

函館工業高等専門学校		開講年度	平成29年度 (2017年度)		授業科目	計算科学
科目基礎情報						
科目番号	0419		科目区分	専門 / 必修		
授業形態	授業		単位の種別と単位数	履修単位: 1		
開設学科	物質環境工学科		対象学年	5		
開設期	前期		週時間数	2		
教科書/教材	課題資料(プリント)／櫻井・猪飼共著「計算機化学入門」(丸善), 堀・山崎共著「計算機実験」(丸善) 染川著「有機分子の分子軌道計算と活用」(九州大学出版)					
担当教員	寺門 修					
到達目標						
1. 分子の三次元的な構造がイメージでき、異性体について理解できる。 2. 代表的な分子に関して、原子価結合法(VB法)や分子軌道法(MO法)から共有結合を説明できる。						
ルーブリック						
	理想的な到達レベルの目安		標準的な到達レベルの目安		未到達レベルの目安	
評価項目1	分子モデリングのソフトが使える、実測値との比較から分子の三次元構造や異性体について理解できるだけでなく、最安定構造について推定できる。		分子モデリングのソフトが使える、実測値との比較から分子の三次元構造や異性体について理解できる。		分子モデリングのソフトが使えず、分子の三次元構造や異性体について理解できない。	
評価項目2	分子軌道計算が行えて、得られる結果から共有結合について説明できる。さらに、分光学的結果などの実測値と計算結果について比較が行える。		分子軌道計算が行えて、得られる結果から共有結合について説明できる。		分子軌道計算が行えず、共有結合について説明できない。	
学科の到達目標項目との関係						
学習・教育到達目標 (B-2) 学習・教育到達目標 (C-2) 函館高専教育目標 B 函館高専教育目標 C						
教育方法等						
概要	物質工学系で利用されている物質の構造の構築技法を学ぶために、分子力学的計算法や量子化学的計算法を用いて、分子構造を構築して、計算機実験をする。物質構造データの実験値との比較や回転ポテンシャルなどの力学的計算による評価によって理論的解析手法を学び、工業技術の分子工学的基礎理論知識を習得する。					
授業の進め方・方法	参考書類が少ないので、プリントをよく読み理解して欲しい。使用方法の不明な点は、オンラインヘルプも理解の参考になる。					
注意点	JABEE教育別到達目標評価：定期試験20% (B-2：50%, C-2：50%)，課題80% (B-2：75%, C-2：25%)					
授業計画						
		週	授業内容		週ごとの到達目標	
前期	1stQ	1週	1. ガイダンス (2h)		・科目の位置づけ、必要性、学習の到達目標および留意点を理解できる。	
		2週	2. 「分子モデリングソフトによる分子構造の作成と実験値との比較」を実習(4h, コア)		・分子モデルを理解し、分子構造を作成できる。	
		3週	2. 「分子モデリングソフトによる分子構造の作成と実験値との比較」を実習(4h, コア)		・分子モデルを理解し、分子構造を作成できる。	
		4週	3. 「分子力学計算による化合物の最適化」を実習(4h, コア)		・化合物の構造を作成し、構造の最適化ができる。	
		5週	3. 「分子力学計算による化合物の最適化」を実習(4h, コア)		・化合物の構造を作成し、構造の最適化ができる。	
		6週	4. 「分子力学計算による分子内構造の「回転ポテンシャルの計算」を実習(4h, コア)		・分子内構造の回転ポテンシャルを計算し、構造との関係を説明できる。	
		7週	4. 「分子力学計算による分子内構造の「回転ポテンシャルの計算」を実習(4h, コア)		・分子内構造の回転ポテンシャルを計算し、構造との関係を説明できる。	
		8週	中間試験			
	2ndQ	9週	試験返却・回答説明(2h)		・試験問題を通じて、間違った箇所を理解できる。	
		10週	5. 「半経験的分子軌道法による化合物の最適化」を実習(4h, コア)		・分子構造を作成し、構造を最適化できる。	
		11週	5. 「半経験的分子軌道法による化合物の最適化」を実習(4h, コア)		・分子構造を作成し、構造を最適化できる。	
		12週	6. 「半経験的分子軌道法による振動解析の計算」を実習(2h)		・振動解析の計算値と実験値の違いを説明できる。	
		13週	7. 「半経験的分子軌道法による分子内構造の「回転ポテンシャルの計算」を実習(4h, コア)		・分子構造内の回転ポテンシャルを計算し、回転による影響を説明できる。	
		14週	7. 「半経験的分子軌道法による分子内構造の「回転ポテンシャルの計算」を実習(4h, コア)		・分子構造内の回転ポテンシャルを計算し、回転による影響を説明できる。	
		15週	期末試験			
		16週	試験答案返却・解答解説(2h)		・間違った問題の正答を求めることができる。	
モデルコアカリキュラムの学習内容と到達目標						
分類		分野	学習内容	学習内容の到達目標	到達レベル	授業週
専門的能力	分野別の専門工学	化学・生物系分野	有機化学	分子の三次元的な構造がイメージでき、異性体について説明できる。	3	前2,前3,前4,前5
				構造異性体、シス・トランス異性体、鏡像異性体などを説明できる。	3	前6,前7
				電子論に立脚し、構造と反応性の関係が予測できる。	3	前10,前11
評価割合						

	試験	発表	相互評価	態度	ポートフォリオ	課題	合計
総合評価割合	20	0	0	0	0	80	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	20	0	0	0	0	80	100
分野横断的能力	0	0	0	0	0	0	0