

授業科目名	化学情報処理演習
開講年度	2008
学期	後期
開設学科	生産工学部 応用分子化学科
科目区分	専門教育科目
学年	3 年生
担当者	古川茂樹
単位数	1
必修・選択区分	
*本枠内を記述してください。	
キーワード	コンピュータ 化学計算 分子軌道法 分子力学法 OFFICE MATHEMATICA WinMopac
通名者	
授業のねらいと概要	<p>今日コンピュータを利用した化学情報処理には様々な分野がある。化学平衡や反応速度、物質収支や熱収支、気-液平衡、分配、吸着などの化学工学的計算をはじめとして分子軌道計算や分子動力学計算などあらゆる分野でコンピュータの力を借りている。ハードウェアの進歩に伴いソフトウェアも進化しており、多少複雑な計算でもエクセル程度のソフトがあれば比較的短時間で計算できるようになっている。本演習では、第一にエクセルを利用した化学計算を修得する。また簡単な分子軌道計算や分子動力学計算もエクセルのマクロ機能や数学用アプリケーションであるMathematica等を利用することで可能となることを理解してもらう。本格的な分子軌道計算はWinMopacを利用し、計算手法とともに、自ら計算した結果をどのように離散するかを理解させる。</p>
履修上注意・学習上の助言	<p>本講義は量子化学I、有機化学I、無機化学I、分析化学I、応用分子化学実験I、II、III、演習I、II、III受講者を対象とするものです。またコンピュータを利用するための最低限の知識が必要となります。さらにVB (Visual Basic)等プログラミングに関心ある方が望ましい。</p>
1	<p>9/19 ガイダンス：授業の方針、レポートの提出方法；配布物：シラバス、出席票（希望調査） 講義：演習室コンピュータの取り扱い、注意事項 ファイル名等 ソフトウェア確認 (Office, Mathematica, WinMopac)</p>
2	<p>9/26 講義および演習：エクセルについて（日大データベースの紹介を含む（時間があれば）） (1) エクセルの基礎操作（データ入力、計算、関数の利用、グラフ表示）(2) VBAについて（ヒストグラム、回帰分析など） (2) 気体の状態方程式計算（あくまで一例です。テーマが変わることもあります）</p>
3	<p>10/3 講義および演習：エクセルVBAによるプログラミング(その1) (1) マクロ言語(2) セキュリティレベルの設定(3) Visual Basic Editorの起動(4) 簡単なプログラムの入力、実行</p>
4	<p>10/10 講義および演習：エクセルVBAによるプログラミング(その2) (1) コマンドの紹介、応用例(2) 自作のプログラミング 化学計算（化学平衡計算 他）</p>
5	<p>10/17 講義および演習：エクセルVBAによるプログラミング(その3) 化学計算（分子軌道計算 他）（状況に応じてテーマを変更する場合があります）</p>
6	<p>10/24 講義および演習：Mathematicaを利用した化学計算 (1) Mathematicaの基礎</p>
7	<p>11/7 講義および演習：Mathematicaを利用した化学計算 (1) 化学熱力学計算（状況に応じてテーマを変更する場合があります）</p>
8	<p>11/14 講義および演習：Mathematicaを利用した化学計算 (1) 動力学（状況に応じてテーマを変更する場合があります）</p>
9	<p>11/21 講義および演習：Mathematicaを利用した化学計算 (1) 分子軌道計算</p>
10	<p>11/28 講義および演習：WIN MOPACを用いた半経験的分子軌道計算 (1) 分子構造入力 そして計算</p>
11	<p>12/5 講義および演習：WIN MOPACを用いた半経験的分子軌道計算 (1) 分子構造の入力（特別な方法）(2) 基底状態における構造最適化</p>
12	<p>12/12 講義および演習：WIN MOPACを用いた半経験的分子軌道計算 (1) Z-Matrixを利用する 高度な分子配置（化学反応の追跡 (Diels-Alder反応 など)）</p>
13	<p>1/19 講義および演習：WIN MOPACを用いた半経験的分子軌道計算 (1) 励起状態の計算(2) 基底状態との差密度の算出(3) 吸収スペクトルの推算</p>
定期試験	試験 別途定める日時で試験を行なう予定。
教科書	なし
参考文献	<p>『Mathematica Computer Programs for Physical Chemistry, William H. Cropper, Springer』 『Excel VBAによる化学プログラミング、佐藤寿邦、佐藤洋子、著、培風館、3,800円』 『Excelでわかる応用数学 日本理工出版会 刊、2,000円』 『数式モデル構築のための応用数学 微分、積分と微分方程式、市村 恒樹 著、三共出版、2,300円』</p>
成績評価方法	試験：40% 演習：60% （ただし課題を課した場合はその評価は演習に含める）講義中に随時行った、演習は電子ファイルまたはプリントした書類で提出すること。
達成目標	<p>1 Office, Mathematica, WinMopacなどのアプリケーションを利用できる。(30%) 2 簡単な物理化学的現象をシミュレートできる。(25%) 3 簡単なプログラミングができる。(25%) 4 コンピュータを利用して得られた結果を考察できる。(20%)</p>

<b>備考</b>	オフィスアワー：金曜日 16:10～17:50 居室：29号館409教室 (時間外で質問がある場合には予めe-mailまたは電話にてappointmentをとるか、e-mailにより質問を送ってください) TEL：047-474-2585 e-mail：s5furuka@cit.nihon-u.ac.jp 総合成績は、最終試験終了後、一週間以内に居室前に掲示するので、成績に関して意見等がある場合は直ちに申し出ること。
<b>参考ホームページ</b>	<a href="http://www.geocities.jp/furukawa408/">http://www.geocities.jp/furukawa408/</a>