

科 目 名

薬物解析と設計 (リード化合物の創製と最適化) Drug Analysis and Design (Lead Generation and Optimization)

3年 後期 1単位 必須

宮本 秀一 (所属：崇城大学・薬学部)

概要と目標

医薬品の開発研究において、リード化合物の創製と最適化は必須のステップである。本科目では、それらのステップに深く関与する薬物設計（発見）ならびにその基礎となる薬物解析の科学的な考え方を理解する。すなわち、薬物の構造と物理化学的性質の理論的解析や薬物と標的生体高分子との相互作用解析（薬物解析）、ならびにそれに基づいた薬物設計等に関する基本的知識と技能の修得を目指す。本講義では、計算化学と構造生物学に基づいて薬物と標的の立体構造に焦点を当てながら、論理的・合理的アプローチの1つであるコンピュータ支援による薬物解析と設計を中心に学習する。従って、本科目では、薬物設計と薬物解析の科学的な考え方を修得し、コンピュータを利用したそれらの適用方法の一端を修得することを目標とする。

授業計画

テーマ	内 容
① 医薬品創製の流れ	創薬ニーズと創薬シーズ、医薬品創製の流れ、リード化合物の創製と最適化の概要〈C17(1)-1-1)、C17(2)-1-1)、G(3)-1-1~4)〉
② 医薬品の標的構造	核酸の構造、蛋白質の構造、受容体の構造、生体膜の構造〈C3(2)-1-1,2,3,5,6)、C17(2)-2-1,4)〉
③ 医薬品と標的の相互作用	分子間相互作用、ファーマコフォア、薬物分子の立体構造、立体構造と生物活性〈C1(1)-2-1,2,5,7)、C3(2)-2-1,4)、C17(2)-2-2,3)〉
④ 薬物解析	定量的構造活性相関、立体配座解析、形状解析、薬物と標的分子の相互作用解析〈C17(2)-4-1)、G(3)-4-1~6)〉
⑤ 薬物設計	定量的構造活性相関に基づく設計、生物学的等価体による変換、相互作用解析に基づく設計、3次元データベース検索、De Novo 設計、薬物動態を考慮した設計〈G(3)-2-1,2)、G(3)-3-1)、C17(2)-4-2,3)、C16(3)-4-1)、G(3)-5-1,2)〉

授業方法

プリントとパワーポイントを用いた講義、課題レポート、演習等で授業を進める。

評価方法

定期試験、演習、課題レポート等の結果から総合的に評価する。

教 材

プリントを適宜配布する。

参考書：北 泰行、平岡哲夫 編「創薬化学—有機合成からのアプローチ—」(東京化学同人)

関連講義

本科目は5年次選択科目の「構造活性相関」と関連している。