

理 學 院

111 學 年 度 第 一 學 期 模 組 化 課 程

分子模擬技術

Molecular Simulation Techniques

授課教師 任職單位 畢業學校

鄭沐政 國立成功大學化學系 加州理工學院

課程類別 學分數 選必修 開課人數 其他注意事項

Lecture + Recitation 1 選修 25 修習過「分子與材料模擬技術」課程者，本門課不予承認

先修課程或先備能力

無

課程難易度

難 中偏難 中偏易 易

建議修課學生背景

適合各領域學生修習

教學方法

講授 70%，實作 30%

評量方式

作業 100%

補充說明：

每天課程結束會有作業，共五份作業，每份作業 20 分，總分 100 分，無考試。

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。

課程概述(英文)

With significant increase in computing power and fast development of theoretical methods, nowadays quantum mechanical simulation plays an important role in the field of chemistry, chemical engineering, and material sciences. Today, scientists are able to determine mechanisms of complicated chemical reactions and to high-throughput screen the needed materials or catalysts by using quantum mechanical simulations. The goal of this course is to teach undergraduate and graduate students how to use one commercial software, Gaussian 09, to simulate physical and chemical properties of molecules.

理 學 院

111 學 年 度 第 一 學 期 模 組 化 課 程

課程進度

日期	時間	進度說明
7/4(一)	13:00-17:00	1. 量子化學計算基礎 2. 如何使用 Gauss View 建立分子模型 3. 如何使用 Gaussian09 優化分子結構 4. 如何使用 Gauss View 分析 Gaussian09 計算結果
7/5(二)	13:00-17:00	1. 如何使用 Gaussian09 預測 IR 與 Raman 光譜 2. 如何使用 Gaussian09 預測 UV-Vis 光譜
7/6(三)	13:00-17:00	1. 如何使用 Gaussian09 預測 NMR 光譜 2. 如何使用 Gaussian09 判定分子的芳香性
7/7(四)	13:00-17:00	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
7/8(五)	13:00-17:00	1. 如何使用 Gaussian09 預測反應能量曲面

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。

[時代性]

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。

其他備註

參考書目

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