



**精准智能化学  
全国重点实验室**  
STATE KEY LABORATORY OF  
PRECISION AND  
INTELLIGENT CHEMISTRY



## 精准智能化学全国重点实验室简介

Introduction

精准智能化学全国重点实验室（以下简称实验室）是依托于中国科学技术大学建设的国家级科研平台。实验室面向世界科技前沿，聚焦化学反应与材料物性的精准调控，通过建立精准化/智能化双驱动模式，实现化学研究范式变革，在精准智能化学领域实现重大原始创新，突破关键核心技术，抢占科技制高点。实验室现任主任为李震宇教授。

### 精准化、智能化双驱动模式



化学家-人工智能机器科学家智慧融合  
化学研究新范式



## 研究方向

Approaches

实验室的研究方向涵盖复杂体系化学理论、化学过程精准表征、数据驱动的智能化学、反应路径与材料物性的精准调控等领域。自2013年至今，实验室每年发表SCI论文约700篇，其中包括Science和Nature等顶级期刊文章，JCR Q1和Q2区论文占比约为90%。目前，实验室正牵头承担多项国家部署的重大任务，包括抢占科技制高点重点任务、国家重大科技基础设施以及10余项国家重点研发计划项目。

### 01 复杂体系化学理论



发展面向复杂化学过程和材料体系的基础理论、底层算法及高效并行计算软件

### 03 数据驱动的智能化学



基于高度结构化的精准化学数据体系，发展化学智能不断提升的机器化学家平台

### 02 化学过程精准表征



发展时空超高分辨多维及多技术联用的原位、动态表征新方法，建立可扩展、可兼容的精准表征实验数据体系

### 04 反应路径与材料物性的精准调控



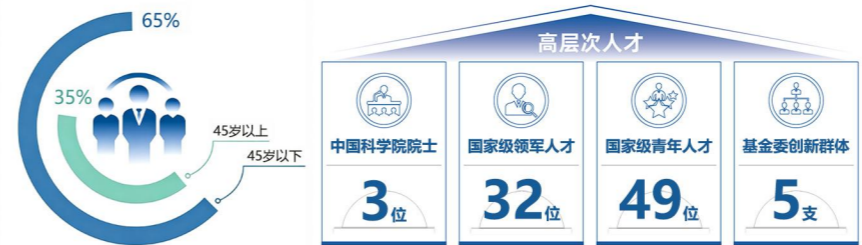
基于精准智能化学方法，实现对重要化学反应路径、反应条件及分子与材料性质的精准调控与优化



## 人才队伍

Teams

实验室致力于培养对化学研究新范式有深刻理解及深入实践的新型人才，师资力量雄厚。现有固定研究人员124人（中国科学院院士3人，国家级领军人才32人，国家级青年人才49人），拥有5支基金委创新群体。



以上均不重复统计



## 战略科学家

Academician



谢毅

中国科学院院士  
发展中国家科学院院士

长期从事无机固体化学研究，曾建立了溶剂热制备非氧化物材料的方法，建立和发展了特征结构导向构筑无机功能固体材料的方法学。获国家自然科学二等奖2次、TWAS化学奖、IUPAC化学化工杰出女性奖、世界杰出女科学家成就奖、NanoResearch Award、全国创新争先奖章、何梁何利科学与技术进步奖等国内外奖项。相关工作成果以通讯作者身份在Nature、Nature Energy等发表论文350余篇，引用4万余次。连续入选Clarivate全球高被引科学家榜单和Elsevier中国高被引学者榜单。



杨金龙

中国科学院院士  
美国物理学会会士

长期致力于应用量子化学研究，在电子结构方法与程序、新型功能材料的设计与模拟、表面单分子量子行为的表征与调控等方面取得了系列原创性成果。曾获安徽省自然科学一等奖(2003)、国家自然科学二等奖(2005)、第九届中国青年科技奖(2006)、中国科学院杰出科技成就奖(2014)、全国先进工作者(2015)、全国创新争先奖章(2023)等奖项。发表SCI论文800余篇，其中90余篇发表在Nature、Science、Nature子刊、Phys.Rev.Lett、J.Am.Chem.Soc和Angew.Chem.Int.Ed.上。



徐铜文

中国科学院院士

长期致力膜化工研究，在离子膜基础研究、产业化及其在储能、氢能和过程工业低碳变革应用方面取得了系统的创造性成果。获国家技术发明二等奖1项、省部级及行业协会一等奖7项，曾获全国五一劳动奖章和侯德榜化工科学技术成就奖、国务院政府特殊津贴等荣誉。在Nature等期刊发表论文600余篇，2014-2024连续十一年入选爱思唯尔高被引作者名单，多次入选美国斯坦福大学和爱思唯尔数据库发布的“全球前2%顶尖科学家榜单”（在2024年的“终身科学影响力排行榜”中，位居全球化工第12位）；获授权发明专利110件。



## 代表性研究成果

Highlights

实现高效稳定近红外钙钛矿LED *Nature* 615, 830–835 (2023)

构建铜系金属卤化物基固态电解质体系 *Nature* 616, 77–83 (2023)

实现微孔框架离子膜内近似无摩擦的离子传导 *Nature* 617, 299–305 (2023)

设计一类硼自由基催化剂并发展其不对称合成反应 *Science* 382, 1056–1065 (2023)

利用人工智能在催化基础研究中取得重大突破 *Science* 386, 915–920 (2024)

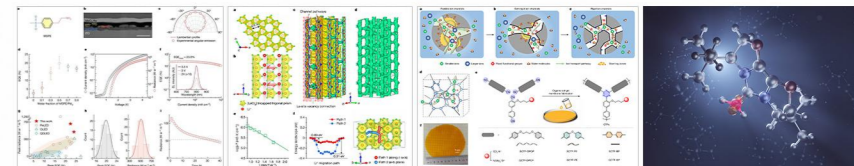
提出分子内结新概念实现光催化甲烷一步高效制乙醇 *Nature* 639, 368–374 (2025)

提出单原子催化剂设计全新理论模型 *Nature* 640, 668–675 (2025)

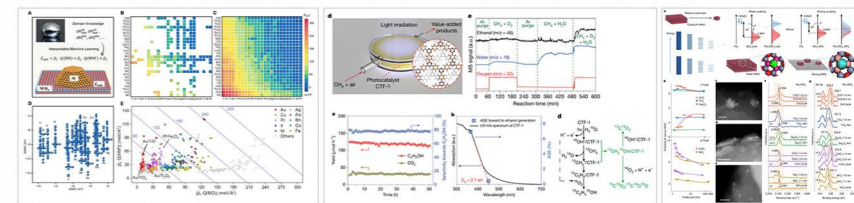
基于三维异质结构设计实现高性能纯红钙钛矿发光二极管 *Nature* 641, 352–357 (2025)

首次利用双极膜重水解离实现气代酸碱的低成本制造 *Nature* 643, 961–966 (2025)

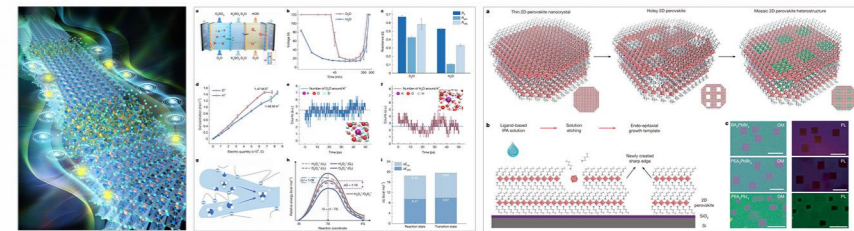
实现二维钙钛矿中的镶嵌式横向异质结构 *Nature* 649, 612–620 (2026)



*Nature* 615, 830–835 (2023) *Nature* 616, 77–83 (2023) *Nature* 617, 299–305 (2023) *Science* 382, 1056–1065 (2023)



*Science* 386, 915–920 (2024) *Nature* 639, 368–374 (2025) *Nature* 640, 668–675 (2025)



*Nature* 641, 352–357 (2025) *Nature* 643, 961–966 (2025) *Nature* 649, 612–620 (2026)

菁菁致远  
共赴未来

中国科学技术大学  
University of Science and Technology of China



## AI赋能研究者创新的智能科学家设施

AI-Driven Innovation Hub

人工智能正在重塑科研范式。中国科学技术大学精准智能化学全国重点实验室已初步建成AI赋能研究者创新的科研基础设施，通过开发科学基座大模型及系列科研模型，形成跨学科知识理解、推理与生成能力，突破知识孤岛，助力青年研究者快速跨越知识门槛和学科壁垒；率先建设智能驱动的规模化机器人实验平台，全球开源发布科研机器人指令集、接口规范、智能模型，形成较传统模式效率提升百倍的实验能力，突破能力孤岛，帮助青年快速完成从想法、实验验证到迭代优化的完整闭环；通过联邦学习算法，实现集中式智能驱动19个分布式设施，并形成一系列智能科研根技术；支撑国能集团、中石化建设自主实验室，构建起科技创新与产业创新融合的新生态；依托智能科学家联盟，突破资源孤岛，为青年提供云端共享的科研资源，涌现出了一批颠覆性的化学材料成果。



### ● 标志性应用成果

#### 创制新型单原子农药

- 已在30个省进行大田验证
- 治疗作物病害近100种
- 土壤几乎0金属残留
- 推广面积2025年底>300万亩



#### 创制高效相变吸热材料

- 首个高温段(800-2000°C)隔热材料：已知最高热容(4.6 KJ/G)，最低导热率(相变点附近<0.001 W/(MK))
- 高温隔热性能达同等厚度国标气凝胶240倍



### ● 驱动产业革新，催生新质生产力

前两次“碳基”工业革命，人类突破了“体力”限制。

第三次“硅基”工业革命，人类突破了“算力”限制。

数据智能驱动的第四次“硅基”工业革命，呼之欲出融合机器人、科学大脑、云设施的智能科学家系统将帮助科研人员突破“个体、体力、算力、脑力”的限制，拔高并链接个体科研能力，全面变革科研范式，大幅度提升我国创新实力。



## 招生方向及奖助学金体系

Admission and Scholarship

实验室招收**化学、材料、物理、人工智能**等方向的研究生，并提供“菁致”奖学金支持。奖学金分为四个等级，额度分别为20万元、10万元、6万元和3万元。“菁致”奖学金等级为一次确定，分五年发放。奖学金申请学生应为国家高水平大学获推免资格的大三学生。进入实验室学习的研究生还将获得学校统一标准的学业奖学金和基本助学金等奖助学金，详细情况请查阅中国科学技术大学研究生院官网学籍奖助专栏。

对于尚未完全确定研究兴趣的学生，实验室还提供课题组轮转的机会，允许学生在第一学期选择不多于3个课题组进行轮转，保障学生与导师双方在研究方向和指导模式上的匹配，为学生提供优异的交叉学科培养环境。



## 国际交流

International Conferences and Exchanges

实验室定期举办高水平国际会议，汇聚全球学者，推动前沿学术对话。通过构建开放、多元、互动的国际化平台，培养具备全球视野、跨文化沟通能力与国际竞争力的高素质人才。



中-法理论化学会议

中-法理论化学研讨会

澳门科技界国情考察团



Nature Conference

印尼高教代表团

新加坡国立大学化学系

西交利物浦大学理学院



## 申请方式

Application

申请学生加入招生QQ群(群号码:992189262)获取面试安排等通知。任何疑问欢迎随时联系实验室工作人员和相关导师。感谢您对实验室教培工作的支持!

报考信息请查阅中国科学技术大学研究生院招生官网:<https://yz.ustc.edu.cn/>，也可查阅实验室官网联系意向导师咨询报名。

联系人：项老师

联系电话：0551-63601793

联系邮箱：elephann@ustc.edu.cn

实验室官网：<https://pichem.ustc.edu.cn/>

实验室微信公众号：USTC-PIC-Lab



## 科研和学习环境

Environments

实验室在高新校区3号学科楼拥有面积约20000m<sup>2</sup>的物理空间，为学生提供良好的科研和学习环境。



● 智能化学实验中心



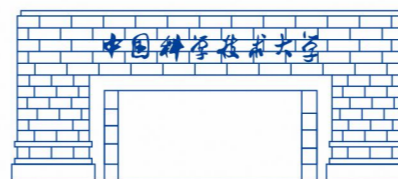
● 高新区图书馆



● 健身设施



● 多彩校园生活



## 精准智能化学全国重点实验室

STATE KEY LABORATORY OF PRECISION AND INTELLIGENT CHEMISTRY



联系电话 / 0551-63601793

网址：<https://pichem.ustc.edu.cn/>

地址：安徽省合肥市中国科学技术大学高新校区3号楼