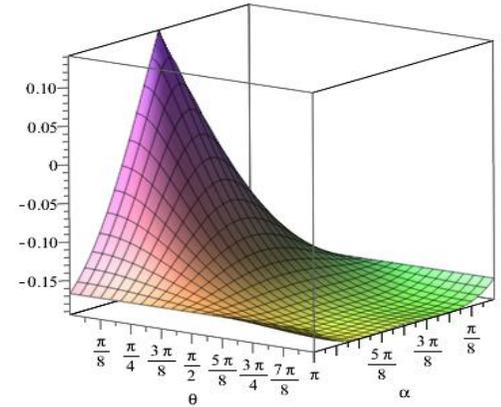


魏恆理教授 / 應用化學系

具精確解的量子力學模型、數學物理、量子化學計算

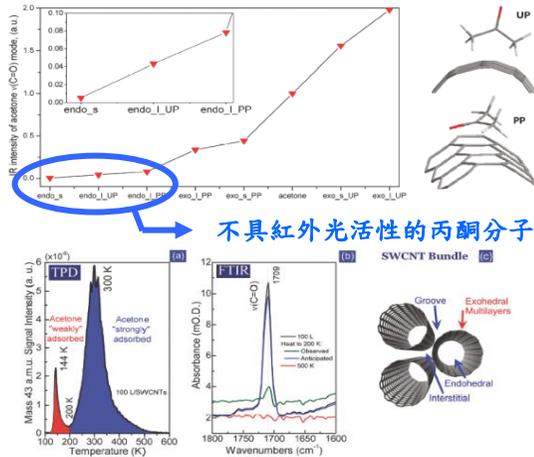
我們實驗室主要的研究主題為開發不同量子力學問題薛丁格方程式的精確解析解。其中最重要的是解釋氦原子基態波函數的解析結構（圖一為其中二次方的一部份解答）。氦的波函數為最簡單的具明確關聯的波函數，並提供了一個範例以建構新的精確量子化學方法。我們實驗室的另一個研究方向為類苯結構的ZZ多項式理論，可方便地用於對這些系統的拓樸描述定義。圖二為用ZZ多項式（右）以及NMR方法（左）所計算出的六方石墨烯之區域芳香性。我們團隊經常利用高精度的量子化學算幫助對於實驗上的偵測給予解釋及預估（圖三、四）。



圖一

包覆於奈米碳管的分子是**不具紅外光活性的**

J. Amer. Chem. Soc. 129, 8191–8198 (2011)

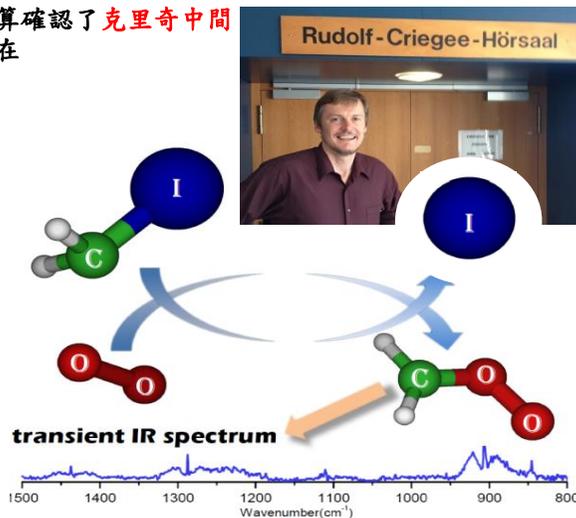


不具紅外光活性的丙酮分子

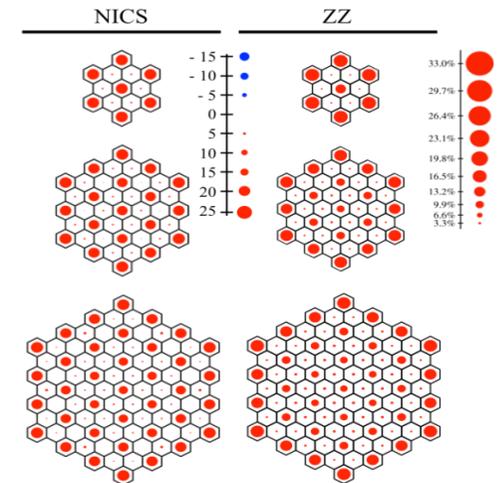
圖四

理論計算確認了**克里奇中間體**的存在

Science 340, 174–176 (2013)
Nature Comm. 6, 7012 (2015)



圖三



圖二