

淡江大學 109 學年度第 1 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	遠距課程 選修 單學期 3學分
	TSPBB4A		

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。

本課程對應院、系(所)核心能力之項目與比重

- B. 瞭解物理特定領域之概括面相。(比重：50.00)
- D. 培養發現問題、分析問題並解決問題的基本能力。(比重：20.00)
- 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。(比重：30.00)

本課程對應校級基本素養之項目與比重

2. 資訊運用。(比重：40.00)
5. 獨立思考。(比重：40.00)
8. 美學涵養。(比重：20.00)

課程簡介

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。

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	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.

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	BDG	258	講述	測驗

授課進度表

週次	日期起訖	內容 (Subject/Topics)	備註 (請註明為同步、非同步課程)
1	109/09/14~ 109/09/20	課程內容與教學目標說明以及教學平台介紹	教室上課
2	109/09/21~ 109/09/27	認識 3D 圖形介面與 Materials Studio 快速入門	以下網路上課
3	109/09/28~ 109/10/04	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	109/10/05~ 109/10/11	認識晶體結構、無機及有機晶體結構資料庫之使用	
5	109/10/12~ 109/10/18	密度泛函理論之方法與應用 (含第一次小考)	
6	109/10/19~ 109/10/25	了解原子的原子軌域與目睹分子的化學鍵	
7	109/10/26~ 109/11/01	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格常數及塊體模量	
8	109/11/02~ 109/11/08	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	109/11/09~ 109/11/15	材料磁性的計算	

10	109/11/16~ 109/11/22	期中考試週	
11	109/11/23~ 109/11/29	電子吸收光譜、折射率與介電函數, 芯電子能譜	
12	109/11/30~ 109/12/06	紅外線吸收光譜、拉曼光譜與靜介電常數; 核磁共振	
13	109/12/07~ 109/12/13	聲子譜與材料比熱的計算、預測相變溫度與結構穩定性	
14	109/12/14~ 109/12/20	表面能帶結構、表面重構、功函數、化學吸附與預測 STM 影像	
15	109/12/21~ 109/12/27	異質界面之能帶偏移 (band-offset)	
16	109/12/28~ 110/01/03	摻雜的處理: 虛擬晶體近似法以及超晶胞法	
17	110/01/04~ 110/01/10	化學反應、活化能與自由能 (含分子動力計算)、電子 激發態	
18	110/01/11~ 110/01/17	期末考試週	
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)		
教科書與 教材	教師自行編著, 置於 遠距平台上		
參考文獻	輔助課程網頁 http://boson4.phys.tku.edu.tw		
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	<ol style="list-style-type: none"> 1. 「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。 2. 依「專科以上學校遠距教學實施辦法」第2條規定: 「本辦法所稱遠距教學課程, 指每一科目授課時數二分之一以上以遠距教學方式進行」。 3. 依「淡江大學數位教學施行規則」第3條第2項, 本校遠距教學課程須為「於本校遠距教學平台或同步視訊系統進行數位教學之課程。授課時數包含課程講授、師生互動討論、測驗及其他學習活動之時數」。 4. 如有課程臨時異動(含遠距教學、以實整虛課程之上課時間及教室異動), 請依規定向教務處提出申請。 <p>※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。</p>		