



2019

先进制造与新材料动态监测快报

8月15日

第16期(总第326期)

重点推荐

美 DOE 资助化学与材料领域数据科学研究

英启动一批应对工业和社会挑战项目

欧洲学者首次合成出稳定的纯碳环 C_{18}

最薄的光学器件在美面世

目 录

项目资助

- 美 DOE 资助化学与材料领域数据科学研究1
- 英启动一批应对工业和社会挑战项目2

研究进展

- 欧洲学者首次合成出稳定的纯碳环 C₁₈3
- 最薄的光学器件在美面世4
- 量子力学计算发现无铅双钙钛矿半导体太阳电池4
- 受海毛虫刚毛结构启发的仿生材料5
- 美陆军利用人工智能开发新型燃料电池6
- 一种新型轻质柔性微型泵6

美 DOE 资助化学与材料领域数据科学研究

8月14日，美国能源部（DOE）宣布将在未来三年出资 2760 万美元，用于资助数据科学的目标研究，加速化学和材料科学的发现。获得资助的 19 个项目（包括 14 所高校和 4 家 DOE 国家实验室）将推动人工智能、机器学习等现代数据科学技术的应用，开发新的材料及化学过程。

研究将侧重于开发对材料及化学性质和过程的预测性理解，预计将推动新型催化剂、合金、超导体、化学分离和材料合成方法等的发展，对能源生产、输送和使用具有重要的潜在影响。

承担机构	研究主题
1 劳伦斯伯克利国家实验室	数据驱动的合成科学
2 桑迪亚国家实验室	用于理解重烃聚类的机器学习
3 阿贡国家实验室	自旋轨道耦合系统中 Hidden Order 的结构特征
4 阿贡国家实验室	量化化学分离中的能量驱动因素
5 洛斯阿拉莫斯国家实验室	数据驱动的分离剂/溶剂设计—一种集成的模拟实验方法
6 弗吉尼亚大学	相关电子系统中电阻开关现象的机器学习辅助建模
7 莱斯大学	材料失效的深度学习
8 普渡大学	数据科学驱动的多金属氧循环电催化剂的发现，以提高能量转换
9 加州理工学院	综合了理论、实验和数据科学的能源材料化学
10 佛罗里达大学	数据科学使超导体的发现成为可能
11 伊利诺伊大学	具有量子特性的二维材料的大规模全原子分析
12 加州大学 Merced 分校	应用深度学习方法开发凝聚阶段的电荷转移、非绝热动力学和非线性光谱学的新模型
13 威斯康星大学麦迪逊分校	利用高通量计算和机器学习来发现并理解低温快速氧导体
14 宾夕法尼亚州立大学	数据驱动发现具有受控活性位点核的金属间催化剂
15 卡内基梅隆大学	用于含氧化合物制氢的多组分材料的数据导向合成
16 佛罗里达大学	通过转移和强化学习阐明热磁加工材料中的晶粒生长
17 犹他大学	利用数据驱动建模和原位表征阐明沸石的形成机理
18 麻省理工学院	稳定纳米晶合金的发现与设计：晶界偏析基因组
19 南加州大学	数据科学推动的功能性电解质中多尺度离子传输以及晶体组装中自由基生成的机理研究

万 勇 编译自[2019-08-14]

Department of Energy to Provide \$27.6 Million for Data Science Research in Chemical and Materials Sciences

<https://www.energy.gov/articles/department-energy-provide-276-million-data-science-research-chemical-and-materials-sciences>

英启动一批应对工业和社会挑战项目

7 月底，在工业战略指引下，英国启动了一批应对工业和社会挑战项目。包括：

(1) 加速疾病检测。英国政府将投资 7900 万英镑支持癌症、阿尔茨海默病和心脏病等疾病的研究、早期诊断、预防和治疗，企业和慈善机构将匹配高达 1.6 亿英镑的研发投入。

(2) 数字安全设计。英国政府和私营部门将分别投入 7000 万和 1.17 亿英镑，以开发应对网络攻击的新型安全硬件原型以及防护软件。

(3) 推动电动革命。英国政府和私营部门将分别投入 8000 万和 1.54 亿英镑，推动电动革命将加强英国提供下一代电动汽车、混合动力飞机和智能电网的能力，确保这些行业扎根于英国，吸引对制造业基地的国内投资。

(4) 工业脱碳。政府承诺投入 1.7 亿英镑用于在产业集群中部署碳捕集和氢能网络等技术，以支持到 2040 年建立世界上第一个净零排放的产业集群。此外，产业部门将投资高达 2.61 亿英镑，在东北、西北、南威尔士和苏格兰的钢铁、化工和炼油等行业开发和推广减排新技术。

(5) 制造业更加智能。英国政府将投资 3000 万英镑启动一项竞争型资助，以支持在制造业中应用包括人工智能和虚拟现实在内的新型数字技术。该资助是制造业更加智能（*Manufacturing Made Smarter*）挑战的一部分，旨在通过鼓励工业数字技术的开发和整合来支持英国制造业转型。

(6) 低成本核能。英国政府将投资 1800 万英镑以创建比传统核电站更小、成本更低的创新型小型核电站，其重点是设计独一无二的小型模块化反应堆（SMR）。

(7) 智能可持续塑料包装。英国政府和私营部门将分别投入 6000 万和 1.49 亿英镑，开发新的商业模式和创造新的可持续可回收塑料材料的方法，应对一次性塑料带来的挑战。

黄 健 编译自[2019-07-23]

Next wave of industry and society challenges

<https://www.ukri.org/news/next-wave-of-industry-and-society-challenges/>

欧洲学者首次合成出稳定的纯碳环 C₁₈

碳有多种组合形式：每个碳原子分别与三个和四个碳原子结合时，即为柔软的石墨和坚硬的金刚石；60个碳原子可形成足球状的巴基球；此外还有纳米管等。几十年来，科学家一直尝试将每个碳原子只跟其他两个碳原子结合，也只是制备得到转瞬即逝的气态碳环。

英国牛津大学和 IBM 苏黎世研究实验室联合首次合成出由 18 个碳原子组成的稳定的环形纯碳分子：环碳（cyclocarbon），实现了基础研究领域的新突破。

研究人员利用湿化学方法制备得到由碳和氧组成的三角形分子 C₂₄O₆，将该碳氧化物分子置于高真空腔体中的单层氯化钠上，在接近绝对零度的温度环境中，通过原子力显微镜调控电流来操纵分子中的原子，逐步去除 CO，直至剩下 18 个碳原子。该环碳化合物具有半导体性质，但判断能否以极高速度传导电子还为时尚早。

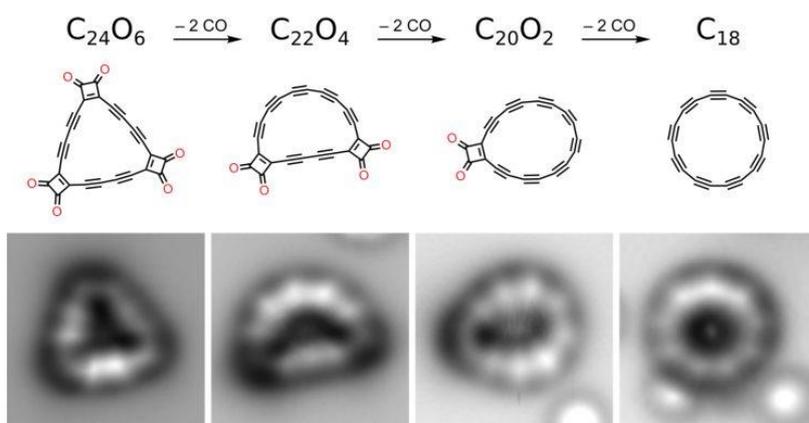


图 环碳形成过程

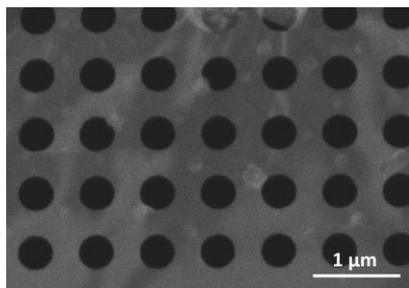
相关研究工作发表在 *Science*（文章标题：An sp-hybridized molecular carbon allotrope, cyclo[18]carbon）。

王 轩 编译自[2019-08-15]

Making and Imaging Cyclocarbon

<https://www.ibm.com/blogs/research/2019/08/making-imaging-cyclocarbon/>

最薄的光学器件在美面世



波导结构的 SEM 图像

美国加州大学圣迭戈分校 Ertugrul Cubukcu 教授率领的研究团队开发出最薄的光学器件——仅有三个原子层厚度的波导，比现有的器件小了几个数量级。有望推动更高密度和容量的光子芯片的发展。

研究人员利用微纳制造技术，在由硅框架支撑的氮化硅薄膜上形成纳米孔阵列图案，从而形成模板，再将单层 WS_2 晶体转移至膜上进行刻蚀，最终得到的波导由悬浮在硅框架上的 WS_2 单层组成，厚度约为 6 \AA ，比典型的光纤要薄 10000 倍，比集成光子电路中的片上光波导薄 500 倍。

这种单层晶体的特殊之处在于，室温下可支持称为激子的电子-空穴对。这些激子能产生强的光学响应，使晶体折射率大约是围绕其表面的空气折射率的四倍。相比之下，相同厚度的其他材料不具备这么高的折射率。当光线通过晶体传播时，它会被内部捕获，并通过全内反射沿着平面传导。该波导的另一个特征是，能在可见光谱中传导光。

刻蚀到晶体中的纳米孔允许一些光垂直于平面散射，从而可以被观察和探测。这个孔阵列产生的周期性结构，使得晶体还可作为谐振器。该系统不仅可以共振地增强光物质相互作用，还可以作为二阶光栅耦合器将光耦合到光波导中。

相关研究工作发表在 *Nature Nanotechnology*（文章标题：Guiding of visible photons at the ångström thickness limit）。

万 勇 编译自[2019-08-12]

Thinnest optical waveguide channels light within just three layers of atoms

http://jacobsschool.ucsd.edu/news/news_releases/release.sfe?id=2847

量子力学计算发现无铅双钙钛矿半导体太阳能电池

美国太阳能电池板安装装置正日益增加，2019 年初新装机量超过 200 万台，是有史以来第一季度新增装机数量最多的一年。为了满足日益增长的需求，需要寻找比当前最广泛使用的硅基太阳能电池更低成本和更有效的替代品。过去十年中，卤化铅钙钛矿已成为最有希望的替代材料，但是这种材料不稳定且含铅、有毒，并可能造成潜在的健康和环境危害，如地下水污染。

华盛顿大学圣路易斯分校 Rohan Mishra 通过数据分析和量子力学计算发现了新型双钙钛矿氧化物，这种由钾、钡、碲、铋和氧组成的新半导体在太阳能应用中更稳定、毒性更小。无铅双钙钛矿氧化物是最初 3 万种潜在铋基氧化物之一，其中只有约 25 种是已知化合物。研究团队利用橡树岭国家实验室超级计算机的材料信息学

和量子力学计算，发现 KBaTeBiO_6 是 3 万种潜在氧化物中最有前途的一种，间接带隙为 1.88 eV ，并显示出优异的稳定性，且可以在实验室合成。更重要的是，尽管大多数氧化物往往具有较大的能带，但研究人员预测，这种新化合物的带隙更小，接近卤化物钙钛矿，并且具有相当好的性能。

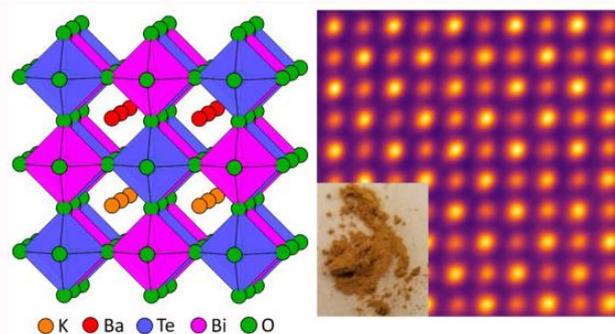


图 无铅双钙钛矿氧化物示意图

相关研究工作发表在 *Chemistry of Materials* (文章标题: KBaTeBiO_6 : A Lead-Free, Inorganic Double-Perovskite Semiconductor for Photovoltaic Applications)。

冯瑞华 编译自[2019-07-24]

A good first step toward nontoxic solar cells

<https://source.wustl.edu/2019/07/a-good-first-step-toward-nontoxic-solar-cells/>

受海毛虫刚毛结构启发的仿生材料

美国特拉华大学副教授 LaShanda Korley 领导的研究团队从海毛虫刚毛系统结构中汲取灵感来制作仿生材料。海毛虫可变形的刚毛底部坚硬，末端柔韧，由一种含有锌和氨基酸组成的单一材料制成。研究人员希望能重建这种化学物质并在合成材料中建立类似结构。

研究团队通过将锌配位的超分子聚合物添加到共价交联的聚乙二醇网络中，模仿了海毛虫刚毛的机械梯度。目标是利用天然材料系统来理解如何通过结合动态和永久结构来控制结构特征的相互作用，特别是机械特性。

相关研究工作发表在 *European Polymer Journal* (文章标题: Gradient supramolecular interactions and tunable mechanics in polychaete jaw inspired semi-interpenetrating networks)。

冯瑞华 编译自[2019-08-19]

Natural Marvels Lead to New Bio-Inspired Materials

<https://scitechdaily.com/natural-marvels-lead-to-new-bio-inspired-materials/>

美陆军利用人工智能开发新型燃料电池

目前燃料电池主要采用氢燃料，但是存储困难等问题。科学家希望通过甲醇替代氢做燃料，但是挑战在于没有成熟的适合甲醇氧化的催化材料。这些材料可能存在成千上万种元素组合，测试和验证每一种组合需要大量的金钱和时间成本。为了改变这种状况，美国陆军研究办公室（ARO）正试图利用人工智能技术开发适合甲醇氧化的催化材料。

在 ARO 的资助下，康奈尔大学开发了名为 CRYSTAL 的系统来筛选可能的材料组合。现有的机器学习方法并不适合科学发现的严格限制，因为解决方案不仅必须合理，而且还要遵守物理和化学定律。因此 CRYSTAL 系统依赖于执行不同的任务的算法机器人，功能包括预测各种组合的相位结构以及确保这些预测符合热力学规则等。研究人员通过该系统筛选数百到数千个元素组合，以创建相位图。利用该系统，研究人员已开发了一种新型催化剂，由三种结晶成一定结构的元素组成，这种催化剂对甲醇氧化有效，并可以集成到甲醇基燃料电池中。

黄健 编译自[2019-08-07]

Innovative AI system could help make Army fuel cells more efficient

https://www.army.mil/article/225351/innovative_ai_system_could_help_make_army_fuel_cells_more_efficient

一种新型轻质柔性微型泵

瑞士洛桑联邦理工学院（EPFL）与日本东京芝浦工业大学研究人员合作开发了一种微型泵，具有灵活、安静、轻便（重量仅为 1 克）、可伸缩、模块化和可扩展性等优点，可应用于柔性机器人、轻型外骨骼和智能服装等领域。

研究者开发的新型泵基于超级计算机等系统中循环冷却液的物理机制。泵具有直径为 1mm 的管形通道，其内部印有多排电极。泵充满介电液体。当施加电压时，电子从电极传导到介质液体分子，随后将这些带电分子吸引到其他电极上，造成介质液体的流动。研究者将泵集成到手套中演示了可穿戴的主动热管理，还将泵嵌入可充气结构中可产生独立的流体“肌肉”。

相关研究工作发表在 *Nature*（文章标题：Stretchable pumps for soft machines）。

黄健 编译自[2019-08-14]

A miniature stretchable pump for the next generation of soft robots

<https://actu.epfl.ch/news/a-miniature-stretchable-pump-for-the-next-generati/>

中国科学院武汉文献情报中心 先进制造与新材料情报研究

跟踪和研究本领域国际重大的科技战略与规划、科技计划与预算、研发热点与应用动态以及重要科研评估分析等。近年来，公开出版发行了《材料发展报告》（科学出版社 2014）、《材料发展报告——新型与前沿材料》（科学出版社 2014）、《纳米》（科学普及出版社 2013）和《新材料》（科学普及出版社 2015）等著作；团队撰写的《美欧中“材料基因组”研究计划分析及建议》《美国报告认为全球制造业成本竞争力发生变革性转变》《韩国宣布一揽子计划推动创新经济》《美国支持创客运动一系列举措概览》等稿件获得了党和国家领导人批示。

研究内容		代表产品
战略规划研究	开展科技政策与科研管理、发展战略与规划研究等相关服务，为科技决策机构和管理部门提供信息支撑。	宁波新材料科技城产业发展战略规划（中国工程院咨询项目） 中国科学院稀土政策与规划战略研究 国家能源材料发展指南（国家能源局项目） 发达国家/地区重大研究计划调研 领域科技战略参考
领域态势分析	开展材料、制造、化工等领域或专题的发展动态调研与跟踪、发展趋势研究和分析，提供情报支撑。	稀土功能材料 微机电系统 微纳制造 高性能碳纤维 高性能钢铁 计算材料与工程 仿生机器人 海洋涂料 二维半导体材料 石墨烯防腐涂料等国际发展态势分析（与其他工作集结公开出版历年《国际科学技术前沿报告》）
科学计量研究	开展材料、制造、化工等领域专利、文献等的计量研究，分析相关行业的现状及发展趋势，为部门决策与企业发展提供参考。	服务机器人专利分析 石墨烯知识产权态势分析 临时键合材料专利分析 超导材料专利分析报告

地 址：湖北省武汉市武昌区小洪山西 25 号（430071）

联系人：黄健 万勇

电 话：027-8719 9180

传 真：027-8719 9202