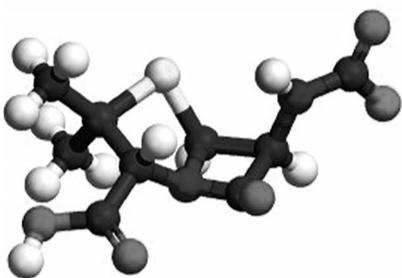


美3名科学家因何摘得化学诺奖

用电脑描绘化学过程

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。他们让借助电脑描绘化学过程成为可能。

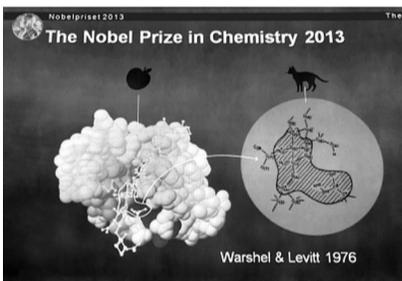
他们发明了什么?



你印象中的化学课是这样的:利用塑料球和小棍来建造分子模型



他们的研究使科学家用计算机来建模型,让电脑替代试管做实验



获奖原因
将化学实验搬到网络世界

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,这3名科学家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。

3人结合经典物理和量子物理,设计出多尺度复杂化学系统模型,将传统的化学实验搬到了网络世界。这一完美结合现实与理论的化学系统模型,为更全面了解并预测化学反应进程奠定了基础。

面对瞬间发生的化学反应,以及复杂电子毫秒间的快速运动,依靠过去用塑料球和小木棒来创建分子模型的办法,无法实现描绘化

学反应全过程的美好愿望。即使化学家选择使用量子物理学计算化学反应过程,繁杂的计算过程与巨大的计算量也只能应付小分子的化学反应。

多尺度复杂化学系统模型的出现无疑是化学界的革命。通过该模型,科学家实现了用电脑监控微小而瞬间的化学变化,从而能将催化等过程最优化。例如在模拟药物如何到达体内靶蛋白的实验中,电脑可直接对与药物相互作用的靶蛋白原子执行量子理论计算,精确分析出药物发生作用的全过程。

皇家科学院还说,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。

专家观点
卡普拉斯多年前就应得奖

清华大学化学系理论化学中心主任李隽教授介绍,理论化学界很早就已经认可了卡普拉斯,多年前大家就认为他应该获得诺贝尔奖。

李隽介绍,1998年,有两名理论化学家获得了诺贝尔化学奖。当时他们有效地发展了计算方法和计算程序,借助计算机,将量子力学的方程用于解决化学问题,使得化学不再是一门单纯的实验科

学。卡普拉斯三人获奖与1998年的获奖者相似,就是“如何将理论引入到化学之中,以及与化学有关的基础生物”,他们解决了“生物化学方面最核心的一个问题”。

李隽还说,计算科学在我国起步较晚,不过发展很快,“但原创性理论方面都是落后于国外的”。目前在计算生物化学方面,“应用他们的方法、程序和概念来解决生物化学的问题,在我国非常普遍”。

花絮
不怎么化学的化学奖

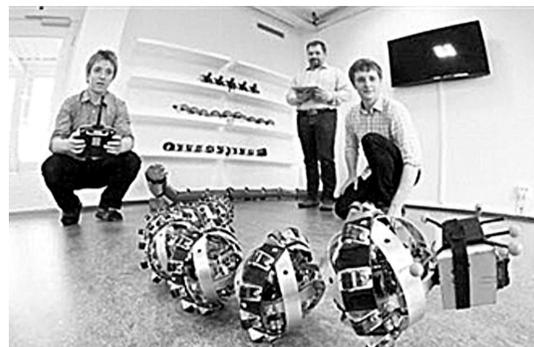
今年的化学奖获奖课题是不是让你感觉不那么化学?1901年以来,化学奖已颁发105次,纵观获奖名单,你会发现一个有趣的现象,就是有些年份的获奖项目实在不化学,有时偏生物学,有时偏物理学,甚至有时偏农业科学,这种理论趋势进入21世纪以来更加明显。

在化学奖上,除了纯化学领域获奖最多外,获奖次多的就是偏生

物学领域,2008年,美国生物化学家、钱学森堂侄钱永健和其他两位科学家因发现和改造绿色荧光蛋白而获奖。偏物理学领域也曾多次斩获化学奖,例如,1977年该奖项颁给比利时科学家普里高津,表彰其对非平衡态热力学的贡献,听着很物理吧?

也许是化学太容易与其他学科交叉了,1945年该奖项颁给提出饲料储藏方法的芬兰科学家。

趣图



科学家拟派机器蛇探索火星

从冰冷的北极到干旱的沙漠,蛇的足迹几乎遍布地球的每一个角落。现在,欧洲空间科学家计划将蛇的高智商用于探索一个环境更为恶劣的所在——火星地表。不过,他们派遣的并不是真正的蛇,而是挪威研究人员研制的机器蛇。

机器蛇由挪威特隆赫姆科技工业研究院的一支研究小组研制。目前,他们

正在研究如何利用机器蛇在环境恶劣的火星表面收集样本。研制中的机器蛇由10个相同的模块构成,通过“关节”连接在一起。每一个模块拥有2个自由度。这些模块表面覆盖被驱动轮,赋予机器蛇地面摩擦力,允许它在平坦的地面上行进。特兰塞斯表示:“我们正在研究一系列方式,允许火星车和机器蛇协同工作。”



潜水男孩模仿鱼类让海虾“刷牙”

据外媒报道,美国马萨诸塞州13岁男孩罗素·拉曼和他的父亲蒂姆·拉曼在巴厘岛潜水的时候,成功模仿了鱼类,张口让水中的虾类进入并帮他刷牙。

神奇的是,水下的白色带状清洁虾顺利进入到了罗素的口中并且开始取出罗素牙齿间的“食物”。“感觉像是牙医在我口中进进出出地做各种小动作”,罗

素兴奋地说,“有点痒但不是很厉害。”

罗素从6岁起就和父亲一起潜水,对水下活动有着丰富的经验。他发现水中的鱼类会依靠虾刷牙。他和父亲在一块凸出的海绵状岩层附近发现了一个“牙齿清洁站”,清洁虾在这里提供服务。罗素大胆地在这里进行了尝试。

新款飞行背包
可抵达
2438米高空

新西兰设计师格伦·马汀花费了30年时间研制空中飞行背包,目前,最新款飞行背包可使用户能够在空中像超人一样飞行。

这是马汀第12次改良飞行背包,此次在结构设计上进行了微调,具有更好的性能和机动性。驾驶者携带飞行背包,可在空中保持站立姿态,使用控制器来操控两个垂直发动机,从而模拟喷气发动机的运行,测试结果显示,可抵达2438米



高空,飞行时速72.4公里。

虽然这款飞行背包未来将作为娱乐设备,但是科学家认为它可适用于现场急救装置。

落水相机
漂流1800公里
有助飓风研究

美国得州男子林顿日前在海滩遛狗时发现一台防水相机,于是把相机交给警方。警方后来靠着相机中的照片背景联系到失主。失主班克斯在相机失而复得后惊讶地说,这是她9个月前去开曼群岛旅游时遗失的,没想到相机在海上漂流了9个月,行程至少1144英里(约1841公里),并且还没坏。



除了失主失而复得之外,研究人员也相当高兴。他们说,可以靠着这台相机的漂流方向,了解飓风在墨西哥湾的移动路径。(本版稿件均据新华社)

南非科学家发现首个彗星曾撞击地球证据

据报道,一个南非科学家小组及其国际合作伙伴近期找到了首个证据,证明曾经有一颗彗星冲入地球大气层并发生爆炸,高温冲击波摧毁了其所经过路径上的所有生物。这项发现不仅提供了首个确凿的证据证明在数百万年前曾经有彗星撞击地球,未来它也将帮助我们理解太阳系的形成之谜。

南非金山大学教授大卫·布劳克(David Block)表示:“彗星时常造访地球的天空,它们实际上就是一些冰雪物质和尘埃混杂在一起的脏雪球,但在此之前人们还从未在地球上找到过确凿的可被证明是源自彗星的物质。”

在大约2800万年前,一颗彗星在今天的埃及上空进入地球大气层。在其进入大气层之后便发生了爆炸,将其下方的沙漠加热至超过2000摄氏度,这一情形的结果便是形成大量黄色的硅酸盐玻璃,散布在撒哈拉地区面积超过6000平方公里广阔地域范围内。在古埃及图坦卡门王法老身上佩戴的装饰中发现了这种玻璃的一块样品。

这项研究将于近期发表于《地球和行星科学快报》上,研究组成员来自南非约翰内斯堡大学,南非核能公司以及开普敦大学等机构。最初引起研究组注意的是数年前埃及地质学家们发现的一些神秘的硅酸盐玻璃。在对这一样品进行复杂的高精度化学分析之后,研究组确信这是首块被找到的源自彗核的手表本,而不仅仅简单的来自陨星的样品。

来自南非约翰内斯堡大学的詹·克莱默(Jan Kramers)是这项研究的首



艺术示意图:一颗彗星冲入大气层,在埃及上空发生爆炸

席科学家,他称那是他感到极度兴奋的一刻,他说:“这是典型的科学发现带来的乐趣——当你排除所有可能性,并因此终于意识到它必定是什么东西的时候。”那次临空爆炸还同时产生了大量显微钻石。克莱默表示:“钻石是含碳物质的一种形式。一般情况下它们形成于地球深处,那里的压强非常大,但是当遭受冲击时同样会产生这种高压环境。彗星的撞击及其产生的冲击波产生了这些钻石。”研究组已经决定将这块含有钻石的样品命名为“希帕蒂亚”(Hypatia),以纪念古代埃及亚历山大城杰出的女性数学家,天文学家和哲学家希帕蒂亚。

彗星物质非常难以辨别。在此之前,除了在地层大气中发现的微型尘埃颗粒以及在南极洲的冰雪之中

发现的一些富碳尘埃颗粒之外,人们还从未在地球上发现过彗星物质。各国的空间机构都宁愿花费巨额资金来确保这些极其珍贵的原始彗星物质样品的安全。

克莱默表示:“美国宇航局和欧洲空间局花费数十亿美元的资金发射飞船采集数微克的彗星物质样品并将其带回地球。而现在,我们有了一种完全不同的从事这项研究的途径,而不再需要花费数十亿美元的资金。”

对样品“希帕蒂亚”的研究现在已经扩展为一项国际性研究项目,综合了来自各个不同学科的研究人员。布劳克表示:“彗星蕴含着揭示太阳系起源的秘密,而这项发现将给予我们一项前所未有的机会去研究第一手的彗星材料。”