



2025-2학기 수업계획서



교과목명	계산화학특론	교수명	임동희
교과목 개요	화학반응의 원자 및 분자단위 해석에 활용되는 밀도범함수이론 모델링에 필요한 양자역학 이론 지식 및 고체 촉매구조 계산을 위한 고체물리학 이론에 대해 배운다. 또한, 밀도범함수이론 모델링 툴인 The Vienna Ab initioSimulation Package (VASP) 프로그램에 대한 이해와 활용을 위한 관련 이론을 배운다.		
학습 목표	본 강의에서는 환경공학과 대학원생을 위한 계산화학이론 수업으로서 기초 물리 양자역학, 밀도범함수이론, 기초 고체물리학 이론 등을 배우며, VASP을 활용한 고체물리학 밴드이론 및 응용방법을 배우는 것을 목표로 한다.		
주차별 수업계획서(블렌디드 적용 및 교수-학습 활동)			
주별	수업내용		
1주	밀도범함수이론(DFT) 연구 소개		
2주	기초물리 양자역학 (1): 푸리에 급수, 2계제차선형 상미분방정식		
3주	기초물리 양자역학 (2): 1차원 파동방정식, 파동방정식 풀이		
4주	기초물리 양자역학 (3): 빛의 성질, 원자의 성질		
5주	슈뢰딩거 방정식 (1): 파동의 표현, 슈뢰딩거 방정식		
6주	슈뢰딩거 방정식 (2): 양자화된 에너지, 불확정성 원리, 유한퍼텐셜 우물, 터널링 효과		
7주	DFT 소프트웨어 16: Gaussian input 설정, GaussView 활용		
9주	DFT 소프트웨어 VASP 계산 (1): DFT 연구 소개, 고체 크리스탈 구조 이해		
10주	VASP 계산 (2): 고체 벌크 및 표면 구조 최적화		
11주	VASP 계산 (3): 촉매효율 평가, VASP 사용법		
12주	역격자 이해: 푸리에 변환, 블로흐 정리		
13주	VASP 계산 (4): 전자구조의 이해		
14주	VASP 계산 (5): 전자구조 분석(CDD, 일함수)		

