

计算化学:源自计算的魅力

■本报记者 王珊 黄辛

白金可被铁锈所取代,这是真的吗?当然是真的。目前,在染料敏化太阳能电池领域,白金常作为电极催化材料被广泛使用。然而,由于成本高,全球科学家一直在努力寻找可替代贵金属电极的材料。

近日,由我国“千人计划”专家、爱尔兰皇家科学院院士胡培君带领的团队,基于微观层面的量子力学方法,竟“算”出可用铁锈替代白金,从而有望大大降低太阳能应用成本。

计算出来的铁锈

华东理工大学计算化学中心完全颠覆了记者对化学实验室的想象。这里不仅没有刺鼻的化学气味,也没有做实验的烧杯等瓶瓶罐罐。迎面而来的,是一台挨着一台的计算机和服务器。

这里正是胡培君等人日常工作的地方,用铁锈取代白金成果也是在这里诞生的。不过,这一结果可不是通过观察化学反应得出的,而是他们用计算机算出来的。在这里,他们通过计算化学寻找最适合的电极催化材料。

计算化学研究的是化学反应深处更为微观的世界,主要利用理论方法与计算技术模拟

或仿真分子的微观行为,进而作出相应的筛选和比对。胡培君等人的成果就是基于他们创立的“化学势动力学”理论模型计算得出的。

团队成员用理论推导得出的“吸附能”关键指标,可对不同物质的性质进行“海选”,而他们的想法是找到具有吸附强度与白金非常接近的材料。为此,他们首先推算出了一个候选材料区间,即从0.3电子伏到1.2电子伏。随后,通过比对,他们惊讶地发现,只有极少材料的吸附能与白金非常相似。

“从成本角度考虑,铁锈正是‘价廉物美’的那一个。”胡培君说。

这一结果很快为传统实验提供了指导。华东理工大学材料学院教授杨桂柱特别对此进行了实验室小试,验证了铁锈完全可取得类似白金的光电转化效率。

刻画原子尺度的图像

胡培君说自己就像一个画家,而他创作的目的就是将催化表面反应的原子尺度的图像画出来。

催化是化学里最重要的学科之一,几乎所有的化学反应都是催化反应。而在工业上,90%以上的化学工业生产都离不开催化剂。在计算化学引入之前,催化剂研究和制备基本都依靠

实验试错进行。

催化剂有着不同组分。具体选择哪个组分,按照传统化学的方法,需要将尽可能多的组分进行合成。这导致合成的周期非常长,从原料的选择到表征观察再到性能测试,所有的流程都要走一遍。而且,在这一过程中不仅会消耗原料,还要预防各种试剂带来污染的可能性,可谓耗时还耗物。

既然如此,为什么还要不断试错呢?原因在于,人类对于化学反应的微观机制不够了解,只能通过试错表现出的化学活性差异一步步进行筛选。其中一个难题就是反应活性位,即一个催化反应应在催化剂什么位点上发生。

催化实验工作者花了近百年试图回答这个问题,但成效甚微。基于密度泛函理论的计算化学产生后,给予了改变这一局面的机会。

对于胡培君来说,密度泛函理论就是他的画笔,它使用电子密度表述体系能量。可以说,有了密度泛函理论计算,才有了现代理论催化。

在画笔的帮助下,胡培君课题组发现了反应活性位的基本规律,并提出了预测反应活性位的理论架构。

幸运与传承

在人群中,一眼就可以辨认出胡培君:瘦

弱而精神,亲切而随和。华东理工大学化学学院副教授王海丰从学生时代开始,就跟着胡培君做科研。在他看来,“老师是一个非常有魄力的人”,对科学研究具有相当的前瞻性。

“他不满足于计算催化在传统化工领域的应用和研究,希望能更多地在光电化学中展开研究,寻找可替代白金的电极催化材料就是其中一个方面。”王海丰说。

胡培君总说自己是一个幸运的人,但事实上,伴随着幸运的永远是付出和努力。

“他是一个非常学术化的专家,会把大部分时间花在思考问题上。”王海丰说,作为外籍教授,胡培君每年在国内的工作时间有五个月左右,还要顾念在国外患病的妻子。

胡培君是一个敢想敢干的人,他也希望年轻人在做科研时能大胆探索。“胡老师对我影响很大。”王海丰说,无论是在学术上,还是在培养学生上,他都深受胡培君的影响。“我会很自然地把他的一些理论和方法传递给我的学生。”

以前,胡培君希望自己的人生能解决1~2个重要的催化问题。现在看来,已超过他的预期。“在未来5~10年,计算化学的价值将会更大。”胡培君说,计算化学解决了化学领域的一些经典科学问题,也大大提高了催化剂应用研究的效率,“中国在这一领域的水平正在迅速提高”。

简讯

京津冀科协共推科技成果转化合作

本报讯5月13日,京津冀三地科协在京签署《科技成果转化平台合作协议》,致力于推动三地科技项目和科技产品成果的互联互通,为科技社团和科技工作者提供科技成果转化服务。

根据协议,京津冀三地科协将分别建立科技成果转化平台,通过联网建立数据库、专家库、评价体系、服务规范,实现资源共享;依托中关村天河科技成果转化促进中心已经建立的科技成果市场成熟度转化评价体系,对科技成果进行评价转化,推动科技社团参与,到以企业为主体、市场为导向、产学研结合的技术创新体系建设;开展培训、评选、竞赛等活动,培养科技企业创新人才;与金融机构合作,为科技成果转化提供金融支持。(倪思浩)

上海首场科学会堂草坪音乐会举行

本报讯近日,上海首场科学会堂草坪音乐会举行,包括国家最高科技奖获得者王振义、著名天文学家叶叔华等在内的40多位两院院士参加。

音乐会由国家一级指挥曹鹏执棒,与上海城市交响乐团给观众带来了《雷电波尔卡》《一步之遥》《保卫黄河》等交响乐曲目。

据悉,从今年起,上海科学会堂草坪音乐会将分别于春秋两季举行,旨在形成服务上海高层次科技、创新人才的高雅艺术活动品牌。(黄辛)

发展中国家太阳能应用管理官员研修班兰州开班

本报讯5月12日,来自阿塞拜疆、巴基斯坦、约旦、委内瑞拉等14个国家和地区的34名官员及技术人员,在兰州开始为期28天的新能源技术培训,以应对全球经济增长引发的能源紧张和环境恶化现状。

受商务部委托,由甘肃自然能源研究所承办的“2015年发展中国家太阳能应用管理官员研修班”当天在甘肃自然能源研究所开班。

甘肃自然能源研究所所长喜文华表示,中国各种太阳能、风能技术和产品无论是数量还是质量,都达到或接近国际先进水平。同时,在太阳能、风能利用方面积累了丰富的经验,掌握了许多适合发展中国家的太阳能、风能技术。“中国愿将这些成熟、先进的技术和经验与发展中国家的朋友们一同分享。”(刘晓倩)

东软慧鼎人才资本研究院在京成立

本报讯5月12日,由东软集团发起、中国首个聚焦人才资本管理与实践的平台性组织——东软慧鼎人才资本研究院(以下简称NTCI)在京成立。

据了解,作为东软慧鼎人才资本管理系统的衍生平台性组织,NTCI不但可分享优秀企业管理实践,还可直接在IT信息化工具中检验新理论与新方法,保证管理与实践的对接,从而真正实现人才资本落地。(张楠)

阿里巴巴助力“云上迪拜”

本报讯近日,迪拜领军企业——Meraas控股集团和阿里巴巴集团旗下的云计算子公司——阿里云正式签署合作协议,合资成立一家全新的技术型企业,为中东、北非地区的企业以及政府机构提供以云计算为支撑的系统集成服务。

据悉,合资公司总部设于迪拜,将专注于应用程序的开发,面向服务架构的搭建、测试与验证以及面向公众的计算服务,并在大数据分析、创收和支付解决方案等领域深耕。

Meraas控股集团总裁阿卜杜拉·哈拜表示,合资公司将为迪拜的交通、通讯、城市基础设施、电力、经济服务和城市规划等6大支柱领域提供服务。(彭科峰)



5月13日,一位厂家代表在展会上介绍汽车生产用的3D扫描设备。

当天,2015北京国际工业智能及自动化展览会在北京展览馆开幕。来自中国、德国、日本等近200家国内外领先的自动化企业参展。展览会分为工业机器人、传感器连接器、运动控制、机器视觉、3D打印、德国国家展团等6个专区。

新华社记者李欣摄

学术·会议

第三届亚太地区果蝇研究大会

中外专家聚焦果蝇研究最新进展

本报讯(记者丁佳)由中科院遗传与发育生物学研究所主办的第三届亚太地区果蝇研究大会于5月11日~14日在北京会议中心召开。来自中、美、日、韩等十多个国家和地区的380余位科研人员参会。

此次会议主题涵盖遗传进化、发育机制、信号转导、生理与代谢、干细胞研究和神经生物学等领域,并设立中国会议专场。来自美国洛克菲勒大学和卡内基科学研究所的专家将

为大会作特邀主题报告,40余位优秀科学家分领域作特邀报告,探讨果蝇研究的最新前沿进展,并展望该领域的未来发展。

据悉,此次会议代表了亚太地区果蝇研究的整体水平,将为促进亚太地区果蝇研究专家加强学术交流、开展实质性合作提供机会。

黑腹果蝇,俗称果蝇,是经典的模式动物,对遗传学和发育生物学的研究起到关键作用,并且推动了多个基础和交叉学科的发展。利用

果蝇体系研究生命科学的基本问题多次获得诺贝尔奖。目前,我国有70多个实验室以黑腹果蝇作为实验材料,进行生命科学和基础医学的研究。

为促进亚太地区果蝇研究者的交流合作,2011年中国科学家和亚太地区果蝇研究同行发起了两年一次的亚太地区果蝇研究会议,成为与欧洲果蝇研究会议、美国果蝇研究会议一样具有国际影响力的地区性果蝇研究会议。

循环经济产业转移承接项目对接会

京津冀地区打造再生资源产业链

本报讯(记者高长安)5月10日,京津冀循环经济产业转移承接项目研讨对接会在河北定州举行。记者从会上获悉,京津冀地区将打造再生资源产业链。

会上,国家发展改革委环资司相关负责人介绍说,生态环保将成为京津冀协同发展规划中率先突破的领域之一,循环经济、再生资源行业的发展将作为其中的重要组成部分。在京

津冀区域层面,将打通再生资源产业链和产业链,进行资源优化配置。

当天,北京华新绿源环保产业发展有限公司等3家企业与定州(北方)再生资源产业基地签约入驻,由此拉开京津冀再生资源产业对接的序幕。

据了解,定州再生资源产业发展已有30多年,实现10万多人就业。从2014年开始,该

市规划了占地1万亩、总投资200亿元的再生资源产业基地。目前,一期用地4690亩全部完成收储,基地内分拣区、“三废”处理中心竣工,并吸引200多家初加工企业入驻。而根据新的规划,定州再生资源产业基地将重点发展橡胶回收加工、精深再制造、废旧机械电子精深加工、报废汽车拆解再利用、物流运输、节能环保新能源等6大产业。

科学释疑

光纤已达极限?专家称车到山前必有路

■本报见习记者 郭爽 实习生 李晨阳

回放: 据英国媒体日前报道,该国光纤即将达到设计容量的极限。根据预测,8年内,网线将达到发送数据的极限;20年后,英国所有电力供应只够供互联网使用。

质疑: 光纤真的已经达到极限了吗?互联网是否会耗尽所有电力?

释疑:

“每一种介质的传播都会有上限,这不可否认。但只是简单地说网速提高、互联网占据大量供电导致光纤达到极限,不太科学。”中科院信息工程研究所研究员徐震日前在接受《中国科学报》记者采访时表示。

“从科学的角度来讲,几乎每一种极限说法最终都不会成立。”资深电信分析师马继华表示,以前有人质疑摩尔定律会失效,某个处理器达到极限,但最后都会被突破。

“光纤的潜力目前并没有被开发完。”飞象网CEO、北京3G产业联盟副理事长项立刚告诉记者,即使一条光纤达到顶峰,还可以再建光纤,但成本会是一个大问题。

如果铺设第二条光纤,成本也许会成倍上涨,但整体收益又不会增加,这对于运营商来说会有压力。

“反过来讲,一旦成本不合算,靠物理性增加解决不了问题时,新一代技术肯定会出现。”马继华表示,当网络不够用时,人们就会建立新的网络,只是这需要有一个过程。

马继华说,网络对应用产生阻碍时,应用的创新也会减缓。这会使得整个网络流量得以控制,从而达到均衡,以等待整个技术的进步和网络铺设的完成。

同时,互联网对电力的消耗的确很大,但如今推出的很多应用或仪器也越来越省电。例

发现·进展

上海交大医学院等单位

发现儿童白血病耐药和复发原因

本报讯(记者黄辛)来自上海交通大学医学院附属上海儿童医学中心等机构的国内外科研人员组成的课题组,在国际上首次发现磷酸核糖核苷酸合成酶1(PRPS1)基因突变是儿童急性淋巴细胞白血病治疗出现耐药和复发的重要原因之一。5月11日,相关成果在线发表于《自然—医学》杂志。

儿童白血病治疗出现耐药和复发是导致患者死亡的重要原因,也是治愈率难以提升的关键所在。如何破解儿童白血病复发机制已成为这一领域的研究焦点。2009年年底,由上海儿童医学中心血液肿瘤科和国家人类基因组南方研究中心组成的研究团队,启动了临床样本的基因深度测序和突变基因识别工作,从而为最新研究的开展打下了基础。

据论文通讯作者周斌兵介绍,研究人员通过下一代高通量测序技术对儿童急性淋巴细胞白血病的初发、缓解后和复发样本进行全外显子组深度测序,生物信息学分析和国内外大样本验证,并通过蛋白三维结构分析和大量功能实验证实,PRPS1突变能导致肿瘤细胞内嘌呤核苷酸代谢的严重失衡。

课题组还通过循证研究提出了“代谢负反馈回路缺失”引发肿瘤细胞内代谢失衡和耐药的新理论。该项研究也为开展针对复发的儿童急性淋巴细胞白血病的精准医疗、研发诊断试剂和创新药物提供了重要途径。

相关专家表示,这不仅为儿童急性淋巴细胞白血病耐药及复发机制提供了新的理论依据,还有望使我国儿童急性淋巴细胞白血病治愈率在目前70%的基础上得到进一步提升。

中科院兰州化物所

制备出仿生毛毛虫结构自爬行驱动装置

本报讯(记者刘晓倩)5月11日,记者从中科院兰州化学物理研究所获悉,该所研究员周峰及其合作者利用仿生毛毛虫结构,通过在具有褶皱结构的聚二甲基硅氧烷(PDMS)表面接枝响应性的聚电解质刷,实现了具有各向异性、瞬间响应性等性能的驱动器装置,从而开辟了制备驱动器的新思路。相关成果日前发表于《微尺度》(Small)杂志。

大自然中的生物组织或器官都具备将物理、化学信号转换为肢体运动的功能。受大自然启发,科学家发展了一系列人造驱动器模拟这些过程,将外界的变化如电、热、光、化学能等转化为机械运动。在日前报道的各类驱动器装置中,具有湿度响应性的聚合物刷引起研究者的广泛兴趣。

周峰小组在PDMS弹性体薄膜表面,通过表面引发原子转移、自由基聚合接枝和具有湿度响应性的聚电解质刷模拟毛毛虫的运动。由于聚合物刷在基底表面比其他聚合物材料具有更高的结构归整度,因此有利于水分子在驱动装置中的扩散,提高了驱动速率。而聚合物链在湿度发生变化时会发生可逆性溶胀、收缩,使得装置响应非常快。同时,褶皱取向决定卷曲方向。通过控制褶皱,可制备复杂三维结构,比如螺旋、梯度弯曲。褶皱运动还可模拟一些生物体的取向运动如毛毛虫的爬行,通过身体皮肤的扩张收缩改变其表面褶皱形状和运动。

中科院地化所

发现长江有机氯农药迁移途径

本报讯(记者彭科峰)日前,中科院地化所在长江水沙搬运对有机氯农药长距离迁移及归趋影响研究中取得进展,相关成果发表于《环球科学与技术》杂志。

随着有机氯农药在全球范围内的削减乃至禁用,这些传统的持久性有机污染物逐渐从一次来源排放,转为从环境介质中的二次来源排放。大河作为持久性有机污染物传输的重要途径之一,成为影响和控制全球二次来源有机污染物环境归趋的关键过程。

此次科研人员对长江搬运的有机氯农药进行研究发现,长江搬运入海的六六六类农药,有超过70%的部分通过水—气界面扩散交换重新释放到大气中。其中,会发生颗粒态向溶解态的显著转移,全年以大气净挥发为主。而滴滴涕类农药在颗粒态和溶解态之间并未发生显著转移,颗粒态滴滴涕仍以沉积物埋藏为最终归宿,这和长江径流、气团来源等季节变化有直接关系。

如,在笔记本电脑出现前,大量的台式机占据主导地位。随着技术的发展,笔记本可随时随地在身边,能用10个小时左右,这就是一个突破。还有智能手机的出现,其功能可媲美电脑,但用电量大大减少,能耗也在逐渐降低。

“IT设备虽说是功耗的大头,但不可能因此耗费全部电力。”徐震表示。

“目前之所以没有新技术产生,是因为现在铺设光纤的成本还比较低。当使用物理方法加铺光纤导致成本过高时,就会促进其他技术的开发。”马继华告诉记者,他认为,如果固定资源饱和,移动资源也可以分流。例如,卫星通信、直接互联都有可能替代光纤传输。

项立刚则表示,虽然目前光纤是最好的介质,但未来量子通信或其他介质可能会替代光纤。虽然这些技术还处于研究中,但随着科技的进步,技术难题总会得到突破。