第一图书网, tushu007.com

<<张乾二院士论文选集>>

图书基本信息

书名：<<张乾二院士论文选集>>

13位ISBN编号：9787030224439

10位ISBN编号：7030224434

出版时间：2008-7

出版时间：科学出版社

作者：张乾二

页数：779

字数：1170000

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

前言

很高兴来南京参加量子化学研讨会，今天会场坐得满满的，估计有六七百人，这说明量子化学研究或理论化学研究的人越来越多了，形势喜人，但今天我要讲的是两点不足之处。

在座有许多青年学生，我想对大家讲的第一点是：进行量子化学计算，不要一拿来就算，要先想想看。

先考虑一下该体系有什么特点，计算结果可能是什么，计算后再比较一下……回忆二十多年前，那时做量化研究的人较少，计算机也很少，一些实验化学家对量子化学还是半信半疑；现在情况不同了，计算机容量越来越大，计算速度越来越快，许多实验化学家合成出一个新分子，研究一个新的化学系统，都希望你为他进行计算。

有的同学没有很好思考，小分子就放进第一性原理的程序中，大体系就放到分子模拟程序中开始大算，这样做是很危险的。

有的同学（包括一些老师）为了解释实验现象，甚至不顾科学性，牵强附会，实验工作想要什么结果就计算出什么结果，这种计算就像为实验外衣打补丁，不是真正的理论化学计算。

好的计算应该是为实验量体裁衣，能从理论的高度去预测实验，解释实验。

第一图书网, tushu007.com

内容概要

本书收录张乾二院士从1961年至今在配位场理论方法、分子轨道图形方法、原子簇化学键理论、多电子理论的群论方法及价键理论方法、固体表面理论化学等研究领域所发表的论文，包括论文全文选集（约60篇）、沦文摘要选集（约50篇）和论著总目录（约380篇），充分体现了张乾二院士多年来致力于理论化学的前沿课题研究，所获得的国内外有影响的创新成果。

本书可供高等院校和科研机构的理论化学研究方向的学生、教师和科研人员参考。

作者简介

张乾二，量子化学家。
福建惠安人。
1928年8月出生于福建惠安。
1947　年就读于厦门大学化学系，1951年被录取为研究生。
1954年厦门大学化学系毕业。
曾任厦门大学化学系主任、中国科学院福建物质结构研究所所长、厦门大学化学化工学院院长、固体表面物理化学国家重点实验室副主任；现任固体表面物理化学国家重点实验室学术委员会主任、结构化学国家重点实验室学术委员会主任，厦门大学教授，中国科学院福建物质结构研究所研究员。
1991年当选中国科学院院士（学部委员）。

书籍目录

代序张乾二院士论文全文选集　AB2和AB3型分子键角变化的规律　　厦门大学学报（自然科学版）1961，（01），68.73.　配位势场理论的研究——Ⅰ.正八面体场中dn组态的理论分析　　吉林大学自然科学学报1964，3，77.　配位势场理论的研究——Ⅱ.强场与弱场波函数的变换关系及其应用　　吉林大学自然科学学报1965，1，59.　分子轨道几何剖析——Ⅰ.类共轭键分子　　厦门大学学报（自然科学版）1978，（01），15.54.　分子轨道几何剖析——Ⅱ.分子轨道“碎片法”　　厦门大学学报（自然科学版）1978，（01），55.78.同谱分子　厦门大学学报（自然科学版）1979，（02），65.75.　Huckel矩阵的图形方法学　　中国科学A辑1979，（08），779—791.　交替烃分子轨道图形方法　厦门大学学报（自然科学版）1979，（02），56—64.　多面体分子轨道的理论方法——Ⅰ.多面体分子轨道构造的一般方法　　厦门大学学报（自然科学版）1981，20，（02），209—220.　多面体分子轨道的理论方法——Ⅱ.球谐函数的对称化　　厦门大学学报（自然科学版）1981，20，（02），221—225.　多面体分子轨道的理论方法——Ⅲ.结构多面体骨架的成键分子轨道　　厦门大学学报（自然科学版）1981，20，（02），226—230.　Symmetry Determined Orbitaland Group Overlap　　International Joumal of Quantum Chemistry 1983，23，（4），1479-1492.　NotesontheTensorSurfaceHarmonicMethod　THEOCHEM1984，18，（3—4），215—221.　多面体分子轨道群重叠法　　分子科学与化学研究1984，4，（4），437.450.　原子簇化合物化学键理论的群论方法　　科学通报1984，（02），127.　投影算子与对称性轨道——Ⅰ.双陪集与多面体分子轨道的构造　　厦门大学学报（自然科学版）1985，24，（04），464—473.　TheBondingPropertiesofPolyhedralMolecularOrbitals　THEOCHEM1986，29，（1—2），45-55.　投影算子与对称性轨道——Ⅱ.点群不可约张量法中的对称性系数　　厦门大学学报（自然科学版）1986，25，（02），165-177.　Studies o fBonding Properties of Incomplete Metallic Cobane-Type Cluster Compounds Containing the M3X4-n Core　　Polyhedron 1989，8，（23），2785-2789.　Bonded Tableau Unitary Group Approach to the Many—Electron Correlation Problem　　International Journal of Quantum Chemistry 1989，36，（5），599—632.　A Noteon Permutation Symmetryin Many—Particle Systems　　Molecular Physics 1989，67，（3），525-535.　Bonded Tableau Method for Many-Electron Systems　　Journal of Molecular Structure 1989，198，413-425.　多电子体系键表的酉群方法　　中国科学8辑1989，（09），919-927.　簇骼分子轨道成对定理及其应用　　《庆祝唐敖庆教授执教五十年学术论文专集》高等学校化学学报编辑部编1989，176.181.　异核过渡金属立方烷原子簇化合物M3S419M'Xn+的电子结构　　结构化学1990，9，（04），243—248.　碎片法合成金属原子簇——Isolobal Analogy的应用和推广　　化学学报1990，48，（04），343.348.　化学子体系相互作用理论的键表方法　　物理化学学报1990，6，（02），151—158.　E1ectronic Structures of Octahedral Cluster Halides of Transition Metals[M6X8]”+，[M6X12]”+and Their Interstitial Compounds[M6X12Z]　　THEOCHEM 1991，74，139—147.　稀土元素六核簇卤化物及其嵌合物的量子化学研究　　中国稀土学报1991，27，（04），5384-5386.　键表的自洽场方法　　高等学校化学学报1991，12，（11），1517—1521.　Studieson the“Cluster-Surface Analogy”：Metallic Slater Basis Sets for abinitio Calculations of Chemisorption　　Journal of Molecular Structure（Theochem）1992，94，105—116.　π共轭体系的全电子键表计算方法　　科学通报1992，（11），996—999.……张乾二院士论文摘要选集附录

第一图书网, tushu007.com

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