

科 目 名	医療分子薬学特論IV				
担当教員名	教授 安池 修之 教授 神野 伸一郎 准教授 小幡 徹 講師 松村 実生	単位数	2 (90分授業 15回)	配当学期	秋学期
講義の概要	<p>本特論では有機化学や量子化学計算に関する最新の理論・技術・活用例を解説する。有機化学では遷移金属触媒を利用した基礎的な炭素-炭素結合形成反応・炭素-ヘテロ原子結合形成反応や光化学反応などを利用した化合物の合成法と、構造解析法に関して習得する。量子化学計算では、計算化学全般と理論的背景について概説し、分子のエネルギーや構造最適化、振動構造解析、励起状態の計算法に関して習得する。</p>				
講義の内容・スケジュール	<ol style="list-style-type: none"> 1. 遷移金属触媒反応の基礎 2. Pd や Cu 触媒を利用した炭素-炭素結合形成反応 3. Pd や Cu 触媒を利用した炭素-ヘテロ原子結合形成反応 4. C-H 活性化反応を利用した炭素-炭素結合形成反応 5. C-H 活性化反応を利用した炭素-ヘテロ原子結合形成反応 6. カルベン錯体を利用したメタセシス反応 7. 核磁気共鳴スペクトルの理論と測定・解析法 8. X線結晶構造解析の理論と測定・解析法 9. 分子標的薬の開発 10. 量子化学計算の基礎と理論的背景 11. 量子化学計算の実際 (1) (分子のエネルギー計算, 構造最適化計算) 12. 量子化学計算の実際 (2) (振動解析計算) 13. 量子化学計算の実際 (3) (励起状態計算) 14. 光吸収と電子励起状態 15. 有機化合物の光化学反応 				
評価方法 (基準等)	レポート (50%)、口頭による質疑応答 (50%) による総合評価				