



課 綱 Course Outline  
化學系國際組

中文課程名稱 Course Name in Chinese	計算化學				
英文課程名稱 Course Name in English	Computational Chemistry				
科目代碼 Course Code	CHEMM0070	班 別 Degree	碩士班 Master' s		
修別 Type	選修 Elective	學分數 Credit(s)	3.0	時 數 Hour(s)	3.0
先修課程 Prerequisite					
課程目標 Course Objectives					
介紹目前在化學研究上，經常被使用之電腦程式及其在化學研究之應					
系教育目標 Dept.' s Education Objectives					
1	培育化學專業人才				
2	培育化學相關領域人才				
3	培育具國際視野之科技人才				
系專業能力 Basic Learning Outcomes				課程目標與系專業能力相關性 Correlation between Course Objectives and Dept.' s Education Objectives	
A	具備化學專業知識			●	
B	具備獨立思考及分析解決問題之能力			●	
C	具備設計與執行化學實驗之能力			○	
D	具備國際視野與外語能力			○	
圖示說明Illustration : ● 高度相關 Highly correlated ○ 中度相關 Moderately correlated					
課程大綱 Course Outline					

1. 計算化學概論
2. 程式設計之概論及化學應用
3. 能量計算、分子結構形狀
4. 化學性質預測
5. 大數據資源之分析及利用

資源需求評估 (師資專長之聘任、儀器設備的配合 . . . 等)  
Resources Required (e.g. qualifications and expertise, instrument and equipment, etc.)

電腦程式：Gaussian  
Perl/Python/Shell Programming/Excel

課程要求和教學方式之建議  
Course Requirements and Suggested Teaching Methods

教課與電腦操作應同步進行，互相配合

其他  
Miscellaneous