

授業科目	化学情報処理
	Information Processing in Chemistry
担当者	講師 原園 としえ
単位	2
曜日・時限	土曜日2時限

到達目標

本講義の到達目標は、受講生が、化学の領域で情報処理がどのように使われているかを知り、実際の例を演習し、同時に科学的思考力を養う力を身につけられることである。

授業内容

この講義では、講師が作成した使用書（プリント）に沿って、化学情報処理全体の基礎理論を押さえていく。実際の授業は、プリントに記載された実例を説明しながら講義と演習をする。

授業計画

各回の講義内容は一応次のように予定しているが、時間の関係で若干ずれる場合もある。予習は、毎回授業の中で指示する。また、復習としては、授業で行った演習が身につく様にする。

- 1 ガイダンス／化学情報処理の学び方ほか
- 1 5回分の内容紹介、出席メール送信の仕方、成績の付け方の説明、WordとExcel等、授業で使用するソフトのアイコン作成、予習復習の指示。
- 2 表計算ソフトの使い方（1） 中和滴定曲線（強酸と強塩基）のpHの式を化学反応式から導き、滴定曲線を表計算ソフト（Excel）で描かせる。中和滴定曲線で使用するpHの式は、全て予習で各自が導いてくる。
- 3 表計算ソフトの使い方（2） 中和滴定曲線（強酸と弱塩基）のpHの式を化学反応式から導き、滴定曲線を描かせる。
- 4 表計算ソフトの使い方（3） 中和滴定曲線（弱酸と強塩基、弱酸と弱塩基）のpHの式を化学反応式から導き、滴定曲線を描かせる。
- 5 表計算ソフトの使い方（4） 中和滴定曲線の演習で作成した4個のExcel図に関して、Wordを用いてレポート作成を行う。
- 6 指数関数で減衰する曲線（1） 放射性物質は、 α 線、 β 線、 γ 線を放出して、別の原子核に変換していく。この崩壊過程は、指数関数で減衰する曲線で表される。これをExcelの図で描かせ、半減期等を求める。あわせて、放射性物質と放射線の化学的な基礎知識の講義を行う。
- 7 指数関数で減衰する曲線（2） 溶液の光透過度も、溶液濃度に対して、指数関数で減衰する曲線で表される。一方、溶液の吸光度は、溶液濃度に対して、1次の直線で表される。この2つの関係を、1つの図で表す方法を演習する。
- 8 最小2乗法（1） 変数2個でフィットする実験データの関数形を1次の最小2乗法により求める。アルゴリズム（演算手続きを指示する規則）を理解するため、手計算で線形1次関数形を求める。
- 9 最小2乗法（2） 前回の続きで、回帰分析のソフトを用いて1次関数形を求める。
- 10 最小2乗法（3） 変数2個でフィットする実験データの関数形を非線形形の最小2乗法により求める。アルゴリズム（演算手続きを指示する規則）を理解するため、手計算で非線形関数形を求める。
- 11 最小2乗法（4） 前回の続きで、Solvaのソフトを用いて非線形関数形を求める。最小2乗法（1）から（4）までのレポート作成を行なう。
- 12 自主テーマのレポート作成と発表（1） 自主テーマの課題を（a-d）から選択し、テーマを決定する。 a：反応等のプログラムを作成する。 b：Excelを用いて化学に関連した曲線を描く。例えば、キレート滴定曲線、沈殿滴定曲線、酸化還元滴定曲線、緩衝作用曲線等。 c：最小2乗法の解をマトリックス法等で求める。 d：その他。
- 13 自主テーマのレポート作成と発表（2） レポート作成のためのデータ解析、化学式の誘導、及び、データの入力式等を決定する。
- 14 自主テーマのレポート作成と発表（3） レポート作成。
- 15 自主テーマのレポート作成と発表（4） 滴定曲線、最小2乗法、自主テーマのいずれかで、発表をする。

授業運営

講義と演習形式による。講義中の私語、飲食及び無用な出入りは厳禁。また、必ず携帯電話の電源を切ること（マナーモード不可）。さらに、講義中にメールを打つなど特に悪質な違反者は単位を授与しない。

評価方法

表計算ソフトの使い方と最小2乗法、および、自主テーマについては、レポートで評価を行う。指数関数で減衰する曲線については、試験で評価を行う。評価点の割合は、レポート3件：試験：発表＝70：20：10。但し、5回以上の欠席者、レポート1件以上未提出者、試験欠席者については、評価を行わない。

オフィスアワー

授業中、及び、授業前後。