

评《理论化学原理与应用》

由帅志刚、邵久书主编,国内十几位学者撰写的专著《理论化学原理与应用》,比较全面地总结了近 30 年来我国理论与计算化学的进展和成就。全书不仅简要概述了理论化学的历史、现状以及发展趋势,还分三个篇章进行专门课题的详细论述。所有作者都是活跃在国内理论化学教学、研究第一线的专家,他们撰写的内容既概括了前人的重要贡献,也评述了自己的研究成果,并指出今后有待解决的问题,充分展现了我国新一代理论化学家的学术风貌。他们志存高远,正大步迈入现代理论化学的前沿、主流领域。综观本书,无论对刚步入研究生阶段学习的学生,还是已经独立从事科研工作的学者和大学教师,都是十分有价值的参考资料。

该书第一篇为电子结构理论,主要论述量子化学的后平均场理论方法,介绍了密度泛函理论的新进展和数值实现方法,包括线性标度算法;讨论了相对论量子化学新进展,特别是作者在简化 Dirac 方程计算等方面的重要工作;还总结了从概念密度泛函-电负性均衡原理出发,发展可极化分子力场,讨论了耦合簇方法,特别是块相关耦合簇以及运动方程耦合簇方法;总结了多参考组态相互作用方法和其计算机程序实现;以及密度矩阵重整化群和半经验价键理论在化学中的应用。

第二篇为化学动力学和光谱以及统计力学,涉及从气相到凝聚相,从量子到经典的动力学理论方法。文中介绍了多原子分子振转光谱的量子力学处理;论述了量子散射方法-含时波包演化和非绝热过程;总结了可用于大分子体系的无指数前因子的半经典近似;讨论了速率理论中的量子瞬子近似方法;分别论述了量子耗散动力学的随机场和路径积分方法;介绍了非平衡非线性化学动力学的新进展,特别是随机共振效应。

第三篇为应用,阐述了如何运用理论化学方法预测有机电子学材料的光电性质;介绍了酶催化过程的微观机理的理论研究;讨论了表面反应催化机理的簇模型方法;介绍了从单分子到分子聚集集体性质的模拟方法,从而为理性设计特性材料奠定基础。

理论化学在先辈唐敖庆院士和徐光宪院士的努力下,在我国有很好的基础。近十几年来,随着国家加大对基础研究的支持力度,理论化学的发展也进入了一个新阶段。在相对论量子化学、价键理论、线性标度理论、密度泛函理论、气相分子动力学过程、光化学反映理论、量子耗散动力学、功能材料理论等领域做出了有影响、有特色的创新工作。本书的十几位作者都是活跃在上述各领域的中青年科学家,他们在书中重点阐述了量子化学方法的发展,化学动力学和统计力学的新进展,总结了理论化学在功能材料、生命体系和催化过程的应用。

本书有几个显著特点:

(1) 内容全面:涵盖了从基本原理到实际应用相关重要的理论化学课题;

(2) 编排适当:三篇章节相对独立,可分别作为高年级和研究生相关课程的基本内容在课堂讲授;

(3) 重视实验:书中许多结果来自理论与实验的密切合作。因此,本书对有志从理论化学汲取营养的实验化学家也有一定的参考价值。阅读本书只需具备基本的物理化学、量子化学和统计力学知识。

总之,本书应该成为从事理论与计算化学、化学信息学、药物和材料设计工作者有益的参考书,同时对年轻的理论化学工作者迅速了解该领域的前沿工作有重要的指导作用。

(南京大学化学学院 江元生)



《理论化学原理与应用》

著者: 帅志刚 邵久书等
定价: 128 元, B5, 精装
ISBN: 978-7-03-021870-4
出版时间: 2008 年 10 月

科学出版社
地址: 东黄城根北街 16 号
邮编: 100717
电话: 010-64005905 (销售部)
010-64034611 (编辑部)