

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	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。				
準 備 学 習 (予習・復習など)	受講前にシラバスに記載されている授業内容に関連する教科書の該当箇所を予習すること。講義内容、教科書、配付プリントをまとめ、復習すること。各回の講義前に、およそ 120 分を目安として予習・復習をすること。				
講義の内容・ スケジュール	1. 遷移金属触媒を利用した有機合成反応の基礎 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. 単結晶 X 線結晶構造解析の理論と測定・解析法 9. 核酸代謝拮抗剤の開発 10. 分子標的治療薬の開発 11. がん免疫療法と光線力学的治療法の開発 12. 量子化学計算の基礎と理論的背景 13. 量子化学計算の実際 (1) (分子のエネルギー計算) 14. 量子化学計算の実際 (2) (構造最適化計算) 15. 量子化学計算の実際 (3) (振動解析計算)				
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				
教 材	配布資料				