

福井工業高等専門学校		開講年度	令和04年度 (2022年度)		授業科目	コンピュータ化学	
科目基礎情報							
科目番号	0010			科目区分	専門 / 選択		
授業形態	講義			単位の種別と単位数	学修単位: 1		
開設学科	学際領域科目群			対象学年	4		
開設期	後期			週時間数	1		
教科書/教材							
担当教員	佐々 和洋						
到達目標							
(1) コンピュータ化学において、分子動力学法の基礎理論と手法を理解する							
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	分子動力学法の基礎理論と手法が十分に理解できている			分子動力学法の基礎理論と手法が理解できている		分子動力学法の基礎理論と手法が十分に理解できていない	
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	近年の社会では産業や学業の中でコンピュータシミュレーションが用いられることも多くなり、その重要性も高まり続けている。化学の世界においてコンピュータ・ケミストリ（コンピュータ化学）あるいは計算化学、計算科学という言葉が盛んに用いられて久しい。コンピュータ化学は分子設計や材料設計、さらには薬物設計や機能設計といった分野で幅広く利用されている。このコンピュータ化学でよく使用されている分子動力学法および分子軌道法について基礎理論から学習する。						
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、コンピュータ化学に関する講義を行い、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。						
注意点	授業外学修による課題30%、授業内容に関する試験(中間・期末)を70%で評価する。学年成績は前期と後期の平均とする。合格点に満たない場合は、課題の追加提出および再試験を実施し、成績評価を行い、この評点は60点とする。						
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		
後期	3rdQ	1週	コンピュータ化学の役割		コンピュータ化学の種類と重要性		
		2週					
		3週	分子動力学法		分子動力学法のあらまし		
		4週					
		5週			運動方程式の一般的な表し方		
		6週					
		7週			複雑な分子運動を表す運動方程式		
		8週					
	4thQ	9週			分子間に働く力		
		10週					
		11週			運動方程式の数値計算法		
		12週					
		13週			分子動力学法から求められる物理量		
		14週					
		15週	学期末試験				
		16週	授業振り返り				
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
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	70	0	0	0	0	30	100
基礎的能力	0	0	0	0	0	0	0
専門的能力	0	0	0	0	0	0	0
分野横断的能力	70	0	0	0	0	30	100