

淡江大學遠距教學課程教學計畫表

(107 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: 107 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
開課所屬學院	理學院	開課資料 ☐ 必修 ☒ 選修 ☐ 其他	☐ 1 (上學期) ☒ 2 (下學期) (不同學期請分別填寫教學計畫表)
開課科系所	物理系		
教學型態 ☒ 遠距教學課程系指每學期總授課週數二分之一以上以遠距教學方式進行 (二者擇一)	☒ 非同步遠距教學 ◆ 即本校所指電腦網路課程，教學方式可包含教室面授、非同步網路授課及同步網路會談等混成式教學方式，必須主要採網路教學平台，以 非同步教學 進行者。 ☐ 同步遠距教學(必填收播學校或校區) ◆ 即本校所指國際或國內同步視訊直播課程。 ◆ 填列本門課程之主、收播學校與系所或校區： (1)學校：_____ (2)系所：_____ ◆ 主要教學方式採網路視訊系統，以 同步視訊教學 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_____ (不同開課學期請分開填寫教學計畫表)		
開課班別	(不同班別請分開填寫教學計畫表)		
預計總修課人數	30		
全英語教學 ☒	☐ 是 ☒ 否		

跨國遠距課程 ☒	☐ 是：國外合作學校與系所_____ ☐ 國內主播 ☐ 國內收播 ☐ 境外專班 ☐ 雙聯學制 ☐ 其他 ☒ 否
課程線上平台	依據「淡江大學遠距教學施行規則」，非同步遠距教學課程必須使用本校遠距教學平台 http://moodle.tku.edu.tw
開課資訊備註 ☒ (若為本學期新開設，請註明「新開設遠距課程」)	☐ 此科目是「教師個人」於首次開授之遠距課程。 ☒ 此科目非「教師個人」於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 2168 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、博士班。

三、授課進度表及課程內容大綱 (每週必填，共填 18 週)

面授 必須 < 遠距教學(同步非同步加總)

週次	上課日期	授課內容 (Subject/Topics)	授課方式 請以數字填寫各週上課時數			備註
			面授	遠距教學		放假、考試週 停課、畢業班 停課、或填補 課日期
			教室上課 教室考試	非同步 授課	同步 授課	
1	2/26	課程內容與教學目標說明以及教學平台介紹	3			
2	3/5	認識 3D 圖形介面與 Materials Studio 快速入門	3			

3	3/15	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）		3		
4	3/12	認識晶體結構、無機及有機晶體結構資料庫之使用		3		
5	3/19	密度泛函理論之方法與應用（含第一次小考）		3		
6	4/2	了解原子的原子軌域與目睹分子的化學鍵		3		
7	4/9	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格常數及塊體模量		3		
8	4/16	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		3		
9	4/23	材料磁性的計算		3		
10	4/30	期中考試週				
11	5/7	電子吸收光譜、折射率與介電函數；芯電子能譜		3		
12	5/14	聲子譜與材料比熱的計算與預測相變溫度；紅外線吸收光譜、拉曼光譜與靜介電常數		3		
13	5/21	計算表面重構、功函數、與預測 STM 影像；異質接面之能帶偏移 (band-offset)		3		
14	5/28	化學反應、活化能與自由能（含分子動力計算）；電子激發態		3		
15	6/4	畢業班考試週				
16						
17						
18		期末考試週				
各類別總時數			6	33		

四、教學方式 (可複選)☑ (不同學期、班別 請分別填寫 教學計畫表)	本欄填寫次數請務必與上表一致 ☒ 1. 本課程配置有線上助教(依「淡江大學遠距教學課程補助與獎勵要點」, 每門遠距教學課程配置一位線上助教) ☒ 2. 採用 面授教學 , 次數: <u>6</u> 次, 總時數: A= <u>6</u> 小時 ☒ 3. 採用 線上非同步教學 , 即採用本校 Moodle 遠距教學平台進行線上教學 ☐ 4. 提供 線上同步教學 , 即同一時間透過網路視訊連線進行教學 次數: _____ 次, 總時數: B= _____ 小時 ☐ 5. 其它, 請說明: _____
每週教室、同步視 訊上課時數☑	填入每週平均時數(即學期總「 面授 」+「 同步遠距教學 」時數除以 18 週) _____ 小時/週 = (上方欄位總時數 A+B) ÷ 18 週
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、師生互動方式 (可複選)☑	☐ 教師線上(網路)辦公室時間: _____ ☒ 教師辦公室時間: <u>採自由約見制</u> ☒ 教師 E-mail 信箱: <u>mhslee@mail.tku.edu.tw</u> , 校內分機: <u>2109</u> ☐ 其他: _____
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: 40 % ☒ 期中考成績: 30 % ☒ 期末考成績: 30 % ☐ 作業成績: _____ % ☐ 線上互動: _____ % ☐ 其他 (_____): _____ %
九、修課注意事項	

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→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」第二條規定：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。如有課程臨時異動，請依規定向教務處提出申請。 4.期中考週及期末考週教室由課務組統一排考用，若補課、考試週需使用教室上課，請聯繫系辦另行借用教室。 ※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。
-----	---

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。