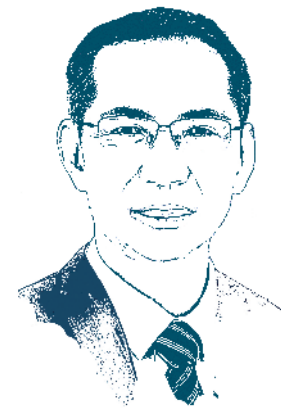


我心向党 报国兴皖 走近院士



·院士名片·

杨金龙,1966年1月生于江苏盐城,物理化学家,中国科学院院士,中国科学技术大学副校长。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,注重与实验结合开展研究。已发表学术论文500余篇,论文被他引2万余次。担任国家自然科学基金委员会创新研究群体负责人和国家重点研发计划项目首席科学家。

杨金龙 探秘单分子世界

■ 本报记者 徐国康 张理想 徐旻昊 摄影报道

在门外汉眼里,化学总是和五彩斑斓的瓶瓶罐罐打交道,看到“理论与计算化学”这个名词就感觉要翻开一部深奥的天书。这正是中国科学院院士、中国科学技术大学副校长杨金龙长期从事的教学和研究领域。

“化学是研究物质变化的一门科学,主要目的是创造物质和控制物质的转化。物质的转化有其内在

规律,这些规律就是理论化学的研究内容。由于物质世界丰富而复杂,仅仅依靠解析表达远远不够,因此就要运用到数学运算,与计算科学相结合,这就是计算化学。”杨金龙用浅显的话语解释,“总之,理论与计算化学是化学的一个基础学科,主要提供理论预测和实验解释。”

中国科大单分子科学团队是国际上著名的单分子团队,杨金龙是团队的领头人之一。这个研究微观世界的舞台,恰恰是杨金龙“起家”的地方。

2001年,“拍摄”能够分辨碳60化学键的单分子图像,世界首次成功直接观察到分子的内部结构;2005年,对吸附于金属表面的钴酞菁分子进行“单分子手术”,世界首次实现单分子自旋态控制;2013年,将具有化学识别能力的空间成像分辨率提高到0.5纳米,世界首次实现亚纳米分辨的单分子光学拉曼成像……20多年来,杨金龙与同事合作,在单分子科学领域不断取得重大突破,成果多次入选两院院士评选的年度“中国十大科技进展”。

“集成电路的器件如今已经做到了几个纳米的尺度,但站在量子力学的角度,这些器件的最终极限是单个分子甚至单个原子。20多年来,我们在单分子器件研究领域一直处于世界前沿。”杨金龙说,希望将来某一天,集成电路中的器件真能够达到单个分子、单个原子层次。

2021年5月,习近平总书记在两院院士大会和中国科协第十次全国代表大会上,提到近年来我国

▲ 杨金龙院士在实验室利用超高真空低温扫描隧道显微镜观察分子结构。

在战略高技术领域取得的10项新跨越,其中包括“神威·太湖之光”超级计算机首次实现千万核心并行第一性原理计算模拟。杨金龙课题组是这项重大研究成果的主要完成者。

“神威·太湖之光”超级计算机系统是我国也是世界第一台理论浮点计算能力达到10亿亿次量级的超级计算机系统。“好的硬件加上好的软件,才能做出好的科研。我们把自主研发的软件,有效应用在全世界最好的计算机上。”杨金龙说,中国科大理论与计算化学的低标度理论算法与国产高性能并行计算软硬件的优势结合,让“神威·太湖之光”充分发挥出强大的计算能力。

大学本科专业是物理学,在单分子化学领域取得系列重大成果,如今杨金龙又迈进了计算科学的殿堂。“科学研究的重大突破,大都发生在学科交叉前沿。从物理到化学,再到计算机,这是我的成长轨迹。”杨金龙说,他鼓励学生开展跨学科研究,招收的学生有的拥有物理、化学的底子,有的具有计算机的基础,有的还拿到了双学位。

“中国的发展离不开科技创新,年轻一代的科技工作者大有可为。希望他们在学科交叉前沿、在源头创新领域,取得更多更大突破!”杨金龙对学生寄予厚望。

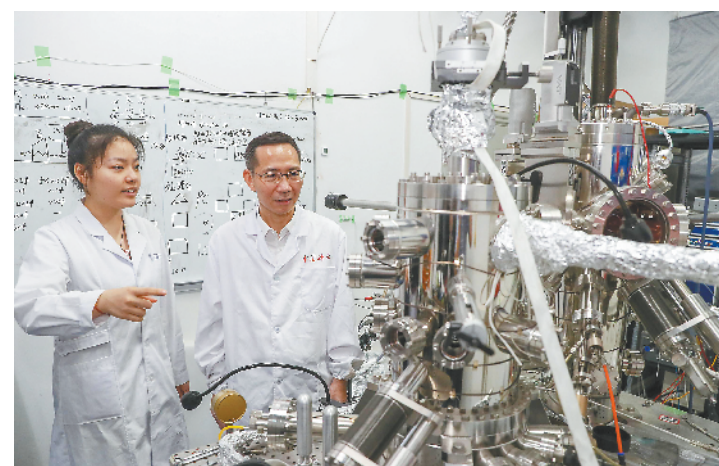
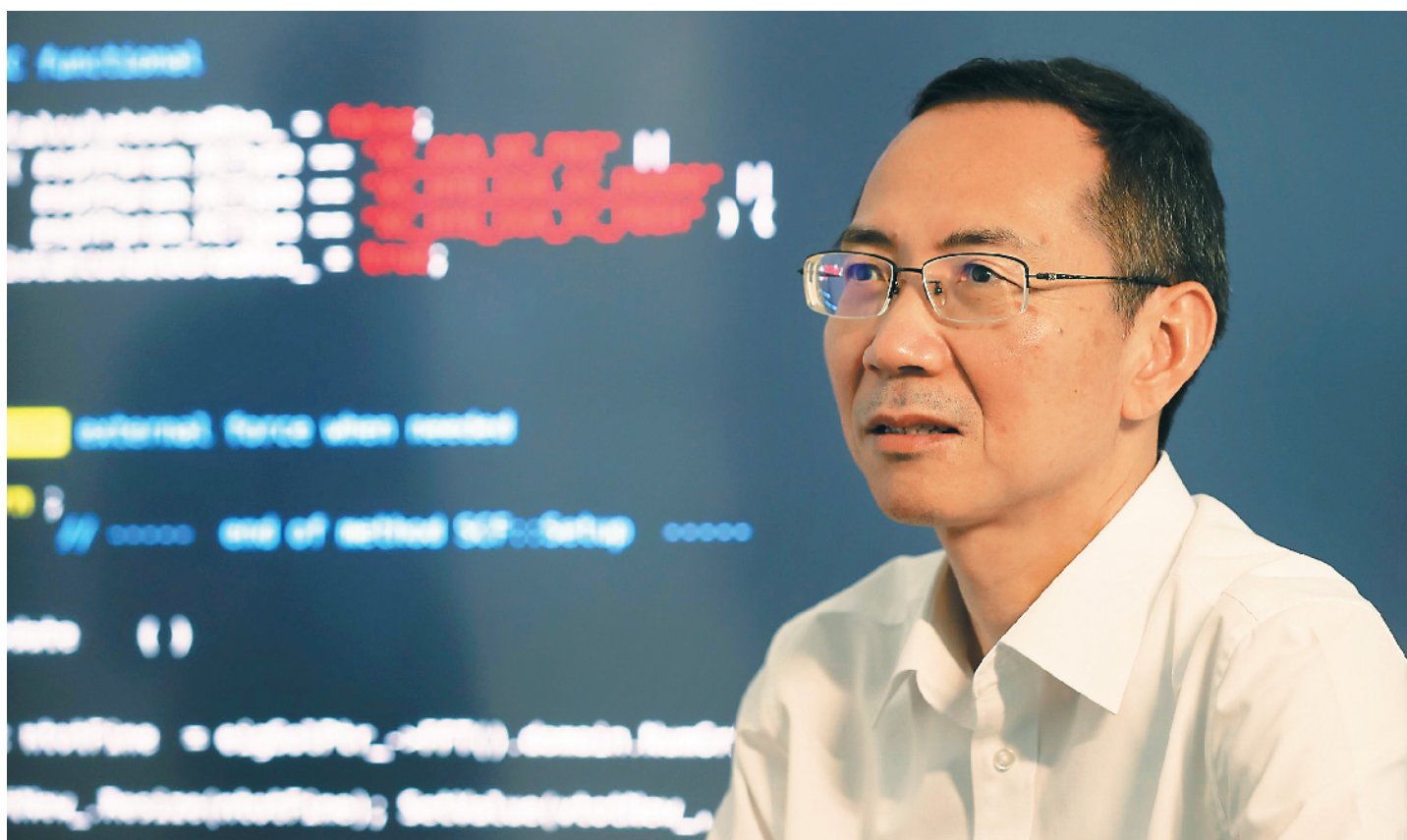


▲ 杨金龙院士在图书馆查阅资料。

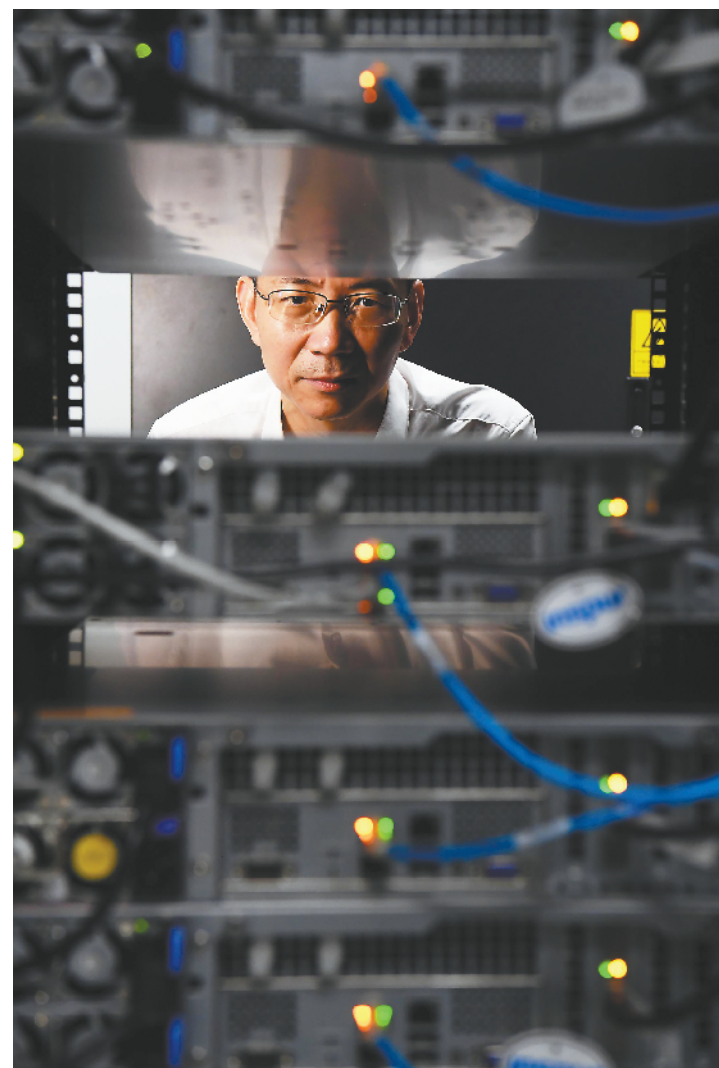
► 杨金龙院士一直致力于理论和计算化学领域的研究。



扫码阅读更多内容



杨金龙院士在中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家研究中心与研究生交流探讨实验数据。



杨金龙院士扎根实验室,全神贯注地钻研科研难题。



漫步中国科大校园,杨金龙院士与学生交流科研心得体会。



杨金龙院士为学生讲解密度泛函理论的优缺点。