

國立交通大學

National Chiao Tung University

出國報告（出國類別： A類、學研訪問  
 B類、出國短期研究  
 C類、國際會議）

## 澳大利亞西澳大學短期研究

服務機關：交通大學應用化學系

姓名職稱：魏恆理 教授

派赴國家：澳大利亞 伯斯 西澳大學

出國期間：2016/07/01~07/15

報告日期：2016/08/31

## 摘要

任職於澳大利亞伯斯西澳大學物理系的 Paul Abbott 教授為世界知名的電腦代數系統及數學物理專家，此次至其團隊長達兩周的研究參訪，乃致力於開發利用建基於雙方團隊合作發展之精確波函數方法的超高精確量子化學計算技術，並整合雙方團隊去年以來的研究，尤其，我們共同研究了數個與計算多體格林函數相關的困難問題，而這些多體格林函數為闡述明確關聯波函數之數學細節過程中所需的反運算拉普拉斯算符所必需的。此次參訪相當地成功，讓我們對於原子及分子超高精確量子化學計算、並完全移除計算過程中所產生的誤差以及不精密度之研究上，達成相當大的進展。

# 目次

一、目的.....	1
二、過程.....	1
三、心得及建議.....	3
四、附錄.....	3

# 本文

## 一、目的

此行赴西澳大學至 Paul Abbott 教授團隊研究參訪的主要目的為合作開發將用於原子及分子超高精確量子化學計算的精確波函數方法，對於這些函數之數學形式的開發，是當今量子力學及量子化學領域相當密集的研究主題，且雙方團隊均為此開發過程中的活躍成員，此行並整合了雙方團隊於去年的研究成果，尤其，我們專注於研究數個與計算多體格林函數相關的困難問題，而這些多體格林函數為闡述明確關聯波函數之數學細節過程中所需的反運算拉普拉斯算符所必需的。我們合作的最終成果一精確波函數方法，將帶給化學一個革命性的、超高精確的方法以執行原子及分子的量子化學計算。

## 二、過程

Paul Abbott 教授是一位在開發精確波函數方法主題上世界知名的專家，在此方法中，多電子原子及分子的波函數被表示為明確關聯的形式並且其中包含了電子之間的交互作用。他對於此領域的興趣可追溯至 1980 年代中期，在有名的澳洲結晶學家 Edward (Ted) Maslen 的指導下，其博士論文(與另一篇由他的同儕 John Gottschalk 撰寫的博士論文)對量子力學產生了小的革命性變化，其中提供了科學世界氦原子波函數精確數學結構的細節以及原子分子的多電子波函數之精確結構，對於這些函數之數學形式的開發是當今量子力學及量子化學領域相當密集的研究主題，並且我們雙方團隊均為此開發過程中的活躍成員。此次至西澳大學的合作參訪旨在整合雙方團隊於去年的研究成果，尤其，我們專注於研究數個與計算多體格林函數相關的困難問題，而這些多體格林函數為闡述明確關聯波函數之數學細節過程中所需的反運算拉普拉斯算符所必需的。我們的努力被賦予相當大的成功；在基態氦原子的精確波函數中，齊次展開中的三次項裡最麻煩的其中一項  $\frac{r_1 r_2}{r_{12}}$ ，我們能夠做反運算，此項研究我們先前已研究過數年卻

無成果。此反運算  $L^{-1}\left(\frac{r_1 r_2}{r_{12}}\right)$  在  $r_1 \geq r_2$  的區域內可表示為

$$\frac{1}{6} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_2^{l+3}}{(l+2) r_2^l} {}_3F_2\left(\begin{matrix} -\frac{1}{2}, 1, l \\ 5, l+3 \end{matrix}; -\frac{r_2^2}{r_1^2}\right) P_l\left(\frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2}\right)$$

其中  ${}_3F_2$  為廣義超幾何函數，而  $P_l$  為勒讓德多項式。將此結果拓展至雙電子的整個組態空間則必須要求其一階導函數在組態空間中  $r_1 = r_2$  的線上皆為零，也就是說，一個在整個組態空間都有效的解答是於上述的表示

再加上下列的項

$$\begin{aligned}
 & -\frac{1}{6} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+3)(2l+5)r_1^3 + 2(2l-3)(2l+5)r_1 r_2^2 + (2l-3)(2l-1)\frac{r_2^4}{r_1}}{(l+2)(2l-3)(2l+1)(2l+5)} \\
 & \cdot \left( \frac{2l+3}{4} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} -\frac{1}{2}, 1, l \\ 5, l+3 \end{matrix}; -1 \right) + \frac{l}{5} {}_3F_2 \left( \begin{matrix} \frac{1}{2}, 2, l+1 \\ 7, l+4 \end{matrix}; -1 \right) \right) \\
 & \cdot \left( \frac{r_2}{r_1} \right)^l P_l \left( \frac{r_1^2 + r_2^2 - r_{12}^2}{2r_1 r_2} \right)
 \end{aligned}$$

此項是在  $r_1 \geq r_2$  半平面上拉普拉斯算符的和諧函數，而將此表示再重新求其和則還沒有完成，在兩個式子中的超幾何函數皆可被表示成基本函數 (包含 Lerch  $\Phi$  函數)，不過此表示式並未被提及於此報告中。

開發精確波函數的形式需要具深度及廣度的數學運算，其中包含以解析的方式解微分方程及計算多重無窮級數與積分，而那些工作在沒有如 MAPLE 或 Mathematica 這類電腦代數系統的幫助下則無法完成。電腦代數系統不只能加快工作速度，還能移除徒手計算時所可能產生的錯誤計算。過去的幾年我在工作上都使用 MAPLE 這套電腦代數系統，而待在伯斯的期間，我有機會參與 Mathematica 這套電腦代數系統的密集式訓練，再配合 MAPLE 則能夠拓展我在開發精確波函數方法的過程中所可能使用的數學運算。這項 Mathematica 的訓練是由 Yves Papegay 博士所帶領的 (<http://www.wolfram.com/training/instructors/papegay.html>)。這個訓練主要致力於使用所謂的 Wolfram 語言將計算過程自動化，此語言為 Mathematica 封包中的內部語言。我從這個訓練中所學到的這項新技能將對於我的專業工作有很大的幫助，並且也能加速精確波函數方法的開發。

此行的最後兩天，我們討論並計畫從我們的合作研究中發表成果，尤其，我們計畫發表一份新的出版物，致力於對原子及分子新的量子化學計算方法，而在此其中並不利用 Born-Oppenheimer 近似法，此近似法中，整個分子的總角動量能夠被完全的分離開來，進而提供了工具將轉動自由度及內部電子和震動座標完全分離，我們認為這個新的研究方向很重要並且有機會對當今量子化學領域帶來巨大的變革。

總結上述，停留於伯斯是富有成效的，也讓我的研究取得實質的進展。身為招待我的東道主，Paul Abbot 的學術態度是對計畫提供深入與密集的討論，與他協同合作讓我們能解決佔據我腦內已久的問題。我們對精確波函數方法的研究成果將會應用於開發一個導向能完全移除計算過程中所產生之誤差以及不精密度的超精準量子化學計算程式集。希望所開發的演算法與技術將為現代量子化學帶來革命性的改變。

### 三、心得及建議

#### (一) 心得

這次參訪 Paul Abbott 教授的團隊讓我在開發精確波函數方法的研究上能有大量的進展，此項研究是針對原子及分子的超高精確量子化學計算，身為招待我的東道主，Paul Abbot 的學術態度是對計畫提供深入與密集的討論，與他協同合作讓我們能解決佔據我腦內已久的問題，他長久以來對 Mathematica 電腦代數系統的專業知識以及 Yves Papegay 博士 (被認證的 Mathematica 講師) 的解說，讓我對應用電腦代數系統 (MAPLE 和 Mathematica) 於我發展精確波函數方法的專業工作上時的能力與技巧有所精進。

#### (二) 建議

1. 交通大學擁有 MAPLE 電腦代數系統全校性的使用許可，這是個很好的軟體並且能在相當多的研究上給予幫助，然而留在伯斯的期間，我意識到再取得 Mathematica 的使用許可將對交大有益，因為這兩套電腦代數系統提供了彼此互補的不同功能給使用者。
2. 西澳大學物理系教師與研究生一周有兩次聚會，第一次聚會 (週二午餐時段，提供咖啡與點心) 於會議室中舉行並較為正式，第二次則是在周五傍晚，舉行於物理系的天臺上 (備有酒及點心)，我察覺這類非正式聚會有助於拉近師生間在學術與社交層面上的聯繫，我深信這類非正式聚會有益於完整系所上的社交狀態。
3. 澳洲的同事在教學上有較少的負荷，而實際負荷量則取決於其各自的研究活躍度，我相信在我們這邊也加入此政策會是有益的。

### 四、附錄





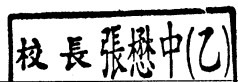
建議事項參採情形 (請條列上述「建議」相關事項於下)	出國人建議		單位主管覆核			
	建議採行	建議研議	同意立即採行	納入研議	不採行	不採行原因
1. 採購全校性的 Mathematica 電腦代數系統使用許可		√		✓		
2. 對於活躍於研究上的教師，降低其在教學上的負荷。		√		✓		

連絡人：魏恆理  
分機：56583

單位主管 (初閱) 簽章：



## 出國報告審核表

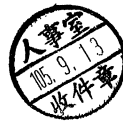
出國報告名稱：澳大利亞西澳大學短期研究				
出國人姓名 (2人以上，以1人為代表)		職稱	服務單位	
魏恆理		教授	應用化學系	
出國類別	<input type="checkbox"/> 考察 (返國後需辦理出國報告座談或說明會等) <input type="checkbox"/> 進修 <input checked="" type="checkbox"/> 研究 <input type="checkbox"/> 實習 <input type="checkbox"/> 其他 (例如國際會議、學研訪問、國際比賽、業務接洽等)			
出國期間：2016年7月1日至2016年7月15日			報告繳交日期：2016年8月31日	
出國人員 自我檢核	計畫主辦 機關審核	審 核 項 目		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	1. 依限繳交出國報告		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	2. 格式完整 (本文必須具備「目的」、「過程」、「心得及建議事項」)		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	3. 無抄襲相關資料		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	4. 內容充實完備		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	5. 建議具參考價值		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	6. 送本機關參考或研辦		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	7. 送上級機關參考		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	8. 本報告除上傳至出國報告資訊網外，將採行之公開發表：		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(1) 辦理本機關出國報告座談會 (說明會)，與同仁進行知識分享。		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(2) 於本機關業務會報提出報告		
<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	(3) 其他：無		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	9. 退回補正，原因：		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(1) 不符原核定出國計畫		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(2) 以外文撰寫或僅以所蒐集外文資料為內容		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(3) 內容空洞簡略或未涵蓋規定要項		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(4) 抄襲相關資料之全部或部分內容		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(5) 引用相關資料未註明資料來源		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	(6) 其他：		
<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	10. 其他處理意見及方式：		
出國人簽章 (2人以上，得以1人為代表)		計畫主辦機關 審核人	初閱	複閱
				
				

說明：

「邁向頂尖大學計畫」出國報告書審核程序如下：

1. 初閱：各學院教師 A、B、C 類及其他行政單位 A 類由單位主管，研究生由指導教授；中心計畫及學群 A、B、C 類由各中心計畫主持人。
2. 複閱：經費所屬之一級單位；中心計畫及學群 A、B、C 類由頂尖計畫執行長。

# 國立交通大學 國外出差旅費報告表



憑證編號：		前瞻跨領域基礎科學中心				購案編號		G105MSR0012			
金額		計畫代號 105W961				編號		105W961Fc400			
\$ 100,000	232 國外旅費		<input type="checkbox"/> 國際會議； <input checked="" type="checkbox"/> 考察訪問； <input type="checkbox"/> 受訓進修實習； <input type="checkbox"/> 教學研究								
	233 大陸旅費		<input type="checkbox"/> 國際會議； <input type="checkbox"/> 考察訪問； <input type="checkbox"/> 受訓進修實習； <input type="checkbox"/> 教學研究								
		新台幣(大寫)		壹拾萬零仟零零拾零元整							
姓名		魏恆理		職稱		教授		單位 應用化學系			
員工代號		T9421		職等		簡任12職等以上領有各該職等全額主管加給					
匯款帳戶資訊 (請擇一填寫)		郵局帳號：		0061251 0122717							
		玉山銀行帳號：		查具備相當簡任十二職等以上資格							
出差事由		受邀至澳大利亞西澳大學短期研究。									
出國日期		中華民國 105 年 7 月 1 日起至 105 年 7 月 15 日止計 15 日，單據 10 張									
起迄地點		月	7	7	7				總 計		
		日	1-2	3-13	14-15						
工作記要		台灣		澳洲伯斯		澳洲伯斯					
		至	至	至	至	至	至	至			
交通費		飛機、船舶		9,434		8,679		18,113			
		長途大眾運輸工具		155		155		310			
		生活費		7,208		79,293		2,163			
								88,664			
辦公費		手續費						-			
		保險費						-			
		行政費	報名註冊費						-		
			郵電費						-		
			翻譯運費等						-		
禮品交際及雜費								實際請款金額為100,000元			
總 計		16,797		79,293		10,997		-			
出差人		單位主管 計畫主持人		院處室主管 中心主管		主辦人事人員		主辦主計人員		校長或 授權代簽人	



## 11 出差單

國立交通大學 因公出國申請單													
單位	應用化學系	職稱	教授										
申請人	魏恆理(T9421)	常用信箱	hwitek@mail.nctu.edu.tw										
聯絡人	于秀琴 (助理或處理假單的人)	聯絡人電話	56568										
赴大陸地區	否												
出國期間	開始時間2016-07-01 11:45 結束時間2016-07-15 11:50 共計14日 0時												
出國起訖時間	<table border="1"> <thead> <tr> <th>起迄時間</th> <th>假別</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>開始時間2016-07-01 11:45</td> <td rowspan="3">出差</td> </tr> <tr> <td>結束時間2016-07-15 11:50</td> </tr> <tr> <td>共計14日 0.0時</td> </tr> <tr> <td>共計 14日 0.0時</td> <td></td> </tr> <tr> <td>假日時數 4日 0時</td> <td></td> </tr> </tbody> </table>			起迄時間	假別	開始時間2016-07-01 11:45	出差	結束時間2016-07-15 11:50	共計14日 0.0時	共計 14日 0.0時		假日時數 4日 0時	
起迄時間	假別												
開始時間2016-07-01 11:45	出差												
結束時間2016-07-15 11:50													
共計14日 0.0時													
共計 14日 0.0時													
假日時數 4日 0時													
出國類別	研究訪問												
連續歷史差假													
選取前往國家	Australia 澳大利亞												
預定前往地區/城市	Perth 珀斯	事由(必填)	研究訪問 visiting Professor Paul Abbott at the Faculty of Physics, University of Western Australia, Perth										
備註		上傳檔案	visit at University of Western Australia.pdf invitation Perth 2016.pdf										
職務移轉	請假人單位	職務	職務代理人										
	應用化學系	教授(職稱)	未兼行政職務教師毋需職務代理人										
調補課狀況													
調補課狀況	無課												
填表人：魏恆理(T9421) 填表時間：2016-06-21 15:21													

## 簽核流程

簽核關卡	簽核者	簽核職務	類型	簽核意見	簽核時間	簽核狀態
填表人	魏恆理(T9421)	教授	一般		2016-06-21 15:34	同意
人事審查	廖勇智(F0406)	行政專員	一般	回國3個月內請至差勤系統(差勤系統/出國/出國報告上傳)上傳出國報告(含建議事項)及填寫建議項數。	2016-06-21 15:44	同意
人事組長	姜慶芸(S0404)	組長	一般		2016-06-21 16:25	同意
直屬主管	李積琛(T9137)	主任	一般		2016-06-22 11:14	決行
單位主管	李耀坤(T8202)	院長	一般		2016-06-22 16:27	同意
課務承辦	課務人員(CS01)	組員	一般		2016-06-22 16:42	同意
課務組長	李錦芳(S7802)	組長	一般		2016-06-22 16:54	同意
教務長	黃育倫(T9305)	主任	代理		2016-06-23 13:46	同意
主任秘書	翁麗羨(S9003)	秘書	代理		2016-06-23 16:01	同意

檔 號	0105/1514/ / /
保存年限	10年

## 簽 於分子科學研究中心

密等及解密條件或保密期限：普通

主旨：擬請同意由前瞻跨領域基礎科學中心計畫出國差旅費(105W961)支付魏恆理教授受邀至澳洲伯斯進行移地研究所需費用，簽請核示。

說明：

- 一、魏恆理教授受邀於105年7月2-14日間赴澳大利亞西澳大學(University of Western Australia)與Paul Abbott教授團隊進行合作研究，以發展有關基於精確波函數方法的超精確量子化學計算技術、撰寫合作論文並發表學術演講，上述移地研究內容為魏教授於前瞻跨領域基礎科學中心之主要研究項目，對於計畫推動及國際交流合作發展將有極大助益。
- 二、預估出國所需相關費用共約139,931元(生活費=USD\$223\*33\*12.9天、機票費約45,000元)，擬請同意由前瞻跨領域基礎科學中心計畫出國差旅費(105W961)補助10萬元整；經費不足部份，將由本人自行負擔。
- 三、檢附魏恆理教授簡歷、訪問行程表及計畫、邀請函如附檔所示。

承辦

分子科學研究中心 計畫助理	于秀琴
1050617 1154	

審核

分子科學研究中心 主任	林明璋
1050617 1158	

會辦

應用化學系 約聘研究員	林聖賢
1050617 1224	

承辦 分子科學研究中心  
計畫助理 于秀琴  
1050620 1007

會辦 前瞻跨領域基礎科學中心(二)  
計畫助理 王姿云  
1050620 1021

會辦 前瞻跨領域基礎科學中心(二)  
計畫主持人 李遠鵬  
1050620 1144

會辦 頂尖大學計畫辦公室  
行政專員 黃欣怡  
1050620 1233

會辦 頂尖大學計畫辦公室  
執行長 陳信宏  
1050620 1419

會辦 主計室第二組  
助理管理師 黃琇珠  
1050620 1531

會辦 主計室第二組  
組長 楊明幸  
1050620 1657

會辦 主計室  
主任 楊淑蘭  
1050620 1715

會辦 人事室第二組  
行政專員 廖勇智  
1050621 0852

會辦 人事室第二組  
組長 姜慶芸  
1050621 1007

會辦 人事室  
主任 蘇義泰  
1050621 1126

前瞻跨領域基礎科學中心(105W961)補助約10萬元。

- 1、擬請依邁向頂尖大學計畫書執行。
- 2、本案如奉核可，請依「國外出差旅費報支要點」規定辦理。

- 1.請於出國前至差勤系統完成出國申請程序。
- 2.差旅費報支核銷時請併至本校差勤系統-出國-出國報告上傳頁面，上傳出國報告。

10510065360

審核 

秘書室 主任秘書	翁麗羨
-------------	-----

  
1050621 1136

代行 

秘書室 主任秘書	裘性天
-------------	-----

  
1050621 1507

決行 

校長室 校長	張懋中(丁)
-----------	--------

  
1050621 1507

同意