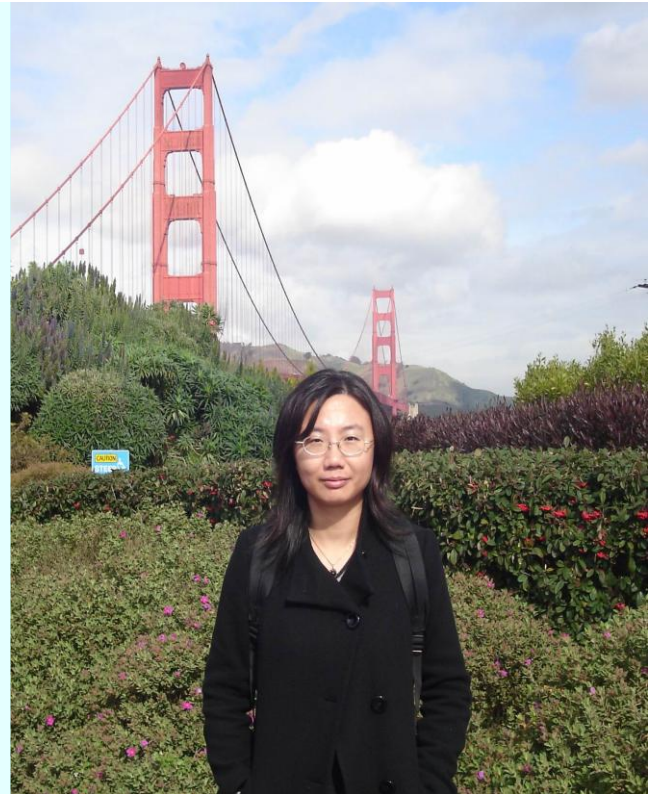


張怡玲博士  
副教授  
奈米計算實驗室主持人

學歷：  
美國普度大學航空太空工程博士  
美國普度大學航空太空工程碩士  
國立台灣大學物理學士

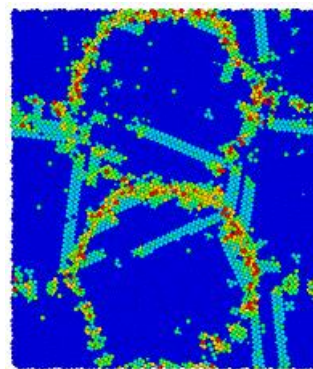
專長領域：  
奈米力學、奈米材料分析、分子模擬、多尺度模擬法

聯絡方式：  
ilchang@mail.ncku.edu.tw  
06-2757575-62124



## 奈米計算

由於奈米尺寸下的量子效應以及表面效應所造成的『介觀』現象，奈米材料常表現出不同於傳統材料的物理特性，因此很多傳統力學理論必須被重新檢驗在奈米尺度下的適用性。而奈米尺度相關的實驗需要高精密度的儀器，成本較高且有其困難度，因此常以數值模擬方法進行奈米材料及結構的研究，其中分子模擬方法直接計算原子間的交互作用，並利用統計力學方法得出大量粒子系統下的物理特性，提供了許多在理論分析和實驗觀察之外的微觀的解釋，因此在物理、化學、生物學和材料科學方面等許多領域得到廣泛的應用。



多晶奈米薄膜內的差排



奈米碳管

## 應用領域

微奈米機械設計、微奈米撷能材料及結構設計、奈米生醫元件設計等

## 分子模擬

分子模擬可直接研究原子或分子的行為，透過勢能函數描述分子間的作用力，可用來研究微觀世界的物理現象，常用的分子模擬方法有分子靜力學法 (Molecular Statics)、分子動力學法(Molecular Dynamics)及蒙地卡羅法(Monte Carlo)等，分子靜力學即為最小能量法，分子靜力學奠基於自然界系統在最小能量下為穩定存在的原理，在忽略原子的熱震盪的假設下，找到原子系統能量曲面的最小點，進而求取材料的穩態性質；分子動力學模擬方法以符合古典牛頓力學規律的大量粒子系統，透過對運動方程式積分計算各粒子在相空間的運動規律與軌跡，並利用統計熱力學方法得出該系統在巨觀的物理特性；蒙地卡羅法為一統計模擬方法，以隨機的方法產生新的分子構型，並由能量及機率決定新的構型是否能存在，並以此迭代。分子靜力學法採用最佳化演算法，計算速度較快，但只能得到 OK 溫度下的穩態行為，分子動力學雖較耗時，但可研究物體於任何溫度之暫態及穩態行為，蒙地卡羅法需要繁雜的電腦技術和大量重複的隨機抽樣，所須計算成本高。

分子模擬可研究的內容囊括了奈米材料及結構的各種物理性質及催化劑、聚合物、固體化學、結晶學、結晶粉末繞射以及材料特性等材料科學研究領域的主要課題。近年來，也常用在藥物研發過程中，用以了解藥效、副作用、代謝等等，以確保藥物之有效性與安全性，可減少進行需耗費大量的金錢、時間與人力的人體實驗，利用分子模擬運算以預測藥物於人體內的物理化學及生理作用情形，已儼然成為新藥開發的趨勢。透過模擬計算可預測經由諸多繁瑣實驗才能得到的性質，如酵素催化作用、劑型與藥物控制釋放、量化藥物結構與活性關係分析、結晶結構預測與溶解度等。

## 奈米計算實驗室

### 設備介紹

#### 多核心晶片計算電腦

##### PC Cluster, Workstation

用於計算數值模擬，使用平行化使計算效率更高；另外也使用國家高速計算中心提供的計算資源

#### 網路儲存設備 Terastation

高速傳輸、大容量且具安全儲存的 NAS

#### 不斷電系統

維持更穩定的運算環境



# 實驗室研究簡介

奈米計算實驗室研究主要著重於探討奈米材料、結構的機械及力學性質，分別從理論及數值模擬等兩個方向進行，所探討的奈米材料及結構包含奈米薄膜、奈米線，奈米碳管及其複合材料。

## 研究方向一：理論模型

奈米材料的機械性質會隨著其特徵長度的大小不同而異，用原有的連續體理論去解釋奈米尺度下的材料行為常有所不足，且實驗或是模擬所得到的結果，常常互相抵觸，有很多問題一直沒有辦法突破，故嘗試建立原子-連續體模型來描述奈米材料的行為，目前已建立半連續模型(semi-continuum model)來處理奈米薄膜及奈米線，奈米薄膜及奈米線的幾何尺寸常橫跨兩個不同的尺度(微米至奈米)，在奈米級尺度的方向上考慮材料的不連續性，在微米級方向上，因其尺寸遠大於原子間距則以傳統連續體理論處理，將原子間的交互作用，分別以線性彈簧來做近似，進而推得其彈性常數與尺寸間的關係。目前正著手建立石墨烯片及奈米碳管之原子-連續體模型。

## 研究方向二：數值模擬

以分子模擬(包含分子靜力學及動力學)的方式來研究奈米材料的機械性質，著重於尺寸、晶格方向、碳管螺旋性效應等的影響，並進一步與傳統連續體理論預測之結果相比較驗證。此外探討奈米結構的**振動、電性及光學性質等及壓電奈米材料特性**，並將研究領域拓展至相關的奈米材料實驗，以驗證理論與數值模擬的正確性。分子模擬是重要的分析方法，但是其計算規模仍然受到很大限制，難以滿足較大尺度系統的計算，近年來也嘗試發展多尺度模擬方法，對於複雜系統運用耦合不同尺度的技術與分析方法，以處理跨尺度的問題。

## 輔助模擬軟體

### Materials Explorer (ME)

ME 是一個多用途的分子動力學模擬軟體，直觀的圖形介面簡化了使用流程，設置了各種計算方法並可視覺化的解釋結果。ME 可以應用於各種材料系統的計算，可藉由調整參數描述相當多的原子間相互作用，包含金屬和無機物，如陶瓷及半導體等，也非常適合有機物，如聚合物和生物分子等。

### Materials Studio (MS)

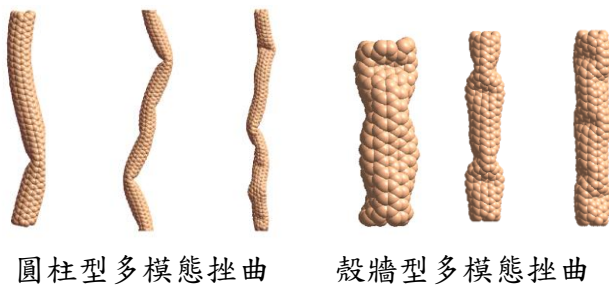
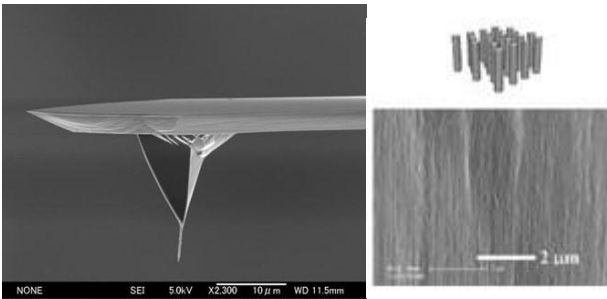
MS 是一套材料科學的模擬軟體，藉由桌上型電腦或伺服器，協助科學家解決重要問題，研發世界上最先進的材料。MS 是在化學和材料領域，為結構和計算機研究者所設計的專業模擬軟體，提供使用者流暢的操作介面，並包含完整的運算方法，讓使用者容易上手並提供功能強大的模擬能力，由國家高速計算中心提供了相關的服務。

## 實驗室研究領域

奈米碳管、碳管環、奈米彈簧、石墨烯片、多晶薄膜、  
奈米複材、金屬及壓電奈米薄膜、奈米線

### 奈米碳管挫曲

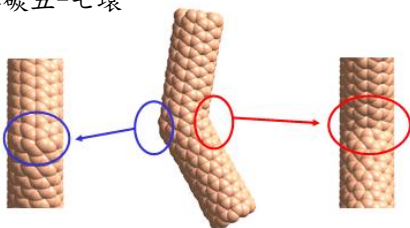
奈米碳管可用做 AFM 探針及複材的補強材，具有高長徑比的特性，受軸向力容易產生挫曲造成破壞，以分子模擬研究碳管不同挫曲變形型態與臨界應變，探討尺寸、長徑比、螺旋性等效應對挫曲性質的影響



### 奈米彈簧

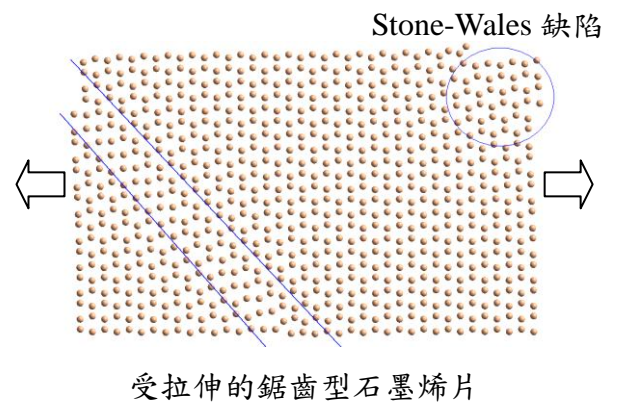
利用碳五環及碳七環缺陷填充碳管形成曲面概念，將半徑相近的扶手椅型與鋸齒型碳管相接形成碳管彈簧，透過加載模擬計算彈簧常數，並與連續體理論模型預測值相比較

〈型單元與碳五-七環



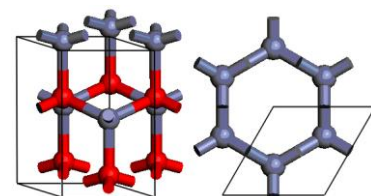
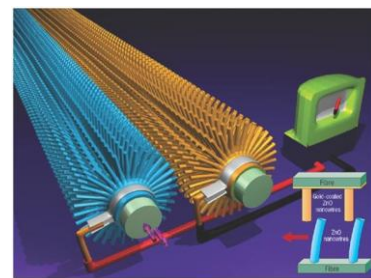
### 石墨烯片破壞型態

石墨烯為六角網狀排列之二維碳結構，其碳原子由  $sp^2$  軌域互相鍵結，僅單層或數層碳原子厚，具有多種獨特的物理特性



### 奈米壓電材料

氧化鋅(ZnO)奈米線可作為新型的擷能材料，轉換振動能成電能，探討氧化鋅奈米線的壓電性質與尺寸間的關係，可提供元件設計者做為參考依據



Wurtzite 氧化鋅晶體結構