

計算化學實驗室

功能：

當個人電腦的處理能力日漸增加(包括中央處理器的速度變快、記憶體空間變大和硬碟空間的增加)，利用個人電腦叢集(PC cluster)來模擬以往超級電腦才可以計算的化學反應系統已經是件可行的事。本實驗室成立的目的是在利用個人電腦叢集系統模擬應用化學中所面臨到的化學反應。我們的研究領域包括：(1)利用計算化學程式及化學動力學方法討論基礎化學反應機制與計算其反應速率、(2)開發新的水溶液反應速率的理論模型及演算法和(3)建構新一代全時平行運算的個人電腦叢集系統。

主要儀器設備：

(1) 桌上型電腦和周邊設備

- Acer 7500 (P4 1.8GHz with 768MB RAM, 80 GB HD)
- D-link Fast Ethernet Switching Hubs
- Backup (CD burner)

(2) 程式開發用叢集系統

- ASUS P4P800 (P4(HT) 2.4GHz with 1GB RAM, 40 GB HD)

(3) 模擬計算用叢集系統

- 8 x Acer 7600 (P4(HT) 2.8GHz with 1GB RAM, 80 GB HD)
- D-Link Gigabit Ethernet Switching Hub

實驗室負責人：應用化學系 莊曜遠老師

連絡電話：07-5919460