

全国第三届量子化学会议手册

大会秘书处

1987年5月 成都

会议日程及作息时间

会议地址：四川省高教学术交流
中心(省中医学院附近)

一、会议日程

日 期	上 午	下 午	晚 上
五月七日	代 表 报 到		自由活动
八 日	代 表 报 到		组委会成员会议
九 日	1.开幕式 2.大会报告 3.照相	大 会 报 告	自由活动
十 日	大 会 报 告	大 会 报 告	研究生座谈、其它同志自由活动
十一日	小 会 报 告	小 会 报 告	文娱晚会
十二日	小 会 报 告	小会报告与座谈讨论	科研工作座谈
十三日	机 动	闭 幕 式	招待会(四川大学招待大会代表)
十四日	游览灌县青城山、都江堰		自由活动

自由活动时间均按排有录像放映，可供代表观看；所有按排如临时有变动，将另行通知。

二、作息时间

早 餐	上午会议	午 餐	下午会议	晚 餐
7：30	8：15~11：45	12：00	2：30~6：00	6：15

上下午会议中间可休息10~15分钟。

目 录

开幕词.....	1
一、组织机构	
(一) 组织委员会名单.....	2
(二) 主席团成员名单.....	2
(三) 秘书处成员名单.....	2
二、会议日程	
(一) 会议日程及作息时间 (见封二)	
(二) 大小报告主持人、时间、地址及安排顺序.....	3
三、全国第三届量子化学会议代表名单.....	16
四、其它	
(一) 住宿平面图.....	30
(二) 成都火车站旅客列车到发时刻表.....	32
(三) 中国民航成都航班时刻表.....	33
(四) 成都市内交通图(另发)	

开 幕 词

唐 敖 庆

各位同志：

全国第三届量子化学会议现在开幕了。我代表中国化学学会向各位同志表示热烈的欢迎。在筹备本次大会的过程中，四川省人民政府、四川省科协、四川省化学化工学会、四川省高教局等曾给予了热情的支持，特别是会议承办单位四川大学的同志们付出了辛勤的劳动。在此我向他们表示衷心的感谢。

参加本次大会的共370位同志，除台湾以外的全国29个省、市、自治区均有代表出席。他们中不仅有教师和科研人员，而且有科学管理，科协以及出版、新闻单位的代表。他们来自全国一百多所高等院校、科研机构、解放军系统和工业部门。这是一次规模巨大的科学盛会。

参加这次大会的不仅有多年在量子化学科研、教育战线从事工作的老专家，而且有大量的中、青年同志，包括近九十名研究生出席。这表明在我国量子化学研究队伍中，年轻的一代正在迅速成长，已涌现出了大批新生力量。我国已经有了一支强大的，有较高水平的量子化学研究梯队，这是十分重要的。

本次大会共收到会议论文262篇，提供论文的作者共425人。这些论文内容广泛，涉及到量子化学理论，方法以及在化学各领域中的应用。

我高兴地看到，从1983年9月在长春召开的全国第二届量子化学会议以来的近四年中，由于大家不断努力和卓有成效的工作，我国的量子化学研究已有了很大的进展，做到了出成果，出人材的双丰收。表明我国广大的量子化学工作者为发展我国科学和教育事业已做出了很大的努力，取得了可喜的成就。

在这次大会上，将广泛地进行学术交流，总结经验，展望未来。这将进一步提高我国量子化学的研究水平，为我国“四化”建设作出更大的贡献。

我预祝大会获得圆满成功。

一、组织机构

(一) 组织委员会名单

主 席：唐敖庆

付主席：徐光宪 鄢国森

委 员：(以姓氏笔划为序)

邓从豪 付孝愿 刘若庄 刘春万 江元生

孙家钟 何福城 陈志行 陈念贻 杨 频

李 笃 吴国是 张存浩 张乾二 赵成大

徐光宪 唐敖庆 曹 阳 鄢国森 潘道皐

黎乐民 戴树珊

(二) 主席团成员名单

(三) 秘书处成员名单

秘书长：田安民

秘书组：孙泽民 唐作华

会务组：陈天朗 薛 英

后勤组：肖慎修 秦自明

二、会议日程

(一) 会议日程及作息时间 (见封2)

(二) 大小会报告主持人, 时间, 地址及按排顺序

1. 各组小会报告主持人(第一人为组长)

A组: 王良琛 黄明宝
 B₁: 汤定华 刘 范 宋玉林
 B₂: 朱正和 韦统师 范康年
 C: 付孝愿 居冠之 鲁崇贤
 D: 高孝恢 林连堂 吴汲安
 E: 沙昆源 赵尚勃
 F: 付 亨 焦克芳 肖鹤鸣
 G: 薛万川 吴念慈 郑世钧

2. 大小报告时间、地址及顺序按排简表

时 间	报告人及报告内容	地 址	主持人
五月九日 上 午 (开幕式后)	唐敖庆 多层夹心化合物的电子构型(B39)	大会会场	鄢国森
下 午	鄢国森 分子振动力常数的计算(E25) 邓从豪 电子相关问题研究(A07) 刘若庄 光化学反应的理论研究简介(C06) 江元生 矩和分子轨道的直观化(A05) 孙家钟 内禀反应坐标法与单分子反应	同 上	另定
五月十日 上 午	陈念贻 铝与 $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{-Al}_2\text{O}_3$ 熔盐系相互作用的量化研究(C25) 陈志行 反应性的微扰理论(A14) 吴国星 蒽与多氙原子范德华络合物结构与性质的量子的研究(B49) 张存浩 双共振与多光子电离光谱的新进展 张乾二 多电子体系键表示法(A18)	同 上	另定

续:

下 午	赵成大 聚乙炔掺杂导电机理的量化研究(F37) 曹 阳 杂化轨道的构成与应用 潘道皑 对共轭效应与芳香性本质的探讨(B21) 黎乐民 分子环境中的原子和它们之间的相互作用 (A13) 戴树珊 非经验参数化相对论 (E H T) 方法及其 应用 (A20)	同 上	另定
-----	--	-----	----

续:

时 间	报告人及报告内容*	地 址	主持人
五月十一日 上 午	A 组(01—12) D: (01—10) B ₁ : (01—10) E: (01—10) B ₂ : (30—40) F: (01—10) C: (01—11) G: (01—10)	A 组后楼第二会议室 B ₁ 组后楼第五会议室 B ₂ 组后楼第四会议室 C 组后楼第三会议室 D 组后楼第一会议室 E 组前楼第二会议室 F 组前楼第三会议室 G 组前楼第四会议室	主持人由 各组自定
下 午	A: (13—20) D: (11—20) B ₁ : (11—19) E: (11—19) B ₂ : (41—48) F: (11—19) C: (12—19) G: (11—19)	同上午	同上
五月十二日 上 午	A: (21—28) C ₂ : (30—38) B ₁ : (20—29) E: (20—25) B ₂ : (49—57) F: (20—29) C ₁ : (20—29) G: (20—28)	其它各组及C ₁ 组不变, C ₂ 在原 D 组会场(后楼第一会议室)	同上
下 午	B: (58—61) F ₂ : (37—44) C: (39—46) G: (29—34) F ₁ : (30—36)	B 组在原B ₁ 组地址 C 组仍在原组C 组地址 F ₁ 组在原E 组地址(前楼二会议室) F ₂ 组仍在原F 组地址 G 组仍在原组G 组地址 A、D、E 组要讨论, 所需地址请 事先联联, 以便安排。	同上

* 编号中已在大会报告过的论文, 不再在小会上报告, 临时若有变动, 将另行通知。

3.大会报告内容及日程: (地址: 均在大会会场)

五月九日

上午 唐敖庆: 多层夹心化合物的电子模型(B39)
 下午 鄢国森: 分子振动力常数的计算(E25)
 邓从豪: 电子相关问题的研究(A07)
 刘若庄: 光化学反应的理论研究简介(C06)
 江元生: 矩和分子轨道的直观化(A05)
 孙家钟: 内禀反应坐标法与单分子反应

五月十日

上午 陈念贻: 铝与 $\text{Na}_3\text{AlF}_6\text{—Al}_2\text{O}_3$ 熔盐系相互作用的量化研究(C25)
 陈志行: 反应性的微扰理论(A14)
 吴国是: 蒽与多氩原子范德华络合物结构与性质的量子化学研究(B49)
 张存浩: 双共振与多光子电离光谱的新进展
 张乾二: 多电子体系键表示法(A18)
 下午 赵成大: 聚乙炔掺杂导电机理的量子化学研究(F37)
 曹 阳: 杂化轨道的构成与应用
 潘道皐: 对共轭效应与芳香性本质的探讨(B21)
 黎乐民: 分子环境中的原子和它们之间的相互作用(A13)
 戴树珊: 非经验参数化相对性(EHT)方法及其应用(A20)

4.各小会报告的具体安排 (一般各题目之第一人为报告人, 有*号者已在大会报告过)

五月十一日上午

A. 量子化学理论和方法 地址 后楼第二会议室

A01	求解原子—分子散射理论二阶微分方程组的新的近似势能方法	谢代前	唐敖庆
A02	约化密度矩阵集合的端点	曾宗浩	孙家钟
A03	二色图的矩和本征多项式的片断封闭公式	张红星	江元生
A04	N—表示的B和C条件的临界行为	李泽生	孙家钟
A05*	矩和分子轨道计算的直观化	江元生	张洪星
A06	量子化学多体理论中的不可约张量方法	李伯符	孙家钟 沈伊民
A07*	电子相关问题的研究	邓从豪	冯大诚 刘成卜
A08	原子—双原子分子散射的GIOS理论	丁世良	邓从豪
A09	开壳体系的改进 Roothaan单哈密顿法	廖沐真	吴国是
A10	硼烷的垂直电离势的EOM/传播算子方法计算	黄明宝	潘道皐
A11	半经验分子轨道法的电子密度函数的拓扑方法讨论	张绍文	蔡新华 郑世钧
A12	部分同谱分子		陈尔霆

B. 原子与分子的电子结构 地址: B₁(01—10)后楼第五会议室
B₂(30—40)后楼第四会议室

B₁:

- | | | | |
|-----|--|-----|-------------|
| B01 | Methylene Oxalate的分子结构的量子化学计算研究 | 陈德棉 | 黄明宝等 |
| B02 | 硼烷缺电子多中心桥键的H—F力研究 | 彭周人 | 杜奇石 |
| B03 | 含硫化合物中硫3d轨道的成键作用 | 肖力 | 黎乐民 徐光宪 梁珍璇 |
| B04 | MnF ₂ 络离子晶场能级理论计算 | 赵尚勃 | 周康巍 |
| B05 | Cs ₃ CoCl ₆ 的精细电子结构 | 邝小渝 | 陈忠厚 |
| B06 | 铁系自由离子d径向的研究 | 陈忠厚 | 邝小渝 |
| B07 | 卤素含氧酸及其盐的酸碱性和稳定性的理论研究 | 曹阳 | 王友良 罗仕忠 |
| B08 | 自然杂化轨道和等辨类似性的推广和应用 I. ML ₃ 的电子结构和性质 | 曹阳等 | |
| B09 | 碳硅双键的量化研究 | 余敬曾 | 高新生 |
| B10 | 任取l值杂化轨道的键强和键角 | 湛昌国 | 刘范 胡振明 |

B₂:

- | | | | |
|------|------------------------------|-----|-------------|
| B30 | 小螺桨烷的中心C—C键 | 韦统师 | 赵存元 邱文元 |
| B31 | 电子结构与穆斯堡尔效应的参量 | 高乃飞 | 崔立其 朱加林 熊家炯 |
| B32 | 铀酰络合物的电子结构与化学键 | 赵明 | 王银桂 张乾二 |
| B33 | SF ₆ 电子亲合势的密度泛函计算 | | 唐荣奇 |
| B34 | 高能化态钼簇合物的电子结构和化学键 | | 李俊篪 |
| B35 | 排列通道量子力学I, 双原子分子基态势能曲线的理论计算 | 王风 | 许宗荣 朱正和 |
| B36 | 排列通道量子力学II, 氢同位素多原子分子结构的研究 | 许宗英 | 王风 朱正和 |
| B37 | 利用相似变换推求杂化轨道 | | 翟锦库 李群 |
| B38 | 咕吨类试剂的量子化学研究 | | 王广怀 |
| B39* | 多层夹心化合物的电子构型 | | 唐敖庆 |
| B40 | 多面体碳烷的杂化轨道研究 | 曹阳 | 王友良 岳敏 |

C. 化学反应的量子理论 址地: 后楼第三会议室

- | | | | |
|------|--|-----|---------|
| C01 | 卤化氢与乙烯加成反应势能面与过渡态量子拓扑分析的半经验SCF—MO方法研究 | 张云清 | 张绍文 郑世钧 |
| C02 | 丙二烯与HF形成π型氢键络合物的量化研究 | 郭林 | 张绍文 郑世钧 |
| C03 | 锂离子水化的量子化学研究 | 王树松 | 郑世钧 |
| C04 | 化学反应的禀反应坐标法 III. 甲硫醛反式异构化反应的IRC解析 | 李学奎 | 孙家钟 |
| C05 | 锂在聚吡咯中电化学嵌入反应的量子化学研究 | 吴浩青 | 严德官 |
| C06* | 光化学反应的理论研究简介 | | 刘若庄 |
| C07 | 醋酸异丁酯热分解研究 | | 周光耀 |
| C08 | BH ₃ 与CH ₂ CN ⁻ 、NCO ⁻ 络合的量子化学研究 | 江德林 | 陈治文 |
| C09 | 四氯二甲己基酸甲酯成环反应的量子化学研究 | 周伟良 | 翁羽翔 李畅蟾 |
| C10 | 苯分子与Rh(III)面相互作用的分子轨道研究 | 高国荣 | 郭纯孝 |

C11 B P I L膜与溶质相互作用的量子化学研究 汲 江 陈嘉彦

D. 固体及表面量子化学 地址: 后楼第一会议室

- D01 非晶硅短程序与电子结构关系的量子化学研究 张瑞勤 戴国才 关大任 蔡政亭
- D02 H在W(100)面一度位上化学吸附的离散变分X_α计算
关大任 王泽新 蔡政亭 邓从豪 张瑞勤
- D03 固体表面化学吸附键能带结构的计算方案 王南钦 周泰锦
- D04 乙烯在Ni²⁺(111)面上吸附的理论研究 崔长星 于恒泰 江元生
- D05 N₂O在Ni(100)面上吸附分解的分子轨道研究 郭国霖 姚小强 唐有祺
- D06 用从头计算法研究LiF晶体中F⁺心周围的势场 崔笠晶 万良风 刘靖疆
- D07 分子筛中的轨道相互作用及其C⁺的催化活性中心 高孝恢 肖慎修 陈天朗
- D08 MAPO—5和CoAPO—5分子筛的量子化学研究
韩淑芸 郭纯孝 周采菊 卢德新 肖丰收
- D09 硅中I B族杂质电子结构的X_α—SW法研究 吴汲安
- D10 SnO吸附NO的SGF ab initio研究 刘洪霖 陈念贻

E. 分子光谱理论 地址: 前楼第二会议室

- E01 天然斜斜方辉石中Cr的晶位对称性和极化吸收谱分析 赵尚勃 谢军楷
- E02 结合CaMgSi₂O₆-CaCrAlSiO₆透辉石固溶态下Cr离子的晶位对称性及吸收谱分析
袁素兰 赵尚勃
- E03 XWO₄ (X = Mg, Zn) 晶体中Ni的谱分析 王慧素 赵尚勃
- E04 苯分子Rydberg光谱的理论计算 韩朝阳 江元生
- E05 有机钴氨素的光谱和DSCPCF微扰能级 杨 频
- E06 钛的三噻吩甲酰三氟丙酮二水配合物Ho(TTA)₂·2HO的简正坐标分析
王秀珍 吴瑾光 施 鼎 徐光宪
- E07 在Ni(Bipuo)X (X = NO, ClO, CF, SO) 中[Ni(BiquO)]络离子的立体构型和Ni的吸收谱 赵尚勃 郑 芋
- E08 力常数 易希璋 丁世良 关大任 王泽新
- E09 亚硝基甲醇的cis式和trans式构象的振动频率、力场和正则振动的ab initio研究
于建国 刘若庄
- E10 碳、氢元素的CNDO参数和共轭烃的紫外光谱 张德聪

F. 高分子、药物及生物量子化学 地址: 前楼第三会议室

- F01 2-氯乙基亚硝脒类药物与受体结合物构象的量子化学研究
郭兆愉 蔡文正 洪世越
- F02 芬太尼类化合物毒性与电子结构关系研究 陈常英 李玉林 陈翼胜
- F03 过渡金属双核夹心络合物的电子结构与稳定性的关系
于恒泰 杨忠志 王志中 朱大奎
- F04 从二聚体到长链体系: 一种理解和获得一维能带的近似方法 吕天雄 江元生
- F05 汉防己甲素的分子表面静电势研究 范文林 薛永泉 徐素娟 李振民

F 06	关于若干辐射增敏剂分子表面电子静电势能势阱的探讨	黄建民	朱安奇	徐素娟
F 07	酚类抗癌药的定量构效关系研究		饶丽雯	蔡文正
F 08	三核钴羧基络合物的量化研究		陈治文	张绍文
F 09	一个5-硝基咪唑衍生物药效活性中心的量子化学研究		王 玮	李 峰
F 10	胞嘧啶甲基化的量子化学研究			谭载友

G. 计算量子化学

地址：前楼第四会议室

G 01	N和O核磁共振化学位移的MNDO/GIAO法计算	游效曾	吴伟雄
G 02	GTO基组用于原子的Slater组态平均化法处理时的谱项能量及轨道能级修正	吴国是	廖沐真
G 03	单中心单电子和双电子积分的计算	吴国是	陈凯先
G 04	在微机上解大CI矩阵的本征值问题	谢 前	王家振 吴国是
G 05	组态相互作用Hamiltonian矩阵元的显式表达	王家振 谢 前 顾宪章 曾 佩	吴国是
G 06	微机上的量子化学组态相互作用计算	谢 前 王家振 顾宪章	吴国是
G 07	在IBM-PC/XT上运行的从头算程序ZAB	陈志行	彭自为
G 08	磷化合物的从头计算研究		张亚拉
G 09	GAMESS程序系统介绍	梁珍璇	刘学宗
G 10	含排斥项包括f轨道的EHMO程序	曹 阳 薛万川	吴文渊

五月十一日 下午

A. 量子化学理论和方法

地址：后楼第二会议室

A 13*	分子环境中的原子和它们之间的相互作用	黎乐民
A 14*	反应性的微扰理论	陈志行
A 15	U(2n)群处理自旋有关哈密顿算符矩阵元的杨表(Yonug)算法	林海伦 曹雨芳
A 16	离散变分计算方法探讨	周泰锦 王南钦
A 17	对称群和酉群的耦合系数	李湘柱 张乾二
A 18*	多电子体系键表方法	李湘柱 张乾二
A 19	配位场的等价算符方法(OET)	栾景国 杨度理
A 20	非经验参数的相对论EHT及其应用	戴树珊 马忠新

B. 原子与分子的电子结构

B₁ (11—19)
B₂ (41—48)

地址：后楼第五会议室
后楼第四会议室

B ₁ :		
B 11	最大重迭法与键强度	刘 范 湛昌国
B 12	同系规律的联系和比较	孙玉坤
B 13	$\pi-\pi$ 电荷转移络合物的量子化学研究	杜奇石 周效贤
B 14	N-乙酰基硫代苯酰胺稳定构象的量化研究	沈德林 金俗谦 刘若庄
B 15	含有双三齿过氧单元的核稀土络合物电子结构的分子轨道研究	任镜清 林应章
		吴瑾光 徐光宪
B 16	有机显色试剂的电子结构与性能关系的量子化学研究	牛树强 赖城明

- B17 $S_6N_4^{2+}$ 中两个硫氮五员间 S—S 键的从头计算研究 汤定华 于建国
 B18 金属酞菁和卟啉的电子结构与催化氧化活性 宫宝安
 B19 含硅分子离子 $HOSi^+$ 与 HSO_i^+ 的电子结构从头算研究 杨成祥

B₂ :

- B41 铬、钼原子间多重键的杂化轨道研究 曹 阳 王友良
 B42 杂化轨道径向分布函数及其应用 李 隽 常光洁
 B43 一般化杂化轨道及夹角公式 李 隽 常光洁
 B44 根据从头计算结果探讨氮丙啶与环氧乙烷的化学键特性 熊建章 潘道皓
 B45 $YbPtOH$ 配合物的定域分子轨道研究 李振祥 倪嘉缙 任镜清 黎乐民
 B46 关于平面四配位碳的 SCF—MO 研究 I, —1,1—2 锂—2,2,2,3,3—4 甲基—环丙烷的分子轨道研究 周荫庄 邹宪法
 B47 改进的 Huckel 分子轨道法 (MHMO) 处理共轭环烯的 π 电子能级 梅平 雷秀斌等
 B48 过渡金属配合物超精细耦合常数 A 的理论计算 彭正合

C. 化学反应的量子理论

地址: 后楼第三会议室

- C12 电环化和环加成反应速率的量子理论 李前忠 罗辽复
 C13 桥基原子对金属—金属作用的影响 程文旦 黄锦顺 张乾二
 C14 二酰胺与乙二醛关环机理及顺反异构体的量子化学研究 王大喜 刘靖疆
 C15 联苯基二硫代磷酸酯旋光异构体之间相互转化的量子化学研究 郭洪猷 王作新
 薛石雷 曹维良 沈其丰 李增民
 C16 羰基钴催化烯炔酞化反应中氧活化作用的量子化学研究 (I—IV) 薛石雷 郭洪猷 曹维良 王作新
 C17 关于 ipso 反应的理论研究 封继康 李志儒 李 松 王宗睦 吴岩火
 C18 硝化乙二醇的热裂解机理 杨树林 宋洪昌 王国雄
 C19 三原子系统 ONO 和 NOO 的分析势能函数 俞华根 沈守瑶 朱正和

D. 固体及表面量子化学

地址: 后楼第一会议室

- D11 一个新的 $Si(001)2 \times 1$ 表面结构模型 蓝 田 徐飞岳
 D12 非晶硅电子结构的理论模型 II, 氢化非晶硅中的三中心键 ab initio 研究 巩金龙 李松林 邱文元 李 笃
 D13 定量的晶体轨道微扰法及应用示例 黄元河 刘若庄
 D14 氢原子在金属 Li 表面上吸附和表面扩散的 ab initio 势能面 王泽新 关大任 丁世良 蔡政亭 邓从豪
 D15 H 在 W 和 Fe 表面、O 在 Ag 表面上吸附的过渡态理论计算 王 镇 居冠之 冯大诚
 D16 过渡金属离子交换 ZSM-5 沸石分子筛的 EHMO 计算 金安定 吴锁川 周志华 姚荣茂
 D17 混合价态 Ferrocene—Ferrocenium 的能带结构 朱文杰 徐筱杰 唐有祺 傅 亨 钱民助
 D18 磷酸根 $[PMo_{12}O_{40}]^{3-}$ 的电子结构及催化性质研究 肖慎修 汲 江 陈天朗 蔡天锡 鄢国森

- D19 苯并—12—冠—4分子的晶体和电子结构 刘小兰 郝金庄 缪方明
D20 铈原子簇化合物的电子结构和催化性能研究 吕公义 肖慎修 鄢国森

E、分子光谱理论 地址：前楼第二会议室

- E11 吡啶—2, 6—二甲酸铈络合物的吸收光谱和磁圆二色性谱的解析
刘文天 黎乐民 徐光宪 金天柱 张慧珍
E12 苯胺的梯度法优化构象及其振动光谱、振动力场的理论预测 钮泽富
E13 光度分析显色试剂的量子化学研究Ⅱ偶氮溴磷Ⅱ及其络合物电子光谱和 π 轨道
能级 周伟良 杨莉苹 潘教麦 陈婉如 赵泓
E14 芳香胺与反丁烯二腈所生成的电荷转移复合物的量子化学研究
唐明生 丁燕波 付孝愿 刘若庄
E15 $M(CSe(NH_2)_2)_2^{2+}$ ($M = Pd(II), Pt(II)$) 络合物的正则坐标分析 鄢国森 孙泽民等
E16 改进的Huckel分子轨道方法(Ⅹ) 呋喃环基多烯醛电子光谱的研究
孙聚昌 任德厚 林惠心
E17 改进的Huckel分子轨道方法(Ⅹ) 芳烃基多烯醛电子光谱的研究
林惠心 任德厚
E18 色素分子RETINAL的平衡几何结构及其振动分析 罗正明
E19 升降算符法计算分子振转能级 刘瑞峰 孙泽民 田安民 鄢国森

F、高分子、药物及生物量子化学 地址：前楼第三会议室

- F11 硼原子簇化学键的探讨I, 封闭型硼氢化物的定域分子轨道 林梦海 张乾二
F12 单立方烷型Mo—Fe—S原子簇的电子结构 刘春万 曹怀贞 林振阳
F13 四铁四硫原子簇化合物电子结构的DV—Xa计算 唐煌 曹怀贞 刘春万
F14 二核元件化合物自旋可能性的理论研究 曹怀贞 刘春万
F15 腐植酸模型化合物与含硒基本生命分子相互作用的量子化学研究 白乃彬
F16 多环烃聚梯型共轭烃及其稳定性 李前树 沈良骏 张星辰
F17 抗癌药芳基异羟肟酸的量子化学研究 许旋 蔡文正
F18 关于硝基咪唑类辐射增敏剂的量子化学计算 朱安奇 徐素娟 罗祖玉
F19 4—(N—环丙烷基—N—苯胺基)—1—2(2—苯乙基)—4—哌啶羧酸
甲酯(R32767)的构象计算 蒋飞龙 嵇汝运 陈常英 李玉林 陈翼胜

G、计算量子化学 地址：前楼第四会议室

- G11 赝势法价电子从头计算技术及其程序化的研究 陈凯先 嵇汝运 吴国是
廖沐真 曹小平 刘洪霖 陈念贻 戴定国
G12 从头计算法分子轨道绘图程序 沈尔忠 王志中 江元生
G13 DPS8机MIDO/3程序及应用 徐明 程钰 王志中
G14 关于GTF线性拟合STO极小基组的几个问题 宁世光 宜仲良
G15 乙醛氧化制乙二醛的EHMO研究 杨书廷 蔡昆 张明春
G16 一个实用的几何优化算法 孟益民 刘生忠 李笃
G17 BH, CH, NH, HO, HF, BH, CH, NH, HOHF

- 等电子系的从头算研究 刘成卜 邓从豪
- G18 绘制轨道、电子云二维函数图形的 IBM-PC/XT 微机程序 蔡新华 郑世钧
- G19 IBMPC/XT 微型计算机的量子化学程序集 郑世钧 蔡新华 孟令鹏
- 张绍文 徐振峰 汤定华 丁燕波

十二日 上午

A、量子化学理论 地址：后楼第二会议室

- A21 Huckel 分子轨道理论中矩和本征多项式的图论求值 胡永寿 江元生
- A22 组合计数与Hukel矩阵本征多项式 刘光炳 何成辉
- A23 一种新的X_a模型方法 王良琛 屠跃权 张清国
- A24 虚轨道的定域化研究 袁高清 田安民 唐作华 鄢国森
- A25 用定域轨道可迁性计算直链共轭大分子 袁高清 田安民 唐作华 鄢国森
- A26 缺电子化合物定域化的研究 任 译 田安民 鄢国森
- A27 Gaussian型d轨道组合成正则轨道的一种方法 苏克和 田安民 刘洪霖
- A28 $S_{N1} \otimes S_{N2} \subset S_{N1+N2}$ 和 $U(n_1) \times U(n_2) \subset U(n_1+n_2)$ 变换系数的计算 文振翼

B、原子与分子的电子结构 地址：B₁ (20—29) 同昨日 B₂ (49—57)

B₁ :

- B20 二茂铁的芳香性 张明春
- B21* 对共轭效应与芳香性本质的探讨 潘道皓 熊建章 张 帆 钮泽富 刘珊林
- B22 单取代苯的多重散射X_a研究 闵新民 汪元生
- B23 卟啉及其络合物的电子结构 王志中 沈尔忠 王莉群
- B24 含C, H, NO双键有机小分子的定域分子轨道研究 丁 宇 于恒泰 杨忠志
- B25 Fe₂S₂(SH)₄, Fe₂S₂Cl₄²⁻ 电子结构研究 江元生 李晓天 于微舟 张明瑜
- B26 关于甲基三氢集团的静电势研究 吕亮德 刘转疆
- B27 小环烷烃成键新论 张 帆 潘道皓
- B28 复合铁黄材料的DV—X_a计算和模型研究 魏锡文
- B29 开环戊及其取代衍生物第一过渡系金属络合物电子结构的量子化学研究

B₂ :

- B49* 苾与多氟原子范德华络合物结构与性质的量子力学研究 罗会烈 胡增建
- B50 硅盐酸中Si—O_{br}与Si—O_{ter}键的量子化学研究 刘洪霖 高孝恢 陈念贻
- B51 分子内旋转及键相互作用可迁性研究 何 知 何福城 田安民 鄢国森
- B52 环丙烯基正离子的电子结构及其稳定性讨论 姚 群 钮泽富 潘道皓
- B53 闭合型碳硼烷的结构和反应性能关系的EHMO研究 林连堂 陈树勇 张乾二
- B54 [1, 3]同面迁移过程中分子轨道界面图 李 平 郭承育 陈志行
- B55 芳香族硝基炸药感度和安定性的量子化学研究甲苯和苯酚类硝基衍生物 李永富 肖鹤鸣 邓 娅 冯蓓雷
- B56 苯和甲苯的硝基衍生物的极谱行为递变规律 肖鹤鸣 樊建前
- B57 二—(2—乙基己基)二硫代磷酸和二—(2—乙基己基)磷酸萃取镉的性能和成键情况的研究 宋玉林 宋魁元 李鸿图

C、化学反应的量子理论

地址 C₁ (20—29) 后楼第三会议室
C₂ (30—38) 后楼第一会议室 (原D组会场)

C₁ :

- C20 烷基对羰基反应性能影响的CND0/2研究 黄柳书
- C21 烯烃与单线态氧1, 2—加成反应途径的解析 刘新厚 刘若庄
- C22 Reppe合成催化机理的理论研究 陈世元 邓立群
- C23 金属催化剂催化氧—氘同位数交换反应动力学的CND0研究 孟昭兴 丁绍凤等
- C24 PMO与偶极环加成反应 韩长日 龚楚儒
- C25* 铝与Na₃AlF₆—Al₂O₃熔盐系相互作用的量子化学研究 陈念贻 刘洪霖 徐 驰等
- C26 VO(OR)₂Cl—Al₂Et₃催化剂体系活性中心的构型及钒中心原子的电荷分布
焦书科 鲁崇贤 姜 键
- C27 胞嘧啶三种异构体异构化反应的量子化学研究 洪三国 冯文林 付孝德
- C28 硝酰(HNO)到连二次硝酸单体(HON)重排反应的MCSCF研究
于建国 刘若庄
- C29 双烯酮热分解反应过渡态及反应机理的理论研究 丁燕波 付孝德

C₂ :

- C30 硝基甲烷重排反应机理的量子化学研究 浦 敏 于建国 刘若庄
- C31 化学反应的内禀反应坐标法—乙炔和乙烯的[2+2]环加成反应的RIC解析
付 强 夏欣夫 赵成大 黄敬安
- C32 多硝基烷Mannich反应的量子化学研究 唐泽华 肖鹤鸣
- C33 亚烷基卡宾xyc=c:(x, y=C1, H, Me, F)的1, 2重排反应的从头算研究
王秉泽 邓从豪
- C34 离子—分子反应的研究J. H₃NH⁺+NH₃体系质子传递的量子分析 居冠之等
- C35 BJL三维量子散射近似方法的动力学同位素效应检验 居冠之 蔡政亭 冯大诚
- C36 F+HF→FH+F线性量子散射计算 魏广太 邓从豪
- C37 Li+HF反应的准经典轨线研究 何福城 周 鲁 李象远
- C38 氮合成α—Fe催化剂晶面电子性质量子化学研究 周泰锦 万惠霖

E、分子光谱理论

地址: 前楼第二会议室

- E20 亚硝腈分子的结构和振动光谱的从头算研究 周学锋 孙泽民 田安民 鄢国森
- E21 MoOC1₄和WOC1₄的电子结构和光谱性质的DV—X_a方法研究
陈天朗 肖慎修 鄢国森
- E22 Rh₂(CO)₄(μ—Cl)₂和Rh₄(μ—CO)₃(CO)₆的简正振动分析
鄢国森 孙泽民 肖慎修 郑重德
- E23 应用配位场理论计算d³(或d⁷)系统的顺磁参数 林维楨 沙昆源
- E24 酞菁和八杂类酞菁电子光谱的量子化学解析 陈 琼 王户怀
- E25* 分子振动力常数的计算 鄢国森

F、高分子药物及生物量子化学

地址: 前楼第三会议室

- F20 双吡啶季铵盐构效关系的研究 高凤兰 丁振闾 宋鸿绪

- F21 微波放电法氚标记川芎嗪的研究 丁介凤 孟昭兴 沈德存 代明光 韩章淑
 F22 原子簇化合物成键规则的等价性 徐文国
 F23 EHMO法和MNDO法对J35化合物构象的研究 焦克芳 张普文
 F24 $[\text{Fe}_4\text{S}_4(\text{L})_n(\text{DTC})]^{2-}$ ($n=0, 1, 2, 4$) 原子簇的电子结构研究

郭纯孝 徐吉庆 魏 注

- F25 准一维高聚物链的线群理论分析——聚吡咯与聚噻吩电子能带的表征

张普文 严继民

- F26 1, 5-苯并杂卓的理论构象分析 吕迎潮 尚振海 金 声 邢其毅

- F27 邻近C—H键对中心金属原子的配位作用(Ⅱ)——双核离子 $[\text{Fe}_2(\text{CH}_3)(\text{CO})[\text{Ph}_2\text{PCH}_2\text{PPh}_2(\text{C}_5\text{H}_5)_2]^+$ 的定域分子轨道研究 陈敏伯 黎 健 徐光宪

- F28 邻近C—H键对中心金属原子的配位作用(Ⅳ)——四核原子簇 $[\text{HFe}(\text{CH})(\text{CO})]$ 的电子结构和化学键 犁 健 陈敏伯 徐光宪

- F29 混合价态Ferroce—Ferrocenium的能带结构

朱文杰 徐筱杰 潘佐华

唐有祺 傅 亨 钱民协

G、计算量子化学

地址：前楼第四会议室

- G20 用MNDO法计算F与 CH_3OH 反应的位能面

李柱芝 张绍文 郑世钧

- G21 线性分子内核四极偶合常数的CNDO/2计算

刁铁军 陈志行 王瑞琴

- G22 P_4 , As_4 及 Sb_4 的从头计算

张明瑜 李晓天 于微舟 江元生

- G23 $\text{Fe}_4\text{S}_4(\text{SH})_2^{2-}$ 电子结构的从头计算

于微舟 李晓天 张明瑜 江元生

- G24 第三周期元素改进的STO-3G

王 波 史鸿运

- G25 角度重叠模型的应用(Ⅱ) 计算低对称性配合物磁学性质的微机程序

豆育升 秦子斌

- G26 显色剂性能研究的通用PPP法程序及说明

李梦龙 章开诚

- G27 赝电势从头计算程序的研制

徐荫晟 孙海金

- G28 不饱和卡宾的从头计算

曹 阳 张书良

五月十二日 下午

B、原子与分子的电子理论

地址：后楼第五会议室

- B58 D_2EHPA 和 D_2EHDTPA 萃取锌的性能及其成键情况的研究

宋玉林 宋魁元 李鸿图

- B59 空间效应的定量研究(Ⅰ) 配位空间的几何解析

李醒夫 沈天骥 郭敖凌

孙广礼 孙鹏年 张兴旺

- B60 $[\text{PW}_{12}\text{O}_{40}]^{3-}$ 原子簇电子结构和配位性质

汲 江 肖慎修 陈天朗

蔡天锡 鄢国森

- B61 硅氧烷及硅酸的量子化学研究

高孝悌 刘洪霖

C、化学反应的量子理论

地址：后楼第三会议室

同昨日

- C39 甲苯用甲醇侧链烷基化机理的量化计算

谢 舜祥 黄仲涛

- C40 共轭体系取代基效应的微扰自由电子模型

陈志行 吴周新

- C41 有机分子中诱导效应(ⅠV)——醛酮水合物的相对稳定性

陈志行 云逢存 杨丹姬