



2013 诺奖

提到电子计算机,你或许能说出它的很多种用途,但可曾想过它能被当做“试管”进行化学实验吗?瑞典皇家科学院9日把2013年诺贝尔化学奖授予3名美国科学家,表彰他们在电脑模拟化学反应领域作出的开创性贡献。

电脑变试管

三位“模拟化学反应”奠基人分享诺贝尔化学奖

融合两大物理学说

马丁·卡普拉斯、迈克尔·莱维特和阿里耶·瓦谢勒分享800万瑞士克朗(约合120万美元)奖金。瑞典皇家科学院说,在上世纪70年代,3人为借助电脑程序理解和预测化学过程及其结果奠定了基础,使借助电脑描绘神秘的化学过程成为可能。深入了解化学过程,可以使催化剂、药物和太阳能电池发挥最大效用。3名获奖者的“开创性工

作”,融合经典物理和量子物理,创造了新方法。比如,模拟一种药物如何作用于人体中特定蛋白质时,电脑用量子物理计算蛋白质内的原子与药物之间的相互作用,用经典物理模拟蛋白质剩余部分。“今天,对化学家而言,电脑与试管同样重要,”皇家科学院说,“电脑模拟如此逼真,以至于它们能预测传统实验的结果。”

都是多国籍人士

此次获奖的3位科学家都有多重国籍,“异域建功”成了他们共同的特点。卡普拉斯生于奥地利,持美国和奥地利国籍,为美国哈佛大学和法国斯特拉斯堡大学教授。莱维特生于南非,为美国斯坦福大学医学院教授,获美国、英国和以色列国籍。瓦谢勒出生于以色列,为美国加利福尼亚南部大学教授,拥有美国和以色列国籍。在上世纪70年代,瓦谢勒与

卡普拉斯在哈佛大学合作,开发出一套结合经典物理和量子物理的电脑程序。莱维特后来在剑桥大学与另一名科学家共同开发一套程序,可用于研究酶。瑞典乌普萨拉大学有机化学教授克尔斯季·赫尔曼松评价道,3名获奖者为化学作出“革命性”贡献,“你在电脑上解出方程,得到几乎不可能用其他任何方法获得的详细信息”。电脑模拟可用于广泛领域,包括能源和材料。

据新华社



马丁·卡普拉斯



迈克尔·莱维特



阿里耶·瓦谢勒

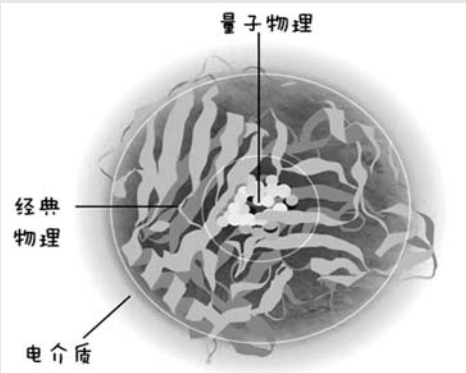
看门道

新算法,好钢用在刀刃上

现代化学不仅是个实验室学科,一个反应可能只有几微秒,光靠倒腾试管根本看不出啥。这就需要大规模的计算。但说到计算,就涉及到一个怎么算的问题。先前,化学家只能在经典物理和量子物理之间作出选择。经典物理计算简便,但只能用于大分子,化学反应一开始就抓瞎了;量子物理倒是精确,但只能计算小分子,计算量太庞大。



怎样解决这个难题呢?3位诺贝尔奖得主想出了好办法。其实思路不难,就是“把好钢用在刀刃上”,在关键的反应核心用量子力学算,外围则用经典物理“凑合”一下。



这个思路说起来容易实现起来很难,但在3位科学家的努力下,这套被称为“多尺度模型”的计算方法终于被创立出来,并成为今天计算机模拟化学反应的理论基础。(图片、资料来自果壳网)

订版电话
(0531)
85196183
85196489
85196199

家 教
◆英数理化+全科86660551
◆专提英数66828262
◆绝招英数13953169204
◆英数理化保提86992877
◆全科一对一辅导15098964157
小初高辅导
◆高中英数理化86992677

实验名师自办
1对1,3-5人小班,全科强训,资深在职名师,保提成绩
15098799169

专补数学
五大校区 解放桥校区
大观校区 山师校区
槐荫校区 舜耕校区
免费咨询热线
400-671-8838

英数物化生重点中学
名师联袂, 一对一及3-6人小班, 经验丰富, 免费试听。
15098770166

69元/小时一对一
免费上门辅导
电话: 58595557

MBA 辅导
注册管理会计师招生
山东大学管理学院
88365668 15264170958

MBA、MPA报名中
211、985高校,包过,名额有限
咨询电话: 18954522186

大学专升本快速办理
15854999901

200元=4小时 1对1
88169518

双证 MBA/MPA 热招中
省内/211重点高校; 免费赠送辅导; 有协议班
电话: 0531-86100010 www.sdmst.cn

初三高三考中后交费
签目标合同, 针对被动生
全托辅导 86600505

工程管理硕士报名
济南上课
0531-86966526

高考.中考英语
非常辅导
15508626028

商 铺 楼 市 写 字 间

门头旺铺

英雄山文化市场旺铺
出租、转让;适合珠宝、玉器、字画、古玩、图书等。
18653199911

旺铺出租
火车站广场西门头房30平出租,最适旅行社、快餐、银行。
电话: 15866691975李

低价出租北园路商铺
一楼300平, 二楼800平, 精装修水电齐全,门口有停车位13695316000。

泉城路三楼900平招租
山大路上下300,二环东路120,老东门180平,18668908681、15863160360

旺铺转让
转华龙路中段38平门头房,位置佳。
电话: 18560148688

超市转让
150平米, 汽车总站附近。
电话:15553197268 66595268

旺铺出租
近经四纬十华联商圈门头出租,300平, 停车方便。
18954522186

统一银座求租商铺
18615515278、86139985
18653105235
另有部分面积出租

写字楼租售

出租写字楼
解放路95号、中心医院东邻, 单位1000平
写字楼出租, 可分租
81938166、15666668817

出租涿源大街写字间
86403060 13573199820

房屋商铺

出售文昌山庄别墅
独栋独院, 前后花园, 集中供暖, 270平, 有证,
15553126857

商铺出租
工业南路(奥体西路口),380平,后有400平小院可改建利用。
15668375018

办公楼.酒店用品商场
八一立交南0.8元出租;
西外环公寓0.4元出租
69923605

出租转让
山大路与花园路交叉口在水一方一楼 500平方
13335178256

大学瓦罐窗口转让
含瓦罐技术! 联系人:苏先生
电话15206408765

出 租
二环西路美里湖段门头房.厂房。面积1600平方。水电齐全。
电话13606401111

出租吴家堡宋家庄厂房仓库
500-2000平
13589005389 13066026066

楼房出租
100至200平,可办公办学公寓
三空桥往北150米部队院内
15066107566

吉楼出售
汽车总站泉星小区二区14号楼2单元501室,108平方,地下室10平方,电话: 15552881778张

带证转让
齐齐发大市场企业、厂房、楼房五千平方转让、分售、出租、代租13869116064

出 租
经十路和谐广场对面
450平出租, 可分租!
适合餐饮、卖场、超市等。
电话:15589967965
13806486357

楼盘资讯

别墅
66万/200M²
118万/330M²
即买即住 手续齐全
双气三线 配套完善
看房提前一天预约
电话:88889972

经十东路青旗山花园
首付3万8 住大三房
2980元/每平米
五证俱全精装现房83773977

经十东路碧桂园
凤凰城南临
青旗山花园联排大别墅
同等地段仅需
4999元/每平米
五证俱全 面积308平米
实景现房公开发售
十月购房可获更多优惠
83773988

同等地段 同等品质住宅8000元/m²
我们只要4800元/m²
送精装 海阳一线海景公寓 纯现房 紧邻市政府
抢房热线: 86151688 86017266

千亩湖畔万顷森林中的度假公寓
面积77平米
总价15.8万/套起
精装现房 限时特惠
TEL: 83780999
章丘市南部山区垛庄中学西邻

阳光托斯卡纳
Sea of Toscana
Tuscan Impression
Pastorale

总款13万
海景养生房
远离雾霾
南山集团 五证齐全 双气三线
0531-86557788(周末看房车报名中)