

計算機化学(4C応用化学工学コース, 必修, 1単位)基礎力チェックリスト

氏名:

基礎事項	チェック項目	チェック内容	学生記入欄(自己判定し 該当欄に○)		
			A	B	C
表計算ソフト(1)	基本操作 数学、化学計算への利用 最小二乗法 (実験データの処理)	表計算ソフトの基本構造(セル、行と列、数式と関数)を知り扱うことができる。 表データから合計、平均、標準偏差、順位などを求めることができる。 表データから適切なグラフを作成することができる。 フィル機能を用いて与えられた関数をグラフ表示できる。 行列計算関数を用いてと連立方程式の解を求めることができる。 ゴールシーク機能を用いて一元高次方程式の近似解を求めることができる。 上記二項を化学計算(実在気体の状態方程式、平衡計算等)に応用できる。 与えられた実験データから(一次)回帰式を求め、実験外データの予測や物性定数の算出ができること。			
ネットワーク利用による化学情報検索	化学情報の検索	一般の検索サイトにアクセスし、化学情報検索ができる。 専門サイトにアクセスし、物質データや文献、研究情報の検索や閲覧ができる。			
化学グラフィクス	化学ドローソフト	化学ドローソフト(ISIS Draw)を用いて構造式を含む書類を作成できる。			
表計算ソフト(2)	VBAの基礎 化学計算への応用	アプリケーションにおけるマクロの役割、プログラムの基本構造(流れ)を理解できる。 VBAの基本形式を理解し、マクロ作成の準備ができる。 変数の取り扱い、データの入出力、計算を含むマクロを作成できる。 繰り返し処理、条件分岐処理を含むマクロを作成できる。 化学理論計算、データ処理を行う簡単なマクロを作成することができる。			