
化合物疏水常数预测系统

CISOC - LOGP 用户手册

有机化合物疏水常数预测系统 (CISOC - LOGP) 是一个用于预测化合物疏水常数的软件。化合物疏水常数预测系统可以对用户提供的化合物进行疏水常数预测, 为您在设计新医药、新农药和新材料过程中, 提供化合物疏水常数的信息。

目 录

一、CISOC - LOGP 系统简介

二、快速入门

- 2.1 CISOC - LOGP 界面介绍
- 2.2 菜单介绍

三、使用实例

四、系统配置与系统安装

- 4.1 CISOC-LOGP 的运行环境
- 4.2 CISOC-LOGP 的安装
- 4.3 CISOC-LOGP 的卸载

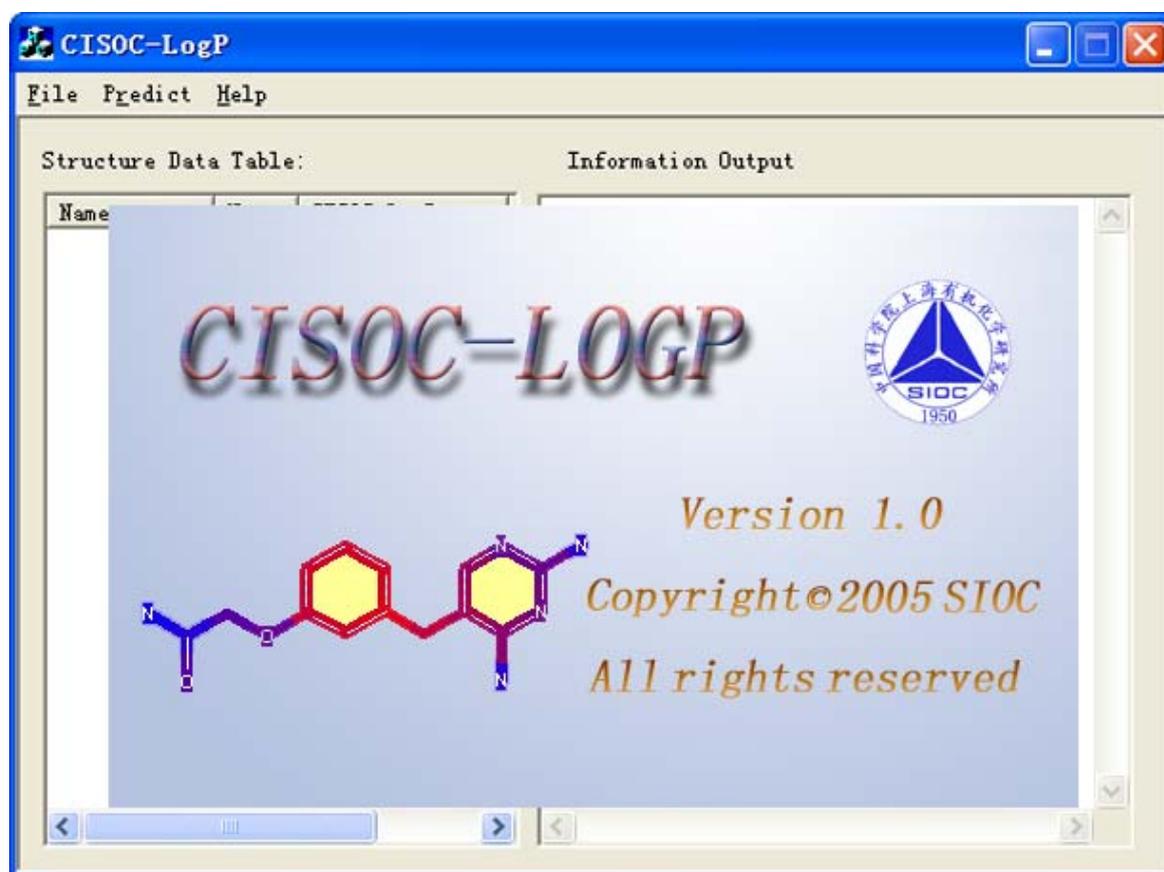
中国科学院上海有机化学研究所

二〇〇五年六月 上海

Shanghai Institute of Organic Chemistry (SIOC)
Chinese Academy of Sciences
Shanghai, P. R. China

Copyright by SIOC.

All rights reserved. Use of copyright notice does not imply publication or disclosure. No portion of this software may be reproduced, transmitted, transcribed, stored in a computer system, or translated into any computer language, in any form or by any means, electronic, magnetic, optical, chemical, manual, or otherwise except as permitted in writing by Shanghai Institute of Organic Chemistry.



Shanghai Institute of Organic Chemistry reserves the right to use the technology embodied in this program, in part or in whole.

The information contained here in consists valuable research secrets of SIOC. You are not permitted to disclose or allow to be disclosed such information except as permitted in writing by Shanghai Institute of Organic Chemistry.

CISOC- LOGP

Version1.0 June 2005

版权所有，翻印必究！

一、CISOC-LOGP 系统简介

CISOC- LOGP 是一个用于预测化合物的疏水常数的计算机辅助化合物疏水常数预测系统。

当一种物质溶解在辛醇/水的混合物中时，该物质在辛醇和水中浓度的比值称为分配系数，而以 10 为底的对数形式(LogP)则被称为该物质的疏水常数。辛醇 / 水分配系数是用来预计一种物质在土壤中的吸附性、生物吸收、辛脂性储存和生物富集的重要参数。同时，在药剂学研究中，它是主要用于预计药物对在体组织的渗透或吸收难易程度。因此，我们可以说化合物的疏水常数是药物设计和农药设计中必须重视的化合物的性质之一。

研究已表明，疏水常数与分子的结构直接相关，包括分子的大小，分子的柔韧性、极性，分子之间的氢键等，通常化合物的疏水常数越大，极性越小。

目前，人们已认识到化合物设计早期阶段的疏水常数预测的重要性，并认为计算机辅助化合物疏水常数预测方法是降低在药物和农药开发的时间和经费开支的有效途径之一。

CISOC-LOGP 是基于目前能收集到具有疏水常数数据及其对应化学结构建立的相应预测模型，根据化合物的化学结构，对该化合物进行疏水常数的预测系统。

本系统使用简单，方便直观。用户不但可以单个地预测化合物疏水常数，而且还可以一次预测一组化合物的疏水常数。二种预测模式得到的预测结果均可存入指定文件。

二、CISOC- LOGP 快速入门

2.1 CISOC – LOGP 界面介绍

图一是 CISOC-LOGP 系统界面，其中包括主菜单栏。使用者可通过选择主菜单及其子菜单，来完成化合物的疏水常数的预测。

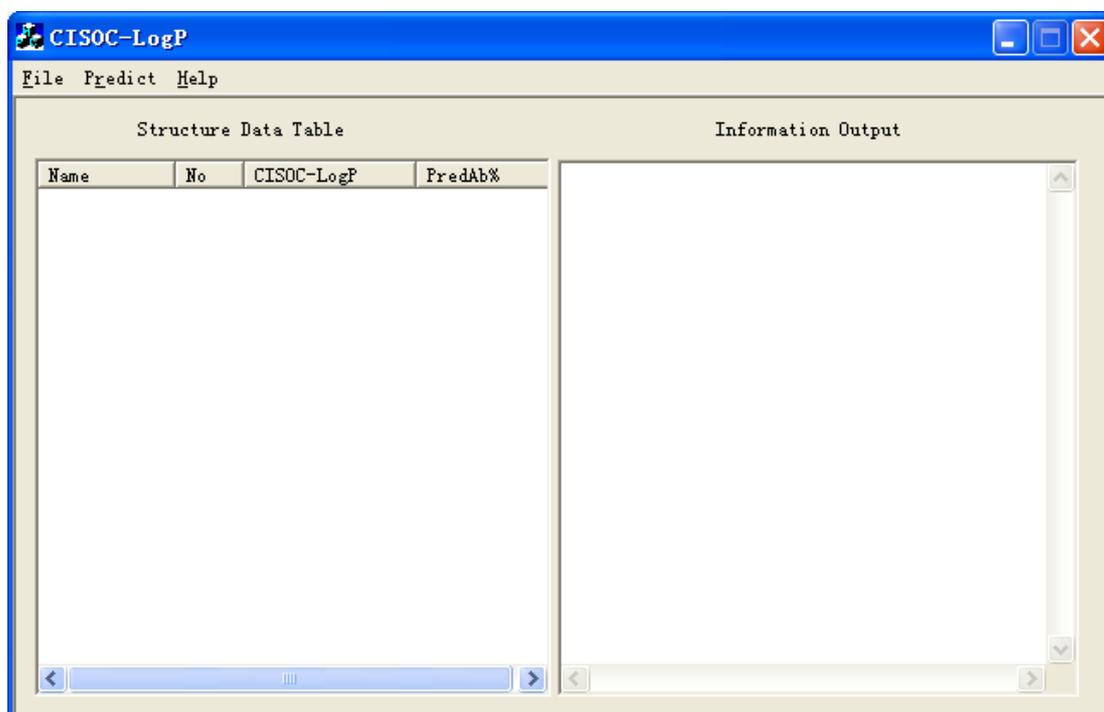
程序安装好后，会在桌面上生成化合物疏水常数预测系统的快捷方式。双击该快捷方式，可以启动程序。

程序启动后如图一显示。



图一、程序启动后界面

若干秒之后，程序便显示其主界面，如图二所示。



图二、程序整体界面

2.2 菜单

本软件的菜单如图三所示

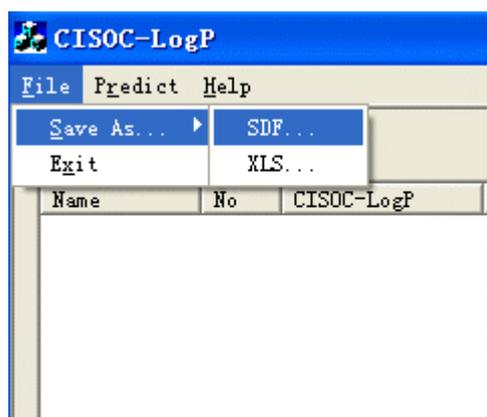


图三、CISOC-LOGP 系统菜单

主菜单包括 File、Predict 和 Help 菜单。

2.2.1 File 菜单

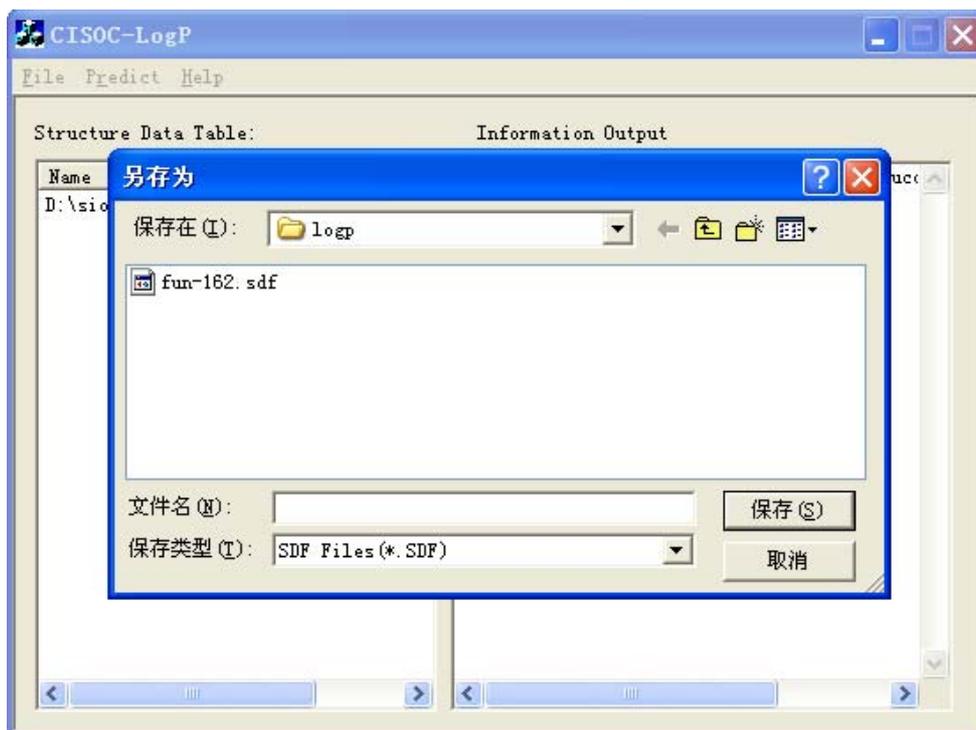
File 菜单中的子菜单有：Save As 和 Exit，Save As 又包括 2 个 2 级子菜单 SDF 和 XLS（如图四所示）。



图四、文件菜单及其子菜单

1、Save As → SDF

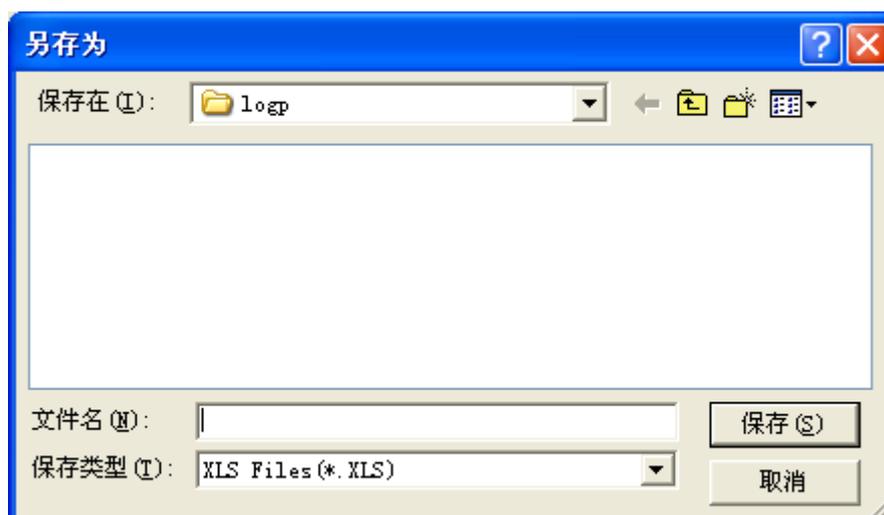
在“File 菜单→Save As”中选此子菜单，程序显示如图五所示界面。在对话框中输入欲保存的文件名，确认按“保存”键，否则按“取消”键。



图五、Save As→SDF 界面

2、Save As→XLS

在“File 菜单→Save As”中选此子菜单，程序显示如图六所示界面。在对话框中输入欲保存的文件名，确认按“保存”键，否则按“取消”键。



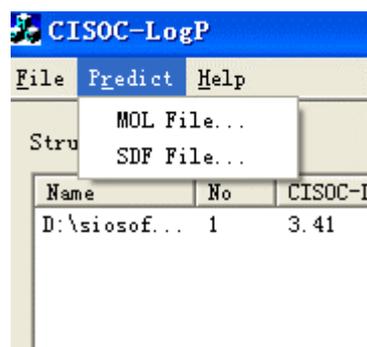
图六、Save As→XLS 界面

3、Exit

在“文件菜单”中选此子菜单后，程序终止运行。

2.2.2 Predict 菜单

Predict 菜单中包括了 MOL File 和 SDF File 两个子菜单（如图七所示）。



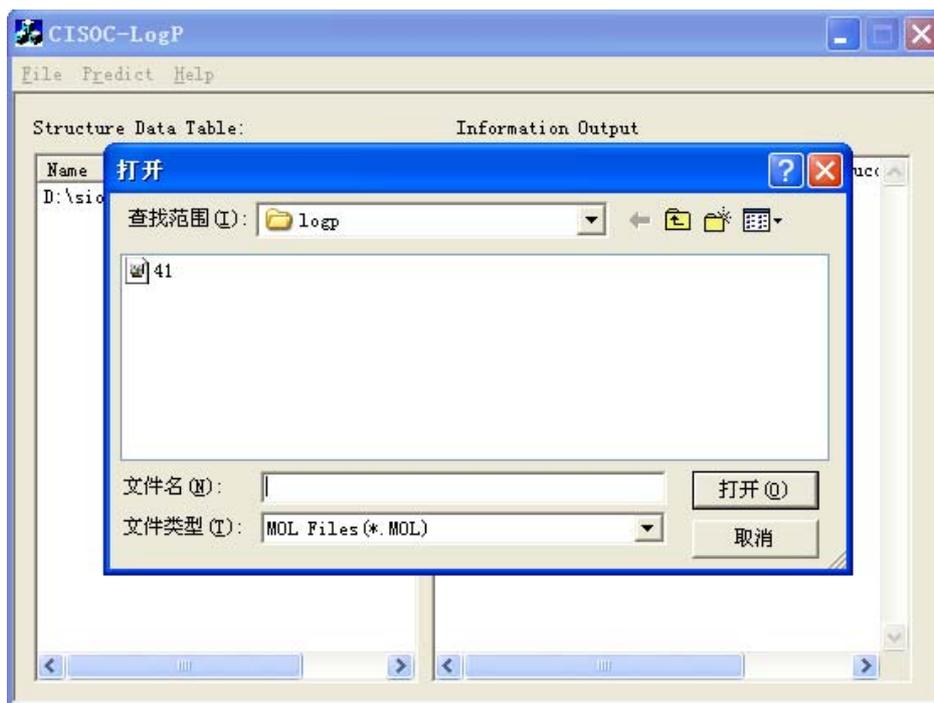
图七、Predict 菜单及其子菜单

1、MOL File

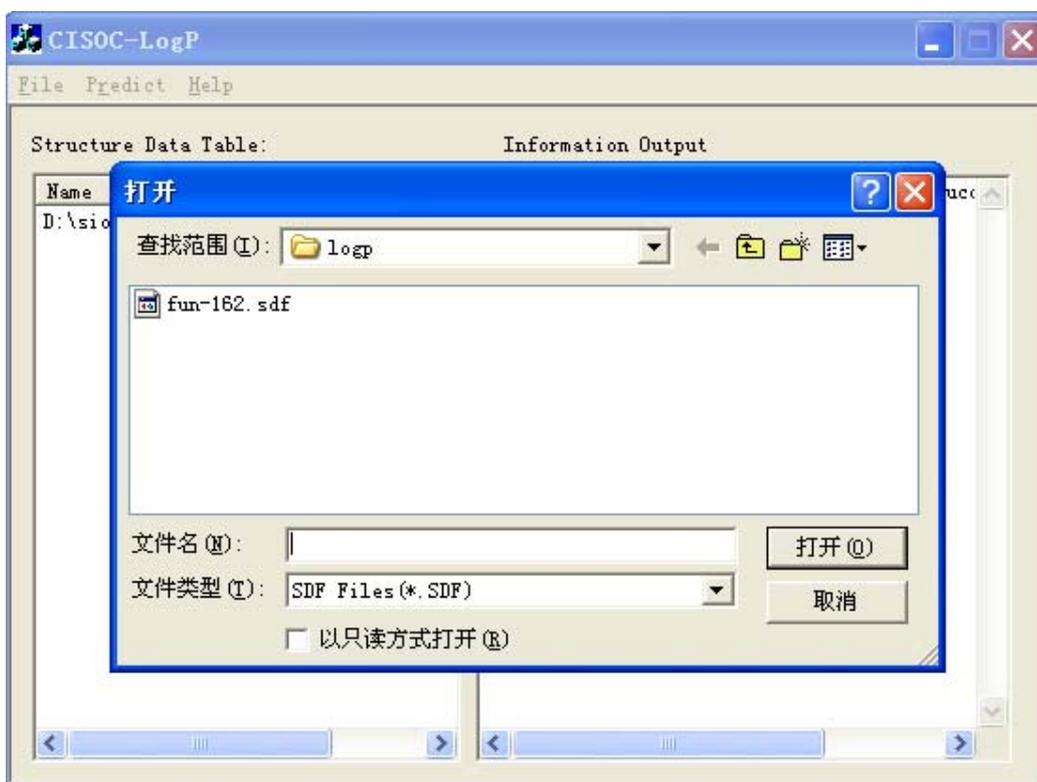
在“Predict 菜单”中选此子菜单，程序显示如图八所示界面。在对话框中选择欲打开的文件，确认按“打开”键，否则按“取消”键。

2、SDF File

在“Predict 菜单”中选此子菜单，程序显示如图九所示界面。在对话框中选择欲打开的文件，确认按“打开”键，否则按“取消”键。



图八、MOL File 子菜单界面



图九、SDF File 子菜单界面

2.2.3 Help 菜单

Help 菜单用于显示帮助信息和版权信息

1、About

在“Help 菜单”中选此子菜单，显示版权信息（如图十所示）。



图十、版权信息

2、Manual

在“Help 菜单”中选此子菜单后，打开使用手册。

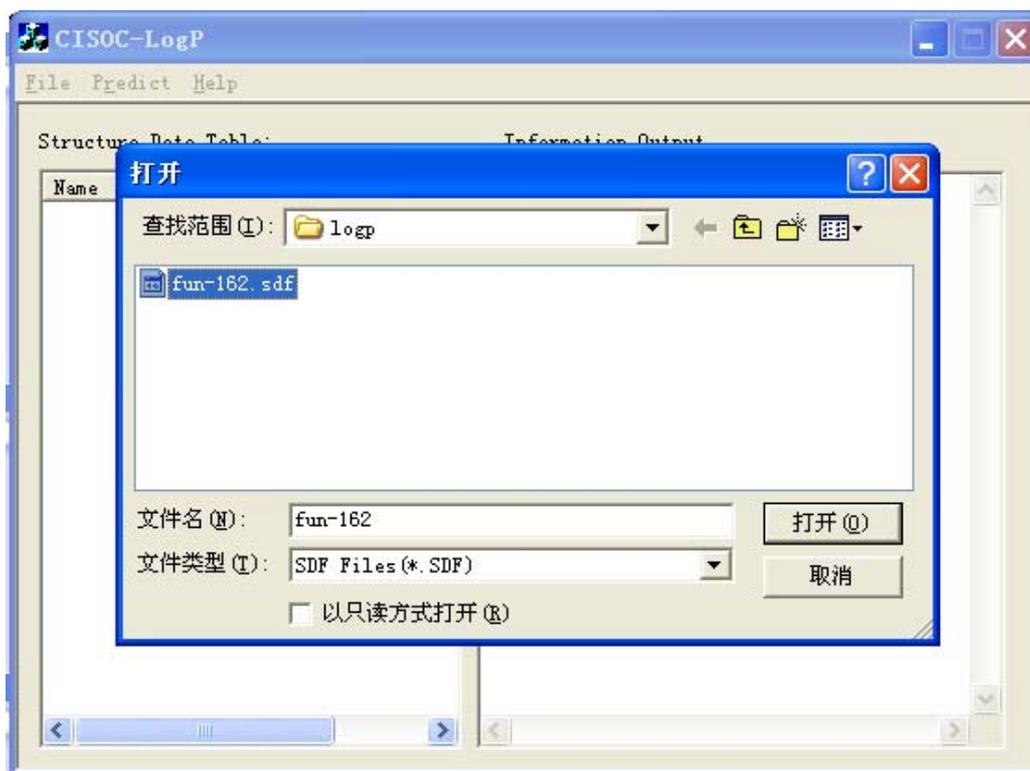
三、使用实例

为说明该软件的使用方法，现以实例说明如何使用该软件：计算一组化合物的疏水常数。

3.1 运行程序

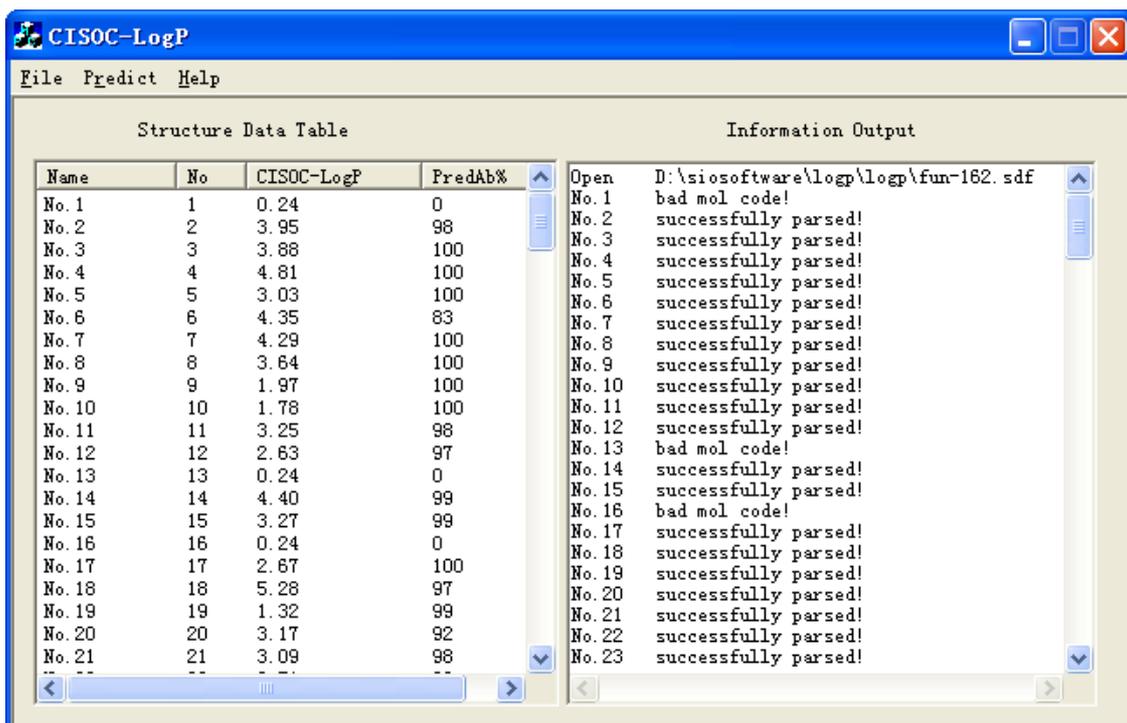
启动 CISOC-LOGP 后，显示如图一界面，若干秒之后，显示如图二界面。

在“Predict 菜单”中选 SDF File，界面如图十一所示。

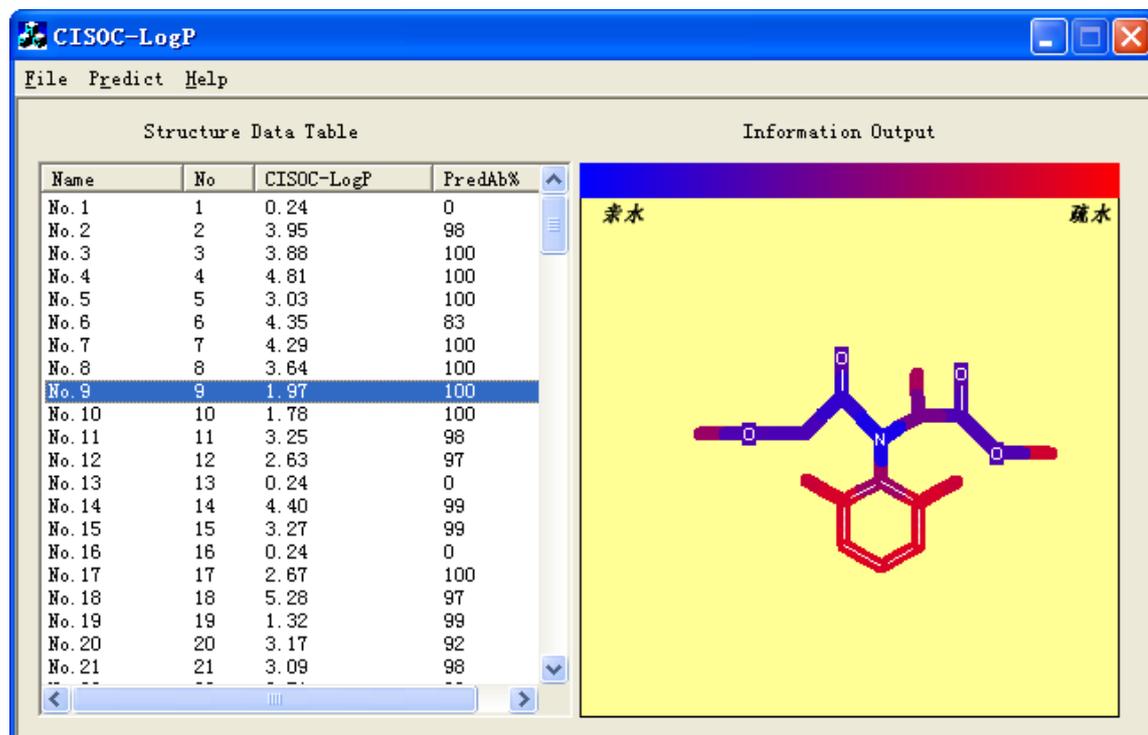


图十一、打开一个数据库界面

输入相应的文件名：fun-162.sdf，按“打开”键后，界面显示如图十二所示，左边的“Structure Data Table”栏中显示了化合物结构的文件名、LogP的预测值和预测可靠性信息。右面的“Information Output”栏中显示对应化合物的预测通过与否的信息。如果在该栏中标注为“bad mol code”，则表示本系统无法进行相应的疏水常数预测。如果在该栏中标注为“successfully parsed”，则表示本系统可进行相应的疏水常数预测。在“Structure Data Table”栏中选取一个在“Information Output”栏中标注为“successfully parsed”的化合物编号，则在“Information Output”栏中显示其结构及化合物中原子对疏水常数的贡献示意图，界面显示如图十三所示。



图十二、sdf 文件打开后的界面



图十三 预测结果

四、系统配置和系统安装

4.1 CISOC-LOGP 的运行环境

- 奔腾 3 (PIII) 以上 CPU, 128M 以上内存, 1G 以上剩余磁盘空间。
- 鼠标、键盘;
- 程序要求在 Window 2000™、Windows XP™, 或完全兼容的系统下安装。
在 Windows 98™或别的操作系统下安装程序可能不能正常运行。
- 安装该系统前, 请先安装 MDL™公司的 ISIS/Draw™ 2.4。用户可以去 MDL 公司网站下载该软件。
- 如果要阅读本手册, 请先安装 Adobe Acrobat Reader™ 5.0 中文版或完全兼容的版本。

4.2 CISOC-LOGP 的安装

CISOC-LOGP 提供标准的 Windows 安装程序。用户直接双击 LOGP.exe 文件即可按照提示完成安装。

建议: 用户在安装过程中接受提供的缺省设置。(只需按 OK, Yes or Next 即可)

4.3 CISOC-LOGP 的卸载

CISOC-LOGP 的安装程序符合 Windows 标准, 用户可按如下步骤卸下 CISOC-LOGP: 从“控制面板”上选择“添加/删除程序”, 选择 CISOC-LOGP, 既可按照提示完成卸载。

本手册中内容将可能被修改而不预先通知用户!
Subject to change without notice!