

新时代的湖南，科技创新浪潮奔涌向前。在打造具有核心竞争力的科技创新高地征程上，广大女科技工作者是当之无愧的“她力量”。全省女性科技工作者总量突破150万，国家重点实验室里处处跃动着巾帼身影。在省妇联、省科技厅今年举办的“巾帼筑梦科技强国”主题分享会上，女科技工作者“硬核”开讲，她们用实践证明：科研没有性别界限，创新不分男女老幼！

当科技领域打破性别的藩篱，人类文明的星空必将更加灿烂。为大力弘扬科学家精神，引领全省广大妇女在培育新质生产力和科技强省建设中自立自强、勇毅进取，湖南省妇联宣传部、今日女报/凤网特别策划“巾帼初心耀三湘·科技篇——了不起的WOMEN”专题报道，讲述她们以“巾帼何曾让须眉”的豪情勇攀科技高峰的动人故事。

“神仙博导”跨界突破：让量子牵手AI，把成果端上餐桌

今日女报/凤网记者 江昌法

11月10日，湖南师范大学动物多肽药物创制国家地方联合工程实验室内，王颖正分析一组组数据——这些数据出自她和团队自主研发的平台：功能多肽智能预测平台。

“这个平台的‘魔力’源于量子化学与人工智能的跨界融合。”王颖告诉今日女报/凤网记者，团队自主研发的CF22D泛函能让组合的阿拉伯数字成为“分子雷达”，精准地计算多肽性质，大幅提升筛肽效率，让原本需要研究数年的多肽筛选周期压缩至几周，不仅能助力国产药物研发，今年6月更是实现了跨界合作，帮助国产乳业从牛奶中精准筛选出免疫调节多肽，大大优化了乳制品质量。

痴迷科研、神仙导师、年轻博导……今年33岁的王颖在科研之路写满了传奇故事。



王颖

挑战传统，给功能多肽立起“精准标尺”



王颖给同学们上课。

王颖的办公桌上，摆放着学生送的“神仙导师奖”，两个“萌猫”玩偶端坐在桌子最外侧，格外引人注目。仔细一看，玩偶上面刻了一行英文小字，翻译成中文即：“计算化学、药物设计”——这恰巧是王颖科研的两大方向。

2009年，王颖考入四川大学化学系，与计算生物化学结缘。之后，她在华东师范大学读博期间，主动向一个困扰学界多年的难题发起挑战——研究密度泛函理论中跨体系高精度计算的普适性问题。这个问

题在行业内的探索已持续30年，而当时她所在的团队是国内唯一从事该领域研究的团队。

正是这段啃“硬骨头”的经历，为她后来实现量子化学与药物设计的跨界联结埋下了关键伏笔。

“多肽贯穿细胞代谢、免疫调节等各类生命活动，其与蛋白质相互作用的精准预测，是药物设计的根本关键。”王颖解释，要突破这一精度瓶颈，离不开量子计算化学领域的重要工具：密度泛函理论。因此，她和团队自主研发高精度密度

泛函新方法——CF22D泛函，帮助国内医药企业搭建“蛋白质-多肽”相互作用的精准模型，相当于给多肽药物设计提供了“精准标尺”，从而更有效地指导药物设计。

无数个夜晚趴在电脑前推算计算，失败了就从头再来，团队陆续研发出revM06-L、revM06、M06-SX等系列泛函。2022年进一步突破理论瓶颈，发展出具备跨体系高精度的密度泛函新方法——CF22D泛函，将某些体系的预测精度控制在实验测量误差范围内，成功解决了传统方法的核心缺陷。

这一突破不仅让理论计算从实验的“小帮手”升级为探索微观世界的“利器”，其精度更超越谷歌团队的DM21方法，还被写入Gaussian等国际知名量子化学软件，供全球上千个课题组使用。

这些成果也让王颖以第一或通讯作者身份在《美国科学院院刊》和《自然计算科学》连续发表四篇重要论文，其博士论文也因卓越的广度和深度助她荣获2018年上海市优秀博士毕业生称号。

破界前行，做“不被定义的自己”

从挑战“卡脖子”难题到“量子+AI”的跨界融合，王颖的科研之路本身就是一部“打破边界”的探索史。而这份敢于突破的勇气，深深植根于导师、著名理论化学家张增辉教授的言传身教。

2013年，王颖师从张增辉教授时，当时团队正开拓“基于结构的药物设计”这一国际新兴领域，更做出了一个当时看来颇为“冒险”的决定——放弃传统理论化学研究者惯用的Fortran语言，转向学界应用尚窄的Python语言，想在空白地带开辟出计算机辅助药物设计新赛道。

“做成了，就是你的优势。”导师的这句话，成为王颖面对未知的底气，也让她深刻领悟到：科研的边界从来不是用来固守的，而是用来突破的。如今，她将这份破界精神完整传递给自己的学生，引导他们跳出舒适区。

“她允许我们探索、试错，在她看来，暂时失利比墨守成规更有价值。”在抗癌肽研究的动物实验中，学生李婷婷建立小鼠肿瘤模型时，从品系选择到注射定位屡屡受挫，王颖从不苛责，而是一起分析讨论、提出解决方案。

正是这样开放包容的方式，让王颖与学生之间实现了“双向奔赴”。2024年，学生周伊妮攻坚“量子化学+AI多肽活性预测”这一全球鲜有

先例的课题，每周组会上，师生俩都会在文献中抽丝剥茧。

“就像当年我的导师带我一样，我告诉她：找不到路的时候，我们自己就是路。”王颖说，目前该课题已取得阶段性进展，为平台核心技术升级注入了新动能。

然而，王颖身上那股子破界的勇气不只存在于对科研的坚持，在感情世界同样如此。

2015年，一趟开往浙江的火车上，王颖与丈夫一见如故。两人一个来自湖南、一个来自安徽，成长环境迥异却不困于地域之别；求学经历、专业背景毫无交集，却不愿被固有路径束缚。这份不被世俗框架定义的相处，让感情愈发坚定。博士毕业后，丈夫主动提议“去长沙一起发展”，更让她毅然决定与这位安徽青年携手一生。

“导师教我打破学科边界，生活教我打破世俗眼光，而我教学生做‘不被定义’的人，走自己的路。”王颖笑着说，如今，她将科研重心转向产业应用，希望把融合科研与生活智慧的破界精神转化为社会价值。

“以创新性前沿AI技术为引擎，结合CF22D泛函等量子化学算法优势，推动产学研深度融合。”王颖的话语笃定，既延续科研执着，也扛起传承担当。

跨界融合，为药物研发装上“AI导航”

在量子化学领域站稳脚跟后，王颖又朝着更具应用价值的跨界方向迈进。

2023年，王颖做出了一个让同行意外的决定：把CF22D泛函和人工智能结合，打造功能多肽智能预测平台。

“科研工作者最重要的使命，是让成果真正落地，造福社会。”这是王颖坚持的信念。她给这个平台做了个生动的比喻：它就像一位经验丰富的“分子老猎人”，既有AI训练出的“敏锐嗅觉”，又有CF22D泛函提供的“精准标尺”，能从数以亿计的候选分子中，精准“嗅”出最有价值的功能多肽。

平台开发过程中，团队面临双重挑战。数据处理上，他们用自然语言处理技术从海量

文献中提取有效信息，构建知识图谱；实验验证上，派成员到合作实验室系统学习，弥补生物实验经验的不足。

一年后，平台在药物研发领域崭露头角：不仅完成了抗癌肽、抗糖尿病肽等治疗性多肽的筛选模型，还针对多个关键癌症靶点，发现了多个高特异性先导分子，为创新药物研发提供了重要候选化合物。

除了医药领域，王颖和团队成果也在今年6月迎来了首次跨界发展——这个主打药物研发的智能平台正式开启了产业化应用，与内蒙古乳业技术创新中心合作，助力中国乳业从牛奶中精准筛选出免疫调节多肽，大大优化了乳制品质量。

“传统乳源肽研发就像盲目尝试，先把蛋白质水解，再检测哪些成分有用。”王颖解释，而他们的平台能直接定位目标，在不流失奶粉营养的前提下，精准获取具有免疫调节、促进吸收等特定功能的多肽。这意味着，未来我们喝到的乳制品不仅营养更足，还能针对性地增强免疫力，质量也更有保障。

周伊妮
湖南师范大学
生命科学学院博士生王颖
湖南师范大学
“潇湘学者”特聘教授

科研湘女面对面

她与团队自主研发的CF22D泛函，能精准计算多肽性质、大幅提升筛肽效率，让原本需要研究数年的多肽筛选周期压缩至几周，助力国产药物研发，惠及民生。本期“科研湘女面对面”视频专栏，邀请一位同领域的博士学生，与这位被学生称作“神仙导师”的科研大咖展开对话。让我们一同走进她们的科研世界，看她如何带领学生破界前行，活成“不被定义的自己”。

扫一扫
看视频