

今回の到達目標

- 分子の性質を予測する理論的方法の特徴について簡単に説明することができる
 - ▶ 分子の骨格構造による **化学的性質** の違いは？
 - ▶ **親水性値・疎水性値** を求める方法は？
 - ▶ **log P** を求める方法は？
- 分子の骨格構造や log P の値に基づいて、分子の**化学的性質**を論理的に説明したり、**予測** することができる

分子の 性質 を予測する

Q) 親水性 とは？

A) 水に溶解しやすい (混ざりやすい) 性質

特徴 : 水との間に「水素結合」を作り易い

Q) 疎水性 とは？

A) 水に溶解しにくい (混ざりにくい) 性質

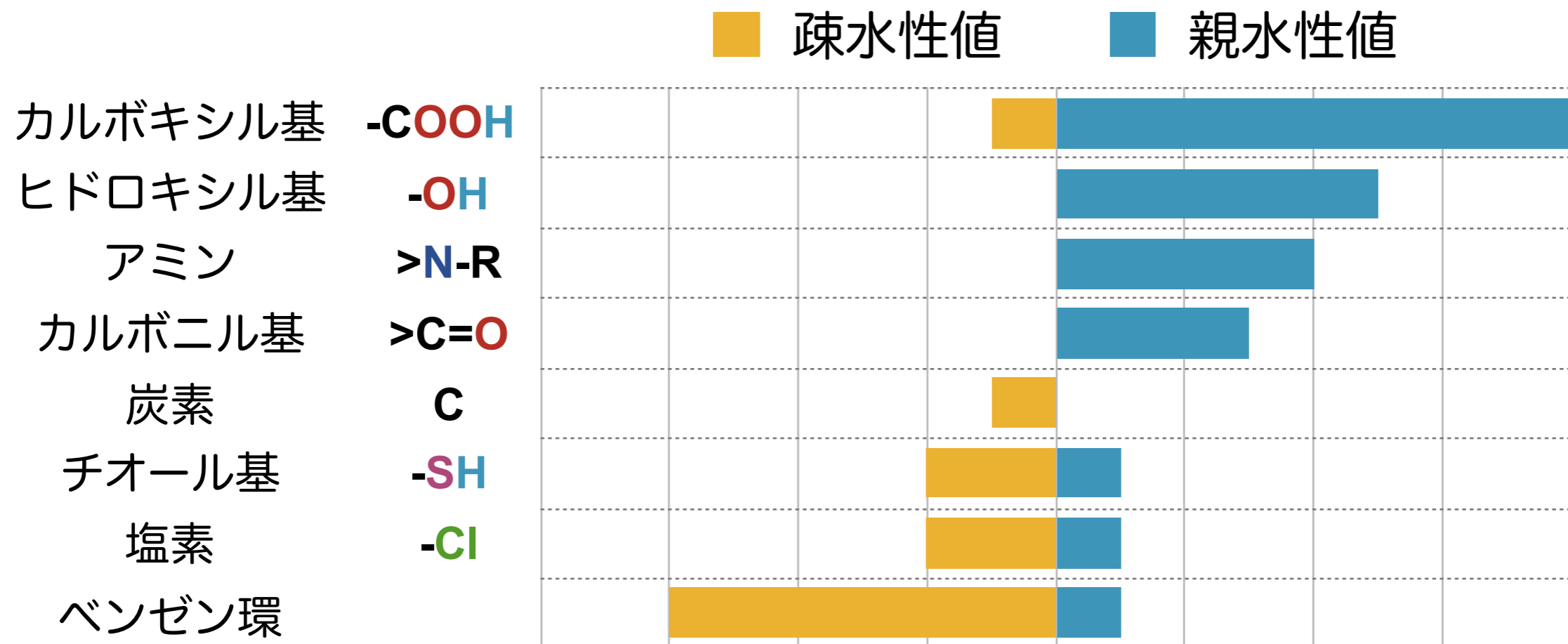
脂質 (油) ・ 非極性溶媒に溶解しやすい性質

特徴 : 体内に蓄積しやすい → 医薬品・毒性

環境に残留しやすい → 環境問題

有機概念図 (親水性・疎水性値) とは？

実験結果をもとにして、分子の骨格構造ごとに親水性・疎水性の値を「**経験的に**」決めたものの分子の「**置換基の種類**」で決められた値から、**化合物の性質を予測することができる**



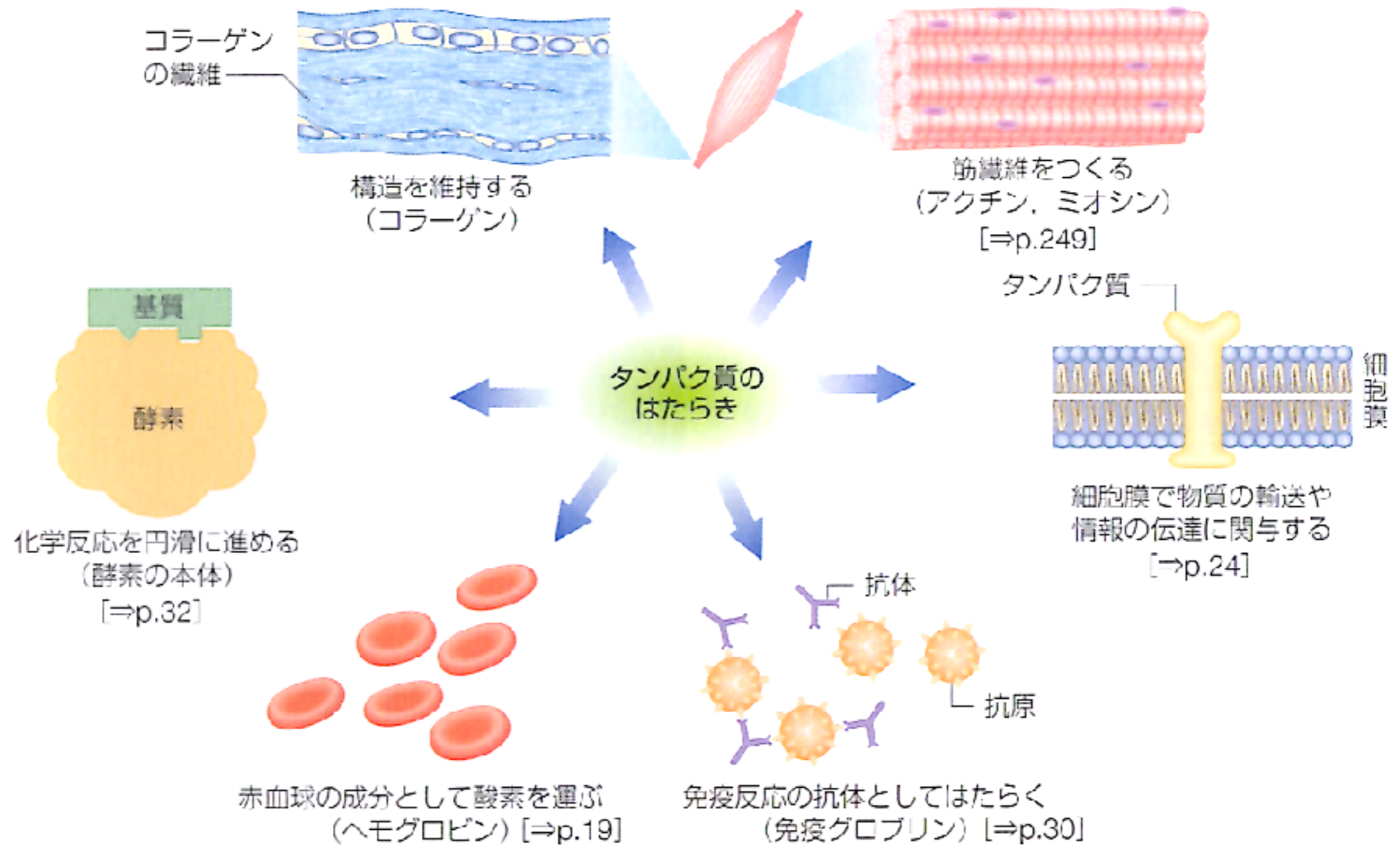
分子の親水性・疎水性値を計算する方法は？

manaba で配布する **有機概念図の計算シート** を使う

	A	B	C	D	E	K	L
1	計算シート: 分子の「性質」を予測しよう						
2				入力	※半角入力モードで数字を入力してください		
3				↓			
4		分子の骨格構造		個数			
5		全ての炭素原子	C	3	※分子に含まれる全ての炭素原子を数える		
6		ベンゼン環					
7		環(ベンゼン環以外)					
8		カルボニル基	>C=O				
9		カルボキシル基	-COOH		※「-COOH」を数えたら「>C=O」と「-OH」は数えない		
10		アミン	-N<				
11		ヒドロキシル基	-OH				
12		エーテル結合	R-O-R'				
13		チオール基	-SH				
14		スルフィド結合	R-S-R'	1			
15		塩素	-Cl				
16							
17				結果	※これより下のセルは編集しないでください		
18				↓			
19		親水性(W)値		20	●		
20		疎水性(O)値		100	●●●●●		
21							
22		W/O 比		0.200			
23							

タンパク質の「性質」を予測する

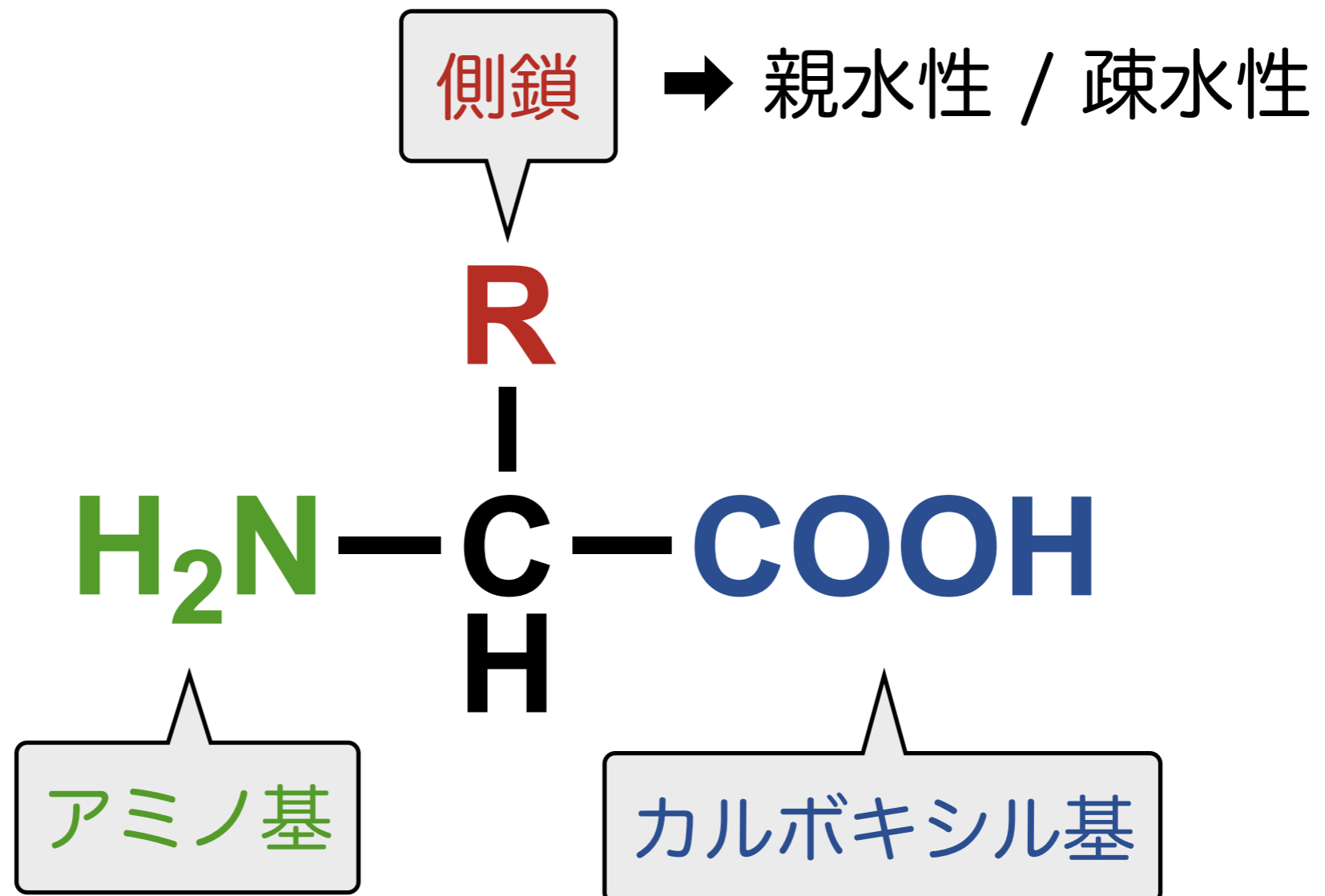
タンパク質とは？



タンパク質を構成している要素とは？

20種類のアミノ酸である

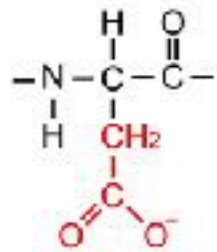
アミノ酸の性質は「側鎖の違い」によって決まる



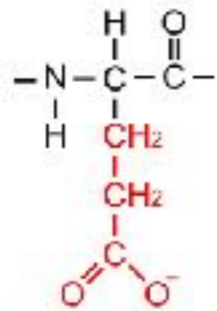
ヒトのタンパク質を構成するアミノ酸は？

酸性アミノ酸

アスパラギン酸
(Asp, D)

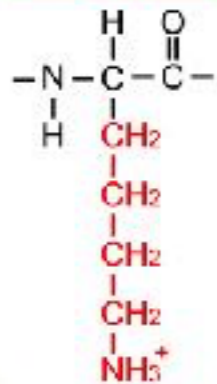


グルタミン酸
(Glu, E)

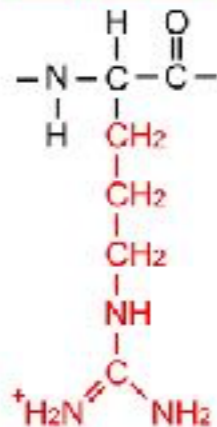


塩基性アミノ酸

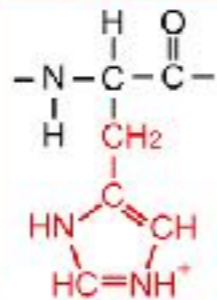
リシン
(Lys, K)



アルギニン
(Arg, R)

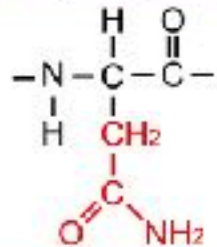


ヒスチジン
(His, H)

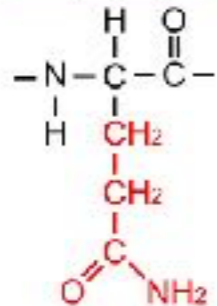


中性極性アミノ酸

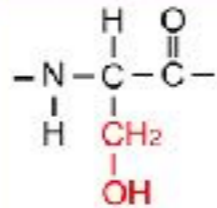
アスパラギン
(Asn, N)



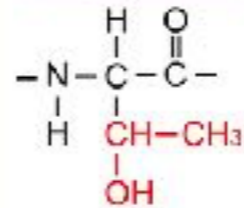
グルタミン
(Gln, Q)



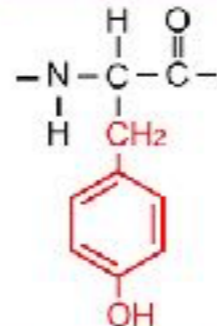
セリン
(Ser, S)



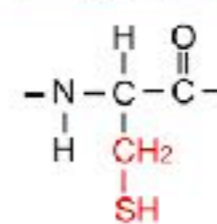
トレオニン
(Thr, T)



チロシン
(Tyr, Y)

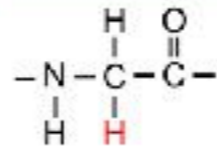


システイン
(Cys, C)

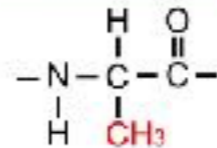


中性非極性アミノ酸

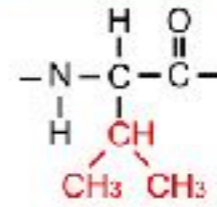
グリシン
(Gly, G)



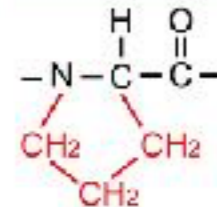
アラニン
(Ala, A)



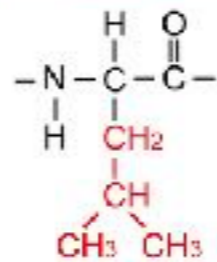
バリン
(Val, V)



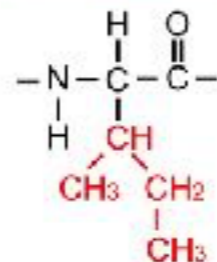
プロリン
(Pro, P)



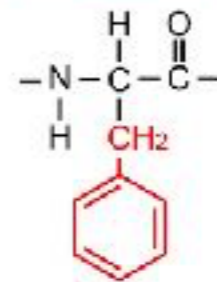
ロイシン
(Leu, L)



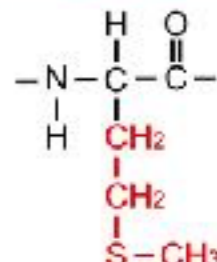
イソロイシン
(Ile, I)



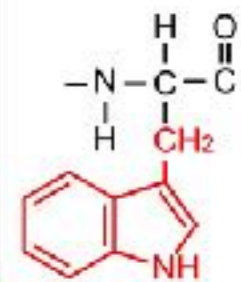
フェニルアラニン
(Phe, F)



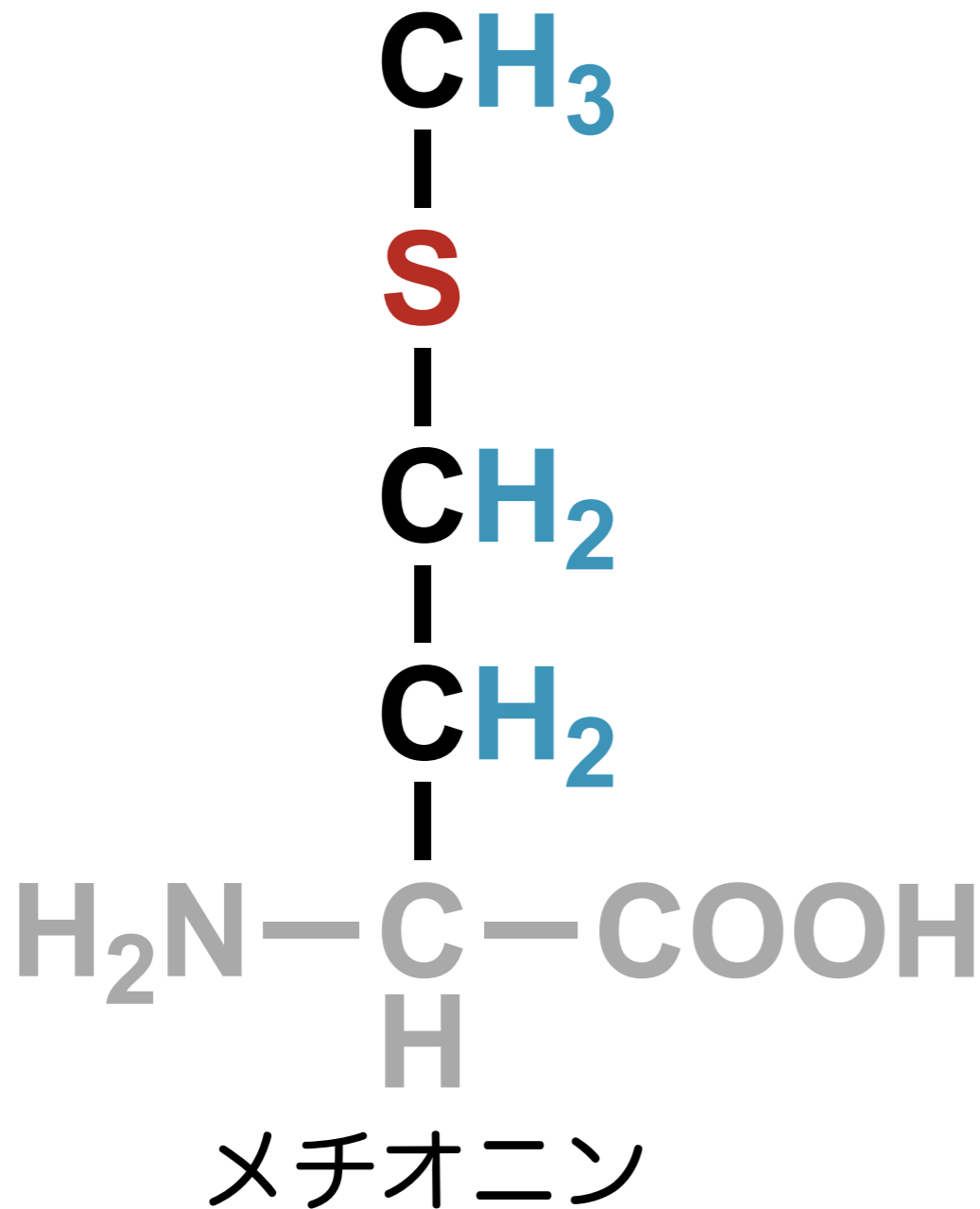
メチオニン
(Met, M)



トリプトファン
(Trp, W)



メチオニンの側鎖の性質は？



分子の骨格構造		個数
全ての炭素原子	C	3
ベンゼン環		
環(ベンゼン環以外)		
カルボニル基	>C=O	
カルボキシル基	-COOH	
アミン	-N<	
ヒドロキシル基	-OH	
エーテル結合	R-O-R'	
チオール基	-SH	
スルフィド結合	R-S-R'	1
塩素	-Cl	

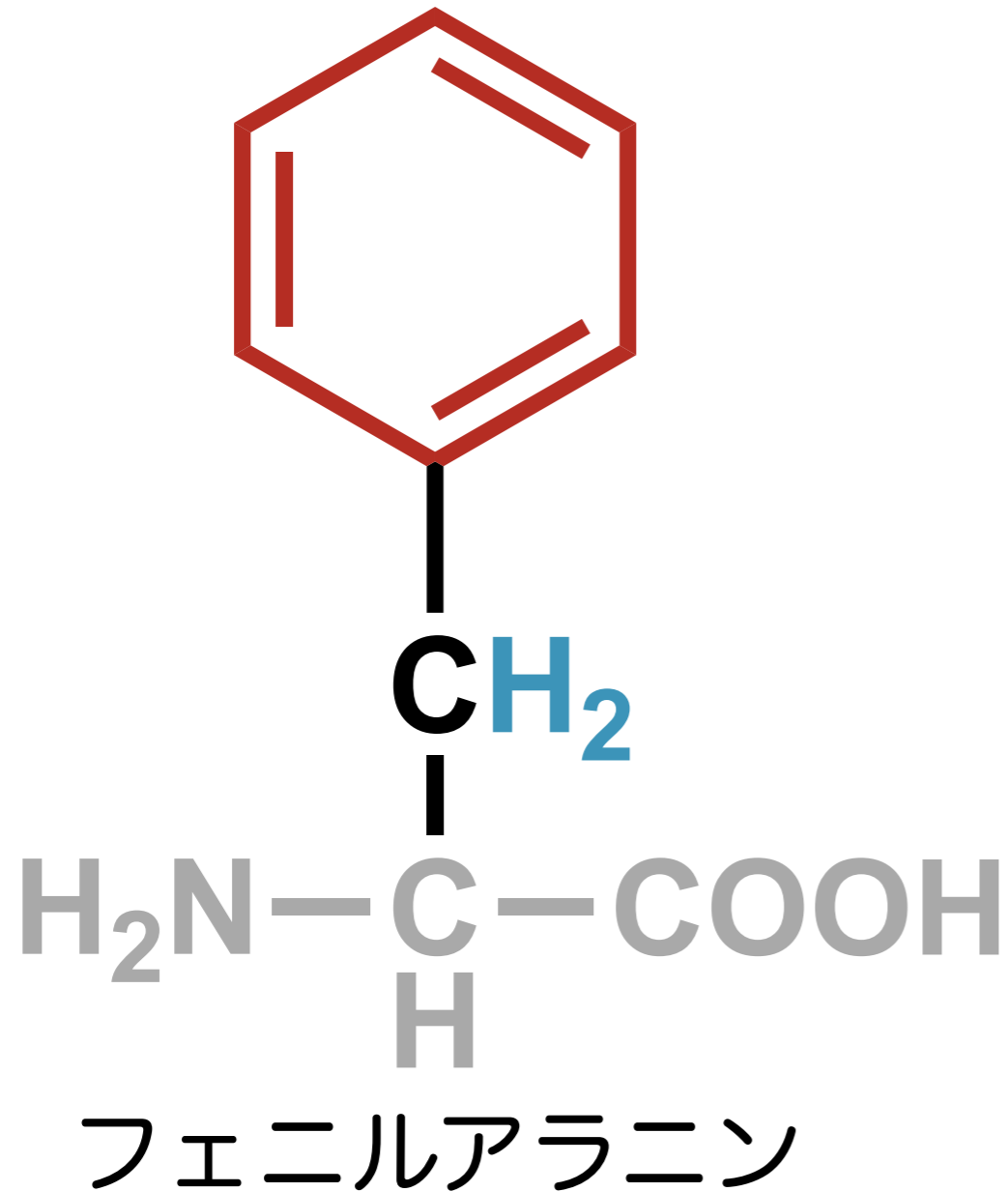
結果

親水性(W)値	20
疎水性(O)値	100

W/O 比	0.200
-------	-------

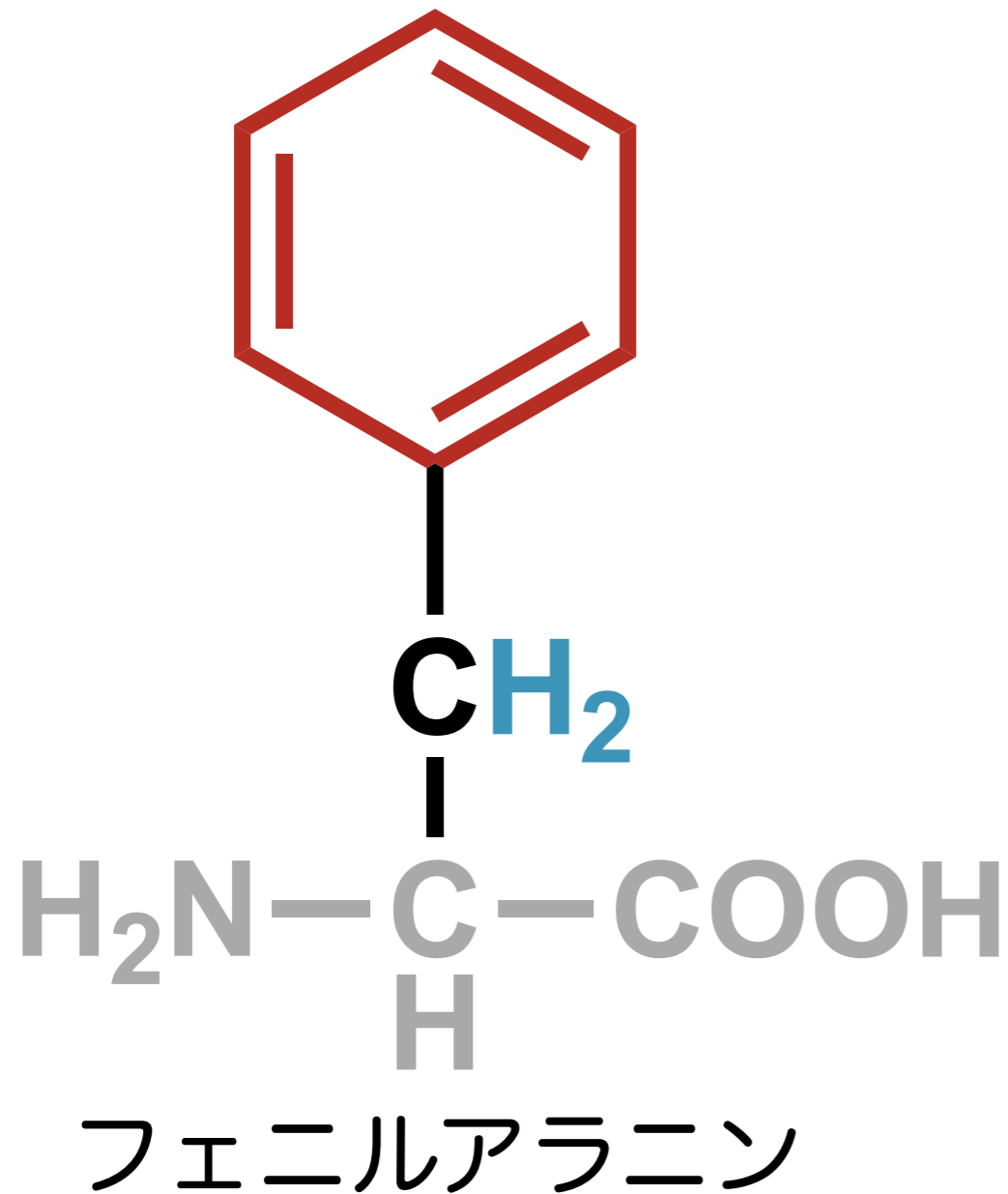
油に溶けやすい

フェニルアラニンの側鎖の性質は？



分子の骨格構造		個数	
全ての炭素原子	C		
ベンゼン環			
環(ベンゼン環以外)			
カルボニル基	>C=O		
カルボキシル基	-COOH		
アミン	-N<		
ヒドロキシル基	-OH		
エーテル結合	R-O-R'		
チオール基	-SH		
スルフィド結合	R-S-R'		
塩素	-Cl		
			結果
			↓
	親水性(W)値		
	疎水性(O)値		
	W/O 比		

フェニルアラニンの側鎖の性質は？



分子の骨格構造		個数
全ての炭素原子	C	7
ベンゼン環		1
環(ベンゼン環以外)		
カルボニル基	>C=O	
カルボキシル基	-COOH	
アミン	-N<	
ヒドロキシル基	-OH	
エーテル結合	R-O-R'	
チオール基	-SH	
スルフィド結合	R-S-R'	
塩素	-Cl	

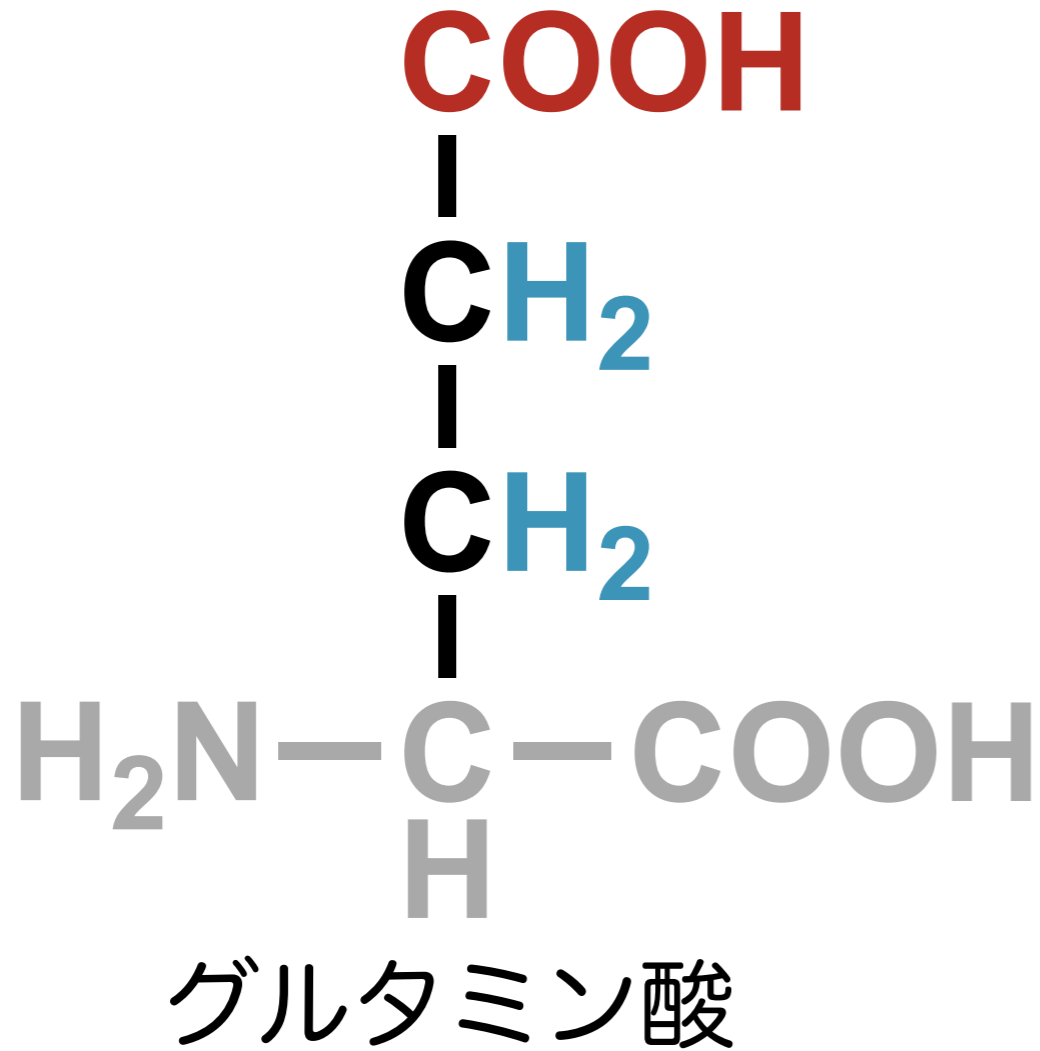
結果

親水性(W)値	15
疎水性(O)値	140

W/O 比	0.107
-------	-------

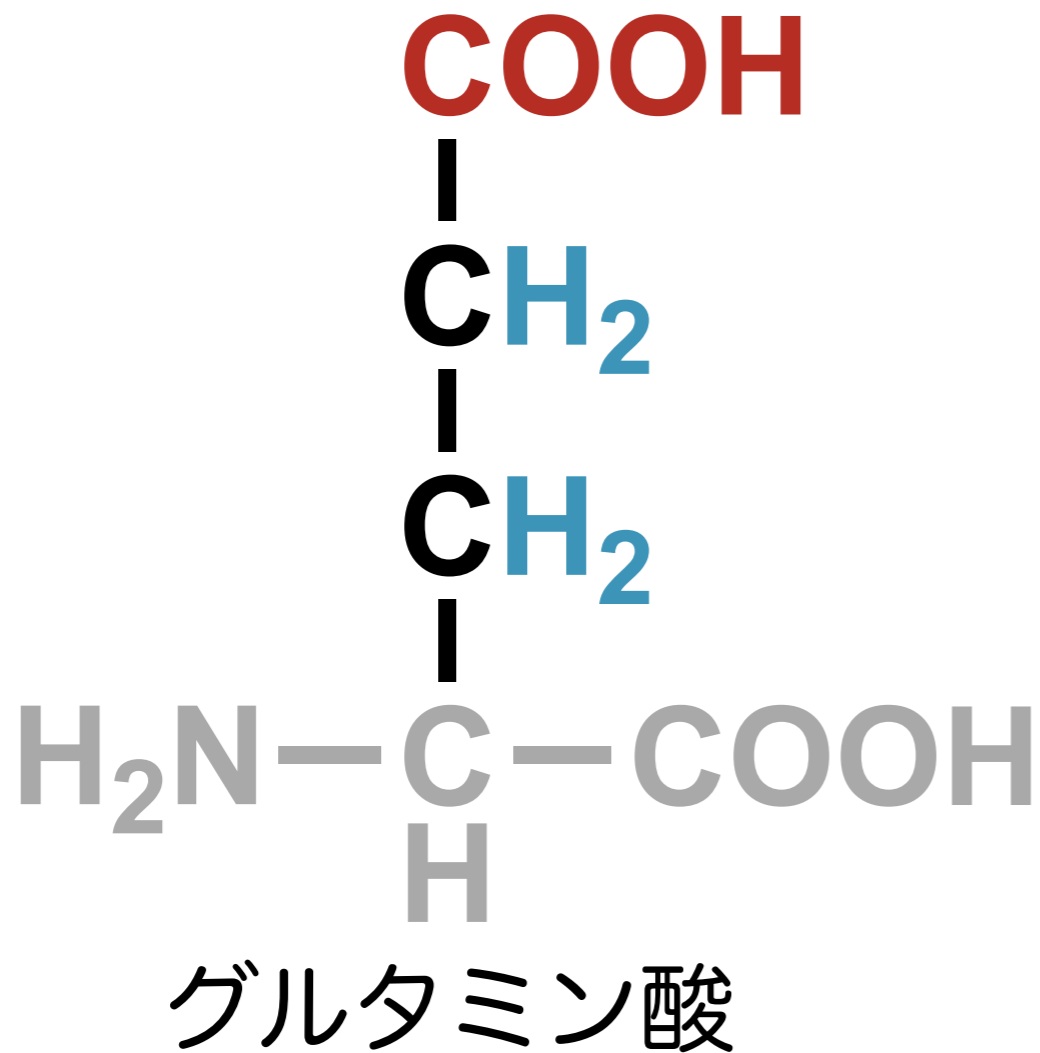
油に溶けやすい

グルタミン酸の側鎖の性質は？



分子の骨格構造		個数
全ての炭素原子	C	
ベンゼン環		
環(ベンゼン環以外)		
カルボニル基	>C=O	
カルボキシル基	-COOH	
アミン	-N<	
ヒドロキシル基	-OH	
エーテル結合	R-O-R'	
チオール基	-SH	
スルフィド結合	R-S-R'	
塩素	-Cl	
		結果
		↓
	親水性(W)値	
	疎水性(O)値	
	W/O 比	

グルタミン酸の側鎖の性質は？



分子の骨格構造		個数
全ての炭素原子	C	3
ベンゼン環		
環(ベンゼン環以外)		
カルボニル基	>C=O	
カルボキシル基	-COOH	1
アミン	-N<	
ヒドロキシル基	-OH	
エーテル結合	R-O-R'	
チオール基	-SH	
スルフィド結合	R-S-R'	
塩素	-Cl	

結果

親水性(W)値	150
疎水性(O)値	60

W/O 比 2.500

水に溶けやすい



小テスト：アミノ酸の側鎖の性質

小テストについて

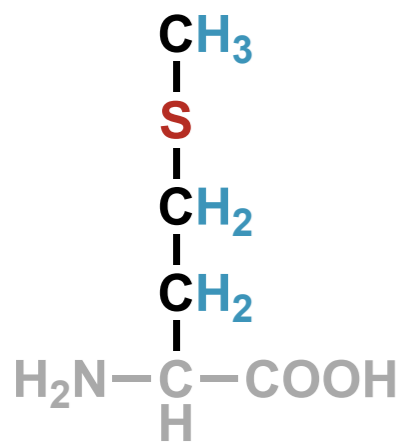
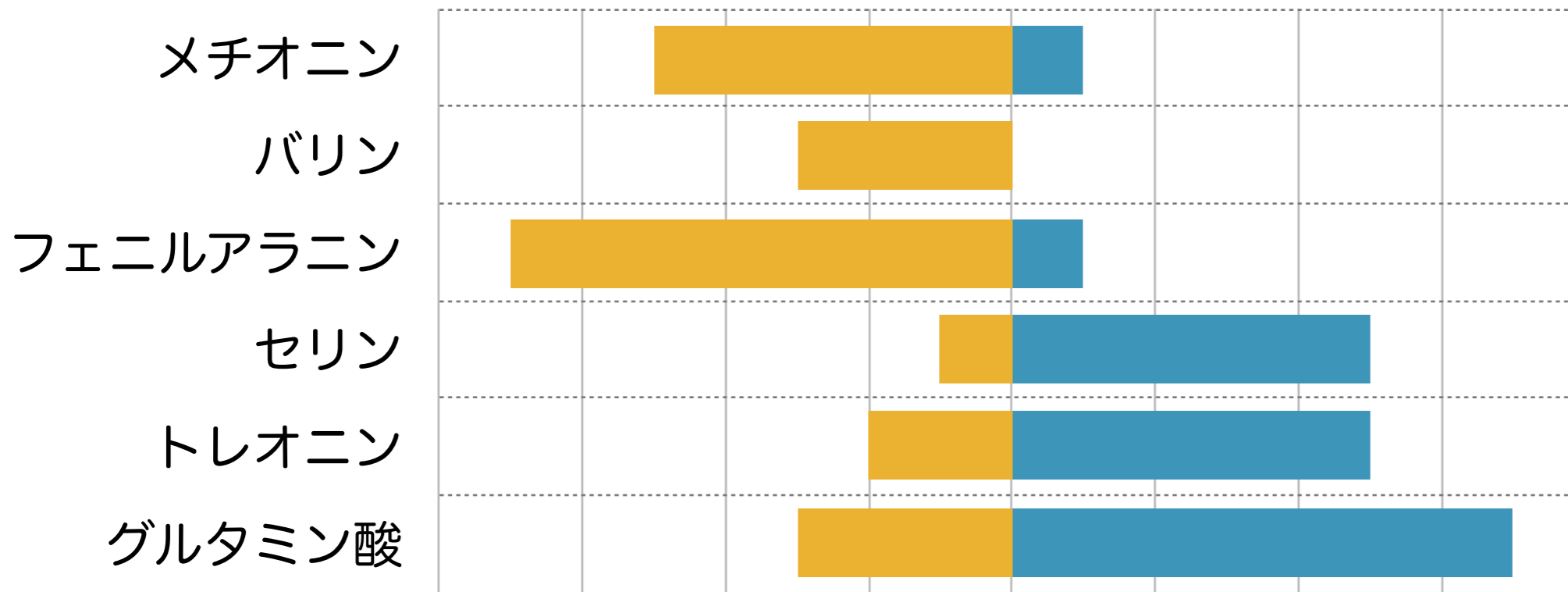
- 授業中に manaba で 小テスト を実施します
- 小テストを受講するときに、
下記の資料を参考にすることができます
 - ▶ 実験テキスト
 - ▶ 自分の 実験ノート
 - ▶ 自分の 予習レポート
- 他の人の回答を見たり、他の人の実験ノートや予習レポートを見たりすることはできません

小テスト：5分

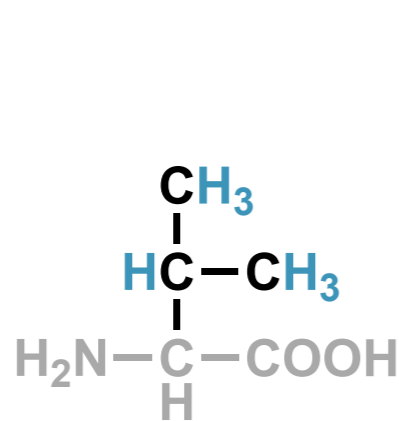
休憩時間：5 分

アミノ酸の側鎖の性質は？

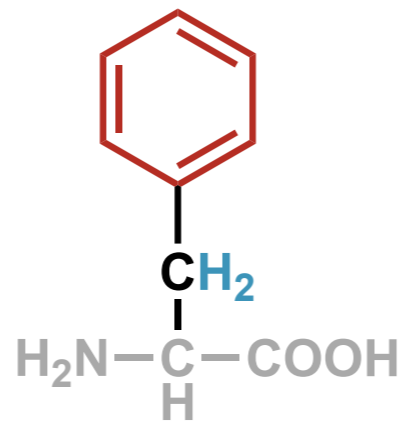
■ 疎水性値 ■ 親水性値



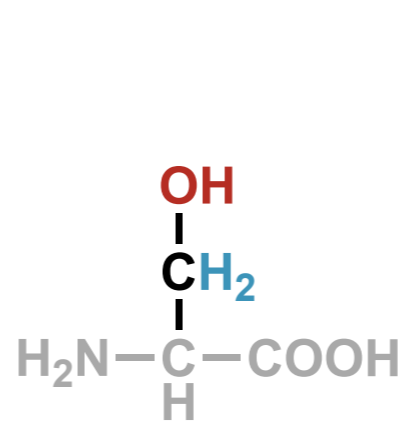
メチオニン



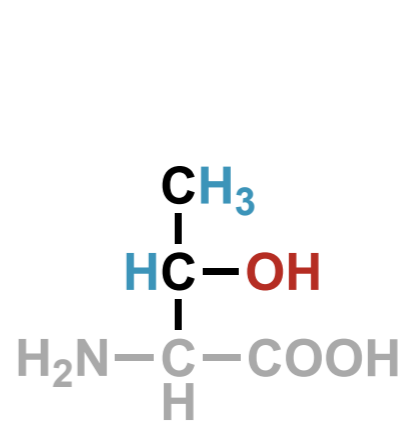
バリン



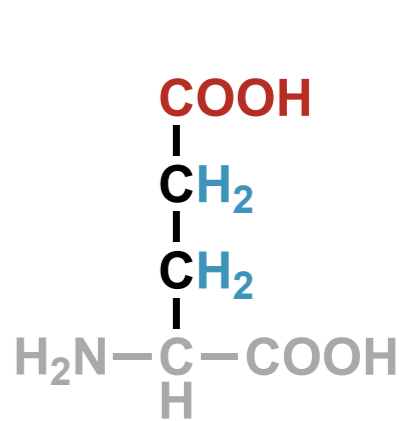
フェニルアラニン



セリン



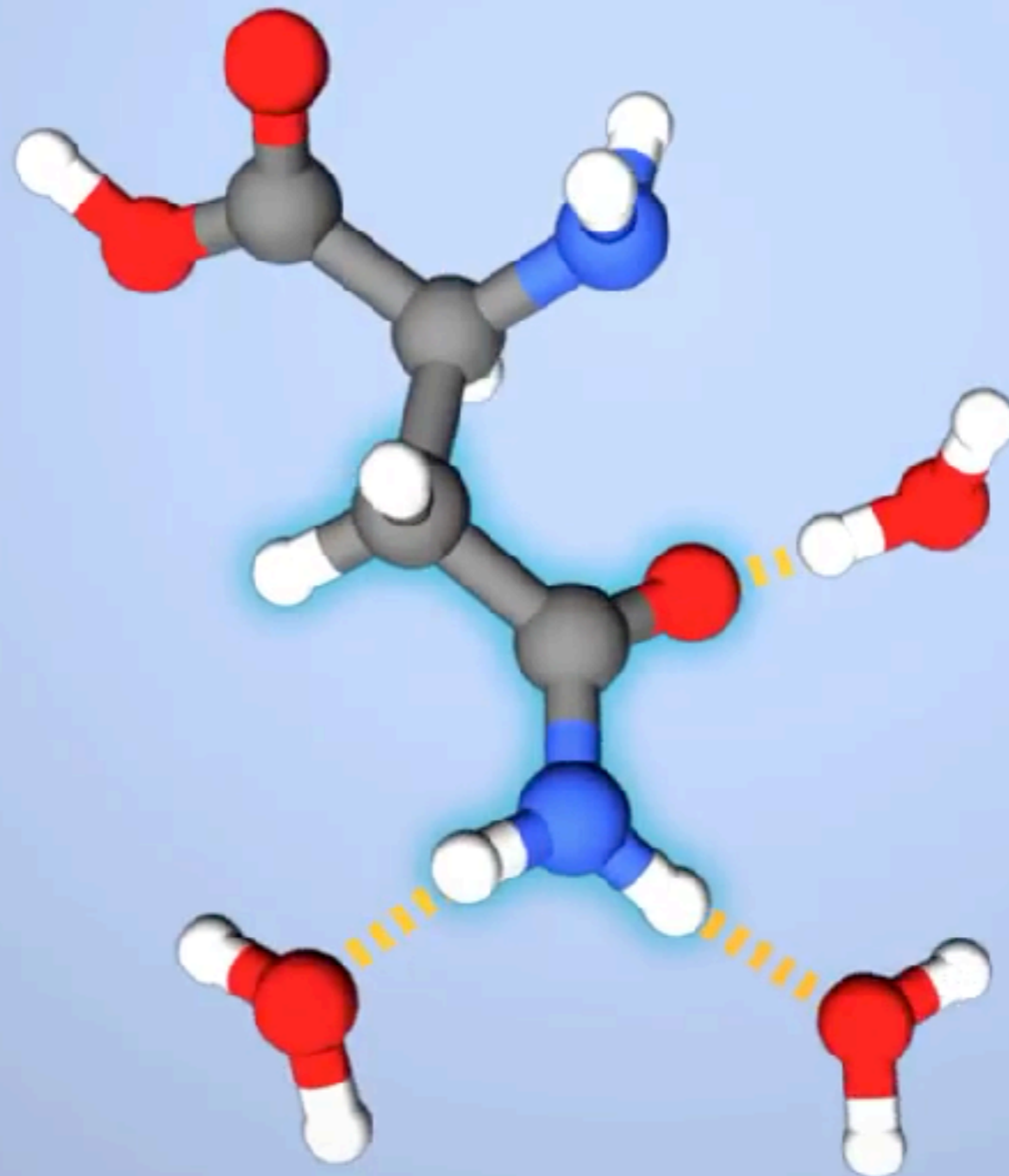
トレオニン



グルタミン酸

水素結合を作りやすい アミノ酸の特徴は？

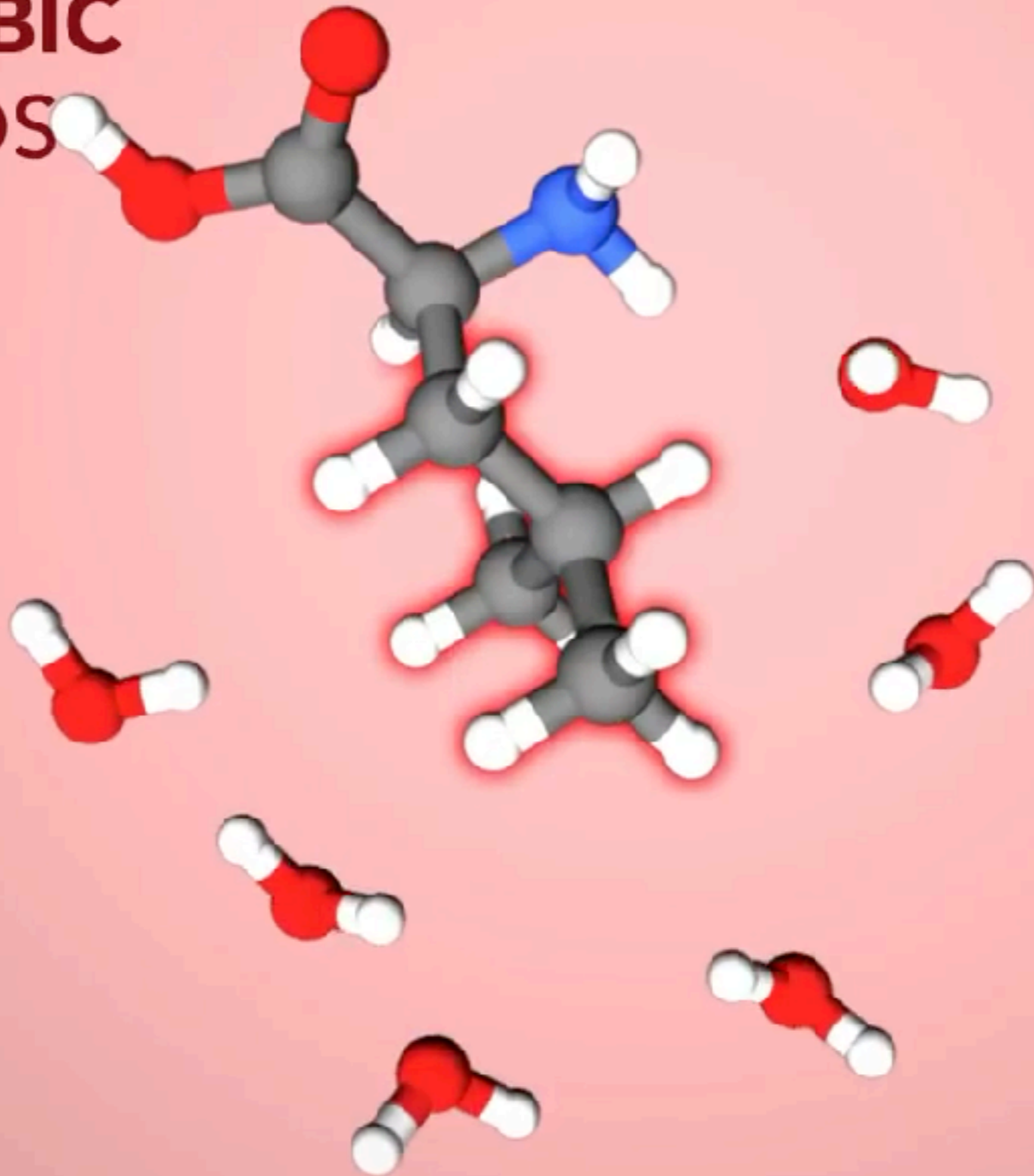
HYDROPHILIC AMINO ACIDS



アスパラギン

水素結合を作りにくい アミノ酸の特徴は？

**HYDROPHOBIC
AMINO ACIDS**

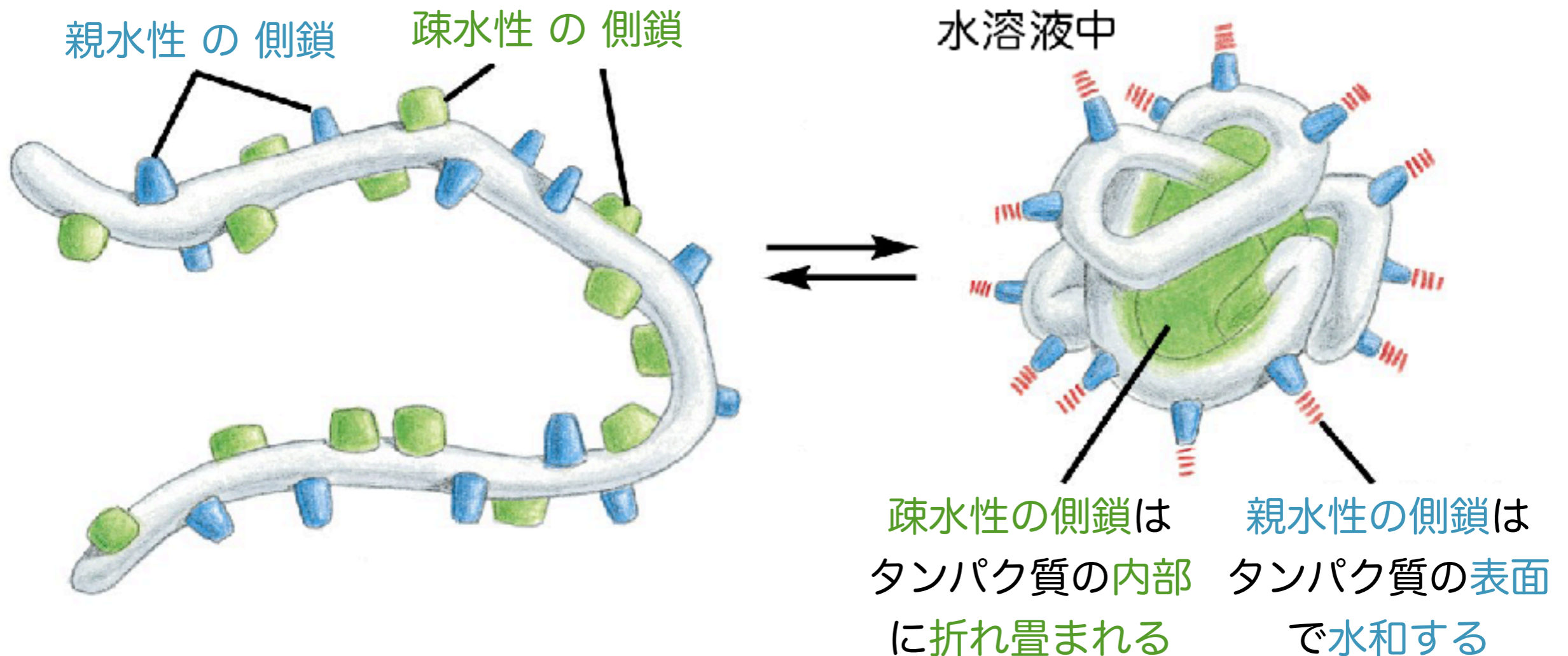


ロイシン

タンパク質の立体構造はどのように決まるか？

親水性の側鎖が「外側」、疎水性の側鎖が「内側」になるように、タンパク質は折れ畳まれる

➔ アミノ酸の配列からタンパク質の構造を予測できる



タンパク質の立体構造 を Chem3D で調べてみよう

https://pdbj.org/

The image shows a screenshot of the PDBj (Protein Data Bank Japan) website homepage. The browser address bar shows 'pd bj.org/?lang=ja'. The page features a search bar with the text 'Search pd bj.org' inside, which is highlighted with a red rounded rectangle. A red callout box with a white border and a pointer to the search bar contains the text 'PDB IDを入力する' and '1buw'. The website header includes the PDBj logo, navigation links for 'English', '日本語', '简体中文', '繁體中文', and '한국어', and a language selection dropdown. The main content area is divided into several sections: a top-left box with the number '236963' and '件を2025-06-04に公開中'; a top-right box with a protein structure image and '最新公開エントリー'; a middle-left sidebar with a 'ホーム' menu; a middle section titled 'PDBjについて' with introductory text; a bottom-left sidebar with a 'データ登録 (OneDep)' menu; a bottom-middle section titled '最新情報' with a list of recent news items; and a bottom-right section titled '今月の分子' with a featured protein structure and '記事一覧' link.

236963
件を2025-06-04に公開中

English 日本語 简体中文 繁體中文 한국어

Search pd bj.org

PDB IDを入力する
1buw

最新公開
エントリー

今月の分子
306: 東部馬脳炎ウイルス
記事一覧

最新情報

- 2025-06-06 [第25回日本蛋白質科学会年会にてランチョンセミナーを開催します](#)
- 2025-06-04 [343件のPDBエントリーが新たに公開されました。\(2025-06-04付\)](#)
- 2025-04-22 [\[wwPDB\] PDBアーカイブのスナップショットは、HTTPS、SYNC、RSYNC、FTP経由でダウンロード頂けます](#)
- 2025-03-25 [PDBj Newsletter Vol.25公開のお知らせ](#)

データ登録 (OneDep)
ヘルプ

タンパク質の立体構造 を Chem3D で調べてみよう

統計情報
ヘルプ
FAQ
お問い合わせ
PDBjの引用・利用規約
リンク集
Settings

▼ データ登録 (OneDep)
ヘルプ
PDB, EMDB, BMRBへの登録

▼ ダウンロード
PDBアーカイブからのデータダウンロード

▼ 標準フォーマット
PDBx/mmCIFについて
フォーマット変換
PDBx/mmCIFエディタ

▼ クイックリンク
ヘルプ
PDB形式変換不可エントリー
グループ登録エントリー

概要 構造情報 実験情報 機能情報 相同蛋白質 履歴 ダウンロード

1BUW


CRYSTAL STRUCTURE OF S-NITROSO-NITROSYL HUMAN HEMOGLOBIN A

1BUW の概要

エントリーDOI	10.2210/pdb1buw/pdb
分子名称	PROTEIN (HEMOGLOBIN), PROTOPORPHYRIN IX CONTAINING FE, NITRIC OXIDE, ... (5 entities in total)
機能のキーワード	oxygen transport and vasodilation, oxygen storage-transport complex, oxygen storage/transport
由来する生物種	Homo sapiens (human) 詳細
タンパク質・核酸の鎖数	4
化学式量合計	64725.07
構造登録者	Chan, N.-L., Rogers, P.H., Arnone, A. (登録日: 1998-09-06, 公開日: 1998-09-16, 最終更新日: 2024-10-30)
	Chan, N.L., Rogers, P.H., Arnone, A. Crystal structure of the S-nitroso form of liganded human hemoglobin. <i>Biochemistry</i> , 37:16459-16464, 1998 Cited by 114 PubMed Abstract: Although numerous reports have documented that the S-nitrosylation of cysteine residues by NO alters the activities of a wide variety

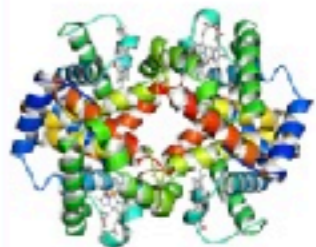
PDBx/mmCIF
PDBML (ヘッダのみ (no-atom))
PDB形式 (全ての情報)
検証レポート (PDF)
EDMap 2fo-fc (MTZ)
[More...](#)

チェーンボロジ



構造

[非対称単位を表示](#)



他のデータベース情報

wwPDB DOI Landing Page

ヘモグロビンの 立体構造

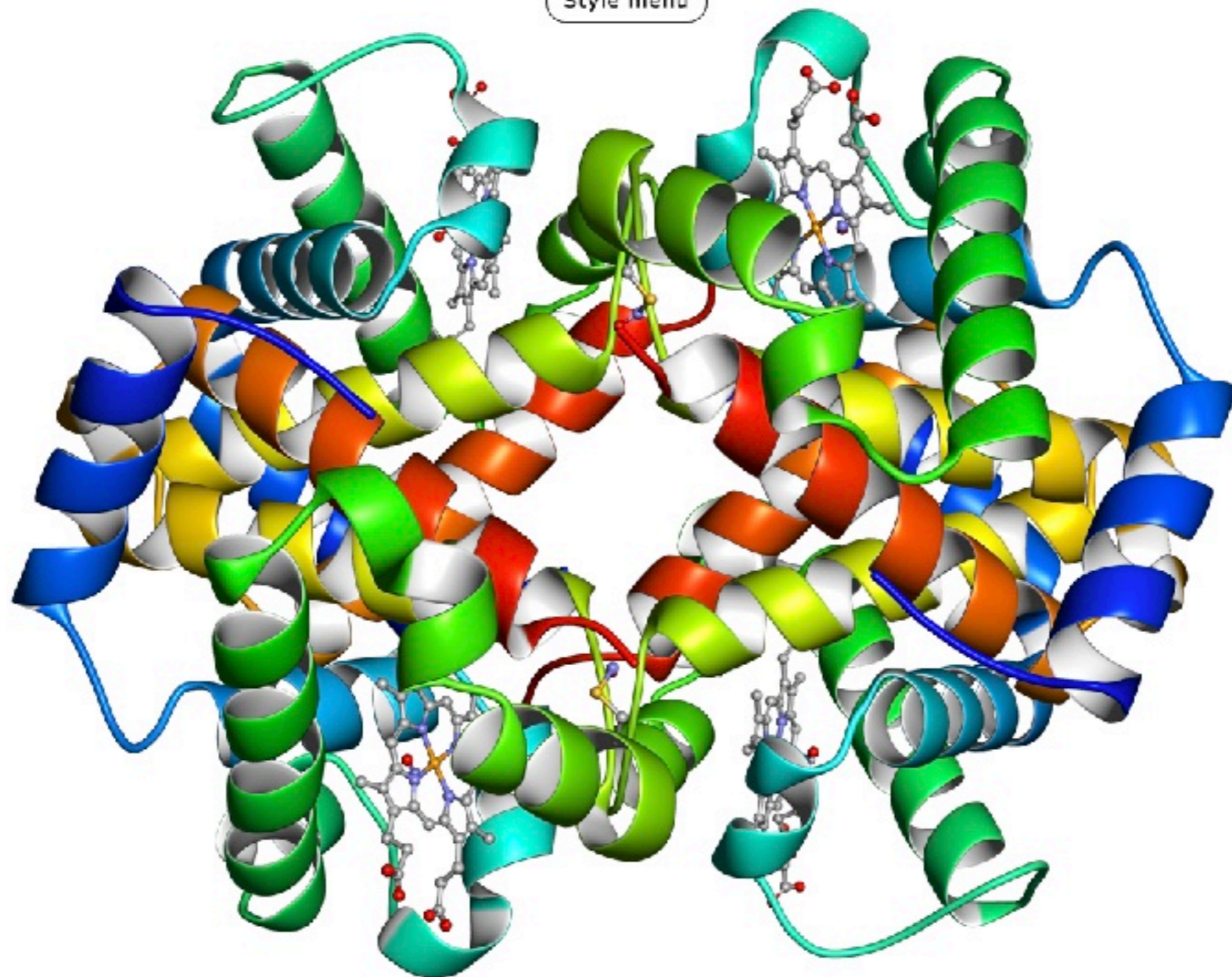
Structure styling options

Quick styling options:

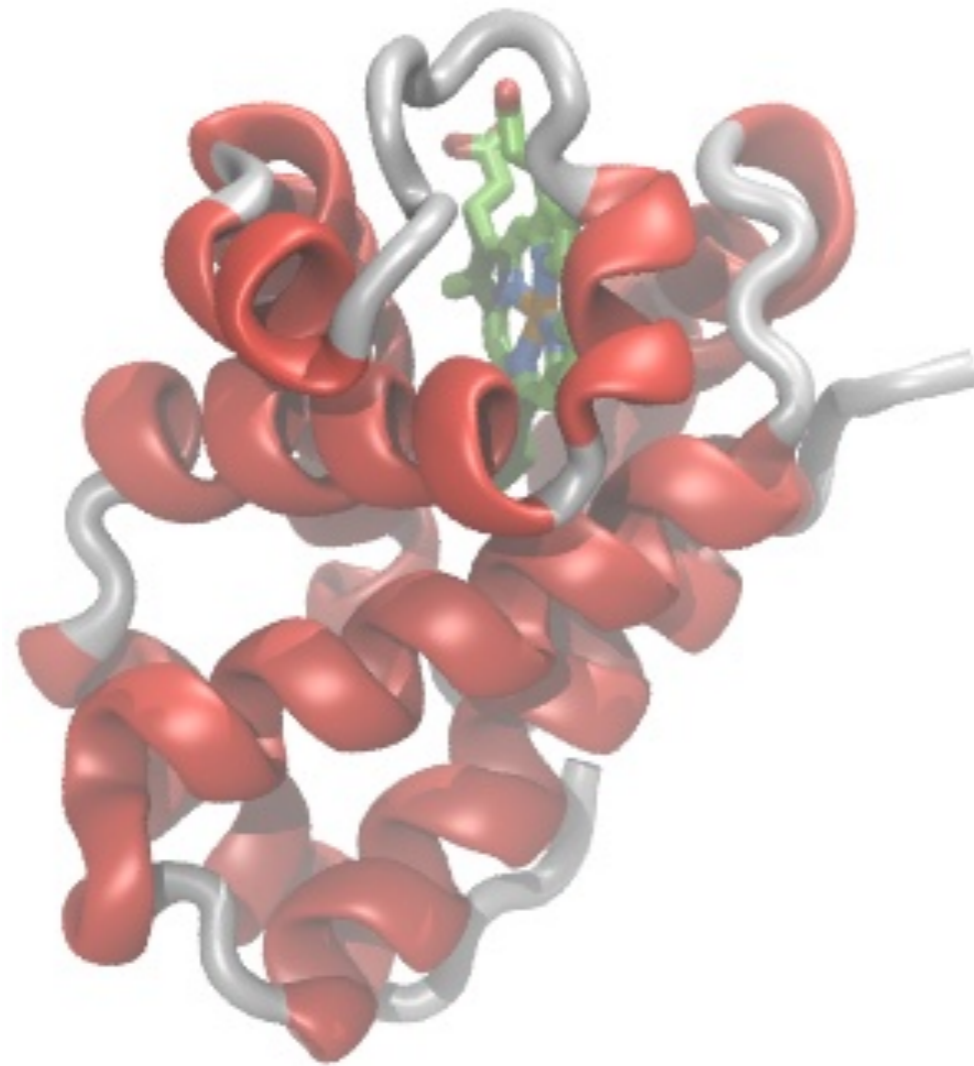
Quick operations:

For more advanced styling, please use the command line (bottom of the page), the structure menu (right-side of the page) or right-click on an atom/cartoon to show a context menu with styling options. Also, see our [manual](#) or [our recent paper](#) for more information.

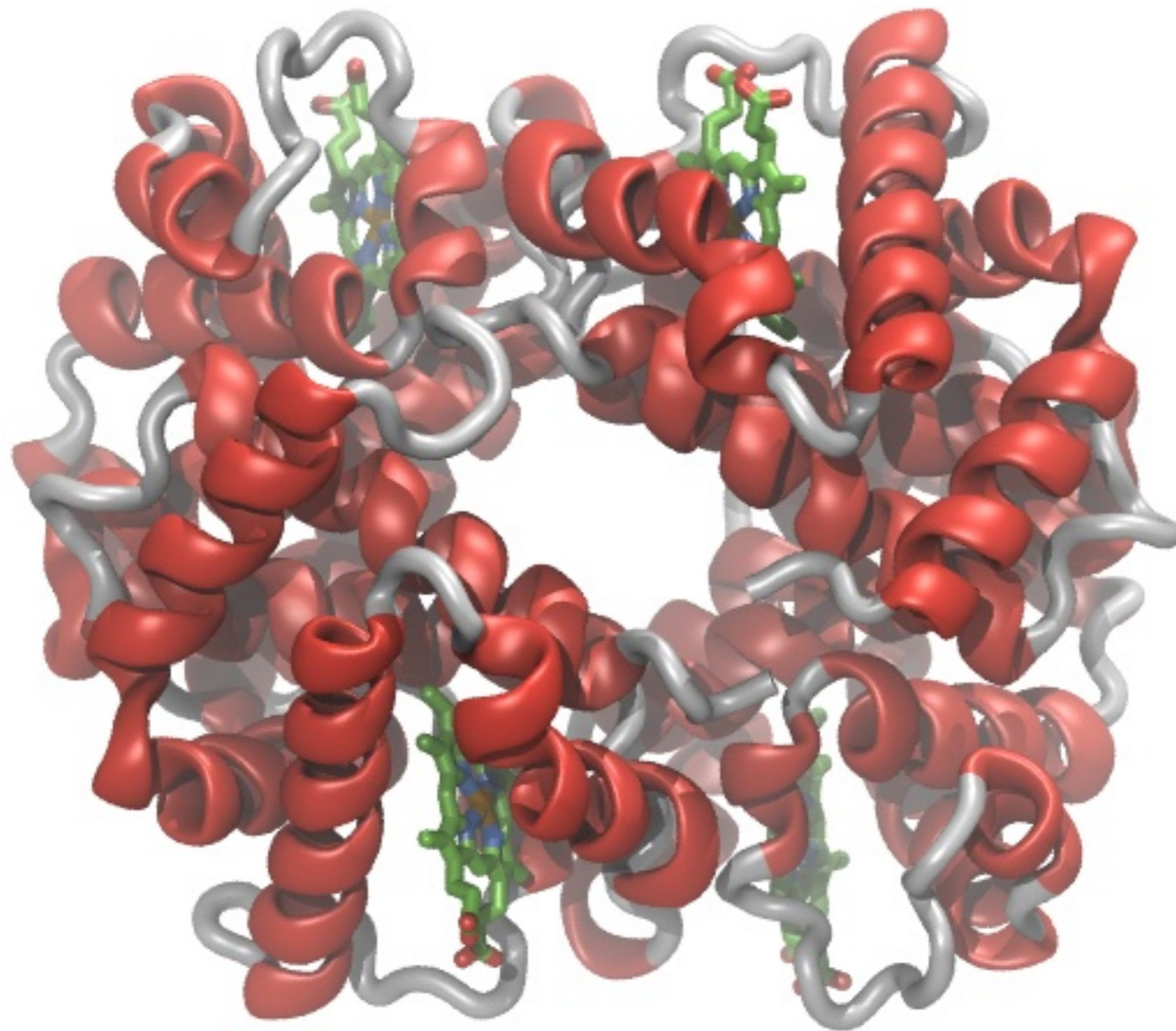
Style menu



ヘモグロビンの 立体構造



ヘモグロビンの 立体構造



ヘモグロビンの **アミノ酸配列** は？

VHLTPEEKSA

DEVGGGEALGR

FFESFGDLST

KAHGKKVLGA

LKGTFATLSE

ENFRLLGNVL

EFTPPVQAAY

LAHKYH

VTALWVGKVN

LLVVYPWTQR

PDAVMGNPKV

FSDGLAHLDN

LHCCKLHVDP

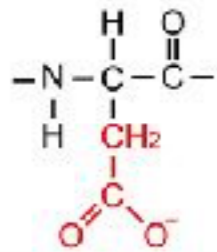
VCVLAHHEFGK

QKVVAGVANA

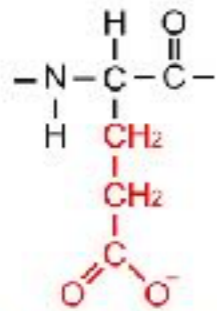
ヒトのタンパク質を構成するアミノ酸は？

酸性アミノ酸

アスパラギン酸
(Asp, D)

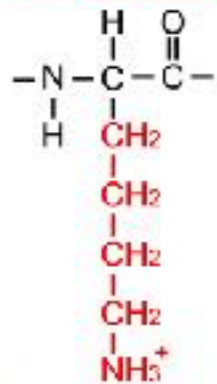


グルタミン酸
(Glu, E)

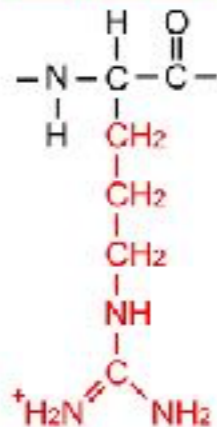


塩基性アミノ酸

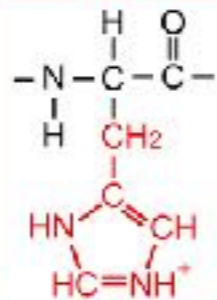
リシン
(Lys, K)



アルギニン
(Arg, R)

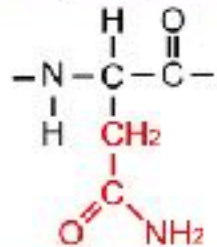


ヒスチジン
(His, H)

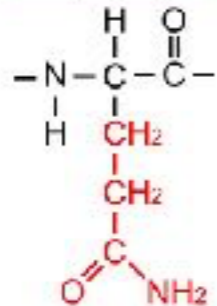


中性極性アミノ酸

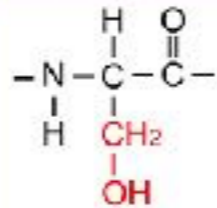
アスパラギン
(Asn, N)



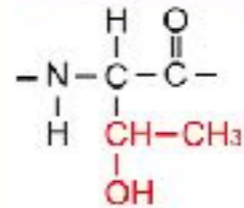
グルタミン
(Gln, Q)



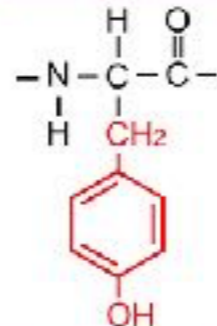
セリン
(Ser, S)



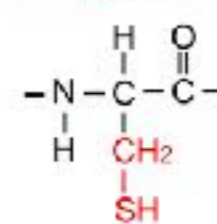
トレオニン
(Thr, T)



チロシン
(Tyr, Y)

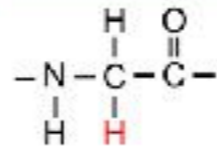


システイン
(Cys, C)

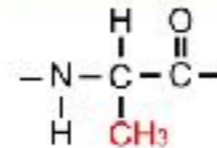


中性非極性アミノ酸

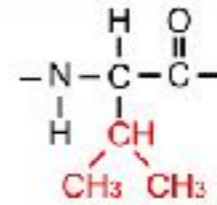
グリシン
(Gly, G)



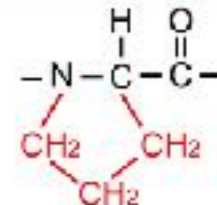
アラニン
(Ala, A)



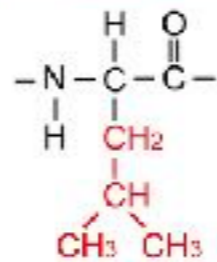
バリン
(Val, V)



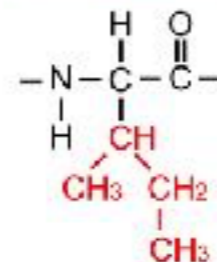
プロリン
(Pro, P)



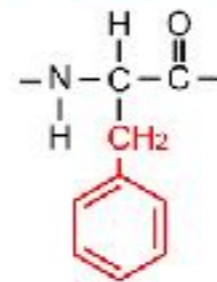
ロイシン
(Leu, L)



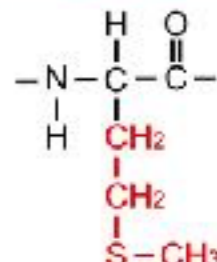
イソロイシン
(Ile, I)



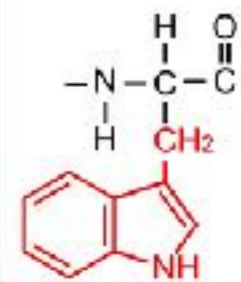
フェニルアラニン
(Phe, F)



メチオニン
(Met, M)



トリプトファン
(Trp, W)



ヘモグロビンの **アミノ酸配列** は？

VHLTP**E**EKSA VTALWVGKVVN
DEVGGGEALGR LLVVYPWTQR
FFESFGDLST PDAVMGNPKV
KAHGKKVLGA FSDGLAHLDN
LKGTFATLSE LHCDKLVDP
ENFRLLGNVL VCVLAHHFGK
EFTPPVQAAY QKVVAGVANA
LAHKYH

ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？

VHLTP**E**EKSA

VTALWVGKVVN

DEVCCVATCD

LLVVYPWTQR

グルタミン酸 → バリン
(E) (V)

I

PDAVMGNPKV

KAHGKKVLGA

FSDGLAHLDN

LKGTFATLSE

LHCDKLVDP

ENFRLLGNVL

VCVLAHHEFGK

EFTPPVQAAY

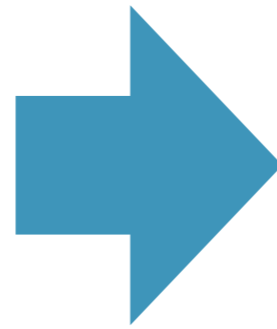
QKVVAGVANA

LAHKYH

ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？

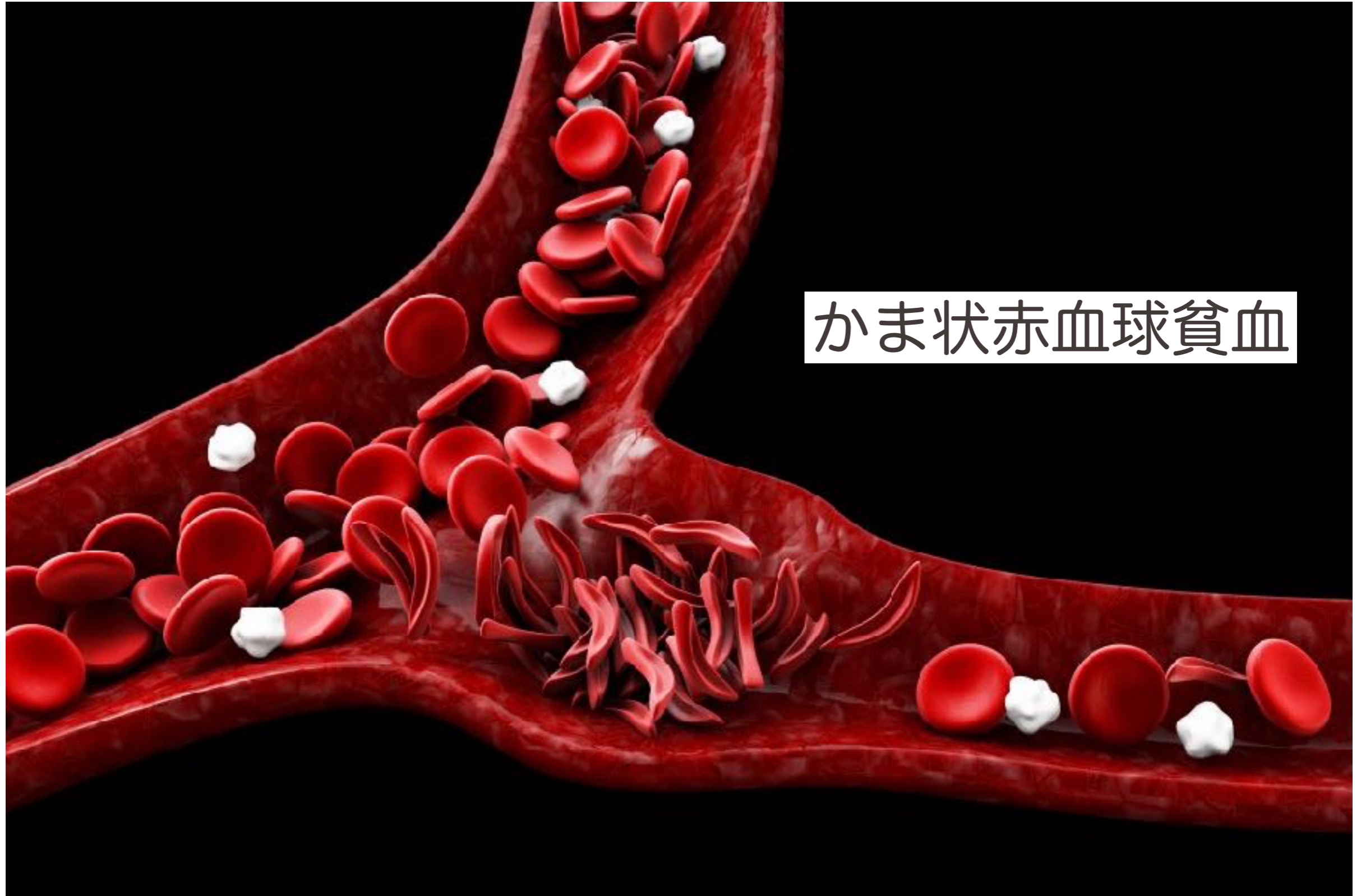


正常な赤血球

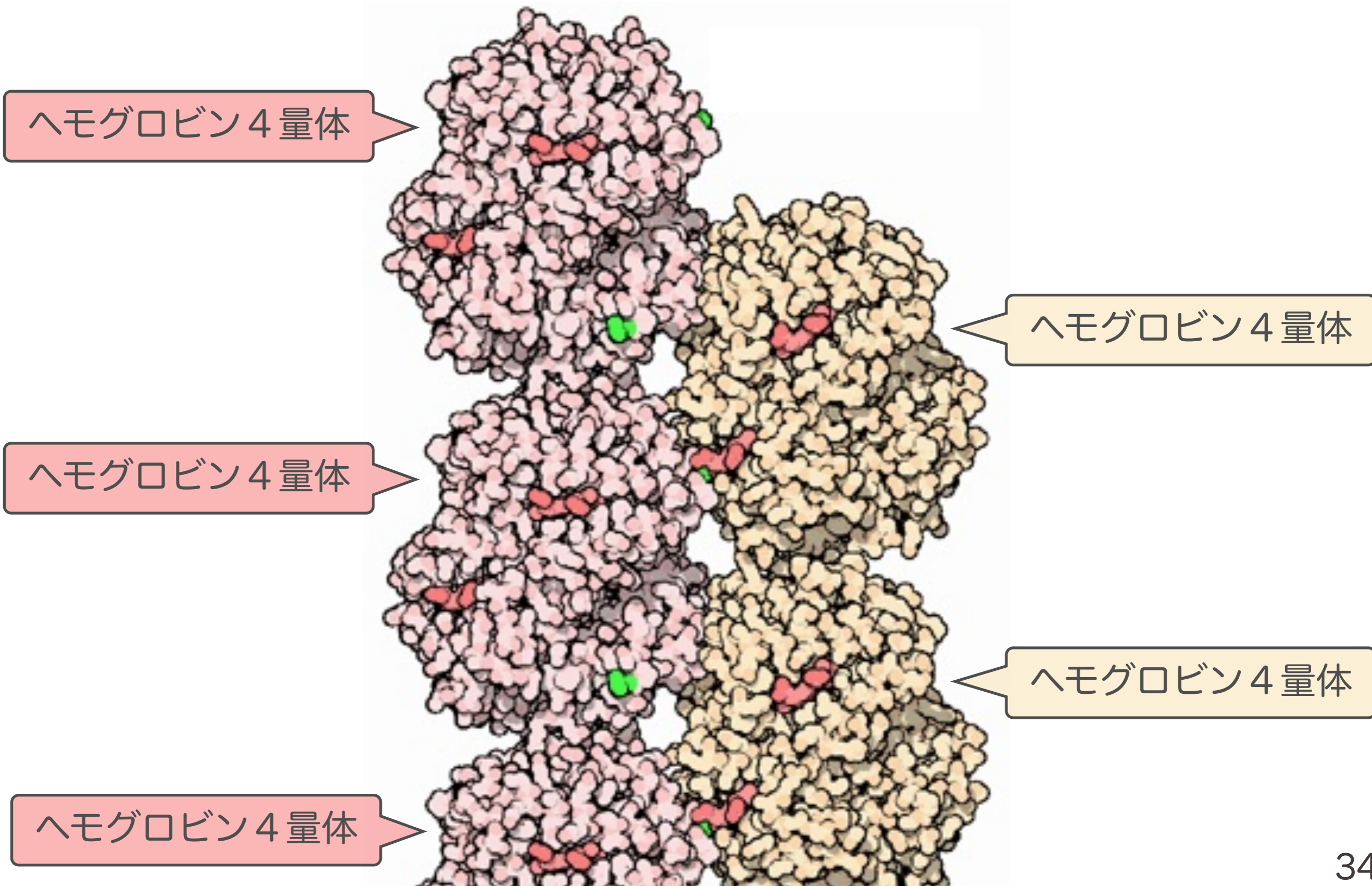


かま状赤血球

ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？



ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？



ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？

VHLTP**E**EKSA

VTALWVGKVN

DEVCCALCD

LLVVYPWTQR

グルタミン酸 → バリン
(性質?) (性質?)

PD

PD

KAHGKKVLGA

FSDGLAHLDN

LKGTFATLSE

LHC

ENFRLLGNVL

VCVLAHFGK

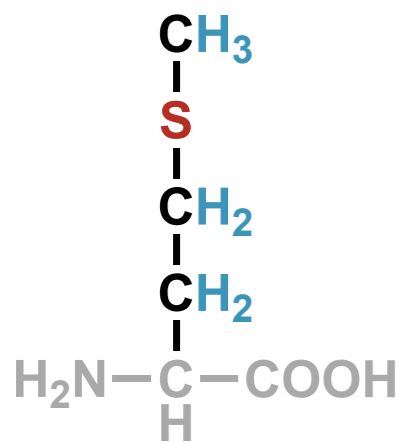
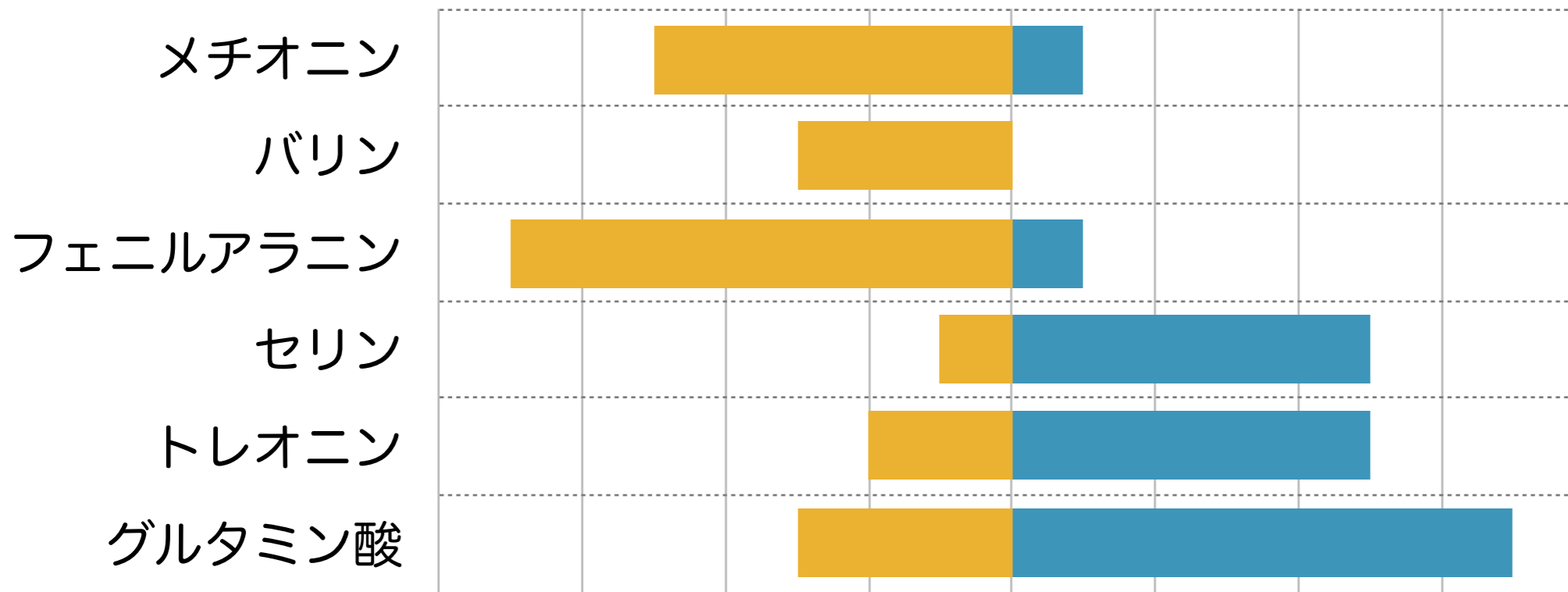
EFTPPVQAAY

QKVVAGVANA

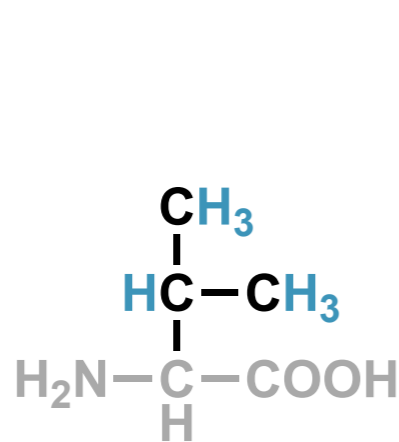
LAHKYH

アミノ酸の側鎖の性質は？

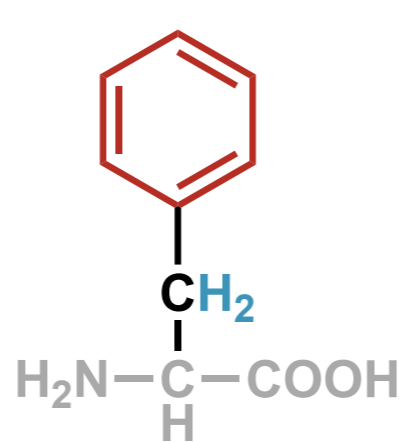
■ 疎水性値 ■ 親水性値



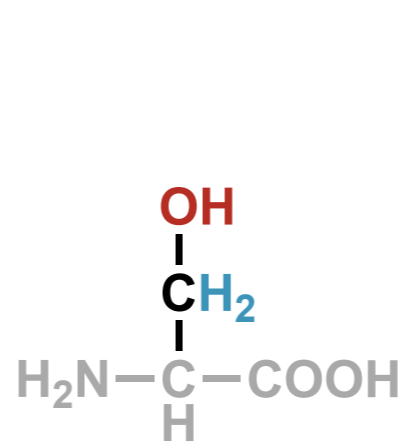
メチオニン



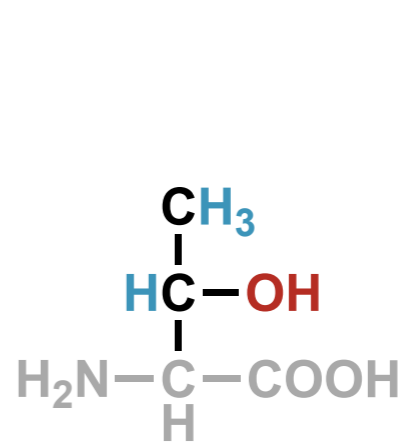
バリン



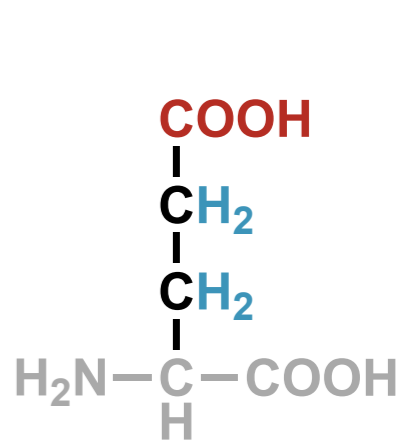
フェニルアラニン



セリン



トレオニン



グルタミン酸

ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？

VHLTP**E**EKSA

VTALWVGKVVN

DEVCCALCD

LLVVYPWTQR

グルタミン酸 → バリン
(親水性) (疎水性)

PDVAVMGNPKV

PDVAVMGNPKV

KAHGKKVLGA

FSDGLAHLDN

LKGTFATLSE

LHCDKLVDP

ENFRLLGNVL

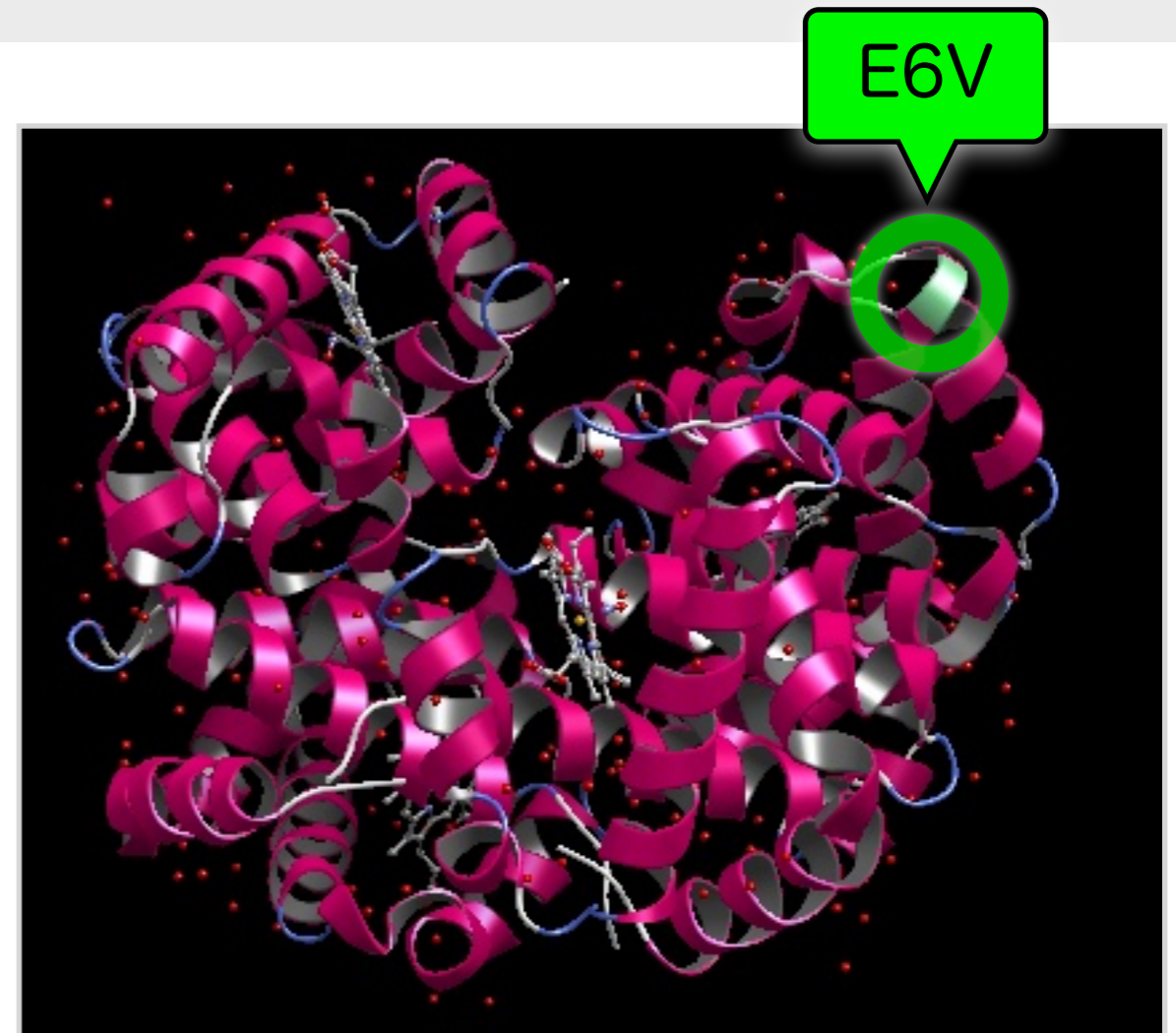
VCVLAHFGK

EFTPPVQAAY

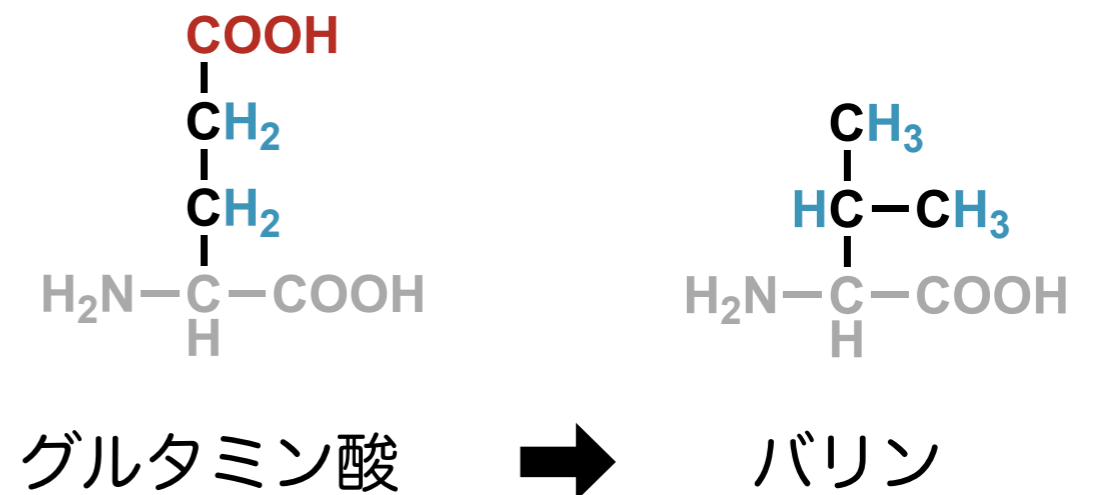
QKVVAGVANA

LAHKYH

ヘモグロビンの アミノ酸配列 が 1文字変わると？



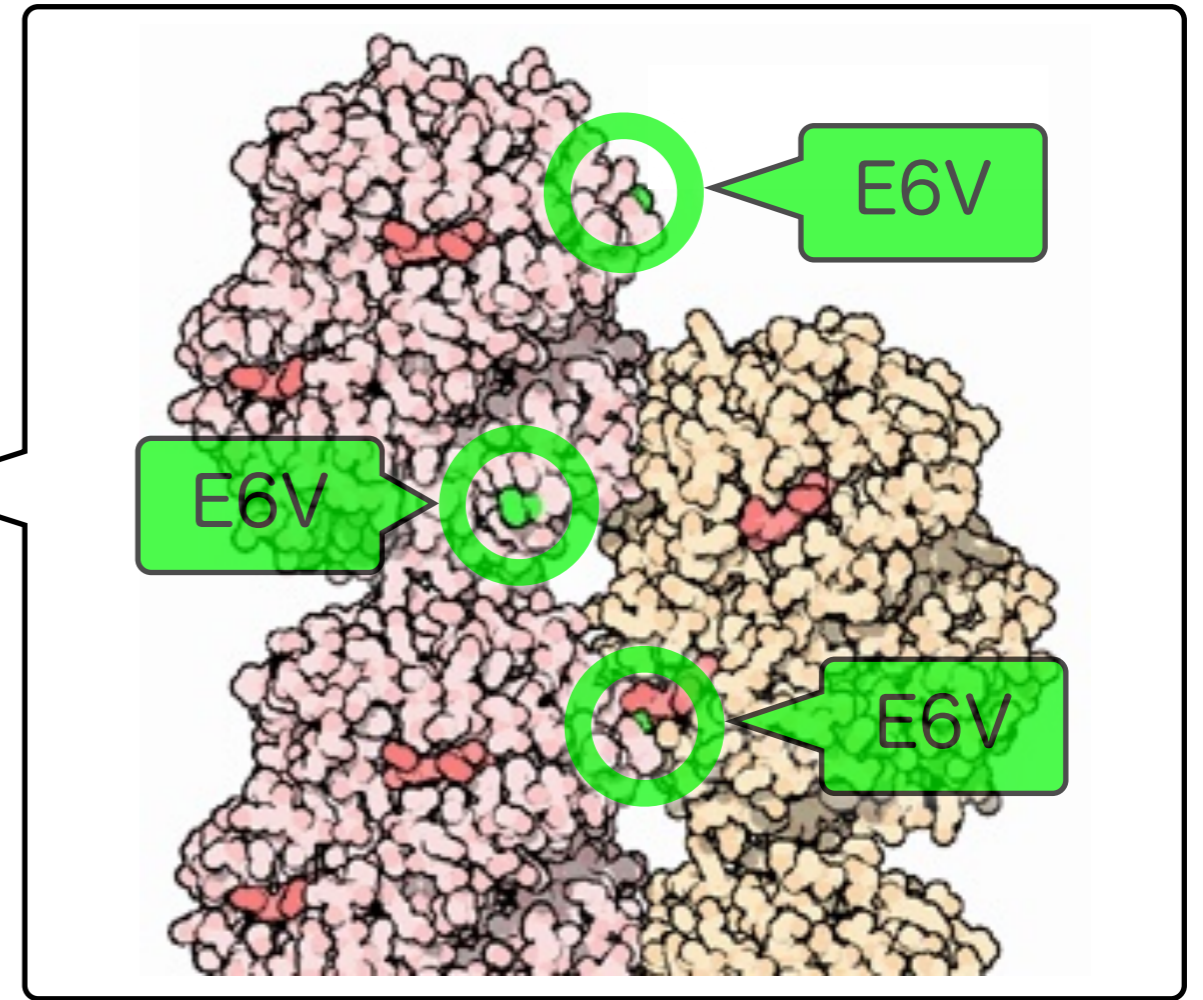
ヘモグロビン表面のアミノ酸が
グルタミン酸 (酸性) から
バリン (中性非極性) になる



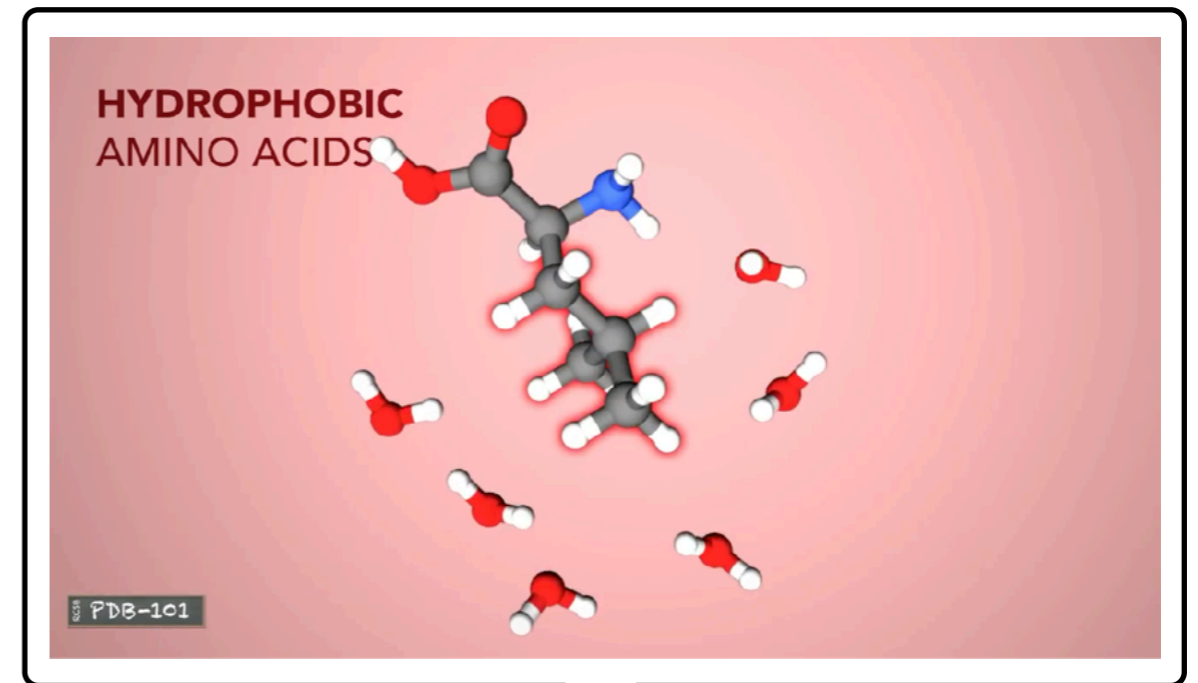
ヘモグロビンの **アミノ酸配列** が 1文字変わると？

ヘモグロビンが**疎水的な相互作用**
で集まって**繊維状の凝集体**になる

ヘモグロビン表面のアミノ酸が
グルタミン酸 (**酸性**) から
バリン (**中性非極性**) に変わる



ヘモグロビンの **アミノ酸配列** が 1文字変わると？

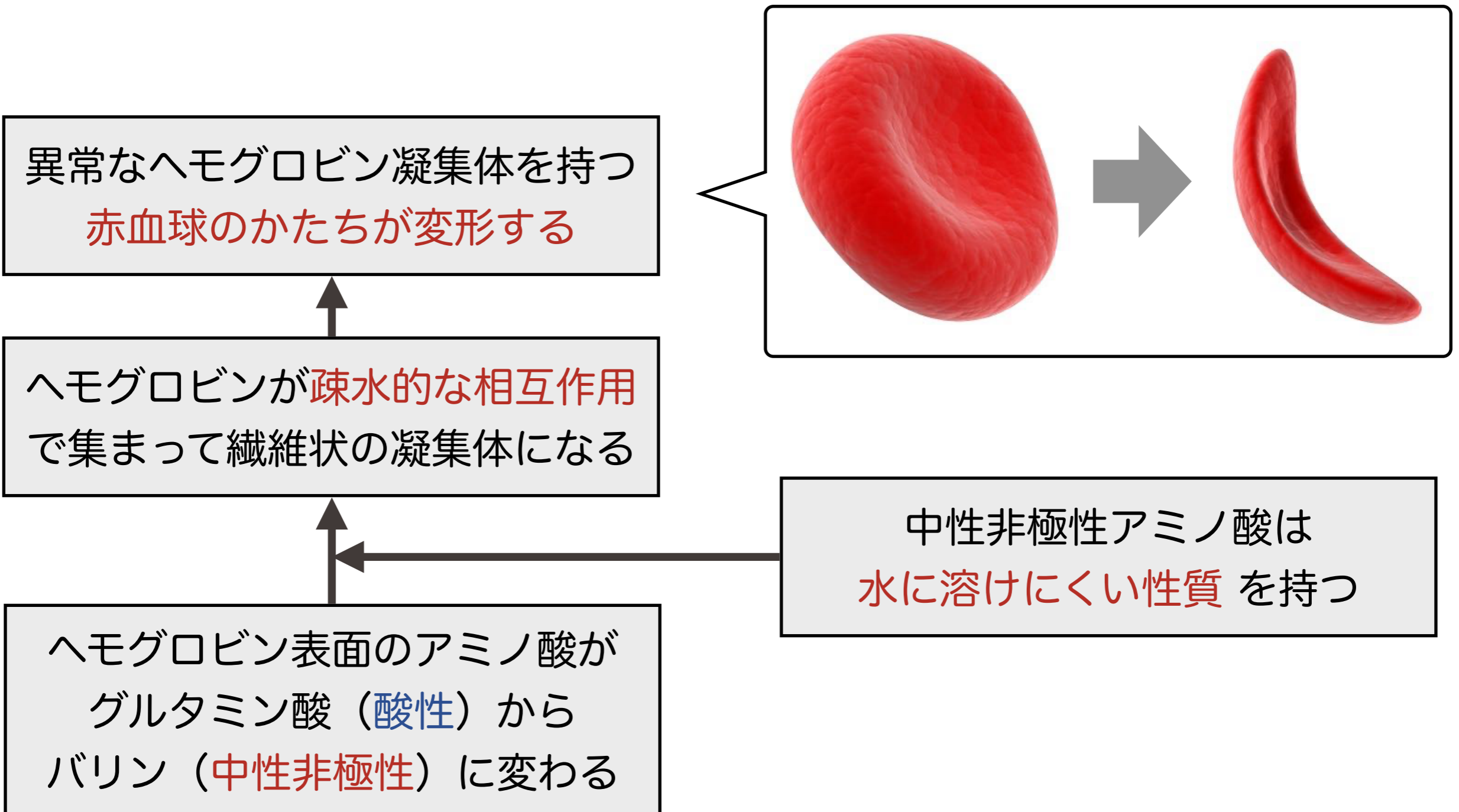


中性非極性アミノ酸は
水に溶けにくい性質を持つ

ヘモグロビンが**疎水的な相互作用**
で集まって**繊維状の凝集体**になる

ヘモグロビン表面のアミノ酸が
グルタミン酸 (**酸性**) から
バリン (**中性非極性**) に変わる

ヘモグロビンのアミノ酸配列が1文字変わると？



ヘモグロビンのアミノ酸配列が1文字変わると？

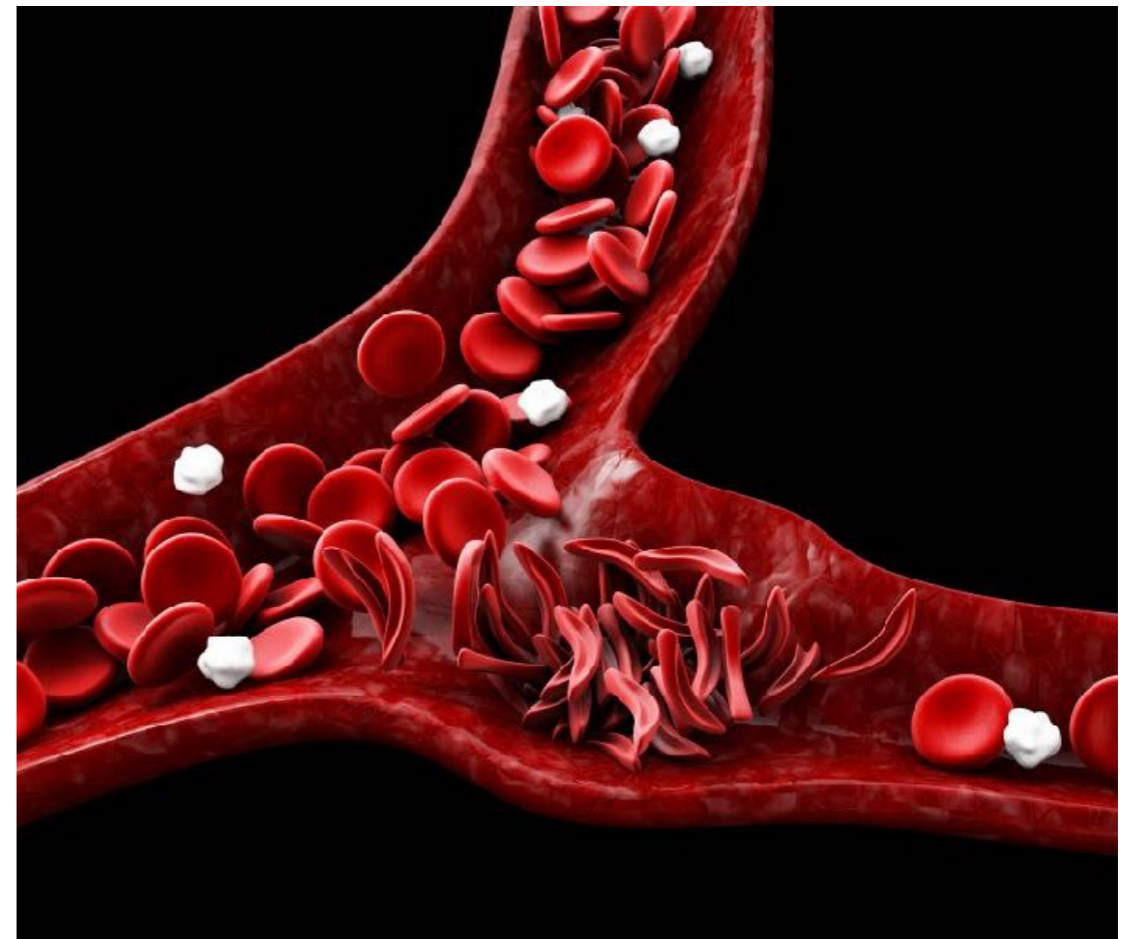
赤血球の酸素運搬能が低下する
「貧血症」を発症する

異常なヘモグロビン凝集体を持つ
赤血球のかたちが変形する

ヘモグロビンが疎水的な相互作用
で集まって繊維状の凝集体になる

ヘモグロビン表面のアミノ酸が
グルタミン酸（酸性）から
バリン（中性非極性）に変わる

中性非極性アミノ酸は
水に溶けにくい性質を持つ



小テスト：タンパク質の形と病気

小テストについて

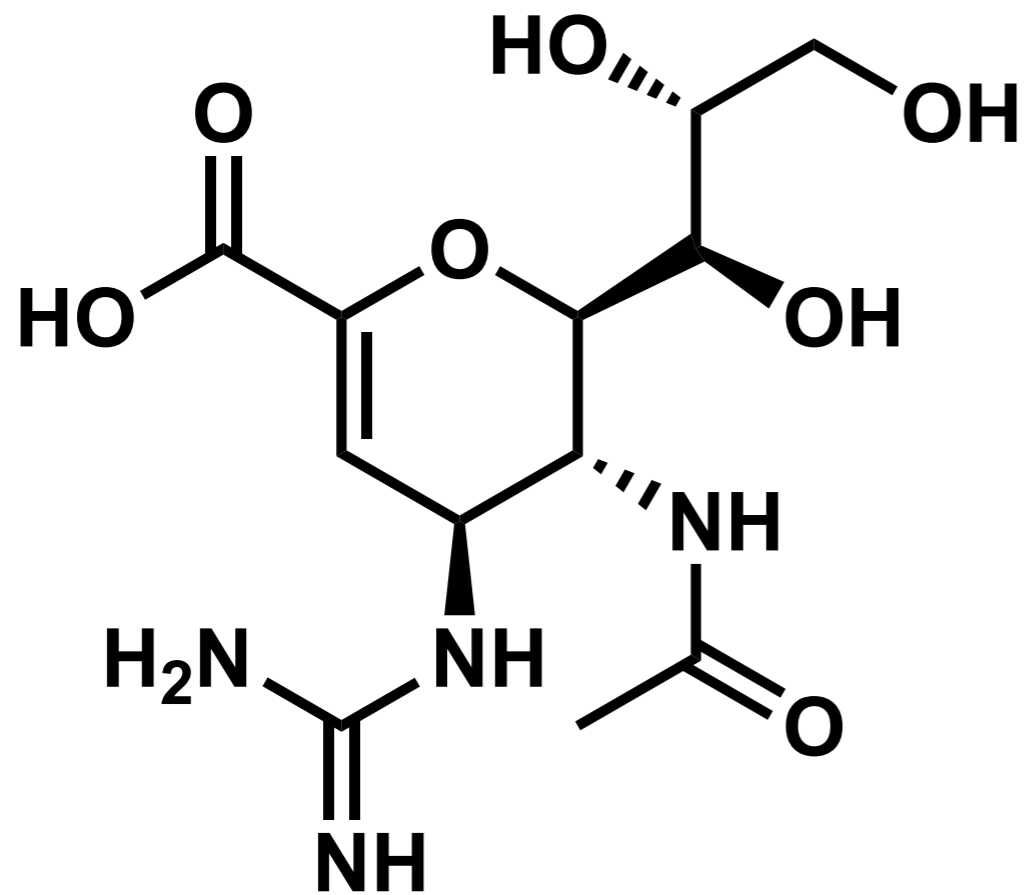
- 授業中に manaba で 小テスト を実施します
- 小テストを受講するときに、
下記の資料を参考にすることができます
 - ▶ 実験テキスト
 - ▶ 自分の 実験ノート
 - ▶ 自分の 予習レポート
- 他の人の回答を見たり、他の人の実験ノートや予習レポートを見たりすることはできません

小テスト：5分

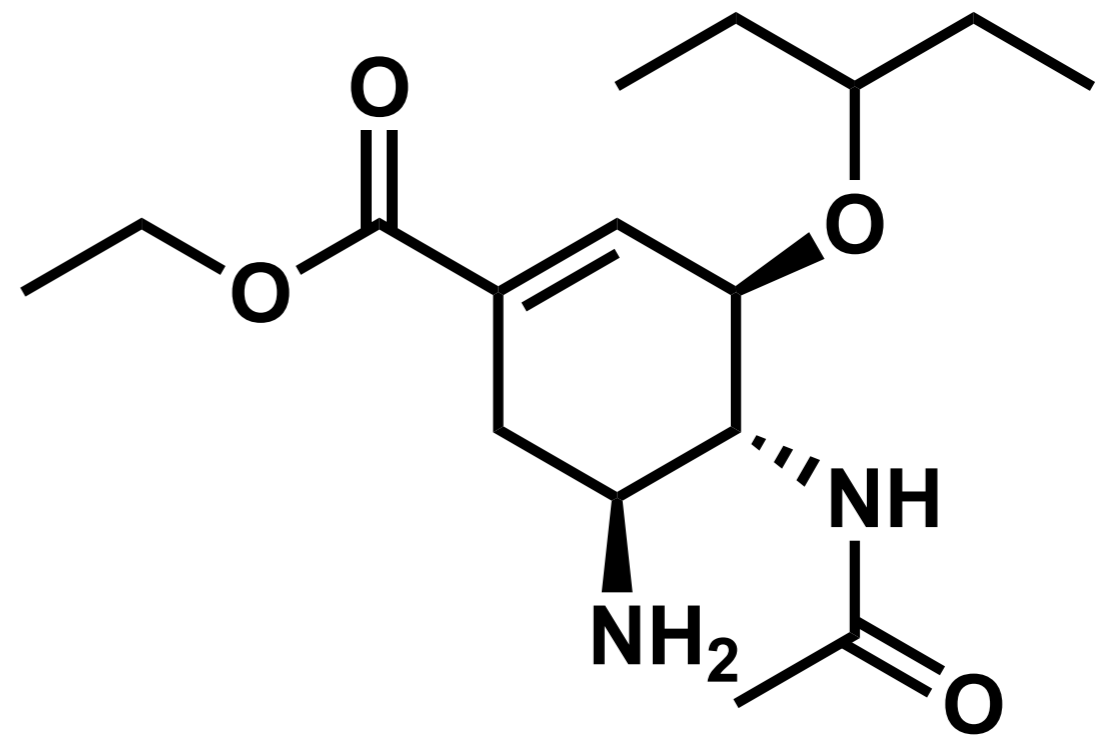
休憩時間：5 分

医薬品の「性質」を予測する

インフルエンザに罹ったときに飲んだ薬は？

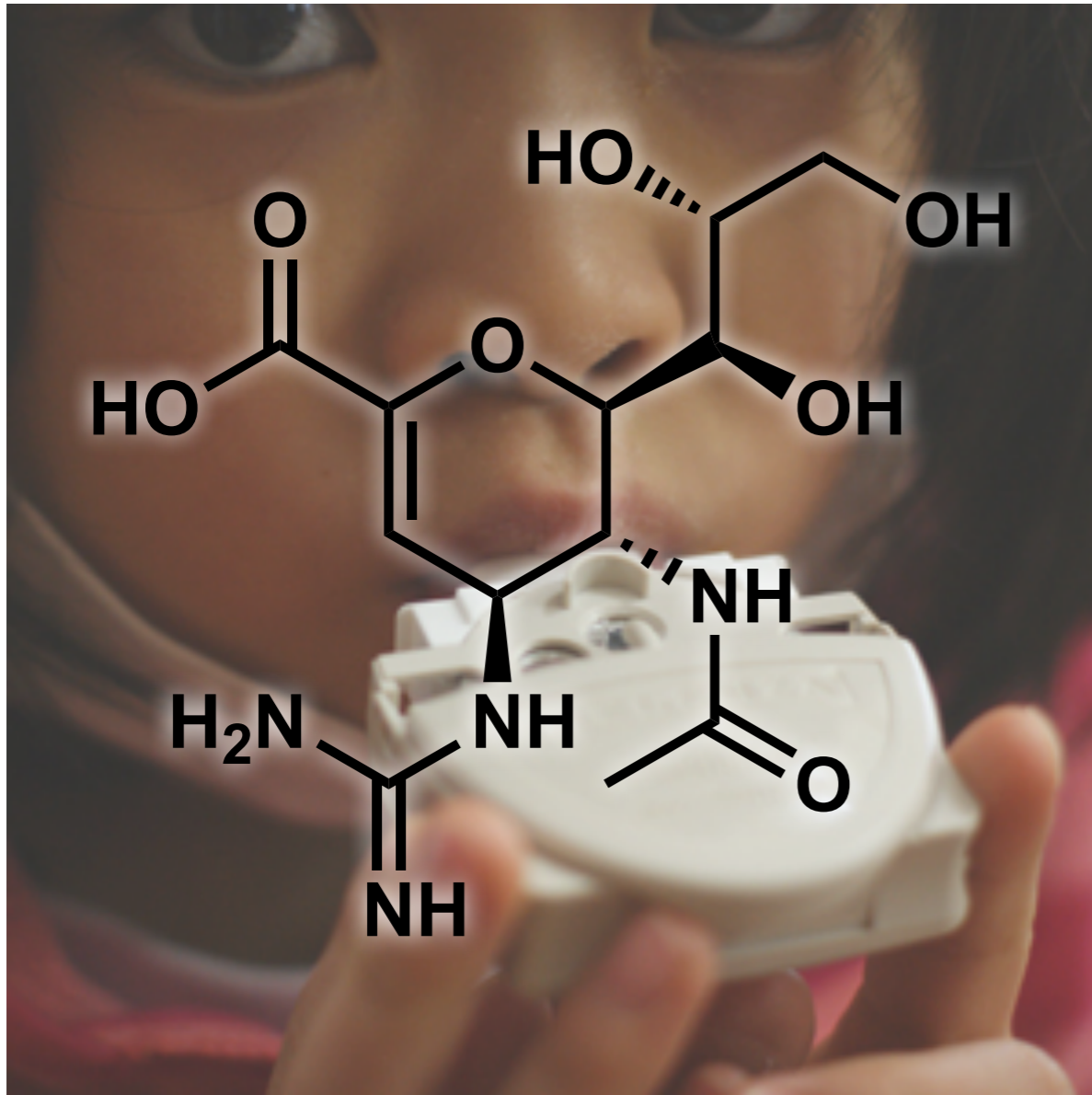


リレンザ



タミフル

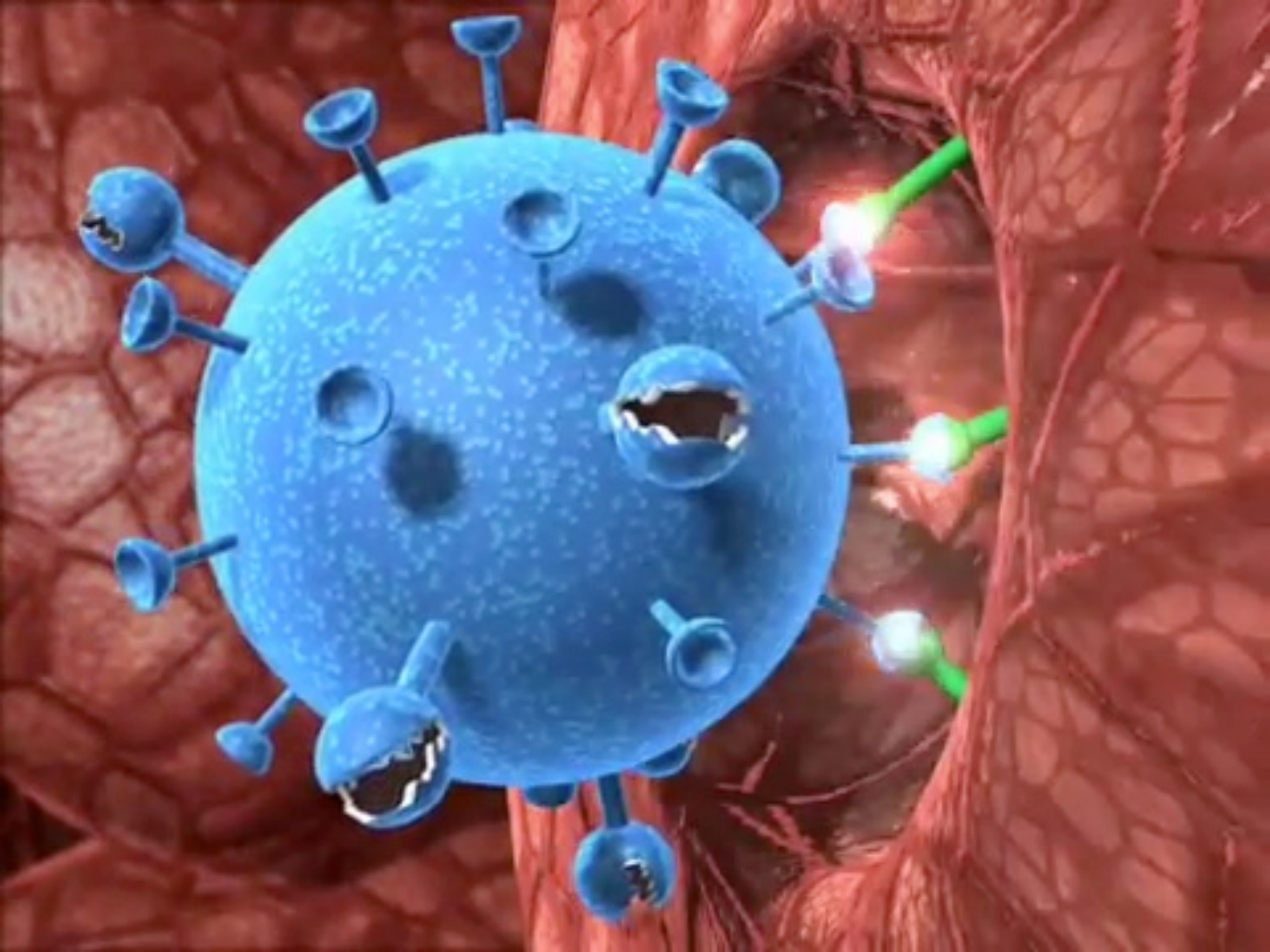
インフルエンザに罹ったときに飲んだ薬は？



リレンザ



タミフル

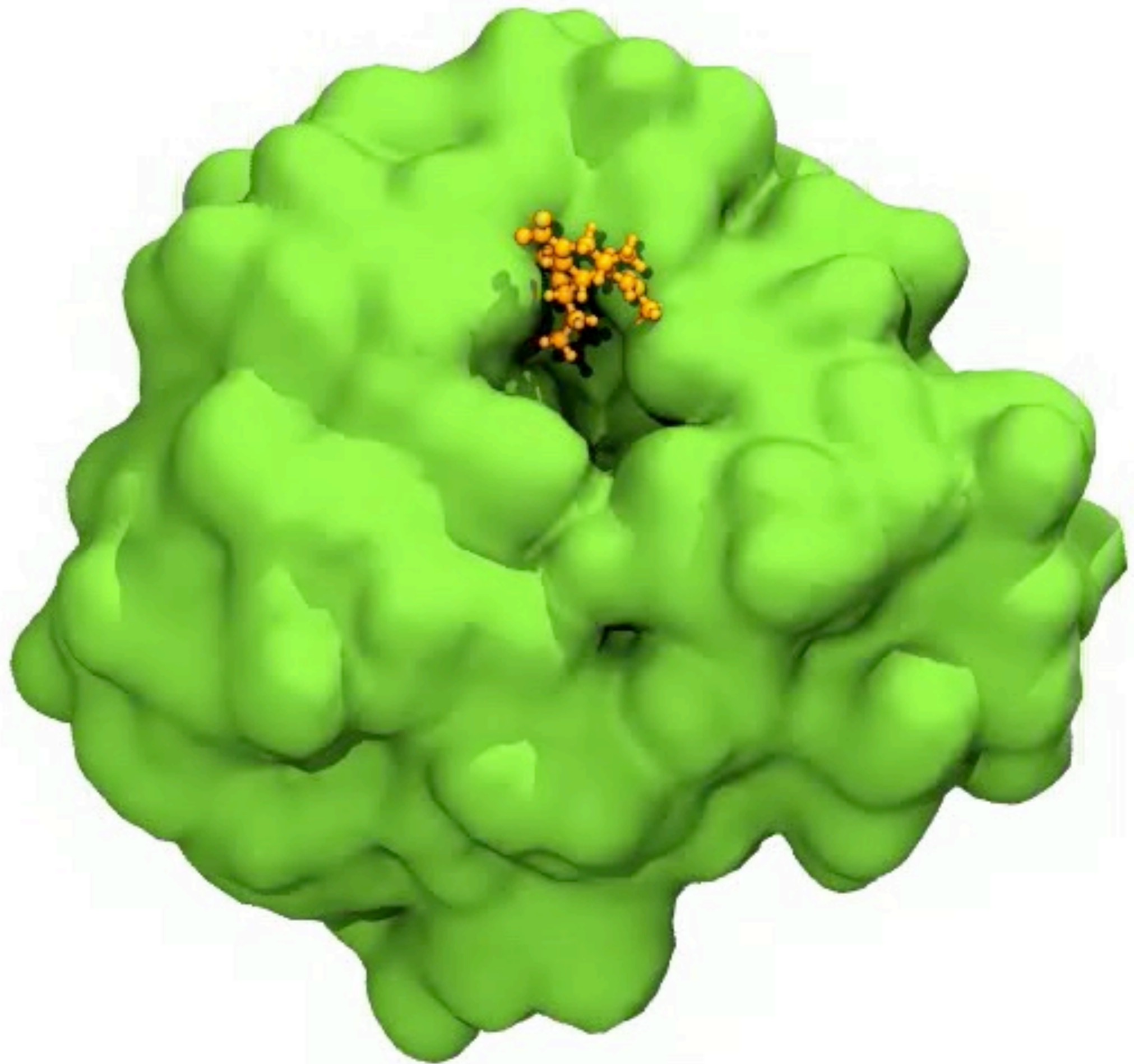


A 3D illustration of a joint, likely a knee, showing the femur (thigh bone) and tibia (shin bone) connected by a joint. The femur is blue and has a textured surface with small circular indentations. The tibia is green. A yellow, faceted, cylindrical object is positioned between the two bones, representing an inhibitor. The background is a reddish-brown, textured surface.

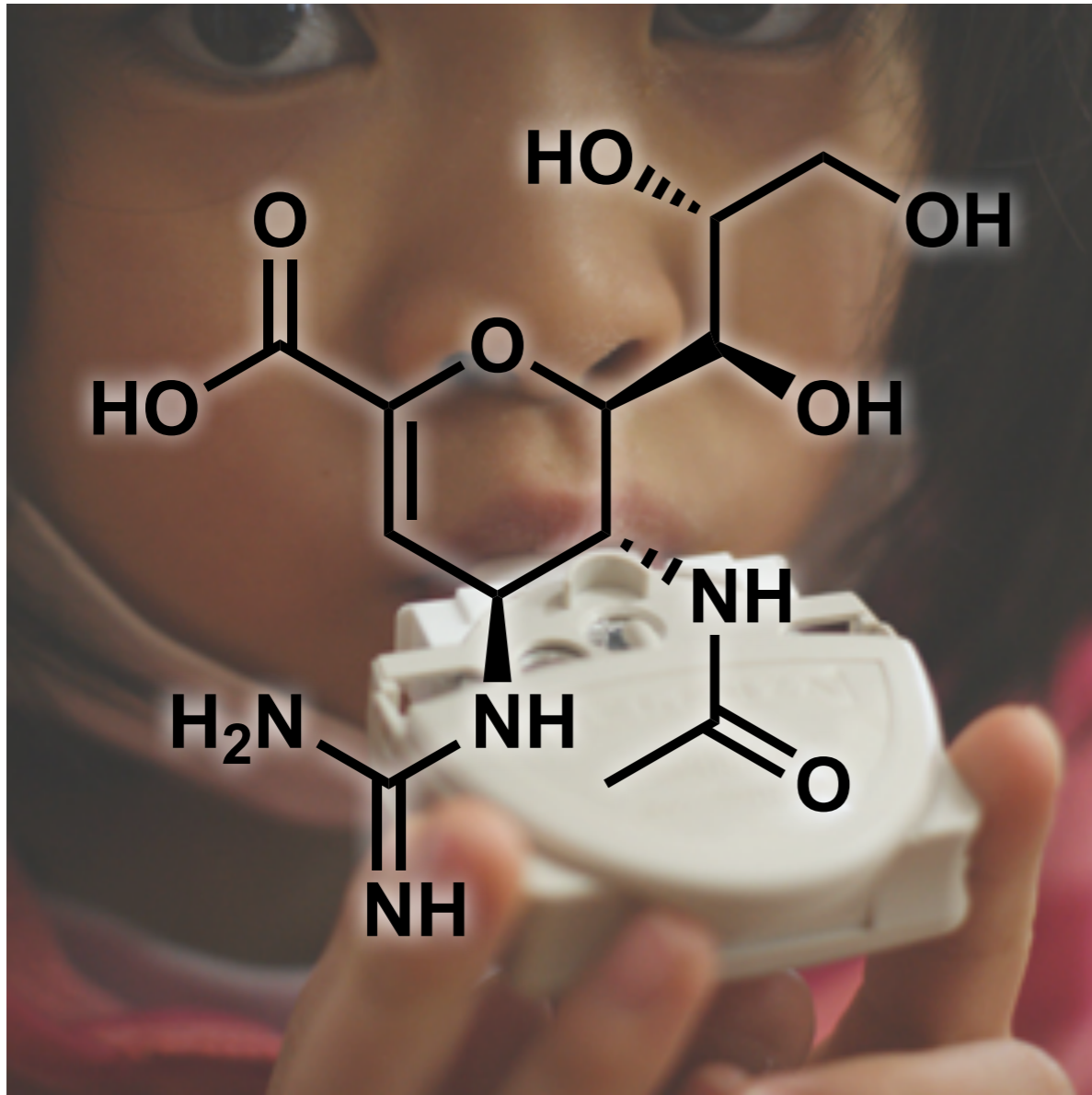
ノイラミニダーゼ

阻害剤

ノイラミニダーゼがシアル酸との結合を切断することを **阻害** する



インフルエンザ治療薬の化学的性質は？



リレンザ



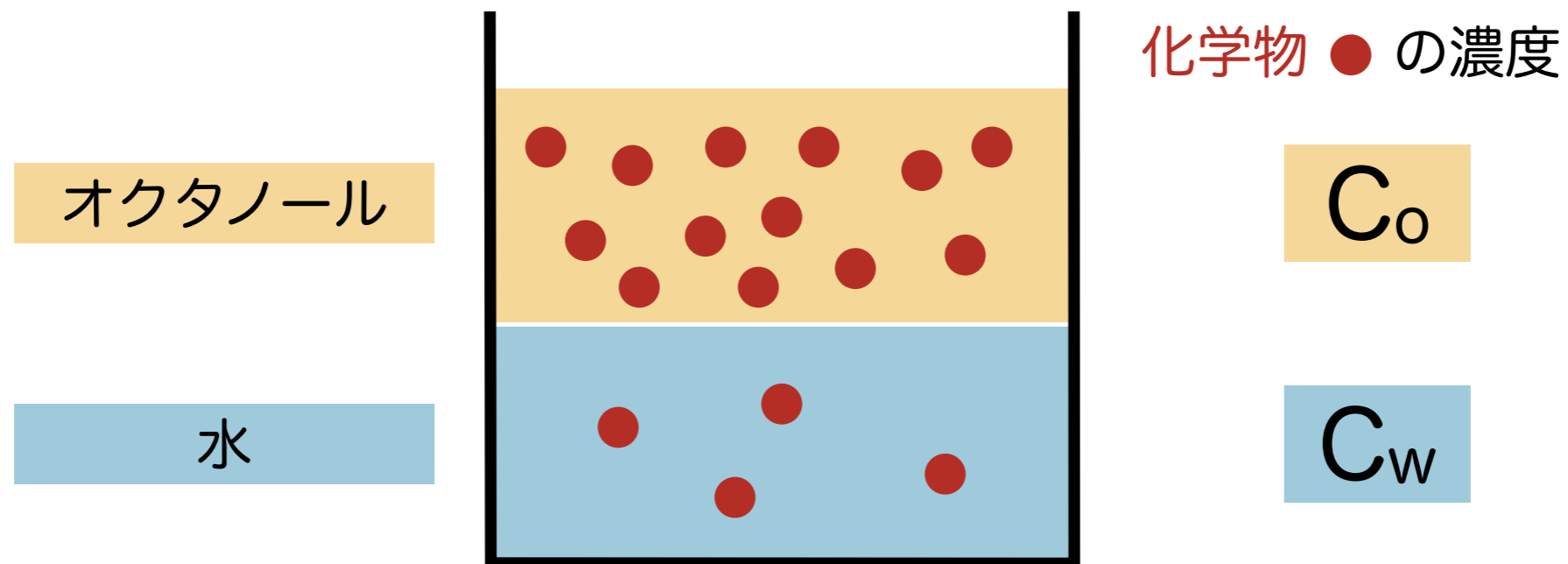
タミフル

油水分配係数 $\log P$ とは？

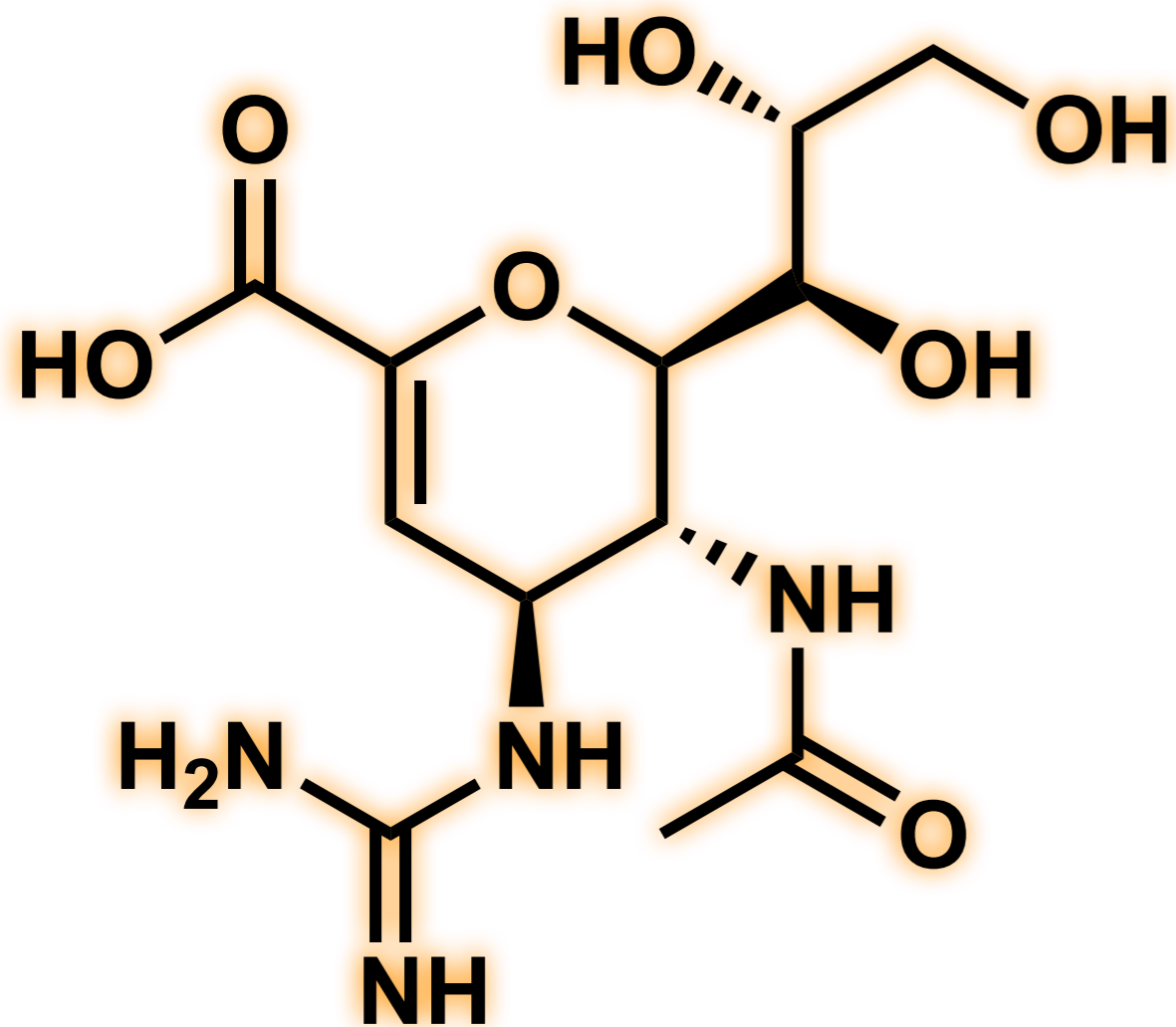
化合物の疎水性を表すための指標

化合物を「オクタノール」と「水」の混合物に溶かしたときの濃度比 ($P = C_o / C_w$) の対数

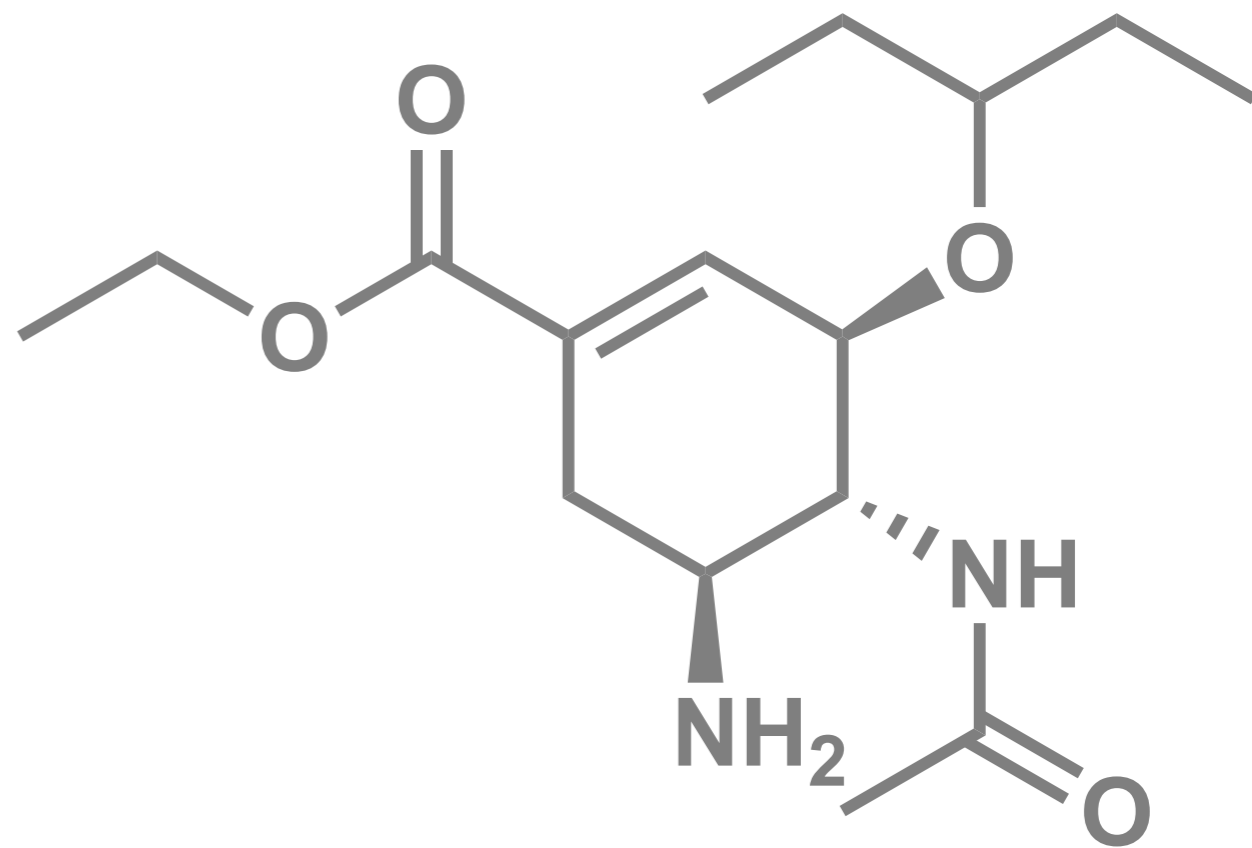
$\log P$ の値が大きい \rightarrow 疎水性が高い



リレンザの $\log P$ は？



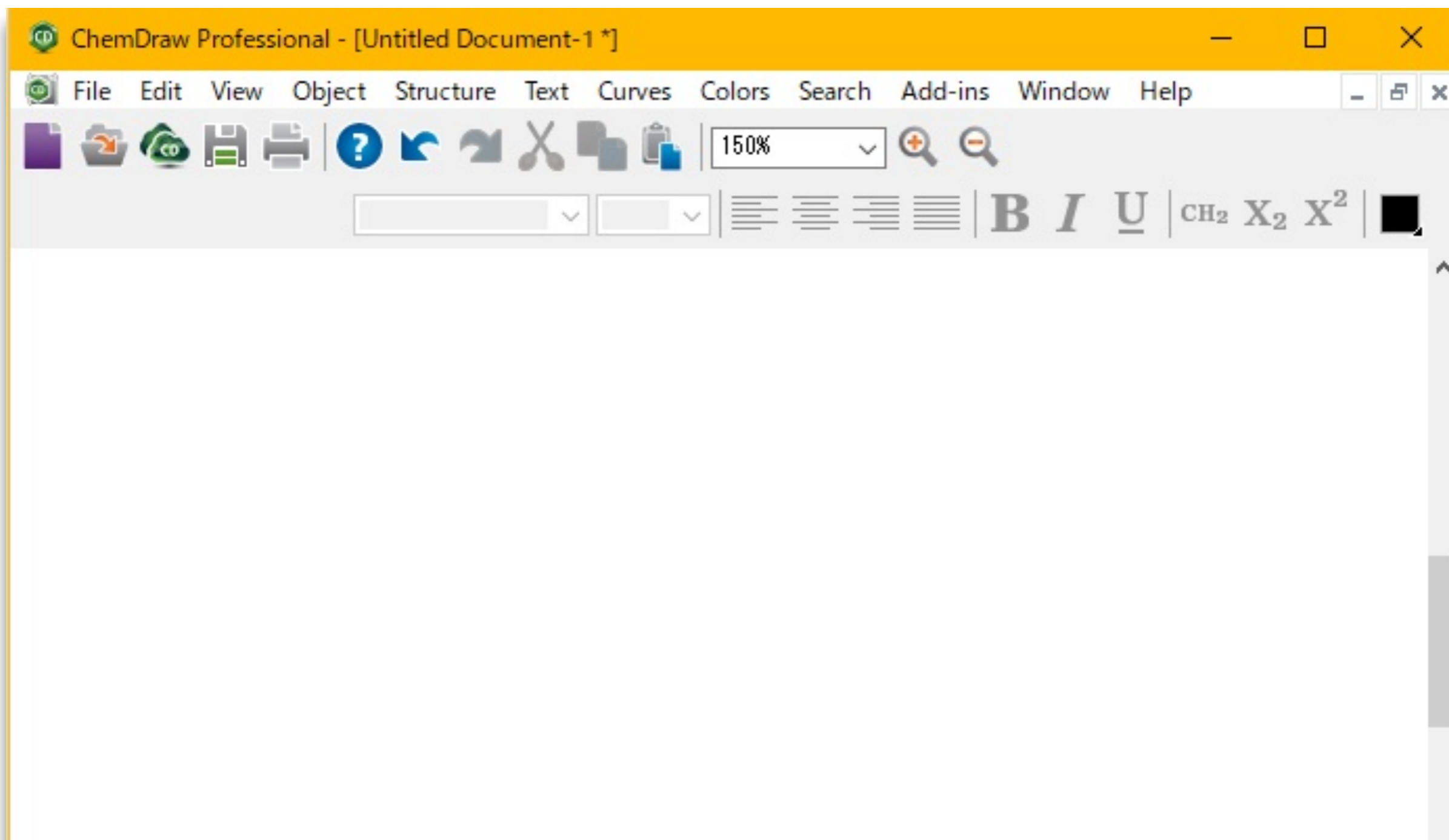
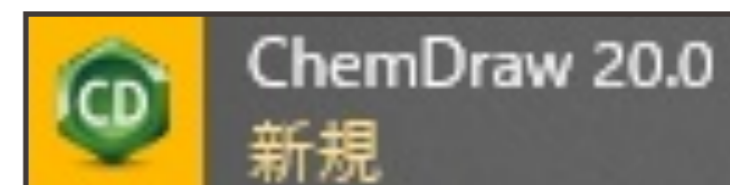
リレンザ



タミフル

分子の $\log P$ を調べる方法は？

スタートメニュー → ChemOffice →



リレンザの 化学構造 を 描く

The image shows a screenshot of the ChemDraw Professional software interface. The window title is "ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]". The menu bar includes "File", "View", "Object", "Structure", "Text", "Curves", "Colors", "Search", "Add-ins", "Window", and "Help". The toolbar contains various drawing tools, and the zoom level is set to 125%. The main canvas displays a simple black hexagon. On the left, a vertical toolbar is visible, with a red circle highlighting the hexagon tool and a red arrow pointing to it from the text "環構造" (Ring Structure).

リレンザの化学構造を描く

The image shows a screenshot of the ChemDraw Professional software interface. The main window displays the chemical structure of Riluzole, a benzodiazepine derivative. The structure features a central benzodiazepine ring system with several substituents: a methyl group, a propyl chain with a terminal vinyl group, and a propyl chain with a terminal vinyl group. The stereochemistry is indicated with wedged and dashed bonds.

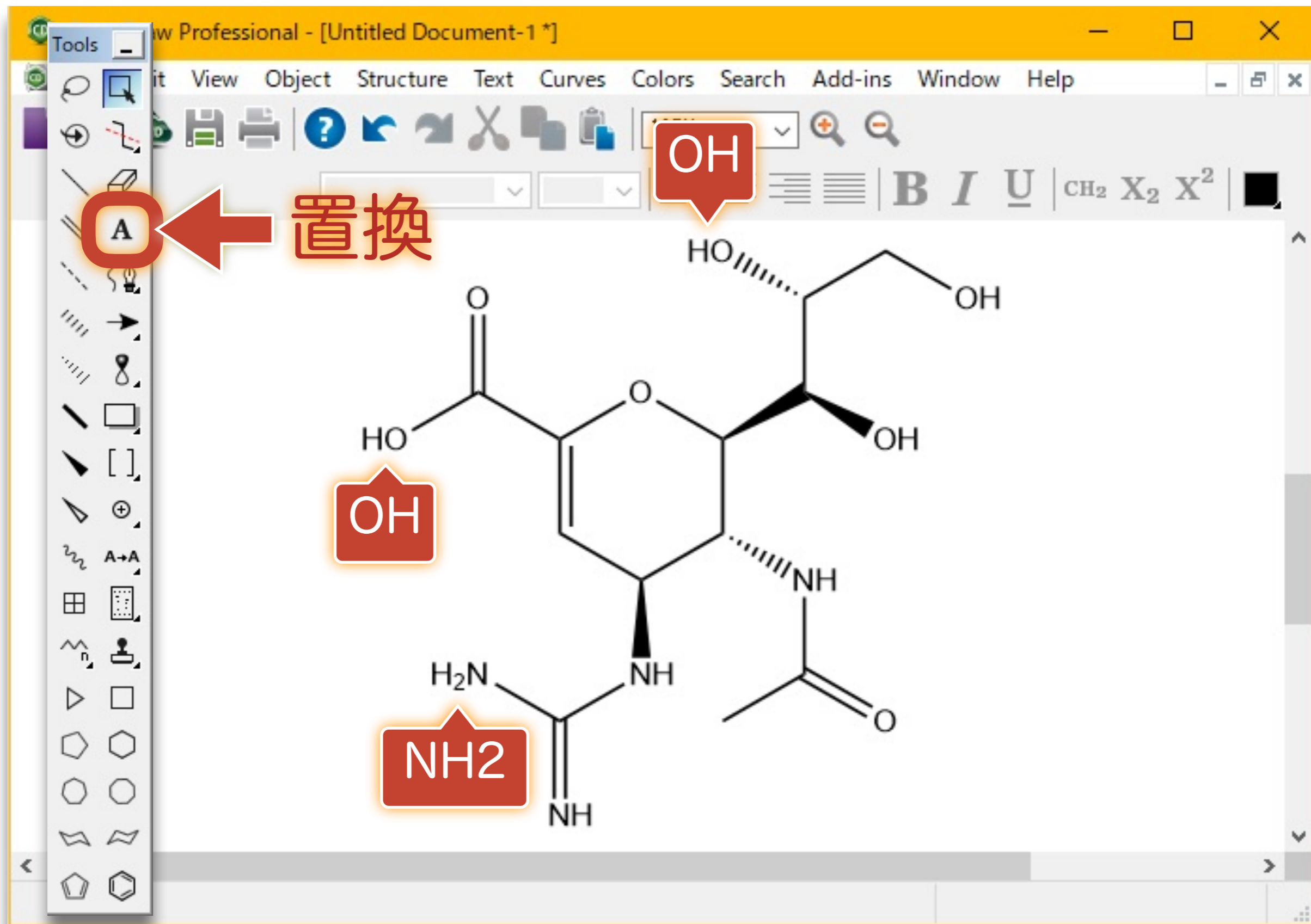
On the left side, the Tools palette is visible, with three tools highlighted by red circles and arrows:

- The top tool is the **Line** tool, used for drawing straight lines.
- The middle tool is the **Wedge** tool, used for drawing wedged bonds to indicate stereochemistry.
- The bottom tool is the **Dash** tool, used for drawing dashed bonds to indicate stereochemistry.

The text "結合" (Kasegou) is written in red above the highlighted tools, indicating the process of drawing bonds.

The software interface includes a menu bar (File, Edit, View, Object, Structure, Text, Curves, Colors, Search, Add-ins, Window, Help), a toolbar with various icons, and a status bar at the bottom.

リレンザの化学構造を描く



リレンザの 化学的性質 を調べる

The image shows a screenshot of the ChemDraw Professional software interface. The title bar reads "ChemDraw Professional - [Untitled Document-1 *]". The menu bar includes "File", "Edit", "View", "Structure", "Text", "Curves", "Colors", "Search", "Add-ins", "Window", and "Help". The "View" menu is open, displaying a list of options. A red arrow points to the "View" menu item, and another red arrow points to the "Show Chemical Properties Window" option, which is highlighted with a blue background. The main workspace displays a chemical structure of a molecule with two hydroxyl groups and an amide group. The "Show Chemical Properties Window" option is checked with a blue checkmark.

- View
- Show Crosshair (Ctrl+H)
- Show Rulers (F11)
- Show Main Toolbar
- Show HELM Monomer Toolbar
- Show BioDraw Toolbar
- Show General Toolbar
- Show Style Toolbar
- Show Object Toolbar
- Show Structure Toolbar
- Show Chemical Properties Window
- Show Periodic Table Window
- Show Character Map Window
- Show Chem3D HotLink Window
- Other Toolbars >
- Templates >
- Show Chemical Warnings
- Show Reaction Interpretation

リレンザの $\log P$ (CLogP) を調べる

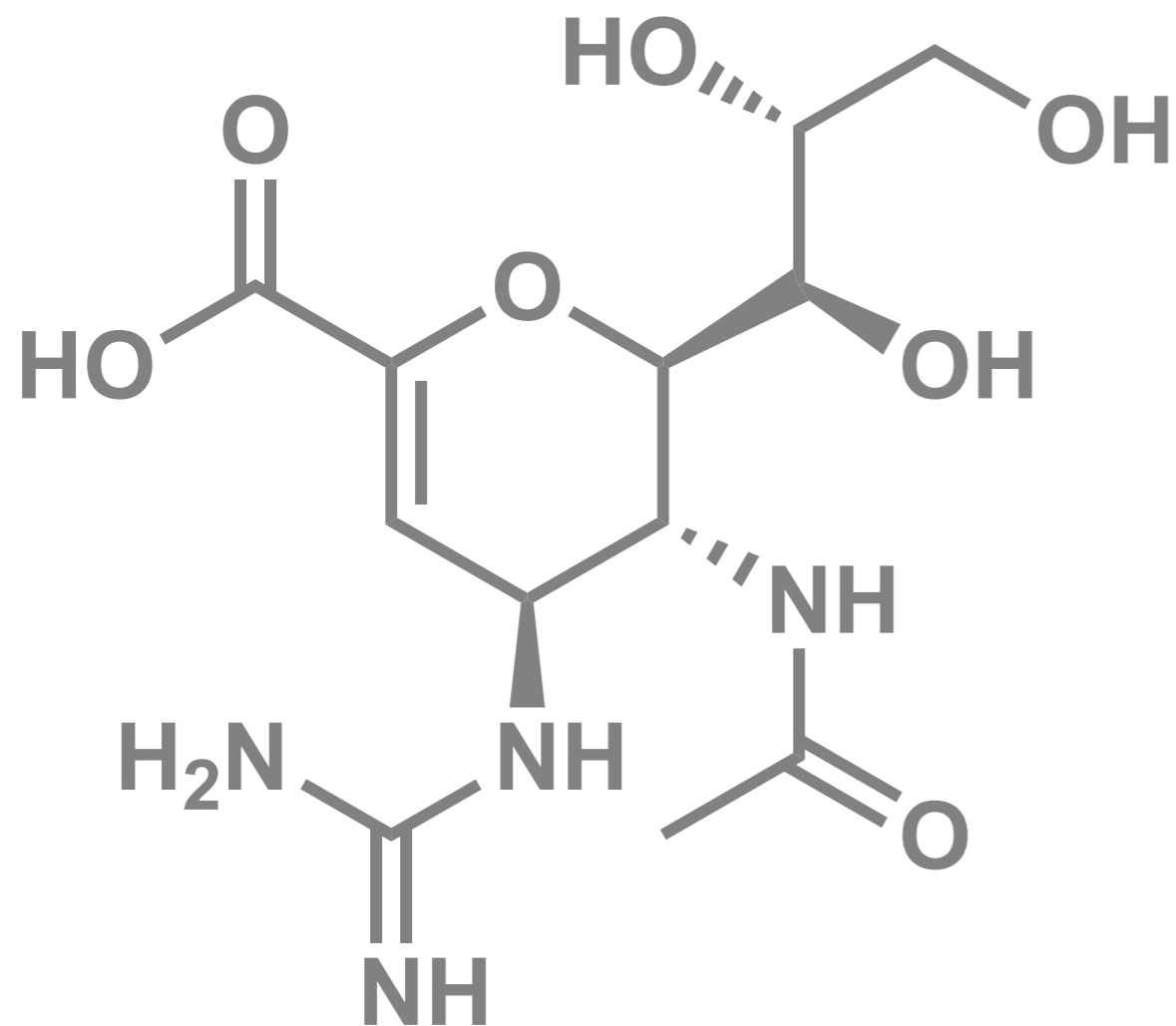


Chemical Properties

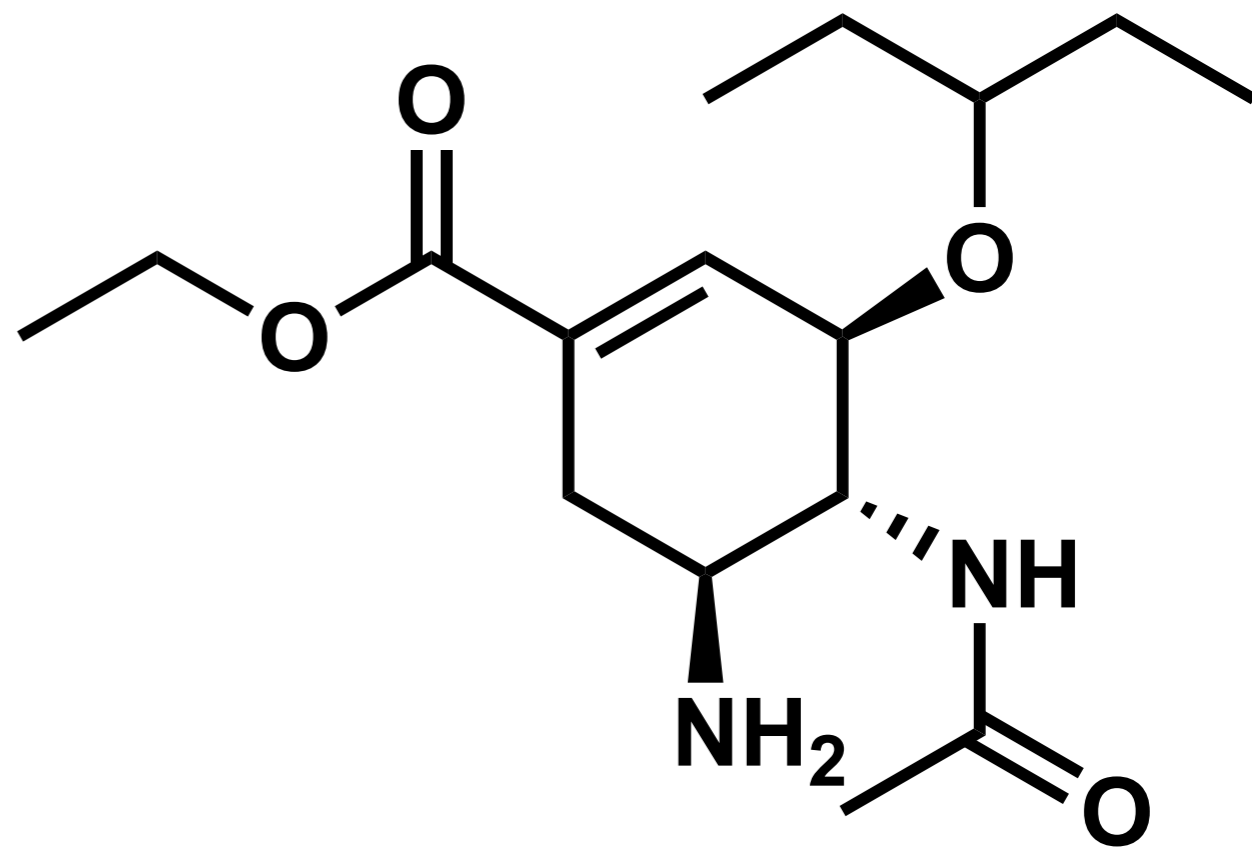
<input checked="" type="checkbox"/>	Boiling Point:	1260.1 [K]
<input checked="" type="checkbox"/>	Melting Point:	
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Temp:	1114.15 [K]
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Pres:	32.8 [Bar]
<input checked="" type="checkbox"/>	Critical Vol:	
<input checked="" type="checkbox"/>	Gibbs Energy:	-465.49 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	Log P:	-4.08
<input checked="" type="checkbox"/>	MR:	75.58 [cm ³ /mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	Henry's Law:	25.49
<input checked="" type="checkbox"/>	Heat of Form:	-1007.2 [kJ/mol]
<input checked="" type="checkbox"/>	+PSA:	198.22
<input checked="" type="checkbox"/>	CLogP:	-5.5556
<input checked="" type="checkbox"/>	CMR:	7.7505
<input checked="" type="checkbox"/>	LogS:	-0.6921
<input checked="" type="checkbox"/>	pKa:	3.030, ...

Paste Report

演習：タミフルの CLogP は？

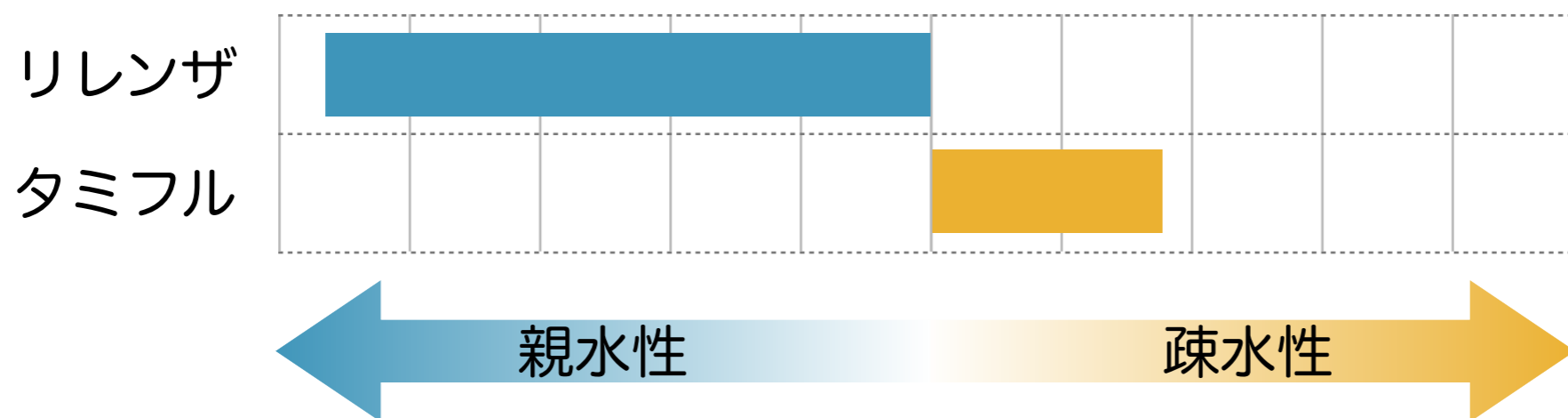
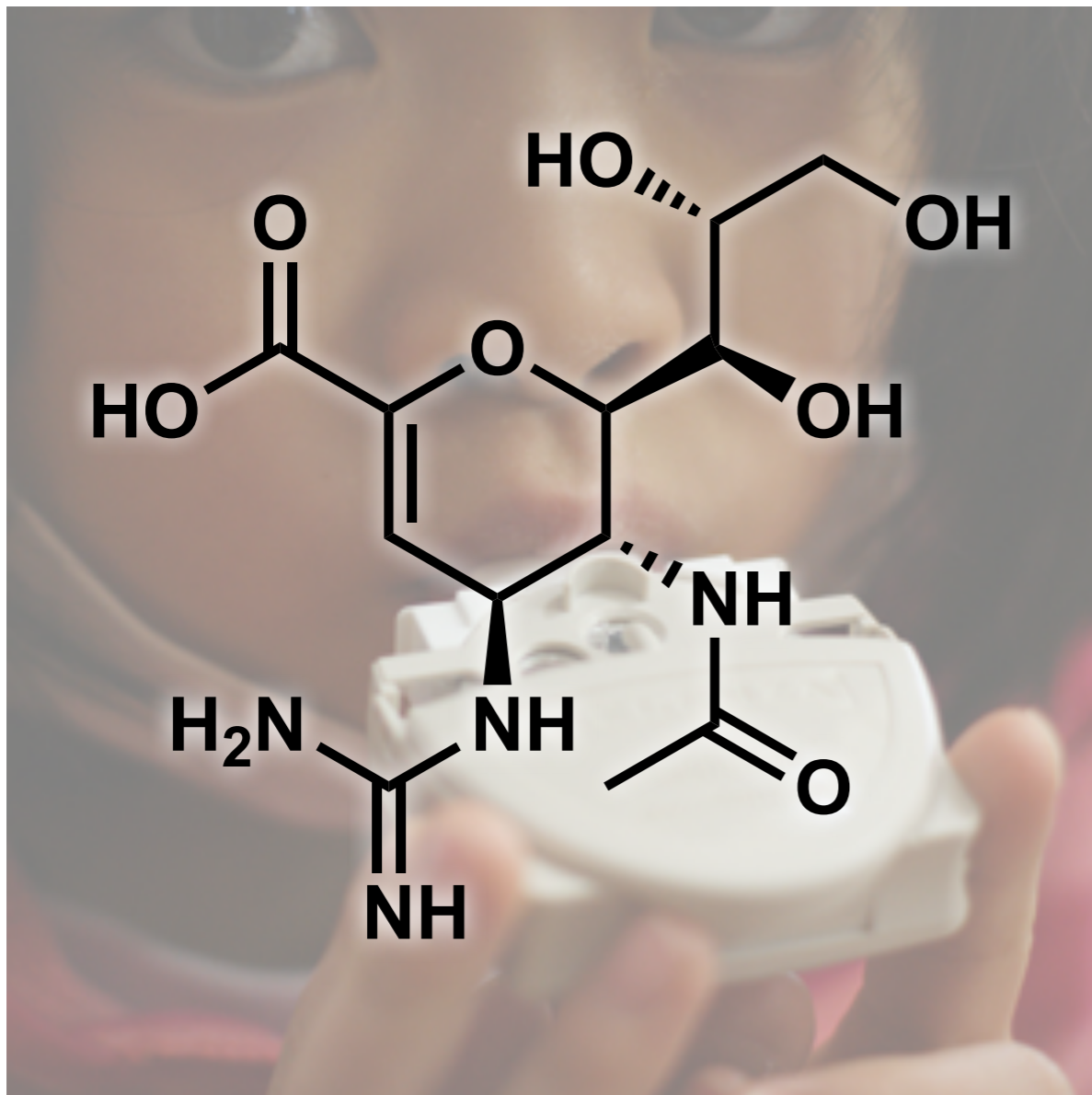


リレンザ



タミフル

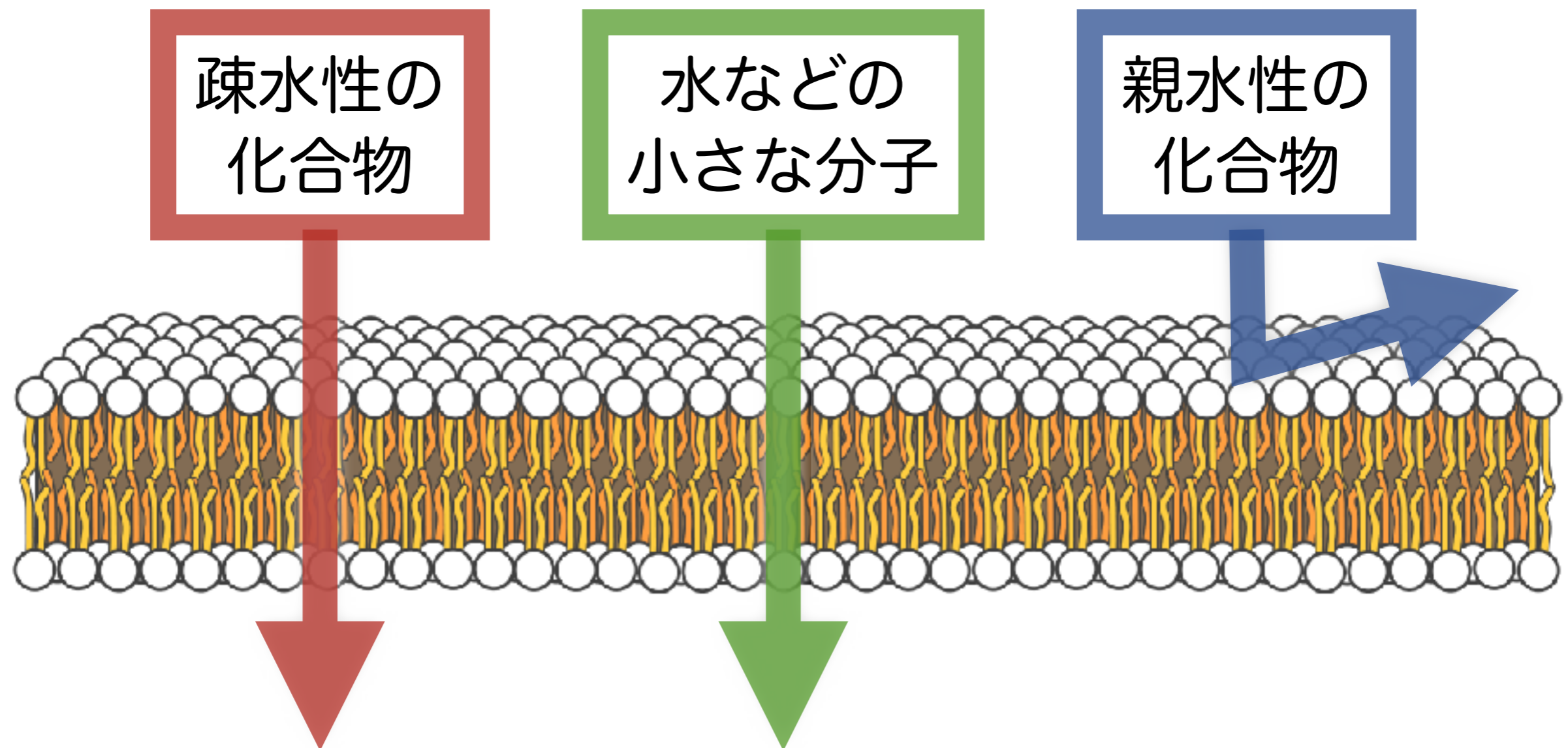
リレンザとタミフルの CLogP は？



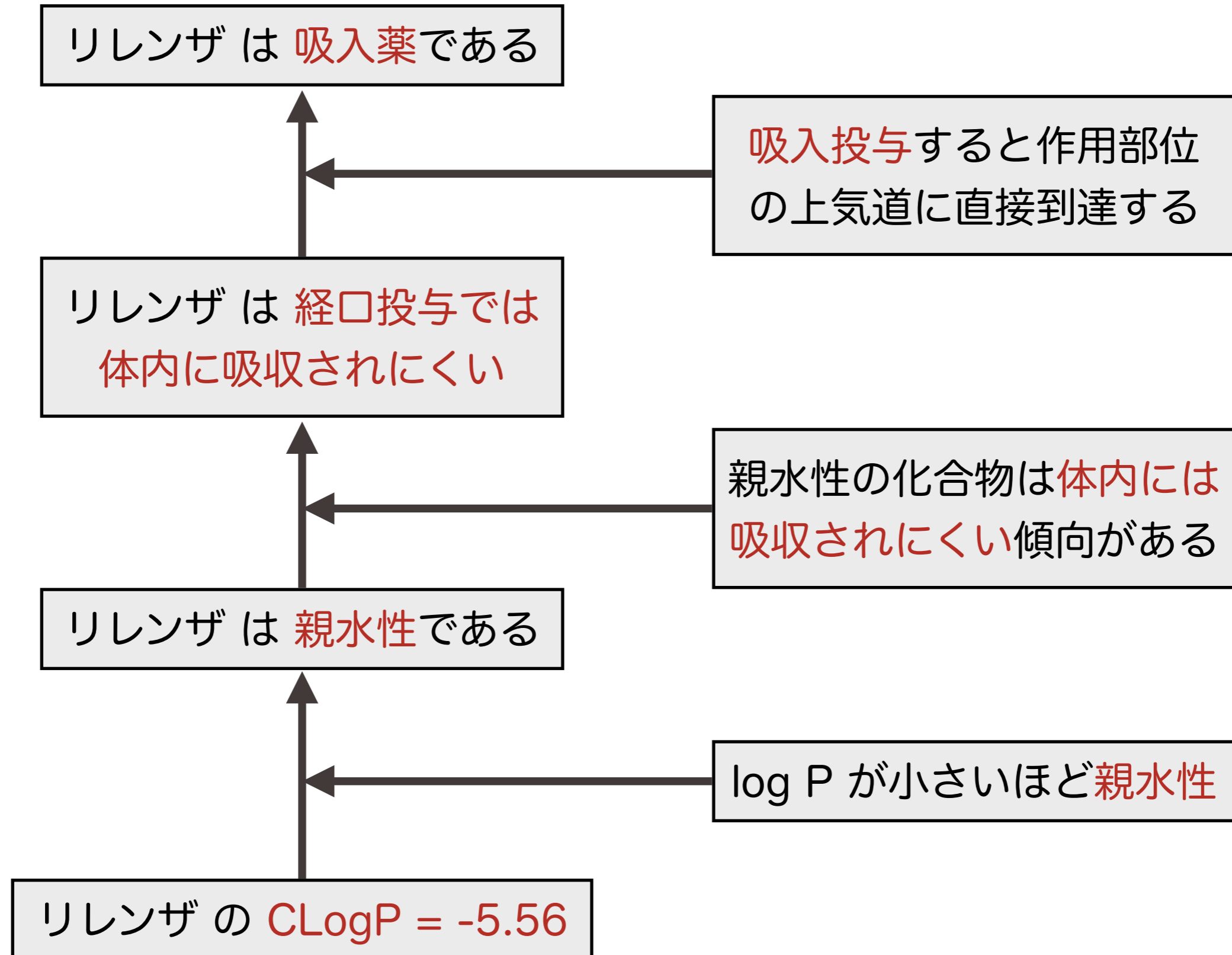
細胞膜（脂質二重膜）を通過できる物質は？

疎水性の化合物 や 水などの小さな分子 のみ
細胞膜を透過できる → 体内に効率よく吸収される

親水性の化合物 は 体内に吸収されにくい



リレンザの特徴は？



休憩時間：5分

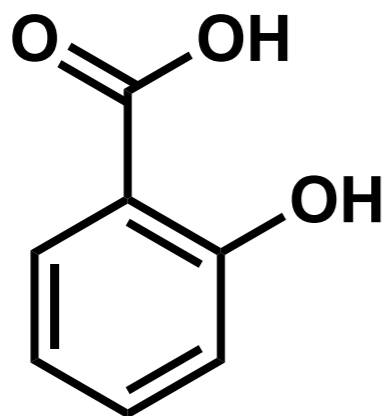
演習：分子の「性質」を予測する

演習レポートについて

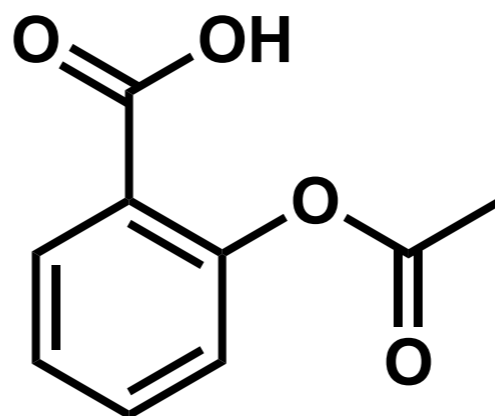
- 授業中に完成させて、最終版を提出します
 - ▶ 実験ノートに下書きをすることをお勧めします
- 教員やTAのサポートやアドバイスを受けながら取り組むことができます
- 他の受講生と相談することもできます
 - ▶ お互いに助け合う（ピア・サポート）の態度をプラスに評価します
- ただし、他の人のレポートを書き写すだけということはありません（※教員・TAが注意します）

課題 1

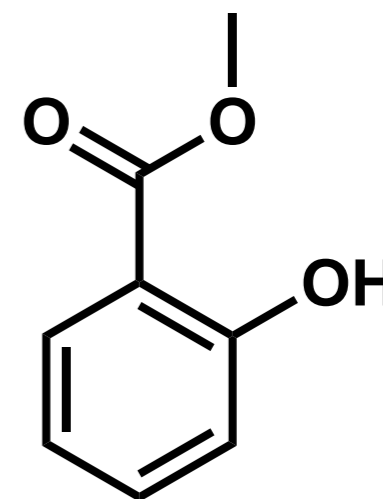
次の分子について、ChemDraw で **CLogP** を調べよ。



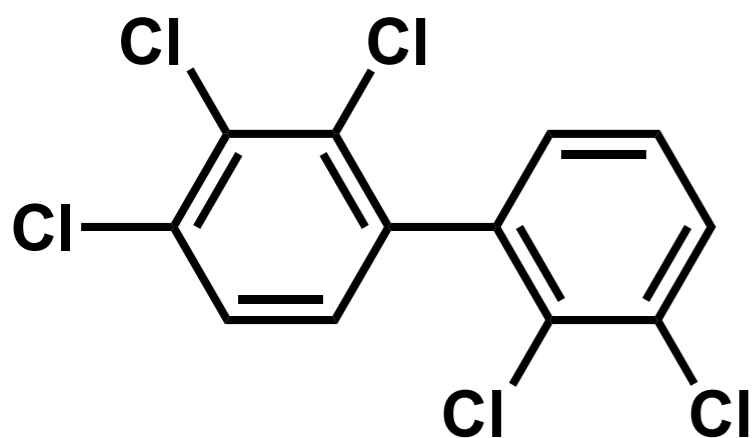
サリチル酸



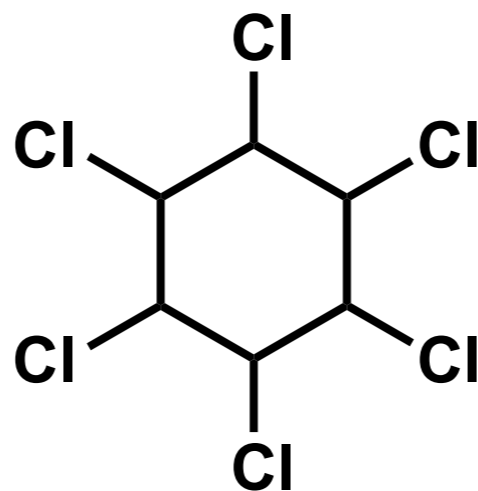
アセチルサリチル酸



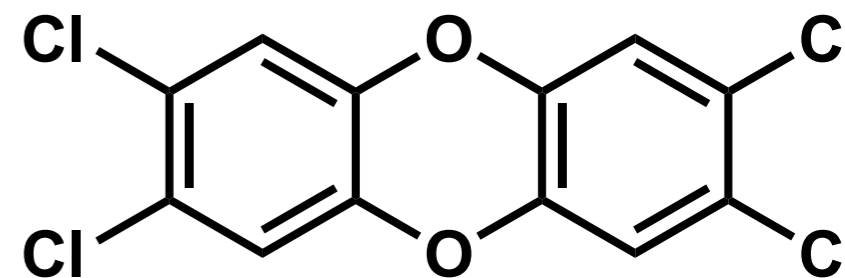
サリチル酸メチル



ポリ塩化ビフェニル
(PCB)



ベンゼンヘキサクロリド
(BHC)



ダイオキシン
(TCDD)

課題 2

アセチルサリチル酸 と サリチル酸メチル は
どちらも鎮痛・解熱・消炎などの作用を持つ。

アセチルサリチル酸 は 主に「飲み薬」として、
頭痛の治療などに用いられている。

サリチル酸メチル は 主に「貼り薬」として、
筋肉痛の治療などに用いられている。

サリチル酸メチルが、アセチルサリチル酸よりも
「貼り薬」としての用途に向いている理由は何か。

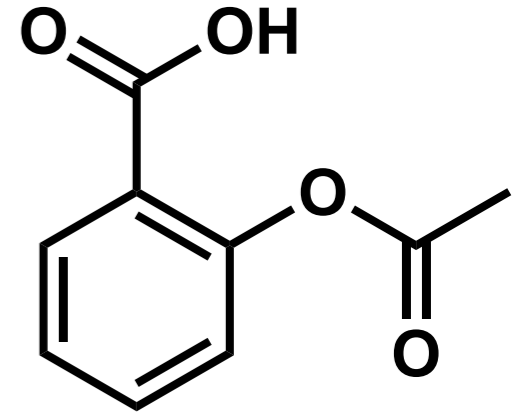
この2つの化合物の CLogP の値 に基づいて、
その理由を説明せよ。

課題 2

アセチルサリチル酸を含む「飲み薬」



成分 (2錠中)アセチルサリチル酸・・・660mg/
合成ヒドロタルサイト(ダイパッファーHT)・・・200mg
※添加物として、トウモロコシデンプン、ステアリン酸Mg、ヒドロキシプロピルメチルセルロース、酸化チタン、マクロゴール、青色1号を含有する。
プリン系の成分は、含まれておりません。

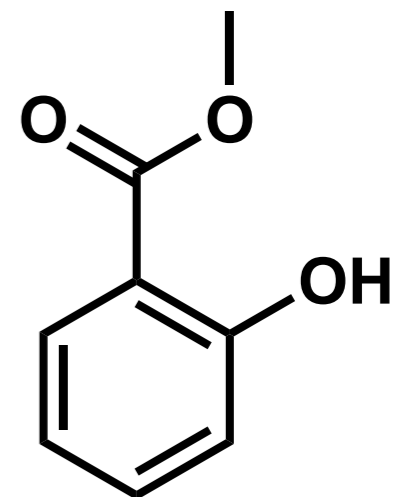


サリチル酸メチルを含む「貼り薬」



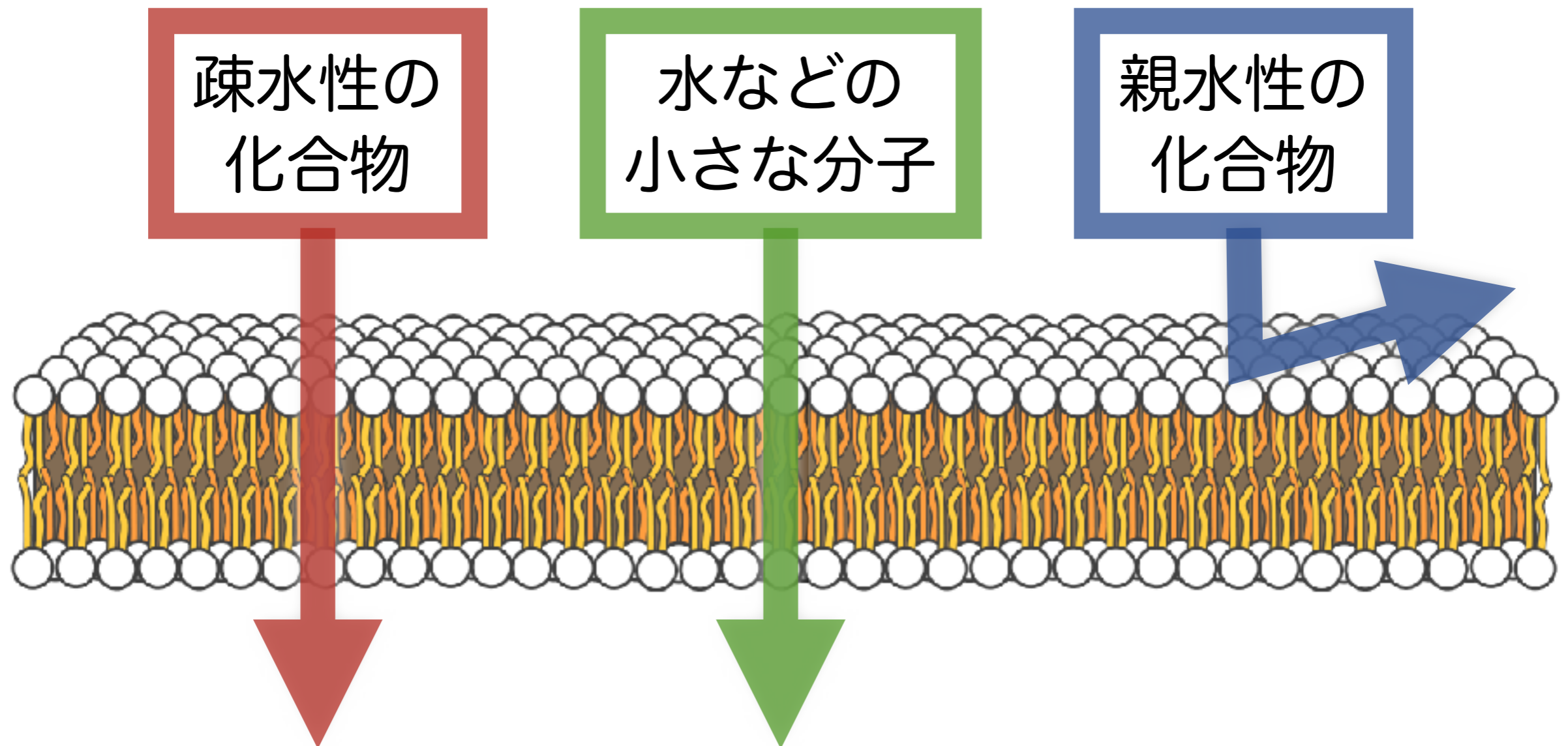
成分・分量

成分含量(膏体100g中)
サリチル酸メチル・・・6.29g
l-メントール・・・5.71g
ビタミンE酢酸エステル・・・2.00g
dl-カンフル・・・1.24g



課題2のポイント

貼り薬は、皮膚から吸収される必要がある。
皮膚の角質層には脂質が多く含まれるため、
疎水性の化合物の方が角質層に移行しやすい。



課題 3

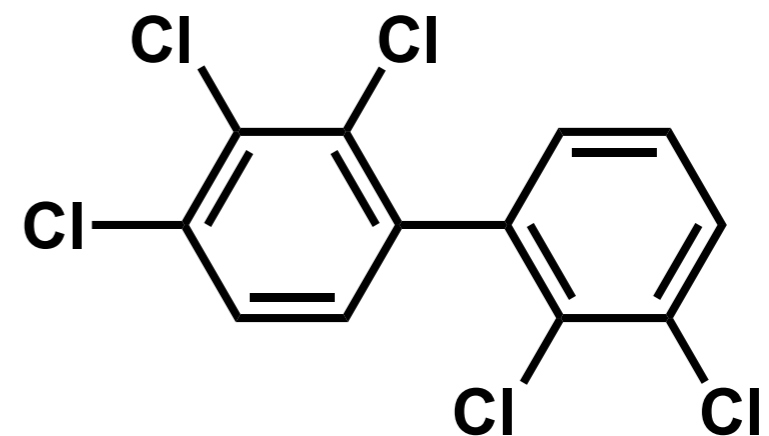
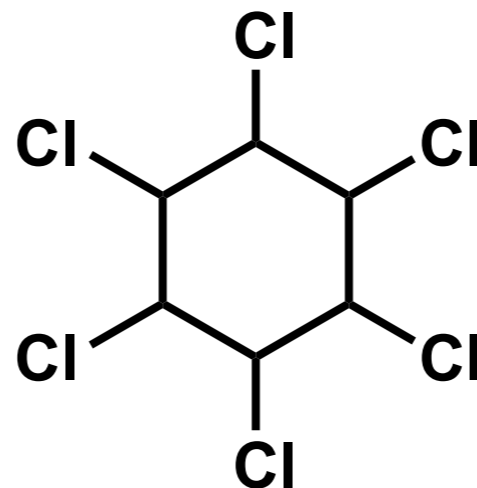
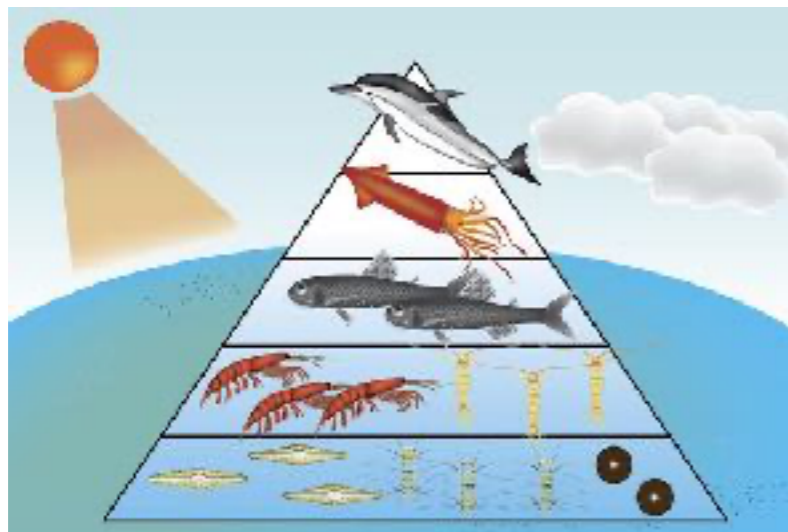
ポリ塩化ビフェニル (PCB) やベンゼンヘキサクロリド (BHC) は、環境中に放出されると、野生生物やヒトの内分泌系を攪乱させる危険性が指摘されている (→ 環境ホルモン)。

この2つのうち、PCB は BHC に比べて生体内の脂質中などに蓄積しやすく、生態系での食物連鎖を経て濃縮しやすい (生物濃縮)。

PCB の方が「生物濃縮」が起こりやすい理由について、2つの分子の CLogP の違いに基づいて説明せよ。

課題 3

例：海洋生態系に含まれる BHC と PCB の濃度



	BHC	PCB
植物プランクトン	0.26	1.7
ハダカイワシ	2.2	43
スジイルカ	77	5200

(単位：ppb)

課題3のポイント

疎水性の化合物は、細胞膜を透過しやすく、
生体内で脂肪などに蓄積しやすい

親水性の化合物は、代謝・排出されやすい

