

淡江大學遠距教學課程教學計畫表

(111 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: 111 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) (擇一，不同學期請分別填寫教學計畫表)	☐ 暑修 3 學分
開課科系所	物理系				
教學型態 ☒	遠距教學課程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 ◆ 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 <u>非同步教學</u> 進行者。 ◆ 參照教育部建議，非同步教學週次課程教材實際錄製的時間，須至少為學分數的一半，例如 2 學分課程每週需錄製 1 小時以上影音教材。 ☐ 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： 收播學校：_____ ◆ 主要教學方式採網路視訊系統，以 <u>同步視訊教學</u> 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	20
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
課程教學平台 ☒	☒ Moodle ☐ iClass ◆ 校內提供 Moodle 以及 iClass 兩種平台，請務必擇一勾選使用
開課資訊備註 ☒	☐ 此課程為「教師個人」第一次於校內開授遠距教學課程。 ☐ 此課程為「本校」新開設遠距教學課程。(報教育部備查需填報欄位) ◆ 判斷「是否為本校新開設遠距教學課程」，以校內是否曾有老師開設同科目名稱之遠距課程來判斷。若此項目不確定，請洽學校分機 2168 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	授課內容 (Subject/Topics)	授課方式 請勾選各週上課方式		備註
		面授	遠距教學	
	*授課時數需 二分之一以上 以遠距教學方式進行			放假、考試週

課 日	*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	教室上課 教室考試	非同步 授課	同步 授課	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	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		*		
8	材料磁性的計算		*		
9	預測鍵長與振動頻率以及預測晶格及彈性常數		*		
10	期中考試週	*			
11	電子吸收光譜、折射率與介電函數、核磁共振		*		
12	紅外線吸收光譜、拉曼光譜與靜介電常數		*		
13	聲子譜與材料比熱的計算（含第二次小考）		*		
14	計算表面重構、功函數、與預測 STM 影像		*		
15	異質介面之能帶偏移 (band-offset)		*		
16	缺陷與摻雜的處理：超晶胞與虛擬晶體近似		*		
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		6	40	0	46
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>3</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>16</u> 次，總時數： B= <u>40</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>0.33</u> 小時/週 = (上方欄位總時數 A+B) ÷ 18週				

五、平台內容、線上互動規劃 ☒ (同步視訊方式上課者免填)	非同步遠距教學課程預計提供以下內容及教學方式(請打☒, 複選): ☒教師、助教聯絡資料 ☒課程資訊、評量標準 ☒最新消息發佈公佈欄 ☒錄製教材內容供學習者觀看、下載 ☐線上作業繳交 ☒線上討論區 ☐線上測驗 ☒成績查詢 ☐其他, 請說明: _____ ◆ 請教師於非同步遠距教學課程進行中, 安排採用 2 種以上遠距教學平台提供之「討論區」、「線上測驗」、「作業繳交」等教學互動相關功能, 並規劃應用於各單元教學活動中, 教學互動實施情形將作為開課申請審查重點項目之一。
六、教師聯繫方式 (可複選)☒	☐教師線上辦公室時間: _____ 週一 12:10 pm~ 1:00 pm ☐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: _____ LINE 群組
七、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 (_____): _____ %
八、修課注意事項	本校生上機考試, 校外生視訊上機考試。凡修課者在修課期間可獲授權在家使用 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」。 4.上課使用教室時間排定後, 遠距中心將彙整 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。 5.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。

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。