

2014 第一屆專題研究成果發表會

The First Workshop on Undergraduate Research Project



李明憲 副教授
淡江大學物理系

「材料的基因：材料設計導向的第一原理計算」

摘要

人類的文明就是材料進步的文明。在摩爾定律下的電腦的效能以指數成長方式提昇，基於量力子學的平行運算程式與圖形介面，成為設計材料的新工具。在半小時的報告裡，我將從計算老兵的角度切入，作一點學理背景的交待，接著以一系列實例為大家呈現第一原理材料設計的面貌，並同時分享一點個人教學革新與產學合作方面的經驗。

最後再提到目前全球的趨勢，例如歐洲 Psi_k Network 所匯整的 "Success Stories of eminent research in ab-initio calculations" 以及美國白宮提出的 Materials Genome Initiative (MGI) 裡面屬第一原理計算的 The Materials Project。

講者簡介

李明憲，台北市人。國中讀大安，因實驗班而加入鼓號樂隊。高中唸延平，曾任校刊總編輯，1984 聯考以第一志願進入淡江物理系，1990 淡大畢業時，獲物理與數學雙學士學位。1991 留學英國，受業於卡文迪西實驗室 Volker Heine 教授門下，1995 獲劍橋大學博士學位，並釋出第一代 CASTEP 膺勢資料庫。

研究興趣：開發能分析材料物性及化學鍵的程式工具，配合 CASTEP 計算材料之線性與非線性光學性質、表面物理與化學性質、異質介面物理性質。

教學經歷：1998 年前後開始著手規劃將 CASTEP 用於大學部之教學，為全亞洲首例。長期受聘於國網中心講授 "NCHC 計算化學 Materials Studio / CASTEP 進階密集課程"，曾獲邀至台積電作 CASTEP 材料計算教育訓練課程。近年亦受邀至中國科學技術大學材料系，開授暑期第三學期 CASTEP 材料物性計算課程。多年參與台北市高中物理資優營 (台大主辦)，教授 數學 (II)、近代物理、電腦模擬實驗。

2014 第一屆專題研究成果發表會

The First Workshop on Undergraduate Research Project



包淳偉 博士
中研院應科中心

「雲端上的材料實驗」

摘要

「作材料實驗，不必進實驗室！」隨著大型計算機計算能量在過去廿年的不斷提升，這句口號已經不再是夢想。廿一世紀的計算材料科學家，只要在全球任何能夠聯網的裝置前面，用手指敲敲螢幕、鍵盤或滑鼠，就可以利用雲端的大型計算主機直接進行"in silico"的材料實驗。計算材料科學已經被廣泛地應用於金屬、陶瓷、半導體、複合到高分子材料從材料設計開發到製程最佳化的各種領域，在本次演講中，首先我將簡略介紹計算材料學的“實驗室”及“實驗”過程；接著，我將介紹幾個計算材料學最近在發現新材料以及解釋真實世界實驗結果的成功應用：藉由分子動力模擬原、分子“粒粒皆清楚”的強大 4D 解析力來模擬金屬奈米柱拉伸實驗和有機太陽能電池奈米結構、利用加速分子動力學預測石墨烯缺陷動態性質、以及利用圖形處理器 GPU 搜尋巨大的晶體結構資料庫來尋找下一代碳捕捉材料。希望藉著以上懶人包式的簡單介紹，能夠使得各位對於計算材料科學的無窮潛力有更多的了解。

講者簡介

包淳偉，大學畢業於清華大學動機系，於臺大取得應力所碩士學位後，再於美國普林斯頓大學獲得機械與航空工程博士學位，並於美國新墨西哥州之洛斯阿拉莫斯國家實驗室(Los Alamos National Laboratory)進行博士後研究。現於中研院應科中心擔任助理研究員。

研究興趣：計算奈米材料及奈米力學，小分子有機太陽能電池及有機發光二極體中有機薄膜的結構及電性之多尺度建模、分子薄膜之結構、缺陷石墨烯之機械性質與熱學性質、光合膜中膜蛋白組織之多尺度模擬。