

## 分子機能工学

2 単位 (選択)

### Biomolecular Design

堀 均・教授 / 環境創生工学専攻 生命テクノサイエンスコース 生物機能工学講座, 宇都 義浩・准教授 / 環境創生工学専攻 生命テクノサイエンスコース 生物機能工学講座

【授業目的】 生体機能修飾物質 (特に生理活性物質や医薬品) の設計, 合成, 生物活性の基礎となる分子機能工学的概念としての “医薬品エレクトロノミクス medicinal electronics” について講述する。

【授業概要】 分子機能工学に関する重要な基礎的な概念としての分子軌道論による生体機能修飾物質 (特に生理活性物質や医薬品) の生体機能分子設計について解説し, “医薬品エレクトロノミクス medicinal electronics” 的思考力を向上させる。

【授業形式】 講義

【キーワード】 生体機能分子設計, 分子軌道論

【関連科目】 『生体高分子化学特論』 (0.5)

【到達目標】

1. 分子機能工学手法としての分子軌道論を理解し, 実際, Hückel 法を使ってエチレンからベンゼンまでの分子軌道を手計算で求める。
2. medicinal electronics 的思考力の向上のため, 簡単な生体機能修飾作用物質の分子軌道計算を実践し, それらの物性や生物活性を定量的に論じることにより, 分子軌道論の果実を味わう。

【授業計画】

1. 分子機能工学と分子軌道概念
2. 酵素反応と分子軌道
3. 量子論的原子構造と分子の結合
4. 分子構造と混成軌道概念. レポート 1
5. ヘテロ分子を含む構造. レポート 1 についての議論
6. 中間体の構造. レポート 2
7. 分子軌道計算 1: 局在  $\pi$  結合. レポート 2 についての討論
8. 分子軌道計算 2: 局在  $\pi$  結合. レポート 3
9. 分子軌道計算 3: 局在  $\pi$  結合. レポート 3 について議論
10. 分子軌道計算 4: 非局在  $\pi$  結合 (ブタジエン). レポート 4
11. レポート 4 についての総合討論
12. 分子軌道計算 5: 非局在  $\pi$  結合 (シクロブタジエン). レポート 5
13. レポート 5 についての総合討論
14. 分子軌道計算 6: 非局在  $\pi$  結合 (環状:ベンゼン). レポート 6
15. レポート 6 についての総合討論
16. 「分子機能工学」についての総合討論

【成績評価基準】 課した全課題レポート (100%) で評価する。レポートはそれぞれ 100 点満点で評価し, すべてのレポートが 60 点以上の場合をもって合格とする。

【教科書】 齋藤勝裕著「構造有機化学」(三共出版) および平山令明著「ブルーバックス実践量子化学入門」(講談社) の付録 CD-ROM 「WinMOPAC Version 3.0.3 (Trial)」

【授業コンテンツ】 <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=216878>

【対象学生】 他学科学生も履修可能

【連絡先】

⇒ 堀 (M 棟 821, 088-656-7514, hori@bio.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 月曜日 11:55-12:50)

【備考】 授業を受ける際には 2 時間の授業時間毎に 2 時間の予習と 2 時間の復習をしたうえで授業を受けることが, 授業の理解と単位取得のために必要である。