



陳馨怡副教授

國立清華大學工程與系統科學系 副教授

學歷：

2012 英國倫敦大學學院 化學系 博士

2008 國立台灣大學 材料科學與工程學系 碩士

2006 國立成功大學 資源工程學系 榮譽學士

經歷：

2022 國立清華大學半導體研究學院合聘副教授

2022 國立清華大學材料科學與工程學系合聘副教授

2021 國立清華大學工程與系統科學系專任副教授

2016 國立清華大學工程與系統科學系專任助理教授

推薦人：

許昭萍 特聘研究員

蔡明剛 教授

以多尺度模擬解析催化反應機制

陳馨怡副教授長期致力於能源催化與材料模擬研究，領導跨領域研究團隊，利用計算材料工具進行機制探討、材料設計以及效能優化，主要以密度泛函理論為基礎，結合第一原理動力學、分子動力學、蒙地卡羅和機器學習等多種方法，建構一多尺度模擬架構，研究從原子級單原子、單團簇至奈米級催化劑，以其結構、形貌、電子結構、熱力學、動力學的角度深度剖析，不僅能夠揭示新的催化機制，定位新的活性位點和反應路徑，更進一步提供實驗團隊優化設計策略及高解析度覆蓋率資料庫。

重要科學突破

建立跨越原子至奈米尺度之多尺度催化模擬理論框架，整合密度泛函理論、分子動力學與機器學習方法，系統性發展單原子、團簇至奈米顆粒之催化機制描述，並據此提出一系列關鍵催化理論，包括：單原子催化中之異相裂氫與氫溢流機制 (*JACS.*, 2021)、選擇性軌域耦合之吸附機制 (*JACS.*, 2024)、奈米催化劑形貌演化與穩定結構之多尺度建模理論 (*Nano Lett.*, 2024)、以及結合第一原理相圖與深度勢能分子動力學之氫覆蓋率預測理論 (*Adv. Mater.*, 2025)。

上述理論不僅突破傳統單尺度模型無法有效描述尺寸與構型效應之限制，更能全面解析從電子結構、形貌演化至熱力學與動力學之跨尺度催化表現，進一步揭示催化活性位點與反應機制之本質來源，並建立結構與反應資料庫，為催化劑設計提供具預測能力之理論基礎，在能源催化與材料模擬領域帶來重要進展，並獲得國際學界高度關注。

國際及國內獎項

2025 QSCP Promising Scientist Prize of Centre Mécanique Ondulatoire Appliquée (CMOA)

2025 清華大學傑出年輕學者

2025 台灣觸媒學會傑出論文獎

2024 清華傑出人才發展基金優秀研究獎

2024 科技部吳大猷先生紀念獎

2023 研發服務平台亮點成果獎

2023 台灣陶瓷學會優秀青年會員獎

2023 清華傑出人才發展基金-傑出研究獎

2022 台灣鍍膜科技協會傑出青年獎

2022 中國材料科學學會優秀年輕學者獎

2021 清華新進人員研究獎