

# 2019 년도 1학기 수업계획서

자연과학대학

과목코드	4446068	과목명	컴퓨터와화학(Computers and Chemistry)				
분반	1	강의실	자1호관 407	요일및시간	화9/금7,8	학점및시수	3-3-0-0
담당교수명	이주용	연구실	자1호관 116	면담시간		전 화	
성적평가	중간 : 40% 기말 : 40% 과제 : 15% 출석 : 5% 기타 : %					평가방법	등급
수강대상	화학과 전공 3,4학년			교과구분	전선	교직구분	
교과목표 및 개요	양자역학과 통계열역학의 기초를 배우고 컴퓨터를 이용해서 화학 및 생분자들의 구조와 운동을 모사하는 방법에 대해서 실제 연구에서 사용되는 프로그램들의 실습을 수행한다.						
수업운영 방식	이론과 실습을 병행할 것임. 이론 시간에는 주로 양자역학과 통계열역학의 기초 이론에 대해서 수업을 진행할 예정이다. 실습시간에는 양자역학 프로그램과 분자동역학 프로그램의 기초에 대해서 배운다. 이론 수업은 영어로 진행될 예정임.						
교재 및 참고문헌							
선수과목 및 지식	물리화학 1,2 생화학에 관련된 지식이 있으면 도움이 될 것임						
수업효과 및 기대	컴퓨터에 대한 기본적인 지식과 컴퓨터를 이용한 분자모델링의 기초를 학습하고, 최신의 계산 화학 연구들의 동향에 대해서 알 수 있을 것으로 기대한다.						
장애학생 지원안내	장애유형(시각, 청각, 지체)						
	강의지원						
	과제지원						
	평가관련						
	※ 본교과목을 수강하는 장애학생은 수업에 필요한 별도 도움이 필요한 경우 담당교수님과 협의 후 장애학생지원센터(033-250-6037)로 수업에 필요한 도움을 요청하기 바람.						
기타 안내사항							
주차	수업내용			교재범위 및 과제물		비고	
1	개요: 화학 전반에서 컴퓨터가 어떻게 사용되는지에 대한 개괄 및 기본적인 컴퓨터의 활용 방법			강의자료			
2	화학 데이터 베이스			강의자료			
3	작은 분자 모델링 - Fragmentation, SMILES			강의자료			
4	양자 역학의 기초와 가우시안을 이용한 간단한 양자 계산			강의자료			
5	양자 역학의 기초와 가우시안을 이용한 간단한 양자 계산(2)			강의자료			
6	단백질 구조 모델링의 기초			강의자료			
7	단백질 구조 모델링의 실제			강의자료			
8	단백질-리간드 결합 시뮬레이션의 이론적 기초			강의자료			
9	단백질-리간드 결합 시뮬레이션의 실제			강의자료			

주차	수업내용	교재범위 및 과제물	비고
10	몬테카를로 시뮬레이션	강의자료	
11	몬테카를로 시뮬레이션 (2)	강의자료	
12	정규양상불과 분자동역학의 기초	강의자료	
13	분자동역학의 응용	강의자료	
14	QSAR	강의자료	
15	QSAR (2)	강의자료	

※ 교직관련 교과목[교직이론(교직소양, 교육실습 포함), 교과교육학, 교과내용학]의 경우는 비고란에 현장학교 교육과정과의 연관성(교과내용학의 경우 주차별 강의 주제와 관련 중고등학교 단원명 제시)을 기재