

2025 年【科學探究競賽-這樣教我就懂】

大專/社會組 科學文章格式

- 文章題目： 量子化學

摘要： 電子的波動性質與分子鍵結的理論基礎。

文章內容： (限 500 字~1,500 字)

量子化學：電子的波動性質與分子鍵結的理論基礎

量子化學是一門研究微觀粒子行為的學科，主要運用量子力學來解釋電子在原子與分子中的分布，並進一步探討化學鍵的本質。在傳統物理學中，電子被視為粒子，但根據量子力學，電子同時具有**波動性與粒子性**（波粒二象性）。這一概念由**德布羅意（Louis de Broglie）**提出，他認為電子可以用波來描述，其波長由 $\lambda = mvh$ 計算，其中 h 是普朗克常數， m 是電子質量， v 是速度。這表示電子並非沿固定軌道運動，而是以機率分布的方式存在於原子或分子內。

電子在原子中的行為由**薛丁格方程式（Schrödinger equation）**描述：

$$H^{\wedge}\psi = E\psi$$

其中， ψ 是波函數，代表電子的機率分布。通過解這個方程式，可以得出電子在原子內可能的能量狀態，這些狀態稱為**原子軌域（Atomic Orbitals, AO）**，當不同原子靠近時，這些軌域會重疊形成**分子軌域（Molecular Orbitals, MO）**，影響化學鍵的形成。

在**分子軌域理論（MO 理論）**中，兩個原子的原子軌域會疊加，形成**鍵結軌域（Bonding Orbital, σ 或 π ）**與**反鍵結軌域（Antibonding Orbital, σ^* 或 π^* ）**。鍵結軌域降低系統能量，使分子穩定，而反鍵結軌域則會削弱鍵結。鍵級（Bond Order, B.O.）的計算方式為：

$$B.O. = \frac{\text{鍵結電子數} - \text{反鍵結電子數}}{2}$$

例如，氫分子（ H_2 ）的鍵級為 1（單鍵），氧分子（ O_2 ）則為 2（雙鍵）。此理論不僅解釋了分子的鍵結強度，也能預測分子的穩定性。

此外，電子的波動性還影響**共振（Resonance）**、**雜化軌域（Hybridization）與量子隧道效應（Quantum Tunneling）**等現象。這些概念廣泛應用於材料科學、藥物設計與光電技術等領域，使量子化學成為現代科學的重要基礎

參考資料

需註明出處。