



北京大学

物理化学实验报告

实验 X

XXXXXXX

姓 名：王梓涵

学 号：2100011837

组 别：22 组

实验日期：2023.xx.xx

室 温：xxx.xx K

大气压强：xxx.xx kPa

摘 要 本实验通过...，利用...，得到了...，比较了...，从而初步了解了...。

关键词 xxx; xxx; xxx; xxx

1 引言

引言部分...

2 实验部分

2.1 仪器和试剂

仪器和试剂...

2.2 实验内容

2.2.1 实验内容 1

实验内容 1...

2.2.2 实验内容 2

实验内容 2...

2.2.3 实验内容 3

实验内容 3...

2.2.4 实验内容 4

实验内容 4...

2.2.5 实验内容 5

实验内容 5...

3 数据与结果

3.1 实验数据记录及处理

3.1.1 实验内容 1

实验内容 1...

xxx 如表 1 所示。



北京大學

图 1 中文图题

Fig. 1 Caption

表 1 中文表题

Table 1 Caption

一	二	三	四	E_{trans} / $\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$
1	1	1	3	-1.01316×10^6
2	2	1	7	
3	3	1	3	
4	4	1	6	
5	5	1	1	

3.1.2 实验内容 2

实验内容 2...

3.1.3 实验内容 3

实验内容 3...

3.1.4 实验内容 4

实验内容 4...

3.1.5 实验内容 5

实验内容 5...

$$E_{total} = E_{trans} + E_{rot} + E_{vib} + E_{elec}$$

$$1 \text{ a.u.} = 2625.50 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta E_{total} = E_{total}(\text{nap}) - E_{total}(\text{azu}) = -1.4 \times 10^2 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

参考值¹

$$\mu = 1.66 \text{ D}$$

实验值^{2,3}

$$E_{\text{Zn}} = 5.80 \text{ eV} \quad E_{\text{Cu}} = 1.39 \text{ eV}$$

3.2 实验结果及分析

3.2.1 实验内容 1

实验内容 1...

4 讨论与结论

4.1 实验讨论

4.1.1 实验讨论 1

实验讨论 1...

4.1.2 实验讨论 2

实验讨论 2...

4.1.3 实验讨论 3

实验讨论 3...

4.2 实验结论

实验结论...

参考文献

- [1] Dean, J. A., et al. *Lange's handbook of chemistry*; McGraw-Hill New York, 1992; Vol. 15.
- [2] Bast, R.; Jensen, H. J. A.; Saue, T. Relativistic adiabatic time-dependent density functional theory using hybrid functionals and noncollinear spin magnetization. *International Journal of Quantum Chemistry* **2009**, *109*, 2091–2112.
- [3] Konecny, L.; Repisky, M.; Ruud, K.; Komorovsky, S. Relativistic four-component linear damped response TDDFT for electronic absorption and circular dichroism calculations. *The Journal of Chemical Physics* **2019**, *151*, 194112.