

# 计算化学改善生活

现在，电脑已经模拟自然界的许多事物。比如，不少科幻影片中未来世界的场景都是电脑模拟出来的，因为在现实中找不到那样的场景。同样，用现有的各种技术手段都难以观察到复杂化学反应中的快速变化过程，而用电脑可以模拟这样的过程。这样的研究领域被称为计算化学。有三位科学家因在计算化学领域做出了突出贡献而获得了2013年诺贝尔化学奖，他们分别是美国理论化学家马丁·卡普拉斯、美国斯坦福大学生物物理学家迈克尔·莱维特和南加州大学化学家亚利耶·瓦谢尔。

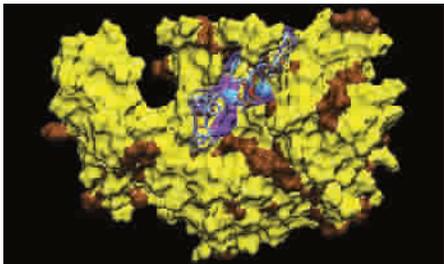
20世纪六七十年代，虽然老百姓并不知道电脑为何物，但是电脑已经成为一些科学家的好帮手。在化学研究中，引入电脑让化学家对复杂化学反应的描述变得可行。卡普拉斯、莱维特和瓦谢尔就是这些化学家中的杰出代表，他们是利用新的技术手段进行科学研究的先行者。瓦谢尔在获奖后接受采访时说：“简单地说，我们的研究就是借助电脑分析蛋白质的结构，最终了解蛋白质的工作机制。”

每年的诺贝尔科学奖大多数都会让人觉得十分深奥而遥远，不少人心或许都有一个共同的疑问：这些成果是不是只是科学家的自娱自乐呢？这些成果对我们的日常生活究竟有多大帮助呢？其实不少研究成果都在直接或间接地改善我们的生活，获得2013年诺贝尔化学奖的相关成果更是可以很直接地改善我们的生活。诺贝尔化学奖评选委员会在发表的声明中说，对化学家来说，电脑是同试管一样重要的工具，电脑对真实生命的模拟已为化学领域大部分研究成果的取得立下了“汗马功劳”。通过模拟，化学家能更快获得比传统实验更精准的预测结果。

首先，计算化学可以更好地理解复杂化学反应的机制。无论



■ 感受电脑模拟出的分子立体模型



■ 电脑模拟出复杂的生物大分子结构



■ 科学家用电脑分析复杂分子的化学结构

是高分子材料的研究，还是对生物体内一些生化反应原理的研究，都可以给我们带来实惠。比如，研究高分子材料的合成过程，可以更好地了解可以对反应过程中的哪些原子基团进行控制，从而可以生产出性能多样的“功能性材料”，这些独特的材料可以用于制造性能更优良的电器和交通工具。又比如，研究健康细胞转化为癌细胞的过程，可以知晓那些生物大分子产生了什么样的变异，研究透彻这些变异所涉及的

分子区域，可以开发出针对性较强的药物。

其次，计算化学可以为合成新物质提供线索和指明方向。在电脑应用到化学研究之前，化学家合成所需新物质的方法是不断尝试，利用不同的物质来多次的交叉尝试，最终找到合适的原料。这样的研究方法费时费力，且浪费原材料和实验室资源。有了电脑之后，化学家就可以先用电脑进行模拟实验，排除那些明显不可能的反应路径，找到几条最有

可能的路径。比如，在新药的开发中，药物化学家们则在进行化学合成和生物学实验之前，应用不同的电脑筛选程序，将那些不太可能成功的化合物提早淘汰掉，选择可能有效的候选药物。另外，药物化学家们还可以利用电脑程序来预测候选药物在体内吸收、分布、代谢、排泄及其毒副作用等特点，这样在进入临床前实验之前，就可以将那些不合格的品种排除在外。

杨先碧

谷歌与英特尔每年都要主持一个令人印象深刻的科学竞赛。今年，来自120个国家的青少年提交了从诊断疾病、智能手机新应用，到创建外骨骼等众多项目。得奖名单刚刚宣布，来自加拿大的女孩安·马克辛斯基赢得15-16岁年龄组的优胜。而她的致胜法宝，是一款名符其实的“手电筒”，它不需要电池，不需要化学品，不需要动能。只要用手握着，手掌的热量就能让它点亮，还不产生任何噪音或振动。

空心手电筒的关键部件，是4片帕尔帖电热片。这种电热片在其两侧温度有差异的状况下会产生电流。马克辛斯基巧用了这种特性，让手掌加热电热片的一侧，另一侧则用散热片冷却，造成稳定的温差，研制了功率5.4毫瓦、真正用手点亮的电筒。

马克辛斯基对人体的理解十分有趣，她认为人就像是“会走动的100瓦灯泡”。因此值得研究如何将人体散热利用起来。她计算过，人体的辐射为5.7毫瓦/平方厘米，而点亮LED仅需0.5毫瓦。

她试用了两种帕尔帖电热片，尽管都能发出直流电，但只有区区几毫伏。而她需要至少2.5伏！必须转换为交流电，才能升高电压。她在一个戏称为“焦耳窃贼”的网站上找到电源转换器集成电路LTC31088的资料，用反馈场效应晶体管构建一个振荡器，实现升压比为5:125的变压。实验中，当振荡器工作电压升至120毫伏时，LED开始发光。

她最终的电路由4个部件组成：IC、升压比1:100的电压器、47微法电容，以及LED。她以50毫伏的直流电得到5伏的交流电，足够点亮LED。

她设计的手电筒有内外两层。内层为直径25毫米、长度125毫米的铝管，镶嵌着4片总面积为16平方厘米的帕尔帖电热片，再置入包裹绝缘泡沫的PVC管里。使用者的手掌通过PVC管的开口握到电热片，使其外侧发热。铝管是空心的，内部流通的空气对电热片内侧进行冷却。结果是，实现了至少5摄氏度的温差，手电筒发出明亮的光线！

外出步行测试中，在10摄氏度温差下手电筒的照度超过50勒克斯，手电筒光束平稳时间超过20分钟。这证明了她一开始的认知：尽管有温度和电压转换的损失，手掌仍有足够的能量提供可用光线。而计算表明，手电筒的实际功率是理论功率的20%，这也是相当不容易的。

马克辛斯基表示获奖是个很大的启发，让她更主动学习，自信地选择职业。5万美元的奖金让她能配备更先进的设备和材料，更有效地设计；而奖励的加拉帕戈斯群岛之旅让她能遇到同样热爱科学的人。

她希望未来能提高转换效率，使手电筒更加明亮。对前景她充满信心，认为这项技术有无限的可能性。想象一下，握着手机通话的同时为手机充电；教室的椅子上贴帕尔帖电热片，用她的手将收获的热量放大、转化为电能收集起来。当然，更有希望把这一技术用于无线医疗传感器的供电。 凌启渝



■ 外层的开口让手接触到嵌入的电热片

## 用你的手点亮「手电筒」

# 猫咪眼睛里的世界



细线，尽量减少光线的射入，以保护敏感的视网膜不受伤害。就像调节照相机快门一样迅速，猫的瞳孔通过阔大和缩小保证了猫在快速运动时能够根据光的强弱和被视物体的远近，迅速地调整视力，对好焦距，明视物体。

如同进化成可以在夜里捕猎的其它动物一样，猫眼球里有反光膜，能够放射眼睛后面的光线，使之能被视网膜再次吸收，这也是它们的眼睛看起来闪闪发光的原因。加上椭圆瞳孔和大型角膜以及绒毡层，猫的视力在昏暗的光线中比

人类的强6-8倍。

然而对于远距离物体来说，猫的视力却要更差。人类可以清楚看到远至30米远的目标，而它们的视觉距离仅为6米。研究表明，猫科动物可以看见蓝色和黄色，却不能看见红色、橘黄色和棕色。在它的眼中，整个外部世界都是深浅不同的灰色。而人类的眼睛由于具备极强的分辨率，因此能欣赏到很多鲜亮的色彩。这从分享拉姆提供的照片中可以清楚感觉到：在猫的视图中，远处的景物模糊不清，看上去很像被洗过一样；而景物在人类视

觉的图片中清晰可见，层次分明。

正如视觉对比所发现的，猫的视野很宽，单独视野在150度以上，没有距离感，共同视野在200度以上，有距离感，而人类的视野仅有180度左右。猫每边的周边视野为30度，而我们只有20度。猫只能够看到光线变化的目标，所以它们在看东西时常常要稍微地左右转动眼睛，使眼前的景物移动起来。猫擅长于捕获快速移动的猎物，而人类却以抓住缓慢移动的物体或动物见长。

李忠东

在猫咪的眼睛里，世界究竟是什么样子的呢？从形状上来说，它们的眼睛和人类的眼睛没有太大的区别。然而随着时间的推移，它们的视野有所改变，以满足不同的需要。最重要的是，猫科动物必须在黑暗中感知猎物的运动，以便将其捕捉。为了使这种能力得到充分地发挥，它们不得不做出一些牺牲，因此缺乏人类眼睛的精确感和色彩感。虽然它们眼中的世界和人类是相似的，但是在某些方面又有所不同。

美国艺术家尼古拉·拉姆把观察猫咪眼睛里的世界作为他最新的研究课题，将拍摄到的猫视野中世界的图片上传到网上。他征询了密歇根州动物眼科诊所、美国动物眼科研究所和宾夕法尼亚州大学兽医学院眼科组专家的意见，尽可能地确保照片准确无误。为了便于对人类视觉和猫科动物视觉的差异进行对比，同一场景分别出现在照片上下两部分：上面部分是人类看到的，猫的视图出现在下面部分。

猫的视力之所以敏锐，即使光线很弱甚至夜间也能分辨物体，在于眼球里的视杆细胞数量多。视杆细胞是视网膜的感光器之一（负责眼睛感光的任务还有视锥细胞和产生黑视蛋白的特殊视网膜细胞），有较高的光敏度。在黑暗的环境中，猫的瞳孔开得很开，尽可能地增加光线的通透量。在白天日光很强时，瞳孔几乎完全闭合合成一条