

# 强化理论与计算的参谋作用， 提高化学探索研究的效率

化学研究的目的是探寻化学物质的组成、结构与性能的变化规律,并用获得的知识造福人类,为社会的生存、发展与进步提供物质支撑。化学研究成果在人类生活中发挥巨大作用。事实上,化工、材料、能源、信息、环境、医药和农业等产业在发展过程中解决的很多问题,关键在相关核心化学问题的突破。

早期化学是“纯经验”科学,依靠实验试探总结经验、找寻规律、建立理论,摸索前进。尽管取得了很大的成绩,但探索过程盲目性大、效率较低,进展缓慢。量子力学建立后,化学过程的物理基础清楚了,化学变化的规律和变化过程原则上是可以理论预测的。狄拉克在1929年指出:“全部的化学基本规律已经完全知道了,困难只是在于运用这些规律得到的数学方程太复杂,无法求解。”由于计算能力的限制,狄拉克的论断对于当时的化学研究没有提出解决办法。20世纪30年代提出的价键理论和分子轨道理论成为指导化学研究的有力理论武器,探索前进的速度显著提高。但价键理论和分子轨道理论只能给出定性结论,化学研究多年来还是在很大程度上依靠实验试探。实现化学研究模式革新,无疑将提高化学探索研究的效率。

从20世纪50年代开始,计算科学技术加速进步,各行各业都在发挥计算科技的作用,改变了整个社会的运行形态和人类生活方式,也助力化学进入发展新阶段。狄拉克论述中提到的数学困难逐步得到解决,得益于计算科技的进步,理论与计算化学取得重要进展。1998年,诺贝尔化学奖授予量子化学家约翰·波普尔和瓦尔特·科恩,授奖理由为:“化学理论和计算的研究



黎乐民,广东电白人,物理无机化学家,中国科学院院士。北京大学化学与分子工程学院教授,主要研究方向为量子化学、理论无机化学、稀土化学等。

有很大进展,其结果使整个化学正在经历着一场革命性变化。”“化学不再是纯实验科学。”2013年诺贝尔化学奖授予理论化学家阿里耶·瓦谢勒、马丁·卡普拉斯和迈克尔·莱维特,授奖理由为:“电脑和试管对化学家一样重要。”“通过模拟,化学家能获得比传统实验更快速、更精准的预测结果。”这表明化学发展踏上新台阶,不再单纯凭经验摸索前进。

由于计算能力的限制,迄今理论计算只能对简单化学问题给出满意的定量结果。不过近年来计算科技进步神速。2018年计算机峰值计算能力已经达到 $10^{17}$  FLOPS量级,现在正向 $10^{18}$  FLOPS量级迈进。计算能力的快速提高给通过理论与计算解决复杂化学问题提供了契机,为理论与计算化学创造了大好发展机遇,应该及时抓住。

化学在从“必然王国”走向“自由王国”的进程中,理论与计算应该成为得力的“参谋”,帮助开拓新思路 and 将思维精密化。化学问题很复杂,在实验研究中理论分析很重要。但定性思考一般不能得到明确结论,需要通过计算将思维精密化。现代计

算能力的极大提升使得这种让思维精密化的作用凸显出来。理论计算方法可以在化学前进的征途中起“参谋”作用,通过计算将思考精密化,在实验前预测结果,减少探索研究的盲目性。理论与计算方法应该成为化学借力计算科技进步踏上发展新阶段的“杠杆”,推动化学研究逐步改变传统的经验摸索模式,实现研究模式革新。

尽管很多化学家认识到应发挥理论与计算对化学实验研究的启发、指导作用,但目前理论计算与实验研究还没有紧密结合,理论与计算起的“参谋”作用不显著,化学研究普遍还是采用实验试探方法。出现这种情况,主要原因有两个:一方面对于实际的化学实验研究对象,理论计算结果可靠性和精确度还不尽如人意;或者计算量过大,难于进行高精度计算。随着计算能力的快速提升,结合理论与计算方法的进步,问题将逐步得到解决。另一方面是没有足够方便的计算软件可供使用,一般实验研究人员不易掌握专业性很强的计算方法。只要有方便使用的计算软件和计算设备,实验化学家也会像使用红外光谱仪、X-射线衍射仪、核磁共振谱仪等设备一样,配合实验探索进行理论计算,使理论思考精密化。理论与实验研究紧密结合是利用计算科技进步助力化学发展的关键。功能全、效率高、使用方便的计算软件是实现理论与实验研究紧密联系的桥梁。在稳定支持理论和计算方法研究的同时,应该充分重视计算软件开发。

黎乐民

(北京大学,北京 100871)