筆された上巻は、Hansch法に関する解説書の決定版としての内容を備えていた。Hansch法、特にその中心をなす分配係数の考え方は、現在、医薬品化学、農薬化学、毒物学、環境化学などの分野で広く応用されている。Hansch法は、数学的には重回帰分析の応用である。そのため、初心者でも容易に理解でき、かつ適用

範囲が広いのが特徴である。

下巻に当たる本書は、定量的構造活性相関(QSAR)や定性的な構造活性相関(SAR)の研究に必要となる広範な物理化学的パラメータ(オクタノール-水系のlogP値と電子のおよび立体的置換基定数)を収録した表から構成されている。各国の環境保護局はどこも新しい工業用化学薬品のlogP値を必要としている。本書に収録されたlogP値は、この分野で最も著名な二人の研究者(Hansch博士とLeo博士)が25年間かけて収集したものである。そのデータベース化は本書に名を連ねているHoekman博士によってなされた。本書に収録された表は、QSARを解説した書籍や論文を読む際に、その伴侶としてきわめて有用なものと考えられる。



溶質構造の描述

QSARやSARの研究に
必要となる広範な物理化学的
パラメータを収録した表

6 オクタノール LogP

| logP | pH | 文献 | 注釈 | 分子式 | 化合物名 / CAS登録番号 / 薬理作用名 |
|-------|-------|------|---------|------------|--------------------------------|
| 280 * | -0.16 | 594 | 400 | C3HSF101 | エピフルオロセドリン 503-09-3 |
| 1 | -0.39 | 579 | | C3HSF101 | フルオロアセトン 430-51-3 |
| 2 * | 0.71 | 425 | | C3HSF301 | 1,1,1-トリフルオロ-2-プロパノール 374-01-6 |
| 3 * | 0.38 | 1942 | | C3HSF301 | 3,3,3-トリフルオロプロパノール |
| 4 * | -0.43 | 594 | | C3HSN1 | プロパ-2-イン-1-アミン 2450-71-7 |
| 66 * | 0.16 | 503 | | C3HSN1 | プロピオニトリル 107-12-0 |
| 8 * | -0.94 | 1896 | | C3HSN101 | 3-ヒドロキシプロピオニトリル 79-97-7 |
| 7 * | -0.67 | 572 | | C3HSN101 | アクリルアミド 79-06-1 |
| 8 | 0.34 | 7.4 | 1094 | 1 C3HSN102 | ヒドロキシイミノアセトン 908-44-5 |
| 9 | 0.34 | 7.8 | 2334 | | ヒドロキシイミノアセトン |
| 270 * | 0.39 | 7.4 | 1094 | 2 * | ヒドロキシイミノアセトン |
| 1 * | -1.42 | 594 | 400 | C3HSN1Q2S1 | メチルスルホニルアセトニトリル 2274-42-2 |
| 2 * | 1.47 | 850 | | C3HSN1S1 | イソチオシアン酸エチル 542-85-8 |
| 3 * | -0.55 | 2619 | | C3HSN3 | 1,2,4-トリアゾール-3-メチル |
| 4 * | -1.09 | 13.0 | 547 224 | C3HSN3 | 4-アミノピラゾール 28466-26-4 |
| 75 | -1.64 | 594 | 290 | C3HSN3 | イミダゾール, 2-アミノ 1450-93-7 |
| 6 * | 0.09 | 2166 | | C3HSN3O1 | 1,2,5-オキサジアゾール, 3-アミノ-4-メチル |
| 7 * | -0.92 | 1137 | | C3HSN3O1 | 2-アミノ-4-メチル-1,3,4-オキサジアゾール |
| 8 * | -0.17 | 2166 | | C3HSN3O2 | フラザン-2-オキシド, 3-メチル-4-アミノ |
| 9 * | -0.32 | 2166 | | C3HSN3O2 | フラザン-2-オキシド, 4-メチル-3-アミノ |
| 280 | 1.62 | 1358 | | C3HSN3O9 | グリセリルトリニトрат 55-83-0 |
| 1 * | 1.72 | 547 | 400 | C3H6 | シクロプロパン 75-19-4 吸入麻酔薬 |
| 2 * | 1.77 | 547 | 400 | C3H6 | プロピレン 115-07-1 |
| 3 | 2.18 | 1560 | 100 | C3H6Br1Cl1 | 1-ブromo-3-クロロプロパン 109-70-6 |
| 4 * | 2.37 | 584 | | C3H6Br2 | 1,3-ジブロモプロパン 109-64-8 |

好評の関連書籍

定量的構造活性相関
Hansch法の基礎と応用

C. ハンシュ・A. レオ 著 / 江崎俊之 訳
ISBN978-4-8052-0866-3 B5判 / 584頁 / 定価11,000円 (本体10,000円+税)

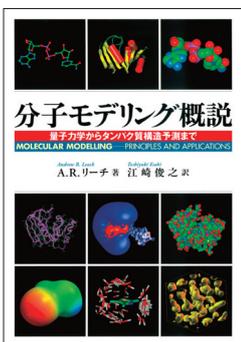
『定量的構造活性相関データ集——分配係数と置換基定数』の上巻に当たる。定量的構造活性相関領域における最も重要な手法であるHansch法の基礎と応用について、そのすべてを解説した参考書。Hansch法、特にその中心をなす分配係数の考え方は、現在、医薬品化学、農薬化学、毒物学、環境化学などの分野で広く応用されている。医薬品化学や農薬化学などの創薬科学における古典的必読文献である。



分子モデリング概説

量子力学から
タンパク質構造予測まで

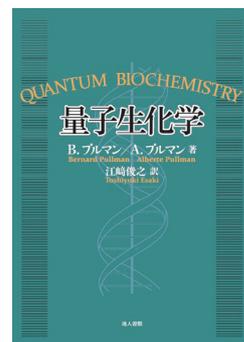
A. R. リーチ 著
江崎俊之 訳
ISBN978-4-8052-0752-9
B5判 / 760頁
定価17,600円
(本体16,000円+税)



第1部は基本的な二つの手法(量子力学と分子力学)について解説。第2部ではエネルギー極小化、分子動力学、モンテカルロ法、配座解析等を取り上げ、第3部では具体的応用として、自由エネルギー計算、化学反応、新しい機能性分子の設計などをテーマとする。分子モデリングの諸手法を理論面に重点を置いて解説した教科書。

量子生化学

B. プルマン・A. プルマン 著
江崎俊之 訳
ISBN978-4-8052-0934-9
B5判 / 752頁
定価17,600円
(本体16,000円+税)



量子生化学の開拓者として著名なプルマン夫妻によって1963年に刊行され、この分野の古典的名著である『Quantum Biochemistry』の完全翻訳本。第1部で分子軌道法を解説、第2部と第3部で生化学と関連の深い各種化合物への分子軌道法の応用を解説、付録には単純ヒュッケル法で計算された各種の生化学的物質の電子の指標の値を収録した。