

姓名：王小明(Shao-Ming Wang)

學號：96000001

有機發光材料之結構與電子性質理論計算研究 (字體大小：16 點)

指導教授：李大維 教授

關鍵字：有機發光材料、順丁烯亞醯胺、MOPAC、Gaussian

單行間距

字體大小：12 點

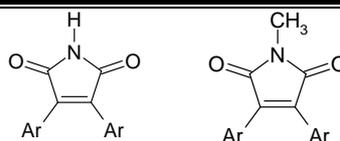
中文：標楷體

英文及數字: Times New Roman

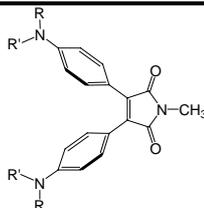
順丁烯亞醯胺(maleimide)化合物，是一個在許多方面都有廣泛應用的複合材料，且具有不錯的發光性質，因此以 maleimide 為主體，並在其 3,4-位置上以不同取代基取代，使用 MOPAC 與 Gaussian 的計算方法來討論其基態與激發態時結構變化，觀察其結構變化對吸收與收射波長的影響。

由計算的結果可以得知具有推拉電子性的取代基對 maleimide 衍生物的吸收與放射波長有一定的影響，推電子取代基在計算的結果發現對光譜具有紅位移的影響，而拉電子基則是具有藍位移的影響。而在 Stokes shift 部分則是發現當分子域軌圖形的 LUMO 電子雲貢獻若是平均分佈在 maleimide 與取代基上時，可具有較大的 Stokes shift 值。而當 HOMO 與 LUMO 的電子雲變化不大時，其 Stokes shift 值將偏低。

由 MOPAC 搭配 Gaussian 的計算方法可以得到與實驗值符合的結果，因此使用這個計算流程可以得到不錯的計算結果，進而跟實驗結合選取出有潛力的有機發光材料。



Ar = phenyl	MLH	MLMe
Ar = 1-naphthyl	1-NPHMLH	1-NPHMLMe
Ar = 2-naphthyl	2-NPHMLH	2-NPHMLMe
Ar = 3-CF ₃ -phenyl	3-CF ₃ MLH	3-CF ₃ MLMe
Ar = 4-CF ₃ -phenyl	4-CF ₃ MLH	4-CF ₃ MLMe
Ar = 4-CH ₃ -O-phenyl	4-MeOMLH	4-MeOMLMe
Ar = 3-pyridyl	3-PYDMLH	3-PYDMLMe
Ar = 2-thienyl	2-THPMLH	2-THPMLMe



R = phenyl, R' = 1-naphthyl	NPAMLMe
R = phenyl, R' = 3-tolyl	TPAMLMe
R = R' = phenyl	PhAMLMe
R = R' = ethyl	EtAMLMe

個人專長及簡歷：

物理化學、理論計算、有機光電材料計算及性質預測

2003~2008 淡江大學化學所博士班

2001~2003 淡江大學化學所碩士班

1997~2001 淡江大學應用化學系

感言：(不少於二百字)

在畢業前夕回想，在淡江的日子一轉眼便是十年，中間經過許多浮沉，在人生的歷練上也寫下許多的事蹟。本來以為淡江是一個小站牌，沒想到卻停站這麼久。從一開始懵懂無知的大一新生，到在學校待了十年的老人，經歷過許多人事物的變遷，自己也漸漸的感覺淡江給我的仍是一開始我大一的那個淡江，就是活力十足。

在淡江的這些日子來，要特別感謝李大維教授的指導，讓我在生活上、學業上都照顧許多。李老師開明的教導方式，讓我有許多的空間可以嘗試不同的新事物，而阿金與小偉學長更是教導我許多理論觀念與操作技術，而實驗室的學弟妹更是教學相長的好伙伴，有了他們的幫忙，實驗室也有了更多的歡笑。

在博士班的這幾年來，除了擔任了物理化學實驗助教之外，也在淡水國中擔任代課老師，教導國中生自然與生活科技，這讓我在與人群的溝通上得到成長。在博三的時候也曾在寒假時有幸前往哈佛大學化學與生物工程系進行為期一個月的觀訪，這一個月主要在哈佛大學化學與生物工程院系的白邊教授實驗室內進行一些學習，這也讓我大大的增廣我的國際觀。除了在理論計算的實驗部分，在博士班四年級時也與台灣大學藥學系合作，進行一連串的生物活性研究，而我也進入台灣大學藥學系的育成中心擔任研究助理的工作，進行奈米生醫材料研究，也得到一些成果，並發表於美國化學會期刊上。

在淡江的日子有歡笑，有悲傷，這一切都是淡江。我想淡江除了是我學習、成長的地方之外，更是我一輩子的回憶。這裡有太多的老師、同學、朋友、情景無法忘懷。感謝淡江。



生活照