

鈴鹿工業高等専門学校		開講年度	平成30年度 (2018年度)		授業科目	化学情報工学
科目基礎情報						
科目番号	0010		科目区分		専門 / 選択	
授業形態	授業		単位の種別と単位数		学修単位: 2	
開設学科	総合イノベーション工学専攻 (エネルギー・機能創成コース)		対象学年		専1	
開設期	前期		週時間数		2	
教科書/教材	教科書：配布プリント，参考書：「化学情報」千原秀昭・時実象一著（東京化学同人），「ケミカルアブストラクトの使い方とデータベース利用」笹本光雄著（地人書館），「オンライン・データベース」杉山勝行著（アスキー出版），「分子軌道法」廣田 稯著（裳華房）					
担当教員	長原 滋					
到達目標						
分子軌道計算が反応や材料の開発・解析および分子設計の有用な手段となることを体得し，インターネット等を利用して必要とする化学情報（文献情報，特許情報等）が検索できる。						
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	有機分子の分子軌道計算による物性（紫外可視吸収スペクトル）および反応性（芳香族求電子置換反応，反応中間体の安定性）が予測でき，材料や反応の開発・解析，分子設計に適用できる。		有機分子の分子軌道計算による物性（紫外可視吸収スペクトル）および反応性（芳香族求電子置換反応，反応中間体の安定性）が予測できる。		有機分子の分子軌道計算による物性（紫外可視吸収スペクトル）および反応性（芳香族求電子置換反応，反応中間体の安定性）が予測できない。	
評価項目2	専攻科特別研究に必要な化学情報（文献情報，特許情報）等がインターネット等を利用して検索でき，得られた化学情報が活用できる。		専攻科特別研究に必要な化学情報（文献情報，特許情報）等がインターネット等を利用して検索できる。		専攻科特別研究に必要な化学情報（文献情報，特許情報）等がインターネット等を利用して検索できない。	
学科の到達目標項目との関係						
教育方法等						
概要	化学情報工学では，コンピュータを利用した分子軌道計算と情報検索について学ぶ。分子軌道計算では分子軌道計算プログラムを用いた分子の反応性や物性の予測・推定を，情報検索ではインターネット等を利用した情報検索を行う。					
授業の進め方・方法	・すべての内容は，学習・教育到達目標（B）＜専門＞およびJABEE基準1(2)の(d)(2)a)に対応する。 ・授業は講義およびコンピュータを用いた演習形式で行う。 ・「授業計画」における各週の「到達目標」はこの授業で習得する「知識・能力」に相当するものとする。					
注意点	<到達目標の評価方法と基準> 授業計画の「到達目標」1～4の確認を課題レポート，化学情報検索結果の発表，前期中間試験および前期末試験で行う。評価に対する「到達目標」1～4に関する重みは同じである。合計点の60%の得点で，目標の達成を確認できるレベルの演習課題および試験を課す。 <学業成績の評価方法および評価基準> 前期中間および前期末の2回の試験（各50点満点）の平均点と課題レポートおよび化学情報検索結果の発表（各25点満点，合計50点）の合計で評価する。再試験は行わない。 <単位修得要件> 学業成績で60点以上を取得すること。 <あらかじめ要求される基礎知識の範囲> コンピュータ検索においてはコンピュータやソフトウェアの基本操作ができる必要がある。分子軌道計算については量子化学および分子軌道法の基礎を理解している必要がある。情報検索では多くの情報が英語で書かれているため，英語科目における学習が基礎となる。 <自己学習> 授業で保証する学習時間と，予習・復習（中間試験，定期試験のための学習も含む）および課題レポート・発表資料作成に必要な標準的な学習時間の総計が，90時間に相当する学習内容である。 <備考> 自己学習を前提とした規定の単位制に基づき授業を進め，課題レポートの提出を課すので，自己学習に励むこと。					
授業計画						
		週	授業内容		週ごとの到達目標	
前期	1stQ	1週	分子軌道法と分子軌道計算プログラム 分子軌道計算演習1：有機化合物の最安定構造と物理量		1. 有機分子の分子軌道計算を行うことにより物性を予測し，分子軌道計算が材料の開発・解析および分子設計の有用な手段となることを説明できる。	
		2週	分子軌道計算演習2：芳香族置換反応の主生成物の予測		2. 有機分子の分子軌道計算を行うことにより反応性を予測し，分子軌道計算が反応の開発・解析および分子設計の有用な手段となることを説明できる。	
		3週	分子軌道計算演習2：芳香族置換反応の主生成物の予測		上記2.	
		4週	分子軌道計算演習3：紫外可視吸収スペクトルの予測		上記1.	
		5週	分子軌道計算演習3：紫外可視吸収スペクトルの予測		上記1.	
		6週	分子軌道計算演習4：ダイオキシン類似物の酸化分解中間体の安定性		上記2.	
		7週	分子軌道計算演習4：ダイオキシン類似物の酸化分解中間体の安定性		上記2.	
		8週	中間試験		これまでに学習した内容について説明できる。	
	2ndQ	9週	化学情報と情報検索：一次情報，二次情報，三次情報，文献情報とファクト情報，特許情報		3. 化学情報および情報検索に関する次の事項が簡潔に説明できる：一次情報，二次情報，三次情報，文献情報とファクト情報，特許情報	
		10週	化学情報と情報検索：遡及検索，現状追従調査，コンピュータ情報検索，オンライン情報検索，ISSN，CAS登録番号		3. 化学情報および情報検索に関する次の事項が簡潔に説明できる：遡及検索，現状追従調査，コンピュータ情報検索，オンライン情報検索，ISSN，CAS登録番号	
		11週	ケミカルアブストラクツ（冊子体）による文献検索演習1：化学分野の代表的な二次情報源であるケミカルアブストラクツ（冊子体）を用いて，「特別研究Ⅰ」の研究内容に関する一般事項および化学物質名から文献情報や特許情報などの情報検索を行う		4. 必要とする化学情報（文献情報，特許情報等）がインターネット等を利用して検索でき，検索結果をプレゼンテーション用ソフトウェアを用いて発表できる。	
		12週	ケミカルアブストラクツ（冊子体）による文献検索演習2		上記4.	

		13週	ケミカルアブストラクツ（冊子体）による文献検索演習3	上記4.
		14週	オンライン情報検索演習： ケミカルアブストラクツサービス（CAS）， 科学技術文献情報データベース（JDreamⅢ）， 特許情報	上記4.
		15週	情報検索結果の発表	上記4.
		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
----	----	------	-----------	-------	-----

評価割合

	試験	課題レポート	相互評価	態度	発表	その他	合計
総合評価割合	50	25	0	0	25	0	100
配点	50	25	0	0	25	0	100