

淡江大學 112 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	李明憲 LEE, MING-HSIEN
	ATOMISTIC SIMULATION OF OPTOELECTRONIC MATERIALS		
開課系級	物理一碩士班 A	開課 資料	實體課程 選修 單學期 3學分
	TSPXM1A		
課程與SDGs 關聯性	SDG4 優質教育 SDG9 產業創新與基礎設施		
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>			
本課程對應院、系(所)核心能力之項目與比重			
<p>A. 熟悉物理領域核心基本知識。(比重：15.00)</p> <p>B. 瞭解物理特定領域之概括面相。(比重：10.00)</p> <p>C. 將概念、模型、或實際問題及定量化之數學能力。(比重：20.00)</p> <p>D. 培養發現問題、分析問題並解決問題的基本能力。(比重：10.00)</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。(比重：20.00)</p> <p>F. 具有審慎的工作態度與安全的操作意識。(比重：10.00)</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。(比重：10.00)</p> <p>H. 具有團隊合作的精神與能力。(比重：5.00)</p>			
本課程對應校級基本素養之項目與比重			
<p>1. 全球視野。(比重：15.00)</p> <p>2. 資訊運用。(比重：30.00)</p> <p>3. 洞悉未來。(比重：10.00)</p>			

4. 品德倫理。(比重：5.00)
5. 獨立思考。(比重：20.00)
6. 樂活健康。(比重：5.00)
7. 團隊合作。(比重：10.00)
8. 美學涵養。(比重：5.00)

課程簡介	本課程要向大家介紹一個基於第一原理（量子力學）的材料模擬計算軟體 CASTEP，以及它在 PC 平台上的操作界面 Materials Studio，讓大家實習如何使用 CASTEP 來預測材料的機械、電學、光學、磁學、熱學、化學等特性。
	This course will introduce students a material simulation calculation software CASTEP based on the first principle (quantum mechanics), and its operation interface Materials Studio on the PC platform, so that you can practice how to use CASTEP to predict the mechanical, electrical, optical, Magnetic, thermal, chemical and other properties.

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	學習如何使用 CASTEP 材料物性模擬軟體並詮釋結果。	Learn how to use CASTEP materials simulation software and interpretate results.

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	ABCDEFGH	12345678	講述	實作

授課進度表			
週次	日期起訖	內容 (Subject/Topics)	備註
1	112/09/11~ 112/09/17	課程內容與教學目標說明以及教學平台介紹	
2	112/09/18~ 112/09/24	認識 3D 圖形介面與 Materials Studio 快速入門； 3D 圖形介面細部操作	
3	112/09/25~ 112/10/01	模型的建構（分子、晶體、表面、介面、奈米管）；認識晶體結構、無機及有機晶體結構資料庫之使用	
4	112/10/02~ 112/10/08	密度泛函理論之方法與應用（含第一次小考）	

5	112/10/09~ 112/10/15	了解原子的原子軌域與目睹分子的化學鍵	
6	112/10/16~ 112/10/22	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格常數及塊體模量	
7	112/10/23~ 112/10/29	能帶結構理論簡介；半導體及絕緣體的能帶結構、能隙與投影態密度、金屬的態密度與費米面	
8	112/10/30~ 112/11/05	能隙修正、派洛歧變、能帶反折、直接間接能隙判定	
9	112/11/06~ 112/11/12	材料磁性與反鐵磁性的計算、強關聯材料的+U修正、(選) 旋軌耦合	
10	112/11/13~ 112/11/19	期中考週	
11	112/11/20~ 112/11/26	電子吸收光譜、折射率與介電函數、芯電子能譜、電子激發態光譜	
12	112/11/27~ 112/12/03	靜(低頻)介電常數、紅外線吸收光譜與拉曼散射光譜	
13	112/12/04~ 112/12/10	聲子譜與材料比熱的計算與預測相變溫度；(選)核磁共振與原子結構	
14	112/12/11~ 112/12/17	表面能帶結構、表面重構、功函數、化學吸附與預測STM 影像 (含第二次小考)	
15	112/12/18~ 112/12/24	異質界面之能帶偏移 (band-offset)	
16	112/12/25~ 112/12/31	摻雜的處理：虛擬晶體近似法以及超晶胞法 (含BZ一致化處理)	
17	113/01/01~ 113/01/07	化學反應、活化能與自由能 (含分子動力計算)、總複習	
18	113/01/08~ 113/01/14	期末考週	
課程培養 關鍵能力	資訊科技		
跨領域課程	STEAM課程(S科學、T科技、E工程、M數學，融入A人文藝術領域)		
特色教學 課程	專題/問題導向(PBL)課程		
課程 教授內容	程式設計或程式語言(學生有實際從事相關作業或活動) 邏輯思考 A I 應用		
修課應 注意事項			
教科書與 教材	自編教材:講義、影片		

參考文獻	
學期成績 計算方式	<p>◆出席率： 20.0 % ◆平時評量：40.0 % ◆期中評量：20.0 %</p> <p>◆期末評量：20.0 %</p> <p>◆其他〈 〉： %</p>
備 考	<p>「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。</p> <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>