

2025 年【科學探究競賽-這樣教我就懂】

普高組成果報告格式

題目名稱：以弱聯結法合成銅鈷鎳錯合物之研究

一、摘要

本研究以弱連結法 (weak-link approach) 合成含有鎳配位基 (BDC 與 L2,2,2) 與銅、鈷、鎳等金屬之錯合物，並探討其結構與光學性質。在製備配位基 BDC 的過程中，發現其生成物為無定形的黃色固體，並呈鹼性反應。當樣品置於冰浴中可暫時形成晶體，但晶體易迅速溶解。為進一步分析其結構，我們利用紅外光譜 (IR) 與核磁共振光譜 (NMR) 進行鑑定。後續將 BDC 與不同金屬離子 (Cu^{2+} 、 Co^{2+} 、 Ni^{2+}) 進行配位反應，並使用紫外光可見光譜 (UV-Vis) 測量其吸收波峰。結果顯示，所得錯合物之吸收波峰與其溶液顏色呈現互補關係，且與文獻所記錄之顏色高度一致，證實成功合成一系列金屬錯合物。此外，加入 1,2-diaminocyclohexane、4,4'-bipyridine 與 2,2'-bipyridine 等輔助配位基可提升錯合物的穩定性，並有效調控其 UV 吸收波峰位置。

二、探究題目與動機

本研究探討以弱聯結法合成銅、鈷和鎳的錯合物。配位化學是一個深奧而迷人的領域，我們將深入探索其中的奧秘，特別關注於使用特定配位基與過渡金屬的相互作用。這項研究不僅將拓展我們對配位化學的理解，還將為超分子化學領域提供寶貴的見解。通過實驗和分析，我們希望能揭示這些錯合物的獨特性質和潛在應用。

三、探究目的與假設

(一)配位基特性研究

- 1.本研究聚焦於含有丙烯醯胺末端基的配子，如 4,7-Diazadecanediamide (L2,2,2)和 N,N-Bis(β -cabamoylethyl)1,2-diaminocyclohexane (BDC)。這些配子具有獨特的結構，同時擁有質子予體和質子受體，提供了多個配位點。

(二)超分子化學應用

- 1.探討這類配子在超分子化學中的應用潛力。通過研究它們的自身堆疊能力(利用氫鍵與 π - π 作用力)以及與過渡金屬的相互作用，瞭解它們在複雜化學系統中的角色。

(三)氧化還原反應研究

- 1.深入研究 BDC 和 L2,2,2 與過渡金屬之間的氧化還原反應。這將有助於理解這些配子在催化和電化學應用中的潛在價值，為新型材料的開發提供思路。

四、探究方法與驗證步驟

(一)製作配位基

- 1.製作兩種不同的配位基：
BDC 和 L2,2,2。



圖 1. L2,2,2 成品圖



圖 2. BDC 成品圖

(二)配位基檢測

1.檢測配位基的 IR 與 NMR 光譜圖，以確認其特性。

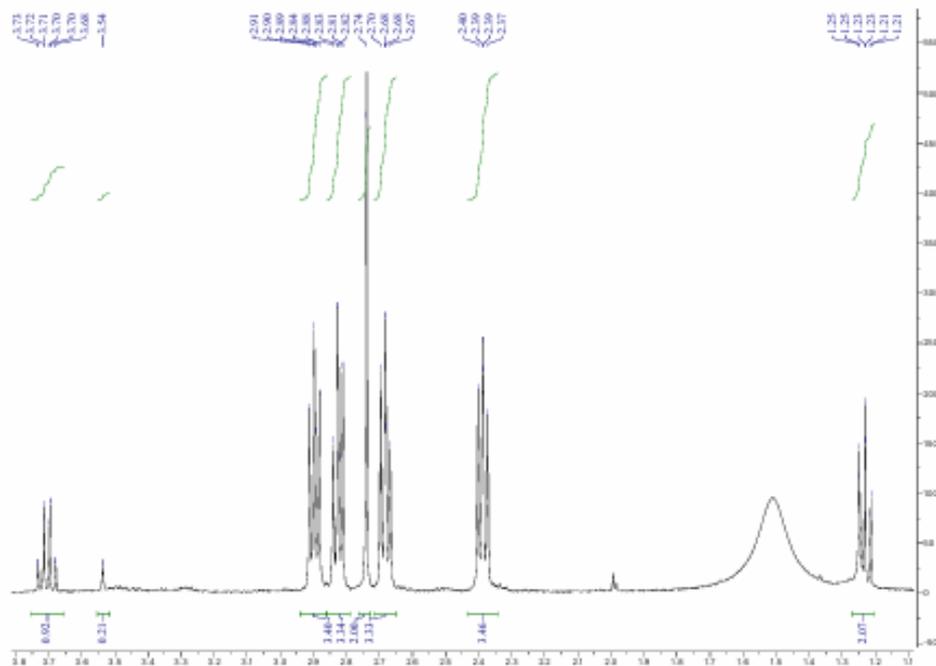


圖 3. 配位基 L2,2,2 之 NMR 氫譜圖

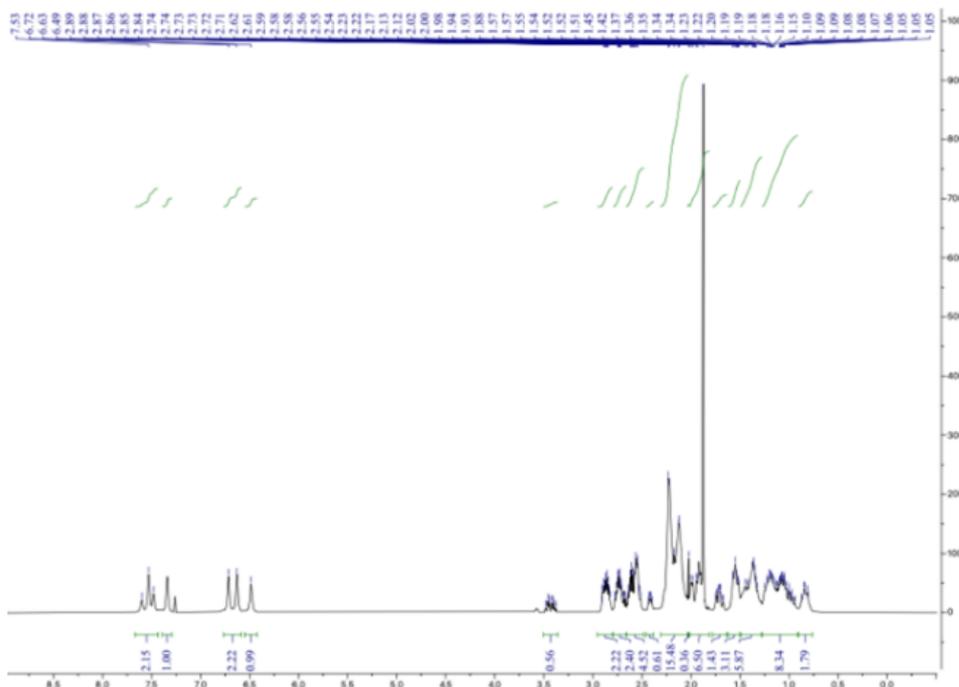


圖 4. 配位基 BDC 之 NMR 氫譜圖

進一步分析配位基是否有結晶，區分為「有結晶」與「無結晶」兩種情況。若無結晶，則透過探究變因（如降低溶液溫度或調整酸鹼值）來嘗試改善。

(三)配位基與銅鈷鎳合成

進行錯合物產量計算，確保反應成功。

(四)測試錯合物的 UV 吸收

錯合物的 UV 吸收與溶液顏色有變化，表示合成成功。

1. BDC+氯化銅對照其 UV 圖可發現 656nm 處有一特性吸收峰，及代表有橙色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉橙色光的互補色，所以溶液呈現藍色。

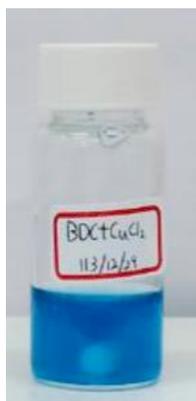


圖 5. BDC+氯化銅

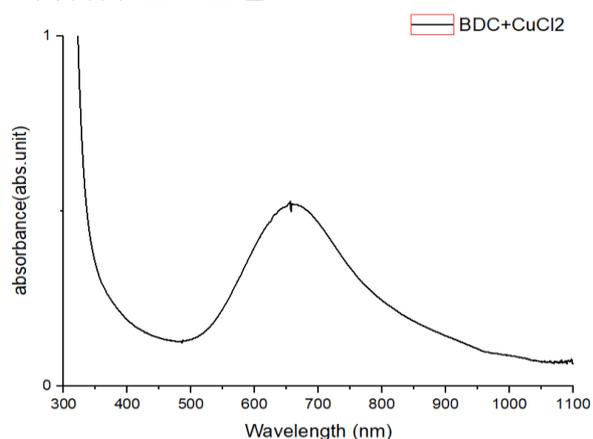


圖 6. BDC+氯化銅 UV 圖

2. BDC+氯化鎳對照其 UV 圖可發現 657nm 處有一特性吸收峰，及代表有紅色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉紅色光的互補色，所以溶液呈現淡藍色。



圖 7. BDC+氯化鎳

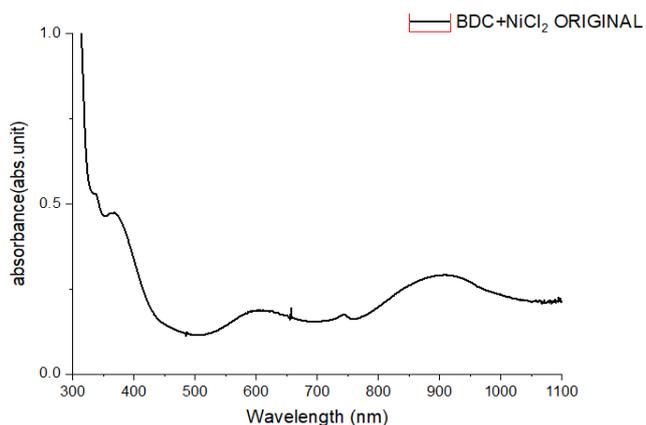


圖 8. BDC+氯化鎳 UV 圖

3. BDC+氯化銅+1,2-diamineocyclohexane 對照其 UV 圖可發現 546nm 處有一特性吸收峰，及代表有綠色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉綠色光的互補色，所以溶液呈現紫色。



圖 9. BDC+氯化銅+1,2-diamineocyclohexane

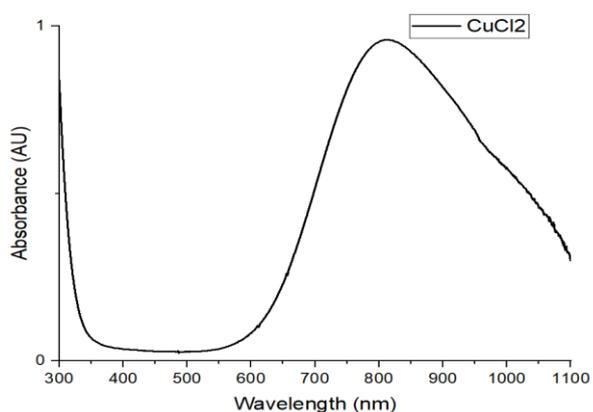


圖 10. BDC+氯化銅+1,2-diamineocyclohexane

4. BDC+氯化鎳+2,2'-bipyridin 對照其 UV 圖可發現 546nm 處有一特性吸收峰，及代表有綠色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉綠色光的互補色，所以溶液呈現紫色。



圖 11. BDC+氯化鎳+ 2,2'-bipyridine

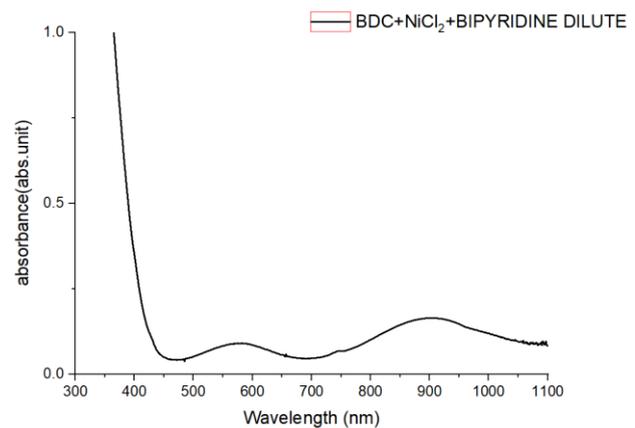


圖 12. BDC+氯化鎳+ 2,2'-bipyridine UV 圖

5. L2,2,2+氯化鈷對照其 UV 圖可發現 509nm 處有一特性吸收峰，及代表有青色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉青色光的互補色，所以溶液呈現紅色。

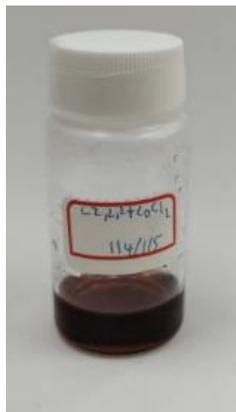


圖 13. L2,2,2+氯化鈷

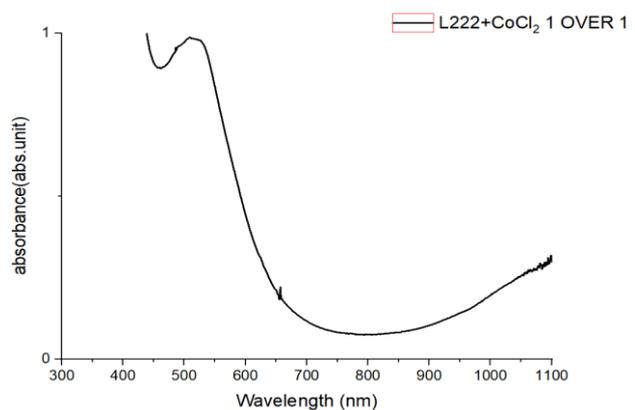


圖 14. L2,2,2+氯化鈷 UV 圖

6. L2,2,2+氯化銅+4,4'-bipyridine 對照其 UV 圖可發現 639nm 處有一特性吸收峰，及代表有紅色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉紅色光的互補色，所以溶液呈現藍色。

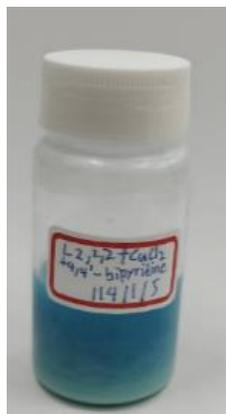


圖 15. L2,2,2+氯化銅+ 4,4'-bipyridine

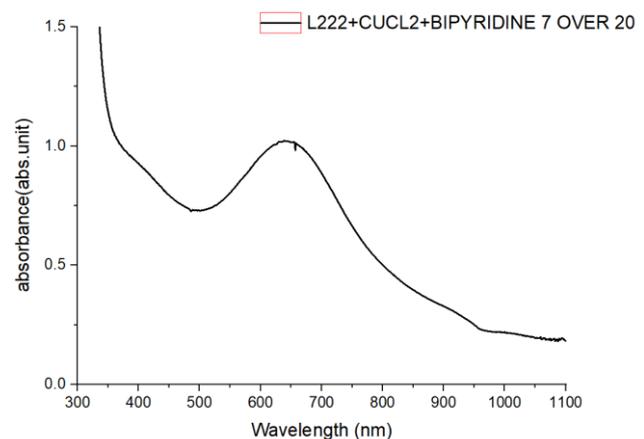


圖 16. L2,2,2+氯化銅+ 4,4'-bipyridine UV 圖

7.L2,2,2+氯化鎳對照其 UV 圖可發現 657nm 處有一特性吸收峰，及代表有紅色光被吸收了，因此肉眼只能捕捉紅色光的互補色，所以溶液呈現青色。



圖 17. L2,2,2+氯化鎳

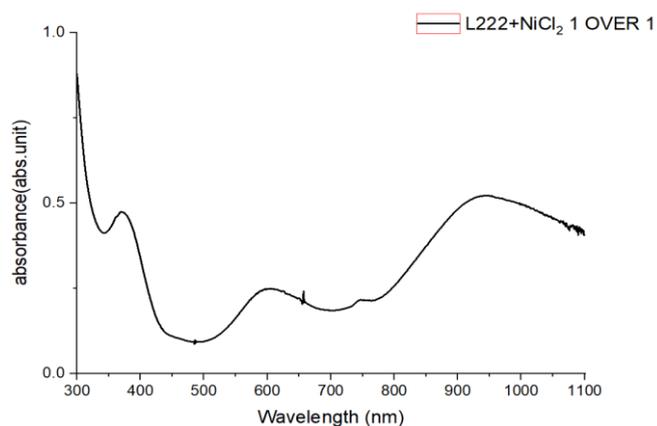


圖 18.L2,2,2+氯化鎳 UV 圖

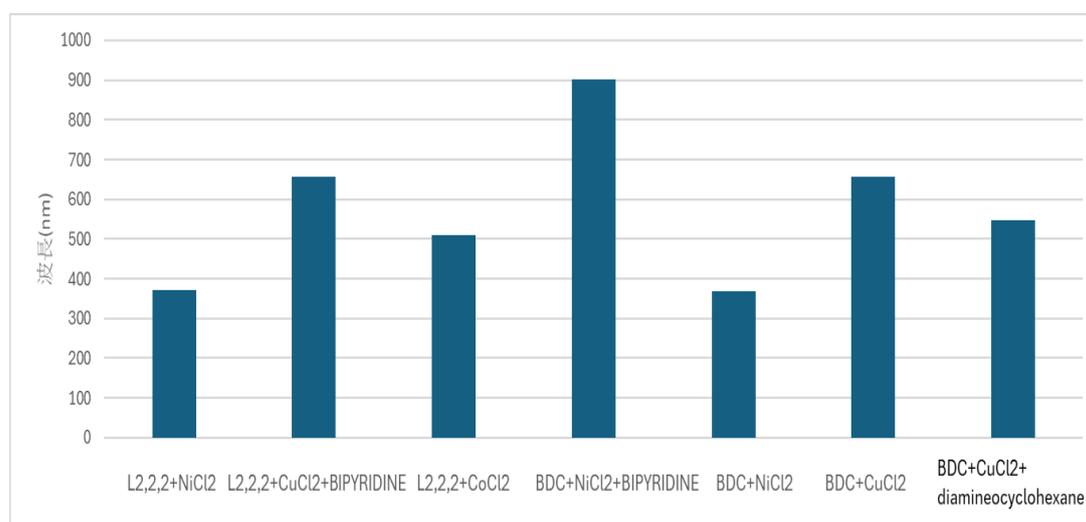


圖 19. 各錯合物的最大吸收波長比較(長條圖)

五、結論與生活應用

- (一)本次實驗成功用弱連結法合成銅、鈷、鎳與 BDC、L2,2,2 之錯合物，並從本次實驗可以得知配位基 BDC 放進冰浴中或調整其酸鹼值，可獲取更多的產量。
- (二)加入 1,2-diamineocyclohexane、2,2'-bipyridin 可以調控錯合物的結構，以達到我們所想的分子開關之應用潛力。
- (三)從光譜得知，UV 的吸收峰與溶液顏色有達到互補的效果，並與文獻中的顏色有高度相似，說明有合成成功。

參考資料

1. Gianneschi, N. C., Masar, M. S., & Mirkin, C. A. (2005). Development of a coordination chemistry-based approach for functional supramolecular structures. *Accounts of chemical research*, 38(11), 825-837.

2. Lehn, J. M. (2007). From supramolecular chemistry towards constitutional dynamic chemistry and adaptive chemistry. *Chemical Society Reviews*, 36(2), 151-160.
3. Gianneschi, N. C., Masar, M. S., & Mirkin, C. A. (2005). Development of a coordination chemistry-based approach for functional supramolecular structures. *Accounts of chemical research*, 38(11), 825-837.
4. Yamamoto, T., Arif, A. M., & Stang, P. J. (2003). Dynamic equilibrium of a supramolecular dimeric rhomboid and trimeric hexagon and determination of its thermodynamic constants. *Journal of the American Chemical Society*, 125(40), 12309-12317.
5. Shi, C. Y., Zhang, Q., Tian, H., & Qu, D. H. (2020). Supramolecular adhesive materials from small-molecule self-assembly. *SmartMat*, 1(1), e1012.