

薬品物理化学特論

Physical Chemistry

2 単位 隔年 (後期)

中馬 寛 (授業責任者)・教授 / 創薬科学専攻

【授業目的】学部4年次までの物理化学等の基礎知識を前提に、生体関連分子の機能・活性・構造の電子・分子レベルからの解析方法に基づいた論理的創薬の考え方を習得する。また論理的創薬おける最新の研究・開発の動向を紹介する。

【授業概要】論理的創薬に必要な理論化学の基礎知識の習得、応用および最新の論理的創薬の実例の紹介をする。

【履修上の注意】講義の一部は受講生の発表形式で行う。e-learning も今後取り扱う予定である。

【授業計画】

1. オリエンテーション
2. 分子科学計算概説
3. 分子力学法
4. 分子動力学法
5. 分子軌道法 (1)
6. 分子軌道法 (2)
7. 分子軌道法 (3)
8. 分子科学計算による創薬へ論理的アプローチ-の実例 (1)
9. 分子科学計算による創薬へ論理的アプローチ-の実例 (2)
10. 分子科学計算による創薬へ論理的アプローチ-の実例 (3)
11. 定量的構造活性相関解析概説 (レポート)
12. 創薬へ定量的構造活性相関解析の応用の実例 (1)
13. 創薬へ定量的構造活性相関解析の応用の実例 (2)
14. 創薬へ定量的構造活性相関解析の応用の実例 (3)
15. 講義のまとめ
16. 定期試験 (最終レポート)

【成績評価】発表内容およびレポート等により評価する。

【授業コンテンツ】 <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=217088>

【連絡先】

⇒ 中馬 (088-633-7257, hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 講義終了後1時間ほど (e-mail により時間調節を適宜行う場合もあります))

【備考】

- ◇ 参考文献等は随時指示、また必要なプリントを随時配付する。
- ◇ 平成 23 年度後期開講