

## 創薬分析・理論化学特論

Advanced analytical and theoretical chemistry

2単位(選択) 毎年(前期)

田中 秀治(授業責任者)・教授/創薬科学専攻, 中馬 寛・教授/創薬科学専攻, 竹内 政樹・准教授/創薬科学専攻

吉田 達貞・助教/創薬科学専攻

**【授業目的】** 医薬品や環境物質を高機能/ハイスループット分析するための基礎と応用について修得する。生体関連分子の機能・活性・構造・物性の電子・分子レベルからの解析に必要な理論的アプローチの基礎知識を修得する。さらに、薬品分析学分野・創薬理論化学における最新の研究の動向を把握する。

**【授業概要】** 薬物や生体関連分子、環境汚染物質などの定量や物性測定を各種分析機器を用いて自動的に行うための基礎的事項と応用例について講義する。続いて、生体関連分子の機能・活性の原子・電子レベルからのメカニズムの理解に必須となる理論・計算化学的アプローチおよび情報科学的なアプローチ(インフォマティクス)の基礎とこれらの創薬への応用について解説する。

**【授業形式】** [形態]

**【キーワード】** [キーワード]

**【先行科目】** [先行科目]

**【関連科目】** [関連科目]

**【到達目標】** [目標]

**【授業計画】**

1. コンピュータを用いる計測と制御(担当/田中秀治)
2. 分析法の自動化(担当/田中秀治)
3. フローインジェクション分析法とその関連法(担当/田中秀治)
4. 大気分析(担当/竹内政樹)
5. 室内空気分析(担当/竹内政樹)
6. 呼気分析(担当/竹内政樹)
7. フロー分析・環境分析研究の最前線(担当/田中秀治, 竹内政樹)
8. 分子科学計算概説-分子力場法・分子動力学法(担当/中馬 寛・吉田達貞)
9. 分子科学計算概説-分子軌道法 1(担当/中馬 寛・吉田達貞)
10. 分子科学計算概説-分子軌道法 2(担当/中馬 寛・吉田達貞)
11. 創薬へ論理的アプローチ-薬物-受容体相互作用(担当/中馬 寛・吉田達貞)
12. 創薬へ論理的アプローチ-定量的構造活性相関解析(担当/中馬 寛・吉田達貞)
13. 創薬へ論理的アプローチ-その他の論理的創薬へのアプローチ(担当/中馬 寛・吉田達貞)
14. 創薬理論化学分野における最近のトピックなど(担当/中馬 寛・吉田達貞)
15. 総括(担当/中馬 寛, 吉田達貞, 田中秀治, 竹内政樹)

**【成績評価】** 発表内容およびレポート等により評価する。

**【教科書】** 指定なし, 講義資料とそのつど参考文献を指示

**【参考書】** [参考資料]

**【授業コンテンツ】** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=217064>

**【連絡先】**

⇒ 田中 (教授室, 088-633-7285, htanaka@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ 中馬 (088-633-7257, hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ 竹内 (088-633-7286, takeuchi@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ 吉田 (創薬理論化学教室, 088-633-9508, tyoshida@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (オフィスアワー: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

**【備考】** 質問は電子メールでも受け付けますが, 要件がわかる件名を記入して下さい(迷惑メールとの判別のため)。

## Advanced analytical and theoretical chemistry

2 units (selection) each-year(1st semester)

Hideji TANAKA(Manager) · PROFESSOR / PHARMACEUTICAL CHEMISTRY, Hiroshi Chuman · PROFESSOR / PHARMACEUTICAL CHEMISTRY, Masaki Takeuchi · ASSOCIATE PROFESSOR / PHARMACEUTICAL CHEMISTRY

Tatsusada Yoshida · ASSISTANT PROFESSOR / PHARMACEUTICAL CHEMISTRY

**Target)** 医薬品や環境物質を高機能/ハイスループット分析するための基礎と応用について修得する。生体関連分子の機能・活性・構造・物性の電子・分子レベルからの解析に必要な理論的アプローチの基礎知識を修得する。さらに、薬品分析学分野・創薬理論化学における最新の研究の動向を把握する。

**Outline)** 薬物や生体関連分子、環境汚染物質などの定量や物性測定を各種分析機器を用いて自動的に行うための基礎的事項と応用例について講義する。続いて、生体関連分子の機能・活性の原子・電子レベルからのメカニズムの理解に必須となる理論・計算化学的アプローチおよび情報科学的なアプローチ(インフォマティクス)の基礎とこれらの創薬への応用について解説する。

**Style)** [形態]

**Keyword)** [キーワード]

**Fundamental Lecture)** [先行科目]

**Relational Lecture)** [関連科目]

**Goal)** [目標]

**Schedule)**

1. コンピュータを用いる計測と制御 (担当 / 田中秀治)
2. 分析法の自動化 (担当 / 田中秀治)
3. フローインジェクション分析法とその関連法 (担当 / 田中秀治)
4. 大気分析 (担当 / 竹内政樹)
5. 室内空気分析 (担当 / 竹内政樹)
6. 呼気分析 (担当 / 竹内政樹)
7. フロー分析・環境分析研究の最前線 (担当 / 田中秀治, 竹内政樹)
8. 分子科学計算概説-分子力場法・分子動力学法 (担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
9. 分子科学計算概説-分子軌道法 1(担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
10. 分子科学計算概説-分子軌道法 2(担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
11. 創薬へ論理的アプローチ-薬物-受容体相互作用 (担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
12. 創薬へ論理的アプローチ-定量的構造活性相関解析 (担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
13. 創薬へ論理的アプローチ-その他の論理的創薬へのアプローチ (担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
14. 創薬理論化学分野における最近のトピックなど (担当 / 中馬 寛・吉田達貞)
15. 総括 (担当 / 中馬 寛, 吉田達貞, 田中秀治, 竹内政樹)

**Evaluation Criteria)** 発表内容およびレポート等により評価する。

**Textbook)** 指定なし、講義資料とそのつど参考文献を指示

**Reference)** [参考資料]

**Contents)** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=217064>

**Contact)**

⇒ TANAKA (教授室, +81-88-633-7285, htanaka@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (Office Hour: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ Chuman (+81-88-633-7257, hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (Office Hour: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ Takeuchi (+81-88-633-7286, takeuchi@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (Office Hour: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

⇒ Yoshida (創薬理論化学教室, +81-88-633-9508, tyoshida@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (Office Hour: 月~ 金の8:30~ 12:00, 13:00~ 17:30)

**Note)** 質問は電子メールでも受け付けますが、要件がわかる件名を記入して下さい(迷惑メールとの判別のため)。