

**Universidad Nacional del Altiplano**  
**Facultad de Ingeniería Estadística e Informática**  
**Docente:** Fred Torres Cruz  
**Autor:** Gallegos Lizárraga Rudy Alex

**Trabajo Encargado - N° 006**

## MODELO LogP

### DEFINICION

El modelo LogP, también conocido como partición logarítmica de probabilidades, es una técnica utilizada para estimar la distribución de probabilidades de compuestos químicos. Se basa en la idea de que la probabilidad de que una molécula tenga ciertas propiedades físicas o químicas está relacionada con la suma de los valores de fragmentos moleculares.

### EJERCICIOS:

Ejercicio 1:

Calcular el LogP del metanol ( $\text{CH}_3\text{OH}$ ) utilizando los siguientes fragmentos y sus valores LogP:

$\text{CH}_3$ : -0.8

$\text{OH}$ : -0.3

SOLUCION:

El metanol está compuesto por 1 grupo  $\text{CH}_3$  y 1 grupo  $\text{OH}$ .

$$\text{LogP} = (-0.8) + (-0.3) = -1.1$$

Ejercicio 2:

Predecir si el etanol ( $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ ) será soluble en agua o en aceite, basándose en su valor LogP.

Solución:

se utiliza una regla general:

Compuestos con LogP  $\leq 0$ : Solubles en aceite Compuestos con LogP  $\leq 0$ : Solubles en agua

El etanol tiene un LogP de -0.32, lo que indica que es soluble en agua.

Ejercicio 3:

Identificar el compuesto con mayor afinidad por proteínas entre los siguientes:

A:  $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}$  (LogP = 3.2) B:  $\text{C}_8\text{H}_{10}\text{N}_4\text{O}_2$  (LogP = -2.1) C:  $\text{C}_{10}\text{H}_8\text{O}_4$  (LogP = 1.8)

SOLUCION:

Los compuestos con mayor afinidad por proteínas son aquellos con un LogP más cercano a 0. En este caso, el compuesto B (cafeína) tiene el LogP más cercano a 0 (-2.1), por lo que se predice que tendrá la mayor afinidad por proteínas.