

جایزه ی نوبل شیمی برای کارپلوس، لویت، و وارشل

جایزه ی نوبل [1] شیمی در 2013 به مارتین کارپلوس [2]، مایکل لویت [3]، و آریه وارشل [4] رسید [5]. این جایزه به خاطر بار آوردن روشها ی محاسباتی در دینامیک ملکولی است، که میشود آنها را برای ملکولها ی پیچیده به کار برد. محاسبات ی که بر اساس مکانیک کلاسیک اند نسبتن ساده اند، اما بعض ی از ویژه گیها ی واکنشها را پیشبینی نمیکنند. محاسبات کوانتمی مفصلتر اند. پیشبینی ی حاصل از این محاسبات بهتر است، اما محدودیت توان محاسباتی کامپیوترها به این مینجامد که محاسبات کوانتمی فقط در مُرد ملکولها ی ساده ممکن است. با انجام محاسبات کوانتمی برای الکترونهای واکنشگر (آزاد) و انجام محاسبات کلاسیک برای بقیه ی الکترونها، مزیتها ی این دُگونه محاسبه با هم ترکیب میشود.

[1] Nobel

[2] Martin Karplus

[3] Michael Levitt

[4] Arieh Warshel

[5] <http://physicsworld.com/cws/article/news/2013/oct/09/chemistry-nobel-honours-trio-who-combined-classical-and-quantum-physics>