

新竹市第四十三屆中小學科學展覽會

作品說明書

科 別：化學科

組 別：國中組

作品名稱：當金屬離子遇上茶--一場化學界的愛恨糾葛

關鍵詞：單寧酸、Phen、金屬離子

摘要

本研究探討單寧酸（Tannic acid）與鄰二氮菲（Phen）這兩種螯合劑與不同金屬離子的反應，並將其應用於護城河水質分析。我們選擇 Hg^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Cu^{2+} 等十二種金屬離子，觀察螯合劑與這些離子反應後的顏色、沉澱變化及光譜特徵。實驗結果顯示，單寧酸與 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 產生紫色混濁，與 Pb^{2+} 形成粉色沉澱；而 Phen 則與 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Ag^{+} 會產生顏色變化，與 Pb^{2+} 、 Hg^{2+} 、 Ag^{+} 形成沉澱。此外，護城河水樣經過濃縮處理後，加入單寧酸與 Phen 皆未產生明顯變化，顯示護城河內的金屬離子含量不足，無法與這些螯合劑產生明顯反應。本研究證明單寧酸與 Phen 可作為部分金屬離子的檢測工具，為污染治理提供科學依據。

壹、前言

一、研究動機

曾經在新聞中看到，全台灣各地有許多工廠依賴地下水和河川，把工廠的廢水排進河川或地下水中，造成河川或地下水的水質被汙染，使生態系被汙染。曾經有在一些新聞或是科展上看到金屬離子加入茶裡面會產生沉澱物，並且在學校學過某些陰離子能和一些金屬離子產生沉澱或化學反應，由此猜測重金屬會和茶裡面的成分進行化學反應。茶裡有許多物質，例如：單寧酸、茶鹼、胺基酸、維生素，我們決定以單寧酸、EDTA和Phen等螯合劑去和各金屬離子的化合物反應，並測量其光譜，進而去測量環境水質。

二、文獻探討

(一) 穩定常數 K_f

K_f (穩定常數，Formation constant)是用來描述螯合物形成時穩定性的一個平衡常數。而對於一個金屬離子(M^{n+})與螯合劑(L)形成螯合物的反應 $M^{n+} + L \rightleftharpoons [ML]^{n-}$ ， K_f 的定義為：

$$\frac{[\text{金屬離子濃度}] \cdot [\text{螯合劑濃度}]}{[\text{螯合劑濃度}]} = \frac{[M^{n+}] \cdot [L]}{[ML]^{n-}}, \text{而常用的是 } \log K_f, \text{即對} K_f \text{取對數。}$$

(二) 金屬離子的選擇(參考文獻二、三)

| 金屬 | 標準($\mu\text{g/L}$) | | 能形成之化合物 | 金屬 | 標準($\mu\text{g/L}$) | | 能形成之化合物 |
|------|-----------------------|------|----------------------------|------|-----------------------|------|---|
| | 行政院 | WHO | | | 行政院 | WHO | |
| 砷 As | 10 | 10 | | 鎳 Ni | 20 | 70 | $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ |
| 鉛 Pb | 10 | 10 | $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ | 汞 Hg | 1 | 6 | HgCl_2 |
| 硒 Se | 10 | 40 | | 銀 Ag | 50 | X | AgNO_3 |
| 鉻 Cr | 50 | 50 | CrCl_3 | 鉬 Mo | 70 | X | |
| 鎘 Cd | 5 | 3 | | 鋁 Al | 200 | 200 | $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ |
| 鋇 Ba | 2000 | 1300 | $\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ | 鐵 Fe | 300 | X | FeSO_4 $\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ |
| 銻 Sb | 10 | 20 | | 錳 Mn | 50 | X | MnSO_4 |
| 鋅 Zn | 5000 | X | ZnSO_4 | 銅 Cu | 1000 | 2000 | CuSO_4 |

▲表1-1 金屬離子選擇表

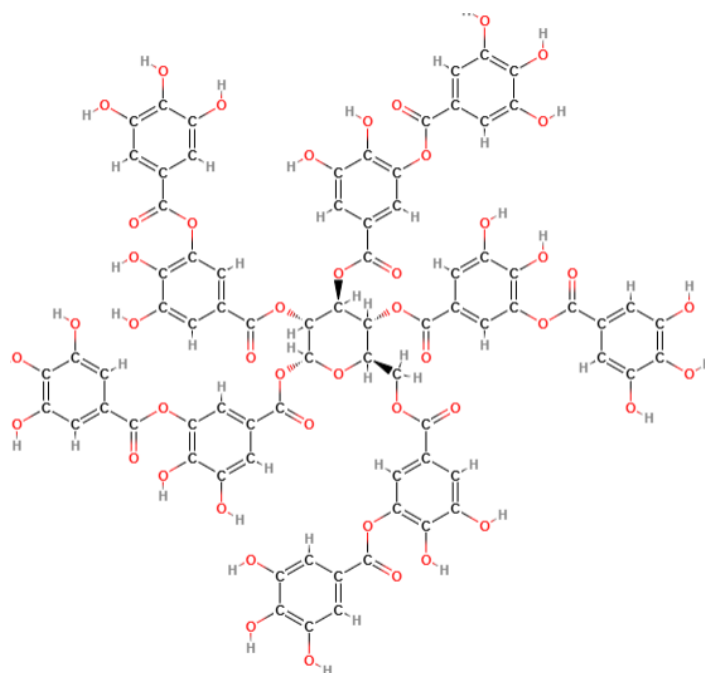
經過比較及篩選，我們決定以較為常見的 Pb^{2+} 、 Cr^{3+} 、 Ba^{2+} 、 Zn^{2+} 、 Ni^{2+} 、 Hg^{2+} 、 Ag^+ 、 Al^{3+} 、 Fe^{2+} 、 Fe^{3+} 、 Mn^{2+} 、 Cu^{2+} 為實驗材料，觀察其與螯合劑反應後的變化。

(三) 螯合劑

1. 單寧酸 (Tannic acid)

(1) 簡介

- 化學式： $C_{72}H_{52}O_{46}$ (結構式如下)
- 結構：多酚類化合物，具有多個酚羥基 (-OH)。
- 螯合原理：酚羥基 (-OH) 中的氧原子 (O) 可以釋放氫離子 (H^+)，形成酚氧負離子 ($-O^-$)，這個帶負電的氧原子可以與金屬離子 (M^{n+}) 配位。
- 螯合最佳pH值：4~8。



▲圖1-1 單寧酸結構圖

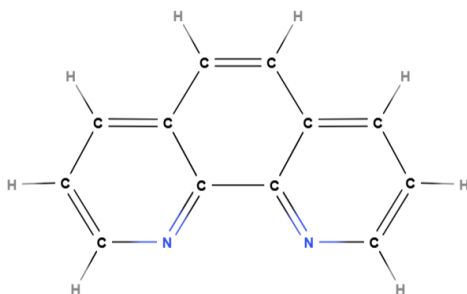
(2) 與我們使用金屬離子的螯合物

常見的即為單寧酸鐵、單寧酸亞鐵……等。

2. 鄰二氮菲 (1,10-Phenanthroline, 簡稱Phen)

(1) 簡介

- 化學式： $C_{12}H_8N_2$ (結構式如下)
- 結構：含有兩個吡啶環 (pyridine rings)，在 1,10-位置上有兩個氮原子。
- 螯合原理：兩個氮原子可以與金屬離子配位，形成一個穩定的五元環。
- 螯合最佳pH值：依不同金屬而異，約2~9。

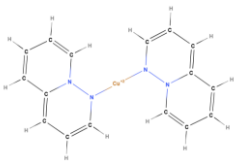
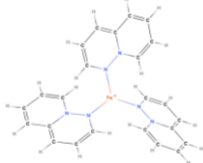
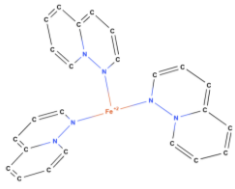
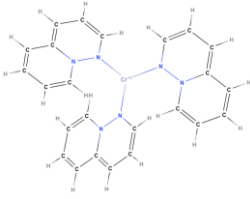
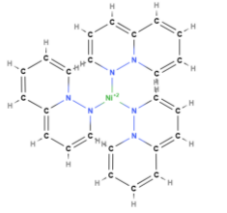
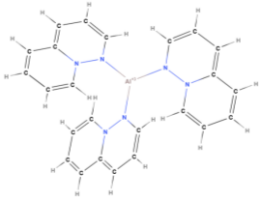
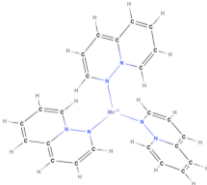
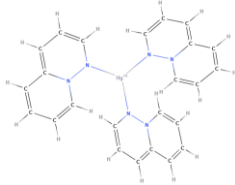
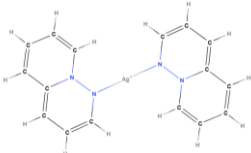


▲圖1-2 Phen結構圖

(2) 與我們使用金屬離子的螯合物

| 金屬離子 | Ba^{2+} | Zn^{2+} | Pb^{2+} |
|------------------|-------------------|---------------------|---------------------|
| 螯合物名稱 | 鋇(II)鄰二氮菲 | 鋅(II)鄰二氮菲 | 鉛(II)鄰二氮菲 |
| 螯合物化學式 | $[Ba(Phen)]^{2+}$ | $[Zn(Phen)_3]^{2+}$ | $[Pb(Phen)_2]^{2+}$ |
| K _f 值 | 0.40 | 17.3 | 8.14 |
| 化合物結構 | | | |

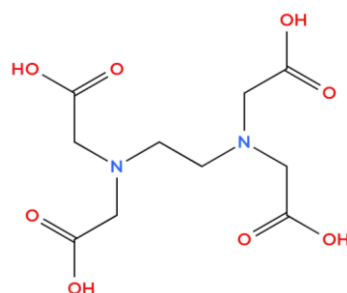
(3) 與我們使用金屬離子的螯合物 (續)

| 金屬離子 | Cu^{2+} | Fe^{3+} | Fe^{2+} |
|---------|---|--|---|
| 螯合物名稱 | 銅(II)鄰二氮菲 | 鐵(III)鄰二氮菲 | 鐵(II)鄰二氮菲 |
| 螯合物化學式 | $[\text{Cu}(\text{Phen})_2]^{2+}$ | $[\text{Fe}(\text{Phen})_2]^{3+}$ | $[\text{Fe}(\text{Phen})_2]^{2+}$ |
| K_f 值 | 21.43 | 14.6 | 21.0 |
| 化合物結構 |  |  |  |
| 金屬離子 | Cr^{3+} | Ni^{2+} | Al^{3+} |
| 螯合物名稱 | 鉻(III)鄰二氮菲 | 鎳(II)鄰二氮菲 | 鋁(III)鄰二氮菲 |
| 螯合物化學式 | $[\text{Cr}(\text{Phen})_3]^{3+}$ | $[\text{Ni}(\text{Phen})_3]^{2+}$ | $[\text{Al}(\text{Phen})_3]^{3+}$ |
| K_f 值 | 20.5 | 24.9 | 10.4 |
| 化合物結構 |  |  |  |
| 金屬離子 | Mn^{2+} | Hg^{2+} | Ag^+ |
| 螯合物名稱 | 錳(II)鄰二氮菲 | 汞(II)鄰二氮菲 | 銀(I)鄰二氮菲 |
| 螯合物化學式 | $[\text{Mn}(\text{Phen})_3]^{2+}$ | $[\text{Hg}(\text{Phen})_2]^{2+}$ | $[\text{Ag}(\text{Phen})_2]^+$ |
| K_f 值 | 10.2 | 23.35 | 12.11 |
| 化合物結構 |  |  |  |

3. 乙二胺四乙酸(Ethylenediaminetetraacetic acid，簡稱EDTA)

(1) 簡介

- 化學式： $C_{10}H_{16}N_2O_8$ (結構式如下)
- 結構：由乙二胺 ($-NH_2CH_2CH_2NH_2$) 骨架以及四個羧酸基 ($-COOH$) 組成。
- 螯合原理：其中的兩個胺基 ($-NH_2$) 及四個羧酸基 ($-COO^-$) 均可當配位點，與金屬離子配位。
- 螯合最佳pH值：8~11。

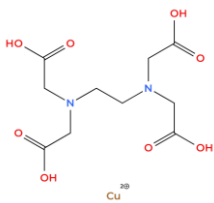
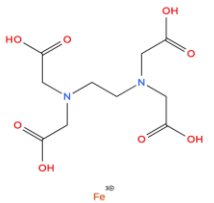
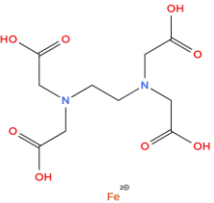
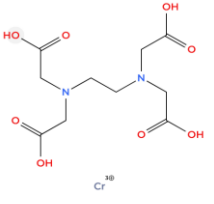
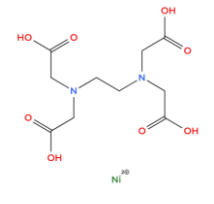
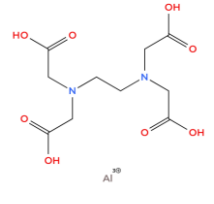
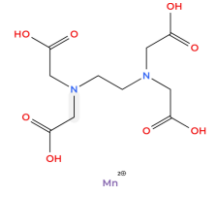
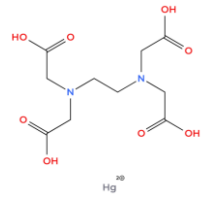
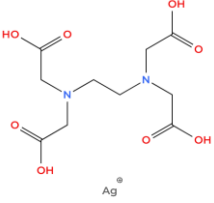


▲圖1-3 EDTA結構圖

(2) 與我們使用金屬離子的螯合物

| 金屬離子 | Ba^{2+} | Zn^{2+} | Pb^{2+} |
|---------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 螯合物名稱 | 鋇(II)-EDTA | 鋅(II)-EDTA | 鉛(II)-EDTA |
| 螯合物化學式 | $[Ba(EDTA)]^{2-}$ | $[Zn(EDTA)]^{2-}$ | $[Pb(EDTA)]^{2-}$ |
| K_f 值 | 7.88 | 18.0 | 18.0 |
| 化合物結構 | | | |

(2) 與我們使用金屬離子的螯合物(續)

| 金屬離子 | Cu^{2+} | Fe^{3+} | Fe^{2+} |
|---------|---|--|---|
| 螯合物名稱 | 銅(II)-EDTA | 鐵(III)-EDTA | 鐵(II)-EDTA |
| 螯合物化學式 | $[\text{Cu}(\text{EDTA})]^{2-}$ | $[\text{Fe}(\text{EDTA})]^{-}$ | $[\text{Fe}(\text{EDTA})]^{2-}$ |
| K_f 值 | 18.78 | 25.1 | 14.3 |
| 化合物結構 |  |  |  |
| 金屬離子 | Cr^{3+} | Ni^{2+} | Al^{3+} |
| 螯合物名稱 | 鉻(III)-EDTA | 鎳(II)-EDTA | 鋁(III)-EDTA |
| 螯合物化學式 | $[\text{Cr}(\text{EDTA})]^{-}$ | $[\text{Ni}(\text{EDTA})]^{2-}$ | $[\text{Al}(\text{EDTA})]^{-}$ |
| K_f 值 | 23.4 | 18.4 | 16.4 |
| 化合物結構 |  |  |  |
| 金屬離子 | Mn^{2+} | Hg^{2+} | Ag^{+} |
| 螯合物名稱 | 錳(II)-EDTA | 汞(II)-EDTA | 銀(I)-EDTA |
| 螯合物化學式 | $[\text{Mn}(\text{EDTA})]^{2-}$ | $[\text{Hg}(\text{EDTA})]^{2-}$ | $[\text{Ag}(\text{EDTA})]^{3-}$ |
| K_f 值 | 13.89 | 21.5 | 7.2 |
| 化合物結構 |  |  |  |

▲表1-3 EDTA與各金屬離子螯合資訊

(四) 研究SMILES

SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System, 簡化分子輸入線性表達法), 是一種用於表示化學結構的文字表示法。

SMILES的基本規則

1. 原子

以元素符號表示, 例如:

碳 (C)、氧 (O)、氮 (N)、氯 (Cl) 等

特殊原子 (如帶電離子) 要加方括號, 如 [Na+], [O-2]。



▲圖1-4 鈉離子



▲圖1-5 氧離子

2. 鍵結

單鍵 (-): 可以省略, 例如 CC (乙烷, C-C)

雙鍵 (=): 例如 C=C (乙烯, C=C)

三鍵 (#): 例如 C#C (乙炔, C≡C)

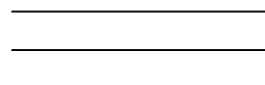
另外, RDKit會自動省略C(碳原子)



▲圖1-5 乙烷



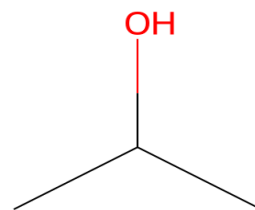
▲圖1-6 乙烯



▲圖1-7 乙炔

3. 支鏈

以 () 表示, 例如 CC(O)C (2-丙醇, C-C(OH)-C)



▲圖1-8 2-丙醇

4. 環

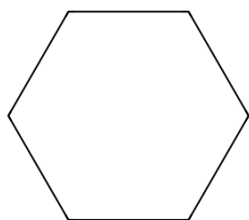
以數字標示環，C1 表示這個碳是環的起點（編號 1）。接下來 CC...CC 代表n個碳連接在一起。最後 1 表示回到起點，形成環狀結構。

(1)非芳香環

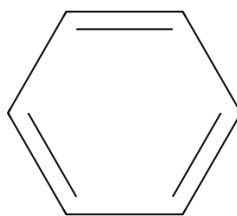
以C表示，如環己烷：C1CCCCC1

(2)芳香環

以c表示，如苯：c1ccccc1



▲圖1-9 環己烷

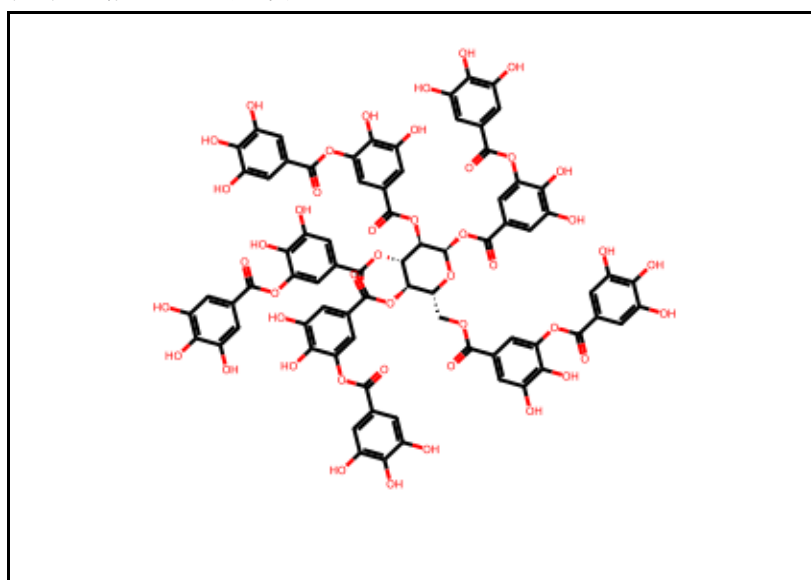


▲圖1-10 苯

5.其他例子

單寧酸：Oc1cc(cc(O)c1O)C(=O)Oc1cc(cc(O)c1O)C(=O)OC[C@H]1O[C@H](OC(=O)c2cc(O)c(O)c(OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)c2)[C@H](OC(=O)c2cc(O)c(O)c(OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)c2)[C@@H](OC(=O)c2cc(O)c(O)c(OC(=O)c3cc(O)c(O)c(O)c3)c2)[C@@H]1OC(=O)c1cc(O)c(O)c(OC(=O)c2cc(O)c(O)c(O)c2)c1

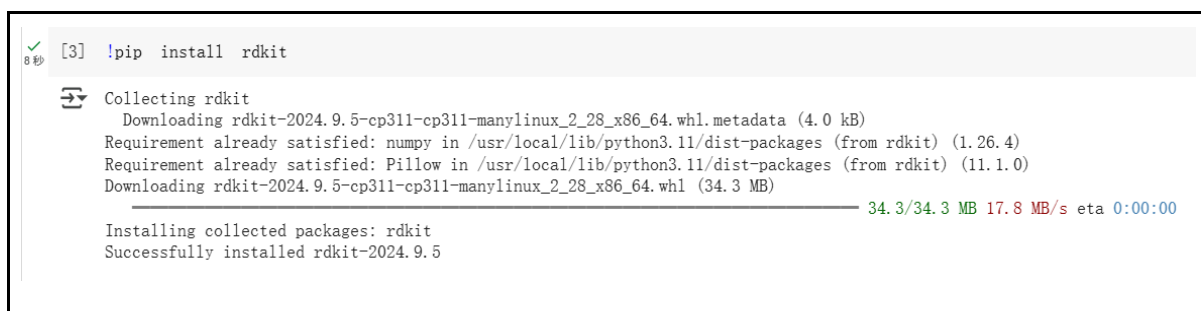
@指立體化學結構，本研究暫不討論。



▲圖1-11 單寧酸

(五) Python程式設計(參考文獻四、五、六)

Python 中的 RDKit 函式庫可以生成化學分子結構，並顯示出來。我們使用Google提供的 Colab 來撰寫程式。首先下載 RDKit 函式庫：



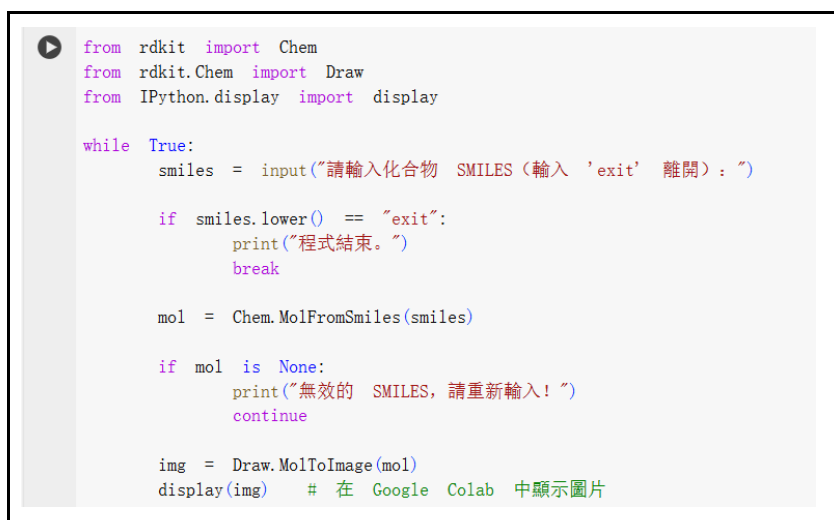
```
[3] !pip install rdkit

Collecting rdkit
  Downloading rdkit-2024.9.5-cp311-cp311-manylinux_2_28_x86_64.whl.metadata (4.0 kB)
Requirement already satisfied: numpy in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from rdkit) (1.26.4)
Requirement already satisfied: Pillow in /usr/local/lib/python3.11/dist-packages (from rdkit) (11.1.0)
  Downloading rdkit-2024.9.5-cp311-cp311-manylinux_2_28_x86_64.whl (34.3 MB)
----- 34.3/34.3 MB 17.8 MB/s eta 0:00:00
Installing collected packages: rdkit
Successfully installed rdkit-2024.9.5
```

▲圖1-12 下載 RDKit 函式庫

輸入 `!pip install rdkit` 這串程式，即可直接開始下載。

接著撰寫正式程式碼：



```
from rdkit import Chem
from rdkit.Chem import Draw
from IPython.display import display

while True:
    smiles = input("請輸入化合物 SMILES (輸入 'exit' 離開): ")

    if smiles.lower() == "exit":
        print("程式結束。")
        break

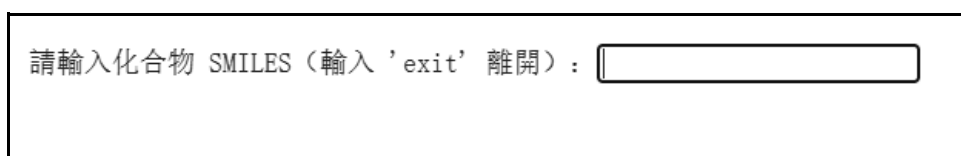
    mol = Chem.MolFromSmiles(smiles)

    if mol is None:
        print("無效的 SMILES, 請重新輸入!")
        continue

    img = Draw.MolToImage(mol)
    display(img) # 在 Google Colab 中顯示圖片
```

▲圖1-13 程式碼

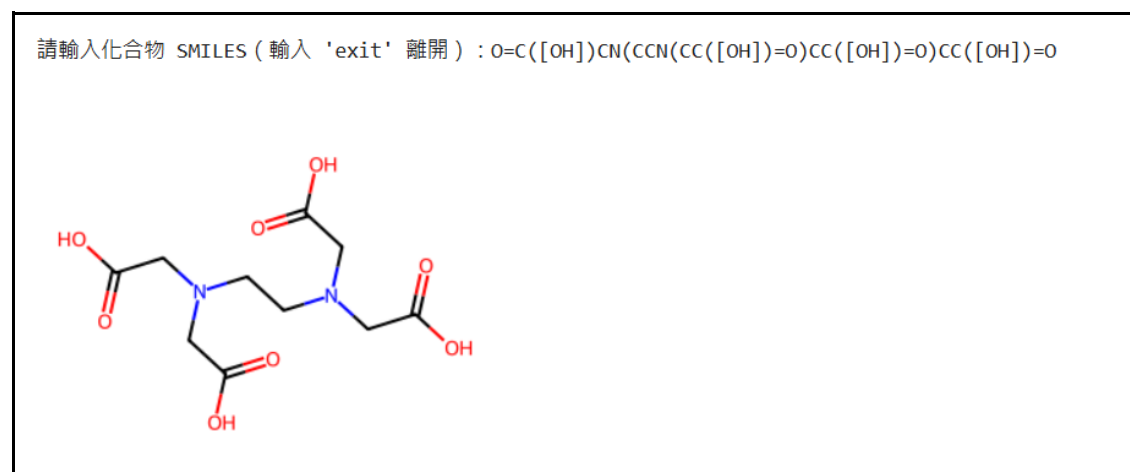
輸入畫面：



請輸入化合物 SMILES (輸入 'exit' 離開):

▲圖1-14 程式輸入畫面

生成結構式畫面(以EDTA為例)：



▲圖1-15 生成結構式畫面

輸入錯誤：

```
請輸入化合物 SMILES ( 輸入 'exit' 離開 ) : 123
[08:47:29] SMILES Parse Error: syntax error while parsing: 123
[08:47:29] SMILES Parse Error: check for mistakes around position 1:
[08:47:29] 123
[08:47:29] ^
[08:47:29] SMILES Parse Error: Failed parsing SMILES '123' for input: '123'
無效的 SMILES，請重新輸入！
```

▲圖1-16 輸入錯誤畫面

結束程式畫面：

```
請輸入化合物 SMILES ( 輸入 'exit' 離開 ) : exit
程式結束。
```

▲圖1-17 結束程式畫面

貳、研究設備及器材

一、試劑

1. 10^{-3}M 單寧酸水溶液($\text{C}_{76}\text{H}_{52}\text{O}_{46}$ ，分子量=1700)
2. 10^{-3}M EDTA水溶液($\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{N}_2\text{O}_8$ ，分子量=292)
3. 10^{-3}M Phen水溶液($\text{C}_{12}\text{H}_8\text{N}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ，分子量=198)
4. 10^{-3}M 硫酸鐵水溶液($\text{Fe}_2(\text{SO}_4)_3$ ，分子量=400)
5. 10^{-3}M 硫酸亞鐵水溶液($\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=278)
6. 10^{-3}M 硫酸銅水溶液($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=249.5)
7. 10^{-3}M 硫酸鋅水溶液($\text{ZnSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=287.4)
8. 10^{-3}M 硫酸鋁水溶液($\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 18\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=639)
9. 10^{-3}M 硫酸錳水溶液($\text{MnSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ，分子量=169)
10. 10^{-3}M 硝酸鎳水溶液($\text{Ni}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=352.7)
11. 10^{-3}M 硝酸鋇水溶液($\text{Ba}(\text{NO}_3)_2$ ，分子量=261)
12. 10^{-3}M 硝酸鉛水溶液($\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ ，分子量=331)
13. 10^{-3}M 硝酸銀水溶液(AgNO_3 ，分子量=169.9)
14. 10^{-3}M 氯化鉻水溶液($\text{CrCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ，分子量=266.5)
15. 10^{-3}M 氯化汞水溶液(HgCl_2 ，分子量=271.6)

二、器材

1. 精密電子秤(50g×0.001g)
2. 燒杯(50mL)
3. 量筒(10mL、25mL)
4. 容量瓶(100mL、1L)
5. 比色管
6. 安全吸球
7. 分度吸量管(1mL、2mL、5mL、10mL、20mL)
8. 漏斗(60mm、90mm)
9. 刮勺
10. 玻棒
11. 滴管

三、電子器材與使用的軟體

1. Arduino Nano
2. 麵包板
3. 可變電阻
4. LED燈
5. 光譜儀
6. (軟體)Theremino_Spectrometer_窗台小圃V0.2
7. (軟體)StabilityConstantExplorer (參考文獻一)
8. (軟體)Google Colab

| | | |
|---|--|---|
|  |  |  |
| ▲圖2-1 Arduino Nano | ▲圖2-2 比色管 | ▲圖2-3 精密電子秤 |

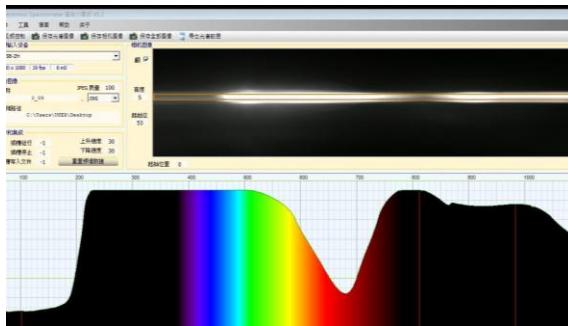
參、研究目的

- 一、光譜儀的製作與測試
- 二、配置各金屬離子與螯合物溶液
- 三、探討不同濃度的螯合劑的光譜變化
- 四、探討不同金屬離子與各螯合劑的反應情形及光譜變化
- 五、探討濃縮護城河水與各螯合物反應情形及光譜變化

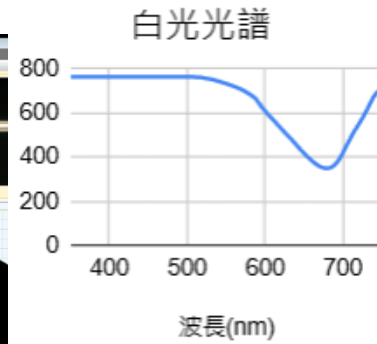
肆、研究過程或方法

一、光譜儀製作與配置

(一)測量光譜儀在白光時的光譜圖

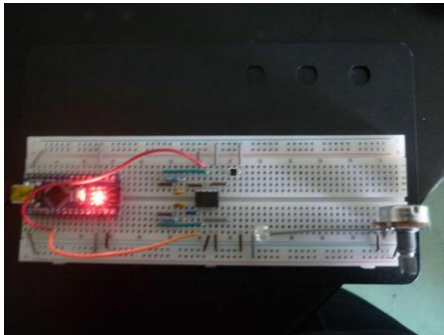


▲ 圖4-1 光譜儀程式畫面(畫面呈現白光)



▲ 圖4-2 白光光譜

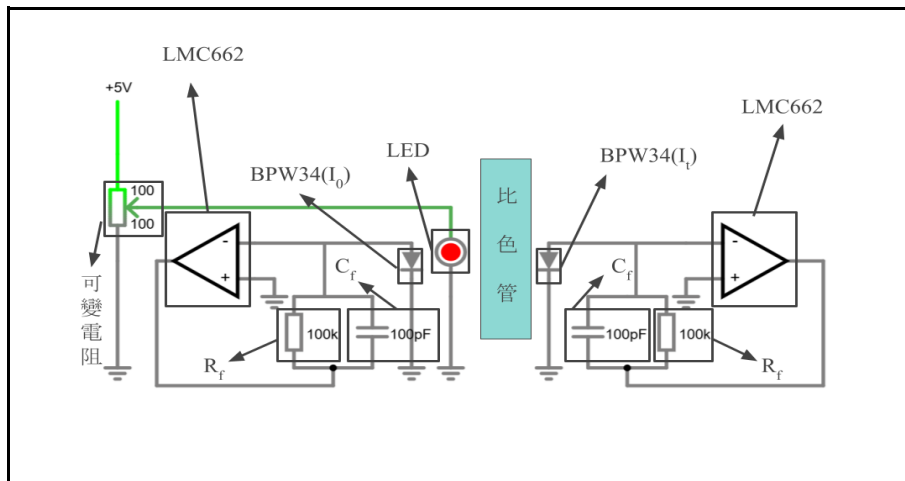
(二)測量光譜使用的器材



▲圖4-3 自組的電路



▲ 圖4-4 光譜儀



▲ 圖4-5 自組電路的電路圖

(三)測量方式：

我們從網站上購置光譜儀，並使用LED燈透過溶液照射到比色管內，進而在電腦形成光譜。一開始先讓LED對準光譜儀，確認LED的光譜能夠顯示，接著再將比色管內裝滿待測溶液，放在LED與光譜儀中間的空隙，再去測量其光譜。



▲ 圖4-6 光譜測量方式

二、配置各金屬離子與螯合物溶液

(一) 螯合劑溶液配置(以單寧酸為例)

1. 以精密電子秤量取 10^{-3} mol(約1.7g)單寧酸加入燒杯內，在燒杯內加入少許蒸餾水使溶質完全溶解。
2. 燒杯內溶液經90mm漏斗全部倒入1L量瓶內，以蒸餾水沖洗燒杯，沖洗液也倒入量瓶中。
3. 加入蒸餾水至量瓶刻度處， 10^{-3} M單寧酸溶液即配置完成。
4. 將溶液倒入茶色血清瓶內保存，並貼上標籤。
5. 將單寧酸換成Phen，重複上述步驟1~4。

☆後來發現EDTA難溶於水，無法進行測量



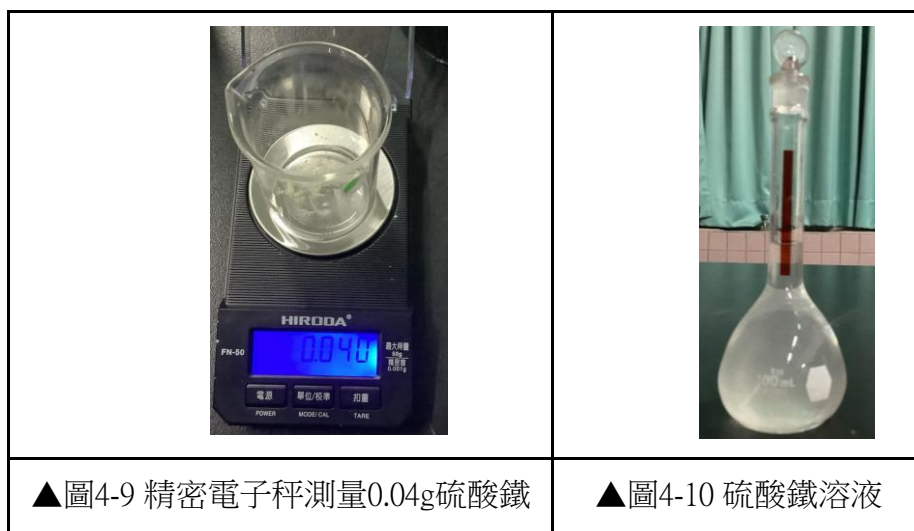
▲ 圖4-7 精密電子秤測量1.7g單寧酸



▲ 圖4-8 單寧酸溶液

(二) 金屬離子溶液配置(以硫酸鐵為例)

1. 以精密電子秤量取 10^{-3}mol (約0.04g)硫酸鐵加入燒杯內，在燒杯內加入少許蒸餾水使溶質完全溶解。
2. 燒杯內溶液經60mm漏斗全部倒入100mL量瓶內，以蒸餾水沖洗燒杯，沖洗液也倒入量瓶中。
3. 加入蒸餾水至刻度處， 10^{-3}M 硫酸鐵溶液即配置完成。
4. 將溶液倒入茶色精油滴瓶內保存，並貼上標籤。
5. 將硫酸鐵換成其他化合物，重複上述步驟1~4。



三、探討不同濃度的螯合劑的光譜變化

(一)探討不同濃度的螯合劑光譜(以單寧酸溶液為例)

1. 以安全吸球及5mL分度吸量管，量取4mL 10^{-3}M 單寧酸溶液加入比色管內。
2. 以自組研究儀器測量光譜，並拍照紀錄。
3. 取19mL 10^{-3}M 單寧酸溶液與1mL蒸餾水加入燒杯內，即得 $9.5 \times 10^{-4}\text{M}$ 單寧酸溶液
4. 將單寧酸溶液改成18mL、17mL、……，重複上述步驟(1~3)，測量 $9.5 \times 10^{-4}\text{M}$ 、 $9 \times 10^{-4}\text{M}$ 、 $0.5 \times 10^{-4}\text{M}$ 單寧酸溶液光譜。
5. 重複上述步驟1~4，測量 $9.5 \times 10^{-4}\text{M}$ 、 $9 \times 10^{-4}\text{M}$ 、 $0.5 \times 10^{-4}\text{M}$ Phen溶液光譜。

四、探討不同金屬離子與各螯合劑的反應情形及光譜變化

(一) 探討不同金屬離子與各螯合劑的反應情形

1. 以25mL量筒量取25mL 10^{-3} M單寧酸溶液加入燒杯內，加入25mL 10^{-3} M硫酸鐵溶液，並立即拍照。
2. 測量30s、5min、1hr、1day的光譜並拍照紀錄。
3. 將硫酸鐵換成其他化合物，重複上述步驟1~2。
4. 將單寧酸換成其他螯合劑，重複上述步驟1~3。

(五) 探討濃縮護城河水與各螯合物反應情形及光譜變化

1. 將護城河的水從3000ml蒸餾至75ml，使護城河水溶液濃度變成原本的4000%。
2. 以25mL量筒量取25mL 10^{-3} M單寧酸溶液加入燒杯內，加入25mL濃縮的護城河水溶液並拍照。
3. 測量30s、5min、1hr、1day的光譜並拍照。
4. 將單寧酸換成其他螯合劑，重複上述步驟1~3。































▲ 圖4-11 用蒸餾法將護城河的水濃縮至原本的4000%


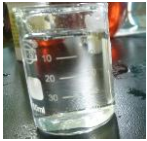
















伍、研究結果

一、不同金屬離子與螯合劑反應後情形

(一) 單寧酸與各種不同金屬離子反應後的變化

| 金屬離子 | Ba ²⁺ | Zn ²⁺ | Pb ²⁺ | Cu ²⁺ | Fe ³⁺ | Fe ²⁺ |
|------|---|---|---|--|---|---|
| 5min |  |  |  |  |  |  |
| 1hr |  |  |  |  |  |  |
| 1day |  |  |  |  |  |  |
| 結果描述 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 產生粉色沉澱 | 無明顯變化 | 產生紫色混濁 | 產生紫色混濁 |
| 金屬離子 | Cr ³⁺ | Ni ²⁺ | Al ³⁺ | Mn ²⁺ | Hg ²⁺ | Ag ⁺ |
| 5min |  |  |  |  |  |  |
| 1hr |  |  |  |  |  |  |
| 1day |  |  |  |  |  |  |
| 結果描述 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 產生棕色混濁 |


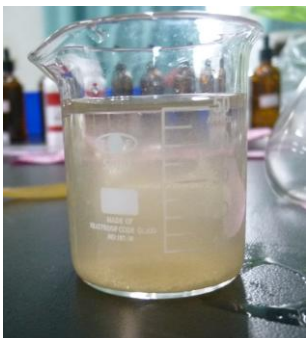
(二) Phen與各種不同金屬離子反應後的變化

| 金屬離子 | Ba ²⁺ | Zn ²⁺ | Pb ²⁺ | Cu ²⁺ | Fe ³⁺ | Fe ²⁺ |
|------|---|---|---|--|---|---|
| 5min |  |  |  |  |  |  |
| 1hr |  |  |  |  |  |  |
| 1day |  |  |  |  |  |  |
| 結果描述 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 產生白色沉澱 | 無明顯變化 | 產生黃棕色沉澱 | 產生黃棕色沉澱 |
| 金屬離子 | Cr ³⁺ | Ni ²⁺ | Al ³⁺ | Mn ²⁺ | Hg ²⁺ | Ag ⁺ |
| 5min |  |  |  |  |  |  |
| 1hr |  |  |  |  |  |  |
| 1day |  |  |  |  |  |  |
| 結果描述 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 無明顯變化 | 產生白色沉澱 | 產生白色沉澱 |

▲ 表5-2 Phen與各種不同金屬離子反應後的變化


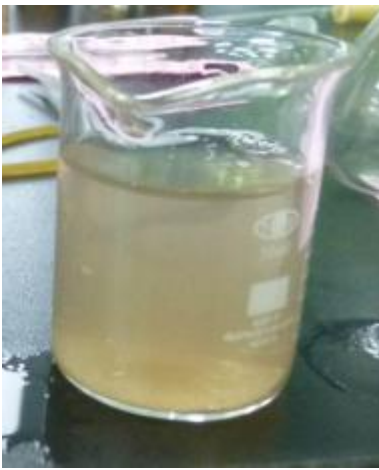
(三) 護城河的水與單寧酸及Phen反應後的變化

1.反應後時間30s：

| | |
|---|--|
|  |  |
| ▲圖5-1 單寧酸(無明顯變化) | ▲圖5-2 Phen(無明顯變化) |

▲表5-3 護城河的水與單寧酸及Phen反應後30s的變化

2.反應後一天：

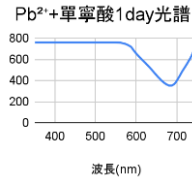
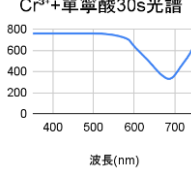
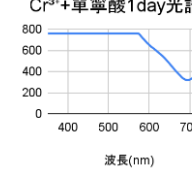
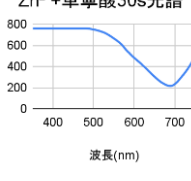
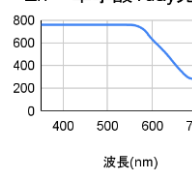
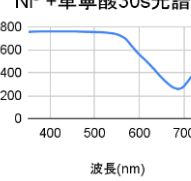
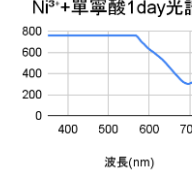
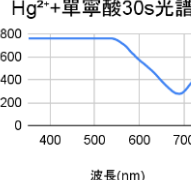
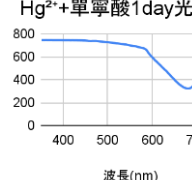
| | |
|--|---|
|  |  |
| 單寧酸(無明顯變化) | Phen(無明顯變化) |

▲表5-4 護城河的水與單寧酸及Phen反應後一天的變化

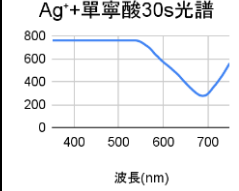
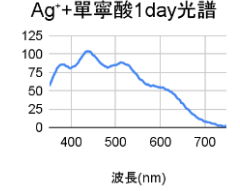
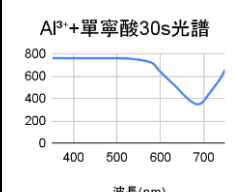

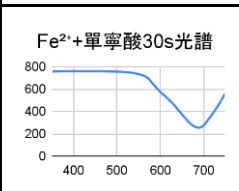
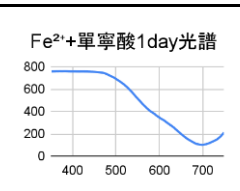
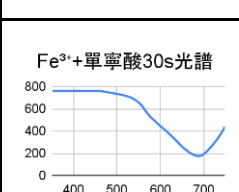
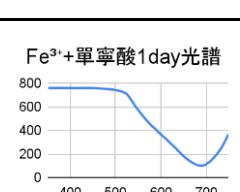
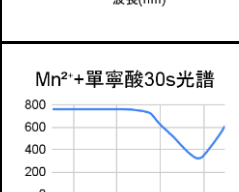

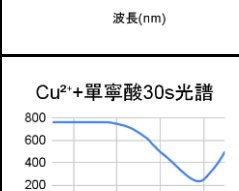
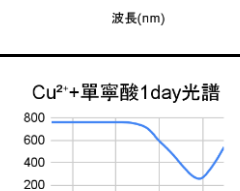
二、光譜圖

由於第0秒、第30秒和第5分鐘測出來的光譜圖很相近，並且1小時和1天的測出來的光譜圖也很相近，所以我們只取30秒測的光譜和1天後測出來的光譜來進行比較。

(一)單寧酸與各種不同金屬離子反應後的光譜儀測定結果

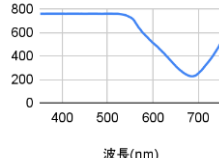
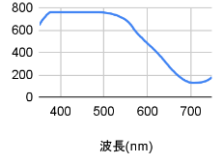
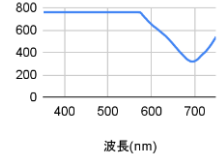
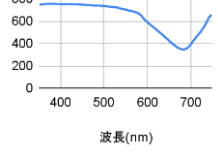
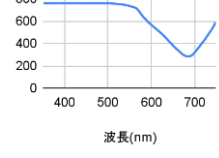
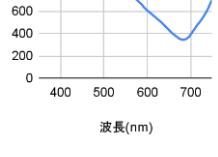
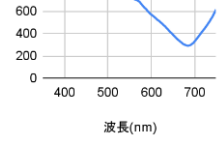
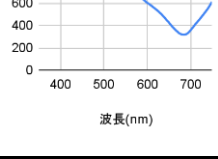
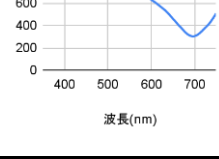
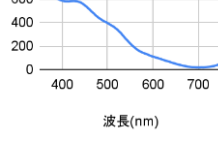
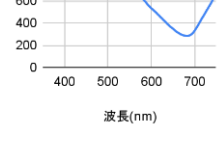
| | 30sec | 1 day | 現象描述 |
|-----------|---|--|---------------------------------|
| Pb^{2+} |  <p>Pb²⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Pb²⁺+單寧酸1day光譜</p> | 在一開始會產生混濁，吸收紅光光譜， 過了一天後會產生沉澱 |
| Cr^{3+} |  <p>Cr³⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Cr³⁺+單寧酸1day光譜</p> | 無明顯變化 |
| Ba^{2+} |  <p>Ba²⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Ba²⁺+單寧酸1day光譜</p> | 無明顯變化 |
| Zn^{2+} |  <p>Zn²⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Zn²⁺+單寧酸1day光譜</p> | 無明顯變化 |
| Ni^{2+} |  <p>Ni²⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Ni²⁺+單寧酸1day光譜</p> | 無明顯變化 |
| Hg^{2+} |  <p>Hg²⁺+單寧酸30s光譜</p> |  <p>Hg²⁺+單寧酸1day光譜</p> | 無明顯變化 |

(一)單寧酸與各種不同金屬離子反應後的光譜儀測定結果(續)

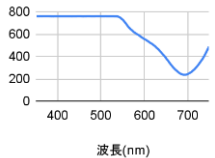
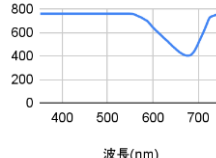
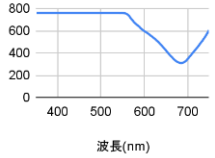
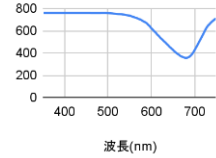
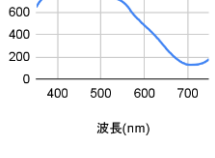
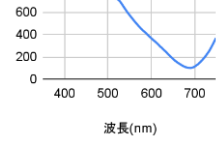
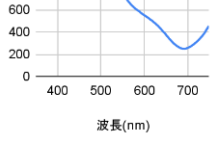
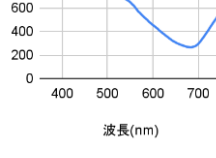
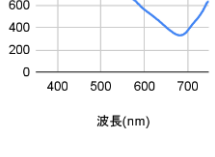
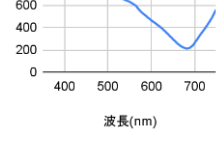
| | 30秒 | 1天 | 現象描述 |
|------------------|---|--|---------------------------|
| Ag^+ | <p>Ag^++單寧酸30s光譜</p>  | <p>Ag^++單寧酸1day光譜</p>  | 一開始無變化，後來反應後吸收不規則光譜 |
| Al^{3+} | <p>Al^{3+}+單寧酸30s光譜</p>  | <p>Al^{3+}+單寧酸1day光譜</p>  | 無明顯變化 |
| Fe^{2+} | <p>Fe^{2+}+單寧酸30s光譜</p>  | <p>Fe^{2+}+單寧酸1day光譜</p>  | 會產生混濁，吸收的紅光變化量較其他金屬離子螯合物多 |
| Fe^{3+} | <p>Fe^{3+}+單寧酸30s光譜</p>  | <p>Fe^{3+}+單寧酸1day光譜</p>  | 會產生混濁，吸收的紅光變化量較其他金屬離子螯合物多 |
| Mn^{2+} | <p>Mn^{2+}+單寧酸30s光譜</p>  | <p>Mn^{2+}+單寧酸1day光譜</p>  | 無明顯變化 |
| Cu^{2+} | <p>Cu^{2+}+單寧酸30s光譜</p>  | <p>Cu^{2+}+單寧酸1day光譜</p>  | 無明顯變化 |

▲ 表5-5 單寧酸與各種不同金屬離子反應後的光譜圖

(二) Phen與各種不同金屬離子反應後的光譜儀測定結果

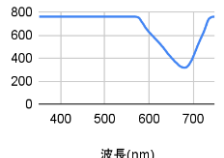
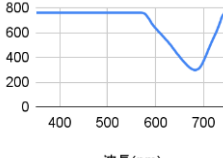
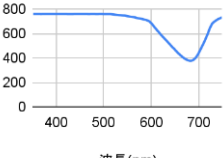
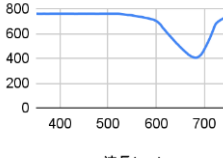
| | 30sec | 1day | 現象描述 |
|-----------|--|---|-----------------------------------|
| Pb^{2+} | <p>Pb²⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Pb²⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 會產生沉澱，導致光譜無變化 |
| Cr^{3+} | <p>Cr³⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Cr³⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |
| Ba^{2+} | <p>Ba²⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Ba²⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |
| Zn^{2+} | <p>Zn²⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Zn²⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |
| Ni^{2+} | <p>Ni²⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Ni²⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |
| Hg^{2+} | <p>Hg²⁺+Phen30s光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>Hg²⁺+Phen1day光譜</p>  <p>波長(nm)</p> | 一開始產生混濁，吸收無規則光譜，後來會產生沉澱，導致光譜無明顯變化 |

(二) Phen與各種不同金屬離子反應後的光譜儀測定結果(續)

| | 30秒 | 1天 | 現象描述 |
|------------------|--|---|---------------------------|
| Ag^+ | <p>Ag⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Ag⁺+Phen1day光譜</p>  | 一開始會吸收較多紅光，後面會沉澱導致光譜無明顯變化 |
| Al^{3+} | <p>Al³⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Al³⁺+phen1day光譜</p>  | 無明顯變化 |
| Fe^{2+} | <p>Fe²⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Fe²⁺+Phen1day光譜</p>  | 吸收較多紅光 |
| Fe^{3+} | <p>Fe³⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Fe³⁺+Phen1day光譜</p>  | 吸收較多紅光 |
| Mn^{2+} | <p>Mn²⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Mn²⁺+Phen1day光譜</p>  | 無明顯變化 |
| Cu^{2+} | <p>Cu²⁺+Phen30s光譜</p>  | <p>Cu²⁺+Phen1day光譜</p>  | 無明顯變化 |

▲ 表5-6 單寧酸與各種不同金屬離子反應後的光譜圖

(四) 濃縮護城河水與單寧酸及Phen反應後的光譜變化

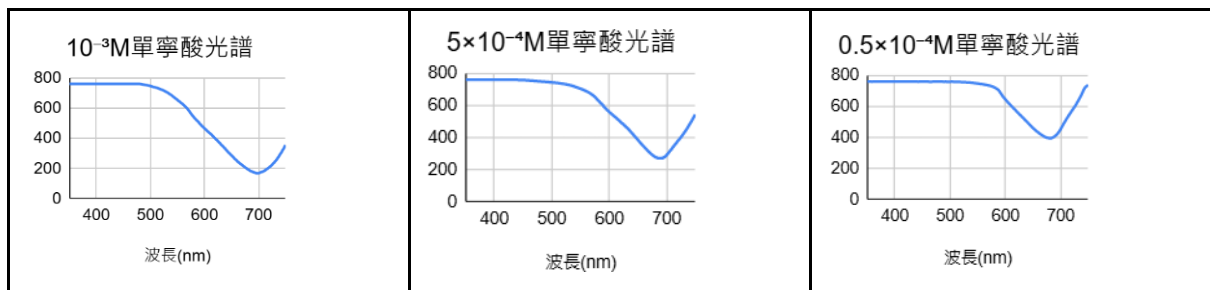
| | 30sec | 1day | 現象描述 |
|------|---|--|-------|
| 單寧酸 | <p>護城河單寧酸30秒</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>護城河單寧酸1天</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |
| Phen | <p>護城河 Phen 30秒</p>  <p>波長(nm)</p> | <p>護城河 Phen 1天</p>  <p>波長(nm)</p> | 無明顯變化 |

▲ 表5-7 濃縮護城河水與單寧酸及Phen反應後的光譜圖

陸、討論

我們的在挑選LED時，因為所使用的白光LED較偏向藍光，所以光譜圖的紅光部分相對亮度比較暗，在測量時也因此只能測量相對的數據，並進行分析。

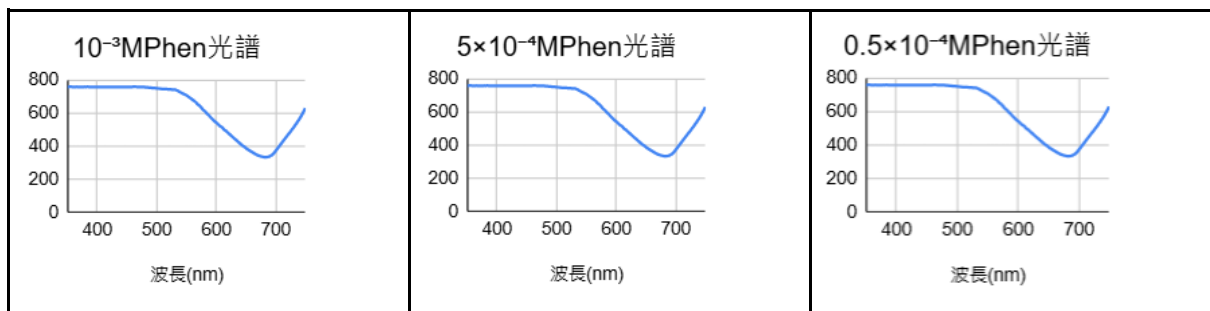
一、比較單寧酸在我們測量的最高濃度與最低濃度



▲ 表6-1 單寧酸的最高濃度與最低濃度光譜圖

單寧酸的濃度在 10^{-3}M 時光譜數據紅光的相對亮度明顯減弱，比起濃度為 $0.5 \times 10^{-4}\text{M}$ 的單寧酸，在單寧酸濃度越高的時候，所吸收的紅光就會越多。

二、比較Phen的最高濃度與最低濃度

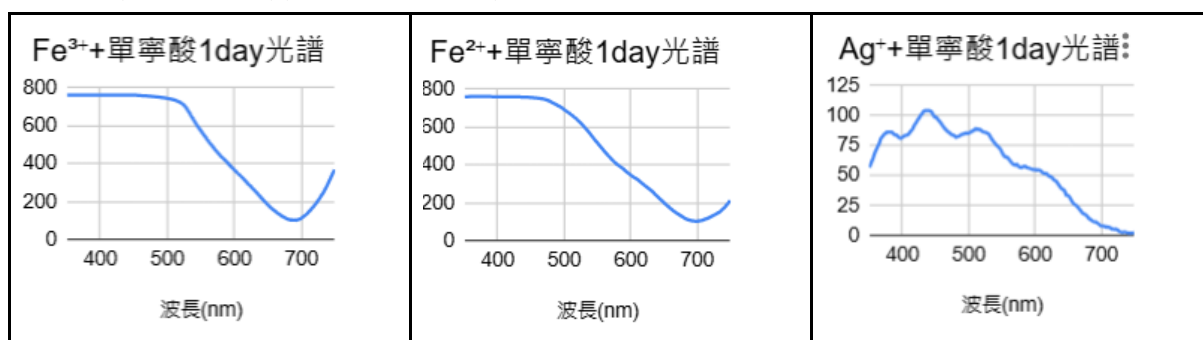


▲ 表6-2 Phen的最高濃度與最低濃度光譜圖

Phen在各個濃度下的光譜都差不多，濃度的改變不會影響其光譜。

三、單寧酸和金屬離子的反應

鐵離子、亞鐵離子、鉛離子和銀離子有較明顯的化學反應變化，其中鐵離子、亞鐵離子和銀離子的光譜會出現明顯的變化。

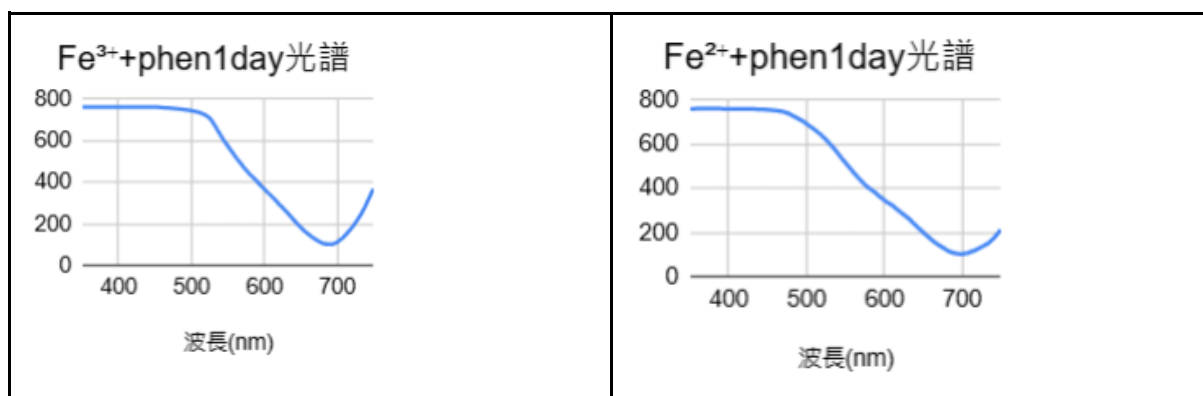


▲ 表6-3 單寧酸和金屬離子的反應光譜圖

鐵離子、亞鐵離子和單寧酸螯合的光譜會吸收較多紅光，而鉛離子吸收的光譜變化較不規律。雖然鉛離子會有反應，但會和單寧酸形成沉澱，因此光譜變化就較不明顯。

四、Phen和金屬離子的反應

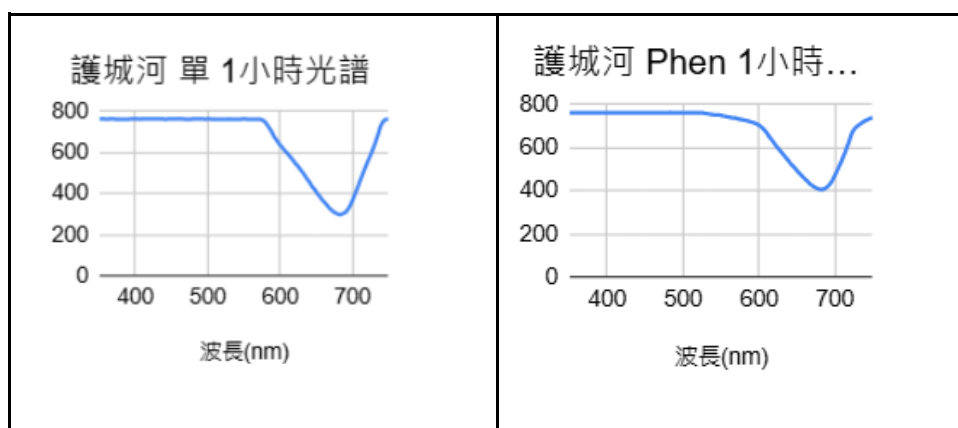
其中鐵離子、亞鐵離子、鉛離子、銀離子和汞離子會有較明顯的化學反應變化。



▲ 表6-4 Phen和金屬離子的反應光譜圖

鐵離子、亞鐵離子和Phen螯合的光譜會吸收較多紅光，其他的金屬離子光譜變化則比較少，但是鉛離子、銀離子和汞離子會和Phen產生沉澱，所以單看外觀反應變化也能容易的看出來。

五、比較濃縮護城河水和Phen、單寧酸進行反應的光譜



▲ 表6-5 比較濃縮護城河水和Phen、單寧酸進行反應的光譜圖

無論是和單寧酸或是和Phen進行化學反應，雖然已經將護城河的水使用蒸餾法濃縮至4000%，都沒有明顯的進行反應或是光譜變化，而我們想到幾種可能的原因：

1. pH值不對，導致無法順利產生螯合物
2. 金屬離子濃縮得不夠濃
3. 真的沒有金屬離子或極微量，測不出來

我們認為第3點的可能性較大，因為中性(pH=7)是單寧酸、Phen都適合的pH值，而4000%已經是極高的濃度，應該並不是不夠濃的問題，經過資料查詢，我們發現護城河經前任市長治理後，引進地下水做為補充水源，可能是因為加入地下水的緣故，護城河的水已經被稀釋，裡面金屬離子濃度變得極低導致無法被測量。

柒、結論

一、本研究發現，單寧酸與Phen在與不同金屬離子反應時，會產生不同的顏色變化及沉澱現象。鐵離子(Fe^{3+})、亞鐵離子(Fe^{2+})、鉛離子(Pb^{2+})和銀離子(Ag^+)與單寧酸反應後會產生顯著的顏色變化，其中鉛離子會產生沉澱。而Phen與鐵離子、亞鐵離子、鉛離子、銀離子及汞離子(Hg^{2+})反應後也有顏色變化，並且鉛、銀及汞會產生沉澱。

二、我們將護城河水進行濃縮（濃度提高至原本的4000%）後，加入單寧酸與Phen進行測試，結果顯示無明顯顏色變化及光譜差異，這可能表示護城河水中重金屬離子濃度極低，整治措施已有效降低重金屬污染。若要更精確檢測河水中的微量金屬離子，可能要採用更靈敏的檢測方法，或是吸取河中汙泥進行沖洗，以找出是否有重金屬的存在。

三、本研究受限於設備，LED光源的光譜偏向藍光，使紅光部分的測量相對受限。EDTA雖為常見螯合劑，但由於其溶解性問題，本次實驗未能成功測量其光譜。未來可考

慮改用更靈敏的光譜儀器，並結合其他檢測方法，如電化學分析或質譜分析，以提高金屬離子檢測的準確度。

總結來說，單寧酸與Phen對多數金屬離子有明顯反應，可作為重金屬離子檢測的基礎。河川水質的監測可藉由本研究方法進行初步分析，但對於低濃度金屬離子，仍需進一步提升測量靈敏度。此研究為未來發展環保型金屬離子檢測方法奠定基礎，並提供水質評估的新方向。

捌、參考文獻資料

一、螯合物

1. Stability Constant Explorer. (2023)。Database of Stability Constants of Metal Complexes。檢索自 <https://n-hatada.github.io/stability-constant-explorer/english.html>

二、重金屬離子

2. 行政院. (2024)。飲用水水質標準。檢索自 <https://law.moj.gov.tw/LawClass/LawAll.aspx?pcode=00040019>
3. 世界衛生組織 (WHO). (2017)。Guidelines for drinking-water quality (4th ed.)。檢索自 <https://iris.who.int/bitstream/handle/10665/254637/9789241549950-eng.pdf?sequence>

三、程式設計

4. RDKit. (2024)。Python RDKit 文件。檢索自 <https://www.rdkit.org/docs/api-docs.html>
5. STEAM 教育學習網. (2021)。Python 教學。檢索自 <https://steam.oxxostudio.tw/category/python/index.html>
6. Google. (XXXX)。Google Colab。檢索自 <https://colab.research.google.com>