

# 第一章 緒論

能源是一切活動的原動力，人類文明的發展與其所能利用的能源之間有著極為密切之關連，隨著文明的進步對於能源的依賴程度亦日益加深。自工業革命後，人類不斷在追求進步、發展高科技，以提升生活品質，像是：飲食、交通運輸、在家看電視、上網以及到處旅遊等，都直接或間接使用化石燃料(Fossil fuels)，更加速了能源的使用。但是地球的資源有限，所以人類為了追求經濟的發展，不得不大量地開採煤、石油和天然氣等化石燃料，以取得能源。

全世界每年消耗大量的化石燃料，導致地球產生嚴重的環境變遷，最讓人重視的莫過於是大氣污染的問題。使用石化燃料除了造成居住環境的污染外，也破壞了全球的生態平衡，在燃燒的過程中，會產生大量的有害物質，如： $\text{CO}_x$ 及 $\text{NO}_x$ 等，進而引起全球氣候暖化的溫室效應（Greenhouse Effect）。

人為的溫室效應導致了全球暖化，所造成的影響，不僅會引起極端的天氣型態、生態圈的改變、海平面上升、沙漠面積的擴大等，甚至會危害人類的生存。一些科學技術先進的國家同時也是化石燃料高消耗的國家，有責任為降低溫室氣體排放量做出更多的努力，並且減少化石燃料的消耗總量。

然而在現今世界上的主要能源仍是以化石燃料為首，於是要如何降低  $\text{NO}_x$  的排放量或者將  $\text{NO}_x$  轉化成無污染的氣體，將是首要課題。本論文中主要討論的是氮氧化物 ( $\text{NO}_x$ )，是由燃燒化石燃料所產生的，也是空氣污染中主要的成分之一。由於要消除  $\text{NO}_x$  各種形成的反應機構，必須找尋適當的反應物與  $\text{NO}_x$  作用。因此藉由 Gauss View 計算軟體與 DFT 理論，來探討 HCCN 與 NO 各種可能的反應機制與可能產生之產物，進而了解如何破壞 NO 鍵，並使之產物盡可能對環境無任何影響。

本研究使用 Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus theory (RRKM) 與 Variational transition-state theory (VTST) 等相關理論去計算反應物 HCCN + NO 的速率常數。