

運用數值模擬發展再生能源的新契機



「沒有國家高速網路與計算中心的高速電腦，很多材料、表面反應的大型計算，都沒辦法進行。」

是中央研究院院士同時也擔任交通大學分子科學研究中心主任的林明璋教授，1959 年畢業於台灣師範大學化學系，1965 年獲得加拿大渥太華大學化學博士，1970 年進入美國海軍研究所工作，1988 年接受美國埃默里（Emory）大學聘請，擔任該校 Woodruff 講座教授，2003 年被前交大校長張俊彥禮聘回台。

林明璋的專長是物理化學領域的化學動力學，他說以前科學家觀察到的很多化學變化，都不清楚其中的原子、分子、離子、電子機制如何運作，只能靠經驗猜測；因為他們雖然已能用雷射探測到個別原子，但化學變化都牽涉到很多個粒子，無法用雷射觀測。

所以當 20 年前量子計算發展到一個階段時，他就開始用電腦模擬各種粒子的交互作用，若模擬後算出的結果正好和某項實驗結果相符，就表示物質粒子間確實是以這種模擬的反應機制在運作；當科學家了解化學反應的每一階段，就可更精確地控制反應照自己所預期的進行。他曾經成功模擬出碳氫化合物燃燒時，氧化氮如何釋出，推翻過去 30 年的假設。

提高太陽電池發電效率

交大的分子科學研究中心，本來是鑑於交大只有應用化學系、對基礎物理化學的理論研究不夠強才成立的；但林明璋回台後，認為用電腦模擬計算也是在鑽研化學的基本原理，而再生能源既需要理論基礎、又有應用價值、又是適合台灣發展的重點產業，於是開始和原子能委員會核能研究所合作，研究奈米點太陽能電池和乙醇轉氫發電。

科學家已經發展出一種「染料敏化太陽電池」，是把特殊有機染料吸附在二氧化鈦奈米薄膜上，就會吸收太陽能並放出電能，可取代矽晶片；但有機染料穩定性不足，因此他們希望用半導體薄膜或奈米點取代，利用奈米點的比表面積增加、物性變化等特性，提高發電效率並加強耐久性。林明璋研究的替代材料，是在二氧化鈦上結合氫化銻奈米點，可是該用什麼物質當結合介面呢？此時國網中心的高速電腦就可派上用場。

林明璋在實驗室中嘗試了多種物質，發現若在二氧化鈦上覆蓋硼酸，再「長」出氮化鈦奈米點，發電效率就會提高，但若用磷酸當介面物質，反而會降低發電效率，用其他材質當介面又會產生不同反應。於是他用高速電腦模擬使用各種介面材質時會產生的能量、化學鍵強度、化學鍵如何形成等機制，有了這些知識，就可知道為什麼某種物質有提高效率的效果，某種物質又會降低效率，然後就可推敲出最適當的製作方法，做出效率最高的奈米點太陽電池。

他說這種計算非常複雜，要是像以前一樣使用埃默里大學的電腦，一定會算很久，超過校方規定的電腦使用時間；還好在國內有國網中心，不但提供功能強大的高速電腦，又非常配合教授的研究，讓他可以安心地進行下去，否則要試算一半就被迫中斷，根本做不下去。

家家戶戶都能擁有小型發電機

利用氫、氧結合產生電能的燃料電池是現在全世界的另一項重要發展趨勢，林明璋希望能將乙醇和水混合後，通過適當的催化劑，將乙醇分解為氫和二氧化碳；再連接適當材料做成的電極，使氫、氧結合發電。他說他最大的夢想，就是以後每戶人家家裡都能有這樣的小型發電機。

但是要找到適當的催化劑和適當的電極材料，若用傳統方法，就要找很多很多不同的材料，一一來做實驗，耗時耗力又提高成本；所以林明璋借重高速電腦的計算能力，在電腦中模擬各種材料的反應機制，希望用這種方法快速找到適當材料。

應擴充規模以支援颶洪研究

林明璋在美國幾乎沒做過再生能源的研究，一回來就投入最尖端的領域，而且還是從零開始，對此他表示，當學者一定要勇於嘗試新工具，這樣研究才能走在尖端；而且「既然回來了，就是希望能幫台灣做一些有用的事」，在美國學物理化學的學生不多，不容易進行這方面研究，台灣的學生研究再生能源的意願比較高，所以很適合發展。

他指出，國網中心現有的計算能力，若要做一般科學研究已經足夠，但若支持國家實驗研究院颶洪中心的研究，可能就會不足；因為氣象方面的計算，比起一般科學研究又複雜許多，例如他只是研究少數幾種但數量龐大的粒子間交互作用，而氣象研究光變化因子就已包羅萬象，所以他建議國網中心可再擴充規模，因為颶洪研究對國內是很重要的議題。

後記：為貼近中心使用高速計算主機用戶，國網中心預計於七月進行用戶拜訪，更多的國內科學研究故事與使用心得，敬請期待。

