

成为风暴驾驭者

——走进中国科学院精准智能化学重点实验室

■本报记者 倪思洁



中国科大供图

科学研究正在经历一场风暴。风暴源于狂飙突进的人工智能技术。“拥抱”还是“逃离”，成为摆在每位科研工作者的面前的选择题。

在中国科学技术大学（以下简称中国科大），一群“野心十足”的年轻人选择了拥抱。他们聚焦于最传统的学科——化学领域，从一个个不起眼的念头出发，打破研究惯例，成果频登《自然》《科学》。他们要在这场科研范式的变革中，争当风暴的驾驭者。

最初的念头：让计算机帮帮忙

如果当初没有选择与计算机“联手”，中国科大教授姚宏斌团队最新发表于《自然》的论文，或许还只是份实验报告。

4月初，这篇论文一经发表便引起轰动。姚宏斌团队关于固态电解质新家族的研究，被认为有望实现电化学储能领域“圣杯”级的全固态锂金属电池。

姚宏斌等人试图寻找一种金属卤化物，以提升固态锂电池的效能。在寻找卤化物电解质的过程中，他们曾考虑将石榴石氧化物——锂镧锆氧中的“氧”换成“氯”，但怎么才能合成出这种化合物，并不知道。如果按照传统的化学研究方法，科研人员得窝在实验室一点点试错。什么时候能试对，也不知道。

姚宏斌想：“有没有可能让计算机帮帮忙？”由于团队中没有能玩转计算机的人，姚宏斌开始搜罗人才。2021年，在研究生复试中，他相中了湘潭大学材料科学与工程学院本科毕业生罗锦达，因为他有计算机编程的基础并对其很感兴趣。

录取名单确定的当晚，姚宏斌拨通了罗锦达的电话：“我们有个材料体系很重要，需要用

到计算化学的方法，你愿不愿意加入？我会联系老师教你。”

姚宏斌之所以如此主动，是因为这项做了4年的研究已经面临经费困境，不能再拖了。

挑到罗锦达后，姚宏斌很快又找到计算化学的“大牛”——中国科大讲席教授李震宇，并把罗锦达“塞”给了他。

在姚宏斌和李震宇的共同指导下，罗锦达写出了满足研究需要的程序。之后，姚宏斌团队联合李震宇团队，根据计算机模拟结果设计出一个常温条件下可以稳定存在的镧系金属氯化物。他们又跟随计算机的指引，在实验室成功

合成具有优质性能的镧系金属氯化物固态电解质。

样品终于做出来了，可这只能算是一份“还不错的实验报告”。样品内部结构如何、锂离子在其中如何传导，这种固态电解质为何具有优质性能，都不知道。

此时，计算机的用处再次得以展现。基于分子动力学原理，团队成员把自己的实验数据和历史上相关研究的海量实验数据输入超算中心，经过长时间计算模拟和分析，最终探明镧系金属卤化物框架结构的锂离子传导原理。

“在这项研究中，模拟计算的分量约占三分之一。假设没有这三分之一，研究将无法令人满意，因为我们很可能无法合成最优的电解质材料，也无法把实验现象背后的原理解释清楚。”姚宏斌说。

论文评审人认为：“作者提出了一个全新的固态电解质结构材料，计算模拟非常完善。”初尝模拟计算甜头后，姚宏斌茅塞顿开：“我们突然发现，还可以干点其他事。”

他们现在有了一个之前想都不敢想的计划：“把元素周期表里的很多元素按不同比例组合，或是在现有海量数据中寻找符合我们期望的材料，把材料做得更多样化。”

突破传统：把计算机训练成“化学家”

姚宏斌团队让计算机成为了“帮手”，而中国科大教授江俊的尝试，则把计算机训练成可以思考的“化学家”。

江俊并非化学科班出身，他最早学的是物理专业，之后慢慢转向理论与计算化学。跨专业却让江俊有些不适应：“物理领域追求共性规律，但

化学追求个性特质，每个实验室都希望做得跟别人不一样，越不一样越好。”

他给学生讲课时经常发现，今天刚讲完一个化学经验规则，第二天就出现了例外，“某某实验又打破了之前的理论极限”。

理论与实践的脱节，让江俊一度“很崩溃”。他开始尝试寻找这个古老学科中可能存在的共性规律。直到2014年，他看到了解决问题的可能——用大数据和人工智能做。

“化学之所以个性化、看不到规律，是因为它是一个高维度的复杂体系，任何一个微小条件的改变，都会引起整个体系的变化。”江俊说，“或许我们可以通过数据智能的方式建立一个‘化学大脑’，找到化学中的共性规律。”

这不是靠一己之力就能完成的。与姚宏斌当初的选择一样，他也开始四处寻找志同道合者。他的团队里，慢慢有了人工智能、电子技术、数学等各个方向的学生。他们以数据为切入口，编写智能程序、搭建数据库、建立知识图谱，让计算机逐渐能够读文献、做实验。

起初有人不屑地说：“不过是实现了自动化而已。”但经过8年摸索，机器化学家从1.0版本升级到2.0版本，“化学大脑”能做的事覆盖了文献阅读、实验设计、配方与条件优化等化学研究的整个链条。

机器化学家诞生后，江俊团队的第一次尝试，是让它计算和预测蛋白质光谱，这篇论文被《科学》杂志编辑部重点推荐。“一般来说，计算一个蛋白质光谱，要做1000多个动力学构象，每个构象都要算一个多星期。我们用机器学习的方式让机器化学家去做，从原先需要20多年缩短到一两个小时。”江俊说。

之后，江俊团队又让升级后的机器化学家做高熵催化剂等化学品与材料的创制。机器化学家从1.6万篇论文中，自主遴选出5种非贵金属元素，又从55万种可能的金属配比中找出全局最优解，将传统“试错法”所需的1400年缩短至5周。

国际同行评价认为，机器化学家的“网络操作系统、工作站和智能化学大脑都是最先进的”，并预计它“将对化学科学产生巨大影响”。

这些都让江俊觉得“当初的方向没定错”。及至2022年，“中国科学院年度团队”和“年度网信工作十大进展”的名单里，都出现了“机器化学家”的名字。

未来，他们的目标是推动中科院沈阳自动化研究所、中科院深圳先进技术研究院、中科院计算技术研究所、中国科大等联合组建智慧实验室。同时，他们还要和中科院文献情报中心、中科院自动化研究所、中科院信息工程研究所联手，打造全球化知识平台，形成精准智能化学的全场景解决方案。（下转第2版）

天空地立体扫描诊断黑土地质量

本报讯(记者沈春蕾)近日,依托中国科学院“黑土粮仓”科技会战三江示范区项目,中科院东北地理与农业生态研究所(以下简称东北地理所)联合中科院空天信息创新研究院(以下简称空天院)等16家单位,在黑龙江省友谊农场开展了为期10天的黑土地航空飞行综合观测实验,精准把脉黑土地质量现状,监测土地“变薄、变瘦、变硬”等退化位置、程度和速率。

三江示范区项目负责人、东北地理所研究员刘焕军介绍,本次实验对友谊农场900平方公里黑土地开展天空地立体监测,采集黑土地全方位“CT”扫描影像,完成了近200个样方的地面调查工作,同时设计了黑土、砂土、白浆土、倒伏地块、鱼眼泡和草甸土6种类型的加密观测样方,对黑土地地形、土壤养分、土壤温湿度、作物性状、耕地质量等进行全方位精准诊断。

国家民用空间基础设施陆地观测卫星共性应用支撑平台项目综合实验场负责人陶醉表示,此次天空地综合实验期间,项目组协调国产卫星同步开机观测,涵盖空基系列和高分系列卫星15颗,累计覆盖监测区的同步卫星影像50余幅。

空天院航空遥感中心主任潘浩说,航空遥感系统承担了区域高分辨率多源遥感数据获取、天-地真实性传递验证等关键任务,并根

据任务要求优选了多光谱光学相机、高光谱相机和多维度合成孔径雷达等一批国产先进航空载荷,这些载荷可实现同步对地观测,同步获取多种类型、高现势性、综合客观的科学数据。这种类型的综合航空遥感实验在黑龙江山至中国黑土研究实验中尚属首次。

刘焕军透露,预计3年内,三江示范区将建立时空精准的多要素立体监测技术体系,推广黑土地保护“三江模式”,为我国黑土地立体监测技术体系建设、黑土地保护模式推广贡献样板。



东北地理所供图

中科院首个开放创新试点启动

本报讯(记者王敏)近日,中国科学院开放创新生态建设研讨会暨磁约束聚变能研究开放创新试点启动会在安徽合肥举办。据悉,磁约束聚变能研究成为中科院首个正式启动的开放创新试点领域,旨在加快构建具有全球竞争力和国际影响力的开放创新生态和国际科技合作网络。

经过半个世纪的创新和发展,依托合肥超环(HIT-7)、全超导托卡马克装置(EAST)、EAST辅助加热系统、聚变堆主机关键系统综合研究设施(CRAFT)四大核聚变研究领域的国家重大科技基础设施,中科院磁约束聚变能研究基础好、成果多、前景广,合肥科学岛成为全球核聚变研究的重要基地。围绕这些大科学工程项目的建设和运行,以及深度参与国际热核聚变实验堆ITER计划,中科院合肥物质科学研究院等离子体物理研究所与欧美

俄日等40多个国家的120多家科研机构建立了稳定的交流与合作关系,磁约束聚变实验装置成为国家开放共享大科学装置标杆之一。

国际著名科研机构及聚变研究资深专家评价EAST的装置性能和物理成果是“国际核聚变研究领域的重大里程碑,对于国际热核聚变实验堆ITER运行和未来聚变工程堆建设具有重要意义”。

据介绍,中科院磁约束聚变能研究将以此次开放创新试点为契机,不断深化重点合作,拓展合作对象和合作领域,推动政府间国际合作项目进展,谋划推动聚变能国际大科学计划,同时进一步加大引进国际人才力度及提升国际化水平,扩大国际合作和开放创新的深度与广度,促进研究不断取得新的重大突破。



第十九届天津工博会开幕

5月8日,在国家会展中心(天津),观众参观展会上展出的工业设备。

当日,第十九届中国(天津)国际装备制造业博览会在国家会展中心(天津)开幕。本届天津工博会吸引了来自机床、机器人、工业自动化及激光加工等领域的近1000个知名品牌参展,配套展出机械设备约4000台套。

新华社记者孙凡越/摄

欧美实验猴供不应求



本报讯 据《科学》消息,近日,美国国家科学院、工程院和医学院研究院发布的一份报告指出,用于研究的实验猴供应减少,并已危及美国关键的生物医学研究,而且未来还将如此。

报告指出,美国有近2/3的研究人员难以获得实验猴,这给他们开展的研究增加了很多不利因素,甚至在某些情况下导致他们放弃研究。

实验猴的价格也在飙升。每只猴子的价格涨幅约两倍,达到2.4万美元。由于亚洲猴子资源枯竭,美国国家灵长类动物研究中心又无法扩大其繁殖计划,导致实验猴短缺。报告还认为,依赖于从其他国家进口这些动物是不可持续的。

欧洲上个月发布的一份报告也得出了类似结论。“除非找到解决办法,否则欧洲的非人灵长类动物研究将会减少,甚至在某些地区会停止。”欧洲动物研究协会执行主任Kirk Leech说。

据了解,美国每年约有7万只猴子用于研究,欧盟约5000只,英国约2000只。近几年,由于新冠病毒大流行,大量猴子被用于疫苗研究,导致实验猴需求激增。

美国和欧盟在国内共同养了几千只实验猴,专供研究人员使用,但仍难以满足需求。美国国立卫生研究院2018年发布的一份报告指出,由于神经科学、传染病和老龄化的研究需求不断增长,在不久的将来,对恒河猴(美国学术实验室使

用的主要猴子物种)的需求可能会超过供应。这种短缺在2021年出现后,美国政府在其7个国家灵长类动物研究中心额外投资了3000多万美元用于猴子繁殖。

报告称,美国应该扩大国内育种计划,并继续投资非动物模型,如“芯片上的器官”技术。

埃默里国家灵长类动物研究中心动物资源副主任Joyce Cohen表示,即使繁殖计划的所有资金和基础设施能即时到位,也需要4到5年时间才能获得研究所需的一些动物。扩大目前的灵长类动物研究中心规模以满足这一需求可能需要数亿美元。

动物保护组织动物福利研究所研究员Eric Kleiman认为,增加国内繁殖并不是“万能药”。他希望供应危机能迫使科学家和政府机构认真考虑对策并投资于动物研究的替代品。

(辛雨)

活产率 72% 新一代试管婴儿技术问世

本报讯(记者冯丽妃)中国科学院北京基因组研究所研究员刘江团队与合作者,研发了使用表观遗传信息(即DNA甲基化指标)优选胚胎的方法(PIMS),使试管婴儿技术活产率达到72%,比传统方法提高了一倍多。相关研究5月8日发表于《细胞研究》。

解决出生障碍的最佳方式是辅助生殖技术(即试管婴儿),然而根据《柳叶刀》2021年相关研究统计,当前全球试管婴儿活产率不足30%。因此,提高试管婴儿活产率和降低出生缺陷是临床上亟待解决的问题。

“PIMS涉及的DNA甲基化是胞嘧啶上的甲基化修饰,对基因的表达起‘开关’作用。”刘

江向《中国科学报》解释,DNA甲基化状态的正确与否决定了婴儿能否顺利出生及健康成长。他从2013年开始与北京大学第三医院、广州医科大学附属第三医院合作研发PIMS,之后又与山东大学等单位合作,在国际上首次报道PIMS的临床应用结果。

刘江与合作者利用PIMS对182个家庭的800个胚胎进行优良胚胎(DNA甲基化水平在0.25~0.27之间的胚胎)的筛选,活产率达到72%。该技术改变了过去根据胚胎形态依靠经验选择胚胎的方法,大大提升了试管婴儿活产率,减少了移植周期次数,既减轻了患者痛苦,又减轻了家庭和社会的经济负担。

为解决上述问题,研究团队基于苯偶酰衍生物(n-BZ)开发了一系列具有多级刺激响应性的有机室温磷光弹性晶体材料。在外界刺激下,n-BZ可以实现青色室温磷光发射与橙色室温磷光发射之间可逆转换。更重要的是,

将刺激响应性与弹性室温磷光晶体相结合,可以提升纯有机室温磷光材料的应用潜力,但由于三线态对外界环境的敏感性,使晶体材料同时兼具室温磷光发射、刺激响应性和弹性非常困难。

为解决上述问题,研究团队基于苯偶酰衍生物(n-BZ)开发了一系列具有多级刺激响应性的有机室温磷光弹性晶体材料。在外界刺激下,n-BZ可以实现青色室温磷光发射与橙色室温磷光发射之间可逆转换。更重要的是,

这一系列室温磷光晶体材料在外界压力的作用下,可以发生弹性弯曲,这在室温磷光晶体材料中十分罕见。通过实验数据分析,研究团队证明了n-BZ晶体的多级刺激响应性源于外界刺激下分子激发态构型的变化,弹性源于晶体分子中存在大量分子间的弱相互作用。该项工作为设计具有多级刺激响应性室温磷光与弹性特性的晶体材料提供了一个新思路。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1016/j.matt.2023.04.006>

室温磷光晶体材料可弹性弯曲

本报讯(记者张双虎 李晨阳)近日,华东理工大学田不院士和马骥教授团队在刺激-响应型室温磷光材料研究方面取得新进展。相关成果发表于《物质》。

结晶诱导磷光已被证明是一种实现室温磷光发射的有效方法,然而,晶体的易碎性限制了其应用范围。因此,开发弹性有机室温磷光晶体至关重要。目前,由于刺激响应性,发光材料可快速对外界刺激(如力、热、pH、溶剂等)作出响应,从而成为近年来研究的热点之一。

科学网客户端全新上线



更多科教资讯
扫描二维码下载查看