

## AI辅助开启化学的新篇章 ——人工智能在化学领域的应用与发展综述

刘怡帆, 彭浩南\*

陕西师范大学化学与化工学院, 西安 710119

**摘要:** 本文探讨了人工智能(AI)在化学领域的应用及其带来的革命性变化。AI通过其强大的数据分析和模式识别能力,正在改进化学研究方法,从分子合成到药物发现等多个领域实现了突破。具体案例包括利用AI加速新材料发现、实现自主化学实验室操作、推动个性化化学教育等。此外,AI在环境化学和绿色化学领域的应用也展现了其在污染物行为分析和新能源技术开发方面的潜力。本文强调了跨学科合作、数据共享、AI课程引入等措施的重要性,以充分发挥AI在化学领域的潜力,推动科学研究的进一步发展。

**关键词:** 人工智能; 化学; 教育; 合成化学; 绿色化学

**中图分类号:** G64; O6

## AI-Assisted New Era in Chemistry: A Review of the Application and Development of Artificial Intelligence in Chemistry

Yifan Liu, Haonan Peng \*

School of Chemistry and Chemical Engineering, Shaanxi Normal University, Xi'an 710119, China.

**Abstract:** This paper explores the application of artificial intelligence (AI) in the field of chemistry and the revolutionary changes it brings. By leveraging AI's powerful data analysis and pattern recognition capabilities, it is transforming traditional chemical research methodologies, achieving breakthroughs in areas ranging from molecular synthesis to drug discovery. Specific case studies illustrate AI's role in accelerating the discovery of new materials, enabling autonomous chemical laboratory operations, and advancing personalized chemistry education. Additionally, AI's applications in environmental and green chemistry demonstrate its potential in pollutant behavior analysis and the development of new energy technologies. The paper emphasizes the importance of interdisciplinary collaboration, data sharing, and the introduction of AI courses to fully harness AI's potential in chemistry, thereby advancing scientific research.

**Key Words:** Artificial Intelligence; Chemistry; Education; Synthetic Chemistry; Green Chemistry

人工智能(Artificial Intelligence, AI)作为一门模拟人类智能的学科,通过计算机系统实现感知、推理、学习和决策等智能行为。AI的核心在于算法和数据,通过机器学习和深度学习等技术,AI系统可以从大量数据中提取有用信息,进行模式识别和预测。近年来,随着计算能力和数据存储能力的提升,AI技术迅猛发展,并在多个领域取得了显著成果。化学作为一门实验和数据驱动的科学,AI的引入为其带来了新的研究方法和创新机会。从材料设计到药物发现,AI正在改变化学研究的传

收稿: 2024-05-27; 录用: 2024-09-14; 网络发表: 2025-03-27

\*通讯作者, Email: phn@snnu.edu.cn

基金资助: 国家自然科学基金(22272101); 科技部重点研发计划(2022YFA12055001)

统模式，同时也为化学的研究范式带来了挑战。本文将探讨AI在化学领域的应用，展示其在改进化学研究方法和创新化学教育模式方面的作用。通过具体案例，展示AI技术如何帮助我们更深入地理解和利用化学知识，并推动化学研究的进一步发展<sup>[1,2]</sup>。

## 1 AI在化学研究中的应用

### 1.1 合成化学与材料科学

在传统的化学研究中，研究人员往往通过基于已有知识的分子设计，来筛选具有特定功能的物质。这通常涉及反复的实验合成与表征，结合对分子结构的不断优化与调整，直至达到预期目标。这种研发模式虽然严谨，但效率较低。组合化学的出现为此带来了新思路。通过利用核心反应，研究人员能够快速组合多种化合物基元，构建出丰富的化合物结构数据库。然而，在面对如此庞大的数据集时，总结并归纳其中的规律，寻找出最优路径，成为了一个关键挑战。正是在这个背景下，AI技术展现了其独特的优势。

AI特别擅长处理大规模数据并识别模式。在化学领域，这意味着可以利用机器学习算法，分析成千上万的化学反应和化合物，快速识别出有效的反应路径或发现新的化学结构。这种基于AI的数据驱动的研究模式，也被称为“第四研究范式”，为分子合成带来了前所未有的机遇。AI在化学中的应用不仅局限于分子合成。在材料化学领域，AI已经被广泛应用于预测材料的性能与行为，优化材料设计流程。例如，通过训练机器学习模型，基于图1机器学习分析过程，研究人员可以预测新材料的热力学性质、电子结构以及机械性能，从而加快材料发现的进程。此外，AI还在催化剂设计、可再生能源材料开发等方面展现了巨大潜力。不仅如此，AI还在化学教育中发挥着日益重要的作用。通过AI技术，学生们可以更直观地理解复杂的化学概念。AI驱动的虚拟实验室、智能辅导系统和自适应学习平台，不仅提高了学习效率，还能根据学生的学习进度和理解水平，提供个性化的学习路径。这种技术赋能的教育模式，有望培养出新一代具备强大数据分析和创新能力的化学家<sup>[3,4]</sup>。

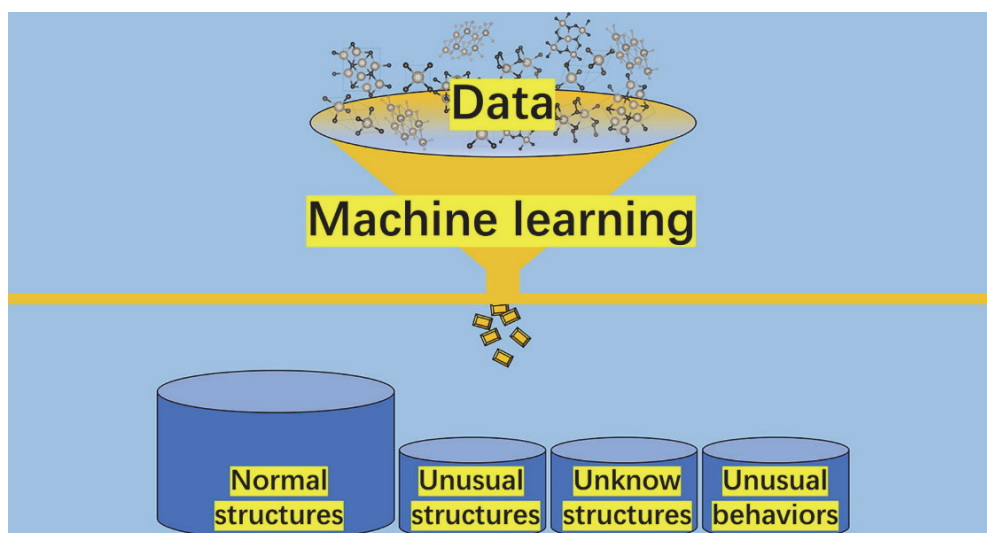


图1 机器学习分析过程<sup>[5]</sup>

在构建一个包含超过60万种独立晶体结构的大数据系统过程中，潘锋团队成功运用了人工智能和机器学习的方法，加速了新型材料的发现<sup>[5]</sup>。他们自主建立了一个包含Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE)计算数据的材料结构数据库，并通过机器学习技术对材料结构的带隙进行了深入研究，尤其擅长筛选异常案例。值得注意的是，尽管潘锋团队在训练中仅使用了相对较小的数据集，但其构建的机器学习模型的整体性能却与已有工作相当，模型的 $R^2$ 值达到了约0.89。这充分显示了人工智能在

机器学习算法和模型优化方面的突出优势，以及对于数据高效利用的独特性能。通过分析带隙预测模型的结果，团队成功地从数据库中约4000种化合物中识别出了34种具有独特特性的化合物。这些化合物在结构或其他方面表现出异常，如特殊的氧化态、配位环境，或是带隙的突然增加，甚至是同族不同化合物之间的不同相结构。这一成果初步证明，通过检查机器学习模型中的异常，可以从庞大的数据库中快速发现具有异常结构的化合物。这种方法不仅大大提高了新型材料发现的效率，而且为材料科学研究开辟了新的途径。

Gabe Gomes课题组研发了一款名为“共同科学家(Coscientist)”的人工智能系统<sup>[6]</sup>。该系统结合了GPT等语言模型及图2所示的大语言模型人工智能系统架构，具备搜索公开信息、解读技术文件、编写代码控制机器人进行实验并分析结果判断成败的能力，在多项任务中展现了强大的通用能力。在多项测试中，Coscientist展现出卓越的化学推理能力，并能与实验室的机器人设备对接，将理论转化为实践。Coscientist能够准确无误地控制高科技机器人和其他先进实验设备，执行一系列复杂且精细的实验操作。例如，Coscientist能够精确吸取和喷射微小液体样本，对样本进行加热处理，并摇动液体以促进化学反应。在其精准操控下，这些设备协同工作，最终成功合成了目标化学物质。Coscientist不仅能轻松合成布洛芬等药物分子，还成功完成了2010年诺贝尔奖得主Suzuki偶联反应等复杂反应。这是人工智能系统首次成功自主掌握诺贝尔奖级别的化学反应，并独立设计出相应的实验步骤。这个具有里程碑意义的成就标志着人工智能在科学研究中的应用达到了一个新的高度，预示着未来人工智能将在更广泛和更深入的科学领域中，以前所未有的速度协助科学家实现突破。

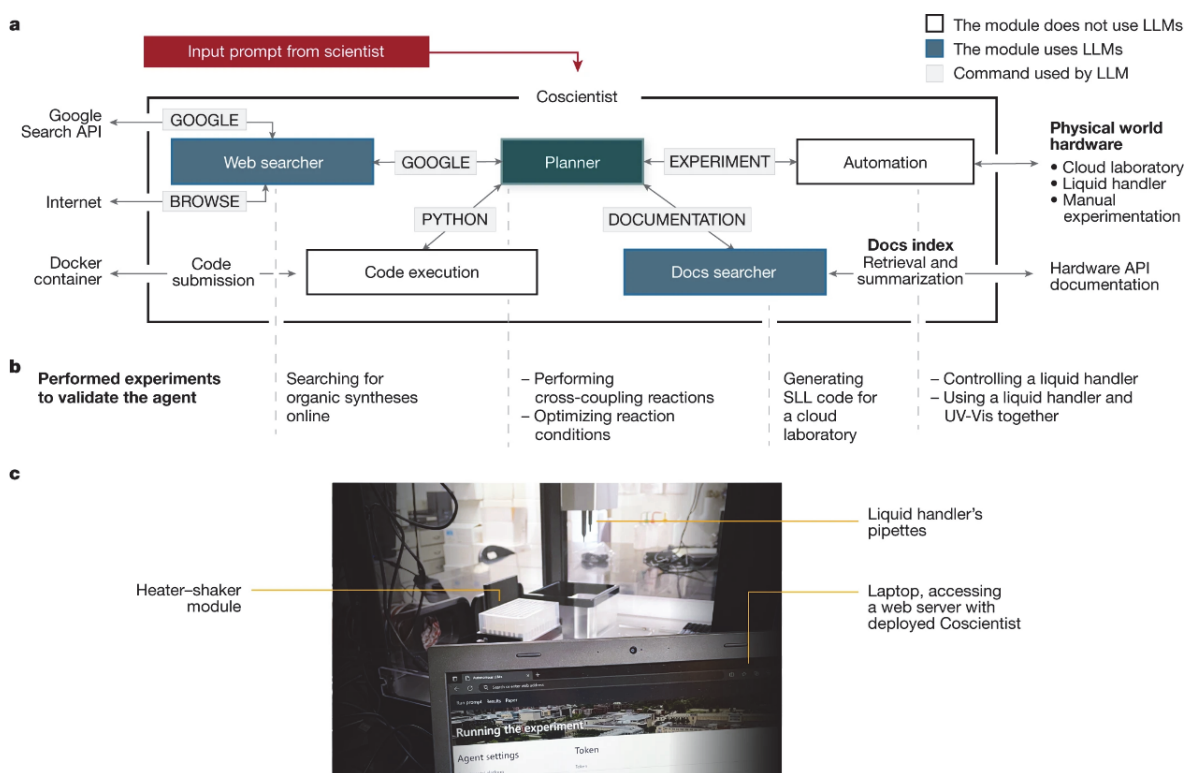


图2 基于大语言模型的人工智能系统架构<sup>[6]</sup>

中国科学技术大学的罗毅教授及其团队开发了一个机器人AI化学家，用于从火星陨石中自动合成和智能优化析氧反应(OER)催化剂<sup>[7]</sup>。该研究利用了机器学习和贝叶斯优化算法，从超过300万种可能的配方中快速筛选出最佳催化剂组合，并在无人干预的情况下，完成了火星陨石的预处理、催化剂合成、表征、测试及优化的整个流程。在六周内，AI化学家通过使用机器学习和贝叶斯优化算

法，学习近30000个理论数据集和243个实验数据集，建立了一个预测模型，提供了有前景的OER催化剂配方及其最合适的合成条件。最终合成的催化剂在 $10 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ 的电流密度下运行超过550000秒，过电势为445.1 mV，展示了其在模拟火星环境下的高效产氧能力和稳定性。这项研究展示了AI在化学材料开发中的巨大潜力，特别是在极端环境下进行资源利用的能力。然而，在实际合成过程中，外部条件如重力、光照和空气等的差异可能会对实验结果产生影响。为了确保在火星环境下AI化学家的工作精准无误，研究团队提出了一个用于合成OER催化剂的双层工作模式。外层包括由智能机器人和各种信息化工作站完成的12步自动实验和数据管理；内层则由AI化学家智能执行的9个连续的数字操作。通过机器学习模型与贝叶斯优化算法的结合，AI化学家能够在极短时间内完成传统方法需要数千年才能实现的复杂优化任务。

此外，这一机器人AI化学家不仅限于火星OER催化剂的开发，还可以扩展到火星或其他应用场景中的其他催化剂生产和有用化学物质的制造。这项研究利用图3的合成路径，为在火星上制造氧气提供了新的突破，每平方米火星材料每小时可以生产近60克氧气，这可能使未来的火星任务无需再从地球携带氧气，为火星氧气的大规模生产提供了新的思路。这种理论与实践相结合的研究范式，不仅加速了新材料的发现进程，也为未来火星基地的建设和深空探索提供了重要的技术支持。

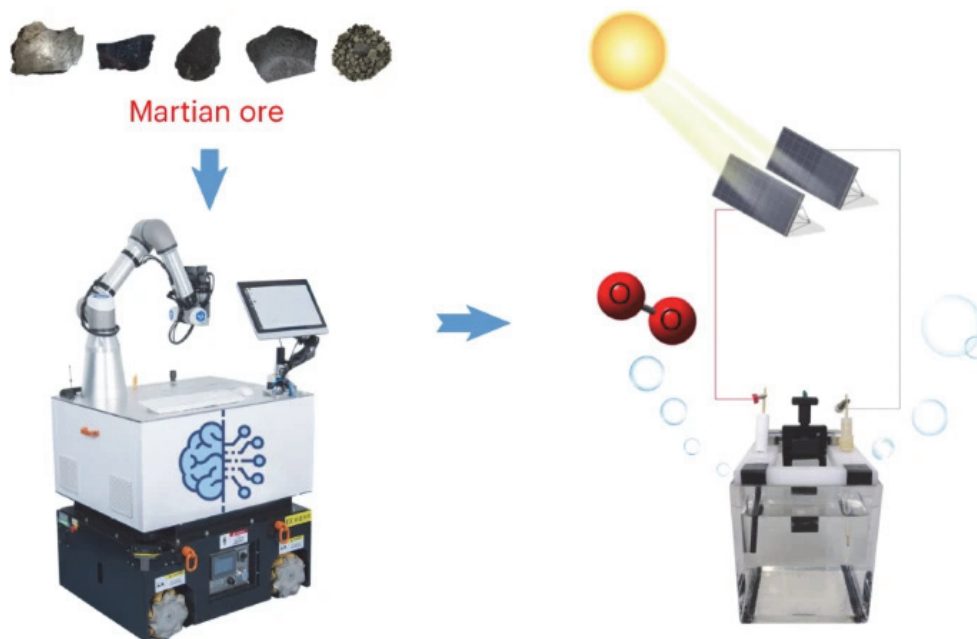


图3 火星催化剂合成路径<sup>[7]</sup>

复旦大学李剑锋教授团队在分子材料合成领域的研究中，致力于探索机器学习与人工智能的交叉学科前沿，结合意识科学理论以增强机器学习的能力，进而揭示意识与神经网络之间的相互作用机制，以指导高分子材料的合成研究<sup>[8]</sup>。嵌段共聚物(BCP)在特定条件下能够自组装形成特定的纳米图案，因而成为光刻和仿生材料等领域的重要基础结构。李剑锋教授团队提出了一种仅依赖机器学习技术解决嵌段共聚物定向自组装引导模板反向设计的新方法。与传统的正向设计方法相比，这种反向设计方法无需通过迭代和优化算法，而是能够直接从目标自组装图案中一步预测出可能的引导模板，其准确率显著提高至97.1%。通过将定向自组装技术与深度学习预测相结合，该方法实现了化学引导模板的精准设计与BCP自组装行为的可控调控，推动了纳米设计的进步。

分子合成的传统研究方法多基于化学理论和经验规律指导，往往受限于化学家的知识范围和经验积累。但在人工智能时代，这种状况将逐渐成为过去。人工智能程序通过深度学习和模式识别技

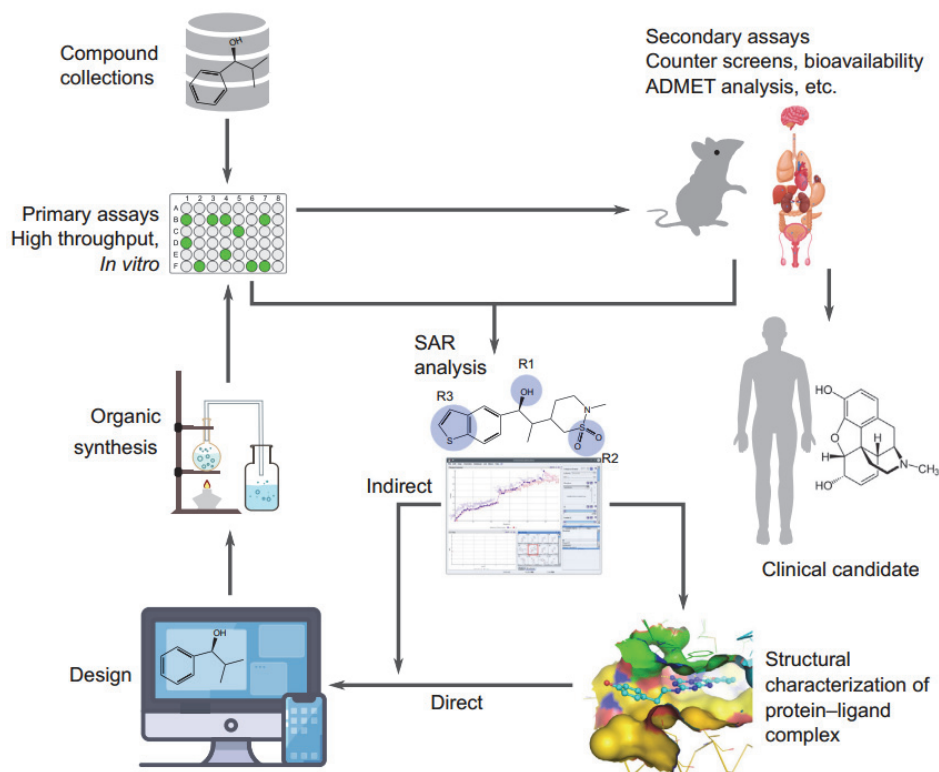
术, 能够预测出多种可能的合成路线, 并为科研人员提供有价值的参考。这些预测路线基于大量的实验数据和化学原理, 因此具有较高的准确性和可靠性。科研人员可以根据这些预测结果, 结合自身的专业知识和经验, 可以快速判断出哪些路线是可行的, 哪些路线可能需要进一步优化或调整, 进而帮助研究人员解决异常问题, 从而为化学合成提供更多的机会。

## 1.2 药物发现与设计合成

AI的一个重要应用是在药物设计合成领域<sup>[9-11]</sup>。在以往的研究中, 药物的研发是一个漫长且成本高昂的过程。AI技术通过预测分子的活性、稳定性和毒性, 帮助科学家快速筛选和优化潜在的药物候选分子, 极大地加速了药物的开发周期。药物设计过程中的一个核心挑战在于筛选出具备一系列必要特性的候选物质。传统上, 研究人员主要依赖高通量筛选库来解决这一问题。高通量筛选(HTS)是一种自动化的大规模筛选技术, 允许研究人员在短时间内测试数以万计的化合物, 评估它们与特定生物靶点的相互作用。基于AI的药物发现过程, 通过使用先进的自动化设备和技术, 高通量筛选能够快速识别出具有潜在药物活性的化合物, 从而大大提高了早期药物发现的效率。然而, 由于每种化合物的价格大约在50-100美元之间, 这使得初始筛选过程不仅耗时数月, 而且成本高达数百万美元。这种高昂的时间和金钱成本无疑成为了药物研发的一大瓶颈。幸运的是, 借助AI的力量, 研究人员现在可以在短短几天内筛选数十亿个分子的文库, 极大地提高了筛选的效率和规模。这种高效性不仅减少了时间成本, 而且使得更多潜在的候选物质得以被发掘和评估。此外, 基于人工智能的结构预测技术也取得了显著进展。传统方法可能需要较长时间进行结构预测, 而AI则能够在几个小时到几天内完成这一任务。除了筛选和结构预测, AI还在药物研究的其他关键方面发挥着重要作用。例如, AI技术被广泛应用于细胞图像处理, 帮助研究人员更准确地分析和解读实验数据。同时, AI也在物理生物活性和毒性预测方面展现出强大的能力, 为药物的安全性评估提供了有力支持<sup>[12]</sup>。与传统药物研发相比较, AI能将药物设计、临床前研究的时间缩短40%以上, 药品研发成功率也从12%提高到约14%, 在新药研发领域拥有绝对优势。

韩国蔚山国家科学技术学院的Bartosz Grzybowski教授及其合作者开发了一款名为Chematica的逆合成分析软件(现名为Synthia, 2017年5月被德国制药巨头默克收购), 其已包含约700多万万个有机分子的超大数据库, Synthia不仅能评估药物合成路线的长度、反应的立体选择性(分子在空间中的几何配置)和区域选择性(反应发生在分子中的具体位置), 还会考虑原料的可获得性、成本以及与现有合成路线的差异<sup>[13]</sup>。在全球抗病毒药物短缺的背景下, Synthia软件发挥了至关重要的作用。在最近的一项科研合作中, 默克生命科学团队与密歇根大学的Tim Cernak教授合作, 利用Synthia人工智能软件对12种在研的抗新冠药物进行了深入的逆合成分析。逆合成分析是一种从目标分子出发, 逐步将其分解为更简单的前体和易得的原料的化学策略。这种方法通过对目标药物分子的结构进行分拆, 设计出从原料到最终药物的合成路线。通过精密的分析和计算, 他们成功为其中11种药物找到了全新的合成路线。这些新路线不仅高效, 还避开了已有的合成路径, 并使用了廉价易得的原料。实验验证了其中两种药物合成路线的可行性和经济性, 为抗击新冠疫情提供了新的药物供应途径。这项合作不仅展示了Synthia在药物合成中的强大功能, 也证明了人工智能在推动科学创新和应对全球健康危机中的巨大潜力。

人工智能在药物临床前研发的各阶段中应用广泛且功能强大, 涵盖了识别药物靶标、药物分子设计、药物分子筛选、药物及靶标蛋白结构预测、小分子合成以及虚拟数据集的构建等领域。相比传统的新药研发流程, AI辅助的药物研发大大缩短了时间, 通常在1-3年内即可完成。例如, 袁曙光课题组利用AI技术成功将两个临床前first-in-class新药推向临床阶段, 仅用了3年时间<sup>[14]</sup>。如图4所示, 该团队通过AI计算机模拟技术筛选出20多个不同药物靶标, 并模拟药物分子与靶标之间的相互作用, 成功为多个孤儿受体找到特异性结合的药物分子, 揭示了这些受体的生理功能。这一方法不仅高效, 还为相关疾病的治疗提供了新的药物靶点, 为药物研发带来了显著的进步。这表明人工智能在药物研发中的巨大潜力, 不仅提升了效率, 还推动了新药发现和开发的进程。

图4 基于AI技术的药物发现过程<sup>[14]</sup>

现代医学发展至今，世界上仍有数千种疾病面临“无药可医”甚至“无药可用”的困境。而传统药物发现耗时漫长成本高昂，且伴随着极高的失败率，超过90%的候选药物在关键的临床验证阶段折戟。AI的出现为药物开发流程优化与效率提升带来了希望。然而，AI在药物研发中仍面临一些挑战，例如数据质量和模型可解释性等问题。未来，研究人员可以进一步研究和改进AI算法，以更好地应用于药物结构优化，并为药物研发带来更大的突破和创新。

### 1.3 环境化学和绿色化学

通过分析和模拟环境污染物的行为和影响，AI有助于更好地理解污染物在环境中的行为，并帮助制定更有效的污染控制策略<sup>[15]</sup>。此外，AI还在帮助开发更高效的能源存储材料和清洁能源技术，为实现可持续发展目标做出贡献。在环境化学领域，AI在土壤污染监测和控制方面的应用日益广泛，涵盖了从预测分析到机器学习算法等多个方面。通过融合视频数据、污染物浓度、气象数据、排放源等多种数据源，运用AI技术可以实现污染源的精准识别、溯源贡献度分析、污染物浓度预报及污染区域预测，进而对多污染物在未来较长时间内进行小时级的精确预测。这样一来，环保部门能够及时掌握生态环境违法信息，有效固定证据，实现快速发现、快速响应和应急指挥等执法闭环。AI技术还可以实现污染治理的动态调度和实时管控，完成从发现问题到解决问题的全过程管理，从而迅速处理突发事件造成的土壤质量波动，避免污染源对当地居民健康造成危害。2022年，中国科学院完成了一项利用人工智能技术开发土壤污染监测和管理平台的项目。该平台使用大数据和AI技术来跟踪、分析和预测土壤污染。费彦肖等人提出将5G与AI技术融合，应用于智慧环保，以全面提升环境智能监控治理水平<sup>[16]</sup>。

“十四五”规划提出培育壮大人工智能、大数据、区块链、云计算、网络安全等新兴数字产业，这显示了国家对发展人工智能技术的高度重视，并将其作为一项重要战略部署来推进。在环境保护与可持续发展的道路上，AI技术扮演着不可或缺的角色。在海洋保护方面，水下机器人结合AI算

法,可以实时监测海洋污染物的分布和扩散情况,为污染治理提供数据支持。AI技术还能分析海洋生物多样性和生态系统健康状况,为海洋生态保护提供科学依据。这些技术手段不仅提高了监测的精度和效率,也为制定更加精准的保护策略奠定了基础。在废物回收和循环利用方面,AI技术通过智能识别和分析系统,可以对废物进行高效的分类、拆解和再利用。例如,AI技术能够有效回收和再利用废旧电子产品中的有价值材料,减少资源浪费和环境污染。此外,AI还可以优化废物处理流程,提升资源利用率,推动循环经济的发展。通过这些应用,AI技术在环境保护领域展现出强大的潜力和广泛的应用前景,助力国家实现绿色发展和可持续发展目标。

随着对生态环境保护和能源可持续性的重视,高效、环保且可持续的新能源体系的研究和应用日益受到关注,这是实现能源可持续发展,走向现代化、智能化社会的必然道路<sup>[17]</sup>。近年来,计算化学和人工智能的发展为加快新型电池系统的研究和开发提供了机会。可充电电池是当前最重要的储能设备。其中,对于钠离子电池负极材料而言,从成本、可获取性、综合性能等因素分析,碳材料仍是最佳选择。研究者基于机器学习的设计与应用将以钠离子电池和碳基材料为着手点,探究非石墨类碳材料中代表结晶度的结构因素并进行特征分析,基于机构参数和性能数据建立结构与性能数据集。经过初步训练后,通过人工调整优化机器学习模型来有效地筛选出最佳结构参数。并致力于构建持续更新的数据库,从而有效地指导非石墨碳材料的科学研究和工程应用。可再生能源是未来能源发展的重要方向,而AI技术在可再生能源的开发、建设和运营过程中发挥着关键作用。通过AI算法,我们可以更加精确地预测风速、太阳能辐射等自然资源的变化,为风能、太阳能等可再生能源的开发提供有力支持。同时,AI还可以帮助我们实现能源的存储和调度,确保可再生能源的稳定供应。

## 2 AI辅助化学教育和实验室实践

### 2.1 化学教育创新

国务院于2017年发布《新一代人工智能发展规划》,将“智能教育”列为国家智能战略的重点任务之一。随后,教育部在2018年推出《教育信息化2.0行动计划》,强调通过信息化手段引领教育发展,构建以学习者为中心的全新教育生态系统。2024年政府工作报告中首次提出了“人工智能+”行动,这一创新性表述不仅突显了人工智能技术在国家发展战略中的重要地位,也预示着教育领域及各行各业将迎来更深层次的变革。这些政策的制定和实施,不仅为人工智能技术在教育领域的应用提供了明确的规范和指引,还为其长远发展创造了良好的政策环境。化学学科具有综合性、系统性和实践性等显著特点,在教学过程中强调对知识的直观、系统性呈现。由于化学学科现代性强,与现代科技的发展紧密结合,因此更注重培养学生运用化学信息技术来分析和解决问题的能力。这一特点为AI赋能教育提供了实践操作的理想平台,使人工智能在化学教学中得以充分应用和发展。

在教育领域,AI技术的应用使得化学学习更加互动和个性化。通过智能教学系统,学生可以根据自己的学习进度和风格得到定制化的辅导,这种方法已被证明能显著提高学习效果<sup>[18,19]</sup>。人工智能与教学深度融合的领域越来越受到重视。在传统教学中,仅靠学生个人的智慧与精力难以应对信息时代下爆炸式增长的学习资源和学习活动,学生的自适应学习更是无从谈起,而人工智能技术的发展能为教师高效的教和学生优质的学提供理论指引和技术支持。课前准备阶段,人工智能借助大数据精准分析学生的认知偏好、认知水平和社会倾向等个体性数据,得到学生个体模型数据库。课中教学阶段,通过对学生学习活动的全流程记录,包含作答速度、停留时间、纠错过程和准确情况,以探索学生个体学习过程数据库。课后提升与反思阶段,人工智能结合学生个体的模型数据与过程数据,智能推荐与其相似学生形成共同体开展合作学习,进而建立学生群体学习过程数据库,最后实现对学生个体进行技术反哺。人工智能将根据学生群体数据和学生个体数据进行匹配分析,溯源能力不足点,智能推送查缺补漏的学习活动,进而改进学生的能力不足点,实现学生的自适应学习,为教学提效增速。

2018年7月, 英国教育部发布了在线教学情境下人工智能应用情况专项报告, 展示了人工智能在教育市场中的重要作用。该报告特别提到智能辅导系统, 这些系统试图复制一对一的辅导, 提供即时、量身定制的指导和反馈, 无需人类导师的干预。通过软件评估学习者的测试结果, 开发人员能够深入了解学习者的学习情况, 提供精确的学习内容设置反馈, 并识别出学习者的薄弱环节。这种个性化的学习体验不仅提高了学习效率, 还使学习者能够按照自己的节奏进行学习, 从而获得更好的学习成果。例如, Holotesc设计开发了MOOC (海量开放在线课程)伙伴教学机器人, 为学习者提供有针对性的个性化学习资源<sup>[20]</sup>。通过比较学生不同教学模式下的考试分数, 可以清晰地看到个性化学习系统相较于传统教师主导教学的显著优势。这种人工智能驱动的教育技术在市场中发挥了重要作用, 为学习者提供了更高效和个性化的学习体验。在这一背景下, 智能辅导系统和其他AI教育工具成为现代教育的重要组成部分, 推动了教育方式的创新和进步。

AI已深入渗透到教育教学的各个阶段, 如今, AI助教也走进了清华大学的“有机化学”课堂。ChemBot是一款基于Mixtral8 × 7b大语言模型开发的问答型机器人<sup>[21]</sup>。它能够交互式地解决有机化学中的常见问题, 提供即时帮助和解答, 并在课堂上进行展示。这不仅加深了学生对新兴技术和学术前沿的理解, 还通过实际应用让他们亲身体验了AI技术的优势。在作业布置中, 学生被要求利用课题组建立的iBonD数据库, 并与自主开发的分子性质预测模型进行比较, 分析模型的预测结果。通过这种实践, 学生们能够深入体验AI技术的优势与不足, 了解当前技术的局限性。AI与传统教学的有机结合, 展现了教育模式的创新与进步。人工智能在构建现代化化学智慧课堂中发挥了积极作用, 并在不同教学环节中展现出其独特优势。在教育领域, AI可以提供丰富的教学资源和内容, 如教学课件、实验模拟等, 提升教学方式和学习体验。通过数字化信息技术的应用, 学习者的学习方式、认知方式、教育关系及学习生态都发生了深刻改变, 从而对教育教学产生了深远影响。此外, AI还可以辅助教师开展教学活动, 提供个性化的学习支持, 改善教学效果。它能够分析学生的学习数据, 为每位学生推荐适合其水平和需求的学习资源和路径。作为智能辅导系统, AI还可以回答学生的问题, 提供解析和示范, 帮助学生更好地理解和掌握知识。人工智能作为新一代数字技术, 通过机器学习、云计算、大数据分析和人机交互等关键技术, 深刻影响着化学教学的目标、设计、方式、环境和评价等多个方面, 推动了化学教学的深刻变革。

## 2.2 实验室工作变革

实验作为化学科学研究的基本手段, 在推动化学领域的发展中起到了至关重要的作用。随着科技的迅猛发展, 传统的人工合成方法已显得力不从心。在这样的背景下, 以人工智能为依托的自动化化学实验室应运而生, 为化学研究注入了新的活力。这些实验室以其可重复性和高效性显著提高了研究效率。AI驱动的机器人可以自动执行实验, 减少人为错误, 并且能够24小时不间断地工作, 大大提高了实验效率<sup>[22]</sup>。英国格拉斯哥大学的Cronin团队在化学实验室智能化与自动化方面取得了显著成果。他们采用机器学习算法, 成功开发出一款有机合成机器人, 能够预测化学反应<sup>[23]</sup>。这款机器人展示了机器学习在化学领域内的强大应用, 其独特之处在于无需依赖传统的化学信息或知识, 而是基于庞大的“数字化”数据库, 高效准确地描述和预测大量化学反应组合的可能性, 能将文献的合成步骤转化成化学代码并实际操作(图5)。

自动化化学实验室不仅提升了实验效率, 还为化学研究提供了新的方法和工具。这些AI驱动的系统能够处理大量数据, 从中提取有价值的信息, 进而预测并优化化学反应。通过减少实验中的人为因素, 这些系统提高了实验结果的可靠性和可重复性。此外, 它们能够快速筛选和优化反应条件, 加速新材料和新药物的开发。总之, AI驱动的自动化化学实验室正在重新定义化学研究的方式, 推动着整个领域向前发展。随着技术的不断进步, 未来的化学研究将变得更加高效和精确, 人工智能将在这一过程中扮演越来越重要的角色。

最近, 利物浦大学的研究团队设计了一个超智能的“移动机器人科学家”(图6), 与以往化学研究中使用的机器人不同, 这个身高1.75米的“科学家”不仅可以像人类研究员一样在标准实验室工

作，熟练地使用各种仪器，执行各种各样的任务。而且它具有无限的耐心，每天即使工作21.5小时，充电后可再次工作，真正实现了“充电2小时，实验一整天”的高工作效率<sup>[24]</sup>。更为惊人的是，它能对下一步实验做出自己的判断，这位“科学家”在没有团队的指导下，独自发现了一种活性高出6倍的新型催化剂。该机器人可在近似于人类的可触及范围内进行工作，而是结合激光扫描和触摸反馈系统作为“眼睛”进行定位。不仅如此，它的大脑使用搜索算法可以在超过9800万候选实验中导航，因此可以根据前一个实验的结构轻松决定下一步需要进行的最佳实验操作。“移动机器人科学家”拥有如此强大的实验设计能力，甚至可以解决目前我们人类无法控制的复杂问题。

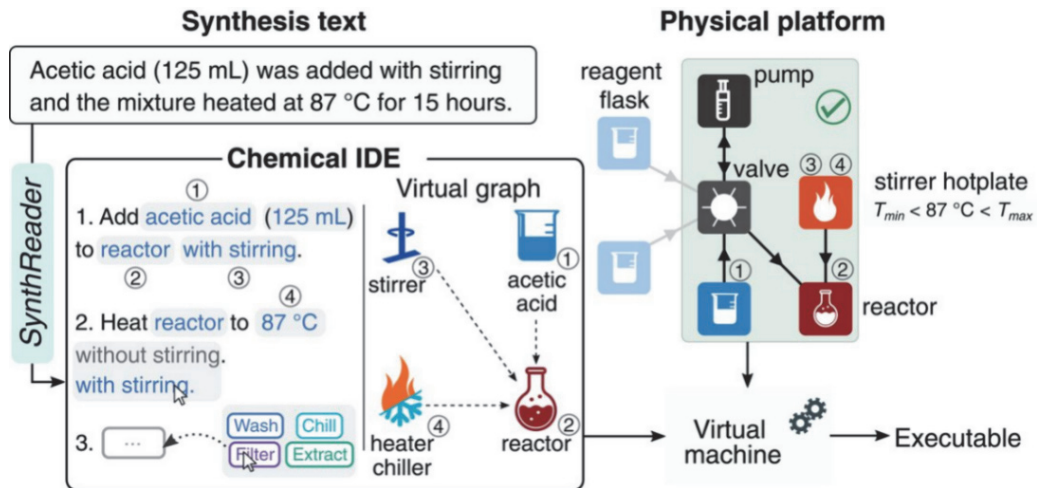


图5 化学软件将文献的合成步骤转化成化学代码<sup>[22]</sup>

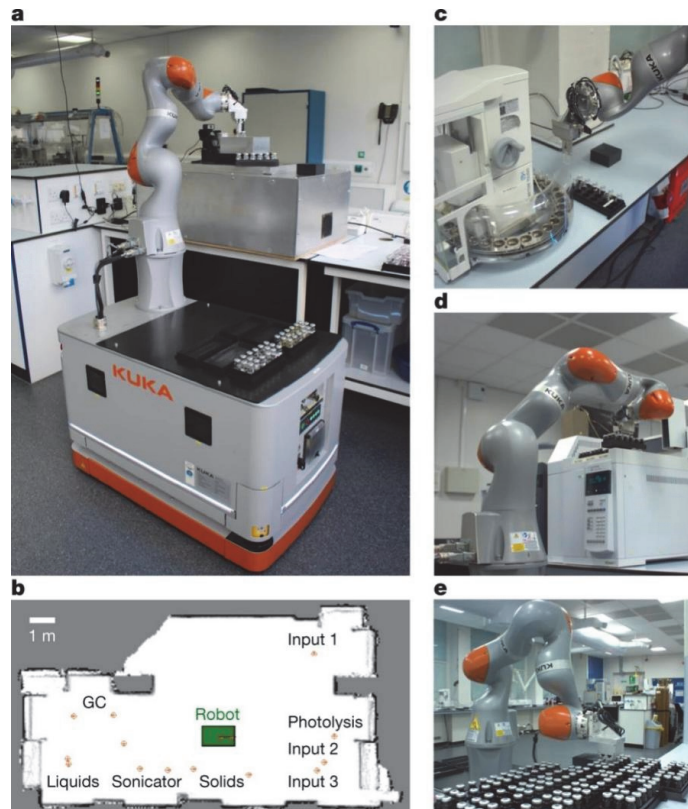


图6 具备科学思维的全方位人工智能化学家<sup>[24]</sup>

AI化学家的出现有望颠覆当前的材料研发范式，将人类的双手从实验台前解放出来。“AI科研助手+操作机器人+智能实验环境+可信多方协作”的高效迭代将令材料研发速度提升成百上千倍，自主化学研究的人工智能系统充分展示了人工智能在加速科学研究方面的潜力。

### 3 结语

AI技术在化学领域的应用正在开启一个新的科学时代。随着自主化学实验室的实现，传统的实验操作模式将被彻底改变，使实验设计、数据分析和结果优化变得更加高效和智能。新型化学研究平台的建设将依托云计算和大数据分析，推动全球范围内的数据共享与协作，打破地域和学科的壁垒，从而加速跨学科研究的深入发展。在数字化背景下，化学教育也呈现出多元化的发展趋势。AI在知识获取和发现过程中发挥着重要作用，不断缩小预测模型与自动化实验之间的差距。通过大数据和机器学习算法，学习化学的复杂性得以降低。在理解反应机理方面，AI与符号数学的深度融合，能够更透彻地揭示反应历程的本质，增强学生对化学反应的理解，同时有效辅助教学。个性化化学教育的推广则基于学生的学习进度和理解能力，提供高度定制化的教育方案，培养新一代具有创新思维和实践能力的化学人才。这种范式转变不仅推动了“科学机器学习”的发展，也为化学教育的未来提供了新的视角。这一变革有望带来深远的影响，进一步促进科学研究和教育领域的进步。

为了充分发挥AI在化学领域的潜力，化学科研工作者和教育家应积极推动以下几方面的工作：首先，促进跨学科合作，化学家应与计算机科学家、数据科学家等领域的专家密切合作，共同开发和优化AI算法，以解决化学研究中的复杂问题；其次，建立高质量、标准化的数据集，并在全球范围内实现数据共享，以提高AI模型的准确性和普适性；再次，在化学教育中引入AI技术的相关课程，培养学生的数据分析和AI应用能力，同时为在职科研人员提供相关培训，使其能够熟练掌握并应用最新的AI工具；此外，制定并遵循严格的伦理规范，确保在使用AI技术处理敏感数据时的安全性和隐私保护；最后，鼓励在AI与化学交叉领域的持续创新，支持相关的基础研究和应用研究，推动技术进步和科学发现。

通过上述努力，AI不仅将成为化学研究的重要工具，更将成为驱动科学突破和实现可持续发展的核心动力。

### 参 考 文 献

- [1] Baum, Z. J.; Yu, X.; Ayala, P. Y.; Zhao, Y.; Watkins, S. P.; Zhou, Q. *J. Chem. Inf. Model.* **2021**, *61* (7), 3197.
- [2] Zhu, Q.; Zhang, F.; Huang, Y.; Xiao, H.; Zhao, L.; Zhang, X.; Song, T.; Tang, X.; Li, X.; He, G. *Natl. Sci. Rev.* **2022**, *9* (10), nwac190.
- [3] Walters, W. P.; Murcko, M. *Nat. Biotechnol.* **2020**, *38* (2), 143.
- [4] de Almeida, A. F.; Moreira, R.; Rodrigues, T. *Nat. Rev. Chem.* **2019**, *3* (10), 589.
- [5] Jie, J.; Hu, Z.; Qian, G.; Weng, M.; Li, S.; Li, S.; Hu, M.; Chen, D.; Xiao, W.; Zheng, J. *Sci. Bull.* **2019**, *64* (9), 612.
- [6] Boiko, D. A.; MacKnight, R.; Kline, B.; Gomes, G. *Nature* **2023**, *624* (7992), 570.
- [7] Zhu, Q.; Huang, Y.; Zhou, D.; Zhao, L.; Guo, L.; Yang, R.; Sun, Z.; Luo, M.; Zhang, F.; Xiao, H.; *et al.* *Nat. Synth.* **2024**, *3* (3), 319.
- [8] Liu, Z. H.; Liu, Y. X.; Yang, Y. L.; Li, J. F. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2023**, *15* (25), 31049.
- [9] Hock, F. J.; Pugsley, M. K. *Drug Discovery and Evaluation: Safety and Pharmacokinetic Assays*, 3rd ed.; Springer International Publishing: Cham, Switzerland, 2023.
- [10] Smalley, E. *Nat. Biotechnol.* **2017**, *35* (7), 604.
- [11] Schneider, P.; Walters, W. P.; Plowright, A. T.; Sieroka, N.; Listgarten, J.; Goodnow Jr, R. A.; Fisher, J.; Jansen, J. M.; Duca, J. S.; Rush, T. S. *Nat. Rev. Drug Discov.* **2020**, *19* (5), 353.
- [12] Smith, G. F. *Methods Mol. Biol.* **2022**, *2390*, 483.
- [13] Lin, Y.; Zhang, Z.; Mahjour, B.; Wang, D.; Zhang, R.; Shim, E.; McGrath, A.; Shen, Y.; Brugger, N.; Turnbull, R.; *et al.* *Nat. Commun.* **2021**, *12*, 7327.

- [14] Chan, H. S.; Shan, H.; Dahoun, T.; Vogel, H.; Yuan, S. *Trends Pharmacol. Sci.* **2019**, *40* (8), 592.
- [15] Asha, P.; Natrayan, L.; Geetha, B.; Beulah, J. R.; Sumathy, R.; Varalakshmi, G.; Neelakandan, S. *Environ. Res.* **2022**, *205*, 112574.
- [16] 费彦肖, 吴俊星. 智能城市, **2020**, *6* (7), 152.
- [17] Kamkar, M.; Leonard, K. C.; Ferrer, I.; Loo, S. C. J.; Biddinger, E. J.; Brady, D.; Carrier, D. J.; Gathergood, N.; Han, H.; Hermans, I. *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2024**, *12*, 2924.
- [18] Hao, K. *MIT Technol. Rev.* **2019**, *123* (1), 1.
- [19] Alasadi, E. A.; Baiz, C. R. *J. Chem. Educ.* **2023**, *100* (8), 2965.
- [20] Holotescu, C.; Grosseck, G. *Brain-Broad Res. Artl.* **2018**, *9*, 99.
- [21] AI助教走进有机化学课堂, 会发生什么奇妙反应? [2024-05-28].  
[https://mp.weixin.qq.com/s?\\_\\_biz=MzI1Nzg2NzcyNw==&mid=2247495318&idx=1&sn=797a3b7c04c0bd157b60de03d439b5e9&chksm=eb8e0b2619e8952faf4cae89b72389eeafd7473f86f1fde387eda5d613e2cdb3bcc0d8a91b22&scene=27](https://mp.weixin.qq.com/s?__biz=MzI1Nzg2NzcyNw==&mid=2247495318&idx=1&sn=797a3b7c04c0bd157b60de03d439b5e9&chksm=eb8e0b2619e8952faf4cae89b72389eeafd7473f86f1fde387eda5d613e2cdb3bcc0d8a91b22&scene=27).
- [22] Volk, A. A.; Epps, R. W.; Abolhasani, M. *Adv. Mater.* **2021**, *33* (4), 2004495.
- [23] Mehr, S. H. M.; Craven, M.; Leonov, A. I.; Keenan, G.; Cronin, L. *Science* **2020**, *370* (6512), 101.
- [24] Burger, B.; Maffettone, P. M.; Gusev, V. V.; Aitchison, C. M.; Bai, Y.; Wang, X.; Li, X.; Alston, B. M.; Li, B.; Clowes, R. A. *Nature* **2020**, *583* (7815), 237.