

GIÁO SƯ PHAN ĐÌNH DIỆU: Anh Cả của Tin học Việt Nam

“Nếu có thể Bảo nên chuyển qua làm về trí tuệ nhân tạo vì đây là tương lai của tin học” là gợi ý trong bức thư Anh Diệu gửi tôi mùa hè 1984, thời kỳ trí tuệ nhân tạo còn ảm đạm. Đã nhiều chục năm trôi qua, nay lĩnh vực này đang là khoa học và công nghệ cốt lõi của kỷ nguyên số. Nhớ lại một kỷ niệm riêng nhân 85 năm ngày sinh của Anh Diệu càng thấy tầm vóc của Anh, người Anh Cả của nền Tin học nước nhà”.

Hồ Tú Bảo



Giáo sư Phan Đình Diệu.

G iáo sư Phan Đình Diệu sinh ngày 12 tháng 6 năm 1936 tại xã Trung Lộc, huyện Can Lộc, tỉnh Hà Tĩnh trong một gia đình có truyền thống hiếu học. Sau khi học trường cấp 3 Phan Đình Phùng ở Hà Tĩnh, năm 1954 ông ra Hà Nội theo học ngành Toán tại trường Đại học Sư Phạm Hà Nội. Ông tốt nghiệp xuất sắc và trở thành giảng viên của trường vào năm 1957.

Năm 1962, ông được cử đi Liên Xô làm nghiên cứu sinh tại Khoa Toán học Tinh toán và Điều khiển học, Trường Đại học Tổng hợp quốc gia Moskva mang tên Lomonosov. Ông theo đuổi nghiên cứu về Logic toán và Giải tích hàm, cũng như việc xây dựng một nền móng vững chắc của Toán học.

Cuộc khủng hoảng về cơ sở của Giải tích toán

học vào cuối thế kỷ 19 dẫn đến sự ra đời của lý thuyết Cantor về tập hợp, tạo nên móng cho Giải tích toán học và Toán học nói chung. Nhưng việc phát hiện ra những nghịch lý trong bản thân lý thuyết tập hợp đã làm lung lay nền móng này. Giới toán học đứng trước vấn đề cần xem xét tính đúng đắn của một số mệnh đề vốn vẫn mặc nhiên được coi là đúng và cần hoài nghi cả một số quy tắc logic vẫn đang dùng. Một số trường phái về xây dựng nền móng của Toán học đã xuất hiện, nổi bật là ba phái lớn: chủ nghĩa logic (logicism), chủ nghĩa hình thức (formalism) và chủ nghĩa trực giác (intuitionism).

Phái chủ nghĩa logic, khởi đầu bởi G. Frege và tiếp tục bởi B. Russell, A. Whitehead, chủ trương đưa toàn bộ toán học thành một bộ phận của logic, ở đó các đối tượng của toán học được xem là không tồn tại độc lập và có thể được xác định bởi một chuỗi các định nghĩa, các phán đoán, các suy diễn logic.

Phái chủ nghĩa hình thức, khởi xướng bởi D. Hilbert, tiếp tục bởi P. Bernays, W. Ackermann, J. von Neumann và nhiều người khác, chủ trương cứu toàn bộ toán học cô điển bằng cách tiên đề hóa rồi hình thức hóa toàn bộ toán học cô điển thành một lý thuyết tiên đề hình thức và chứng minh tính phi mâu thuẫn của lý thuyết hình thức này.

Phái chủ nghĩa trực giác, với những người đề xướng chủ chốt là L.E.J. Brouwer, A. Heyting, đòi hỏi các đối tượng toán học phải được xây dựng rõ ràng một cách trực giác, muốn chứng minh sự tồn tại của một đối tượng phải chỉ ra được một cách trực giác để tìm ra đối tượng đó.

Lĩnh vực nghiên cứu ông lựa chọn khi đó là toán học kiến thiết của trường phái chủ nghĩa trực giác. Ông làm nghiên cứu với nhà toán học Nga nổi tiếng Andrei A. Markov, người cùng N.A. Shanin đã sáng lập ra lý thuyết toán học đệ quy kiến thiết. Đề tài ông theo đuổi là xây dựng một lý thuyết kiến thiết cho lĩnh vực giải tích hàm. Trên con đường nghiên cứu này ông đã hoàn thành luận án tiến sĩ về “Lý thuyết kiến thiết của các không gian tô-pô tuyến tính lồi địa phương” vào năm



Giáo sư Tạ Quang Bửu, Lê Văn Thiêm và Phan Đình Diệu. Nguồn: Trung tâm Di sản các nhà khoa học VN.

1965 và luận án tiến sĩ khoa học với tiêu đề “Một số câu hỏi về giải tích hàm kiên thiết” vào năm 1967.

Trong thời gian làm luận án ông đã đăng sáu bài báo trên tạp chí rất nổi tiếng ở Nga lúc đó là “Doklady Akademii Nauk”. Với các công trình mang tính đột phá này, chỉ trong 5 năm ông đã xây dựng thành công một nhánh mới trong Toán học: Giải tích hàm kiên thiết. Luận án của ông được in riêng thành một tập trên tạp chí khoa học “Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics” của Nga, và năm 1974 Hiệp hội Toán học Mỹ đã dịch và xuất bản luận án này trong cuốn sách tiếng Anh “Some Questions in Constructive Functional Analysis”.

Điều ý nghĩa là cùng lúc làm luận án tiến sĩ, ông đã dành thời gian tìm hiểu các lý thuyết về thuật toán, tâm huyết với việc gán cho khái niệm “tồn tại” hay “xây dựng được” các nội dung thuật toán một cách chính xác. Đây là những bước chuẩn bị ban đầu của ông cho một sự nghiệp ông sẽ theo đuổi trong suốt quãng đời còn lại. Điều này cũng phần nào giống như câu chuyện hai mươi năm trước đó, khi làm việc ở Pháp và Đức, kỹ sư Trần Đại Nghĩa đã âm thầm tìm hiểu về vũ khí để khi về nước đã gây dựng nên nền quân khí Việt Nam trong những năm tháng kháng chiến.

Vào giữa năm 1967, Minsk-22— một trong những máy tính hiện đại nhất của Liên Xô và Đông Âu vào

thập kỷ 60 của thế kỷ trước— có mặt ở miền Bắc Việt Nam và đặt tại trụ sở của Ủy ban Khoa học và Kỹ thuật Nhà nước, một trong những dấu ấn đầu tiên của khoa học máy tính ở Việt Nam.

Cũng vào năm đó sau khi về nước, tiến sĩ khoa học trẻ Phan Đình Diệu được phân công về làm việc ở Ủy ban Khoa học và Kỹ thuật Nhà nước, tại Phòng Máy tính. Năm 1972, ông được đề nghị làm Trưởng phòng Máy tính với nhiệm vụ xây dựng những tập thể cán bộ không những biết sử dụng và khai thác máy tính lớn để phục vụ nhu cầu tính toán trong nhiều lĩnh vực ứng dụng mà còn có khả năng nghiên cứu ở trình độ cao về một số hướng phát triển hiện đại của khoa học máy tính. Cũng trong

Cùng lúc làm luận án tiến sĩ, ông đã dành thời gian tìm hiểu các lý thuyết về thuật toán, tâm huyết với việc gán cho khái niệm “tồn tại” hay “xây dựng được” các nội dung thuật toán một cách chính xác. Đây là những bước chuẩn bị ban đầu của ông cho một sự nghiệp ông sẽ theo đuổi trong suốt quãng đời còn lại. Điều này cũng phần nào giống như câu chuyện hai mươi năm trước đó, khi làm việc ở Pháp và Đức, kỹ sư Trần Đại Nghĩa đã âm thầm tìm hiểu về vũ khí để khi về nước đã gây dựng nên nền quân khí Việt Nam trong những năm tháng kháng chiến.

những năm 1970–1975, khi Viện Toán học được thành lập với bốn bộ môn, tiến sĩ khoa học Phan Đình Diệu đã phụ trách bộ môn Điều khiển học gồm hai nhóm “Lý thuyết automat và ngôn ngữ hình thức” và “Điều khiển tối ưu”.

Cùng ngay từ thời gian này, nhận định về sự phát triển trên thế giới và cho rằng khoa học máy tính sẽ ngày càng đóng vai trò quan trọng và là nền tảng của những cuộc cách mạng công nghiệp lớn sẽ thay đổi lịch sử nhân loại, ông chủ trì đề xuất dự án thành lập Viện Khoa học Tính toán và Điều khiển.

Đầu năm 1977, Viện Khoa học Tính toán và Điều khiển, thuộc Viện Khoa học Việt Nam (nay là Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam) chính thức được thành lập, và ông là Viện trưởng đầu tiên. Viện được thành lập trên cơ sở hai đơn vị là Phòng Máy tính và Ban Điều khiển học vốn thuộc Ủy ban Khoa học và Kỹ thuật Nhà nước. Với khoảng 125 cán bộ nghiên cứu thuộc nhiều lĩnh vực— lập trình đến kỹ thuật số, từ kinh tế đến điều khiển, từ thông kê và phương pháp tính đến nhận dạng... Viện Khoa học Tính toán và Điều khiển là cơ quan nghiên cứu và ứng dụng chung của cả nước về hai lĩnh vực này.

Lãnh đạo những cán bộ trẻ hầu hết mới tốt nghiệp đại học của một ngành khoa học non trẻ, giáo sư Phan Đình Diệu đã dành trọn thời gian, sức lực và nhiệt huyết để cùng tập thể này phấn đấu cho các mục tiêu. Một mặt, ông đã truyền được cảm hứng, trách nhiệm và động lực khoa học cho các cán bộ trẻ, tạo ra một không khí làm việc say mê của Viện trong hoàn cảnh đất nước còn vô vàn khó khăn. Mặt khác, nhận trách nhiệm xây dựng và phát triển một ngành khoa học mới và đa dạng, mới ngay cả với chính mình, ông đã dành nhiều thời gian để tìm hiểu và tự học những lĩnh vực rất mới và thay đổi rất nhanh của ngành. Phải có niềm đam mê đặc biệt và một trí lực phi thường

trọng và triển vọng mà các chất xúc tác hữu cơ do Benjamin List và David MacMillan tạo ra.

“Tôi hoàn toàn không chờ điều ngạc nhiên lớn này – anh thật sự khiến ngày hôm nay thành một ngày đặc biệt”, List nói với các phóng viên tại một buổi họp báo sau lễ công bố. “Khi lần đầu làm thực nghiệm này, tôi còn không rõ những gì có thể xảy ra và tôi nghĩ nó có thể là một ý tưởng ngốc nghếch, hoặc ai đó đã cố làm ra nó. Khi tôi thấy nó diễn ra, tôi mới cảm nhận đây có thể thực sự là điều gì đó lớn lao”.

Những chất xúc tác thay thế

Các chất xúc tác, các chất liệu gia tốc các phản ứng mà không bao giờ được dùng hết một cách trọn vẹn, là các công cụ cơ bản cho các nhà hóa học. List, làm việc tại Viện Nghiên cứu Than đá Max Planck ở Mülheim an der Ruhr, Đức và MacMillan, tại trường Đại học Princeton ở New Jersey, đã phát triển các chất xúc tác có thể điều khiển quá trình xúc tác bất đối xứng, trong đó phản ứng tạo ra phiên bản đối xứng trái của một phân tử nhiều hơn là phiên bản đối xứng phải và ngược lại.

Vào năm 2000, Benjamin List đã có ý tưởng đột phá trong khi nghiên cứu các kháng thể xúc tác. Thông thường, các kháng thể tấn công các virus bên ngoài hoặc vi khuẩn trong cơ thể chúng ta nhưng các nhà nghiên cứu tại Scripps đã tái thiết kế chúng, vì vậy chúng có thể định hướng các tương tác hóa học. Nghĩ về cách các enzyme hoạt động trên thực tế, List nhận thấy các phân tử lớn được tạo ra từ hàng trăm amino acids. Bên cạnh các amino acids này, một tỉ lệ đáng kể các enzyme chứa kim loại có thể thúc đẩy các quá trình hóa học. Nhưng nhiều enzyme cũng tạo ra xúc tác cho các phản ứng mà không cần đến kim loại. Thay vào đó, các phản ứng được một hoặc vài amino acids trong enzyme định hướng. Do đó, Benjamin List đã tự hỏi: amino acids có là một phần của một

enzyme để tạo xúc tác cho một phản ứng hóa học? hay chỉ một amino acid, hoặc một phân tử đơn giản tương tự có thể làm được chuyện này?

Một số nghiên cứu từ đầu những năm 1970 đã sử dụng một amino acid là proline làm chất xúc tác nhưng nếu proline thực sự là một chất xúc tác hiệu quả thì nó có thể hiệu quả trên những phản ứng gì? Cuối cùng, List đã chứng tỏ proline amino acid có thể đóng vai trò như một chất xúc tác trong một phản ứng aldol, trong đó các nguyên tử carbon

trong sản xuất công nghiệp ở quy mô lớn là điều vô cùng phức tạp. Ông cho rằng, để phát triển các công cụ hóa học hữu dụng, cần phải xem xét lại vấn đề.

MacMillan đã bắt đầu thiết kế các phân tử hữu cơ đơn giản. Chúng ta biết là các phân tử hữu cơ là các khối cơ bản của sự sống và có khung các nguyên tử carbon bên, và chúng thường xuyên chứa cả oxy, ni tơ, sulphur hay phosphorus. Tính chất của các phân tử hữu cơ phụ thuộc vào việc các nguyên tố này được đặt cạnh nhau như thế nào.



Nhà hóa học Đức Benjamin List trong niềm vui giành giải Nobel Hóa học 2021 cùng đồng nghiệp ở Viện Nghiên cứu Than đá Max Planck ở Muelheim. Nguồn: AP Photo/Martin Meissner.

từ hai phân tử khác nhau đều liên kết với nhau và có thể được điều khiển thành xúc tác phi đối xứng.

Cùng thời điểm đó, MacMillan chuyển từ Harvard đến UC Berkeley. Tại Harvard, ông đã tập trung vào cải thiện các xúc tác bất đối xứng bằng việc sử dụng kim loại. Đây là một lĩnh vực thu hút sự chú ý của rất nhiều nhà nghiên cứu nhưng MacMillan biết rằng các chất xúc tác được phát triển lại hiếm khi phù hợp với ngành công nghiệp. Do đó, ông bắt đầu suy nghĩ tại sao và giá trị vấn đề là các kim loại có độ nhạy cao đơn giản là quá khó và quá đắt cho việc ứng dụng. Việc đạt những điều kiện về độ âm hay khả năng chống oxy hóa của một số chất xúc tác quá đơn giản trong phòng thí nghiệm nhưng việc làm như vậy

MacMillan đã lựa chọn nhiều phân tử hữu cơ với những đặc tính cần thiết và thử nghiệm tính năng của chúng trong việc định hướng một phản ứng Diels–Alder, phản ứng mà các nhà hóa học dùng để tạo các vòng nguyên tử carbon. Một vài phân tử hữu cơ đã xuất sắc trong vai trò xúc tác bất đối xứng. Giống như hai hình ảnh đối xứng nhau qua gương, một hình ảnh giống đời thực tới 90%. Cuối cùng, ông đã thiết kế các phân tử nhỏ để có thể cung cấp hoặc đón nhận các điện tử và do đó thúc đẩy các phản ứng một cách hiệu quả.

Vào tháng 1/2000, trước khi Benjamin List xuất bản công bố của mình, David MacMillan gửi bản thảo lên một tạp chí khoa học. Trong phần giới thiệu của bài báo, ông viết

Các chất xúc tác hữu cơ đóng vai trò hết sức quan trọng trong ngành công nghiệp dược, vốn thường cần các xúc tác phi đối xứng. Cho đến khi các nhà hóa học có thể tạo ra các chất xúc tác này, nhiều dược chất chứa cả hai hình ảnh gương của một phân tử, một có tính hoạt hóa trong khi hình ảnh còn lại thì thông thường lại tạo ra những hiệu ứng không mong muốn. Một ví dụ là scandal thalidomide vào những năm 1960, trong đó một hình ảnh hưởng của dược chất thalidomide đã trở thành nguyên nhân gây ra nhiều biến chứng nghiêm trọng cho hàng ngàn thai nhi đang phát triển.

Bằng việc sử dụng các xúc tác hữu cơ, giờ đây các nhà nghiên cứu có thể gia tăng số lượng các phân tử bất đối xứng khác nhau một cách đơn giản. Ví dụ, họ có thể tạo ra các hợp chất có khả năng chữa bệnh trong phòng thí nghiệm thay vì chỉ có thể tách được một lượng nhỏ hợp chất đó trong các dược thảo hiếm hoặc các sinh vật dưới đáy biển sâu.

Tại các công ty dược phẩm, phương pháp này thường được áp dụng để tổng hợp ra một lượng lớn sản phẩm từ các dược chất đã có. Một vài ví dụ như paroxetine, thường dùng điều trị chứng căng thẳng và trầm cảm, và thuốc kháng virus oseltamivir, vốn dùng điều trị các bệnh lây nhiễm qua đường hô hấp.

“Tại đây, chúng tôi giới thiệu một chiến lược mới cho chất xúc tác hữu cơ mà chúng tôi hy vọng sẽ mở ra một phạm vi những chuyên hóa bất đối xứng”.

Cho đến khi những đột phá này được họ tạo ra, hiểu biết chung của các nhà hóa học là một xúc tác tổng hợp các phân tử bất đối (những phân tử có độ cứng lớn nhất) đều là một enzyme hoặc chứa một kim loại chuyển pha như sắt. “Đó thực sự là một chuyên đổi về khái niệm.” nhà hóa học Cathleen Crudden của trường Đại học Queen ở Kingston, Canada, nói. “Trong một quãng thời gian dài, mọi người đều nghĩ kim loại và enzyme chỉ là một”.

“Các xúc tác hữu cơ” do List, MacMillan và đồng nghiệp của họ phát triển đều không chứa kim loại. Và không như các enzyme, chúng là các phân tử hữu cơ nhỏ, “thứ mà tôi nghĩ là vô cùng thú vị”, nhà hóa học Claudia Felser của viện nghiên cứu Hóa Lý chất đậm đặc ở Dresden, Đức, nói. Các chất xúc tác hữu cơ đều rẻ hơn những loại chứa kim loại.

Khó có thể liệt kê hàng trăm ví dụ về việc ứng dụng các chất xúc tác hữu cơ – nhưng tại sao không ai nghĩ đến chất xúc tác phi đối xứng đơn giản. xanh và rẻ hơn? Có nhiều câu trả lời cho thắc mắc này. Một trong số đó là ý tưởng đơn giản thường rất khó để hình dung. Cái

nhìn của chúng ta thường bị che mờ bởi những khái niệm đã có về cách thế giới phải vận hành, như ý tưởng chỉ có các kim loại hoặc các enzyme mới có thể “lèo lái” các phản ứng hóa học. Benjamin List và David MacMillan đã thành công trong việc bỏ qua các khái niệm đã có thể tìm ra một giải pháp dây kéo léo cho vấn đề mà các nhà hóa học đã vật lộn trong nhiều thập niên. Các chất xúc tác hữu cơ do đó đang lại – theo cách đúng đắn như hiện nay – lợi ích lớn lao cho con người.

Món quà từ tự nhiên

Các nhà hóa học tự biết nhiệm vụ của họ là bắt chước Mẹ thiên nhiên. Nhưng quà thật đây là những nhiệm vụ vô cùng khó. Ví dụ như về các chất xúc tác hữu cơ, vốn có thể dẫn đến việc xây dựng các phân tử hiệu quả là là sự tổng hợp diễn ra trong tự nhiên, như trường hợp của phân tử strychnine phức tạp (một chất độc có trong cây mã tiền). Những ai đọc các tiêu thuyết trinh thám với vô số vụ giết người bí ẩn của Agatha Christie hẳn đều biết tác dụng khủng khiếp của strychnine. Tuy nhiên với các nhà hóa học thì strychnine lại giống như một khối Rubik lập phương; một thách thức lớn bởi nếu muốn giải quyết chỉ trong vài bước là không thể. Khi strychnine được tổng hợp lần đầu tiên vào

năm 1952, nó đòi hỏi 29 phản ứng khác nhau và chỉ có 0,0009% vật liệu ban đầu có thể hình thành nên strychnine. Phần còn lại đơn giản là vô tác dụng. Vào năm 2011, các nhà nghiên cứu mới có thể sử dụng các chất xúc tác hữu cơ và một phản ứng nối tầng để tạo ra strychnine trong 12 bước, và quá trình sản xuất đã hiệu quả hơn 7.000 lần.

Trong phạm vi của các hiện tượng và các tỉ lệ khác nhau rất lớn, tự nhiên dường như có khuynh hướng thuận tay này hơn tay khác, Felser cho biết thêm. Điều này cũng được phản ánh một sự thật là từ thuở ban sơ, vũ trụ được tạo ra từ vật chất chứ không phải là phản vật chất, và sự sống sử dụng các amino acids thuận trái và đường thuận phải.

“Tại sao trong thế giới sinh học chỉ thuận một tay? Tại sao chúng ta có sự ưu tiên này trong tự nhiên? Chúng ta thường không biết”, List nói. “Khuynh hướng thích một hướng thuận này thể hiện rõ ràng trong phản ứng xúc tác lên các chất nền vì vậy anh sẽ có nhiều hơn các phân tử thuận một hướng. Đó là một món quà vĩ đại. Tôi có thể nói, tự nhiên đem lại các phân tử đó cho chúng ta”.

“Với tôi, tính bất đối xứng là câu hỏi thú vị bậc nhất trong vật lý và hóa học, thậm chí có thể là sinh học”, Felser nói và cho biết thêm là việc thông báo giải Nobel Hóa học có thể “truyền cảm hứng cho thế hệ sau nhìn vào các vi phạm đối xứng trong tự nhiên”.

“Theo quan điểm của tôi, cuộc cách mạng thật sự của những gì chúng ta có – trong các phát hiện của chúng tôi – chỉ là một chút trên bề mặt”, List nói và cho biết thêm là việc nhận giải Nobel có thể cho phép ông có thêm sự tự do để theo đuổi các ý tưởng mới trong nghiên cứu của mình. “Tôi hi vọng tôi sẽ sống với sự ghi nhận này và tiếp tục khám phá những điều thú vị” □

thanh Nhân tổng hợp

Nguồn: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2021/summary/Nature>