

淡江大學 107 學年度第 2 學期課程教學計畫表

課程名稱	計算材料	授課 教師	李明憲 LEE, MING-HSIEN
	COMPUTATIONAL MATERIALS PHYSICS		
開課系級	物理系應物四 A	開課 資料	選修 單學期 3學分
	TSPBB4A		
系 ( 所 ) 教育目標			
<p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>			
系 ( 所 ) 核心能力			
<p>A. 熟悉物理領域核心基本知識。</p> <p>B. 瞭解物理特定領域之概括面相。</p> <p>C. 將概念、模型、或實際問題及定量化之數學能力。</p> <p>D. 培養發現問題、分析問題並解決問題的基本能力。</p> <p>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。</p> <p>F. 具有審慎的工作態度與安全的操作意識。</p> <p>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。</p> <p>H. 具有團隊合作的精神與能力。</p>			
課程簡介	<p>資訊科技日新月異，電腦模擬不但是研究物理的工具，也成為找尋與設計新材料的一大利器。本課程要以每週一個獨立單元的明快進度，向學生們介紹如何利用最先進的材料計算電腦模擬軟體與3D互動式圖形介面來預測材料的性質。。內容涵蓋傳統固態物理學之材料的晶體結構、能帶結構、機械性質、電學性質、光學性質、磁學性質等重要主題，同時兼顧科技應用及廣度，可協助學生培養研究的基礎及提昇就業的競爭力。</p>		

This course uses the most advanced theories and software available teach computational materials physics. Graphical user interface with powerful atomistic model building, 3D visualization allow quick access to materials design tasks. Many kinds of physical properties can be analyzed. This course help students to bring closer the gap between fundamental physics and modern industrial applications.

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	本課程注重觀念的建立與物理圖像的了解，藉以強化學生對學理的認識。學生可經由的觀摩逐步的示範及自行透過網際網路由遠端上機實習，來建立實際操作的能力。亦可協助學生培養研究的基礎及提昇就業的競爭力。	This course is focus on step-by-step demonstration and introducing the concepts and physical picture needed to acquire skills of using computers to predict physical properties for materials design.	C3	BDG

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	本課程注重觀念的建立與物理圖像的了解，藉以強化學生對學理的認識。學生可經由的觀摩逐步的示範及自行透過網際網路由遠端上機實習，來建立實際操作的能力。亦可協助學生培養研究的基礎及提昇就業的競爭力。	講述、討論、模擬、實作、問題解決	實作、報告、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	108/02/18~ 108/02/24	課程內容與教學目標說明以及教學平台介紹	教室上課
2	108/02/25~ 108/03/03	認識 3D 圖形介面與 Materials Studio 快速入門	以下網路上課
3	108/03/04~ 108/03/10	3D 圖形介面細部操作與模型的建構 (分子、晶體、表面、介面、奈米管)	
4	108/03/11~ 108/03/17	認識晶體結構、無機及有機晶體結構資料庫之使用	
5	108/03/18~ 108/03/24	密度泛函理論之方法與應用 (含第一次小考)	
6	108/03/25~ 108/03/31	了解原子的原子軌域與目睹分子的化學鍵	
7	108/04/01~ 108/04/07	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格常數及塊體模量	
8	108/04/08~ 108/04/14	能帶結構簡介，半導體及絕緣體的能帶結構、能隙與投影態密度，以及金屬的態密度與費米面	
9	108/04/15~ 108/04/21	材料磁性的計算	
10	108/04/22~ 108/04/28	期中考試週	
11	108/04/29~ 108/05/05	電子吸收光譜、折射率與介電函數，芯電子能譜	
12	108/05/06~ 108/05/12	聲子譜與材料比熱的計算與預測相變溫度	

13	108/05/13~ 108/05/19	紅外線吸收光譜、拉曼光譜與靜介電常數	
14	108/05/20~ 108/05/26	表面能帶結構、表面重構、功函數、化學吸附與預測 STM 影像	
15	108/05/27~ 108/06/02	畢業考試週	
16	108/06/03~ 108/06/09	---	
17	108/06/10~ 108/06/16	---	
18	108/06/17~ 108/06/23	---	
修課應 注意事項	本校生上機考試，校外生繳交期中及期末報告。凡修課者可獲授權在家使用 Materials Studio 8.0/4.0/CASTEP 材料計算軟體。助教課提問及討論時間每週一次，自由參加。		
教學設備	電腦、其它(網路)		
教材課本	教師自行編著，置於 遠距平台上		
參考書籍	輔助課程網頁 <a href="http://boson4.phys.tku.edu.tw">http://boson4.phys.tku.edu.tw</a>		
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：            %   ◆平時評量：            %   ◆期中評量：25.0 % ◆期末評量：25.0 % ◆其他〈小考兩次共〉：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>		