

计算化学理论与实践 课程教学大纲

Course Outline

课程基本信息 (Course Information)					
课程代码 (Course Code)	001-(2018-2019-1)CA369	*学时 (Credit Hours)	48	*学分 (Credits)	1.5
*课程名称 (Course Title)	(中文) 计算化学理论与实践				
	(英文) Computational Chemistry: Theory and Practice				
*课程性质 (Course Type)	本科生专业必修课				
授课对象 (Target Audience)	致远荣誉计划化学方向				
*授课语言 (Language of Instruction)	中文/英文 (双语)				
*开课院系 (School)	化学化工学院				
先修课程 (Prerequisite)	化学原理, 物理化学(1), 数学分析或高等数学、物理学导论或大学物理				
授课教师 (Instructor)	吴量	课程网址 (Course Webpage)			
*课程简介 (Description)	基于量子力学的理论计算化学已经成为化学学科中不可或缺的研究方法。理论计算化学对于阐述实验现象、在分子甚至电子水平理解化学过程发挥着巨大作用。一方面, 本课程在延续物理化学、高等数学等先修课程的相关内容的基础上, 着重讲述量子力学的基本原理、量子力学在在化学问题的应用以及量子化学理论发展; 另一方面, 通过上机使用计算化学软件, 解决相关化学问题, 加深对于化学的基本原理的认识, 初步掌握计算化学的理论和计算方法。				
*课程简介 (Description)	Theory and computational chemistry based on quantum mechanics, is an indispensable tool for research of chemical science. Theory and computational chemistry enable us to explain and understand experimental observation and chemical process at molecular or even electronic level. In the course based on the preparatory courses such as physical chemistry, college mathematics. The focus of the course is placed on principles of quantum mechanics, the applications of quantum mechanics in chemistry and theoretical development of quantum chemistry. On the other hand, computer experiments and computation using computational chemistry software are required to deepen the understanding of chemical principles, theory and methods in computational chemistry.				
课程教学大纲 (course syllabus)					

<p>*学习目标 (Learning Outcomes)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. 掌握量子化学的基本理论 2. 掌握计算化学软件的基本使用方法 3. 使用量子化学软件计算分子电子结构性质、光谱、热力学性质的能力 4. 初步具备应用计算化学手段探索化学问题的能力，基本应用现有量子化学理论和计算工具解释实验现象。 																																																																																																												
<p>*教学内容、进度安排及要求 (Class Schedule & Requirements)</p>	<table border="1"> <thead> <tr> <th>教学内容</th> <th>学时</th> <th>教学方式</th> <th>作业及要求</th> <th>基本要求</th> <th>考查方式</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>理论计算化学引论</td> <td>2</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>量子力学原理</td> <td>2</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>近似理论</td> <td>2</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>自洽场理论</td> <td>4</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>电子相关</td> <td>3</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>量子化学的基组</td> <td>2</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>密度泛函理论</td> <td>4</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>分子对称性</td> <td>2</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>量子化学的应用</td> <td>6</td> <td>讨论</td> <td>口头表述</td> <td>活跃</td> <td>思想性</td> </tr> <tr> <td>量子化学软件的使用</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>原子、分子轨道的计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>分子轨道、结构及能量的量子化学计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>分子光谱的量子化学计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>分子间弱相互作用能的计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>化学反应的量子化学计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> <tr> <td>化学变化的熵、焓及自由能变的计算</td> <td>3</td> <td>实验</td> <td>实验报告</td> <td>规范</td> <td>实验结果</td> </tr> </tbody> </table>							教学内容	学时	教学方式	作业及要求	基本要求	考查方式	理论计算化学引论	2	讨论	口头表述	活跃	思想性	量子力学原理	2	讨论	口头表述	活跃	思想性	近似理论	2	讨论	口头表述	活跃	思想性	自洽场理论	4	讨论	口头表述	活跃	思想性	电子相关	3	讨论	口头表述	活跃	思想性	量子化学的基组	2	讨论	口头表述	活跃	思想性	密度泛函理论	4	讨论	口头表述	活跃	思想性	分子对称性	2	讨论	口头表述	活跃	思想性	量子化学的应用	6	讨论	口头表述	活跃	思想性	量子化学软件的使用	3	实验	实验报告	规范	实验结果	原子、分子轨道的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果	分子轨道、结构及能量的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果	分子光谱的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果	分子间弱相互作用能的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果	化学反应的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果	化学变化的熵、焓及自由能变的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果
教学内容	学时	教学方式	作业及要求	基本要求	考查方式																																																																																																								
理论计算化学引论	2	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
量子力学原理	2	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
近似理论	2	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
自洽场理论	4	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
电子相关	3	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
量子化学的基组	2	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
密度泛函理论	4	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
分子对称性	2	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
量子化学的应用	6	讨论	口头表述	活跃	思想性																																																																																																								
量子化学软件的使用	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
原子、分子轨道的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
分子轨道、结构及能量的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
分子光谱的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
分子间弱相互作用能的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
化学反应的量子化学计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
化学变化的熵、焓及自由能变的计算	3	实验	实验报告	规范	实验结果																																																																																																								
<p>*考核方式 (Grading)</p>	<p>成绩 100% 8 次作业报告占 40%，综合作业报告占 60%</p>																																																																																																												
<p>*教材或参考资料 (Textbooks & Other Materials)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. 《Computational Chemistry Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics》 (2nd Edition), Errol G. Lewars, Springer 2. 《量子化学-基本原理和从头计算法》上册、中册，主编：徐光宪、黎乐民、王德民，科学出版社 3. 《Exploring Chemistry with Electronic Structure Method》 James B. Foresman, Aeleen Frisch. 																																																																																																												

其它 (More)	
备注 (Notes)	

备注说明：

1. 带*内容为必填项。
2. 课程简介字数为 300-500 字；课程大纲以表述清楚教学安排为宜，字数不限。