

## 第三届中日双边理论化学研讨会介绍

由国家自然科学基金资助、厦门大学承办的第三届中日双边理论化学研讨会于1994年10月9—14日在厦门大学举行。我国著名理论化学家唐敖庆、徐光宪、张乾二、孙家钟、江元生和国家自然科学基金委员会主任、著名物理化学家张存浩教授等出席会议。日方参加会议的有著名理论化学家福井谦一、米泽贞次郎、山边时雄等。出席会议正式代表38人，中国代表18人，另特邀著名学者、美籍华人、台湾中研院原子与分子科学研究所所长林圣贤先生参加。会议共收到论文39篇，其中中方21篇，日方18篇。

本次会议的内容精，但议题广泛，涉及理论化学各前沿领域，包括量子化学方法及应用、分子性质、材料设计、生物体系、原子簇、表面和界面、动力学与反应机理、谱学性质等。25名学者在会上作了报告。中方唐敖庆院士作了关于“具有 $I_h$ 对称性的碳物种的休克尔方法处理”的报告，提出了一种基于“元件组装”与不等价不可约表示矩阵元新方法，计算了 $C_n$  ( $n=60K^2$ )的碳物种（即从 $C_{60}$ 到 $C_{6000}$ ）的本征值，得出了一些重要规则，预言了这些碳物种可以稳定存在。为碳烯的合成提供了理论指导、获得了与会代表的高度评价。江元生院士作了题为“富勒烯对称性约化技巧的Lanc305方法”的报告。两位教授的工作异曲同工，各有新窍。徐光宪院士以铍的化学价为例提供了一种新的化学价概念，即一个原子的化学价应等于其价层的空穴数，而非其价电子数。引起了与会代表的浓厚兴趣。朱清时院士就局域模态作了精彩的报告，将与会者带入了一个选键化学新兴领域。年轻博士徐昕副教授作了化学吸附的簇模型方法研究的报告，提出了“金属态原子”概念及金属态原则。日方米泽贞次郎教授认为“该工作找到了一个解决复杂问题的突破口”。

日方报告主要有：山边时雄教授作了“高自旋分子的电子结构”的报告。高自旋分子因其可能作为磁性材料而备受青睐。山边时雄教授从实验和理论两方面作了系统的研究报告。西本吉助教授作了染料分子的电子光谱的分子轨道计算的报告。考虑到染料分子中 $\pi$ 电子大的极化率、西本吉助教授引进了光谱化学的软型模型，新模型的计算结果和实验符合很好。今村论教授作了氢键体系电子结构的伸展法研究报告，提出了伸展法模型。该模型可以有效地研究带缺陷及杂质的非周期性高聚物如氢键体系、生物大分子等。

一些著名的化学家如张存浩、孙家钟、张乾二、黎乐民院士将自己的论文安排在墙报展出，而将口头报告的机会让给年轻学者，给年轻学者创造一个很好的学习和锻炼机会。同时因墙报展出高质量的研究成果引起了与会者热烈的讨论。

两年一度的中日双边理论化学研讨会，是对我国理论化学研究水平的一次大检阅，从本届研讨会可看到：中方的论文所涉及的题材广泛，内容丰富，显示出我们基础理论方面进行着较高水平的工作，应用方面欣欣向荣，而在计算方法上也有长足的进步。但和日方相比，我们有些工作还不够深入细致，一些国际上受到重视的课题我们还涉及不多，量子化学应用方面，仍局限于对分子成键行为的定性讨论。日方研究成果一个显著特色是理论和实验紧密相联，选择材料、能源、医药、以及化工生产等方面具有重大实用价值的课题进行细致的理论研究，在研究过程中，提出新思想、新概念，并建立与之相应的新理论和新方法。

从本次会议看理论化学研究新进展是：(1) 理论化学中的量子化学基础理论的研究向更系统化、理论化方面发展，在更高的认识水平上处理多体问题；(2) 计算量子化学将得到更大的发展和完善，其中相关能和相对论的计算将更受到人们的重视；(3) 理论化学中应用研究，不仅注重分子结构和性质的关联，而且将重视分子的激发态和化学反应过程研究。理论计算与现代谱学实验手段的结合，将对新材料合成、药物设计、催化剂筛选等方面作出重要贡献，进而对国民经济产生影响。

(国家自然科学基金委员会化学科学部 张慧心 供稿)