专访中国理论与计算化学领军人物：2019年新科院士杨金龙

《物理化学学报》编辑部

北京大学化学与分子工程学院, 北京 100871

Interview with the Pioneer of Theoretical and Computational Chemistry in China: 2019 New Academician Jinlong Yang

Editorial Office of *Acta Physico-Chimica Sinica*

College of Chemistry and Molecular Engineering, Peking University, Beijing 100871, P. R. China.

Email: whxb@pku.edu.cn.

Published online: December 19, 2019.

从上世纪开始,随着计算机技术的迅猛发展与广泛应用,理论与计算化学的研究有了飞跃的进展,其结果使整个化学界发生着一场革命性的变化。化学不再是纯实验科学,理论与计算化学占据了化学学科的半壁江山,理论、计算与实验工作的协同合作有效提高了研究效率。当前中国的理论与计算化学处于蓬勃发展时期,国内近年来涌现出了一批中青年学者活跃在国际学术界。我们很荣幸对中国理论与计算化学的领军人物,《物理化学学报》副主编杨金龙院士进行了专访。杨院士讲述了自己的科研故事,分析了中国理论与计算化学领域的发展趋势,并为年轻的学者们提出了中肯的治学建议,相信对读者们会有所启迪。

问题1: 杨院士,首先祝贺您当选中国科学院院士。获得这一荣誉,您有什么样的感受?

回答: 我很高兴能够获得这一荣誉,这是国家对我以前科研工作的一种肯定。获得这一荣誉,我要感谢前辈、师长、同事和家人长期以来对我的支持和帮助,同时我也感到更多的责任、动力和压力。国家给了院士很高的荣誉,我在今后工作中要更加努力,为我们国家科学事业的发展做更多的贡献。

问题2: 请简单介绍一下您的研究领域和研究经历。

回答: 我的研究领域是理论与计算化学,通过发展新理论和新方法,利用计算机计算和模拟对化学中的重要科学问题开展研究。主要研究方向包括精确高效的电子结构计算方法发展、新型功能材料理论设计、表面单分子体系量子行为表征等方面。我研究生阶段在中国科学技术大学基础物理中心主要是对一些凝聚态材料体系开展电子结构研究。后来,加入中国科学院选键化学重点实验室后,与扫描隧道电子显微镜(STM)实验组合作,开展了许多表面单分子表征与操控方面的研究,例如表面C₆₀分子取向识别以及通过STM操控单分子脱氢调控近藤共振等。与此同时,我们也一直从事线性标度电

子结构计算方法发展方面的研究。我们发展了一系列的算法,可以高效地计算电场中的体系、前线轨道以及在周期性体系中进行高效的杂化密度泛函计算等。目前我们已经开发了一个具有自主知识产权的通用电子结构计算程序包HONPAS。另外,我们通过计算模拟,设计了许多功能材料,例如可以应用于自旋电子学的半极金属。我们注重在材料设计的过程中提出新的概念,实现源头创新,例如我们提出双极磁性半导体的概念,可以方便地通过外加电场改变磁极化方向;提出通过内建电场实现红外光光解水,大大提高了太阳能利用的频谱范围。

问题3: 在科研的道路上有哪些重要的人影响了您?

回答: 首先是我的研究生导师汪克林教授,虽然我研究生阶段的科研方向并不是汪老师主要的研究方向,但是汪老师对科学的热爱、对真理的追求,以及他对学生的关怀、放手让学生尝试各种想法的宽容都深深地影响了我的科研和我自己带研究生的方式。另外两位是朱清时院士和侯建国院士,朱老师远见卓识,率先在中国科学技术大学推动表面单分子方面的研究,也是朱老师促成了我和侯建国后来二十多年的愉快合作。

问题4: 在您的科研道路中是否遇到过挫折或困难?

回答: 科研肯定都不是一帆风顺的。以我们和实验合作的单分子科学研究为例。STM实验观测到的其实是关于表面电子结构的信息, 并不直接给出表面原子分子的几何构型等。因此, 有时候为了能理解一个有趣的实验观测现象, 我们需要花很长一段时间通过理论模拟, 然后与实验比对, 再回过头来修正理论模型, 多次迭代以后最后才能发现真正的故事。有段时间, 我和侯建国没事就到实验室, 盯着STM数据看, 一起讨论分析, 有时候都忘了时间。

问题5: 当选院士以后, 您和您的团队下一阶段有哪些打算?

回答: 我们团队将继续在理论计算方法发展、新材料设计、表面单分子体系表征等方面开展深入研究, 争取取得更多突破性的进展。方法方面, 我们将进一步根据现在计算机硬件的变化和发展, 开发新型软件包, 实现高效的大规模并行计算, 同时提前布局量子计算, 为量子计算机时代的量子化学打好基础。新材料设计方面, 我们将致力于提出一些新的概念, 引领实验, 发展一些全新的材料。同时, 我们也将进一步扩展研究的体系, 比如设计新型量子比特材料等。在表面单分子体系表征方面, 我们将和实验紧密结合, 开发新的表征手段, 力争实现时间、空间、能量域上同时的超高分辨表征。

问题6: 您认为科研人员最重要的品质是什么? 您对研究生或年轻的科研工作者有什么建议?

回答: 我认为科研人员最重要的品质是好奇心, 基础理论科学研究是好奇心驱动的。当然, 对研究生和年轻科研工作者, 还需要认真学习, 扎实地打好基础。例如, 对理论与计算化学领域的研究生来说, 必须要有较好的计算机编程能力。我年轻的时候, 商业软件还不是很成熟, 很多东西都要靠自己编程, 所以我写了很多代码。编程能力必须靠不断的练习才能提高。现在, 有个别同学只会简单地使用商业软件, 甚至不清楚其中有些输入参数的物理意义, 把自己也变成了科研的简单工具, 这不是在做研究。

问题7: 目前国内理论与计算化学领域的发展存在的最大的挑战有哪些?

回答: 目前国内理论与计算化学领域的发展态势总的来说是挺好的, 当然也面临着一些挑战。比如说, 计算程序的发展。计算程序的发展需要既懂化学又懂计算机的人才。如果主要依靠研究生的话, 面临学习周期长、发表文章困难以及人员流动大等问题。需要科研管理部门专门研究, 加大资助, 吸引优秀人才加入到理论与计算化学软件开发的队伍里面来。同时, 理论与计算化学属于基础研究, 对整个化学的发展有重要的支撑作用, 需要广大同行一起支持理论与计算化学的发展。

问题8: 目前中国理论与计算化学的研究在国际上处于什么水平?

回答: 目前中国理论与计算化学基本上处于与国际第一梯队并跑水平。发展了一些原创性的理论, 在应用方面尤其出色, 取得了很多重要成果。但是, 在理论的系统性以及程序的发展方面还存在一定的短板。目前国内从事理论与计算化学研究的优秀年轻人才很多, 我相信经过一段时间的积累, 我们一定能补足短板, 使得我国的理论与计算化学研究进入国际领跑状态。

问题9: 科学家的工作非常繁忙, 您是如何平衡好科研工作与管理工作的关系?

回答: 是的, 对科研工作者来说时间总是很宝贵的, 需要合理的安排和利用时间。比如, 有时我白天会忙于行政工作, 这时就会利用晚上的时间和学生讨论。另外, 对于理论研究而言, 并不需要大型的仪器设备, 只要有网络连接就可以工作。所以, 我们可以充分利用一些边角料时间, 比如出差途中, 进行一些工作。

问题10: 工作之余, 您有其他兴趣爱好吗?

回答: 我的兴趣爱好其实比较广泛, 以前在选键化学实验室的时候, 有一张乒乓球台, 闲下来的时候我经常和学生一起打球。另外, 我也喜欢发现生活中的美, 最近几年, 我用手机拍摄了很多花卉, 现在出去大部分的花我都能认识了。

杨金龙, 汉族, 物理化学家, 中国科学院院士, 中国科学技术大学副校长。

1966年1月生于江苏盐城, 1981至1985年在南京师范大学学习, 获学士学位。1985至1991年在中国科学技术大学学习, 分获硕士、博士学位。毕业后留校任教。曾在意大利Padova大学、Cagliari大学、国际理论物理中心、香港科技大学、东京大学、香港大学和新加坡国立大学等单位工作和访问。1996年起任中国科学技术大学教授。1997年任中国科学院选键化学重点实验室副主任, 2004年任合肥微尺度物质科学国家实验

室理论与计算科学研究部主任，2009年任中国科学技术大学化学与材料科学学院执行院长。2017年1月任中国科学技术大学校长助理，2018年4月起任中国科学技术大学副校长，2019年11月当选为中国科学院院士。

长期从事理论与计算化学的教学和研究工作。一直致力于发展与应用第一性原理计算方法与模型研究小分子，原子团簇，固体表面与界面和纳米体系的结构和性质，注重和相关实验研究的配合与合作。已发表学术论文四百余篇，论文被他引一万余次。获得国家杰出青年科学基金资助，受聘教育部“长江学者奖励计划”特聘教授，担任基金委创新群体负责人和国家重点研发计划项目首席科学家。应邀担任 *WIREs Computational Molecular Science* 和《物理化学学报》的副主编，*Theoretical Chemistry Accounts*、*The Journal of Physical Chemistry*、《中国科学》和《化学物理学报》的编委。入选美国物理学会(APS)的 Fellow。

现任安徽省第十三届人大常委，农工民主党安徽省副主委，全国中学生“英才计划”化学学科工作委员会秘书长。