

科 目 名
医薬品合成化学 Synthetic Chemistry for Pharmaceuticals

3年 後期 2単位 必修

原 野 一 誠

概要・目標

低学年において、有機反応を電子の動きと結合の分極性に基づくと考える「有機電子論」について学んだ。しかし「有機電子論」では、分子軌道論的考察が必要な「ペリ環状反応」や「芳香族性」などは扱うことができない。本学部の一連の有機化学講義の最終段階に位置する「医薬品合成化学」においては、有機合成反応を量子化学的観点から学習する。さらに、生体内反応を含む様々な化学反応を分子軌道論の立場から理解するための基礎的知識の付与を目指す。

授業計画

医薬品の骨格合成に用いられるペリ環状反応を理解するためには、分子軌道の概念の修得が必須である。原子軌道から分子軌道を作る作図法を学習し、次いで分子軌道同士の相互作用によってより複雑な分子が創られていく過程を学習する。

- 1) 原子軌道から分子軌道を作る。
- 2) フロンティア分子軌道 (HOMO, LUMO) とその役割。
- 3) 化学反応を分子軌道相互作用として捉える。
- 4) 熱許容反応と光許容反応、反応性および生成物予測。
- 5) 置換反応、脱離反応などのフロンティア軌道法による理解。
- 6) 芳香族性、安定性などのフロンティア軌道法による理解。
- 7) ペリ環状反応（環化付加反応、シグマトロピー反応、電子環状反応、キレトロピー反応、エン反応等）の機構、各種選択性と立体選択的分子骨格合成反応。
- 8) 化学、薬学領域における分子軌道法の役割。

授業方法

講義形式（作図演習、プレゼンテーション及びプリント配布）

評価方法

予習、復習、遅刻、私語、受講態度、出席状況などはすべて定期試験に集約されると確信する。よって筆記試験によって評価する。

教 材

資料を配布する。医薬品化学研究室ホームページ上で資料および情報を提供する。

コアカリキュラムとの関連

C5 ターゲット分子の合成(2) “複雑な化合物の合成” を含む。他項目への対応の詳細については薬学部ホームページに掲載。フロンティア軌道論 (Frontier Orbital Theory) の採用は本学独自の判断による。

履修上の注意

フロンティア軌道法の知識習得はコアカリキュラムには明記されていないが、近代化学では必須の理論である。指導原理として、福井謙一博士のフロンティア軌道論を用いる。暗記より原理をしっかりと理解することが応用力修得への近道と思っている学生向きの講義である。上学年アドバンスト講義「有機軌道論」(計算機化学を含む) の基礎となる講義である。