

<<理论化学原理与应用>>

图书基本信息

书名：<<理论化学原理与应用>>

13位ISBN编号：9787030218704

10位ISBN编号：7030218701

出版时间：2008-8

出版时间：科学出版社

作者：帅志刚, 邵久书等编著

页数：875

版权说明：本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介，请支持正版图书。

更多资源请访问：<http://www.tushu007.com>

<<理论化学原理与应用>>

前言

化学是一门基础学科，具有坚实的理论体系。

化学已经发展成为实验与理论并重的科学，理论化学可以更深刻地揭示实验结果的本质并阐述规律，在许多情况下，还可以对结构与性能进行预测从而促进学科的发展。

国家自然科学基金委员会在“十五”期间，设立了专项基金资助理论化学的发展，就是因为考虑到理论化学的重要性。

理论化学在我国有很好的基础，在唐敖庆院士和徐光宪院士的努力和带领下，从20世纪50年代开始，长期开展基础理论研究，取得了许多重要成果，培养了一大批学术骨干。

近年来，随着国家加大了对基础研究的支持力度，化学在整体上进入了快速发展阶段，在国际上的地位迅速提升。

一批优秀的青年学者从海外学成归来，理论化学的发展也进入了一个新阶段，无论是在基础理论方法发展还是在计算化学的应用方面都产生了一批在国际上很有影响力的研究成果。

2005年10月，黎乐民先生邀请我参加了在桂林召开的第九届全国量子化学大会。

看到国内一批青年学者在近年来快速成长，我深有感触。

因此，会议期间我与帅志刚和邵久书交谈，询问起组织出版一本理论化学研究进展专著的可能性。

将近三年过去了，两位学者花费了大量心血，组织撰写的《理论化学原理与应用》终于由科学出版社出版了。

这是很值得庆贺的。

参加编写的十几位科学家大都得到理论化学专项基金的资助，活跃在国际前沿研究领域。

该书集中介绍了他们近年来所从事该研究领域的进展。

从内容来看，该书包括了量子化学的方法发展，化学动力学和统计力学的新进展，以及理论化学在功能材料、生命体系和催化过程的应用。

我相信该书的出版对国内理论化学研究可以起到促进作用，因为该书不仅仅是优秀研究工作的总结，更重要的是可以让年轻的理论化学工作者特别是研究生、博士后和青年科研人员，通过阅读该书，更有效、迅速地进入研究前沿，既可以从中学习已有的理论工具，又对前沿方向有一定的把握。

<<理论化学原理与应用>>

内容概要

理论化学建立于量子物理和统计力学的基础上，它既是现代化学的基础又是学科的前沿，具有重要挑战性。

任何一门自然科学都离不开深入的理论研究，否则就难以形成完整的学科体系。

本书汇集了国内多个研究机构近20个理论化学研究小组近年来所取得的科研积累，详细介绍了他们在理论化学研究中所取得的突出研究成果，并阐述了该领域的前沿发展趋势。

内容包括电子结构理论、动力学理论和分子光谱、非平衡统计理论、功能材料理论设计、催化理论以及生物酶催化等。

本书可供从事理论与计算化学、分子模拟、功能材料科学等领域的科研人员及研究生阅读、参考。

<<理论化学原理与应用>>

作者简介

帅志刚

江西铅山人，清华大学化学系教授，博士生导师。

研究领域为理论化学、有机功能材料理论计算与模拟；主要是如何理论预测材料的性能，比如看到一个分子结构，在不用实验的前提下，预测它的发光效率。

学习简历：

1979.9-1983.7 中山大学物理系理学学士学位物理专业

1983.9-1986.7 暨南大学物理系、武汉大学物理系理学硕士学位固体物理专业

1986.9-1989.7 复旦大学物理系 理学博士学位理论物理专业

工作简历：

1989.8-1990.2 复旦大学物理系研究助理（孙鑫教授课题组）

1990.3-2001.12 比利时University of Mons-Hainaut, Laboratory of Chemistry for Novel Materials, 博士后、研究助理、研究员

2002.1-2008.4 中国科学院化学研究所有机固体实验室，百人计划、研究员、博士生导师

2008.5-至今清华大学化学系，百人计划、教授、博士生导师

主要获奖与荣誉：

2004 中国科学院百人计划结题评估“优秀”（前20%）

2004 国家杰出青年科学基金

2006 国家人事部等7部委“新世纪百千万人才国家级人选”

2008 当选国际量子分子科学院(International Academy of Quantum Molecular Science)院士，成为继我国著名量子化学家唐敖庆教授后，中国第二位当选的院士。

部分国际交流与合作：

1993.2-5：美国麻省理工学院化学系、休斯敦大学物理系 访问学者，合作研究

1994.2-5：美国Los Alamos National Laboratory, 凝聚态与统计物理研究室，访问学者

1995.9-11：印度Indian Institute of Science, Bangalore, 访问学者，合作研究

1996.9-10：美国Carnegie-Mellon University 合作研究

2001.7-8：美国University of Arizona 访问学者

主要学术兼职：

《中国科学：化学》编委

《Journal of Theoretical & Computational Chemistry》(World Scientific, Singapore), Advisory Editor

《分子科学学报》编委

中国化学会副秘书长、理事、国际事务工作委员会主任

中国化学会理论化学专业委员会副主任

中国化学会有机固体专业委员会委员

北京大学兼职教授

东北师范大学客座教授

近期发表著作：

《理论化学原理与应用》，帅志刚、邵久书等编著，第0（部分）、第4（部分）、6（部分）、14、15章，科学出版社，北京，2008

《分子科学前沿》第10章“理论化学”，帅志刚、邵久书，科学出版社，北京，2007

《功能材料化学进展》第8章“有机功能材料理论研究进展”，帅志刚，化学工业出版社，北京，2005

<<理论化学原理与应用>>

书籍目录

序一序二主编者的话各章(节)编写人员第0章 理论化学概论 0.1 引言 0.2 量子化学 0.3 化学动力学和统计力学 0.4 理论与计算化学应用 0.5 展望 参考文献第一篇 电子结构理论 第1章 密度泛函理论及其数值方法 1.1 密度泛函理论基本概念 1.1.1 从波函数到电子密度 1.1.2 Hohenberg-Kohn定理:多体理论 1.1.3 Kohn-Sham方程:有效单体理论 1.2 交换关联能量泛函 1.2.1 交换关联穴 1.2.2 LDA和GGA 1.2.3 轨道泛函与非局域泛函 1.2.4 自相互作用修正 1.2.5 GW近似 1.3 含时密度泛函理论 1.3.1 含时密度泛函理论基本概念 1.3.2 线性响应 1.3.3 激发态能量和振子强度 1.4 密度泛函理论的扩展形式 1.4.1 强关联密度泛函理论 1.4.2 流密度泛函理论 1.4.3 相对论性密度泛函理论 1.4.4 密度泛函微扰理论 1.4.5 极化和介电常数 1.5 离散方法 1.5.1 基组:从量子化学到固体能带理论 1.5.2 格点:有限差分和有限元 1.5.3 小波方法 1.6 线性标度计算方法 1.6.1 实现线性标度的目的和根据的基本原理 1.6.2 自洽场中的线性标度方法 1.6.3 描述分子物理特性的线性标度方法 1.7 密度泛函理论的应用 1.7.1 效率与精度 1.7.2 材料物性 1.7.3 弱作用体系 1.7.4 生物大分子 1.7.5 分子电子学 1.7.6 分子光谱 1.7.7 分子动力学 参考文献 第2章 相对论量子化学基本原理及相对论密度泛函理论 2.1 引言 2.1.1 相对论效应 2.1.2 Dirac方程与负能态问题 2.2 相对论量子化学方法与变分原理 2.2.1 哈密顿 2.2.2 Dirac—Hartree-Fock (DHF)方法:极小极大变分原理 2.2.3 量子电动力学(QED)简介 2.3 矩阵表示 2.3.1 中心场本征函数 2.3.2 基函数:动能平衡条件 2.3.3 原子四旋量线性组合:“用原子合成分子” 2.4 相对论密度泛函理论 2.4.1 Dirac-Kohn-Sham (DKS)方程 2.4.2 准四分量方法 2.4.3 新一代准相对论方法XQR 2.4.4 交换相关作用:开壳层体系 第3章 概念密度泛函理论与浮动电荷分子力场 第4章 耦合簇方法的研究进展 第5章 多参考态组态相互作用 第6章 密度矩阵重整化群与半经验价键理论 第二篇 化学动力学和光谱及统计力学 第7章 多原子分子振转光谱的精确量子力学研究 第8章 分子反应动力学的含时波包与非绝热过程理论 第9章 实时和虚时量子演化半经典近似 第10章 化学反应速率常数的量子瞬子理论 第11章 量子耗散体系随机描述方法 第12章 量子耗散动力学理论介绍 第13章 非平衡非线性化学动力学第三篇 理论与计算化学应用 第14章 有机电子学材料的理论化学研究 第15章 有机分子非线性光吸收理论 第16章 酶的结构及催化反应机理 第17章 多相催化理论模拟:现代簇模型方法 第18章 高分子材料的理论研究:从单分子链到分子聚集体

<<理论化学原理与应用>>

章节摘录

插图：第0章 理论化学概论0.1 引言自然科学在西方也称为精确科学。

所谓精确科学，粗略地讲就是可以进行定量研究的学问。

人们通常通过实验或推理计算进入各自的研究领域。

众所周知，物理学和化学是自然科学的两个基本的领域，它们的分支学科物理化学和化学物理的内涵和目标均有差异，但却担当紧密连接两门主学科的桥梁。

物理学探求不同事物和现象的内在统一规律，而化学则揭示原子分子世界缤纷多彩的相异性根源；两门主学科的立足点不同，思想方法也不同。

换言之，物理学和化学都追求精确性但聚焦于不同的层次上。

物理学家宣称量子电动力学理论预测的电子的磁矩和实验测量值的偏差为 10^{-10} 、理论的成功可谓令人叹为观止。

那么化学研究又如何呢？

化学家首先关心的是准确地合成出具有指定结构的任何分子。

一个著名的例子是化学家YoshitoKishi于1993年完成的海葵毒素C (129) H (223) N (3) O (54) (palytoxin) 的全合成。

它由72个独立的分子片段组成，由于每个分子片段可取2个不同构型，因此共有 2^{72} 或 5×10^{21} 种可能的立体异构体，而海葵毒素只是其中的一种，存在概率为 10^{-21} YoshitoKishi教授设计的合成路线竟能百分之百地得到该天然化合物，说明化学研究的精湛已达到美妙绝伦的境界。

其背景之一应归功于量子力学的建立，派生出理论与计算化学的知识框架，促使化学家立足于原子、分子乃至电子结构层次，去理解并掌握分子的结构、性能和反应动力学的规律，指导新物质的合成和设计。

本书的主题就是讨论理论与计算化学的最新进展。

它涉及的内容包括三个方面：分子和凝聚（组装）体系结构、化学分子动力学和物质性能。

揭示自然的奥秘和利用自然规律以发展生产、改善生活是科学发展的动力。

相对于其他基础科学分支，化学更贴近人们的生活，它直接或间接地由人类物质需求所推动。

现今，化学已成为一门核心、实用、创造性的基础科学领域，它为人类认识世界和社会文明与进步做出了巨大的贡献。

在化学分支学科中，理论与计算化学的发展历史相对较短，尚不足百年，但其影响显著，且与日俱增。

。

<<理论化学原理与应用>>

编辑推荐

《理论化学原理与应用》可供从事理论与计算化学、分子模拟、功能材料科学等领域的科研人员及研究生阅读、参考。

<<理论化学原理与应用>>

版权说明

本站所提供下载的PDF图书仅提供预览和简介, 请支持正版图书。

更多资源请访问:<http://www.tushu007.com>