北京深云智合科技有限公司介绍

北京深云智合科技有限公司成立于2020年11月，注册于北京市昌平区，国家高新技术企业、专精特新中小企业。创始人为国家级海外人才计划入选者、北京航空航天大学教授刘宇宙博士。公司致力于成为“AI+新材料”行业的领先者，融入人工智能技术助力底层创新，为绿色新材料产业发展提速。推出DeepChem智能合成平台，基于人工智能、计算化学、云平台和智能合成机器人，通过设计目标分子及其合成路径，探索催化剂、溶剂和温度等反应条件对结果的影响，可以发现具备更优性能的化学结构，解决现有材料性能缺陷，进而提供深度的分子合成研发，以推动AI+绿色创新的多场景应用。

公司配有计算化学软件平台和智能合成硬件平台、全自动化高通量合成设备、拥有自主开发的高效高精度算法模型，通过将精准理论计算和高效自动化实验验证相结合的方式，实现合成路径优化，反应流程优化、减少反应步骤，解决现有材料合成困难的问题，加快清洁能源、高端化学品、特种材料和医药等领域的研发进程。新材料应用领域广泛，但研发耗时耗力，从发现到走出实验室，到工程化实际应用至少需要20～30年。全球60%化学品为中国制造，市场规模达到千亿级别。全国130多种关键基础材中，32%的关键材料在中国仍为空白，52%依赖进口。本项目将“AI计算+智能合成”技术融入新材料领域，助力千亿级别新材料产业研发及提速，市场潜力巨大。  
 Deepchem 智能合成平台以能源、化工、医药健康领域为重点发力方向，选择行业头部企业拓展业务，以快速解决市场问题，利用材料产业商业链条短等优势，建立客户信任，以CRO，提供技术方案或者IP授权等商业模式。已经接洽了国能集团、奥来德、东方雨虹、华西医院等企业和机构。同时中标工业和信息化部2023年国家新材料重点平台-煤化工材料生产应用示范平台项目。研发场地方面，公司获得了北京市未来科学城管委会对于高校项目奖补资金支持，以及昌发展集团的场地支持。DeepChem新分子智能设计与合成平台，具有高通量、智能化和远程操控等优势，提供深度的分子合成研发。目前该系统已经正式投入运营，重点关注新材料、医疗健康和新能源等领域。  
 DeepChem 智能合成平台由 AlphaCat计算平台和 AlphaLab 合成平台构成。  
 AlphaCat实现了活化能、多步过渡态、反应路径、多种光谱、分子振动模式、最佳合成条件和最优产品性能的计算。集成了多种计算化学理论方法，其中包括：密度泛函理论（DFT）、激发耦合簇（CCSD）、分子动力学（AIMD）等，在计算过程中可以根据任务的结构、体系、类型以及用户计算精度的需求动态选择最佳的理论方法和最优的参数进行计算通过对于化学电子层面的计算，可以得到化学反应的活化能、反应速率、核磁谱图、多个过渡态、最优反应路径、最优的配体等等，分布式计算服务器不需要运行复杂的服务，只需要使用 Docker 等技术快速方便的复制计算环境并运行我们自主研发和封装的计算程序。该方式为后续计算规模的扩大化和资源利用率提供了无限可能，计算出结果由平台结果展示模块进行可视化展示，可通过报表、图表、动图的形式清晰直观地展示给用户。  
 项目已取得了阶段性成果，AlphaLab合成平台已经成功搭建针对微克级和百克级的两类自动化系统，微克级系统可以在不影响反应结果的前提下有效地节省试剂、减少污染和排放；百克级系统已实现合成需要量很低的药物分子、合成新材料测试需要的样品量，为下一步自动材料测试做样品储备。  
 当前，微克级自动化系统已经正式投入运行，集成了三轴机械臂、高通量反应器、加料模块、自动过滤模块、自动稀释模块、气相色谱仪、超高压液相色谱仪以及多种辅助设施。依靠自主设计的软件平台和算法，能够实现自动加料、自动反应、自动稀释、自动过滤、自动分析和自动数据处理等功能，在电脑端或手机端可以跟进反应进程和反应结果，实现云端7X24h实验。目前每天可以进行百个自动化试验，接近百人博士研发团队工作量，可以极高地提高研发效率。

百克级自动化系统已初步实现自动化，此系统具有六轴机器人、电缸、开瓶器、自动换夹爪工装、自动升降台、反应器、天平等设备，已具备自动开/加瓶盖、换夹爪、加液、组装/拆卸玻璃反应器、反应(加热搅拌)、称重等功能。实验数据显示，自动化实验已能实现人工实验达到的效果，同时具备精度高、安全可控、数据自动记录等特点。

### 高通量自动合成平台

化学合成对农药、染料、香料，日用化学品、航空材料等的开发起了关键性作用，使其成为人类生产生活中不可或缺的重要组成部分。但是，化学合成发展到现在仍然是一个劳动密集型、耗费时间且存在固有危险的一个行业。在如今自动化、信息化的时代，化学合成实验所用的仪器、操作方法并没有随之产生巨大的改进。因此不管是在科学研究还是工业生产都受到极大的限制。由于化学合成一直是人工操作，因此存在各种问题：1）实验底物种类繁多，逐个反应和处理耗时费力；2）小剂量的样品称量不准确；3）由于操作失误而造成中毒、火灾、爆炸等危险。再者，当前化学研发过程中，还存在以下几个行业痛点：1）实验结果难复现，很多情况下实验结果会不稳定；2）实验过程管理困难，大规模研发机构研发人员会有几百甚至成千上万人，每个人掌握着各自的研发实验记录和实验数据，而作为研发的管理者，对资源的管理和整合比较困难；3）研发过程中产生的数据和经验，整合困难，相关经验不容易描述，且会随着人员的流失而流失。

针对上述化学合成研发和生产过程中存在的问题，本公司基于多年化学、化工及材料产业的积累，自主开发出高通量自动合成平台，以期达到以下目的：1）将研发人员从种类繁多、重复操作、对人体具有潜在风险的化学实验中解放出来；2）通过不知疲倦且运转高效的全自动化平台显著提升化学研发和生产的效率；3）对实验方案、实验数据、实验现象等进行全面的信息化记录，避免因人为因素引起的操作不稳定性，并使研发资料具有极强的规范性及可继承性；4）采用高通量反应器，借助人工智能算法对实验数据进行快速高效的分析整合，更好地凝练反应结果并为未来的实验设计提供指导。

高通量自动合成平台通过高效湿实验验证，达到理论与实践互相验证的目的。此平台能实现整个实验流程的无人工完成和数据收集。它不仅仅是动作执行层面的操作，还是涉及样本流、信息流、操作流的全方位系统工程，不仅要完成对实验仪器的自动化操作，更要对实验仪器产生的结果或实验流程的数据结果进行整合处理。

高通量自动合成平台将化学合成的大多数功能（原料储存与运输、液体分配、固体分配、控温和混合、稀释、过滤、萃取、蒸馏等后处理操作、产物分析检测）集成到整个系统中。传统的化学实验室中均可以找到对应的装备，但大多自动化程度极低，自动化集成难度过高，我们要对这些功能进行提炼，设计相应的自动化方案，其中涉及化学化工、通讯控制、机械设计、程序编程、网页设计、机器人控制等多种专业知识，不仅要解决每个环节的技术可行性，而且要实现整体整合以及长期稳定性运行。

**平台优势及应用**  
 传统材料研发流程十分漫长，存在人工试验步骤多，循环往复，耗时耗力等问题，同时高端研发人才紧缺、招聘困难，也为研发增加了巨额成本。公司自主研发的高通量平台和自动化设备，通过AI 计算云平台，在分子生成、量子化学计算、反应条件筛选等方面用计算筛选代替湿试验，同时在后续试验阶段，采用人机结合模式的自动化系统实现实验过程的高度自动化和智能化，最终可大幅缩短研发周期，加速新材料发现及产业化进程。根据我们的预估，一套基于Deepchem智能平台的云研发平台的研发效率约等于传统实验室百人博士研发团队的工作量。

本公司开发的智能合成平台具有以下优势：1）实验通量大，效率远高于人工实验；2）全流程自动化，无人值守，全程监测；3）数据稳定、准确；4）7×24小时远程实验，不受位置限制；5）全程可追溯、自动数据记录；6）研发成本低，价格只有人工实验的 1/5～1/10。此平台可以很好地服务于化工新材料等领域，对反应的适用范围广（比如氧化反应、硅氢加成反应、环氧化反应、Suzuki偶联反应等）；利用高通量反应器可以快速实现不同中心原子、配位结构和配位数等筛选，同样也适用于底物扩展和反应参数的优化。

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 适用范围广 | 高通量筛选 | 底物扩展 | 反应参数快速优化 |
| • 氧化反应  • 硅氢加成反应  • 烯烃环氧化反应  … | • 不同中心原子筛选  • 配位结构筛选  • 配位数筛选  … | • 同系物扩展  • 类似物扩展  • 同基团扩展  … | • 溶剂筛选  • 反应条件快速筛选  • 智能规划最优组合  … |

研发方面，作为北京校城融合的引进项目，公司以新建的新元科技园中占地1168平方米的新研发中心以及昌平高教园区的政府配套研发设备补助为基础，将持续加大平台研发能力建设。搭建完毕“新材料研发大学生实践基地”“新材料交流中心的基础上，创建“新材料推广应用联络站”，为新技术产生的新材料提供市场应用场景，拓展新材料开发市场。

长期战略方面，公司未来会紧紧围绕智能合成平台，建立国内乃至全球最领先的“黑灯实验室”，在更多领域进行研发，建立标准化，积累更多数据，同各个领域的头部企业进行合作，不仅解决基础实验的效率问题，还要解决企业的痛点难题，把平台做大做强，成就以人工智能平台为手段，高效开发中国急需新材料的新范式。