

# 儲三陽教授

## 一、學歷

1. 美伊州理工學院化學博士（民國 59 年）
2. 台灣大學化工系學士（民國 54 年）

## 二、經歷

1. 美西北大學博士後研究（民國 58-59 年）
2. 清華大學副教授（民國 63-65 年）
3. 清華大學教授（民國 65-97 年）
4. 康乃爾大學訪問教授（民國 68-69 年）
5. 化學系系主任（民國 76-79 年）

## 三、榮譽

1. 中山學術獎（71 年）
2. 國科會研究傑出獎（民國 74 年、78 年）
3. 張昭鼎教授講座（92 年）
4. 中國化學會學術獎（94 年）

## 四、研究領域

計算化學

## 五、研究興趣與成果

利用高斯程式從事計算化學研究：

### 1. 混合原子集團電荷異常現象

鹼金屬原子有一有趣鍵結現象，例如李遠哲的博士論文發現  $\text{Cs}_2^+$  鍵能強於  $\text{Cs}_2$ 。輕原子此現象更明顯， $\text{Li}_2^+$  及  $\text{Li}_3^+$  鍵能均高於中性分子。這現象導致一個違背直覺的計算結果，即  $\text{Li}_2\text{Na}_2$  及  $\text{Li}_3\text{Na}_2^+$  集團中，陰電性較高的 Li 帶正電荷高於 Na。我們也去檢查此電荷逆轉現象是否也會出現在其他原子集團中如  $\text{BnAl}_m$  及  $\text{CunAg}_m$ 。

### 2. 離子對的 $\text{SN}_2$ 反應

計算以離子對  $\text{LiX}$  進行親核劑做  $\text{SN}_2$  反應。由於陽離子的存在，反應位能曲面顯著不同於陰離子系統。研究重點在於非碳原子如 N、O 和 S 的化合物上鹵素取代反應。通常反應活化能高於陰離子 ( $\text{X}^-$ ) 之  $\text{SN}_2$  反應。又同側反應 (retention) 比起眾所熟知的異側 (inversion) 反應機構，也具有競爭性。

### 3. 含矽非飽和化合物

研究碳矽烯 (silene) 系統中，發現碳端取代基可以影響碳矽鍵結類型，從平面雙鍵到配位鍵。在碳矽炔 (silyne) 中，陰電性高取代基使得三重態為基態，而非成對電子集中在碳端。同時也探討兩原子對插入反應的相對活性。