

淡江大學遠距教學課程教學計畫表

(105 學年度版)

(學系教育目標、學生基本能力，另於網路上傳教學計畫表至課程系統)

壹、課程基本資料 開課期間: 106 學年度 第 2 學期

表單勾選使用符號 ☒

課程名稱	(中) 計算材料			授課教師	李明憲
	(英) Computational Materials Physics			教師職稱	專任副教授
開課單位名稱 (或所屬學院及 科系所名稱)	理學院	開課 資料	☐ 必修 ☒ 選修 ☐ 其他	☐ 0 (單學期) ☐ 1 (上學期) ☒ 2 (下學期) ☐ 3 (第 3 學期)	3 學分
	物理系				
教學型態 ☒ (擇一)	☒ 非同步遠距教學 ◆ 即本校所指電腦網路課程，含面授、非同步網路授課或同步網路會談。 ◆ 總授課時數二分之一以上以遠距教學方式進行，且主要（或多數）採網路教學平台，以非同步教學進行者。 ☐ 直播學校同步遠距教學(必填收播學校或校區) ◆ 填列本門課程之主、收播學校與系所或校區： (1)學校: (2)系所 ◆ 即本校所指國際或國內同步視訊直播課程。 ◆ 總授課時數二分之一以上以遠距教學方式進行，且主要（或多數）採網路視訊系統，以同步教學進行者。				
師資來源 ☒	☒ 專業系所聘任 ☐ 通識中心聘任 ☐ 以上合聘 ☐ 其他				
課程學制 ☒	☒ 學士班 ☐ 進修學士班 ☐ 學士班在職專班 ☐ 碩士班 ☐ 碩士班在職專班 ☐ 博士班 ☐ 學院 (☐ 二年制 ☐ 四年制) ☐ 專科 (☐ 二年制 ☐ 四年制) ☐ 進修專校 ☐ 進修學院 (☐ 二技 ☐ 四技 ☐ 碩士在職專班) ☐ 學位學程 (☐ 二年制 ☐ 四年制 ☐ 碩士班) ☐ 學分學程				
部別 ☒	☒ 日間部 ☐ 進修部(夜間部) ☐ 其他				
科目類別 ☒	☐ 共同科目 ☐ 通識科目 ☐ 校定科目 ☒ 專業科目 ☐ 教育科目 ☐ 其他				
部校定 (本課程由那個單位所定) ☒	☐ 教育部定 ☐ 校定 ☐ 院定 ☐ 所定 ☒ 系定 ☐ 其他				
開課期限(授課學期數) ☒	☒ 一學期(半年) ☐ 二學期(全年) ☐ 其他				
開課班級數	1				
預計總修課人數	30				
全英語教學 ☒	☐ 是 ☒ 否				

國外學校合作遠距課程 (有合作學校請填寫) ☐	國外合作學校與系所名稱: _____ ☐ 國內主講 ☐ 國內收播 ☐ 境外專班 ☐ 雙聯學制 ☐ 其他
課程線上平台網址	☒ 本校網路教學平台(moodle.learning.tku.edu.tw) ☐ 其他 _____
課程教學計畫檔案連結網址 ☒	☒ http://deds.learning.tku.edu.tw/docs/edu/ ☒ 其他 http://boson4.phys.tku.edu.tw/comp-solid-state/index.htm
備註 ☒ (若為遠距教學課程,且自本學期新開設,請註明「新開設遠距課程」。)	☐ 此科目是「教師個人」於本學期首次開授之遠距課程。 ☒ 此科目非「教師個人」於本學期首次開授之遠距課程。 ☐ 此科目是「本校新開設遠距課程」。(報教育部備查需填報欄位) ☒ 此科目非「本校新開設遠距課程」。(報教育部備查需填報欄位) ◆ 判斷「是否為本校新開設遠距課程」,以全校是否曾有老師開設同科目名稱之遠距課程來劃分。若此項目不確定,請洽學校分機 2159 遠距組承辦人員。

貳、課程教學計畫

一、課程教學目標

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。

CASTEP 是使用所謂的密度泛函理論,來處理並近似多個電子交互作用的複雜量子力學問題。它可以處理晶體、表面等具週期性的系統,也可以用超晶胞的方法處理分子吸附、雜質等非週期性的系統。Materials Studio / CASTEP 的組合是一個先進的材料設計環境,具三度空間繪圖的科學視覺化能力、其材料物性計算也有良好的精密度及優越的單機與平行效能,在高度整合的主從運算與分析環境架構下,提供親切而功能強大的使用者界面,因此是研究與設計材料物性的一個非常好用的工具。

在一個學期 3 學分的課程中,我們會對實際使用 CASTEP 與 Materials Studio 的基礎學理、功能選項、操作方法、都儘可能作廣泛性的、入門性的介紹,並配合實務經驗傳授及上機實習,希望能讓上路新手也都收穫豐富,而能開始自行使用第一原理計算來輔助材料特性的研究與設計。

二、適合修習對象

理工學院系大三、大四、碩士班。

三、授課進度表及課程內容大綱 (每週 3 選 1, 共填 18 項) 或 (於空格內填時數)

必須 面授週數 < 遠距教學週數

週次	內容 (Subject/Topics)	授課方式 (請V選) 或文字敘述於備註欄		
		面授	遠距教學	備註
		教室上課 教室考試 實體上課	非同步 網路授課 同步網路會談 同步遠距教學	放假、 考試週停課、 畢業班停課、 或填補課日期
1	課程內容與教學目標說明以及教學平台介紹	*		
2	認識 3D 圖形介面與 Materials Studio 快速入門	*		
3	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	認識晶體結構、無機及有機晶體結構資料庫之使用		*	
5	密度泛函理論之方法與應用 (含第一次小考)		*	

6	了解原子的原子軌域與目睹分子的化學鍵		*	
7	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格常數及塊體模量		*	
8	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	材料磁性的計算		*	
10	期中考試週	*		
11	聲子譜與材料比熱的計算與預測相變溫度		*	
12	電子吸收光譜、折射率與介電函數		*	
13	紅外線吸收光譜、拉曼光譜與靜介電常數		*	
14	核磁共振與原子結構（含第二次小考）		*	
15	計算表面重構、功函數、與預測 STM 影像		*	
16	異質界面之能帶偏移（band-offset）		*	
17	化學反應、活化能與自由能（含分子動力計算）		*	
18	期末考試週	*		
四、教學方式 (可複選) ☑		本欄若有填寫次數請與上表一致		
為便於區別，多學期課程，請勿使用同一檔案				
		☑1.提供線上(網路)課程主要及補充教材		
		☑2.提供線上(網路)非同步教學		
		☑3.有線上(網路)教師或線上(網路)助教		
		☑4.提供 面授教學 ，次數：_____次， 總時數：A=_____小時		
		☐5.提供線上(網路) 同步教學 ，即同一時間透過網路與學生連線進行教學 次數：_____次， 總時數：B=_____小時		
		☐6.其它，請說明：_____		
每週上課時數☑ (2選1)		☐1.遠距課程請填入每週「面授」及「同步遠距教學」之上課時數 _____小時/週		
		☑2.若無法界定每週時數，填入每週平均時數（即學期總「面授」+「同步遠距教學」時數除以總課程週數） _____ 小時/週 = (A+B)=_____總小時÷_____總週數(18減放假且不補課週數)		
五、學習管理系統☑		呈現內容是否包含以下角色及功能（有包含者請打☑，可複選）：		
		1.提供給系統管理者進行學習管理系統資料庫管理		
		☑個人資料		
		☑課程資訊		
		☑其他相關資料管理功能		
		2.提供教師(助教)、學生必要之學習管理系統功能		
		☑最新消息發佈、瀏覽		
		☑教材內容設計、觀看、下載		
		☐成績系統管理及查詢		
		☐進行線上(網路)測驗、發佈		
		☑學習資訊		
		☑互動式學習設計(聊天室或討論區)		
		☑各種教學活動之功能呈現		
		☐其他相關功能，請說明：_____		
六、師生互動討論方式(可複選)☑		☐教師線上(網路)辦公室時間：_____		
		☑教師辦公室時間：_____ 週一 12:10 pm~ 1:00 pm		
		☑教師 E-mail 信箱：_____ mhslee@mail.tku.edu.tw ，校內分機：_____ 2109		
		☑課程助教姓名：_____ 闕子翔 ，通訊方式：_____ 0910730658		
		☐其他：_____		

四、教學方式
(可複選) ☒

- ☒1.提供線上(網路)課程主要及補充教材 本欄若有填寫次數請與上表一致
- ☒2.提供線上(網路)非同步教學
- ☒3.有線上(網路)教師或線上(網路)助教
- ☒4.提供**面授教學**，次數：_____次，**總時數：A= _____小時**
- ☐5.提供線上(網路)**同步教學**，即同一時間透過網路與學生連線進行教學
次數：_____次，**總時數：B= _____小時**
- ☐6.其它，請說明：

五、學習管理系統 ☒

1. 提供給系統管理者進行學習管理系統資料庫管理
 - ☒ 個人資料
 - ☒ 課程資訊
 - ☒ 其他相關資料管理功能
2. 提供教師(助教)、學生必要之學習管理系統功能
 - ☒ 最新消息發佈、瀏覽
 - ☒ 教材內容設計、觀看、下載
 - ☐ 成績系統管理及查詢
 - ☐ 進行線上(網路)測驗、發佈
 - ☒ 學習資訊
 - ☒ 互動式學習設計(聊天室或討論區)
 - ☒ 各種教學活動之功能呈現
 - ☐ 其他相關功能，請說明：

七、作業繳交方式 (可複選) ☒	☐ 提供線上說明作業內容 ☐ 線上即時作業填答 ☐ 線上討論區 ☐ 作業檔案上傳及下載 ☐ 報告 ☐ 線上測驗 ☐ 成績查詢 ☐ 其他做法，請說明：_____
八、學期成績評量 方式 ☒	☐ 平時成績： _____ % ☒ 期中考成績： 50% ☒ 期末考成績： 50% ☐ 作業成績： _____ % ☐ 線上互動： _____ % ☐ 其他 (_____)： _____ %
九、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/CASTEP 材料計算軟體。面對面輔導課提問及討論時間每週一次，自由參加。
備考	1. 「教學計畫表管理系統」網址： http://info.ais.tku.edu.tw/csp 或由教務處首頁（網址 http://www.acad.tku.edu.tw/index.asp/ ）教務資訊「教學計畫表管理系統」進入。 ※非法影印是違法的行為。請使用正版教科書，勿非法影印他人著作，以免觸法。 2. 依「大學遠距教學實施辦法」第三條規定：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者。 3. 上課使用教室時間排定後，遠距組將彙整 1 份送課務組備查（轉事務組配合教室開關門作業，以確保教室設備安全）。如有課程臨時異動，請依規定向教務處提出申請，並請知會遠距組。 4. 期中考週及期末考週教室由課務組統一排考用，若需使用教室上課，請另向課務組借用。

表單編號：AILX-Q03-001-FM008

註：1. 依據本校個人資料管理制度，隱私權政策聲明網頁 <http://www.tku.edu.tw/privacy.asp>。

2. 本表單所蒐集之個人資料僅限於本次業務使用，絕不轉做其他用途。保存期限 3 年。