

■授業概要

研究室に配属され、あるいは仕事の現場で、知っていると役に立つ可能性のある次の3つの手法について学ぶ。

(1) 文献検索法：生物、化学、環境の研究に取り組むにあたって必要な文献の情報を蓄積し、検索に供している学術情報データベースの概要と活用法。

(2) 分子科学計算：物質の構造と性質を予測するための基礎となる方法。

(3) 分子設計への道：線型自由エネルギー関係、構造活性相関など。

いずれも化学分野で基礎が築かれ、近年、ライフサイエンスへの展開が進んできた。それぞれの原理と基本的な方法を、紹介する。

■到達目標

概要で取り上げた手法は、化学・生物・環境および材料系の各分野で、研究・開発だけでなくさまざまな職種で活用されている。卒業研究はもとより、将来の仕事や研究の助けとして実践的に活用できるようになるための基礎を身につけることをめざす。

S: 授業・講習によく主体的に参加し、概要の(1)・(3)のための基礎的な手法をよく実践できるようになった。

A: 授業・講習に主体的に参加し、概要の(1)・(3)のための基礎的な手法を実践できるようになった。

B: 授業・講習の大部分に主体的に参加し、概要の(1)・(3)のための基礎的な手法を実践的に体験した。

C: 授業・講習の大部分に参加し、概要の(1)・(3)のための基礎的な手法の大半を実践的に体験した。

D: 授業・講習の大半に参加し、概要の(1)・(3)のための基礎的な手法を一応実践的に体験した。

■授業計画・内容

回数	内容	
1回目	講義内容	ガイダンス：講義の概要説明など ○序論、文献とは
	準備学習の内容など	シラバスをよく読ので内容を把握する。
2回目	講義内容	(1) 文献検索：「何が既に知られているか」を知る方法。 文献の種類とその検索法を解説する。 ○原著情報、電子ジャーナル、
	準備学習の内容など	授業資料を熟読し、質問を用意する。
3回目	講義内容	(1) 文献検索 ○参考図書、抄録・検索誌 ○抄録データベースの構造 ○講習：電子ジャーナルサイトJ-Stageの利用説明 (E307)
	準備学習の内容など	授業資料を熟読し、質問を用意する。
	講義内容	(1) 文献検索 ○抄録データベースの構造 ○オンラインデータベースと文献検索

4回目		←第1部演習課題の提案開始
	準備学習の内容など	授業資料を熟読し、質問を用意する。
	講義内容	(1) 文献検索 ○講習：J-DREAMを用いる文献検索 (E307)
5回目	準備学習の内容など	コマンド検索の確認。
		5時間目1635~
	講義内容	(1) 文献検索：まとめ
6回目		(2) 分子設計と分子科学計算 代表的な手法である分子軌道法と分子力学法の基礎を解説する。 ○分子化学計算とは、分子力学法 (1)
	準備学習の内容など	第1部演習課題の確定。
	講義内容	(2) 分子設計と分子科学計算 ○分子力学法 (2) ○分子軌道法の概要
7回目	準備学習の内容など	授業資料を熟読し、質問を用意する。
	講義内容	(2) 分子設計と分子科学計算 ○講習：Scigressの基本的な使い方 (分子力学計算を含む) (E307)
8回目		(付録) Symyx Drawの簡単な使い方
	準備学習の内容など	前回までの内容を復習しておく。
	講義内容	(2) 分子設計と分子科学計算 ○ヒュッケル分子軌道法
9回目	準備学習の内容など	前回の内容を確認しておく。
	講義内容	(2) 分子設計と分子科学計算 ○ヒュッケル分子軌道法 (2) ○半経験的分子軌道法：MOPAC
10回目		←第2部演習課題の提案開始
	準備学習の内容など	前回までの内容を復習しておく。
	講義内容	(2) 分子設計と分子科学計算 ○講習：Scigressによる分子軌道法計算 (E307)
11回目	準備学習の内容など	前回までの内容とScigressの基本的な使い方を確認しておく。

12回目	講義 内容	(3) 分子設計への道 ハメット則と線型自由エネルギー関係 (1)
	準備学習の内容など	前回の内容を確認しておく。 第1部演習課題の確定。
13回目	講義 内容	(3) 分子設計への道 ハメット則と線型自由エネルギー関係 (2) 構造活性相関 (1)
	準備学習の内容など	前回までの内容を復習しておく。
14回目	講義 内容	(3) 分子設計への道 構造活性相関 (2)
	準備学習の内容など	前回までの内容を復習しておく。
15回目	講義 内容	相関式の簡単な求め方 (E307) まとめ
	準備学習の内容など	前回までの内容を復習しておく。

■評価・試験方法

種別	割合	評価基準
定期試験		
中間試験		
レポート	60%	講義時間外で行う演習課題を3回課し、結果をレポートとしてまとめ、提出する。
実技・作品等		
日常点 (小テスト・課題等)	40%	毎回、小テストまたは課題を課し、講義終了時に提出させる。5回欠席すると40%減点される。
その他		
備考		毎回出席が原則。欠席、遅刻は減点対象となる。無断欠席は不可。やむを得ず欠席する場合はe-mail等で必ず事前に連絡すること。

■履修上のアドバイス

重要な情報、連絡はポータル授業支援システムに掲載するので、随時参照すること。

この授業で何より大切なことは、方法やその背景・原理について「知る」ことである。授業は知るためのよい機会なので、出席を重視している。方法への習熟や原理の理解は、履修後に必要に応じて行えばよく、評価の対象ではない。

「化学基礎論」「有機化学」「物理化学」「生化学」「生命科学のための数学」(「微分積分学」)を修得していることが望ましい。

「量子化学」とあわせて履修すると「(2) 分子設計と分子科学計算」の理解に有効。

※毎週の授業に必要な学習時間 (小テスト、レポート、課題など) : 2時間