DOI：10.19789/j.1004-9398.2026.03.001　　**Open Access**
文献引用：陈欣，刘怡帆，黄嘉莉，等．化学视角下的AI驱动跨学科融合：机遇、路径与挑战［J］．首都师范大学学报（自然科学版），2026，47（3）：1-13. CHEN X，LIU Y F，HUANG J L，et al. AI-driven interdisciplinary integration from a chemical perspective：opportunities，pathways，and challenges［J］. Journal of Capital Normal University（Natural Science Edition），2026，47（3）：1-13.

化学视角下的AI驱动跨学科融合：机遇、路径与挑战*

陈　欣，刘怡帆，黄嘉莉，彭浩南**

（陕西师范大学化学化工学院，陕西 西安　710119）

摘要：随着全球经济的发展，现代化和城市化进程不断加快，各种各样的全球性问题接踵而至，环境、气候和医疗等诸多领域的研究面临着越来越多的挑战，单一学科的知识无法系统地解决这些错综复杂的问题。近年来，人工智能（AI）技术飞速发展，作为科学研究的核心学科，将AI技术应用于化学研究在打破学科界限、促进多学科融合方面以及解决各种全球性问题上展现出了极大的潜力。本文回顾了近10年关于AI辅助化学研究——“AI+Chem”应用的文献进展，系统介绍了AlphaFold、SynthReader、dZiner和AlphaFlow等在化学领域内适应应用场景的系统或模型，从阅读并深度学习和分析文献、设计合成路线到自主开展实验，探讨了通过构建跨学科实时融合平台和动态知识图谱来打破学科壁垒的机制，并进一步分析了AI+Chem+多学科协同创新路径存在的机遇和挑战。当前，不论是AI+Chem还是AI+Chem+多学科的研究都还是处于起步阶段，已有的初步研究表明，AI技术极可能是打破学科壁垒、连接知识孤岛的一个强有力工具，也为解决错综复杂的全球问题提供了极大的可能，而工具的发挥和问题的解决还需要所有科研工作者们一起探索。

关键词：化学研究；人工智能；跨学科融合；AI+Chem；AI+Chem+多学科
中图分类号：G64；O6-1　　**文献标志码**：A

AI-driven interdisciplinary integration from a chemical perspective：opportunities，pathways，and challenges*

CHEN Xin，LIU Yifan，HUANG Jiali，PENG Haonan**

（School of Chemistry & Chemical Engineering，Shaanxi Normal University，Xi’an Shaanxi　710119）

Abstract：As the global economy evolves，modernization and urbanization accelerate and various global problems followed. Research in many fields，such as environment，climate and healthcare，is facing increasing challenges. These problems are too complex to be systematically solved by a single discipline. In recent years，artificial intelligence（AI）technology has developed rapidly，as the core discipline of scientific research，when AI technology is applied into chemistry research，great potential will be shown in breaking disciplinary boundaries，promoting multidisciplinary integration and solving

收稿日期：2025-10-28
*国家重点研发计划项目（2022YFA1205501）；国家自然科学基金项目（22272101）；高校学科人才引进计划项目（B14041）；中央高校基础研究基金项目（GK202501003）
**通信作者：phn@snnu.edu.cn

various global problems. This paper systematically reviews a number of literatures in the field of AI in the past decade, introduces some AI systems or models that have been applied to various application scenarios in the field of chemistry, such as AlphaFold, SynthReader, dZiner, and AlphaFlow, from reading, deeply learning and analyzing literature, designing synthesis routes, to conducting experiments independently. It predicts and discusses the mechanism of breaking down disciplinary barriers by building an interdisciplinary real-time fusion platform and dynamic knowledge graph, as well as the future path of AI assisted chemical research—"AI+Chem" and other disciplines. It also analyzes and looks forward to the possible development direction of AI and its challenges. At present, whether it is AI+Chem or AI+Chem+multidisciplinary research is still in its infancy, preliminary research has shown that AI technology is very likely to be a powerful tool to break down disciplinary barriers and connect knowledge islands, and also provides great possibilities for solving complex global problems, and the play of tools and problem solving still need to be explored by all scientific researchers.

Keywords: chemical research; artificial intelligence; interdisciplinary; AI+Chem; AI+Chem+multidisciplinary

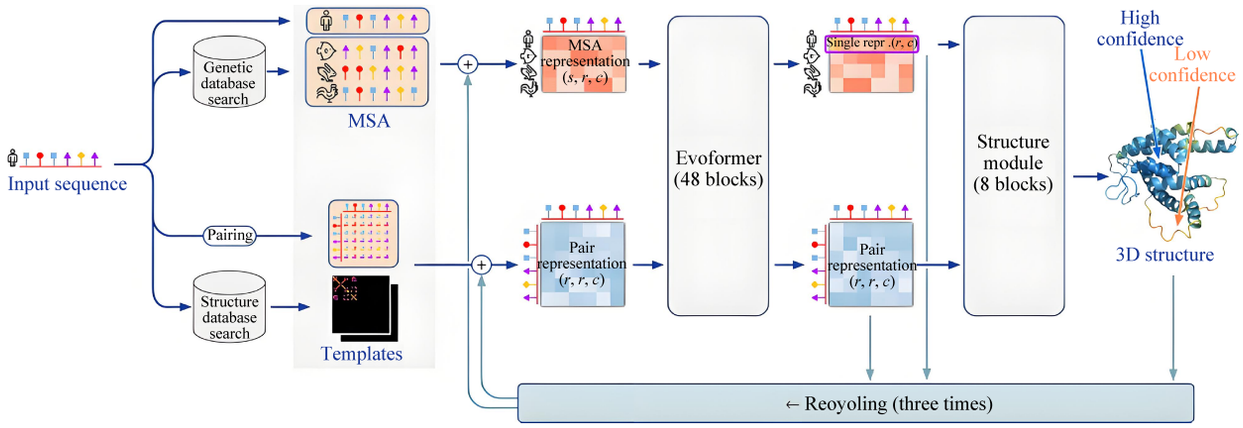
CLC: G64; O6-1 **DC**: A

0 引 言

气候变化、能源资源约束以及公共卫生问题已经成为阻碍全球经济发展与社会和谐进步的主要挑战,摆在当代科学家面前的这些挑战,既具有高度的关联性和复杂性,又无法通过单一学科解决,因此,多学科深度交叉研究的呼声越来越响亮。传统的跨学科合作主要依赖于不同领域专家之间的知识共享与交流,从各自的专业视角寻找问题的综合解决途径。这种合作模式常常面临术语沟通障碍、学科知识壁垒等挑战,尤其在面对复杂的系统性问题时,不同学科之间的知识差异、研究方法和数据格式的不一致性降低了协作效率。随着互联网、大数据和相关信息技术的迅猛发展,知识传播渠道日益丰富、跨学科信息获取更为便捷,传统意义上的信息壁垒似乎正在被逐步削弱,但仅靠信息更"自由"的流动仍不足以实现对复杂问题的深度协同与系统整合。因此,基于新技术提升跨学科合作的研究方向备受学者关注。

20世纪中期,达特茅斯会议首次提出了人工智能(artificial intelligence, AI)术语,而受限于计算机的性能,导致AI的实际应用与预期差距较大,主要应用于基于规则和逻辑推理的系统。进入21世纪,随着计算机硬件的进步以及大数据和深度学习技术的发展,AI的能力得到了显著提升,特别是在模式识别、自然语言处理和图像分析等领域取得了突破性进展,从而使得其在科学研究中的应用迅速扩展[1]。从互联网时代到深度学习革命,再到生成式AI的兴起,AI技术已进入高速发展轨道。根据斯坦福大学以人为本人工智能研究所(Stanford Institute for Human-Centered Artificial Intelligence, Stanford HAI)发布的《2024年人工智能指数报告》[2],2023年全球共涌现出51个具有代表性的机器学习(machine learning, ML)模型,其中学术界贡献了15个模型,产业界与学术界共同研发了21个模型。基础模型的研发也取得了令人瞩目的突破,2023年全球发布了149个基础模型,是2022年的2倍以上。2024年的诺贝尔化学奖授予了AI在化学方向的突出研究成果,表彰John Jumper、Demis Hassabis和David Baker研究的以AlphaFold为代表的AI技术在蛋白质结构预测与蛋白质计算设计领域的突出贡献,研究成果如图1所示[3],彰显了AI在打破学科界限、通过跨学科协作推动科学发现中的变革性作用。

如今,AI模型可以从不同学科的数据中多维度提取关键信息,并自动化整合各类知识,加速跨学科研究进程,打破传统学科界限[4]。如:在化学等高度依托实验数据积累的学科中,通过实时分析和处理大量实验数据,AI能够辅助研究者快速优化实验设计,显著缩短实验验证周期;AI在理论推导中亦展现出突出优势,通过高效计算与优化算法,可对模型快速迭代和动态修正,缩短从提出假设到完成验证的时间窗口,从而在一定程度上重塑传统研究范式,推动基础研究更快迈向应用转化[5]。由此,AI



注:MSA为蛋白多序列比对。

图1　AlphaFold的模型架构及各个组件之间的信息流[3]

Figure 1　model architecture of AlphaFold and the information flow among the various components[3]

开始以前所未有的方式驱动自然科学的发展,催生了一个全新的研究领域——人工智能赋能科学研究(AI for Science),近年来在全球迎来蓬勃发展,展现出重塑科技创新和多学科协同创新的巨大潜力[6]。

1　化学视角的多学科合作

化学是研究物质组成、结构、性质及其变化规律的基础科学,通过对微观世界的深入探索,人们得以理解物质本质与转化机制。作为“中心学科”之一,化学在自身蓬勃发展的同时,有力推动了生命科学、材料科学、环境科学、药学、能源科学和食品科学等众多领域的进步,并在应对重大现实问题中发挥着不可替代的作用。从学科交叉的角度看,化学为生物学提供了定量分析与分子识别的核心工具,生命体内的新陈代谢、遗传信息传递和信号调控本质上皆由一系列精细有序的化学反应驱动;电泳、色谱、质谱和核磁共振等分析技术已成为解析生物大分子结构与功能的关键手段。化学也是高分子科学与材料科学的理论基础和方法源泉,研究者能够通过分子设计与可控合成构筑具有高强度、高导电性、高耐蚀性、高选择性分离、智能响应等特殊性能的新型材料,为电子信息、能源存储、催化转化和生物医药等应用提供解决方案。药物研发更是高度依赖有机合成和药物化学的创新,使抽象的药理学机制得以转化为切实可用的治疗分子。与此同时,化学在食品营养与安全评估中支撑从成分检测到品质溯源的全链条控制。在环境科学中为识别污染物、阐明迁移转化机制及设计修复策略提供理论与技术基础。可以说,从环境治理到能源转化,从材料创制到人类健康保障,化学在解决当今与未来的全球性挑战研究中始终处于核心枢纽地位,是支撑人类社会可持续发展的关键“底层科技语言”和问题解决工具库。

一方面,化学为其他学科提供了基础理论、物质和技术支持。以世界气候变化的难题为例,可制定化学实验方案揭示大气中温室气体CO_2的转化机制,厘清产生途径、行为模式以及对环境的影响。如:王华琴[7]通过改良Ni基活性炭催化剂成分与结构并研究其在不同温度下低温等离子体催化重整CO_2-CH_4的性能,并用于生活中的温室气体转化;李秀权[8]根据催化剂金属Fe-Ni活性组分对乙烷与具有弱氧化性的CO_2催化反应性能的影响,确定了CO_2资源性转化的最优条件;王欣茹[9]利用可再生能源转化的清洁电能捕集电化学CO_2,实现常温分离纯化CO_2,不仅提高了CO_2捕集的效率,同时降低了CO_2分离的能耗,优化并创新了以往的CO_2捕集和规模化长时储能技术。这些研究为碳捕集、利用与封存(carbon capture and storage,CCS)技术的开发提供了坚实的理论基础,帮助减少大气中的温室气体浓度,加快了实现“双碳”目标的步伐。此外,在能源转型中,化学同样起到核心作用,尤其是在设计高效的光电、热电以及电化学系统方面,这些技术对于可再生能源的生成、储存和传输至关重要。再如,化学在全球健康领域也有广泛应用,包括新药开发、传染病检测以及分子诊断技术的创新,这些成果都依赖化学基础研究的突破。

另一方面,其他学科的发展为化学学科提供新

的研究方法、技术手段和理论框架,极大地推动了化学的进步。例如,在气候变化研究中,各种化学技术手段在应对全球气候变暖的严峻形势中起着不可或缺的支撑作用,但仅依赖化学反应机制的研究并不足以全面揭示气候系统的全貌。Hegerl[10]指出物理学家Klaus Hasselmann和Syukuro Manabe开创了气候建模的先河,首次通过地球气候的物理建模可靠地预测了全球变暖趋势;Sain[11]提出了利用大规模数据科学量化气候风险的设想,强调了数据科学管道在气候监测和研究中的重要性,并论证了可行性。2023年联合国的气候与生物多样性团队强调了气候与生物圈之间的相互依存关系,并提出应将生物学的细节纳入现有的物理气候建模中,并进一步强化这2个领域的跨学科联系与知识共享,以有效应对这一双重危机[12]。以上研究表明,要想全方位攻克全球性难题,必须将物理学的大气动力学模型、生物学的生态系统响应机制以及数据科学的大数据分析技术等学科知识同步结合。类似的多学科交叉研究在其他科研问题中也屡见不鲜。然而,实现多学科间研究成果的高效交互与整合,才是成功应对复杂系统挑战的关键所在。

传统的化学研究模式高度依赖于经验指导、广泛的实验以及有限的计算机模拟,这种方法不仅耗费了大量的人力、时间、材料和资源,还受制于人类认知能力的局限性,难以全面处理海量的文献和数据。这导致化学家常常耗费大量时间在重复性研究上,阻碍了效率与创新。随着科研工作者不断探索和实验,AI在化学中的创新应用层出不穷,已有技术的整合,为化学研究带来了全新的思维模式与技术支持——AI辅助化学(artificial intelligence assists chemical research,AI+Chem)研究,打通了数学与化学之间的学科壁垒,为预测分子性质、加速新材料与新药物的发现、优化实验路径、揭示反应机理等提供了可能,促成"AI+Chem"新兴交叉领域的生成。Yang等[13]基于CiteSpace软件检索了Web of Science核心合集2000—2024年发表的"AI+Chem"方向的相关原创文章,并可视化展示了知识背景、研究现状和最新知识结构(图2),预测其未来发展主要以分子设计、反应预测、材料设计、药物设计和量子化学等为热点。

目前,AI+Chem领域的成果在跨学科的实践尝试中仍存在诸多尚未解决的关键问题:不同学科之

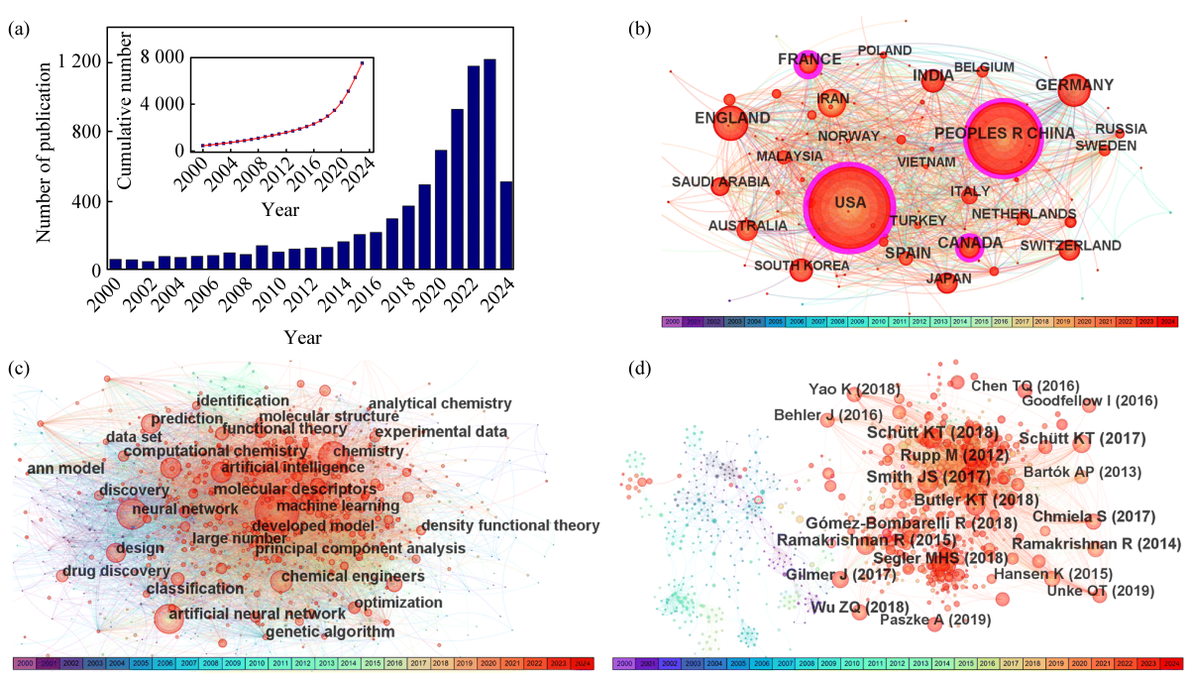


图2　CiteSpace对人工智能辅助化学(AI + Chem)研究领域文献的相关调研结果[13]

(a)年出版物数量;(b)不同国家发文量;(c)关键词共现图谱;(d)文献共引的可视化网络

Figure 2　research results on literature in the field of artificial intelligence assisting chemical (AI+Chem) research using CiteSpace[13]

(a) number of publications per year; (b) publication output by country; (c) keyword co-occurrence map; (d) visual network of co-cited literature

间的数据标准与本体体系尚未统一,知识表达割裂,限制了模型在更大范围内的迁移与泛化;多数AI模型仍聚焦于局部任务,缺乏面向复杂系统问题的全流程协同能力;模型决策过程透明度不足和“幻觉”等风险削弱了其在高风险科研与工程场景中的可信度;面向真实科研场景的动态知识图谱、自动化实验平台与跨学科协同机制之间仍缺乏系统性的整体设计。基于此,本文在回顾近10年AI+Chem代表性进展的基础上,系统分析AI重构化学研究与多学科协同的内在机制,提出“AI驱动的实时学科融合平台+动态知识图谱”的框架,以此揭示AI打破学科壁垒、重构科研流程的潜在路径;进一步凝练出通用跨学科模型构建、可解释性与可信治理等面向未来的核心挑战,尝试为AI赋能化学研究及跨学科融合(AI+Chem+多学科)提供具有前瞻性的整体路线图和实践指引。

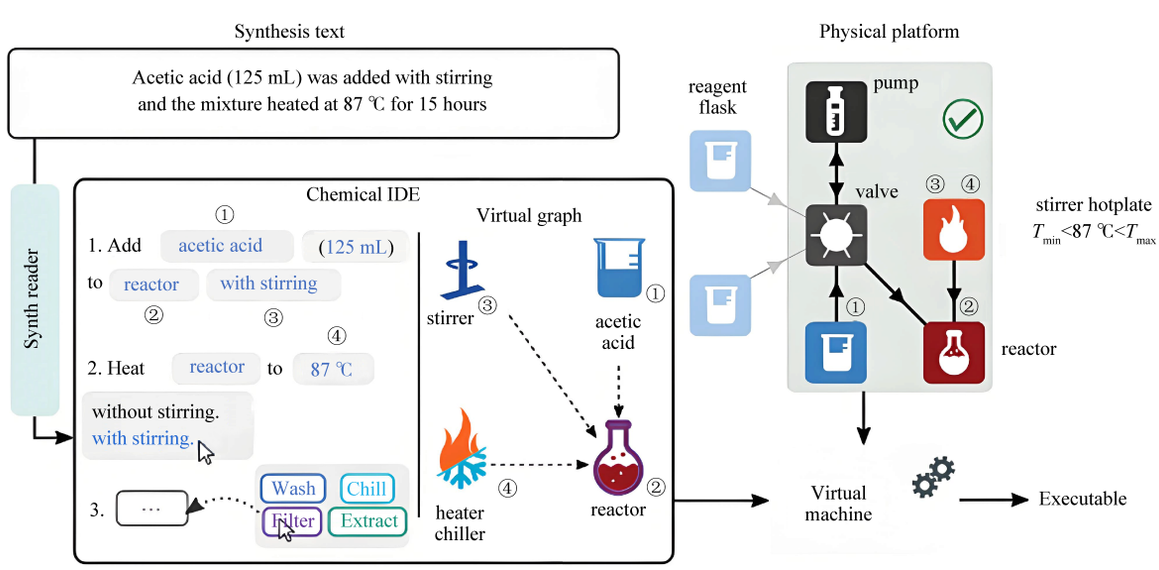
2　AI+Chem虚拟实验室搭建

2.1　天然产物合成与设计

在AI 2.0时代,把握AI技术不仅意味着科研效率的提升,更意味着科研“弯道超车”机遇的到来。早在2018年,*Nature*报道了AI通过深度学习大约1 250万个化学反应后,就能够在短短5 s内规划出新的合成路径[14],而5 s甚至不够一个人类化学家完整地写下这个化学反应。2020年,复杂天然产物的逆合成分析AI也在*Nature*上惊艳化学界,其所设计的路线与经验丰富的化学家设计的路线几乎没有差别[15];*Science*也报道了如图3所示的会解析文献并能够直接在自动合成平台上执行的AI系统[16];*Nature*报道了会做实验的AI智能体[17],化学家无需编程知识,使用自然语言就可修改自动识别的合成步骤。

2.2　材料设计与应用

AI+Chem利用生成式模型加速材料发现、模拟实现体系筛选,以及借助自主实验平台完成快速验证等路径实现。Osaro等[18]综述了AI在材料科学中的集成化应用,强调其在材料设计、性能预测、实验自动化等方面的跨领域促进作用;Chávez-Angel等[19]也在综述中强调了在材料工程领域的工艺优化、器件设计和工业制造等环节,AI能够有效打通化学设计、材料开发与工程实现之间的多学科耦合链条,起到了不可或缺的应用驱动型作用,成为了材料科学迈向体系化和自动化研究的核心驱动力;Otyepka等[20]报道AI可显著加速材料发现的全流程,包括数据构建、特征挖掘、结构预测和实验验证,强调了构建“AI+自动化实验+多尺度建模”的闭环体系在多学科材料研究中的重要性;Reiser等[21]系统总结了图神经网络(graph neural network,GNN)在化学和材料领域的快速发展,展示了其在性质预测、功能材料筛选和结构-性能映射上的跨学科优势,证明了AI是驱动化学与多学科深度融合的关键技术;Ansari等[22]在关于通过AI发现新材料突破的



注:IDE指集成开发环境;序号代表实验顺序;T_{min}、T_{max}为最低、最高实验温度。

图3　SynthReader将合成程序转换为化学代码并执行指令的流程[16]

Figure 3　SynthReader converts synthetic procedures into chemical code and executes commands[16]

文章中,介绍了一个名为dZiner的化学AI代理(图4),通过深度学习化学领域的文献,以性质到结构的逆向思路,从新材料期望具有的性质出发,预测化学结构并设计合成路线,为功能材料的分子级构建提供了全新的自动化路径,这能作为人类化学家高效设计合成路线的基础。这些研究共同表明,AI并非替代传统化学,而是通过重塑材料发现流程、强化结构-性能关联理解和压缩实验迭代周期,使化学的知识框架能够更准确高效地进入能源技术创新的前沿,并加速材料科学从经验探索迈向可预测设计的时代。

2.3　静态实验室向动态实验室的迭代

传统的科研实验室大多是静态实验室,静态实验意味着预先设计确定的实验条件并执行。顾名思义,AI动态实验室则是在实验条件、步骤等方面都能够依托于AI的数据架构而灵活变化,以此可以丰富实验现象,并利用AI模型预设推理演绎,从而达到实验的最佳效果和效率。中国科学院大学江俊、陈林江团队开发了一种AI辅助的交互式实验-学习进化方法[23],以加速高荧光共价有机框架(covalent organic frameworks,COFs)的发现,这类方法展示了"虚拟实验流程—真实实验反馈—模型学习进化"的深度融合,为虚拟实验室提供了可被复用的核心逻辑。与此同时,Volk团队开发的自主化学实验室AlphaFlow进一步展示了动态实验系统的潜力(图5)[24],利用强化学习实时更新自身的"信念模型",能根据实验中出现的偏差或材料状态的波动即时调整反应条件和操作步骤。这种"自适应调控—动态优化"的机制,是AI虚拟实验室区别于传统实验室的关键特征,即未来的实验流程可由机器在高维参数空间中实时寻优。

这些新型实验模式为虚拟实验室的建设提供了重要启示:其意义不仅在于提升研究效率,更在于推动研究范式从线性试错转向知识驱动的智能探索。如:Wang和Zhang[25]认为AI算法的强大计算能力显著提升了复杂分子结构的设计效率,同时

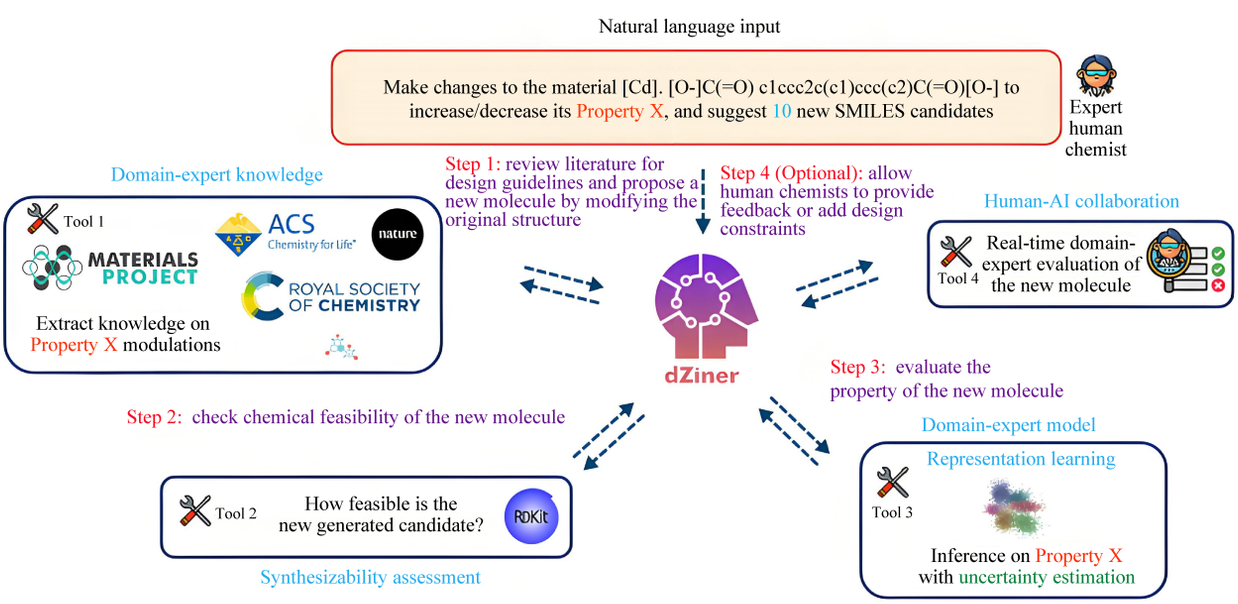


图4　dZiner动态检索-人工智能(AI)生成-实时评估-人工审查的工作流[22]

Figure 4　workflow of dZiner: dynamic search, artificial intelligence (AI) generated, real-time evaluation, manual review[22]

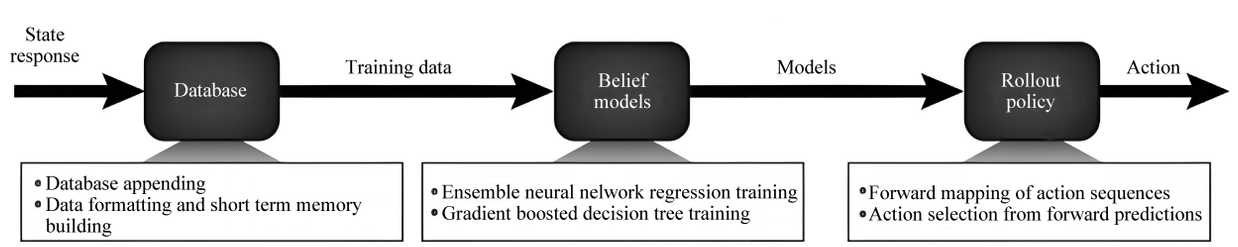


图5　AlphaFlow系统中的信念模型工作示意[24]

Figure 5　the work process of the belief model in AlphaFlow system[24]

能更精准地预测分子性质和优化合成路线;Ramos等[26]强调基于AI和ML的大型语言模型(large language models,LLMs)已成为化学领域的强大工具,LLMs不仅能够推动分子设计、性质预测和合成路线优化,还具备通过自动化显著加速科学发现的潜力。

由此可以预见,AI推动下的实验室从"静态"向"动态"转型是未来新趋势,研究人员有望依托于AI构建的动态实验室实时分析数据,并按照原实验设计开展实验后的阶段性情况自我反馈,根据对所得数据的整合和分析动态,合理地调整后期实验方案,即动态迭代优化实验。

3　AI+Chem学科融合交流平台搭建

3.1　多学科数据交流平台搭建

从传统的学科研究模式来看:知识传播和交流的范围局限于学科内部,构成了学科间的不可通约性——学科壁垒;知识生产过程中的交流、传播、生产和创新被严格限定在学科围墙之内——形成了知识孤岛。随着科学发展的进一步深入,跨学科合作的优势逐渐显现出来。以计算蛋白设计为例,化学家为蛋白质的各种化学键与相互作用提供了理论支持,生物学家通过实验验证这些抽象理论在实际生物体中的体现,计算机科学家则通过构建囊括了上述化学和生物学科知识的模型和算法,达到优化蛋白质预测的目的[27]。2023年的一项"World Avatar"研究中,Bai团队为该项目的自动驾驶实验室开发了一个基于动态知识图谱的架构[28],通过将软件代理编码为可执行的知识组件,使得World Avatar超越了静态知识表示,在保留与现有信息连接的同时,能够支持动态和持续地合并新概念和数据;为了佐证和演示这一数据框架的实际应用(图6),该团队同时连接了剑桥和新加坡的2个机器人,实时协作了闭环优化与制药相关的醛醇缩合反应,展示了World Avatar的模型在实时更新数据和接受反馈方面的性能。未来可能兴起基于AI的云端科研协作系统的"即时科研平台",不仅同专业的科研人员能共享实验数据,探讨本学科难题,跨专业科研人员也能提供专业知识以探讨跨学科难题,科研人员将以机器协作为载体,在全球范围内实时科研互动,加速科学新发现。

3.2　知识图谱共现

知识图谱是以图谱形式存储实体及其相关信息,并展示实体之间关系的一种结构化的语义知识库。知识图谱结合自然语言处理、ML和深度学习技术,能够削弱甚至抹除学科间无形的术语"壁障",并以图形化方式展示综合处理的结果,使用户能够直观理解复杂的关系网络。在跨学科合作中,知识图谱的核心优势在于能够合并不同来源的知识、解决数据冲突,并构建前后一致的数据库,使复杂的数据关系以更加简单和高效的形式呈现。

如Bai团队在其World Avatar项目中,构建了如图7所示的实验室知识图谱[28],解决了新加坡与剑桥跨组织异地数据共享中的标准化问题;采用标准化的研究交流语言,使录入数据能够实现可查找、可访问、可互操作和可重用(findable,accessible,interoperable,reusable,FAIR)原则,利用自然

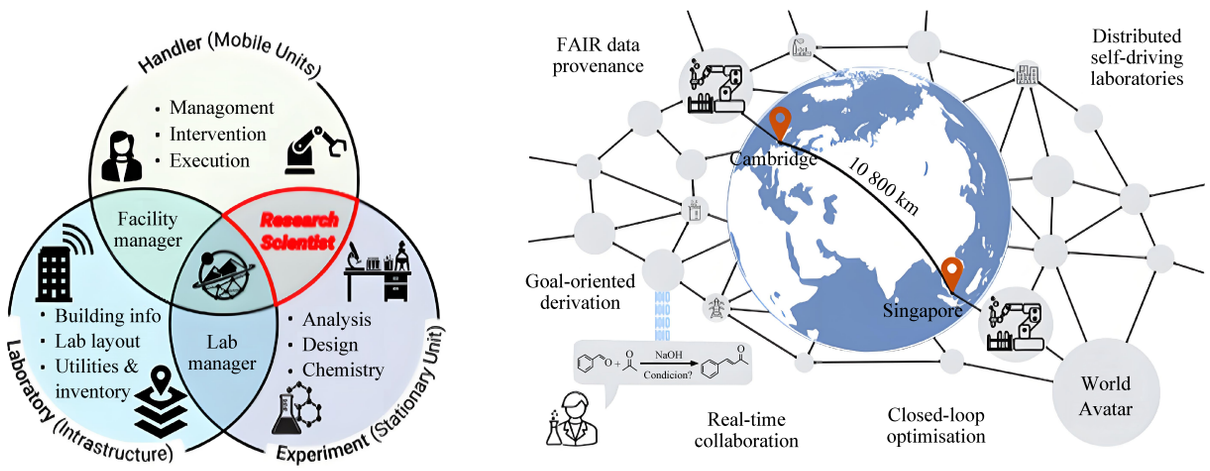


图6　World Avatar全球互联实验室数字双胞胎方法概念[28]

Figure 6　World Avatar approach towards globally connected laboratory digital twins[28]

语言处理技术,确保参与者能够在分配任务和共享研究结果时使用公共语言,从而全面覆盖科研实验室的所有层面。这一案例展示了知识图谱在同一学科中实现跨组织知识与技术共享的潜力。然而,未来的发展将更为雄心勃勃,AI结合知识图谱将自动整合分散于不同学科的知识,通过自动化学术推理与因果推理的能力,构建一个全球性的跨学科知识图谱。此类平台将使科研人员能够自主学习和获取跨学科知识,而不仅限于本学科范围。

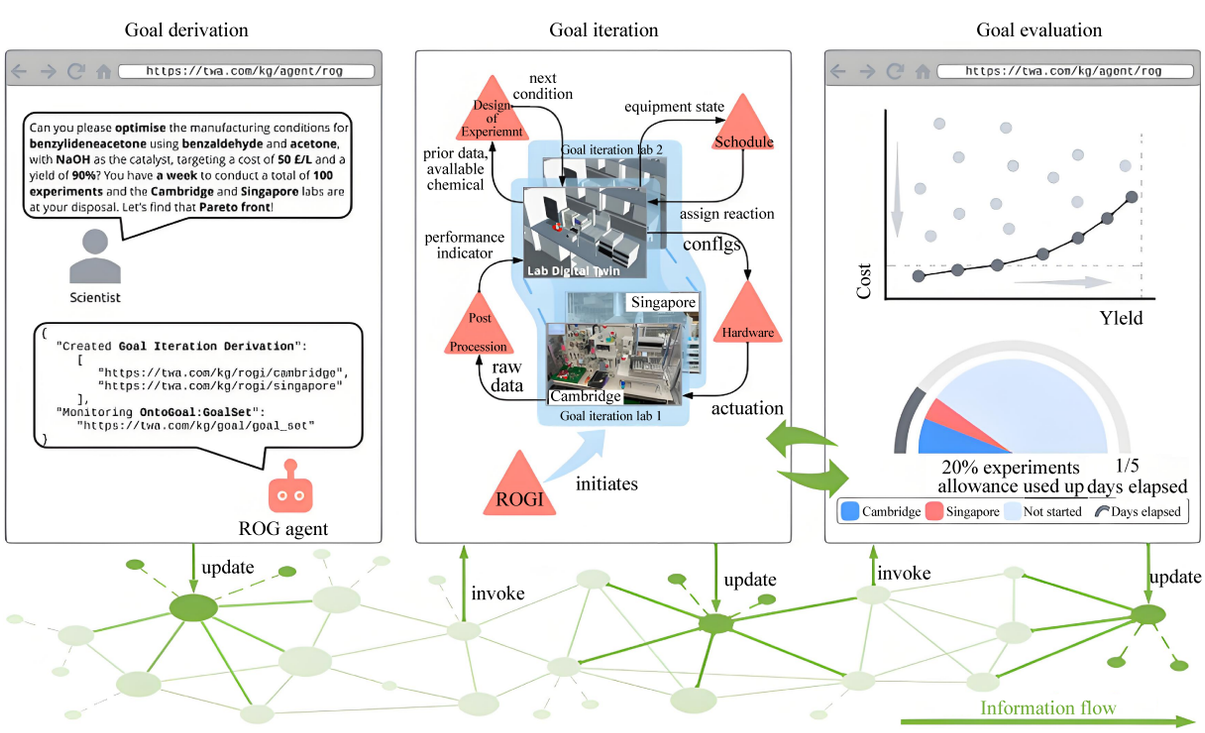
更进一步,若结合因果推理与GNN,AI不仅可以连接现有知识,还能通过自主学习和推理生成新的科学假说。这种跨学科的自动化整合平台有望彻底改变学科间的互动方式与知识生产的模式,成为实现知识图谱综合应用最大化的最终形态。这一愿景不仅将推动科学研究的深度融合,还可能重新定义未来全球化科研的协作方式。

4　AI+Chem+多学科

4.1　AI+Chem+多学科深度融合

近年来,AI与化学的深度融合不仅提升了药物分子设计的效率,也正在扩展生物医药、生命科学与环境科学的研究边界。

在生物医药领域,AI已能够在药物复杂反应规划与逆合成设计中展现接近化学专家的能力。如:Ferreira和Carneiro[29]全面综述了AI在药物发现中的作用,涵盖分子生成、虚拟筛选、药物代谢动力学(absorption-distribution-metabolism-excretion-toxicity, ADMET)预测至动态力学热分析(dynamic mechanical thermal analysis, DMTA)闭环优化,清晰展示了化学如何作为药物科学与AI技术连接的桥梁学科;Bajorath[30]指出AI使化学与生命科学之间的边界日益模糊,跨学科研究呈现高度耦合趋势,强调了AI在药物、系统生物学与化学机制研究中的桥接作用,是"AI+Chem→Biomedicine"的典型案例,是AI+Chem作为跨学科枢纽的直接证据。化学物质的设计与合成能力,从根本上决定了生物医药领域研究的广度。无论是旨在干预疾病通路的小分子药物,还是用于精准诊断的分子探针,其创制都依赖于对分子结构的精确设计与高效合成。AI+Chem作为强大的赋能工具与催化剂,正在加速学科壁垒的消融,并催生新的交叉研究范式。通过AI+Chem能够加



注:ROG为反应优化目标;ROGI为反应优化目标迭代。

图7　信息在知识图谱中动态地传播时自主响应人类科学家指令的工作流[28]

Figure 7　autonomous workflow triggered in response to goal requests from scientists as information dynamically travels within the knowledge graph[28]

速化合物的设计与合成路径规划,拓展药物与分子探针的可探索空间。AI能够在数秒内完成逆合成分析、自动读取文献并直接执行合成,甚至依据目标性质反向生成结构与路线。通过AI的强大功能联结化学与生物,实现跨学科融合,从而大幅缩短药物发现周期,使药物分子设计与合成从经验驱动转向高效预测与自动化实践,推动生物医药研发进入快速迭代的新阶段。

在生命科学领域,AI模型在复杂化学系统中的训练正不断深化其对生物分子结构与功能的理解,并重塑分子层面的研究范式。以AlphaFold2为代表的蛋白质结构预测革命[3],以及新一代de novo蛋白生成模型[31],不仅极大提升了蛋白结构的可预测性,也为靶点发现、酶催化机制解析与创新生物治疗策略的构建提供了全新的化学基础。同时,核糖核酸(ribonucleic acid,RNA)二级结构预测、序列优化与功能设计方面取得突破性进展[32],使核酸药物开发与基因调控研究从依赖实验筛选转向可计算、可编程的设计模式。随着这些模型在结构生物学与化学生物学领域的深入应用,AI正使生命科学的多个核心问题呈现从"难以解析"向"可预测、可设计"的根本性转变。

在环境科学领域,AI + Chem通过材料设计、反应动力学与多尺度模拟的深度融合,正为复杂污染治理提出新思路。Nuzhat等[33]在光催化废水处理研究中证明,机器学习框架能够同时整合催化剂组成、能带结构与光反应条件等多维化学特征,实现对有机污染物降解效率的精准预测与快速筛选,从而显著缩短新型光催化材料的研发周期;在更复杂的水处理体系中,Mousazadehgavan等[34]进一步展示AI模型在电化学氧化与重金属去除等过程中的价值,不仅可优化电极材料与反应参数,还能在真实水体的多变量耦合背景下实现性能预测与工艺调控,为构建高效、可扩展的电化学水处理技术提供决策支撑。由此可见,AI+Chem不仅增强了传统环境治理技术的预测性和调控能力,也为应对多污染因子、跨尺度耦合等环境科学难题奠定了新的方法论基础。

跨学科科研合作的首要难点是学科间的术语不相通,这是学科间知识不可通约性的根源所在。以蛋白质结构预测问题举例来说,化学家习惯使用分子和原子层级的术语,而生物学家则更加注重功能性和进化角度的表达,计算机科学家则通常聚焦于算法和数据分析。随着当今信息技术的飞速发展,信息的来源和存在形式多种多样,计算机科学家将每种信息的不同来源或存在形式称之为一个模态。当前的AI模型大多为特定领域优化,即"单一模态",而自然信息往往具有丰富的特征,远非单一模态能够完整描述的。

未来解决术语不相通的问题应该着眼于构建"万用"AI模型,任泽裕等[35]在多模态数据融合的综述中提到了如何通过自然语言处理、深度学习和图像识别开发出多模态信息融合技术。在跨学科应用中,一个学科的某研究方向可视为单一的"小模态",学科整体即可认定为单一的"大模态",跨学科融合即可以代入多个大模态的信息融合,应用多模态信息融合技术,从而生成能够自适应不同学科的"多模态AI"模型,构建可以自适应不同学科的AI平台,并通过统一的模型框架解决跨学科的复杂问题,尤其是在开发能够跨学科适应的所谓"万用"AI系统上。无论是跨学科研究平台还是知识图谱,AI都需要具有通用性,这是讨论AI用于加速人类科学发现进程的最初理念。

未来学科融合势必要打破学科"泾渭分明"的界限,由传统的AI概念产生的通用人工智能(artificial general intelligence,AGI)和类脑智能(neuromorphic computing,NC)方向的研发工作便能够促使AI逐渐具备真正的自主学习、因果推理和自我创新能力,这2项技术将会使得未来的AI系统更加高级,展现出更符合人类逻辑的协作与沟通能力,从而能够与人类或其他AI系统高效地交换知识,最终形成一个由多个高级AI系统共同组成的多学科交叉融合的科学探索平台[36-37]。

不同于当前仅作为科研的辅助工具,未来的AI是具备进行跨学科协同自我学习、自主推理能力的"智能合作者",更将逐步成为科学研究中的伙伴。在这样的工作模式下,人机交互的效率成为了高效取得科研成果的关键。以马斯克的Neuralink为代表的科技公司所进行的脑机接口(brain-computer interface,BCI)技术的开发[38-39],正能够弥补AI系统在人机交互方面可能存在的缺陷。BCI运行的首要步骤是读取并识别人类的脑电数据,通过借鉴BCI对脑电数据进行翻译的底层逻辑,AI系统可以更好地理解人类独特的思维方式和决策过程,从而提高

人机交互的效率。与此同时,AI将在科研中获得身份转变,与人类研究者协同工作,实现更深层次和更高效率的跨学科融合与创新[40]。

4.2　AI+Chem+多学科挑战

随着深度学习和ML的不断发展,AI模型强大的学习能力和巨大的参数空间被视作人类难以理解的“黑箱”模型,其决策过程缺乏透明度,性能越优秀模型的工作机制往往越难以理解。AI模型复杂程度逐渐增加的趋势,促使其透明性和可解释性的提高成为AI发展必不可少的一环,这在科研和许多社会行业的关键基础设施和高风险领域中成为了一个重大挑战。例如,欧盟已经提出的AI伦理的五项原则,其中便包括透明运行的可解释性原则[41]。

AI大模型的训练过程本质上是对海量数据进行高维压缩与抽象,其输入的是内容之间关系的数学表征,而非内容本身的语义理解。因此,当模型与人类进行交互时,是基于统计概率生成最“流畅”的文本,而非最“真实”的答案。这一机制导致其在面对复杂、细节敏感或知识边界不清晰的问题时,容易输出形式上连贯却事实错误的内容,即所谓“AI幻觉”[42]。随着大模型在科研、工程与产业中的应用愈加广泛,AI幻觉的欺骗性也愈发凸显,尤其在化学研究等强依赖实验逻辑与理论严谨性的领域中,错误信息可能直接导致研究方向偏离甚至实验失败。因此,将AI科学且高效地融入化学研究及跨学科复杂系统的协同工作,必须强调模型生成结果的合理性、逻辑性与可行性审查。在利用AI或机器学习快速生成理论假设、实验方案或分析路径时,研究者仍需进行独立判断与科学验证,避免因不加甄别地接收错误内容而造成适得其反的后果。国内政策如《生成式人工智能服务管理办法》亦明确要求建立AI输出欺骗行为的风险监控机制[43],强调安全、可靠与可控性。因此,构建具备可解释性、可审计性与风险可控性的AI科研模式,将成为推动跨学科深度融合与实现智能科研范式变革的关键基础设施。

为了完善这一问题,能够通过技术手段向人类提供清晰、可理解的解释来说明其决策和预测过程的AI系统——“可解释”的人工智能(explainable artificial intelligence,XAI)应需而生,常规XAI系统工作流程如图8所示[44],其目标是:在保持模型预测性能的同时,通过技术手段向人类提供清晰、有逻辑的解释,说明模型的决策与预测依据。AI可解释性及其可视化不仅有利于理解从数据中学习是如何发生的,从而支持和提高人类对于给定AI模型输出的信心,还有助于揭示如何利用模型来改进其自身性能。在这一类系统中,XAI不仅用于解释单次预测,更有望用于记录与审计整条科学工作流中的关键决策节点,包括理论假设生成、实验条件选择、成本与资源配置、潜在风险评估及避险策略建议等[45]。XAI的发展需要综合使用自然语言处理、特征归因和计算论证等方法,整合了计算机科学、工程学和心理学等多个领域的技术。目前,最近热门的DeepSeek大语言模型的“深度思考(R1)”模式大致能够给出AI对于使用者所提出问题的思考过程和逻辑,初步实现了帮助用户理解模型的预测结果,但这种透明运行的AI模型数量少且自解释性不全面,还需要在现有基础上反复修改与尝试。

面向未来,XAI+Chem的结合有望支撑一种“全流程、可解释的智能科研模式”:从可追溯的机理建模和虚拟实验,到在自动化平台上执行实验,再到结合安全规范的方案筛选,以及针对高风险操作的

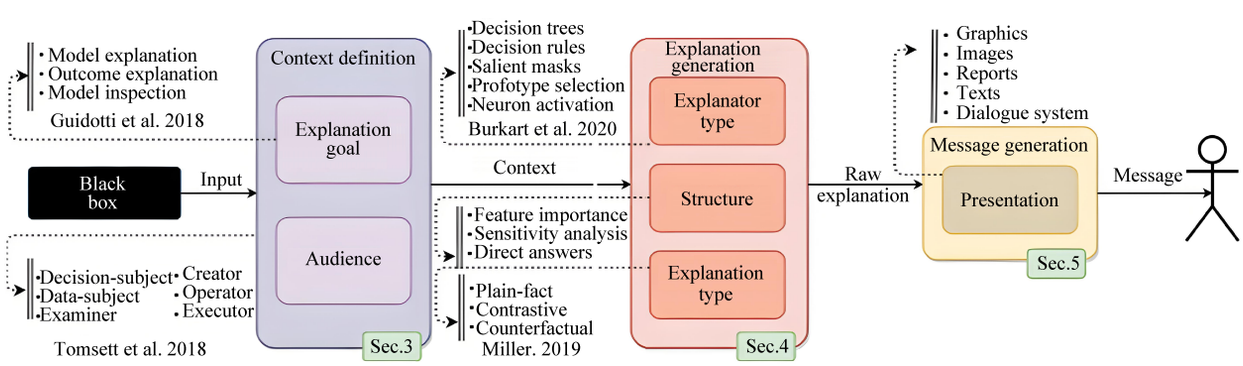


图8　“可解释”的人工智能(XAI)系统选择使用自然语言解释的路线[44]

Figure 8　roadmap for selecting explainable artificial intelligence(XAI) systems that make use of natural language explanations[44]

实时监控和预警。随着此类“虚拟实验室+自驱动实验平台+风险治理”体系的完善,AI有望在提高科研效率的同时,真正成为可被信任的跨学科合作伙伴,而不仅是一个性能优异却难以理解的“黑箱”工具。

AI正在渗入人类社会的方方面面,从经济到教育,从科研到医疗,只有AI具有足够的可信任度,才有可能最大限度地发挥作用,而提高模型透明度——准确理解AI模型决策背后的推理,是提高用户信任度的关键。若将XAI更加广泛地应用于更多领域的不同工作场景,这些系统的可解释性需要攻克的不单纯是技术问题,届时,如何在技术可解释性的基础上,进一步构建兼顾法律、伦理与社会责任的治理框架,将成为AI+Chem走向大规模应用与深度跨学科融合必须持续回答的问题[46]。

5　结束语

AI在与化学学科的融合中展现出了巨大的潜力,尤其是在加速化学研究、优化实验设计、发现新规律等方面。然而,目前的研究还只是一个初步尝试,未来的探索需要更多跨学科的人才和技术投入。要真正打破学科壁垒和知识孤岛,不仅需要更多的跨学科人才和技术投入,更需要学者们以科学的态度面对AI技术。学者们既不能被技术表面的“辉煌”所迷惑,也不能因技术的复杂性而退缩,而是要以严谨的科学精神,探索AI与化学融合的真正价值。唯有如此,才能在未来的科学研究中,实现跨学科的协同创新,推动化学及相关学科的长足发展。与此同时,AI技术本身的局限性和潜在风险也需要引起警惕,学者们需要以科学的态度和严谨的方法,推动AI与化学的健康发展。

即便后时代的AI能够拥有强大的学习能力,能够掌握大量客观的外显知识,在使用AI进行科研工作时,对其输出的答案不能直接采信,应以多个AI模型分别生成答案再交叉验证、对照取优,对关键任务输出更有必要采取人工交叉验证,结合文献数据库、行业知识图谱等专业工具作出判断。同时也要意识到,因为人的世界存在大量默会知识,这是人创造性的根源,AI永远无法复刻,所以人类科学家的思想和创造力也始终不可替代。

科学家们推动跨学科协同的最终愿景是科学无边界。AI版图的扩展与开发能够使得学科壁垒逐渐消失,形成“无边界科学”的理想状态。在这个愿景中,能够打破时空的限制,也不再有固定的学科划分,研究者将以更加宏观和全面的视角探索无止境的知识。通过上述这些更加前沿的技术与观点,这篇评论性论文希望展示AI在未来打破学科壁垒的颠覆性潜力,同时为以学科协同为中心的科学研究提供更具战略性的视野,从而激发学术界和工业界的思考,并为未来的科研发展方向提供清晰的路线。

©The editorial department of Journal of Capital Normal University (Natural Science Edition) 2025. This is an open access article under the CC BY-NC-ND 4.0 license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/).

参 考 文 献

[1] LUGER G. A brief history and foundations for modern artificial intelligence [J]. International Journal of Semantic Computing, 2023, 17 (1): 143-170. DOI: 10.1142/S1793351X22500076.

[2] MASLEJ N, FATTORINI L, PERRAULT R, et al. Artificial intelligence index report 2024 [R]. Stanford: Stanford HAI, 2024.

[3] JUMPER J, EVANS R, PRITZEL A, et al. Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold[J]. Nature, 2021, 596 (7873): 583-589. DOI: 10.1038/s41586-021-03819-2.

[4] LI J L, ZHANG M Y, LI N Y, et al. Generative AI for self-adaptive systems: state of the art and research roadmap [J]. ACM Transactions on Autonomous and Adaptive Systems, 2024, 19 (3): 13. DOI: 10.1145/3686803.

[5] ZENIL H, KING R D. The automated AI-driven future of scientific discovery[M]. Singapore: World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2023: 679-691.

[6] BOIKO D A, MACKNIGHT R, KLINE B, et al. Autonomous chemical research with large language models[J]. Nature, 2023, 624 (7992): 570-578. DOI: 10.1038/s41586-023-06792-0.

[7] 王华琴. 镍基活性炭催化剂耦合低温等离子体重整CO_2-CH_4减排温室气体的研究[D]. 武汉:武汉科技大学,2021.
WANG H Q. Study on the reduction of greenhouse gases by nickel-based activated carbon catalyst coupled with low-temperature plasma reforming CO_2-CH_4[D]. Wuhan: Wuhan University of Science and Technology, 2021.

[8] 李秀权. Fe-Ni催化剂载体表界面结构调控CO_2活化及

C_2H_6定向转化作用机制研究[D].重庆:重庆大学,2022.
LI X Q. Study on the mechanism of the surface interface structure of Fe-Ni catalyst support regulating CO_2 activation and C_2H_6 directional conversion [D]. Chongqing:Chongqing University,2022.

[9] 王欣茹.基于电化学CO_2捕集的新型电解质CO_2捕集性能与离子输运机理研究[D].杭州:浙江大学,2023.
WANG X R. Research on CO_2 capture performance and ion transport mechanism of novel electrolyte based on electrochemical CO_2 capture [D]. Hangzhou: Zhejiang University,2023.

[10] HEGERL G C. Climate change is physics [J]. Communications Earth & Environment,2022,3(1):14-15. DOI:10.1038/s43247-022-00342-8.

[11] SAIN S R. Data science and climate risk analytics[J]. Environmetrics, 2023, 34(2): e2749. DOI: 10.1002/env.2749.

[12] Nature Ecology & Evolution. Climate science needs biology[J]. Nature Ecology & Evolution, 2023, 7(2): 171. DOI:10.1038/s41559-023-01991-4.

[13] YANG L, GUO Q, ZHANG L. AI-assisted chemistry research:a comprehensive analysis of evolutionary paths and hotspots through knowledge graphs[J]. Chemical Communications, 2024, 60(55): 6977-6987. DOI: 10.1039/D4CC01892C.

[14] SEGLER M H S,PREUSS M,WALLER M P. Planning chemical syntheses with deep neural networks and symbolic[J]. Nature,2018,555(7698):604-610. DOI: 10.1038/nature25978.

[15] MIKULAK-KLUCZNIK B, GOLEBIOWSKA P, BAYLY A, et al. Computational planning of the synthesis of complex natural products[J]. Nature,2020, 588(7836):83-88. DOI:10.1038/s41586-020-2855-y.

[16] MEHR S H M, CRAVEN M, LEONOV A I, et al. A universal system for digitization and automatic execution of the chemical synthesis literature [J]. Science, 2020, 370(6512): 101-108. DOI: 10.1126/science.abc2986.

[17] BURGER B, MAFFETTONE P M, GUSEV V V, et al. A mobile robotic chemist[J]. Nature,2020,583(7815): 237-241. DOI:10.1038/s41586-020-2442-2.

[18] OSARO E, KARPINSKI N, ALORNYO S, et al. Artificial intelligence in materials science and chemistry: past, present and future trajectories [J]. Materials Today Chemistry, 2025, 49: 103115. DOI: 10.1016/j.mtchem.2025.103115.

[19] CHÁVEZ-ANGEL E, ERIKSEN M B, CASTRO-ALVAREZ A, et al. Applied artificial intelligence in materials science and material design [J]. Advanced Intelligent Systems,2025,7(8):2400986. DOI:10.1002/aisy.202400986.

[20] OTYEPKA M, PYKAL M, OTYEPKA M. Advancing materials discovery through artificial intelligence [J]. Applied Materials Today, 2025, 47: 102981. DOI: 10.1016/j.apmt.2025.102981.

[21] REISER P, NEUBERT M, EBERHARD A, et al. Graph neural networks for materials science and chemistry[J]. Communications Materials, 2022, 3: 93. DOI: 10.1038/s43246-022-00315-6.

[22] ANSARI M, WATCHORN J, BROWN C E, et al. dZiner: rational inverse design of materials with AI agents [PP/OL]. axXiv [2024-10-04]. https://arxiv. org/abs/2410.03963.

[23] ZHANG L, DU J, CHEN L, et al. Discovery of highly fluorescent covalent organic frameworks through AI-assisted iterative experiment-learning cycles[J]. Nature Chemistry, 2025, 17: 1645-1654. DOI: 10.1038/s41557-025-01974-x.

[24] VOLK A A, EPPS R W, YONEMOTO D T, et al. AlphaFlow: autonomous discovery and optimization of multi-step chemistry using a self-driven fluidic lab guided by reinforcement learning [J]. Nature Communications,2023,14:1403. DOI:10.1038/s41467-023-37139-y.

[25] WANG S, ZHANG J. Artificial intelligence is empowering chemistry research [J]. National Science Open, 2024, 3(2): 20240008. DOI: 10.1360/nso/20240008.

[26] RAMOS M C,COLLISION C J,WHITE A D. A review of large language models and autonomous agents in chemistry [J]. Chemical Science, 2025, 16(6): 2480-2482. DOI:10.1039/D4SC90250E.

[27] INGRAHAM J B,BARANOV M,COSTELLO Z,et al. Illuminating protein space with a programmable generative model[J]. Nature, 2023, 623(7989): 1070-1078. DOI:10.1038/s41586-023-06728-8.

[28] BAI J, MOSBACH S, TAYLOR C J, et al. A dynamic knowledge graph approach to distributed self-driving laboratories[J]. Nature Communications, 2024, 15:462. DOI:10.1038/s41467-023-44599-9.

[29] FERREIRA F J N, CARNEIRO A S. AI-driven drug discovery: a comprehensive review [J]. ACS Omega, 2025,10(23):23889-23903. DOI:10.1021/acsomega.5c00549.

[30] BAJORATH J. Artificial intelligence in interdisciplinary life science and drug discovery research [J]. Future

Science OA, 2022, 8(4): FSO792. DOI: 10.2144/fsoa-2022-0010.

[31] ANISHCHENKO I, PELLOCK S J, CHIDYAUSIKU T M, et al. De novo protein design by deep network hallucination[J]. Nature, 2021, 600(7889): 547-552. DOI: 10.1038/s41586-021-04184-w.

[32] ZHANG S C, LI J, CHEN S J. Machine learning in RNA structure prediction: advances and challenges[J]. Biophysical Journal, 2024, 123(17): 2647-2657. DOI: 10.1016/j.bpj.2024.01.026.

[33] NUZHAT T, RADZI N A B M, MARUTHUPANDY M, et al. A review on machine learning in photocatalytic degradation of organic dyes from wastewater: current trends and future directions[J]. Journal of Water Process Engineering, 2025, 78: 108760. DOI: 10.1016/j.jwpe.2025.108760.

[34] MOUSAZADEHGAVAN M, HAJALIFARD Z, BASIRIFARD M, et al. The critical role of artificial intelligence in optimizing electrochemical processes for water and wastewater remediation: a state-of-the-art review[J]. ACS ES&T Water, 2025, 5(6): 2793-2811. DOI: 10.1021/acsestwater.5c00238.

[35] 任泽裕,王振超,柯尊旺,等.多模态数据融合综述[J].计算机工程与应用,2021,57(18):49-64. DOI: 10.3778/j.issn.1673-9418.2403083.
REN Z Y, WANG Z C, KE Z W, et al. A review of multimodal data fusion[J]. Computer Engineering and Applications, 2021, 57(18): 49-64.

[36] CICHOCKI A, KULESHOV A P. Future trends for human-AI collaboration: a comprehensive taxonomy of AI/AGI using multiple intelligences and learning styles[J]. Computational Intelligence and Neuroscience, 2021(1): 8893795. DOI: 10.1155/2021/8893795.

[37] 朱松纯.为人文赋理:从通用人工智能视角看中国思想[M].杭州:浙江科学技术出版社,2024:42-66.
ZHU S C. Empowering the humanities: Chinese thought from the perspective of general artificial intelligence[M]. Hangzhou: Zhejiang Science and Technology Press, 2024: 42-66.

[38] DREW L. Elon Musk's neuralink brain chip: what scientists think of first human trial[EB/OL]. [2024-02-02]. https://www.nature.com/articles/d41586-024-00304-4.

[39] NADDAF M, DREW L. Second brain implant by Elon Musk's neuralink: will it fare better than the first?[J]. Nature, 2024, 632(8025): 481-482. DOI: 10.1038/d41586-024-02368-8.

[40] RALHAN S, DESHMUKH P B, MISHRA J. Advances in electrical, computing, communication and sustainable technologies[C]//ICAECT. 2024 Fourth international conference on advances in electrical, computing, communication and sustainable technologies (ICAECT 2024). Bhilai: Institute of Electrical and Electronics Engineers, 2024: 1-8.

[41] DIAZ-RODRIGUEZ N, DEL SER J, COECKELBERGH M, et al. Connecting the dots in trustworthy artificial intelligence: from AI principles, ethics, and key requirements to responsible AI systems and regulation[J]. Information Fusion, 2023(99): 101896. DOI: 10.1016/j.inffus.2023.101896.

[42] GOSMAR D A, DAHL D. Hallucination mitigation using agentic AI natural language-based frameworks[PP/OL]. axXiv (2025-01-19)[2025-07-13]. https://arxiv.org/abs/2501.13946.

[43] 王岭,胡丹妮,熊艳.生成式人工智能的内容风险挑战与监管政策[J].东北财经大学学报,2025(5):15-24. DOI: 10.19653/j.cnki.dbcjdxxb.2025.05.002.
WANG L, HU D N, XIONG Y. Content risk challenges and regulatory policies of generative artificial intelligence[J]. Journal of Dongbei University of Finance and Economics, 2025(5): 15-24. DOI: 10.19653/j.cnki.dbcjdxxb.2025.05.002.

[44] CAMBRIA E, MALANDRI L, MERCORIO F, et al. A survey on XAI and natural language explanations[J]. Information Processing & Management, 2023, 60(1): 103111. DOI: 10.1016/j.ipm.2022.103111.

[45] LU C, LU C, LANGE R T, et al. The AI scientist: towards fully automated open-ended scientific discovery[PP/OL]. axXiv (2024-09-01)[2025-08-10]. https://arxiv.org/abs/2408.06292.

[46] LONGO L, BRCIC M, CABITZA F, et al. Explainable artificial intelligence (XAI) 2.0: a manifesto of open challenges and interdisciplinary research directions[J]. Information Fusion, 2024, 106: 102301. DOI: 10.1016/j.inffus.2024.102301.

(责任编辑:王　媛)