



北京深云智合科技有限公司

CONTENTS

目录



行业背景

PART 01



解决方案

PART 02



核心技术

PART 03



合作优势

PART 04



应用案例


PART 05

行业背景

- 新材料产业是国民经济战略性、基础性产业，事关现代化经济体系建设大局。
- 中国是全球最大的材料制造及消费国之一，工信部曾指出，到 2025 年中国新材料产业将达到 10 万亿市场规模，复合增长率达 13.5%。
- AI技术对材料科学赋能的关注度明显上升，2020 年至 2025 年中国AI材料科学的复合增长率预计将达 36.76%。长期来看，AI材料科学或达到万亿市场规模。
- 建设“大数据和人工智能驱动的高通量、自动化新材料、新工艺设计开发平台”顺应时代发展需求，加快新能源、新材料以及装备制造等产业转型升级，催生新产业、新模式、新动能提供强有力的技术支撑。

传统实验：以人为主，效率低下



- 传统的材料开发耗时费力、效率低
- 标准化流程欠缺
- 合规管理难度大
- 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
- 由于操作失误而造成中毒、火灾、爆炸等危险 

VS

深云Deepchem智能平台： 以人为本，降本增效



- 实验通量大，效率远高于人工实验
- 全流程自动化，无人值守，全程监测
- 数据稳定、准确
- 7x24小时远程实验，不受位置限制
- 全程可追溯、自动数据记录
- 开发成本低，价格只有人工实验的1/5~1/10

核心技术

构建全面自动化智能实验室

AI智能预测分析

通过计算模拟、筛选候选，进行精准的分析指导



机器人自动化技术

实现7 小时不间断操作，极大提高工作效率



实验室数智化

全流程信息化管理涵盖人员、设备、试剂、样品、流程及环境等方面



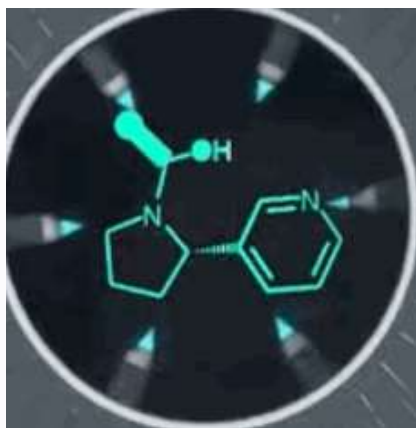
云智合 DELPOCHEM2025

(一) AI智能预测分析

AlphaCat计算平台

AI分子生成

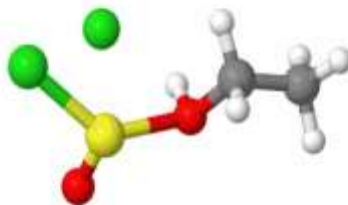
- ◆ 大漏斗
- ◆ 针对电子的AI算法



量子化学计算

- ◆ 中漏斗
- ◆ 高效、准确计算分子性质

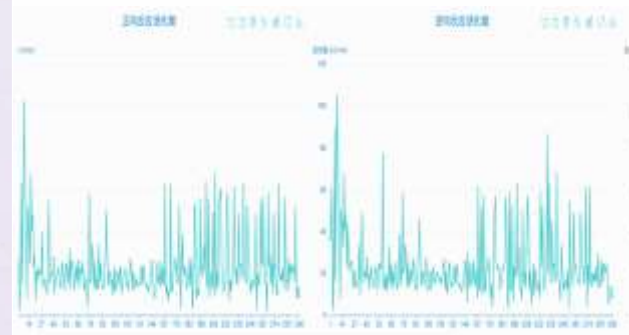
Model = 18, Energy = -27.832 Kcal/mol



JSmol

反应条件筛选

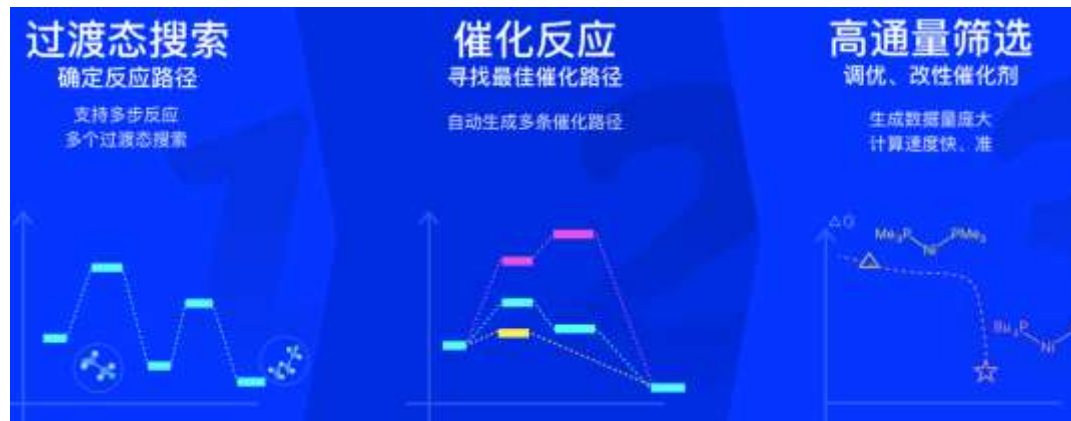
- ◆ 细滤纸
- ◆ 对后选分子进行再次优化



深云智合DEEPCHEM2025

AI助力研发创新领域突破

- 在虚拟环境中创造新化合物结构，并预测其在不同应用场景下的表现
- 根据过渡态搜索，寻找最佳反应路径，大幅加速了新材料的发现过程
- 通过AI生成候选分子，筛选效率提升

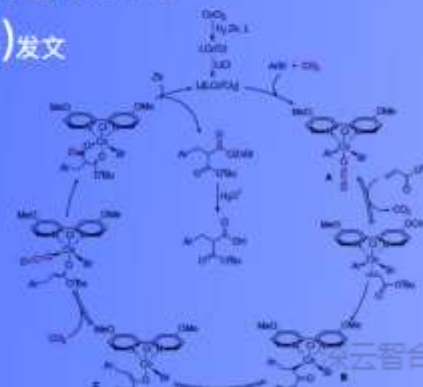


AlphaCat 与 清华大学席婵娟教授团队合作在 《ChemSusChem》期刊(IF 8.4)发文

理论计算结果表明:

1. CO_2 的配位可以降低三价钴中间体A的能量, 其暗示 CO_2 除了最后的配位插入, 还可能通过配位参与前期的反应过程;
2. 烯烃配位插入后得到的三价钴中间体B首先转化为烯醇式C后再同 CO_2 反应。

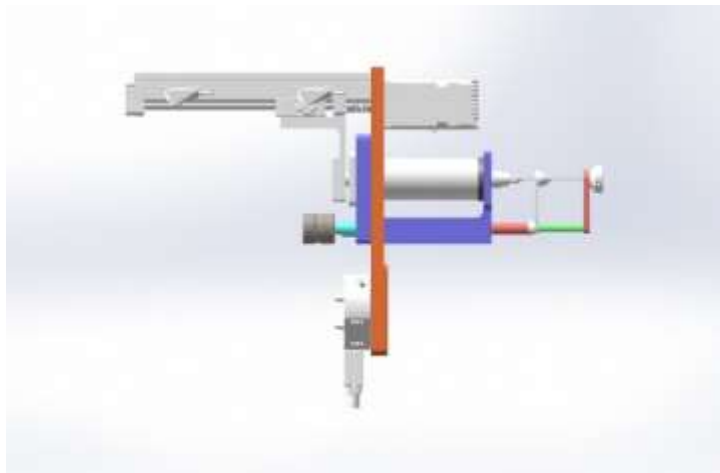
[点击阅读原文 >](#)



云智合DEEPCHEM2025

(二) 实验机器人自动化

高通量+自动化合成设备



- 原创解决加固、加液、保护问题
- 多种检测设备接入



- 适配绝大数催化反应
- 全流程顺畅完成



- 规模化自动化实验室
- 云端化学材料研发

自动化湿实验平台：快速高效地进行反应过程优化

AMR复合机器人

- ✓ 协作机器人能够承担重复性的操作任务，还可 7 × 24 小时不间断工作，帮助加快实验的进程。
- ✓ 可在包括手套箱这样的无水无氧环境执行复杂的任务，完成开盖、放置、移液、加样、过滤、稀释、磁力搅拌、快速取样、UPLC 测试等不同工序。
- ✓ 协作机器人的自主移动机器人进行串联，自主完成样本转运任务，提高效率的同时进一步降低成本。
- ✓ 自动化实验设备产生高质量大规模的数据将使“设计—制造—测试—分析”（Design-Make-Test-Analyze）的研发循环更为迅速和高效，成为推动 AI 促进科学高质量发展的坚实基础。



高通量筛选

- ✓ 可实现高样品容量和更佳的自动化样品前处理功能，帮助提升实验室分析效率
- ✓ 支持多种进样技术：液体进样、静态和动态顶空进样，以及固相微萃取（SPME 纤维头或 SPME Arrow 进样），具备很高的灵活性。
- ✓ 支持多达四种不同工具的交换，可自动切换液体进样、顶空和 SPME 纤维头或 SPME Arrow



原创解决加固、加液、保护等

- ✓ 采用质量反馈PID控制，实现mg级小量及g级多量的液体、固体的快速加样
- ✓ 原创加样针可实现氮气保护下的无水无氧反应
- ✓ 全方位的传感检测，实现加热、搅拌、全自动蒸馏等的实时检测控制



(三) 实验室数智化

✓ 实验室信息进行实时收集、整理、上报、分析，提升了信息采集与处理的效率。

助力研发效能管理

将前期信息化积累的数据建立数据仓库和建立数据流程模型，对历史数据进行再利用，用于优化工作过程和实验效率，让信息系统数据更好地为科研工作提供支持。



计算化学合成平台监管系统

蒸馏设备(Distill)

烘箱(DoBake)

开加盖(DoCap)

滴加(DoDrop)

搅拌2(DoMix2)

搅拌3(DoMix3)

指令

1

设置磁力搅拌加热器

2

废液蒸馏

采集数据信息

PV[4]冷凝管实时温度(°C)

-2.8

PV[4]加热套实时温度(°C)

49.8

PV[4]检测头实时温度(°C)

55.4

PV[1]实时压力(mbar)

-

PV[4]搅拌台实时温度(°C)

174.9

SV[1]收集馏分三通阀

-

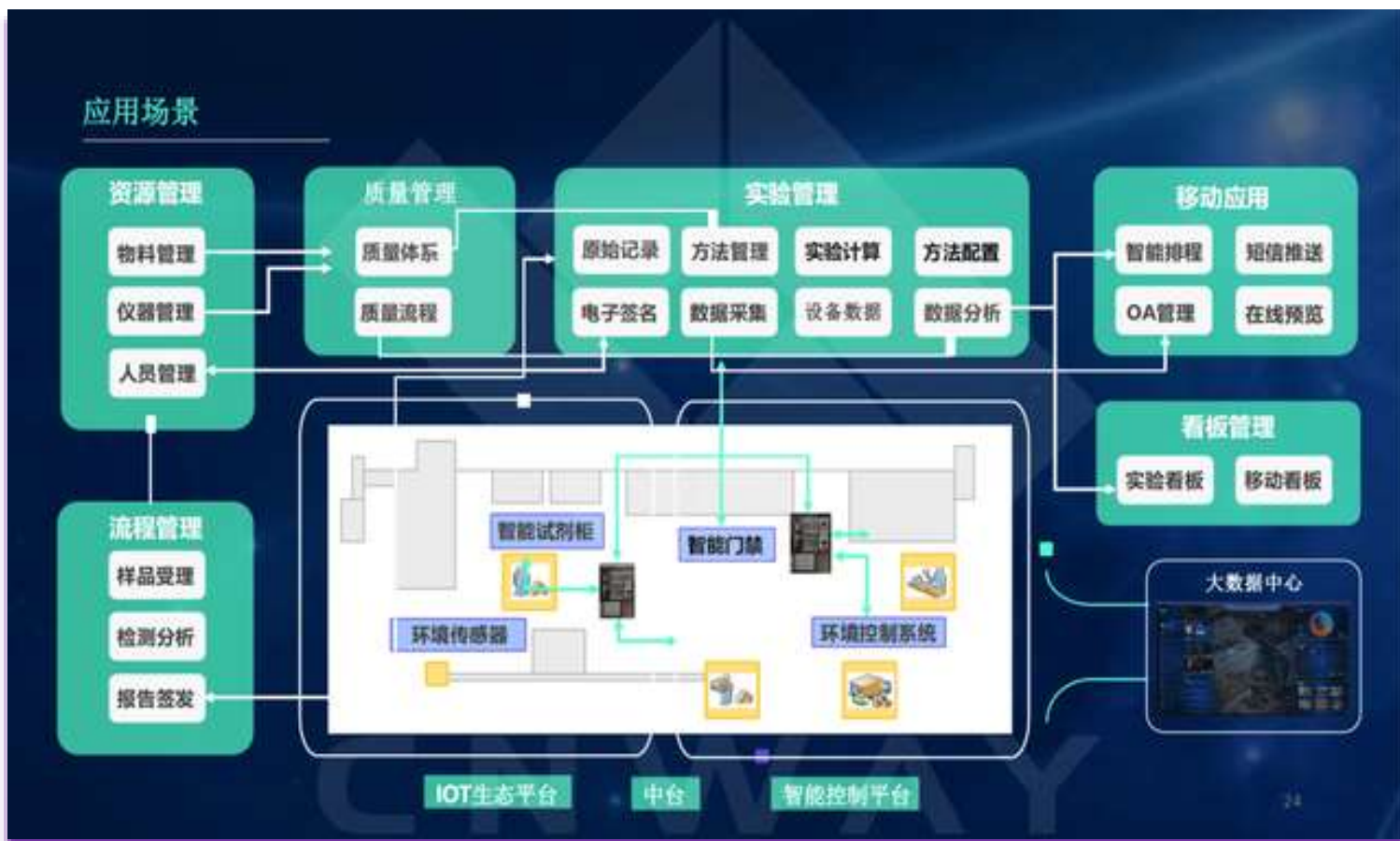
SV[3]冷凝管设置温度(°C)

11

SV[3]加热套设置温度(°C)

45

实验室数智化



- ✓ 人、物、环境三位一体以安全为中心的全面智控一体化，实现资源和信息互联互通、精细化动态化智能管理。
- ✓ 在大数据分析和运行实践的基础上，实现智能接单、智能审核、智能非标业务定制等个性化功能，通过大量的数据知识积累和行为确认，确保实验室智能化的可靠性。

- 1) 量子计算模拟能力，自主研发了高效精确的量子化学系统，涵盖智能分子模拟技术（AI DFT）、激发耦合簇（CCSD）、分子动力学（AIMD）等多种量子化学方法，具有领先的筛选效率，通过与人工智能技术融合，实现了自适应选择最优密度泛函的智能化，大幅提高计算效率和准确度。
- 2) 开发出多种前沿AI技术在计算材料学中的创新应用，提升了计算结果的实际可用性。计算精度和效率超越了传统方式，部分指标领先国际同行，为高通量材料计算带来颠覆性提升。
- 3) 基于自主可控的计算集群，自主开发了完整的软硬件一体化系统，高度优化了量子化学计算、第一性原理计算等密集型计算的性能，为高通量材料计算提供了有力支撑。

底层设计是复杂的软硬件系统架构

- 硬件架构包括：自动化控制上位机、机械手臂、加料、反应、温控系统、搅拌系统、分析检测系统等模块；
- 软件架构包括：实时控制系统软件、数据采集和处理软件、人机交互界面、通信协议等。
- 在打通模块控制实验的同时，实现了通过互联网远程监视和维护，此外还有一些辅助功能模块，例如：设计安全锁、防故障和事故处理机制等。

模块化设计

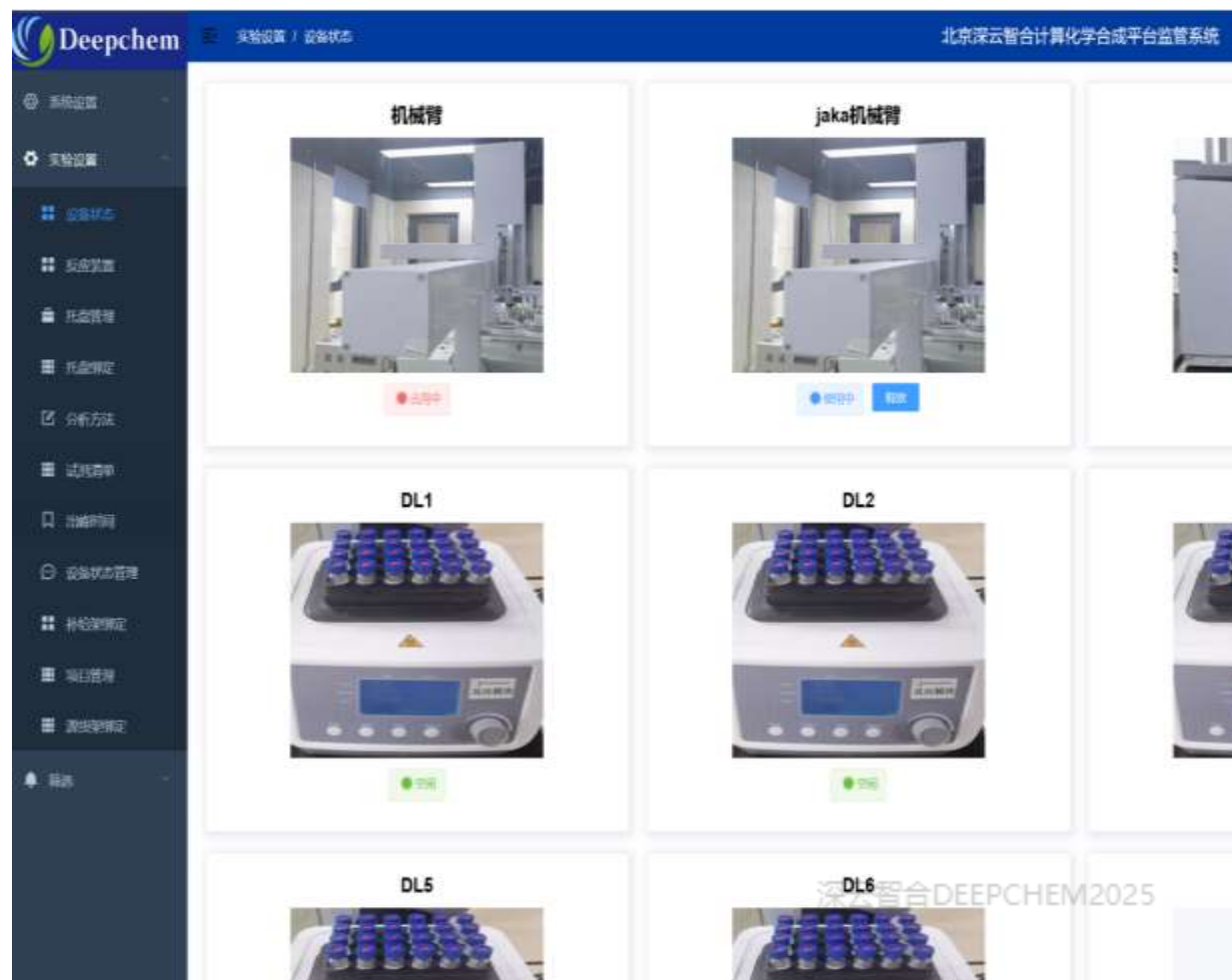
云端自动化试验平台采用模块化设计



前端界面

简洁友好

仅需根据引导操作，输入实验所需试剂及其配比、反应条件等参数，即可将实验任务下发至后端实验舱执行



后台系统

后台基于云计算架构：实现实验任务的随机分配或指定分配到特定实验舱内，并启动相应的实验流程，使用户专注于科研目标。

计算化学合成云平台监管系统

😊 欢迎

⚙️ 系统设置

📊 实验

🔧 步骤管理

🚚 仓管理

ID	仓名称	仓状态	集群名称	数据库名称
1	包头1号舱	online	baotou	alpharobo-cloud-t
2	北京1号舱	online	beijing	alpharobo-cloud-t

深云智合DEEPCHEM2025

使用步骤

主要包括以下步骤:

① 用户访问Web页面并登录试验平台;



② 根据平台提示选择所需试剂、配比、反应流程及参数，并提交试验任务；

使用步骤

③ 实验随机或指定下发到实验舱，即启动实验流程；

- 支持滴加、搅拌(磁力、机械、行星)、加热、氮气保护、过滤、蒸馏(常压、减压)、烘干等众多工艺。
- 支持颗粒固体、粉末固体、纤维固体、低黏稠液体五种形态反应物自动加料，准确度在1%内。
- 支持铝缸、玻璃瓶、航空杯三种材质的反应器。
- 支持体积为2 ml、1 ml、0.5 ml、0.1 ml、0.01 ml的反应。自研1 ml、0.5 ml、0.1 ml、0.01 ml五种量程加样针，准确度在1%内。
- 支持温度、湿度、电流、转速、压力、滴速等多种传感器数据的采集。

The screenshot displays the DEEPCHEM2025 experimental control interface. At the top, there are dropdown menus for '舱' (Cabin) set to '北京1号舱' and '托盘' (Tray) set to '智能测试托盘2'. Below these is a '描述' (Description) text field. A '+ 采集数据' (Collect Data) button is located to the right. The interface is divided into two main sections for step configuration. The first section, '步骤 1' (Step 1), shows a '步骤' (Step) dropdown set to '造瓶' (Bottle Making) and a '反应瓶编号' (Reaction Bottle ID) set to '1'. It includes a toggle for '是否氮气保护' (Whether Nitrogen Protection) which is currently off, and a '瓶型' (Bottle Type) dropdown set to '航空杯' (Aerospace Cup). A '+ 采集数据' button is at the bottom right of this section. The second section, '步骤 2' (Step 2), shows a '步骤' dropdown set to '加试剂' (Add Reagent) and a '反应瓶编号' set to '1'. It lists three reagents: 'HX000030' with a mass of 15g, 'HX000036' with a mass of 5g, and '乙酰丙酮-188-200' with a mass of 0.5g. Each reagent entry has a red minus icon to its right. At the bottom of this section is a '+ 加入试剂' (Add Reagent) button. The footer of the interface includes the text '深云智合DEEPCHEM2025' and another '+ 采集数据' button.

舱: 北京1号舱 托盘: ZX-02

托盘: 智能测试托盘2

描述:

+ 采集数据

步骤 1

复制该步骤 删除步骤

步骤: 造瓶 反应瓶编号: 1

是否氮气保护: ☐ 瓶型: 航空杯

+ 采集数据

步骤 2

复制该步骤 删除步骤

步骤: 加试剂 反应瓶编号: 1

试剂: HX000030 质量: 15 g

试剂: HX000036 质量: 5 g

试剂: 乙酰丙酮-188-200 质量: 0.5 g

+ 加入试剂

深云智合DEEPCHEM2025

+ 采集数据

使用步骤

④ AGV 智能小车自动去药品库拿取试剂并送到指定实验舱；



自主研发物料位置统一信息模型，实现厂区内对舱端实验自动补给。

案例：部署4台AGV、补给20个实验舱

使用步骤

⑤ 舱内开始进行实验；

自研高效并发排程 APS

针对实验工艺特点，自研的高效APS，根据实验流程自动编排设备作业环节，极大提高舱运行实验的效率。

⑥ 实验流程全记录及整个流程的实时监控；

支持舱内数百种传感器数据采集、监测、警报，可根据需要灵活添加。

Deepchem 实验设置 / 设备状态管理				
2024年11月12日				
	机械臂(占用中)	jaka机械臂(使用中)	补给注射泵(空闲)	AGV小车(空闲)
15:45	筛选试验<1705> 托盘 <Tray Holder 3:Slot1> 通道<4> 加样 双氧水	15:45 - 15:46 筛选试验<1702> 初始位 <OP20-x1y2-x1y1> 目标位<OP31-x1y2-x1y1> 反		筛选试验 <1704> AGV 回试剂托盘 <3-11,4-1>
16时	15:54 - 16:00 筛选试验<1702> 托盘 <Tray Holder 2:Slot2> 通道<1> 取样			15:54 - 15:58 筛选试验 <1705> AGV 入试剂托盘 <3-11>
16:15	16:09 - 16:14 筛选试验<1704> 托盘 <Tray Holder 2:Slot1> 通道<1> 加样 乙腈			
16:30	16:23 - 16:28 筛选试验<1702> 托盘 <Tray Holder 2:Slot2> 通道<2> 取样			
16:45	16:49 - 16:53 筛选试验<1702> 托盘 <Tray Holder 2:Slot2> 通道<3> 取样	16:40 筛选试验<1705> 初始位 <OP32-x1y1-x1y1> 目标位<OP21-x1y1-x1y1> 反		16:35 - 16:40 筛选试验 <1705> AGV 回试剂托盘 <3-11>
17时		16:53 筛选试验<1704> 初始位 <OP30-x1y1-x1y1> 目标		16:55 - 17:04 筛选试验 <1704> AGV 回试剂托盘 <3-11,4-1>

使用步骤

- ⑦ 实验结束，按需进行材料性质检测并自动进行产物收集及废物处理；
- ⑧ 数据分析报告返回至云平台，可直接查看分析报告；
- ⑨ 如有需要实验产物可通过 AGV 运送到指定位置拿取；



部分硬件指标展示



性能指标	
泵类型	二元泵
流速范围	0-5mL/min
温度区域数量	≤2
溶剂最大数量	≤4
压力操作范围	up to 1300bar
色谱柱容量	8
进样量范围	0.1-100ul



性能指标	
使用温度	≤450℃
升温速度	0.1-100 °C/min
程序升温	6阶7平台
最低检测器限	≤1.8pg碳/s（丙烷）
线性动态范围	≥ 10 ⁷
采样速率	≤200Hz

部分硬件指标展示



加热反应模块



技术参数			
最大搅拌量	20L	定时功能	1min~99h59min
转速范围	100-1500rpm	外壳防护等级	IP21
加热温度范围	室温~340℃，步长1℃	热输出功率	600W
温度传感精度	PT1000 (精度±0.2℃)	搅拌子最大尺寸	80mm
技术参数			
温度控制范围	室温-15-100℃	功能	加热/冷却/震荡
温度设定范围	0-100℃	过温保护	150℃
温度控制精度	±0.5℃	功率	200W
最大升温速率	5.5℃/min	允许环境温度	10-40℃
混匀直径	3mm	允许相对湿度	<80% RH

部分硬件指标展示



基本参数		性能参数	
外形尺寸	950*630*850（LWH）	防护等级	手臂IP68
机械臂臂展	1327mm	标准工况节拍	20S*
旋转直径	1000mm	满载续航能力	双电池6h*
设备重量	300kg	站点定位精度	±10mm
可用设备载重	150kg	综合定位精度	±0.5mm*
机械臂负载	12kg(含夹具)		
运动参数			
机臂TCP速度	≤1.8m/s		
移动速度	≤1.2m/s		
越障高度	≤10mm		
过缝宽度	≤20mm		
行走通道宽度	≥850mm		
回转通道宽度	≥1250		

合作优势

成本降低

研发成本仅为人工实验的1/5~1/10，大幅降低企业研发投入。

经济效益显著

以较低的成本实现高效研发，提高企业市场竞争力，为企业创造更大的经济效益。

为企业节省大量资金，可用于其他研发项目或市场拓展，推动企业可持续发展。

成本优势

实验效率提升

实验通量大，单日处理实验量是人工实验室的20倍，7×24小时无人值守，加快研发进程。

研发周期缩短

通过AI智能预测和实验室数智化平台，快速筛选候选分子，优化实验方案，缩短研发周期。

效率优势

数据安全性保障

通过加密技术、访问控制和数据备份等措施，确保数据的安全性和保密性。

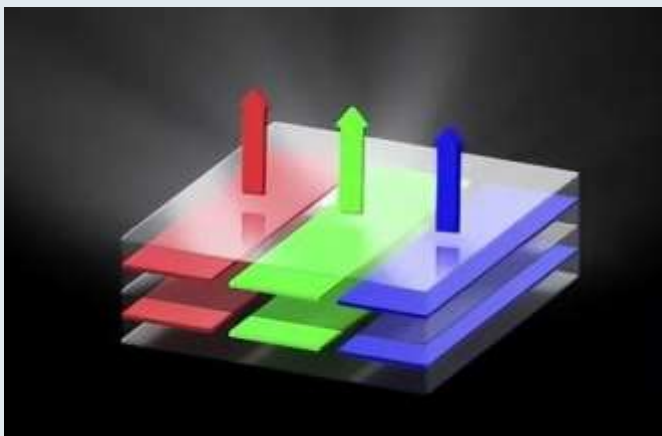
数据稳定性与准确性

实验室数智化平台实现全流程信息化管理，数据稳定、准确，自动记录与追溯，确保科研数据的质量。

数据安全

案例展示

OLED中间体材料新分子开发



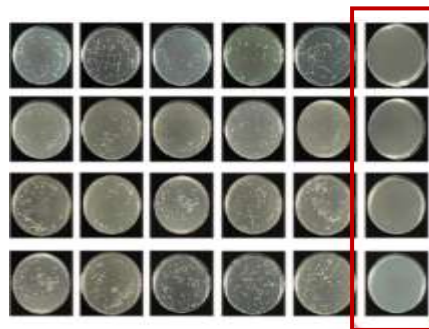
- 合成新分子提高OLED材料性质
- 客户预计耗时半年的工作，平台2周完成
- 研发成本降低80%

药物改性研发



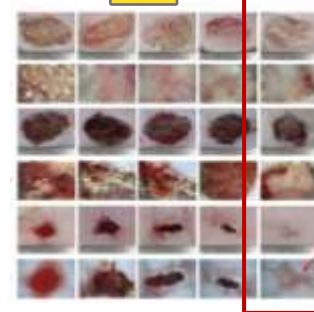
四川大学华西医院

对念珠菌浮游菌的抑制效果



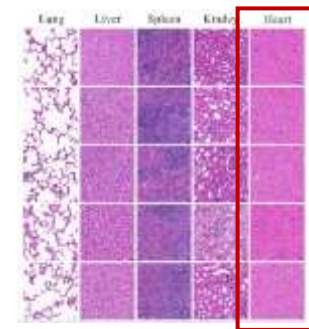
与HA相比
cop1T-HA杀菌效率提高68%

对念珠菌动物感染模型的抑制效果



光照下
cop1T-HA伤口愈合更快

对念珠菌动物感染模型的毒副作用研究



cop1T-HA对小鼠无明显毒副作用

- 大幅度增强杀菌效率，适用于各种多重耐药型真菌，具有极高的生物安全性。

深云智合DEEPCHEM2025

应用范围：提供高效、经济、环保的技术研发解决方案

- 服务于能源、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等。

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

联系方式

邮箱: yanghuijuan@deepchem.cn;

zhangbingjie@deepchem.cn

欢迎随时咨询, 我们将为您提供专业的服务和支持。

公司网站: <https://www.deepchem.cn>



企业二维码

扫码关注, 了解更多企业信息和机会。

深云智合 DEEPCHEM2025