



蔡政達

國立臺灣大學物理學系副教授

得獎著作：

- ✿ Jeng-Da Chai*, Po-Ta Chen, 2013, “Restoration of the Derivative Discontinuity in Kohn-Sham Density Functional Theory: An Efficient Scheme for Energy Gap Correction”, *Physical Review Letters*, 110, 033002.
- ✿ Jeng-Da Chai*, 2012, “Density Functional Theory with Fractional Orbital Occupations”, *Journal of Chemical Physics*, 136, 154104.
- ✿ Chun-Shian Wu, Jeng-Da Chai*, 2015, “Electronic Properties of Zigzag Graphene Nanoribbons Studied by TAO-DFT”, *Journal of Chemical Theory and Computation*, 11, 2003-2011.

得獎簡評：

「密度泛函理論」是目前用來計算先進材料之物理與化學特性的主要理論工具，但是它對材料中電子組態間的複雜耦合效應，還缺乏一套有效的處理方法，因此無法精確地計算具有「強相關電子系統」的新穎材料之特性。得獎人是國內 50 多位「密度泛函理論」專家中，唯一能針對它的基礎理論與內涵提出具體改進方法的學者。他在三篇具有原創性的代表作之中，發展出新的「密度泛函理論」，

推導出「用分數之分子軌域佔據數的電子基態密度」自洽方程式，並且提出以無交互作用之電子系統之熱效應，模擬真實的「強相關電子系統」之複雜耦合效應，確實處理了「密度泛函理論」中部分重要的課題。可預期的，這一系列的作品將對先進材料之特性的了解與預測產生長遠的影響。

得獎人簡歷：

蔡政達副教授出生於臺灣花蓮，1997 年畢業於國立臺灣大學物理學系，完成兩年兵役後，隨赴美國繼續深造。2002 年取得俄亥俄州立大學物理碩士學位，2005 年獲得馬里蘭大學化學物理博士學位，其後在加州大學柏克萊分校從事博士後研究。在 2009 年 8 月返國進入臺灣大學物理學系擔任助理教授，並於 2013 年 8 月升等為副教授。

蔡副教授致力於發展適用奈米系統之新量子理論，並將其理論應用在開發新能源材料上，主要研究係在發展更精確的密度泛函與高效率之計算方法，以期準確地預測奈米系統之電子結構與光學性質。蔡副教授亦為國際知名量子化學計算軟體 Q-Chem 之共同發展者，並擔任多本國際期刊之編輯委員，且經常受邀為國際期刊之文章評審委員。除了教學研究之外，蔡副教授多次應邀參與國際重要學術研討會，發表最新研究成果，拓展臺灣在國際上之能見度。歷年來的努力成果受到國內外重要學術機構之青睞與肯定，如榮獲 2011 年國際理論化學物理協會「EPSON 年輕學者獎」、2012 年國家理論科學研究中心「年輕理論學者獎」、

2013 年世界科學院「TWAS 青年學者」和臺灣大學「學術研究生涯發展計畫」、
2015 年救國團博學類「青年獎章」和科技部「優秀年輕學者研究計畫」，以及 2016
年中華民國物理學會「傑出年輕物理學者獎」等殊榮。

得獎著作簡介：

新密度泛函理論之發展研究，在原子、分子與固態物理、量子化學以及材料科學等各領域中極具重要性，且亞洲國家鮮少學者從事這項高挑戰性之研究工作。由於蔡副教授在發展適用奈米系統之新密度泛函理論上具有新穎且獨特之見解，並針對強相關電子系統之電子結構理論、密度泛函理論中著名之「能隙問題」和「漸近問題」等棘手難題，作出突破性之研究成果。迄今，已發表 37 篇國際期刊論文，被引用次數高達 4,800 多次，其中，單篇最高被引用次數超過 2,700 次。第一篇得獎著作之研究貢獻即提出解決密度泛函理論「能隙問題」之方法，採無限階微擾理論求得正解基本能隙，並進一步提出高效率能隙之計算方法。第二篇得獎著作之研究貢獻：提出新密度泛函理論，以計算奈米尺度強相關電子系統之特性；文中指出電子基態密度表示法與強相關系統之間的關聯性，並提出以無交互作用之電子系統之熱效應，模擬真實強相關電子系統之複雜耦合效應，強調熵在模擬強相關效應中之重要性，並以數值結果予以佐證。第三篇得獎著作之研究貢獻係利用所發展之新密度泛函理論來預測奈米尺度強相關電子系統（如：鋸齒形石墨烯奈米帶）之特性等棘手難題。

得獎感言：

非常感謝中央研究院授予「年輕學者研究著作獎」，本人感到榮幸之至。感謝科技部在研究經費上的大力支持，這些研究工作才得以順利完成。感謝國立臺灣大學提供優越之研究環境以及在研究經費上的支持。感謝物理系同仁對於本人研究的支持與鼓勵。感謝與本人共同努力打拼的學生們。最後，感謝摯愛的家人無條件的支持與陪伴，讓本人可以全心投入研究工作。

