



扫二维码 看科学报



扫二维码 看科学网

新浪微博 <http://weibo.com/kexuebao>

科学网 [www.sciencenet.cn](http://www.sciencenet.cn)

# “机器化学家”是怎样炼成的

■本报记者 王敏

自主阅读海量文献汲取前人智慧,制定实验方案,在无人干预的情况下完成实验全流程,思考出最优解,创造新的化学品和材料。

这正是中国科学技术大学(以下简称中国科大)化学与材料科学学院教授罗毅、江俊团队的作品。8年攻关,他们开发和集成移动机器人、智能化学工作站、智能操作系统、科学数据与模型库,研制出全球首个“数据智能驱动的全流程机器化学家平台”(以下简称机器化学家)。

研究论文发表于《国家科学评论》。审稿人评价,该成果的“机器人系统、工作站和智能化学大脑都是最先进的”,“将对化学科学产生巨大影响”。

“这主要得益于中国科大多学科交叉的背景,促使不同学科的科研人员会集在一起做一件事。我们的目标是建成机器化学家大科学装置,解放化学家双手,加快新化学品和新材料的研发创制。”江俊向《中国科学报》介绍。

日前,罗毅、江俊团队获得了2022年中国科学院年度团队称号。

## “最强化学大脑”引领化学研究智能化

提及为何研发机器化学家,江俊自嘲是因为手笨。早在2003年,还在中国科学院上海技术物理研究所攻读硕博连读学位的江俊经常要做实验。“但是我的手特别笨,所以做实验失败是常有的事。”江俊说,后来他师从罗毅教授,专攻理论化学研究。

在做理论研究中,江俊发现中国人在学术上非常“被动”。“我们做了大量研究工作,最终成果发表在外文期刊上。但引用这些论文数据时还得花钱买,并且只有访问权,不允许大量下载。”江俊认为,“我们应该做中国人自己的材料数据库。”

物理学家狄拉克说“公式都是优美的”,底层规则是非常清晰和简单的。但是一旦将理论应用到实践中,解答其方程的复杂度往往高到无法想象,人类无法计算求解。因此,由于算力和人类思考能力的局限,理论和实践常处于“脱节”状态。这种长期“脱节”,带来了传统化学研究的最大“痛点”——科研人员主要依赖于“穷举”“试错”的手段创制新物质,导致实验成本高、周期跨度大;随着化学研究对象日益复杂化、高维化,面对庞大的化学空间,配方和工艺的搜索常常止步于局部最优,无法进行全局探索。



研究人员在控制室分析电催化器实验数据结果。

张大岗/摄

逐渐兴起并快速迭代进化的大数据与人工智能技术为解决这些难题提供了新的机遇。罗毅、江俊及其团队提出了“机器化学家”的概念,并开展相关科研工作。从2014年到2022年,他们攻坚克难,成功研制出机器化学家。

机器化学家由“化学大脑”、机器人实验员和智能化学工作站三部分组成。其中最核心的“化学大脑”通过分析大量化学实验和理论数据建立知识图谱,实现了阅读理解文献、设计化学实验、自主优化方案,并配备了人机交互的操作系统,便于“无编程基础”的科研人员使用。机器人实验员和16个智能化学工作站之间能进行数据交换和互动,精准配合执行化学实验。

以研制潜力巨大的高熵化合物催化剂为例,江俊展示了机器化学家的“绝技”:阅读1.6万篇论文,自主遴选出5种非贵金属元素,融合2万组理论计算数据和200组全流程机器实验数据,建立了理论驱动的智能模型,从55万种可能的金属配比中找出最优的高熵催化剂。将传统需要消耗大量人力、物力、时间等的“炒菜式”遍历搜索所需的1400年,缩短为5周。

业内专家认为,机器化学家的研究工作脱离了传统试错研究范式的限制,展现出“最

强化学大脑”指导的智能新范式的巨大优势,引领化学研究朝着知识理解数字化、实验操作指令化、材料创制模板化的未来趋势前进,确立了我国在智能化学创新领域的全球领跑地位。

## 从不“摆烂”、从不应付差差

如此“聪慧”的机器化学家,其研发团队近30人,多数是“90后”“95后”。他们分工明确,配合默契。

化学实验经验丰富的朱青等人负责实验方案设计,并对机器人实验员的操作质量进行评估;黄炎等人负责理论模型的构建;张百成编写程序,让机器人读论文、提出科学假设、形成实验报告和方案;肖恒宇和赵路远等主攻系统整体软件架构以及各个化学工作站的软件开发;自动化系的高伟伟、张飞团队负责研制机器人。

(下转第2版)

致敬科学家  
建功新时代

# 世卫结束猴痘紧急状态遭科学家质疑



寰球眼

本报讯 猴痘疫情暴发10个月,随着欧洲和美洲病例的大幅下降,世界卫生组织(WHO)总干事谭德塞5月11日宣布,猴痘疫情不再构成“国际关注的突发公共卫生事件”。但研究人员担心,这一决定将无法遏制非洲等地区仍在流行的猴痘疫情。

“我最大的担忧是,用于应对猴痘疫情的资金投入和资源将减少,2022年疫情大规模暴发后的诸多努力将无法持续。”美国埃默里大学传染病物理学家Boghuma Tiantanji说,在2022年猴痘疫情暴发成为全球关注的重要疾病前,这种疾病就严重影响着西非和中非偏远地区贫困人口,但并未得到太多关注。因此他很担心在下次影响西方富裕国家的猴痘疫情暴发前,对非洲猴痘疫情的关注会恢复原状。

猴痘是一种由猴痘病毒(MPV)感染引起的疾病。这种令人痛苦且可能致命的疾病在非洲流行,但去年世界其他地区出现了一种新的猴痘病毒毒株,引发国际关注。后来针对猴痘疫情传播情况,WHO于去年7月宣布其为“国际关注的突发公共卫生事件”。

在2022年夏天猴痘疫情最严重的时候,仅美洲和欧洲每周报告病例就达7000多例。过去3个月WHO收到报告的猴痘

病例相较更早以前的3个月减少了近90%,自然免疫和应对行为的改变似乎遏制了疾病的传播。因此猴痘应急委员会经过激烈讨论后,将猴痘从“国际关注的突发公共卫生事件”中取消,委员会认为长期努力而非紧急措施是目前控制猴痘传播的最佳方式。

然而,WHO 5月11日发布的最新情况报告显示,过去一周全球猴痘病例略有上升。瑞士伯尔尼大学传染病流行病学专家、WHO猴痘应急委员会副主席尼古拉·洛指出,目前某些国家小规模猴痘疫情仍在持续,因此,存在疫情再次大规模暴发的不确定性。

而这正是对WHO宣布猴痘疫情不构成“国际关注的突发公共卫生事件”感到担忧的研究人员的关注点。

“非洲面临着许多问题,而上述决定将使猴痘再次被忽视,就像在2022年猴痘疫情暴发前的很长一段时间一样。”WHO紧急情况委员会成员、尼日利亚尼日尔河三角洲大学的Dimie Ogoina说,因此他并不完全同意委员会的决定。

据悉,目前已分发的数百万支用于应对猴痘疫情的疫苗大多在美国和英国等富裕国家。在很大程度上非洲国家无法获得太多疫苗和相关治疗。此外,即将到来的北半球夏季可能会助长猴痘的传播。

对此,谭德塞指出,猴痘疫情不再构成“国际关注的突发公共卫生事件”并不意味着相关工作已经结束。相反,猴痘仍对公共卫生构成重大挑战,需要各国采取有力、积极和可持续的应对措施。

有WHO官员呼吁各国和国际组织作出财政承诺,以监测、治疗疾病和了解疾病发展。

“显然,宣布猴痘疫情不再构成‘国际关注的突发公共卫生事件’,绝不意味着猴痘不再是一种有威胁的传染病,而是意味着我们需要作出国际承诺,以实现控制和消除猴痘人传人的长期目标。”尼古拉·洛说。

(徐锐)

# 国际科学界呼吁通过合作推动人类共同发展

据新华社电 国际科学理事会于近日在巴黎召开中期全体会员会议,来自全球各地的百余位科技专家和科技组织代表齐聚一堂,围绕“充分利用科学的合力”共同研讨。与会者普遍认为,在当今世界局势复杂的背景下,科学界更应携手合作,凝聚共识,推动科技开放、信任、合作,推动人类共同进步和可持续发展。

国际科学理事会主席彼得·格卢克曼表示,科学是人类共同的语言,科学界应当跨越当今世界的地缘政治紧张因素,秉持科学态度,不受外界干扰,推动科技开放、信任、合作,为全球政府决策提供科学依据,协力建设更加和谐美好的世界。他指出,中国科学技术协会是国际科学理事会重要会员,多年来中国科学家深度参与和积极支持国际科学理事会工作,作出了卓越贡献。

国际科学理事会首席执行官萨尔瓦托雷·阿里科接受新华社记者采访时说,科学没有国界,科学家出于对研究课题的共同兴趣而开展协作,这种合作不应被政治所左右。科学进步需要科学界的充分交流,这种交流带来改变,促成解决方案。

美国国家科学院国际秘书、神经生物学专家

约翰·希尔德布兰德对记者表示,美国国家科学院具有与中国开展合作的长期传统。尽管面临当今世界的复杂局势,美中科学界交流仍然必不可少。无论政治领域发生什么,美中科学界必须保持真正有力的合作,这符合世界福祉,有助于共同应对人类面临的重大挑战。

国际科学理事会科学规划委员会委员、中国科学院生态环境研究中心主任朱永官院士指出,面对气候变化、环境污染等全球议题,任何国家都无法独自应对、独善其身。因此,科学界应尽可能开展合作,既分享经验,也借鉴教训,这样整个世界才会更高效、更安全、更健康。

太平洋科学协会主席、厦门大学讲席教授吕永龙分享会议期间的交流感受时说,无论世界局势如何变化,科学家之间的交流一定要进行下去,这是与会各国科学家的普遍共识。对科学学术交流设置人为障碍,既不符合各方利益,也是国际科学界不愿看到的。

国际科学理事会是汇聚自然科学和社会科学学科的非政府国际科技组织。其总部设在巴黎,会员来自全球一百多个国家和地区。中国科协是其会员单位。

(徐永春)

# 第十四届华语科幻星云奖在三星堆揭晓

据新华社电 第十四届华语科幻星云奖5月13日晚在四川广汉三星堆揭晓。

天瑞说符的《我们生活在南京》获长篇小说金奖,并同时摘取2020至2022年度新星金奖桂冠;星温的《解控人生的少女》获中篇小说金奖;迟卉的《不做梦的群星》获短篇小说金奖;春喜翻译[韩]金草叶著的《如果我们无法以光速前行》获翻译作品金奖;吴岩、贾立元、任冬

梅、肖汉、姜振宇、王璐的《20世纪中国科幻小说史》获非虚构作品金奖;姚利芬的《〈大国重器〉:时代科幻文学——为科学家提供“脑洞氧气”》获评论金奖。

据了解,华语科幻星云奖是由华人科幻志愿者于2010年创立的公益性科幻奖项,致力于在全球范围内发现和奖励优秀华语科幻作品,作者和相关从业者。

(余里)

# 食蟹猴胚胎3D长时程体外培养模型建立

本报讯(记者李晨阳)中国科学院动物研究所/北京干细胞与再生医学研究院研究人员和美国宾夕法尼亚大学的研究人员,建立了一个可支持食蟹猴胚胎体外发育至受精后25天的3D长时程培养体系(pIVC),并基于该体系探究了灵长类胚胎中晚期原肠运动和早期神经发育过程中的核心事件和谱系特征。相关研究5月11日以封面文章形式在线发表于《细胞》。

出生缺陷是婴儿死亡的首要原因,与早期胚胎发育异常密切相关。胚胎体外培养技术是可视化研究胚胎发育的有力工具。科学家一直致力于搭建非人灵长类胚胎体外培养体系。1995年,澳大利亚科学家将绒猴的囊胚体外培

养至胚胎期11天;2019年,王红梅团队及国内外同行将食蟹猴胚胎体外培养至胚胎期20天。但要探究灵长类胚胎中晚期原肠运动和早期神经发育,还需要进一步延长食蟹猴胚胎的体外发育历程。

在该研究中,研究人员首先比较了2D与3D培养体系,发现2D和3D培养体系都能支持胚胎发育到第20天。在2D体系下,胚胎由于胚外组织发育旺盛而迅速增大,但内部的胚体发育并不好;而在3D体系下,胚胎的胚外组织生长受限,但胚体结构显著发育。为了保证胚体发育,研究人员继续优化3D体系,并建立了pIVC,该体系能支持33.7%的食蟹猴胚胎发育到胚胎期25天。

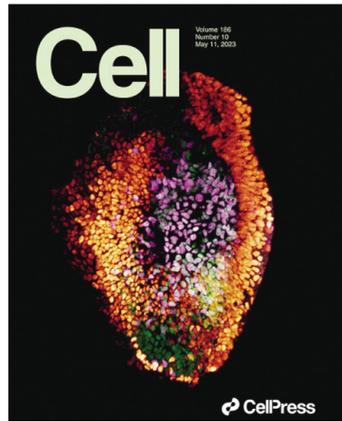
进一步研究表明,与相同发育阶段的体内正常胚胎相比,pIVC胚胎的分子表达特征与正常胚胎相似,表明pIVC胚胎可重现原肠运动中晚期阶段中胚层和内胚层的发育。

最后研究者对9个pIVC胚胎单细胞的转录组、DNA甲基化和染色质可及性进行测序和分析。结果表明,与该团队2022年在《自然》报道的相同发育阶段的食蟹猴胚胎单细胞转录组数据库相比,pIVC胚胎可重现体内正常胚胎的转录组特征,并且各种细胞类型的基因均发生了甲基化,胚胎组织的DNA甲基化水平高于胚外组织,与已报道的小鼠和人类胚胎特征相似。

该研究进一步填补了灵长类胚胎中晚期原肠运动至早期器官发育阶段的领域空白,为灵长类胚胎体外培养和基于干细胞构建的“类胚胎”体外培养提供了参考体系,为深入了解人类早期胚胎发育机制、开展早期胚胎发育异常相关疾病的病理研究提供了技术平台。

相关论文信息:

<https://doi.org/10.1016/j.cell.2023.04.019>



当期封面。

图片来源: Cell Press

# 突破! 约束中子星性质有了新角度

■本报见习记者 叶满山

自20世纪60年代人类首次发现中子星以来,人们对这个密度惊人的神秘天体充满了好奇。中子星是除黑洞外密度最大的星体,具有极强的引力场和磁场,对于探索宇宙具有重要意义。各国科研机构通过多种手段对其进行了大量探索。

近日,中国科学院近代物理研究所(以下简称近代物理所)原子核质量测量团队与合作者基于兰州重离子加速器冷却储存环,利用国际首创的新型质谱技术,精确测量了一批关键原子核的质量,研究了中子星表面的X射线谱,从新角度约束了中子星的性质。相关研究成果近日发表于《自然-物理》。

## 从原子核到中子星

中子星是人类已知的最致密星体之一,在中子星上,每立方厘米的物质足足有几亿吨。对于中子星的形成过程,科学家认为,当恒星寿命结束时,经过引力坍缩,在其核心会形成残余物,而中子星就是残余物的一种。

中子星的表面还有一种强大的磁场和猛烈的X射线。X射线暴发生在中子星与伴星(通常是一颗红巨星)组成的双星系统中,是目前已知最频繁的天体热核爆发过程,也是太空望远镜所能观测到的最亮的天文现象之一。中子星强大的引力将伴星中富含氢和氦的燃料吸积到中子星的表面。当这些燃料的温度和密度达到一定程度时,热核反应就会发生,在10~100秒的时间内释放出大量能量,形成X射线暴。X射线暴为研究中子星性质提供了窗口。

快速质子俘获过程是驱动X射线暴的主要热核反应之一,涉及一系列远离稳定线的短寿命中子原子核。其中,锆-64扮演着非常重要的角色,被科学家称为“等待点核”。

“锆-64就是核过程路径上的一个‘十字路口’,是核反应进行到中等质量核区时遇到的第一个重要的拥堵路段,其附近的原子核质量决定

着核反应的走向和能量释放。”论文第一作者、近代物理所博士生周旭解释。

因此,精确测量锆-64附近原子核的质量,对深入理解X射线暴和确定中子星性质非常重要。然而由于这些原子核的产额极低、寿命很短,且测量难度大,国际上一直未能实现突破。

## 新一代原子核质量测量方法

2011年,近代物理所首次测量了短寿命原子核锶-65的质量,它是锆-64的质子俘获产物,为研究快速质子俘获过程中锆-64等待点核问题提供了关键数据。

但想要彻底明确锆-64周围的核反应流,锆-64的双质子俘获产物硒-66及其附近原子核的质量也非常重要。然而,硒-66的产生截面比锶-65低一个量级,测量难度更大,多年来国际上一直未能突破。

经过十余年的努力,近代物理所质量测量团队基于兰州重离子加速器冷却储存环研发了新一代等时性质谱技术,并将其命名为“磁刚度识别的等时性质谱技术”。近代物理所研究员王猛向《中国科学报》介绍:“我们实验中用的是首创的新型质谱技术,具有高精度、单离子灵敏、高效率、短测量时间、无背景污染等优点,是目前国际上最先进的短寿命、低产额原子核质量测量方法之一。”

## “小质量”发挥“大作用”

利用新型质谱技术,研究团队精确测量了锶-64、锶-65、硒-66、硒-67、锆-63等原子核的质量,从而在实验上首次确定了等待点核锆-64相关的所有核反应能。其中,锶-64和硒-66的质量是国际上首次测量,其他原子核的质量精度均得到提高。

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