

2025 年 05 月 18 日

AI+主题系列（二）：“机器化学家”的科研范式革命

中小盘研究团队

——中小盘主题

周佳（分析师）

zhoujia@kysec.cn

证书编号：S0790523070004

赵晨旭（联系人）

zhaochenxu@kysec.cn

证书编号：S0790124120019

● 机器化学家能学、能想、能做，实现从效率到思维范式的突破

“机器化学家”是由人工智能驱动的全流程化学研究系统，通过融合“化学大脑”、机器人实验员和智能化学工作站三大模块，具有完整的人工智能软件、复杂的内部循环以及以高通量执行单独规划的循环实验能力。“机器化学家”的运作基于“能学-能想-能做”三阶段智能闭环。（1）**能学**：通过自然语言处理模型与云端大脑阅读海量文献，为科研认知提速；（2）**能想**：结合量子化学计算、分子动力学模拟等物理模型，结合大数据与人工智能技术进行思考和模拟计算；（3）**能做**：通过机械臂和智能工作站自动执行计算-合成-表征-测试的全流程，自主完成实验验证。与传统化学研究范式相比，机器化学家实现了从效率到思维范式的突破。首先是效率跃升，单台机器化学家日均实验量达 2000 次，传统试错法需数十年至千年级周期，而机器化学家可压缩至数周；第二是数据驱动，他可以基于海量数据挖掘与跨尺度模拟，突破人类经验主义的局限；第三是可迁移复制，通过代码复制即可批量部署“科学家”，突破人类培养周期限制。

● 机器化学家赋能多领域研发，新科研范式正加速来临

机器化学家正从实验室迈向更广阔的应用场景，未来发展将呈现多维度突破。在材料科学领域，机器人化学家成功助力光学活性薄膜材料、铜系金属卤化物基固态电解质等新材料的研发，效率提升超百倍；在生物医药领域，默克公司利用机器化学家直接评估化合物对靶标蛋白的亲和性，大幅缩短药物开发周期；在深空探测领域，机器化学家“小来”成功创制出火星制氧催化剂，仅用 6 周便完成传统范式下 1400 年的工作量。在化工领域，机器化学家正助力国家能源集团建设煤化工催化剂智慧实验室。未来，中国科大计划建设“机器化学家大楼”，拟部署上百机器人及上千智能工作站，日均实验量百万次，实现研发效率指数级提升。

● 受益标的

志特新材：注册控股子公司，布局化学机器人与 AI4S 新材料产业化。2025 年 5 月，公司注册控股子公司“志特小临智能科技”，主营业务为化学机器人平台以及通过 AI4S 新范式进行新材料研发与产业落地，正式进军化学机器人领域。依托中科大精准智能实验室技术储备，“志特小临”已经储备超级隔热材料、固态电池材料等数十款材料。其中，超级隔热材料保温系数是涂层型气凝胶的两倍，可用于建筑隔热、汽车玻璃隔热、新能源电池防燃爆等领域。超级隔热材料可做成涂层用于建筑领域，公司作为建材领域龙头企业，渠道遍布中东、东南亚、非洲、南美等地区，因此“超级隔热材料”跟公司主营业务具备较强协同性。

晶泰控股：以人工智能赋能和机器人驱动的创新型研发平台。自主研发机器人自动化学实验室，为生物基材料、新型化学表面活性剂等提供材料研发解决方案。

● **风险提示**：技术落地不及预期、合作进展不及预期、下游需求不及预期等。

相关研究报告

特别声明

《证券期货投资者适当性管理办法》、《证券经营机构投资者适当性管理实施指引（试行）》已于2017年7月1日起正式实施。根据上述规定，开源证券评定此研报的风险等级为R3（中风险），因此通过公共平台推送的研报其适用的投资者类别仅限定为专业投资者及风险承受能力为C3、C4、C5的普通投资者。若您并非专业投资者及风险承受能力为C3、C4、C5的普通投资者，请取消阅读，请勿收藏、接收或使用本研报中的任何信息。因此受限于访问权限的设置，若给您造成不便，烦请见谅！感谢您给予的理解与配合。

分析师承诺

负责准备本报告以及撰写本报告的所有研究分析师或工作人员在此保证，本研究报告中关于任何发行商或证券所发表的观点均如实反映分析人员的个人观点。负责准备本报告的分析师获取报酬的评判因素包括研究的质量和准确性、客户的反馈、竞争性因素以及开源证券股份有限公司的整体收益。所有研究分析师或工作人员保证他们报酬的任何一部分不曾与，不与，也将不会与本报告中具体的推荐意见或观点有直接或间接的联系。

股票投资评级说明

	评级	说明
证券评级	买入（Buy）	预计相对强于市场表现 20%以上；
	增持（outperform）	预计相对强于市场表现 5%~20%；
	中性（Neutral）	预计相对市场表现在-5%~+5%之间波动；
	减持（underperform）	预计相对弱于市场表现 5%以下。
行业评级	看好（overweight）	预计行业超越整体市场表现；
	中性（Neutral）	预计行业与整体市场表现基本持平；
	看淡（underperform）	预计行业弱于整体市场表现。

备注：评级标准为以报告日后的 6~12 个月内，证券相对于市场基准指数的涨跌幅表现，其中 A 股基准指数为沪深 300 指数、港股基准指数为恒生指数、新三板基准指数为三板成指（针对协议转让标的）或三板做市指数（针对做市转让标的）、美股基准指数为标普 500 或纳斯达克综合指数。我们在此提醒您，不同证券研究机构采用不同的评级术语及评级标准。我们采用的是相对评级体系，表示投资的相对比重建议；投资者买入或者卖出证券的决定取决于个人的实际情况，比如当前的持仓结构以及其他需要考虑的因素。投资者应阅读整篇报告，以获取比较完整的观点与信息，不应仅仅依靠投资评级来推断结论。

分析、估值方法的局限性说明

本报告所包含的分析基于各种假设，不同假设可能导致分析结果出现重大不同。本报告采用的各种估值方法及模型均有其局限性，估值结果不保证所涉及证券能够在该价格交易。

法律声明

开源证券股份有限公司是经中国证监会批准设立的证券经营机构，已具备证券投资咨询业务资格。

本报告仅供开源证券股份有限公司（以下简称“本公司”）的机构或个人客户（以下简称“客户”）使用。本公司不会因接收人收到本报告而视其为客户。本报告是发送给开源证券客户的，属于商业秘密材料，只有开源证券客户才能参考或使用，如接收人并非开源证券客户，请及时退回并删除。

本报告是基于本公司认为可靠的已公开信息，但本公司不保证该等信息的准确性或完整性。本报告所载的资料、工具、意见及推测只提供给客户作参考之用，并非作为或被视为出售或购买证券或其他金融工具的邀请或向人做出邀请。本报告所载的资料、意见及推测仅反映本公司于发布本报告当日的判断，本报告所指的证券或投资标的的价格、价值及投资收入可能会波动。在不同时期，本公司可发出与本报告所载资料、意见及推测不一致的报告。客户应当考虑到本公司可能存在可能影响本报告客观性的利益冲突，不应视本报告为做出投资决策的唯一因素。本报告中所指的投资及服务可能不适合个别客户，不构成客户私人咨询建议。本公司未确保本报告充分考虑到个别客户特殊的投资目标、财务状况或需要。本公司建议客户应考虑本报告的任何意见或建议是否符合其特定状况，以及（若有必要）咨询独立投资顾问。在任何情况下，本报告中的信息或所表述的意见并不构成对任何人的投资建议。在任何情况下，本公司不对任何人因使用本报告中的任何内容所引致的任何损失负任何责任。若本报告的接收人非本公司的客户，应在基于本报告做出任何投资决定或就本报告要求任何解释前咨询独立投资顾问。

本报告可能附带其它网站的地址或超级链接，对于可能涉及的开源证券网站以外的地址或超级链接，开源证券不对其内容负责。本报告提供这些地址或超级链接的目的纯粹是为了客户使用方便，链接网站的内容不构成本报告的任何部分，客户需自行承担浏览这些网站的费用或风险。

开源证券在法律允许的情况下可参与、投资或持有本报告涉及的证券或进行证券交易，或向本报告涉及的公司提供或争取提供包括投资银行业务在内的服务或业务支持。开源证券可能与本报告涉及的公司之间存在业务关系，并无需事先或在获得业务关系后通知客户。

本报告的版权归本公司所有。本公司对本报告保留一切权利。除非另有书面显示，否则本报告中的所有材料的版权均属本公司。未经本公司事先书面授权，本报告的任何部分均不得以任何方式制作任何形式的拷贝、复印件或复制品，或再次分发给任何其他人，或以任何侵犯本公司版权的其他方式使用。所有本报告中使用的商标、服务标记及标记均为本公司的商标、服务标记及标记。

开源证券研究所

上海

地址：上海市浦东新区世纪大道1788号陆家嘴金控广场1号楼3层
邮编：200120
邮箱：research@kysec.cn

深圳

地址：深圳市福田区金田路2030号卓越世纪中心1号楼45层
邮编：518000
邮箱：research@kysec.cn

北京

地址：北京市西城区西直门外大街18号金贸大厦C2座9层
邮编：100044
邮箱：research@kysec.cn

西安

地址：西安市高新区锦业路1号都市之门B座5层
邮编：710065
邮箱：research@kysec.cn