

授業コード	2124314ks1		
授業名	創薬化学(b1)		
英文名	Medicinal Chemistry		
配当学年	3年	単位数	2.0単位
開講年度・学期	2020年度後期	曜日・時限	木曜2限
授業形態	講義		
学位授与方針 (DP)	化学コースDP1		
担当教員(先頭者が主担当)	川井 悟		

目的概要	<p>創薬において、候補物質の分子設計はきわめて重要な位置を占めている。また、候補物質から最終的な医薬品へ導く過程においても、目的とする薬効を増強しつつ、有害な副作用を低減するための合理的な誘導体分子設計が不可欠である。さらに、品質管理上の課題を低減し、経済性と安全性に優れた効率的合成経路の立案が要求されている。</p> <p>本講義では、生命科学分野で必要とされる知識や技術を身につけることを目的に、有機合成化学を基盤として、創薬につながる生理活性分子の設計、ならびに合理的な合成経路の立案に必要な事項について講義を行う。</p> <p>【実践的教育科目】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・製薬会社の研究部門での経験を生かし、有機合成化学の考え方について解説する。
達成目標	<p>本学系の学位授与方針のうち、理学分野の専門的な知識の習得をはかるため、次の4点を本講義の目標とする。</p> <ol style="list-style-type: none"> (1) 化合物の構造から物理化学的性質の概略が予想できる (2) リード化合物の最適化を理解し、具体的な事例に適用できる (3) 定量的構造活性相関に使用する記述子を理解し、具体的な事例に適用できる (4) いくつかの古典的定量的構造活性相関モデルを理解し、具体的な事例に適用できる
関連科目	<p>生命物理化学 有機化学Ⅰ・Ⅱ 生物情報科学Ⅰ・Ⅱ</p>
履修条件	生命物理化学、有機化学Ⅰ・Ⅱ、生物情報科学Ⅰ・Ⅱを履修していることが望ましい
教科書名	<ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した授業資料を使用する ・あらかじめダウンロードしておき、講義に使用できるようにしておくこと
参考書名	<ul style="list-style-type: none"> ・必要に応じてWebClassで参考資料を提供する
評価方法	<ul style="list-style-type: none"> ・成績評価における達成目標の重みづけ — おおむね(達成目標1) : (達成目標2) : (達成目標3) : (達成目標4) = 25 : 25 : 25 : 25 ・成績評価における宿題、考査の重みづけ — (宿題) : (中間考査) : (学期末考査) = 20 : 30 : 50 — 出席はとるが、出席状況は成績には反映しない
事前・事後学習	<p>【事前学習】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・該当範囲について、WebClassに登録した講義資料を用いて十分に予習すること ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、講義資料等を用いて十分に復習すること ・関連する問題に取り組み、指定された問題を宿題として提出すること
自由記載欄	<p>【アクティブラーニング】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassにより自習用問題を提供する <p>【ICTの活用】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassにより教材配布、事前課題提供、課題提出を行う

テーマ・学習内容	
<第1回>	<p>(0) ガイダンス</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義の目的、講義スケジュール、成績評価の基準 <p>(1) 医薬品業界の概要</p> <ul style="list-style-type: none"> ・パテントクリフ ・先発医薬品(新薬)と後発医薬品(ジェネリック医薬品) ・医薬品開発の概略
第1回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第2回>	<p>(2) 薬理学の復習</p> <ul style="list-style-type: none"> ・薬の分類 ・生物活性の評価 ・薬物標的

第2回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第3回>	<p>(3) リード化合物の探索と最適化 (その1)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・スクリーニング ・天然資源の探索 ・In silicoスクリーニング ・Fragment-based drug discovery
第3回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第4回>	<p>(3) リード化合物の探索と最適化 (その2)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ファーマコフォア ・古典的等価体と非古典的等価体 ・スキヤフォールド・ホッピング ・環構造の変換
第4回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第5回>	<p>(3) リード化合物の探索と最適化 (その3)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・立体配座固定と立体障害 ・構造活性相関研究の手順
第5回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第6回>	<p>(3) リード化合物の探索と最適化 (その4)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・薬物-薬物受容体相互作用 ・置換基の物理化学的效果
第6回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第7回>	<ul style="list-style-type: none"> ・前半部のまとめ ・中間考査 (範囲: 薬物分子の物理化学) ・中間考査の出題のねらいと解説
第7回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (160分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (30分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること
<第8回>	<p>(4) 薬物分子の物理化学 (その1)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・物理化学的性質と生理活性 ・解離定数 pKa ・脂溶性 <ul style="list-style-type: none"> -脂溶性と生理活性 -親水性置換基と疎水性置換基 ・脂溶性記述子 log P ・分配係数
第8回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第9回>	<p>(4) 薬物分子の物理化学 (その2)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・置換基の電気的效果 <ul style="list-style-type: none"> -Hammettの置換基定数 σ -分子双極子モーメント -安息香酸類縁体の解離定数への影響 ・置換基の立体的効果 <ul style="list-style-type: none"> -Taftの立体因子 E_s -モル屈折率 -verloop立体パラメータ
第9回 事前・事後学習	<p>【事前学習】 (90分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと <p>【事後学習】 (100分)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)

<第10回>	(5) 構造活性相関 (その1) ・概要 ・定量的構造活性相関に用いられる記述子 -物理化学的記述子 -トポロジカル・インデックス -有機電子論のパラメーター -空間的パラメーター
第10回 事前・事後学習	【事前学習】 (90分) ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと 【事後学習】 (100分) ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第11回>	(5) 構造活性相関 (その2) ・古典的な定量的構造活性相関 -Free-Wilsonモデル -Fujita-Banモデル
第11回 事前・事後学習	【事前学習】 (90分) ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと 【事後学習】 (100分) ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第12回>	(5) 構造活性相関 (その3) ・重回帰分析による定量的構造活性相関 (その1) -重回帰分析の概要
第12回 事前・事後学習	【事前学習】 (90分) ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと 【事後学習】 (100分) ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第13回>	(5) 構造活性相関 (その4) ・重回帰分析による定量的構造活性相関 (その2) -重回帰分析の実例
第13回 事前・事後学習	【事前学習】 (90分) ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと 【事後学習】 (100分) ・講義内容について、十分に復習すること (一部を宿題として提出する)
<第14回>	・後半部のまとめ ・学期末考査 ・学期末考査の出題のねらいと解説
第14回 事前・事後学習	【事前学習】 (160分) ・WebClassに登録した事前課題に取り組むこと 【事後学習】 (30分) ・講義内容について、十分に復習すること
質問への対応 (オフィスアワー等)	・オフィスアワー：水曜日と木曜日のお昼休み ・オフィスアワー以外でも、在室時には可能な限り対応します ・場所：学部長室 (本館3階) ・メールによる質問も受け付けます。ただし本人確認のため、差出人メールアドレスが"学籍番号@ms.dendai.ac.jp"のものに限ります。
E-Mail address	kawaii☆mail.dendai.ac.jp (☆を@に変えてください)
履修上の注意事項 (クラス分け情報)	なし
学習上の助言	
備考	【宿題の体裁について】 ・表紙 (WebClassに登録しているもの) を付けること ・ホチキス止めは「左2カ所どめ」 ・手書きのこと (鉛筆不可、ボールペン等を使用すること) ・用紙はA4サイズを使用すること ・提出期限は、次回授業開始時
J A B E E	

学期末試験<事務部記入>	
試験方法	
試験実施日時	
参照可否	

着席方法	
レポート提出先	
レポート提出期限日時	
備考	