



理论室第15期学术报告



报告题目: Classical Valence Bond Approach by
Modern Methods

报告人: 吴玮 教授, 厦门大学

报告时间: 2023年4月23日 (星期日) 上午 10:00

报告地点: 南楼二层会议室

邀请人: 高兴发 研究员

摘要:

作为现代化学键理论之一, 价键理论为分子电子结构性质和化学反应机理提供了直观的化学图像理解。虽然当前分子轨道理论占据着量子电子结构研究的主导地位, 随着计算机运算能力的迅速提升, 以及量子理论计算算法的日益完善, 从头计算价键理论重新引起了人们的重视。在这次报告中, 我将简要介绍从头计算价键理论方法在过去三十年来所取得的突破, 着重介绍了厦门大学化学键理论研究团队在这一领域研究取得的进展。

报告人简介:

吴玮, 厦门大学教授, 博士生导师, 教育部长江学者特聘教授 (2004), 国家杰出青年基金获得者 (2002)。1990年毕业于厦门大学, 获理学博士学位, 同年留校任教。1992年至1994年在意大利比萨大学从事博士后研究。1995年破格晋升为研究员 (教授)。现任厦门大学化学化工学院教授, 福建省理论与计算化学重点实验室主任。已发表学术论文220余篇, 专章9章, 合作专著1部。获教育部“中国高校自然科学奖”一等奖 (第一完成人, 2000), 福建省自然科学奖一等奖 (第一完成人, 2015), 厦门市科技重大贡献奖 (2019)。