

## 2022年度 物質科学特論C (4078)

### ■ 授業科目基本情報

科目区分	専門科目	教職科目	指定なし
単位数	1	選択・必修・自由	選択
授業形態	講義	主な使用言語	英語
開講時期	III	履修登録システム	使用する
履修登録期間	2022/10/07~2022/10/28	履修取消期限	2022/12/02

### ■ 教育プログラム別の履修区分

プログラム名	IS	BS	MS	DS	DGI
履修区分	△	△	○	○	○
コア科目	-	-	-	-	-
履修方法	・修士論文研究又は特別課題研究を履修する場合は、序論科目、基盤科目及び専門科目から14単位以上履修すること。 ・課題研究を履修する場合は、序論科目、基盤科目及び専門科目から16単位以上履修すること。				

### ■ 授業科目概要

担当責任教員	細川 陽一郎
担当教員	梶原 孝志、山下 誠、池田 和由、森 俊文
教育目的／学修到達目標	<p>【教育目的】</p> <p>森: 計算機を用いた分子シミュレーションがどのように動き、またそれが生体分子の研究に用いられているかを学ぶ。特に、ミクロな分子がダイナミックに動く様を調べることが分子機能の理解にどのようにつながるか、さらにそれが新たな分子設計へと展開できるかを議論する。</p> <p>山下: 現代の有機化学およびその周辺分野においては、周期表にある炭素以外の多数の元素の特性を理解することが必須です。本講義では基礎概念を理解した後、それぞれの族の元素における特徴的な物性や反応性を各論として学びます。これにより、周期表の中でなぜ、どのように炭素が有機化学の主演となっているかを自らの言葉でイメージできるようになることが最終目標です。</p> <p>池田: 人工知能(AI)がいま注目されており、大量かつ良質なデータをいかに入手できるかが重要である。この講義では、化学分野における代表的な公共データベースを紹介し、その活用方法を解説する。医薬品候補となり得る有機化合物の特性を理解し、既知の化合物情報を収集・統合して、効率的に分子設計する方法を学ぶ。</p> <p>【学修到達目標】</p> <p>森: 分子シミュレーションの基本的原理について理解し、生体分子系でのシミュレーション研究の実際について学ぶことで、分子のダイナミックな描像とその役割を議論できるようになる。</p> <p>山下: 有機分子の構造・物性・反応における多様な典型元素の役割について理解し、説明、記述できる。</p> <p>池田: 1) オープンデータとは何か? を学び、説明ができる。                  2) 医薬品となり得る有機化合物の特性を理解し、議論ができる。                  3) 化学データベースの仕組みを知り、効率的な分子設計について理解できる。</p>
授業概要／指導方針	<p>【授業概要／指導方針】</p> <p>森: 講義形式で授業を行う。</p> <p>山下: 講義形式で授業を行う。</p> <p>池田: 講義形式で授業を行う。</p> <p>【授業時間外学修(予習・復習等)の目安】</p> <p>森: 8回目の講義修了後に出すレポート課題に4時間程度。</p> <p>山下: 講義終了後に課すレポート課題に6時間程度</p> <p>池田: 2回目の講義終了時に出すレポート課題に8時間程度</p>

### ■ 授業計画

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付 [時間]	担当教員	テーマ	内容
----	---------	------	-----	----

1	12/2 [3]	池田 和由	医薬分子設計のためのデータサイエンス(1)	オープンデータとは何か?その重要性について考える。医薬品開発における代表的なデータベースを紹介し、その仕組みと活用方法を学ぶ。
2	12/2 [4]	池田 和由	医薬分子設計のためのデータサイエンス(1)	医薬品候補となり得る有機化合物の特性を知り、既知情報を活用した効率的な医薬分子設計について学ぶ。
3	12/9 [3]	森 俊文	分子シミュレーションの基礎	生体分子系への適用を視野に、計算機を用いた生体分子の分子シミュレーションの基本となる考え方と計算方法について説明する。また、シミュレーションより得られたデータを解析するための方法について、基礎となる統計力学理論を紹介し、それをどのようにデータ解析に用いるかについて解説する。
4	12/9 [4]	森 俊文	生体分子のシミュレーション研究の現在と展望	生体分子の分子シミュレーションの応用例を紹介する。特に、近年の計算機の発展によって、分子シミュレーションが生体分子の研究をどのように変えてきたか、さらに何が課題として残されているかなどを議論する。また、データ解析において機械学習手法がどのように取り入れられているかの研究を紹介し、その展望についても議論する。
5	12/13 [3]	山下 誠	有機典型元素化学:基礎概念と各論	電気陰性度・原子半径・イオン化ポテンシャル・超原子価・リガンドカップリングなどの基礎概念を理解した後に、それぞれの族の元素における特徴的な物性や反応性を各論として学ぶ。
6	12/13 [4]	山下 誠	高反応性13族元素の化学	有機典型元素化学における最近の研究の例として、高反応性の13族元素の化学を取り上げる。空軌道に由来するルイス酸性に加えて、反応活性な電子対が協動的に作用する系に注目して解説を行う。
7	—	梶原 孝志		
8	—	梶原 孝志		

## ■ 授業日程

[1限目 9:20-10:50] [2限目 11:00-12:30] [3限目 13:30-15:00] [4限目 15:10-16:40] [5限目 16:50-18:20] [6限目 18:30-20:00]

回数	日付	時間	講義室	備考
1	12/2	3	Rethink 物質創成科学大講義室	
2	12/2	4	Rethink 物質創成科学大講義室	
3	12/9	3	Rethink 物質創成科学大講義室	
4	12/9	4	Rethink 物質創成科学大講義室	
5	12/13	3	Rethink 物質創成科学大講義室	
6	12/13	4	Rethink 物質創成科学大講義室	

## ■ テキスト・参考書

テキスト	池田:講義はスライドを用いて行うので特に必要なし 森:スライドを用いて講義を行うので特に必要ありません。 山下:基本的に配付資料とプレゼンテーションで説明を行うが、東京化学同人「大学院講義有機化学I 分子構造と反応・有機金属化学」第2版(編者:野依・中筋・玉尾・奈良坂・柴崎・鈴木)を読むことを強く勧める。
参考書	池田:講義はスライドを用いて行うので特に必要なし 森:スライドを用いて説明するので特に必要ありません。 山下:特になし

## ■ その他

履修条件	池田:特になし 山下:学部で学ぶ基礎的な有機化学を理解していることを前提とする。
オフィスアワー	Eメールで連絡の上、日時を決める
成績評価の方法と基準	5段階(秀・優・良・可・不可)で評価する。 池田:授業への参加度とレポートで評価する。 森:授業への参加度とレポートで評価します。 山下:レポート課題で評価を行う。
関連科目	特になし
関連学位	理学、工学、バイオサイエンス
注意事項	特になし