

趙聖德 教授研究 Highlights

學歷：國立清華大學物理學系 學士(1992)

國立臺灣大學物理研究所 博士(1999)

研究室：臺灣大學應用力學館 413 室

(TEL: 02-33665066; E-mail: sdchao@iam.ntu.edu.tw)

實驗室：跨尺度動力學模擬實驗室@應力所 228 室

(TEL: 02-33665611; E-mail:

r12543068@ntu.edu.tw)



實驗室簡介：

本實驗室著重於跨尺度材料及工程系統之演算法開發及計算機(電腦)模擬。近年來，先進的計算機硬體設備以及軟體開發使得多尺度分子模擬計算能夠重現並預測奈米材料及微工程系統之奇異特性，並且提供系統工程整合一項有力的工具。目前配合大數據分析及人工智慧(AI)輔助計算，更能將數值計算的資料應用於複雜系統。

我們的研究主題非常多元，例如：固液介面有限元素模擬、微流道生物檢測器開發、光電超穎材料應用、奈米材料熱力性質模擬以及量子電動力場分子動力學模擬。雖然本實驗室以計算模擬為主軸。近年來亦發展實驗方法，例如：波浪能擷取設備開發及機制和石英晶體微天平生化檢測器開發，並與所內及所外實驗室合作，研究成果均發表於國際知名期刊，實驗成果取得國內外專利。

研究主題：

分子光譜及化學動力學

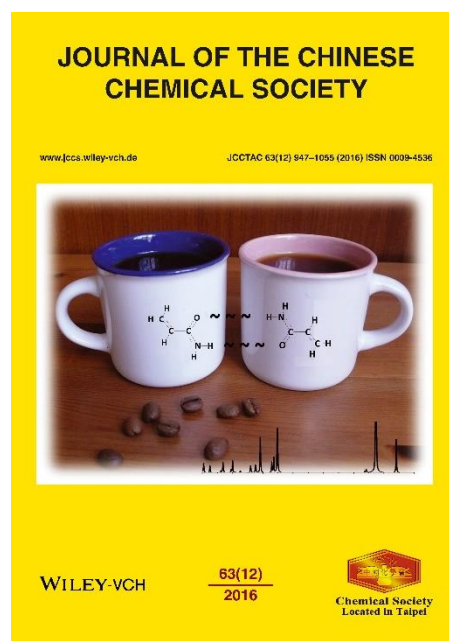
生物檢測器固液介面之有限元素模擬

光電超穎材料之力學應用

奈米材料熱力性質模擬

量子力場分子動力學模擬

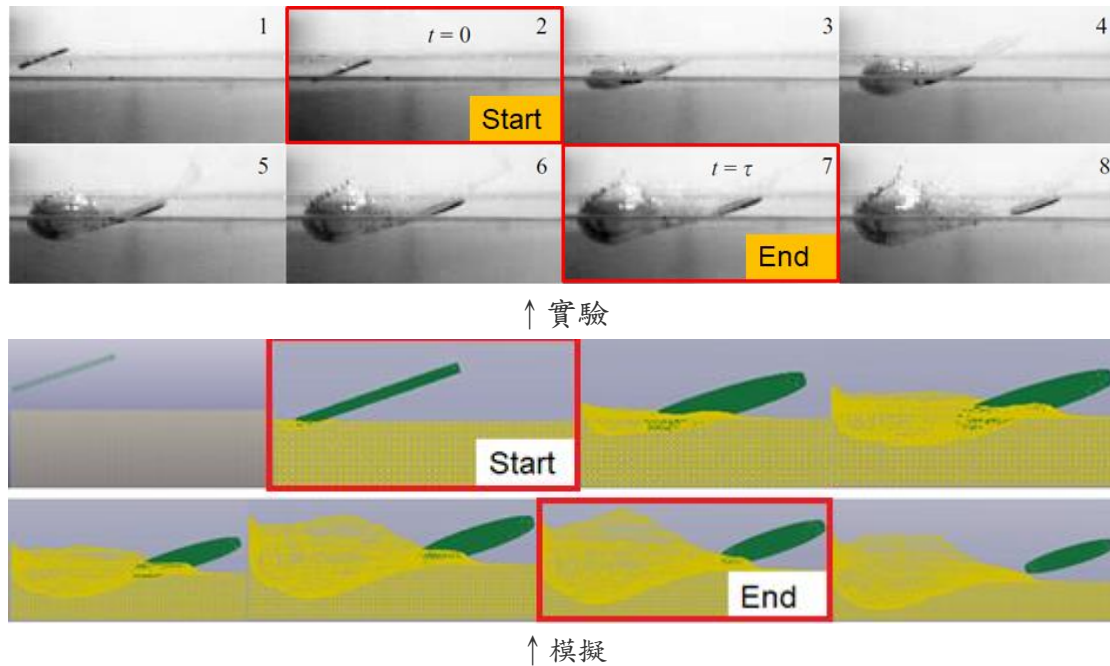
波浪能擷取設備及機制



～有興趣的同學，歡迎聯絡我們～

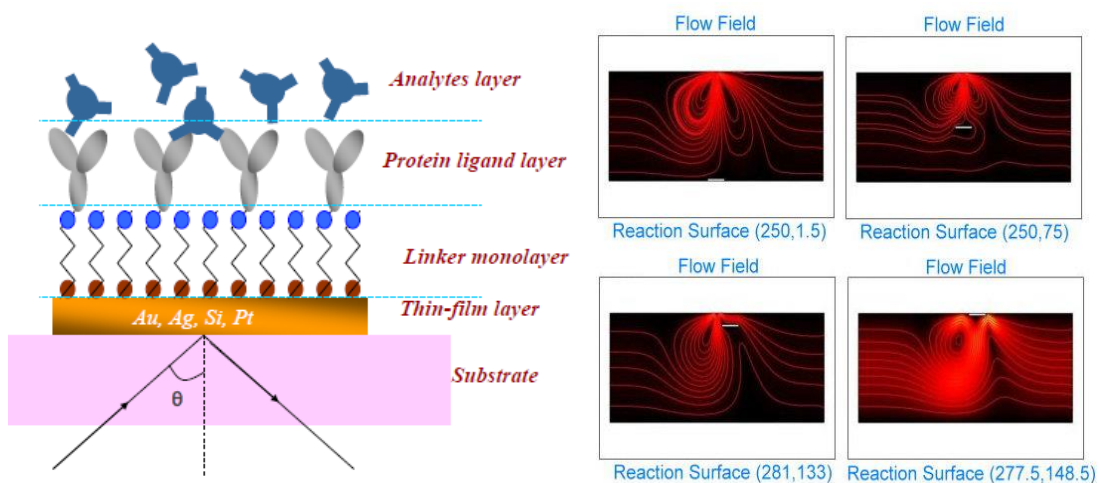
➤ 固液介面有限元素模擬-打水漂之動力學模擬：

巨觀流固耦合作用是目前研究的前沿，例如打水漂是平常生活中所能遇見的。本研究利用有限元素法針對影響彈跳次數的幾項因素作探討，例如：石頭與水面的夾角、速度與水面的夾角、自轉速度，目標為找到最佳的彈跳次數的影響因子及最佳的彈跳次數。



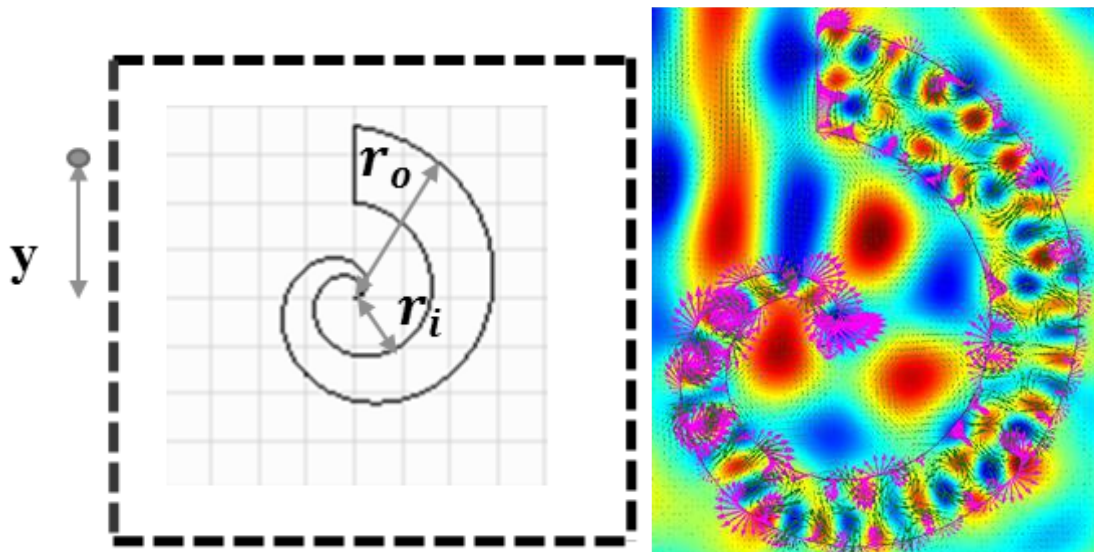
➤ 微流道生物檢測器開發：

近年來，生物醫學及生化檢測技術已進入微奈米尺度，微流體在介觀尺度之動力學與巨觀尺度有明顯之差異且有新奇的性質，利用有限元素法模擬微流道系統並與實驗結合，運用這些特性可開發準確又有效率之生物檢測器，例如：毒品快篩檢測等。



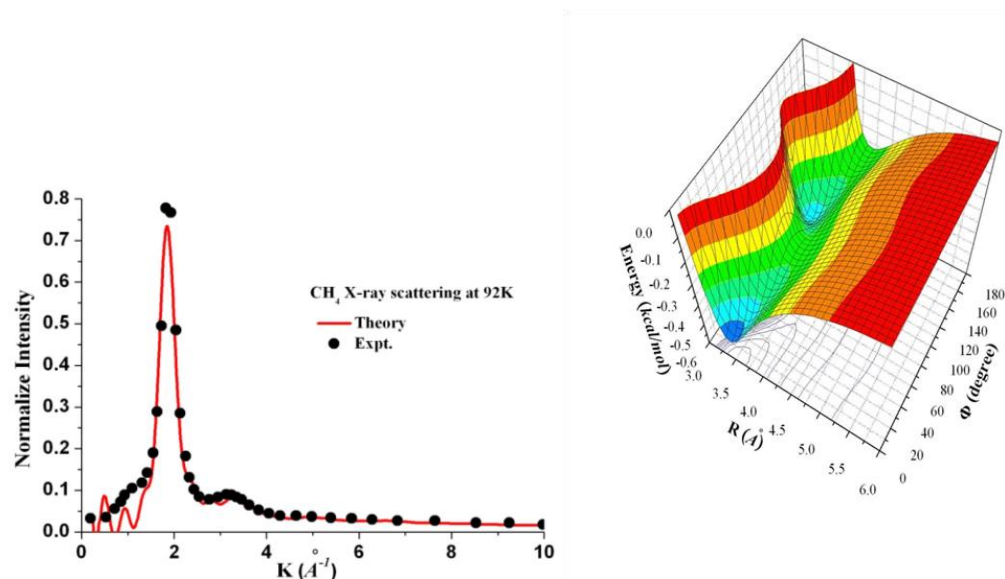
➤ 光電超穎材料應用：

光電超穎材料是結合力學與光學的一門前沿技術，由有限元素法模擬各種介質波導的穩態電磁場，再將表面之電磁場帶入馬克斯威爾應力方程式，求得電磁場施加在波導表面的應力後，接著對表面應力與該點至中心之距離外積後積分，求得波導的平均力矩。我們嘗試**改變波導形狀**來改變場的分佈，進而改變力量分佈來求得**最大力矩之結構**，研究結果發現在波導內有空隙、不對稱及直接受光照面確實可增強力矩，但如果結構旋轉一圈之平均力矩之最大值又會與固定角度下最大值可能有所不同，而實務上平均力矩最大化較為重要，最大力矩可以當作初始的推動或是克服較難旋轉的點。



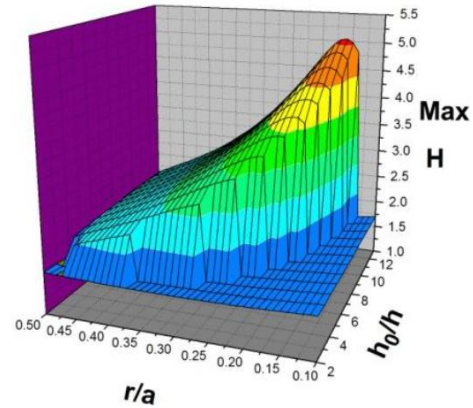
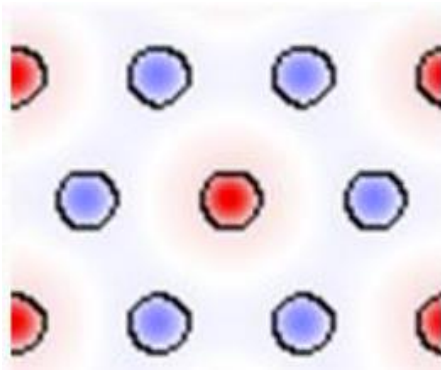
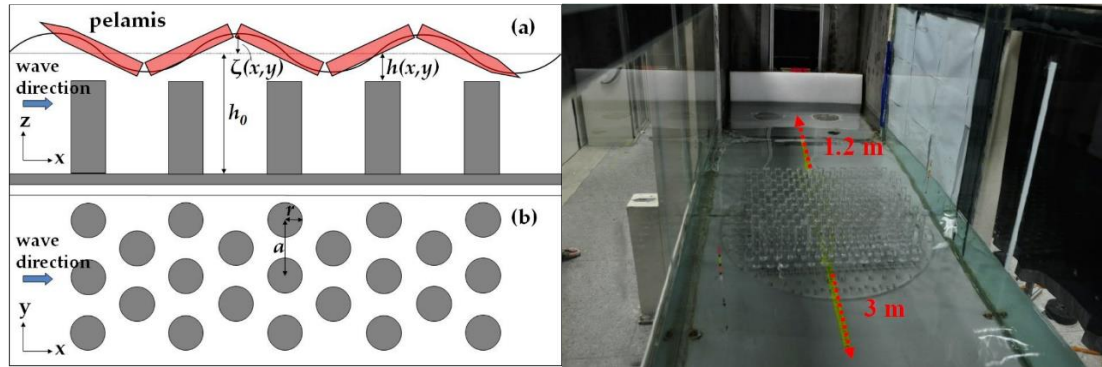
➤ 量子電動力學於分子動力學之應用：

在微觀力學中，我們利用**量子力學**計算方法深入研究分析甲烷、三氟甲烷及二甲醚等分子系統。利用計算所得到的(粗粒化)分子力場進而模擬介觀的**分子力學和動力學**方面的軌跡運動。且配合中子與 X-ray 的**散射實驗**結果，來佐證我們的理論研究。



➤ **波浪能擷取設備及機制：**

在波浪能研究方面，波浪發電系統是藉由裝置把波浪能先轉換為機械能(液壓能)，然後轉成可利用之電能，對實際波浪而言，其能量潛能受到波高、週期所影響。本研究提出一種**增強波浪振幅**之方法已期改善能流密度與地形水深之限制，使波浪能的擷取能更具廣泛性與效率性。此研發成果取得**美國發明專利**。



近期論文期刊發表：

Y. H. Chen, I. H. Wu and **S. D. Chao***, 2024:

A Mini-Review of the Kinetic Energy Partition Method in Quantum Mechanics
Symmetry, 16, 290/18

Z. X. Fan and **S. D. Chao***, 2024:

A machine learning force field for bio-macromolecular modeling based on quantum chemistry calculated interaction energy datasets
Bioengineering, 11, 51/17

C. M. Cheng, Y. H. Chen, S. Y. Lin, **S. D. Chao***, S. F. Tsai*, 2023:

Study on Shielding Effectiveness of High Transmittance Coating Film Glasses against Electromagnetic Pulse.
Technologies, 11, 175/18

J. A. Chen and **S. D. Chao***, 2023:

Intermolecular Non-Bonded Interactions from Machine Learning Datasets.
Molecules, 28, 7900/17

S. D. Chao*, 2023:

Adiabatic theory for high Rydberg molecules.

J. Chin. Chem. Soc., 70, 232-242.

H. H. Huang, Y. S. Wang and **S. D. Chao*, 2022:**

A minimum quantum chemistry CCSD(T)/CBS dataset of dimeric interaction energies for small organic functional groups: Heterodimers.

ACS Omega, 7, 20059-20080

J.-J. Li, S.-F. Chiu, **S. D. Chao*, 2022:**

Split beam method for determining mode shapes of cantilever beams under multiple loading conditions.

Journal of Vibration and Control, 28, 3207-3217 (Published online June 24, 2021)

J.-S. Sung, S.-F. Chiu, **S. D. Chao*** and Arvin H.-T. Li, **2021:**

A simulation study of the electrothermal effect on cyclic voltammetric detection efficiency of methamphetamine in a microfluidic sensor.

Multiscale Science and Engineering, 3, 155-164

Y. M. Chang, Y. S. Wang and **S. D. Chao*, 2020:**

A minimum quantum chemistry CCSD(T)/CBS dataset of dimeric interaction energies for small organic functional groups.

J. Chem. Phys., 153, 154301/13

專利：

趙聖德，邱碩峰，黃耀弘，王俊傑，王思哲，朱錦洲

‘波浪能聚集與增益裝置’ ROC Patent I521135 (Feb. 2016—April 2033)

Sheng-Der Chao, Shuo-Feng Chiu, Yao-Hung Huang, Chun-Chieh Wang, Su-Che Wang, Chin-Chou Chu

‘Wave Energy Gathering And Enhancing Device Utilizing Linearized Shallow Water Wave Theory’ USA Patent 9303617 B2 (April 2016 – Sept 2034)