

中正大學課程大綱
化學工程學系

課程名稱(中文)：	軟物質材料之多尺度模擬法	開課單位：	化學工程研究所
課程名稱(英文)：	Multiscale Simulation Methods for Soft Materials	課程代碼：	
授課教師：	華繼中		
學分數：	3	必/選修：	選修(開放大四選修)
先修科目或先備能力：	Physical Chemistry/ Thermodynamics/ Engineering Mathematics		
課程概述：	I. Introduction to the basic principles of quantum chemistry, molecular dynamics, and various kind of coarse-grained computational schemes. II. Applications to representative soft material systems. III. Practice of simple simulation jobs and mini-projects.		
學習目標：	This course introduces the basic principles and schemes for utilizing multiscale simulation methods to resolve fundamental physical properties of representative soft material systems, including polymer solutions, colloidal suspensions, gels, and their condensed thin films.		
教科書/參考書：	1. Frenkel, D.; Smit, B.; <i>Understanding Molecular Simulation from Algorithms to Application</i> , Academic Press (1996) 2. Allen, M. P.; Tildesley D. J.; <i>Computer Simulation of Liquids</i> , Oxford (1987) 3. Holtje, H.-D.; Sippl, W.; Rognan, D.; Folkers, G.; <i>Molecular Modeling : Basic Principles and Applications</i> , John Wiley & Sons Inc (2008) 4. Voth, G. A.; <i>Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems</i> , CRC Press (2009) 5. Lewars, E. <i>Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics</i> , Springer (2010) 6. Ross, R. B.; Mohanty S.; <i>Multiscale Simulation Methods for Nanomaterials</i> , John Wiley & Sons Inc (2008)		

課程大綱		分配時數				核心能力	備註
單元主題	內容綱要	講授	示範	習作	其他		
Chapter I. Introduction	1. History of computer simulations 2. Current applications to soft materials 3. Concept of multiscale simulations	6				1,3,4,5,8	
Chapter II. Molecular Dynamics (MD)	1. Equations of motion 2. Interaction between molecules and force fields 3. Statistical analysis of MD simulation data 4. Tips of submitting job to commercial software package 5. Case study: polymer solutions and colloidal suspensions	9				1,3,4,5,8	
Chapter III. Coarse-Grained (CG) Schemes	1. Basic ideas of CG simulation 2. Strategies of coarse-graining & mapping of force fields 3. Case study: polymer solutions, colloidal suspensions, and phase transition	9				1,3,4,5,8	
Chapter IV. Practice of Simple Simulation Jobs	Running simulation jobs on software package	3		3		2,3,4,6	
Chapter V. Quantum Chemistry	1. The Hartree-Fock approximation 2. Basis sets 3. Other electronic structure	9				1,3,4,5,8	

	methods (DFT, SE ...) 4. Tips of submitting job to commercial software package 5. Case study 1: Force field constructions 6. Case study 2: Fundamental optical and electronic properties of donor-acceptor pairs						
Chapter VI. Application of Multiscale Simulations	1. Optical and electronic properties of solution-cast organic thin films 2. Miscellanies	6				1,3,4,5,8	

教學要點概述：
1. 教材編選： ☒ 自編教材 ☒ 教科書作者提供
2. 教學方法： ☒ 投影片講述 ☒ 板書講述
3. 評量方法： ☐ 上課點名 0%， ☐ 小考 0%， ☐ 作業 0%， ☐ 程式實作 0%， ☒ 實習報告 40%， ☐ 專案 0%， ☒ 期中考 30%， ☒ 期末考 30%， ☐ 期末報告 0%， ☐ 其它 0%
4. 教學資源： ☐ 課程網站 ☒ 教材電子檔供下載 ☒ 實習網站
5. 教學相關配合事項：

核心能力：

- 1、具有化學工程核心課程的專業知識及其應用於工程問題解析的能力。
- 2、具備規劃研究計畫，執行研究，分析數據，歸納結論，撰寫研究成果報告的能力
- 3、熟練化工領域之專業研究所需的技術、技巧及使用現代計算工具與分析儀器之能力。
- 4、熟練文獻調查與資料蒐集的方法，能主動閱讀文獻，具有成熟的書面及口頭報告的表達能力。
- 5、具備材料科學或生物科技等跨領域之先進專業知識，瞭解工程技術對環境、社會及全球的影響。
- 6、具有領導、有效溝通與團隊合作的能力。
- 7、具有實驗室管理、研究器材採購、研究軟硬體設施或實驗設備維護的能力。
- 8、理解專業倫理及社會責任，重視作業安全與環保永續，並具有創新研發與跨領域學習的精神。