

2025 年 04 月 23 日

中小盘研究团队

AI+主题系列（一）：AI4S 赋能的新材料研发变革

——中小盘主题

周佳（分析师）

zhoujia@kysec.cn

证书编号：S0790523070004

● AI4S 是科学研究的第五范式，为传统科研创造四重价值

科研范式是科研人员进行科学观察、思考和操作的基本过程和逻辑，是根本的科研世界观和对应方法论体系。人类的科研范式经历了“经验科学—理论科学—计算科学—数据密集型科学”的演化，随着数据的快速增长以及计算能力的飞速提升，越来越多科学家开始探索将人工智能用于科研当中，以解决更高维度、更多变量、更复杂的问题，由此诞生了第五范式—AI for Science (AI4S)。AI4S 是以人工智能为核心驱动力，通过机器学习、知识推理和自动化技术深度嵌入科学研究全流程，构建“假设生成—实验验证—理论迭代”智能闭环的新范式。与传统科研范式相比，AI4S 具备四重价值：（1）**加速科学发现**。在药物研发领域，生成式 AI 将靶点发现至先导化合物优化周期从传统 4-5 年缩短至 12 个月。（2）**突破传统方法限制**。在气候科学中，NVIDIA Earth-2 平台以 1 公里网格分辨率实时模拟全球气候系统，计算速度较传统超算提升 1000 倍，成功预测 2024 年厄尔尼诺事件路径。（3）**降低科研成本与门槛**。机器人实验室使单次化学实验成本从 2000 美元降至 50 美元，开源框架 PyTorch Geometric 使材料模拟门槛降低 90%。

（4）**驱动跨学科创新**。在生物电子学领域，MIT 团队整合蛋白质折叠数据与半导体工艺参数，开发出自组装纳米晶体管，导电性较传统硅基器件提升 3 倍。

● AI4S 在新材料领域前景广阔，多家厂商已取得实际进展

新材料研发涉及体系复杂、参数空间巨大、构效关系不明等关键共性难题，AI4S 这一新研究范式可凭借统一数据建模框架、跨尺度仿真能力和自主实验平台，为新材料的设计、筛选、优化及工艺改进等提供明显助力。随着以材料基因工程计划为代表的百万量级高质量材料数据的诞生以及深度学习技术带来的非线性建模能力跃升，多家企业纷纷运用 AI4S 赋能新材料研发。2024 年 8 月，晶泰科技与协鑫集团签署为期 5 年的战略合作协议，将为协鑫提供钙钛矿、超分子、锂离子电池、正极材料、碳硅材料等领域高科技新能源材料研发的订单化服务。同月，深势科技与东阳光签约成立 AI4S 新材料研发联合实验室，将联合解决电极箔产业节能降耗、电容器和储能电池寿命预测、新型储能材料工艺优化等行业难题。

● 受益标的

志特新材：打造“量子计算+AI 赋能新材料研发范式”。2025 年 3 月，公司宣布与量子科技长三角产业创新中心、合肥微观纪元数字科技达成三方战略合作，并与微观纪元成立合资公司上海志特纪元新材料科技有限公司，推动人工智能与量子技术在新材料领域的产业应用和落地。2025 年 4 月，志特新材与中国科学技术大学精准智能化学全国重点实验室签署合作备忘录，双方将通过共建 AI4S 创新平台，共建“功能材料智创实验室”形成“基础研究-技术开发-成果转化”的全链条机制，联合开发高性能防晒隔热材料，突破产业化瓶颈，推动其在汽车全景窗、建筑隔热等场景的规模化应用。

● **风险提示：**技术落地不及预期、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