

新材料监测快报

MATERIALS NEWSLETTER

2024.05

本期要目

- 美加强关键矿产供应链设施建设
- 欧日启动先进材料合作对话
- 英罗伊斯研究所支持材料创新
- 英加强资源节约型和生物基材料与制造
- 英报告认为制造业对经济的影响力被严重低估
- 首个定制化颅骨植入解决方案获 FDA 上市许可

中国新材料产业技术创新平台

目 录

战略规划

美加强关键矿产供应链设施建设	1
欧日启动先进材料合作对话	3

项目资助

英罗伊斯研究所支持材料创新	4
英加强资源节约型和生物基材料与制造	5

行业观察

英报告认为制造业对经济的影响力被严重低估	6
首个定制化颅骨植入解决方案获 FDA 上市许可	7

研究进展

IMT 相变过程中衬底活动新发现	9
可生物降解纤维素气凝胶的增材制造技术	9
贫水溶剂四聚体自组装可捕获双倍的碳	11
兼具韧性和生物降解性的下一代聚乳酸生物塑料	11
机器学习模型用于表征材料表面	13
石墨烯旗舰 2D-PRINTABLE 项目取得新成就	13
含砷晶体中发现“混合拓扑”新物态	14

美加强关键矿产供应链设施建设

4月2日，美国能源部（DOE）化石能源与碳管理办公室宣布拨款7500万美元，用于开发“关键矿产供应链研究设施”（Critical Minerals Supply Chain Research Facility）项目。该项目由《两党基础设施法》资助，将加强美国国内供应链，助力满足对关键矿物和材料日益增长的需求，并减少对“不可靠国外来源”的依赖¹。

具体而言，美国国家能源技术实验室将领衔“从矿物到材料供应链设施”（Minerals to Materials Supply Chain Facility, METALLIC）项目，参与方包括另外八家 DOE 国家实验室（分别是：艾姆斯、阿贡、爱达荷、劳伦斯伯克利、劳伦斯利佛莫尔、可再生能源、橡树岭和西北太平洋实验室）。该项目将汇集九家实验室的专业力量，通过提供关键矿物和材料生产利用技术的快速验证优化及商业化，扩大关键矿物和材料研究、开发、示范和推广的影响。该项目拟开展以下工作²。

（1）加快采用新型加工技术

通过为各种技术和材料提供设施，在多个规模和各种工艺配置下进行原型设计、测试及验证，缩短新技术的开发时间。

（2）设计新材料，支持低浓度来源提取

开发和验证新型材料，用于从低浓度原料（低至万亿分之一）中提取关键矿物和材料。

（3）通过工艺设计最大限度地减少废弃物的产生

设计关键矿物和材料对环境影响小的制造方法，降低使用强度，提高提取效率，提升原料混合及回收的加工容差性。

¹ DOE Invests \$75 Million to Strengthen Nation's Critical Minerals Supply Chain.

<https://www.energy.gov/fecm/articles/doe-invests-75-million-strengthen-nations-critical-minerals-supply-chain>

² NETL To Lead Multi-National Lab Collaboration To Rapidly Advance Critical Minerals and Materials Technologies. <https://netl.doe.gov/node/13549>

（4）开发制造先进合金，减少使用关键矿物和材料

鉴于这些合金是在非平衡条件下进行加工，将通过原位计量表征其性能。

（5）验证处于不同成熟度阶段的技术，降低新技术的采用风险

每条供应链选取成熟度一高一低的两个技术分组开展研究。成熟度较低的技术分组研究将验证技术性能的各个方面，并将材料交由其他中心测试，确定提升成熟度的准备情况；成熟度较高的技术分组研究将在相关产业已具备一定规模的背景下，开展技术验证。

（6）快速推进技术从实验室到商业化

部署可配置的测试平台，验证及生成多种规模的相关数据，并减少扩大规模时间、不确定性和风险，以加速商业化。

（7）支持建立美国国内关键矿物和材料供应链

该团队将验证技术性能，性能测试将由第三方进行，并对产业规模化加工技术进行测试，生产不同体积及尺寸的材料以适应终端技术需求。

此外，该设施还拟通过将物理、计算和数据能力集成到四个中心，支持 DOE 供应链领域的“关键材料协作”(Critical Materials Collaborative, CMC) 活动。新建的四个中心将分别聚焦以下方向：原料选矿；提取与分离；精炼；合金开发与先进制造。其中，艾姆斯实验室领衔建设“关键材料精炼中心”(Critical Materials Refinery Center)，该中心将开展以下工作：①开发经济、节能、环保的关键材料精炼技术；②将先进诊断和数据分析集成到关键材料精炼中，使实时过程监控成为可能；③促进与利益相关方的合作，开发可商业规模化的解决方案，填补当前掣肘关键材料供应链的技术和能力差距³。

³ Ames National Laboratory partners with NETL and other DOE labs to launch a new critical materials research facility. <https://www.ameslab.gov/index.php/news/ames-national-laboratory-partners-with-netl-and-other-doe-labs-to-launch-a-new-critical>

欧日启动先进材料合作对话

4月2日，欧盟委员会与日本内阁府在东京宣布启动欧盟-日本先进材料对话，巩固双边在先进材料研究与创新方面的密切合作⁴。

该通告是欧盟委员会在2月27日通过的关于先进材料产业领导力的报告之后发布的。先进材料应用于可再生能源、电池、零排放建筑和半导体等关键行业，是支撑绿色和数字化转型的关键使能技术，也是经济主权和战略独立的重要组成部分。欧盟和日本在材料技术方面处于全球领先地位，加强对话还将强化七国集团层面在新兴技术方面的合作。

欧盟和日本在关键金属替代材料、功率电子材料等领域的研发及创新合作上取得了成功，此次先进材料对话将在现有成果基础上创建合作平台，分享有关政策发展的信息，探索在共同感兴趣的领域进行联合研究的机会。

⁴ EU and Japan launch Enhanced Dialogue on advanced materials.
https://ec.europa.eu/commission/presscorner/detail/en/IP_24_1781

项目资助

英罗伊斯研究所支持材料创新

英国工程与自然科学研究理事会（EPSRC）宣布，亨利·罗伊斯研究所提出的两项重要提案将获得百万英镑的投资。该提案与英国国家优先事项相契合，旨在实施英国国家半导体战略以及确保英国战略性基础工业持续减少碳足迹⁵。

（1）支持英国半导体和量子技术战略

斯旺西大学南威尔士化合物半导体集群将获得 49 万英镑，以加强先进半导体晶圆分析设备（ASemi WAC）的研究。ASemi WAC 能够在制造过程中分析整个 8 英寸晶圆，而不会对结构和成分造成损坏，可以为英国半导体行业提供急需的研发和创新能力。ASemi WAC 设施将于 2024 年年末上线。该项目属于整体项目的一部分，整体项目将在斯旺西大学集成半导体材料中心创建一个国家级半导体分析系统。

（2）提高可持续制造和循环能力

亨利·罗伊斯研究所和谢菲尔德大学将获得 51 万英镑的资助，用于开发下一代放电等离子体烧结（SPS）/场辅助烧结技术（FAST）来支撑基础产业。该项投资将与来自谢菲尔德大学和思克莱德大学等机构的投资一起，使用先进装置替代现有 SPS/FAST 设备。新设备将能够进行新型热处理工艺，将粉末等松散材料置于高温和高压下，制成新的固体坯料。从而使金属废料流能够加工成坯料，用于随后的锻造和轧制。

亨利·罗伊斯研究所正在支持一系列产业和应用。循环性和资源效率的提高为供应链韧性提供了新的途径，设备功能的提高也允许研究金属系统之外的替代关键材料和矿物，例如通过 FAST/SPS 回收稀土磁体或加工用于电信应用的新型功能陶瓷。

⁵ Million Pound Boost For Materials Innovation.
<https://www.royce.ac.uk/news/million-pound-boost-for-materials-innovation/>

英加强资源节约型和生物基材料与制造

4月2日，英国创新机构（Innovate UK）与生物技术和生物科学研究理事会（BBSRC）共同发布资助项目，以推进英国的材料和制造业实现净零排放和资源高效利用的目标。每个项目的金额将在 50 万-100 万英镑之间，项目主题共分为以下两类⁶。

（1）资源节约型材料和制造

项目须专注于以下五个领域中的两个及以上：①面向未来经济的材料：开发功能材料以及用于减少产品排放、能耗和成本的先进材料；②智能设计：开发高效的设计方法以及以资源效率和全生命周期价值最大化为目标的设计；③韧性供应链：实现完整供应链的可见性，开发可持续原料以及废物流和排放流协同管理；④世界级生产：实现韧性生产能力、材料使用最小化以及提高生产率和适应性；⑤更长的使用和再利用时间：实现材料浪费最小化和完全可追溯性，并提供新的再制造服务。

（2）可持续的生物基材料和生物制造

项目须专注于以下五个领域中的一个及以上：①面向未来经济的材料：使用生物系统改善现有生物原料的提取，或开发传统制造工艺的替代品；②智能设计：利用生物技术设计和开发先进的生物产品；③韧性供应链：发现并优化用于生物制造的酶和生物体，或使用生物技术从废物流中获得收益；④世界级生产：在规模上提高可制造性和一致性，或在多个制造业和部门中推进生物技术的开发和采用；⑤更长的使用和再利用时间：通过应用生物技术提高产品的可持续性。

⁶ Resource-efficient or bio-based materials and manufacturing, FS 2.
<https://apply-for-innovation-funding.service.gov.uk/competition/1880/overview/3074d518-8839-456c-9472-c5d5971b2043#scope>

英报告认为制造业对经济的影响力被严重低估

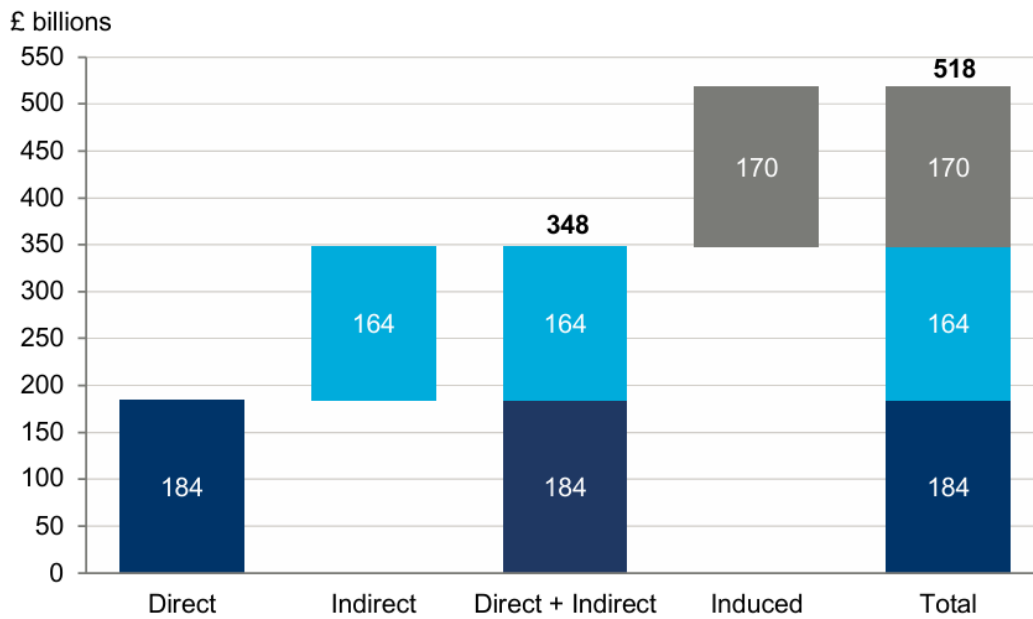
编者按：4月，牛津经济研究院和英国制造技术协会（MTA）共同发布了题为《英国制造业的真正影响》的研究报告⁷。报告认为，制造业对英国经济的影响力被严重低估，因此应该正视英国制造业存在的问题，充分发挥制造业对推动经济社会发展的潜力。以下是该报告简要编译。

制造业是英国经济版图的重要组成部分，直接雇佣人数超过260万人，2022年GDP总额约为1840亿英镑。这意味着当年制造业直接贡献了8%的GDP和7%的就业。作为高生产力部门，制造业是全英国高薪工作重要来源，制造业工资中位数比英国平均水平高出11%。

除了直接影响外，制造业还为英国经济发展提供了间接影响。制造商从供应商处的采购会对英国经济产生间接影响，波及所有部门。2022年制造业为英国经济提供的间接影响为1640亿英镑，制造业直接+间接影响约为3480亿英镑（约占英国经济15%）和500万个就业岗位（约占英国总就业岗位14%）。

制造业对英国经济的贡献还包括“扩散”影响，当制造商及其供应商雇佣的员工将工资所得用于更广泛的经济中时就会产生“扩散”影响。2022年制造业对英国经济的扩散影响约为1700亿英镑，制造业对英国经济的总影响约为5180亿英镑，具体参见下图。据此估算，制造业每为英国经济贡献100英镑的直接影响，将实际贡献180英镑的间接+扩散影响。基于同样道理，制造业本身的每一个工作岗位将导致英国经济的其他部门获得1.8个工作岗位。

⁷ Report reveals ‘True Impact’ of manufacturing is nearly a quarter of UK GDP.
<https://additivemanufacturinguk.org.uk/report-reveals-true-impact-of-manufacturing-is-nearly-a-quarter-of-uk-gdp/>



英国制造业为经济带来的影响

除了支持经济发展和就业之外，制造业在其他方面对英国经济也做出了重要贡献。首先，制造业在全英国研发支出中所占比例较高，2022 年 47% 的企业研发投入来自于制造企业，这些研发投入可以产生超出单个企业或部门的更广泛效益。此外，制造业的重出口导向意味着它是出口收入的重要来源，2022 年制成品占英国商品和服务出口额的 34.5%。

首个定制化颅骨植入解决方案获 FDA 上市许可

4 月 15 日，3D Systems 公司宣布，其开发的个性化颅骨植入物解决方案——VSP PEEK 颅骨植入物已获得美国食品和药物管理局（FDA）上市批准许可，解决方案包括分割和 3D 建模软件、3D Systems EXT 220 MED 3D 打印机、赢创（Evonik）VESTAKEEP® i4 3DF PEEK（聚醚醚酮）和生产流程等⁸。

VSP PEEK 颅骨植入物是首款经 FDA 批准的聚醚醚酮增材制造植

⁸ 3D Systems Announces FDA Clearance for World's First 3D-Printed PEEK Cranial Implants.
<https://www.3dsystems.com/press-releases/3d-systems-announces-fda-clearance-worlds-first-3d-printed-peek-cranial-implants>

入物，用于颅骨成形术以修复颅骨缺陷。这种植入式高性能聚合物材料由于其卓越的性能和与人体骨骼密切相关的机械性能，因而已大量进入临床应用。该材料还具有优异的生物相容性、耐体液性以及较宽温度范围内的稳定性，其固有的射线可透性确保对医学成像的干扰最小，从而有助于更清晰地评估手术部位和植入物的完整性。

与传统加工生产的类似植入物相比，VSP PEEK 颅骨植入物解决方案具备较好的经济性：使用的植入式 PEEK 等昂贵原材料使用量减少了 85%，且基于洁净室的架构与简化的后处理工作流程相结合，可以加快周转速度，同时控制总体成本。

VSP PEEK 颅骨植入物解决方案创新性较强，可以改善患者护理并扩大精确、个性化神经外科手术的可能性，无菌环境设计的打印技术与 PEEK 的机械特性相结合，将彻底改变颅骨外科手术领域。

目前，瑞士巴塞尔大学医院、奥地利萨尔茨堡大学医院和以色列特拉维夫苏拉斯基医疗中心已经利用 VSP PEEK 颅骨植入物成功实施了近 40 例颅骨成形术。未来颅骨植入物将解决广泛的应用问题，包括创伤、缺陷和重建等。

IMT 相变过程中衬底活动新发现

VO₂ 是一种典型的热致相变材料,在相变时发生可逆的绝缘体-金属相变 (IMT),同时伴随光学和电学性能的突变。因此,VO₂ 在光电开关、红外隐身、温度/应力传感器等领域有着广泛的应用前景。宾夕法尼亚州立大学 Venkatraman Gopalan 教授的科研团队,发现在 VO₂ 的 IMT 过程中,二氧化钛衬底的活性层会发生相似活动⁹。这表明衬底可以在半导体工艺中发挥积极作用,对设计未来的材料和器件具有重要意义。

研究人员使用阿贡国家实验室的先进光子源对 IMT 过程中材料的时空响应进行绘制,发现 VO₂ 薄膜通道在 IMT 期间凸出,这与预期的收缩相反。此外,基底中微米厚的近端层也随着膜中的 IMT 过程而相应地凸起,也与预期不同。研究人员认为这是由于在 IMT 过程中,中性氧空位中含有两个电子的电荷得到释放,而留下的氧空位带电并膨胀,从而导致器件也随之膨胀。

上述研究工作发表在 *Advanced Materials* (文章标题: In-Operando Spatiotemporal Imaging of Coupled Film-Substrate Elastodynamics During an Insulator-to-Metal Transition)。

可生物降解纤维素气凝胶的增材制造技术

超轻、隔热、可生物降解的纤维素气凝胶用途广泛。瑞士联邦材料科学与技术研究所 (Empa) 成功地将天然材料 3D 打印成复杂的形状,可用作微电子的精密绝缘材料或个性化医疗植入物。¹⁰

墨水的流动特性在 3D 打印中至关重要,必须具有足够的粘性才能

⁹ 'Surprising' hidden activity of semiconductor material spotted by researchers.

<https://www.psu.edu/news/materials-research-institute/story/surprising-hidden-activity-semiconductor-material-spotted/>

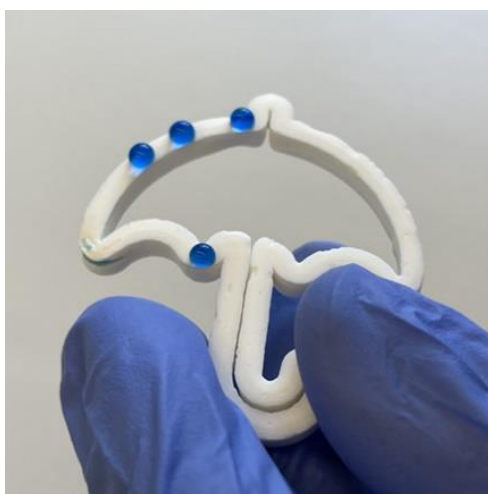
¹⁰ Airy cellulose from a 3D printer.

<https://www.empa.ch/web/s604/3d-printed-cellulose-aerogel>

在凝固前保持三维形状，还应在压力下液化以便能够流过喷嘴。研究人员制备出两种类型的纳米颗粒——纤维素纳米晶体和纤维素纳米纤维，来生产生物气凝胶的 3D 打印“墨水”。

长纳米纤维使墨水具有高粘度，短纳米晶体确保具有剪切稀化效果，使其在挤出过程中更容易流动。为了 3D 打印后将墨水变成气凝胶，研究人员首先用乙醇替换孔隙溶剂水，然后用空气取代乙醇，同时保持了真实的形状。这种高孔隙率和小孔径使气凝胶成为非常有效的隔热材料。

实验结果显示，3D 打印的纤维素气凝胶具有各向异性，意味着它的强度和导热性与方向有关。此外，这种新型气凝胶由纯纤维素组成，与活组织和活细胞具有生物相容性，其多孔结构能够吸收药物，然后长期释放到体内，在生物医药方面具有潜在应用。其另一个优势是，打印出的气凝胶在初次干燥后可以多次再水化和再干燥，而不会失去形状或多孔结构。



新型气凝胶多次再水化和干燥仍保持形状

上述研究工作发表在 *Advanced Science*（文章标题：Additive Manufacturing of Nanocellulose Aerogels with Structure-Oriented Thermal, Mechanical, and Biological Properties）。

贫水溶剂四聚体自组装可捕获双倍的碳

碳捕获、利用和封存是应对气候变化的一项关键技术，但成本较高。碳捕获液体或贫水溶剂可以从燃煤发电厂、造纸厂等排放源中有效捕获二氧化碳分子，是颇具前途的碳捕获材料。美国西北太平洋国家实验室使用分析化学工具对单组分贫水溶剂进行实验和建模综合研究，发现二氧化碳的捕获伴随着溶液中反胶束状四聚团簇的自组装¹¹。

起初研究人员试图将实验数据与两个溶剂分子的模型进行拟合，但拟合效果不佳。当使用含有四个溶剂分子模型时，实验数据与模型就很匹配。因为这种灵活的结构会发生一系列转变，以容纳进入的二氧化碳分子，二氧化碳最终到达团簇的核心。这类似于一种活性口袋（active site pocket），团簇的整体结构和相互作用与蛋白质相似。一旦两个二氧化碳分子都进入团簇内，它们就能相互反应，生成不同的碳基分子，如氨基甲酸、氨基甲酸酐和烷氧基氨基甲酸酐等，从而扩大二氧化碳的捕获。通过将两个二氧化碳基分子结合在一起，可以将捕获系统的储存能力提高一倍，为具有更高二氧化碳储存能力的材料开辟道路。

上述研究工作发表在 *Nature Chemistry*（文章标题：Tetrameric self-assembling of water-lean solvents enables carbamate anhydride-based CO₂ capture chemistry）。

兼具韧性和生物降解性的下一代聚乳酸生物塑料

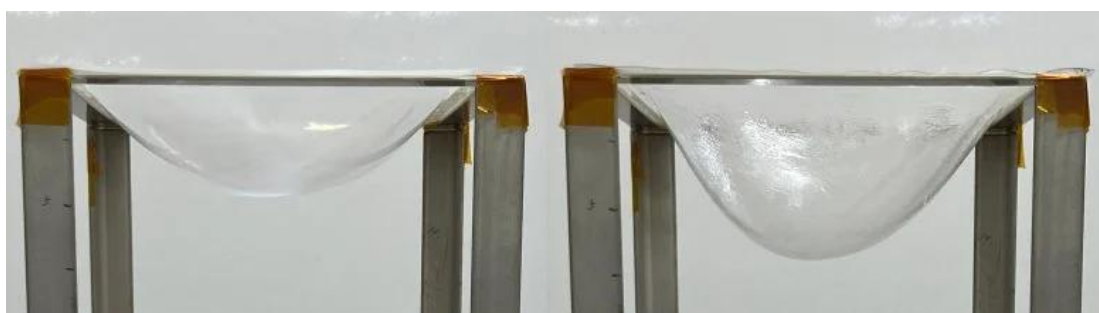
工程细菌可以产生一种塑料改性剂，使可再生来源的塑料更易于加工、更耐断裂和具有高度可生物降解性。日本神户大学、可生物降解聚合物制造公司 Kaneka Corporation 将聚乳酸与另一种生物塑料 LAHB（乳酸和 3-羟基丁酸的共聚物）混合，该混合物融合了聚羟基丁酸的天然生物降解性和聚乳酸的实用性等优异性能。在聚乳酸中添加少量 LAHB 作

¹¹ Finding New Chemistry to Capture Double the Carbon.
<https://www.pnnl.gov/news-media/finding-new-chemistry-capture-double-carbon>

为添加剂可显著提高聚乳酸的伸长率，并促进聚乳酸在海水中的生物降解。LAHB 作为一种“改性剂”，消除了聚乳酸在“韧性”和“生物降解”方面的弱点。然而，为了生产 LAHB，需要通过添加新基因和删除干扰基因，系统地操纵生物体的基因组，从而设计出一种自然产生前体的细菌菌株¹²。

研究人员创建了一个细菌塑料工厂，仅使用葡萄糖作为原料，就能大量生产 LAHB 链。研究表明，通过修改基因组可以控制 LAHB 链的长度，从而控制塑料的性能，生产出比传统方法长十倍的 LAHB 链，称为“超高分子量 LAHB”。

将超高分子量 LAHB 添加到聚乳酸中可以创造出具有优异特性的材料，由此产生的高度透明的塑料具有比纯聚乳酸更好的成型性和更强的抗冲击性，并且还可以一周内在海水中生物降解。



加热条件下添加 LAHB 的聚乳酸（左）下垂程度远低于纯聚乳酸（右）

上述研究工作发表在 *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*（文章标题：Microbial platform for tailor-made production of biodegradable polylactide modifier: Ultra-high-molecular weight lactate-based polyester LAHB）。

¹² “強靱性”と“生分解性”を両立した次世代型ポリ乳酸の大量生産に成功.
<https://www.kobe-u.ac.jp/ja/news/article/20240402-65194/>

机器学习模型用于表征材料表面

设计和开发具有优越性能的新型材料需要对其原子和电子结构进行全面分析。电离能(ionization potential, IP)、电子亲和能(electron affinity, EA)等电子能参数可揭示半导体、绝缘体和电介质表面电子能带结构的重要信息。准确估算此类非金属材料的电离能、电子亲和能,可以揭示其作为光敏设备及光电器件的功能表/界面的适用性。这些性质的传统计算往往较为耗时,且量化有限,急需采用高效的方法。

日本东京工业大学 Fumiyasu Oba 团队利用人工神经网络开发回归模型,将“原子位置平滑重叠”(smooth overlap of atom positions, SOAPs)作为输入数据,结合晶体结构和表面终止面相关信息,准确有效地预测了二元氧化物表面的电离能、电子亲和能。此外,该模型还可用于三元氧化物相关性能的预测。

上述研究工作发表在 *J. Am. Chem. Soc.* (文章标题: Band Alignment of Oxides by Learnable Structural-Descriptor-Aided Neural Network and Transfer Learning)。

石墨烯旗舰 2D-PRINTABLE 项目取得新成就

欧盟石墨烯旗舰计划 2D-PRINTABLE 项目在开发适合印刷电子产品的新型二维材料方面,取得了两项里程碑式的新成就¹³。

(1) 实现新型二维材料的理论鉴定

利用范德华密度泛函理论进行严格的计算分析,确定了为印刷电子应用量身定制的可剥离材料的核心组合。利用领先数据库中的实验数据,项目组扩展了二维材料组合,并预测了机械强度、电荷迁移率和光学行为等关键特性。

¹³ Progress Update from 2D-PRINTABLE.
<https://graphene-flagship.eu/materials/news/progress-update-from-2d-printable/>

(2) 成功合成多种新的层状晶体

项目组与捷克布拉格化工大学合作，成功合成高介电常数电绝缘体、半导体、金属化合物等多种二维材料，并扩大氢化硼晶体碗和钼、二硒化钨等单晶的生产规模，以满足工业需求。

含砷晶体中发现“混合拓扑”新物态

美国普林斯顿大学 M. Zahid Hasan 团队在含砷晶体中观察到一种称为“混合拓扑”的新型量子效应，为下一代量子科学和工程开发高效材料和技术开辟了一系列新的可能性¹⁴。

研究团队使用扫描隧道显微镜，结合用于确定分子和原子中电子相对能量的光发射光谱法，共同研究新的量子态，并对其进行成像。该状态混合了边缘态和表面态这两种形式的拓扑量子行为。边缘态和表面态作为不同类型的二维电子系统，虽然均多次被实验观测，但科学界从未在同一材料中观察到二者混合形成的新物质形态。这次实验也是首次在含砷晶体中发现拓扑效应。

上述研究工作发表在 *Nature* (文章标题: A hybrid topological quantum state in an elemental solid)。

¹⁴ Physicists discover a novel quantum state in an elemental solid.
<https://research.princeton.edu/news/physicists-discover-novel-quantum-state-elemental-solid>

