AI遇上化学：“不可能”变为“可能”

热点透视 rediantoushi

8天完成688次化学实验，7天研究1000种催化配方……人类夜以继日多年才能完成的工作，人工智能（AI）在短时间内就能完成。

“AI从一个研究领域变成了一类赋能技术。”在12月9~10日召开的香山科学会议第768次学术讨论会上，中国科学院院士白春礼说，在化学领域，得益于AI的应用，化学反应预测与新化学物质的发现、化学试验的自动化与智能化等方面均取得了显著突破。

AI将如何改变化学研究？如何进一步推进AI与化学的深度融合？这些问题引发与会专家学者热议。

2个月内完成2000年的工作

AI让枯燥、危险、重复的化学实验来了个“大变身”：机器人自动操作化学合成平台，甚至具备观察、分析实验结果的能力。

中国科学技术大学研发的机器化学家系统“小来”，可以完成文献读取、合成、表征、性能测试、机器学习模型建立和优化等全流程任务。中国科学技术大学教授罗毅介绍，通过运用“小来”系统，团队加速了新材料的发现过程，2个月内就完成了需要验证2000年才能完成的复杂优化工作，利用火星陨石制备出实用的产氧电催化剂。

面向“远方”，AI能帮助人类探索出一条在地球外星系就地取材研制化学品的新路；聚焦“眼前”，有研究单位仅用一年时间，便利用高精准的预训练模型，从6000万个有机小分子的结构中筛选出符合冷却液不同性质和要求的目标分子，并成功完成这些分子的合成及实际产品的测试工作。

“科学研究的基本工具来自理论、实验和科学文献三方面。受工具的限制，过去的化学研究采取依赖经验和不断试错的方法，组织形式也往往是作坊模式。”中国科学院院士鄂维南说，AI将助力打造有效的理论、实验和文献工具平台，使科学研究迈向平台化模式。

中国科学院院士张锦也认为，利用AI、大数据、虚拟现实等工具，人类能够扩展思维，提升理解力，不断突破认知边界。通过构建覆盖研发全流程的一系列智能体来弥补短板，可以让科学家有工程思维、工程师有产品思维，打破实验室研究与产业化要求难以匹配的困境。

高效表达复杂微观世界

微观层面，AI在化学研究中的优势进一步显现。电子自旋、电荷密度、分子势能等与化学性质息息相关的参数，都变得可预测、可求解。

阿尔法折叠3这种模型为什么能准确预测蛋白质、DNA、RNA、配体等生命分子的结构及相互作用？白春礼介绍，它通过分析大量的输入和输出数据寻找规律，掌握分子间相互作用的力、角度等参数，再模拟出现实情况，预测可能的情况。

从读懂现象到摸清规律、再到高效表达复杂的微观世界，AI在化学领域让“不可能”的探索成为“可能”。

“在化学动力学理论研究方面，AI展现了巨大潜力。”中国科学院院士张东辉说，化学理论中的分子体系势能面构造存在“指数墙”困难，即计算量会随分子体系中原子个数增长而呈指数级增长。AI神经网络能高效表达复杂的高维函数，解决了这个难题。借助AI，团队解决了包含十几个原子的分子体系高精度势能面构造问题。

张东辉介绍，近年来，神经网络在求解电子运动薛定谔方程的基态波函数方面也取得了重要进展。在不存在费米共振的情况下，团队仅使用15000个参数，就能精确求解丙烷分子（包含11个原子）的振动能量。而这在此前被认为是难以求解的。

针对求解多电子薛定谔方程这一量子化学领域的核心问题，AI提供的新范式有望突破计算消耗随体系扩大呈指数级增长的瓶颈。中国科学院院士杨金龙介绍，基于生成式AI的“乾坤网络”（QiankunNet）可实现多电子薛定谔方程的直接求解。“化整为零、分而治之”的策略，使较复杂材料体系的计算从“不可能”逐步走向“可能”和“精准”。

中国科学技术大学一名博士研究生在实验室调试机器化学家系统“小来” ■ 张端摄

模型建构需“垂直发力”

“化学是唯一能够获得稳定新物质的科学。”白春礼说，AI将为发现更多前所未有的反应类型与合成方法带来无限可能。

然而，要担负起“从0到1”的创新任务，AI仍面临巨大挑战。

一方面是化学数据的质量与可用性问题。“化学研究数据类型复杂且高度多样化，涵盖分子表征、光谱图像、实验记录等多模态数据。”中国科学院自动化研究所所长徐波解释，现有模型往往难以高效表征、难以整合不同模态数据里的信息。化学研究还需AI具备更高阶的推理能力，以完成化学反应预测、分子逆向设计、多步合成路径规划等任务。

另一方面是AI化学知识储备问题。现有算法多为“黑箱式”模型，融入的化学知识不够。换句话说，要拿下“化学博士学位”，AI还需“垂直发力”。徐波说，当前许多AI系统主要依赖数据驱动的方法，与不同领域知识结合程度不足。为解决这个问题，AI领域学者与化学学者正在进行跨领域合作，为化学领域开发专用算法和模型，发展各类科学化学语言表征等基本能力，以构建更强大的模型。

中国科学院院士、南京大学党委书记谭铁牛认为，应在基座大模型的基础上，着力建构以知识和数据双驱动的多任务多目标垂直模型。

白春礼也认为，加快AI和自动化实验的深度融合，亟需构建高质量、开放共享的化学基础数据库，并考虑数据安全管理等因素。他建议，应建立自主可控、开放共享的基础大模型，开发针对化学复杂问题的专用AI算法等，进一步加强学科交叉并重视AI化学领域的人才培养，加快建设AI化学生态平台。

张佳星

硬翅膀，软着陆：马恒用智慧和汗水铺就的安全飞行长征路

在航空业蓬勃发展的今天，随着空中交通流量的日益增长与复杂化，传统的航空管理方式难以适应现代航空的高标准需求。由此，下一代航空交通管理系统应运而生，也悄然重塑了飞行员的角色与职责。发表于国家级科技期刊《运输经理世界》的《下一代航空交通管理系统对飞行员角色和职责的影响》便深入探讨了这一变革如何影响飞行员的工作方式和决策过程。这篇文章因其深度分析和实用建议引发了业界广泛关注和热烈讨论，使马恒的名字映入了更多人的眼帘。

马恒，中国国际航空股份有限公司（简称“国航”）的资深飞行员，不仅是一位穿梭于蓝天白云间的飞行艺术家，更是一位默默守护旅客安全、见证大地辽阔的空中卫士。正如古语所云：“不积跬步无以至千里，不积小流无以成江海。”飞行员的职业之路亦是如此，每一段平稳的飞行，每一次精准的起降，都是通往卓越飞行员之路上不可或缺的积累。对于马恒而言，安全不仅是职业生涯的起点，更是一场永无止境的长征。

多年来，马恒不断追求飞行质量和安全性的提升，未发生飞行事故征候和飞行事故，创造了累计30,417小时的安全飞行记录，锻造了那对令人敬佩的“硬翅膀”。他的卓越贡献和杰出表现也得到了中国民用航空局的高度认可，荣获了安全飞行银质奖章。不仅如此，作为国航的一位杰出飞行员，马恒以其卓越的专业技能和对安全飞行的坚定承诺，成为飞行队伍的标杆，先后被评为“航空安全生产标兵”和“飞行总队先进个人”。

当然，马恒的职业生涯中不乏里程碑式的时刻。他曾赴波音公司试驾波音737—800，有幸见证了波音737天空内饰飞机首次进入中国的历史性时刻。作为这一重要事件的参与者，马恒为国航引入先进机型和技术搭建了桥梁，也为提升中国飞行员的技术水平和飞行经验树立了榜样。

在以马恒为代表的优秀飞行员们的引领下，“硬翅膀”与“软着陆”的完美结合成为国航飞行队伍的一大特色，使其不仅在国内树立了典范，更是在国际舞台上赢得了广泛尊重。国航凭借其在安全飞行方面的杰出表现，荣获了诸多重磅奖项，如“国际民航组织荣誉奖章”“安全飞行标兵单位”以及“北京2022年冬奥会、冬残奥会北京市先进集体”等。尤其值得一提的是，国航在全球航空安全评估中脱颖而出，在“世界十大最安全航空公司”榜单中稳居第五位。

这支飞行队伍的安全之花之所以能常开不谢，正是因为有像马恒这样的飞行员们，围绕飞行安全解难题、求突破，以实际行动诠释了对飞行安全的执着追求。为保障飞行安全，马恒进行深入研究，独立撰写了《飞行员的视性错觉对飞行安全的影响分析》，发表在国家级科技类专业学术理论期刊《中国航班》中。在这篇文章中，他深入探讨了视性错觉这一复杂现象，分析其产生原因、表现形式及其对飞行安全的具体影响，并提出了有效的应对策略，旨在增强飞行员的应对能力和飞行安全。

马恒的职业生涯跨越二十五载，通过智慧与汗水的交织收获了累累硕果，期间不仅见证了无数次穿越气旋侵袭、突破雷雨困扰、冲破云雾迷障的非凡历程，更展现了他对飞行事业无尽的热情和不懈追求。未来，他将继续以蓝天为纸，飞机为笔，谱写出更加绚丽的篇章！

宋明

人淡如菊一智者 步履科学“绘”传奇

（上接A1版）2015年，美国迪士尼订购了50万元的儿童水彩笔。“这笔订单让美国企业对我们刮目相看，因为经他们监测，我们的儿童水彩笔指标完全符合美国和欧盟儿童用具标准。这一订单让我们对产品打向全球市场有了更大的自信和决心，使科技转化实现了‘市场突围’。”董川讲道。同时，水致褪色环保笔成功进驻义乌科创园，在山西、上海、北京、河南、福建等省市千余所学校分散使用，并出口美国、日本、法国等多个国家。

对真理的探索是董川一直的追求。今年4月，董川及团队成员参与的“新型环保水致褪色色料及其在书写绘画中的应用”项目获得了瑞士国际发明展特别嘉许金奖。

“下一步，团队将继续推进项目在其他领域的应用，进一步加快推进科技成果转化，真正实现科技改变生活。”谈及下一步的科研方向，董川眼里的光芒越发明亮。

匠心精神的“园丁”

科教40年，董川坚持以德施教、因材施教，用自己的一腔热情践行一位学人的理想——教书育人。

“我经过不断地思考，认为科教的目的是立德树人，让学生和老师热爱科学，服务社会，做对社会有用的人。”在董川看来，立德树人是培养学生的人生观，热爱科学是培养学生的兴趣，服务社会是培养学生脚踏实地。

作为一名大学教师，董川非常注重学生的品德培养，经常告诫学生“先学做人，后做学问；做学问要真，求知识要新”，特别是告诫研究生在科学的道路上无捷径可走，要攀登科研高峰，就要反对浮躁浮夸和急功近利等不良学风，“非淡泊无以明志，非宁静无以致远”；他倡导“万物皆可为师，处处可学习，事事可借鉴”，教导学生只要善于观察和思考，就能从中求得真知，获得教益。

“科技要全球化，眼界也要全球化。”多年来，董川积极参与国内外同行的合作交流，他认为研究生的培养不能坐井观天，而是要走出去、请进来。为此，他经常选派课题组青年教师和研究生赴中国香港浸会大学、加拿大麦克马斯特大学、日本大阪大学、美国匹兹堡大学等国内外知名学校研究学习，为研究生国际化培养奠定基础。

“每每派出学生时，我总要叮嘱他们的所作所为，这不仅仅代表自己，同时代表着课题组，甚至是山西大学，所以大家要时刻铭记于心。”与此同时，董川还非常注重研究生的日常培养，定期鼓励学生进行双语汇报，并对每一位汇报的学生进行点评，既锻炼了学生的口语能力，同时培养学生沟通协作能力，为日后走出象牙塔步入工作岗位奠定基础。

“老师应当实现一种自立立人、自达达人的境界。把培育社会主义事业接班人作为终生奋斗的事业和追求。为国育人，为党育才，与学生构建一种‘一日为师，终身为师’的和谐结构。”董川说道。

人文科普路上的菊韵智者

“科学没有国界，科学家却有祖国。”一直以来，董川不断思考人文精神对于一名科研工作者的意义是什么？在“强国复兴有我”的实践中科研工作者又该担负怎样的社会责任？

“在科学研究和教书育人的过程中，我对人生、对为世、对学生的人生观进行不断地思考探索，并且在研究生的科学课题和业余讨论中给予应用。”董川说道。

穷片叶飞花之理，究科技人文之本。多年来，自然规律与社会现象中蕴藏着的人文精神深深感染着董川。他学理，悟理之严密与创新，他观水；品水之坚韧与谦和；他看树，察树之守候与奉献；他于牛顿定律中思考，于物理量及量纲中探求，于数字运算中斟酌，于饮茶棋牌中感悟；他从自然科学的角度出发，思考人生的哲学与智慧……始终关注科学研究与人文修养的平衡与协调，认为只有“真善结合，社会才会和谐美好”。

2012年，董川出版了自己的第一部科普读物《科学技术中的人文智慧漫谈》，之后相继出版了《科技人文学》《自然观到人生观——自然科学的人文哲理》等一系列丛书，向大众传递着科学人文的智慧，希冀将科普之光洒在人们心中。

“我认为坚持致力于科学人文的普及与传播对于提升公众科学素养、推动科技进步创新、培养批判性思维、促进文化多样性和包容性、提升个人生活质量、构建和谐美好社会等方面具有重要的意义。”董川坚定地讲道。

2018年始，董川带领自己的博士生团队开始致力于创办“每日一读”科普专栏线上活动，建立融入语言、文字、图画、声音于一体的线上科普渠道，增长栏目趣味性与生动性的同时，普及与传播科学人文知识。同时，为了引领学生提升人文关怀，2022年，他为全校本科生开设校本通识课程——科学思想与人文精神，立足课程思政化，将科学思想与人文精神有机交叉融合，给学生讲好如何做人的第一课，教育引导学生立鸿鹄志、做奋斗者。

以科学的眼光审视世界，以人文的情怀拥抱生活，董川，一位菊韵智者的“园丁”，以独特的视角和深邃的思考，不仅成为学术殿堂的领航者，更是人文精神的守护者、传承者。

创新杂谈 chuangxinzatan

以科技创新引领新质生产力发展

■ 薛莉

新质生产力具有高科技、高效能、高质量特征，发展新质生产力，必须充分发挥科技创新的引领作用，以科技创新开辟发展新领域新赛道，塑造发展新动能新优势。

党的二十届三中全会审议通过的《中共中央关于进一步全面深化改革、推进中国式现代化的决定》提出，“构建支持全面创新体制机制”。支持全面创新体制机制的加快构建，需要政府、企业、学校、研发机构等相互合作，形成合力，系统推进。面向国家战略需求，建立紧密对接产业链、创新链的学科专业体系。深化推进科技人才分类评价改革，全方位培养用好人才。推动产学研深度合作，形成一批有为政府与有效市场协同发力的创新联合体。近年来，作为国家科技创新格局和区域创新能力“第一方阵”成员，江苏以创新驱动为核心，奋力推进高水平科技强省建设，在关键核心技术攻关、推动科技创新和产业创新深度融合、集聚科技领军人才和创新团队、深化科技体制改革等方面都卓有成效，为全面推进中国式现代化江苏新实践注入强大动能。

当前，全球科技创新进入了空前密集的活跃期，新一代信息技术、人工智能、生命科学等新兴技术加快突破，催生一系列新的业态，赋予新质生产力更多的时代特征。这些颠覆性、前沿性技术领域涉及众多产业，对知识、资金、人才等提出更高要求，仅凭一方创新主体力量难以克服研发长周期与市场需求快迭代之间的矛盾。抓住机遇、应对挑战、解决困难，还有很多工作要做。

探索新体制新机制，进一步汇聚推进创新的磅礴力量。充分发挥新型举国体制优势，统筹各方面资源，集全国之力、汇八方之智，把政府、市场、社会等力量拧成一股绳，为新质生产力发展积蓄力量。以重大创新工程为抓手，推动科研组织范式变革。可按照目标设定—任务分工—资源配置—考核评价的逻辑链条，通过“揭榜挂帅”攻关机制和“赛马制”等科研组织方式创新，真正让有优势的地方和单位承接重大项目研发，形成协同创新、良性竞争的有利局面。以大平台大装置为载体，全面支撑重大战略共性技术和产业发展。在重点领域组建一批国家实验室，组织一批大科学计划和工程，搭建一批公共服务平台，并通过对重大科研基础设施的建设、共性技术研究平台的投入，形成重大科研攻关的创新合力。

发挥国有资本战略性、牵引性作用，进一步织密织牢耐心资本供应网络。利用创业投资基金加大对行业科技领军企业、科技成果转化和产业链上下游中小企业的投资力度，运用投行思维进行科技项目孵化，鼓励投早、投小、投长期、投硬科技，发挥长期耐心资本作用。充分发挥政府资本的引导作用，吸引集聚社会资本，引入更多战略投资者，鼓励头部企业建立产业基金，构建政府基金、产业基金和市场基金联动发展格局，完善多层次金融支持服务实体经济体系，形成支持科技企业发展的耐心资本供应网络。

因地制宜打造系统性产业集群，进一步推动产业迭代升级。中央经济工作会议提出，“综合整治‘内卷式’竞争，规范地方政府和企业行为”。在打造战略性新兴产业、抢滩布局未来产业时，紧紧围绕《国家创新驱动发展战略纲要》等战略规划，根据各地区、各产业已有基础，在全面审视区位产业优势基础上，统筹谋划未来产业区域布局，避免“一哄而上”、新兴产业“泡沫化”“盆景化”。增强产业发展接续性，找准关键共性技术和零部件薄弱环节，引导企业合力攻关，积极运用数字技术、绿色技术改造传统产业，推动新旧动能平稳接续转换。

巧用无人机 提高保障力

“无人机已经侦察到火情。”

“起火点锁定，准备灭火。”

“报告，东南方向500米处火灾已被扑灭。”

……

近日，天山脚下，新疆军区某人武部组织的一场民兵无人机分队全力抢险救灾综合保障演练正在进行。

指挥所里，官兵突然收到无人机传回的火灾消息，指挥所迅速派出某型无人机前去灭火，险情很快得到排除。

这是该人武部探索新域新质力量助推民兵分队战斗力提升的一个缩影。

“民兵应急连在保障机动途中，突然遭遇恶劣天气，有多名官兵受困，现场携带的保障物资几乎用尽……”指挥所在接到通知后，迅速派出无人机携带物资前去救援，同时派出一架无人机侦搜，及时将相关情况传回指挥所，为下一步制定行动计划提供信息支撑。

“科技就是战斗力，能够不断提升民兵分队的应急应战能力。”该人武部领导说。

笔者了解到，近年来，该人武部在组织民兵分队实战化训练中积极发挥无人直升机小巧轻便、能悄无声息地进入“敌”防区、数据传输稳定等特点，把无人机运用到灾情信息侦搜、灭火救灾、物资投送、穿障破障等情境中，并积极组织演练检验，探索无人化条件下应急应战保障模式和组织指挥流程。

据悉，该人武部坚持问题导向，梳理出多个制约民兵新域新质战斗力提升的问题，并逐一研究解决方案，为下一步无人机实战化运用提供客观全面的参考借鉴。 朱彤

从“一株药”到“一条链”的华丽蜕变

（上接A1版）为了公司更好地发展，公司科技研发中心又与山西大学生命科学学院、北京中医药大学、中国中医科学院中药研究所、中国科学院过程工程研究所、中国科学院上海药物研究所等团队签署合作协议，和山西大学合作设立了岳康产业技术应用研究院和产学研基地。今年，岳康集团还投资4.3亿元，建设中药现代化和创新药制剂项目，新建的4000吨中药材甲类提取车间、占地8000平方米的综合制剂车间已完成地基建设。新技术、新理念、新业态的导入，让岳康药业做到了本地研发、本地培育、本地加工、本地交易、本地检验，做出有自主知识产权的独家专利产品。

在着力打造中医药与中药材产业链发展上，岳康药业实现了从培育“一株药”到打造“一条链”的蜕变。下一步，岳康集团将做精中药标准化种植、做大中药现代化制造、做强中药市场化流通、做活中医药融合产业，建设安泽中药材大宗现货交易集散地，不断助推中医药产业高质量发展。