

# 확장형 표준 강의계획서

(2019학년도 1학기)

## I. 교과목 정보

교과목명	기초 전자 밀도함수 이론		개설 학과	대학원 신소재공학과 응용소재		
설강 학기	1학기		학점 시수 및 평가	3-3-0 / GRADE		
담당교수	김현유		교수소속	신소재공학과		
학과전화			담당교수전화			
기대 역량	1순위		2순위		3순위	

## II. 교과목 개요(Course Overview)

1. 수업개요							
이 수업에서는 석-박사 레벨의 연구에서 Density functional theory (DFT)를 직접 연구에 활용하기 위한 기본 개념을 강의하고, 수강생들이 시뮬레이션/계산 방법론을 활용하기 위한 기초 이론을 강의한다.							
2. 선수학습내용							
물리화학 1,2. 고체물리 및 고체화학. 양자역학/양자화학 기본. 결정론. 무기화학. 유기화학.							
3. 수업방법(%)							
강의	토의/토론	실험/실습	현장학습	개별/팀 별 발표	기타		
100%	%	%	%	%	%		
4. 평가방법(%)							
중간고사	기말고사	퀴즈	출석	과제	포트폴리오	참여도	기타
33%	33%	%	33%	%	%	%	1%

## III. 교과목표(Course Objective)

Density functional theory (DFT)의 구조와 기본 이론 이해.
------------------------------------------------

#### IV. 수업운영방식(Course Format)

(II-3의 수업방법의 구체적 설명)

강의 100%

#### V. 학습 및 평가활동(Course Requirements and Grading Criteria)

(II-4의 평가방법의 구체적 설명)

중간 및 기말고사. 성취도 및 진행 성과에 따라 기말고사 100%로 전환할 수 있음.

#### VI. 수업 규정(Course Policies)

이 강의는 소재의 전자구조에 대한 이해가 가능한 정도의 기본적 소양이 갖춰진 석-박사 과정 학생들의 연구력 향상에 중점을 둠.  
따라서, 양자화학/역학과 고체의 전자구조에 대한 기본 이해 필수. Hartree fock 이론과 Schrodinger equation에 대한 기본 이해 필수.

#### VII. 교재 및 참고문헌(Materials and References)

A Chemist's Guide to Density Functional Theory, Second Edition  
Prof. Dr. Wolfram Koch Dr. Max C. Holthausen

#### VIII. 주차별 강의계획(Course Schedule)

(\*추후 변경될 수 있음)

1주차	학습목표 및 주요학습내용	Schrodinger equation 구조
	과제	
	기타 사항	
2주차	학습목표 및 주요학습내용	Schrodinger equation 구조
	과제	
	기타 사항	
3주차	학습목표 및 주요학습내용	Hartree fock 이론을 이용한 Schrodinger equation의 전개
	과제	
	기타 사항	
4주차	학습목표 및 주요학습내용	Hartree fock 이론을 이용한 Schrodinger equation의 전개
	과제	

	기타 사항	
5주차	학습목표 및 주요학습내용	Hartree fock 이론을 이용한 Schrodinger equation의 전개
	과제	
	기타 사항	
6주차	학습목표 및 주요학습내용	다전자 시스템에 대한 Schrodinger equation 전개
	과제	
	기타 사항	
7주차	학습목표 및 주요학습내용	Kohn Sham equation
	과제	
	기타 사항	
8주차	학습목표 및 주요학습내용	Kohn Sham equation
	과제	
	기타 사항	
9주차	학습목표 및 주요학습내용	Kohn Sham equation
	과제	
	기타 사항	
10주차	학습목표 및 주요학습내용	Kohn Sham equation
	과제	
	기타 사항	
11주차	학습목표 및 주요학습내용	exchange, correlation holes
	과제	
	기타 사항	
12주차	학습목표 및 주요학습내용	exchange, correlation holes
	과제	

	기타 사항	
13주차	학습목표 및 주요학습내용	Exchange-correlation energy
	과제	
	기타 사항	
14주차	학습목표 및 주요학습내용	Exchange-correlation functionals
	과제	
	기타 사항	
15주차	학습목표 및 주요학습내용	Hybrid exchange-correlation functionals
	과제	
	기타 사항	

**IX. 참고사항(Special Accommodation)**

**X. 장애학생 학습편의 제공안내**

■ 기본사항 : 장애학생은 학기 첫 주에 교과목 담당교수와의 면담을 통해 출석, 강의, 과제 및 시험에 관한 교수학습 지원 사항을 요청할 수 있으며, 요청된 사항에 대해 담당교수 혹은 장애학생지원센터를 통해 지원받을 수 있습니다.

■ 장애유형 별 세부 수강지원 내역

- 시각장애
  - 강의 : 장애정도에 따라 유인물 사전 배포 및 녹음 허용, 맹인 안내견 동행 허용, 교재(한글파일, 전자파일, 텍스트 녹음도서, 화면해설이 붙어있는 동영상 등), 보조기기(녹음기, 점자정보단말기(한소네), 한소네 보이스, 노트북 등 저시력 학생)
  - 과제 : 대안적 과제 및 평가제시(구어로 발표, 녹음 또는 한글파일로 제출), 과제 제출기간 연장
  - 평가 : 점자나 큰 활자로 제시된 문제지 활용, 구두 또는 컴퓨터로 답안 작성 허용, 독립된 환경에서 평가 제공 및 대필이나 음성녹음 방법으로 시험지 제출 허용
- 청각장애
  - 강의 : 수화통역(원격교육 연계), 지정좌석제, 노트북, FM보청기 사용 허용, 강의 속도 조절(속기 도우미 지원),
  - 과제 : 청각 관련 과제는 다른 형태의 과제로 대체 제출, 조별과제의 경우 제출기한 연장
  - 평가 : 시간 연장, 수화 등 대안적 평가 허용, 수화통역 등, 독립된 환경에서 평가 제공
- 지체장애
  - 강의 : 노트필기가 어려운 경우 노트북 및 녹음기 사용 허용, 척수장애 학생은 적절한 휴식시간 제공 등
  - 과제 : 비장애학생과의 형평성을 고려하여 수행 가능한 과제(분량) 제시, 이동권 보장 등
  - 평가 : 상지사용이 어려운 경우 워드사용 가능, 시험 시간 연장, 시험치는 방법(단답형, 선택형 문제 제출) 고려, 시험 대필 및 독립된 환경에서 평가 제공
- 기타장애 : 기타 장애의 경우 장애유형 및 장애정도에 따라 사전 협의

☎ 문의 : 장애학생지원센터(821-5057)