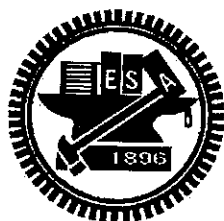


範例

①



國立交通大學

National Chiao Tung University

出國報告（出國類別：☒ A 類、考察訪問

☐ B 類、出國短期研究

☐ C 類國際會議）

②

題目：APCTCC 考察參訪與 Kasetsart
大學考察參訪

③

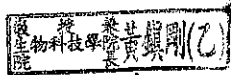
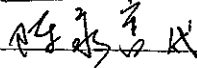
服務機關：生物科技系

姓名職稱：尤禎祥 助理教授

前往國家：馬來西亞 Port Dickson 市 APCTCC
泰國 曼谷 Kasetsart 大學

出國期間：2009/12/20~12/28

報告日期：2009/12/29

撰 寫 人	審 核 人	初 閱	複 閱
			 

備註：出國報告書審核程序如下

一、初閱：各學院教師 A、B、C 類及其他行政單位 A 類由單位主管，研究生由指導教授；中心計畫及學群 A、B、C 類由各中心計畫主持人。

二、複閱：經費所屬之一級單位；中心計畫及學群 A、B、C 類由頂尖計畫執行長。

摘要

本人於 2009 年 12 月 20 日至 12 月 23 日期間赴馬來西亞 Port Dickson 市參加第 4 屆亞太理論與計算化學研討會(The 4th Asian Pacific Conference for Theoretical and Computational Chemistry, APCTCC-4)並發表研究成果,隨後於 12 月 23 日轉往泰國曼谷 Kasetsart 大學化學系參訪;並討論該校代表團訂於 2010 年 3 月 17 日前來本校參訪簽約事宜詳情。

目次

摘要	1
目次	1
目的	1
過程	2
心得及建議	4
附件 APCTCC-4 詳細議程表	6

目的

亞太理論與計算化學研討會(The Asian Pacific Conference for Theoretical and Computational Chemistry)係由亞太理論與計算化學學會(The Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemistry, APATCC)為亞太地區理論與計算化學家增進彼此學術交流所籌組之國際會議,今年為第 4 屆,由新加坡大學 Prof. Richard Wong 主辦,馬來西亞 Kebangsaan 大學 School of Chemical Sciences & Food Technology 的 Prof. Mohammad B. Kassim 協辦,時間為 12 月 21 日至 12 月 23 日,地點則挑選在馬來西亞吉隆坡國際機場約 45 分鐘車程外的 Port Dickson 市 The Legend Water Chalets 舉行。依往例本會議原為每年舉行一次,第一屆 2004 年,於 5 月 12 日至 15 日在日本岡崎市原子分子研究所創始;第二屆於 2005 年 5 月 2 日至 6 日於泰國曼谷朱拉隆功大學(Chulalongorn University)舉辦;而 2006 年五月恰逢第 12 屆國際量子化學研討會(The XIIth International Congress of Quantum Chemistry)於日本京都舉行,因其會議地點位於亞太地區,因此亞太理論與計算化學研討會暫停一年,第三屆研討會延至 2007 年 9 月 22 日至 26 日間在中國北京舉行,主辦人為香港科技大學吳昀東教授。接著又逢三年一度的世界理論與計算化學家聯合研討會(World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC) 2008 年於澳洲雪梨舉辦,亦位於亞太地區,因此本研討會第四屆延至今年。本次 APCTCC-4 共計有超過 150 名來自亞太及世界各地之與會者,其中日本籍與會者最多、共計 40 人,主辦國新加坡 25 人次之、台灣及泰國各 16 人、地主國馬來西亞 14 人,其餘來自亞太國家的尚有澳洲 9 人、紐西蘭 2 人、韓國 5 人、印度 5 人、香港 3 人與中國 14 人;最特別的是還

有一位來自芬蘭與一位來自俄羅斯的與會者，可見本研討會的影響力已漸漸向亞太地區以外擴張。

過程

2009 年 12 月 20 日早上搭乘 BR227 班機出發前往吉隆坡，由於班機抵達的時間正好錯過大會安排的接駁巴士，因此自行安排交通前往會場報到，當天晚間有大會安排的歡迎晚會(reception party)。12 月 21 日上午八時 30 分大會正式開始，議程詳如附件；重點摘要如下：

三天的會期間共計有七場大會演講(Plenary Lecture)，35 場邀請演講(Invited Lecture)，24 場口頭論文演講(Oral Communication)、18 場學生論文報告(Student Oral Communication)，除大會演講外其它演講分為三個平行議程進行；此外還有六十一篇壁報論文分兩天傍晚場次發表，規模盛大。會議開場由新加坡大學主辦人 Prof. Richard Wong 以及地主國馬來西亞 Kebangsaan 大學 School of Chemical Sciences & Food Technology 的 Prof. Mohammad B. Kassim 致辭，簡單地報告了會議的籌備經過，並歡迎所有與會者來到，接著由澳洲 Australia National University 的 Prof. Peter M.W. Gill 的大會演講揭開序幕。



大會開幕式

亞太理論與計算化學學會每年頒發兩個獎項，其中 Fukui 獎章頒發給對理論化學或計算化學有卓越貢獻的亞太學者，2008 年得主為印度 Indian Association for the Cultivation of Science 的 Debashis Mukherjee，表彰他在偶合叢集理論 (couple cluster theory) 上的先驅研究，2009 年得主則為日本量子化學研究所 (Quantum Chemistry Research Institute, QCRI) 的中辻博教授 (Prof. Hiroshi Nakatsuji)，他因在理論化學的發展與應用上長久的貢獻而得獎。而 Pople 獎章得主必須為 45 歲以下且在理論與計算化學方面表現傑出的年輕學者，2008 與 2009 年的得主為分別為中國南京大學的 Prof. Shuhua Li 與日本 Institute of Molecular Science (IMS) 的江原正博教授 (Prof. Masahiro Ehara)。四位學會獎章得主在會議議程中均安排有大會演講。



學會主席平尾公彥教授(左一)與四位學會獎章得主；左二起為中辻博教授、Debashis Mukherjee 博士、Shuhua Li 教授與江原正博教授。

本次大會由新加坡 Novagobal Pte 公司贊助論文獎學金，提供五個新加坡幣 100 元的名額頒發給 2 位最佳學生論文報告與 3 位最佳壁報論文，並於閉幕式上頒獎。最佳學生論文報告的得主一為日本京都大學分子工程學系的黒川悠索 (Yusaku I. Kurokawa)，他的研究主題是「MRMP2 and DFT Study of Inverted Sandwich Type Dinuclear Transition Metal Complex: Surprisingly High Spin Multiplicity in the Mn Analogue」，另一位則為台灣科技大學化工系江志強教授的

研究生王嘉慶，他報告的題目是「DFT Study of NH_x ($x=1-3$) Adsorption and Ammonia Oxidation On $\text{RuO}_2(110)$ Surface」。三個最佳壁報論文獎則分別頒給日本理料研究所(RIKEN)的 Jong-Won Song，他的論文題目為「Systematic Optimization of Long-Range Corrected Hybrid Exchange-Correlation Functionals Including a Short-Range Gaussian Attenuation (Legau-B97)」；另一得獎者為日本御茶水大學先進科學部的森寬敏(Mori Hirotoishi)博士，他的研究主題則是「Theoretical Design of Dipole Photo Switching Molecule: *Ab initio* Electronic Structure Study of Aza-Substituted π -Electron Systems」；主辦人 Prof. Richard Wong 的學生、新加坡國立大學的 Soo Tin Kwa 亦在獲獎之列，其研究主題為「Terahertz (THz) Absorption Spectrum of 2,4-Dinitrotoluene」。

閉幕式上學會主席亦宣布，下屆 APCTCC-5 的會議將移師至紐西蘭首都奧克蘭市的梅西大學 (Massey University) 舉行，主辦人則為 Prof. Peter Schwerdtfeger。

隨後於 12 月 23 日傍晚搭機前往泰國曼谷準備 24 日起之參訪行程。與 Kasetsart University 方面洽談，該校代表團八至十人將於 2010 年三月 17 日前來本校參訪簽約之初步行程規畫，以及草約的內容將另件送至國際處，在此不加贅述。行程間同時也參觀了該校化學系副系主任 Prof. Supa Hannongbua 的實驗室並與其實驗室成員會談，交換雙方在計算化學與分子模擬的研究心得。

心得及建議

本人發表口頭論文(oral communication)題目為「Theoretical Study on the Alkyne Adducts of Group VI Dinuclear Metal Complexes」，被安排於第二天 12 月 22 日下午的 3:07 分時段。對於雙金屬五重鍵的系統而言，由於其雙金屬鍵結核心鍵級高、反應性強，在先前的實驗中也發現這些系統在合成時會和溶劑反應，因此溶劑的挑選須避免有孤對電子，比如常用的 Tetrahydrofuran (THF) 會和鍵結中心反應，在同時考量溶解度的狀況下，改用正己烷才能順利得到五重鍵的化合物。由此經驗出發，若特意讓這些五重鍵化合物與 alkyne 反應，則可得到特殊的 alkyne adducts，其產物最有趣的性質在於，晶體中鉻—鉻四重鍵與 alkyne adducts 的碳=碳雙鍵形成約 53 度的夾角，與原先文獻中報告過約八十幾種化合物的結構，金屬—金屬與碳=碳雙鍵若非平行即為互相垂直的構形非常不同。本人發表的論文即是利用密度泛函理論研究這類系統的電子結構，並計算其最低空軌域(LUMO)與最高佔據分子軌域(HOMO)之間的能量差異，並根據一系列的單點計算掃描其 alkyne adducts 的碳=碳雙鍵繞著金屬—金屬鍵軸旋轉時的能量變化，即可建構夾角與位能曲面間的關係。這樣描繪出的 Walsh diagram 有助於了解分子軌域如何穩定化合物的構形，並比較其與文獻報導中、非平行即為

互相垂直的幾何結構間的差異。

承蒙校方補助本人此次國際會議與參訪行程，本人收益良多，謹此致謝！

附件

APCTCC-4 詳細議程表。詳見下頁起。

PL - Plenary Lecture	IL - Invited Lecture	OP - Oral Presentation	SO - Student Oral Communication
----------------------	----------------------	------------------------	---------------------------------



The Fourth Asian Pacific Conference of Theoretical & Computational Chemistry

21-23 Dec 2009, Port Dickson, Malaysia

Scientific Programme of APCTCC-4

DECEMBER 21 (MONDAY)			
8.30-10.10 am	Plenary Session 1 [Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A] Chair: Richard M.W. Wong (<i>Chairman of APCTCC-4, National University of Singapore</i>)		
8.30 am	Opening Ceremony Kimihiko Hirao (<i>President of APATCC; RIKEN, Japan</i>)		
8.50 am	PL01 Peter M.W. Gill (<i>Australian National University, Australia</i>)		
9.30 am	PL02 (2009 Fukui Medal Lecture) Hiroshi Nakatsuji (<i>Quantum Chemistry Research Institute, Japan</i>)		
10.10-10.40 am	Morning Tea Legend International Water Homes Foyer		
10.40 am-12.20 pm	Invited Session 2A Chair: Peter M.W. Gill Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Invited Session 2B Chair: Yun-Dong Wu Bunga Raya Room 3	Invited Session 2C Chair: Shigeyoshi Sakaki Bunga Raya Hall 1
10.40 am	IL01 Wenjian Liu <i>Peking University, China</i>	IL07 Hao Hu <i>University of Hong Kong, Hong Kong</i>	IL13 Kwang S. Kim <i>Pohang University of Science and Technology, Korea</i>
11.05 am	IL02 Seiichiro Ten-no <i>Kobe University, Japan</i>	IL08 Ngai Ling Ma <i>Novartis Institute for Tropical Diseases, Singapore</i>	IL14 Chun Zhang <i>National University of Singapore, Singapore</i>
11.30 am	IL03 Takeshi Yanai <i>Institute for Molecular Science, Japan</i>	IL09 Jing Ma <i>Nanjing University, China</i>	IL15 Yoon Sup Lee <i>KAIST, Korea</i>
11.55 am	IL04 Hway Chuan Kang <i>National University of Singapore, Singapore</i>	IL10 Masataka Nagaoka <i>Nagoya University, Japan</i>	IL16 Kazunari Yoshizawa <i>Kyushu University, Japan</i>
12.20-2.00 pm	Lunch Duyung Restaurant		
2.00-3.24 pm	Invited/Oral Session 3A Chair: Hiromi Nakai Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Invited/Oral Session 3B Chair: Vudhichai Parasuk Bunga Raya Room 3	Invited/Oral Session 3C Chair: Shigeru Nagase Bunga Raya Hall 1
2.00 pm	IL05 Dong Hui Zhang <i>Dalian Institute of Chemical Physics, China</i>	IL11 Wei-Hai Fang <i>Beijing Normal University, China</i>	IL17 Jinlong Yang <i>University of Science and Technology of China, China</i>
2.25 pm	IL06 Tetsuya Taketsugu <i>Hokkaido University, Sapporo, Japan</i>	IL12 Rauzah Hashim <i>University of Malaya, Malaysia</i>	IL18 Haibin Su <i>Nanyang Technological University, Singapore</i>
2.50 pm	OP01 Denis Bokhan, <i>Kobe University, Japan</i>	OP05 Jiong Ran <i>National University of Singapore, Singapore</i>	OP09 Ante Bilić <i>CSIRO Math. & Information Sciences, Australia</i>
3.07 pm	OP02 Kazuhide Ichikawa, <i>Kyoto University, Japan</i>	OP06 Suehiro Iwata <i>Toyota Physical and Chemical Research Institute, Japan</i>	OP10 Ai-Hua Zhang <i>National University of Singapore, Singapore</i>
3.24-4.00 pm	Afternoon Tea Legend International Water Homes Foyer		
4.00-5.10 pm	Oral/Student 4A Chair: Seiichiro Ten-no Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Oral/Student 4B Chair: Ngai Ling Ma Bunga Raya Room 3	Oral/Student 4C Chair: Yoon Sup Lee Bunga Raya Hall 1

PL - Plenary Lecture	IL - Invited Lecture	OP - Oral Presentation	SO - Student Oral Communication
----------------------	----------------------	------------------------	---------------------------------

4.00 pm	OP03 Yutaka Imamura <i>Waseda University, Japan</i>	OP07 Ya-Jun Liu <i>Beijing Normal University, China</i>	OP11 Ruslan Kevorkyants <i>Institute of High Performance Computing, Singapore</i>
4.17 pm	OP04 Jaewoon Jung, <i>Kobe University, Japan</i>	OP08 Timm Lankau, <i>National Tsing Hua University, Taiwan</i>	OP12 Masato Kobayashi <i>Waseda University, Japan</i>
4.34 pm	SO01 Jia Deng <i>Australian National University, Australia</i>	SO04 Waraporn Boonyarat <i>Kasetsart University, Thailand</i>	SO07 Yongqing Cai <i>National University of Singapore, Singapore</i>
4.46 pm	SO02 Rahul Maitra <i>Indian Association for the Cultivation of Science, India</i>	SO05 Lin-Tai Da <i>Peking University, Shenzhen, China</i>	SO08 Arthit Vongachariya <i>Chulalongkorn University, Thailand</i>
4.58 pm	SO03 Toru Shiozaki <i>University of Tokyo, Japan</i>	SO06 Junming Ho <i>Australian National University, Australia</i>	SO09 Ying-Chieh Hung <i>National Taiwan University, Taiwan</i>
5.15–6.45 pm	Poster Session I [PP01-PP30] Legend International Water Homes Foyer		

DECEMBER 22 (TUESDAY)			
9.00–10.20 am	Plenary Session 5 [Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A] Chair: Kimihiko Hirao (<i>President of APATCC; RIKEN, Japan</i>)		
9.00 am	PL03 (2008 Fukui Medal Lecture) Debashis Mukherjee (<i>Indian Association for the Cultivation of Science, India</i>)		
9.40 am	PL04 (2008 Pople Medal Lecture) Shuhua Li (<i>Nanjing University, China</i>)		
10.20–10.50 am	Morning Tea Legend International Water Homes Foyer		
10.50 am–12.30 pm	Invited Session 6A Chair: Wenjian Liu Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Invited Session 6B Chair: Chin-Hui Yu Bunga Raya Room 3	Invited Session 6C Chair: Kwang S. Kim Bunga Raya Hall 1
10.50 am	IL19 Michelle L. Coote <i>Australian National University, Australia</i>	IL25 Shridhar R. Gadre <i>University of Pune, India</i>	IL30 Michael B. Sullivan <i>Institute of High Performance Computing, Singapore</i>
11.15 am	IL20 Koichi Yamashita <i>University of Tokyo, Japan</i>	IL26 Supa Hannongbua <i>Kasetsart University, Thailand</i>	IL31 Wei-Xue Li <i>Dalian Institute of Chemical Physics, China</i>
11.40 am	IL21 Young Min Rhee <i>Pohang University of Science and Technology, Korea</i>	IL27 Shogo Sakai <i>Gifu University, Japan</i>	IL32 Jia-Jen Ho <i>National Taiwan Normal University, Taiwan</i>
12.05 pm	IL22 Wei Wu <i>Xiamen University, China</i>	IL28 Richard M. W. Wong <i>National University of Singapore, Singapore</i>	IL33 Zhen Hua Li <i>Fudan University, China</i>
12.30–2.00 pm	Lunch Duyung Restaurant		
2.00–3.24 pm	Invited/Oral Session 7A Chair: Debashis Mukherjee Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Invited/Oral Session 7B Chair: Wei-Hai Fang Bunga Raya Room 3	Invited/Oral Session 7C Chair: Hway Chuan Kang Bunga Raya Hall 1
2.00 pm	IL23 Hiromi Nakai <i>Waseda University, Japan</i>	IL29 Vudhichai Parasuk <i>Chulalongkorn University, Thailand</i>	IL34 Shigeyoshi Sakaki <i>Kyoto University, Japan</i>

PL - Plenary Lecture	IL - Invited Lecture	OP - Oral Presentation	SO - Student Oral Communication
----------------------	----------------------	------------------------	---------------------------------

2.25 pm	IL24 Chin-Hui Yu <i>National Tsing Hua University, Taiwan</i>		IL35 Matthias Lein <i>Massey University, New Zealand</i>
2.50 pm	OP13 Detlev Figgen <i>Massey University, New Zealand</i>	OP17 Bun Chan <i>University of Sydney, Australia</i>	OP21 Ito Chao <i>Academia Sinica, Taiwan</i>
3.07 pm	OP14 Dulal C. Ghosh <i>University of Kalyani, India</i>	OP18 Jen-Shiang K. Yu <i>National Chiao Tung University, Taiwan</i>	OP22 Hong Mei Jin <i>Institute of High Performance Computing, Singapore</i>
3.24-4.00 pm	Afternoon Tea Legend International Water Homes Foyer		
4.00-5.10 pm	Oral/Student 8A Chair: Shridhar R. Gadre Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A	Oral/Student 8B Chair: Michael B. Sullivan Bunga Raya Room 3	Oral/Student 8C Chair: Chun Zhang Bunga Raya Hall 1
4.00 pm	OP15 Yoshinobu Akinaga <i>Kobe University, Japan</i>	OP19 Hassan H. Abdallah <i>Universiti Sains Malaysia, Malaysia</i>	OP23 Sheau Wei Ong <i>National University of Singapore, Singapore</i>
4.17 pm	OP16 Isseki Yu <i>Aoyama Gakuin University, Japan</i>	OP20 Sven Tobisch <i>Sasol Technology Ltd., U.K.</i>	OP24 Zhenyu Li <i>University of Science and Technology of China, China</i>
4.34 pm	SO10 Hui Yang <i>National University of Singapore, Singapore</i>	SO13 Yusaku I. Kurokawa <i>Kyoto University, Japan</i>	SO16 Han-Jung Li <i>National Taiwan Normal University, Taiwan</i>
4.46 pm	SO11 Robert J. O'Reilly <i>University of Sydney, Australia</i>	SO14 Wataru Mizukami <i>The Graduate University for Advanced Studies, Japan</i>	SO17 Jiang Wu <i>National University of Singapore, Singapore</i>
4.58 pm	SO12 Suphawarat Phalinyot <i>Kasetsart University, Thailand</i>	SO15 Lalitha Selvam <i>Swinburne University of Technology, Australia</i>	SO18 Chia-Ching Wang <i>National Taiwan University of Science and Technology, Taiwan</i>
5.15-6.45 pm	Poster Session II [PP31-PP61] Legend International Water Homes Foyer		
7.30-10.00 pm	Conference Banquet Legend Water Chalets Ballroom		

DECEMBER 23 (WEDNESDAY)

9.00-10.20 am	Plenary Session 9 [Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A] Chair: Mohammad B. Kassim (Co-Chairman of APCTCC-4, Universiti Kebangsaan Malaysia)
9.00 am	PL05 (2009 Pople Medal Lecture) Masahiro Ehara (Institute for Molecular Science, Japan)
9.40 am	PL06 Yun-Dong Wu (Hong Kong University of Science & Technology and Peking University, China)
10.20-10.50 am	Morning Tea Legend International Water Homes Foyer
10.50 am-12.00 pm	Plenary Session 10 [Bunga Raya Hall 2, 3 & 3A] Chair: Richard M.W. Wong (Chairman of APCTCC-4, National University of Singapore)
10.50 am	PL07 Shigeru Nagase (Institute for Molecular Science, Japan)
11.30 am	Presentation of Poster and Student Oral Communication Awards Richard M.W. Wong (Chairman of APCTCC-4, National University of Singapore)
11.45 am	Closing Remark Kimihiro Hirao (President of APATCC; RIKEN, Japan)