



國立清華大學 化學系

CHEMISTRY @ National Tsing Hua University

2022

化學新勢力 人物誌

Vol.5

發行人：江昀緯

撰 文：楊自雄

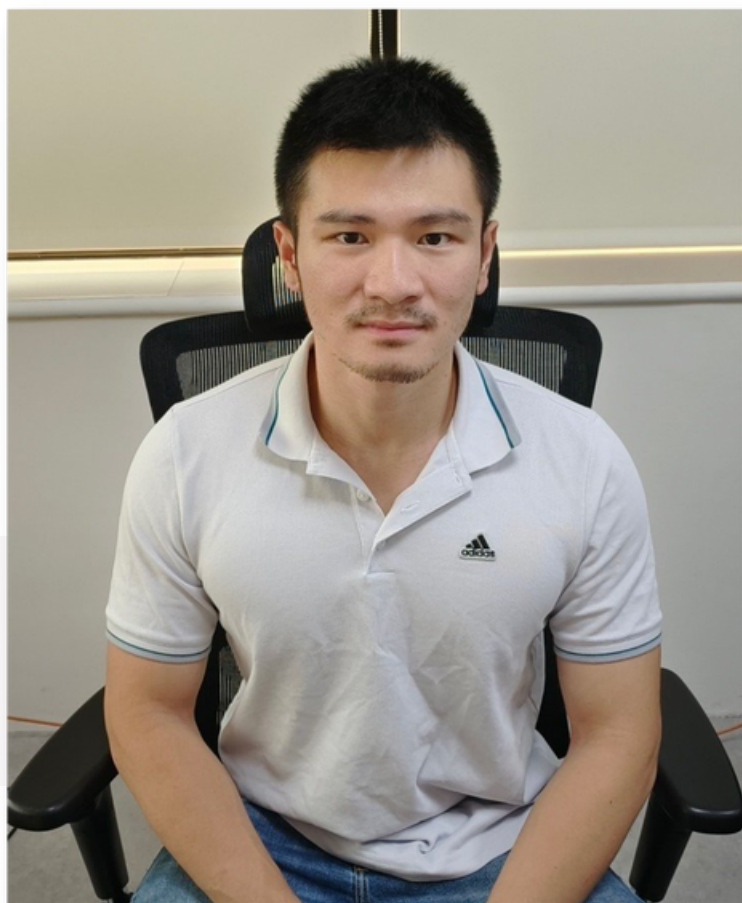
編 輯：李函諭

自強不息
雄心壯志
任重道遠

楊自雄 助理教授

美國威斯康辛大學麥迪遜分校化學系博士(2018)

美國威斯康辛大學麥迪遜分校學士(2013)



封面人物

撰文：楊自雄

前言

在這混亂的年代，短短十年內人們經歷了歐債危機、歐洲難民危機、新冠疫情及俄烏戰爭，同時工業4.0、大數據及人工智能為人們的生活帶來了重大的革新，卻也帶來了種種挑戰。或許每個十年都是混亂的，而我們身為在這亂世中渺小的一份子，也許只能隨波逐流、笑看世事。但是，夜深人靜的時候也會問自己，是不是能為國家做一點事，為這個世界多做點事，所以我選擇進入學術界成為教授，十年樹木、百年樹人，希望窮盡我畢生所學推動社會往前走，並希望我的學生們能如漣漪般一起推進社會。很榮幸國立清華大學願意給予我這個舞台，這是一所很特別的學校，它孕育於中華民族最落魄的時候，卻也為前人在厚德載物的努力下，自強不息地站回世界的舞台做了最佳的見證。也期望我能在未來的日子裡，乘著歷史的重量，不忘前人的努力，為社會貢獻我所學所想所能。

緣起

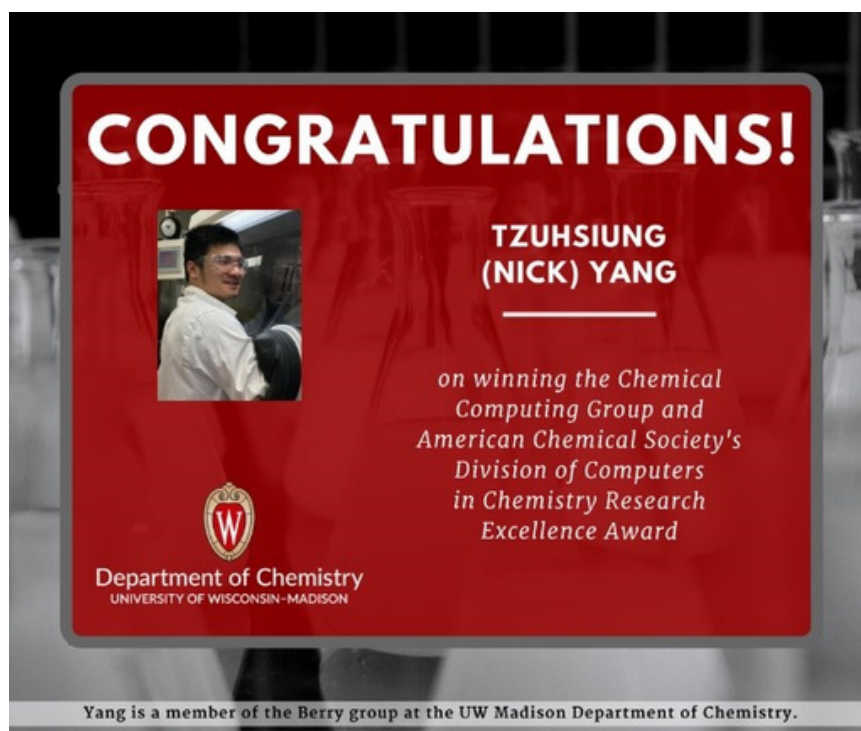
我大學就讀於美國威斯康辛大學麥迪遜分校，起初研究的方向是營養學，期待能靠生物科技的方式改善落後國家人民的健康，在大學一年級的時，於Eric Yen教授的實驗室裡協助研究老鼠體內的脂肪代謝及如何設計藥物來增快脂肪消耗，其有助於減少肥胖及肥胖帶來的相關疾病。當時，同一實驗室的白人學姐還前往非洲參與了轟動一時的黃金米計畫(The Golden Rice Project) – 以基因改造技術使稻米產生β-胡蘿蔔素，可在體內轉化成維生素A，進而改善維生素A缺乏症的問題。這讓我深受啟發，原來學術研究可以改善世界各地需要幫助的人們的生活。在大二的時候，因為旁聽了大三的營養學課程，有幸受課堂教授David J. Eide的邀請加入他的實驗室，研究鋅缺乏在遺傳性疾病脊椎變異性Ehlers-Danlos Syndrome (sdEDS)的影響。鋅離子能藉由跟鋅指蛋白質模體(Zinc finger motif)錯合後使該蛋白能結合DNA並啟動DNA的轉錄(圖一)，促進組織生長及修復。因此sdEDS的患者臨床症狀常凸顯代謝快的組織生長異常，例如軟骨、皮膚等。而因為鋅離子的金屬配位性質使我開始對生物無機化學產生興趣並在大三的時候轉入化學系，正式開始踏入化學這個領域。



圖一 鋅指構型在錯合鋅離子後結合去氧核糖核酸。圖片擷取至 Wikipedia

成長

轉入化學系後，我在大三加入John F. Berry教授（也是我之後的博士導師）的實驗室，以實驗方式研究硝酸雙釷錯合物(diruthenium nitrate complex)的光化學推動的氧化雙釷(diruthenium-oxo)生成及氧原子轉移反應，同時以量子計算方式研究其反應機理還有紫外線及可見光光譜的模擬。這個專題最後發表在著名的化學期刊Journal of the American Chemical Society (JACS)。在2013年，我前往約翰霍普金斯大學化學系攻讀博士，師從David P. Goldberg，研究生物無機化學類卟啉錳錯合物(manganese porphyrinoid complexes)催化的氧原子轉移反應，有幸在一年半的研究後發表了1篇一作的JACS、2篇共同作者的JACS及另外3篇學術論文。在2015一月，因為我對電子結構計算、分子磁性及無機光譜的熱情，所以我回到了John F. Berry教授的實驗室。博士期間以量子化學模擬有機金屬催化反應的研究也成就了我3篇共同一作JACS、1篇一作且共同通訊的Journal of Chemical Theory and Computing (JCTC)及2篇共同作者學術論文，其中一篇共同作者的論文還包括與博士期間指導的專題生Alex Jamber一同完成的研究。我的共同通訊的論文還在2018年春季的美國化學學會年會拿到ACS COMP excellence award(見圖二)。三年半後（2018年5月），我通過了博士口試。當時我的口試委員Clark R. Landis教授問了我一句話讓我印象深刻：“So what’s next? You have excelled this”。是啊，那我應該要繼續往這個方向鑽研下去，例如能處理更大體系的量子力學/分子力學(QM/MM)方法，還是有什麼其他跨時代、跨領域的方法能讓量子化學模擬跟實驗結合？



圖二 學校網站刊登我當時榮獲ACS COMP excellence award

反思

經過一段時間的思考後，我在2018年7月來到了麻省理工學院(MIT)化工系 Heather J. Kulik教授的小組，研究機器學習(Machine learning, ML)用於無機分子錯合物(Inorganic molecular complexes, IMC)的性質預測和加速該類錯合物的結構生成及運算。進入小組的第一天就被安排指導了一名來自加州來的高中生Sean Lin，他是利用來暑假特別來MIT做專題（加州坐飛機到MIT飛行時間要5個半小時），我們成功以資料科學的方式在幾十萬筆IMC中找到核心金屬離子與第一配位層之間的作用如何決定該IMC的自旋態。該研究最後我跟Sean為共同第一作者，發表在Journal of Physical Chemistry A，而Sean最後拿到校長獎學金入學加州大學柏克萊分校。在Kulik教授小組一年內我又發了3篇共同作者的論文。之後，我想更深入的研究人工智慧(Artificial Intelligence, AI)在化學及材料上的發展性，希望從ML模型預測分子性質延伸到AI直接創造新的分子。因此我轉到同個學院材料系的Rafael Gomez-Bomberalli教授小組研究並且與日本的住友化學和豐田汽車進行產學合作研究如何用深度生成模型來設計及創造有潛力的有機發光二極體及固態電池電解質材料。此外，我在MIT的期間，黑石集團總裁Stephen A. Schwarzman捐贈了109億台幣，併入學校的231億台幣預算成立了MIT自1950年後成立的第六個學院Schwarzman College of Computing，志在跨領域的結合AI與各個領域（例如經濟、生物、化學等等），來達到“以人為本”的科技創新。當時我有幸參與創學院的展覽，看到了很多有抱負想結合AI來解決社會問題的研究計畫，對我的影響甚遠。

展望未來

在2017年，美國的國家科學基金會(NSF)正式核定了十大科學研究項目，並在2019年投資了每一項研究10億台幣，其中”Harnessing the Data Revolution”（駕馭數據革命）成為美國政府自2017年以來的十年著重發展的項目之一。回望台灣，中華民國行政院在107年6月核定了“台灣AI行動計畫”，並在2022年正式成立了「數位發展部」，這些行動不但都突顯了我們也意識到AI將是世界主要國家的發展目標，AI也已成爲我國科技發展的主要項目之一。我於2022年8月1號正式上任國立清華大學化學系助理教授，希望在未來幾（十）年能貢獻我在美國所學到的一切：無機化學、量子化學、物理化學、光電材料、機器學習及人工智慧，跨領域地結合這些知識來達到科技創新，並應用於新世代能源轉化催化劑、有機發光二極體及其他世界急迫需要的材料的研發上。有幸有三位有熱情的碩士生在我剛起步的時候就加入我的研究組（圖三），與我一起將我們的所想應用到這些領域中，也冀望未來我們會發揮我們所能一起推進社會。



圖三 楊自雄研究組2022年8月