

|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------|----------------------------------|----------------------------------------|---------------------|-----|
| 福島工業高等専門学校                                                                                                |          | 開講年度                                                                                                                                                                   | 平成31年度 (2019年度) |                                  | 授業科目                                   | 計算機化学               |     |
| 科目基礎情報                                                                                                    |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 科目番号                                                                                                      |          | 0151                                                                                                                                                                   |                 | 科目区分                             |                                        | 専門 / 選択             |     |
| 授業形態                                                                                                      |          | 実験・実習                                                                                                                                                                  |                 | 単位の種別と単位数                        |                                        | 履修単位: 1             |     |
| 開設学科                                                                                                      |          | 物質工学科 (R2年度開講分まで)                                                                                                                                                      |                 | 対象学年                             |                                        | 5                   |     |
| 開設期                                                                                                       |          | 前期                                                                                                                                                                     |                 | 週時間数                             |                                        | 2                   |     |
| 教科書/教材                                                                                                    |          | 必要に応じてプリントを配布する。                                                                                                                                                       |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 担当教員                                                                                                      |          | 羽切 正英                                                                                                                                                                  |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 到達目標                                                                                                      |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| ①計算結果や実験結果についての妥当な表現が行えること。<br>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。<br>③モデル分子を組み立て、分子軌道計算によるシミュレーションができること。 |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 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                                                                                                     |          | 到達目標の内容を実践で理解し、応用できる。                                                                                                                                                  |                 | 到達目標の内容を実践で理解している。               |                                        | 到達目標の内容を実践で理解していない。 |     |
| 評価項目2                                                                                                     |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 評価項目3                                                                                                     |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 学科の到達目標項目との関係                                                                                             |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 教育方法等                                                                                                     |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 概要                                                                                                        |          | 主に実習を通じ、化学における計算的手法・シミュレーションの手法について学ぶ。<br>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。<br>また、理工学分野における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、化学情報に関するデータベースの検索方法などについても学修する。 |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 授業の進め方・方法                                                                                                 |          | 演習課題およびレポートなどの成果物を80%、実技や平素の取り組みを20%として総合的に評価し、60点以上を合格とする。<br>定期試験は実施しない。                                                                                             |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 注意点                                                                                                       |          | 毎週課題を与えるので、遺漏なく提出すること。                                                                                                                                                 |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 授業計画                                                                                                      |          |                                                                                                                                                                        |                 |                                  |                                        |                     |     |
|                                                                                                           |          | 週                                                                                                                                                                      | 授業内容            |                                  | 週ごとの到達目標                               |                     |     |
| 前期                                                                                                        | 1stQ     | 1週                                                                                                                                                                     | 電子計算機の利用        |                                  | 電子計算機の外部構造と内部構造<br>化学と情報の関わり           |                     |     |
|                                                                                                           |          | 2週                                                                                                                                                                     | データ処理技法(1)      |                                  | 実験データと表計算                              |                     |     |
|                                                                                                           |          | 3週                                                                                                                                                                     | データ処理技法(2)      |                                  | データ処理と効果的なグラフ化                         |                     |     |
|                                                                                                           |          | 4週                                                                                                                                                                     | 分子モデリングと計算      |                                  | 計算環境の構築・MOPACの利用<br>分子モデルと表示ソフトウェア     |                     |     |
|                                                                                                           |          | 5週                                                                                                                                                                     | 構造解析と振動解析(1)    |                                  | 分子の構造最適化とCO2の振動解析                      |                     |     |
|                                                                                                           |          | 6週                                                                                                                                                                     | 構造解析と振動解析(2)    |                                  | n-ブタンの回転障壁・MEP計算                       |                     |     |
|                                                                                                           |          | 7週                                                                                                                                                                     | 分子軌道計算          |                                  | エチレン・ベンゼンのHOMO-LUMO                    |                     |     |
|                                                                                                           |          | 8週                                                                                                                                                                     | 励起状態計算          |                                  | 共役ポリエン類の励起エネルギー計算                      |                     |     |
|                                                                                                           | 2ndQ     | 9週                                                                                                                                                                     | 反応計算(1)         |                                  | SN2反応のシミュレーション                         |                     |     |
|                                                                                                           |          | 10週                                                                                                                                                                    | 反応計算(2)         |                                  | SN2反応のシミュレーション                         |                     |     |
|                                                                                                           |          | 11週                                                                                                                                                                    | 反応計算(3)         |                                  | SN2反応のシミュレーション                         |                     |     |
|                                                                                                           |          | 12週                                                                                                                                                                    | ネットワークの活用       |                                  | オンラインデータベースとその利用<br>電子ジャーナルの利用・データ検索実習 |                     |     |
|                                                                                                           |          | 13週                                                                                                                                                                    | 理工系における表現技法(1)  |                                  | 理工系における基礎的な文章表現                        |                     |     |
|                                                                                                           |          | 14週                                                                                                                                                                    | 理工系における表現技法(2)  |                                  | 理工系における基礎的な可視化表現                       |                     |     |
|                                                                                                           |          | 15週                                                                                                                                                                    | 理工系における表現技法(3)  |                                  | 理工系における可視化表現とプレゼンテーション法                |                     |     |
|                                                                                                           |          | 16週                                                                                                                                                                    |                 |                                  |                                        |                     |     |
| 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 |
| 基礎的能力                                                                                                     | 工学基礎     | 情報リテラシー                                                                                                                                                                | 情報リテラシー         | 情報を適切に収集・処理・発信するための基礎的な知識を活用できる。 |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 論理演算と進数変換の仕組みを用いて基本的な演算ができる。     |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | コンピュータのハードウェアに関する基礎的な知識を活用できる。   |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 情報伝達システムやインターネットの基本的な仕組みを把握している。 |                                        | 4                   |     |
| 専門的能力                                                                                                     | 分野別の専門工学 | 化学・生物系分野                                                                                                                                                               | 有機化学            | 有機物が炭素骨格を持つ化合物であることを説明できる。       |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 誘起効果と共鳴効果を理解し、結合の分極を予測できる。       |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | σ結合とπ結合の違いを分子軌道を使い説明できる。         |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 芳香族性についてヒュッケル則に基づき説明できる。         |                                        | 3                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 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。  |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | それらの官能基を含む化合物の合成法およびその反応を説明できる。  |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 代表的な反応に関して、その反応機構を説明できる。         |                                        | 4                   |     |
|                                                                                                           |          |                                                                                                                                                                        |                 | 電子論に立脚し、構造と反応性の関係が予測できる。         |                                        | 4                   |     |

|  |  |  |      |                                                    |   |  |
|--|--|--|------|----------------------------------------------------|---|--|
|  |  |  |      | 反応機構に基づき、生成物が予測できる。                                | 4 |  |
|  |  |  | 分析化学 | いくつかの代表的な陽イオンや陰イオンの定性分析のための化学反応について理解できる。          | 4 |  |
|  |  |  |      | 光吸収について理解し、代表的な分析方法について説明できる。                      | 4 |  |
|  |  |  |      | 無機および有機物に関する代表的な構造分析、定性、定量分析法等を理解している。             | 4 |  |
|  |  |  |      | 特定の分析装置を用いた気体、液体、固体の分析方法を理解し、測定例をもとにデータ解析することができる。 | 4 |  |
|  |  |  | 化学工学 | SI単位への単位換算ができる。                                    | 4 |  |
|  |  |  |      | 物質の流れと物質収支についての計算ができる。                             | 4 |  |
|  |  |  |      | 化学反応を伴う場合と伴わない場合のプロセスの物質収支の計算ができる。                 | 4 |  |
|  |  |  |      | 管径と流速・流量・レイノルズ数の計算ができ、流れの状態(層流・乱流)の判断ができる。         | 4 |  |
|  |  |  |      | 流れの物質収支の計算ができる。                                    | 4 |  |
|  |  |  |      | 流れのエネルギー収支やエネルギー損失の計算ができる。                         | 4 |  |
|  |  |  |      | 流体輸送の動力の計算ができる。                                    | 4 |  |
|  |  |  |      | 蒸留の原理について理解できる。                                    | 4 |  |
|  |  |  |      | 単蒸留、精留・蒸留装置について理解できる。                              | 4 |  |
|  |  |  |      | 蒸留についての計算ができる(ラウールの法則、マッケーブシール法等)。                 | 4 |  |
|  |  |  |      | 基本的な抽出の目的や方法を理解し、抽出率など関係する計算ができる。                  | 4 |  |
|  |  |  |      | 吸着や膜分離の原理・目的・方法を理解できる。                             | 4 |  |
|  |  |  |      | バッチ式と連続式反応装置について特徴や用途を理解できる。                       | 4 |  |

| 評価割合    |    |     |      |    |         |     |     |
|---------|----|-----|------|----|---------|-----|-----|
|         | 試験 | 課題等 | 相互評価 | 態度 | ポートフォリオ | その他 | 合計  |
| 総合評価割合  | 0  | 100 | 0    | 0  | 0       | 0   | 100 |
| 基礎的能力   | 0  | 40  | 0    | 0  | 0       | 0   | 40  |
| 専門的能力   | 0  | 60  | 0    | 0  | 0       | 0   | 60  |
| 分野横断的能力 | 0  | 0   | 0    | 0  | 0       | 0   | 0   |