

·科学论坛·

从美国国家科学基金会近年资助的理论与计算化学项目看该领域的发展趋势

杨俊林¹ 邵久书²

(1 国家自然科学基金委员会化学科学部,北京 100085; 2 中国科学院化学研究所,北京 100080)

[摘要] 简要分析了美国国家科学基金会近年来对理论与计算化学项目的资助情况并与我国国家自然科学基金委员会对该领域的支持项目进行了简单对比。

[关键词] 理论与计算化学,美国国家科学基金会

相对于化学领域中传统的四大学科无机化学、有机化学、分析化学以及物理化学等来说,理论化学即使在今天也一般被列为新兴化学分支中的一类。实际上,追溯其历史可以看出,这一非传统的化学学科并不年轻,到今天它已经经历了百年多的不断发展与壮大且在化学乃至分子科学中发挥着不可替代的作用^[1, 2]。现代理论化学的基础是量子力学。早期许多量子物理学家对理论化学的发展做出了开创性贡献。例如已经写到大学教科书的波恩-奥本海默近似、海特勒-伦敦价键理论、分子光谱和分子间相互作用理论、休克尔理论等都是物理学家的成就。当然,理论化学中还有许多十分重要的工作,如维格纳和 Eyring 的过渡态理论、Kramers 液相反应速率理论、Hartree-Fock-Roothaan 自洽场方法以及近年才发展的 Car-Parrinello 分子动力学方法等。诚然,与理论物理相比,理论化学对整个自然科学以及社会的发展影响小得多,而且,从事理论化学研究的专业人员占整个化学家队伍的比例也不高。尽管如此,迄今为止,已有十多位科学家由于在理论化学方面的杰出贡献荣获诺贝尔化学奖(其中 Flory 和 Ernst 是因为在理论和实验两个方面的杰出成就而获奖的化学家)。他们的工作对化学以及其他相关学科的发展仍然起着巨大的推动作用。

现代理论与计算化学包括三个主要研究方向:(1) 电子结构,研究分子中电子运动的特征;(2) 分子动力学,探讨分子体系中原子的运动性质;(3) 统

计力学,研究原子和(或)分子聚集体的行为。

美国犹他大学化学系 J. Simons 教授在美国国家科学基金会(以下简称 NSF)的资助下建立了一个理论化学的网站^[3],读者对象为大学化学系学生。这个网站的内容由 3 部分组成:(1) 化学中理论的意义;(2) 实验室-理论界面,实验测量什么;(3) 当今理论化学研究什么内容。该网站的特色之一是介绍了许多(主要在美国的)目前非常活跃的理论化学家和他们研究方向,为学生以及年轻的理论与计算化学工作者了解当代理论化学提供了十分有价值的信息。本文试图从另一角度,即通过分析 NSF 对理论与计算化学方向的资助情况等认识目前该学科的发展趋势。

NSF 化学学科分为九个大项,其中之一为理论与计算化学(与实验物理化学并列)。设立这一项目的目的是对分子性质和反应性提供分子水平的解释。它资助有关电子结构、统计力学、计算机模拟以及化学动力学方面的理论与计算研究。它也支持特别依赖于理论解释的化学体系实验热力学以及凝聚相动力学方面的研究。尽管理论与计算化学包括两个大方向,即量子计算(quantum calculations)和统计与模拟(statistics and simulations),但它也常与其他部门一同支持一些交叉研究。

利用 NSF 网站^[4]进行搜索(时间为 2005 年 5 月 9 日),发现含有理论和计算化学(theoretical and computational chemistry)关键词的在研项目共 190

本文于 2005 年 7 月 18 日收到。

项。资助部门:数学和物理科学部(160项)、生物科学部(19项)、工程部(8项)、教育和人类资源部(1项)、地球科学部(1项)、国际科学与工程办公室(1项)。

资助项目除了最主要的两部分,即量子计算(quantum calculations)和统计和模拟(statistical and simulations)外还包括:材料理论(materials theory)、催化与生物催化(catalysis and biocatalysis)、生物分子体系(biomolecular systems)、结构和反应活性(structure and reactivity)、合成无机(synthetic inorganic)、化学仪器(chemical instrumentation)、分子生物物理(molecular biophysics)、计算数学(computational mathematics)、数学科学优先领域——交叉学科(mspa-interdisciplinary)、数学科学(mathematical sciences)、主要研究仪器(major research instrumentation)、微粒和多相过程,过程和反应工程(particulate & multiphase process, process & reaction engineering)等。

所有在研项目中量子计算有72项,而统计与模拟为94项。

这些被资助的项目中,发展电子结构理论方法和应用的项目(含时和非含时的密度泛函理论、密度矩阵方法、耦合簇理论等)有13项,单纯应用电子结构方法研究实际问题的有7项(2项纳米材料、1项硅表面、1项金属酶研究,其余为化学基本问题,如分子负离子电子结构等);发展量子动力学方法的项目有36项,其中包括复杂体系或凝聚相量子动力学项目(涉及半经典近似、自洽场方法、耗散动力学、模式耦合等方法研究液体光谱、反应、电子转移和分子导电性等)24项,其余为气相反应动力学、光谱和相干控制等;发展统计力学理论方法和应用的项目有30余项,与生物有关的项目(分子力学模拟、生物分子体系自由能、蛋白质折叠和成核、DNA动力学、分子马达等)15项,研究传统相变统计力学、液体(结构、动力学和光谱)、非线性化学动力学等的项目有10余项,其余比较新颖的项目包括分子聚集和自组装、玻璃态相变、超流体、单分子光谱理论等。值得注意的是,项目负责人包括 Andersen, Berne, Fisher, Marcus, Miller, Ratner, Silbey, Tully, Widom, Wolynes 10位美国国家科学院院士,他们的研究方向都是动力学和统计力学。

不可否认,美国理论化学在国际上仍然占有主导地位。因而,分析美国国家科学基金会目前资助理论化学项目的情况,不难看出理论化学近期的发

展趋势。首先,理论及计算化学学科的自身发展需要继续开展电子结构、化学动力学和统计力学等方面的研究工作。其中最具挑战性的方向为复杂分子体系的电子结构和量子动力学。目前比较受关注的课题包括电子相关的有效处理方法、含时密度泛函理论、线性标度计算方案、半经典理论与计算方法、数值路径积分方法等。我国学者近年来在局域电子相关、密度泛函理论、激发态电子结构、重元素的相对论效应、量子动力学理论方法等方面的研究取得可喜进展。在这些成果基础上有望编制具有自主知识产权的可用于分子电子结构以及动力学性质计算的程序包。

从原子分子水平研究生命体系中重要问题无疑是理论与计算化学的重要方向。由于生物分子或生物过程的复杂性,完全从量子力学第一性原理出发对这些问题进行定量研究是不现实的。因此,可行的方案是将量子的电子结构理论和经典的分子力学、分子动力学模拟等方法相结合。需要指出,理论化学计算可以对所研究的体系进行精确的微观描述,是任何实验方法不能替代的。例如,理论化学方法(包括生物信息学、理论生物物理等理论描述)可以解决许多重要生物学问题:计算和分析酶的结构及其活性机理;揭示遗传与变异的奥秘;调控基因的复制和突变;设计高效无毒的新药等等。总之,从微观水平看,生命体系基本过程如调控和识别的本质仍然是化学问题。因而应用理论化学方法,结合计算机技术对这些问题进行深入研究具有重要的理论和实际意义。

毫无疑问,理论化学在化学领域中有着广泛的应用,从而极大地促进相关学科的发展。如果不涉及合成问题,化学家一般只关心分子体系的结构和动力学性质。这样,理论工作者需要对具体的分子系统进行理论分析和计算,从而可以比较准确地回答有关稳定性、反应机理、微观动力学等基本化学问题。当然,理论化学家还可以根据设定的目标,通过设计不同的激光场对化学反应进行相干控制,真正做到在原子水平对反应进行调控。

目前理论与计算化学在材料的优化和设计方面发挥至关重要的作用。例如,研究催化材料和催化机理、光电磁功能材料体系激发态行为、能量转移与转化、电荷转移及其化学反应、信息载体的传输等离不开理论化学的先导工作或其他形式的直接参与。更一般地讲,从简单原子、分子团簇到复杂的超分子组装和自组装体,理论化学可以帮助阐明它们的结

构和形成机理等重要问题。

从近三年我国国家自然科学基金委员会化学科学三处理论与计算化学受资助项目情况来看,基于理论化学应用研究的项目较多,而发展理论化学方法、建立研究模型的项目相对较少。值得指出的是,有关统计力学研究的项目例如液体理论、单分子光谱理论等寥寥无几。在未来的研究和资助工作中,我们必须注意到我国理论化学的发展与国际上理论化学发展趋势所不相称的方面^[5]。

致谢:感谢 J. Simons 教授和田国才先生的帮助。

参 考 文 献

- [1] Nye M J. From Chemical Philosophy to Theoretical Chemistry. Berkeley: University of California Press, 1993.
- [2] Simons J. An Introduction to Theoretical Chemistry. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.
- [3] Simons J. Theoretical Chemistry—A Self-Guided Introduction for College Students.
<http://simons.hec.utah.edu/TheoryPage/index.html>
- [4] National Science Foundation. <http://www.nsf.gov/>
- [5] 梁文平,杨俊林,陈拥军等. 新世纪的物理化学——学科前沿与展望. 北京:科学出版社,2004

THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY RESEARCH PROJECTS SUPPORTED BY THE NATIONAL SCIENCE FOUNDATION — A SHORT SURVEY

Yang Junlin¹ Shao Jiushu²

(1 Department of Chemical Sciences, NSFC, Beijing 100085; 2 Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Abstract We briefly summarize the theoretical and computational chemistry research projects supported by the National Science Foundation of the United States and make a simple comparison with the research proposals approved by the National Natural Science Foundation of China in the same field.

Key words theoretical and computational chemistry, National Science Foundation

·资料·信息·

中国科学家在 IEEE VLSI 学术会议上实现论文零的突破

中国科学院半导体研究所王守觉院士、石寅研究员领导的半导体神经网络及模糊逻辑高速电路实验室在新型高速直接数字频率合成(DDS)芯片研制中取得重大进展:他们采用 0.35 μm 常规 CMOS 工艺研制出合成时钟频率达 2 GHz 的新一代 ROMLESS DDS 高速芯片。目前国际上报道的同类芯片合成时钟频率为 1.2 GHz,半导体所研制的芯片速度指标处于国际领先地位。此外,与本项高速 DDS 芯片研发相并行开展的创新结构的 DDS 研究中亦取得重要成果,所撰写的学术论文“A Direct Digital Frequency Synthesizer with Single-Stage Delta-Sigma Interpolator and Current-Steering DAC”作为全球 85 篇入选文章之一被 IEEE VLSI2005 录用,并邀请为分会作报告,其意义不仅在于实现了中国大陆在

IEEE VLSI 学术会议上论文零的突破,而且也表明了我国在国际信息产业界的地位的提高。

芯片是信息产业的基石,芯片的研发水平标志着一个国家在信息产业中的地位。IEEE 固体电路协会是国际芯片研发的最具权威的学术机构。其下属两个芯片研发的顶级学术会议:IEEE ISSCC 及 IEEE VLSI 代表着当前国际芯片研发的前沿方向及最高技术水平。

王守觉院士和石寅研究员这方面的工作长期得到国家自然科学基金的支持,他们先后得到过 7 个基金项目的资助,其中既有面上项目也有重点项目。

(信息科学部 何杰 供稿)