
Nature发表的“标杆性成果”，被指“不可靠”

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/37849.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！

Nature发表的“标杆性成果”，被指“不可靠”。编译李思辉 刘琳

“谷歌团队在Nature发表的论文并不可靠！”近日，英国利物浦大学的数学家和计算机科学家维塔利·库尔林（Vitaliy Kurlin）团队公开指出，谷歌DeepMind旗下人工智能工具GNoME（材料探索图网络）所生成的晶体数据库中，存在大量的重复或近似重复结构。

这一发现，使谷歌团队此前发表于Nature的相关研究，以及随后关于自主实验室材料合成的论文，成为讨论焦点。过去几年中，库尔林团队创造了一种新的检测重复晶体结构的方法，基于新方法，他们发现了DeepMind团队的“秘密”。

1

谷歌材料学“新突破”

作为人工智能领域的领军企业，近些年，DeepMind凭借前沿技术，在材料科学领域掀起了不小的波澜。

2023年，该团队在Nature发表一项被誉为“凝聚800年科研成果”的突破性研究。该研究通过自主研发的AI工具GNoME，宣称发现了多达220万个全新晶体结构，其中超38万种被判定为稳定无机材料。

这一数量级在当时创下纪录，被认为有望为半导体、可充电电池等现代技术发展提供潜在材料支撑。

业内人士一度认为，GNoME的研发与应用“堪称AI赋能科研的典型实践”——谷歌团队AI深度学习晶体结构的特征与稳定性规律，借助独特的算法设计，以前所未有的规模和精度，预测新型晶体结构及其稳定性。

在其公布的成果中，涵盖约5.2万种类石墨烯层状化合物与528种锂离子导体。传统研究中，科学家需通过调整已知结构或试错组合元素，来寻找新晶体，过程耗时耗力、成本高昂。

GNoME的出现，被视作破解这一困境的关键。凭借AI的高效计算，它大幅压缩了原本漫长的科研周期，突破了传统研究的瓶颈。该研究在短短两年内引用量飙升至数千次，成为AI在材料科学领域的标杆性成果。

2

重复数据引发争议

就在GNoME成果被广泛引用、各实验室配套研究同步推进之际，一场针对其数据真实性的质疑悄然蔓延。

利物浦大学库尔林团队研发出一种全新重复检测技术，进而发现GNoME数据库中存在大量重复或高度相似的晶体结构。更关键的是，其中超过10%被标记为“稳定”的晶体，其实只是在已有结构上替换一两个原子，算不上真正的新发现。

这一问题也波及到2023年11月Nature同期发表的另一项补充研究。这项由美国劳伦斯伯克利国家实验室A-Lab完成的自主材料合成成果被认为“也存在严重重复问题”。该实验室声称在17天内合成了43种新材料，但其中2种早已录入无机晶体结构数据库，其余41种在同一数据库中也均有几乎完全一致的副本。

面对确凿的检测数据，各相关方的反应不一。库尔林团队发布数据后，GNoME数据库中超过8.3万条内容被悄悄删除，谷歌未对此作出公开说明。

美国化学会媒体联系GNoME论文作者及谷歌公关，未获回应。

英国伦敦大学学院的罗伯特·帕尔格雷夫（Robert Palgrave）呼吁撤下A-Lab论文，但认为GNoME研究发更正即可。

库尔林则主张两篇都应撤稿。Nature编辑卡尔·齐梅利斯（Karl Ziemelis）表示，A-Lab论文准备“更正”，GNoME研究因未收到“正式关切”（formal concerns），暂不调查。

各数据库处理方式也不同：“材料项目”承认重复问题，考虑引入新检测方法；晶体学开放数据库负责人索利乌斯·格拉祖利斯（Saulius Gražulis）认可该方法，目前仅标注重复而非删除。

英国剑桥结构数据库执行董事苏珊娜·沃德（Suzanna Ward）认为，重复原因多样，不宜“一刀切”删除，简单化合物的相似结构属正常，不会移除。

3

AI科研何去何从？

有评论认为，此番争议不仅聚焦于谷歌的两项研究，更暴露了AI大模型在科研应用中的深层矛盾：当技术追求规模与效率时，如何兼顾数据的真实性与新颖性？同时，这也对晶体学数据库的管理模式、AI生成内容的评估标准提出了严峻拷问。

目前，学界普遍认为，应当将库尔林团队这类高效的重复检测工具整合到AI研发流程中，在数据输出前自动筛选绝对重复的内容。同时，需要强化同行评审的针对性：对于AI生成的大规模数据集，应要求研究者提供抽样验证报告及重复检测证明，而非仅依赖算法本身的可信度。

晶体学数据库的重复乱象并非个例，有机、无机及计算机生成的晶体数据存储均受此困扰。其实，数据库管理者也面临两难：一方面，理想状态下“优质数据库不应存在重复”；另一方面，重复结构的成因复杂，不能简单归为数据完整性问题。

对此，业内已形成几点共识：建立分层处理机制，区分“完全重复”与“近似重复”、“恶意重复”与“合理重复”，后者包括因独立发现导致的重复，应避免采取单一的删除或保留政策。引入标准化检测工具，推广开源、高效的重复检测技术，让数据库在接收数据时就能进行初步筛查，从源头减少重复条目。

有学者指出，AI技术为科研带来了效率革命，但绝不能以牺牲科研诚信为代价。在此次争议中，GNoME数据库悄悄删除重复条目却不公开说明的做法，引发了学界对数据透明度的广泛担忧。科研的核心价值在于探索未知，AI应是辅助这一过程的工具，而非追求虚假规模的捷径。

前述学者还认为，未来需要建立针对AI科研的伦理规范，明确研究者、期刊、数据库各方的责任：研究者需对AI生成数据的真实性进行严格核验，期刊需强化对大规模AI成果的评审标准，数据库需完善重复数据的管理与披露机制。

毫无疑问，这场围绕220万晶体结构的争议，本质上是AI时代科研范式转型过程中的一次阵痛。它提醒我们，在追逐技术突破的同时，更需要坚守真实性、透明度的科研底线。

“唯有建立完善的评估体系与伦理规范，才能让AI真正成为推动科学进步的强大动力，而非制造科研泡沫的潜在隐患。”这位学者说。

相关参考文章：

<https://cen.acs.org/research-integrity/Duplicate-structures-haunt-crystallography-databases/103/web/2025/12>

作者：李思辉 刘琳 来源：科学网微信公众号

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://iikx.com)转发