

第六屆  
2011

鍾靈化學創意競賽

材料化學專題演講  
演講者：林志興教授

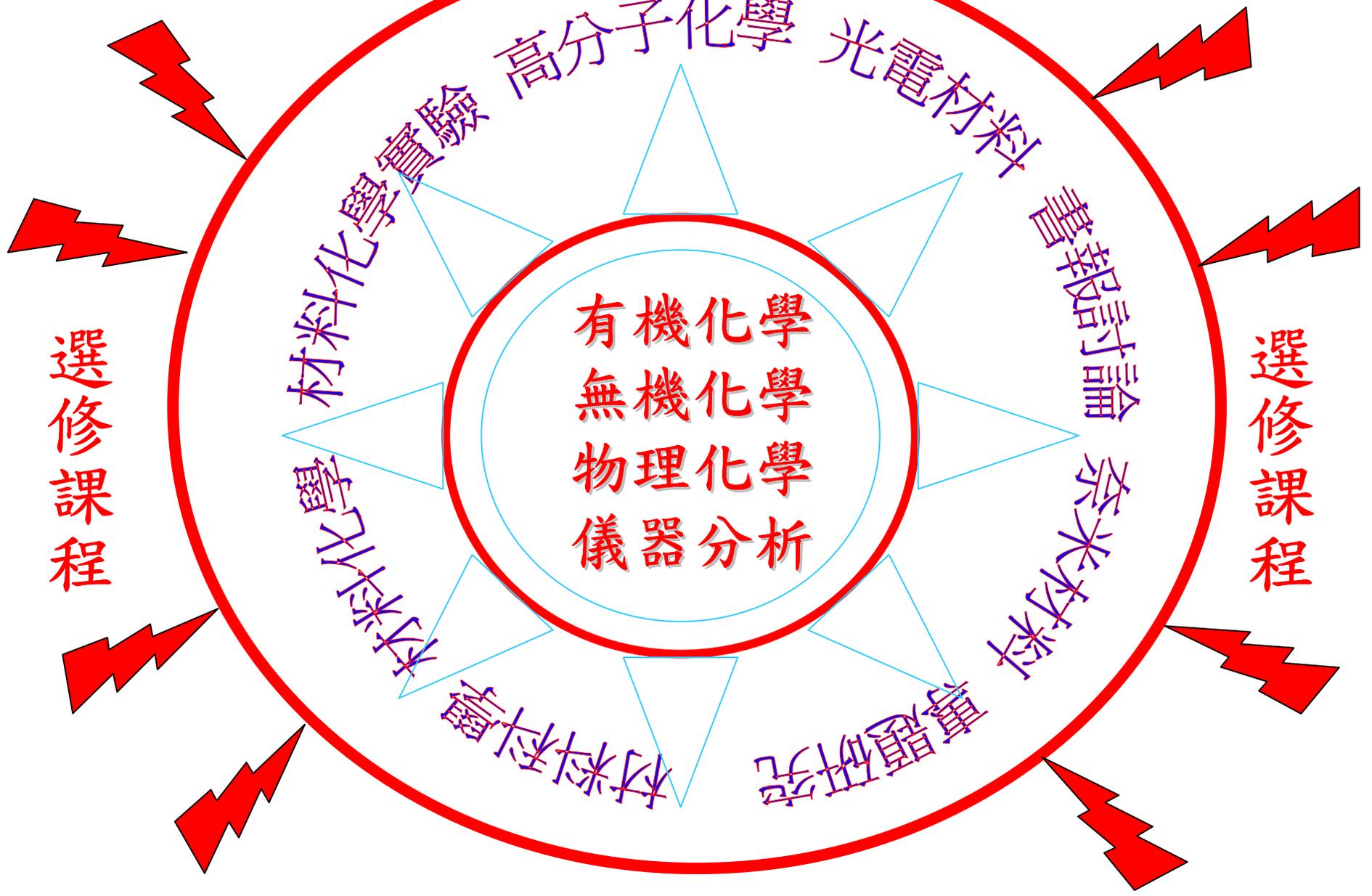
2011/03/05

有機化學  
無機化學  
物理化學  
儀器分析

材料化學實驗 高分子化學 光電材料  
普報討論 奈米材料  
專題研究 材料科學  
材料化學

選修課程

選修課程



## 材料化學實驗

有機發光材料的合成與性質鑑定

金奈米粒子的製備與性質鑑定

液晶材料合成及性質鑑定

自組裝材料的製備與性質鑑定

孔洞材料的製備與性質鑑定

多種新穎材料之製備及性質量測

## 專題研究

磁性材料

奈米材料

液晶材料

超分子材料

高溫超導材料

有機發光材料

功能性高分子材料

材料電腦模擬

# 儀器設備

## 儀器

核磁共振、紅外光、紫外-可見光、螢光、原子光譜儀

偏光光學顯微鏡

穿隧電子顯微鏡、掃描電子顯微鏡、原子力顯微鏡

全套熱分析儀 (TGA, DSC, DMA, TMA, DTA)

X-ray繞射儀 (單晶、粉末)

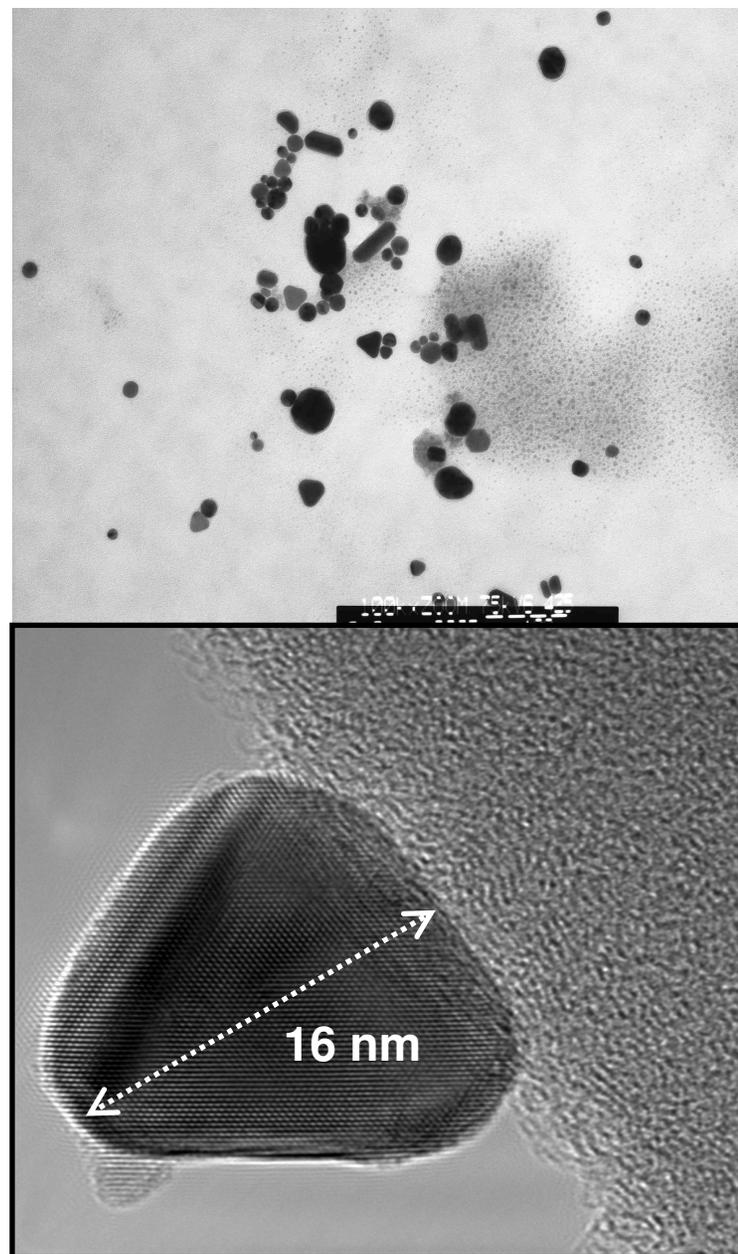
電灑質譜儀、氣相層析質譜儀

氣相層析儀、液相層析儀、電泳分析儀

# 600MHz核磁共振儀



穿透式電子顯微鏡



# 磁性材料

## 魏和祥教授

### 分子磁性

### 生化活性分子

### 設計-酵素模擬



淡江大學化學系教授 (1975-迄今)

日本國立東京大學理學博士 (1972)

錯鹽化學 分子磁性 磁性化學

生物無機 梅思堡光譜

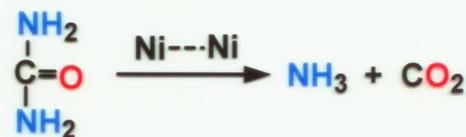
主要研究在於分子設計模擬生物活性之無機錯化合物與構成鐵磁性之分子磁體，利用

SQUID 變溫磁性測定，ESR，Raman 及 Mössbauer 光譜學探討分子集合體之自旋狀態、磁性與生化反應。目前研究題目有：

1. 分子磁性: 1) 具有順磁有機自由基,  $R-(NO\cdot)_x$  及其金屬(包括過渡金屬、稀土金屬)錯合之研究。2) 金屬錯合物磁與晶體工程構造之關連性之研究。
2. 生化活性之分子設計: 1) Catechol dioxygenase 模型 Fe(III) 錯合物合成、晶體構造解析、物性與 Catecholates 生化開環氧化反應。



- 2) Urease 模型双核 Ni(II) 錯合物合成、晶體構造解析、物性與 Urea 生化分解(生成  $NH_3$  及  $CO_2$ ) 反應。

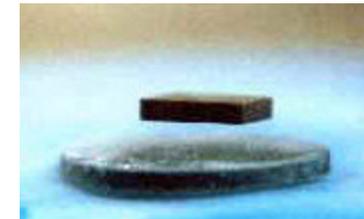


## 固態氧化物材料 高惠春教授

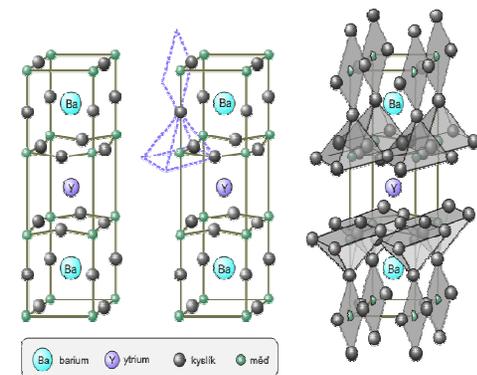
製備並研究具有**超導性**、**磁性**、**巨磁阻性**、**離子導電性**、**抗腐蝕性的氧化物材料**。巨磁阻材料使用在磁記錄設備上；離子導電材料使用在固態氧化物**燃料電池**中。抗腐蝕的氧化物塗膜內含**奈米**粒子。

儀器：X-光粉末繞射儀、熱分析儀、自動滴定儀、高溫爐、打片機、研磨機、黏度計。

•合作對象：本校物理系·同步輻射中心  
彰化師範大學



高溫超導的磁懸浮展示



# 高分子材料 陳幹男 教授

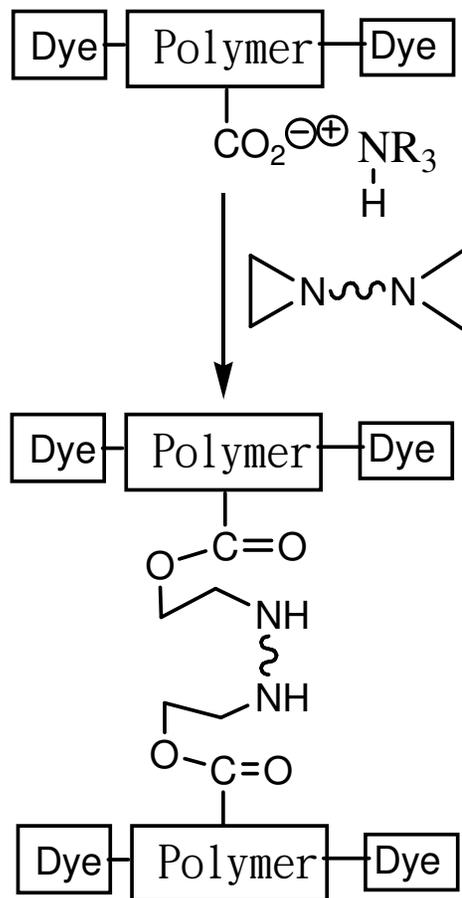
## 研究興趣

高分子材料之合成和應用

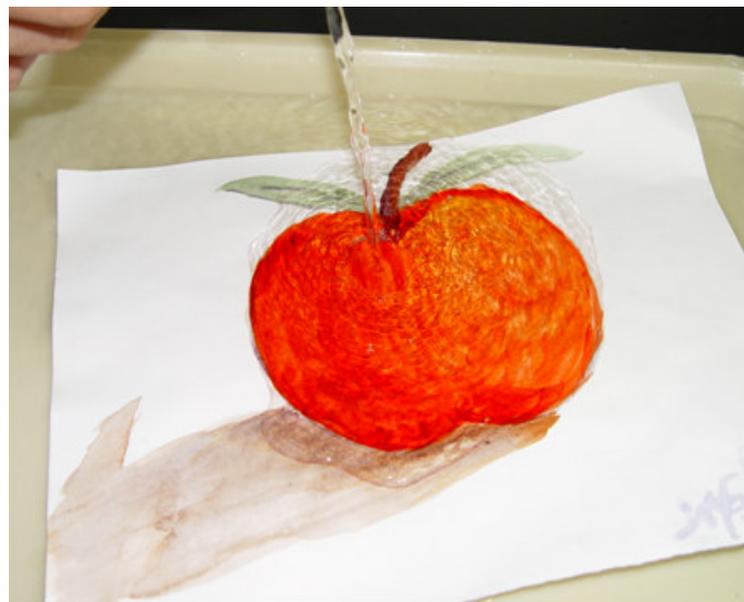
1. 環境友善綠色製程開發
2. 水性樹脂
3. 紫外光硬化型樹脂
4. 高分子型染料
5. 功能性高分子材料
6. 超親水性高分子
7. 超撥水性高分子

## 獲得專利

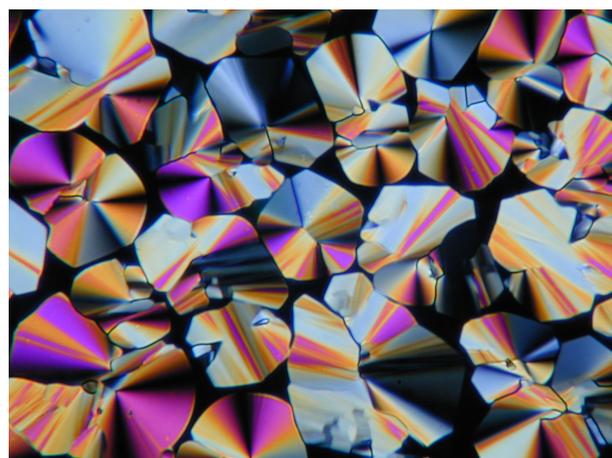
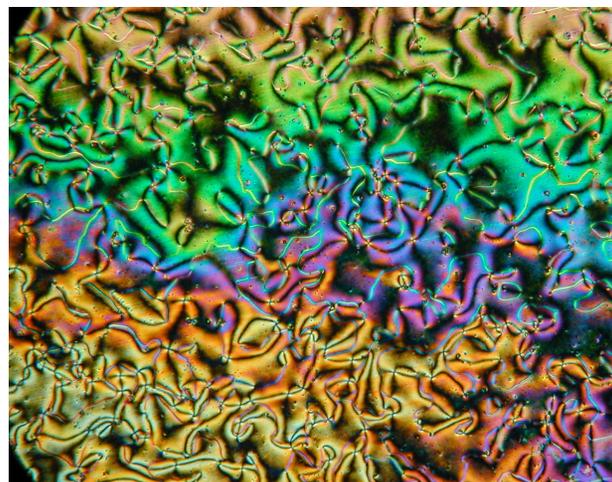
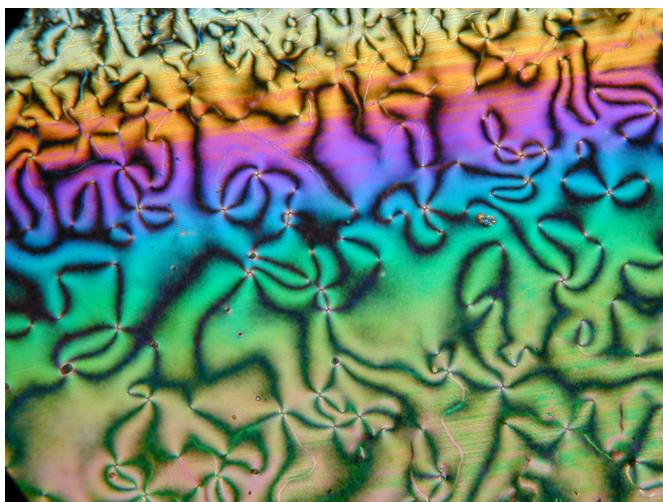
中華民國、美國、日本、英國、德國和荷蘭等國之專利共18項。



高分子染料

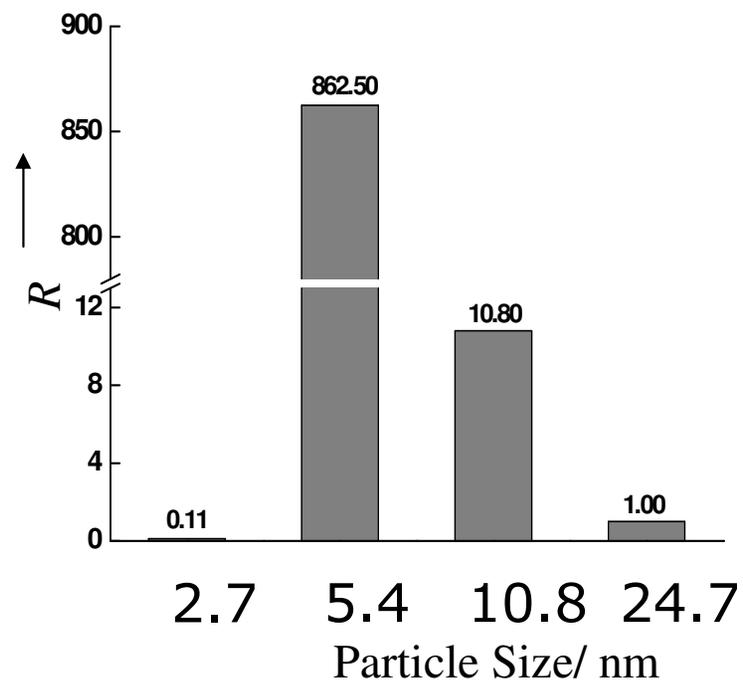
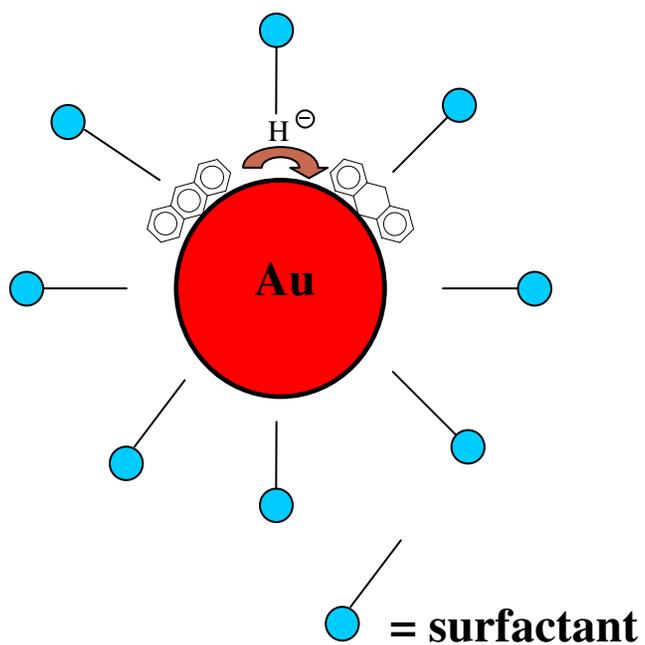
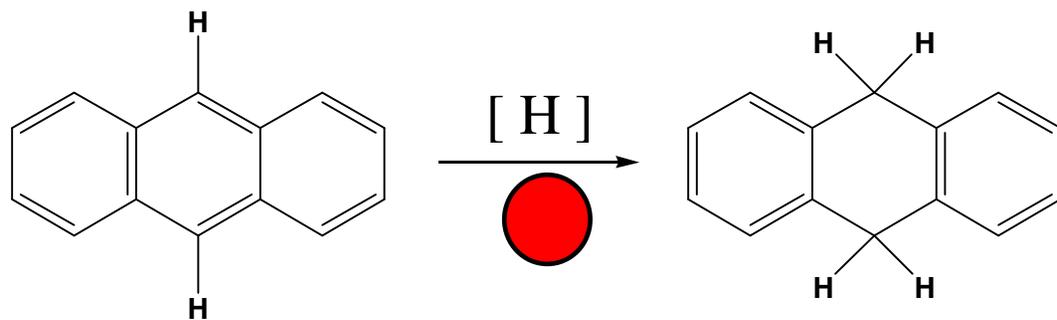


光電材料 - 液晶材料 (王文竹、余良杰、李世元、徐秀福 教授)



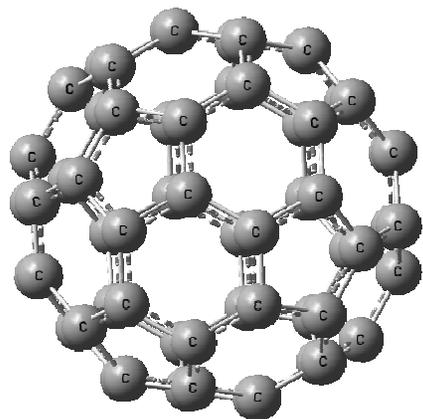
偏光光學顯微鏡下的液晶

# 奈米科學 - 催化氧化 (鄧金培 教授)

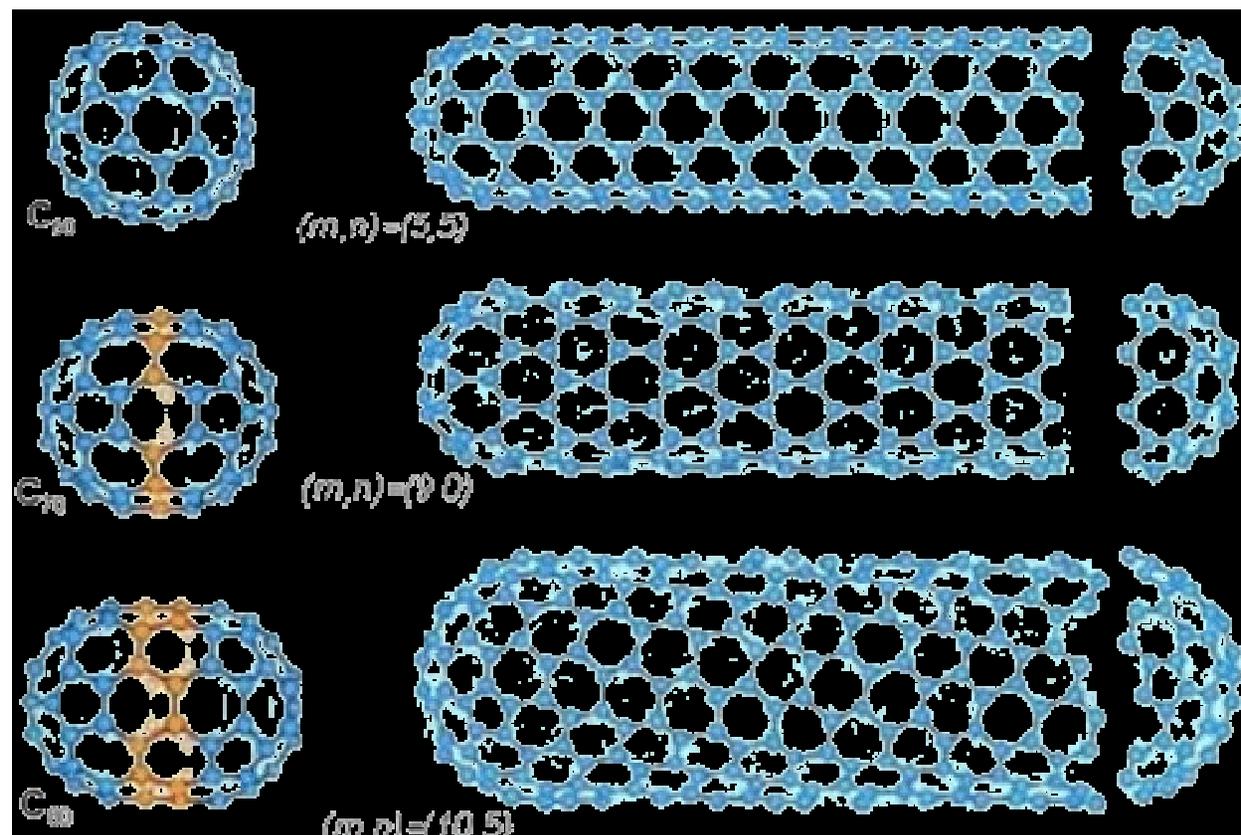


# 奈米科學 - 奈米碳管 (王伯昌 王文竹 教授)

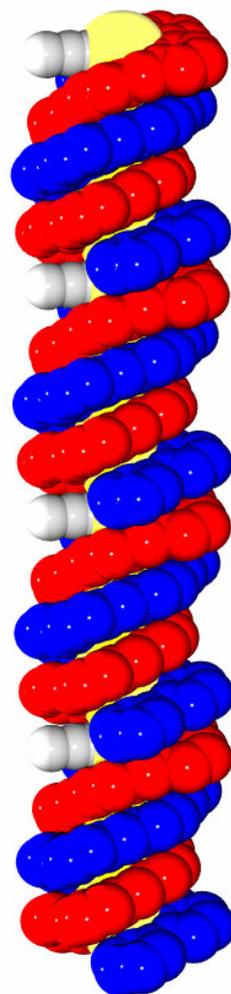
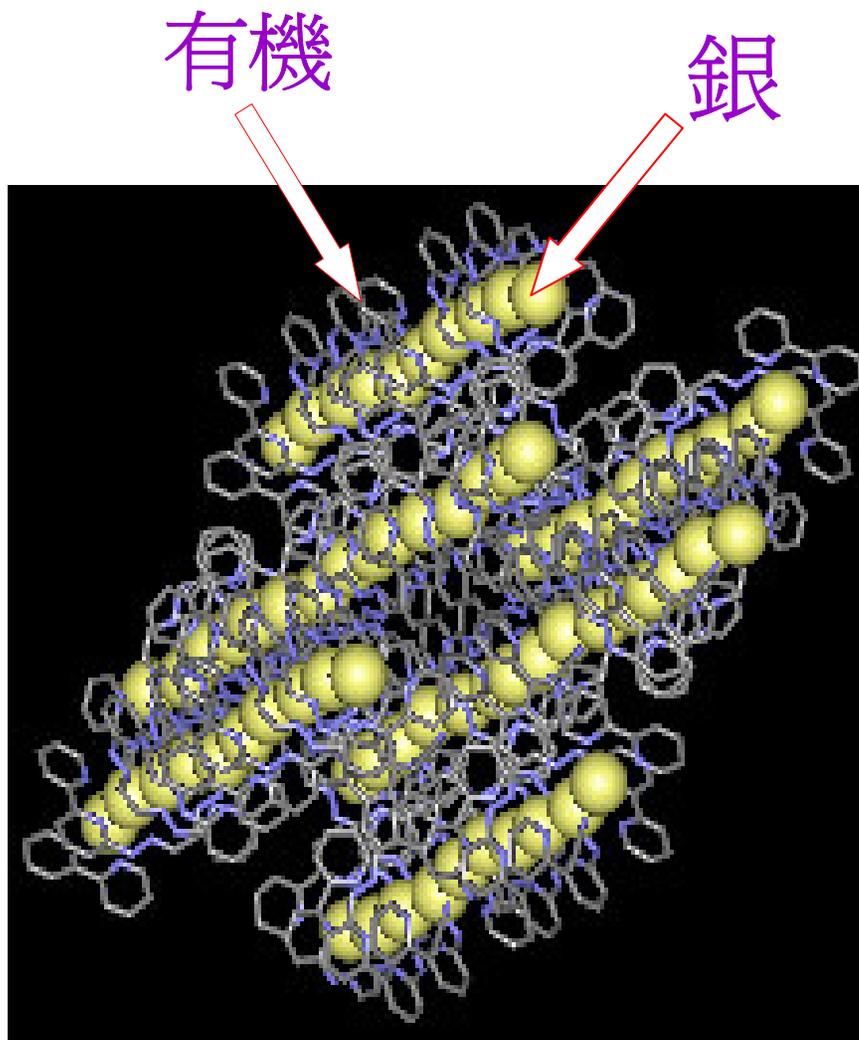
奈米碳球、奈米碳管 - 合成及理論計算



C<sub>60</sub>

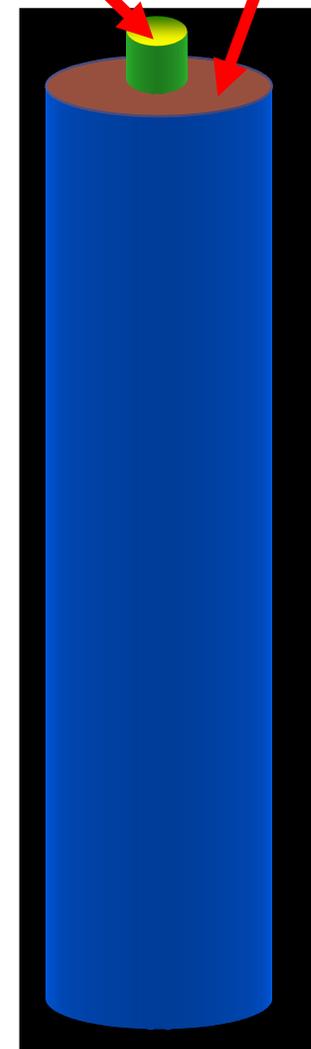


# 超分子 - 金屬原子導線 (王文竹教授)



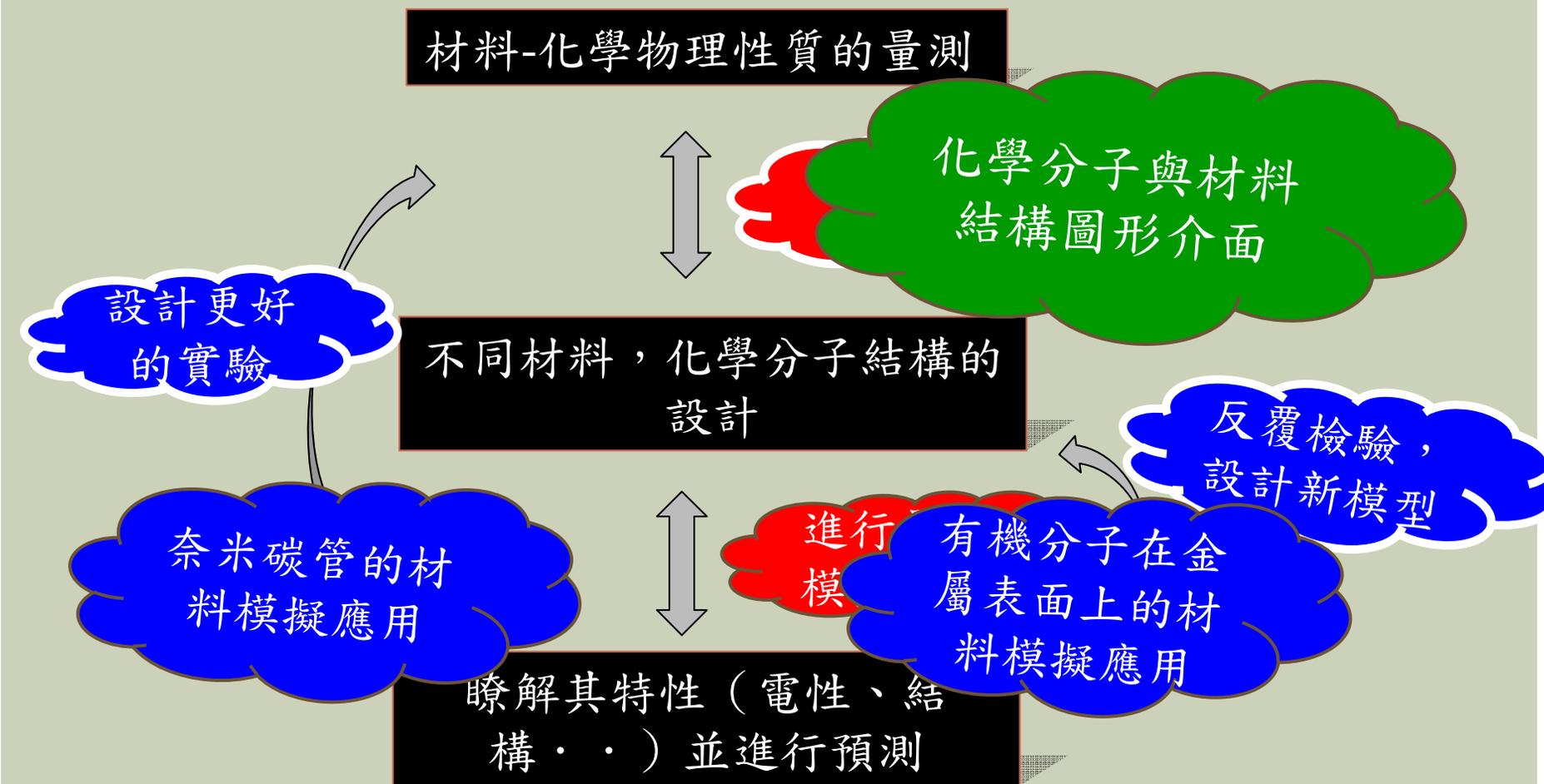
導線

絕緣包覆層



# 電腦模擬在材料化學上的應用

# 模擬策略



# 化學分子與材料結構模擬平台

烷類

醇類

酸類

酮類

醛類

醚類

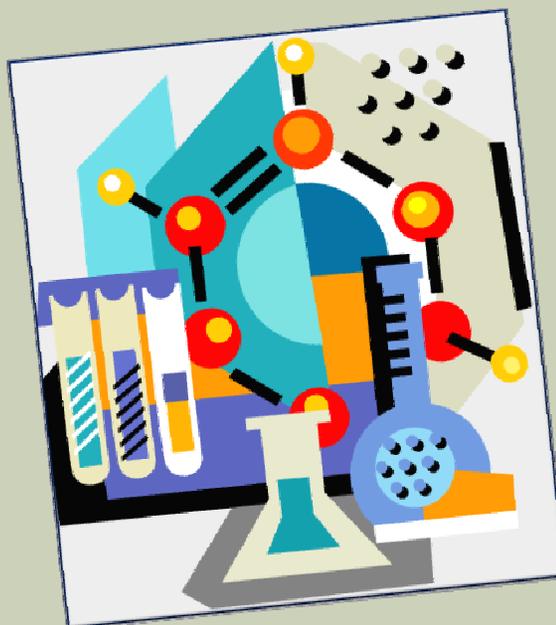
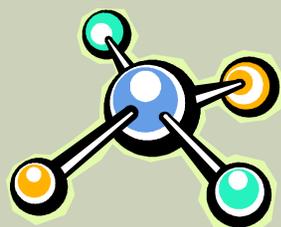
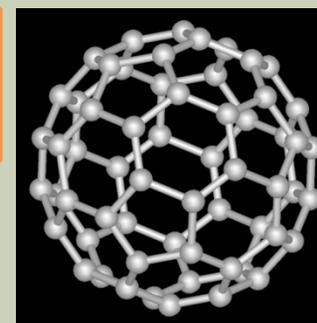
有機分子

礦物結構

分子晶體結構

C60

C70



無機材料

金屬氧化物

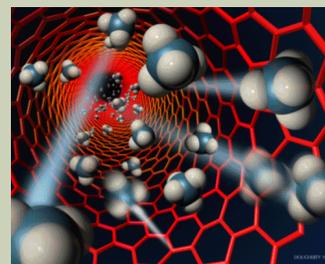
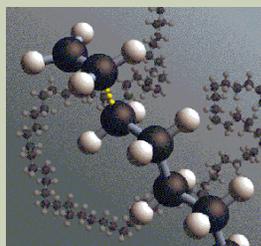
陶瓷材料

沸石結構

半導體材料

聚合物

奈米碳管



# 化學分子與材料結構模擬平台

## ■ 如何產生分子結構?

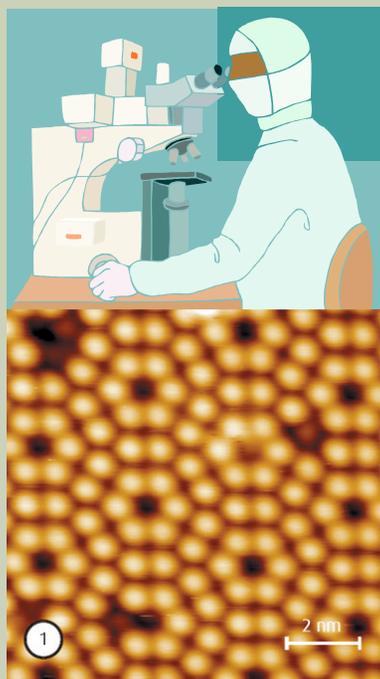
透過實驗測量



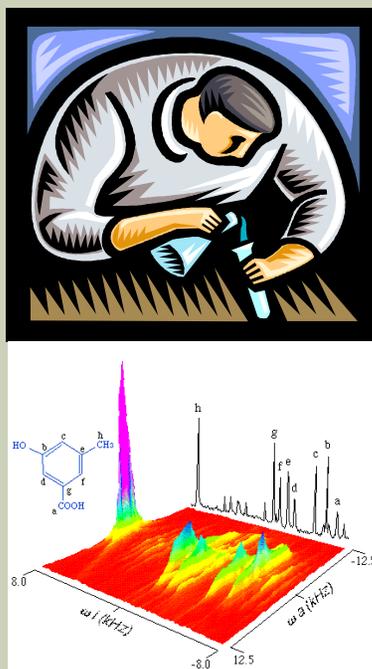
分析化學結構



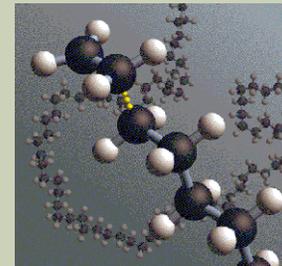
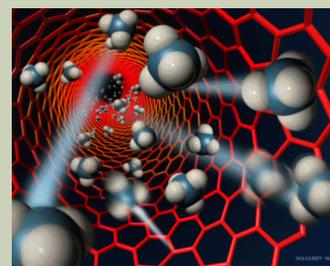
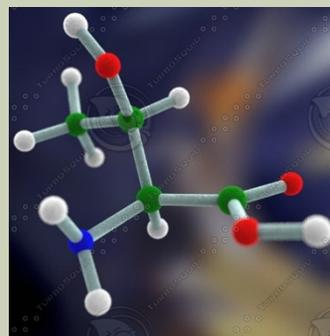
將**結構座標**存入資料庫中  
最後以電腦模擬的方式呈  
現分子或晶體結構



電子顯微鏡, 原子力顯微鏡 (STM), (AFM) ..



光譜儀器測定, 推測分子結構 (IR), (NMR), (MASS) ..



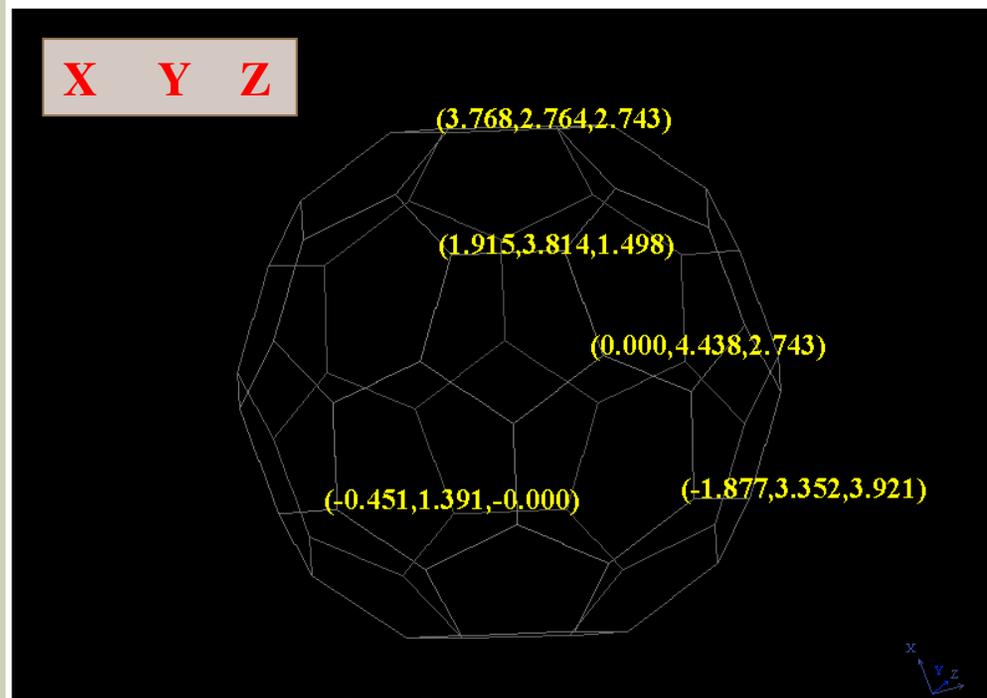
# 化學分子與材料結構模擬平台

- 如何顯示分子結構? (透過向量(Vector)及矩陣(Matrix))

ATOM	1	C1	MOL	2	0.000	0.000	0.000	1.00	0.00	C
ATOM	2	C2	MOL	2	1.464	0.000	0.000	1.00	0.00	C
ATOM	3	C3	MOL	2	1.916	1.392	0.000	1.00	0.00	C
ATOM	4	C4	MOL	2	0.732	2.253	0.000	1.00	0.00	C
ATOM	5	C5	MOL	2	-0.452	1.392	0.000	1.00	0.00	C
ATOM	6	C6	MOL	2	-1.573	1.756	0.728	1.00	0.00	C
ATOM	7	C7	MOL	2	-0.692	-0.953	0.728	1.00	0.00	C
ATOM	8	C8	MOL	2	2.156	-0.953	0.728	1.00	0.00	C
ATOM	9	C9	MOL	2	3.036	1.756	0.728	1.00	0.00	C
ATOM	10	C10	MOL	2	0.732	3.431	0.728	1.00	0.00	C
ATOM	11	C11	MOL	2	3.341	-0.568	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	12	C12	MOL	2	3.768	0.749	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	13	C13	MOL	2	3.037	3.002	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	14	C14	MOL	2	1.916	3.815	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	15	C15	MOL	2	-0.452	3.815	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	16	C16	MOL	2	-1.573	3.002	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	17	C17	MOL	2	-2.305	0.749	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	18	C18	MOL	2	-1.877	-0.568	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	19	C19	MOL	2	0.040	-1.960	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	20	C20	MOL	2	1.424	-1.960	1.498	1.00	0.00	C
ATOM	21	C21	MOL	2	-0.692	-2.198	2.743	1.00	0.00	C

輸入座標

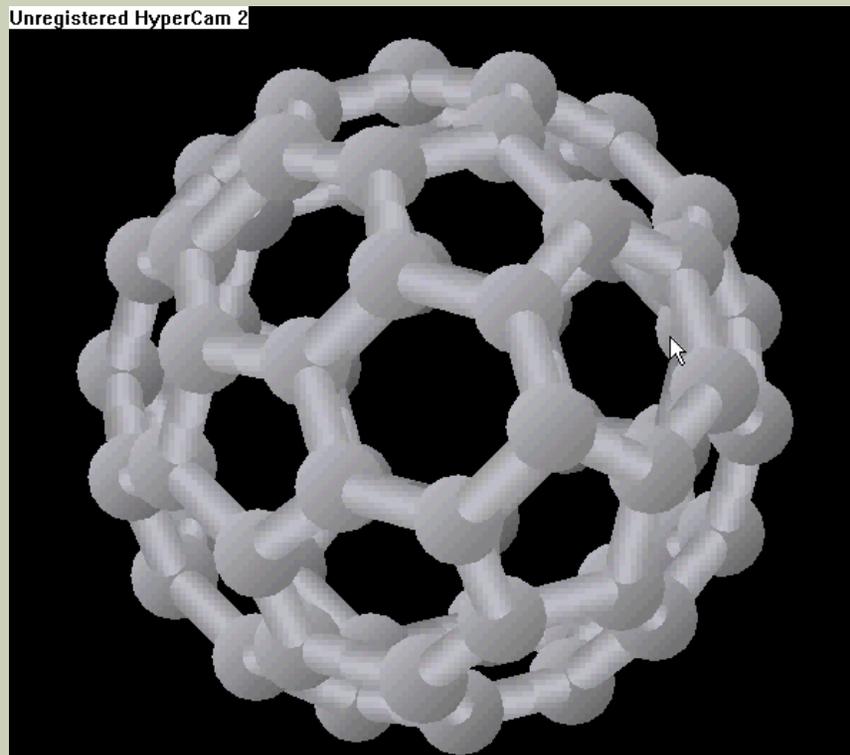
Molecular Name : C60



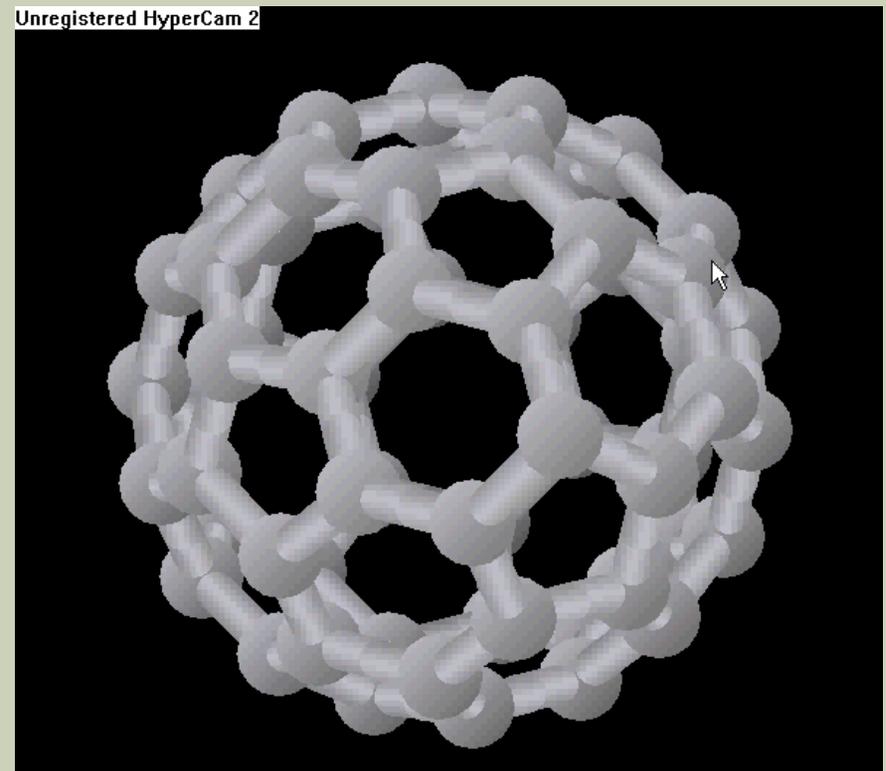
顯示原子

# 化學分子與材料結構模擬平台

- 圖形界面的功能（旋轉, 縮放分子）（透過矩陣運算操作）



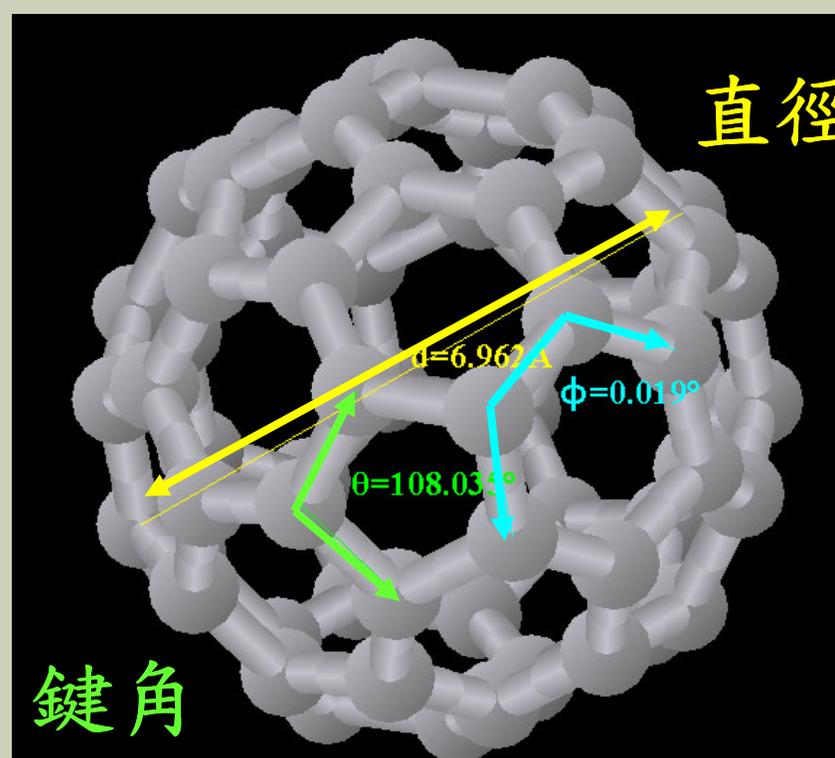
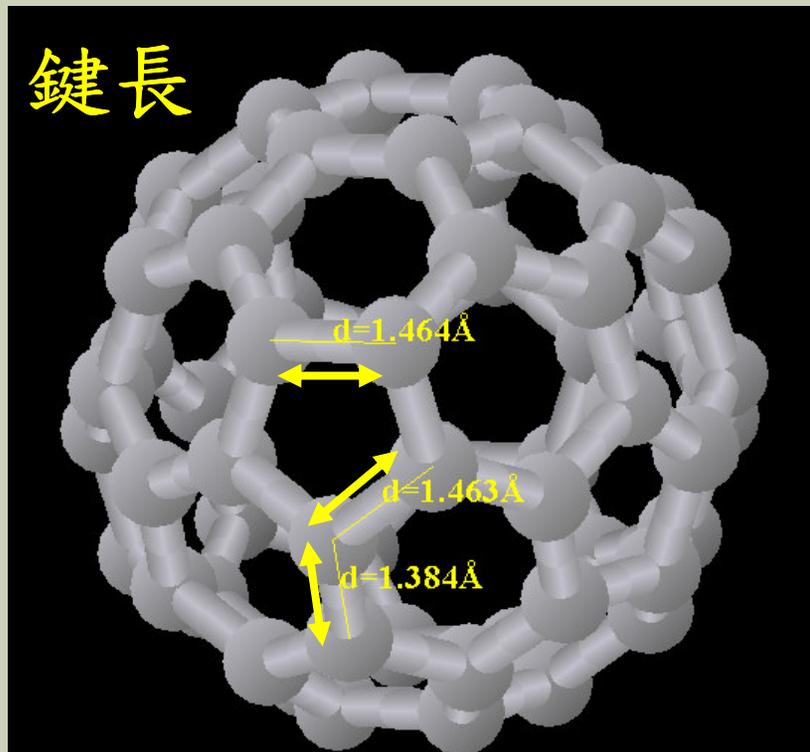
縮放



旋轉

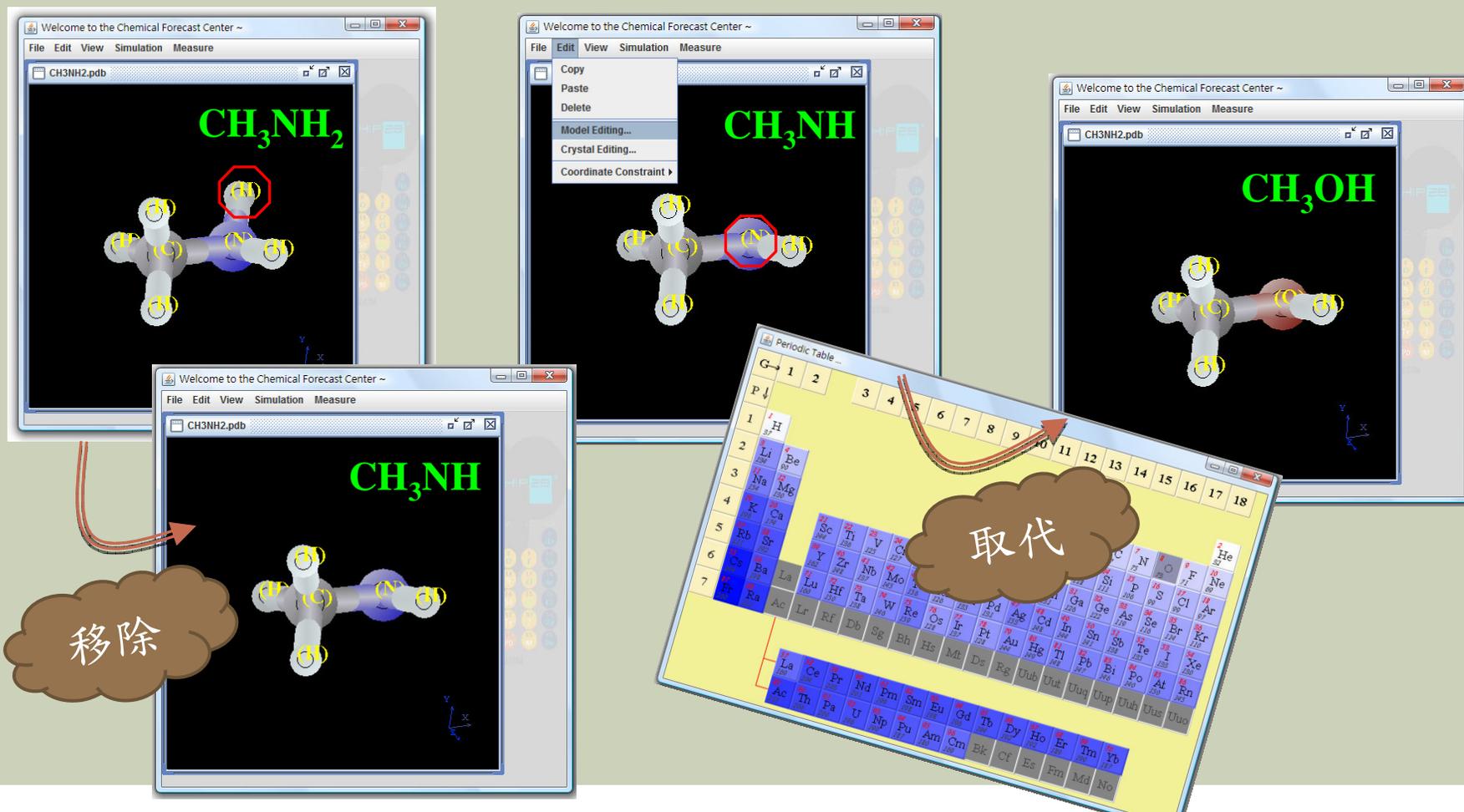
# 化學分子與材料結構模擬平台

- 測量分子內結構資訊（鍵長, 鍵角, 雙面角）（透過向量運算）



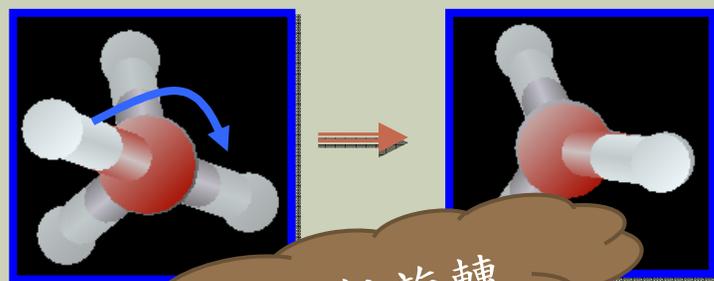
# 化學分子與材料結構模擬平台

- 修飾分子內結構資訊 (移除原子, 修改原子)

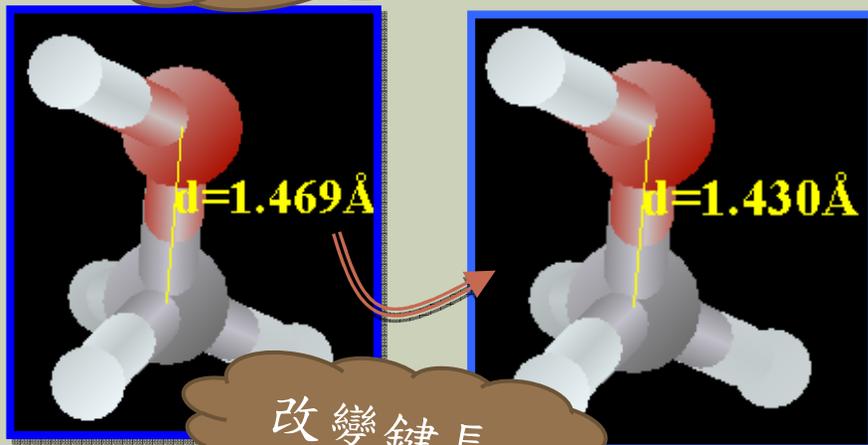


# 化學分子與材料結構模擬平台

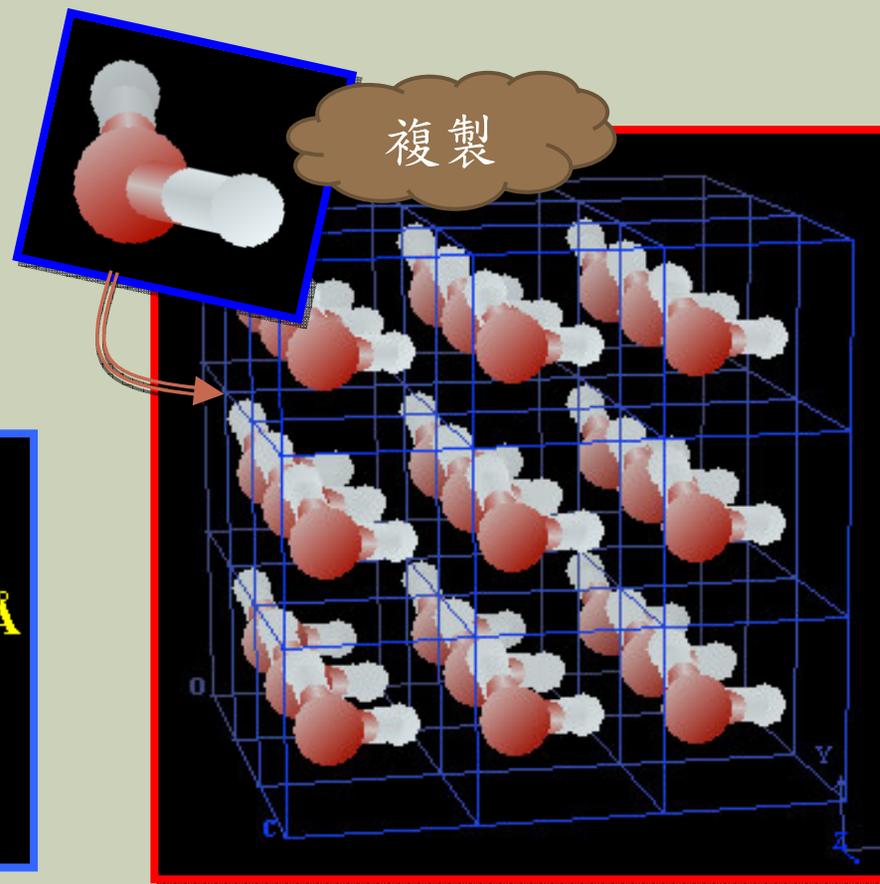
- 修飾分子內結構資訊 (旋轉特定官能基) (向量, 矩陣操作)



分子軸旋轉



改變鍵長



# 化學分子與材料結構模擬平台

- 3D Chemistry? (Our Future)  
(身歷其境的化學世界)



# 模擬策略

材料化學物理性質的儀器測量

化學分子與材料  
結構圖形介面

針對不同材料，化學分子結  
構進行設計

奈米碳管的材  
料模擬應用

有機分子在金  
屬表面上的材  
料模擬應用

瞭解其特性（電性、結  
構···）並進行預測

# 奈米碳管簡介

- 1993飯島澄男(S. Iijima)教授在研究碳團簇時，偶然發現奈米碳管(Carbon nanotube : CNT)的結構其結構類似於 $C_{60}$ 朝某特定方向延展.

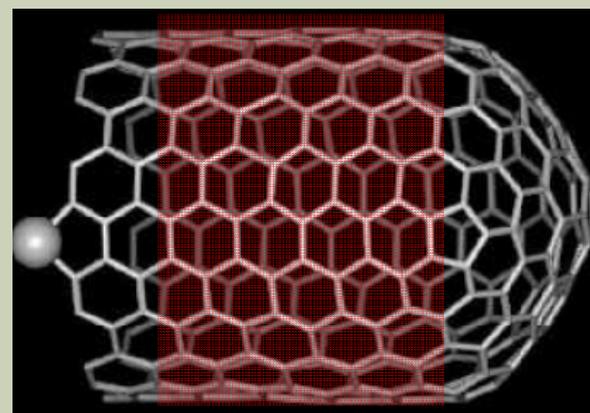


碳管頂端部分：

由半個 $C_{60}$ 的結構組成

碳管管壁部分：

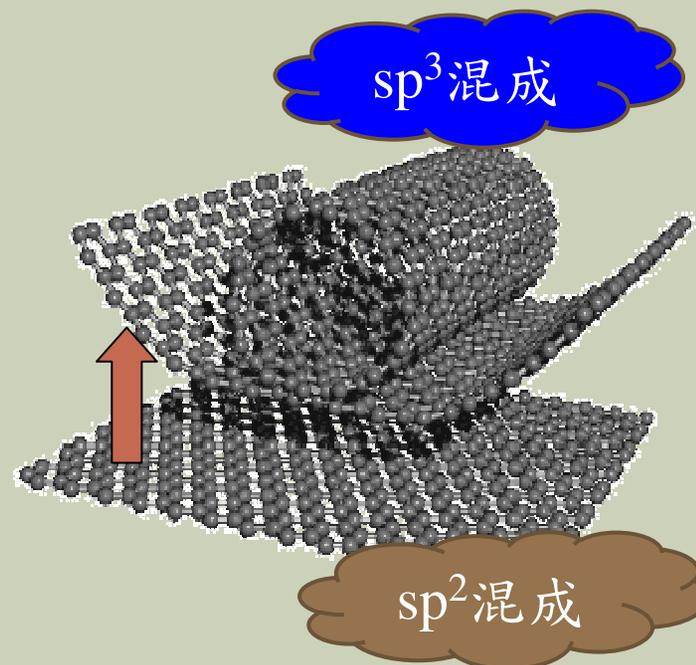
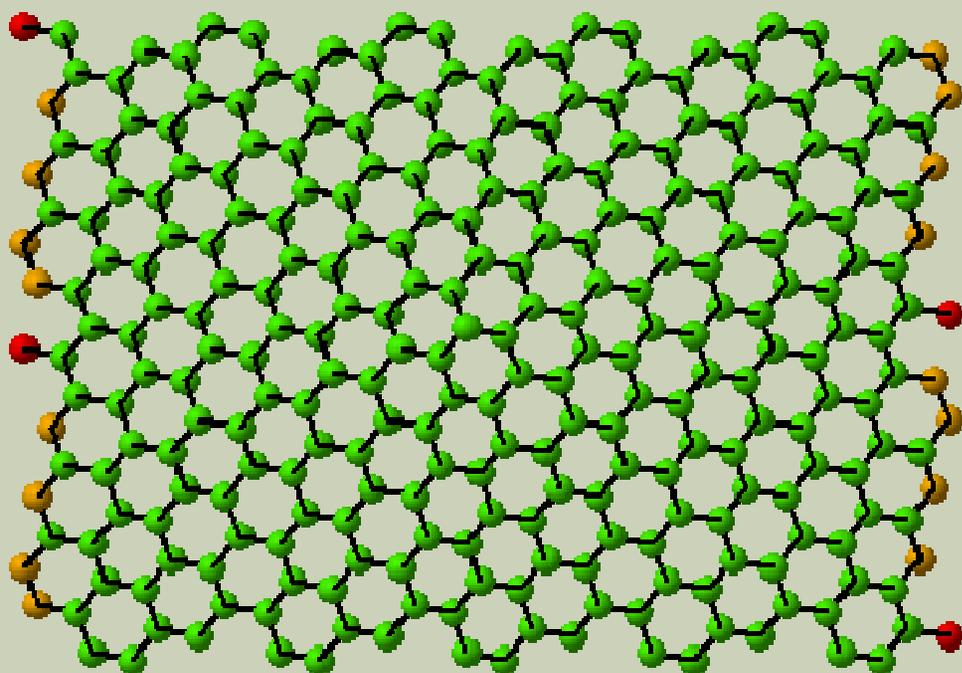
由石墨烯(Graphene)的結構扭曲而成



Carbon nanotube: CNT

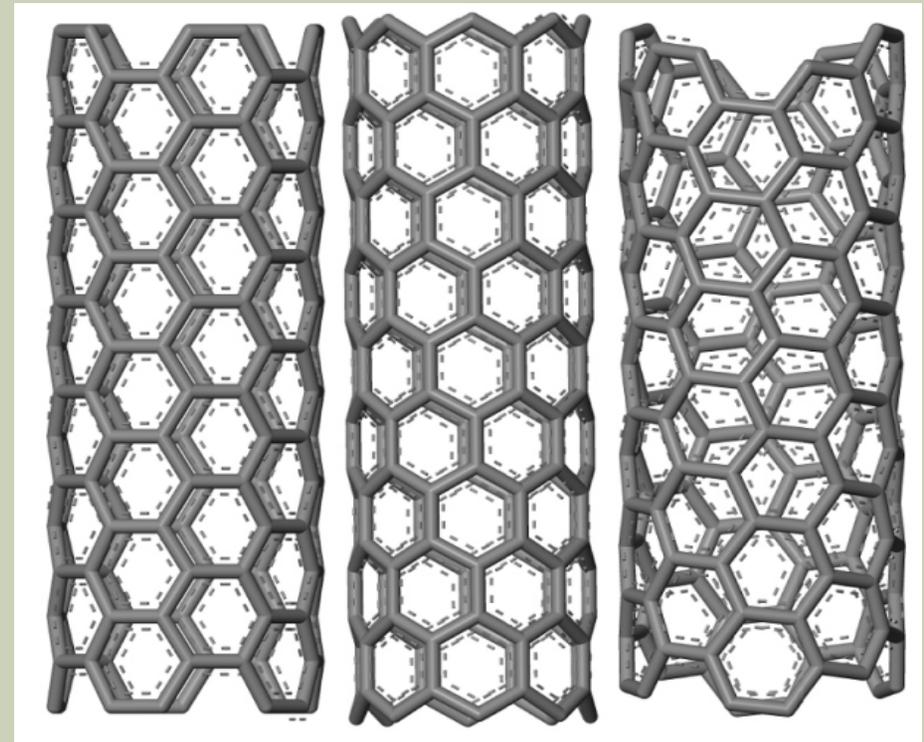
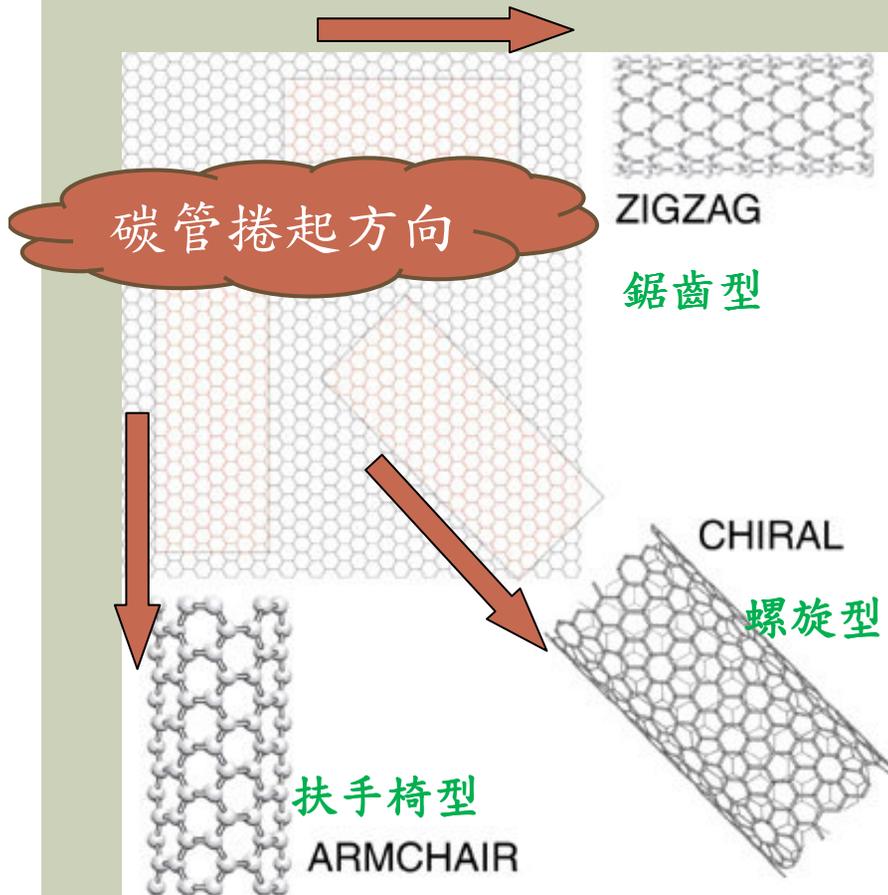
# 奈米碳管簡介

- 管壁結構：奈米碳管之管壁結構，可看作由石墨烯( $sp^2$ 混成)  
(二維結構)所捲起的圓筒(三維結構)



# 奈米碳管的結構特性

■ 單壁奈米碳管(SWCNT: Single-Walled Carbon NanoTube)



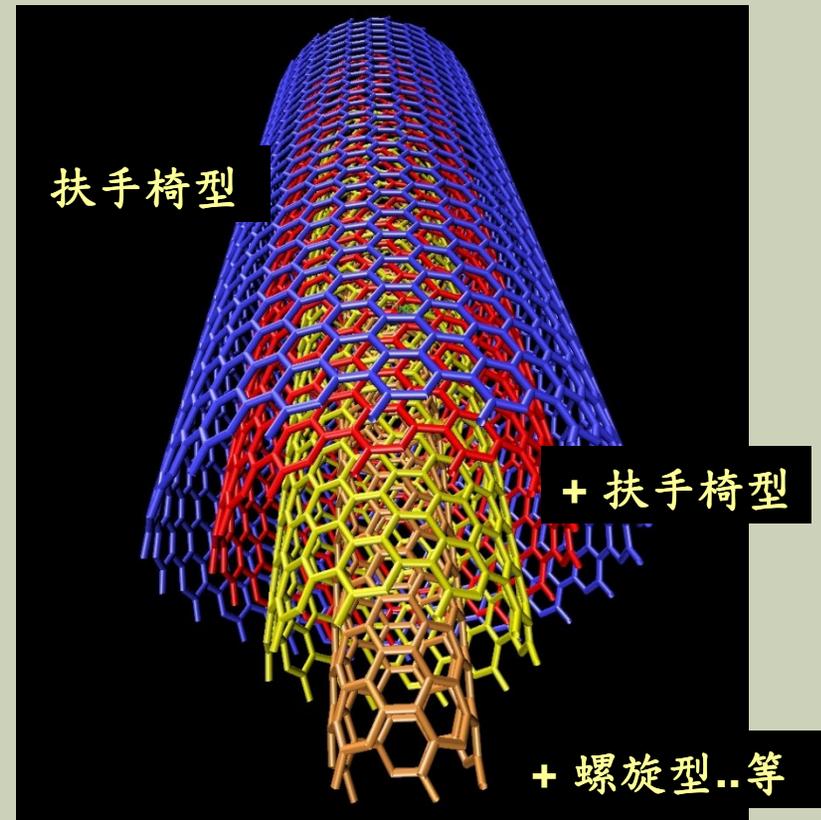
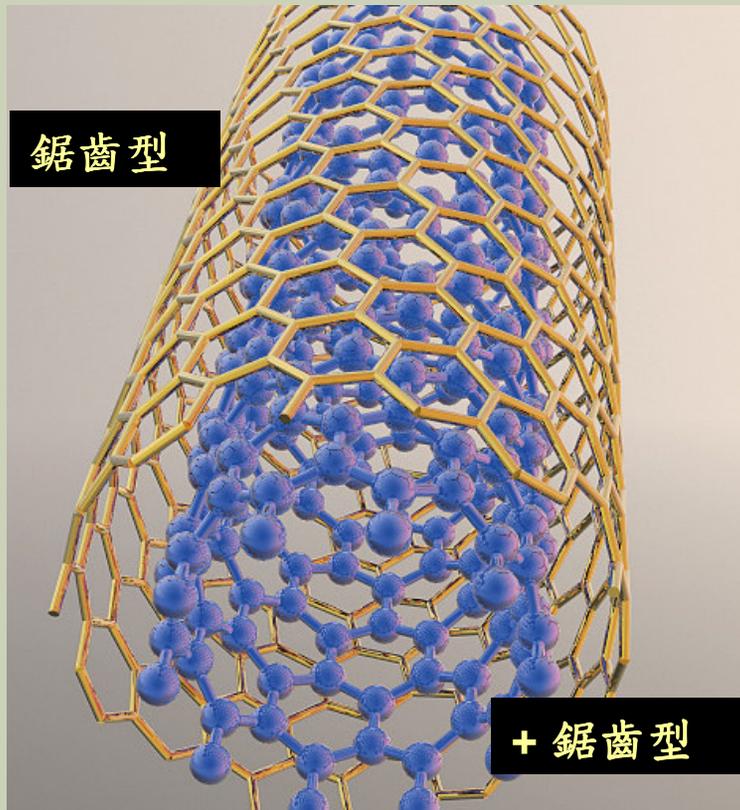
扶手椅型

鋸齒型

螺旋型

# 奈米碳管的結構特性

- 多壁奈米碳管(MWCNT : Multi-Welled Carbon NanoTube)

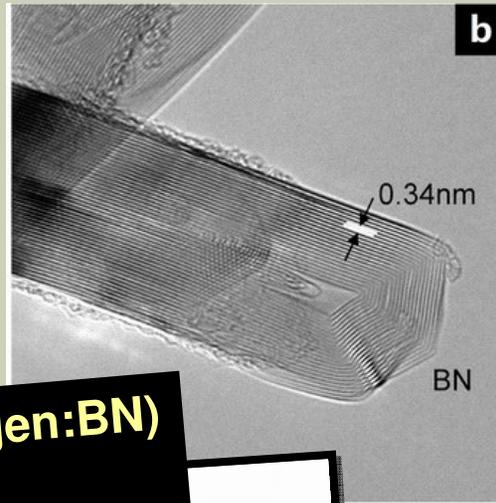


# 奈米碳管的結構特性

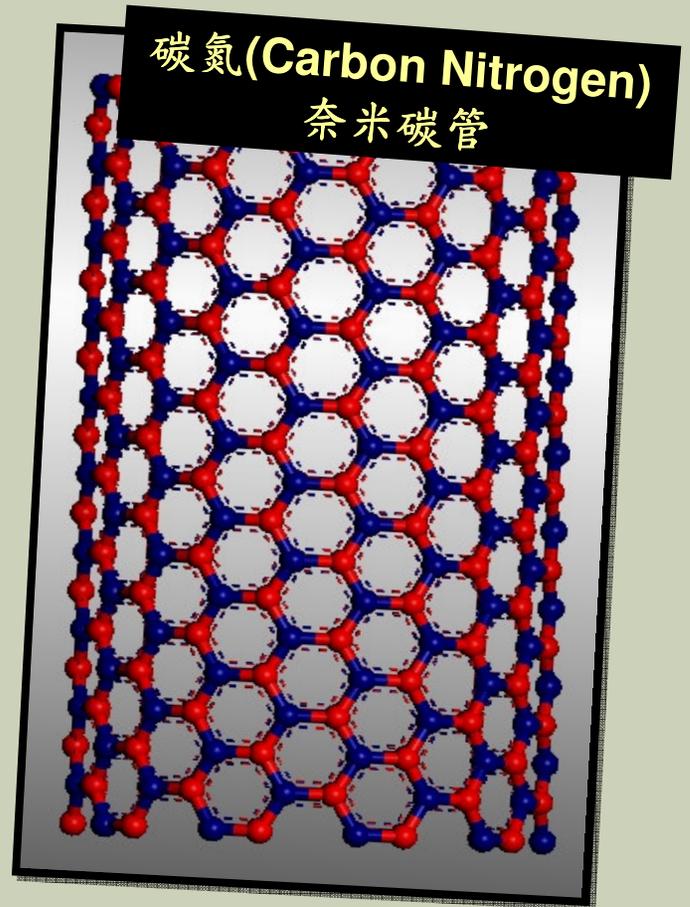
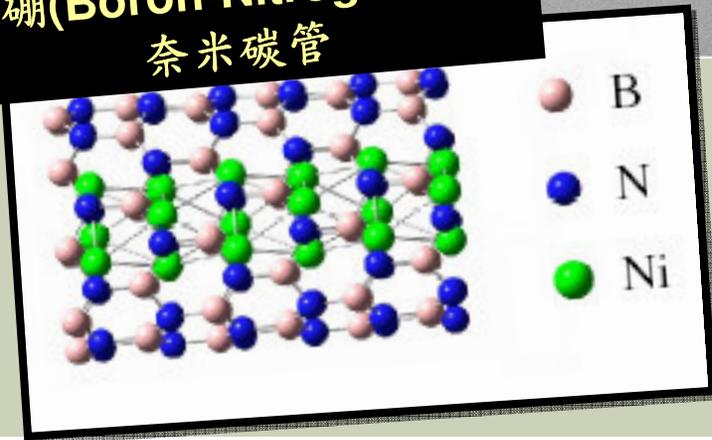
- 摻雜奈米碳管(doping-CNT : Doping Caron NanoTube)



氮硼(Boron-Nitrogen:BN)  
奈米碳管

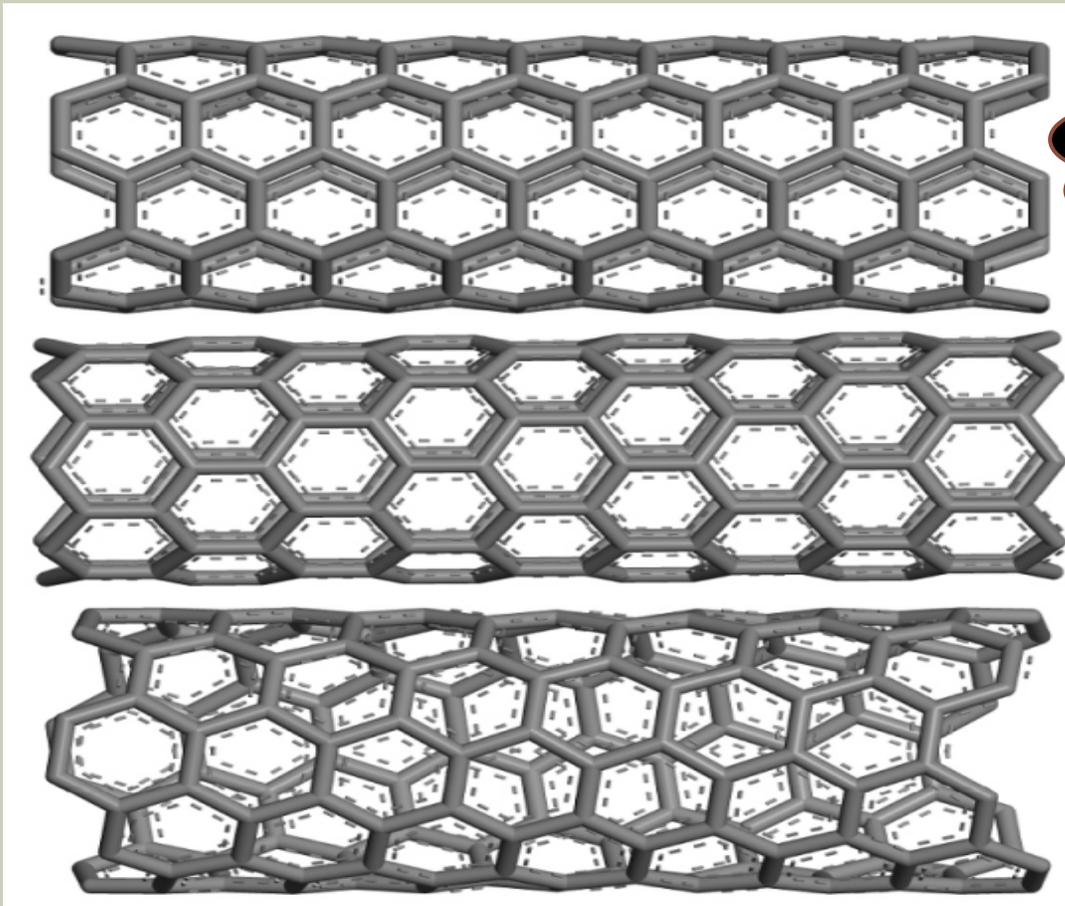


b



# 奈米碳管的材料模擬應用

- 奈米碳管的純化與分離 (依據其導電性分類)

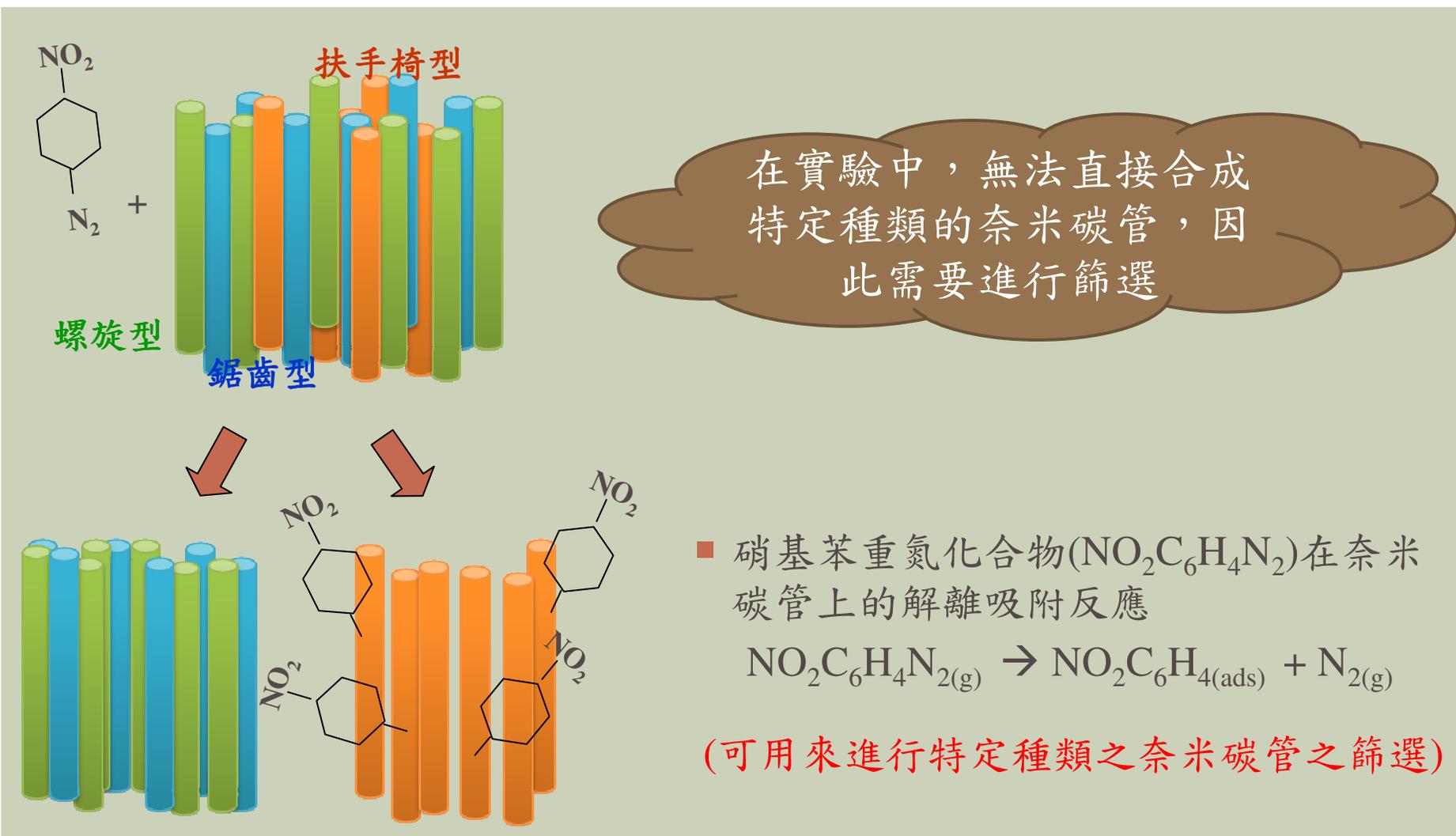


Armchair(扶手椅型)  
金屬特性

Zigzag(鋸齒型)  
金屬特性 & 半  
導體特性

Chiral(螺旋型)  
半導體特性

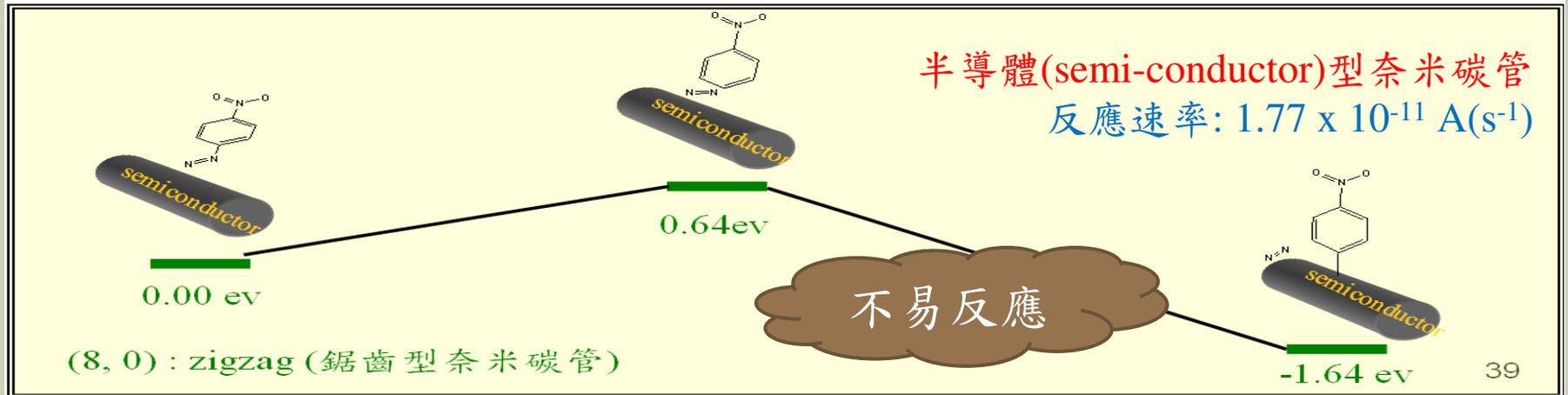
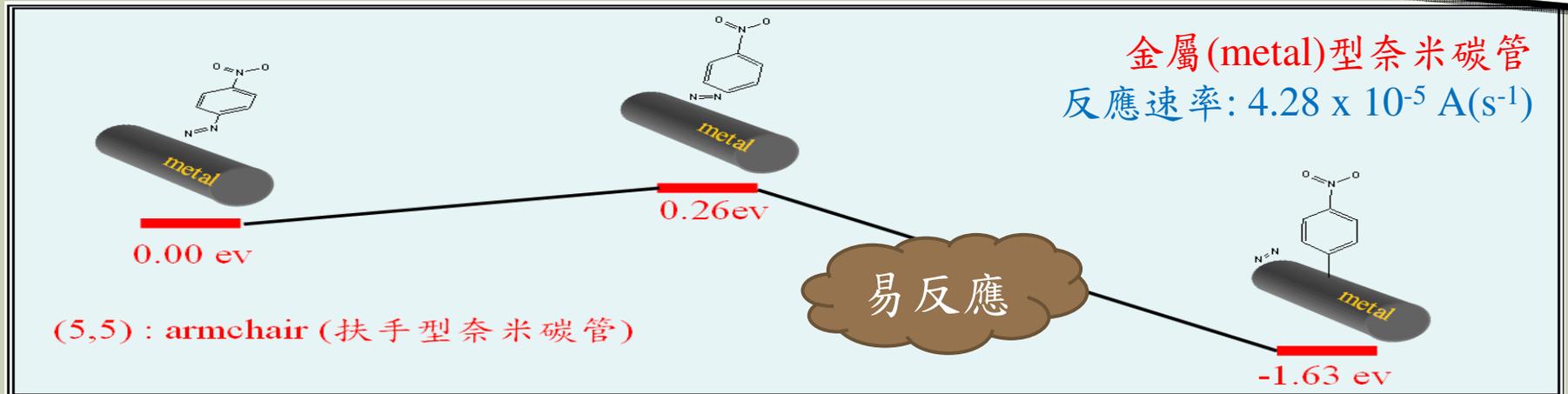
# 奈米碳管的材料模擬應用



# 奈米碳管的材料模擬應用

■ 硝基苯重氮化合物( $\text{NO}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{N}_2$ )的選擇性解離吸附反應

$$k = Ae^{-E_a/k_B T}$$



# 模擬策略

材料化學物理性質的儀器測量

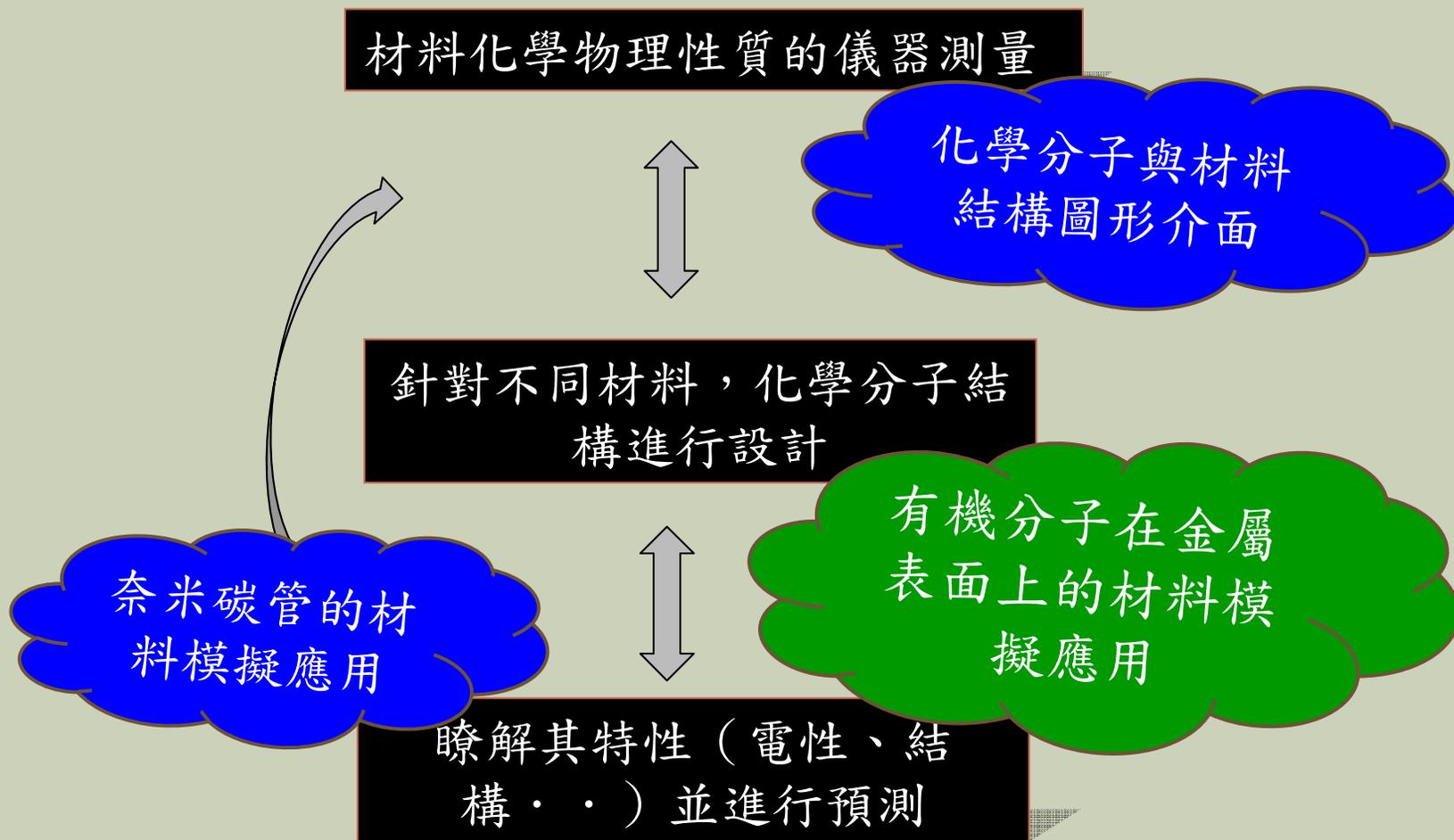
化學分子與材料  
結構圖形介面

針對不同材料，化學分子結  
構進行設計

有機分子在金屬  
表面上的材料模  
擬應用

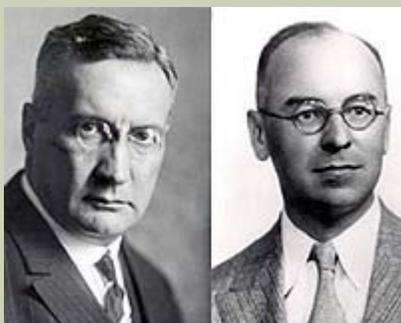
奈米碳管的材  
料模擬應用

瞭解其特性（電性、結  
構···）並進行預測



# 有機分子在金屬表面上的催化反應

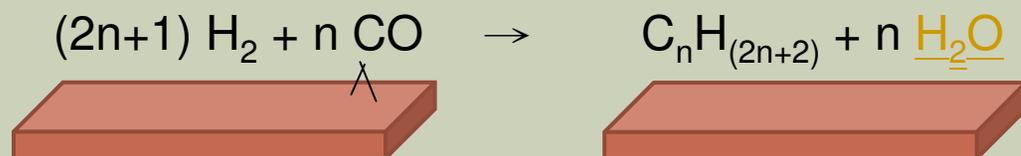
## ■ 費托-合成法(Fischer-Tropsch)簡介



1902年，Sabatier 和 Senderens 它們發現一氧化碳以及氫氣，在200~300 °C 的條件下通過鎳(Ni)或鈷(Co)金屬表面可以催化生成甲烷。而德籍化學家費、托二氏 (Franz Fischer and Hans Tropsch) 更進一步透過金屬表面,如鐵(Fe)與鈷(Co)的催化生成液態的甲醇和其他各式各樣分子量高的碳氫化合物,被大量應用在工業上。

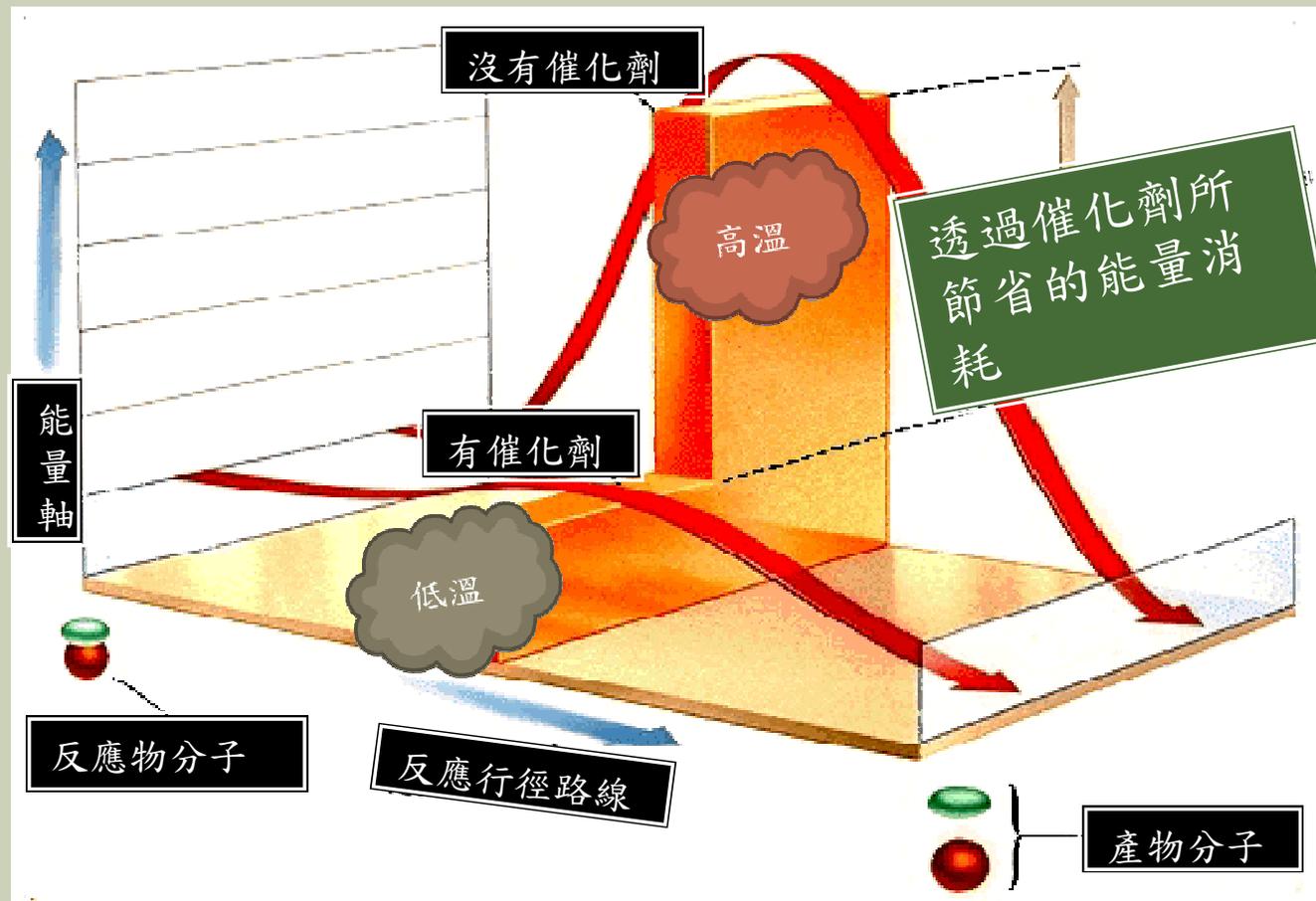


高溫：  
不易反應



低溫：  
易反應

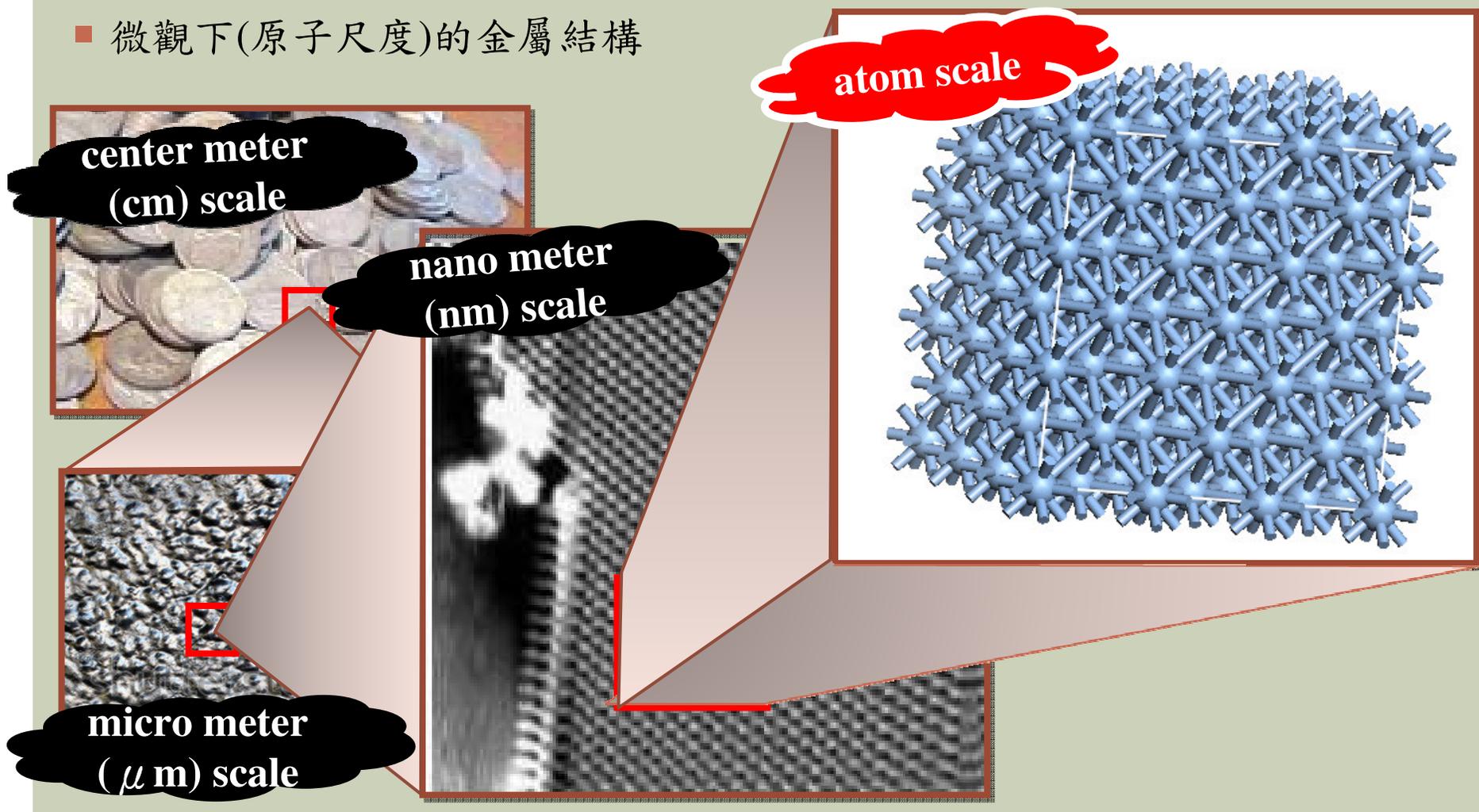
# 有機分子在金屬表面上的催化反應



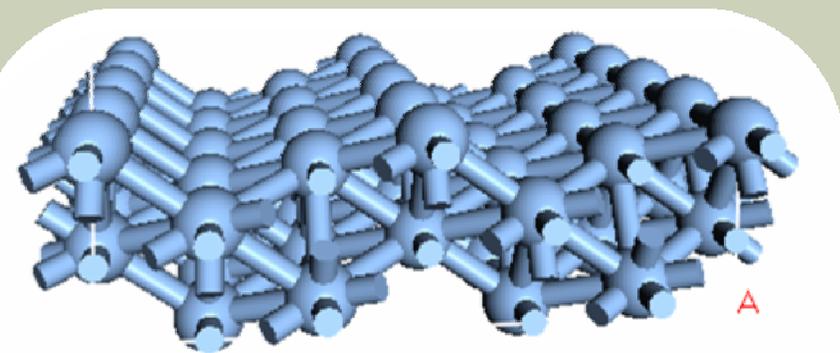
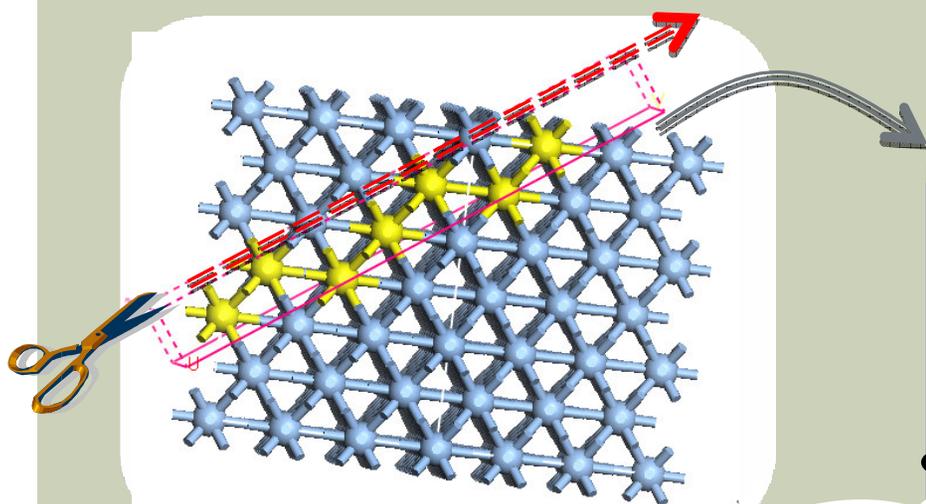
- ◆ 費托合成法中
- 催化劑為金屬
- 不同金屬材料對有機分子的催化效果不同
- 反應溫度與活化能成正比

# 有機分子在金屬表面上的催化反應

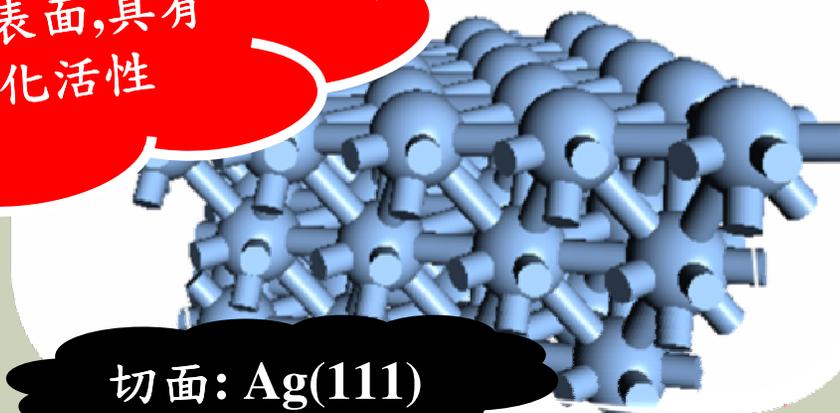
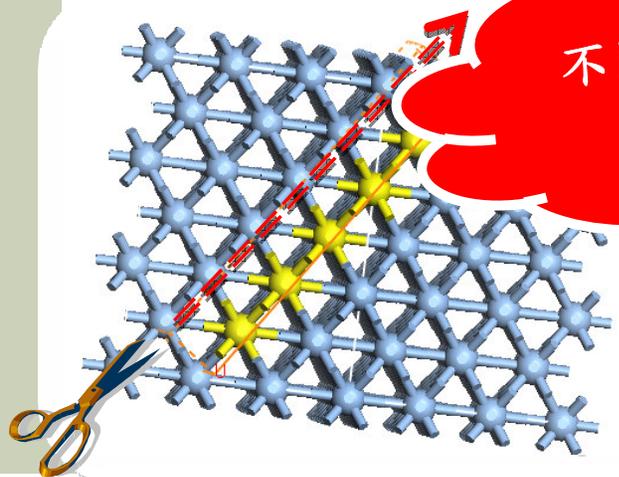
- 微觀下(原子尺度)的金屬結構



# 有機分子在金屬表面上的催化反應



切面: Ag(211)



切面: Ag(111)

不同的金屬表面,具有  
不同的催化活性

# 有機分子在金屬表面上的催化反應

- 更多樣性的有機分子在金屬表面上的催化反應
- 主要目的：透過理論計算的方式了解碳氫、碳氟化合物在不同金屬表面的反應機制與反應性
- 二氟乙烯( $\text{CH}_2=\text{CF}_{2(g)}$ )在銀表面以及銅表面上的合成反應
- 2,4-二己烯( $\text{H}_3\text{CC}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{CCH}_3(g)$ )與丁烷( $\text{CH}_3\text{CH}_2-\text{CH}_2\text{CH}_3$ )在銀表面上的合成反應

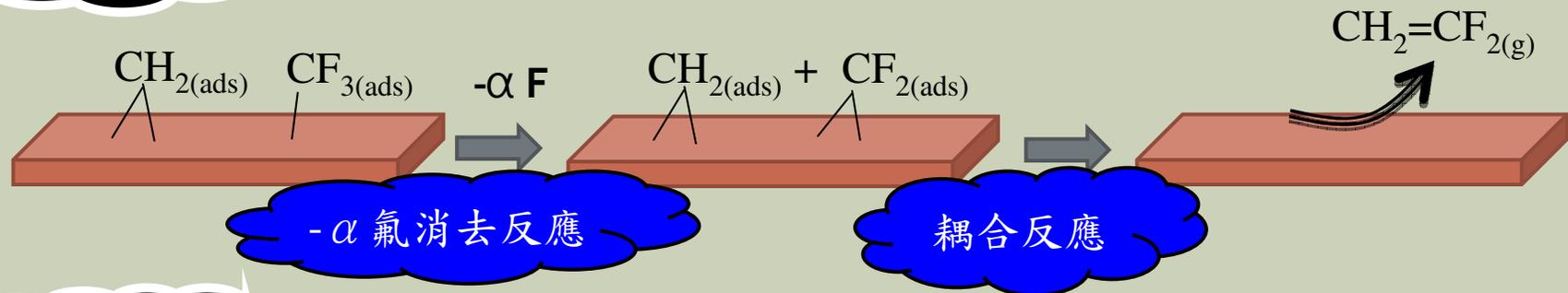
不同金屬的  
催化效應

不同混成軌域的  
催化效應

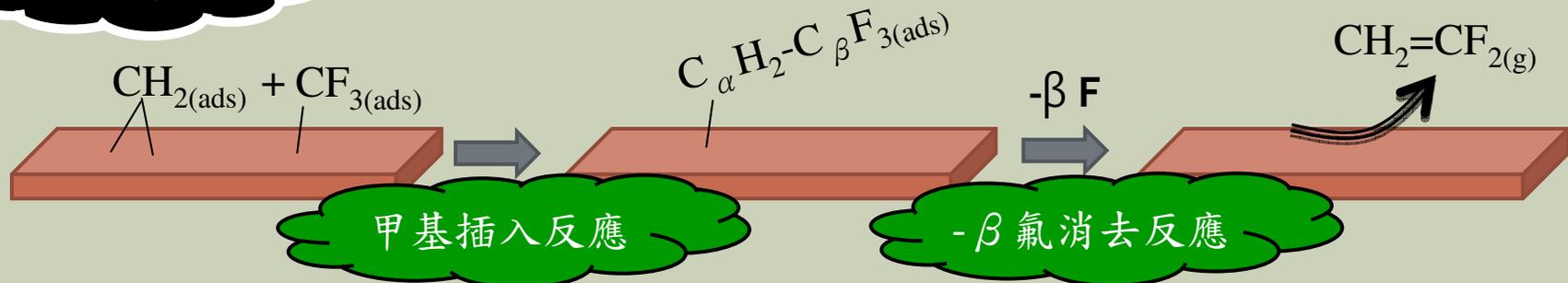
# 有機分子在金屬表面上的催化反應

- 不同金屬表面的催化反應特性
- 二氟乙烯( $\text{CH}_2=\text{CF}_2(\text{g})$ )在金屬表面上的合成催化步驟

可能途徑1

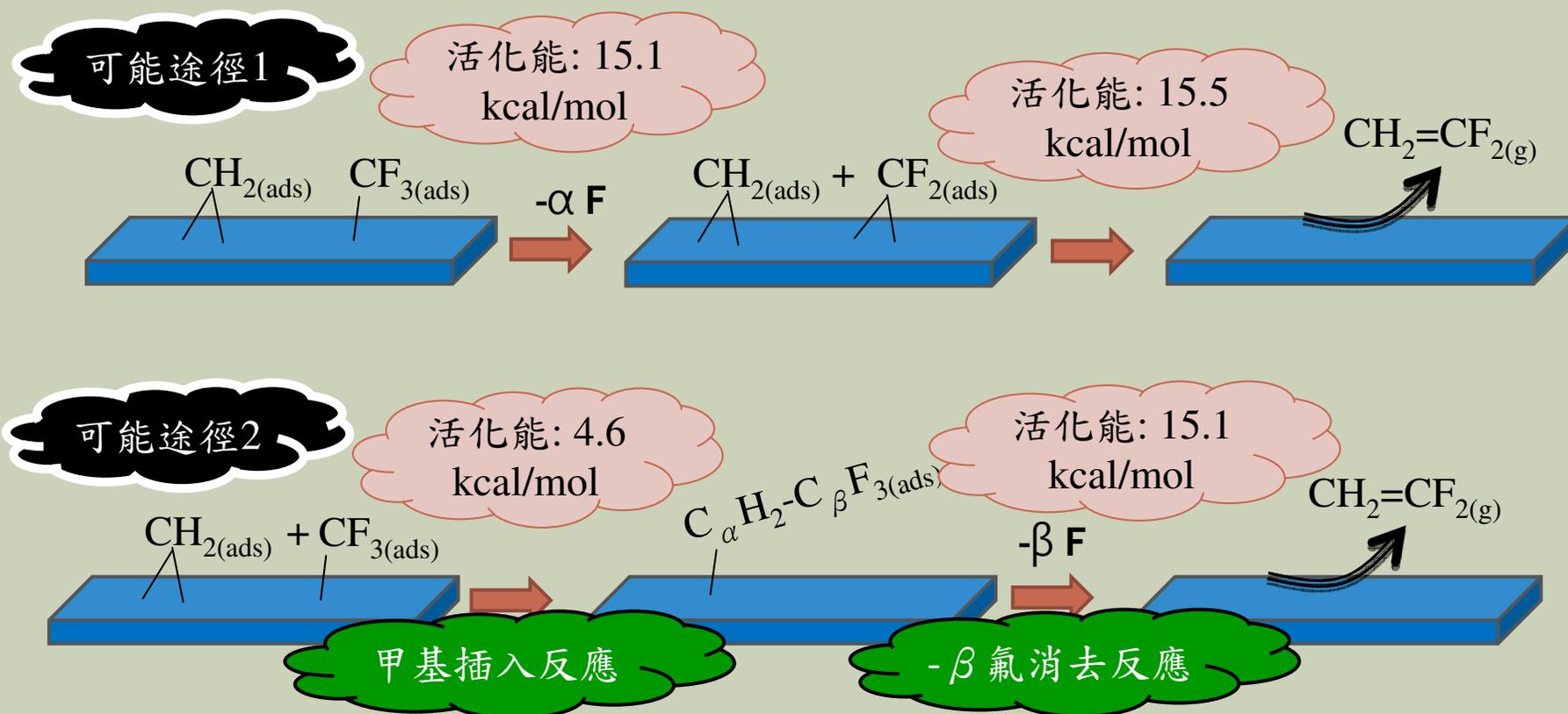


可能途徑2



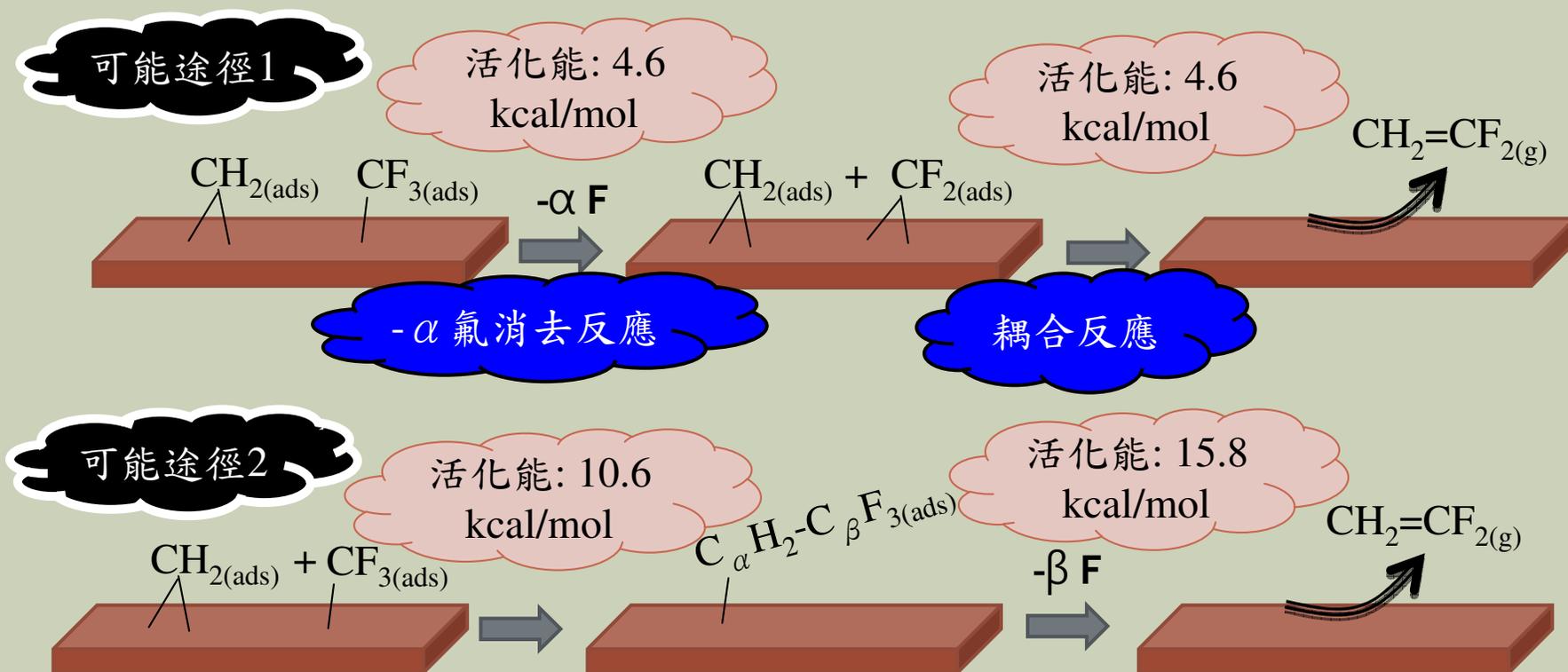
# 有機分子在金屬表面上的催化反應

- 不同金屬表面的催化反應特性
- 二氟乙烯( $\text{CH}_2=\text{CF}_2(\text{g})$ )在銀表面上的合成催化模擬計算



# 有機分子在金屬表面上的催化反應

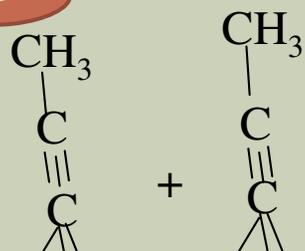
- 不同金屬表面的催化反應特性
- 二氟乙烯( $\text{CH}_2=\text{CF}_2(\text{g})$ )在銅表面上的合成催化模擬計算



# 有機分子在金屬表面上的催化反應

- 不同混成軌域分子(sp & sp<sup>3</sup>)在金屬表面上的催化反應特性
- 2,4-二己烯(H<sub>3</sub>CC≡C-C≡CCH<sub>3(g)</sub>)與丁烷(CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>)  
在銀表面上的催化合成模擬計算

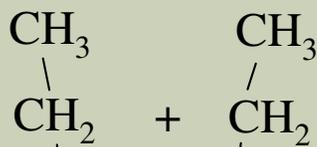
sp 耦合反應



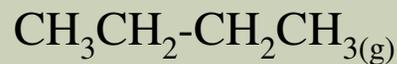
活化能: 30.8  
kcal/mol



sp<sup>3</sup> 耦合反應

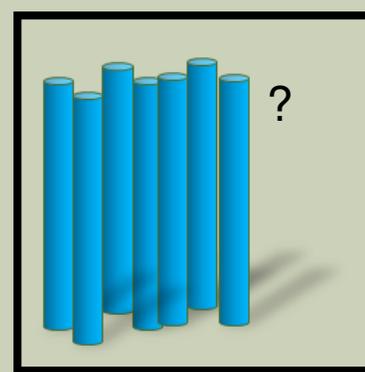
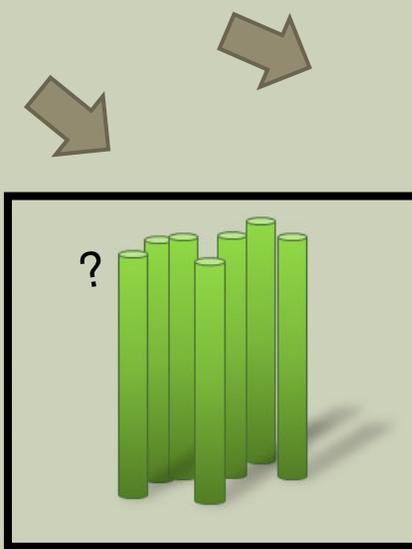
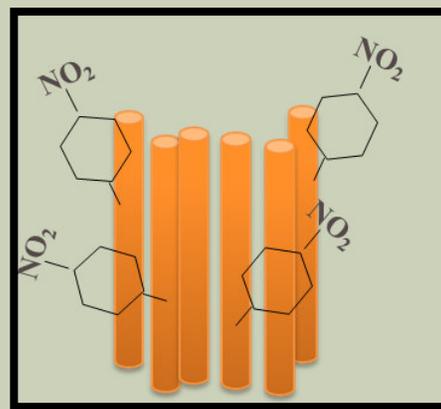
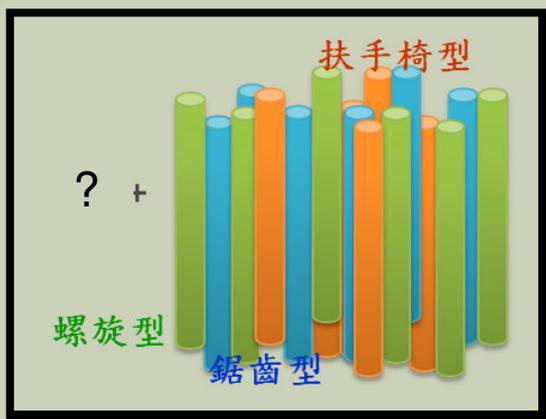


活化能: 16.1  
kcal/mol



# 化學分子與材料的模擬

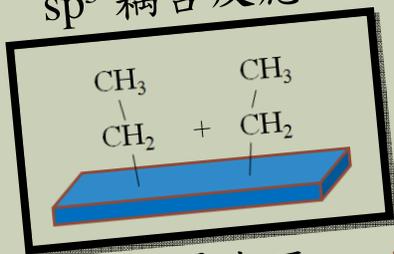
有機分子在奈米碳管上的選擇反應



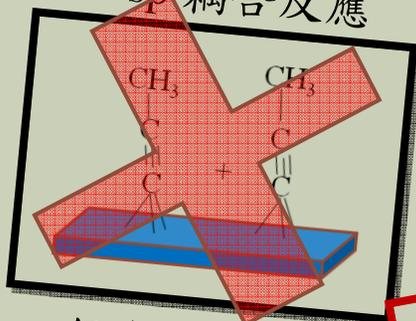
# 化學分子與材料的模擬

有機分子在金屬表面上的催化反應

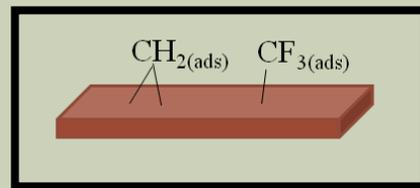
sp<sup>3</sup> 耦合反應



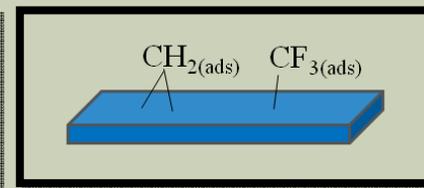
sp 耦合反應



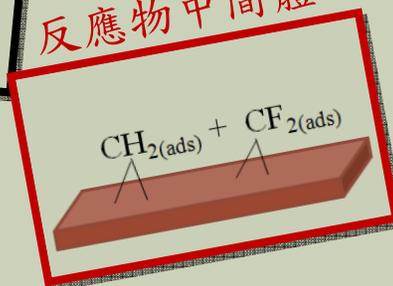
銅金屬表面



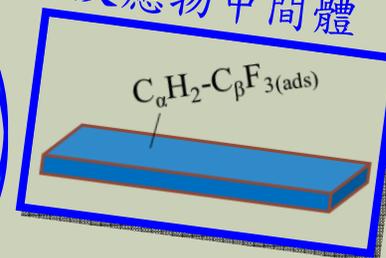
銀金屬表面



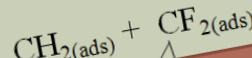
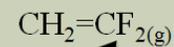
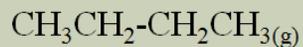
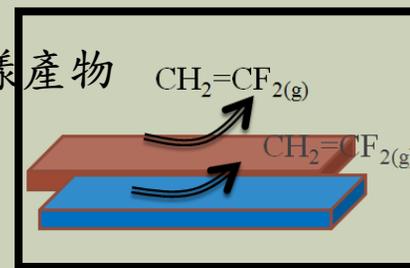
反應物中間體



反應物中間體



生成同樣產物



化學分子與材料結構  
圖形介面的開發

<http://163.13.115.23:8080/MMQS/index.jsp>

奈米碳管結構產生器

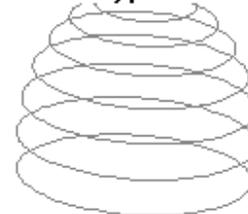
化學分子與  
資料庫

邀請大家一同來進入化學材料  
電腦模擬的世界

淡江大學化學系歡  
迎您的加入

有機分子  
紅外光譜模擬平台

Unregistered HyperCam 2



-H2N2  
C3H6  
C3H6  
C3H6  
C3H6  
C3H6  
C2H5N