

得獎人著作簡評

郭哲來 副研究員 (中央研究院原子與分子科學研究所)

代表作名稱：

1. D. Bing, T. Hamashima, Q. C. Nguyen, A. Fujii*, and J.-L. Kuo*, 2010, “Comprehensive analysis on the structure and proton switch in $H^+(CH_3OH)_m(H_2O)_n$ ($m + n = 5$ and 6)”, *Journal of Physical Chemistry A* 114, 3096-3102.
2. K. Mizuse, J.-L. Kuo, and A. Fujii*, 2011, “Structural trends of ionized water networks: Infrared spectroscopy of water cluster radical cations $(H_2O)_n^+$ ($n = 3-11$)”, *Chemical Science* 2, 868-876.
3. Q. C. Nguyen, Y.-S. Ong, and J.-L. Kuo*, 2009, “A hierarchical approach to study the thermal behavior of protonated water clusters $H^+(H_2O)_n$ ”, *Journal of Chemical Theory and Computation* 5, 2629-2639.

得獎簡評：

郭哲來副研究員是在第一原理為基礎的跨尺度/模型的理論計算方法領域之傑出年輕學者，尤其他在發展此法來模擬水及氫鍵系統的研究上，已在學術界受到肯定。長期以來，模擬氫鍵系統的主要困難，在於無法有效的利用高精確度的第一原理，來直接研究探討水及氫鍵的複雜結構。他所發展的方法，有效的結合快速的經驗模型及精確但昂貴的第一原理計算，與東北大學藤井教授實驗團隊的合作成功地解開水團簇結構的祕密。此一理論與計算，創新的不僅僅是計算效率的提高，他們巧妙的結合統計力學及人工智慧的想法，建構出跨尺度/模型及跨領域的計算模式。這一套理論計算方式，也能推廣至奈米尺度新穎材料模擬。