



2020「中技社科技獎學金」

2020 CTCI Foundation Science and Technology Scholarship

研究獎學金

Research Scholarship



固態催化、鈣鈦礦之光學性質及機器學習預測螢光放光波長之計算化學研究

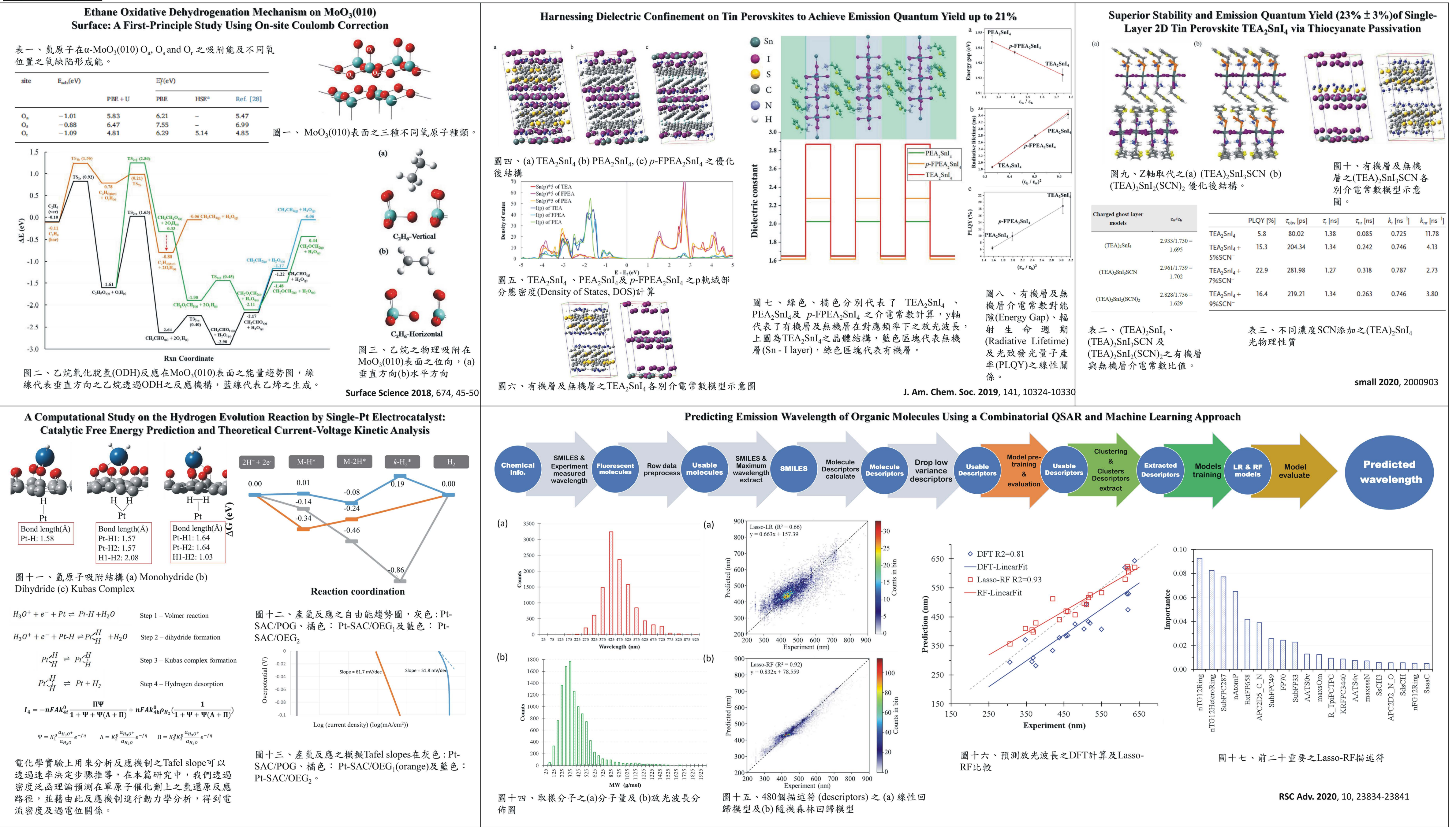
Computational Studies: Catalysis on Solid, Optical Properties of Perovskites and Emission Wavelength Prediction by Machine Learning



國立臺灣師範大學 化學系 博士班二年級 廖振成
指導教授 蔡明剛 教授

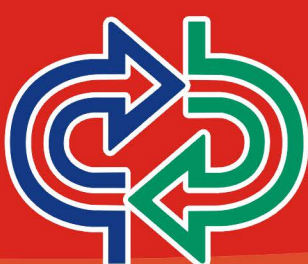
研究重點 計算化學(Computational Chemistry)是化學領域的分支之一，影響了現今社會甚劇。透過計算化學，新的材料及化合物可以不耗費實驗的成本而有初步的發現，亦幫助了實驗學家及業界設計高效的產品。在量子化學及熱力學的協助下，計算化學亦可以了解原子、分子、材料及聚合物，如：蛋白質、高分子...等之基礎性質，而在化學反應部分，亦可以得知其可能的反應機構及可能的產物。在本篇報告中，討論了數項計算化學之主題，1. 乙烷在氧化鉬 MoO_3 表面之氧化脫氫反應(Oxidative Dehydrogenation Reaction)，可以得知偏好的催化劑反應位置及其可能的主要產物。2. 產氫反應(Hydrogen Evolution Reaction)在單原子鉑催化劑之反應機構探討，並透過動力學分析得知其塔佛斜率(Tafel Slope)。3. 鹵素取代及SCN取代之 TEA_2SnI_4 鈣鈦礦(Perovskite)材料之介電常數(Dielectric Constant)計算，並討論有機層及無機層介電常數對光致發光量子產率(Photoluminescence quantum yield, PLQY)之關係。4. 透定量構效關係過(Quantitative structure-activity relationship, QSAR)及機器學習(Machine Learning)預測有機分子之螢光放光波長。

研究成果



研究生活與心得

從專題生開始，加入蔡明剛教授實驗室已經八年，非常感謝蔡教授的指導，並讓我累積了多次與實驗合作的機會，經由計算化學的協助，從量子化學到機器學習都可以提供產業界及學術界研究、合成的方向，並能針對欲研究的系統進行模型設計，透過計算其基礎性質得以解釋或驗證實驗研究上觀察到的現象。最後，非常感謝財團法人中技社提供的研究獎學金，對我來說是很大的肯定，期許自己能在計算化學領域精進，透過自身所學回饋給國家及社會。



財團法人中技社
CTCI FOUNDATION