

突破想象！AI机器人成为实验室“主力军”

化学实验如何告别传统“试错法”，破解新物质周期长、成本高的难题？

在中国科学技术大学精准智能化学全国重点实验室里，大模型成为科研“超级助手”，AI机器人成为实验室“主力军”。可以自主设计实验方案、24小时不间断做实验的智能科研基础设施——“智能科学家”，正成为人工智能引领科研范式变革的代表之一。

在实验台前，一名“智能科学家”正抬起结实的机械臂抓取试管，依次走过液体进样台、磁力搅拌台、烘干工作台，进行样品称重、搅拌、离心、烘干……精准智能化学全国重点实验室的19个分布式实验室中，分布着110台这样的“智能科学家”。它们可以通过自主实验，精准完成试剂配置、样品合成、性能表征等一系列操作，将实验数据实时同步至智能操作系统。

除了能24小时“做”实验，这些“智能科学家”还可以自己“看”论文、“想”方案甚至“学”经验。

在“AICHEM云平台”上，选择“人机对话”，提出一个科学问题，会有四个大模型同时生成答案，还可以在此基础上设计实验方案。“这就相当于有了一个科学家的大脑。”

实验室副主任汪俊说。

这个“智能大脑”建立并不容易。最初，是科研团队为了解决化学问题而设计的人工智能平台。团队花了三年时间，像“蚂蚁搬家”一样从教科书、论文和专利中整理出百万条化学数据，同时，还把本校相关领域专家的研究经验“灌”进计算机，让“智能大脑”去理解更为复杂的化学知识。

2021年，机器人科学家“小来”正式诞生，它集成了2台移动机器人、19个智能化学工作站和高通量计算系统，日均能完成2000次精准操作，抵得上五六名科研人员的工作量。

为了研发火星制氧催化剂，“小来”学习了5万多篇相关的化学论文，面对376万种配方组合，人类科研团队需要2000年来进行实验验证，“小来”凭借“智能大脑”，用6周时间找到最佳配方。

当看到“人工智能+”赋能科研创新的新路径后，科研团队为“小来”制作了机械臂，又接入了多个生成式大模型。优化了“大脑”和“手臂”的第二代“机器人科学家”，被命名为“小临”。

“十五五”规划建议专章部署“加快高水平科技自立自强，引领发展新质生产力”，提

出要提升国家创新体系整体效能。在中国科大的精准智能化学全国重点实验室，这一战略部署正转化为具体的实践。

目前，科研团队进行了第三次迭代，将更多领域的科学知识“教”给“智能大脑”，让“机器人科学家”进一步升级，成为精通更多学科领域的“智能科学家”。

“智能科学家”还突破了地域的局限，加速各领域科技创新。通过“AICHEM云平台”，不同的高校、科研院所也可以线上“下单”，让这个实验室内的“智能科学家”远程进行实验。

实验室主任教授朱灏介绍，团队的目标是让机器实现“完全自主科研”；未来，它可能通过阅读文献发现全新研究方向，在人类未涉足的领域实现突破；即便是非化学专业的研究者，也能借助它完成“从0到1”的物质创造。

（转载自新华社客户端 2025年12月10日 记者 周楠）

研究团队提出快速抗抑郁新策略

抗抑郁起效时间有望缩短至一小时内

抑郁症已成为全球最主要的精神健康负担之一，影响了3亿多人。可是传统抗抑郁药需要好几周才能起效，这期间，还可能因患者症状加重甚至自杀风险，有没有办法能让抗抑郁效果“立竿见影”？

中国科学院大学、合肥综合性国家科学中心大健康研究院教授曹灿与中国科学技术大学教授薛天以及天津医科大学特聘研究员陈贺团队提出一种快速抗抑郁新策略，有望将抗抑郁起效时间缩短至1小时，为解决这一世界性难题开辟了全新路径。相关研究成果近日在线发表在国际顶级期刊《细胞》（Cell）上。有业界媒体认为，这一成果属于“革命性提速”。

抑郁能发病原因复杂，目前学术界的一种主流观点认为，抑郁的发生与大脑中的血清素水平降低有关。基于该理论，研究人员开发出可提升血清素水平的抗抑郁药物。目前最流行的一线抗抑郁药主要为“选择性血清素再摄取抑制剂”（SSRIs），包括帕罗西汀、帕罗西汀、舍曲林等。但这些药物起效缓慢，患者往往需要连续服药2周至4周甚至更长时间才能起效。

不仅仅是起效慢，在这期间，负反馈作用甚至可能加重患者症状，这正是FDA（美国食品药品监督管理局）对多种抗抑郁药发出自杀风险警告的重要原因之一。

为什么会发生这样的情况？“血清素，学名5-羟色胺，是一种让人快乐的神经递质，就像化学信使，在大脑中传递信息。然而，血清素受体有很多种，它们广泛分布在细胞表面的接收天线，不同天线接收到信号后，会引发细胞内部完全不同的反应。”曹灿解释道。

血清素在大脑的不同位置扮演“双重角色”。比如位于大脑中缝核、表达于突触前膜的血清素1A受体起负反馈调节作用。当患者服用SSRI类抗抑郁药后，突触间隙血清素浓度快速升高，表达在突触前膜的血清素1A受体被激活，引发负反馈调节，抑制血清素释放，从而导致药效“延迟”。

科学家们通过优化，最终获得了先导化合物TMU4142。在抑郁小鼠模型测试中，科学家们发现TMU4142可以缓解小鼠的抑郁状态。尤其是在新奇食物抑制实验中，注射TMU4142化合物1小时后就可以在小鼠身上产生显著的抗抑郁效果。目前，TMU4142已完成专利布局，多家药企主动洽谈，希望合作开发并成果转化进行授权。

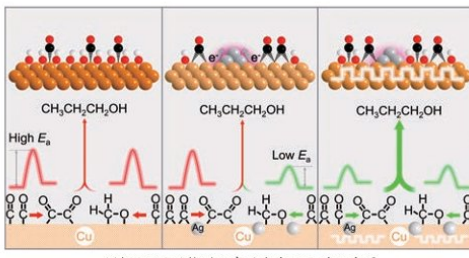
“接下来，我们将继续优化化合物，并开展更系统、全面的临床前研究，争取尽早推动TMU4142或类似位点进入临床试验。”曹灿表示。（转载自《安徽日报》2025年12月15日 记者 王弘毅）

中国科大实现一氧化碳到多碳醇的高选择性电合成

本报讯 中国科大高敏教授团队在电驱动一氧化碳电催化合成正丙醇领域取得重要进展。相关研究成果12月2日发表在《美国化学会志》上。

正丙醇作为一种重要的有机溶剂和化工原料，广泛应用于涂料、制药、印刷油墨和燃料添加剂等领域，全球市场规模巨大。然而，传统合成工艺依赖乙炔氢甲酰化，成本高昂且伴随大量二氧化碳排放。可再生电驱动一氧化碳电催化正丙醇提供了一条绿色、低碳的新路径，然而目前产率效率较低。

研究团队通过调控一氧化碳在催化剂表面的吸附构型，成功提升了正丙醇的选择性。研究人员采用银修饰的氧化物衍生铜催化剂，巧妙地引入脉冲电催化技术，在一氧化碳电还原反应中实现了75.7%的多碳醇选择性，其中正丙醇选择性高达48.8%，并在连续流电解槽中稳定运行116小时。这一进展为高效、可持续合成高价



调控CO吸附构型以高效合成正丙醇示意图

醇类提供了新思路。正丙醇的合成涉及复杂的C₁-C₂二聚与后续的C₂-C₃偶合步骤，其关键在于实现*CH₂O与*OCCO中间体的协同吸附。该转化路径受CO在催化剂表面吸附构型的显著影响：顶位吸附与桥位吸附共存促进*OCCO形成，而桥位吸附则更利于*CH₂O生成。因此，精准调控催化剂表面

CO顶位吸附与桥位吸附的分布是平衡关键中间体数量，提升正丙醇选择性的关键要素。研究人员通过在氧化物衍生铜中引入银组分构建新型复合催化剂，采用脉冲电催化模式，成功实现了对顶位吸附与桥位吸附共存构型的精准调控。机理研究表明，银的引入与脉冲电催化之间存在协同效应，二者通过调节表面OH覆盖度来调控CO的吸附构型。此外，脉冲电催化破坏了界面水分子氢键网络结构，使反应主导机制由Eley-Rideal路径转向Langmuir-Hinshelwood加氢路径。这一机制转变从本质上解释了在铜基复合催化剂上高选择性生成多碳醇的实验现象。

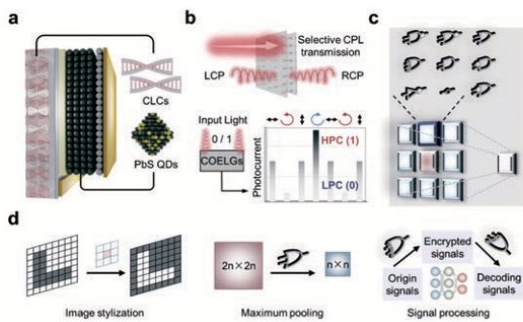
论文共同第一作者为中国科大博士研究生孙书平，天津理工大学研究员张晓晓，安徽大学博士后杨雪鹏，中国科大博士研究生余鹏程、李成成。

（合肥微尺度物质科学国家研究中心 科研部）

中国科大构建高性能圆偏振光电逻辑门

本报讯 近日，中国科大庄涛教授团队设计了基于手性选择性光电转换的圆偏振光电逻辑门，并验证了其多功能逻辑运算能力，在图像处理与信息加密领域实现应用。相关研究成果发表在《先进材料》上。

在光电逻辑门中，多逻辑功能的实现往往依赖于复杂的结构或多种外部调控，导致器件集成度低。圆偏振光作为一种高维度的光学信息载体，其独特的左/右手手性为构建高集成度、多功能的逻辑门提供可能。然而，由于现有的圆偏振光电探测器普遍面临手性识别能力不足、光谱响应窄等困难，实现宽波长响应和高不对称因子的高性能圆偏振光电逻辑门的构建仍然面临巨大挑战。



圆偏振光电逻辑门的结构、原理及其应用

研究团队提出一种基于手性选择性的光电转换策略，通过集成具有宽光谱响应的PbS光电

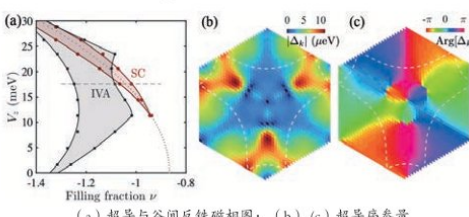
二极管与具有手性选择性的液晶软螺旋结构，构建了高性能圆偏振光电逻辑门。该器件展现出高达1.86的光电流不对称因子，并实现了从400到1600nm可调的宽波长响应。通过调控光电流阈值、并串联光电二极管或改变输入配置，成功演示了9种逻辑门，并进一步将其应用于图像处理单元的构建。该设计不仅可在单器件上灵活切换逻辑功能，而且在模拟二值神经网络中的最大化池化操作、信息加密等任务中展现出巨大潜力。相关工作实现了偏振光学与光电子学的融合，拓展了圆偏振光与逻辑运算的应用场景。

中国科大硕士研究生黄言吉、博士研究生周德浩为论文共同第一作者，庄涛涛为通讯作者。（化学与材料科学学院 科研部）

中国科大揭示扭转双层WSe₂中谷间自旋涨落诱导的超导配对机制

本报讯 中国科大秦维教授与武汉大学吴冯成教授合作，在二维扭转过渡金属硫族化合物超导体机制研究方面取得重要进展，揭示了能谷间的反铁磁自旋涨落能显著增强电子间有效吸引相互作用，为理解莫尔体系超导的微观机制提供了新思路。相关研究成果12月9日发表在《物理评论快报》上。

近年来，扭转二维材料构成的莫尔超晶格展现出丰富的强关联电子效应而备受关注。其中，扭转双层WSe₂在实验中表现出平带、关联绝缘态，以及超导等性质。相较于石墨烯莫尔超晶格体系，其超导机制仍缺乏清晰的微观理论支撑。特别是5°转角体系中超导与范霍夫奇点、位移场调控下的能



（a）超导与谷间反铁磁相图；（b）、（c）超导体参量

带重构成密切相关，引发了研究者对其“配对胶水”及拓扑性质的广泛兴趣。本研究在该背景下展开，旨在阐明驱动该体系超导的关键相互作用。

研究人员基于连续模型与屏蔽相互作用的

系统计算发现，仅依靠屏蔽的库仑相互作用难以产生实验量级的超导临界温度；而进一步引入谷间反铁磁涨落后，配对作用得到显著增强，在范霍夫奇点附近实现与实验可比的超导转变温度。自洽计算表明，该体系的超导基态呈现d+id型手性配对对称性，并具有陈数C=±2的拓扑特征。本次研究成果不仅揭示了扭转双层WSe₂中超导可能来源于谷间自旋涨落的电子机制，也为调控拓扑超导材料开辟了

新思路。秦维与武汉大学邵博轩博士后为论文共同第一作者，中国科大为论文第一单位，秦维与吴冯成共同通讯作者。

（物理学院 科研部）

中国科大在计算成像与人工智能交叉领域取得突破

在医学影像与人工智能交叉领域，如何实现无创、便携的动态功能成像始终备受关注。近日，中国科学技术大学自旋磁共振实验室刘东研究员等，在计算成像与人工智能交叉领域取得重要进展，创新性提出一种物理驱动的网络神经网络监督学习框架，有效克服了医学电阻抗成像中的核心难题。相关研究成果在线发表于人工智能领域知名期刊《IEEE模式分析与机器学习》。

相比传统具有侵入性且伴随风险的CT、电阻抗成像可以通过体表电流与边界电压反映体内阻抗分布，从而实现成像，具有实时、动态且安全的优势。然而，电阻抗成像受制于电流场弥散，其测量灵敏度会随深度显著下降，并呈非线性衰减，导致深部区域信息易被噪声淹没，图像解反问题高度不适定。因此，如何提高深部区域的灵敏度与可辨识度，成为该领域亟待突破的核心难题。

针对这一挑战，中国科大研究团队深入剖析电阻抗成像的物理机理，提出了物理驱动神经网络监督学习框架，并创新构建了灵敏度感知机制——通过基于物理先验的层级映射，使神经网络能够感知物理场中灵敏度的空间分布。

这种机制类似人眼的“注视”功能——在低灵敏度区域自动投入更多的表征能力进行补偿，而在高灵敏度区域施加适当约束，以有效抑制干扰。同时，研究团队提出了融合多尺度主成分与傅里叶特征投影的混合表征方法，并结合自设计的频率正则化策略，显著提升了神经网络在高、低灵敏度区域的重建能力与鲁棒性。

在无需标注数据的条件下，该框架在仿真数据和物理实验中均实现了高保真、强鲁棒性的图像重建，显著优于现有方法。尤其在低对比度、低灵敏度的中心区域，它能够精准重建几何结构，同时展现出卓越的抗噪性能及对不同网络分辨率的泛化能力。

研究者表示，该成果不仅在理论上为图像重建中长期存在的非均匀灵敏度难题提供全新的“神经网络”解决方案，也为电阻抗成像在便携式医疗监护、柔性电子皮肤和无损检测等领域的实际应用奠定坚实基础。

（转载自《安徽日报》2025年12月15日 记者 陈婉婉）