

薛宏中 鑽研第一性原理材料計算

淡江學術圈

學歷：英國愛丁堡（Edinburgh）大學物理與天文學系博士

經歷：物理系系主任、教授

研究領域：第一性原理激發態計算、能譜計算、二維材料、高壓物理

研究緣起

透過原子尺度的細微訊息，可以掌握宏觀世界中各式新穎材料的奇特性質。然而，在此微觀世界中，想要掌握為數浩繁如星又彼此糾纏不清的電子，不僅對於建立正確理論模型，是一項艱難的考驗，對近代奈米實驗技術，更是一大難題。淡江研究發展處研發長薛宏中，運用第一性原理電子結構計算方法，與最新實驗技術結合，可以同時兼顧計算之高精確度與效率，有效發揮計算材料科學的功能，企圖理解新世代材料與元件中豐富的物理機制。

研究領域

「第一性原理」為結合多體理論與高效能演算法，計算材料內的電子行為。因電子數量太多以及涵蓋多種不同形式的交互作用，想掌握材料裡的全部電子行為極不容易，而第一性原理計算方法，便是為解決此問題而生。

薛宏中表示：「有些夢想中的材料，具有完美的特性；然而，現階段可能因為技術尚未成熟而無法被製造出來，但可以先透過第一性原理計算模擬預測其製備條件，待未來科技進步，即可依照模擬結果，設計及製造具有各種特殊功能的材料與電子元件。」薛宏中提及第一性原理的運用，除了為實驗結果與觀測到的現象，提供理論解釋之外，亦具有預測材料性質的能力。他指出，利用實驗手段研究材料時，要先探測與電子交互作用後的反應，進而推論材料內的電子結構，但任何探測行為，皆會影響電子所處的狀態，致使造成在觀察或理解上的困難，所以需透過「模擬」處理此問題。薛宏中以高壓舉例，假設若知道某一元素加壓後的結構變化，便能藉由壓力控制去設計

新的材料，而這些材料將在未來研究或生活應用上有新的可能性。

研究歷程

薛宏中在淡江大學物理系就讀時，主要的興趣在統計物理方面。大學畢業後前往英國蘇格蘭首府，愛丁堡大學就讀。博士班的研究主題是探究材料在高壓下的結構變化，研究材料的原子與電子結構如何因外加壓力轉換而改變。返回淡江大學工作三年後，獲當時國科會與學校的支持，前往美國加州學術重鎮——柏克萊大學，進行交流訪問，期間將研究重心轉往第一性原理激發態計算，探究原子世界中的各種複雜電子結構與動態行為。

在研究過程中，薛宏中認為「合作」非常重要。在他過去的研究生涯中，也曾遭遇瓶頸，因當時純粹以理論角度思考問題，造成研究成果無法落實到現實材料中。薛宏中坦言：「現在做研究不像以前一樣，一個人單槍匹馬就可以解決所有問題，即便是像愛因斯坦那樣偉大的科學家，他在當年也必須跟許多理論與實驗專家討論，才能確定他的理論正確與否。」他認為理論與實驗的合作是重要也是必要的，精準的理論仍需透過實驗驗證。無論是何種領域，皆需藉由專業領域的共同探討，以及學習如何接受他人角度看待事情，才會明瞭自身想法是否有盲點或錯誤，並進行修正調整。

研究成果

薛宏中近年代表性研究成果，包括：將第一原理激發態理論（GW+BSE 及 TDLDA+U），應用於奈米層狀（單層及少層）結構，發現由於空間自由度之侷限，致使增加電子與電洞波函數耦合程度，造成低微度奈米材料中之激子效應非常顯著，亦顯示奈米結構將可應用於各類型可調制之光電元件；與同步輻射 X光實驗研究群密切合作，研究摻雜效應對於石墨烯材料、過渡金屬氧化物（ZnO）奈米結構、類石墨烯二維材料等等之電子結構以及磁性特性之影響，發現在奈米尺度之下，摻雜效應對於物質之磁結構之影響非常明顯；此外，也通過第一原理激發態GW+BSE 計算結果，與國內先進光學實驗研究群合作，共同研究新穎光電池材料：發現類黑磷結構之四—六族層狀半導體（GeS, GeSe, SnS, SnSe），其單層與少層奈米結構之電子結構、光學特性及光激子效應具有非常強之各向異性（anisotropy）。而且，此一特性會隨著材料的厚度愈薄愈接近單層（準二維結構），而更趨顯著。利用此特性，可應用於太陽能

電池以及光檢測元件之開發。最近，更重新審視傳統晶格振動計算理論，提出一種新的聲子計算（phonon）方法-原子間力常數配分法（partition method），並證實其應用於傳統半導體、鐵電材料、二維磁性材料、以及旋轉錯位雙層石墨烯等系統之計算，能獲得與密度泛函微擾理論（DFPT）相同精確度。此一兼具計算效率與精確性的聲子計算法，未來將可應用於更複雜結構系統之晶格振動與熱力學相關特性之計算與分析。

研究展望

目前，薛宏中除了擔任淡江大學研發主管之外，也出任台灣物理學會學術處副主任，過去亦曾擔任國科會物理學門研究計畫複審委員，積極參與各項學術活動。雖然身兼數職，薛宏中仍持續積極參與國內外各項研究合作，例如：與柏克萊大學雷干城院士合作的能譜研究，探究如何運用光為探源，研究新穎材料中豐富多樣的電子行為；與成功大學團隊合作，運用第一性原理還原生長二維材料氮化硼的機制，期望能穩定取得二維材料以取代未來的傳統半導體；持續與淡江物理系同步輻射研究團隊合作，研究新穎材料之的電子結構；此外，薛宏中主導與陽明交通大學、臺灣大學、中興大學等多所學校老師合組研究團隊，研究特殊物理機制——「電荷密度波」。薛宏中表示，二維材料與電荷密度波可衍伸許多議題，例如研發新材料替換太陽能光電材料元件，解決太陽能發電效率低的問題，提升未來產業發展效能。

提及關於對社會的貢獻，薛宏中說：「我太太以前也常問我，做這些研究題目，對社會有什麼貢獻？」他回答這個問題表示，希望除了理解物理現象、傳承研究經驗給學生之外，未來希望透過與企業合作，發揮自己的學術專長，呼應產業需求，以現有資源幫助產業解決問題，以我們的專業，協助半導體科技業界改善所面臨的問題。（文字整理 / 邱若惠）

研究聚焦

近期期刊論文與專書：

1. Nematic electron and phonon dynamics in SnS crystals (2022)

作者：Nguyen Nhat Quyen, Tz-Ju Hong, Chin En Hsu, Wen-Yen Tzeng, Chien-Ming Tu, Chia-Nung Kuo, Hung-Chung Hsueh, Chin-San Lue, and Chih-Wei Luo

期刊：Applied Physics Letter, 已被接受 (2022)

2. Bandgap Shrinkage and Charge Transfer in 2D Layered SnS₂ Doped with V for Photocatalytic Efficiency Improvement (2021)

作者：Abhijeet R. Shelke; Hsiao-Tsu Wang; Jau-Wern Chiou; Indrajit Shown; Amr Sabbah; Kuang-Hung Chen; Shu-Ang Teng; I-An Lin; Chi-Cheng Lee; Hung-Chung Hsueh; Yu-Hui Liang; Chao-Hung Du; Priyanka L. Yadav; Sekhar C. Ray; Shang-Hsien Hsieh; Chih-Wen Pao; Huang-Ming Tsai; Chia-Hao Chen; Kuei-Hsien Chen; Li-Chyong Chen; Way-Faung Pong

期刊：Small, vol. 18, p. 2015076 (2021)

3. Magnetic and topological properties in hydrogenated transition metal dichalcogenide monolayers (2020)

作者：Liang-Ying Feng; Rovi Angelo B. Villaos; Harvey N. Cruzado; Zhi-Quan Huang; Chia-Hsiu Hsu; Hung-Chung Hsueh; Hsin Lin; Feng-Chuan Chuang

期刊：Chinese Journal of Physics, vol. 66, p.15 (2020)

4. Partitioning interatomic force constants for first-principles phonon calculations: applications to NaCl, PbTiO₃, monolayer CrI₃, and twisted bilayer graphene (2020)

作者：Chi-Cheng Lee; Chin-En Hsu; Hung-Chung Hsueh

期刊：Journal of Physics: Condensed Matter, vol. 33, p.055902 (2020)

5. Study of Structural, Thermoelectric, and Photoelectric Properties of Layered Tin Monochalcogenides SnX (X = S, Se) for Energy Application (2020)

作者：Ching-Hwa Ho; Wen-Yao Lin; Liang-Chiun Chao; Kuei-Yi Lee; Jun Inagaki; Hung-Chung Hsueh

期刊：ACS Applied Energy Materials, vol. 3, p.4896 (2020)

6. Polarization photoelectric conversion in layered GeS (2018)

作者：Hung-Chung Hsueh; Jia-Xuan Li; Ching-Hwa Ho

期刊：Advanced Optical Materials, vol. 6, p.1701194 (2018)

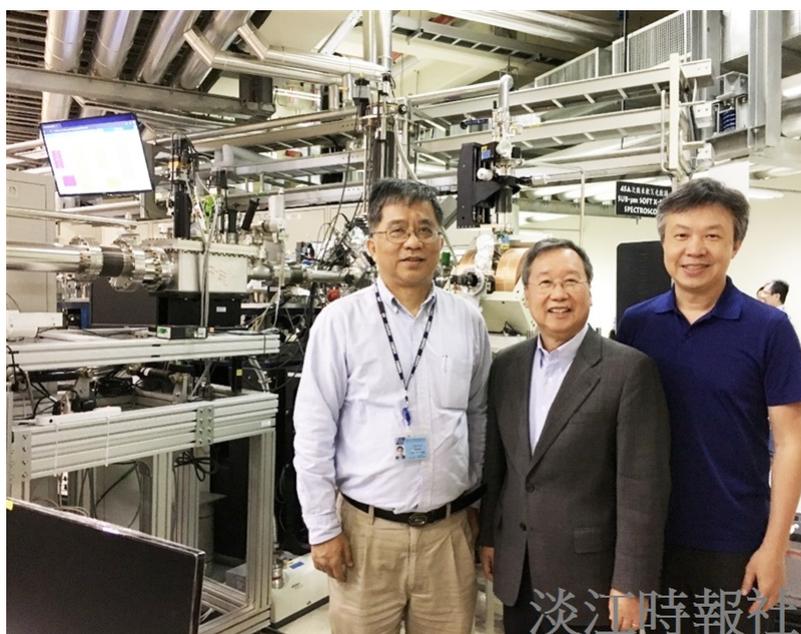
7. Origin of magnetic properties in carbon implanted ZnO nanowires (2017)

作者：Y. F. Wang; Y. C. Shao; S. H. Hsieh; Y. K. Chang; P. H. Yeh; H. C. Hsueh; J. W. Chiou; H. T. Wang; S. C. Ray; H. M. Tsai; C. W. Pao; C. H. Chen; H. J. Lin; J. F. Lee; C. T. Wu; J. J. Wu; Y. M. Chang; K. Asokan; K. H. Chae; T. Ohgashi; Y. Takagi; T. Yokoyama; N. Kosugi; W. F. Pong

期刊：Scientific Reports, vol. 8, p.7758 (2018)

8. 專書《固態材料之電子結構與光譜計算》(2016)

2022/10/25



薛宏中（右一）與物理系講座教授彭維鋒（左一）、加州大學柏克萊分校雷干城院士（中），於新竹國家同步輻射研究

中心內淡江大學專屬工作站（45A）前合影。