

---

# AI不懂化学？新技术有望改观

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26701.html>

*本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！*

AI不懂化学？新技术有望改观。随着具有广泛耐药性的超级耐药细菌的出现，人类迫切需要结构新颖的抗生素。最近，加拿大麦克马斯特大学和美国斯坦福大学的研究人员开发出一种新的生成式人工智能模型，可以快速、低成本地设计新的抗生素分子，并给出了合成路线，使化学家们可以在实验室轻松合成出新分子。3月22日，相关成果发表于《自然—机器智能》。

2022年的一项全球性研究显示，2019年全球约有127万人直接死于抗生素耐药性。

抗生素是一种独特的药物。一旦我们开始在临床上使用它们，就启动了药物失效计时器，因为细菌会迅速进化以抵抗它们。该论文的主要作者、麦克马斯特大学助理教授Jonathan Stokes表示，我们需要快速且廉价地发现抗生素，这就是人工智能发挥关键作用的地方，

此前，人工智能模型在开发抗生素方面存在明显的局限性：性质预测模型在评估某一种化学性质时，需要挨个评估不同分子，扩展性较差；而生成模型虽然可以快速设计多种分子，但生成的分子往往难以在实验室合成。

研究人员设计了一种人工智能生成模型SyntheMol，并选取超级耐药细菌——鲍曼不动杆菌来进行试验。这是一种很难根除的细菌，已被世界卫生组织确定为世界上最危险的耐药细菌之一。

他们从包含13.2万个分子片段的数据库中提取数据，这些片段可以像乐高积木一样无缝衔接，但性质却截然不同。然后将这些分子片段与一组13个化学反应进行交叉验证，从而获得300亿个片段的双向组合，从中设计出58个最有前景的新分子，并利用另一个人工智能毒性预测模型来测试新分子的毒性。

在随后的实验室研究中，他们合成了这些结构新颖的分子，并验证其中6个新分子表现出对鲍曼不动杆菌和其他几种细菌病原体的有效抗菌活性，而且无毒。

Synthemol 不仅设计了有前途的候选药物的新颖分子，而且还生成了如何制造每种新分子的配方。这是一种新方法，也是游戏规则的改变者，因为化学家往往不知道如何制造人工智能设计的分子。论文合著者、斯坦福大学副教授James Zou说。（来源：中国科学报 陈欢欢）

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s42256-024-00809-7>

作者：Jonathan Stokes 来源：《自然—机器智能》

---

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发