

福井工業高等専門学校		開講年度	令和03年度 (2021年度)		授業科目	情報化学I	
科目基礎情報							
科目番号		0015		科目区分		専門 / 必修	
授業形態		講義		単位の種別と単位数		履修単位: 2	
開設学科		物質工学科		対象学年		2	
開設期		通年		週時間数		2	
教科書/教材		「コンピュータ化学」吉村忠与志、上嶋晃智著、サイエンスハウス(2003)					
担当教員		佐々 和洋					
到達目標							
化学に関連した問題の解決方法を学習し、情報化学について理解することを目標とする。1年次の情報処理の履修を踏まえて、コンピュータ支援の化学問題解決の高度な知識と技術を習得させる。							
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		情報化学について、応用的な問題の解決方法を構築できる		情報化学について、基本的な問題の解決方法を構築できる		情報化学について、基本的な問題の解決方法を構築できない	
評価項目2							
評価項目3							
学科の到達目標項目との関係							
JABEE JE2							
教育方法等							
概要		インターネット時代に適応した化学におけるコンピュータ利用を実践できる能力を育成する。化学に関連した問題の解決方法を学習し、情報化学について理解することを目標とする。1年次の情報処理の履修を踏まえて、コンピュータ支援の化学問題解決の高度な知識と技術を習得させる。					
授業の進め方・方法		本科目は学修単位科目である。従って、授業においては、情報化学に関する講義と演習を行い、さらに、授業外学修のための課題(予習復習、授業内容に関する調査・考察)を課す。教科書に沿って講義と演習を行う。					
注意点							
授業の属性・履修上の区分							
☐ アクティブラーニング		☐ ICT 利用		☐ 遠隔授業対応		☐ 実務経験のある教員による授業	
授業計画							
		週	授業内容		週ごとの到達目標		
前期	1stQ	1週	授業概要、ガイダンス、情報化学の分類		情報化学の分類が理解できる		
		2週	コンピュータ化学の総説		コンピュータ化学の概念、インターネット革命、化学におけるコンピュータ手法に関して理解できる		
		3週	情報倫理		ネットワーク社会の問題点、情報セキュリティポリシーの策定に関して理解できる		
		4週			情報の保護とプライバシーに関して理解できる		
		5週	インターネットによる情報学		インターネットと検索エンジンに関して理解できる		
		6週			化学文献とデータベースに関して理解できる		
		7週	化学情報学		化学構造の表記法に関して理解できる		
		8週	中間試験				
	2ndQ	9週	試験返却、Excelによる問題解決		Excelのプラットフォームに関して理解できる		
		10週			文献の仕様に耐えうる表およびグラフの作成ができる		
		11週			回帰直線（近似直線）：最小二乗法を作成できる		
		12週			正規分布曲線を作成できる		
		13週			二次方程式の解（複数のセルを使ってプログラミング）ができる		
		14週			図形の各種値の算出ができる		
		15週	前期まとめ				
		16週	期末試験返却				
後期	3rdQ	1週	モデリング、分子軌道論		化学におけるモデリング分類および分子軌道論について理解できる		
		2週	フロンティア軌道論		フロンティア軌道論について理解できる		
		3週	分子科学計算		各種分子科学計算について理解できる		
		4週	分子モデリング		コンピュータ上における分子モデリングについて理解できる		
		5週	化学計測		各種計測手段および情報の整理について理解できる		
		6週	Excelによる問題解決		基本統計量および回帰直線式を導出できる		
		7週			回帰曲線および重回帰分析を利用できる		
		8週	中間試験				
	4thQ	9週	試験返却、Excelによる問題解決		ゴールシーク、ソルバーを利用できる		
		10週			分析ツールを利用できる		
		11週	Excelによる行列の計算		行列の和・積・内積が算出できる		
		12週			転置行列・逆行列を算出できる		
		13週			行列式を算出できる		

		14週					行列を用いて連立方程式の解を算出できる	
		15週	固有値・固有ベクトルの算出				固有値・固有ベクトルが算出できる	
		16週	試験返却、後期まとめ					
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。			3	
評価割合								
	試験	発表	相互評価	態度	ポートフォリオ	その他	合計	
総合評価割合	90	0	0	0	0	10	100	
基礎的能力	90	0	0	0	0	10	100	
専門的能力	0	0	0	0	0	0	0	
分野横断的能力	0	0	0	0	0	0	0	