

【教科名】 計算機化学 Computer Chemistry <H25 履修単位科目>						
学年	学科	単位数	期間	開設週数	時間/週	総時間
4	物質化学工学科 応用化学工学コース	(必修) 1	前期	15	2	30
【担当教員】 竹原 健司      【教員室】 7号館 2階      【TEL】 7241      【e-mail】 takehara						
<b>【授業目的と概要】</b> 化学及び化学工学に携わる技術者や研究者にとって、得られたデータをパソコンで処理、解析し、その結果をレポートとしてまとめて他者に伝えることや、ネットワーク上での情報検索などは日常のことである。本科目では、表計算ソフト(EXCEL)の基本的な使用法と数学的・化学的計算、回帰分析への応用、VBAプログラミングの基本知識とデータ処理等を学ぶ。また、ネットワーク上の化学データベース利用や化学式描画ツールの利用を実習する。						
<b>【授業の進め方及び履修上の注意】</b> 各授業の最初に概要を PowerPoint で説明し、電算室演習室のパソコンを実際に使用しながら演習や課題に各自で取り組む。授業での演習やレポート課題等はファイルとして提出する。保存用に USB フラッシュメモリ等を各自用意しておくこと。また、WebClass を利用して資料や課題の配付、授業や試験の連絡、アンケート等を行う予定である。						
授 業 項 目		内 容				時間
<b>【前期】</b>						
導入		ガイダンス、化学(工学)におけるコンピュータ利用				2
表計算ソフト(1)		基本的操作、数式・関数の利用				6
		最小二乗法による回帰分析とグラフ作成				4
		連立方程式の解法、一元高次方程式の解法				4
中間試験						
ネットワークによる化学情報検索		化学データベースへのアクセスと検索				1
化学グラフィクス		化学ドローツールの使用				1
分子モデリング		分子の 3D モデルの作成と利用				2
表計算ソフト(2)		Visual Basic for Application(VBA)の基礎と文法				6
		簡単なプログラム作成、VBA による化学(工学)計算				4
定期試験						
<b>【達成目標】</b> ・表計算ソフトの基本的な使い方ができる。 ・表計算ソフトによる回帰分析処理が行え、実験データ解析とレポート作成に応用できる。 ・化学情報(物質データベースなど)サイトにアクセスして、有用情報を引き出せること。ネットワーク検索の利点と注意点を把握できる。 ・化学ドローツールやモデリングソフトを用いて、2Dや3Dの化学構造を作成できる。 ・VBA の基本文法を習得し、簡単なプログラムや化学(工学)計算プログラム作成ができる。				<b>【教科書】</b> Excel で学ぶ化学工学 化学工業社、吉川英見他著 <b>【参考書】</b> 演習で学ぶ IT 入門 化学同人、倉元博美他著		
JABEE 教育目標		(A)①, (B)②, (C)③				
準学士課程目標		(A)①, (B)②, (C)③				
成績評価		<b>【評価基準】</b> 中間試験・定期試験、授業演習・レポートによる総合評価で 60 点以上を合格とする。 <b>【評価方法】</b> 中間試験および定期試験 90% 授業演習およびレポート 10%			<b>【オフィスアワー】</b> 水曜日 午後 3 時から 5 時	