

结构与谱学II：原子和分子光谱导论

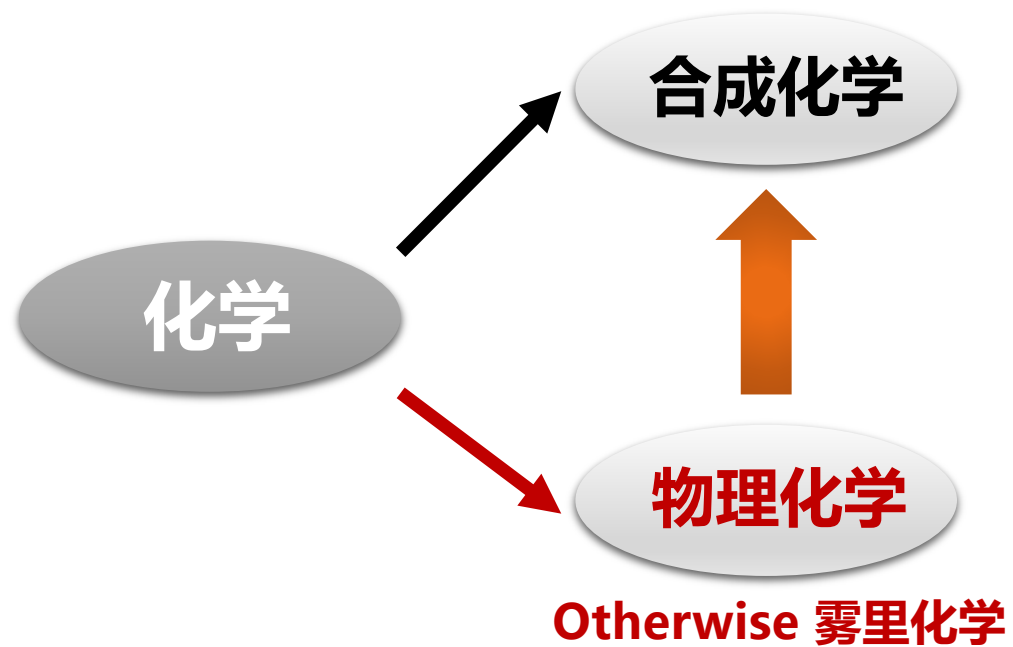
朱海明

hmzhu@zju.edu.cn

13429129488

海纳苑C419

从物理化学聊起。。。



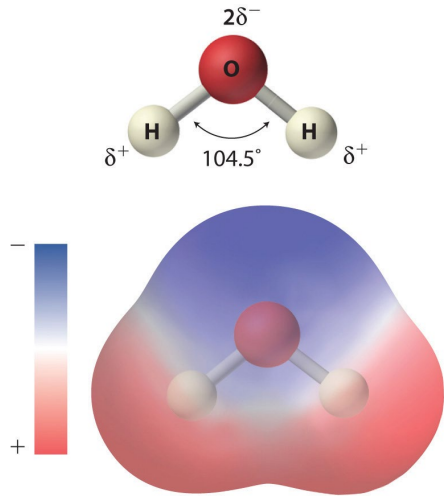
认识 + 改造 物质世界的中心科学

物理化学：用定量系统的方法研究和表达化学。

以**化学体系**为对象，
用**物理**的手段和理论，
探求化学的**基本规律**，
构成整个化学的**基础**。

从物理化学聊起。。。

物理化学



微观分子结构

- 量子力学
 - 光谱学
- 《结构和谱学》

统计热力学

宏观多分子系统性质

- 热力学
 - 动力学
 - 溶液
- 《物理化学》

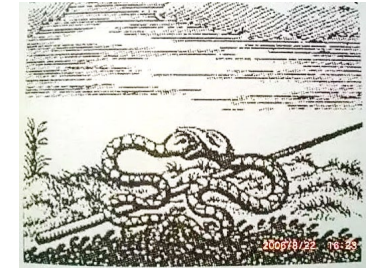
微观分子结构的认知历史。。。

臆想时期：

- 公元前4世纪，古希腊学者德谟克利特：万物都是由原子组成的，原子是不可分割的最小微粒

瞎猜时期：

- 炼金术士：硫和汞想象成两条相互咬合的大蛇，原始的“当量”和“亲和力”的概念



硬凑时期：

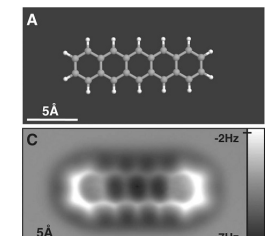
- 18世纪中叶，俄国罗蒙诺索夫：物体是由微粒组成的，物体的性质取决于微粒的性质，微粒运动产生热
- 18世纪中后，拉瓦锡：物质由元素和化合物，化学反应质量守恒
- 18世纪末，英国道尔顿：物质是由具有一定质量的原子构成的，原子是化学作用的最小单位（现代原子论）
- 1811年，意大利阿伏加德罗：构成气体的粒子不是原子，而是分子。分子是保留原物质性质的最小微粒。
- 1827年，英国布朗：通过实验证实了分子的存在和分子运动的存在
- 分子结构：1850s，凯库勒：价键说；1870s，范特霍夫：碳四面体说；1910s，路易斯：八隅律；

摸象时期：

- 量子力学（化学）：共价键（1920s），杂化论（1930s）
- 谱学：红外光谱晶体X射线衍射测定键长键角分析分子结构，DNA双螺旋模型（1950s）

观察时期：

- 微观谱学观测技术：扫描隧道显微镜STM，原子力显微镜AFM



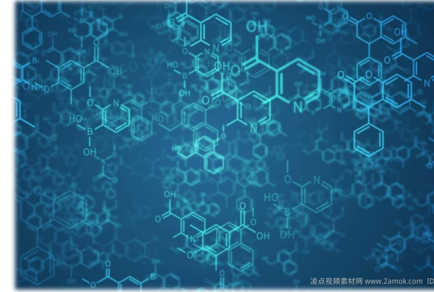
结构与谱学

研究对象:

宏观宇宙星辰



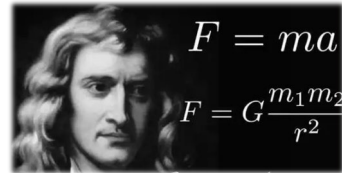
微观原子分子



理论框架:

牛顿力学

$$F = ma$$



量子力学

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(\vec{r}) \Psi$$



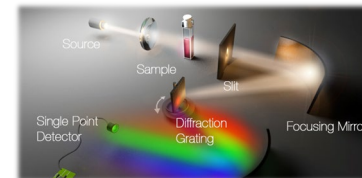
一沙一世界
一花一天堂

观察工具:

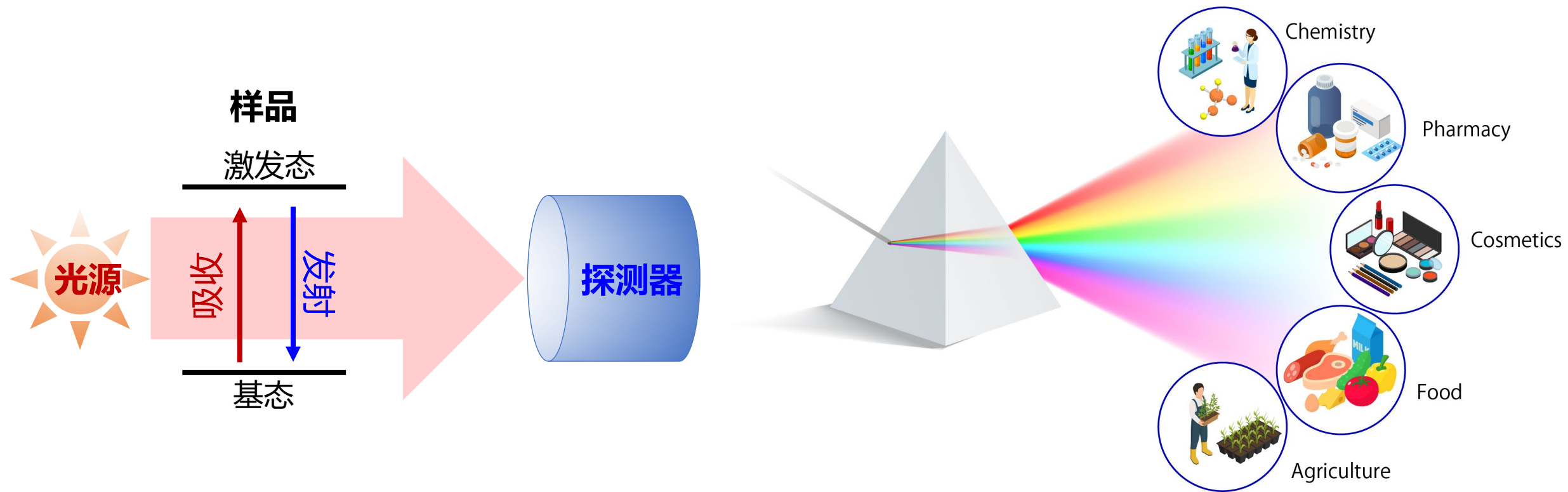
望远镜



光谱

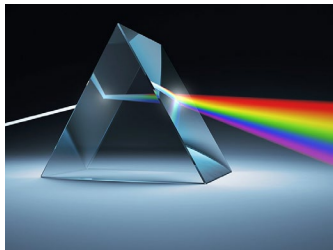
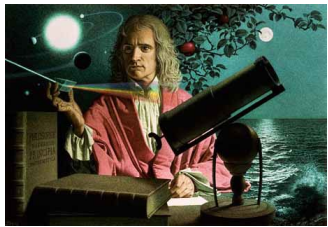


光谱学



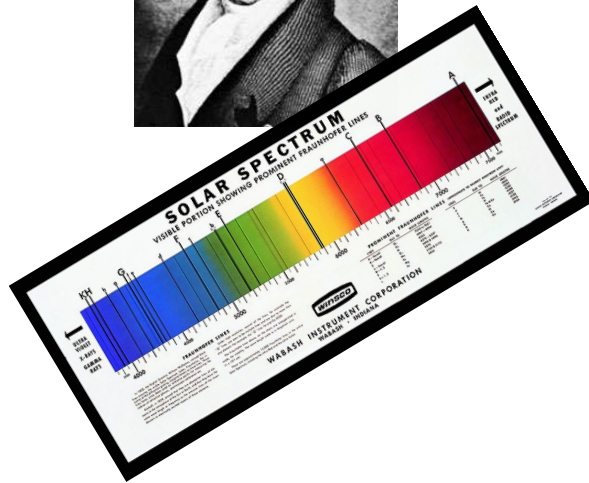
光谱学

牛顿的棱镜实验



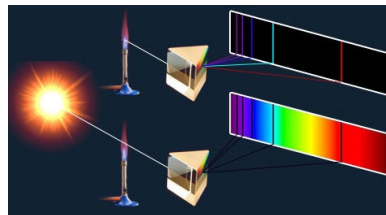
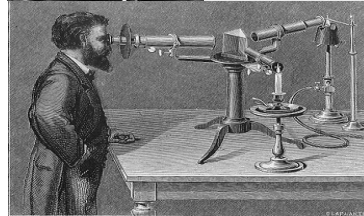
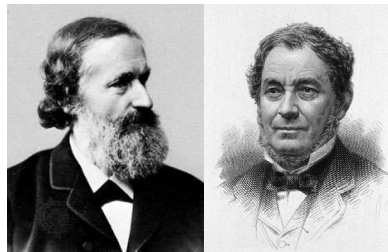
Isaac Newton
(1643—1727)

太阳光谱暗线

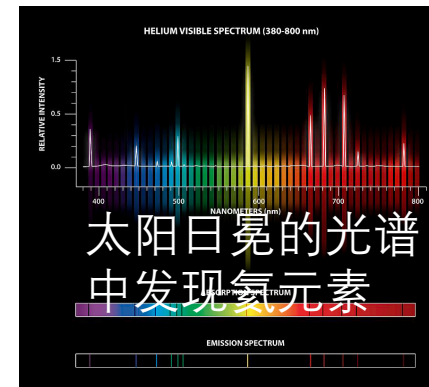
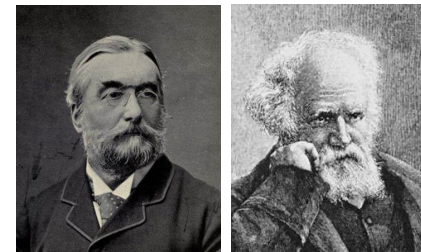


Joseph von
Fraunhofer
(1787-1826)

原子吸收和发射谱线

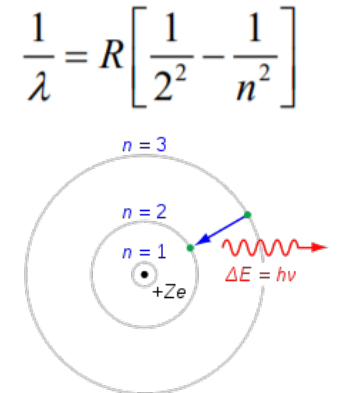


Gustav Kirchhoff
(1824-1887)
Robert Bunsen
(1811-1899)

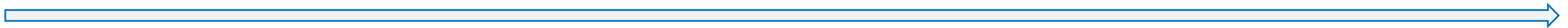


Sir Norman Lockyer
(1836-1920)
Jules Janssen
(1824-1907)

氢原子理论



Johann Jakob Balmer
1825-1898
Niels Bohr
1885-1962



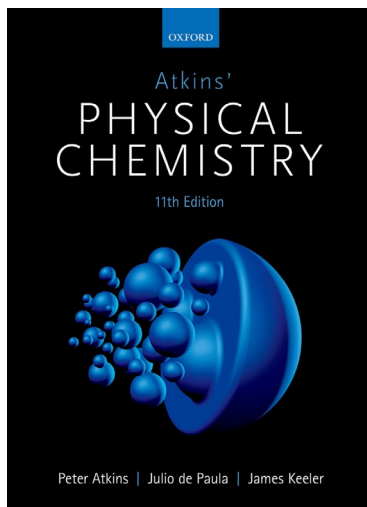
谱学I：原子、分子光谱

- 从广义上讲，光谱学是研究**电磁波与物质相互作用**的学科。
- 对于化学家来说，光谱学是确定**分子结构和动力学**的有力工具。
- 本课程将重点介绍化学中最常应用的技术，包括转动、振动和电子光谱学。涵盖的主题包括光-物质相互作用和各种类型的光谱技术。
- 你们将熟悉光谱学的基本原理和方法，能够讨论从各种光谱方法中收集到的信息，确定跃迁选择规则。

包括内容：

1. 光与分子相互作用
2. 原子电子结构和原子光谱
3. 转动能级结构和转动光谱
4. 振动能级结构和振动光谱
5. 分子电子能级和电子光谱

教材和参考书

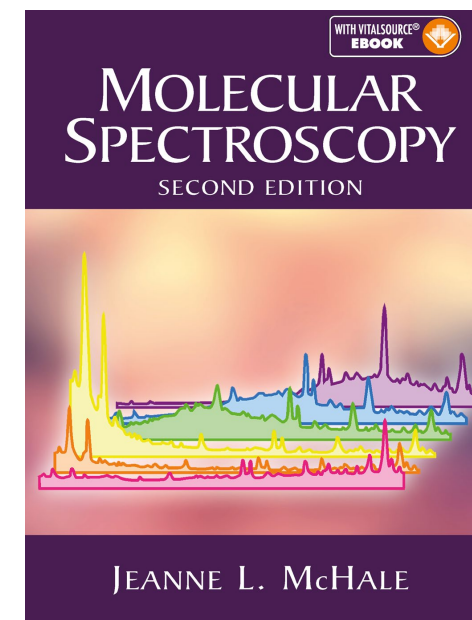
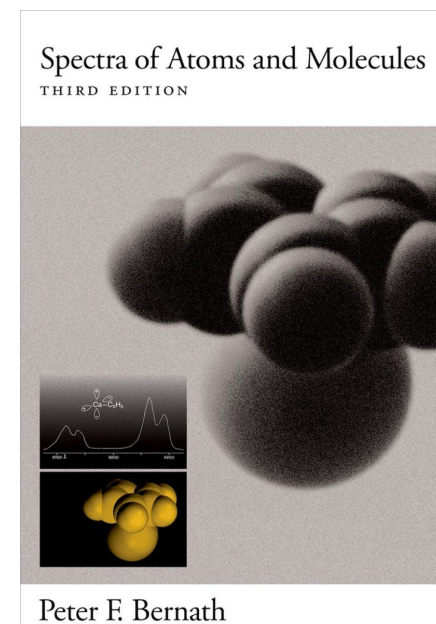


教材：
《 Physical Chemistry 》
Peter Atkins
(有中文版)

- Chapter 9 Atomic structure and spectra
- Chapter 11 Molecular Symmetry
- Chapter 12 Rotation and vibrational spectra
- Chapter 13 Electronic transitions

参考书：

- 《Spectra of Atoms & Molecules》 - P. Bernath
- 《 Molecular Spectroscopy 》 Jeanne McHale



成绩组成

- **平时成绩：小测20% + 作业20%**

- **期末考试成绩 60%**

- **小测：**随堂，5道选择题，20分（姓名+学号 10分）

- **作业：**一周结束一次。第二周的周一上课交助教纸质版（手写or打印）。

- **考试：**25道选择题（50分，全对+10分），50分解答题

助教



金涛



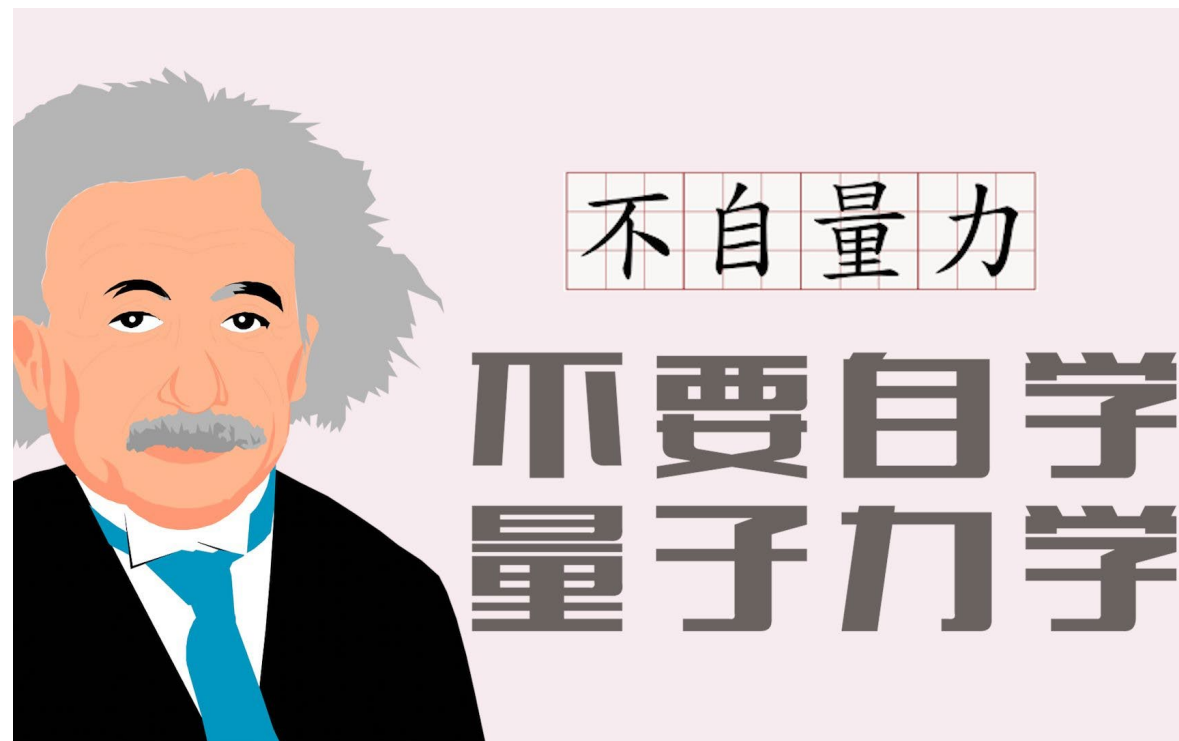
谢雨洁



关雨杭

怎么学？

- 不要怕难，**相信**自己和我
- 来**教室**听课并收起来**手机**
- 课后及时**弄明白**上课内容
- 自己**做作业**并讨论交流



听听学长学姐的话

老师讲解已经很循循善诱了,让我~~听懂~~
是易懂

不像之前那样望而兴叹
对量子力学 改观

可以适当减少量子力学的内容。量子力学对化学系的同学来说较难理解,则对化学系对量子力学的知识储备要求不高

~~我对光谱可能有一些“成见”(排除掉科学的成分)不是很能听懂~~
光谱其实要更具体一点,但是我在开始的尝试尽量坐到前面认真听,结果还是
没能听懂(尤其是不清楚要掌握到什么程度的数学/物理推断)

: 我在学习过程中觉得光谱的概念有时候不太好理解,很多时候只是背公式然后去用它,但不知道为什么要这样,如果老师可以在概念理解上多加点东西可能会如点理解。

听听学长学姐的话

希望能减少偏抽象内容，多加入实际应用相关理论

可以适当缩减高难内容，多讲些新知识。

课很难，老师和助教很好；不过建议老师的PPT可以更突出重点一点，
比如在公式推导过程可以稍微精简，或者在旁边要给予个标注，表示下哪些
推导是需要掌握的，或是不需要太过钻研的，这样整理和复习时会更清楚

要考就出份作业了，课上推那么快真反应不过来
结课课上可以少讲点推导，故课后自己看，

听听学长学姐的话

附加题：对本课程后续意见：建议老师在上课过程中的穿插例题题目分析中所讲知识点的运用，最好把讲的知识与题目更好的联系起来，方便我们迅速掌握和运用。对于作业题的讲解可以放在下一节课的开头，更有利于回顾上一节课的内容，继续下一节课的学习。

1. 每节课可以抽出 5~10 min 进行作业/小测中部分题目的及时反馈。

建议增加例题讲解

希望上课能多点例题。

上课时加一些例题，从知识过渡到解题，也许能更好地理解。

听听学长学姐的话

我认为结构力学这门课对习题的应用不够，
导致会很多知识点但不会做题，希望能开设习题课

希望能每周增加一次习题/答疑课，小测题目也可与
作业习题联系更紧密；

听听学长学姐的话

建议给公式，全闭卷。

对本门课的建议：在¹⁰经过一学期学习后，感觉还是没有理解这门课，但大多是自己的原因。首先，开卷是很好的，在抄小抄的过程中将PPT过一遍，有了一点感觉了，然后关于作业和小测感觉安排非的也都还好，问题是如何克服大家的畏难心理，其实感觉还是有会学的。

最好能学色谱分析沈宏老师，每节课把各种带符号的印在一个大海报贴在板上，不然上下角标和各种相同字母会看晕。