

## [研究成果報導]

## 88 學年度自然處傑出獎得獎人得獎理由及重要論文著作目錄

## 數 學

## 程舜仁 (成功大學數學系教授)

## (一) 得獎理由：

程舜仁教授的研究專長是超代數及其表現理論 (Superalgebras and their representations)，本次是他第二次獲得傑出獎，得獎的原因是過去三年他與 Kac 合作，解決無窮維線性緊緻李單超代數的分類問題 (classification of infinite-dimensional simple linearly compact Lie superalgebras) (1; 2; 3)。

## 學術創見及具體貢獻

Sophus Lie 在研究有限維多樣體的向量場所形成的李代數時，把這個問題歸結到無窮維線性緊緻李單代數的分類，Elie Cartan 初步解決這個問題，其後又經 Guillemin, Sternberg, Quillen 給予嚴格的證明 (1970)。Kac 與程舜仁把這個問題推廣到超多樣體 (Supermanifold) 的情況。因此，他們必須解決線性緊緻李單超代數的分類問題。但是，超代數的情況遠比李代數的情況複雜。

給定一個線性緊緻李單超代數，必有一種濾化結構 (filtration)，因此可以得到分次超李代數 (graded Lie superalgebra)，但是它的深度可能是 1, 2, 3, ... 而不像李代數的情況只有深度 1 才會出現。Kac 在論文 [1] 中完全分類這些分次超李代數的“餘項”。程舜仁與 Kac 在論文 [3] 中，針對 Kac 在 [1] 中的“餘項”造出其所對應的分次超李代數。然後，程舜仁與 Kac 在論文 [2] 中把各種分次超李代數所對應的線性緊緻李單超代數完全分類。因此，這個問題就獲得完全解決。

在論文 [2] 與 [3] 中，程舜仁與 Kac 發展出許多新的技巧。例如，在李代數的情況，Spencer cohomology 可以決定是否有非平凡的濾化形變 (filtered deformations)；但是，在超代數時，Spencer cohomology 卻不適用，他們必須發展出廣義的 Spencer cohomology 才能解決 "pedestrian" arguments 與 Spencer cohomology

所不能應付的情況，也才能解決深度  $\geq 2$  的情況。[1; 2; 3] 是一部優美的數學三部曲，在超代數的研究必定佔有重要的歷史地位。

最近，程舜仁與王偉強共同研究超代數的對偶問題 (duality problem in the sense of Roger Howe)。他們得出 Schur 函數與 Schur Q-函數極有趣的恆等式。

## (二) 重要著作目錄：

1. Kac, V. G. : Classification of infinite-dimensional simple linearly compact Lie superalgebras, *Advance in Math.* 139 (1998) 1~55.
2. Cheng, S. J. and Kac, V. G. : Generalized Spencer cohomology and filtered deformations of  $\mathbf{Z}$ -graded Lie superalgebras, *Advances in Theoretical and Math. Physics* 2 (1998) 1141~1182.
3. Cheng, S. J. and Kac, V. G. : Structure of some  $\mathbf{Z}$ -graded Lie superalgebras of vector fields, *Transformation Groups* 4 (1999) 219~272.

## 陳俊全 (台灣大學數學系教授)

## (一) 得獎理由：

陳俊全教授的研究領域是非線性偏微分方程，特別是在橢圓型的非線性偏微分方程有卓越的貢獻。他在純曲率方程 (scalar curvature equation) 的研究裡，有二個重要的貢獻。

- (1) 有關對奇異解 (singular solutions) 在其奇異點附近行為的研究，是近幾年來國際間橢圓型偏微分方程有關奇異解的研究裡最重要的工作之一。
- (2) 對 point-condensation solutions 的 concentration 現象有極透徹的分析。特別當 condensation 的點超過一點以上時，對於 condensation-points 間的 interaction 有完全的描述。這些工作是人們了解純曲率方程的解結構最基本且重要的工作。在純率方程的工作是他獲得傑出獎的理

由。

#### 研究成果及影響力

純曲率方程是在保角幾何 (conformal geometry) 中, 對純曲率 (scalar curvature 中所扮演的角色的研究。這個描述純曲率在保角幾何的方程式, 在其它學門描述一些現象的數學模式亦常出現。可說是非線性橢圓型方程裡一個基本重要但困難的方程式。由於這個方程式的解的結構有許多豐富的現象, 在這過去的二十多年中引起許多數學家的興趣。其中尤以方程式的解具有 point-condensation 的現象, 也就是說, 解的整個能量會凝聚在極小的空間裡。研究這類解的行為是近年來國際間偏微分方程的研究裡最重要的研究主題。由於這類工作需要高難度的數學技巧, 陳教授的工作成為這一方面問題的研究典範之一。

#### 具體貢獻

陳教授在純曲率研究工作有許多重要成果, 要詳盡描述須要相當多的專門語言, 因此我僅陳述其中一個最基本但極為重要的工作, 即是球面的 Harnack inequality。假設  $u_i$  是一串下列方程式的解

$$Du_i + K_i(x)u_i^{\frac{n+2}{n-2}} = 0 \text{ for } |x| < 1 \quad (1)$$

#### Theorem (Spherical Harnack inequality)

Suppose the origin is the only critical point of  $K_i$  where  $K_i$  is a positive  $C^1$  function, and  $K_i$  satisfies some nondegenerate conditions at the origin. Assume that  $x_i$  is a maximum point of  $u_i$

$$u_i(x_i) = \max_{|x| \leq \frac{1}{2}} u_i(x) \rightarrow +\infty.$$

Then there exist an universal constant  $c > 0$  such that

$$u_i(x) \leq cu_i(y)$$

holds whenever  $|x - x_i| = |y - x_i| \leq \frac{1}{2}$ .

這個 spherical Harnack inequality 說明當有 concentration 發生時, 以 concentration point  $x_i$  為中心的任一球面, 其值是可以互相比較的, 換句話說, 解是 asymptotically (radially) symmetric with respect to  $x_i$ , 這是對解行為了解的第一步, 但絕非是最困難的一步。但定理

的證明已需要不同於以往的全新概念與技巧。

#### (二) 重要著作目錄

1. Chen, C.-C. and Lin, C.-S., Estimates of the Conformal Scalar Curvature Equation Via the Method of Moving Planes, II, J. of Diff. Geometry 49 (1998), 115-178.
2. Chen, C.-C. and Lin, C.-S., On the Asymptotic Symmetry of Singular Solutions of the Scalar Curvature Equations, Math. Ann. 313 (1999), 229-245.
3. Chen, C.-C. and Lin, C.-S., Blowing-up with Infinite Energy of Conformal Metrics on  $S^n$ , Comm. In P.D.E. 24 (5&6) (1999), 785-800.

#### 陳榮凱(中正大學數學系)

#### (一) 得獎理由：

陳榮凱專長在代數幾何, 回國三年, 致力於該領域中 Abelian Variety 刻劃問題的研究。其研究成果被認為是該專題最先進的結果, 且被聲望極高的 Invent. Math. 所接受發表, 因此獲得本年度數學學門傑出研究獎。

#### 學術創見：

代數幾何的古典問題之一是用雙有理不變量來刻劃代數流形的結構。在這個方向上關於 Abelian Variety 的刻劃, 陳榮凱的工作推廣了 Kawamata 與 Kollár 的工作, 是此專題目前為止最深入的進展。

#### 研究成果影響力：

Abelian Variety 的刻劃問題, Kawamata 於 1981 年的工作, 其中的假設之一是 Kodaira dimension 等於 0; 之後的一個重要進展是 Kollár 於 1986 年的證明, 他用更具體的"多虧格數" (plurigenera) 來取代先前 Kodaira dimension 的條件。Kollár 並且提出一個更強化的猜測, 是說在關於多虧格數的假設方面, 只要假設第一、第二多虧格數分別等於一, 則原來 Abelian Variety 的刻劃問題的結論仍然成立。

陳榮凱的合作論文[2]證明了 Kollár 的猜測為真, 成為本專題目前最佳的結果。

#### 具體貢獻：

- (1) 證明了若  $X$  是某投影代數流形,  $P_1(X)=P_2(X)=1$  且  $q(X)=\dim X$ , 則  $X$  雙有理等價於某 abelian variety.
- (2) 若  $X$  是某投影代數流形, 且具有 maximal Albanese dimension, 則  $5K_X$  給出了一個

近乎有限的有理映射 (generically finite rational map)。

- (3) 在任何 3 維以上的投影代數流形  $X$ ，只要任意給定的自然數  $N$  夠大，就可存在某  $X$  上的光滑曲線，它的虧格數等於  $N$ 。

(二) 重要著作目錄：

1. J. A. Chen, On genera of smooth curves in higher dimensional varieties, Proc. AMS 125, (1997), 2221-2225.
2. J. A. Chen, C. D. Hacon, Characterization of abelian varieties, Invent. Math., to appear.
3. J. A. Chen, C. D. Hacon, Pluricanonical maps of varieties of general type and maximal Albanese dimension, Preprint.

## 統計

姚怡慶(中央研究院統計研究所研究員)

(一) 得獎理由：

姚研究員近年來之研究課題包括：

- (1) 常態分佈不等式；
- (2) 當參數個數隨樣本數成長而漸增時之統計推論；
- (3) 分離率估計偏差之校正。

關於(1)，由於藥學上之 bioequivalence 研究需要，而導出了一個關於常態分佈之不等式。第(2)個部分，則是就配對比較(paired comparisons)上常用的 Bradley-Terry 模型，研究最大似估計量之極限行為，主要特色在於假定未知參數的個數會隨著樣本數之成長而增加，從而使得傳統之分析方法必需做適當的調整方可處理極限問題。第(3)個部分是關於人類遺傳上之分離率估計，藉著 randomization 的技巧，來調整已有之估計量，從而降低了原有估計量之偏差。

(二) 重要著作目錄

1. Y.-C. Yao and H. Iyer, "On an inequality for the normal distribution arising in bioequivalence studies", Journal of Applied Probability 36, 279 (1999).
2. G. Simons and Y.-C. Yao, "Asymptotics when the number of parameters tends to infinity in the Bradley-Terry model for paired comparisons", Annals of Statistics 27, 1041 (1999).

3. Y.-C. Yao and J.J. Tai, "Bias correction for segregation ratio estimation in human genetics", Biometrics, to appear.

何淮中 (中央研究院統計研究所研究員)

學術創見

何淮中研究員的作品，針對非傳統的平穩過程，以創新的方法，結合過程特性及古典的技巧，於再新理論和極值極限得到深刻而重要的結果。

具體貢獻及影響

不僅解決一些機率論中基礎的漸進問題，所提出的鞅-泰勒分解方法，亦被長相關過程研究學者採用，藉以處理相關的統計推論問題。作品結果在財務經濟亦有相當的應用。

重要著作目錄

1. Ho, H-C., and William McCormick (1999). Asymptotic distributions of sum and maximum for Gaussian processes. *J. Applied Probability* 36, No.4, 1031-1044.
2. Ho, H-C. (1999) A note on first passage time of stationary sequences. *Statistica Sinica* 9, No. 3, 725-733.
3. Ho, H-C., and Hsing, Tailen (1997). Limit theorems for functionals of moving averages. *Annals of Probability* 25, 1636-1669.

## 物理

侯維恕 (台灣大學物理系教授)

(一) 得獎理由

侯維恕教授過去數年對 B 物理與 CP 破壞的研究有傑出的表現，適時的提出許多獨到的見解並深入探討。近年來領導台灣團隊參與日本 B 工廠 BELLE 實驗有相當大的進展。

學術創見

- (1) 探討在 B 介子無魅衰變中藉新物理相角貢獻出現極大 CP 破壞效應之可能性。
- (2) 在稀有 B 衰變數據出爐時，洞見標準模型之相角或許比原本以為的大，並看見電弱企鵝圖之徵兆。
- (3) 在深入探討多種 B 衰變數據後，提出若相角在第二象限而非第一象限，則實驗

數據十分支持「因子化」方法。

- (4) 由以上切入點，不但初步得出相角之大小，且進一步指出稀有 B 衰變數據仍有些疑點，或許要終態散射方能解釋。

#### 研究成果影響力

侯教授在過去兩年的研究藉稀有 B 衰變數據推論出標準模型之 CP 破壞相角值大概大於 90 度，與用其他傳統間接分析法得到的約 60 度十分不同，且已為 B 物理工作者所普遍接受。此創見將在未來數年被實驗進一步驗證。

#### 具體貢獻

侯教授對粒子物理新的現象能夠掌握，並切中其中重要的物理精髓，並且提出新的創見，此特質充份地反映在其論文中。除了理論研究外，侯教授大力推動台大高能實驗室之建立，已見規模，於 1999 年完成參與 BELLE 實驗自製子偵測器系統並首先偵測到 B 工廠之 Bhabha 散射。

#### (二) 重要著作目錄

1. W.S. Hou and B.Tseng, "Enhanced  $b \rightarrow sg$  Decay, Inclusive  $\eta'$  Production, and the Gluon Anomaly", Phys. Rev. Lett. **80**, 434-437 (1998).
2. Wei-Shu Hou, James G. Smith, Frank Würthwein, "Determination of the Phase of  $V_{ub}$  from Charmless Hadronic B Decay Rates", hep-ex/9910014.
3. Wei-Shu Hou, Kwei-Chou Yang, "Possibility of Large Final State Interaction Phases in Light of  $B \rightarrow K\pi$  and  $\pi\pi$  Data", Phys. Rev. Lett. **84**, 4806-4809 (2000).

### 黃英碩 (中央研究院物理研究所博士)

#### (一) 得獎理由

黃英碩博士應用超高真空掃描穿隧顯微術 (scanning tunneling microscopy) 在矽、鍺半導體磊晶成長機制之了解，及矽晶表面擴散與表面化學反應機制，得到突破性之重要成果。

#### 學術創見

- (1) 研究在鉛覆蓋矽(111)表面最初期二維鍺島的成核(nucleation)及成長(growth)現象，探討表面反應對成核成長的影響，證實該系統為反應受限(reaction-limited)，即反應為成核成長過程中的瓶頸步驟，反應受限在磊晶成長理論是一

新觀念。黃博士指出，傳統成核理論僅考慮表面擴散，因此只適用於擴散受限系統，並提出磊晶成長理論需適當地考慮表面擴散及反應，而且原子團的動態行為對半導體磊晶成長也十分關鍵，現有磊晶成長理論普遍忽視原子團的行為，而僅考慮單一原子，難以正確描述半導體磊晶成長的行為。

- (2) 發現在乾淨的矽(111)表面有某一種奇異原子團，其為此表面的很多動態行為(如擴散、磊晶成長等)的基本單位，黃博士及其研究群定量地測出此原子團的跳躍速率及活化能等參數，並提出數個奇異原子團協力反應(concerted reaction)的成核成長新機制。
- (3) 觀察在矽(111)- $7\times 7$  表面吸附的氧分子及氫原子在矽的表面原子上的跳躍，發現氧分子跳躍過程中會經歷兩個時間短暫的中間態，再到下一個位置，氫原子則只經歷一個中間態，黃博士及其研究群實驗量得每一基本步驟的活化能及中間態的能量。此外，還發現原子分子的吸附位置、跳動、及反應，與表面未成對電子(dangling bond) 的結構有相當密切的關係。

#### 研究成果影響力

- (1) 傳統成核理論已被廣泛採用來解釋各種系統的磊晶成長現象，黃博士及其研究群以實驗證明傳統成核理論的不周全，其忽視反應在磊晶成長過程中扮演的角色，此成果有助於未來發展更周延的成核理論，也警告傳統成核理論被不當地濫用。
- (2) 矽為半導體中的一個代表性材料，黃博士及其研究群的發現讓我們懷疑其他半導體表面也可能有奇異原子團。現有磊晶成長理論未考慮奇異原子團的存在，研究人員普遍用單一原子的模型來描述磊晶成長的行為。在矽(111)表面上，過去有很多動態行為被觀察到，也是用單一原子的模型來描述，黃博士及其研究群的實驗推翻此類模型，所提出的新機制更能適切地描述矽(111)表面上的動態行為。
- (3) 矽的氧化是半導體技術中一個很重要的步驟，在半導體材料的處理過程中也常

常使用到氫，因此研究初期單一氧分子及單一氫原子如何吸附到矽表面、跳動、及反應，有助於對矽表面氧化程序及氫跟矽的作用有更基本的瞭解。此實驗特別的是對中間態的捕捉，中間態在很多動態現象中扮演著關鍵性的角色，但因其有生命期短、數量少的特性，傳統技術很難偵測中間態的存在，更難對其作研究，黃博士及其研究群以可變溫 STM 成功地捕捉中間態，並決定出它們的能量。

#### 具體貢獻

- (1) 黃博士及其研究群對鍺在鉛覆蓋矽(111)所提出的成長機制，有助於釐清表面催化成長(surfactant-mediated epitaxy)機制的謎，並對發展更周延的成核理論提出新方向，此實驗是由自製 UHV-STM 所完成。
- (2) 黃博士及其研究群首度發現奇異原子團在表面動態扮演關鍵角色，故此發現對如半導體等共價鍵結材料 (covalently bonded materials) 的磊晶成長機制將有重要的影響。
- (3) 過去對表面分子的基本運動(擴散及反應)，只能依賴猜測及理論推算，黃博士及其研究群首次對單一分子事件程序 (pathway) 做直接觀察及量測。

#### (二) 重要著作目錄

1. I.-S. Hwang, R.-L. Lo, and T.T. Tsong, "Site Hopping of Single Chemisorbed Oxygen Molecules on Si(111)-  $7 \times 7$  Surfaces", *Physical Review Letters* **78**, 4797 (1997).
2. I.-S. Hwang, T.-C. Chang, and T.T. Tsong, "Exchange-Barrier Effects on Nucleation and Growth of Surfactant-Mediated Epitaxy", *Physical Review Letters* **80**, 4229 (1998).
3. I.-S. Hwang, M.-S. Ho, and T.T. Tsong, "Dynamic Behavior of Si Magic Clusters on Si(111) Surfaces", *Physical Review Letters* **83**, 120 (1999).

#### 魏金明 (中央研究院物理研究所研究員)

##### (一) 得獎理由

魏金明博士與其合作者多年來在反轉電子繞射圖案得到原子結構的研究方面有傑出之貢獻，尤其在利用菊池電子繞射圖案決定表面結構上之發展。

學術創見

- (1) 首先提出【多重能量相位疊加】方法，應用於菊池電子全相術實驗，發展成為【直接決定表面結構】的新技術。
- (2) 發展出【電子相關熱擴散散射圖案 Patterson 反轉】直接決定表面結構的新技術。
- (3) 發展出【低能電子繞射曲線 Patterson 反轉】直接得到表面結構訊息的新技術。

#### 研究成果影響力

魏博士與其合作者利用【多重能量相位疊加】理論，發展出數種直接全相反轉或 Patterson 反轉電子繞射圖案，以得到原子結構訊息的方法，這些新技術的發現，對傳統上認為只有如 X-射線之單一散射系統的繞射斑點可以反轉得到原子結構的訊息，是一個觀念上的大突破。

#### 具體貢獻

截至目前為止表面原子結構的決定，都是經由測量低能電子繞射曲線，與許多結構相關之多重散射理論計算曲線互相比較而間接決定，因此是一種嘗試與錯誤的過程。魏博士與其合作者發展出的新技術，則可以反轉電子繞射圖案，直接得到表面原子結構的訊息，減少許多嘗試與錯誤的過程。

#### (二) 重要著作目錄

1. T. Aubukawa, C. M. Wei, T. Hanano and S. Kono, "Correlated thermal diffuse scattering in low to medium energy electron diffraction: A new structural tool", *Phys. Rev. Lett* **82**, 335 (1999).
2. C. Y. Chang, Y. C. Chou, and C.M. Wei, "Atomic structures and phase transitions of Si (113) reconstructed surfaces: Kikuchi electron holography studies", *Phys. Rev. B* **59**, Rapid Communication, R10453 (1999).
3. C. Y. Chang, Z. C. Lin, Y. C. Chou, and C. M. Wei, "Direct three-dimensional Patterson inversion of low energy electron diffraction I(E) curves", *Phys. Rev. Lett.* **83**, 2580 (1999).

#### 化學

楊學明 (中央研究院原子分子研究所副研究員)

## (一) 得獎理由

楊博士的研究領域是氣相化學動力學。最近四年來建立了一套新一代交叉分子碰撞儀，裝設完成氫原子雷德堡態時譜偵測裝置。進行一系列氧原子和甲烷，矽烷以及氫分子等的基元反應實驗。詳細探討水分子以及一系列有機小分子的光分解動力學。均是氣相化學動力學裡，領先性的工作。

## 學術創見及具體貢獻

- (1) 建立了一套世界上最完先進的通用型交叉分子束儀器，對分子的光分解過程以及交叉分子束碰撞反應作更深入的研究，其中包括氧原子和甲烷及矽烷分子的微觀化學反應動力學上的探討，為多通道反應過程的動力學行為提供了例證。
- (2) 建立了一套高解析度的氫原子雷德堡態時譜裝置。對水分子的光分解進行詳盡的實驗研究，解決了長期以來水分子在 A 電子態光分解過程研究中理論和實驗結果不相吻合的困境。並發現傳統上利用雷射誘導螢光方法測量氫氧基產物的量子態分佈有嚴重缺陷。此外首次觀察到水分子在 B 電子態光分解動力過程中，由於電子位能面交叉及互相互作用，發生了特殊的量子干涉現象。以及發現了水分子光分解過程中有趣的動力學共振現象。並成功的測量了氧原子和氫分子在化學變化過程中，具量子態解析之微分反應截面。為插入式反應機制 (Insertion Mechanism) 提供了一個極佳的實驗例證。

## 研究成果影響力

藉由一系列精確的光分解及交叉分子束碰撞實驗，開拓了微觀化學反應動力學新視野，並為理論工作者提供新的思考方向。

## (二) 重要著作目錄

1. D.W. Hwang, X. Yang, X. Yang "The Vibrational Distribution of the OH Product from H<sub>2</sub>O Photodissociation at 157 nm: Discrepancies Between Theory and Experiment" *J. Chem.Phys.* **1999**, *110*,4119.
2. R. N. Dixon, D. W. Hwang, X. F. Yang, S. Harich, J. J. Lin, X. Yang "Chemical "Double Slits": Dynamical Interference of Photodissociation Pathways in Water"

*Science* **1999**,285,5431.

3. J. J. Lin, S. Harich, Y. T. Lee, X. Yang "Dynamics of the O (<sup>1</sup>D)+ CH<sub>4</sub> Reaction: Atomic Hydrogen Channel vs Molecular Hydrogen Channel" *J. Chem.Phys.* **1999**, *110*,10821.

## 胡紀如 (清華大學化學系教授)

## (一) 得獎理由

胡紀如博士由於他在藥物化學重要且適時的貢獻而備受此領域同仁的推崇。他與他的研究群以及合作同仁最近合成出一些具有抗泡疹與抗愛滋病毒的新奇二核苷酸類似物、一序列具有抗菌活性的頭孢菌素-3'-間苯三酚酯與 7-間苯三酚醯胺基頭孢菌素、及具有強抗菌功能的異去硫氮代 cephem. 許多抗泡疹病毒的化合物已在臨床試驗階段。而在頭孢菌素衍生物與異去硫氮代 cephem 的研究成果，可望在未來發展出一套新的β-內醯胺抗生素。上述這些研究成果受到藥物學與生物醫學團體廣泛的注意。

## 學術創見

頭孢菌素衍生物與異去硫氮代 cephem 之所以具有活性，是透過推理性的分子設計，並非隨機的分子篩選而得，因此是一種可望用來克服細菌抗藥性的新藥開發策略。

## 研究成果影響力與具體貢獻

過去多年來，胡紀如博士與他的研究夥伴們在有機合成化學與藥物化學的研究領域已做出相當重要的貢獻。除了合成出抗病毒與抗菌活性的化合物外，他的研究群最近亦開發出新的人造 DNA 切割酶，可用來切割 DNA。胡博士在有機合成方法的開發，亦相當有成就，他開發出利用矽基或矽基試劑去引導或促進有機反應，亦開發出「反撲試劑」的觀念去進行複雜的有機官能機轉換。

## (二) 重要著作目錄

1. J.-R. Hwu, A. A. Moshfegh, S.C. Tsay, C.-C. Lin, W.-N. Tseng, A. Azaripour, H. Mottaghian and G. H. Hakimelahi, *J. Med Chem.* **40**, 3434(1997).
2. J.-R. Hwu, S.C. Tsay, and S. Hakimelahi, *J. Med. Chem.* **41**, 4681(1998).
3. J.-R. Hwu, S. Hakimelahi, A.A. Moosavi-Movahedi and S.-C. Tsay, *Chem. Eur. J.* **5**,

2705 (1999).

## 林小喬 (中央研究院生物醫學研究所)

## (一) 得獎理由

林小喬研究員專長於理論計算，尤其是在生物分子的複體結構以及反應動力學方面。其長期從事於利用嶄新的理論方法以及概念來針對生化有機大分子複體以及溶液態之反應動力學提出理論上的佐證，並發展出創新的模型概念來預測其結構及反應趨勢，成果備受國際同行所推崇。

## 學術創見與具體貢獻

## (1) 於生物分子的結構，動力學及其功能上的創見

- a. 在蛋白質和金屬(尤其是和鎂二價金屬的作用力)之理論計算方面有突破性的發展。成功的解釋了  $Mg^{++}$  和蛋白質中的羧酸根(carboxylate)官能基複體的架構以及水分子所扮演的角色。並由  $Mg^{++}$  單一配位複體的模型來發展出一套可以正確預估  $Mg^{++}$  和多種配位基結合能的半經驗法則。
- b. 林博士利用 *E. Coli* ribonuclease HI (RNase HI) 蛋白質的分子動力學模擬數據與其 NMR 結構及 X-ray 晶體結構數據做比較。對比結果成功的發現由極為少量之 NMR Constraints 的現象即可以判別出動態過程的演變。這個研究成果開啟了利用 NMR 結構組的資料將(蛋白質支鏈)游動性引入蛋白質結合結構預測的先河。
- c. 利用分子動力學模擬計算的方法來針對以往無法以 NMR 緩解實驗中看清楚，但在生物學上卻是很重要的蛋白質其重要部份(如活化中心等等)做詳細的動力學分析。
- d. 成功的將分子動力學模擬和 ab initio 化學位移(chemical shift)的計算結合起來，提供 NOE 及化學位移資料對氫鍵，氨基-芳香劑 aliphatic-芳香劑之交互作用解釋上的輔助資訊。

## (2) 於磷酸類(phospho-ester)反應性方面的創見

- a. 發展出一套新的的理論技術用以測試各磷酸類的反應機制，此技術排除一

些特定的反應機構而使得反應途徑的選擇更具彈性，並可以因此找出新的反應途徑來。更重要的是可以針對每一個反應找出其速率決定步驟及其所對應之過渡態。這方面的計算成果不但成功的預測了產物的分佈比例，也精確的估算出與實驗相吻合的活化自由能。最值得一提的是因為不須要調整任何參數，使得理論預測的真實性及意義性增大。

- b. 對於氫氧根離子與非環型的 phosphate 之氣態反應，林博士的理論計算結果顯示碳和磷對於氫氧根離子基本反應性的重要因素在於與溫度無關的靜電力。這結果使得攻擊磷的反應較易發生。反之與溫度相關的亂度效應將增強在碳上的反應性。此二種反應會相互競爭，預測結果與實驗之產物分布情形相吻合。

- (3) Solvation (溶合) 理論上的創見成功的藉著離子半徑與“離子→水對(ion-water pair)分佈函數”之第一個鋒位置的平均值當作有效的 Born radius 導出了一個同時考慮了 dielectric saturation 與 electrostriction 的溶劑性質來針對球型離子的溶合能計算的準確公式。這公式可以推出溶合時的亂度以及焓的變化，將來可以用在大型生化分子溶合的自由能模擬上。

## (4) 新的計算技術/演算法

發展出 cellular automata 計算方法，其重要性是在於可以用在各種物理-化學的反應過程當中。因此，它可以用來模擬許多在高科技或生物上實驗僅能提供非常少的結構及動力學資料的系統。由於此種方法在本質上就有非常好的平行運算效率，故此種分子模擬方法將來可以用來計算非常大的分子量系統 ( $>10^6$  Daltons)。

## (二) 重要著作目錄

1. Nai-Yuan Chang and Carmay Lim, J. Am. Chem. Soc., **120**, 2156-2167 (1998).
2. Todor Dudev, Jimmy Cowan and Carmay Lim, J. Am. Chem. Soc., **121**, 7665-7673 (1999).
3. C. Satheesan Babu and Carmay Lim, J. Phys. Chem. B, **103**, 7958-7968 (1999).

## 地 科

### 羅清華 (台大地質系教授)

#### (一) 得獎理由：

羅教授研究工作範圍廣泛，包括氬同位素擴散作用、台灣造山帶變質作用、熱事件演化與東南亞地體構造演化研究等，其成果頗具廣度與深度，備受重視。

#### 研究成果影響力

最近五年進行兩項不同領域之工作：

- (1) 氬同位素擴散作用與應用研究：了解礦物內氬同位素的擴散作用，是為同位素地球化學與定年學相關理論與應用的基礎。近十年來，羅教授持續一系列礦物內氬同位素擴散機制與動力方面之研究工作，成功推導相關理論，並成功地應用於東亞地區之造山與陸塊運動（包括台灣造山、西藏高原抬升與大型剪切帶錯移活動等）研究工作上，成效卓著。
- (2) 新生代東南亞地體碰撞 - 脫逸運動：相關成果足以改寫板塊運動學說中的地體運動模式，奠定碰撞造山 - 陸塊飄移運動相關研究工作的基礎。

#### 具體貢獻：

羅教授之研究工作主要著重於基礎理論研究，其研究結果，不但修正了以往相關理論模式之謬誤，並建立新模式，作為未來相關研究工作之基礎，其成果頗受國際學者重視。近年來，羅教授更擔任【CREATE I】整合型研究計畫召集人，有效整合國內有限資源，從事國際間學者所重視之相關研究工作，並積極將國內地科研究工作與成果推向國際，堪稱國內地科界最成功的整合型計畫之一。

#### (二) 重要著作目錄

1. Lo, C.H., Lee, J.K.W. and Onstott, T.C. (2000) Argon Release Mechanisms of Biotite in vacuo and the role of short-circuit diffusion and recoil. *Chemical Geology* 165, 135-166.
2. Chung, S.L., Lo, C.H., Lee, T.Y., Zhang, Y., Xie, X., Li, X., Wang, K.-L. and Wang, P.-L. (1998) Diachronous uplift of the Tibetan plateau starting 40 Myr ago. *Nature* 394, 723-725.
3. Wang, P.-L., Lo, C.H., Lee, T.Y., Chung, S.L., Lan, C.Y. and Yem, N.T. (1998)

Thermochronological evidence for movement of the Ailao Shan - Red River shear zone: a perspective from Vietnam. *Geology* 26, 887-890.

### 王錦華 (中研院地科所研究員)

#### (一) 得獎理由：

王研究員之研究工作在地震物理過程模擬和地震活動上，對了解地震破裂過程具有重要的貢獻。

#### 研究成果影響力

- (1) 地震活動之動力學研究：利用質點及彈簧組成之格點動力學模型，研究地震活動和地震尺度律，對瞭解破裂過程各相關物理參數與 b 值的關係，十分有價值。
- (2) 台灣地區的地震活動：建立台灣地區地震活動之地震次數的深度分布，並討論該分布與地質、應力及地熱等之相關性。本研究成果對台灣地體構造的瞭解具有重要性。
- (3) 地震斷層之長度寬度及平均位移之相關性：由分佈於世界各地之地震破裂長度、寬度和平均位移，研究其相關性，並發表於 SCI 期刊上。

#### 具體貢獻：

王研究員之研究工作主要著重於基礎地震物理研究，其研究結果具有國際聲譽，王教授持續在理論基礎研究上致力於相關定律的建立與了解，發表於國際期刊的論文頗受國際學者重視。王教授亦擔任【地震及活斷層研究】重大科技計畫總主持人，積極有效整合國內有限資源及人力，進行地震及活斷層的相關研究工作，並將國內研究工作與成果積極推向國際。

#### (二) 重要著作目錄

1. Wang, J. H. and S. S. Ou (1998) On scaling of earthquake faults, *Bull. Seis. Soc. Am.*, 88, 758-765.
2. Wang, J. H. (1997) Effect of frictional healing on the scaling of seismicity, *Geophys. Res. Lett.*, 24, 2527-2530.
3. Wang, J. H. (1996) Velocity-weakening friction as a factor in controlling the frequency-magnitude relation, *Bull. Seis. Soc. Am.*, 86, 701-713.



## 大 氣

郭鴻基 (台灣大學大氣科學系)

### (一) 得獎理由

郭鴻基教授在大氣科學研究的重要貢獻包含三個主題，即颱風動力學、中尺度對流及數值模式和數值方法。特別是颱風動力學研究對大氣科學的基礎性貢獻，這使郭教授成為在颱風動力研究方面的國際知名學者。

#### 學術創見

- (1) 第一次分析觀測到的橢圓型颱風眼的旋轉和伴隨的對流，以探討線性和非線性渦度波動力如何作用以產生這些現象。這項研究和對於瑞伯與亞力士颱風合併過程的研究，使我們對於由熱力和動力驅動的颱風眼的錯綜複雜過程增加了了解。
- (2) 對於區域波譜方法之研究，首次發現區域波譜模式的準確性與尺度有強烈相關。
- (3) 對於數值模式裡使用之正定法研究，使模式裡物質之平流計算（例如：水氣、污染物）不出現負值，改進模擬準確度。

#### 研究成果影響力

郭教授的颱風動力研究，使我們對颱風結構與強度演變之動力增加了解，對颱風預報之改進亦有貢獻；在區域波譜模式準確度與尺度相關之發現，對數值預報與模擬研究有重大影響；正定法研究對物質平流計算之改進，對不同尺度模式之預報與模擬準確度之改進有很大幫助。

#### 具體貢獻

- (1) 橢圓型颱風眼的旋轉與雙颱風合併過程的研究，對颱風動力研究做了重要的基礎性貢獻。
- (2) 區域波譜模式準確性與尺度關係之研究，對模式之改進與不確定性之了解，有重大突破。
- (3) 正定法研究，對物質平流計算之改進，已被不同尺度模式做模擬時採用。

### (二) 主要著作目錄

1. Chang, C-P., S.-C. Hou, H.-C. Kuo, and G. T.-J. Chen, 1998: The development of an intense East Asia summer monsoon disturbance with strong vertical coupling. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 2692-2712.

2. Kuo, H-C., and R. T. Williams, 1998: Scale dependent accuracy in regional spectral methods. *Mon. Wea. Rev.*, **126**, 2640-2647.
3. Kuo, H-C., R. T. Williams, and J.-H. Chen, 1999: A possible mechanism for the eye rotation of typhoon Herb. *J. Atmos. Sci.*, **56**, 1659-1673.
4. Kuo, H-C., T.-M. Leou, and R. T. Williams, 1999: A modified Smolarkiewicz advective method with fourth order accuracy. *Computer and Fluids*, **28**, 779-799.
5. Kuo, H-C., and C.-T. Chen, 1999: Experiments with a spectral convection model. *TAO*, **10**, 651-692.

## 海 洋

扈治安(中央研究院地球科學研究所)

### (一) 得獎理由：

扈治安研究員在放射性同位素地球化學研究上卓然有成，利用天然或人為核種的時空分佈探討海洋體系沉積物動力學及應用在水土保持相關之研究。五年來發表近 20 篇論文，不論研究的質與量上堪稱國內海洋學界的模範。

#### 學術創見

扈研究員以精密實驗方法量測  $^7\text{Be}$  電子捕獲之蛻變率，發現放射性同位素的半衰期會隨化學組成與壓力條件的改變而變化，此項發現對放射同位素利用在地質學的定年工作上產生極大的意義，深受國際重視。

#### 研究成果影響力

沉積物在東海的傳輸機制的探討為國內行之有年的「黑潮邊緣交換作用」整合型計畫的主要課題之一，扈研究員自 1996 年自美返台服務以來，即參與該整合研究，利用  $^{210}\text{Pb}$ 、 $^{137}\text{Cs}$ 、 $^{239,240}\text{Pu}$  等多樣放射核種在東海沉積物內的分佈，勾劃出大量由長江、黃河等河川輸入的沉積物在東海中的命運(包括沉積物的來源、傳輸途徑、沉積速率之推算等工作)，此工作對於物質在東海體系內的循環機制的探討極為重要，扈研究員的研究成果使得東海的海洋科學研究更上層樓。

#### 具體貢獻

- (1) 利用天然( $^7\text{Be}$ 、 $^{210}\text{Pb}$ 、 $^{228}\text{Th}$ )及人造( $^{137}\text{Cs}$ 、

$^{239,240}\text{Pu}$ 核種作為海水或顆粒體的示蹤劑，研究東海內之沉積動力學。

- (2) 以鈾同位素作為微量金屬的類比元素，探討海洋中的清除作用。
- (3) 利用  $^{137}\text{Cs}$ 、 $^7\text{Be}$ 、 $^{210}\text{Pb}$  的降塵量，進行水土保持之相關工作。

(二) 重要著作目錄

1. Huh, C.-A. and C.-C. Su (1999) Sedimentation dynamics in the East China Sea elucidated from  $^{210}\text{Pb}$ ,  $^{137}\text{Cs}$  and  $^{239,240}\text{Pu}$ .

*Marine Geology*, 160(2), 183-196. (NSC 87-2611-M-001-001-k2)

2. Huh, C. A. and H.-Y. Chen (1999) History of lead pollution recorded in East China Sea sediments. *Marine Pollution Bulletin*, 38(7), 545-549. (NSC 87-2611-M-001-001-K2)
3. Huh, C.-A. (1999) Dependence of the decay rate of  $^7\text{Be}$  on chemical forms. *Earth Planet Sci. Lett.* 171(3), 325-328. (NSC 88-2611-M-001-001-K2)