

## 2019-2020 学年第一学期高等物化课堂报告要求

1. **报告选题：**题目自由选择，但需与本学期课程相关，不可以其它课程内容代替，不能是课堂已讲过的内容。可以是最新研究进展，书上内容拓展等。如有文献请列出。
2. **报告报名：**请在报名时间截止前将姓名学号发给助教，将自拟题目或所选章节题目(如 12-A)通过 QQ 发给助教并在群里说明，不能多人选择同一题目(按先后原则)。报名人数不足将随机指定。
3. **PPT 准备：**格式为 ppt/pdf，内容充实，重点突出，版面整洁，鼓励使用程序或工具。请在 PPT 截止时间前提交 PPT。
4. **人数时间：**共 3-4 次，每次不超过 10 人，每人时间 5-8 分钟，讨论 2 分钟。
5. **重修成绩：**重修同学报告默认为上学年成绩，若提交新的课程报告，该成绩会更新。
6. **前两批次：**

批次	报告数	报名提交题目	提交 PPT	报告时间
1-2	15-20	10 月 29 日	11 月 10 日	11 月 11,13 日

### 第 12 章 Group Theory: The Exploitation of Symmetry

- 12-A 判断分子点群的小程序
- 12-B 群论在分子轨道和配体场方面的应用
- 12-C 群论研究环中粒子的光谱选择定律 (J. Chem. Educ., 2015, 92, 2165)
- 12-D 使用箱中粒子模型理解对称性 (J. Chem. Educ., 2016, 93, 1056)

### 第 13 章 Molecular Spectroscopy

- 13-A 惯量椭球的判断算法和程序
- 13-B 使用特征标表讨论 Raman 光谱
- 13-C 局域模(local mode)振动
- 13-D 拉曼光谱的原理和石墨烯二维材料的表征 (J. Chem. Educ.2016, 93, 1798)
- 13-E 二维红外光谱
- 13-F 太赫兹光谱的原理和应用
- 13-G X 射线吸收光谱
- 13-H 四氯化碳的振动光谱 (J. Chem. Educ., 2015, 92, 1081; 2015, 92, 1949)
- 13-I 己炔振动光谱的实验和理论计算 (J. Chem. Educ., 2018, 95, 1205)
- 13-J 双原子分子的 Franck-Condon 因子 (J. Chem. Educ., 2013, 90, 1463)
- 13-K Franck-Condon 原理的图解 JAVA 程序 (J. Chem. Educ., 2010, 87, 345)
- 13-L 红外和拉曼光谱计算研究草酸盐阴离子结构 (J. Chem. Educ. 2016, 93, 1130)
- 13-M 表面增强的拉曼光谱介绍
- 13-N 二氧化氯自由基的电振光谱 (J. Chem. Educ., 2017, 94, 515)

### 第 14 章 Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy

- 14-A 碳 13 核磁共振谱
- 14-B 磁共振成像及在医疗诊断中的应用
- 14-C 固体核磁共振谱
- 14-D 电子自旋共振 (ESR) 谱
- 14-E 二维核磁共振谱 (J. Chem. Educ., 2016, 93, 699)
- 14-F 在线二维 NMR 谱实践 (J. Chem. Educ., 2016, 93, 1483)

- 14-G 在线  $^1\text{H}$  NMR 谱的自旋-自旋分裂 (J. Chem. Educ., 2016, 93, 1478)  
14-H 使用  $^1\text{H}$  NMR 谱研究天然氨基酸的结构和成分 (J. Chem. Educ., 2017, 94, 115)

### Chapter 15 Lasers, Laser Spectroscopy, and photochemistry

- 15-A 荧光与磷光的早期历史 (J. Chem. Educ. 2011, 88, 731)  
15-B 如何利用激光测量粒子波长 (J. Chem. Educ., 2017, 94, 577)  
15-C Ruthenium Bisbipyridine Diacetonitrile 复合物的动力学和光化学 (J. Chem. Educ., 2016, 93, 2101)  
15-D 姜黄素溶液的双光子吸收光谱 (J. Chem. Educ., 2017, 94, 101)  
15-E Three Ruthenium(II) Polypyridyl 复合物的光物理和光化学 (J. Chem. Educ. 2016, 93, 292)  
15-F 茚并吡喃及其衍生物的光化学计算 (J. Chem. Educ. 2014, 91, 924)

### Chapter 17 The Boltzmann Factor and Partition Functions

- 17-A 玻尔兹曼分布和平均能量 (J. Chem. Educ. 2013, 90, 1639)  
17-B Stirling 公式在统计力学熵中的应用 (J. Chem. Educ., 2013, 90, 731)  
17-C Metropolis 算法计算热力学量 (J. Chem. Educ., 2011, 88, 574)

### Chapter 18 Partition Functions and Ideal Gases

- 18-A 从相空间角度看熵 (J. Chem. Educ., 2019, 96, 2208)  
18-B 使用热力学和统计力学构建单组分系统的相图 (J. Chem. Educ., 2018, 95, 2197)  
18-C  $\text{N}_2$  和  $\text{F}_2$  在高温下热容的区别及原因 (J. Chem. Educ., 2019, 96, 926)  
18-D 反应蒙特卡罗方法研究化学反应平衡 (J. Chem. Educ., 2018, 95, 767)