

生成式AI大模型：有望实现生命从头设计

□ 王琳琳 刘传波

12月8日，谷歌发布最强AI 3个模型。其中，Gemini Nano 是一个更轻便的版本，可以在安卓设备上原生离线运行。谷歌首席执行官将其描述为“人工智能模型的一次巨大飞跃”。而最近发表在国际顶级期刊《自然》上的论文《用可编程生成模型理解蛋白质空间》也引起科技界轰动。这篇文章用生成式AI大模型生成了自然界中从来没有存在过的蛋白质分子，并经实验验证获得了蛋白质的三维结构。

为什么这项研究会引起科技界的轰动？首先，之前的研究只能设计跟天然蛋白近似的结构。也就是说，之前蛋白质的设计仅局限于自然界中已存在的蛋白质序列。事实上，蛋白质可能存在的序列是已发现的蛋白质分子的亿万倍。如果想实现蛋白质某一个功能，但是天然蛋白不存在近似结构，那就无法精确设计。比如，想设计一个雪花型蛋白质，可没有相似的天然蛋白结构，无从下手。现在采用生成式AI大模型则突破了这一限制，可以设计任何结构的蛋白质。采用以前的方法设计的蛋白质要么无法折叠，要么能折叠但结构错误，导致没有生物功能，而采用AI大模型预测的蛋白质均能折叠并具有功能，证明了新设计方法的准确和强大。

这次研究证明了可以利用AI大模型有效探索巨大的构象空间，理论上蛋白质构象空间的构象个数比宇宙中所有的原子个数都要多。在这样的空间寻找某种构象曾被认为是不可可能的，而现在AI大模型却可以得到指定的构象，可以类似在一片大海里寻找到某个特殊的水分子。更为重要的是，我们可以利用这种生



人工智能AI大模型辅助分子设计概念图。视觉中国供图

成式AI模型“编辑”蛋白质结构和功能，实现高效的蛋白质分子设计。当具有能力可以设计蛋白质分子及分子间相互作用，我们也同时具有能力，可以从头设计生命体内的物质结构与信号传递，有望实现生命从头设计。

可以预期AI大模型辅助的蛋白质的可编程从头设计，我们将以前所未有的方式

操控生物分子，引发一场生命科学领域的创新革命，直接促进生命科学领域研究及人类的医疗健康产业的发展，有望对癌症、艾滋病、衰老、老年痴呆症等重大医疗难题提供治疗方法。我们可以利用蛋白质制造纳米级别的新工具，并且与我们身体完全相容，使其对人体副作用最小化。这些新工具可以是新药物、新疫苗、新的

疾病疗法，甚至是新材料。它们完全来源于与人体化学构成相同的氨基酸作为材料。

如果想设计一种能够在体内识别癌细胞的蛋白质，这种蛋白质需要具备特异性识别癌细胞靶点的功能。我们可以通过确定癌细胞靶点的结构和结合面，并使用生成式AI模型设计出这样的蛋白质得到氨基酸序列，可以合成出编码这个新序列的基因，并且在免疫细胞中表达。这样免疫细胞就具有了识别癌细胞的能力，可以特异性地消灭癌细胞，并且不会损伤正常细胞。我们也可以根据其他疾病的致病机制，设计相应的蛋白质分子，阻断甚至治愈这些疾病。当具有了蛋白质的从头设计能力之后，我们就可以做更多之前无法想象的事情。

但是，应该清醒地认识到，目前机器学习与深度学习依然存在一些问题。尽管神经网络可以通过大量的数据和观测结果学习到隐含的规律与法则，并利用这些规律与法则生成新数据，但相比于从第一性原理计算得到的结果还充满不确定性，并且无法估计生成结果的准确性。因此，虽然生成式AI大模型逐渐展现出从语言、图像到设计分子的巨大潜力，但我们依然需要保持谨慎乐观的态度。在最终实现利用生成式AI大模型从头设计生命的理想之前，依然还有很漫长的路要去探索、试验和完善。

(第一作者系吉林省科普创作协会会员、吉林省科学技术工作者服务中心助理研究员，第二作者系吉林省科普创作协会会员、中国科学院长春应用化学研究所博士)



有位朋友很苦恼地对我说，他经常失眠，到了睡前反而非常兴奋，如果大脑能在这个时段高速运转，可否把学习工作时间调整到睡前，说不定灵感迸发，事半功倍？要想解决这个问题，我们首先要知道大脑在一天中有没有高速运转的“黄金时段”。

人体具有生物节律，亦称生物钟，是众所周知的事实。在生物钟作用下，人体很多生理指标发生规律性的变化，如体温、血压、激素水平等。大脑的工作效率也会受到生物钟的调节，最典型的就是白天清醒，夜间睡眠，中午一般要适当休息。这种调整主要受交感和副交感神经的支配，褪黑素、去甲肾上腺素等激素也发挥着作用。到了夜晚，副交感神经就会兴奋，褪黑素的分泌大量增加，人就会昏昏欲睡。

一天24小时，交感和副交感神经的兴奋性呈周期性变化，激素水平也有周期性波动，有人据此推测大脑有4个能力较强的“黄金时段”：上午7点到9点，催产素的分泌较多，是谈情说爱的黄金时段，人比较温情，关心自己家人和伴侣；9点到11点半是创造性工作的黄金时段，此时大脑完全清醒，没有情感方面的信号干扰，适合进行深度思考；下午2点半到6点，大脑经过午休又进入兴奋状态，且心情比较放松，适合做沟通、洽谈的工作；下午6点到8点，褪黑素分泌尚少，不会感到困倦，而一天的紧张劳作已引起身心疲惫，此时适合做一些减压、健身的事情，如打扫房间、购物、锻炼身体等。

细心的读者会发现，真正适合工作的黄金时段，不就是上午和下午吗？不错，工厂上班、学生上课都是这段时间，因为人们在经年累月的生活中发现，这段时间工作效率比较高，注意力比较集中，除了用餐前后、下班后的夜晚以及睡眠时间，我们的大脑其实都处于相对清醒活跃的状态，是思考和创造价值的最佳时机。

而那些上夜班的人或凌晨就开始工作的人，也未必效率低下，这是因为每个人的昼夜节律有差异；有些人属于“百灵鸟型”，黄金时段就会比一般人向前推若干小时；有些人属于“猫头鹰型”，黄金时段就会比一般人向后推若干小时。即便这个人的生物钟正常，又不得不调整大脑的兴奋状态。当“打起精神”时，交感神经就会兴奋，去甲肾上腺素的分泌就会增加，就不会感到困倦。这也说明，大脑本身是个“司令部”，不像其他器官那么被动，而是可以积极主动地进行调节。

前面提到的那位失眠的朋友为什么觉得睡前才是大脑最高效的时间呢？也许他真的是“猫头鹰型”的生物节律，那不妨起床做事；也有可能他的心理并没有接受睡眠来临的信号，还想着白天没有做好的事情，担忧明天可能发生的问题，情绪和思绪不断起伏，使大脑进入异常的亢奋状态。现在社会的压力也让更多人到了晚上才有属于自己的时间，于是乎玩手机、看电视，海量信息使大脑被迫兴奋，久而久之生物节律就发生紊乱。

要想让大脑放松而不懒散、高效而不焦虑，只有进入全神贯注的心流状态，这才是我们开发大脑潜能时需要考虑的问题：你真心喜欢自己的工作吗？你的能力与挑战相匹配吗？你在工作中获得了价值感和意义感吗？如果答案是肯定的，你的大脑就会时常处于黄金时段，也更能顺应自然规律，做到劳逸结合，身心安顿。

(作者系华中师范大学副教授，中国神经科学学会科普与继续教育委员会委员)

让大脑处于高速运转的「黄金时段」

□ 王欣

面临极限生存挑战 祝融号火星车一往无前

□ 李虹佳



我国科学家通过频谱分析祝融号火星车低频雷达数据，认为祝融号火星车着陆区地下35米处存在16个古多边形地貌。相关研究成果日前在《自然·天文学》上发表。

火星，这颗神秘的红色星球一直以来被人们赋予特殊的意义，是科学家梦寐以求去探索的地方。

2021年5月15日，天问一号带着国人的无限好奇与美好的祝福成功抵达目的地——火星。在这里，祝融号火星车开始历时92天的极限生存挑战。

祝融号火星车将面临哪些严峻考验呢？首当其冲的就是能源问题。祝融号火星车选择太阳能作为能量来源。然而，在火星上获取太阳能可不是件容易事，火星到太阳的平均距离是地球到太阳的平均距离1.5倍以上，火星的太阳辐射能量只有地球的40%左右。为此，祝融号火星车专门配备了4个大翅膀、3节砷化镓太阳能电池阵列。这种装置可以将光电转化率由16%提高到32%，为祝融号火星车提供了充足的能源供给。

祝融号火星车面临的挑战还远不止能源问题。火星上漫天蔽日的沙尘暴会大大降低太阳能电池的工作效率。为了应对这一考验，科学家特意采用了电除尘技术和特殊涂层，相当于给火星车穿上了一件滑溜溜的防尘外衣，从而减轻了对尘埃的烦恼，必要时祝融号火星车还会暂时进入休

眠状态，直到沙尘暴结束才被重新唤醒开始探测工作。

火星表面深沟高壑、乱石嶙峋，坚硬的岩石或松软的沙砾会逐渐破坏火星车的动力系统。为了应对各种难以预料突发状况，祝融号火星车设计运用了主动悬架结构，通过其中的夹角调整车体的角度和高度，从而使火星车主动抬起车身躲避障碍。在主动悬架的基础上，科学家还创新研发了轮步式移动系统，也就是依靠这6个能独立行动的轮子，让祝融号火星车不仅可以走直线、原地转向、边走边转向，还能蠕动或横行，避免火星车在难以翻越的沙质陡坡中陷车，从而更好地适应了火星的表面环境。

火星表面环境恶劣，昼夜温差极大，最高温度25摄氏度，而最低温度可达零下110摄氏度。为了隔热保温，祝融号火星车

采用纳米级气凝胶和正十一烷集热窗等技术，确保火星车安全无虞地度过漫漫黑夜。

在日益强大的科技支撑下，祝融号火星车承载着14亿中国人的梦想，以稳健的步伐揭开火星神秘面纱，带领我们走向星辰大海的浩瀚征途。

(作者系中国地质大学逸夫博物馆讲解员，第九届全国科普讲解大赛二等奖获得者)



扫码观看讲解视频

元素家族

锶

：耐磨耐腐蚀特具优势

纯锶坍塌的碎块，断面处有强烈的金属光泽。吴尔平 制图

锶，元素周期表第38号元素。锶与铍都是在1803年被英国化学家史密斯·特南特在铂的不溶杂质中发现的。特南特参与了一个铂矿的开发研究，得到了大量铂金的残留物，并从中辨认出铍和锶两种元素。特南特在一连串强酸强碱的反复反应后制成一种深红色的晶体，其中就有锶元素。

锶在地壳中含量很低，在火成岩中的含量却很丰富，于是科学家们猜测，可能在地球形成时就已沉入地心，并聚集在火山喷发出来的岩浆里。

锶虽然在地壳中的含量稀少，但在生产生活中的应用并不少。有数据显示，仅2009年到2010年，锶的需求量就增长了4倍多。早年间，锶和铍曾因其耐磨性被制成钢笔的笔尖，这基本上就是锶的主要应用了。但现在钢笔已不再用锶，锶成了加农炮的点火孔和排气孔的材料。据1867年巴黎世界博览会的一份报告称，一把带有锶-铅合金的魏温斯步枪曾完成过3000颗子弹发射仍毫无损耗，充分表明锶-铅合金完美的耐磨性。

随着科技进步，锶的应用远不止这些。由于具有耐腐蚀的特性，锶成为坩埚、各种火花塞和碱氟法所需电极的理想材料；飞机引擎中一些长期使用的耐磨部件也都有锶的身影；锶-钛合金还可制作水底管道材料，其最大的优点就是耐腐蚀。

锶的稳定性也让测量部门看到了它的优势，1889年制的国际米原器和国际公斤原器，就是由含有90%铂和10%锶的合金组成的。

含锶配合物是很好的催化剂。1982年，科学家们找到一种催化法，能把甲醇氧化为乙酸，就是利用锶的有机配合物。这种催化剂能活化饱和烃中的碳-氢键，使羟基进行氧化，从而将甲醇成功转变为乙酸。含锶配合物还能用来催化不对称氢化反应，使本来难以氢化的基底氢化为其中一种有机物，用来合成高附加值化合物。特别是当含有离子的化合物被分离出来时，惊动了整个化学界，因为其中锶元素的化合价高达+9价，这是从来没有发现过的最高化合价，这使铍成为迄今为止化合价最为广泛的元素，同时也印证了铍容易形成配合物的特性。或许，按照这个思路，在这些配合物中能找到更多有用的催化剂，甚至能在有机发光二极管中起到作用。

X射线望远镜和粒子物理学反质子生产过程中，都有锶元素身影。作为密度仅小于钨0.1%的锶，还有太多惊奇等待我们去探索和发现。

(作者系武汉市第二十中学化学教师、武汉市科学家科普团成员)

高温气冷堆的核燃料穿上了“铠甲”

(上接第1版)

核反应堆的本质就像用煤炉烧开水。“可别瞧不起烧开水。目前，高温气冷堆输出温度已达950℃，并且在烧水过程中能够让‘煤球’里面的放射性物质乖乖地呆在那里，保证在任何情况下都不会跑出来。”何琳说，这些“煤球”的高温，因此只要不超过这个温度都不会破损，包裹在里面的放射性物质不会泄漏出来。

除此之外，高温堆还拥有自动停堆系统，堆芯只要稍微过热便会自动停堆，终止核反应。这很像电动汽车的能量回收功能，一旦松开油门就好像踩了刹车一样剧烈减速。这个功能也能保证在任何事故情况下，堆内温度都不可能超过1620℃。

何琳介绍说，由于高温气冷堆的高温堆温度不超限，结构不会破坏，放射性物质出不来。这种独特的安全设计，已经彻底避免了堆芯熔毁以及核泄漏的可能性。所以，高温气冷堆也被称为“不会熔毁的反应堆”。

可在未来提供稳定的绿氢来源

作为国际公认的第四代先进核电技术，高温气冷堆最突出的优势是具有固有安全性，在发电、热

电冷联产及高温供热等领域商业化应用前景广阔。

资料显示，高温气冷堆采用模块化建设，单个模块发电功率10万千瓦，可通过多模块灵活组合的方式，建设20万、40万、60万、80万、100万等系列装机容量不同的核电机组，以适应不同地区、不同用户的需求。山东石岛湾核电示范工程为双模块组合，发电功率20万千瓦。

“目前，高温堆的氢气出口温度高达750℃，产生的高于500℃的蒸汽覆盖石油、化工等行业绝大部分热源需求，可以为其提供高品质的工业蒸汽。”何琳说。

此外，高温气冷堆以其良好的固有安全性，从技术上消除了高温气冷堆对外应急的需要，外加运行过程中无高放废液、无需安全厂用水，环境友好性强，因此，高温气冷堆厂址可以更加靠近用户，从根本上解决老百姓“谈核色变”的问题。

何琳表示，随着高温气冷堆的继续升级，反应堆的出口温度不断提高，大规模核能制氢将成为现实，为氢能时代提供稳定的绿氢来源。高温气冷堆将作为国家名片以绿色能源、智慧能源解决方案，为实现“双碳”目标、增进人类福祉作出更大的贡献。

绿氢技术支撑能源转型与工业脱碳

□ 邓占峰 唐城

前沿科学

实现碳达峰碳中和，是着力解决资源环境约束突出问题、自然选择。要想实现碳达峰碳中和，首先需要明确碳排放的主要来源和减排的技术路线。

近年来，我国在可再生能源和电力绿色低碳转型方面已取得长足发展。截至2022年底，非化石能源装机规模占总装机的49%，超过煤电装机规模；2022年非化石能源发电量占总发电量的36%。2060年实现碳中和，届时可再生能源发电的比重将达80%以上。

然而，以光伏、风电为主体的可再生能源，普遍具有间歇性、波动性、随机性、负荷时空不匹配等特点，新能源渗透率不断提高将大影

响电网的稳定性，并导致弃光、弃电现象。此外，尽管绿电替代将给众多领域的脱碳带来希望，但仍有30%以上的终端能源消费缺乏技术经济可行的深度脱碳方案，特别是钢铁、水泥、电解铝、化工等高耗能行业和重卡、轮船、飞机等交通部门。

解决上述难题的核心在于发展一种清洁、高效、易存储运输、多应用场景和形式的能源载体，连接可再生能源和多终端用能，而氢能是最理想的选择。

作为元素周期表中的第一号元素，氢是宇宙中含量最多的元素，质量占比75%，单质形态是氢气。氢气是质量能量密度最高的化学燃料，是石油的3倍、焦炭的4倍，且燃烧后只有一种产物——水，作为清洁能源可以用于氢燃料电池发电、氢燃料电池重型卡车、掺氢燃烧用于建筑与工业零碳供热。

氢气在工业生产中也发挥着重要作用。目前，中国近七成的氢气被用作炼油、合成氨、合成甲醇等化工过程的工业原料，而以富氢还原高炉和氢气竖炉直接还原炼铁为代表的氢冶金技术，也得到越来越多的重视。

2022年，国家发改委、国家能源局发布《氢能产业发展中长期规划(2021—2035)》，指出氢能是未来国家能源体系的重要组成部分，是用能终端实现绿色低碳转型的重要载体，是战略性新兴产业和未来产业重点发展方向。

中国是全球最大的氢气生产国和消费国，2021年产量达到3400万吨，其中80.3%来自化石能源，18.5%来自工业副产氢，1.2%来自电解水制氢。化石能源制氢会产生大量的二氧化碳排放，即灰氢，通过可再生能源电解水制氢，理论上可大幅降低碳排放，也就是绿氢。

在“双碳”目标下，可再生能源电解水制取绿氢，有望成为支撑电力系统低碳化和用能终端电气化的核心技术：一方面，电解水制氢可作为超大规模的可调负荷，实现波动性绿电的有效消纳和超长时储能，并能通过不同方式远距离、跨区域运输，实现跨时空的能源再分配，或者通过燃料电池发电等方式实现“电—氢—电”转化，支撑高比例可再生能源的新型电力系统发展。另一方面，绿氢可替代现有煤化工和石油化工中的灰氢，在钢铁、水泥、化工、有色等领域发展绿氢与二氧化碳化学转化固碳技术、富氢或纯氢气冶炼技术、掺氢掺氢燃烧发电供热技术等，实现用能终端的间接电气化和低碳化，支撑低碳与零碳工业流程再造。

(第一作者系北京智慧能源研究院氢能技术研究所所长，第二作者系清华大学化工系副教授)