

课程大纲

COURSE SYLLABUS

1.	课程代码/名称 Course Code/Title	CHE5022/理论与计算化学												
2.	课程性质 Compulsory/Elective	专业课												
3.	课程学分/学时 Course Credit/Hours	3.00/48												
4.	授课语言 Teaching Language	中文												
5.	授课教师 Instructor(s)	李隽												
6.	先修要求 Pre-requisites	无												
7.	教学目标 Course Objectives	<p>计算化学是以计算机为工具，从量子力学、分子力学、统计力学等基础理论出发，借助于计算机软件来解决物质性质等化学相关问题的新学科。计算化学课程是多学科交叉的边缘课程，其内容不仅涉及结构化学、量子化学，还包含分子力学、分子动力学、从头算方法、半经验方法，密度泛函方法等计算方法的原理与方法。在计算软件部分，我们将目前较为广泛使用的 ChemOffice, GaussView, Gaussian 等分子建模、化学作图、科学作图和科学计算软件的使用等引入教学，在典型算例部分，将利用计算机软件获得物质的几何结构，分子轨道，电荷分布，以及反应的电子能，焓变，自由能，反应速率等结果。使学生全面掌握应用计算化学解决化学相关问题的基本概念、基本原理、基本方法和基本技能，拓宽学生的理论基础，培养学生的创新思维与创造能力。通过理论与上机相结合的授课方式，促使学生掌握具体问题具体分析，将理论知识融会贯通在实际问题的处理过程中。通过实际项目的完成，培养学生思考问题，解决问题的能力。</p>												
8.	教学方法 Teaching Methods	<p>计算化学是化学系必修课，共 3 学分，48 学时。教材为“Computational Chemistry - Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics”，部分内容有删减。该课程以计算机为工具，从量子力学、分子力学、统计力学等基础理论出发，借助于计算机软件来解决物质性质等化学相关问题的新学科。计算化学课程是多学科交叉的边缘课程，其内容不仅涉及结构化学、量子化学，还包含分子力学、分子动力学、从头算方法、半经验方法，密度泛函方法等计算方法的原理与方法。在计算软件部分，我们将目前较为广泛使用的 ChemOffice, GaussView, Gaussian 等分子建模、化学作图、科学作图和科学计算软件的使用等引入教学，在典型算例部分，将利用计算机软件获得物质的几何结构，分子轨道，电荷分布，以及反应的电子能，焓变，自由能，反应速率等结果。使学生全面掌握应用计算化学解决化学相关问题的基本概念、基本原理、基本方法和基本技能，拓宽学生的理论基础，培养学生的创新思维与创造能力。</p>												
9.	教学内容 Course Contents	<table border="1" style="width: 100%; border-collapse: collapse;"> <tr> <td style="text-align: center;">Section 1</td> <td>简介 (Introduction)</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">Section 2</td> <td>基本论题 (Part I. BASIC TOPICS)</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">Section 3</td> <td>应用 (Part III. APPLICATIONS)</td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">Section 4</td> <td></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">Section 5</td> <td></td> </tr> <tr> <td style="text-align: center;">Section 6</td> <td></td> </tr> </table>	Section 1	简介 (Introduction)	Section 2	基本论题 (Part I. BASIC TOPICS)	Section 3	应用 (Part III. APPLICATIONS)	Section 4		Section 5		Section 6	
Section 1	简介 (Introduction)													
Section 2	基本论题 (Part I. BASIC TOPICS)													
Section 3	应用 (Part III. APPLICATIONS)													
Section 4														
Section 5														
Section 6														

	Section 7	
	Section 8	
	Section 9	
	Section 10	
	
10.	课程考核 Course Assessment	
	①考试；②平时成绩 30%，笔试成绩 50%，上机成绩 20%。	
11.	教材及其它参考资料 Textbook and Supplementary Readings	
	Computational Chemistry 作者: David C. Young 互联网资源: http://www.docin.com/p-379293984.html http://www.wpi.edu/Pubs/E-project/Available/E-project-031014-153531/unrestricted/Computational_Chemistry_in_the_High_School_Classroom.pdf	