

35 种新化合物问世

化学合成有了 AI“助手”

本报讯 一项近日发表于《自然》的研究报道了一种可以极大简化并加快化学合成过程的人工智能(AI)系统——MOSAIC。该系统由美国耶鲁大学与跨国制药公司勃林格格路翰合作开发。研究人员利用该系统成功合成了 35 种化合物,它们具有成为药物、农用化学品或化妆品的潜力,而无需进行任何筛选或调整。

“小分子合成是药物研发和其他许多重要领域中耗时较长的一个环节。”论文作者、耶鲁大学的化学家 Timothy Newhouse 说,MOSA-IC 能够突破这一瓶颈,提出完整、详细到足以让化学家直接操作的实验室指南,帮助他们创造新分子。

对于化学家来说,寻找新药和新材料是一项艰巨的任务。为了合成这些有前景的化合物,他们必须对数以百万计的已知化学反应进行筛选,同时每年有数十万种新的化学反应被添加进来,然后测试能否合成出这些化合物。

预测化学反应条件一直是 AI 在化学领

域的重点应用,其中最亮眼的工具是美国 IBM 公司开发的基于大语言模型(LLM)的在线化学合成预测平台 RXN for Chemistry。它利用简化分子线性输入规范(SMILES)系统,将化学三维结构转化为字母、数字和标点等更适合语言识别系统的符号。相比之下,瑞士洛桑联邦理工学院联合美国罗切斯特大学开发的 ChemCrow 则通过自然语言数据训练完成化学任务。

SMILES 方法使得处理起始材料、溶剂之类的化学信息变得更加容易。“我们的目标是建立一个通用模型,通过听取实验步骤,能够像化学家书写化学式那样读取化学信息,并将其迅速转化为实用建议。”Newhouse 说,将 MOSAIC 生成的分步指令整合到自动化系统中将是“自然的下一步”。

Newhouse 等研究人员利用此前研发的 AI 系统,将从专利中提取的约 100 万条反应记录分为 2285 个子集。利用这些子集,团队训练了美国 Meta 公司部分开源的 Llama LLM,创建了 2498 个独立的专家模型。每个模型专门对应从

一种分子开始的一种化学转化组合。它们可以在本地计算机上运行,因为使用的参数比目前主要的 LLM 少。

美国北卡罗来纳州立大学材料科学家 Martin Seifrid 表示,MOSAIC 避免了用大模型来解决问题,反而选择专注于一个精心设计的由许多更小的“专家”模型组成的系统。

研究人员尝试用 MOSAIC 提出的化学条件合成 52 种新物质。在实验室测试中,他们成功合成了其中的 35 种。此外,MOSAIC 准确预测了这些化合物的颜色和形态。MOSAIC 还提出了一种合成氮杂吡啶分子的新方法,并成功通过测试。

勃林格格路翰公司已经在使用 MOSA-IC。“他们对设计新的合成途径很感兴趣。”论文作者、耶鲁大学的理论与计算化学家 Victor Batista 说,如果能减少合成步骤,就能节省大量资金。MOSAIC 作为开源代码可供其他团队使用。

英国利物浦大学的计算机科学家 Xenofon Evangelopoulos 认为,这种方法具有很大的潜



化学合成是利用较简单的前体物质合成复杂化合物的过程。
图片来源:Andrew Lambert Photography/SPL

力,除了作为可靠的化学合成 AI 工具外,MO-SAIC 还确立了一种利用全球化学知识的模块化与功能化可扩展范例。

(徐锐)
相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s41586-026-10131-4>

远古“巨型蘑菇”可能属于未知生物门类

据新华社电 大约 4 亿年前,陆地上生活着一种形似树干、最高可达 8 米的奇特生物,人们原先认为它可能是一种“巨型蘑菇”,即真菌。但英国研究人员最近发现,这种名为原杉菌的生物有许多重要特征与真菌不符,更可能属于一个已灭绝的未知生物门类。相关论文已发表于《科学进展》。

原杉菌化石最早发现于 1859 年,它在生物门类中的归属长久以来一直存在争论。在排除了远古针叶植物、藻类、苔类等可能性后,古生物学家认为,它很可能是一种真菌,也可能是未知门类的多细胞生物。英国爱丁堡大学等机构的研究人员近期分析了一块新发现的化石后认为,后一种观点更站得住脚。

这块化石发现于苏格兰高地的莱尼燧石岩层,有 4.07 亿年历史,具有原杉菌的典型特征。显微镜观察显示,它内部有着高度复杂的三维微细结构,与动物和植物体内输送水分、营养物质和提供支撑的一些结构有相似之处,是现代真菌完全不具备的。

研究人员还分析了这块化石的“分子指纹”,将其与同一岩层中的真菌等生物化石进行对比。结果显示,该化石缺乏真菌细胞壁的核心成分——甲壳质和 β -葡聚糖,而同期真菌化石中都含有这些物质;它也不包含真菌的另一种生物标志物萜(一种多环有机物)。

综合现有证据,原杉菌无法被归入任何已知的生物门类,也不是多个物种共生的结构。研究人员说,它应该是一个此前不为人知、独立且已完全灭绝的复杂多细胞真核生物门类的成员。

两月大婴儿已会视觉分类物体

本报讯 一项研究显示,婴儿能够在视觉上分类不同物体的时间比此前认为的要早,甚至在两个月大时即可做到。这些发现表明,复杂视觉处理机制的发育早于此前认知,为理解婴儿期认知发展提供了新思路。这项研究成果 2 月 3 日发表于《自然-神经科学》。

人会在出生后第一年学会识别和分类物体,这一过程为日后学习语言奠定了基础,但这一能力何时在大脑中形成尚不明确。过去的研究依赖于行为测量,如注视时间,这在研究对象年龄小时很困难。但如今对清醒婴儿的功能性脑成像(fMRI)技术,让研究者能够以更高的准确性表征早期视觉功能。

在这项研究中,爱尔兰圣三一大学的 Cliona O'Doherty 和同事开展了大规模纵向 fMRI 研究,纳入 130 名两个月大的婴儿,其中 65 人在 9 个月大时接受了随访,并设置成年组进行了对照。这些婴儿观看了 12 类在出生后第一年常见的图像,如动物和树木,并被记录了大脑活动。

通过分析视觉处理通路,即腹侧流的脑活动,研究人员能够预测出物体的类别,表明两个月大的婴儿已经可以分类物体,到 9 个月时该功能得到了进一步完善。具体而言,婴儿视觉皮层和腹侧颞叶皮层的物体表征模式与成人相似,在区分生物/非生物及物体大小方面亦然,尽管婴儿此时视觉敏锐度和对世界的经验都很有限。

(赵熙熙)
相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s41593-025-02187-8>



图片来源:Pixabay



粪便中的细菌可能成为对抗癌症的意外武器。

图片来源:LEWIS HOUGHTON

科学此刻

移植粪便治疗癌症

对治疗无效的癌症患者来说,从药物治疗成功的人身上移植粪便,或许能提高治疗成功的可能性。改变肠道微生物群会对免疫系统产生连锁反应,在一项针对肾癌患者的小型试验中,这种方法似乎有助于稳定肿瘤。1 月 28 日,相关研究成果发表于《自然-医学》。

粪便微生物群移植(FMT)是一种安全的手术,即将一个人的粪便样本移植到另一个人的肠道中,以改善后者的微生物群。该疗法已在英国和美国获批用于治疗复发性耐药艰难梭菌感染,并且对其他疾病,如肠易激综合征也显示出一定疗效。

在治疗癌症时,名为检查点抑制剂的免疫治疗药物通过帮助免疫系统摧毁癌细胞发挥作用,但它们并非对所有人都有效。此前研究表明,对这些药物有反应的人的粪便微生物群,对那些没反应的患者的肠道可能是有益的。“微生物组是宿主免疫力的强大调节器,因此我们假设改变它可以增强免疫力,从而帮助杀死癌细胞。”论文作者、意大利圣心大学的 Gianluca Ianiro 说。

但此类研究通常集中于黑色素瘤上,

并且没有将粪便移植的效果与安慰剂组进行比较。因此,Ianiro 和同事招募了 45 名肾癌患者,他们在过去两个月里开始服用检查点抑制剂帕博利珠单抗和一种阻断肿瘤血液供应的药物阿昔替尼。

然后,研究人员随机将参与者分为两组,一组移植了服药后癌症缓解的人的粪便,另一组接受生理盐水,两者都通过肛门输送到大肠。在首次移植后的 3 个月和 6 个月,大多数参与者又以口服的形式接受了两剂指定的治疗药物:粪

便微生物群或生理盐水。

在 FMT 组中,参与者的癌症在首次移植后平均稳定了两年,而安慰剂组则为 9 个月。更重要的是,FMT 组中过半参与者的肿瘤缩小了,而安慰剂组中只有约 1/3。

“这为‘肠道微生物组可通过治疗性调控影响免疫疗法效果’提供了强有力的证据。”美国匹兹堡大学的 Hassane Zarour 说。FMT 究竟如何起作用尚不清楚,但对参与者 FMT 前后的粪便样本进行的分析表明,引入的一种名为 Blautia wexlerae 的肠道细菌,能够产生增强抗癌免疫细胞的短链脂肪酸。

FMT 似乎也改变了受体肠道中已有的细菌水平。例如,它降低了促进有害炎症的大肠杆菌的水平,提高了 Ruminococcus bromii 菌株的水平,后者会促进其他产生短链脂肪酸的细菌的生长。

Ianiro 表示,还需进一步研究确定粪便中哪些细菌是有益的,这有助于创建用于大规模癌症治疗的人工微生物样本。

(王铄)
相关论文信息:
<https://doi.org/10.1038/s41591-025-04189-2>

致命毒蛇搭印度火车“旅行”

本报讯 近年来,印度火车上有蛇的新闻频频登上当地报纸的头条。而一项最新研究表明,甚至世界上最长的毒蛇——眼镜王蛇都可能在印度乘火车“旅行”。这种无意的搭便车似乎正将这些致命毒蛇运到它们通常不会出现的地方,例如城市,这增加了人类与蛇受伤害的风险。1 月 26 日,相关研究成果发表于《热带生物》。

美国弗吉尼亚理工大学的 Max Jones 表示:“我认为这非常有趣且引人深思。”

事实上,蛇确实会出现在火车和飞机上。例如二战期间,爬上飞机起落架的棕林蛇便出现在太平洋的岛屿上。然而,直到近几年,爬行动物学家才开始探讨蛇及其他爬行动物搭火车迁移的现象。例如,2020 年公布的一篇预印本论文显示,一种体长 30 厘米的人侵蟒蛇正是通过火车扩大了在美国佛罗里达州的活动范围。

这项蛇通过铁路运输传播的研究,也是对蛇进行的首个此类分析,是德国波恩大学的 Dikansh Parma 在德国莱布尼茨生物多样性变化分析研究所攻读博士学位期间进行的。Parma 自幼痴迷蛇类,最喜欢眼镜王蛇。这种蛇不仅能长到 3 米,还是唯一会筑巢的蛇。它们主要捕食其他蛇类,只有在受惊或遭受攻击时才会咬人。论文作者之一、美国维克多谷学院的 Himrich Kaiser 说:“如果感到受威

胁,它们会瞬间发起攻击。在火车上,这样的情况很容易发生。”目前尚无针对眼镜王蛇的抗蛇毒血清。

在这项调查中,Parma 研究了印度西高止山脉周边的蛇类分布情况,试图了解各种蛇的栖息地及限制其活动与繁殖的因素。他还整理了过去 22 年的救援报告,采访目击者及核实地点以完善研究。

从山区的森林村落到低地森林环绕的城镇,研究人员共记录了 47 起眼镜王蛇出没事件。一个统计模型显示,预测西高止山脉眼镜王蛇分布情况的最可靠手段是依靠植被茂密的森林与河流。该模型还显示,眼镜王蛇存在于 5 个完全不适宜它们栖息的环境中,其中一个为印度果阿镇的火车站。在铁路旁工作的工人曾向救援队求助,移除一条两米长的眼镜王蛇。救援人员此前从未在该地区见过或听说过眼镜王蛇。

另外 4 起事件发生的地点也都在铁路沿线或几百米以内。Jones 表示:“唯一合理的解释是人类活动所致。”

Parma 和同事推测,这些擅长攀爬的蛇类可能趁货运列车停靠时爬上车厢。眼镜王蛇上车的一个原因可能是暴雨淹没了它们的洞穴,迫使其寻找干燥的庇护所;另一个原因可能是为捕猎,因为运载谷物或水果的列车往



一条眼镜王蛇出现在一个印度火车站附近,它可能是乘火车抵达的。
图片来源:SOURABH YADAV

往会吸引啮齿动物、蜥蜴或其他蛇类。

Jones 对眼镜王蛇能否通过铁路扩大活动范围持保留态度,因为这需要许多蛇最终到达同一个新的栖息地。但 Jones 强调,如果这种顶级掠食者在新环境中扎根,将产生“巨大的生态影响”。此外,即便一条眼镜王蛇入侵也会对人类构成威胁,尤其是当它出现在人们从未接触过这种毒蛇的地方。

Parma 认为,限制列车在原始森林停靠可有效防止眼镜王蛇的意外迁移。此外,还应强调不要在列车上留下食物,以免吸引啮齿动物。而最有效的干预措施是遏制森林退化,从而减少蛇类在铁路沿线觅食的可能性。

(文乐乐)
相关论文信息:
<https://doi.org/10.1111/btp.70157>

“小柯”秀

一个会写科学新闻的机器人

《地质学》

构造对分布式火山场岩浆储存的控制

美国北亚利桑那大学的 Mary R.Reid 团队报告了构造对分布式火山场岩浆储存的控制。1 月 28 日,相关研究成果发表于《地质学》。

分布式火山场在全球范围内均有分布,但其火山成分与喷发行为的控制机制尚不明确。为研究不同熔岩火山系统中喷发方式、熔体储存和火山灾害的控制因素,研究团队对美国亚利桑那州北部圣弗朗西斯科火山场的地下结构进行了地震成观测。结果揭示了两个部分熔融区及与下地壳移除相关的区域性地壳厚度变化。

圣弗朗西斯科山是一座长英质层状火山,位于完整地壳与移除地壳的边界之上。这一岩石圈性质的横向边界将熔体集中到中、下地壳储层,使这一以玄武岩为主的地区形成了长英质火山作用。这展示了横向岩石圈梯度如何将熔体集中在分布式火山场中,而移除在形成这些梯度中起着关键作用。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1130/G54058.1>

《科学》

弱断层在青藏高原形变过程中的作用

英国利兹大学的 T. J. Wright 团队用高分辨率大地测速揭示了青藏高原原弱断层在形变中的作用。1 月 29 日,相关论文发表于《科学》。

理解控制大陆构造变形的关键机制,一直是地球动力学领域的一项重大挑战。研究团队获得了青藏高原高分辨率的大地测量速度场数据,表明有几条主要的走滑断层系统将形变分布更均匀的区域分开。

研究团队认为,主要断层系统的集中应变由相对低黏度的延展性剪切带引起,这些剪切带贯穿地震活跃断层下方的岩石圈。

简单的模型计算表明,昆仑断裂带的高滑动率使得东西向延伸作用广泛分布于青藏高原南部和中部。中新世时期昆仑断层的活跃与南北地堑裂谷的开启同时发生,暗示两者之间存在因果关系。

相关论文信息:
<https://doi.org/10.1126/science.adi3552>

更多内容详见科学网小柯机器人频道:

<http://paper.sciencenet.cn/Alnews/>

“破界”之材!“中国牌”无机半导体来了

(上接第 1 版)

开拓“韧”的赛道 要性能更要用力之地

具备塑性解决了“能用”的问题,但对功能材料而言,“好用”才是终极目标。

“功能半导体材料只追求力学塑性无实际意义,塑性是使用前提,要使材料适配柔性场景以及复杂几何形态,功能才是核心价值,因此需要兼顾塑性和热电、传感等功能特性。”上海硅酸盐所副研究员杨世琪说。

团队在对 Ag₂S 材料体系的研究中发现了一个奇妙的“过渡区”。在这个区域,材料的原子排列处于“左右逢源”的微妙状态,既保留了使其柔韧的化学键网络,又获得了更优的导电特性。有了这一发现,团队像调制精密配方一样,通过同时添加极微量的铜、硒、碲等各司其职的元素,使材料拉伸应变提升至与金属相当的 100%时,其热电转换效率提升数个量级。

基于高性能塑性功能材料,团队又实现了一系列新突破。

他们研制出国际最薄、厚度仅 0.3 毫米(相当于鸡蛋壳的厚度)的超薄柔性热电器件,打造出能“穿”在身上的发电机,能直接利用人体与环境的微小温差发电。

团队开发出柔性温度传感阵列,温度每变化 1 摄氏度,传感器电阻就会产生 4.7%的明显变化。在人体健康监测中,该传感器件可以长期贴合皮肤进行连续监测,有望应用于局部炎症精准检测或血液循环异常实时监测。

团队还研制出可“弯折”的存储与计算芯片,未来手机的存储芯片可以像胶片一样卷曲。

目前,系列成果开始走向产业化。2024 年,上海硅酸盐所将 11 项与塑性无机半导体相关的专利转让给中科玻声科技(溧阳)有限公司,开展成果转化,产品应用场景包括光模块精确控温、芯片散热、自取能传感器电源等。

“实验室做几克样品与工厂生产几公斤产品,完全是两回事。”仇鹏飞说,“成果转化过程中,如何在材料规模化生产的同时,保持实验室小批量样品的高性能是最难课题。我们和企业技术人员深度合作,针对样品的均匀性、重复性等开展大量试验研究,提取了规模化过程中影响性能的关键因素,最终解决了这一转化应用之路上的关键问题。”

史迅表示,当前主流的半导体都起源于欧美发达国家,团队创造的“中国牌”无机半导体,对我国在半导体材料领域的自主可控和技术突围具有重要意义。“我们将逐步发现和拓展更多塑性无机半导体种类,助推塑性无机半导体向柔性电子皮肤、植入式医疗器件、脑机接口、极端环境探测等新场景拓展应用。”