

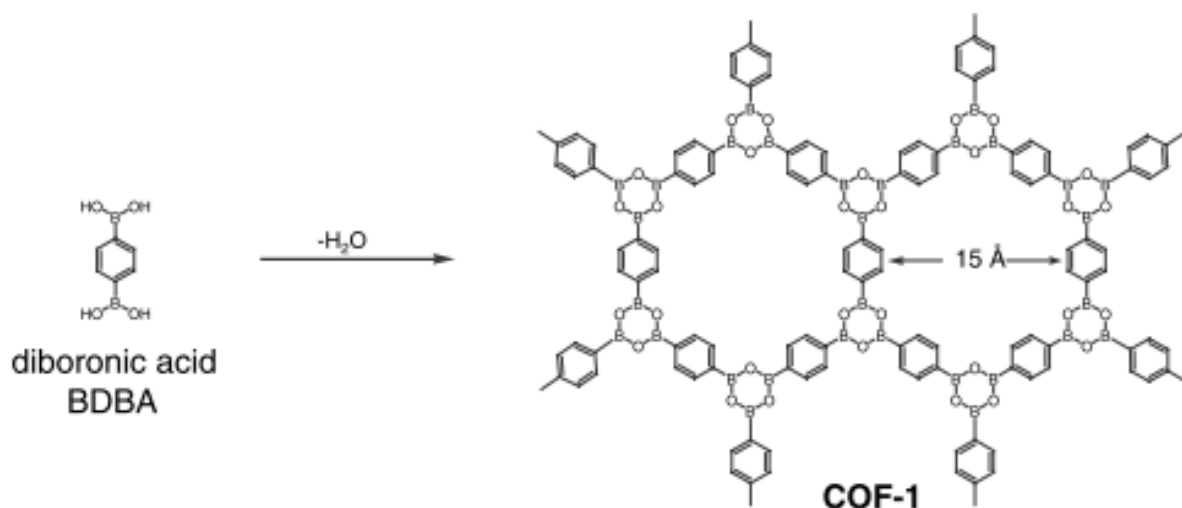
## 研究計畫內容

### (一)簡介：

本實驗室的研究主要是利用以有機分子與金屬來生成 MOF 或有機分子間形成 COF 等孔洞材料，這些孔洞材料可用於做氣體吸附或者催化等功用。目前我們致力於以更簡單的合成法合成表面積更大、毒性更小、功能更多的新型材料，並希望藉由理論計算的幫助能更有效率地得到更好的成果。我們對於一些非結晶性材料也希望藉理論方式反推得到晶體的結構。

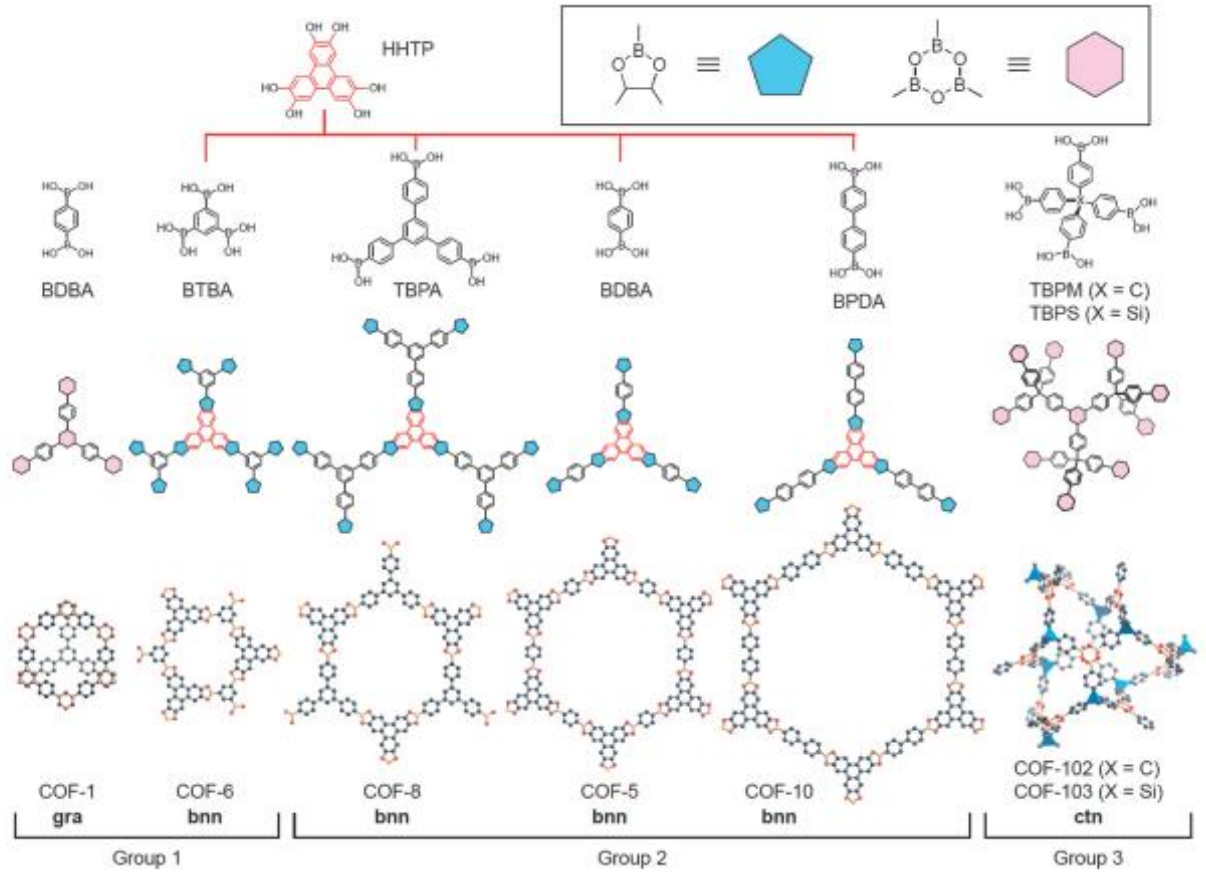
### (二)研究動機：

我們以 Science 2005, 310, 1166 為例，Omar M. Yaghi 教授成功設計合成出 COF-1，如下



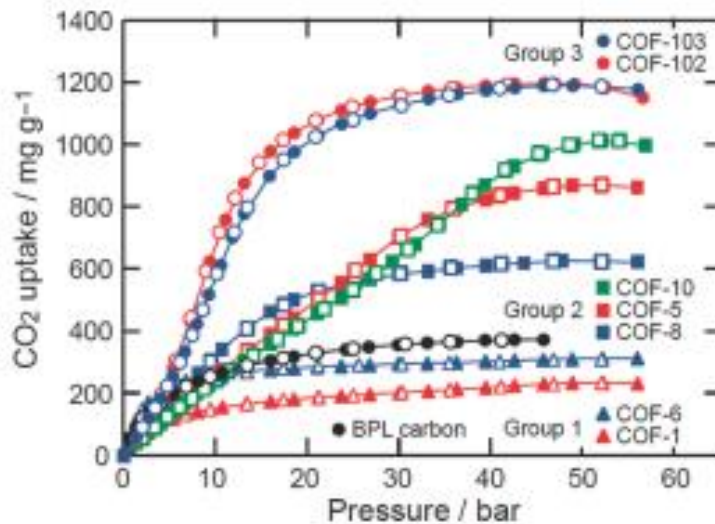
成功地為孔洞材料寫下新的一頁，短短四年 Omar M. Yaghi 已經合成

出上百種以上的 COF

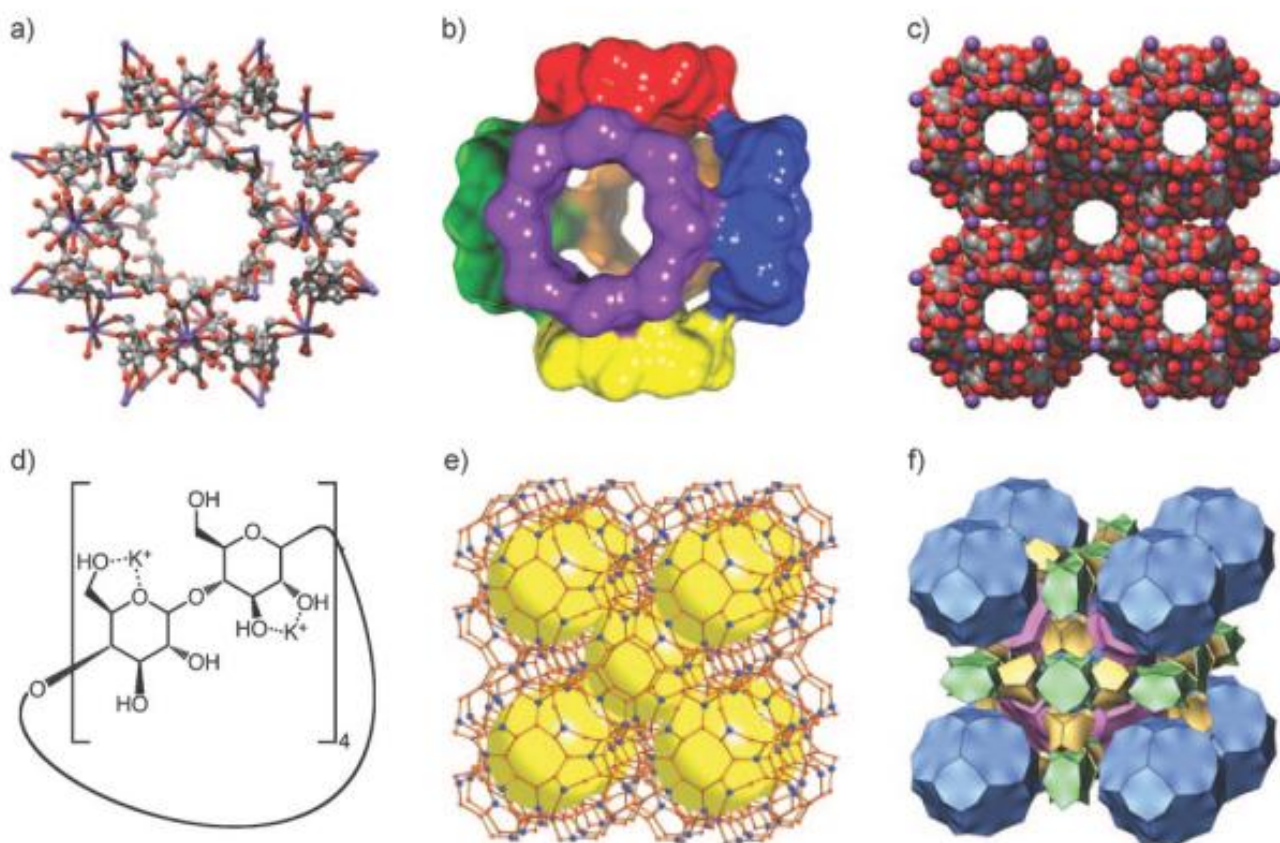


可知 COF 在近年有爆炸性的發展，更加深了我們對他的研究動機，而

且這些孔洞材料在氣體吸附上也比傳統的孔洞材料亮眼許多。



然而上述的材料其起始物是經過特別設計的 polyaromatic compounds，其價格非常高昂不適合於工業量產，且對人體有危害。為了改善此問題，我們引用 biomolecule 來合成我們的 frameworks，例如 *Angew. Chem. Int. Ed.* 2010, 49, 8630 – 8634，J. Fraser Stoddart 教授利用 cyclodextrin 合成生物可容性的孔洞材料，如下圖

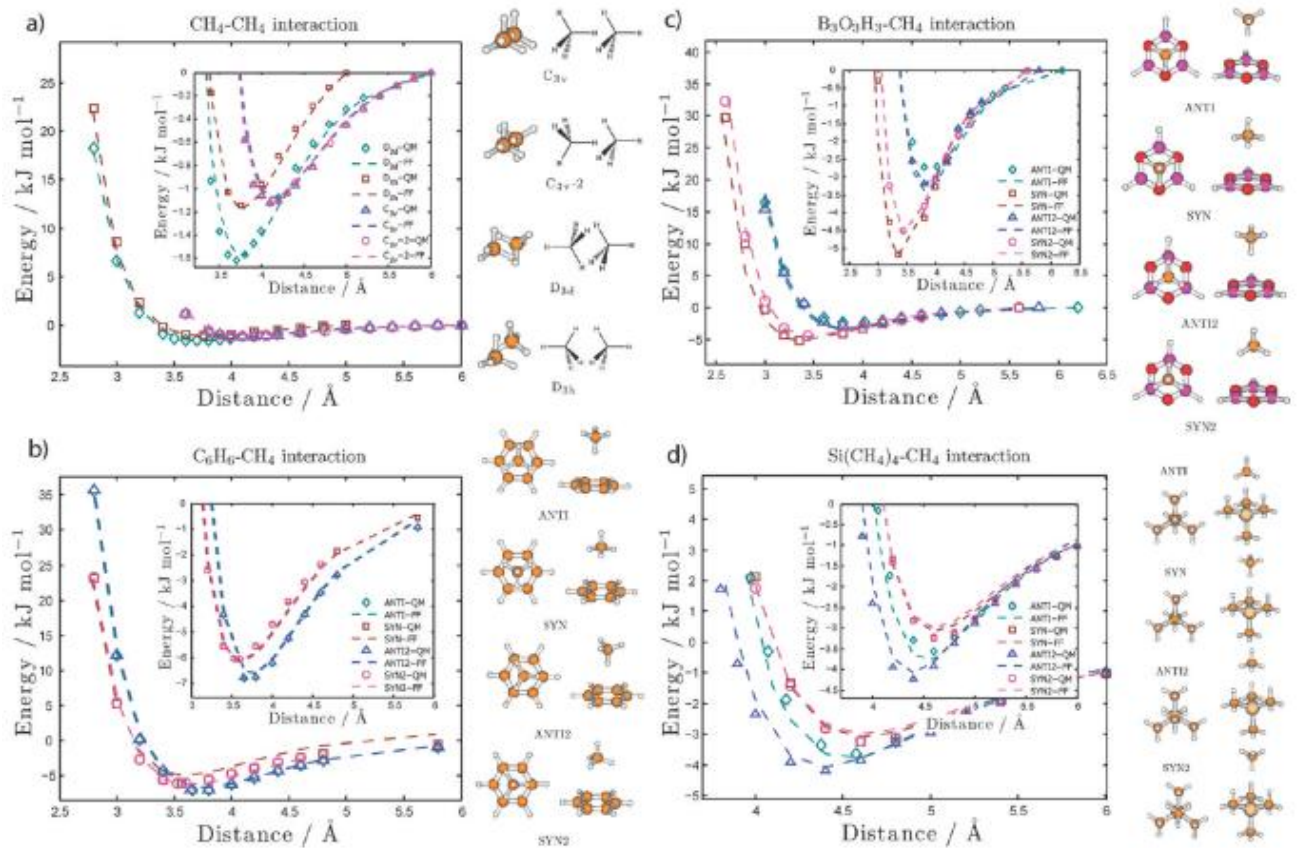


其表面積上雖沒有經設計過的亮眼，但還是比傳統材料好上許多。但是 biomolecule 其 framework 結構更加複雜而且大多拿不到晶體，所以我們可能須借助理論計算的方式來得到晶體結構。

### (三) 研究方法與步驟：

綜合上述，其一我們想藉由理論計算來得知結構 首先根我們會先採用不同計算模組，先將目標進行結構最佳化，決定計算的力場函數，最後採用 Monte Carlo 的方式決定平衡結構。其二，我們也可以用實驗得到的圖譜來反推晶體結構，之後再逐步選出最可能的結構。

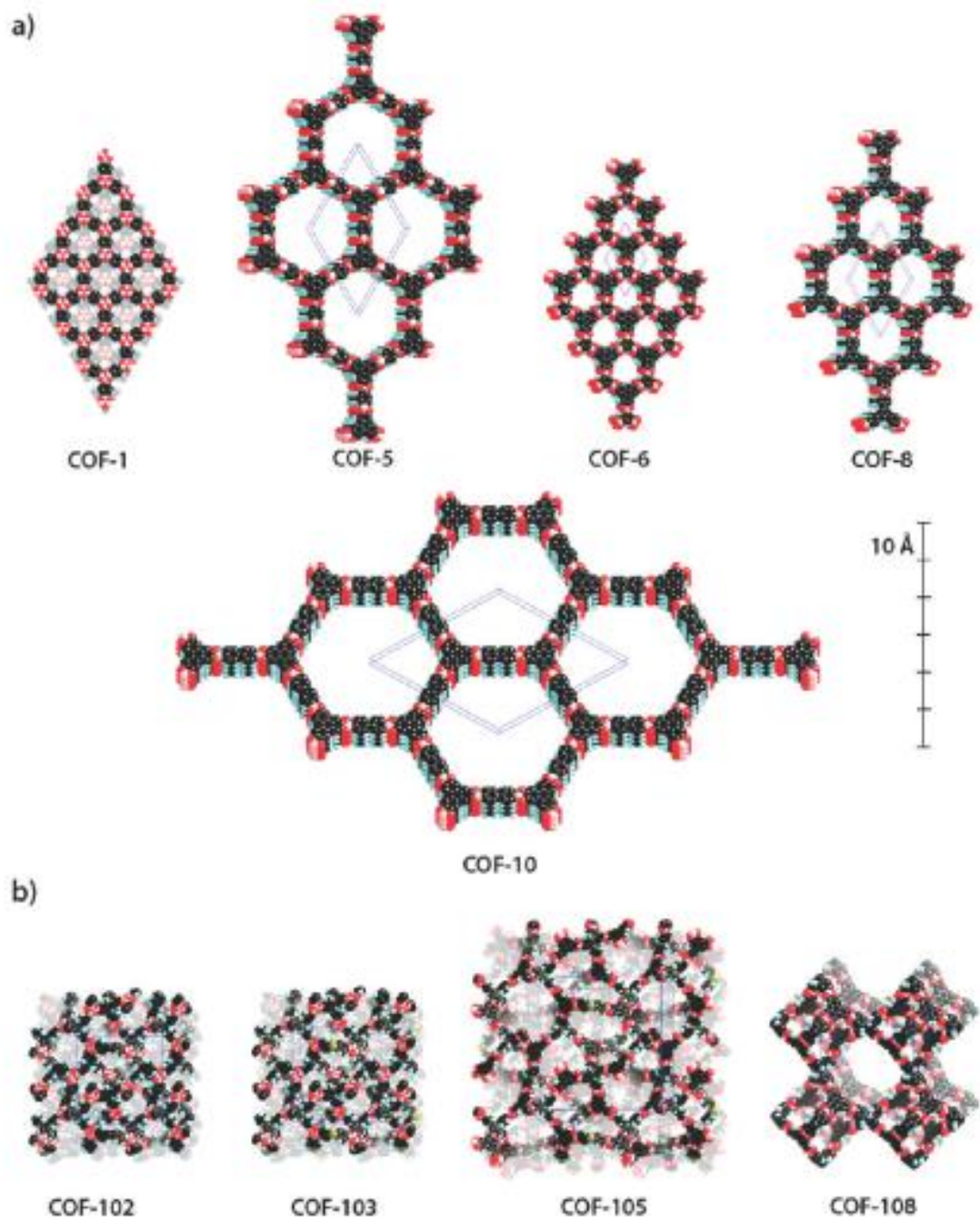
其計算力場可參考 *J. Phys. Chem. A* 2010, *114*, 10824 - 10833



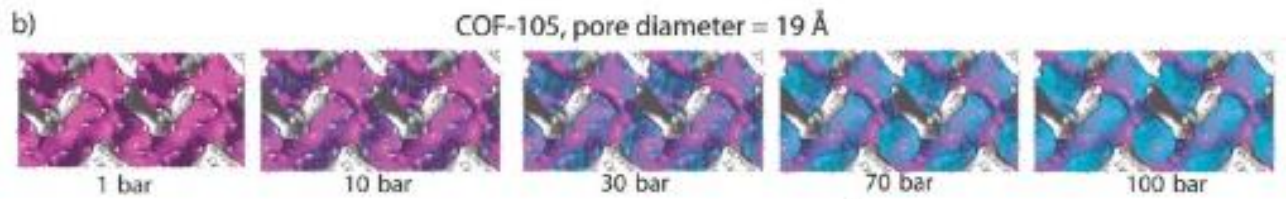
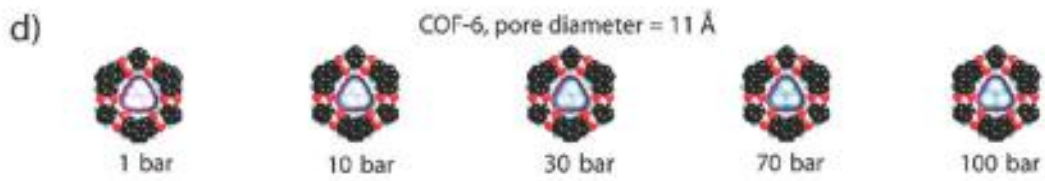
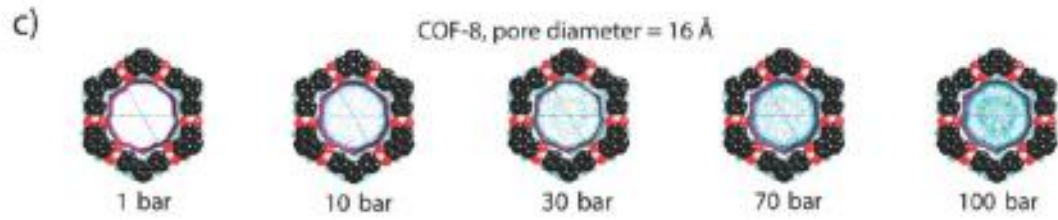
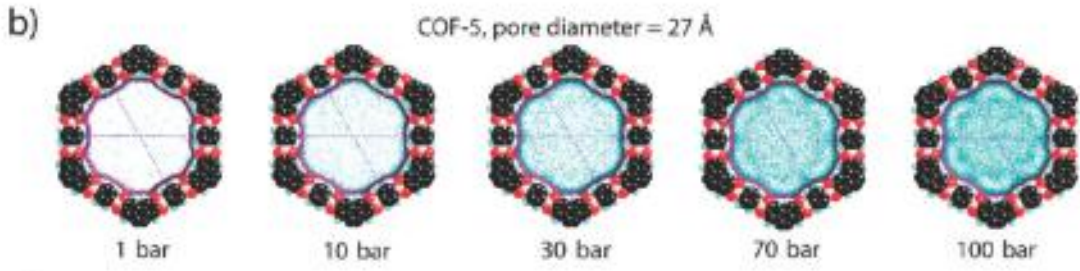
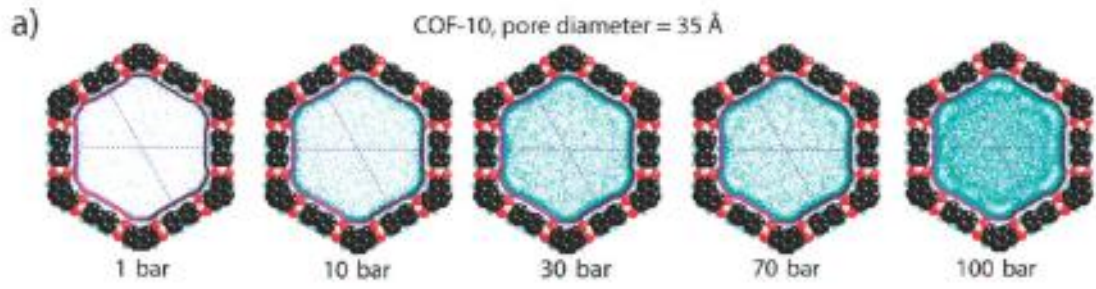


(四) 預期結果：

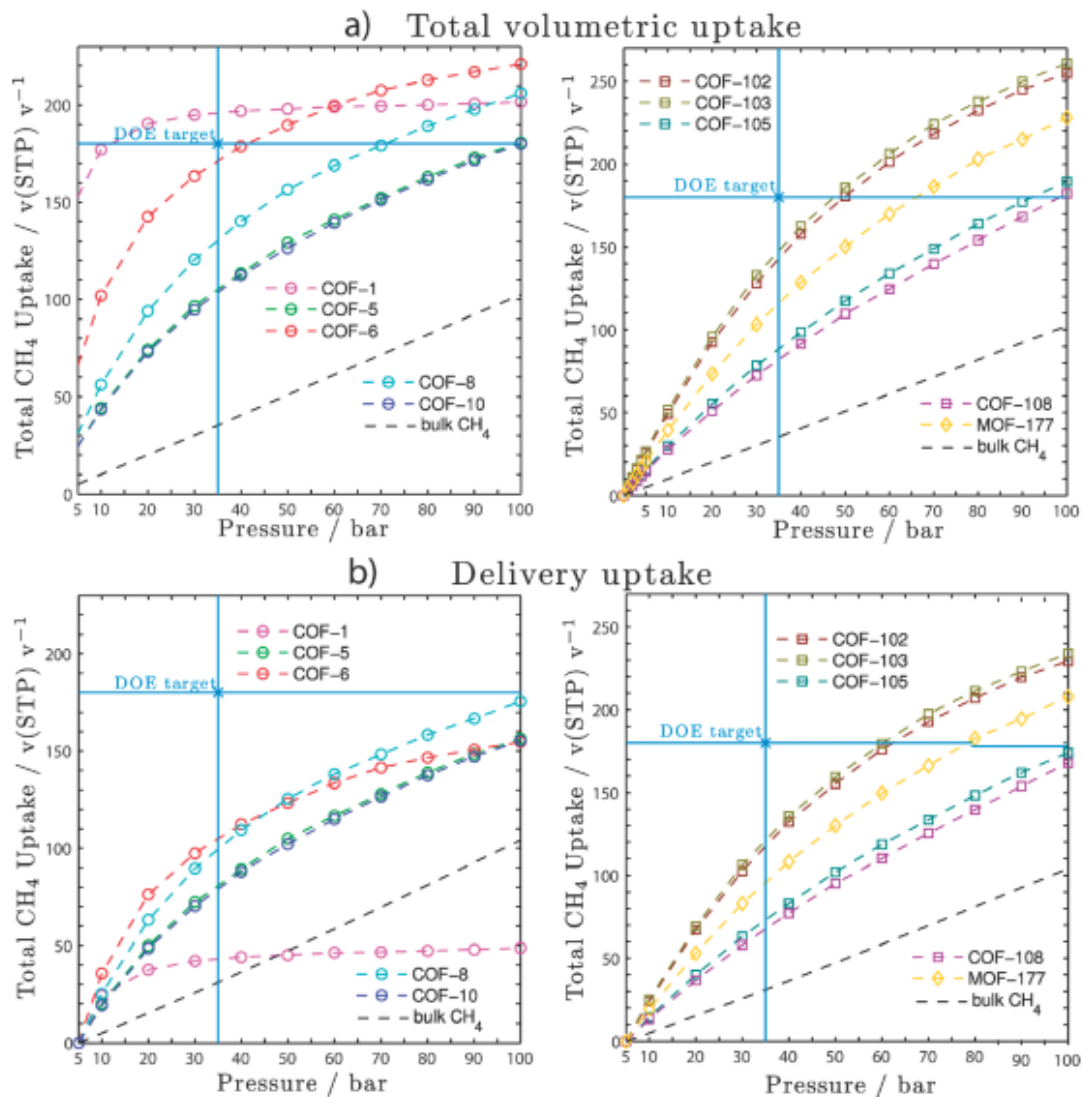
我們將會計算出各種不同的可能結構，定利用實驗數據選出最適合的一種。對於拿不到晶體的孔洞材料，也可以藉由實驗圖譜反推其參數與結構。如果拿不到好的圖譜，最後就採用 Monte Carlo 的方式決定平衡結構。如此一來未知的孔洞材料其結構也能明確化。下為例子



氣體的吸附行為也可以被模擬



表面積也能預測



(五)參考文獻：

1. Adrien P. Cote,\* Annabelle I. Benin, Nathan W. Ockwig, Michael O' Keefe, Adam J. Matzger, Omar M. Yaghi\*  
Science 2005, 310, 1166
2. Hiroyasu Furukawa\* and Omar M. Yaghi\*  
J. AM. CHEM. SOC. 2009, 131, 8875 - 8883

3. Jihyun An, Steven J. Geib, and Nathaniel L. Rosi\*  
J. AM. CHEM. SOC. 2009, 131, 8875 - 8883
4. Jihyun An, Steven J. Geib, and Nathaniel L. Rosi\*  
J. AM. CHEM. SOC. 2010, 132, 38 - 39
5. Langmuir 2006, 22, 9067-9074
6. Ronald A. Smaldone, Ross S. Forgan, Hiroyasu Furukawa,  
Jeremiah J. Gassensmith, Alexandra M. Z. Slawin, Omar M.  
Yaghi, and J. Fraser Stoddart\*  
Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 8630 - 8634
7. Jose´ L. Mendoza-Corte´s, Sang Soo Han, Hiroyasu Furukawa,  
Omar M. Yaghi,\* and William A. Goddard III\*  
*J. Phys. Chem. A* 2010, 114, 10824 - 10833