

2025

綠能科技與材料論壇 會議手冊

日期：114年3月27日（星期四）

時間：09:30~16:40

地點：中國文化大學大恩館1樓國際會議廳



主辦單位：中國文化大學 理工學院(工)暨化材系所

中國文化大學
Win
[敬定] 以

院 長 的 話

中國文化大學工學院目前所擬定之發展方向為「綠能科技與材料」與「智慧型數位生活」等整合性研究項目，前者投入相關研究子題如：綠色能源、奈米材料、先進化工製程、智慧衣服等項目；而後者則投入相關研究子題如：智慧型機器人、無線感測網路、數位機電、影像處理科技、智慧機電控制與實踐等項目。以此兩大學術發展主軸；成立研發中心，執行研究計畫，召開研討論壇，**迄今適逢學校 63 周年校慶，本院配合校慶舉辦此論壇活動，**期望經由本院師生的共同努力，能夠獲致優良的學術成果，期能結合跨系所的力量，建立文大工學院之特色。

進入 21 世紀高科技主導人類生活的時代，人類對能源及資源的消耗加劇成長，但對地球環保概念愈益重視。台灣的天然資源蘊藏有限，絕大部分的能源需仰賴進口，經濟發展因而容易受到多重因素的衝擊，加上環境保護及生態保育的觀念已漸成普世的價值與趨勢；對我國而言，發展綠能科技、尋求替代能源、有效提高能源的使用效率以及實行節能減碳的生活，皆為產官學研各界感到迫切的課題，尤其現在政府對綠色能源特別重視即將投入大量資金發展綠色能源以取代現有能源，此時正是台灣發展綠色能源的絕佳時機。

為此將由化學工程與材料工程學系同仁協助「綠能科技與材料」小組規劃，舉辦「2025 綠能科技與材料論壇」，會中邀請 3 位學者專家做系列專題演講，陣容相當「堅強」，本院謹致上衷心的感激之意。

敬祝

研討會圓滿成功，與會諸君平安愉快。

中國文化大學理工學院-(工)院長

陳景祥 謹誌

2025 年 3 月 27 日



2025 綠能科技與材料論壇

日期：114年3月27日（星期四）

地點：中國文化大學大恩館1樓國際會議廳

議・程・表

時 間	演 講 題 目	主 講 人	主持人
09:30-10:00	報 到		
10:00-10:10	開 幕 式 (Opening)	工學院 陳景祥 院長	化材系所 張鈞智 主任
10:10-11:40	再生能源科學與未來： 以太陽能為範例	淡江大學 化學工 程與材料工程學系 謝孝基 助理教授	化材系所 張鈞智 教授
11:40-13:10	午 餐 (lunch)		
13:10-14:40	模組化微反應器：未來永 續化學工廠的拼圖	尹諾士國際股份有 限公司 顏美吟 經理	化材系所 陳輝龍 教授
14:40-15:00	茶 敘 (coffee breaking)		
15:00-16:30	Theoretical Approaches to Energy Storage and Conversions	東吳大學 化學系 劉啟佑 助理教授	化材系所 廖振成 教授
16:30-16:40	閉 幕 式 (closing)		化材系所 張鈞智 主任

主辦單位：中國文化大學 理工學院(工)暨化材系所



議程一

再生能源科學與未來：以太陽能為範例

主講人：

謝孝基 助理教授

淡江大學 化學工程與材料工程學系

主持人：

張鈞智 副教授/系主任

中國文化大學 化學工程與材料工程學系



2

摘要

- 1. 介紹
- 2. 再生能源的重要性
- 3. 有關太陽能
- 4. 太陽能科學與未來發展

介紹

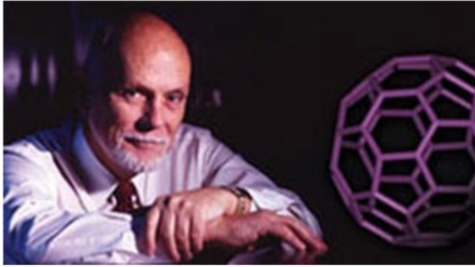
3

Future Global Energy Prosperity: The Terawatt Challenge

Richard E. Smalley

(1943 -2005)

Nobel Prize in Chemistry (1996)



Top Ten Global Concerns

1. **Energy** (能源)
2. **Water** (水資源)
3. **Food** (食物)
4. **Environment** (環境)
5. **Poverty** (貧窮)
6. **Terrorism and War** (戰爭)
7. **Disease** (疾病)
8. **Education** (教育)
9. **Democracy** (民主)
10. **Population** (人口)

4

2050 淨零路徑規劃

建築

運輸

工業

電力

再生能源持續擴大，
發展新能源科技、儲能、
升級電網

負碳技術

2030 進入示範階段
2050 進入普及階段



2020

短中期(~2030)

長期(~2050)

2050

再生
能源

增加自產再生能源

(優先佈建成熟光電風電)

太陽光電 (傳統砂晶) 2025年累計 20GW; 2026-2030年每年 10GW
離岸風電 (固定式) 2025年累計 5.6GW; 2026-2035年每年 1.2GW

火力
發電

火力發電低碳化

(推動以氣換煤導入氫氣混燒)

天然氣 (煤轉氣; 燃氣亞臨界提供電價提前停轉)
氫氣混燒示範 (興達-林口)

無碳
燃料

建構無碳燃料供應體系

(提供產業、運輸所需氫氣與生質燃料)

生質能 (國內料源為主) 氫能 (成立經濟部氫能推動小組)
(推動國際合作-建置示範系統)

極大化自產再生能源

(擴大光電、風電場域; 持續技術突破, 扶植優勢前地地熱海洋能; 建構基礎型發電)

太陽光電 額定效率極端發展 至2050年目標累計達40-80gw
離岸風電 額定效率極端發展 至2050年目標累計達40-55gw

極大化自產再生能源

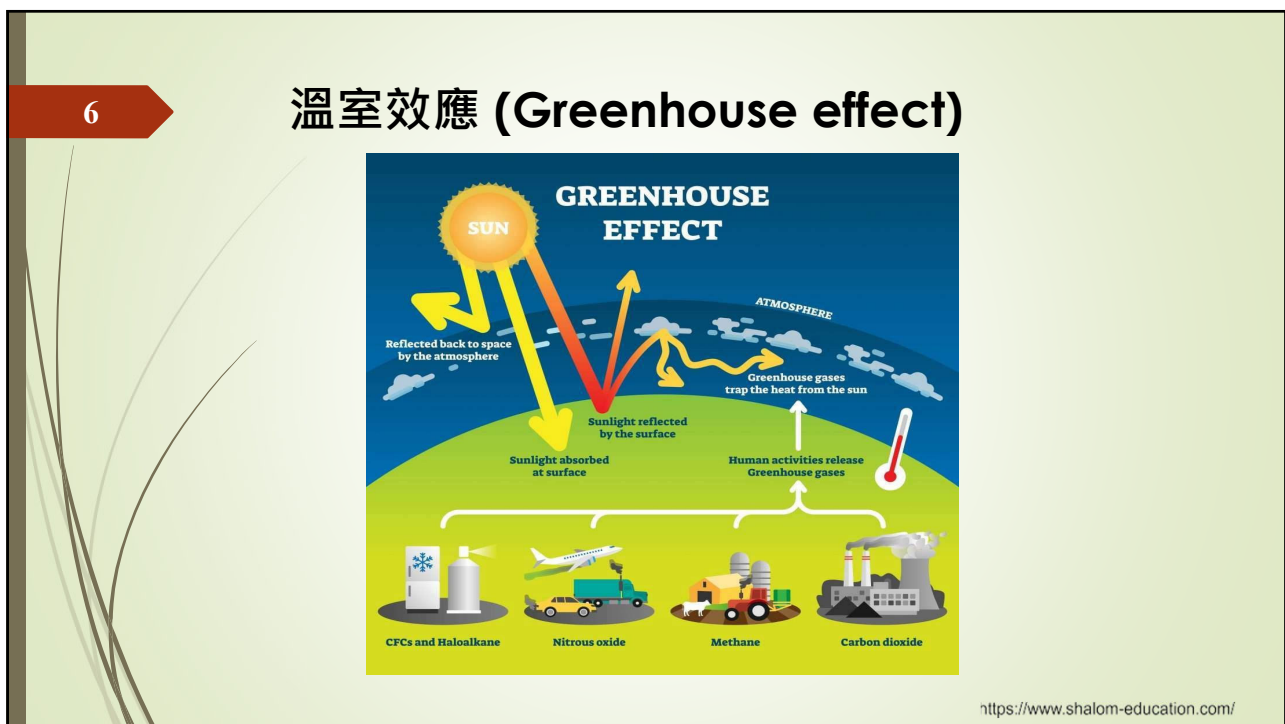
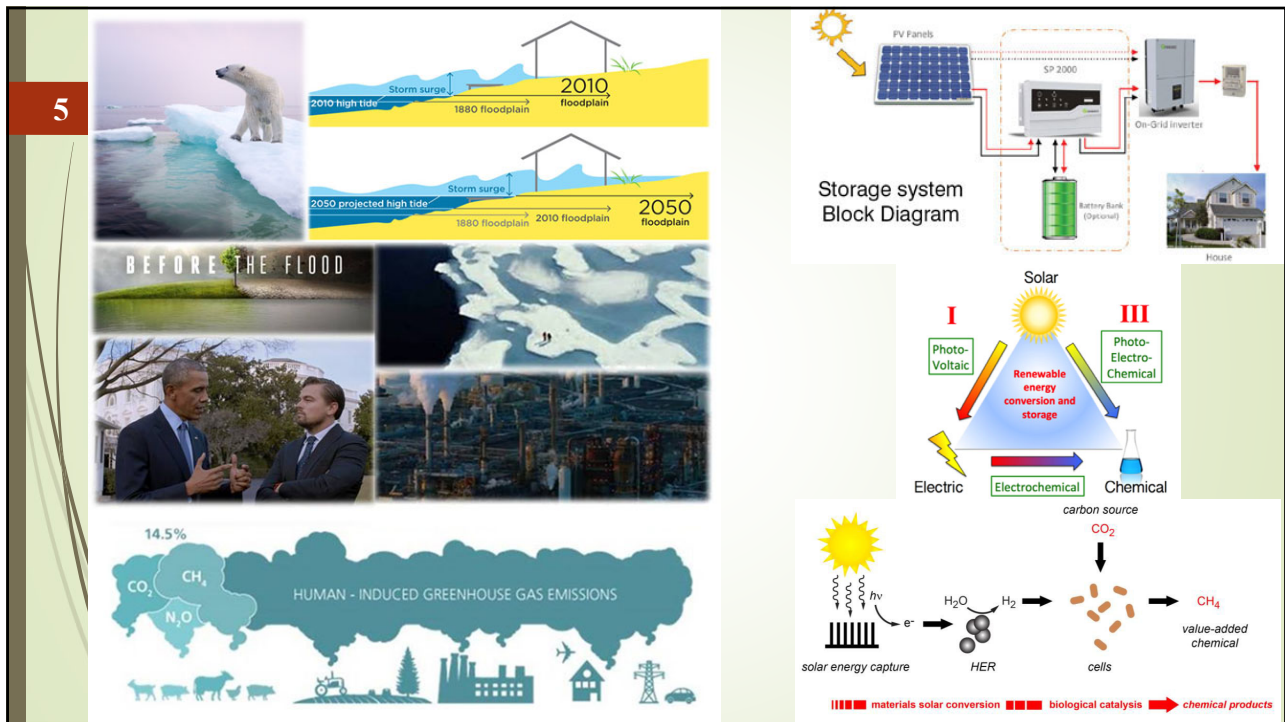
(燃氣+CCUS-進口碳中和LNG-氫能發電燃機轉為安全備用)

天然氣 (+CCUS-進口碳中和LNG)
氫氣 (混燒比例提高-專燒)
燃煤 (超超臨界機組+CCUS-2050年轉為安全備用)

生質能 (布局國外料源)

<https://www.gvm.com.tw/article/88501>

4



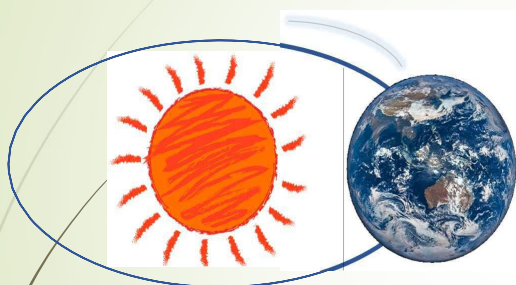
7

可再生能源發電比較

發電方式	機制/原理	優點	缺點	限制	發電成本
太陽能發電	利用太陽光的光電效應產生電力	零碳排放，維護成本低	效率低，依賴天氣	不適用於陰天和夜間	中等成本，可降低
氫能發電	氫燃料電池利用電化學反應發電	氫氣供電，碳排放低	技術尚未成熟，運輸困難	需要氫氣生產資源	高成本，高機動性
風力發電	風力渦輪機將風能轉換為電力	低碳排放，最大化利用風能	建設成本高，影響野生動物	依賴地理資源	中等成本
水力發電	利用河流的動能發電	可持續運作，長期維護成本低	建設成本高，可能引發水土流失	需要大量水資源	中等成本
地熱發電	利用地熱加熱水蒸氣發電	維護成本低，電力穩定	建設難度高，受地理位置限制	需要特定的地熱區域	低成本
生質能發電	燃燒木材和有機廢棄物發電	可再生，減少廢棄物	碳排放高，效率低	依賴地理資源	中等成本

8

為何是太陽能電池？



- 不受地理環境影響
- 穩定的能源供應
- 零碳排放

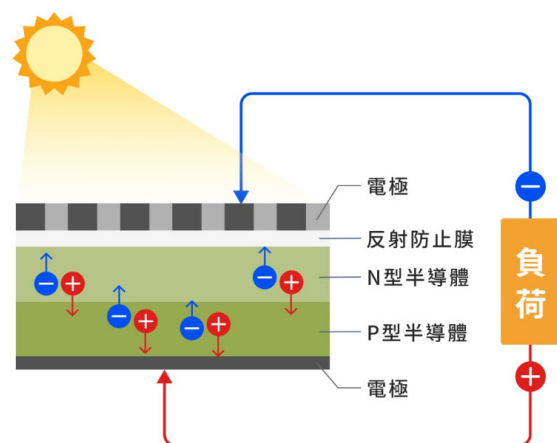
<https://e-info.org.tw/node/220853>

太陽能電池的基本原理

種類	物理式電池	化學式電池
特性分類		
原 理	藉由外來的刺激而產生電能的科學性現象。	化學反應作用而產生電能的科學性現象。
分 類	• 光敏化電池。 • 太陽能電池。 • 壓電電池。 • 熱敏化電池。	• 鉛蓄電池。 • 鎳鎘電池。 • 鋅錳電池。 • 鋰錳電池。 • 水銀電池。 • 錳鹼性電池。 • 氧化銀電池。 • 燃料電池。
特 性	• 此類電池以功能性陶瓷材料為主體的。 • 具有環保性。 • 可再生利用性。	• 此類電池以電解質溶液為主體的。 • 不具有環保性。 • 可再生性及不可再生性。

|| 太陽能發電原理 ||

- 在矽材料之中，摻雜第五族的元素於其內，則所形成的半導體是帶有較多電子的n型半導體
- 倘若摻雜第三族的元素於其內，則所形成的半導體是帶有較多電洞的p型半導體
- 當p型半導體以及n型半導體接合在一起的時候，因為兩端的自由電子以及電洞濃度不同而產生擴散現象，p型半導體中的電洞濃度較高的，而向n型半導體方面擴散



如何檢測

|| 影響太陽能板發電量的因素 ||



太陽能板功率



日照量



紅外及可見光無人機



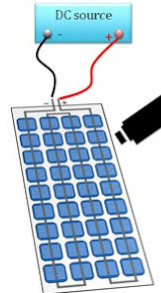
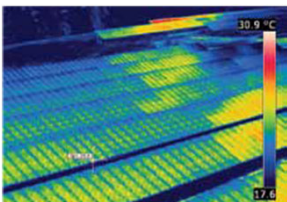
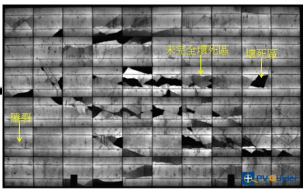
太陽能板品質



太陽能板安裝角度



環境溫度、濕度

11

太陽能車的製作

成品照



馬達用小螺絲固定，裝上小齒輪，齒輪向車殼垂直面，勿緊密

黑色夾帶鋼細螺絲

短軸穿過馬達連通孔，套上紅色輪套

短軸加黑套

另一長軸裝輪套和輪子

長軸配軍用大齒輪，裝在軸中間

馬達齒輪

調整齒輪

調整齒輪左右對稱

裝上其他輪子和軸套

短軸裝上黑輪套

車殼蓋在集線板上

太陽能板用螺絲，去皮紅黑色一併接上

在無雲太陽下直射，馬達轉動帶動車輪，避陰影燈光等不足無法轉動

馬達用小螺絲固定，裝上小齒輪，齒輪向車殼垂直面，勿緊密

黑色夾帶鋼細螺絲

短軸穿過馬達連通孔，套上紅色輪套

短軸加黑套

另一長軸裝輪套和輪子

長軸配軍用大齒輪，裝在軸中間

馬達齒輪

調整齒輪

調整齒輪左右對稱

裝上其他輪子和軸套

短軸裝上黑輪套

車殼蓋在集線板上

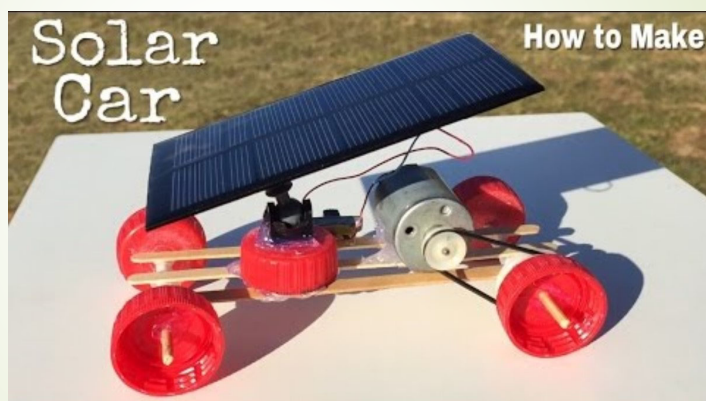
太陽能板用螺絲，去皮紅黑色一併接上

在無雲太陽下直射，馬達轉動帶動車輪，避陰影燈光等不足無法轉動

6

13

太陽能車的實務影片



<https://www.youtube.com/watch?v=jigQ35gQTco>

太陽能板材料及規格

- 一般太陽能電池所使用的核心材料是半導體材料，在自然界中的半導體材料種類：

- 有機半導體材料

- 無機半導體材料

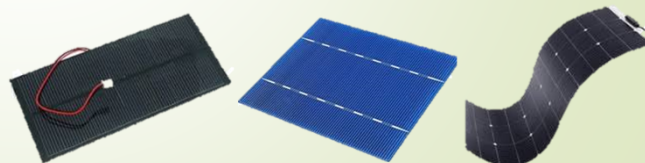
- 在無機半導體材料方面：

- 矽系列半導體材料

- 化合物系列半導體材料

- 陶瓷系列半導體材料

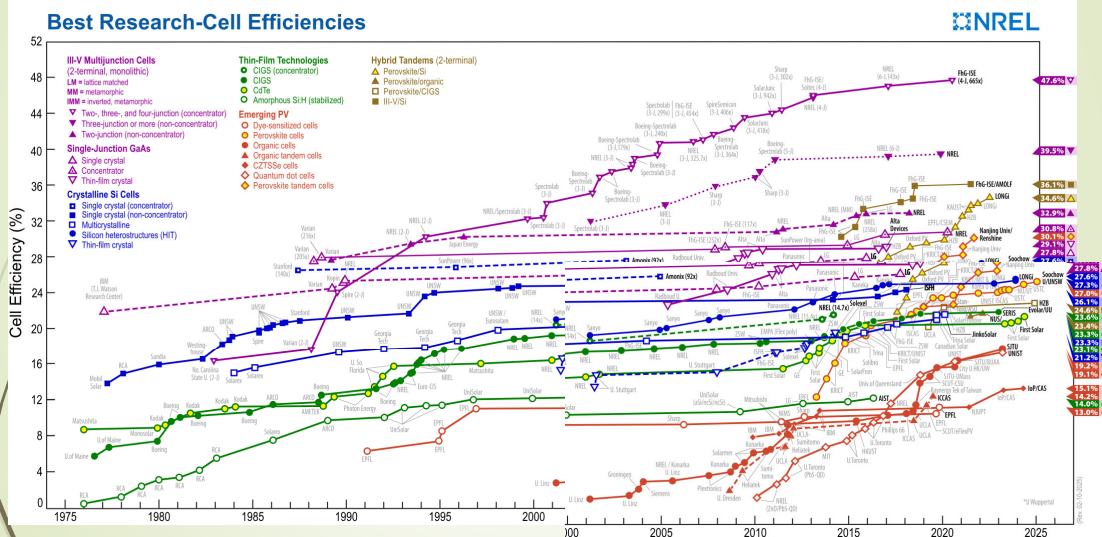
	單晶矽太陽能板	多晶矽太陽能板	薄膜太陽能板
外觀	黑色，均勻片狀	藍色，晶體形狀不規則	黑色，形式為柔軟薄膜
發電效率	最好，19% 以上	中等，15% 左右	偏低，10% 左右
適用場所	適用於有限空間，如一般住宅及商辦大樓	適用於大面積場所，如今已逐漸被淘汰	適用於彎曲或不規則表面，如建物外牆、露營車棚
價格	高	低	低



14

15

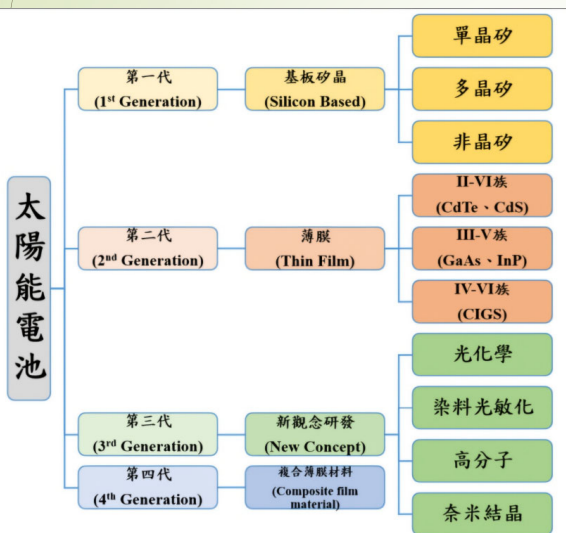
電池最佳效率(取自美國國家能源再生實驗室)



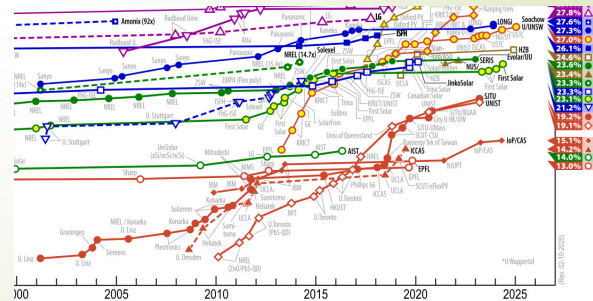
<https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.pdf>

16

太陽能電池的分類與需求

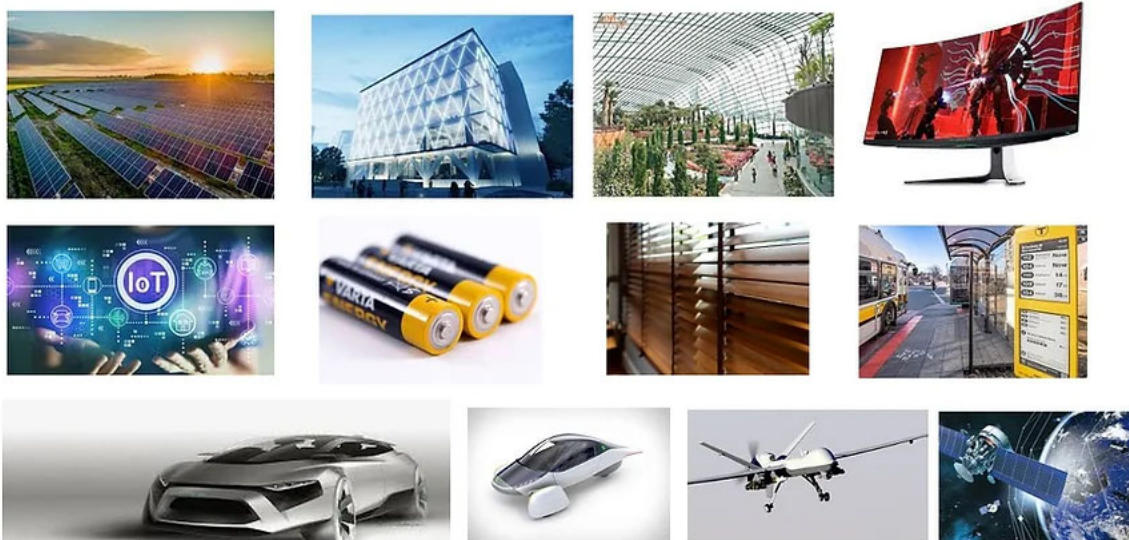


- 低成本、輕量化、高效能及長期穩定性
- 大規模生產法
旋塗法、刮刀技術、網版印刷、捲對捲印刷等
- 先進的效率：
聚合物或小分子太陽能電池：19.2%
染料或量子點太陽能電池：13.0%
鈣鈦礦太陽能電池：27.0%



<https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.pdf>

17



串聯型太陽能電池(Tandem solar cells)

- 串聯型太陽能電池通過堆疊多個不同半導體材料製成的太陽能電池，可更有效地吸收和利用太陽光譜中的各種波長，提高整體發電效率
- 市場驅動力：鈣鈦礦太陽能技術的快速發展、能源效率、成本效益

市場規模預估

2024	2028
0.8億美元	2.4億美元
CAGR : 30.0%	

18

對於太陽能材料的需求

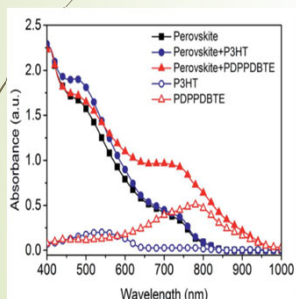
過去我們的需求

1. 可吸光
2. 可導電
3. 能長效使用

現在發現

鈣鈦礦材料?
(Perovskite)

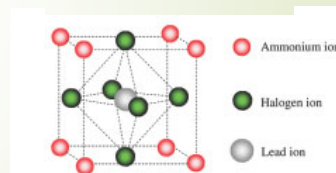
- ✓ 在可見光的區塊有高的吸光係數
- ✓ 有長載子擴散長度 (可達 $1\ \mu\text{s}$)
- ✓ 有效的電子與電動遷移率 ($66\ \text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)
- ✓ 可低成本、可撓取



Kim and Park et al., *Energy Environ. Sci.*, 2014, 7, 1454.



Bolink et al., *Energy Environ. Sci.*, 2014, 7, 994.

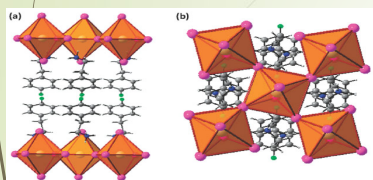


Miyasaka et al., *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131, 6050.

合成鈣鈦礦材料的目標 - 低毒性、防水性、高傳導特性

19 High mobility

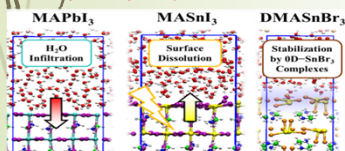
Ex: $(\text{C}_9\text{H}_9)_2\text{PbI}_4$, $(\text{CH}_3\text{NH}_3)_3(\text{C}_9\text{H}_9)_2\text{Pb}_4\text{I}_{13}$, etc.



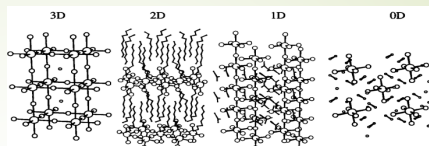
J. Phys. Chem. C 2009, 113, 19305.

Low toxicity and water resistant

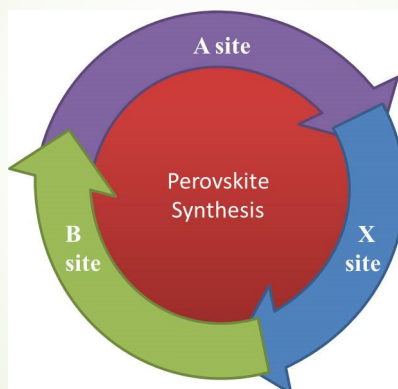
Ex: MASnI_3 , $\text{MA}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, etc.



W. Kaiser, HOPV Photovoltaics Conference, 2022.

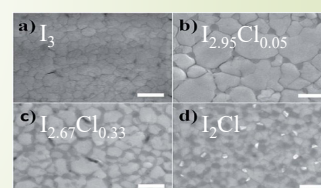


J. Phys.: Condens. Matter 1996, 8, 1217-1227.



High crystallinity and mobility

Ex: $\text{MAPbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $\text{MAPbI}_{3-x}\text{Br}_x$, etc.



J. Mater. Chem. A, 2020, 8, 27-54

Adapting parameters - Goldschmidt tolerance factor

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)}$$

19

20

鈣鈦礦材料應用於太陽能電池之發電機制

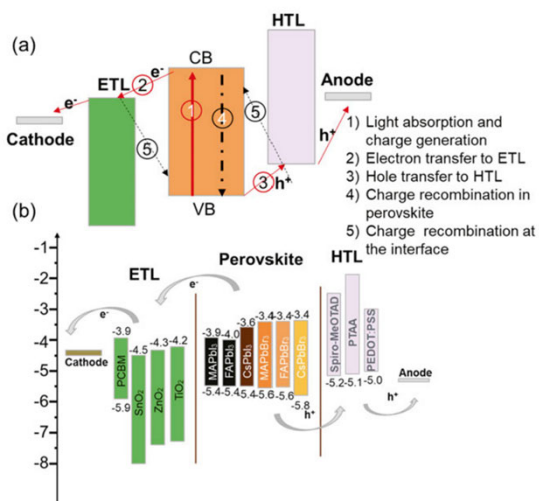


Figure 1-4 (a) Schematic figure of the working mechanism of PSCs and (b) energy bands of the materials in PSC solar cells.¹⁷⁻¹⁹

- ➡ 步驟一、光吸收以及電荷產生
- ➡ 步驟二、電子傳導至電子傳導層
- ➡ 步驟三、電洞傳導至電洞傳導層
- ➡ 步驟四、電子再複合至鈣鈦礦
- ➡ 步驟五、電子於界面處的再複合效應

<https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:1751755/FULLTEXT01.pdf>

謝謝聆聽



議程二

模組化微反應器：未來永續化學工廠的拼圖

主講人：

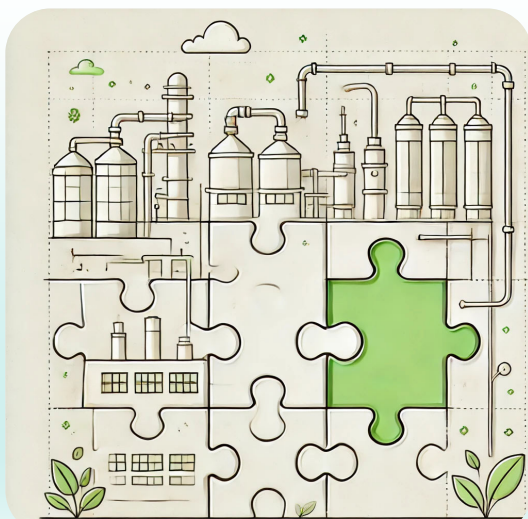
顏美吟 經理

尹諾士國際股份有限公司

主持人：

陳輝龍 教授

中國文化大學 化學工程與材料工程學系



模組化微反應器： 未來永續化學工廠的拼圖

顏美吟

InnoNyx
尹諾士國際股份有限公司

放大效應 Scale-up Effect



反應條件在放大過程中，不會等比例變化，可能造成熱傳、混合、反應速率等的改變，導致產品品質、產率、安全性出現問題。

小規模做得好 ≠ 工廠可行



傳統化工的三大挑戰

問題	原因	結果
• 能源效率低 • 操作不安全 • 汙染排放高	• 批次加熱/冷卻不連續 • 混合差、熱控難 • 副產物多、清洗困難	• 高耗能、高成本 • 易爆、反應失控 • 廢水/廢氣超標

永續 應用到產業中，追求的是：

- ✓ 低耗能
- ✓ 低污染
- ✓ 資源有效循環
- ✓ 安全高效的製程
- ✓ 對環境與人類友善的產品

永續化學 設計更安全、環保且高效率的化學反應與材料製程，減少對環境和資源的傷害。

不只是「綠色化學」的理念，而是要整合到「整個工廠與供應鏈」，從原料選擇、反應條件、廢棄物處理，到產品循環都納入考量。

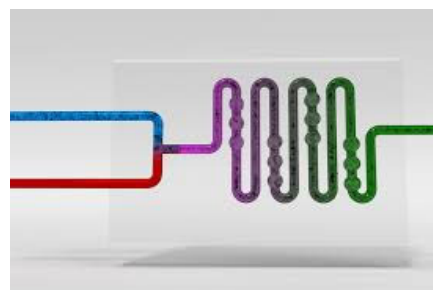
 什麼是永續化學工廠？永續化學工廠是一種：

- ✓ 高效能、低耗能、低排碳的製造系統
- ✓ 強調數位化、自動化與靈活反應調控
- ✓ 支援模組化與連續製程，快速應變市場需求

逐漸取代傳統大型批次反應器，成為未來新材料與藥品製造的主流趨勢。

微通道技術與化學製程

- 結合流動化學 (Flow Chemistry) 與微型通道(Micro-channel)，微通道反應器是重要的過程強化設備，讓化學反應提高傳質、傳熱效率，取代傳統的批次釜式反應。相同的處理能力，反應器體積較傳統設備可減小1~2個數量級，實現更安全與更高效的連續



5

✓ 微通道如何做到「熱控神技」？



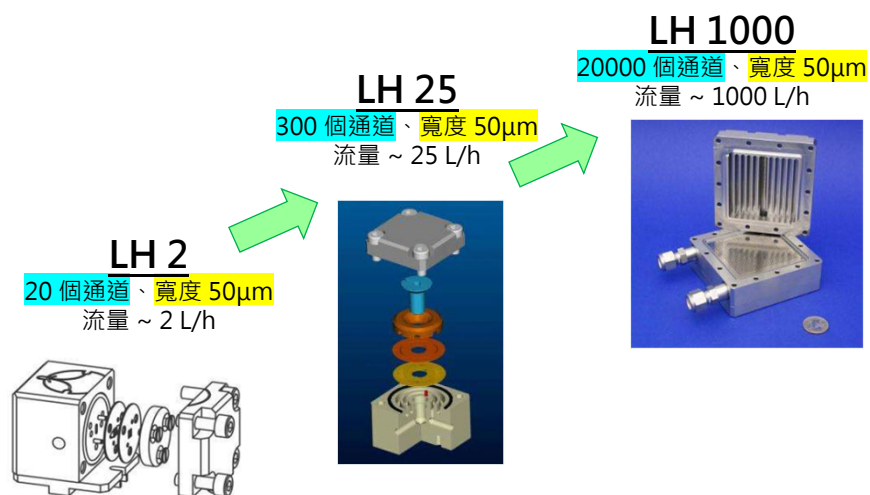
憑藉微尺寸、高表面積、快速流動，大幅強化熱交換效率，是實現安全、穩定、高品質化學反應的關鍵工具。

強化原理	說明
 小通道尺寸 (通常為100–1000 μm)	熱傳距離短，熱能夠更快從反應區域導出或導入
 高表面積 / 體積比 (Surface-to-Volume Ratio)	越小的通道，單位體積可接觸的冷卻/加熱壁面越多 → 散熱或吸熱超快
 貼壁流主導 → 高熱通量區域穩定	微通道中流體緊貼管壁，整體都能參與熱交換，不像大反應器只有邊界層有效
 薄層流、快速流動	流體薄、移動快 → 熱量交換迅速、無滯熱區
 整合式熱交換設計	微反應器模組本身常包含冷卻層、加熱層、絕熱層，甚至具備局部溫度控制能力 (multi-zone control)

微通道如何放大？

途徑：

- 幾何尺寸放大
- 並聯疊加放大
- 通道數量增加



範例：Ehrfeld Mikrotechnik LH mixer

微反應器材質挑選指南

金屬

- 高壓

玻璃

- 光催化

碳化矽

- 特殊酸鹼
強腐蝕性

微反應器

微混合器

換熱器

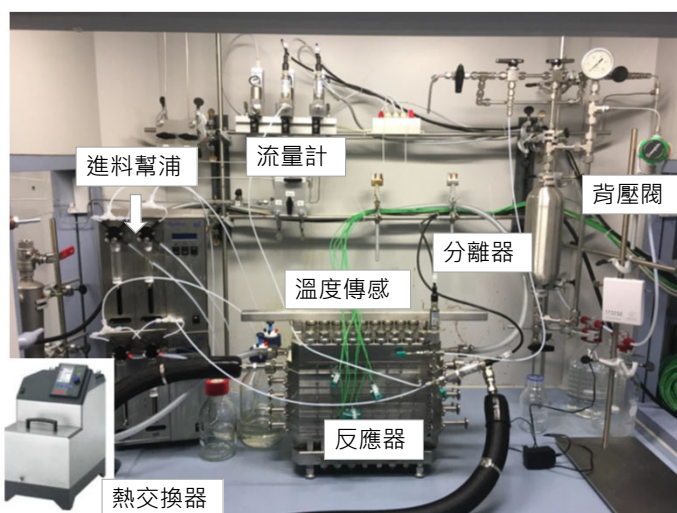
傳感器

控制器

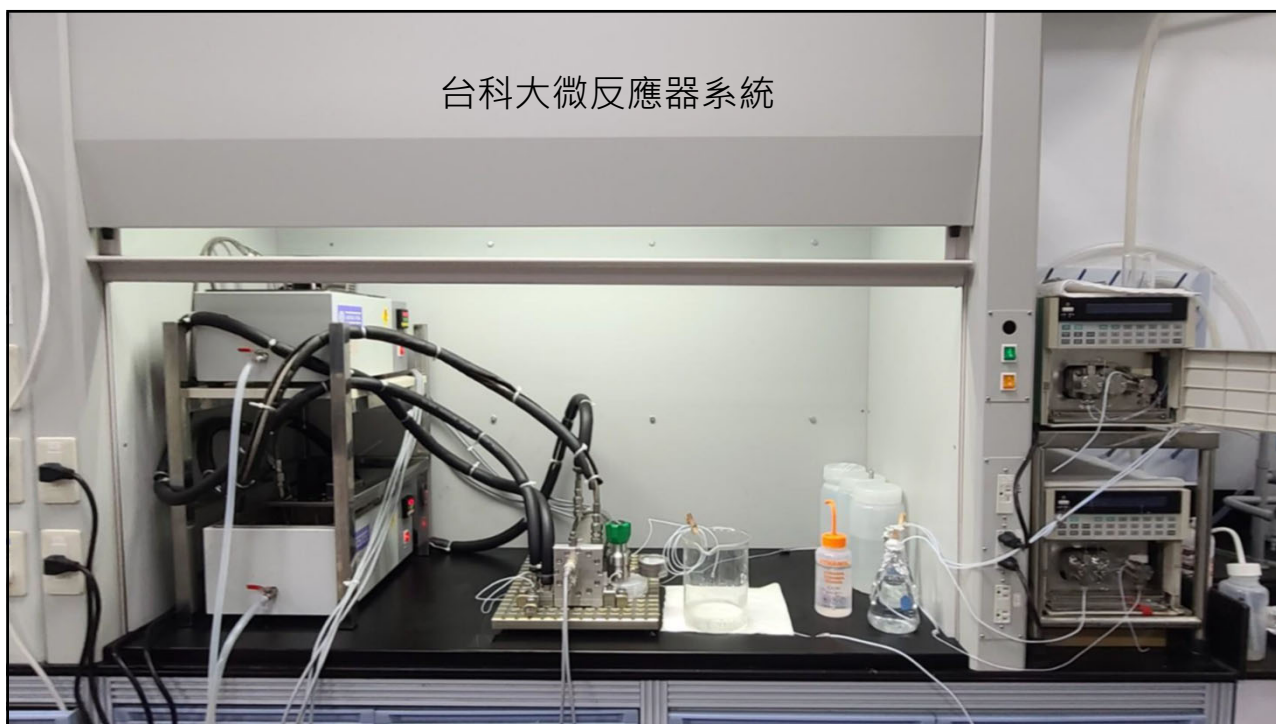
輸送系統



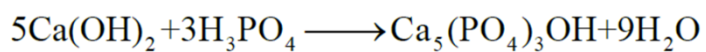
微通道反應器家族



台科大微反應器系統

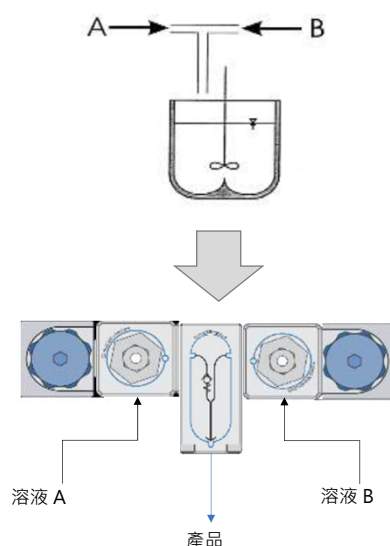
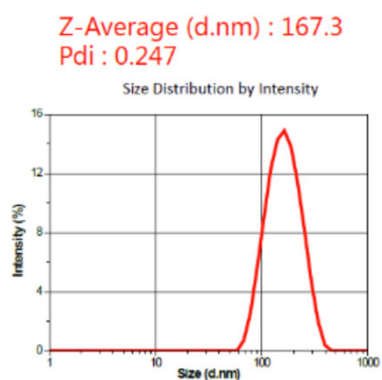
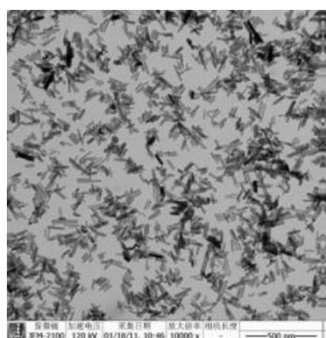


羟基磷灰石合成



微通道技術與傳統方式的差別

- 混合強化傳質
- 精確控制鈣磷莫耳比
- 控制過程的溫度和時間



- 具有線上清洗功能的奈米顆粒自動化連續生產裝置 (可用於生產催化劑、染料...)
- 可移動的分散型生產裝置

製備催化劑前驅物

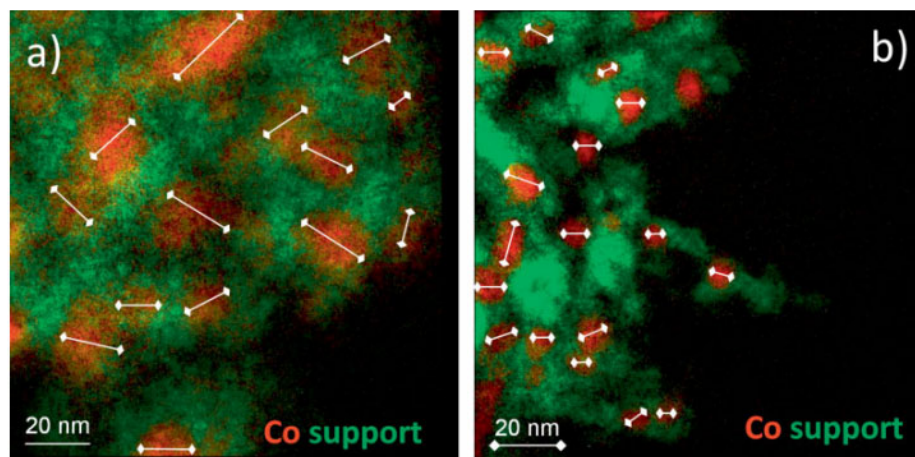
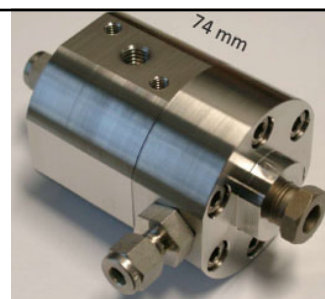


Figure 6. EELS images of (a) catalyst from batch precipitation and (b) continuous precipitation in a valve-assisted micromixer. Red color marks the metalite particles (Co/Mn), green (Al/Mg) the carrier material.



工業化案例：乙氧基化



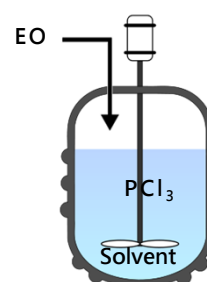
1. 投放 PCl_3 至反應釜
2. 鋼瓶EO通過熱水加熱汽化
3. 緩慢通入EO氣體
4. 2000L反應釜一批次物料，歷時120小時完成反應

Highly
exothermic
強放熱

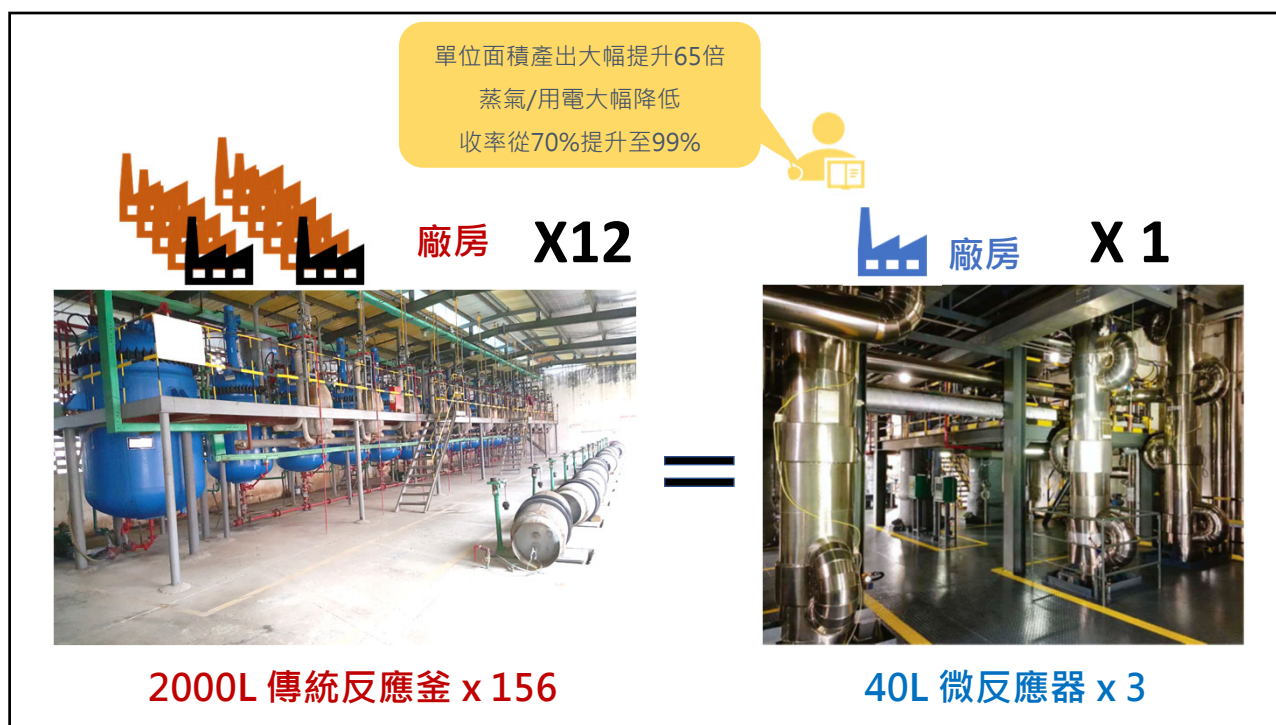
Explosive &
Flammable
易爆易燃

Toxic
有毒

Increased
safety risk
安全風險

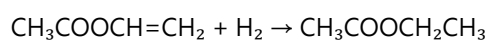


解決方案：減少反應器體積+增強傳質傳熱



選擇性氫化 + 微通道觸媒插件

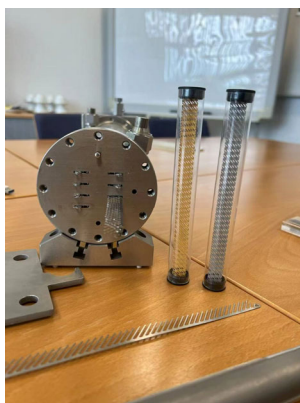
反應式：



(乙酸乙烯酯 + 氫氣 → 乙酸乙酯)

在化學生產上的優勢

1. 反應速率提升：靜態混合器
2. 選擇性高：避免副反應
3. 安全性提升：降低氫氣累積風險
4. 空間利用率高
5. 可模組擴產



Ehrfeld Mikrotechnik



F³ Factory Project (2009-2013)



- 目的：提高歐盟化學工業競爭地位
- F³-Factory 是一個為期四年、耗資 3000 萬歐元的政府/私人合作項目，專注於開發和實施標準化、模組化、連續化的示範工廠，使歐洲化學品生產商能夠嘗試用於小規模到中等規模生產的創新製造技術，從而展示更清潔、更高效的化學製造技術。

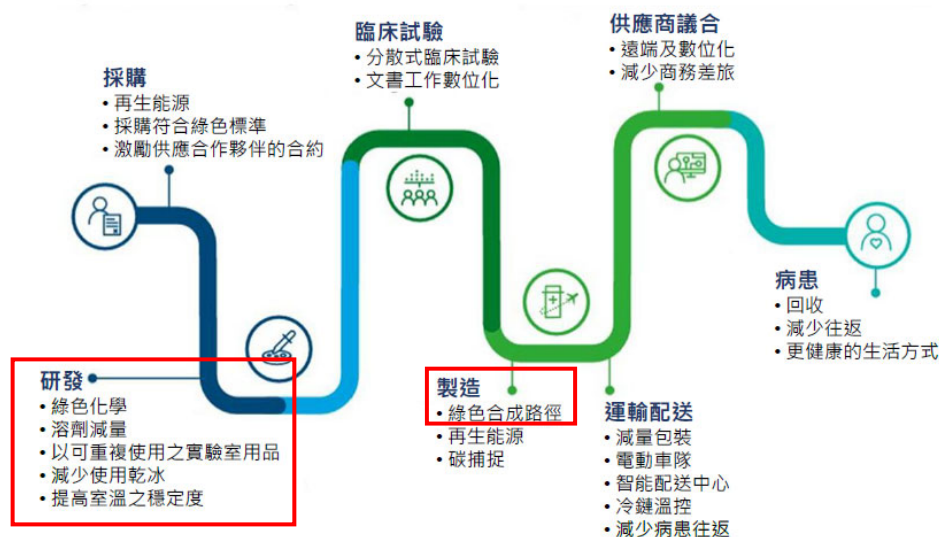


Lonza 在瑞士 Visp 投資 CHF 4 億打造 Ibex 製造綜合體，採用 mini-monoplant 模組化製程架構，提升空間利用率與靈活生產能力，

mini-monoplant approach，這是一種模組化、多產品靈活製程的概念。

每一條 mini-monoplant 生產線像是獨立的小工廠，能快速針對不同生物藥品進行客製化製造，優勢包括：

-  快速啟動與技術轉移
-  高彈性切換產品
-  模組化設計節省空間與投資成本
-  便於規模放大與多批次操作



資料來源：IQVIA；DCB 產資組 ITIS 研究團隊（2023/04）

圖 2 生技製藥產業產品價值鏈上可切入減碳的重點階段



展望

綠色化工新契機，藉由微通道反應科技帶來高效、安全、節能、減廢和省錢等諸多好處。此科技的優越性主要來自於其極高的可控性與程序強化，並其天生安全的本徵特質。

在市場應用方面，目前發展最為蓬勃的是精密化學品包括藥物的生產。

估計在未來的五至十五年間，精密化學品與製藥業將見證一場大範圍的技術升級。許多傳統的批式生產將被微通道反應的連續流生產所取代。



新北市汐止區新台五路一段97號28樓-11

mandyyen@innonyx.com

議程三

Theoretical Approaches to Energy Storage and Conversions

主講人：

劉啟佑 助理教授

東吳大學 化學系

主持人：

廖振成 助理教授

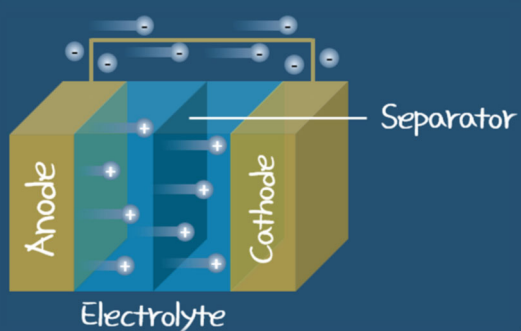
中國文化大學 化學工程與材料工程學系



Research Interest

Energy Storage

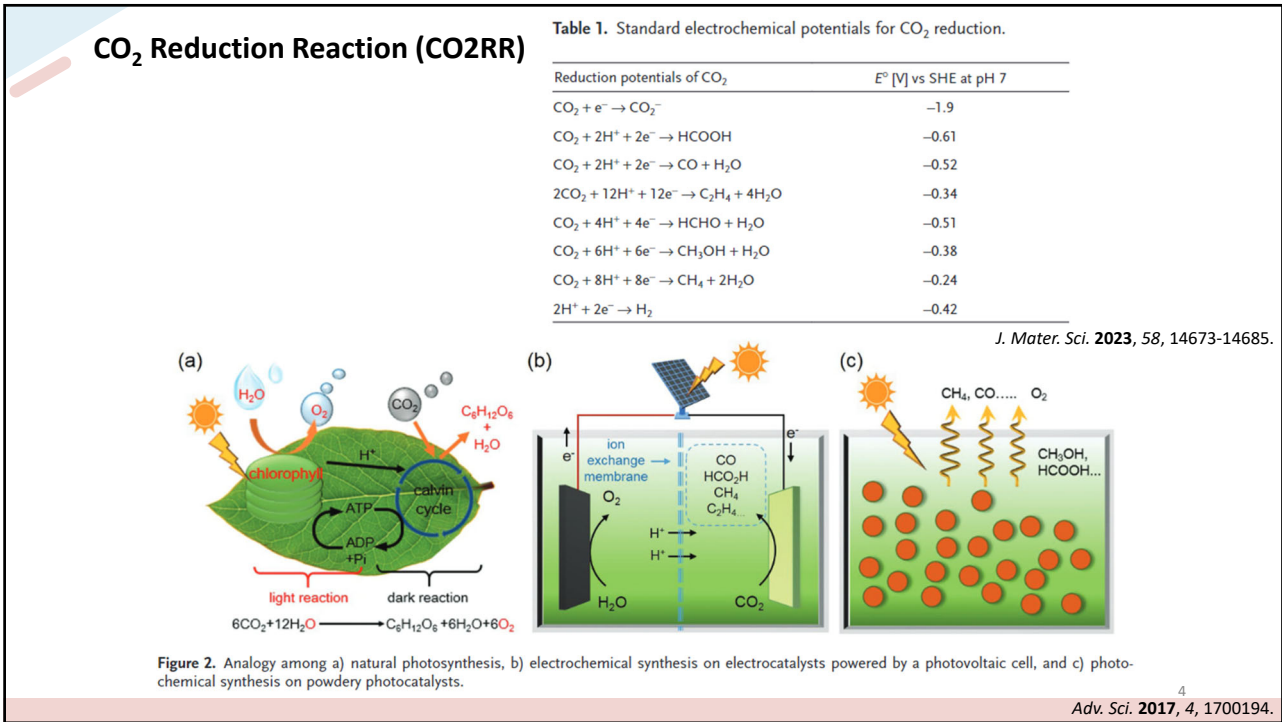
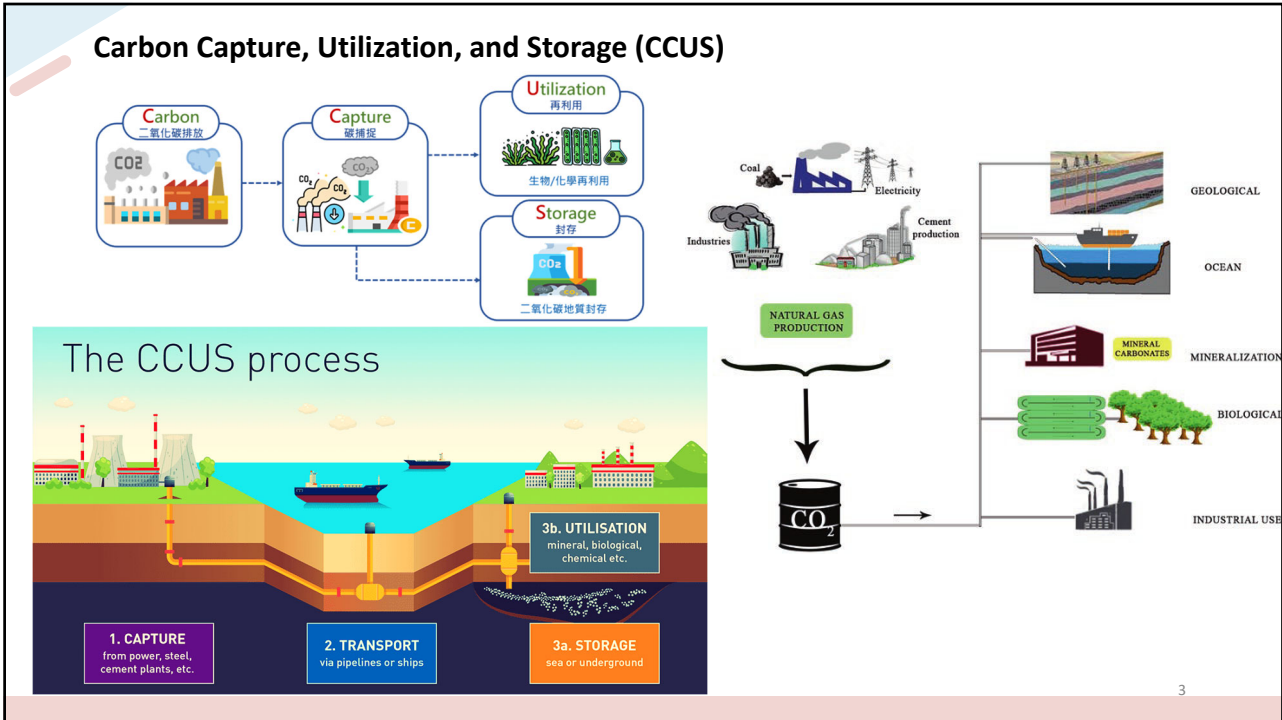
Metal-ion, Metal-air, Metal-sulfur,
Flow battery, DMFC, PEMFC



Energy Conversion

Alkane to Alkene, CH_4 conversion,
CO oxidation, Fischer-Tropsch





Electrochemical CO₂RR

- Cathode: $\text{CO}_2 + \text{H}^+ \rightarrow \text{Hydrocarbons (CO}_2\text{RR)}$
- Cathode: $2\text{H}^+ \rightarrow \text{H}_2$ (HER)
- Anode: $\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{H}^+ + \text{O}_2$

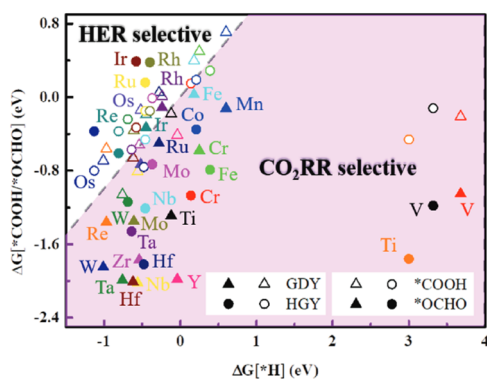
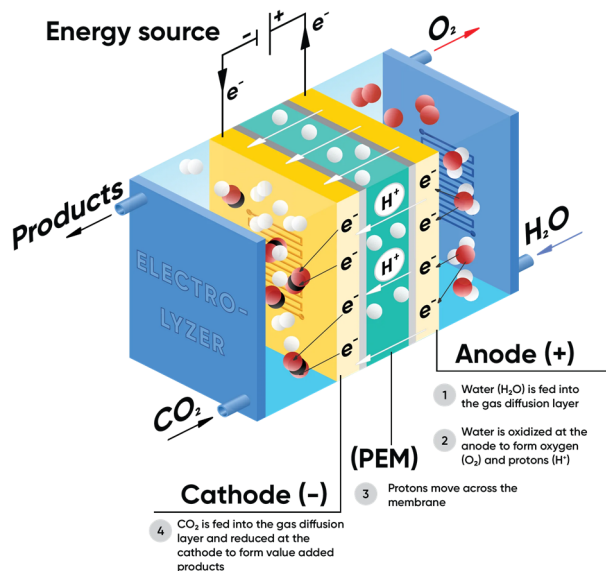


Figure 4. Comparison of Gibbs free energy changes of CO₂RR versus HER on M/GDY and M/HGY in the initial protonation step.

Adv. Funct. Mater. 2023, 33, 2213543.

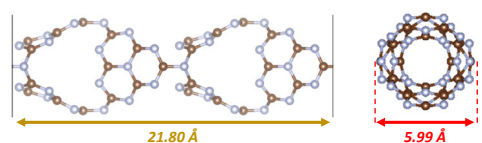


5

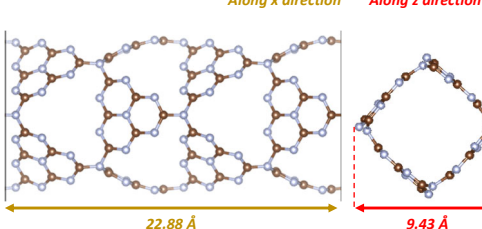
C₃N₄ Nanotube Systems & Metal Decorations

CNNTs, M/CNNTs, and M₄/CNNTs

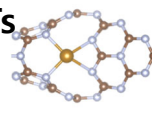
(a) (6, 0)-CNNT (zN-6)



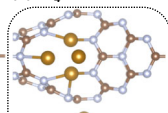
(b) (6, 6)-CNNT (aN-6)



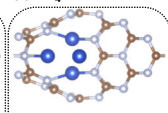
(c) Fe/zN-6



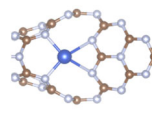
(e) Fe₄/zN-6



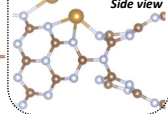
(f) Cu₄/zN-6



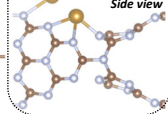
(d) Cu/zN-6



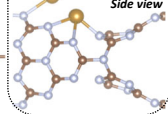
(g) Fe/aN-6



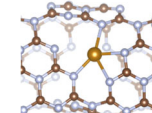
(i) Fe₄/aN-6



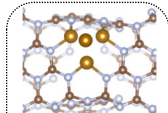
(j) Cu₄/aN-6



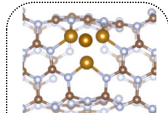
(h) Cu/aN-6



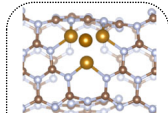
(Side view)



(Side view)

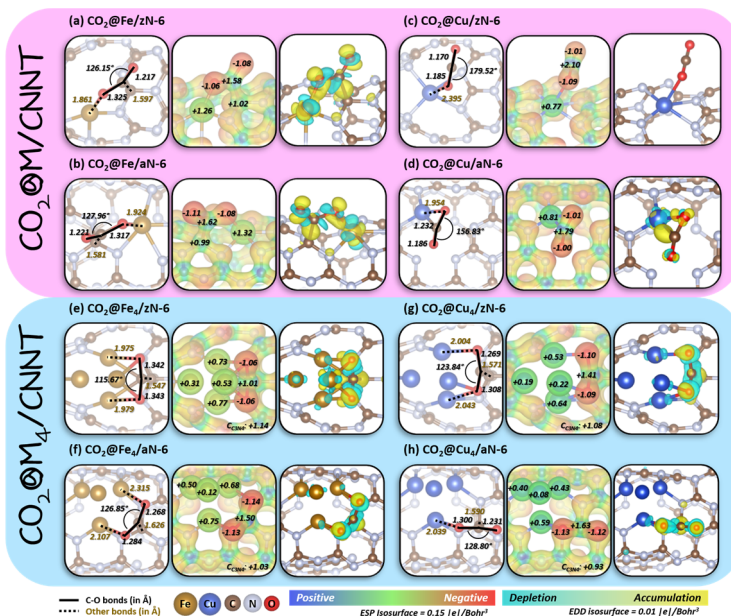


(Side view)

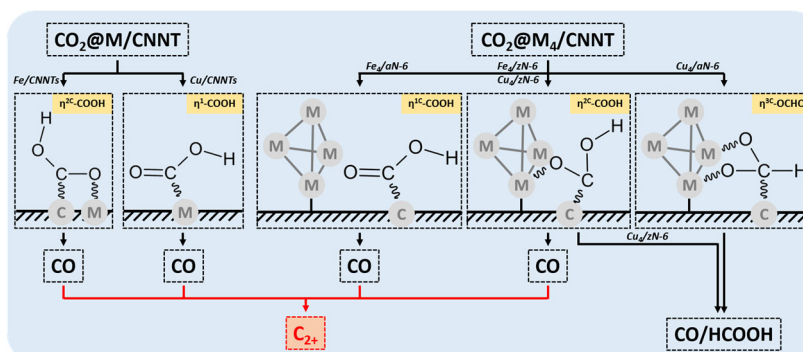
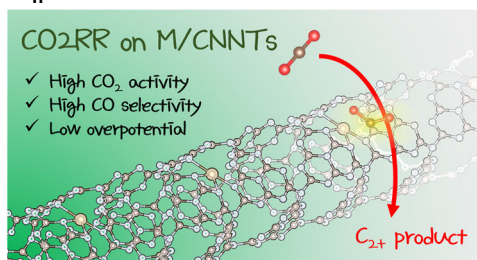


6

Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 8155-8162.

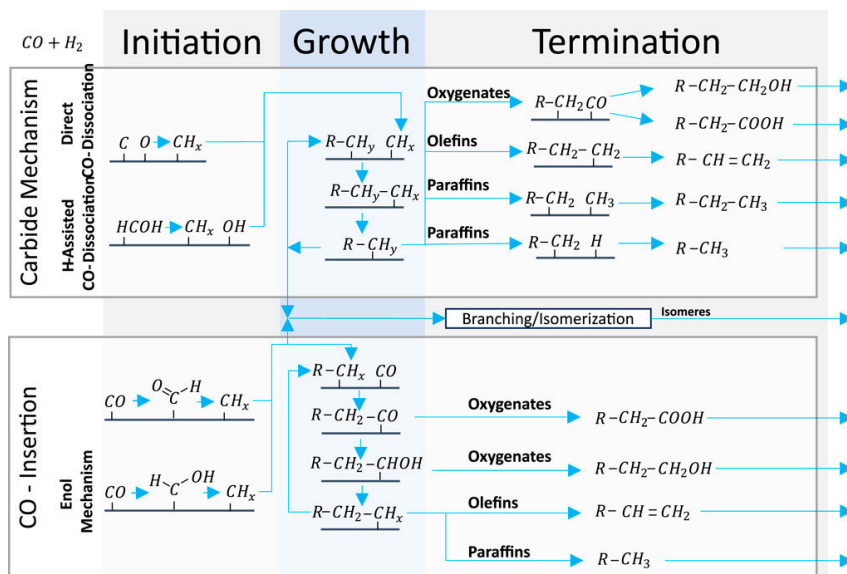
Geometries of $\text{CO}_2@M_n/\text{CNNTs}$ 

Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 8155-8162.

Summary of CO_2RR on M_n/CNNT 

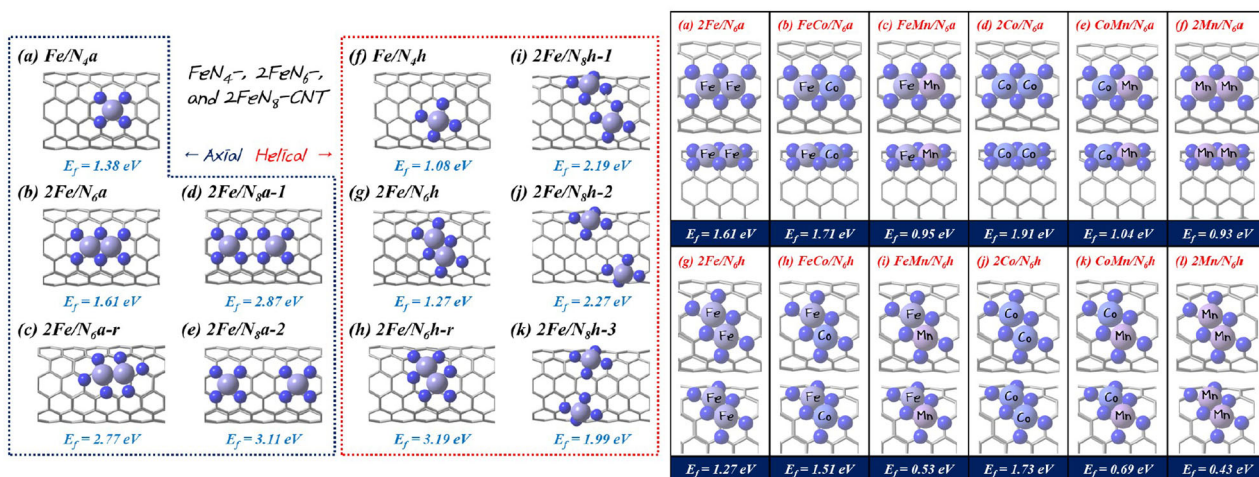
Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 8155-8162.

Mechanisms of FTS



Front. Energy Res. 2024, 12, 1344179.

Dual Atomic Active Center on (6,6)-CNT



Liu, C.-Y. et al. *Sustain. Energy Fuels*, 2020, 4, 2638-2644.

C-C Coupling Reactions

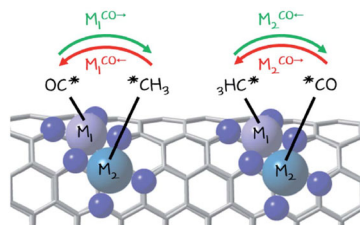


Fig. 2 Four possible migration pathways of the [CO + CH₃] reaction on M₁M₂/N₆h surfaces. The colors of the elements N and C are blue and gray, respectively.

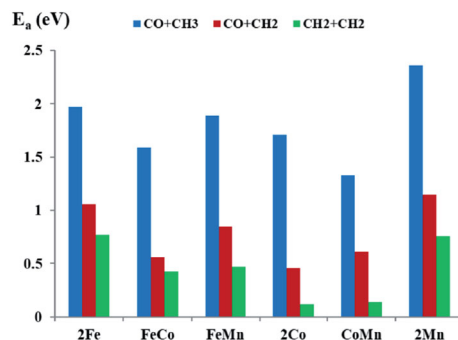
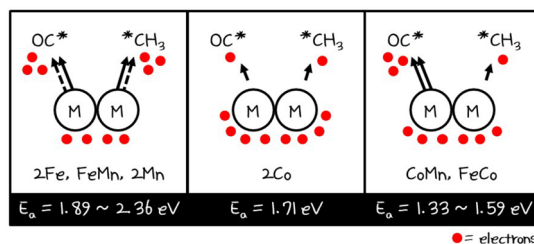
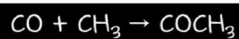


Fig. 3 The activation energies (E_a , in eV) of the three C-C coupling reactions along the most possible reaction coordinate on different M₁M₂/N₆h surfaces.

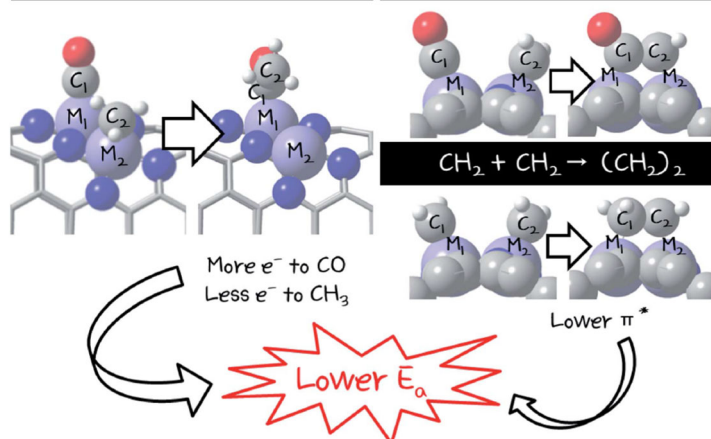
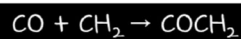
Liu, C.-Y. et al. *Sustain. Energy Fuels*, 2020, 4, 2638-2644.

Summary of C-C Coupling on M₁M₂/N₆h

C-C coupling **with** fragment migration

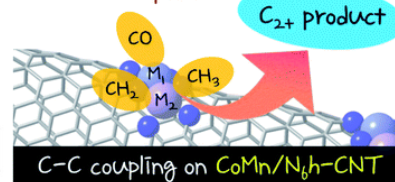


C-C coupling **without** fragment migration



Scheme 1 Schematic reaction mechanisms of C-C coupling between different adsorbates on M₁M₂/N₆h surfaces.

Fischer-Tropsch

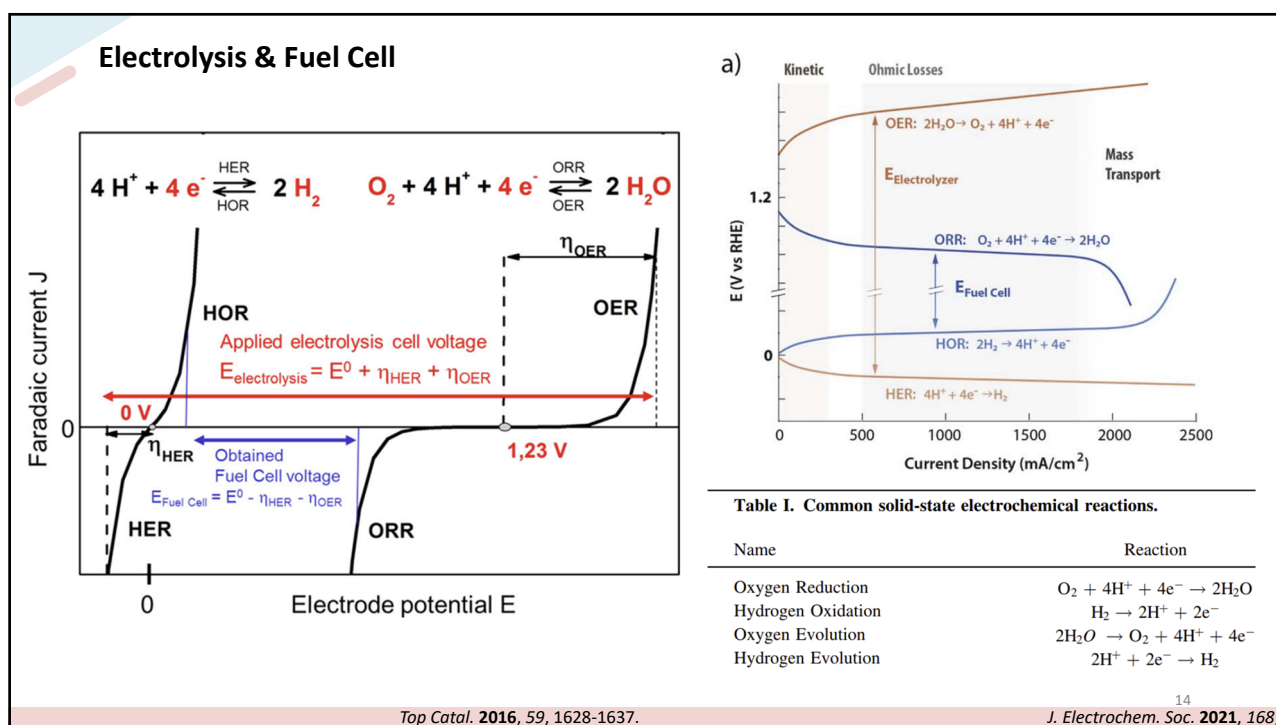
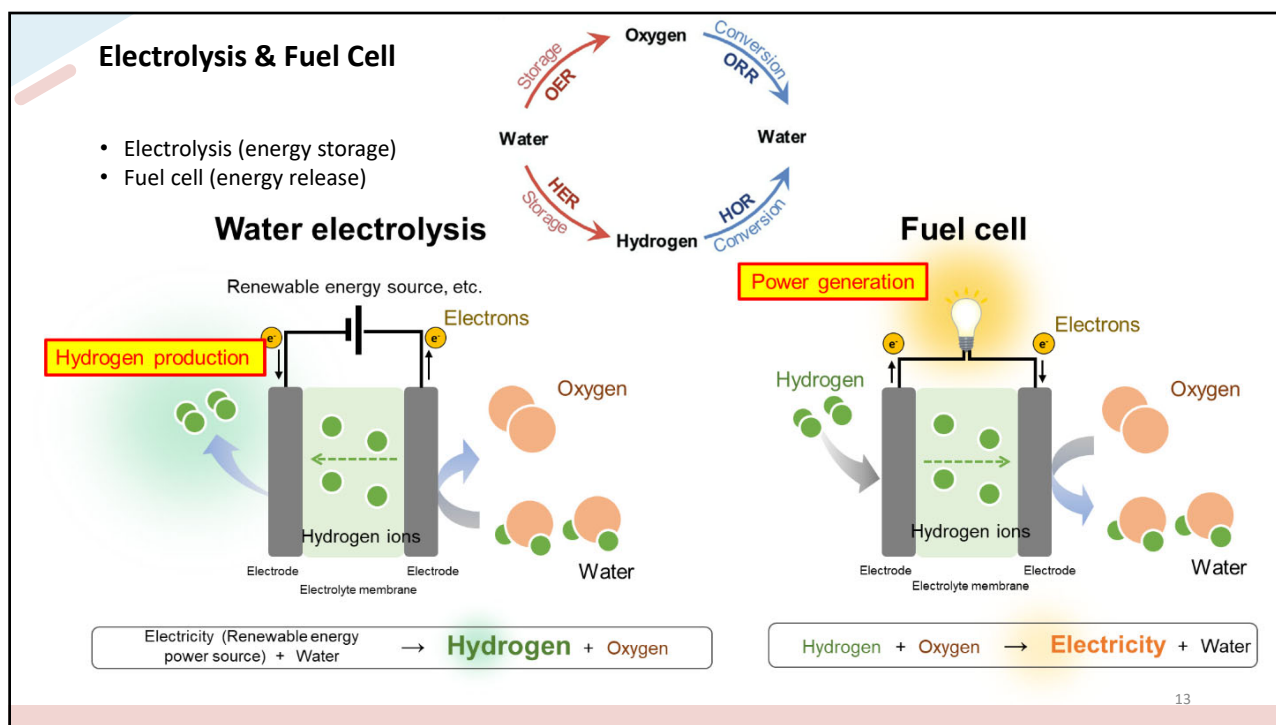


Sustainable Energy & Fuels

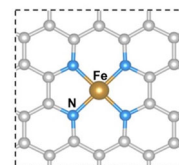
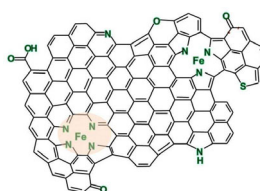


ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY

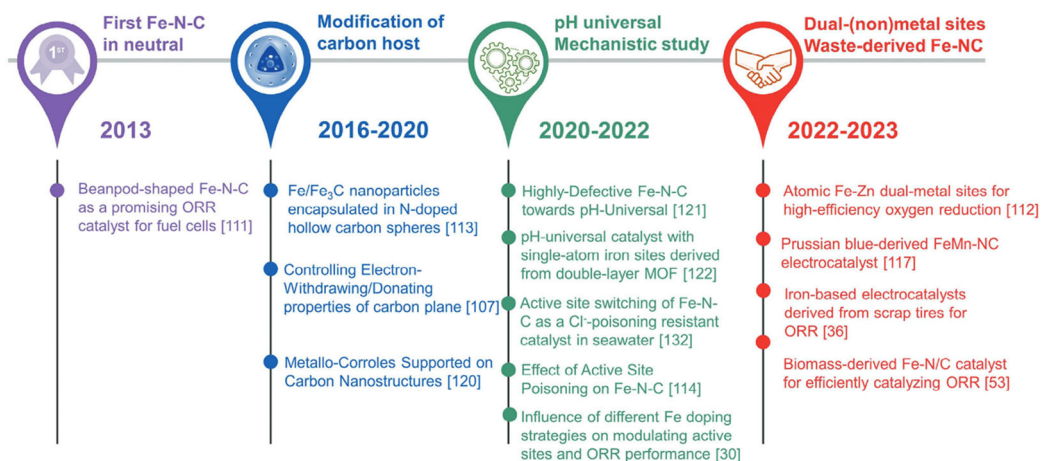
Liu, C.-Y. et al. *Sustain. Energy Fuels*, 2020, 4, 2638-2644.



Oxygen Reduction Reaction (ORR)

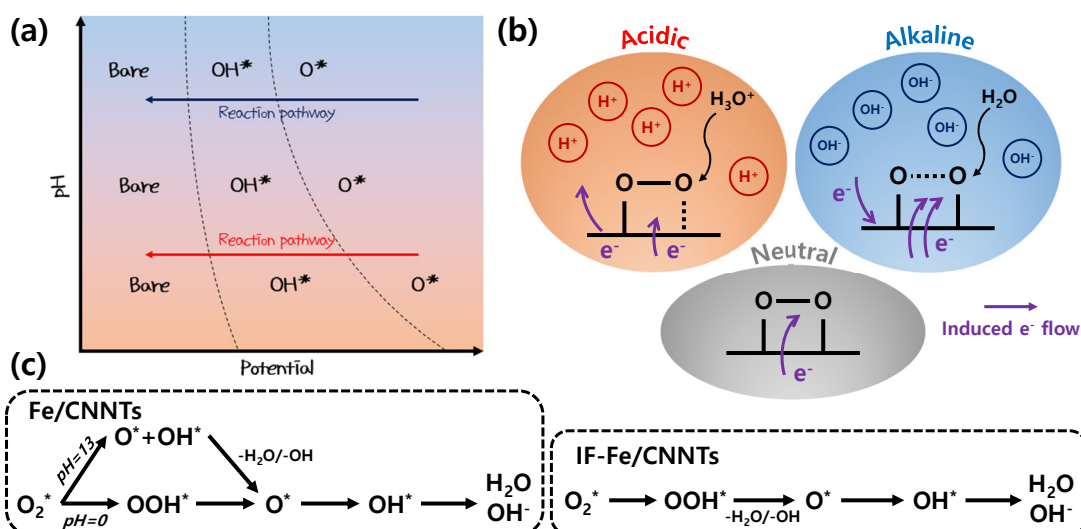


J. Mater. Chem. A **2023**, 11, 25534-25544.



Adv. Funct. Mater. **2024**, 34, 2314282.

The Considered Pathways of ORR

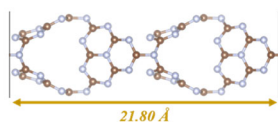


Liu, C.-Y. et al. ACS Appl. Energy Mater.* **2024**, 7, 2416-2422.

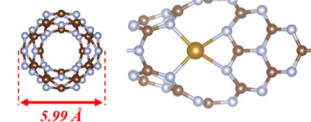
The Fe/CNNT Systems

Zigzag / Armchair $g\text{-C}_3\text{N}_4$ nanotube (CNNT)

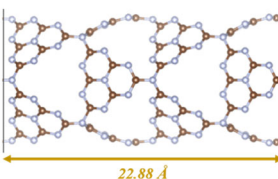
(a) (6, 0)-CNNT (zN-6)



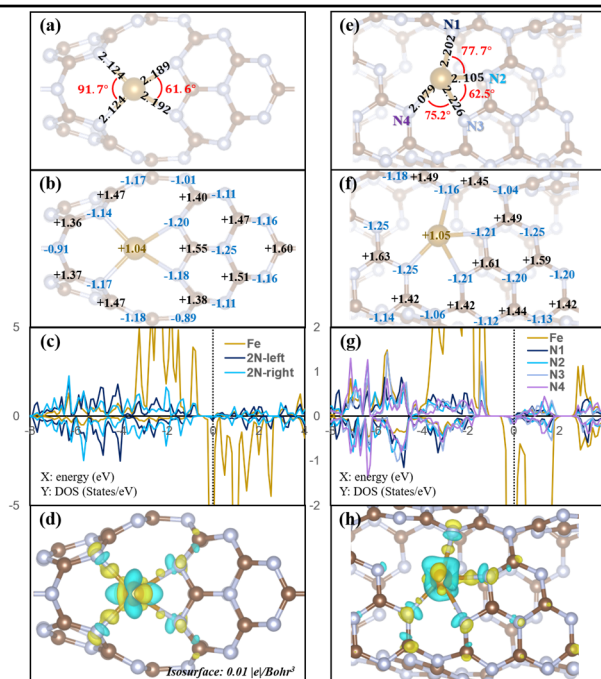
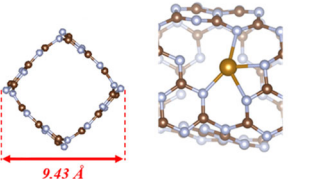
(c) Fe/zN-6



(b) (6, 6)-CNNT (aN-6)

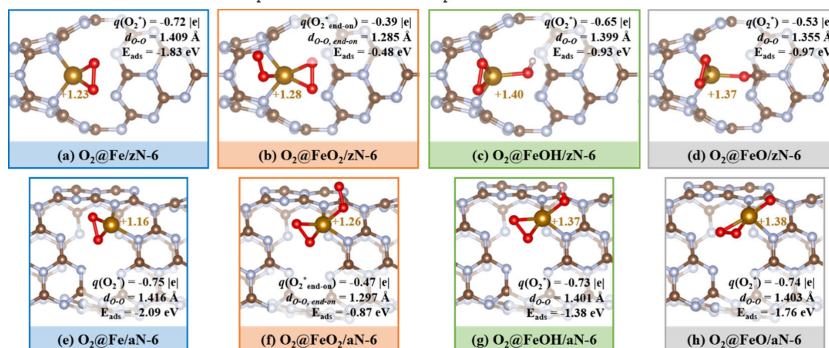
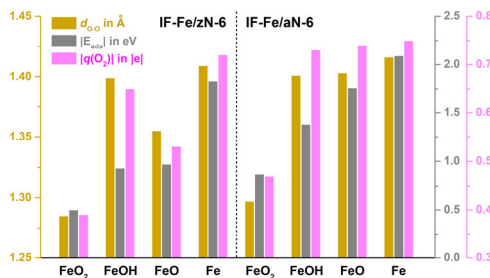


(d) Fe/aN-6



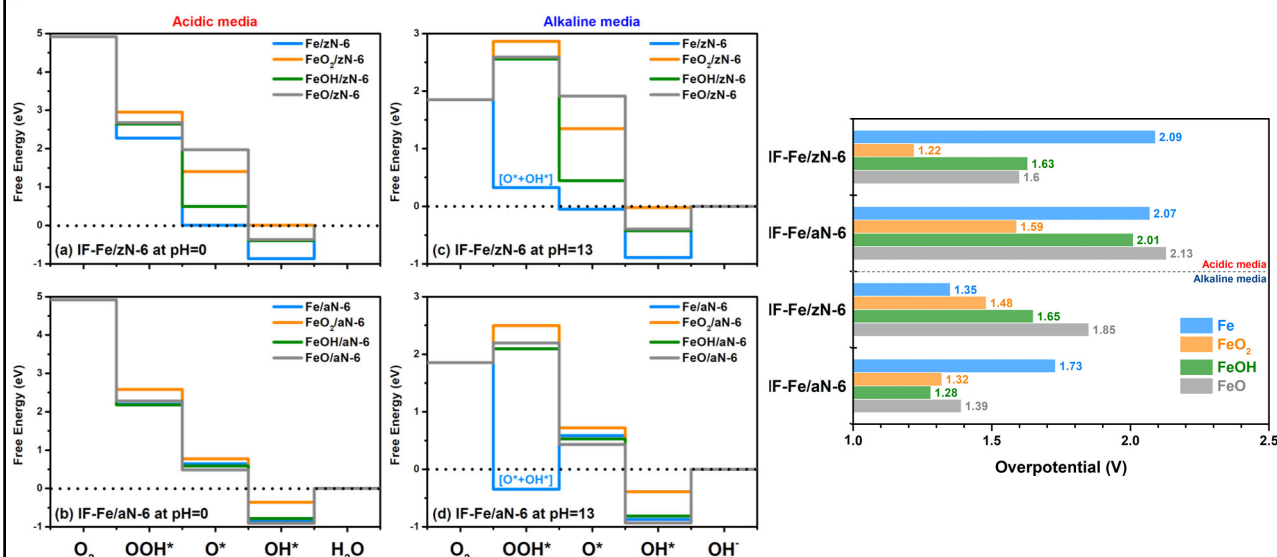
Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 2416-2422.

Intrinsic Functionalization on Fe/CNNTs



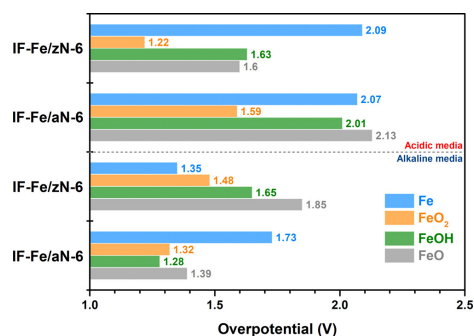
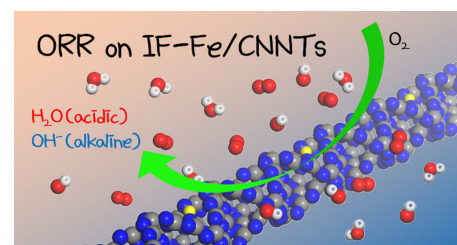
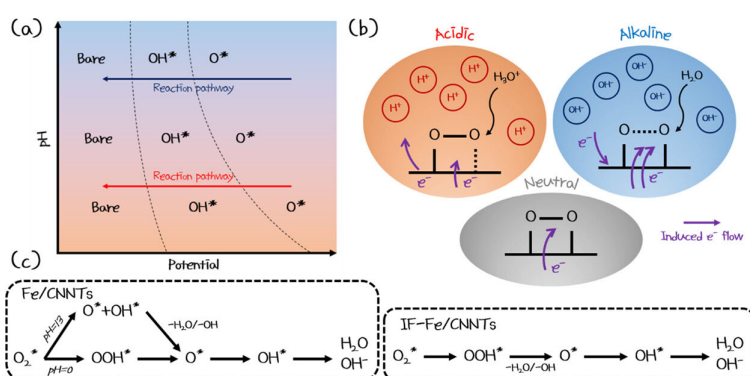
Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 2416-2422.

Free Energies & Overpotentials of ORR on Fe/CNNTs



Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 2416-2422.

Summary of ORR on Fe/CNNTs



Liu, C.-Y.* et al. ACS Appl. Energy Mater. 2024, 7, 2416-2422.

