

学术引领系列



国家科学思想库

# 中国学科发展战略

## 理论与计算化学

国家自然科学基金委员会  
中国科学院



科学出版社

学术引领系列



国家科学思想库

# 中国学科发展战略

## 理论与计算化学

国家自然科学基金委员会  
中国科学院

科学出版社

北京

图书在版编目(CIP)数据

理论与计算化学/国家自然科学基金委员会,中国科学院编. —北京:科学出版社, 2016. 7

(中国学科发展战略)

ISBN 978-7-03-048919-7

I. ①理… II. ①国… ②中… III. ①化学-计算-学科发展-发展战略-中国 IV. ①O6-O4  
中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2016) 第 136558 号

丛书策划: 侯俊琳 牛 玲

责任编辑: 朱萍萍 宁 倩 / 责任校对: 张怡君 刘亚琦

责任印制: 张 倩 / 封面设计: 黄华斌 陈 敬

编辑部电话: 010-64035853

E-mail: houjunlin@mail. sciencep. com

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

中国科学院印刷厂印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2016 年 7 月第 一 版 开本: 720×1000 1/16

2016 年 7 月第一次印刷 印张: 48 3/4

字数: 980 000 插页: 4

定价: 168.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

# 中国学科发展战略

## 联合领导小组

组 长：陈宜瑜 李静海  
副 组 长：秦大河 姚建年  
成 员：詹文龙 朱道本 陈 颢 李 未 顾秉林  
贺福初 曹效业 李 婷 王敬泽 刘春杰  
高瑞平 孟宪平 韩 宇 郑永和 汲培文  
梁文平 杜生明 柴育成 黎 明 秦玉文  
李一军 董尔丹

## 联合工作组

组 长：李 婷 郑永和  
成 员：龚 旭 朱蔚彤 孟庆峰 吴善超 李铭禄  
刘春杰 张家元 钱莹洁 申倚敏 林宏侠  
冯 霞 王振宇 薛 淮 赵剑峰

# 中国学科发展战略·理论与计算化学

## 项 目 组

组 长：黎乐民

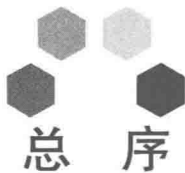
成 员：（以姓氏拼音为序）

方维海 高加力 高毅勤

蒋 鸿 刘 剑 刘文剑

邵久书 帅志刚 吴云东

杨金龙 杨伟涛 张增辉



## 总序

白春礼 杨卫

17 世纪的科学革命使科学从普适的自然哲学走向分科深入，如今已发展成为一幅由众多彼此独立又相互关联的学科汇就的壮丽画卷。在人类不断深化对自然认识的过程中，学科不仅仅是现代社会中科学知识的组成单元，同时也逐渐成为人类认知活动的组织分工，决定了知识生产的社会形态特征，推动和促进了科学技术和各种学术形态的蓬勃发展。从历史上看，学科的发展体现了知识生产及其传播、传承的过程，学科之间的相互交叉、融合与分化成为科学发展的重要特征。只有了解各学科演变的基本规律，完善学科布局，促进学科协调发展，才能推进科学的整体发展，形成促进前沿科学突破的科研布局和创新环境。

我国引入近代科学后几经曲折，及至上世纪初开始逐步同西方科学接轨，建立了以学科教育与学科科研互为支撑的学科体系。新中国建立后，逐步形成完整的学科体系，为国家科学技术进步和经济社会发展提供了大量优秀人才，部分学科已进入世界前列，有的学科取得了令世界瞩目的突出成就。当前，我国正处在从科学大国向科学强国转变的关键时期，经济发展新常态下要求科学技术为国家经济增长提供更强劲的动力，创新成为引领我国经济发展的新引擎。与此同时，改革开放 30 多年来，特别是 21 世纪以来，我国迅猛发展的科学事业蓄积了巨大的内能，不仅重大创新成果源源不断产生，而且一些学科正在孕育新的生长点，有可能引领世界学科发展的新方向。因此，开展学科发展战略研究是提高我国自主创新能力、实现我国科学由“跟跑者”向“并行者”和“领跑者”转变的

一项基础工程，对于更好把握世界科技创新发展趋势，发挥科技创新在全面创新中的引领作用，具有重要的现实意义。

学科发展战略研究的核心是结合科学技术和经济社会的发展需求，在分析科学前沿发展趋势的基础上，寻找新的学科生长点和方向。在这个过程中，战略科学家的前瞻引领作用十分重要。科学史上这样的例子比比皆是。在1900年8月巴黎国际数学家代表大会上，德国数学家戴维·希尔伯特发表了题为“数学问题”的著名讲演，他根据过去特别是19世纪数学研究的成果和发展趋势，提出了23个最重要的数学问题，即“希尔伯特问题”。这些“问题”后来成为许多数学家力图攻克的难关，对现代数学的研究和发展产生了深刻的影响。1959年12月，美国物理学家、诺贝尔奖得主理查德·费曼在加利福尼亚理工学院举行的美国物理学会年会上发表了题为《物质底层大有空间——一张进入物理新领域的请柬》的经典讲话，对后来出现的纳米技术作出了天才的预见。

学科生长点并不完全等同于科学前沿，其产生和形成不仅取决于科学前沿的成果，还决定于社会生产和科学发展的需要。1841年，佩利戈特用钾还原四氯化铀，成功地获得了金属铀，可在很长一段时间并未能发展成为学科生长点。直到1939年，哈恩和斯特拉斯曼发现了铀的核裂变现象后，人们认识到它有可能成为巨大的能源，这才形成了以铀为主要对象的核燃料科学的学科生长点。而基本粒子物理学作为一门理论性很强的学科，它的新生长点之所以能不断形成，不仅在于它有揭示物质的深层结构秘密的作用，而且在于其成果有助于认识宇宙的起源和演化。上述事实说明，科学在从理论到应用又从应用到理论的转化过程中，会有新的学科生长点不断地产生和形成。

不同学科交叉集成，特别是理论研究与实验科学相结合，往往也是新的学科生长点的重要来源。新的实验方法和实验手段的发明，大科学装置的建立，如离子加速器、中子反应堆、核磁共振仪等技术方法，都促进了相对独立的新学科的形成。自20世纪80年代以来，具有费曼1959年所预见的性能、微观表征和操纵技术的

仪器——扫描隧道显微镜和原子力显微镜终于相继问世，为纳米结构的测量和操纵提供了“眼睛”和“手指”，使得人类能更进一步认识纳米世界，极大地推动了纳米技术的发展。

作为国家科学思想库，中国科学院（以下简称中科院）学部的基本职责和优势是为国家科学选择和优化布局重大科学技术发展方向提供科学依据、发挥学术引领作用，国家自然科学基金委员会（以下简称基金委）则承担着协调学科发展、夯实学科基础、促进学科交叉、加强学科建设的重大责任。继基金委和中科院于2012年成功地联合发布“未来10年中国学科发展战略研究”报告之后，双方签署了共同开展学科发展战略研究的长期合作协议，通过联合开展学科发展战略研究的长效机制，共建共享国家科学思想库的研究咨询能力，切实担当起服务国家科学领域决策咨询的核心作用。

基金委和中科院共同组织的学科发展战略研究既分析相关学科领域的发展趋势与应用前景，又提出与学科发展相关的人才队伍布局、环境条件建设、资助机制创新等方面的政策建议，还针对某一类学科发展所面临的共性政策问题，开展专题学科战略与政策研究。自2012年开始，平均每年部署10项左右学科发展战略研究项目，其中既有传统学科中的新增长点或交叉学科，如物理学中的软凝聚态物理、化学中的能源化学、生物学中生命组学等，也有面向具有重大应用背景的新兴战略研究领域，如再生医学、冰冻圈科学、高功率高光束质量半导体激光发展战略研究等，还有以具体学科为例开展的关于依托重大科学设施与平台发展的学科政策研究。

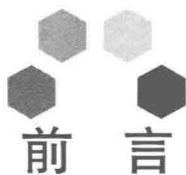
学科发展战略研究工作沿袭了由中科院院士牵头的方式，并凝聚相关领域专家学者共同开展研究。他们秉承“知行合一”的理念，将深刻的洞察力和严谨的工作作风结合起来，潜心研究，求真唯实，“知之真切笃实处即是行，行之明觉精察处即是知”。他们精益求精，“止于至善”，“皆当至于至善之地而不迁”，力求尽善尽美，以获取最大的集体智慧。他们在中国基础研究从与发达国家“总量并行”到“贡献并行”再到“源头并行”的升级发展过程中，脚踏实地，拾级而上，纵观全局，极目迥望。他们站在巨人肩上，



立于科学前沿，为中国乃至世界的学科发展指出可能的生长点和新方向。

各学科发展战略研究组从学科的科学意义与战略价值、发展规律和研究特点、发展现状与发展态势、未来5~10年学科发展的关键科学问题、发展思路、发展目标和重要研究方向、学科发展的有效资助机制与政策建议等方面进行分析阐述。既强调学科生长点的科学意义，也考虑其重要的社会价值；既着眼于学科生长点的前沿性，也兼顾其可能利用的资源和条件；既立足于国内的现状，又注重基础研究的国际化趋势；既肯定已取得的成绩，又不回避发展中面临的困难和问题。主要研究成果以“国家自然科学基金委员会—中国科学院学科发展战略”丛书的形式，纳入“国家科学思想库—学术引领系列”陆续出版。

基金委和中科院在学科发展战略研究方面的合作是一项长期的任务。在报告付梓之际，我们衷心地感谢为学科发展战略研究付出心血的院士、专家，还要感谢在咨询、审读和支撑方面做出贡献的同志，也要感谢科学出版社在编辑出版工作中付出的辛苦劳动，更要感谢基金委和中科院学科发展战略研究联合工作组各位成员的辛勤工作。我们诚挚希望更多的院士、专家能够加入到学科发展战略研究的行列中来，搭建我国科技规划和科技政策咨询平台，为推动促进我国学科均衡、协调、可持续发展发挥更大的积极作用。



早期化学研究主要依靠实验探索，被看成是纯实验科学。20世纪前后到60年代，化学家运用物理理论处理化学问题，极大地推动了化学的发展。70年代以后，借助计算机能力的快速提高，理论与计算化学如虎添翼，迅速发展。2013年，诺贝尔化学奖颁奖通告中说“如今对化学家来说，电脑同试管一样重要”。从1954年到2014年，诺贝尔化学奖14次授予理论与计算化学，凸显出理论与计算化学研究在推动化学发展中的重要作用。当前化学正从纯实验科学转向依靠“实验、计算、理论”协同推动前进的科学，进入发展的新阶段。理论与计算化学处于蓬勃发展时期，制订正确发展战略、建立合理资助机制和采取必要政策措施促进其发展，不但对加速我国这一学科本身的发展有重要作用，对推动化学整体以及材料科学、生命科学等相关学科的发展也有重要意义。

国家自然科学基金委员会-中国科学院学科发展战略研究工作联合领导小组设立“理论与计算化学发展战略研究”项目，委托我主持。项目组由13人组成，根据理论与计算化学的内涵和发展现状，设五个专题，每个专题包含若干主题，邀请国内相关领域优秀中青年专家参加学科发展战略研究工作。

各专题在有关主题负责人认真调研文献的基础上举行了专题学术研讨会。除专题和主题负责人外，还邀请了项目组外的若干专家参加。电子结构理论与计算方法专题邀请向涛、马玉臣、任新国、文振翼、曹泽星、戴希、罗洪刚等；化学中的统计力学专题邀请周昕、徐莉梅、高靓辉等；微观反应机理和反应动力学专题邀请方亚辉；材料科学中的问题专题邀请张振宇、龚新高、郭万林等；生命

科学与药物化学中的问题专题邀请肖奕、陈敏伯、季长鹤、朱通、李国辉、杨忠志、何晓等。各专题学术研讨会后，项目组进行全面总结。

为听取更多同行专家的意见，集思广益，项目组2014年6月在太原协助国家自然科学基金委员会化学科学部组织“理论与计算化学发展战略座谈会”，共三十多名出席第十二届全国量子化学学术会议的国内外专家参加了座谈会，包括胡培君、罗毅、林振阳、郑原忠、莫亦荣等专家。会上，十多人就理论与计算化学发展战略问题发表意见并提出具体建议。2014年8月，项目组和李灿科研组在大连联合举办“太阳能光催化实验-理论研讨会”，讨论光催化反应领域理论计算和实验研究中的问题，探讨两者如何紧密配合互动。还请教过几位境外专家，如美国加州大学贝克莱分校 William H. Miller 等。

遵照中国科学院学部学术与出版工作委员会的规定，2014年11月，项目组协助举办以“理论与计算化学发展战略”为主题的“科学与技术前沿论坛”，安排15个专题报告，除项目组成员报告项目整体和各专题工作情况及研究进展外，还有其他学科的专家（周爱辉、周海军、戴希、罗毅、张振宇、刘利民、兰峥岗、王伟、王任小等）的专题报告，并邀请崔俊芝、陈难先、王崇愚、陈润生、陈凯先等院士到会指导。与会专家就我国理论与计算化学发展战略有关问题展开讨论，从不同视角提出意见和建议。

在上述工作基础上，项目组写出理论与计算化学发展战略研究报告，分析学科发展历史和发展规律，评述学科现状和发展趋势，提出关键科学问题、发展思路和政策建议等。有83人参加撰写工作，详见各专题和主题的研究报告。参加过部分工作的还有鄂维南、胡浩、严以京、孙强、李隽、林小乔、刘海燕等。

项目任务是在国家自然科学基金委员会和中国科学院学部的领导下完成的，工作过程中得到众多专家的指导和帮助，谨表示衷心感谢。尽管项目组在工作过程中注意听取尽可能多专家的意见，多次开会研讨，力求将工作做得细致深入一些，但理论与计算化学是

一门多学科交叉的学科，涵盖面很广，限于项目组成员的科学水平和分析能力，研究报告难免存在疏漏之处，恳请同行专家批评指正。

黎乐民  
北京大学化学与分子工程学院



## 摘要

### 一、回顾理论与计算化学发展的历程，揭示学科交叉的重要性

早期化学研究主要依靠实验摸索和总结经验，被看成是纯实验科学。通过不断吸纳物理学和数学的理论成果，利用计算科学发展产出的强大计算能力，构建自身的理论体系，用于化学过程以及相关领域的研究中，逐步形成理论与计算化学。学科发展历程大致可分为四个阶段。第一阶段，以实验探索和总结实验事实为主，通过建立简单理论模型说明实验现象。第二阶段，吸纳物理学中热力学和统计力学的成果，建立化学热力学和化学统计力学。第三阶段，吸纳量子力学的成果，利用其概念和基本原理处理化学问题成果丰硕，极大推动了化学的发展。运用统计力学理论成果也有重要进展。第四阶段，吸纳计算机和计算数学成果，逐步向掌握化学变化定量规律的目标迈进；分子模拟逐渐成为研究复杂体系热力学和动力学性质的重要工具；化学信息学也有很大进展，成为发现有指定用途化学新物质的有效途径。

学科发展历程表明，理论与计算化学发展的推动力首先源于化学整体向前发展的要求，理论与实验研究伴生并行，相互促进。其次也源于理论与计算学科自身发展的需要，即发展高效率和有足够精度的理论和计算方法。学科交叉重叠起关键作用：化学家不断吸纳物理学理论成果以及应用数学与计算科学成果是学科形成的实质性过程，而将理论与计算化学方法用于化学其他分支以及材料科学、生命科学、药物学等领域的研究推动学科持续向前发展。

## 二、概述学科现状、分析发展趋势

化学进入发展的新阶段，逐步发展为依靠实验、计算、理论三方面协同工作推动的科学。理论和计算模拟方法在化学研究和相关领域中的应用日趋广泛。理论计算与实验工作紧密配合互动有效提高了研究效率。计算科学飞速进步使对真实复杂体系结构和运动过程的数学模拟成为可能。近年来理论与计算化学的进步主要表现在两个方面：研究对象从简化模型向真实复杂体系和过程逐步逼近；研究目标从对问题的定性分析走向追求定量结论。当前理论与计算化学的发展趋势与显现的特征是：理论分析与计算模型力求逼近复杂的真实化学体系和过程；研究重心从静态结构逐步转向动态过程，从简单基元过程扩展到多种过程耦合；阐明与生命现象相关的化学过程的计算模拟成为热点；强化对材料结构与功能关系的理论研究；对计算精度的要求进一步提高，建立新理论模型、发展高效率高精度的计算方法，成为学科本身的研究重点；重视发展能计算巨大体系和模拟复杂体系变化过程的方法；理论与计算方法在化学及相关研究中被广泛应用，与实验研究紧密配合互动逐步成为研究工作的常态；理论与计算研究正在逐步进入产业部门。

## 三、展望学科前景，指出面临的难题

学科发展新阶段——跃上新台阶的标志：在质的方面表现为科学水平的提高。理论与计算方法将具备处理更复杂实际体系和过程的能力，对计算结果的误差有可靠估计，对实验结果的解释更可靠，指导实验探索的作用更强。在量的方面表现为发挥作用范围扩大，研究人员采用实验与理论计算紧密配合互动的工作方式将成为常态。

目前存在的主要问题：研究结论没有足够的可靠性，计算结果通常不能作为独立的科学论据，只能作为佐证或者旁证。对于复杂体系的研究，结果与实验不一致时，无法判断是物理模型有缺陷还是数学计算的误差。计算方面的基本困难：量子化学计算的基本矛盾是计算量和精度难于兼顾，研究化学过程对计算精度要求很高，

高精度理论研究的计算量非常大；简化计算模型和/或作计算近似，得出的结论可靠性没有保证。运用统计力学理论面临两大困难：可靠的分子力场很难获得，超大尺度的空间和时间模拟计算量极大，现有计算机难以胜任。发展高效率、高精度、低计算量、误差可控（或可估计）的理论与计算方法是理论和计算化学的核心攻坚任务。

#### 四、概述学科关键科学问题和学科重要研究前沿

在理论与计算化学基础性研究方面，提出学科整体向前发展亟需解决的七个关键科学问题。在实际体系的理论计算研究方面，强调重视有关学科发展前沿，与实验研究紧密配合互动开展工作；同时重视以物理学基本原理为依据，为实验研究预测发展新方向和新领域。

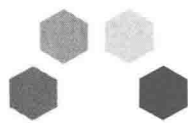
对学科涵盖的电子结构理论与计算方法、化学中的统计力学、微观反应机理和反应动力学、材料科学中的问题、生命科学和药物化学中的问题五个专题中各个主题的关键科学问题和重要前沿研究方向，在全书各章分别进行阐述和深入讨论。

#### 五、提出发展思路，建议采取相应战略性措施

强化理论与计算化学与数学、物理、材料、生命、计算科学、信息科学等领域的交叉合作；强化理论和实验研究的紧密结合，特别是两者的直接配合互动；加强队伍建设，要从国外引进高端人才，更要立足国内培养；推广理论与计算方法在化学及相关研究中的有效运用，在普及的基础上提高。

#### 六、提出促进学科发展的资助机制与政策的八项具体建议

鉴于目前没有一个公共计算化学软件平台严重影响我国理论与计算化学发展速度，项目组提出《关于建立“计算化学软件平台专项”的建议》。



---

# Abstract

---

## **1. Overview of the historical development of theoretical and computational chemistry, and reveal the importance of interactions among disciplines**

Chemical research in early days mainly relied on experimental trials and summarizing empirical findings, and was therefore regarded as a purely experimental science. By continuously absorbing the theoretical achievements made in physics and mathematics to chemistry, and taking advantage of tremendous computational power enabled by rapid development of high-performance computational technology, chemistry has built up its own theoretical system, which has been used in fundamental and applied research in chemistry and related fields, and gradually theoretical and computational chemistry has come into being. The historical development of theoretical and computational chemistry can be roughly divided into four stages. In the first stage, chemical research focused on experimental exploration and summarizing observational facts, and tried to explain experimental phenomena by building up simple theoretical models. In the second stage, chemical thermodynamics and chemical statistical mechanics were established based on absorbing achievements in thermodynamics and statistical mechanics developed in physics. In the third stage, with the establishment of quantum mechanics, the basic concepts and fundamental principles of quantum mechanics were ap-



plied to chemical problems, resulting in tremendous success and abundant fruits, and pushing forward the development of chemical science greatly. In the meantime, the application of theoretical achievements of statistical mechanics to chemical problems also resulted in a lot of important developments in theoretical chemistry. In the fourth stage, taking advantage of great achievements of computer science and computational mathematics, quantitative description of chemical reactions gradually became possible; molecular simulation gradually became an important tool to study thermodynamic and kinetic properties of complex systems; chemical informatics has also been greatly developed, and has become an effective approach to discover new chemical species with desired functions.

The history of the discipline development process shows that the important driving force for the development of theoretical and computational chemistry, first of all, is the requirements of the evolution of chemical science as a whole, since theoretical and experimental research are always closely entangled and stimulate each other. Secondly, the development of the discipline is also driven by the internal need of theoretical and computational chemistry, which calls for the development of highly effective and accurate theories and computational methods. In the process, the interactions between different disciplines have played a crucial role; the real process that theoretical and computational chemistry formed was the one in which chemists continuously exploited theoretical achievements of physics, applied mathematics and computer science, and in the meanwhile the application of theoretical and computational chemistry methods to other different branches of chemistry as well as materials, biological and medicinal sciences promoted the discipline sustainable development forward.