

淡江大學 110 學年度第 1 學期課程教學計畫表

課程名稱	電腦在化學上的應用	授課 教師	蔡旻燁 MIN-YEH TSAI
	COMPUTER APPLICATIONS IN CHEMISTRY		
開課系級	化學系材化二A	開課 資料	實體課程 選修 單學期 3學分
	TSCDB2A		
課程與SDGs 關聯性	SDG3 良好健康和福祉 SDG9 產業創新與基礎設施		
系 (所) 教育目標			
<p>一、培養化學基本、專業知識及實驗技巧。</p> <p>二、培養專業化學實務執行之能力。</p> <p>三、培養專業化學倫理與終身學習之能力。</p>			
本課程對應院、系(所)核心能力之項目與比重			
<p>A. 具備物理、數學等基礎科學知識，並且運用於基礎化學領域。(比重：15.00)</p> <p>B. 具備如有機、物化、無機、與儀器分析等基礎化學知識，並以此知識擴展於生物化學、材料化學及其他專業化學領域之能力。(比重：70.00)</p> <p>D. 具備資料蒐集與分析能力並且運用於專業化學的專題研究與書報討論之能力。(比重：10.00)</p> <p>E. 具備專業化學職場的專業倫理與未來化學專業問題解決之能力。(比重：5.00)</p>			
本課程對應校級基本素養之項目與比重			
<p>2. 資訊運用。(比重：60.00)</p> <p>5. 獨立思考。(比重：40.00)</p>			
課程簡介	<p>本課程將簡介各種化學應用軟體，包含專業軟體以及線上化學資源。課堂內容包含分子模型的建立、視覺化、電子結構計算、分子動力學模擬、結構預測以及人工智慧在化學的應用。我們會學習到的工具包含模型建構軟體、簡單的腳本程式語言(ex. python)、化學以及生物資訊網站以及免費的雲端計算工具等資源。學生能夠了解如何利用電腦以及網路資源來搜集專業的化學知識，並建立解決化學問題的虛擬實驗平台。</p>		

In this course, I will introduce a variety of professional chemistry software including online tools. Specifically, the contents include molecular modeling, visualization, electronic structure, molecular dynamics simulation, structure prediction, and AI applications. Students will be learning to use molecular browsers, simple scripting languages (ex. python), chem and bioinformatics, and cloud computing resources. Students will be able to understand how to use computers and online tools to construct a virtual platform in order to solve chemical questions of interest.

本課程教學目標與認知、情意、技能目標之對應

將課程教學目標分別對應「認知 (Cognitive)」、「情意 (Affective)」與「技能(Psychomotor)」的各目標類型。

- 一、認知(Cognitive)：著重在該科目的事實、概念、程序、後設認知等各類知識之學習。
- 二、情意(Affective)：著重在該科目的興趣、倫理、態度、信念、價值觀等之學習。
- 三、技能(Psychomotor)：著重在該科目的肢體動作或技術操作之學習。

序號	教學目標(中文)	教學目標(英文)
1	學生能夠認識化學相關專業軟體的用途, 並瞭解如何針對特定化學問題尋找電腦以及網路資源	Students will be able to appreciate computer simulations for addressing the chemical problems of interest, in particular, students will be able to identify specific research questions and properly use computers and resources from the Internet to solve it.

教學目標之目標類型、核心能力、基本素養教學方法與評量方式

序號	目標類型	院、系(所)核心能力	校級基本素養	教學方法	評量方式
1	認知	ABDE	25	講述、討論、實作	測驗、作業、報告(含口頭、書面)

授課進度表

週次	日期起訖	內容 (Subject/Topics)	備註
1	110/09/22~110/09/28	課程介紹	
2	110/09/29~110/10/05	分子模型以及視覺化	
3	110/10/06~110/10/12	電子結構介紹	
4	110/10/13~110/10/19	簡單模型：盒中粒子與其應用	
5	110/10/20~110/10/26	生物分子介紹視覺化軟體 VMD + 結構生物學介紹	電腦教室
6	110/10/27~110/11/02	分子動力學模擬簡介與實作	電腦教室
7	110/11/03~110/11/09	分子動力學模擬簡介與實作	電腦教室
8	110/11/10~110/11/16	NAMD蛋白質動力學模擬實作	電腦教室

9	110/11/17~ 110/11/23	期中考試週	
10	110/11/24~ 110/11/30	研究專題介紹：蛋白質折疊	電腦教室
11	110/12/01~ 110/12/07	python + Deep learning + google Colab	電腦教室
12	110/12/08~ 110/12/14	人工智慧在化學的應用-溶解度預測	電腦教室
13	110/12/15~ 110/12/21	Docking	電腦教室
14	110/12/22~ 110/12/28	AWS雲端計算	電腦教室
15	110/12/29~ 111/01/04	成果發表與討論	電腦教室
16	111/01/05~ 111/01/11	成果發表與討論	電腦教室
17	111/01/12~ 111/01/18	期末考試週	
18	111/01/19~ 111/01/25		
修課應 注意事項	某些週次會至電腦教室實作		
教學設備	電腦、投影機、其它(上機實作)		
教科書與 教材			
參考文獻			
批改作業 篇數	篇 (本欄位僅適用於所授課程需批改作業之課程教師填寫)		
學期成績 計算方式	◆出席率： 20.0 % ◆平時評量： % ◆期中評量：30.0 % ◆期末評量： % ◆其他〈專題報告〉：50.0 %		
備考	「教學計畫表管理系統」網址： https://info.ais.tku.edu.tw/csp 或由教務處 首頁→教務資訊「教學計畫表管理系統」進入。 ※不法影印是違法的行為。請使用正版教科書，勿不法影印他人著作，以免觸法。		