

淡江大學遠距教學課程教學計畫表

(108 學年度)

(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： 108 學年度 第 1 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)		☐ 暑修		
開課科系所	物理系						3 學分		
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主播課程。 ◆ 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 (本課程由哪個單位所定) ☒	☐ 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	1 (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	授課內容（Subject/Topics） *授課時數需二分之一以上以遠距教學方式進行 *暑修科目請以上課日填寫內容大綱 如：2 學分課程共上課 9 天， 3 學分課程共上課 13.5 天	授課方式 請勾選各週上課方式			備註 放假、考試週 停課、畢業班 停課、或填補 課日期
		面授	遠距教學		
			教室上課 教室考試	非同步 授課	
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	*			
各類別總時數		8	42		

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>4</u> 次，總時數：A= <u>8</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： <u> </u> 次，總時數：B= <u> </u> 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 ） <u> </u> 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： <u> </u>

六、師生互動方式 (可複選)☑	☒ 教師線上(網路)辦公室時間：____ LINE 群組____ ☒ 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____ ☐ 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：____ % ☒ 期中考成績：40% ☒ 期末考成績：40% ☒ 作業成績：20% ☐ 線上互動：____ % ☐ 其他(____)：____ %
九、修課注意事項	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→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」。 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。