物理化學二-量子化學（PHYSICAL CHEMISTRY II-Quantum Chemistry）

（課號 203 33170）

學分：

三學分（一學期，大三上學期開課）

預修課程：

普通化學、化學數學或相等科目

開授對象：

化學系大三學生之基礎必修課。

課程內容： 授課時數

一、**量子理論**(Quantum theory)： **6 h**

光電效應與輻射的粒子性(Photoelectron effect and particlelike properties of radiation)

粒子的波動性(Wavelike properties of particles)

海生堡測不準原理(The Heisenberg uncertainty principle)

德布洛意物質波(De Broglie matter wave)

薛丁格方程(The Schrodinger equation)

算子(Operators)

量子力學的基本假設(Basic postulates of quantum mechanics)

二、**粒子在一維盒子的運動**(Paticle in a box)： **2 h**

一維盒子中的粒子(Particle in a one-dimensional box)

應用到共軛多烯(Application to conjugated polyenes)

粒子在三維盒子的運動(Particle in a three-dimensional box)

三、**諧振子**(The harmonic oscillator)： **4 h**

古典諧振子(The classical harmonic oscillator)

量子諧振子(The quantum harmonic oscillator)

四、**氫原子**(Hydrogen atom)： **4 h**

類氫原子的薛丁格方程(The Schrödinger equation for hydrogenlike atoms)

類氫原子的本徵函數與機率密度(Eigenfunctions and probability density for hydrogenlike atoms)

類氫原子的軌域角動量(Orbital angular momentum of hydrogenlike aotms)

角動量(Angular momentum)

自旋(Spin)

五、**估計方法**(Approximation methods)： **6 h**

Rayleigh-Schrödinger 微擾理論 (Rayleigh-Schrödinger perturbation theory)

變分法(Variation method)

六、**多電子原子的電子結構**(The electronic structure of many-electron atoms)： **6 h**

氦原子(Helium atom)

包立不共容原理(Pauli-exclusion principle)

氦的第一激發態(First excited of helium atom

鋰原子(Lithium atom)

週期表與建構原理(The periodic table and the Aufbau principle)

原子的項符號(Atomic term symbols)

七、**分子的電子結構**(The electronic structure of molecules)： **6 h**

Born-Oppenheimer 近似 (The Born-Oppenheimer approximation)

氫分子離子(The hydrogen molecule ion)

氫分子的分子軌域描述(The molecular orbital description of the hydrogen molecule)

同核雙原子分子的電子組織(Electron configurations of homonuclear diatomic molecules)

八、**分子與輻射的作用**(The interaction between molecules and radiation)： **4 h**

電磁輻射(Electromagnetic radiation)

光的吸收與發射(Absorption and emission of light)

躍遷機率(Transitional probabilities)

選擇律(Selection rules)

九、**光譜**(Spectroscopy)： **6 h**

旋轉與振動光譜(Rotational and vibrational spectroscopy)

核運動的薛丁格方程(Schrödinger equation for nuclear motion)

雙原子分子的旋轉光譜(Rotational spectra of diatomic molecules)

雙原子分子的振動光譜(Vibrational spectra of diatomic molecules)

雙原子分子的振動旋轉光譜(Vibration-rotation spectra of diatomic molecules)

多原子分子的振動光譜(Vibrational spectra of polyatomic molecules)

拉曼光譜(Raman spectra)

電子光譜(Electronic spectroscopy)

電子能級與選擇律(Electronic energy levels and selection rules)

Franck-Condon 原理(The Franck-Condon principle)

振子強度(Oscillator strength)

多原子分子的電子光譜(Electronic spectra of polyatomic molecules)

共軛分子：自由電子模型(Conjugated molecules: Free-electron model)

螢光與磷光(Fluorescence and phosphorescence)

合計 **44 h**