

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

物理化學及分析化學研究發展及推動小組

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2114-M-002-002-

執行期間：91年01月01日至91年12月31日

執行單位：國立臺灣大學化學系暨研究所

計畫主持人：周必泰

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 9 月 24 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫 ☒ 成果報告 ☐ 中期

中進度
報告

物理化學及分析化學研究發展及推動小組

計畫類別：☒ 個別型計畫 ☐ 整合型計畫

計畫編號：NSC 91— 2114 — M — 002 —
002

執行期間： 91 年 1 月 1 日 至 91 年 12 月 31 日

計畫主持人：周必泰教授

共同主持人：

計畫參與人員：

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)：☒ 精簡報告 ☐ 完整報告

執行單位：台灣大學化學系

中 華 民 國 92 年 9 月 23 日

一、現況綜述

自然科學包括數學、統計學、物理學、化學、地球科學、大氣科學、海洋科學等七項學門之基礎研究，除學門本身外，自然處在本年度持續朝加強學門整合以及推動重點研究兩方面努力。不論任何研究，自然處都是以能夠提昇國家整體科技水準為中長程的目標。在業務推動上，是以自然科學研發方向之擬定、引導、協調，研究計畫之評估、審查、補助、考核，研究人才之培育、延攬、獎勵，以及整體自然科學之創新與永續發展為施政方針。

在政府及學術界多年來的共同努力下，已有一定之基礎及成果，其主要在資源投入方面，補助研究之經費，由八十七年度的新台幣11.60億到九十一年度的21.77億元，五年來增加了百分之八十七的經費。依性質略分為一般專題計畫、重點研究計畫及其他推動規劃項目三大類。一般專題計畫方面，九十一年度專題計畫共申請1984件，核定通過1499件，通過率為76%，補助經費共193,830萬元，同一期間之專題研究計畫件數由八十七年度的1,371件到91年度的1,576件，增加幅度是百分之十五。

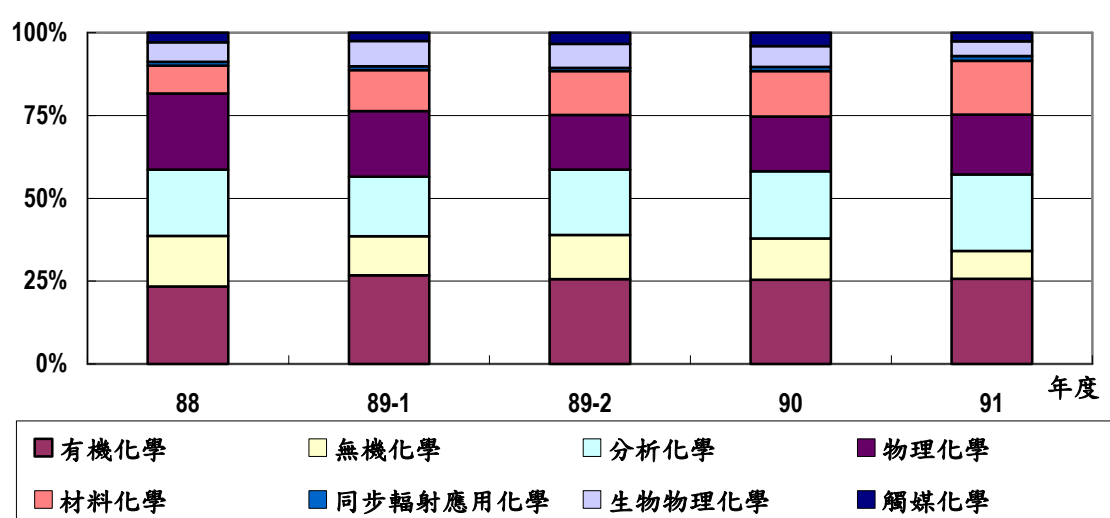
二、化學學門次領域研究概況

九十一年度化學學門研究計畫（不含隨到隨審之新聘人員計畫及跨領域奈米科技計畫）共通過418件，核定金額為64,216萬元，與去年(61,983萬元)相比較，在經費上雖然增加了3.6%，但顯然已經比89~90年度6.4%幅度的成長少了近一倍。大家應可以理解這趨勢和國內經濟近年來的負成長率有間接性的關聯。然在國家經濟拮据困境下，尤能有高於百分之三的經費成長，可以凸顯出近年來政府提昇科研的決心。

各次領域的經費分佈情形而言，有機化學領域佔27%仍與以往趨勢相同，高居各領域之冠，但由計畫的研就方向中可以窺知國內有部分機化學研究者也逐漸由較傳統之方法學(methodology)或全合成研究，轉型至較應用層面的方向，例如有機發光體，分子辨識系統等等。順應潮流的使然，也將可以預期未來跨領域整合的契機將大增，這應是國內科研界的良性發展現象。值得注意的是分析化學領域毋論在申

請經費或件數上已連續兩年超越物理化學領域，躍升為第二。反之，物理化學，尤其是實驗導向之相關領域有負成長的趨勢。和國內近年間新成立化學相關系所及新進人員的成長交互比對後，不難發現一個關聯性，那就是從事分析領域以及理論化學的研究人員明顯增加。這現象應和學校，尤其是新興系所未來的定位，發展，預算經費以及學生來源有密切關係。

另一方面，材料化學亦因學術界配合國際科研趨勢，獲重視程度從前四年之 8% 增至今年的 16%，這個數據可以用來和無機領域的 12% (90 年度) → 8% (91 年度) 做一個消長上的比對。無機領域最能直接切入當前材料化學發展方向。其餘各次領域的經費百分比或依計畫件數增減略有變動，均屬常態性分佈。



圖四：近五年化學學門次領域研究計畫經費之比重

(資料來源：1.國科會統計資料庫AS51500程式2.本研究整理)

1. 有機化學

有機化學領域無論在教學或者研究方面，可說是國內發展最悠久、最健全、穩定的領域。其系統化的邏輯以及相當少量的數學背景，也是化學相關學生最能夠直接投入以及接受的領域。五年以前，有機化學的申請計畫，其研究方向大半著重於方法演進 (methodology) 以及機遇性的研究 (突然合成某種新的化合物)。具設計策略的全合成 (total synthesis) 研究，受限於國內整個研究團隊的規模以及人力素質，相關領域計畫研究者比較少觸及。但近年來一些新近人員帶動了應用方面的合成發展，諸如非線性光學分子的合成、有機電致發光元件、陽光染料電池元件以及藥物合成及

生化分子辨識等等。由近年國家型計畫、卓越計畫的申請領域中，可以歸納出有機化學是所有化學領域中最積極嘗試走向跨領域研究的研究群。未來若能和材料製程、生化領域找出相互合作的途徑，則前景樂觀。

2. 無機化學

受材料科研的蓬勃發展之賜，無機化學近年來在論文數量的提昇上成果輝煌。尤其水熱法(hydrothermal reaction)的盛行，造成新材料前仆後繼的被合成出來。由於國內在材料鑑定的建制上，包括儀器的更新以及相關技術人員的運作均已臻完善，是故新分子的產生及結構鑑定已比十餘年前又縮短了大半的時間。以元素種類為出發點的話，則無機化學的可變性(flexibility)又比純有機合成的方向寬廣太多。而結合有機、無機的有機金屬發展潛力更是無遠弗屆。

由各種角度來衡量，無機化學合成應是最被小型研究規模的大學化學系所看好的未來研究領域，原因是它所需的研究經費不高，結構測試方面可以完全仰賴公用儀器甚至貴重儀器中心，最重要的是如以水熱法而言，需要的是人力的加成堆積，對於素質不高但用功、有興趣做的學生，所顯現的成果最明顯。具我們非正式的統計，最近幾年在年輕一輩的無機研究人員中表現較好的，有相當大的比例都不是在名門學校，反而是在新興的國立大學甚至小規模的私立學校。近年來有相當多的無機研究群積極找尋和材料物理領域人員合作，尤其在顯微技術方面的人才，俾能充分在基本性質以及應用上連結，而在未來發展上有所突破。這觀點也是當前無機界最需要思維的進步空間，否則空有令人驚嘆的「量」上發展，在缺乏跨領域的激盪下，論文層次上會較難有所突破。

3. 分析化學

製作電泳晶片應用於連接聚合聯鎖反應產物的臨床分析，及製作應用於蛋白質分析的整合型晶片。另也將固相萃取(solid-phase extraction)以及微透析膜分別整合在電泳晶片上，這可大大的增加濃縮、及時取樣等分析功能，也是朝向微全程分析的重要一大步。如果能達到完全整合型且具微小化全自動分析的功能，未來實驗室晶片在生化分析之生物活性鑑定及藥物的快速篩選、組合化學、臨床醫學上神經傳導物質的即時偵測，甚至環境、食品的檢測上，將會是一項重要的利器，對未來檢驗分析實驗室會發生革命性的影響 具有連續進樣之微流體電泳晶片

研究可應用於生物分子辨識研究的工具—親和力毛細管電泳

(affinity capillary electrophoresis)。這種利用毛細管電泳分離具生物辨識能力及免疫專一性物質，是為親和力毛細管電泳的特殊應用之一。這種用量微少且分析快速的技術，相信未來在臨床疾病檢測上將扮演重要的角色。在毛細管電泳研究上，成功的發展線上濃縮與分離蛋白質的技術，以及從平板凝膠上回收蛋白質，再送入質譜進行分析。完成以氫氙互換結合高解析度傅立葉轉換質譜法研究蛋白質的結構變化。

在生物分子辨識研究領域以及組合化學上的應用上亦有優異的成果。各種感測器的研發，例如免疫感測器，應用組合化學庫篩選仿生物辨識材料與多工模組陣列氣體感測器技術研發。

「奈米粒子於生物檢測及分析上的應用」，所發展出的醣類金奈米粒子，已可應用到細菌的標定。這項新奈米材料，對於疾病上的檢測，提供了一項簡單且快速之檢驗方式，另外醣類金奈米粒子無生物毒性，且非常穩定。現在研究團隊正在運用這項新科技，嘗試用奈米粒子在老鼠上產生新抗體。未來對醫學上的免疫分析技術，將產生重大的影響。另發展出不同顏色之功能化二、六族半導體粒子，再將這些半導體粒子與生物檢測上使用的抗體或 DNA 結合，可以用來做為細胞器上的標定、DNA 序列上的鑑定，由於半導體奈米粒子上特殊的光學性質，這項科技將可取代現有的螢光標定物質，提供一個多顏色快速且精準的生物檢測技術。

4. 材料化學

材料化學對國內化學領域而言，主要為合成化學的綜合體，即視其結果是否為應用材料而定義之。更嚴謹的說，材料化學目前是依附在國內其他化學領域來歸屬，舉例而言，台大牟中原教授在化學系被歸屬於一半無機化學，一半物理化學，中正王崇人教授、師大陳家俊教授以及清大趙桂蓉教授，雖都是在從事材料化學合成但卻都規範在物理化學領域，中興林寬鉅教授屬無機化學領域，中研院陳錦地研究員做 OLED 材料元件，在化學中心的歸類中屬於有機化學。是故材料化學泛指產物的定義，在領域上似乎渾沌不清的。而國內化學界在材料的貢獻一般也是以合成、結構分析為主，在製程方面大多需仰賴化工、電機以及其他材料工科領域的配合。近年來化研界有鑒於研究的方向以及目標和工科的迥異，已經有些有識之士，包括中研院陶雨台教授、陸天堯教授、交大陳金鑫教授等研究者，不僅在合成上努力，亦在製程上花了相當大的投資，尤其是在真空蒸鍍，單分子膜以及 OLED 元件的製備上。然而真正比較複雜的元件製程，以及外加配合裝置，由

於涉及了電路、光阻等複雜系統的設計，超出一般化學研究人員的基本知識範圍，故未來跨領域的合作還是充分必要的一途。國內材料化學將來要走的應是更高階層的研究方向，亦即有理論基礎的設計研究(rational design)。這方面研究，包括超分子或奈米基材等，目前都還比較在摸索的階段，未來的發展空間還是無可限量。據此，國內目前亂槍打鳥式的材料合成化學，在未來幾年內可能面臨轉型的叉路口，這一方面就如同國際科研目前走向一樣，未來需要跨領域像物理化學人才的積極投入。另外，我國業界發展型態基本上是以光電產業為主軸，材料化學研究「質」方面的提昇絕對直接影響到國內產業升級的原動力。是故未來如何積極帶動此方面研究的整合效益，是一個非常重要的議題。

5. 物理化學

由十年來國際間熱門研究領域中觀之，可以了解未來化學和物理、生化、材料跨領域鍵結的橋樑無疑就是物理化學。一九九〇年初開始，國際間物理化學領域的主要研究方向就出現重大的變革。這轉變在一些大型研究機構，如貝爾、IBM 等實驗室以及美國知名大學如柏克萊加大、MIT 等更為明顯。舉例而言，當時在物化界快速光譜動力學表現傑出的一些國際知名人士，如 L. E. Brus, K. E. Eisensthal, M. F. El-Sayed 以及 R. Haustrasser 等，皆紛紛往跨領域的奈米基材、顯微技術或生物物理方面轉型，幾年下來也都有令人驚嘆的研究成果！反觀國內，以近五年來搜尋申請國科會計畫題目的統計結果，我們可以大膽的結論，相較於其他三個傳統領域，物理化學轉型發展的意願實在是保守許多。轉型成功如台大牟中原教授、清大趙桂蓉教授以及中正王崇人教授等研究者畢竟是相當少數，大多數皆守著原來領域做守成的工作。

近年來在國際甚至國內科研方向以著重在生化材料方面發展的同時，國內物理化學領域在墨守成規下將呈現快速式微的現象。以實驗物化而言，國立大學物理化學成員分佈 65-70% 集中在台北地區，重點包括中研院原分所、台灣大學、凝態中心等等，15% 分佈在新竹清華、交大地區，其他零星的 10% 分散在中南部地區，私立學校約佔~5-10%，主要也是在北部地區，與其他領域還算是均勻分佈的情形比較起來呈現非常突兀的分佈，詳見圖五及圖六。另外，我們也發現近二、三年來新進物化人員的屬性幾乎八成以上皆集中在純理論計算專才，據調查絕大部份的原因是學校在經費縮減下，系所寧可聘用不需開辦費(start-up fund)的理論計算領域，也不願投下大筆經費來支持實驗物化的成長。

以上思維在理論、實驗互相作用的前提下本無可厚非。然據我們對

近一、二年的統計，國內理論物化的屬性幾乎清一色是“計算化學”，亦即利用現成軟體來做分子結構最佳化以及反應熱、動力學的計算。學生只要懂得指令，基本上一定有成果。

三、國際合作研究計畫

除了與美國進行電子自旋光譜與限制空間內的化學研究及 IPEX 蛋白質之結構與動態研究。更與立陶宛、拉脫維亞建立三邊合作進行分子體系之電荷分離與傳遞：在溶液相分子團及固相狀態的比較研究。另外國際合作計畫還包括

1、中加國際合作：

- (1) 奈米結構與限制空間內的化學研究：結合理論與實驗研究探討限制空間內的化學，研究內容包含奈米孔道中的金屬特性、發冷光半導體在奈米孔洞性材料中之結構與光特性研究及光抽運極化氙-129 實驗設備之建構與應用。目前業已完成份分子動力學計算程式及激光抽運自旋交換極化氙-129 實驗設備之建構與測試，成功地提升氙-129 之極化率達約 5,000 倍，並已開始應用高極化性氙-129 核磁共振技術研究氙氣在修飾前後 M41S 及 SBA-15 等奈米級孔洞性材料、薄膜等限制空間內之物理化學性質，包含其化學位移、吸附及擴散現象等。
- (2) 新型過渡金屬氣相沉積前驅物的研製研究：與加拿大國家研究委員會(NRC)的實驗室合作，進行一系列過渡金屬氣相沉積前驅物的研製研究。首先經由有機合成可以合成一系列含多芽配位基的有機官能團，包含 β -二酮基，酮亞胺，醇胺，醇亞胺與唑等等，再將這團些官能基化合物反應，會形成具有高揮發性的有機金屬配位化合物。這些屬配位化合物可進一步利用化學氣相沉積法，以鍍製金屬或金屬氧化物薄膜，如鈦、鋁和銅等。這些合作研究，均已有了不錯的成果發表，並獲得核准專利。
- (3) 有機光電化合物電子態能量轉移—衰減動力學及與分解途徑關係研究：與加拿大國家實驗室史岱詩機構之飛秒研究群進行有機光電化合物之快速反應之機制研究，在電子激態間之能量轉移有時速率相當快速，需要發展有利之技術加以偵測。對某些結構及有機取代物，其能量轉移傾向衰減回電子基態，藉著溶劑帶走額外能量，相對之下穩定性較高，有些

化合物則易造成異構化或分解，形成光不穩定性，這些基本性質之探討對光電材料或分子開關之製備有深遠之影響。

- (4) 半導體氮(磷)化物化學蒸鍍中的自由基及中間物之結構，動力學及能階研究：前一期(1999,8-2002,7)加拿大 NRC 史岱詩機構之分子科學研究所 (Stacie Institute for Molecular Sciences, SIMS) 與清華大學化學系之良好合作關係，目前進行第二階段的合作，初期將先以各種光譜學方法研究重要中間物如： Si_2N ， Si_2P ， Si_2H ，及 PH_2 ，並以各種光譜學方法研究之；同時，也將研究重要反應的動力學。計畫中理論計算亦扮演重要角色，協助光譜的指認及化學反應的瞭解。

2、中法國際合作：由法方 CNRS 在 Aime Cotton 實驗室利用交叉分子束進行鉍與氫氣之動態行為的觀測，我方則利用在台大化學系/原分所內的實驗室在反應腔內觀測鉀、鈉、鋰等其他金屬之反應。雙方在研究上均有很大的突破。在合作期間曾經舉辦過兩次中法氣態動力學的會議，一次在法國巴黎，一次則在台北。此外，針對鹼金族與氫氣反應的主題，中法雙方共同發表成果在 *International Reviews in Physical Chemistry* (2002)，這是至今在這一主題最為完整詳盡之回顧論文。

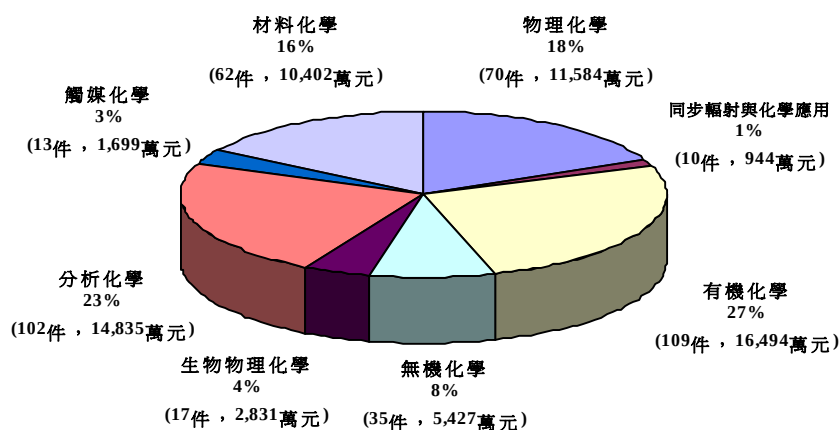
3、中波國際合作：波蘭科學院係該國於各學術領域之研發重鎮，其中利用高壓系統合成儲氫合金材料之研究上已累積相當豐富之經驗。藉由「利用高壓合成新材料及其特性分析」之國際合作研究計畫可望達成之目標包括：高壓($\sim 1.5\text{GPa}$)合成系統之建立有助擴展研發材料之新領域、藉本研究中獲致之經驗與知識有助國內發展高壓樣品合成之技術及訓練與培養國內於高壓系統研究領域之人員。

四、未來展望

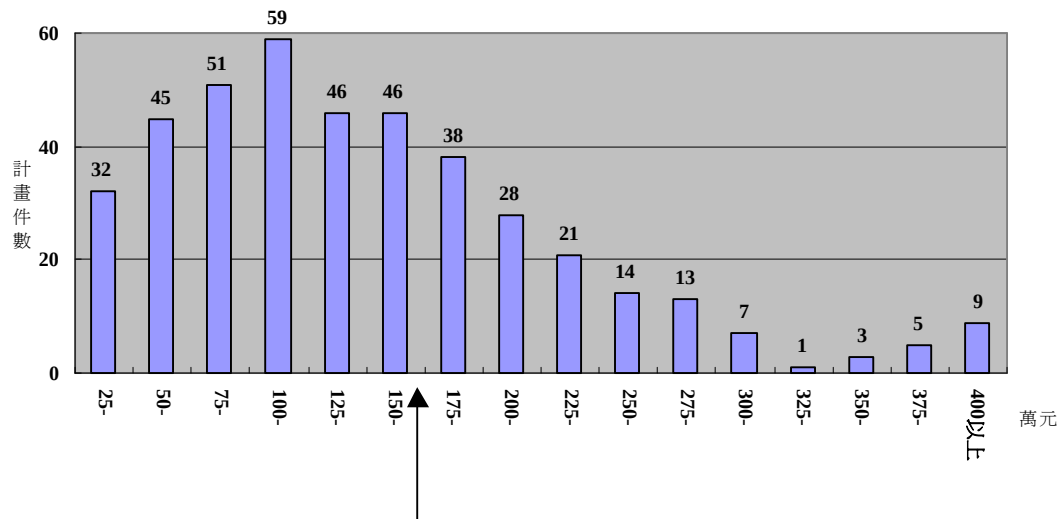
自然科學研究推動的目標在於鞏固與開拓自然科學理論基礎、加強自然科學與科技的關聯、培育自然科學基礎科技人才，隨時檢視各領域的成熟度，適時提出自然科學各領域重點研究方向使從長期性與合作性的領域中，逐漸培養出自然科學領域之領導人才。自然科學研究推動包含了數學、統計、物理、化學、地科、大氣、海洋等學門，其研究動機源自人類對自然科學之追求，進而改善人類之生活品質、對社會經濟發展有所貢獻、解決地球規模諸問題、擴大人類的智慧資

源。在問題評析上達到 1.闡明科學或理論的方法，將原理、現象解釋明白；2.成功開發自然科學相關技術以達成一定的目標，例如指首次完成試作；3.將自然科學相關技術達到實用化，即在經濟性已有眉目而實際加以使用，例如指首次實際完成實用規模者；4.進而將其技術達到普及，即已實用化者廣為一般所使用。欲達成總目標未來則需加強 1.研究者、技術者及研究支援者的養成與確保；2.促進人才交流、不同領域間的合作等制度之擴充；3.研究發展設施與設備的整備及開放。預期將可 1.落實自然科學重點研究之推動；2.促進科技研究成果之推廣、專利申請及技術轉移；3.協助工業界研究發展，提供有關技術性服務，並推動學、研、產交流，以進行合作研發工作；4.研定研究發展方向及重點項目，考核研究進度及成果；5.促進學術交流；6.提供完善圖書資料服務，提昇研究環境。

91年度化學學門次領域研究計畫經費分佈圖



91年度化學研究計畫補助經費級距分佈



91年度化學研究計畫件數單位分佈

