

## 教科書「コンピュータ化学」の執筆およびテキスト試用

吉村 忠与志

福井工業高等専門学校物質工学科(〒916-8507 鯖江市下司町 16-1)

### 【緒言】

コンピュータの機能発展とともにあらゆる分野においてコンピュータが利用されるようになり、インターネットの普及によって文書も電子化されて、メールに添付したり、ファイルをダウンロードしたりする方法でのやり取りが常道となりつつある。化学を研究するにも自分のパソコンをインターネットに接続せずには、今や何も出来ない。そして、インターネットに常時接続して利用していると、ウィルスが雨のように降り注ぎ、パソコンに染み込んでくる。それなりのウィルス対策というか、情報セキュリティポリシーが出来ていなければ、インターネットを通しての仕事は当然不可能である。いろいろな申請書や報告書の様式が定められ、テンプレートがインターネットで供給されている。セキュリティ対策を身に付けて、インターネットを上手に利用して化学の研究に活かしたいものである。

### 【執筆動機】

筆者は、パソコン OS が DOS 時代からコンピュータと親しみ、コンピュータと化学という学術分野で活動してきた。特に、化学分野におけるコンピュータ利用に関する学術活動、化学 PC 研究会、化学ソフトウェア学会、そして、日本コンピュータ化学会と、学術の輪を広めてきた。1997 年に「コンピュータ・ケミストリー入門」なる単行本を執筆し、教科書としての利用を進めてきた。しかし、インターネット時代となった今日、インターネットに適応した教科書への転換が必要となり、この本を全面的に改訂することにした。そして、その書名も「コンピュータ化学」とした。インターネット時代の化学情報工学を学習するためのものである。

### 【章立て】

第 1 章「コンピュータ化学とは」で、コンピュータ化学の学術的な意義を学習し、第 2 章「ネットワーク社会のルールと倫理」で、情報セキュリティ対策と情報倫理を学習し、第 3 章「インターネットによる情報学」で、インターネットを通して化学情報源を如何に効率よく検索するかを学び、第 4 章「Excel による化学問題解決」で、Excel をプラットフォームとして化学問題を解決する手法を学習し、第 5 章「化学統計学」で、多変量統計解析手法を学び、第 6 章「化学グラフィックス」で、ChemDraw で化学的意味を持つ文書作りを、PowerPoint でプレゼンテーション手法を学び、第 7 章「分子モデリング」で、分子科学計算に伴う分子軌道および分モデリングについて学び、第 8 章「化学計測」で、生体から学ぶ化学計測手法の研究成果を学び、最後に、第 9 章「インターネット教育工学」で、インターネットからの化学教材を学習するように、章立てを行った。

### 【テキスト試用】

インターネットが生活基盤となりつつある今日、高等教育機関に学ぶ学生には、初中等教育で学んだ情報リテラシーを踏まえて、より高度の情報技術を学ばせる必要がある。そして、化学を専攻する学生には、より高度なテーマでのコンピュータ化学を学習させることが重要である。巷には、工学教育プログラムを認定する JABEE 基準なるものが教育目標を挙げ、数学、自然科学、情報技術に関する基礎知識とそれらに応用できる能力や、種々の科学・技術・情報を利用して社会の要求を解決するためのデザイン能力の養成を掲げている。本書は、正にその教育目標と一致したものであり、インターネット時代の情報技術を駆使し、社会の要請する化学技術による問題解決のためのデザイン能力を培うことを教育目標としている。