

## 情報薬科学 (創製理論化学)

1 単位 (選択) 3 年 (前期)

## Pharmacoinformatics

中馬 寛・教授 / 創製薬科学科 創製学講座 創製理論化学

【授業目的】理論計算化学及びケモ・バイオインフォマティクス等の情報化学は今日、研究室や実験室のレベルを超えて、製薬関連企業等においても需要が大きい基盤技術となっている。本講義では原子・電子レベルからの生体分子の活性・機能発現メカニズム及び以上に基づく論理的創薬の基礎を習得する。

【授業概要】本講義では薬物-受容体相互作用に主眼を置いて計算化学、情報化学等についての基礎的方法を概説する。さらに以上の論理的解析法を用いた生体分子の機能・活性の定量的予測 (定量的構造活性相関解析) について創薬の実例をまじえて説明する。

【授業形式】講義

【履修上の注意】の講義は分析化学2, 基礎有機化学1~3 および構造生物学で学習したことを前提に行うので、これらの講義の要点を復習しておいてください。

【到達目標】

## 1. 薬物分子間相互作用

- 1) 薬物分子や受容体の立体構造およびその動的挙動について説明できる
- 2) 薬物分子と受容体の構造相補性について分子間相互作用の観点から説明できる。
- 3) 薬物分子間の構造類似性について分子間相互作用の観点から説明できる。
- 4) 静電相互作用, 立体相互作用, 疎水相互作用, 水素結合について説明できる。

## 2. 理論計算化学・情報化学の基礎的方法

- 1) 立体構造等の理論的予測方法 (分子力場法・分子動力学法・分子軌道法等) の概略について説明できる。
- 2) 薬物分子間相互作用エネルギーの理論的予測方法の概略について説明できる。

## 3. 定量的構造活性相関解析とケモインフォマティクス

- 1) Hammett 則等の定量的構造活性相関解析法の基礎と方法を説明できる。
- 2) 定量的構造活性相関解析結果を物理化学的観点から解釈できる。
- 3) ニューラルネットワークなどの相関解析法の概略を説明できる。

## 4. 論理的創薬の実例

- 1) 幾つかの薬物分子の活性と構造を見たとき、論理的に予想される活性発現に影響を及ぼす物理化学的因子を説明できる。

【授業計画】

1. オリエンテーション
2. 薬物分子-受容体相互作用 (1)
3. 薬物分子-受容体相互作用 (2)
4. 薬物分子や受容体の立体構造とその動的挙動
5. 分子間相互作用 (1)
6. 分子間相互作用 (2)
7. 分子間相互作用 (3)
8. 理論計算化学・情報化学の基礎的方法 (1)
9. 理論計算化学・情報化学の基礎的方法 (2) (レポート)
10. 論理的創薬の実例 (1)
11. 論理的創薬の実例 (2)
12. 論理的創薬の実例 (3)
13. 論理的創薬の実例 (4) (レポート)
14. 論理的創薬の実例 (5)
15. 講義のまとめ
16. 定期試験

【成績評価】定期試験とレポートおよび出席状況をもとに評価する。

【再試験】実施する。

【教科書】特に指定しないが、随時参考文献を紹介、また随時プリントを配布予定である。

【授業コンテンツ】 <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=217165>

【連絡先】

⇒ (e-mail により時間調節を適宜行う場合もあります)(研究室)薬学部・創製理論化学研究室(本館4階西)  
(Eメールアドレス)hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp(心当たりのないメールは読まずに削除することがありますので、用件に必ず学年と名前を記入して下さい) (オフィスアワー: 月~ 金の9:00~ 12:00, 13:00~ 17:30)