

2010年暑期南加州大學藥學系

電腦模擬藥物設計研習營心得

藥學系 吳秀梅 主任

藥學院為拓展學生國際視野，積極建構與世界優質大學結盟，並落實師生交流互動；今年暑假本院藥學系六位學士班學生及兩位香粧品學系碩士班學生前往南加州大學(University of Southern California, USC)藥學系參與電腦模擬藥物設計課程，本活動能順利成行，必須感謝教育部學海築夢計畫、學校教卓經費及藥學文教基金會等補助部份經費；本課程為期四週，由USC Dr. Michael Wincor負責規劃，第一週主題是 structure-based drug design - small molecules，先由Dr. Haworth授課，他先給每一組一個protein，教學生如何使用ViewerPro軟體來找出它的ligand，也從最基本的生化開始講起，介紹胺基酸和蛋白質的結構和一些藥物設計的基本觀念，以及蛋白質和ligand的結合，並解說課程大綱，而其中比較特別的名詞應該是 docking。老師上課時不只教投影片的內容，還會要求學生下載一些軟體馬上現場操作，像是 SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System)，操作時一旁就有助教耐心的幫忙，讓學生得以快速進入狀況，每一天小組都要上網交一份軟體操作的作業。第二週的課程 biopharmaceutics small molecules，多了Dr. Okamoto授課，主要是利用線上免費軟體了解原始ligand的一些特性，例如親疏水性、pKa、分子量、logP、logD等，接著依照ligand的缺點做修飾。接著使用線上軟體去觀察修改後ligand的特性，也去學校的電腦教室使用GastroPlus這個

軟體，這是一個模擬生物可利用率的軟體，可以從這個模擬軟體來看修飾過後的ligand是否具有好的生物利用率。第三週課程為design & delivery of proteins & DNA therapeutics agents，也包括上台報告這個月的成果。最後一個禮拜授課包括病患諮詢及精神科用藥，也安排到USC的Main Campus及附屬醫院藥局參觀，還有親切的臨床藥師介紹藥事照護的情形；在美國藥師被賦予很大的權利，其中病患諮詢是非常重要的服務，甚至有獨立空間，並配備有電腦儀器，只要輸入病患姓名就可調出相關資料，例如病症、主治醫生、過去病史、目前服用的藥物，提供藥師更詳盡的資訊。

另外Dr. Wincor也積極希望台灣學生能了解美國生活，每週約有兩天課外活動，他們都會很貼心地印好地圖，教學生該搭什麼公車或地鐵，而且行程都安排的很棒。第一週是安排去Pasadena辦見面餐會，順便逛街，也到Dodgers的主場去看Dodgers對Cubs的比賽，可惜郭泓志當天未出賽！第二週安排的行程是到Hollywood及MOCA現代藝術中心，第三週去Long Beach的海生館參觀，成果報告結束的當天晚上，安排的活動是去Hollywood Ball聽LA Phil的古典音樂演奏，主題是莫札特。這一個月的行程學生收穫良多，感謝有機會能到美國知名大學上課，除了認識USC藥學系授課的方式和內容，也藉由和他們學生的交流見識國外的大學生活，實在是難得的寶貴經驗。



本校交流學生與USC老師合影。



USC教師，左二為陳景虹院士。



USC藥學院院長Pete Vanderveen (右) 及副院長Michael Wincor (左)