

出國報告（出國類別：國際會議暨學術交流）

出國報告名稱：第二屆全球材料科學
與工程會議(湖北省咸寧市)暨江蘇
常熟理工學院學術交流出國報告

服務機關：國立暨南國際大學應用材料及光電工程學系

姓名職稱：聶永懋 助理教授

派赴國家：中國

出國期間：102年11月20日至102年11月30日

報告日期：102年12月18日

摘 要

參加第二屆全球材料科學與工程會議(湖北省咸寧市)國際會議與學術交流，日期：102 年 11 月 20 日 至 102 年 11 月 27 日。本研討會是國際性材料科學與工程全領域學術研討會，邀集全球材料科學與工程界領先地位之專家學者與會。報名參加學者必須發表論文，而論文需通過嚴謹 peer-reviewed 論文審查程序。且所有會議發表論文將發表於 SCI 期刊 *Materials Research Innovations*；因此，此會議已經在國際建立相當聲譽。

本人與此次大會發表論文為目前材料科學燃氣渦輪發動機高耐熱鎳系超合金材料表面熱障塗層領域、極少數以第一原理分子動力學模擬的理論研究工作，而其中一共同作者 Roger C. Reed 教授(英國牛津大學教授；原伯明罕大學材料科學與工程學系系主任兼該校模擬研究生產與材料合資公司主任；國際超合金學會主席；英國材料礦物礦業研究所院士為當今超合金材料表面塗層國際最重要學者之一,另一合作伙伴 Dr. R. Wu 為過去日本國立材料研究所著名的高溫研究中心核心成員之一，聯合發表相關最新的實驗成果。本論文即為會議一篇重要發表論文。因此獲邀榮膺此次大會分會場主席。

會後與北京清華大學、中科院物理所、及江蘇常熟理工學院學者交流後獲得具體研究合作方案。上述會後所得具體研究合作方案將與會議期間學術交流成果一一條列於本報告。同時回顧此行提出心得與建議本報告。

目 錄

一、目的.....	1
●原定計畫目標	
●主題	
●緣起	
●預期效益	
二、過程.....	3
●會議之性質及其學術地位、重要性	
●出席發表論文之重要性	
●會議議程與議場主題	
●個人所發表論文標題、作者與摘要	
●學術交流具體收穫	
三、心得與建議	9
四、附件與活動影像	12

一、目的

1. 原訂計畫目標：

1. 發表論文

中文名稱：鉑元素攙雜效應於熱障塗層 γ' -Ni₃Al/Al₂O₃ 黏性第一原理分子動力學模擬研究

英文名稱：The effect of Pt on the adherence of γ' -Ni₃Al/Al₂O₃ interface of thermal barrier coatings investigated by first-principle molecular dynamics (見附件一論文接受證明) 為國科會專題研究計畫之成果，計畫編號：

98-2112-M-260-001-MY2，計畫名稱：第一原理模擬發明室溫半金屬反鐵磁，計

畫主持人：聶永懋

2. 議程中與大會出席學者進行學術交流

2. 主題：

藉由出席此次大會(見附件二大會邀請函)的平台宣傳國科會補助本人主持之最新材料科學燃氣渦輪發動機高耐熱鎳系超合金材料表面熱障塗層領域第一原理分子動力學模擬的理論成果；與觀摩學習各國多材料領域參與學者的最新實驗與裡理論研究成果。

3. 緣起：

2010年九月25-26日由上述國科會計畫補助出席英國伯明罕大學材料科學與工程學系系主任兼該校模擬研究生產與材料合資公司主任之R. C. Reed教授主持之研

討會：第一原理分子動力學模擬討論研討會，進而啓動了本校暨大應光系本人（聶永懋）領導之奈米建構電子學高速運算實驗室師生與R. C. Reed教授及日本國立材料研究所進行理論-實驗三方合作著手研究鉑的摻雜對氧化物金屬介面的黏性效應（doping effects of platinum group metals (PGMs) on the adhesion of the oxide metal interface）（請見附件三之R. C. Reed教授邀請函）。

經過兩年多的合作，初期成果結論與R. C. Reed教授及其學生Dr. R. Wu在日本國立材料研究所所做相關最新的實驗結果論點非常相符，也解釋了其他以發表實驗觀察的現象。今年暑假整理資料撰稿，為趕年底國科會計畫送審前將部分成果發表，為參加此CMSE2013會議（附件三大會邀請函）能同時兼發表於國際期刊Materials Research Innovations（MRI）是有時效的考量（見附件一）。

而本次附加前往江蘇常熟理工學院，實是由於配合CMSE2013大會作業11/13完成註冊手續後，接著訂購出國往返大陸直航的飛機票太晚，離會議活動結束11/27時間最近可訂到的返台直航班機是11/30杭州出發，因此於CMSE2013會後停留大陸期間，就近杭州與江蘇常熟理工學院物理與電子工程學院院長（兼新型功能材料省重点建设实验室主任）江學範教授進行學術交流（見附件四邀請函）。

4. 預期效益：

1. 參與國際會議宣揚本人主持的國際合作研究成果；
2. 發表國際會議與國際期刊論文；
3. 觀摩學習各國多材料領域參與學者的最新實驗與理論研究成果。

以上原本預期效益都得到實現。

超出預期：

1. 在大會前期壁報發表階段與各國學者互動交流良好贏得人望，隔天被推舉擔任分場口頭報告階段的主席，得以學習主持大型國際會議議程與服務演講者則是另一項收穫。
2. 經江蘇常熟理工學院江院長引薦與物理與電子工程學院老師合作研究：最新型 Heusler 合金半金屬材料製成的穿隧結的理論預期的巨磁阻實驗上觀測失敗的可能機制分析。

二、過程

(一) 第二屆全球材料科學與工程會議，湖北理工大學（湖北省咸寧市）(CMSE2013)國際會議與學術交流，日期：102 年 11 月 20 日 至 102 年 11 月 27 日。

● 會議之性質及其學術地位、重要性

性質：國際性材料科學與工程全領域學術研討會，邀集全球材料科學與工程界居領先地位之專家學者與會，進行交流與討論當前遭遇的研究挑戰與相應的解決方案。

地位：與會發表學者必須發表論文，而論文需送審且通過嚴謹 peer-reviewed 論

文審查程序；且所有通過之會議發表論文將可發表於SCI期刊Materials

Research Innovations (ISSN: 1433-075X)，因此此會議雖是舉辦第二屆，但首屆的成功已經在國際建立相當聲譽。因為其審稿週期僅一個月，所以吸引許多新材料研究發現，以此會議作為平台發表，而在材料界已經受到重視。

● 出席發表論文之重要性

本次發表論文為目前材料科學燃氣渦輪發動機高耐熱鎳系超合金材料表面熱障塗層領域、極少數以第一原理分子動力學模擬的理論研究工作，而其中一共同作者Roger C. Reed教授(英國牛津大學教授；原伯明罕大學材料科學與工程學系系主任兼該校模擬研究生產與材料合資公司主任；國際超合金學會主席；英國材料礦物礦業研究所院士)，為當今超合金材料表面塗層國際最重要學者之一，另一合作伙伴Dr. R. Wu為日本國立材料研究所著名的高溫研究中心核心成員之一，聯合發表相關最新的實驗成果。本論文即為會議一篇重要發表論文，因此獲邀榮膺此次大會分會場主席。(見附件五大會開立證明)

● 會議議程與議場主題

11月20日8:00-18:00報到 湖北咸寧凱悅酒店

11月21日9:00-9:30大會開幕儀式 湖北科技大學

11月21日9:30-12:00大會論文壁報發表會 湖北科技大學(見附件六參加活動留影)

11月21日14:30-17:40特邀國際貴賓演講 湖北科技大學

講題與講者：

1. 講題：奈米材料與科技：奈米機械展望的趨勢

講者: **Dr.Elias C. Aifantis**

所屬單位: 美國密西根理工大學榮譽教授與沙烏地阿拉伯**King Abdulaziz**

大學傑出合聘教授 (Emeritus Professor of Michigan Technological University USA and Distinguished Adjunct Professor of King Abdulaziz University of Saudi Arabia)

2. 講題：利用脈衝技術進行離子-電漿氮化物噴塗改良金屬製品強度與抗熱循環剝裂性

講者: **Dr. Alexander O. Khotsianovsky**

所屬單位: 烏克蘭國立科學研究院強度問題**Pisarenko**研究中心

(Pisarenko Institute of Problems of Strength of the National Academy of Sciences of Ukraine, Ukraine)

3. 講題：新近材料科學進展

講者: **Dr. R S Beniwal**

所屬單位: 印度通信與資訊資源 **CSIR-國立科學研究所** (National Institute of Science Communication and Information Resources, INDIA)

11月22日(週五) 8:30-12:30 大會論文口頭發表會 湖北科技大學

11月22日 下午咸寧風景區銀水洞遊覽

11月22日 7:00 惜別晚宴

會議結束後 11 月 25-27 日（週一～週三）經大會安排停留三日。其間與北京清華大學物理所段文輝所長、與中科院物理所劉邦貴教授進行學術交流討論未來合作方案。

（二） 11 月 28-29 日於江蘇常熟理工學院進行學術交流。

● 個人所發表論文標題、作者與摘要

標題：

第一原理分子動力學模擬鉑元素攙雜改良熱障塗層 γ' -Ni₃Al/Al₂O₃

黏性效應 (The effect of Pt on the adherence of γ' -Ni₃Al/Al₂O₃ interface of thermal barrier coatings investigated by first-principle molecular dynamics)

作者： Y. M. Nie^{1*} (聶永懋), R. T. Wu², R. C. Reed³, Y. A. Chen¹
(陳奕安) and K. I. Lee¹ (李官益)

(以本校暨大應光系本人(聶永懋)領導之奈米建構電子學高速運算實驗室師生為主導的跨國合作研究)

作者所屬單位：

1. 國立暨南大學應用材料及光電工程學系，南投，台灣 (Department of Applied Materials and Optoelectronic Engineering, National Chi Nan University, Nantou County 54561, Taiwan)

2. 國立材料研究所，筑波市，茨城縣，日本 (National Institute for Materials Science, 1-2-1 Sengen, Tsukuba City, Ibaraki, Japan)

3. 伯明罕大學冶金與材料學系，伯明罕，英國 (Department of Metallurgy and Materials, University of Birmingham, Edgbaston, Birmingham B15 2TT, UK)

摘要：

雖然攙雜鉑元素在熱障塗層之 γ' -鎳鋁合金與氧化鋁塗層-氧化物介面黏度的效應已經逐漸已被證實，而其確切底下的機制是尚未被完全的了解。本研究探索此介面的化學鍵結機制藉由第一原理分子動力學，模擬室溫介面的微結構在一溫度引起的相變化，並利用形變能來計算塗層-氧化物介面黏度。本研究提供了一個理論的基準值：添加重量百分之十二的鉑元素的塗層-氧化物介面系統其黏度是未添加者的三倍。依據化學鍵的分析，鉑元素引起鋁氧化程度的增強扮演使塗層-氧化物介面黏度提高的重要角色。由此對熱障塗層在熱循環氧化失效問題，本研究提供了一個塗層-氧化物介面系統組成晶元熱相轉移機制的理論詮釋。

涉及材料學門研究領域：

- 航空引擎部件 (Aero-engine component)；
- 熱障塗層 (TBC)；
- 鎳基超合金 (Nickel-based superalloy)；
- 熱生成氧化物 (TGO)；

- 黏度(Adhesion strength);
- 第一原理(First-principles);
- 分子動力學(Molecular dynamics)。

● 學術交流具體收穫

- Prof. Theerachai Bong-Karn (泰國): 請教氧化鈦系陶瓷之鐵電、介電性質於相轉移之變化狀況，而上述性質可藉由燃燒技術來進行改良。(壁報論文分場)
- Prof. Ling-Zhi Zhao: 請教第一原理於二氧化矽摻雜鋁的計算細節。(壁報論文分場)
- Prof. Xiaoyun Liu (劉小勇, 昆明科大): 請教於高分子纖維應用光子進行固化的機制，及其應用於 3D-列印加工的潛力。(壁報論文分場)
- Prof. Baek Eung-Ryul (韓國): 請教 F-15 戰鬥機大推力發動機葉片高壓下金屬疲勞經熱處理防治方法。(口頭報告分場)
- Prof. Seuol Kaya (土耳其): 請教高介電材料 BiFeO₃ 於 MOS 電容器的電子特性。(口頭報告分場)
- 段文暉教授 (北京清華):
 - 學習到使用第一原理計算 Berry phase 方法於鐵磁鐵電的多鐵陶瓷材料可得到與實驗相近結果，但無法計算鐵磁-鐵電耦合係數。
 - 學習到使用第一原理計算電子躍遷發光機制必須使用 GW 近似方法進行修正，

經此修正應用於有機光學晶體可以獲得與實驗相近的結果。

- 建議筆者（聶永懋）使用西班牙 Rubio 教授開發的光學模擬程式。
- 申請經費邀請筆者（聶永懋）明年暑期訪問北京清華與他交流研究三個月。
- **劉邦貴教授（北京中科院物理所）：**
- 討論內自旋波理論，結論是此方法熱力學統計計算納入非物理態，以致只能適合模擬低溫情況。
- 現今大型層狀磁結構相轉移題目為最近磁物理研究的熱門課題，可透過他開發的簡單蒙地卡羅計算可解決此類熱力學統計問題。
- **江學範教授（江蘇常熟理工學院）：**
- 討論半金屬材料 Co_2MnSi -Heusler 合金與非磁性鋁所製的巨磁阻穿隧結的磁性質與運動性質的實驗結果與其參與的校內團隊所發表近期 Applied Physics Letter 論文的第一原理模擬成果。分析 Co_2MnSi -Heusler 合金半金屬性在組成 $\text{Co}_2\text{MnSi}/\text{Al}/\text{Co}_2\text{MnSi}$ 介面結構時遭破壞、以解釋實驗上該介面巨磁阻失效因素。
- 本人將主導與該校團隊合作進行上述巨磁阻穿隧結的研究，計畫由格林函數方法模擬電子穿隧，結合第一原理計算能譜計算電子速度，以期望與得出可直接與實驗相比較的穿隧電流譜的結果。
- 本人將參與與該校團隊合作進行近年來半導體界熱門的：低維系統石墨片鍍金屬膜電極的研究。

心得及建議

本會議為本人首次參加中國大陸舉辦且以中國科技大學學者為主體的百人以上的大型國際會議，心得總結為以下幾點：

- 大陸學者雖然研究視野國際化能見度程度，因為網路受國家管制以及國際封鎖而遠較台灣困難許多。況且中國科技大學研究設備軟硬體及投入研究學生基礎能力都較我暨大差了許多，但是許多年輕老師勇於挑戰難題，例如蘭州科大碩班學生使用 LAMMPS 套裝軟體進行數十萬顆原子量級的分子動力學研究模擬金屬疲勞的裂紋分析；而筆者使用 VASP 進行單位元胞三百個原子的第一原理分子動力學研究已經可說是國內之最大此類模擬系統了，國內放諸台清交成等校尚還沒有任何研究小組進行上述數十萬顆原子大量級系統分子動力學研究模擬於材料科學研究。主要原因是國內學者以為 LAMMPS 套裝軟體計算結果無法如第一原理般精確，投稿期刊難受青睞；故少有人想嘗試。反觀大陸部份研究是出於國家領導單位指示配合政策，儘管各項條件一時難俱備仍然奮力一試，雖然初期階段看上去尚屬摸索層次，但是就人才的培育觀點，未來不可限量。
- 而本系研究所已成立三年，招入碩班學生一半是國內科大畢業生。過去筆者與這類學生一直有個共同迷思：認定科大生理論基礎薄弱難做理論研究；然而此行看見海峽對岸許多科大生理論基礎薄弱但是肯做，加上老師研究方向

指引正確，照樣能出好的研究成果。

- 再就是在國內研討會看到的成果大致與美國熱門研究題目雷同，少有與業界產學合作獨到的作品，因為此類研究在國內一般被認為較不具學術性；而本次在會中卻看到例如武漢科技大學與中鋼產學合作協助於冶煉過程除去有害雜質，雖然與日韓學者報告的飛機發動機超合金改良方案相比較不具學術深度，但是前者有原創性而且實用性大得多。諸如此類的案例極多，若積許多此類有意義的工藝改進研究，是可以構築國家雄厚的工業底子。反觀國內這種學界扶助產業的例子是罕見的，筆者因此想嘗試在台灣中部以光電機械工程為主體工業界尋找產業合作伙伴。

建議有以下一點：

- 校內既然獎勵老師出席參加國際研討會發表研究論文，可是具體措施只有補貼機票，其他如報名費、論文發表費等竟無編列會計課目，無法讓與會老師得使用分配所得的經常門費用額度進行部分核銷補貼。建議這種單方面要老師替學校爭取榮譽卻獎補助不夠到位的目前暨大措施是需要改進的，上述國際研討會報名費、論文發表費學效應當分擔部分沒道理要求老師全額吸收或自己找經費。

附件一 CMSE2013 會議論文與 MRI 期刊論文接受函

The 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering CMSE 2013

ACCEPTANCE NOTIFICATION

November 7th, 2013

Congratulations! We are extremely glad to inform you that your paper:

Paper Number: *MSE1967*

Paper Title: *The effect of Pt on the adherence of γ -Ni3Al/Al2O3 interface of thermal barrier coatings investigated by first-principle molecular dynamics*

Complete List of Authors: *Y. M. Nie^{1*}, R. T. Wu², R. C. Reed³, Y. A. Chen¹ and K. I. Lee¹*

Author's Affiliations: *Department of Applied Materials and Optoelectronic Engineering, National Chi Nan University, Nantou County 54561, Taiwan*

has been accepted by the 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering (CMSE 2013) and will be published on *Materials Research Innovations (MRI)*.

Please complete the registration procedures before November 12th, 2013 by the registration information attached.

If you have any question, please feel free to contact us.

Best regards,



CMSE2013 Organizing Committee

www.cmseconf.org November 20-22, 2013 Xianning, China
Materials Research Innovations Online ISSN: 1433-075X

附件二 CMSE2013 會議邀請函

The 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering
(CMSE2013)

INVITATION

November 8th, 2013

Dear Yung-mau Nie,

The 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering (CMSE 2013) will be held in Xianning, China. Prior to this conference, we already have had one successful conference named CMSE2012.

The main objective of CMSE2013 is to provide a comprehensive global forum for experts and participants from academia to exchange ideas and present results on all aspects of Materials Science and Engineering.

The conference program consists of keynote speeches, special sessions, oral and poster presentations. About 200 experts all around the world will participate in the meeting.

Due to your outstanding academic achievement, we cordially invite you to participate in the conference and visiting Hubei University of Science and Technology during Nov.20th to Nov.27th for research discussions and communication. And we have every reason to believe that you would make the conference more successful.

We are looking forward to meeting you in Xianning, China.

For more information, please visit our website: www.cmseconf.org

Best regards!



www.cmseconf.org Nov. 20-22, 2013 Xianning, China

附件三 2010 年國科會補助赴英 R. C. Reed 教授邀請函



UNIVERSITY OF
BIRMINGHAM

College of Engineering and
Physical Sciences

School of Metallurgy and Materials

Professor Roger C Reed
Professor of Materials Science &
Engineering

8th September 2010

Dr. Yang-Mao Nie
Department of Applied Materials and Optoelectronic
National ChiNan University
Taiwan

Dear Dr Nie

Invitation

I would like to invite you to come and join a Discussion Workshop on First Principle Molecular Dynamics Simulation in Stratford-Upon-Avon and Cambridge on 25th and 26th September 2010. We should discuss a future research collaboration aimed at better understanding the doping effects of platinum group metals (PGMs) on the adhesion of the oxide metal interface.

We should also work together on the preparation of a manuscript during this meeting.

I look forward to seeing you.

Yours faithfully,

Roger C Reed

University of Birmingham Edgbaston Birmingham B15 2TT United Kingdom

附件四：江蘇常熟理工學院江學範教授邀請函



常熟理工学院

CHANGSHU INSTITUTE OF TECHNOLOGY

College of Physics and Electronic Engineering
Changshu Institute of Technology,
Jiangsu, China
Professor Xuefan Jiang

10th September 2013

Dr. Yung-Mau Nie
Department of Applied Materials and Optoelectronic
National ChiNan University, Taiwan

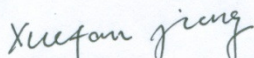
Dear Dr Nie

Invitation

I would like to invite you to visit our College of Physics and Electronic Engineering, Changshu Institute of Technology, China, to reinforce collaboration from 27 to 30 of November 2013. We should discuss a future research collaboration aimed at better understanding the electronic structure of stable ferroelectricity in tunneling conductance.

I look forward to seeing you.

Yours faithfully,


Xuefan Jiang

地址：中国江苏省常熟市南三环路 99 号 邮编：215500
Address: No.99, Third Ring Road (South), Changshu, Jiangsu, China Zip Code:215500 <http://www.cslg.edu.cn>

附件五：獲邀榮膺此次大會口頭報告分會場主席大會證明

The 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering CMSE 2013

Session Chair Certification

November 22, 2013

Dear Yung-mau Nie,

This is to certify that you have participated in the 2nd Global Conference on Materials Science and Engineering (CMSE 2013) and to be the Session Chair of the Oral Presentation.

We are extremely grateful for your contribution to the conference. And we also hope that you will contribute your excellent work to future CMSE!

CMSE 2013 Organizing Committee



www.cmseconf.org November 20-22, 2013 Xianning, China
Materials Research Innovations Online ISSN: 1433-075X

附件六：11月21日壁報論文分場：與作者請教討論研究細節留影。

