



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并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。

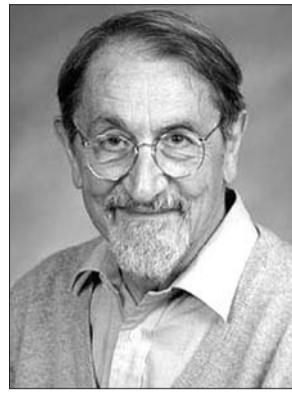
卡普拉斯生于奥地利,持美国和奥地利国籍,为美国哈佛大学和法国斯特拉斯堡大学教授。莱维特生于南非,为美国斯坦福大学医学院教授,获美国、英国和以色列国籍。瓦谢勒出生于以色列,为美国加利福尼亚南部大学教授,拥有美国和以色列国籍。

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

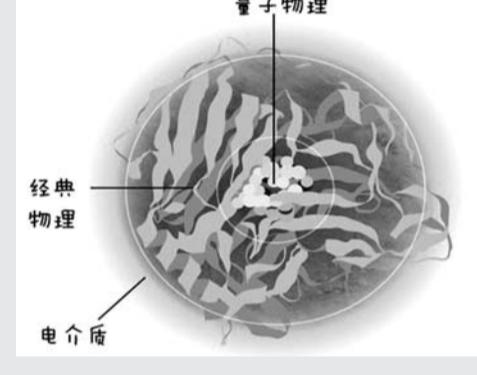
新算法,好钢用在刀刃上

现代化学不仅是个实验室学科,一个反应可能只有几微妙,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,化学反应一开始就把瞎了;量子物理倒是精确,但只能计算小分子,计算量太庞大。



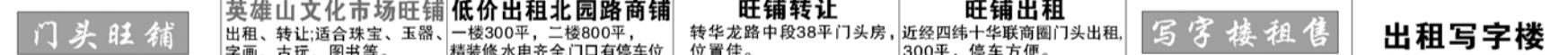
怎样解决这个难题呢?3位诺贝尔奖得主想出了好办法。其实思路不难,就是“把好钢用在刀刃上”,在关键的反应核心用量子力学算,外围则用经典物理“凑合”一下。



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866660551 ◆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、MPA报名中 211、985高校,包过,名额有限 咨询电话: 18954522186 实验名师办小班 一对一,在职一线名师,各科辅导,提高快。 18265413501 MBA辅导 注册管理会计师招生 山东大学管理学院 88365668 15264170958	大学专本科快速办理 15854999901 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			



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	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。	旺铺转让 转华龙路中段38平门头房,位置佳。 电话: 18560148688	旺铺出租 近经四纬十华联商圈门头出租,300平,停车方便。 18954522186	写字楼租售
转让新世界盈利化妆品店 可多面经营位置佳也可空转20平方, 电话: 13081427472	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	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	超市转让 150平米,汽车总站附近。 电话: 15553197268 66595268	统一银座求租商铺 18615515278、86139985 18653105235 另有部分面积出租	出租泺源大街写字间 86403060 13573199820

