

# 淡江大學106學年度第1學期課程教學計畫表

課程名稱	光電材料模擬	授課教師	薛宏中 HSUEH, HUNG-CHUNG
	ATOMISTIC SIMULATION OF OPTOELECTRONIC MATERIALS		
開課系級	物理一碩士班A	開課資料	選修 單學期 3學分
	TSPXM1A		

## 系（所）教育目標

- 一、傳授專業知識：教導學生學習物理科學的核心基本知識、鑽研物理科學所需之基本技能、與應用物理科技的專業知能。
- 二、分析與解決問題：教授學生分析問題與將概念模型定量化之數學能力，與解決科學、工程等方面之各種問題所需要的思考與創新能力。
- 三、訓練實作技能：教導學生如何執行與驗證各項實驗以及具有審慎的工作態度與安全的操作意識。
- 四、表現人格特質：使學生能以他/她們的剛毅、樸實、專注等個人特質與專業技能獲得主管與同儕的認同。
- 五、培養團隊精神：訓練學生具有組織能力與溝通技巧，讓他/她們能具有融入團隊的適應力，並具有發揮或運用團隊力量來解決相關之專業問題的能力。
- 六、營造國際視野：順應全球化的趨勢，營造國際化的學習環境與機會，教育學生持續地自我成長，吸收國內外新的知識，在未來的領域中成為一位具有國際視野的專業人才。

## 系（所）核心能力

- A. 熟悉物理領域核心基本知識。
- B. 瞭解物理特定領域之概括面相。
- C. 將概念、模型、或實際問題及定量化之數學能力。
- D. 培養發現問題、分析問題並解決問題的基本能力。
- E. 實際處理物理問題之演練，並具有對實驗數據分析解釋的能力。
- F. 具有審慎的工作態度與安全的操作意識。
- G. 了解科技發展脈動與從事專業工作所需其它領域知識及技術。
- H. 具有團隊合作的精神與能力。

通過固態理論之教授與第一原理之實作，學生可以理解光電材料所有特性(包括：晶體結構、電子結構、離子特性與光學特性、等等)之機制。

## 課程簡介

	Students could get insight into all the characteristics of opto-electronic materials (eg. structural, electronic-structure, magnetic, and optical properties) by means of both fundamental solid-state theory and ab-initio calculations.
--	---

### 本課程教學目標與目標層級、系(所)核心能力相關性

#### 一、目標層級(選填)：

- (一)「認知」(Cognitive 簡稱C)領域：C1 記憶、C2 瞭解、C3 應用、C4 分析、C5 評鑑、C6 創造
- (二)「技能」(Psychomotor 簡稱P)領域：P1 模仿、P2 機械反應、P3 獨立操作、P4 聯結操作、P5 自動化、P6 創作
- (三)「情意」(Affective 簡稱A)領域：A1 接受、A2 反應、A3 重視、A4 組織、A5 內化、A6 實踐

#### 二、教學目標與「目標層級」、「系(所)核心能力」之相關性：

- (一)請先將課程教學目標分別對應前述之「認知」、「技能」與「情意」的各目標層級，惟單項教學目標僅能對應C、P、A其中一項。
- (二)若對應「目標層級」有1~6之多項時，僅填列最高層級即可(例如：認知「目標層級」對應為C3、C5、C6項時，只需填列C6即可，技能與情意目標層級亦同)。
- (三)再依據所訂各項教學目標分別對應其「系(所)核心能力」。單項教學目標若對應「系(所)核心能力」有多項時，則可填列多項「系(所)核心能力」。(例如：「系(所)核心能力」可對應A、AD、BEF時，則均填列。)

序號	教學目標(中文)	教學目標(英文)	相關性	
			目標層級	系(所)核心能力
1	學生能同時具備材料之電子結構計算的理論與實務之能力。	Students could get the ability of both fundamental theory and computational skill of electronic properties calculation of materials.	C3	ACE

#### 教學目標之教學方法與評量方法

序號	教學目標	教學方法	評量方法
1	學生能同時具備材料之電子結構計算的理論與實務之能力。	講述、討論、模擬	實作、上課表現

**本課程之設計與教學已融入本校校級基本素養**

淡江大學校級基本素養	內涵說明
◇ 全球視野	培養認識國際社會變遷的能力，以更寬廣的視野了解全球化的發展。
◆ 資訊運用	熟悉資訊科技的發展與使用，並能收集、分析和妥適運用資訊。
◆ 洞悉未來	瞭解自我發展、社會脈動和科技發展，以期具備建構未來願景的能力。
◇ 品德倫理	了解為人處事之道，實踐同理心和關懷萬物，反省道德原則的建構並解決道德爭議的難題。
◇ 獨立思考	鼓勵主動觀察和發掘問題，並培養邏輯推理與批判的思考能力。
◇ 樂活健康	注重身心靈和環境的和諧，建立正向健康的生活型態。
◇ 團隊合作	體察人我差異和增進溝通方法，培養資源整合與互相合作共同學習解決問題的能力。
◇ 美學涵養	培養對美的事物之易感性，提升美學鑑賞、表達及創作能力。

**授課進度表**

週次	日期起訖	內容 (Subject/Topics)	備註
1	106/09/18~ 106/09/24	Introduction	
2	106/09/25~ 106/10/01	An overview of computational material science	
3	106/10/02~ 106/10/08	Density Functional Theory	
4	106/10/09~ 106/10/15	Density Functional Theory	
5	106/10/16~ 106/10/22	Atoms in crystals (supercell, k-points, ...)	
6	106/10/23~ 106/10/29	Pseudopotential vs. atomic orbital	
7	106/10/30~ 106/11/05	Computational procedure (Methodology)	
8	106/11/06~ 106/11/12	Electronic band structure calculation I	
9	106/11/13~ 106/11/19	Electronic band structure calculation II	
10	106/11/20~ 106/11/26	Electronic band structure calculation III	
11	106/11/27~ 106/12/03	Structural properties calculation I	
12	106/12/04~ 106/12/10	Structural properties calculation II	

13	106/12/11~ 106/12/17	Magnetic properties calculation I	
14	106/12/18~ 106/12/24	Magnetic properties calculation II	
15	106/12/25~ 106/12/31	Optical properties calculation I	
16	107/01/01~ 107/01/07	Optical properties calculation II	
17	107/01/08~ 107/01/14	Quasiparticle GW calculations	
18	107/01/15~ 107/01/21	Beyond Density Functional Theory	
修課應 注意事項	Since topics included in this lecture are rather broaden, please try your best to attend each lecture.		
教學設備	電腦、其它(PC cluster)		
教材課本	Teaching note as enclosed in the teaching-add platform		
參考書籍	User manual of VASP (can be downloaded from <a href="http://www.vasp.at/index.php/documentation">http://www.vasp.at/index.php/documentation</a> ) Atomic and Electronic Structure of Solids /Efthimios Kaxiras, Cambridge University Press (2003)		
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： % ◆期末評量： 30.0 % ◆其他〈Hand-ons〉： 50.0 %		
備 考	「教學計畫表管理系統」網址： <a href="http://info.ais.tku.edu.tw/csp">http://info.ais.tku.edu.tw/csp</a> 或由教務處首頁〈網址： <a href="http://www.acad.tku.edu.tw/CS/main.php">http://www.acad.tku.edu.tw/CS/main.php</a> 〉業務連結「教師教學計畫表上傳下載」進入。 <b>※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。</b>		