

## Physical Chemistry

2 units alternate-year(2nd semester)

Hiroshi Chuman(Manager) · PROFESSOR / PHARMACEUTICAL CHEMISTRY

**Target)** 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。また論理的創薬における最新の研究・開発の動向を紹介する。

**Outline)** 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。

**Notice)** 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。

### Schedule)

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)

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

**Contents)** <http://cms.db.tokushima-u.ac.jp/cgi-bin/toURL?EID=217088>

### Contact)

⇒ Chuman (+81-88-633-7257, hchuman@ph.tokushima-u.ac.jp) MAIL (Office Hour: 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があります))

### Note)

- ◇ 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