

# 理學院

## 107 學年度第一學期模組化課程

分子與材料模擬技術

Molecular and Materials Simulation Techniques

授課教師：

鄭沐政

國立成功大學化學系

課程類別	學分數	選必修	開課人數	開課日期及上課時間	上課地點
實驗	1	選修	25	2018/08/27(一)-2018/08/31(五) 9:00-16:00 ※學生自備筆電 ※實際上課時間以實驗進度而定 ※化學系學生修習本課程不計入畢業學分	

先修課程或先備能力：

無

建議修課年級：

不設限

建議修課學生背景：

適合各領域學生修習

教學方法：

講授 30 %、實作(電腦模擬.實驗) 70 %

評量方式：

實驗操作 85 %、出席率 15 %

補充說明：

學生須於每天課程結束前一個小時，以當天所學的模擬技術，完成指定的練習題

學習規範：

無

課程概述：

隨著電腦運算速度的大幅提升與量子理論方法的高速發展，量子力學模擬在「化學」、「化工」、與「材料」的研究上扮演著日益重要的角色。今日，科學家已可藉由量子力學模擬來判定化學反應機構、或利用高通量篩選快速尋找所需要的材料或催化劑。本課程的主要目的在教導大學生或研究生運用兩套熱門的商業軟體 VASP 與 Gaussian09 以模擬材料與分子的物理與化學性質。

~接續下頁~

# 理 學 院

## 107 學年度第一學期模組化課程

課程進度：

堂次	時數(小時)	進度說明
1	8	1. 如何使用 Gauss View 建立分子模型 2. 如何使用 Gaussian09 優化分子結構 3. 如何使用 Gauss View 分析 Gaussian09 計算結果
2	8	1. 如何使用 Gaussian09 預測 IR 與 Raman 光譜 2. 如何使用 Gaussian09 預測 NMR 光譜 3. 如何使用 Gaussian09 預測 UV-Vis 光譜
3	8	1. 如何使用 Gaussian09 預測化學反應的反應熱 2. 如何使用 Gaussian09 預測分子的氧化還原電位 3. 如何使用 Gaussian09 預測分子的 pKa
4	8	1. 如何使用 Linux 作業系統 2. 如何結合 Materials Project 與 Crystal Maker 建立材料模型 3. 如何使用 VASP 進行材料模擬
5	8	1. 如何使用 P4VASP 分析 VASP 計算結果 2. 如何使用 VASP 研究化學反應 3. 如何結合 VASP 計算與 Wulff Construction 預測奈米粒子的形狀

課程學習目標：

- 1、熟悉各種量子力學計算軟體的操作與使用。
- 2、熟悉高速電腦與 Linux 作業系統的操作與使用。
- 3、藉由分析模擬的結果以增進學生對分子與材料性質的了解。

課程的重要性、跨域性與時代性：

### 完整性

本課程提供一條龍式的訓練，從教導學生如何建立分子與材料之模型、到運用不同軟體執行各種物理、化學性質模擬、並分析其結果，完整地培養學生進行量子力學模擬的能力。

### 聚焦性

本課程著重於學生對材料與分子模擬能力、技術的訓練，並大幅地減少理論原理的講解，以降低課程的難度，並增加其趣味性。

### 跨域性

本課程培養學生運用量子力學進行分子與材料模擬的能力，讓學生可從事「化學」、「化工」、與「材料」的跨領域的研究。

### 當代性

隨著科技的發展，量子力學模擬在「化學」、「化工」、與「材料」等領域上的應用越來越熱門，相信這門課將會帶給學生一個全新而且獨特的技能。

# 理 學 院

## 107 學 年 度 第 一 學 期 模 組 化 課 程

其他備註:

課程網址:

<https://www.mjcheng.ch.ncku.edu.tw/>

課程教材:

- (1) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models (by Christopher J. Cramer);
- (2) Density Functional Theory: A Practical Introduction (by David Sholl)