

# “多尺度模型”计算神秘化学反应

## ——上海交大教授解读本年度诺贝尔化学奖

昨天,本年度诺贝尔化学奖揭晓,犹太裔美国理论化学家马丁·卡普拉斯、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,因开发多尺度计算模型处理复杂体系的化学反应而分享奖项。他们的研究融合经典力学和量子力学领域,通过计算机程序模拟复杂的化学过程,让科学家能够了解和预测其中细节。

### 化学反应“可以计算”

化学反应以光速进行,电光火石之间,电子已经在原子核之间跳跃着躲避科学家们的窥探。借助实验方法描绘化学过程中每一步微小步骤,已经很难满足科学探究的步

伐。上海交通大学化学化工学院教授孙准表示,1998年,计算化学首次获得诺贝尔化学奖,得主之一约翰·波普发现的多种量子化学计算方法,使人们得以弄清楚小分子的性质和它们在化学反应中的行为,让人们了解那些不可能完全通过实验观测的化学过程。实际上,如今化学家们的实验,早已不仅仅在实验室中进行,瞬息变化中的化学世界通过计算逐渐清晰。

化学反应是极其神秘而复杂的,孙教授举例解释,“一个蛋白质分子里有成百上千个原子,但化学反应往往发生在其中的一个小区间。量子力学能够精确描述例如酶催化等小区间的化学反应,但小区

间不是孤立的,整个环境也需要纳入研究考量。”今年获奖的三位科学家,将量子化学和分子力学计算相结合,用量子化学计算小区间的化学反应,用分子力学处理环境的影响,弥补了分子力学无法模拟反应过程及量子化学无法完成海量计算的缺陷。诺奖官网上一幅“牛顿和薛定谔的猫和平共处”的有趣插画寓意,今年化学奖为原本相对独立的两个世界开启了一扇合作之门。

### 建“多尺度计算模型”

三位科学家的开创性研究始于上世纪70年代,他们成功地建立了上述算法,并处理了诸如视网膜分子由自由电子运动造成的结构变化的问

题。此后,经过长期努力,科学家们建立了更加准确和普遍适用的量子化学和分子力学结合的多尺度计算模型。

孙准表示,这种方法具有普遍性,从化学、生物学、材料学到工业应用都可以研究,越来越多的科学家在用这种方法进行研究。例如,科学家们以此优化药物设计,揭示植物光合作用的机制并制造出更高效的太阳能电池,还可以通过研究催化水分子的分解来开发更多清洁能源等等。

### 将应用于更多领域

多尺度的概念并不局限于电子尺度的量子化学计算和原子尺度的分子力学计算。孙教授表示,目前科

学家的研究正在从原子尺度向超原子尺度过渡。例如蛋白质能够在很短的时间里自组装(折叠),但用计算方法在原子尺度上预测蛋白质折叠仍是遥不可及的任务。通过把几个乃至几十个原子作为一个位点来考量,可以有效地扩大计算范围,有望在计算机上实现蛋白质折叠,进而了解蛋白质的功能和结构的关系,为了解蛋白质的变异,揭秘疾病产生的原因提供有力的研究工具。

孙准介绍,目前中国科学家也在相关领域积极参与研究,但对多尺度模型的建立研究还在初始阶段。但他认为,计算化学必将在生物科学、材料科学、化学化工等领域带来新的突破。 本报记者 易蓉

# 江苏酝酿新高考方案 英语拟不再计入总分

## 上海考试院:明年高考科目不变

昨天,江苏省传出未来高考改革的“重磅”消息,英语科目将不再计入总分,而是以等级形式呈现,由高校录取时自行确定生源的外语水平标准。记者从上海市教育考试院获悉,至少明年本市的高考科目组仍将保持现有格局。

### 一年两考更有利

此次江苏酝酿的新高考方案,颇具亮点的是尝试探索英语学科的“一年两考”:成绩不再计入总分,而是以等级制形式计入高考成绩;各高校在录取时将对外语等级自行提出要求。不过,即便是在江苏省内,已有教育界人士提出,英语尝试“一年两考”,在操作上会遇到较大的困难——在时间安排上,有一考肯定会在6月的全国统一高考时间内举行,但另一考的时间究竟放在何时是一个“艰难选择”,且均会陷入有利有弊的境地。但从另一方面来说,由于是等级制,这也在很大程度上减少了一些考生为求多考几分而参加第二次考试的“刷分”现象,对大多数学生来说,并不会增加学业负担。

而在复旦附中副校长吴坚看来,给英语学科多一次高考的机会肯定是件好事,考生的机会更大了。特别是选择6月之外的时段参加一次英语考试,那就更能集中精力应对统一高考时的其他科目。

### 高考改革先微调

外语教学历来是我国基础教育的“重中之重”,因此,有关外语科目在高考中的“进退”,都会被视作在为高考改革探路。比如,山东省教育厅公布的2014年普通高校招生方案,英语等外语听力考试不再纳入夏季高考统一考试内容。对此,正面的评价是此举

有望扭转当前的全民英语现象,但质疑的声音是取消听力考试会助长“哑巴英语”,不利于素质教育。

吴坚说,现有的高考模式有一个很大问题,就是只看各科的考分累加,谁总分高谁就占有录取的优先权,看似公平,实则并不能真正测评出考生的具体学业状况。现在有些地方从外语科目入手,对高考方案做些微调,逐渐采用等级制、多次考试等方式,这对推动高考改革都是有益的尝试。

### 必须先改进教学

如果江苏的方案得以实施,将来985高校可能会要求高考生的外语必须是A等,一般本科院校的非外语专业可能会要求B等,而高职高专的某些专业可能只要求考生达到C等就行。这会不会冲击现有的外语教学质量?对此,浦东中学校长、英语高级教师倪瑞明说,在更趋开放的国际化社会里,外语已经不再是一门“学科”,而更多地回归它的工具属性,成为每一名高中毕业生应当具备的一种能力,所以,不用过于担心英语不列入高考总分而带来的负面影响。其实,需要讨论的并不是高考科目中有没有外语,而是外语考试如何更好地适应工具性教学的要求,不是简单地背单词、考语法,不是机械地围着习题转,而是要让学生更好地听说读写。

记者昨晚从市教育考试院获悉,明年本市的高考科目仍保持平稳,没有调整科目总分的考虑,但从2015年起,本市将实施调整完善后的普通高中学业水平考试制度,届时对高考的变动与影响,才是考生们需要密切关注的。

本报记者 王蔚

# 132名教师入选中小学班主任带头人工作室

本报讯(记者 陆梓华)经各区县教育行政部门推荐审核、专家面试和网上公示,市教委昨日公布上海市第二期中小学班主任带头

人工作室学员名单,132名本市中小学校(含中职学校)教师入选。

据悉,名师工作室旨在鼓励教师坚守立德树人育人理念,立足

班主任工作实际,加强理论研修和实践探索,不断增强班主任工作的使命感和责任感,努力提升班主任工作能力和专业化水平。



### 重阳节送医上门

派医务人员携带设备上门,为敬老院老人提供心电图、心脏彩超等检查。昨天,上海远大心胸医院举办“九九重阳节,浓浓敬老情”爱心敬老集体签约仪式。医院将为全市20多家养老机构及徐汇、长宁等四区的癌症俱乐部提供心胸疾病检查、健康讲座及药品配送等服务。

图为老人在敬老院接受上门心脏彩超检查

本报记者 孙中钦 摄影报道

# 北大“慕课”中学生或可先修

## 以此探索自主招生新评价机制

本报讯(记者 易蓉)继春季学期推出7门共享课程,本学期开始复旦大学《人类与核科技发展》、上海交通大学医学院《急救与自救技能》、同济大学《珠宝鉴赏》等14门共享课程在上海高校课程中心上线开课。北京大学新增3门课程近日登录Coursera,至此北大已有10门课程登录国际“慕课”平台。

### 混合式教学效果佳

中国式MOOCs(massive open online courses),大型开放式网络课程,俗称“慕课”)长三角论坛日前在复旦大学举行,来自国内80所高校800余名教师参会。与会嘉宾提出,“慕课”在推进高等教育改革、为教育资源均衡方面做出有益尝试,而将其作为辅助工具、与线下实体课堂面授讨论的混合式教学模式,其实更具生命力。北京大学副校长、中科院院士高松教授同时透露:北大将尝试将“慕课”作为大学先修课程向中学生开放,并以此探索自主招生新评价机制。

随着越来越多的内地高校试水“慕课”,与国际平台强调的自由和自学相比,国内学生是否已经适应在线课堂带来的教学变革?高松表示,北大校内正有不少老师积极探索“慕课”带来的教学变革,今年登录EDx和Coursera的课程(EDx与Coursera为两大世界顶尖高校牵头创立的免费大型国际公开在线课程平台),涉及多个领域,目前已经有超过2万学生注册本月刚刚上线的课程,其中一门《生物信息学》有5000人同时注册选修。

### 中学生有望上“慕课”

在探索在线课程服务社会、辐射联盟院校的同时,北大正研究将“慕课”作为大学先修课程向中学开放,并以此作为自主招生资质的评价之一。“目前,我们采用培训中学教师的方式教授5门先修课程,考虑不妨通过‘慕课’平台,让学有余力的学生直接选修例如《大学化学》这样的北大‘慕课’。”至于在线学习带来的效果和诚信问题,高松

表示可以通过考试统一、中学监督等方式解决。

### 课程共享均衡资源

对于更多的高校学子,“慕课”带来新鲜感的同时,也挑战自主学习的动力和毅力。对此,上海高校课程中心主任、交大医学院副院长黄钢表示,“慕课”式教学带来的理念和技术将促进高校内部开展教学改革,但单纯将课程搬到网上,并不能解决主动学习的问题。黄钢认为,线上学习+线下讨论的模式,更适合目前国内学生的学习习惯,而且“社会越来越虚拟化、真实交流越来越少的环境中,面对面交流仍然非常重要”。

沪上高校课程共享,为国内高校探索“慕课”带来借鉴意义,论坛上,不少内地高校表示愿意积极参与东西部联盟的“慕课”实践。浙江大学校长林建华表示愿意加入长三角课程共享,并为更多高校提供优质课程资源,帮助均衡教育资源,整体提升中国高等教育水平。

# 本市开展世界精神卫生日主题宣传

本报讯(记者 施捷)今天是第22个世界精神卫生日。国家卫生计生委将今年我国的精神卫生宣传主题定为“发展事业、规范服务、维护权益”。本市各级精神卫生专业机构相继开展一系列形式多样、喜闻乐见的知识宣教活动。

今年5月1日《中华人民共和国精神卫生法》的正式实施,对本市精神卫生工作提出了更高要求和发展空间。目前本市着手进行《上海市精神卫生条例》修订的前期工作,以进一步提升本市精神卫生工作的法制化水平。