

让AI能“想”会“做”

深圳先进院提出轻量化“双模型协作”材料创制智能体

随着人工智能技术的发展,科学家们开始研发能够辅助科学研究的大模型,模型越大,能力就越强,但训练、部署和长期使用的成本也就越高。模型做小了又无法兼顾专业的科学推理和复杂的科研工具调用。那么,能否不依赖单个无所不能的“超级大模型”,而是让多个小模型协同合作获得复杂的科研能力呢? 9月10日,中国科学院深圳先进技术研究院(以下简称“深圳先进院”)材料人工智能研究所喻学锋研究员领衔的研究团队在《自然—机器智能》发表最新研究成果,正式发布了材料研究领域内的首个轻量化双模型协作智能体“材智云脑MatBrain”。该智能体由两个轻量化的小模型Mat-R1、Mat-T1组成,前者就像“材料专家”,负责材料知识理解、科学推理和结果判断;后者则像“科研执行者”,负责调用材料数据库、结构生成模型和计算软件。两者通过不断地“执行、分析、反馈、再执行”,共同完成科研任务。

AI“材料专家”与“科研执行者”

传统的材料科学研究中,一个新材料的发现从概念验证到应用往往需要较长的研发周期,这一过程需要科研人员不断进行理论分析、计算筛选和实验试错。近年来,大语言模型、高通量计算、机器学习以及Materials Project等大型材料数据库快速发展,研究人员得以更快地获得晶体结构和数据,并更高效地开展科学研究。

但在真实的工作中,科学推理和工具执行具有不同的任务特征。材料推理要求大模型尽可能准确、稳定,判断材料结构是否合理、分析材料性质、解释计算结果时,模型必须遵循化学组成、晶体对称性、原子几何和

物理规律,不能随意“发挥”。单个大模型在给出专业判断、执行任务时,需要在不同的软件之间选择,构造正确的参数,读取中间结果,并根据信息灵活决定下一步的行动,其有效执行路径往往并不统一。

“科学推理和科研工具调用这两种科研能力很难在同一个轻量化模型中做好,换成数千亿参数的通用大模型虽然可以提高科研能力,但会带来巨大的计算和部署成本。”论文第一作者、深圳先进院博士后史桐雨介绍,与其让单一模型同时承担所有功能,不如将“科学分析”和“科研执行”进行专业化分工,并通过模型协作完成复杂材料研究。

基于这一思路,研究团队开发出了“材智云脑MatBrain”智能体。该模型由Mat-R1、Mat-T1

两个轻量化的模型组成。其中,300亿参数(30B)模型Mat-R1主要负责“想”,即理解材料结构和性质,判断计算结果是否合理,并根据已有证据决定下一步研究方向。140亿参数(14B)模型Mat-T1主要负责“做”,即调用材料数据库、晶体结构生成模型和性质计算程序,完成结构生成、计算分析和结果整理等任务,两者通过反复“执行、分析、反馈、再执行”共同完成科研任务。

既然要让两个小模型来分工合作,那么如何训练它们,从而实现更高效的材料科研工作?

对于负责“想”的Mat-R1模型,研究人员整合了Materials Project、OQMD、ICSD等材料数据库和科研文献,将晶体结构、材料性质、合成方法与应用信息进行关联,构建了约25.2万条高质量材料指令数据,对模型进行训练。

对于负责“做”的Mat-T1模型,则构建了Mat-MCP材料科研工具平台,将以往公开的Materials Project、MatterGen、Pymatgen、CHGNet和VASP等数据库、生成模型和计算程序统一封装成Mat-T1模型可调用的科研工具,并通过2万个复杂材料科研问题对其进行强化学习。

史桐雨介绍说:“两个模型角色明确,分工合作。Mat-R1就像‘材料专家’,负责判断,

Mat-T1就像‘科研执行者’。如果结果不合理或者信息不充分,Mat-R1就会重新提出下一步研究要求,再让Mat-T1继续执行。”

研究结果表明,两个模型组成完整的MatBrain智能体后,不仅能够完成材料结构生成、性质预测、稳定性分析和合成路线规划等材料科研任务,还能够进一步参与开放式材料发现过程。在电催化剂的应用中,该模型完成了从科学假设形成、3万个候选结构生成、多阶段计算筛选,到候选材料实验验证的完整研究链条。

另外,在执行长时程复杂的材料创制任务中,MatBrain的材料预测综合准确率较GPT5、DeepSeek-R1等大模型提升66%。相较于依赖数千亿参数通用模型的技术路线,MatBrain由30B和14B两个相对轻量的模型组成,其硬件部署成本可降低超过95%,使先进材料科研智能体有望从大型计算中心进一步走向普通实验室工作站。

AI搭台,中试唱戏,赋能新材料研发

一直以来,喻学锋团队围绕人工智能技术赋能材料创制展开科学研究与技术转化,而MatBrain正是基于此前的技术基础,在不断优化和迭代后诞生的。团队相关核心专利“一种双模型协同的轻量化材料科学智能研究方

法与系统”已获得授权,同时登记了“材料科学模型协同生态平台软件V1.0”软件著作权,相关成果入选2025年度中国科学院网信工作十大进展。团队已经将MatBrain开发成可应用的AI智能体软件,现正式发布MatBrain体验版软件供公众下载。

“在推动成果转化方面,我们将MatBrain与材料中试生产数据相结合,为产业定制化开发材料智能体——材智云脑,为新材料等领域的突破提供高效的智能化解决方案。”喻学锋介绍。相关技术已应用于深圳先进院团队孵化的中科先进材料科技有限公司,构建了数据驱动的先进功能材料中试平台,于2025年成功获批首批国家级制造业中试平台(全国仅21家,材料领域仅2家)。

此外,研究团队正致力于将MatBrain作为机器人“决策大脑”,与具身智能技术相结合,构建具身智能机器人科学家(Dr. Mind),其在灵巧手控制、离心机操作、精准“反馈”移液、精准“微量”加粉、样品表征分析等方面实现了精准、智能的自主实验,帮助科研人员高效完成生化合成、材料创制、细胞培养、样品检测等科研任务,从而推动构建具身智能自主实验室新范式。

本报记者 刘肖勇
通讯员 刁雯蕙

药品安全科普亮相 广东省全国科普月

本报讯(记者 张文鑫 麦博)9月2日,广东省全国科普月暨第九届广东科普嘉年华启动仪式在广州举办。广东省药品监督管理局作为参与单位首次亮相该活动,在嘉年华现场服务区设置药品安全科普展位,面向社会公众开展药品、医疗器械、化妆品安全科普宣传。本届科普嘉年华以“科技改变生活 创新赢得未来”为主题,广东省药品监督管理局在“数智安康岛”专区布设科普摊位,通过互动问答、派发科普宣传资料等多种形式,普及药品、医疗器械、化妆品安全相关知识。展位聚焦科学合理用药、儿童化妆品“小金盾”标识解读、医疗器械规范使用等群众关切的实用内容,设置趣味答题、转盘互动等体验游戏,让市民在轻松有趣的氛围中学习安全知识。活动现场吸引了众多市民、学生驻足参与,大家在沉浸式互动体验中,进一步强化了安全用药、用械、用妆的防范意识。

本次活动是推动药品安全科普普法深入群众的重要举措,实现了广东省“全国药品安全宣传周”与广东省全国科普月活动的深度融合、同频共振、相互赋能。通过广东省科普嘉年华这一高人气、广覆盖的科普活动,将药品安全科普普法宣传融入全民科普热潮,以群众喜闻乐见的形式普及安全用药用械用妆知识,有效拓展了广东省“全国药品安全宣传周”活动的覆盖面和影响力。

下一步,广东省药品监督管理局将紧扣广东省“全国药品安全宣传周”活动,结合广东省全国科普月部署要求,聚焦公众关心的安全用药用械用妆问题,创新科普形式、丰富科普载体,深入开展“两品一械”安全科普宣传活动,不断提升公众药品安全科学素养和法治意识,着力构建药品安全社会共治格局,切实将安全用药知识送到千家万户,增强公众在“两品一械”领域的获得感、幸福感、安全感。

本报讯(记者 刘肖勇)9月5日,2026年全国科普月暨深圳(罗湖)科普月活动罗湖青少年宫正式启动。本次活动以“AI罗湖·创未来”为主题,由罗湖区科技和工业信息化局、罗湖区科学技术协会主办,深圳市科学技术协会指导,共青团深圳市罗湖区委员会支持。深圳市科协党组成员、驻会副主席石兴中,罗湖区科技和工业信息化局党组书记、局长、区科协主席王绍文等领导嘉宾出席活动,1500余名市民朋友参加启动仪式和现场互动体验活动。

在启动仪式上,石兴中对罗湖区全民科普与青少年科技教育工作给予充分肯定,并对罗湖科普事业创新发展寄予厚望,鼓励持续深耕普惠科普,让科学知识走进千家万户。

活动一大核心亮点是罗湖区科协集中推出一批人工智能科普资源。继今年5月全国科技活动周推出首部《人工智能》科普短视频之后,本次活动现场再度发布《算力》《具身机器人》《生成式AI》等3部人工智能科普短视频,同步推出科普读本《AI词语知多少》。通过这些科普资源,解读人工智能概念,让普通市民认识AI、读懂AI、善用AI,拓展科普传播新载体,推动AI科普内容惠民落地。

在舞台上,妙趣横生的科学秀表演将现场氛围推向高潮。各类新奇直观的科学实验轮番上演,把抽象的科学原理转化为看得见、感受

2026年全国科普月暨深圳(罗湖)科普月: “AI罗湖·创未来”



科学表演

主办方供图

得到的现场演示,充分点燃青少年的探索欲与好奇心,将一颗颗热爱科学的种子播撒到孩子们心中。

舞台环节结束后,一楼启航大厅的科技互动体验区面向公众开放。AI互动游戏、科技小实验、科普成果展示、趣味打卡等丰富体验项目吸引大批市民参与。大家动手实操、沉浸式感受人工智能的魅力,真正做到理论科普与实景体验双向结合。

在今年全国科普月,结合群众

科普需求,罗湖区策划推出近60项形式多样的科普活动。活动时间从9月延续至10月,覆盖学校、社区、博物馆及公共文化场所。下一步,罗湖区将以科普月为契机,持续策划开展多样化科普主题活动,不断丰富科普供给,拓宽科普传播渠道,着力提升辖区公民科学素质,在全社会营造崇尚科学、勇于创新的良好氛围,为区域科技创新发展注入科普力量。