

2019年度
修士論文

ネットワーク解析を用いた高生物活性
ファイトケミカルの特徴量の抽出

Network Analysis for characterizing bioactive
phytochemicals

指導教員

古沢 浩 教授

高知工科大学大学院 基盤工学研究科

基盤工学専攻 環境数理コース

学籍番号 1225085

福田 理紗

Risa Fukuda

目次

第 1 章	緒言	2
1.1	背景	2
1.2	研究目的	3
第 2 章	データと解析方法	4
2.1	対象データ	4
2.2	データ処理方法	4
2.3	フィルター値	5
2.4	ネットワーク図の可視化	6
2.5	辺の重みとネットワーク構造の関係	7
第 3 章	ネットワークの指標特性及び考察	10
3.1	最大ネットワークの頂点占有率のフィルター依存性	10
3.2	次数分布	11
3.3	リピンスキーの法則を満たす phytochemical 群の抽出	12
第 4 章	ネットワークの構造特性及び考察	14
4.1	ネットワーク構造	14
4.2	最大共通部分構造	16
第 5 章	結論	18
参考文献		19
付録. 1	高生理活性ファイトケミカル 1124 種類	20
付録. 2	物理化学的性質の標準化データ	52
付録. 3	python コード	53
付録. 4	R コード	54

第 1 章

緒言

1.1 背景

1.1.1 深層学習によるリード化合物の絞り込み

近年、新薬開発において開発費の増加と長期的な開発期間が問題となっており、リード化合物のより効率的な絞り込みに関する研究が進んでいる。昨年 9 月にロンドンの Insilico Medicine は生成テンソル強化学習 (GENerative Tensorial Reinforcement Learning, GENTRL) と呼ばれる新しい人工知能システムを用いて DDR1 の新しい 6 つの阻害物質を 21 日で設計したと報告している [1]。抽出された 6 種類の阻害物質は、下記の 4 条件の内 2 条件を満たす化合物は医薬品開発において有用である可能性が高いというリピンスキーの法則を満たしていた。

- (1) 分子量が 500 以下
- (2) LogP が 5 以下
- (3) 水素結合供与体数が 5 以下
- (4) 水素結合受容体数が 10 以下

1.1.2 天然資源創薬

従来の市販医薬品の 50% 以上又、承認される新薬の 20% から 50% は天然物或いは天然物誘導体を利用している。天然物の分子構造は多様で特異的且つ高い生理活性を持つことから画期的なリード化合物を発見する可能性ある事が天然資源創薬の利点である。しかし、天然資源の枯渇や 1993 年に締結した生物多様性条約などによって天然資源からリード化合物を探索する事が困難になっている。

1.1.3 Phytochemical

医薬品の原料として有用な化合物の中には phytochemical と呼ばれるものが多く存在している。phytochemical は植物の根や葉、種子などに含まれる植物の二次代謝産物である。摂取不足による欠乏症は起きないが、生体調節機能を持たため、第 7 栄養素として注目されている。また、多くの phytochemical は抗酸化作用を持つ。酸化ストレスは脳血管疾患や糖尿病老人性認知障害など多様な疾患と因果関係があるため、phytochemical の含有量が多い植物を摂取する事で健康への有益性が期待されている。

1.2 研究目的

新薬開発では、化学構造情報や物理化学的性質の情報を利用して何万種類の化合物候補からリード化合物を効率的に絞り込んでいる。本研究では、健康への有益性が期待されている phytochemical についての情報を Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases(<https://phytochem.nal.usda.gov/phytochem/search/list>)より入手し、これら phytochemical の化学構造情報及び物理化学的性質の情報をを用いて生物活性がより高い phytochemical 群をネットワーク解析により抽出する事を目指す。

第 2 章

データと解析方法

2.1 対象データ

本研究で使用したデータは 3 種類ある。

1. 高生物活性 phytochemical : 多様な生物活性を有する 1124 種類の phytochemical を Dr. Duke's Phytochemical and Ethnobotanical Databases より取得した。
2. Structure Data Format : 1124 種類の phytochemical の化学構造を行列で表記した SDF (Structure Data Format) を Pubchem より取得した。
3. 物理化学的性質 : 1124 種類の phytochemical に関する 5 種類の物理化学的性質を pubchem より取得した。

- (1) LogP
- (2) Molecular Weight
- (3) Hydrogen Bond Donor Count
- (4) Hydrogen Bond Acceptor Count
- (5) Topological Polar Surface Area

対象データ 1. と 3. についての詳細は付録表 1 に記した。

2.2 データ処理方法

2.2.1 Structure Data Format のデータ処理

化学構造を保持しているファイルフォーマットを変換するシステム Openbabel を用いて化学構造情報の SDF (行列表記法) (図 2.1) を Fingerprint (線形表記) (図 2.2) へ変換した。この Fingerprint より 2 つの phytochemical の構造の類似度を表す Tanimoto 係数を算出した。

2.2.2 物理化学的性質のデータ処理

各物理化学的性質の平均値と標準偏差を算出し、(2.1) 式を用いて各物理化学的性質の標準化した数値を算出した。

$$Z_{ij} = \frac{F_{ij} - F(x)}{S(x)} \quad (2.1)$$

```

13730
-OEChem-07041807183D

31 33 0 1 0 0 0 0 0999 V2000
-2.0313 -0.2627 0.9720 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-3.8147 1.6277 -1.5048 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-4.3906 -1.7747 1.2676 O 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0.1796 -0.0398 0.1477 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.4360 -1.6550 -0.7454 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
1.9245 1.4960 0.8550 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4.1418 0.6378 0.3045 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
4.4700 -1.4617 -0.7962 N 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.0188 0.6821 0.5776 C 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-2.8078 0.7817 -0.9887 C 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
-1.6181 1.5780 -0.5001 C 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0

```

図 2.1 化学構造情報の行列表記
Structure Data Format の例

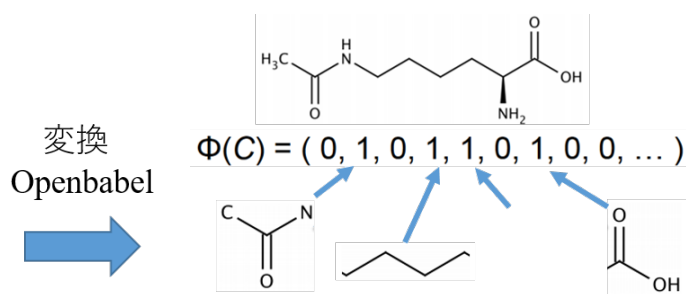


図 2.2 化学構造情報の線形表記 Fingerprint の例

付録の表 2 に標準化した数値の一部を示した。この表を以下のようにベクトルとして扱い、

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{15} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{25} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{11241} & v_{11242} & \dots & v_{11245} \end{bmatrix} \quad (2.2)$$

$$= \begin{pmatrix} \vec{v}_1 \\ \vec{v}_2 \\ \vdots \\ \vec{v}_{1124} \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

(2.4) 式より 2 つの phytochemical の物理化学的性質の類似度である内積 C_{kl} を算出した。

$$C_{kl} = \vec{v}_k \cdot \vec{v}_l \quad (k \neq l) \quad (2.4)$$

2.3 フィルター値

複雑ネットワークでは、辺によって接続された 2 つの頂点に何らかの関係性や複雑な現象が存在する場合、2 つのノードの相互作用とその強さを考える。例えば、化学構造の類似性に関して phytochemicalA と B の相互作用は、Tanimoto 係数 (化学構造の類似度) を辺の重みとすることで表せる。本研究では、4 種類の相互作用を意味する各値をネットワークの辺の重みとして使用した (表 2.1)。

表 2.1 辺の重みと相互作用

辺の重み	相互作用
(1) 内積	2 つの phytochemical の物理化学的性質の類似性
(2) Tanimoto 係数	2 つの phytochemical の化学構造の類似性
(3) 正の値の内積と Tanimoto 係数の積	2 つの phytochemical の 物理化学的性質と化学構造の両者が類似している
(4) 正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値	2 つの phytochemical の 化学構造はにているが物理化学的性質は似ていない

2.4 ネットワーク図の可視化

本研究では、ネットワーク解析及び可視化用オープンソースソフトウェアパッケージ Gephi とオープンソースのバイオインフォマティクスソフトウェアのプラットフォーム Cytoscape を使用し、ネットワーク図を作成した。内積や Tanimoto 係数など種々の値をフィルター値 W_c 、辺の重みを w とする。図 2.3 のように w が W_c より大きい時 2 つのノードが辺で繋がれ、 w が W_c より小さい時辺が切断される。ネットワーク図では 1 つのノードが 1 つの phytochemical を表し、フィルター値 W_c は辺の重みとして表示される。この辺の重みを増加させると W_c の値が小さい辺ほど早くに切断され 2 つのノードも自動的に離れていく。そのため、類似していない phytochemical 同士は辺が切断され遠くに位置するが、類似している phytochemical 同士は同じコミュニティに存在する (図 2.7)。ネットワーク図では、分裂後相対的に密度の高いサブグループをコミュニティと呼ぶ。

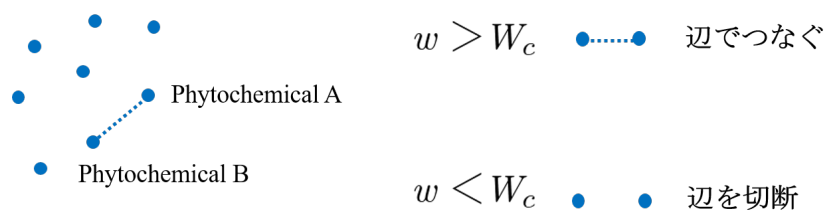


図 2.3 ネットワーク図の可視化

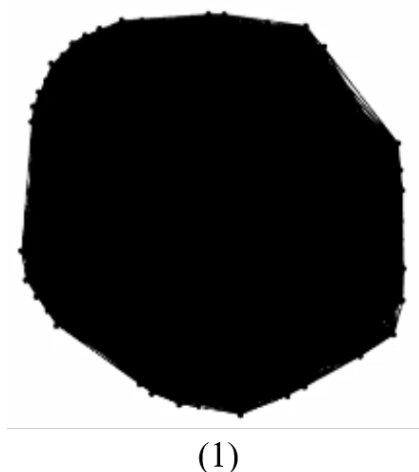


図 2.4 辺の重みの値が小さい初期段階

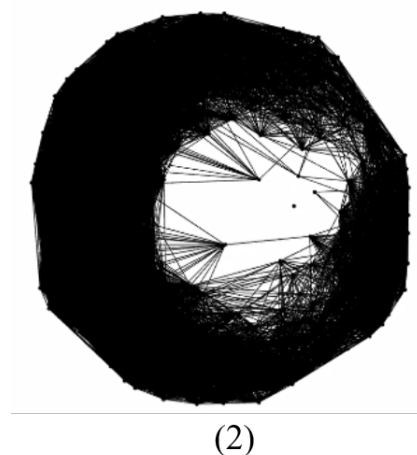


図 2.5 辺の重みを少し大きくしネットワークが分裂する前の様子

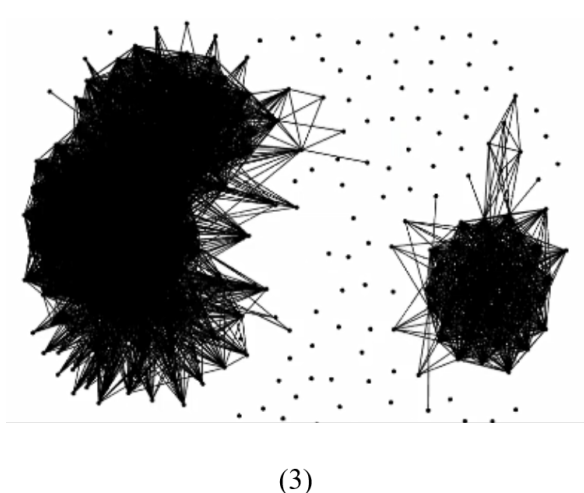


図 2.6 辺の重みを大きくしネットワークが分裂した後の様子

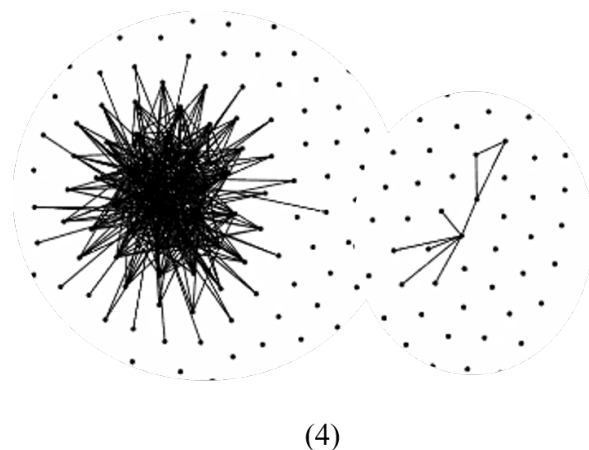


図 2.7 ネットワークの分裂後相対的に密度の低いコミュニティは消滅する

2.5 辺の重みとネットワーク構造の関係

表 2.1 に 4 種類の辺の重みと相互作用について示した。その辺の重みと相互作用がどのようにネットワーク構造に反映されるかを具体例を挙げて説明する。

まず、2 つの phytochemical の構造の類似度を表す Tanimoto 係数は 0 から 1 の範囲であり、1 に近いほど 2 つの phytochemical の構造が類似している事を意味する。図 2.8 の 10-Gingerol と Neral は構造が似ていないため Tanimoto 係数は 0.078 となるが、構造が似ている 10-Gingerol と Hexahydrocurcumin の Tanimoto 係数は 0.98 となる。Tanimoto 係数を辺の重みとし、ソフトウェア上で辺の重みを 0 から 1 まで徐々に増加させると 2 つの phytochemical の Tanimoto 係数が 0 に近いものは 2 つのノードの辺が早期に切断され、ノードも消滅する。一方、2 つの phytochemical の Tanimoto 係数が 1 に近いものは 2 つのノードは辺で接続されたままになるためコミュニティとして抽出可能となる。また、本研究では Tanimoto 係数の逆数を 2 つの

phytochemical の構造の非類似度と定義した。

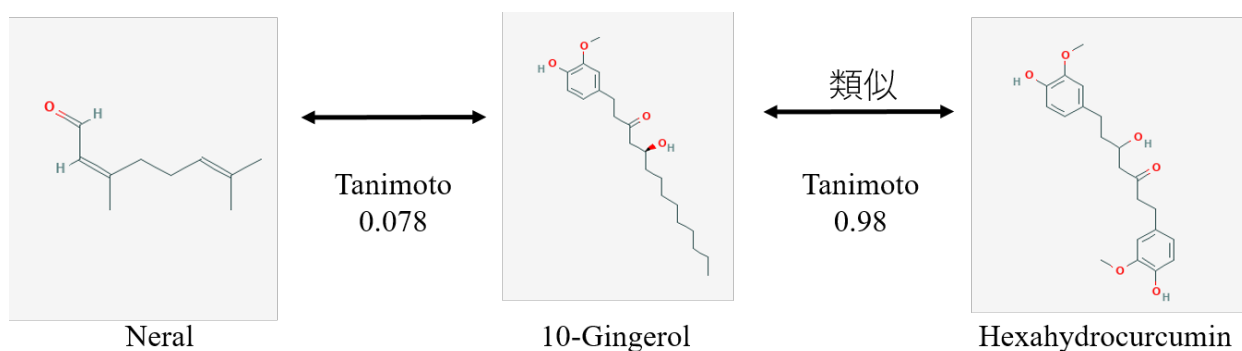


図 2.8 化学構造の類似性と Tanimoto 係数

Tanimoto 係数が 1 に近いほど 2 つの phytochemical の化学構造が類似している事を意味する

次に、2 つの phytochemical の物理化学的性質の類似度を表す内積は-93.52 から 73.94 の範囲であり、73.94 に近いほど 2 つの phytochemical の物理化学的性質が似ている事を意味する。表 2.2 の Psoralen と Amygdalin の各物理化学的性質の数値には差があるため内積は-2.21 となるが、Psoralen と Bergapten の各物理化学的性質の数値の差は小さいため内積は 4.18 となる。本研究では、物理化学的性質が似ている phytochemical を抽出する事を目的としたため、正の値の内積のみを使用した。Tanimoto 係数と同様に、内積を辺の重みとし、ソフトウェア上で辺の重みを 0 から 73.94 まで増加させると 2 つの phytochemical の内積が 0 に近いものは 2 つのノードの辺が早期に切断され、ノードも消滅する。一方、2 つの phytochemical の内積が 73.94 に近いものは 2 つのノードが辺で接続されたままになるためコミュニティとして抽出可能となる。

表 2.2 物理化学的性質の類似性と内積

内積の値が大きいほど 2 つの phytochemical の物理化学的性質の数値が似ている事を意味する

	Bergapten	Psoralen	Amygdalin
LogP	2.12	2.15	-1.3
Hydrogen Bond Donor Count	0	0	7
Hydrogen Bond Acceptor Count	2	1	12
Topological Polar Surface Area	48.7	39.4	202.32
Molecular Weight	216.19	186.16	457.4
Psoralen との内積	4.18	—	-2.21

以上のことを踏まえ、正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重みとしたネットワークでは物理化学的性質と化学構造が似ている phytochemical 群が抽出可能となり、正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワークでは物理化学的性質は似ているが、化学構造が似ていない phytochemical 群が抽出可能となる。

第3章

ネットワークの指標特性及び考察

3.1 最大ネットワークの頂点占有率のフィルター依存性

内積と Tanimoto 係数の積を辺の重み W_c としたネットワークを用いてハイパスフィルターを行った際、最も大きいコミュニティを形成する頂点数の割合を図 3.1 に示した。縦軸 ρ は最大ネットワークを構成する頂点数を全頂点数 1124 で割った値で、頂点占有率を表している。辺の重み $W_c=0.5$ のにおいて、1 次相転移的なパーコレーション転移が起きた。この時、ネットワーク図では 2 つの大きなコミュニティが 1 つに統合された (図 3.2)。

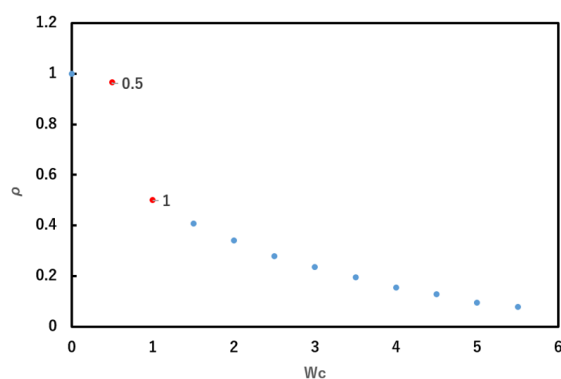


図3.1 最大ネットワークの頂点占有率変化

W_c : 辺の重み

ρ : 最大ネットワークの頂点占有率

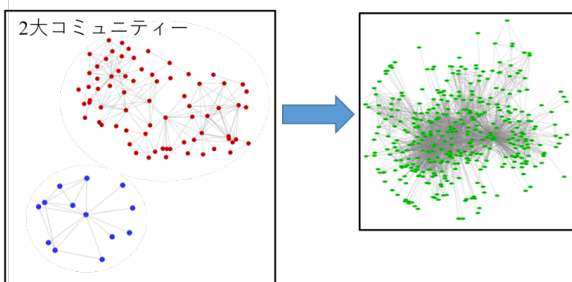


図3.2 パーコレーション転移時のネットワーク図

3.2 次数分布

パーコレーション転移が起きる直前の次数分布を図 3.1(a) に示した。横軸は次数、縦軸はネットワークを構成している全頂点数の内、ある次数を持つ頂点の数を表している。この次数と頂点数に関する両対数プロットを図 3.1(b) に示した。べきフィッティングの結果、べき指数は約 1.7 であり、従来の複雑ネットワークにおけるべき指数 (表 3.1) の範囲にある事が分かった。このことから内積と Tanimoto 係数の積を辺の重み W_c としたネットワークはスケールフリー性を持つと示唆される。

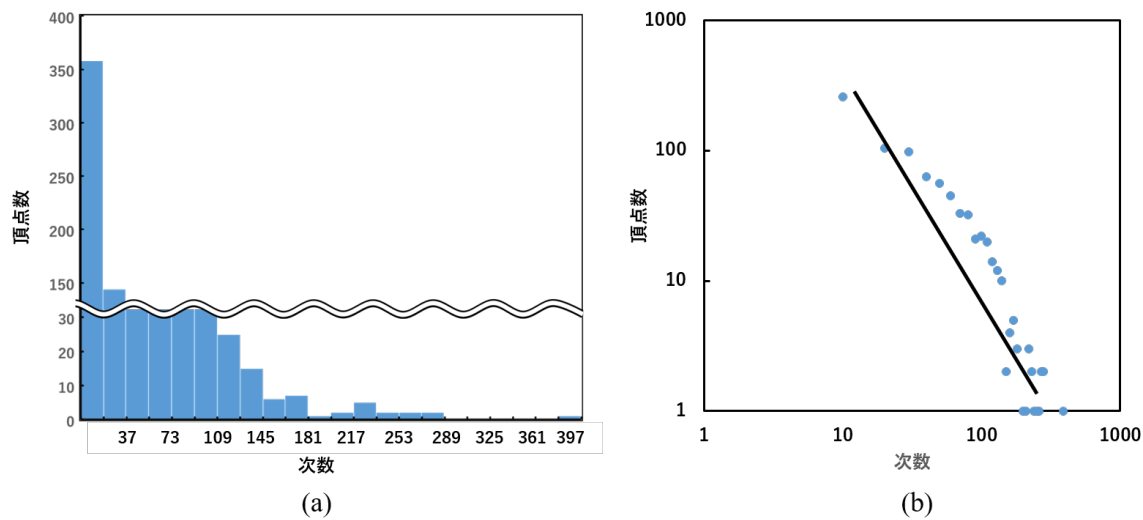


図 3.1 パーコレーション転移直前の次数分布 (a) とその両対数プロット (b)

表 3.1 従来の複雑ネットワークにおけるべき指数の例

ネットワーク構造	べき指数
小規模 SNS の友人ネットワーク構造 [2]	1.02~1.19
大規模 SNS の友人ネットワーク構造 [3]	1.8
43 種の生物の主要代謝ネットワーク構造 [4]	2.2

3.3 リピンスキーの法則を満たす phytochemical 群の抽出

内積と Tanimoto 係数の積を辺の重み W_c とし、 W_c を増大させるとネットワーク中で相対的に密度の高い 2 つのコミュニティが残った (図 3.2)。これら 2 つのコミュニティにはリピンスキーの法則 (医薬品有望条件) に関しての特徴をえることが出来た。赤色で示したコミュニティを A、青色で示したコミュニティを B とする。ラージ N を A 又は B に属する phytochemical 数、スモール n を A 又は B に属し且つリピンスキーの法則を満たす phytochemical の数とし、各コミュニティにおいてリピンスキーの法則を満たす phytochemical 数の割合を算出した。その結果、コミュニティ A は 100%、コミュニティ B は 46.6% となった。(表 3.2)

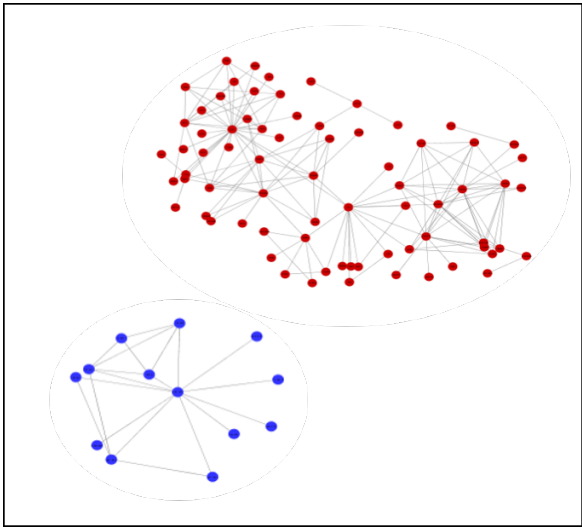


図 3.2 辺の重み W_c を増大させたとき
2 つのコミュニティが残ったネットワークの様子

表 3.2 各コミュニティにおいて
リピンスキーの法則を満たす phytochemical の割合

	A(赤)	B (青)
総 phytochemical 数	604	313
条件を満たす phytochemical 数	604	146
割合 (%)	100	46.6

さらに辺の重みを $W_c=6$ まで増加させると 1 つのコミュニティが残った。このコミュニティに属する phytochemical の LogP、分子量、水素結合供与体数、水素結合受容体数のヒストグラムから全ての phytochemical がリピンスキーの法則を満たすことが分かった。

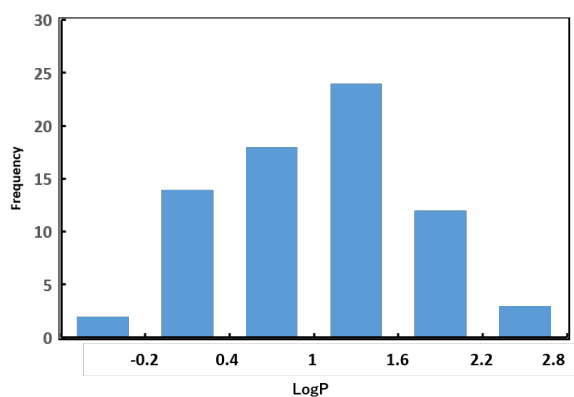


図 3.3 コミュニティに属する phytochemical の LogP の分布

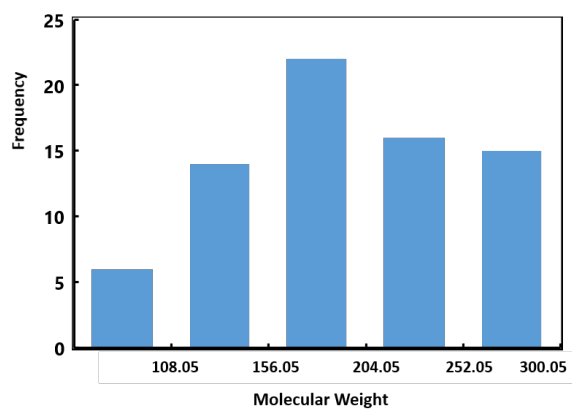


図 3.4 コミュニティに属する phytochemical の分子量の分布

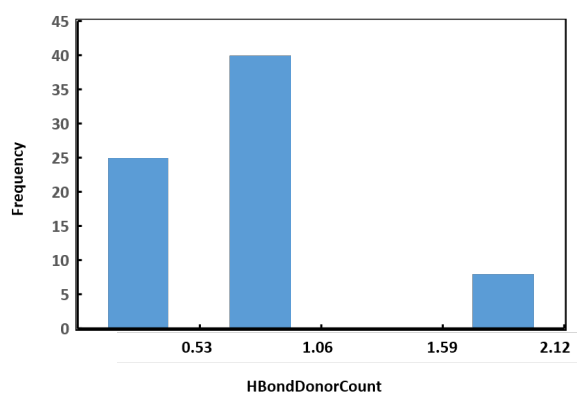


図 3.5 コミュニティに属する phytochemical の水素結合供与体数の分布

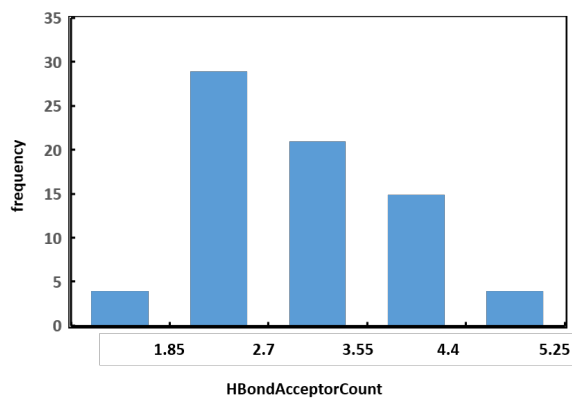


図 3.6 コミュニティに属する phytochemical の水素結合受容体数の分布

第 4 章

ネットワークの構造特性及び考察

4.1 ネットワーク構造

先に表 2.1 で示した通り、本研究では異なる相互作用を反映した 4 種類のネットワークを生成した。例えば、正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重み W_c としたネットワークでは、図 4.1 のように物理化学的性質と化学構造が似ている phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出している。

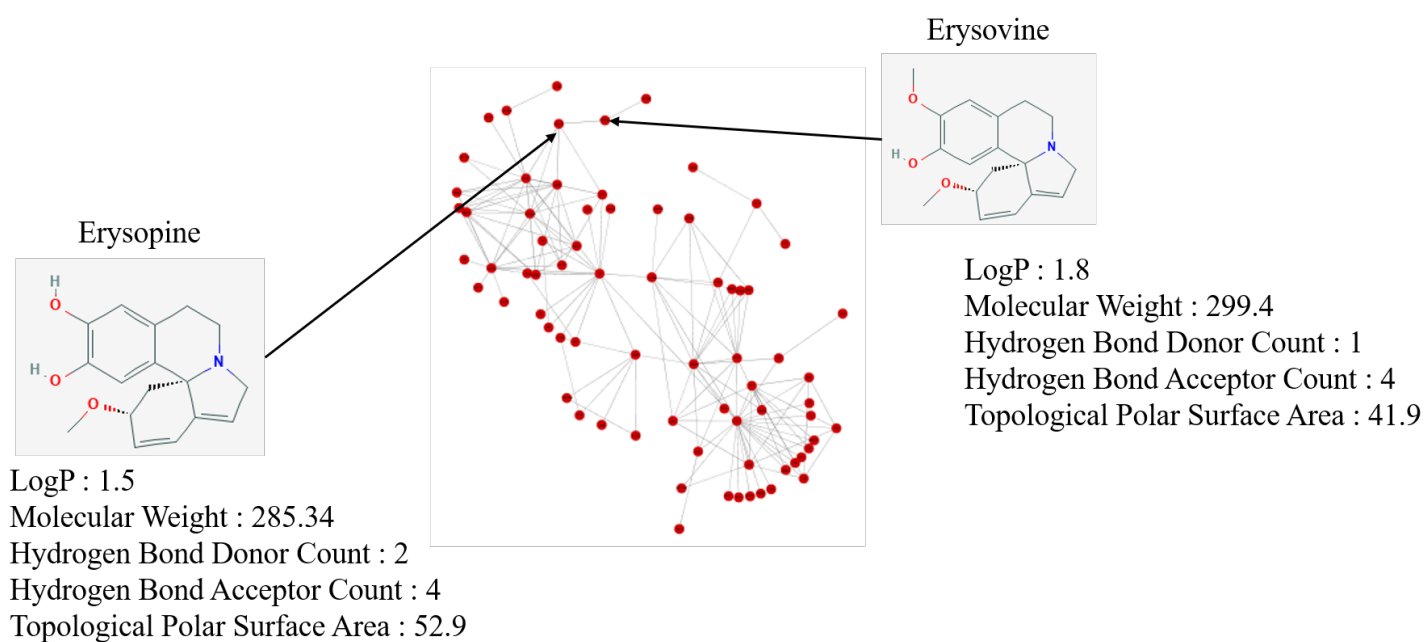


図 4.1 正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重みとしたネットワーク
化学構造と物理化学的性質が似ている phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出

一方、正の値の内積を tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワークでは、物理化学的性質は似ているが化学構造は似ていない phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出するため図 4.2 で示した Erysovine と Erysopine は直接辺で繋がれていない。

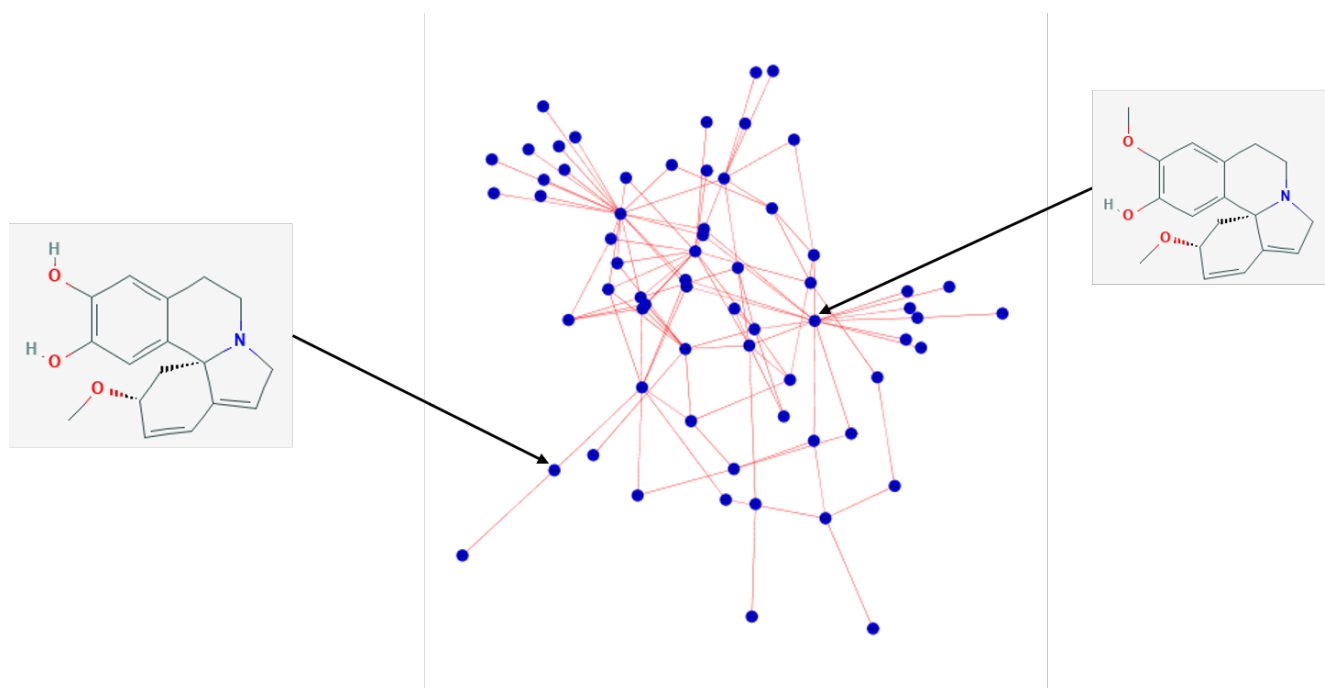


図 4.2 正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワーク
物理化学的性質は似ているが化学構造が似ていない phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出

4.2 最大共通部分構造

正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重みとしたネットワークと正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワークではノード (phytochemical) を辺で繋ぐ方法に差がある事を検証するために最大共通部分構造 (Maximum Common Substructure, MCS) を用いて各ネットワークにおける化学構造の完全不一致率を算出した。

以降、正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重みとしたネットワーク及び正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワークをそれぞれ内積× Tanimoto 係数のネットワーク、内積÷ Tanimoto 係数のネットワークと呼ぶ。

最大共通部分構造は2つの化合物にどのくらい共通する部分構造があるかを求める時の指標である。本研究では、RDKit というケモインフォマティクス用のソフトウェアを python 上で扱い、2つの phytochemical の最大共通部分構造を評価した。RDKit に化学構造式を線形で表した fingerprint を入力する。fingerprint では、化合物の構造を部分的に見たときその構造を化合物が持っている場合は1、持っていない場合は0となる (図 4.3)。

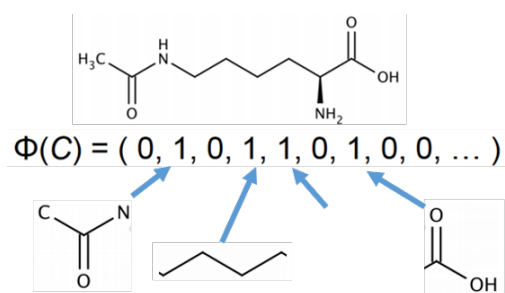


図 4.3 Fingerprint : 化学構造の線形表記

分子 A	1000	1000	1110	0010	1000	0100	0000	1001	01
分子 B	0001	1000	0100	0010	0100	0100	0000	1001	01
A and B	0000	1000	0100	0010	0000	0100	0000	1001	01

図 4.4 共通部分構造を表すビット配列

2つの化合物 (分子 A と分子 B) の間で共通する部分構造があると図 4.4 の赤色で示した 1 のみが残る。このビット配列を可視化すると2つの phytochemical に共通する部分が黄色と青色で示される (図 4.5)。

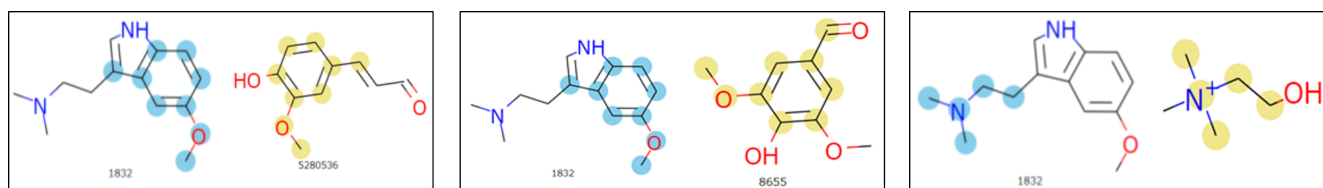


図 4.5 最大共通部分構造の可視化

一方、2つの phytochemical に共通する部分構造がない場合は色付けされない (図 4.6)。このような phytochemical に着目し、共通部分を持たない phytochemical 数を総 phytochemical 数 73 で割った値を化学構造の完全不一致率とした。図 4.7 に内積× Tanimoto 係数と内積÷ Tanimoto 係数の各ネットワークにおける完全不一致率の分布を示している。各ネットワークにおける完全不一致率の平均値は内積× Tanimoto 係数が 0.21%、内積÷ Tanimoto 係数が 33.65% となった。つまり、内積÷ Tanimoto 係数のネットワークではより化学構造が多様な phytochemical 群を抽出する事が出来ると示唆される。

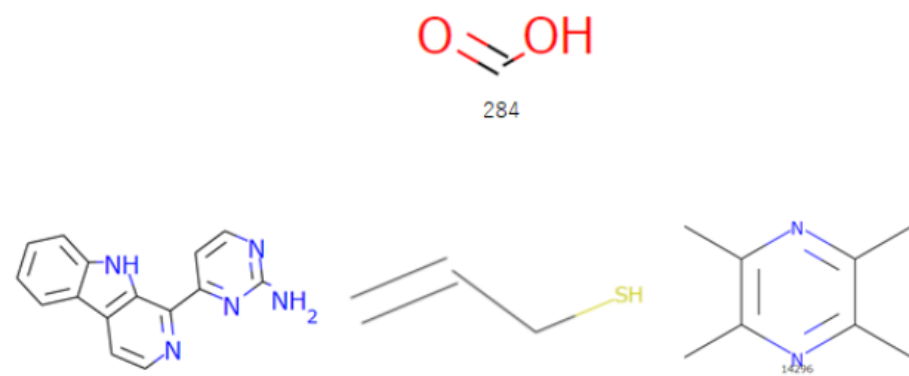


図 4.6 上の化合物に対して下の 3 つの化合物は共通部分構造を持たないため色付けされない

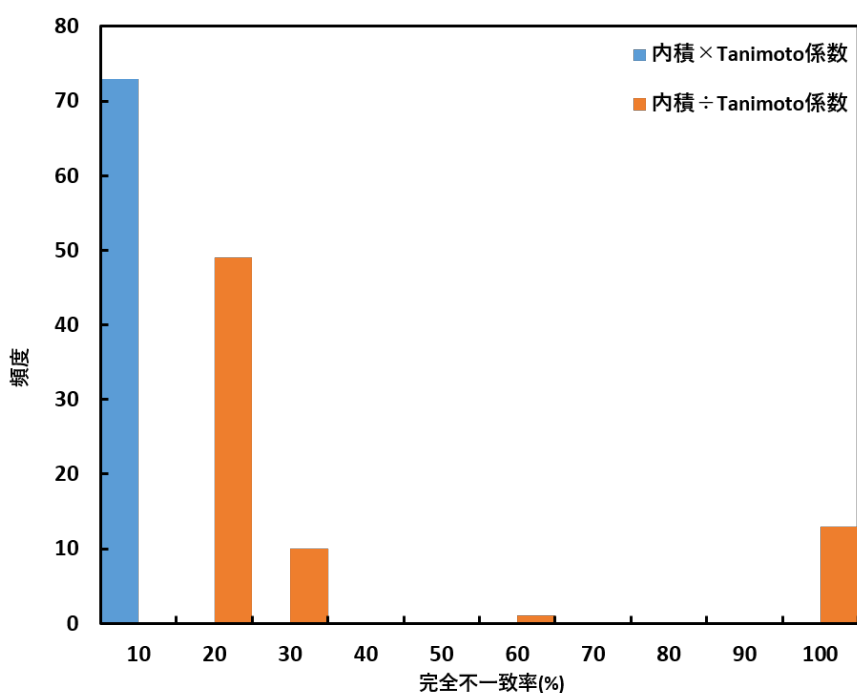


図 4.7 各ネットワークにおける完全不一致率の分布

第 5 章

結論

新薬開発においてより効率的にリード化合物を絞り込む方法確立する事は重要である。生成テンソル強化学習を用いて 21 日で DDR1 の新しい阻害剤を設計した Insilico Medicine は、化合物の構造の類似度の指標である Tanimoto 係数を用いて膨大な化合物の中から有用な化合物を絞り込んだ。また、DDR1 の新しい 6 つの阻害剤はリピンスキーの法則（医薬品有望条件）を満たしていた。本研究では、医薬品の原料として利用されることが多い phytochemical の化学構造と物理化学的性質の情報を対象データとした 4 種類のネットワーク図を生成し、分析を行った。4 種類のネットワーク全てにおいて、辺の重みを増加させるとリピンスキーの法則を満たさないコミュニティでは急激なサイズダウンが起きたため、リピンスキーの法則を満たすコミュニティのみが抽出可能となった。また、正の値の内積と Tanimoto 係数の積を辺の重みとしたネットワークでは、化学構造と物理化学的性質が似ている phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出しているが、正の値の内積を Tanimoto 係数で割った値を辺の重みとしたネットワークでは、物理化学的性質は似ているが化学構造が異なる phytochemical 同士を辺で繋ぎ抽出していることが最大共通部分構造による化学構造の完全不一致率より裏付けられた。

参考文献

- [1] ZHAVORONKOV, Alex, et al. Deep learning enables rapid identification of potent DDR1 kinase inhibitors. *Nature biotechnology*, 2019, 37.9: 1038-1040.
- [2] 鳥海不二夫; 石田健; 石井健一郎. SNS におけるネットワーク成長モデルの提案. *電子情報通信学会論文誌 D*, 2010, 93.7: 1135-1143.
- [3] 湯田聡夫, et al. ソーシャル・ネットワーキング・サービスにおける人的ネットワークの構造. *情報処理学会論文誌*, 2006, 47.3: 865-874
- [4] JEONG, Hawoong, et al. The large-scale organization of metabolic networks. *Nature*, 2000, 407.6804: 651-654.

付録

付録. 1 高生理活性ファイトケミカル 1124 種類

表 1: 1124 種類の phytochemical とそれらの物理化学的性質のデータ

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
1	quercetin	5280343	302.23	1.5	5	7	127
2	curcumin	969516	368.4	3.2	2	6	93.1
3	berberine	2353	336.4	3.6	0	4	40.8
4	berberastine	442180	352.4	2.5	1	5	61
5	ascorbic acid	54670067	176.12	-1.6	4	6	107
6	caffeic acid	689043	180.16	1.2	3	4	77.8
7	apigenin	5280443	270.24	1.7	3	5	87
8	alpha tocopherol	14985	430.7	10.7	1	2	29.5
9	beta tocopherol	86052	416.7	10.3	1	2	29.5
10	gamma tocopherol	92729	416.7	10.3	1	2	29.5
11	delta tocopherol	92094	402.7	10	1	2	29.5
12	ursolic acid	64945	456.7	7.3	2	3	57.5
13	rutin	5280805	610.5	-1.3	10	16	266
14	genistein	5280961	610.5	270.24 2.7	3	5	87
15	luteolin	5280445	270.24	286.24 1.4	4	6	107
16	zinc	23994	286.24	65.4	0	0	0
17	chlorogenic acid	1794427	354.31	-0.4	6	9	165
18	eugenol	3314	164.2	2	1	2	29.5
19	kaempferol	5280863	286.24	1.9	4	6	107
20	thymol	6989	150.22	3.3	1	1	20.2
21	resveratrol	445154	228.24	3.1	3	3	60.7
22	1,8-cineole	2758	154.25	2.5	0	1	9.2
23	allicin	65036	162.3	1.3	0	3	61.6
24	magnesium	5462224	24.305	0	0	0	0
25	oleanolic acid	10494	456.7	7.5	2	3	57.5
26	menthol	1254	156.26	3	1	1	20.2
27	gallic acid	370	170.12	0.7	4	5	98
28	caffeine	2519	194.19	-0.1	0	3	58.4
29	ferulic acid	445858	194.18	1.5	2	4	66.8
30	piperine	638024	285.34	3.5	0	3	38.8

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
31	limonene	22311	136.23	3.4	0	0	0
32	cinnamaldehyde	6375113	132.16	1.9	0	1	17.1
33	chrysin	5281607	254.24	2.1	2	4	66.8
34	selenium	6326970	78.97	0	0	0	0
35	emodin	3220	270.24	2.7	3	5	94.8
36	coumarin	323	146.14	1.4	0	2	26.3
37	glycyrrhizin	656656	857	0	10	18	269
38	rosmarinic acid	5281792	360.3	2.4	5	8	145
39	naringenin	667495	272.25	2.4	3	5	87
40	gossypol	3503	518.6	6.9	6	8	156
41	bromelain	44263865	1026.9	-11.6	18	29	483
42	linalool	6549	154.25	2.7	1	1	20.2
43	citral	643779	152.23	3	0	1	17.1
44	beta carotene	5280489	536.9	13.5	0	0	0
45	atropine	174174	289.4	1.8	1	4	49.8
46	ellagic acid	5281855	302.19	1.1	4	8	134
47	baicalein	5281605	270.24	1.7	3	5	87
48	aescin	133640184	1131.3	0.7	13	24	388
49	ephedrine	9294	165.23	0.9	2	2	32.3
50	puerarin	53384442	416.4	0	6	9	157
51	lapachol	3884	242.27	2.8	1	3	54.4
52	sanguinarine	5154	332.3	4.4	0	4	40.8
53	beta sitosterol	222284	414.7	9.3	1	1	20.2
54	ajoene	5386591	234.4	1.7	0	4	86.9
55	colchicine	6167	399.4	1	1	6	83.1
56	capsaicin	1548943	305.4	3.6	2	3	58.6
57	quercitrin	5280459	448.4	0.9	7	11	186
58	scopoletin	5280460	192.17	1.5	1	4	55.8
59	protocatechuic acid	72	154.12	1.1	3	4	77.8
60	pyridoxine	1054	169.18	-0.8	3	4	73.6
61	xanthotoxin	4114	216.19	1.9	0	4	48.7
62	catechin	9064	290.27	0.4	5	6	110
63	plumbagin	10205	188.18	2.3	1	3	54.4
64	camphor	2537	152.23	2.2	0	1	17.1
65	tannic acid	16129778	1701.2	6.2	25	46	778
66	scopolamine	134767951	303.35	0.9	1	5	62.3

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
67	escin	6476031	1131.3	0.7	13	24	388
68	baicalin	64982	446.4	1.1	6	11	183
69	epicatechin	72276	290.27	0.4	5	6	110
70	niacin	938	123.11	0.4	1	3	50.2
71	berbamine	12300053	608.7	6.1	1	8	72.9
72	yohimbine	8969	354.4	2.9	2	4	65.6
73	carvacrol	10364	150.22	3.1	1	1	20.2
74	glabridin	124052	324.4	3.9	2	4	58.9
75	theophylline	2153	180.16	0	1	3	69.3
76	alantolactone	72724	232.32	3.7	0	2	26.3
77	anethole	637563	148.2	3.3	0	1	9.2
78	geraniol	637566	154.25	2.9	1	1	20.2
79	borneol	12242824	154.25	2.7	1	1	20.2
80	tannin	16133892	1701.2	6.2	25	46	778
81	proanthocyanidin	108065	592.5	2.7	9	12	210
82	salicylic acid	338	138.12	2.3	2	3	57.5
83	helenalin	23205	262.3	1.4	1	4	63.6
84	forskolin	47936	410.5	1	3	7	113
85	diosmin	5281613	608.5	-0.8	8	15	234
86	myricetin	5281672	318.23	1.2	6	8	148
87	aristolochic acid	2236	341.27	3.6	1	7	111
88	chelerythrine	2703	348.4	4.6	0	4	40.8
89	nordihydroguaiaretic acid	4534	302.4	4.3	4	4	80.9
90	aesculin	5281417	340.28	-0.6	5	9	146
91	emetine	11865426	482.7	4.7	2	4	58
92	hydroquinone	785	110.11	0.6	2	2	40.5
93	indole-3-carbinol	3712	147.17	1.1	2	1	36
94	reserpine	5770	608.7	4	1	10	118
95	quinine	3034034	324.4	2.9	1	4	45.6
96	biochanin A	5280373	284.26	3	2	5	76
97	aesculetin	5281416	178.14	1.2	2	4	66.8
98	daidzein	5281708	254.24	2.5	2	4	66.8
99	6-shogaol	5281794	276.4	3.7	1	3	46.5
100	glycyrrhetic acid	133568304	470.7	6.4	2	4	74.6
101	thiamin	1130	265.36	1	2	5	104
102	myristicin	4276	192.21	2.9	0	3	27.7

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
103	psoralen	6199	186.16	2.3	0	3	39.4
104	caryophyllene	6429274	204.35	4.4	0	0	0
105	hesperidin	129010007	610.6	-1.1	8	15	234
106	anthocyanin	145858	207.25	0	0	0	1
107	boswellic acid	168928	456.7	8.3	2	3	57.5
108	menthone	443159	154.25	2.7	0	1	17.1
109	hyperoside	5281643	464.4	0.4	8	12	207
110	safrole	5144	162.18	3	0	2	18.5
111	tryptophan	9060	204.22	-1.1	3	3	79.1
112	boldine	10154	327.4	2.7	2	5	62.2
113	kawain	5281565	230.26	2.5	0	3	35.5
114	glycyrrhetic acid	25796773	470.7	6.4	2	4	74.6
115	nimbidin	108058	540.6	2.3	0	9	118
116	vanillin	1183	152.15	1.2	1	3	46.5
117	alpha pinene	6654	136.23	2.8	0	0	0
118	diallyl trisulfide	16315	178.3	2.6	0	3	75.9
119	adenosine	60961	267.24	-1.1	4	8	140
120	lycorine	72378	287.31	0	2	5	62.2
121	pulegone	442495	152.23	2.8	0	1	17.1
122	6-gingerol	442793	294.4	2.5	2	4	66.8
123	isoliquiritigenin	638278	256.25	3.2	3	4	77.8
124	licochalcone A	5318998	338.4	4.9	2	4	66.8
125	calcium	5460341	40.08	0	0	0	0
126	tetrandrine	73078	622.7	6.4	0	8	61.9
127	procyanidin	107876	594.5	2	10	13	230
128	cocaine	446220	303.35	2.3	0	5	55.8
129	linoleic acid	5280450	280.4	6.8	1	2	37.3
130	hyoscyamine	6931560	289.4	1.8	1	4	49.8
131	parthenolide	124463365	248.32	2.3	0	3	38.8
132	phenol	996	94.11	1.5	1	1	20.2
133	bergapten	2355	216.19	2.3	0	4	48.7
134	hypericin	3663	504.4	5.7	6	8	156
135	papaverine	4680	339.4	3.9	0	5	49.8
136	serotonin	5202	176.21	0.2	3	2	62
137	lawsone	6755	174.15	0.9	1	3	54.4
138	podophyllotoxin	10607	414.4	2	1	8	92.7

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
139	flavone	10680	222.24	3.6	0	2	26.3
140	diallyl disulfide	16590	146.3	2.2	0	2	50.6
141	aconitine	134688691	645.7	0.3	3	12	153
142	solanine	134784057	868.1	1.8	9	16	241
143	arecoline	2230	155.19	0.3	0	3	29.5
144	l-dopa	6047	197.19	-2.7	4	5	104
145	imperatorin	10212	270.28	3.4	0	4	48.7
146	diallyl sulfide	11617	114.21	2.2	0	1	25.3
147	p-coumaric acid	637542	164.16	1.5	2	3	57.5
148	benzaldehyde	240	106.12	1.5	0	1	17.1
149	ethanol	702	46.07	-0.1	1	1	20.2
150	harmaline	3564	214.26	2.1	1	2	37.4
151	protopine	4970	353.4	2.8	0	6	57.2
152	physostigmine	5983	275.35	0.7	1	4	44.8
153	vanillic acid	8468	168.15	1.4	2	4	66.8
154	aloe emodin	10207	270.24	1.8	3	5	94.8
155	chromium	23976	51.996	0	0	0	0
156	gentianine	354616	175.18	1.5	0	3	39.2
157	pectin	441476	194.14	-2.3	5	7	127
158	s-allyl-l-cysteine	9793905	161.22	-2.1	2	4	88.6
159	citric acid	311	192.12	-1.7	4	7	132
160	pyrogallol	1057	126.11	0.5	3	3	60.7
161	terpinen-4-ol	11230	154.25	2.2	1	1	20.2
162	bulbocapnine	12441	325.4	2.9	1	5	51.2
163	alpha terpineol	17100	154.25	1.8	1	1	20.2
164	harmine	5280953	212.25	3.6	1	2	37.9
165	tylophorine	10883727	393.5	4.7	0	5	40.2
166	quinidine	24867865	324.4	2.9	1	4	45.6
167	rhynchophylline	117829480	384.5	2.3	1	5	67.9
168	cynarin	129316856	516.4	1.5	7	12	211
169	folic acid	135398658	441.4	-1.1	6	10	209
170	tetramethyl pyrazine	14296	136.19	1.3	0	2	25.8
171	gaba	119	103.12	-3.2	2	3	63.3
172	catechol	289	110.11	0.9	2	2	40.5
173	scoparone	8417	206.19	1.9	0	4	44.8
174	myrcene	31253	136.23	4.3	0	0	0

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
175	betulinic acid	64971	456.7	8.2	2	3	57.5
176	arctigenin	64981	372.4	3.6	1	6	74.2
177	protoanemonin	66948	96.08	0.9	0	2	26.3
178	umbelliferone	5281426	162.14	1.6	1	3	46.5
179	morphine	5288826	285.34	0.8	2	4	52.9
180	isoquercitrin	51402807	464.4	0.4	8	12	207
181	methyl salicylate	4133	152.15	2.3	1	3	46.5
182	theobromine	5429	180.16	-0.8	1	3	67.2
183	skimmianine	6760	259.26	2.8	0	5	53.7
184	nicotine	89594	162.23	1.2	0	2	16.1
185	matrine	91466	248.36	1.6	0	2	23.6
186	lupeol	259846	426.7	9.9	1	1	20.2
187	eicosapentaenoic acid	446284	302.5	5.6	1	2	37.3
188	andrographolide	5318517	350.4	2.2	3	5	87
189	chlorophyll	12085802	893.5	0	0	9	96.4
190	alliin	15558642	177.22	-3.5	2	5	99.6
191	sparteine	16212687	234.38	2.5	0	2	6.5
192	geraniin	118701496	952.6	-0.6	14	27	450
193	anisodamine	134693125	305.4	0.9	2	5	70
194	benzoic acid	243	122.12	1.9	1	2	37.3
195	choline	305	104.17	-0.4	1	1	20.2
196	dopamine	681	153.18	-1	3	3	66.5
197	benzyl isothiocyanate	2346	149.21	3.2	0	2	44.4
198	pilocarpine	5910	208.26	1.1	0	3	44.1
199	methyl eugenol	7127	178.23	2.5	0	2	18.5
200	citronellal	7794	154.25	3	0	1	17.1
201	apiole	10659	222.24	2.7	0	4	36.9
202	paeonol	11092	166.17	2	1	3	46.5
203	aucubin	91458	346.33	-3	6	9	149
204	carnosol	442009	330.4	4.4	2	4	66.8
205	gamma linolenic acid	5280933	278.4	5.9	1	2	37.3
206	demethoxycurcumin	5469424	338.4	3.3	2	5	83.8
207	alpha bisabolol	6506009	222.37	3.8	1	1	20.2
208	verbascoside	132274946	624.6	-0.5	9	15	245
209	paeoniflorin	134693106	480.5	-1	5	11	164
210	acetyl choline	187	146.21	0.2	0	2	26.3

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
211	inulin	441708	586.7	1.5	3	10	133
212	carvone	7439	150.22	2.4	0	1	17.1
213	camptothecin	24360	348.4	1	1	5	79.7
214	d-limonene	440917	136.23	3.4	0	0	0
215	pterostilbene	5281727	256.3	3.8	1	3	38.7
216	cyanidin-3-o-glucoside	12303221	484.8	0	8	11	181
217	asiaticoside	133640195	959.1	0.1	12	19	315
218	guaiacol	460	124.14	1.3	1	2	29.5
219	histamine	774	111.15	-0.7	2	2	54.7
220	mannitol	6251	182.17	-3.1	6	6	121
221	galanthamine	9651	287.35	1.8	1	4	41.9
222	rhein	10168	284.22	2.2	3	6	112
223	honokiol	72303	266.3	5	2	2	40.5
224	dihydromethysticin	88308	276.28	2.6	0	5	54
225	chelidone	197810	353.4	2.2	1	6	60.4
226	cinnamic acid	444539	148.16	2.1	1	2	37.3
227	oleic acid	445639	282.5	6.5	1	2	37.3
228	ginsenoside	3086007	444.7	8.5	2	2	40.5
229	vitexin	5280441	432.4	0.2	7	10	177
230	amentoflavone	5281600	538.5	5	6	10	174
231	mangiferin	5281647	422.3	-0.4	8	11	197
232	rhamnetin	5281691	316.26	1.9	4	7	116
233	beta asarone	5281758	208.25	3	0	3	27.7
234	methysticin	90125683	274.27	2.4	0	5	54
235	solasodine	134694123	413.6	5.4	2	3	41.5
236	ginkgolide A	9909368	408.4	0.6	2	9	129
237	ginkgolide B	65243	424.4	-0.4	3	10	149
238	ginkgolide C	24721502	440.4	-1.4	4	11	169
239	benzyl benzoate	2345	212.24	4	0	2	26.3
240	resorcinol	5054	110.11	0.8	2	2	40.5
241	apomorphine	6005	267.32	2.3	2	3	43.7
242	pseudoephedrine	7028	165.23	0.9	2	2	32.3
243	angelicin	10658	186.16	2	0	3	39.4
244	palmatine	19009	352.4	3.7	0	4	40.8
245	cycleanine	121313	622.7	6.7	0	8	61.9
246	anacardic acid	167551	348.5	9.5	2	3	57.5

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
247	taxifolin	439533	304.25	1.5	5	7	127
248	carpaine	442630	478.7	6.3	2	6	76.7
249	farnesol	1549109	222.37	4.8	1	1	20.2
250	thujone	12304613	152.23	2.3	0	1	17.1
251	glycyrrhizic acid	134747495	822.9	3.7	8	16	267
252	acetic acid	176	60.05	-0.2	1	2	37.3
253	juglone	3806	174.15	1.9	1	3	54.4
254	allyl isothiocyanate	5971	99.16	2.4	0	2	44.4
255	methyl gallate	7428	184.15	0.9	3	5	87
256	p-cymene	7463	134.22	4.1	0	0	0
257	elemicin	10248	208.25	2.5	0	3	27.7
258	thymoquinone	10281	164.2	2	0	2	34.1
259	tetrahydrocannabinol	16078	314.5	7	1	2	29.5
260	vanadium	23990	50.941	0	0	0	0
261	hydrastine	371942	383.4	2.7	0	7	66.5
262	lycopene	446925	536.9	15.6	0	0	0
263	humulone	549481	362.5	4.2	3	5	94.8
264	isoeugenol	853433	164.2	2.6	1	2	29.5
265	formononetin	5280378	268.26	2.8	1	4	55.8
266	acacetin	5280442	284.26	2.1	2	5	76
267	wogonin	5281703	284.26	3	2	5	76
268	ajmaline	6100671	326.4	1.8	2	4	46.9
269	silymarin	24832061	482.4	2.4	5	10	155
270	dauricine	44144275	624.8	6.7	1	8	72.9
271	falcarinol	71308196	244.37	5.5	1	1	20.2
272	ibogaine	89578867	310.4	3.9	1	2	28.3
273	platycodin A	46173910	1267.4	-3.1	16	29	459
274	platycodin B	53317652	1387.5	-5.3	20	33	532
275	platycodin C	162859	1225.3	-3.7	17	28	453
276	malic acid	525	134.09	-1.3	3	5	94.8
277	indole	798	117.15	2.1	1	0	15.8
278	khellin	3828	260.24	2.3	0	5	57.9
279	trigonelline	5570	137.14	1.2	0	2	44
280	citronellol	8842	156.26	3.2	1	1	20.2
281	osthol	10228	244.28	3.8	0	3	35.5
282	ascaridole	10545	168.23	2.3	0	2	18.5

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
283	tangeretin	68077	372.4	3	0	7	72.4
284	isopimpinellin	68079	246.21	1.9	0	5	57.9
285	sesamin	72307	354.4	2.7	0	6	55.4
286	methionine	84815	149.21	-1.9	2	4	88.6
287	withaferin A	265237	470.6	3.8	2	6	96.4
288	salicin	439503	286.28	-1.2	5	7	120
289	arbutin	440936	272.25	-0.7	5	7	120
290	riboflavin	493570	376.4	-1.5	5	7	155
291	asarone	636822	208.25	3	0	3	27.7
292	lobeline	688025	337.5	3.8	1	3	40.5
293	methyl isoeugenol	1549045	178.23	2.5	0	2	18.5
294	alpha linolenic acid	5280934	278.4	5.9	1	2	37.3
295	fisetin	5281614	286.24	2	4	6	107
296	morin	5281670	302.23	1.5	5	7	127
297	polydatin	5281718	390.4	1.7	6	8	140
298	bakuchiol	5468522	256.4	6.1	1	1	20.2
299	isorhynchophylline	71571454	384.5	2.3	1	5	67.9
300	artemisinin	91746672	282.33	2.8	0	5	54
301	lutein	126970006	568.9	11	2	2	40.5
302	ginsenoside-rb-1	9898279	1109.3	0.3	15	23	377
303	betaine	247	117.15	0.5	0	2	40.1
304	diazepam	3016	284.74	3	0	2	32.7
305	sucrose	5988	342.3	-3.7	8	11	190
306	shikimic acid	8742	174.15	-1.7	4	5	98
307	perillyl alcohol	10819	152.23	2.1	1	1	20.2
308	manganese	23930	54.93804	0	0	0	0
309	canavanine	439202	176.17	-4.8	4	5	137
310	strychnine	441071	334.4	1.9	0	3	32.8
311	conessine	441082	356.6	4.9	0	2	6.5
312	arginine	1549073	175.21	-3.5	4	2	134
313	cichoric acid	5281764	474.4	2	6	12	208
314	codeine	5284371	299.4	1.1	1	4	41.9
315	sulfur	5362487	32.07	0.5	0	1	1
316	potassium	5462222	39.098	0	0	0	0
317	dihydrokawain	10220256	232.27	2.8	0	3	35.5
318	hyperin	90657624	463.4	1	7	12	209

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
319	deoxypodophyllotoxin	133565267	398.4	3.1	0	7	72.4
320	acemannan	134129847	1692.5	-12.8	17	49	711
321	ginsenoside-rg-1	441923	801	2.7	10	14	239
322	p-hydroxy benzoic acid	135	138.12	1.6	2	3	57.5
323	formic acid	284	46.025	-0.2	1	2	37.3
324	palmitic acid	985	256.42	6.4	1	2	37.3
325	rotenone	6758	394.4	4.1	0	6	63.2
326	alpha terpinene	7462	136.23	2.8	0	0	0
327	vasicinone	10242	202.21	0.4	1	3	52.9
328	beta pinene	14896	136.23	3.1	0	0	0
329	zingiberone	31211	194.23	0.8	1	3	46.5
330	magnolol	72300	266.3	5	2	2	40.5
331	jatrorrhizine	72323	338.4	3.4	1	4	51.8
332	betulin	72326	442.7	8.3	2	2	40.5
333	isoalantolactone	73285	232.32	3.4	0	2	26.3
334	beta eudesmol	91457	222.37	3.7	1	1	20.2
335	cysteine	92851	121.16	-2.5	3	4	64.3
336	ar-turmerone	160512	216.32	4	0	1	17.1
337	medicarpin	336327	270.28	2.6	1	4	47.9
338	evodiamine	442088	303.4	3.1	1	2	39.3
339	geranial	638011	152.23	3	0	1	17.1
340	beta ionone	638014	192.3	2.9	0	1	17.1
341	diosmetin	5281612	300.26	1.7	3	6	96.2
342	galangin	5281616	270.24	2.3	3	5	87
343	myricitrin	5281673	464.4	0.5	8	12	207
344	coumestrol	5281707	268.22	2.8	2	5	79.9
345	bilobalide	129010088	326.3	-0.3	2	8	119
346	falcarindiol	131954651	260.4	4.4	2	2	40.5
347	corilagin	134692185	634.5	0.1	11	18	311
348	mesaconitine	134715403	631.7	-0.1	3	12	153
349	allantoin	204	158.12	-2.2	4	3	113
350	formaldehyde	712	30.026	1.2	0	1	17.1
351	glycine	750	75.07	-3.2	2	3	63.3
352	iodine	807	253.8089	1.7	0	0	0
353	p-aminobenzoic acid	978	137.14	0.8	2	3	63.3
354	estragole	8815	148.2	3.4	0	1	9.2

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
355	anemonin	10496	192.17	0.4	0	4	52.6
356	herniarin	10748	176.17	1.9	0	3	35.5
357	copper	23978	63.55	0	0	0	0
358	pelletierine	92987	141.21	0.4	1	2	29.1
359	bornyl acetate	93009	196.29	3.3	0	2	26.3
360	mitraphylline	94160	368.4	1.6	1	5	67.9
361	liquiritigenin	114829	256.25	2.2	2	4	66.8
362	taspine	215159	369.4	2.8	0	7	74.3
363	vicenin-2	442664	594.5	-2.3	11	15	267
364	arachidonic acid	444899	304.5	6.3	1	2	37.3
365	trachelogenin	452855	388.4	2.8	2	7	94.4
366	fraxetin	5273569	208.17	1.2	2	5	76
367	stigmasterol	5280794	412.7	8.6	1	1	20.2
368	yangonin	5281575	258.27	2.7	0	4	44.8
369	homoharringtonine	5458297	545.6	0.8	2	10	124
370	ginkgolide B	11973122	424.4	-0.4	3	10	149
371	estrogen	23667301	372.4	0	0	5	91.9
372	epicatechin gallate	44460390	442.4	1.5	7	10	177
373	punicalagin	44567213	1084.7	1.7	17	30	511
374	bullatacin	118701178	622.9	9.7	3	7	105
375	aloin	134693262	418.4	-0.1	7	9	168
376	naringin	134694135	580.5	-0.5	8	14	225
377	adenine	190	135.13	-0.1	2	4	80.5
378	embelin	3218	294.4	5.4	2	4	74.6
379	tyramine	5610	137.18	1.1	2	2	46.2
380	sorbitol	5780	182.17	-3.1	6	6	121
381	epinephrine	5816	183.2	-1.4	4	4	72.7
382	testosterone	6013	288.4	3.3	1	2	37.3
383	alizarin	6293	240.21	3.2	2	4	74.6
384	pantothenic acid	6613	219.23	-1.1	4	5	107
385	alpha phellandrene	7460	136.23	3.2	0	0	0
386	gamma terpinene	7461	136.23	2.8	0	0	0
387	maltol	8369	126.11	0.4	1	3	46.5
388	monocrotaline	9415	325.36	-0.7	2	7	96.3
389	liriodenine	10144	275.26	3.4	0	4	48.4
390	perillaldehyde	16441	150.22	2.6	0	1	17.1

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
391	jatamansone	21164	222.37	4.4	0	1	17.1
392	p-anisaldehyde	31244	136.15	1.8	0	2	26.3
393	castanospermine	54445	189.21	-2.2	4	5	84.2
394	dictamnine	68085	199.2	2.7	0	3	35.3
395	magnoflorine	73337	342.4	2.7	2	4	58.9
396	isotetrandrine	73664	622.7	6.4	0	8	61.9
397	ajmalicine	441975	352.4	2.7	1	4	54.6
398	macrocarpal A	454457	472.6	6.2	4	6	115
399	macrocarpal D	454460	472.6	6.2	4	6	115
400	lithium	3028194	7	0	0	0	0
401	huperzine A	4369233	242.32	0	2	2	55.1
402	ginkgetin	5271805	566.5	5.7	4	10	152
403	geranyl geraniol	5281365	290.5	6.6	1	1	20.2
404	harmane	5281404	182.22	3.6	1	1	28.7
405	isorhamnetin	5281654	316.26	1.9	4	7	116
406	s-allylmercaptocysteine	9794159	193.3	-2	2	5	114
407	nerolidol	11241545	222.37	4.6	1	1	20.2
408	anagryne	71056954	244.33	1.6	0	2	23.6
409	solasonine	118701087	884.1	1.1	10	17	259
410	cryptotanshinone	139068390	592.7	0	0	6	86.7
411	3-n-butyl phthalide	61361	190.24	2.8	0	2	26.3
412	chrysarobin	68111	240.25	3.6	2	3	57.5
413	cuminaldehyde	326	148.2	2.7	0	1	17.1
414	mescaline	4076	211.26	0.7	1	4	53.7
415	xylitol	6912	152.15	-2.5	5	5	101
416	piperidine	8082	85.15	0.8	1	1	12
417	azulene	9231	128.17	3.2	0	0	0
418	chrysophanol	10208	254.24	3.5	2	4	74.6
419	reticuline	10233	329.4	3	2	5	62.2
420	bufotenine	10257	204.27	1.2	2	2	39.3
421	chamazulene	10719	184.28	4.4	0	0	0
422	glaucine	16754	355.4	3.4	0	5	40.2
423	alpha terthienyl	65067	248.4	4.4	0	3	84.7
424	rutaecarpine	65752	287.3	3	1	2	48.5
425	bergenin	66065	328.27	-1	5	9	146
426	alpha amyrrin	73170	426.7	9	1	1	20.2

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
427	daidzin	107971	416.4	0.7	5	9	146
428	anonaine	160597	265.31	2.8	1	3	30.5
429	cirsilineol	162464	344.3	2.9	2	7	94.4
430	tanshinone-ii-a	164676	294.3	4.3	0	3	47.3
431	eriodictyol	440735	288.25	2	4	6	107
432	cathine	441457	151.21	0.8	2	2	46.2
433	oxyacanthine	442333	608.7	6.3	1	8	72.9
434	lignan	443013	414.4	2	1	8	92.7
435	geniposidic acid	443354	374.34	-2.7	6	10	166
436	fenugreekine	444170	663.4	-5.9	8	19	327
437	squalene	638072	410.7	11.6	0	0	0
438	nerol	643820	154.25	2.9	1	1	20.2
439	cytisine	1549781	190.24	0.2	1	2	32.3
440	fraxin	5273568	370.31	-0.6	5	10	155
441	crocetin	5281232	328.4	5.4	2	4	74.6
442	echinacoside	5281771	786.7	-2.1	12	20	324
443	iridin	5281777	522.5	0.8	6	13	194
444	butylidene phthalide	5352899	188.22	3.2	0	2	26.3
445	10-hydroxycamptothecin	14440697	364.4	0.6	2	6	100
446	robinin	44258757	740.7	-2.2	11	19	304
447	macrocarpal B	46233158	454.6	7.2	3	5	94.8
448	vinblastine	133126830	811	3.7	3	12	154
449	akuammidine	133561945	352.4	1.5	2	4	65.6
450	alpha boswellic acid	134688623	456.7	8.4	2	3	57.5
451	cnicin	138404438	378.4	0.2	3	7	113
452	geniposide	138454108	388.4	-2.3	5	10	155
453	achyranthine	322598	129.16	-2.4	1	3	40.5
454	cryogenine	61002	151.17	0.1	3	2	67.2
455	Bisdemethoxycurcumin	5315472	308.3	3.3	2	4	74.6
456	benzyl alcohol	244	108.14	1.1	1	1	20.2
457	hcn	768	27.025	0.1	0	1	23.8
458	phytic acid	890	660.04	-10.3	12	24	401
459	oxalic acid	971	90.03	-0.3	2	4	74.6
460	phloretin	4788	274.27	2.6	4	5	98
461	camphene	6616	136.23	3.3	0	0	0
462	valeric acid	7991	102.13	1.4	1	2	37.3

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
463	benzyl acetate	8785	150.17	2	0	2	26.3
464	terpinolene	11463	136.23	2.8	0	0	0
465	taxol	36314	853.9	2.5	4	14	221
466	lupulone	68051	414.6	6.7	2	4	74.6
467	pinocembrin	68071	256.25	2.7	2	4	66.8
468	delphinidin	68245	338.69	0	6	7	122
469	beta amyrin	73145	426.7	9.2	1	1	20.2
470	hederagenin	73299	472.7	6.8	3	4	77.8
471	solamargine	73611	868.1	1.1	9	16	239
472	sweroside	161036	358.34	-0.9	4	9	135
473	cirsimaritin	188323	314.29	2	2	6	85.2
474	delta cadinene	441005	204.35	3.8	0	0	0
475	pedunculagin	442688	784.5	0.9	13	22	377
476	sinapic acid	637775	224.21	1.5	2	5	76
477	tetrahydropalmatine	969488	355.4	3.2	0	5	40.2
478	dihydrohelenalin	3032910	264.32	0.5	1	4	63.6
479	agropyrene	3083613	154.21	3.4	0	0	0
480	chrysosplenol D	5280699	360.3	2.8	3	8	115
481	tricin	5281702	330.29	1.7	3	7	105
482	syringin	5316860	372.4	-1.3	5	9	138
483	heliotrine	5407362	313.39	0.1	2	6	79.2
484	fangchinoline	5458555	608.7	6.1	1	8	72.9
485	vasicinol	6452262	204.22	0.1	2	3	56.1
486	asimicin	9960731	622.9	9.7	3	7	105
487	costunolide	12304109	232.32	2.1	0	2	26.3
488	asperuloside	20054840	414.4	-2.4	4	11	161
489	erythrophleine	20054907	421.6	3.3	2	6	84.9
490	acoric acid	25750964	268.35	1.8	1	4	71.4
491	parthenin	68152825	262.3	1.3	1	4	63.6
492	indicine-n-oxide	71725096	315.36	-1	3	6	105
493	serpentine	129316896	349.4	3.1	1	3	55.2
494	oleuropein	134688908	540.5	-0.4	6	13	202
495	ginsenoside-rb-2	6917976	1079.3	0.3	14	22	357
496	urushiol III	5281862	316.5	7.4	2	2	40.5
497	urushiol II	12444627	318.5	8.1	2	2	40.5
498	urushiol IV	71588307	1315.5	0	8	23	368

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
499	m-cresol	342	108.14	2	1	1	20.2
500	phloroglucinol	359	126.11	0.2	3	3	60.7
501	lactic acid	612	90.08	-0.7	2	3	57.5
502	glycerol	753	92.09	-1.8	3	3	60.7
503	inositol	892	180.16	-3.7	6	6	121
504	apocynin	2214	166.17	0.5	1	3	46.5
505	azelaic acid	2266	188.22	1.6	2	4	74.6
506	p-cresol	2879	108.14	1.9	1	1	20.2
507	gentisic acid	3469	154.12	1.6	3	4	77.8
508	stearic acid	5281	284.5	7.4	1	2	37.3
509	estrone	5870	270.4	3.1	1	2	37.3
510	l-alanine	5950	89.09	-3	2	3	63.3
511	tubocurarine	6000	609.7	6	2	7	80.6
512	tyrosine	6057	181.19	-2.3	3	4	83.6
513	phlorizin	6072	436.4	1.2	7	10	177
514	deserpidine	8550	578.7	4.1	1	9	109
515	allyl mercaptan	13367	74.15	1.2	1	1	1
516	glutamic acid	23327	147.13	-3.7	3	5	101
517	delta-3-carene	26049	136.23	2.8	0	0	0
518	pentagalloyl glucose	65238	940.7	3.6	15	26	444
519	isoimperatorin	68081	270.28	3.8	0	4	48.7
520	hordenine	68313	165.23	2.1	1	2	23.5
521	hesperetin	72281	302.28	2.4	3	6	96.2
522	nobiletin	72344	402.4	3	0	8	81.7
523	warburganal	72502	250.33	2.8	1	3	54.4
524	marrubiin	73401	332.4	3.7	1	4	59.7
525	beta peltatin	92122	414.4	2.9	1	8	92.7
526	alpha peltatin	92129	400.4	2.6	2	8	104
527	corynanthine	92766	354.4	2.9	2	4	65.6
528	cularine	94150	341.4	3.3	0	5	40.2
529	thymohydroquinone	95779	166.22	2.9	2	2	40.5
530	canthin-6-one	97176	220.23	2.4	0	2	34.9
531	eupatorin	97214	344.3	2.9	2	7	94.4
532	santonin	221071	246.3	2.3	0	3	43.4
533	ruscogenin	441893	430.6	4.7	2	4	58.9
534	cannabidiol	644019	314.5	6.5	2	2	40.5

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
535	piceatannol	667639	244.24	2.9	4	4	80.9
536	jasmone	1549018	164.24	2.2	0	1	17.1
537	auraptene	1550607	298.4	5.3	0	3	35.5
538	caryophyllene oxide	1742210	220.35	3.6	0	1	12.5
539	fructose	2723872	180.16	-2.8	5	6	110
540	hirsutine	3037884	368.5	3.4	1	4	54.6
541	punicic acid	5281126	278.4	6.4	1	2	37.3
542	cucurbitacin B	5281316	558.7	2.6	3	8	138
543	chrysosplenetin	5281608	374.3	3.1	2	8	104
544	quercetagetin	5281680	318.23	1.2	6	8	148
545	acteoside	5281800	624.6	-0.5	9	15	245
546	arborinine	5281832	285.29	3.3	1	5	59
547	ubiquinone	5281915	863.3	19.4	0	4	52.6
548	dicafeoylquinic acid	5316647	516.4	1.5	7	12	211
549	glycyrrhisoflavone	5317764	354.4	4.2	4	6	107
550	dehydrocurdione	10421549	234.33	2.8	0	2	34.1
551	podophyllin	11979494	1693.6	0	8	34	433
552	glaucarubinone	12310232	494.5	0.1	4	10	160
553	rugosin D	16129626	1875.3	3.6	29	52	877
554	anisatin	44575426	328.31	-1.9	4	8	134
555	desoxypodophyllotoxin	71045228	398.4	3.1	0	7	72.4
556	harringtonine	101582408	531.6	0.5	2	10	124
557	ellagitannin	101601927	992.7	0.2	13	27	447
558	ailanthinone	118701210	478.5	1.1	3	9	140
559	ailanthone	129316867	376.4	-1.1	3	7	113
560	ficin	129630591	300.841	2	1	2	23.8
561	saikosaponin D	129637783	781	2.5	8	13	208
562	azadirachtin	131698851	720.7	-0.6	3	16	215
563	corynantheine	133613122	366.5	3.2	1	4	54.6
564	veratrine	134688019	591.7	0.6	6	10	160
565	amygdalin	134694146	457.4	-2.7	7	12	202
566	chebulagic acid	134694193	954.7	0.4	13	27	447
567	steviol	134715193	318.4	3.8	2	3	57.5
568	vincristine	134755071	825	2.8	3	12	171
569	inosine	135398641	268.23	-1.3	4	7	129
570	gelsemicine	137628514	358.4	1.9	1	5	60

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
571	garcinol	138111558	602.8	10.3	3	6	112
572	alginic acid	6850754	398.32	-3.7	6	13	202
573	tellimagrandin-i	442690	786.6	1.2	13	22	377
574	indole-3-acetic acid	802	175.18	1.4	2	2	53.1
575	succinic acid	1110	118.09	-0.6	2	4	74.6
576	5-methoxy-n,n-dimethyltryptamine	1832	218.29	1.5	1	2	28.3
577	harmalol	3565	200.24	1.7	2	2	48.4
578	lauric acid	3893	200.32	4.2	1	2	37.3
579	pimpinellin	4825	246.21	2.3	0	5	57.9
580	glucose	5793	180.16	-2.6	5	6	110
581	piperitone	6987	152.23	2.2	0	1	17.1
582	thiophene	8030	84.14	1.8	0	1	28.2
583	ergotamine	8223	581.7	2	3	6	118
584	linalyl acetate	8294	196.29	3.3	0	2	26.3
585	vincamine	15376	354.4	2.9	1	4	54.7
586	d-carvone	16724	150.22	2.4	0	1	17.1
587	alpha carotene	24090	536.9	13.6	0	0	0
588	chlorine	24526	70.9	1.6	0	0	0
589	swainsonine	51683	173.21	-1.3	3	4	63.9
590	(+)-galocatechin	65084	306.27	0	6	7	131
591	columbamine	72310	338.4	3.4	1	4	51.8
592	chaparrinone	73154	378.4	-0.4	3	7	113
593	verbenalin	73467	388.4	-1.5	4	10	152
594	licopyranocoumarin	122851	384.4	2.7	3	7	105
595	glutathione	124886	307.33	-4.5	6	8	160
596	cyanidin	128861	287.24	0	5	5	102
597	demecolcine	220401	371.4	1.4	1	6	66
598	noradrenalin	439260	169.18	-1.2	4	4	86.7
599	pelargonidin	440832	271.24	0	4	4	81.9
600	hyperforin	441298	536.8	9.6	1	4	71.4
601	neriifolin	441867	534.7	2.1	3	8	115
602	biflorin	441959	354.31	-0.7	6	9	157
603	cephaeline	442195	466.6	4.4	2	6	63.2
604	ergometrine	443884	325.4	1.8	3	3	68.4
605	fumaric acid	444972	116.07	-0.3	2	4	74.6
606	sorbic acid	643460	112.13	1.3	1	2	37.3

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
607	ricinoleic acid	643684	298.5	5.7	2	3	57.5
608	schisandrin	3001664	432.5	4	1	7	75.6
609	atractylon	3080635	216.32	4	0	1	13.1
610	glyceollin-i	4475100	338.4	2.5	2	5	68.2
611	luteolin-7-glucoside	5280637	448.4	0.5	7	11	186
612	gossypetin	5280647	318.23	1.8	6	8	148
613	chrysoeriol	5280666	300.26	1.7	3	6	96.2
614	fulvoplumierin	5281541	244.24	1.7	0	4	52.6
615	axillarin	5281603	346.3	2.5	4	8	126
616	hinokiflavone	5281627	538.5	4.4	5	10	163
617	hispidulin	5281628	300.26	1.7	3	6	96.2
618	scutellarein	5281697	286.24	1.4	4	6	107
619	ginkgoic acid	5281858	346.5	8.5	2	3	57.5
620	astragalin	5282102	448.4	0.7	7	11	186
621	ligustilide	5319022	190.24	2.7	0	2	26.3
622	artemetin	5320351	388.4	3.4	1	8	92.7
623	rhamnocitrin	5320946	300.26	2.2	3	6	96.2
624	thebaine	5324289	311.4	2.2	0	4	30.9
625	sinomenine	5459308	329.4	2.2	1	5	59
626	phenylalanine	5460957	166.2	-1.5	2	2	64.9
627	germacrone	6370431	218.33	3.5	0	1	17.1
628	tigloidine	6540490	223.31	2.5	0	3	29.5
629	securinine	6544480	217.26	1.1	0	3	29.5
630	isoborneol	6973640	154.25	2.7	1	1	20.2
631	agrimoniin	16129621	1871.3	4.2	29	52	877
632	sinigrin	23712637	397.5	0	4	11	203
633	hainanolide	25092280	310.3	0.3	0	4	52.6
634	avicularin	44144273	434.3	1	7	11	186
635	homatropine	73707487	275.34	1.9	1	4	49.8
636	histidine	86580368	156.16	-3.2	3	3	93.6
637	cinchonine	92131260	294.4	2.7	1	3	36.4
638	dihydrocorynantheine	101287817	368.5	3.4	1	4	54.6
639	alpha chaconine	129627776	852.1	1.8	8	15	221
640	diosgenin	132275123	414.6	5.7	1	3	38.7
641	saikosaponin A	133126366	781	2.5	8	13	208
642	stevioside	134129657	804.9	-1.2	11	18	295

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
643	cycloartenol	134688382	426.7	9.8	1	1	20.2
644	punicalin	134694222	782.5	-0.3	13	22	377
645	medicagenic acid	134820255	500.7	7.1	2	6	121
646	theaflavin	136453467	564.5	2.4	9	12	218
647	6-alpha-hydroxymedicarpin	44257485	286.28	1.5	2	5	68.2
648	anthraquinone	6780	208.21	3.4	0	2	34.1
649	cinerin I	5281547	316.4	5	0	3	43.4
650	cinerin II	5281548	360.4	4	0	5	69.7
651	cinerin D	45273291	402.4	2	1	7	83.4
652	n-amyl-alcohol	6276	88.15	1.6	1	1	20.2
653	polygonin	5281675	448.4	-0.2	8	11	197
654	valtrate	442436	422.5	1.8	0	8	101
655	Acevaltratum	65717	480.5	0.9	0	10	127
656	Didrovaltrate	65689	424.5	2.3	0	8	101
657	acetaldehyde	177	44.05	-0.3	0	1	17.1
658	anthranilic acid	227	137.14	1.2	2	3	63.3
659	butyric acid	264	88.11	0.8	1	2	37.3
660	o-cresol	335	108.14	2	1	1	20.2
661	tartaric acid	875	150.09	-1.9	4	6	115
662	propionic acid	1032	74.08	0.3	1	2	37.3
663	taurine	1123	125.15	-4.1	2	4	88.8
664	guaiazulene	3515	198.3	4.8	0	0	0
665	guanidine	3520	59.07	-1.3	3	1	75.9
666	mimosine	3862	198.18	-3.5	3	6	104
667	estriol	5756	288.4	2.5	3	3	60.7
668	phenethyl alcohol	6054	122.16	1.4	1	1	20.2
669	strophanthidin	6185	404.5	0.6	3	6	104
670	eugenyl acetate	7136	206.24	2.3	0	3	35.5
671	furfural	7362	96.08	0.4	0	2	30.2
672	acetophenone	7410	120.15	1.6	0	1	17.1
673	anisic acid	7478	152.15	2	1	3	46.5
674	heliotropine	8438	150.13	1.1	0	3	35.5
675	narceine	8564	445.5	0.5	1	9	104
676	ethyl acetate	8857	88.11	0.7	0	2	26.3
677	corydine	10153	341.4	2.6	1	5	51.2
678	dillapiol	10231	222.24	2.7	0	4	36.9

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
679	syringic acid	10742	198.17	1	2	5	76
680	myristic acid	11005	228.37	5.3	1	2	37.3
681	fenchone	14525	152.23	2.3	0	1	17.1
682	1-monolaurin	14871	274.4	4.2	2	4	66.8
683	andromedotoxin	20842	412.5	0.8	5	7	127
684	iron	23925	55.84	0	0	0	0
685	digiferrugineol	32209	254.24	2.6	2	4	74.6
686	eseridine	65719	291.35	0.8	1	5	54
687	thymyl acetate	68252	192.25	3	0	2	26.3
688	sesamol	68289	138.12	1.2	1	3	38.7
689	octacosanol	68406	410.8	13.8	1	1	20.2
690	epigallocatechin	72277	306.27	0	6	7	131
691	polygodial	72503	234.33	3.2	0	2	34.1
692	maslinic acid	73659	472.7	6.5	3	4	77.8
693	1-monomyrustin	79050	302.4	5.2	2	4	66.8
694	allixin	86374	226.27	2.8	1	4	55.8
695	umbellulone	91195	150.22	1.6	0	1	17.1
696	lupinine	91461	169.26	1.2	1	2	23.5
697	zingiberene	92776	204.35	5.2	0	0	0
698	uvaol	92802	442.7	7.4	2	2	40.5
699	deguelin	107935	394.4	3.7	0	6	63.2
700	rishitin	108064	222.32	1.9	2	2	40.5
701	stachydrine	115244	143.18	1	0	2	40.1
702	cynaropicrin	119093	346.4	0.6	2	6	93.1
703	aspidin	120290	460.5	4.1	4	8	141
704	malvidin	159287	331.3	0	4	6	100
705	coclaurine	160487	285.34	2.6	3	4	61.7
706	nevadensin	160921	344.3	2.9	2	7	94.4
707	tracheloside	169511	550.6	1	5	12	174
708	glyceollin-ii	181883	338.4	2.5	2	5	68.2
709	parillin	197977	1049.2	0.1	12	22	335
710	anabasine	205586	162.23	1	1	2	24.9
711	aspidospermine	227613	354.5	3.4v0	3	32.8	
712	alpha thujone	261491	152.23	2.3	0	1	17.1
713	ouabain	439501	584.7	-1.7	8	12	207
714	l-carvone	439570	150.22	2.4	0	1	17.1

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
715	digitoxin	441207	764.9	2.3	5	13	183
716	glaucarubolone	441797	394.4	-0.9	4	8	134
717	brucine	442021	394.5	1	0	5	51.2
718	genipin	442424	226.23	-0.7	2	5	76
719	haematoxylin	442514	302.28	1.2	5	6	110
720	glabrol	480768	392.5	6	2	4	66.8
721	isoxanthohumol	513197	354.4	4.1	2	5	76
722	hayatine	626931	594.7	6	2	8	83.9
723	o-methoxycinnamaldehyde	641298	162.18	1.7	0	2	26.3
724	oxypeucedanin	928465	286.28	2.6	0	5	61.2
725	coniferyl alcohol	1549095	180.2	1.4	2	3	49.7
726	mitragynine	3034396	398.5	3.4	1	5	63.8
727	cassaidine	5281266	407.6	3.4	2	5	70
728	cucurbitacin E	5281319	556.7	3.2	3	8	138
729	cucurbitacin-i	5281321	514.6	2.7	4	7	132
730	harpagoside	5281542	494.5	-0.6	6	11	175
731	salvianolic-acid-a	5281793	494.4	3.9	7	10	185
732	casticin	5315263	374.3	3.1	2	8	104
733	cinnamyl alcohol	5315892	134.17	1.9	1	1	20.2
734	isoliquiritin	5318591	418.4	1.7	6	9	157
735	toralactone	5321980	272.25	3.3	2	5	76
736	caryophyllene epoxide	6604672	220.35	3.6	0	1	12.5
737	pinostrobin	6950539	270.28	3.1	1	4	55.8
738	narcotine	9933439	449.9	0	1	8	75.7
739	beta bisabolene	10104370	204.35	5.2	0	0	0
740	cinchonidine	12032282	294.4	2.7	1	3	36.4
741	barbaloin	12305761	418.4	-0.1	7	9	168
742	beta sitosterol-d-glucoside	12309060	576.8	7.7	4	6	99.4
743	cymarín	17750997	548.7	0.8	3	9	132
744	arabinogalactan	24847856	500.5	-4.2	7	14	206
745	gardenoside	44202881	404.4	-2.8	6	11	175
746	annonacin	44575507	596.9	8.4	4	7	116
747	nimbinin	49863985	466.6	4.2	0	6	86.1
748	delsoline	76323993	467.6	-0.6	3	8	101
749	quercimeritrin	91820114	463.4	1	7	12	209
750	asarinin	102004873	354.4	2.7	0	6	55.4

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
751	dendrobine	118701398	263.37	3	0	3	29.5
752	picrotoxin	124080966	602.6	0	3	13	191
753	neohesperidin	129627747	610.6	-0.5	8	15	234
754	alpha hederin	129629004	751	3.6	7	12	196
755	curdione	131675179	236.35	2.7	0	2	34.1
756	ginsenoside-rc	132399057	1079.3	0.9	14	22	357
757	amarogentin	132477941	586.5	2.4	6	13	202
758	lactucin	133568471	276.28	-0.7	2	5	83.8
759	harpagide	133612270	364.34	-3.3	7	10	169
760	tomatine	133612499	1034.2	-0.7	13	22	338
761	dioscin	134612776	869	1.3	8	16	236
762	gelsemine	137628468	322.4	1.8	1	3	41.6
763	akuammine	138108671	382.5	1.5	1	6	62.2
764	grandifloric acid	138113901	318.4	3.9	2	3	57.5
765	chebulinic acid	138857791	956.7	0.7	13	27	447
766	1'-acetoxychavicol acetate	119104	234.25	2.2	0	4	52.6
767	acalyphine	49787014	360.32	-2.9	5	10	173
768	alpha amyrin palmitate	131752026	665.1	16.9	0	2	26.3
769	betanin	12300103	550.5	-0.9	8	14	249
770	dehydrofalcarindiol	5469786	258.35	3.9	2	2	40.5
771	gymnemic acid I	11953919	807	3.9	7	14	230
772	gymnemic acid II	91617872	809	4.1	7	14	230
773	gymnemic acid III	14264066	767	4	8	13	224
774	gymnemic acid IV	14264063	764.9	3.8	8	13	224
775	ingenol-3,20-dibenzoate	442043	556.6	4.1	2	7	110
776	kaempferol-7-o-rhamnoside	25079965	432.4	0.6	6	10	166
777	s-allyl-cysteine-sulfoxide	121922	177.22	-3.5	2	5	99.6
778	sanguin-h-6	16181831	1871.3	4.2	29	52	877
779	starch	24836924	692.7	-7.5	11	20	306
780	alpha terpinyl acetate	111037	196.29	2.4	0	2	26.3
781	beta terpinyl acetate	88693	196.29	3.1	0	2	26.3
782	gamma terpinyl acetate	82480	196.29	2.7	0	2	26.3
783	4-beta-hydroxywithanolide	476483	430.7	7.8	1	3	46.5
784	caprylic acid	379	144.21	3	1	2	37.3
785	chrysazin	2950	240.21	3.2	2	4	74.6
786	hydrastinine	3638	207.23	1.1	1	4	41.9

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
787	beta lapachone	3885	242.27	2.2	0	3	43.4
788	nitidine	4501	348.4	4.6	0	4	40.8
789	glutamine	5961	146.14	-3.1	3	4	106
790	dimethyltryptamine	6089	188.27	2.5	1	1	19
791	hexanal	6184	100.16	1.8	0	1	17.1
792	gramine	6890	174.24	1.8	1	1	19
793	salicylaldehyde	6998	122.12	1.8	1	2	37.3
794	diphenyl	7095	154.21	4	0	0	0
795	synephrine	7172	167.2	-0.6	3	3	52.5
796	neryl acetate	7780	196.29	3.5	0	2	26.3
797	citrulline	9750	175.19	-4.3	4	4	118
798	beta erythroidine	10074	273.33	-0.2	0	4	38.8
799	(+)-isocorydine	10143	341.4	2.6	1	5	51.2
800	visnadin	10157	388.4	3.4	0	7	88.1
801	byakangelicin	10211	334.3	1.6	2	7	98.4
802	capillin	10321	168.19	3	0	1	17.1
803	isovaleric acid	10430	102.13	1.2	1	2	37.3
804	diaboline	10513	352.4	0.7	1	4	53
805	physcion	10639	284.26	3	2	5	83.8
806	ethyl gallate	13250	198.17	1.3	3	5	87
807	benzyl thiocyanate	18170	149.21	2	0	2	49.1
808	sabinene	18818	136.23	3.1	0	0	0
809	n-nonanal	31289	142.24	3.3	0	1	17.1
810	myrtenal	61130	150.22	2.1	0	1	17.1
811	scilliroside	62354	620.7	-0.4	6	12	192
812	xanthotoxol	65090	202.16	1.6	1	4	59.7
813	solanidine	65727	397.6	6.1	1	2	23.5
814	2,6-dimethoxybenzoquinone	68262	168.15	-0.1	0	4	52.6
815	fustin	72282	288.25	1.3	4	6	107
816	tubulosine	72341	475.6	4.6	3	5	69.8
817	rubrofusarin	72537	272.25	3	2	5	76
818	arjunolic acid	73641	488.7	5.8	4	5	98
819	diallyl tetrasulfide	75552	210.4	3.1	0	4	101
820	beta thujone	91456	152.23	2.3	0	1	17.1
821	phaseolin	91572	322.4	3.6	1	4	47.9
822	ambrosin	92119	246.3	2.6	0	3	43.4

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
823	isoboldine	98369	327.4	2.2	2	5	62.2
824	allocryptopine	98570	369.4	2.9	0	6	57.2
825	corydaline	101301	369.5	3.6	0	5	40.2
826	higenamine	114840	271.31	2.2	4	4	72.7
827	cnidilide	160710	194.27	3.2	0	2	26.3
828	pinitol	164619	194.18	-3.2	5	6	110
829	androsin	164648	328.31	-1.4	4	8	126
830	cinchophyllamine	165871	496.6	4.9	3	4	65.3
831	8-gingerol	168114	322.4	4.2	2	4	66.8
832	limonin	179651	470.5	1.8	0	8	105
833	santamarin	188297	248.32	2	1	3	46.5
834	alchorneine	217611	221.3	1.5	0	2	28.1
835	coronopilin	257278	264.32	1.3	1	4	63.6
836	menthofuran	329983	150.22	3	0	1	13.1
837	gentianidine	362908	163.17	1.1	0	3	39.2
838	cyanin	441688	611.5	0	11	15	260
839	phorbol	442070	364.4	-0.8	5	6	118
840	bakkenolide A	442173	234.33	3.5	0	2	26.3
841	canin	442175	278.3	0.2	1	5	71.6
842	8-deoxylactucin	442196	260.28	0.3	1	4	63.6
843	eugeniin	442679	938.7	2.4	15	26	444
844	agrimophol	442901	474.5	4.6	4	8	141
845	ergosterol	444679	396.6	7.4	1	1	20.2
846	glabrene	480774	322.4	3.6	2	4	58.9
847	ajugarin-i	481707	446.6	3.7	1	6	85.4
848	methyl cinnamate	637520	162.18	2.6	0	2	26.3
849	p-methoxy cinnamic acid	699414	178.18	1.8	1	3	46.5
850	geranyl acetate	1549026	196.29	3.5	0	2	26.3
851	digoxin	2724385	780.9	1.3	6	14	203
852	alstonine	3324650	349.4	3.1	1	3	55.2
853	pisatin	4484953	314.29	1.7	1	6	66.4
854	annomontine	5257090	261.28	1.9	2	4	80.5
855	5,6-dehydrokawain	5273621	228.24	2.8	0	3	35.5
856	pinosylvin	5280457	212.24	3.5	2	2	40.5
857	coniferyl aldehyde	5280536	178.18	1.5	1	3	46.5
858	daphnetin	5280569	178.14	1.2	2	4	66.8

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
859	zeaxanthin	5280899	568.9	10.9	2	2	40.5
860	kaempferide	5281666	300.26	2.2	3	6	96.2
861	tectorigenin	5281811	300.26	2.6	3	6	96.2
862	bilobol	5281852	318.5	8.1	2	2	40.5
863	alpha ionone	5282108	192.3	3	0	1	17.1
864	erysovine	5317203	299.4	1.8	1	4	41.9
865	glycitein	5317750	284.26	2.4	2	5	76
866	glycycomarin	5317756	368.4	4.4	3	6	96.2
867	isofraxidin	5318565	222.19	1.5	1	5	65
868	isopetasin	5318627	316.4	4.5	0	3	43.4
869	en-yn-dicycloether	5352496	200.23	2.5	0	2	18.5
870	aluminum	5359268	26.981538	0	0	0	0
871	corylifolin	5470819	188.26	4.2	1	1	20.2
872	saponins	6540709	1131.3	0.7	13	24	388
873	beta elemene	6918391	204.35	6.1	0	0	0
874	verbenone	6973628	150.22	1.6	0	1	17.1
875	ornithine	6992088	133.17	-3.8	2	2	95.4
876	sclareol	7060889	308.5	4.9	2	2	40.5
877	24-methylene cycloartanol	9547213	440.7	10.3	1	1	20.2
878	cycasin	9572792	252.22	-2.6	4	8	141
879	neoandrographolide	9848024	480.6	2.6	4	8	126
880	dehydroabietic acid	10017708	300.4	5.6	1	2	37.3
881	feruloylhistamine	10401784	287.31	1.4	3	4	87.2
882	acetyl beta boswellic acid	11386458	498.7	8.3	1	4	63.6
883	cassamine	12302503	433.6	3.5	0	6	72.9
884	erysothiovine	12308894	421.5	-1	1	8	111
885	nepetalactone	12311117	166.22	1.9	0	2	26.3
886	sabinol	12315159	152.23	1.8	1	1	20.2
887	scillarenin	12315393	384.5	2.9	2	4	66.8
888	beta sesquiphellandrene	12315492	204.35	5.4	0	0	0
889	rosmanol	13966122	346.4	3.4	3	5	87
890	tuberosin	14630495	338.4	2.5	2	5	68.2
891	dihydrovaltrate	15558731	424.5	2.3	0	8	101
892	erysopine	21679844	285.34	1.5	2	4	52.9
893	kurarinone	26209049	438.5	5.6	3	6	96.2
894	nimbolide	44631202	466.5	2.2	0	7	92

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
895	coixenolide	46173943	591	14.7	0	4	52.6
896	cassaine	54603654	503.7	0	3	9	150
897	phylloquinone	71310504	457.7	10.9	0	2	34.1
898	erythroplamine	72941436	449.6	2.7	1	7	93.1
899	alisol-a-monoacetate	74344393	532.8	4.4	3	6	104
900	inokosterone	91900472	480.6	0.6	6	7	138
901	pretazettine	118701056	331.4	1.3	1	6	60.4
902	casuarictin	118701062	936.6	2.1	15	26	444
903	haemanthamine	118701185	301.34	1.3	1	5	51.2
904	jesaconitine	118701203	675.8	0.2	3	13	163
905	cyasterone	122130059	520.7	1	5	8	145
906	prunin	124300887	434.4	0.6	6	10	166
907	daucosterol	129316834	576.8	7.7	4	6	99.4
908	oxymatrine	129316835	264.36	1	0	2	38.4
909	catalposide	129317142	482.4	-1.3	6	12	188
910	picrotoxinin	131673970	292.28	0.5	1	6	85.4
911	aconine	131674266	499.6	-2.5	5	10	141
912	erysothiopine	131750988	407.4	-1.3	2	8	122
913	quassin	133565271	388.5	2.4	0	6	78.9
914	voacangine	134688048	368.5	3.5	1	4	54.6
915	eudesmin	137795855	386.4	2.9	0	6	55.4
916	withanolide D	138115301	470.6	3.1	2	6	96.4
917	ginsenoside-re	138454119	947.2	1.6	12	18	298
918	perivine	138454120	338.4	1.9	2	4	71.2
919	1,2,6-tri-o-galloyl-beta-d-glucos	124024	636.5	0.1	11	18	311
920	12-alpha hydroxyrotenone	68184	410.4	3.3	1	7	83.4
921	2-phenylethyl isothiocyanate	16741	163.24	3.5	0	2	44.4
922	4-vinyl guaiacol	332	150.17	2.4	1	2	29.5
923	beta amyrin acetate	92156	468.8	9.7	0	2	26.3
924	alpha cadinen	12306048	204.35	4.1	0	0	0
925	beta cadinen	10657	204.35	4	0	0	0
926	gamma cadinen	6432404	204.35	4.3	0	0	0
927	ginsenoside-r-o	11815492	957.1	2.7	11	19	312
928	lupulin A	10841022	582.7	2.9	1	11	139
929	lupulin B	44566823	566.7	3.8	0	10	119
930	lupulin D	14431882	466.6	3	0	8	92.8

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
931	procyanidin-b-4	147299	578.5	2.4	10	12	221
932	soyasaponin I	122097	943.1	2.4	11	18	295
933	soyasaponin Aa	71307461	1365.5	-0.6	14	31	472
934	soyasaponin Ab	102004833	1437.5	-0.7	14	33	498
935	soyasaponin Ba	91973815	959.1	1.9	12	19	315
936	soyasaponin A3	188847	959.1	1.2	12	19	315
937	soyasaponin IV	24721354	767	3.5	8	13	216
938	soyasaponin A1	157242	1269.4	-2.4	18	29	474
939	soyasaponin Ac	101603693	1421.5	-0.2	13	32	478
940	alpha turmerone	14632996	218.33	3.8	0	1	17.1
941	beta turmerone	196216	218.33	4	0	1	17.1
942	cinnamtannin-b-1	475277	864.8	3.3	14	18	320
943	p-hydroxybenzaldehyde	126	122.12	1.4	1	2	37.3
944	glycolic acid	757	76.05	-1.1	2	3	57.5
945	phenylethylamine	1001	121.18	1.4	1	1	26
946	phosphoric acid	1004	97.995	-2.1	3	4	77.8
947	tryptamine	1150	160.22	1.6	2	1	41.8
948	mandelic acid	1292	152.15	0.6	2	3	57.5
949	thymidine	5789	242.23	-1.2	3	5	99.1
950	lactose	6134	342.3	-4.7	8	11	190
951	threonine	6288	119.12	-2.9	3	4	83.6
952	methyl benzoate	7150	136.15	2.1	0	2	26.3
953	anisole	7519	108.14	2.1	0	1	9.2
954	isopropyl acetate	7915	102.13	0.9	0	2	26.3
955	2-undecanone	8163	170.29	4.1	0	1	17.1
956	desaspidin	8238	446.5	3.8	4	8	141
957	ethyl salicylate	8365	166.17	3	1	3	46.5
958	syringaldehyde	8655	182.17	0	1	4	55.8
959	chymopapain	9002	270.2	-0.7	4	8	166
960	(+)-coniine	9985	127.23	2	1	1	12
961	lucidin	10163	270.24	2.4	3	5	94.8
962	coixol	10772	165.15	1.1	1	3	47.6
963	carnitine	10917	161.2	-0.2	1	3	60.4
964	galegine	10983	127.19	0.3	2	1	64.4
965	ethyl vanillate	12038	196.2	2.1	1	4	55.8
966	dipropyl disulfide	12377	150.3	2.7	0	2	50.6

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
967	sterculic acid	12921	294.5	5.8	1	2	37.3
968	adenosine triphosphate	13803	551.14	0	5	17	285
969	damsin	14631	248.32	2.5	0	3	43.4
970	laudanoline	15548	357.4	3.7	0	5	40.2
971	asparagusic acid	16682	150.2	0.2	1	4	87.9
972	candicine	23135	180.27	2.1	1	1	20.2
973	rutamarin	26948	356.4	4.4	0	5	61.8
974	silybin	31553	482.4	2.4	5	10	155
975	calcium oxalate	33005	128.1	0	0	4	80.3
976	isopulegone	34645	152.23	2.8	0	1	17.1
977	xanthoxylin	66654	196.2	1.7	1	4	55.8
978	actinidine	68231	147.22	2.4	0	1	12.9
979	perillaketone	68381	166.22	2.8	0	2	30.2
980	alloimperatorin	69502	270.28	3.9	1	4	59.7
981	dracorhodin	69509	266.29	2.7	0	3	35.5
982	plumieride	72319	470.4	-1.2	5	12	181
983	dehydrocostus lactone	73174	230.3	2.6	0	2	26.3
984	uvaretin	73447	378.4	4.9	3	5	87
985	sakuranetin	73571	286.28	2.7	2	5	76
986	cardol	76617	320.5	9	2	2	40.5
987	phenylheptatriyne	77981	164.2	3.5	0	0	0
988	diosphenol	79023	168.23	2	1	2	37.3
989	loganin	87691	390.4	-1.4	5	10	155
990	gentiopicrin	88708	356.32	-1.2	4	9	135
991	butin	92775	272.25	1.8	3	5	87
992	vulgarin	94253	264.32	1.2	1	4	63.6
993	glucuronic acid	94715	194.14	-2.3	5	7	127
994	obaberine	100231	622.7	6.7	0	8	61.9
995	malabaricone C	100313	358.4	5.7	4	5	98
996	arctiin	100528	534.6	1.8	4	11	153
997	eremanthin	100572	230.3	2.6	0	2	26.3
998	rapanone	100659	322.4	6.5	2	4	74.6
999	chimaphilin	101211	186.21	2.6	0	2	34.1
1000	dicentrine	101300	339.4	3.2	0	5	40.2
1001	fagarine	107936	229.23	2.9	0	4	44.5
1002	supinine	108053	283.36	0.5	2	5	70

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
1003	isoorientin	114776	448.4	-0.2	8	11	197
1004	tephrosin	114909	410.4	3	1	7	83.4
1005	tanshinone-i	114917	276.3	3.7	0	3	47.3
1006	ponasterone A	115127	464.6	1.9	5	6	118
1007	matairesinol	119205	358.4	3.3	2	6	85.2
1008	divaricoside	120704	534.7	1.9	3	8	115
1009	glabranin	124049	324.4	4.7	2	4	66.8
1010	skullcapflavone-ii	124211	374.3	2.9	2	8	104
1011	2-vinyl-4h-1,3-dithiin	133337	144.3	2.3	0	2	50.6
1012	sideritoflavone	155493	360.3	2.6	3	8	115
1013	hypaphorine	160488	246.3	2.9	1	2	55.9
1014	isoreserpiline	161345	412.5	2.7	1	6	73
1015	hardwickic acid	161454	316.4	5.6	1	3	50.4
1016	leonurine	161464	311.33	0.5	3	6	129
1017	isovitexin	162350	432.4	0.2	7	10	177
1018	malabaricone B	163001	342.4	6	3	4	77.8
1019	biotin	171548	244.31	0.3	3	4	104
1020	lactucopicrin	174880	410.4	1.1	2	7	110
1021	cyanidin-3-o-galactoside	176457	484.8	0	8	11	181
1022	vestitol	177149	272.29	2.9	2	4	58.9
1023	nantenine	197001	339.4	3.2	0	5	40.2
1024	flicin	197044	668.7	4.9	7	12	227
1025	neoabietic acid	221118	302.5	5.1	1	2	37.3
1026	proscillaridin A	222154	530.6	1.9	4	8	126
1027	aricine	251575	382.5	2.7	1	5	63.8
1028	curine	253793	594.7	6	2	8	83.9
1029	dehydroglaucine	398788	353.4	4.5	0	5	40.2
1030	nigellone	398941	328.4	2.1	0	4	68.3
1031	dracorubin	435559	488.5	5.3	0	5	54
1032	obamegine	441064	594.7	5.7	2	8	83.9
1033	parasorbic acid	441575	112.13	1.1	0	2	26.3
1034	glaucarubin	441794	496.5	-0.2	5	10	163
1035	divostroside	441857	534.7	1.9	3	8	115
1036	ginsenoside-rf	441922	801	2.7	10	14	239
1037	ferruginol	442027	286.5	6.7	1	1	20.2
1038	artecanin	442147	278.3	0.2	1	5	71.6

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
1039	armepavine	442169	313.4	3.4	1	4	41.9
1040	swertiamarin	442435	374.34	-2	5	10	155
1041	cleomiscosin A	442510	386.4	2.1	2	8	104
1042	vasicine	442929	188.23	0.4	1	2	35.8
1043	(+)-syringaresinol	443023	418.4	2.2	2	8	95.8
1044	licocoumarone	503731	340.4	4.8	3	5	83.1
1045	o-coumaric acid	637540	164.16	1.5	2	3	57.5
1046	xanthohumol	639665	354.4	5.1	3	5	87
1047	isoferulic acid	736186	194.18	1.5	2	4	66.8
1048	d-borneol	1201518	154.25	2.7	1	1	20.2
1049	hexenal	5281168	98.14	1.5	0	1	17.1
1050	butein	5281222	272.25	2.8	4	5	98
1051	crocin	5281233	977	-2.5	14	24	391
1052	capillarisin	5281342	316.26	2.7	3	7	105
1053	5,7-dihydroxychromone	5281343	178.14	1.4	2	4	66.8
1054	zearalenone	5281576	318.4	3.6	2	5	83.8
1055	6-deoxyjacareubin	5281629	310.3	3.7	2	5	76
1056	mangostin	5281650	410.5	6.3	3	6	96.2
1057	seneciophylline	5281750	333.4	0.7	1	6	76.1
1058	irilone	5281779	298.25	2.8	2	6	85.2
1059	licoisoflavone A	5281789	354.4	4.2	4	6	107
1060	luteone	5281797	354.4	4.2	4	6	107
1061	cis hinokiresinol	5281830	252.31	4.4	2	2	40.5
1062	nepetin	5317284	316.26	1.4	4	7	116
1063	annonin-vi	5319146	622.9	9.7	3	7	105
1064	magnocurarine	5319197	314.4	3.1	2	3	49.7
1065	oroxylin A	5320315	284.26	2.1	2	5	76
1066	penduletin	5320462	344.3	3.1	2	7	94.4
1067	spiraeoside	5320844	464.4	0.4	8	12	207
1068	atractylodin	5321047	182.22	3.5	0	1	13.1
1069	tin	5352426	118.71	0	0	0	0
1070	warangalone	5379679	404.5	5.9	2	5	76
1071	lysine	5460926	147.2	-2.4	2	2	95.4
1072	silicon	5461123	28.085	0	0	0	0
1073	phosphorus	5462309	30.973762	0	0	0	0
1074	boron	5462311	10.81	0	0	0	0

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
1075	irigenin	5464170	360.3	2.6	3	8	115
1076	selagine	5912039	242.32	0	2	2	55.1
1077	columbianadin	6436246	328.4	3.7	0	5	61.8
1078	valerenic acid	6440940	234.33	3.2	1	2	37.3
1079	alpha cyperone	6452086	218.33	3.8	0	1	17.1
1080	caulophylline	6545858	204.27	0.7	0	2	23.6
1081	ginkgolide C	9867869	440.4	-1.4	4	11	169
1082	cerberin	10031063	576.7	2.7	2	9	121
1083	chikusetsusaponin-iv	10079497	927.1	2.8	10	18	292
1084	isopinocampnone	10329459	152.23	2.3	0	1	17.1
1085	grosshemin	10422811	262.3	0.8	1	4	63.6
1086	limonene oxide	10953718	152.23	2.5	0	1	12.5
1087	patchouli alcohol	10955174	222.37	4.1	1	1	20.2
1088	isothymonin	11726019	360.3	2.6	3	8	115
1089	beta-sitosterol-beta-d-glucoside	12309055	576.8	7.7	4	6	99.4
1090	isochlorogenic acid	12310829	354.31	-0.4	6	9	165
1091	pinocampnone	12311188	152.23	2.3	0	1	17.1
1092	epsilon viniferin	13887317	454.5	5.4	5	6	110
1093	benzyl cinnamate	15558051	238.28	3.8	0	2	26.3
1094	spilanthol	15558482	221.34	3.6	1	1	29.1
1095	quercetin-3-rhamnoglucoside	23696393	730.6	0	11	20	351
1096	liriodendrin	44202792	742.7	-1.4	8	18	254
1097	apiin	46882564	564.5	-0.4	8	14	225
1098	pogostone	54695756	224.25	2.6	1	4	63.6
1099	galanolactone	56993665	318.4	4.6	0	3	38.8
1100	pterygospermin	72201063	406.5	4.7	0	4	89.1
1101	orientin	90658326	447.4	0.5	7	11	200
1102	casuarinin	101601178	936.6	1.2	16	26	455
1103	consolidine	101712484	467.6	-0.6	3	8	101
1104	franguloline	101921947	534.7	5.2	3	5	99.8
1105	ecdysterone	118701161	480.6	0.5	6	7	138
1106	bullatacinone	118701179	622.9	9.4	2	7	102
1107	napelline	118701206	359.5	1.2	3	4	63.9
1108	convallamaroside	118701243	1211.3	-1.9	16	27	425
1109	demissine	118701441	1018.2	0	12	21	320
1110	salannin	118701505	596.7	3.9	0	9	111

次ページに続く

前ページからの続き

No.	Name	Pubchem CID	MW	LogP	水素結合 供与体数	水素結合 受容体数	tPSA
1111	arctiopicrin	118701526	350.4	1	2	6	93.1
1112	plumericine	118701583	290.27	0.8	0	6	71.1
1113	bebeerine	124541565	594.7	6	2	8	83.9
1114	liensinine	126422568	610.7	6.4	2	8	83.9
1115	20-hydroxyecdysone	129316840	480.6	0.5	6	7	138
1116	oleandrin	129317182	576.7	2.4	2	9	121
1117	enmein	133562397	362.4	1.8	2	6	93.1
1118	cosmosiin	133564578	432.4	-0.1	6	10	166
1119	cucurbitacin D	133564773	516.7	2.1	4	7	132
1120	gedunin	134692703	482.6	4.2	0	7	95.3
1121	hypaconitine	134715566	615.7	0.9	2	11	133
1122	neoruscogenin	134823825	428.6	4.1	2	4	58.9
1123	digitonin	137349669	1229.3	-3.9	17	29	455
1124	yuanhuacine	138985243	648.7	4.8	3	10	144

次ページに続く

付録. 2 物理化学的性質の標準化データ

表 2 物理化学的性質の標準化したデータの一部

ID	LogP	Hydrogen Bond Donor Count	Hydrogen Bond Acceptor Count	Topological Polar Surface Area	Molecular Weight
1	-0.24338	0.63134	0.17615	0.32787	-0.19579
2	0.3534	-0.1909	0.0152	-0.0068	0.0768
3	0.494	-0.739	-0.307	-0.523	-0.055
4	0.1077	-0.465	-0.1458	-0.3236	0.0109
5	-1.331591	0.357245	0.01518	0.130451	-0.71522
6	-0.3487	0.0832	-0.3068	-0.1578	-0.6986
7	-0.17318	0.08315	-0.14579	-0.06697	-0.32755

付録. 3 python コード

本研究で使用した Python のコードを使用した

Structure Data Format から Fingerprint への変換

```
import openbabel
import pybel
import os
import pandas as pd
x = os.listdir("C:/Users/Owner/Desktop/pubchemsdf1")
s = pd.DataFrame(list(it.combinations(x,2)))
os.chdir("C:/Users/Owner/Desktop")
s.to_csv('1124chems.csv') #組合せノードのみ csv で書き出し
x = os.listdir("C:/Users/Owner/Desktop")
fps = "1124chems.csv"
os.chdir("C:/Users/Owner/Desktop")
fps = pd.read_csv(fps)
fps = fps.iloc[:,1:3]
a = np.zeros(len(fps))
a[:] = np.nan
a = pd.DataFrame(a)
fps = pd.concat([fps,a],axis=1)
```

Tanimoto 係数算出

```
os.chdir("C:/Users/Owner/Desktop/pubchemsdf1")
for i in list(range(0,len(fps))):
    y1 =fps.iloc[i,0]
    y2 =fps.iloc[i,1]

    mol1 = pybel.readfile("sdf",y1).next() ##P79
    mol2 = pybel.readfile("sdf",y2).next()
    I = mol1.write("sdf")
    J = mol2.write("sdf")

    fp1 = mol1.calcfp()
    fp2 = mol2.calcfp()
```

```

    tanimoto = fp1 | fp2
    print(i)
    print tanimoto

    fps.iloc[i,2] = tanimoto
    print tanimoto

fps
os.chdir("C:/Users/Owner/Desktop")
fps.to_csv('1124tanimoto.csv')

```

付録. 4 R コード

本研究で使⽤した R のコードを記した。

内積の算出

```

setwd("C:/Users/Owner/Desktop")
dir()
getwd()
city=read.csv("1124chemicals 物理化学的性質")
city2=as.data.frame(matrix(NA,nrow(city),ncol(city)))
colnames(city2)=paste0(colnames(city),2)
colnames(city2)=colnames(city)

for(j in 1:ncol(city)){
  for(i in 1:nrow(city)){
    city2[i,j]=city[i,j]/sqrt(var(city[,j],na.rm=T))
  }
  print(j)
}

write.csv(result,"350chemc 物理化学的性質.csv",row.names=F)
A=combn(ncol(city2),2)
A
result=as.data.frame(matrix(NA,ncol(A),3))
for(i in 1:nrow(result)){
  result[i,1]=colnames(city2)[A[1,i]]
  result[i,2]=colnames(city2)[A[2,i]]
  result[i,3]=sum( (city2[, colnames(city2)[A[1,i]] ]*city2[, colnames(city2)
[A[2,i]] ])/nrow(city2))

```

```
    print(i)
}
setwd("C:/Users/Owner/Desktop")
write.csv(result,"350chemc 物理化学的性質組合せ.csv",row.names=F)
```