

科目名 (Eng)		計算機化学(Computer Chemistry)							
担当教員		羽切 正英							
対象学年等		学科・専攻・学年		授業期間・区分・単位数・時間数			分野	形態	学修単位科目
		物質工学科	4	前期	選択	1	(15)	専門	C
目標基準との対応	福島高専の教育目標との対応：(B-3)．(B-4)．(D-2)．(E-2)．								
	卒業時に身に付けるべき学力や資質・能力との対応：2)．3)．6)．								
授業の概要と方針		計算手法を単に追うだけでなく、自分の実験などでも使える場面を想定して分子モデリング、反応計算を行う。また、実験データや計算データの取り扱い方、効果的な作図方法などについて学ぶ。							
到達目標		①計算結果や実験結果についての妥当な表現，化学的な評価が行えること。 ②情報検索ができ，検索によって得られた情報の妥当性が評価できること。 ③モデル分子を組み立てシミュレーション計算ができること。							
授業計画									
前期	週	授業項目	理解すべき内容						
	1	計算機利用の基礎	計算機の利用方法の確認						
	2	表現技法(1)	化学表現と計算機						
	3	表現技法(2)	プレゼンテーション資料の作成						
	4	データ処理技法(1)	実験データと表計算						
	5	データ処理技法(2)	データ処理とグラフ化						
	6	ネットワークの利用(1)	オンラインデータベースの利用						
	7	ネットワークの利用(2)	電子ジャーナルの利用・データ検索実習						
	8	分子モデリングと計算(1)	分子構造の表現・データの作成						
	9	分子モデリングと計算(2)	計算環境の構築・MOPACの利用						
	10	分子モデリングと計算(3)	分子モデルと表示ソフトウェア						
	11	反応計算(1)	分子モデルとデータ						
	12	反応計算(2)	SN2反応のシミュレーション						
	13	反応計算(3)	SN2反応のシミュレーション						
	14	反応計算(4)	エネルギー状態と分子モデルとの対応						
15	まとめ								
試験について		実施しない。							
評価方法		演習課題およびレポートなどの成果物，実技等を総合的に評価する。							
教科書		必要に応じてプリントを配布する。							
参考書		(1) 川添良幸，コンピュータ・シミュレーションによる物質科学—分子動力学とモンテカルロ法，共立出版 (2) 平山令明，実践量子化学入門，講談社 (3) 前田耕治ら，実験データを正しく扱うために，化学同人							
関連科目		化学系，情報系科目と関連するが，特に量子化学(5年生)．ほか，情報処理I・II(2-3年生)物理化学I・II(3-4学年)，無機化学I・II(3-4学年)，有機化学I・II(3-4学年)，化学工学実験(5学年)，卒業研究(5学年)など。							
履修上の注意		演習課題を課すので，まずは他人に頼らず，自分で考え，計算に慣れるよう努力すること．シミュレーションの可否は初期モデルと反応条件の設定で決まってしまう．エネルギー的な優位性を確かめながら計算してみましょう。							