

新材料监测快报

MATERIALS NEWSLETTER

2024.04

本期要目

- 美发布《国家微电子研究战略》
- 美成立国家实验室联盟推动氢产业发展
- 美 DOC 斥资 85 亿美元加强半导体供应链
- 美 DOE 投资 6200 万美元降低电池回收成本
- 欧发布 PET 循环利用分析报告
- 人工智能、汽车和工业市场刺激半导体芯片需求反弹
- 瑞典钢铁推出全球首款无排放钢粉

中国新材料产业技术创新平台

目 录

专 题

美发布《国家微电子研究战略》	1
----------------------	---

战略规划

美成立国家实验室联盟推动氢产业发展	5
-------------------------	---

项目资助

美 DOC 斥资 85 亿美元加强半导体供应链	6
-------------------------------	---

英投资 6300 万英镑打造世界级研究中心	7
-----------------------------	---

美 DOE 投资 6200 万美元降低电池回收成本	8
---------------------------------	---

行业观察

欧发布 PET 循环利用分析报告	10
------------------------	----

人工智能、汽车和工业市场刺激半导体芯片需求反弹	12
-------------------------------	----

研究进展

AI 模型助力自主材料科研实现新飞跃	13
--------------------------	----

从农业废弃物中提取可持续塑料	14
----------------------	----

量子计算重大进展：“近乎完美”地控制单原子	15
-----------------------------	----

瑞典钢铁推出全球首款无排放钢粉	16
-----------------------	----

大规模计算和化学剥离方法结合制备二维材料	16
----------------------------	----

美发布《国家微电子研究战略》

编者按：3月15日，美国白宫科技政策办公室发布《国家微电子研究战略》（*National Strategy on Microelectronics Research*）¹。该战略由美国国家科学技术委员会微电子领导小组委员会制定，提出了加速研究进展、建设基础设施、培养劳动力和构建创新生态系统等未来五年微电子研究四项发展目标，并阐述了相关的关键需求和行动方案，为联邦部门与机构、学术界、产业界、非盈利组织以及国际盟友和合作伙伴等提供指导框架。本期专题对前两项目标的关键需求做了编译。

目标一：推动并加速未来微电子技术研究进展

（1）加速研发可提供新功能或功能增强的材料

关键研发需求包括：①新兴有机和无机材料，如二维材料；量子材料；用于高效电子产品和极端环境的宽带隙及超宽带隙材料；优化高带宽互连的材料；超高频操作（光学、电气和机电）材料；实现非冯·诺依曼架构的材料；生物-非生物混合系统等。②可以无缝集成到现有工艺流程中的材料。③改进现有块状衬底材料，加快新衬底材料的开发和应用。④规范半导体材料数据基础设施。⑤新的建模、表征和计量方法。⑥新型和新兴材料的制造合成工艺及生产工具研发。⑦新的材料测量方法和标准，确保纯度、物理特性和来源。⑧在全生命周期内提高加工、制造和供应链的可持续性与循环性。⑨可兼容非常规材料或工艺的制造设施。⑩新的工艺设施，对新型或非常规材料的工艺进行验证放大。

（2）提高电路设计、模拟和仿真工具的能力

提高数字工具能力的战略方法包括：①创建、开发和提供广泛可用的工具。②进一步将人工智能和机器学习以及基于物理的方法集成到电

¹ White House Office of Science and Technology Policy Releases National Strategy on Microelectronics Research. <https://www.whitehouse.gov/ostp/news-updates/2024/03/15/white-house-office-of-science-and-technology-policy-releases-national-strategy-on-microelectronics-research/>

子设计自动化工具中。③开发高级综合工具以及电子设计自动化系统与流程。④改进材料和器件验证方法，推进材料、组件和电路特性的测量。⑤改进“设计技术协同优化”(DTCO)和“系统技术协同优化”(STCO)方法及平台。⑥推进开发形式化和端到端验证方法。

(3) 开发未来系统所需的各种强大处理架构和相关硬件

关键研发需求包括：①深入理解对新架构实现最佳性能所需的算法、编程模型和编译器。②提高器件可编程性和可编程抽象性。③优化新架构的制造和设计能力。④新型架构，可实现新的集成电路设计以及非冯·诺依曼组件与传统计算架构的优化集成。⑤人工智能与机器学习方法，解决异构集成逻辑存储器的高数据速率和大数据量相关挑战。⑥量子信息科学研究，如量子计算、量子网络和量子传感。⑦量子支持技术，如可与量子系统对接的低温电子学和光子学。⑧用于大型传感器网络提取和提炼信息的高能效处理架构。⑨极端环境中传感、信号处理和计算应用的设计流程与架构。⑩超越高性能计算的电路创新，满足能源、医疗健康、交通和通信等的需求。

(4) 开发先进封装和异构集成的工艺及计量

主要研究挑战包括：①用于衬底、封装/模塑和晶粒到晶粒(die to die)互连的新材料。②机电一体化、机器视觉和机器人技术等进步。③可提高能效和密度的互连新技术。④新的高速检测及监控方法。⑤增强的工具计量和检测能力。⑥跨越多种长度尺度(2D和3D)和物理特性的新型计量技术。⑦改善整个系统的热、机械和电磁行为的物理建模，以及新的高分辨率方法。⑧电路、架构和封装的集成设计工具和方法。

(5) 优先考虑硬件完整性和安全性

研发需求包括：①准确的威胁模型。②完整性和安全性的高级概念模型。③新的自动化和支持结构。④协同设计卓越中心。⑤保护数据和减少硬件信任的新方法，如同态加密、加密存储系统、安全计算、隔离加密和多方计算等。⑥确保集成电路IP来源和完整性的方法。⑦用于评

估和基准测量性能的标准测试工件、方法和分析。⑧验证电路硬件的高通量测量和检测系统。

(6) 投资研发制造工具和工艺，将创新成果转化为生产

主要研发需求包括：①超精密表征、先进光刻和计量工具以及更好的质量控制，包括亚 10 nm 的精确参考结构。②新的图案化方法，包括“减法式”和“加法式”，支持 3D 架构、大面积衬底以及高混合、小批量制造电路和封装等新兴需求。③改进区域选择性原子层沉积和蚀刻等工艺。④高通量实验和建模方法，结合光学、电子和扫描探针显微镜检测工具的新功能。⑤混合计量方法，将来自多个测量工具的数据与新的机器学习方法相结合，实现过程优化。⑥基于人工智能/机器学习/物理的集成模型，能够消化晶圆厂的实时过程数据，进行高级预测分析，用于测量和提高产量并实现晶圆厂虚拟化。⑦进一步开发和使用原位计量。⑧快速、高分辨率、无损技术。⑨表面、埋藏特征、界面和器件的物理特性表征。⑩将第一性原理材料研究与高性能计算相结合。⑪数字孪生应用的进步。⑫提高能源和资源效率，并在制造过程中使用环境友好的化学品。

目标二：支持、建立和连接微电子基础设施

(1) 支持设备研发制造和表征设施的联合网络

主要研发需求包括：①对现有设施进行差距分析，努力解决现有设施内的能力差距，并在必要时建立新能力。②定期更新共享研究资源的可搜索公共注册表。③支持先进的制造技术，能够将新兴的低维纳米材料和纳米器件以及其他“超越摩尔”解决方案整合到设计中；以及支持采用成熟和最先进技术制造电路，用于中小型原型设计。④必要时与盟国和伙伴国的国际实体达成协议，为美国研究人员提供使用尖端制造设施的机会，弥合当前美国国内差距。⑤基于侧重满足广泛和多样化用户群需求的影响指标构建融资模式，并根据需要提供持续资助。⑥激励培训和教育的成功衡量标准及资助机制。⑦减少设施准入障碍。⑧FAIR(可

查找、可访问、可互操作和可重用) 数据管理系统。

(2) 为学术和小企业提供更灵活的设计工具和晶圆级制造资源

主要研发需求包括：①灵活且经济实惠的模型，包括成熟节点的潜在开源功能。②与电子设计自动化供应商建立更广泛的合作伙伴关系，显著降低成本。③适用于成熟和新兴技术的可访问设计工具和工具环境，包括基于云的安全解决方案。④标准化的许可协议和保密协议。⑤访问建模和仿真所需的高性能计算资源，支持在产生原型成本之前评估电路性能。⑥增加制造设施的多项目晶圆产能，并以小规模制造能力作为补充。⑦建立并提供具有标准接口的标准“即插即用”小芯片库，以及这些接口的开源参考实施方案。⑧先进封装研究设施的创建和访问，加速先进封装、异构集成和小芯片生态系统的发展。

(3) 促进关键功能材料的研究获取

主要研究需求包括：①与美国的材料供应商合作，确保维持和扩大国内产能。②针对处于材料开发前沿的美国研究机构，推动其向美国国内研究人员提供新型材料。需要产业界参与的重点研究资助可用于建立合作关系。③投资传统和创新方法，包括材料基因组计划方法。

(4) 扩大对建模和仿真高级网络基础设施的访问

关键行动包括：①提供对一流计算和其他网络基础设施的访问。②促进用户、系统开发人员以及计量和原型设备之间的密切协调。③与实体基础设施及其产出建立密切联系。

(5) 支持先进研发和原型设计，弥合实验室与晶圆厂之间的差距

关键行动包括：①对现有设施进行差距分析，努力解决现有设施内的能力差距，并在必要时建立新能力，以全面解决前述“目标一”确定的每个研发优先领域的进一步发展。②必要时与盟国和伙伴国的国际实体签订协议，为美国研究人员提供使用尖端制造设施的机会，弥合当前的国内差距并促进合作。③开发“从晶圆厂到实验室”的生态系统。④减少设施使用的障碍。

(6) 支持先进组装、封装和测试

主要行动包括：①建立并密切协调 DARPA “下一代微系统制造” (NGMM) 和 NIST “国家先进封装制造项目” (NAPMP) 的研发及中试生产设施，确保相辅相成、相互支持。②开发整个生态系统合作并充分利用互补性工作的机会，实现装配设计套件、封装相关设计工具和其他数字资源的安全共享。③促进封装研发社区获得小芯片。④制定提高先进封装设备的自动化水平和性能的项目计划，使得美国国内封装具有成本竞争力。⑤致力开发新衬底材料和相关制造技术，支持密度和信号性能的改进。⑥支持行业在适当的时候制定和引入小芯片和先进封装标准。⑦支持组件、集成方案和测试方法的开发和验证。

战略规划

美成立国家实验室联盟推动氢产业发展

3月，美国成立了国家实验室卷对卷压印工艺 (R2R) 联盟。联盟由美国国家可再生能源实验室 (NREL) 领导，成员包括阿贡国家实验室 (ANL)、橡树岭国家实验室 (ORNL)、劳伦斯伯克利国家实验室 (LBNL) 和桑迪亚国家实验室 (SNL) 等²。

燃料电池和电解槽的高通量制造对于支持清洁氢技术的市场加速至关重要。卷对卷制造可以提高工艺效率和减少材料浪费以降低成本，但需要解决与材料合成、涂层、干燥和质量控制等相关挑战。

联盟将致力于推进氢燃料电池和电解槽的高效、高通量和高质量制造工艺研究与开发，降低高性能、耐用燃料电池和电解槽系统成本，推动美国国内相关制造业的发展。每个国家实验室分别专注于不同科学领域：材料规模量产科学 (ANL)、制造工艺科学 (SNL)、质量控制 (NREL)、表征 (LBNL)、高级计算 (SNL)、技术经济分析 (NREL)。

² DOE National Laboratory Consortium to Advance High-Volume Manufacturing of Critical Clean Hydrogen Technologies.
<https://www.energy.gov/eere/fuelcells/articles/doe-national-laboratory-consortium-advance-high-volume-manufacturing>

项目资助

美 DOC 斥资 85 亿美元加强半导体供应链

3 月 20 日，美国商务部（DOC）和英特尔公司达成一项不具约束力的初步条款备忘录³，并根据《芯片和科学法》（CHIPS）提供 85 亿美元的直接资金，以加强美国供应链，重新建立美国在半导体制造业的领导地位。

这是 DOC 发布的第四份初步条款备忘录公告。除了 85 亿美元的直接资金外，芯片计划办公室还将根据备忘录向英特尔提供高达 110 亿美元的贷款，并计划向美国财政部申请投资税收抵免，预计将达到符合要求的资本支出的 25%。这项拟议投资具体包括以下方面。

（1）亚利桑那州钱德勒

建造两个新的前沿逻辑晶圆厂，并对一个现有晶圆厂进行改造，预计将显著提高前沿逻辑芯片产能，包括 Intel 18A 的大规模美国国内生产。该公司将在亚利桑那州的工厂生产第一款 Intel 18A 产品，名为 Clearwater Forest。

（2）新墨西哥州里奥兰乔

将两个晶圆厂升级为先进封装设施，以填补美国国内半导体供应链中的重要缺口。当全面生产时，该工厂将成为美国最大的先进封装工厂。

（3）俄亥俄州新奥尔巴尼

建立一个新的区域芯片制造生态系统，以建设两个领先的逻辑晶圆厂为基础，扩大代工能力，并实现供应链多元化。

（4）俄勒冈州希尔斯伯勒

通过扩建和现代化技术开发设施，投资美国领先的开发中心，该设施将使用世界上第一台 High NA EUV 光刻设备。

³ Biden-Harris Administration Announces Preliminary Terms with Intel to Support Investment in U.S. Semiconductor Technology Leadership and Create Tens of Thousands of Jobs.
<https://www.commerce.gov/news/press-releases/2024/03/biden-harris-administration-announces-preliminary-terms-intel-support>

此外，备忘录还包括约 5000 万美元的专项资金，用于培养英特尔的半导体和建筑员工。英特尔已经与上述地区的教育机构进行了合作，以培养大量半导体相关技术人才。例如，与亚利桑那州马里科帕县社区学院合作，推出了第一个与英特尔员工导师合作的半导体技术培训项目；在新墨西哥州的五所学院和大学设立了奖学金，并通过投资、年度拨款等方式支持 STEAM 教育；资助了俄亥俄州 80 多所高等教育机构，包括社区学院和大学等。

英投资 6300 万英镑打造世界级研究中心

3 月，英国研究合作投资基金（UKRPIF）向克兰菲尔德大学、赫尔大学、伦敦国王学院和诺丁汉大学提供了总额为 6300 万英镑的资助，支持这些大学在氢能航空、临床医疗、个性化医疗、新能源车辆等领域打造世界级研究中心⁴。

其中，克兰菲尔德大学将获得 2300 万英镑资助，在克兰菲尔德机场建立世界级氢能航空生态系统，设计、验证和交付氢能绿色航空装备，并制定新的安全和环境政策，帮助英国在 2050 年前接近净零航空。

诺丁汉大学将获得 1400 万英镑资助以打造零碳转化中心，测试以液氢和其他绿色燃料为燃料的低温电机和系统，并针对航空、海运、卡车、越野、列车等特殊应用开发颠覆性动力解决方案。

⁴ Four new research centres put icing on cake of scheme's success.
<https://www.ukri.org/news/four-new-research-centres-put-icing-on-cake-of-schemes-success/>

美 DOE 投资 6200 万美元降低电池回收成本

3 月 28 日，美国能源部（DOE）宣布为《两党基础设施法》资助的 17 个项目提供 6200 万美元，以增加消费者对电池回收的参与力度，提高电池回收的经济性，并支持建立安全的关键材料美国国内供应链⁵。公告包括三个主题。

（1）扩大对消费电子产品回收的参与度

通过电子垃圾收集活动、学生教育和外联活动，开发网络教育平台等四个项目，增加报废消费电子产品和独立电池的回收效果，总资金为 1440 万美元。

（2）提高消费电子电池回收的经济性

通过人工智能和自动分拣等创新、经济的方法，扩大市场需求，以更好地回收消费电子电池。总资金为 4010 万美元，共选择了七个项目，具体研究内容见下表。

	领衔机构	研究内容
1	AMP Robotics 公司	通过利用人工智能和自动分拣技术，建立一套分拣流程，效率比现有技术至少高出 25%。并通过技术经济和生命周期评估来验证其对环境和社会的影响。
2	阿贡国家实验室	利用相变材料和聚合物气凝胶的组合来开发阻燃高绝缘包装的解决方案，开发安全切碎或自动拆卸的设备，并利用相关工具分拣出 LiCoO ₂ 。
3	Expost 技术公司	开发先进的移动机械系统，将集成零排放切碎和提取技术，以消除电池的电化学和化学危害，降低运输过程中的事故风险。
4	MOLG 公司	通过部署五个机器人单元来改进报废笔记本电脑电池的拆卸过程，以目前 50% 的成本拆卸电池中前十的部件。
5	Li 工业公司	开发自动化、集成的分拣和预处理解决方案，通过将所有分拣和预处理步骤整合在一个设施中，以降低运输成本。
6	UHV 技术公司	制定一套完整的工业设施计划，实现分拣和回收电池，包括计算废物流中电池的类型和数量，对其进行分类，并从中回收 95% 的电池；优化分拣机和人工智能算法；建立 TEA/LCA 和供应链模型等。

⁵ Biden-Harris Administration Announces \$62 Million to Lower Battery Recycling Costs Across the Nation. <https://www.energy.gov/articles/biden-harris-administration-announces-62-million-lower-battery-recycling-costs-across>

7	反应工程国际公司	开发清洁且价格合理的低温热方法，对报废锂离子电池进行预处理。将在当地社区建造并演示一个生产效率为 20 kg/h 的中试规模连续系统。
---	----------	---

(3) 制定收集消费类电子产品电池的计划

该主题总资金为 720 万美元，共选择了六个项目，以协助美国各州和地方政府启动或加强电池收集、回收和再处理。具体方法包括电池收集计划以及部署电池存储和分拣设施等。例如，明尼苏达州污染控制局为当地电池收集项目提供灭火用品和安全的室内外储存；纽约市卫生部计划在纽约市的 5 个行政区举办至少 200 次移动电池收集活动等。

欧发布 PET 循环利用分析报告

3 月，欧洲塑料回收商协会、Petcore 欧洲等机构联合发布《欧洲的 PET 市场：现状》报告。报告指出，尽管 2022 年 PET 和 rPET（回收 PET）的价值链极端波动，但原始市场和回收市场的需求显示出行业已经恢复到疫情前的水平⁶。

（1）2022 年 PET 回收率增至 60%

2022 年，欧洲市场上的瓶子、托盘片材和软包装等共使用了 500 万吨 PET。其中，300 万吨 PET 被回收，回收率达到 60%。回收的 PET 包装中绝大部分是瓶子，共计 280 万吨。

PET 回收主要是通过欧洲各地的回收系统，包括路边拾取、回收点、带到站点和存款返还计划（Deposit Return Scheme, DRS）等。2022 年，欧洲通过 DRS 实现了 30% 的瓶子回收量。除了实施新的 DRS 计划以外，欧洲还在努力加强其他现有系统。虽然大多数现有收集系统都仅针对 PET 瓶子，但 2022 年少数国家也对 PET 热塑托盘等进行了回收，其他 PET 包装计划在 2023 年进行收集。

在不断提高回收率和回收类型的基础上，2022 年欧洲还对近 270 万吨 PET 废弃物进行了分类回收。2022 年的分类回收率为 54%，比 2020 年略有提高。其中，饮料瓶的分类回收率为 75%。

（2）2022 年 rPET 颗粒挤出产能翻番达 140 万吨

2022 年欧洲用于薄片生产的 PET 机械回收产能为 300 万吨。德国的产能约为 63 万吨，占最大份额；其次是西班牙和葡萄牙，产能超过 50 万吨；然后是意大利、法国和英国。2022 年，从薄片生产 rPET 颗粒的挤出产能翻了一番，达到 140 万吨。

当前欧洲约 60% 的 rPET 颗粒生产商的挤出能力与薄片生产相结合，

⁶ PET on the road to circularity, but disparities are creating potholes.
<https://www.plasticsrecyclers.eu/news/pet-on-the-road-to-circularity-but-disparities-are-creating-potholes/>

同时拥有清洗和挤出生产线。减少原生聚合物消耗、包装废弃物最小化和瓶片竞争加剧的趋势，为托盘回收的发展提供了强劲动力。2022 年，欧洲托盘回收能力达到 57000 吨/年，预计 2025 年将超过 300000 吨/年。

（3）立法框架的发展：2022 年影响 PET 回收和 rPET 使用的新规则和条例

首先，欧盟成员国在实施《一次性塑料指令》方面取得了进展。欧盟委员会对《包装和包装废弃物指令》进行审查，并发布了一项新的法规提案——《包装和包装废弃物法规》。欧盟委员会于 2022 年 10 月推出新的《食品接触材料法规 2022/1616》，取代了 EC282/2008 号法规。

同时，根据欧盟“可持续和循环纺织品”战略，欧盟所有成员国拟议的纺织品强制性统一“纺织品生产者延伸责任计划”有望加快欧盟纺织品分类收集、分拣、再利用和再循环的发展。

（4）区域总回收能力达到短期目标，但区域差异较大

统计数据表明，欧洲现有的再循环能力足以满足短期目标的要求：达到《一次性塑料指令》规定的 2025 年强制再循环含量目标，大约需要 80 万吨 rPET。这是通过 PET 价值链对循环性的承诺和 2020 年以来的投资实现的，表明该行业在实现目标方面取得了积极进展，但国家层面的分析凸显了各国之间的明显差异。

一些成员国（特别是在东南部地区以及中欧和西欧的一些国家）的收集率和回收率远远低于欧洲平均水平，如果没有解决这一问题的行动计划，欧洲实现目标的能力将会受到挑战。

根据目前的《包装和包装废弃物法规》草案，要在 2040 年实现再生成分占 65% 的拟议目标，欧洲需要增加 350 万吨的产能。未来需要在整个价值链中开展合作和规划，提高收集、分拣和回收能力，从而满足对 rPET 供应链的更高需求。

人工智能、汽车和工业市场刺激半导体芯片需求反弹

半导体是关键的使用技术，有助于促进经济领域各种产品的创新。2022 年半导体芯片销售总额达到创纪录的 5741 亿美元，由于正常的市场周期性波动，2023 年芯片行业的全球收入下降了 8.2%，降至 5269 亿美元。然而，到 2023 年下半年，销售额出现了逐月和逐年持续增长，美国半导体产业协会认为这标志着本轮周期的开始⁷。

推动 2023 年下半年反弹的原因是汽车和工业领域销售额的增长，以及人工智能系统对一系列芯片需求的增长。从历史数据上看，PC/计算机和通信终端市场约占总体销售额的三分之二，汽车、工业和消费电子等行业占其余部分。但近年来，按终端市场划分的销售额发生了变化，根据世界半导体贸易统计组织（WSTS）发布的《2023 年半导体终端用途调查》报告，2023 年通信和 PC/计算机终端市场仍占半导体销售额的最大份额。其中，通信行业的销售额增加了 2%，而 PC/计算机的销售额下降了 1%；同时，汽车行业的芯片销售份额增长最大，成为第三大终端市场，参见下图。

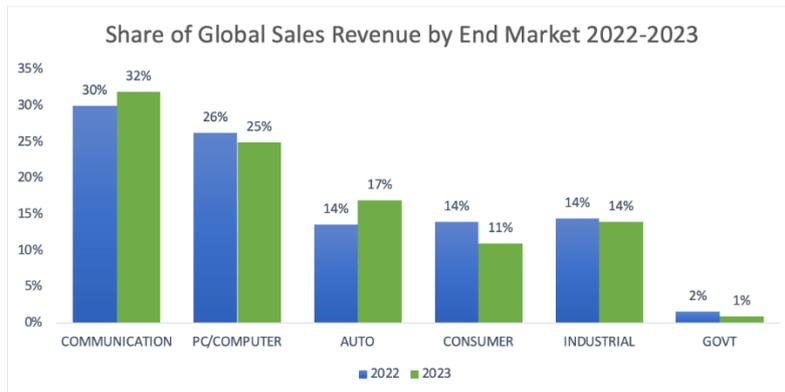


图 2022-2023 终端市场半导体销售额占比

未来十年汽车行业仍将是推动半导体需求的重要领域。汽车电气化、自动驾驶和互联互通方面的创新要求汽车中的芯片含量更高。目前的汽车（包括电动汽车）可配备 1000-3500 个半导体。随着消费者选择汽车

⁷ AI, Auto, Industrial Markets Spurred Rebound in Chip Demand During Second Half of 2023.
<https://www.semiconductors.org/ai-auto-industrial-markets-spurred-rebound-in-chip-demand-during-second-half-of-2023/>

时继续优先考虑汽车安全系统（如高级驾驶辅助系统）、汽车互联性和电气化等方面的进步，这一数字预计还会增长。尽管 2023 年全球半导体市场不景气，但对芯片的长期需求呈现强劲增长。事实上，WSTS 预计 2024 年的市场年增长率将达到两位数。

研究进展

AI 模型助力自主材料科研实现新飞跃

美国西北太平洋国家实验室 Steven Spurgeon 团队开发出一种新的人工智能模型，无需人工干预即可识别电子显微镜图片中的模式，实现更准确一致的材料科学研究。同时，该工作还消除了电子显微镜上进行自主实验的障碍⁸。

通常，为了训练人工智能模型能理解辐射损伤等场景，研究人员需制作一个手工标记的训练数据集，手动追踪电子显微镜图像上的辐射损伤区域。然而，手动标记数据集的效果并不理想。这不仅是一个耗时的过程，更重要的是，人工标记时容易出现不一致、不准确的情况，甚至同一样品不同电子显微镜图片会出现不一样的标注。

研究团队从 ResNet50 AI 模型和包含 10 万余张未标记电子显微镜图像的数据集（称为 MicroNet）开始，以此为基础，让模型将每个电子显微镜图像划分为一个小“碎片”（chips）网格，计算碎片之间的整体相似性，并分配彼此的相似性分数。然后，将彼此最相似的碎片组归为“群体”（communities），其代表图像中具有类似特征的部分。这样，可对图

⁸ New AI Model Is a Leap for Autonomous Materials Science.
<https://www.pnnl.gov/news-media/new-ai-model-leap-autonomous-materials-science>

像进行抽象化表示，且无需人工告诉模型需要寻找什么。

研究人员利用新模型来了解核反应堆等高辐射环境中使用的材料的辐射损伤。该模型能够准确地“切碎”退化区域，并将图像分类为代表不同辐射损伤程度的群体。该模型的优势在于，以非凡的一致性识别图像信息，生成标记数据的轮廓区域，且没有人工标记的反复无常的偏差。同时，该新模型扩展了西北太平洋国家实验室的创新型“人工智能引导透射电子显微镜”（AutoEM）项目平台的功能。

上述研究工作发表在 NeurIPS 2023 论文集（文章标题: Unsupervised segmentation of irradiation-induced order-disorder phase transitions in electron microscopy）。

从农业废弃物中提取可持续塑料

瑞士洛桑联邦理工学院 Jeremy Luterbacher 团队开发出一种新方法，利用从农业废弃物中提取的糖核来制造聚酰胺。该方法不仅以可再生资源为原料，而且能够实现可再生资源到塑料的高效转化，将环境影响降至最低⁹。

新的无催化剂工艺，可将木糖二甲基乙二酸酯（一种直接从木材或玉米棒等生物质中提取的稳定碳水化合物）转化为高质量的聚酰胺。整个工艺的原子效率高达 97%，几乎所有的起始材料都被用于最终产品，大大减少了浪费。同时，利用自然界常见且通常无毒的糖结构，替代化石基塑料中的芳香基团，新的生物基聚酰胺被赋予了可与化石基聚酰胺相媲美的高硬度、高强度和耐高温等特征，可广泛应用于汽车零件、消费品等各种领域。

更重要的是，新的生物基聚酰胺在多次机械循环中始终保持其完整性和高性能特征，表现出显著的弹性，这对于可持续材料的生命周期管

⁹ Sustainable plastics from agricultural waste.
<https://actu.epfl.ch/news/sustainable-plastics-from-agricultural-waste/>

理至关重要。当前，研究团队已经完成了该材料的技术-经济分析和生命周期评估，瑞士 Bloom Biorenewables 公司正在扩大生产并努力将其推向市场。

上述研究工作发表在 *Nature Sustainability* (文章标题: Performance polyamides built on a sustainable carbohydrate core)。

量子计算重大进展：“近乎完美”地控制单原子

目前尚未有一种方法能够实现制造量子计算机所需的量子比特规模和低错误率，包括在硅晶体中精确定位单个“杂质”原子，操纵其量子特性来形成量子比特。这种方法具有固有的低量子比特错误率，且以可扩展的硅微电子技术为基础。标准做法是使用磷作为杂质原子，但单个磷原子的定位成功率仅为 70%。而使用砷进行单原子制造也会遇到与磷同样的问题。

伦敦大学学院 Neil Curson 教授团队假设，砷原子比磷原子更合适，并以近乎完美的精度和可扩展的方式在硅中成功放置砷原子，首次展示了实现量子计算机所需精度和规模的新方法¹⁰。

研究人员使用一种能够识别和操纵单个原子的显微镜，将砷原子手工逐个精确地插入硅晶体中。通过重复该过程，构建了一个由单个砷原子组成的 2×2 阵列。据保守估计，新方法放置砷原子的准确率为 97%，且有望在短期内提高至 100%。该方法有望与当前的半导体加工工艺高度兼容，并有望在解决自动化和工业化等工程难题后实现集成。

上述研究工作发表在 *Advanced Materials* (文章标题: Single-Atom Control of Arsenic Incorporation in Silicon for High-Yield Artificial Lattice Fabrication)。

¹⁰ ‘Near perfect’ control of single atoms is major advance towards quantum computing.
<https://www.ucl.ac.uk/news/2024/mar/near-perfect-control-single-atoms-major-advance-towards-quantum-computing>

瑞典钢铁推出全球首款无排放钢粉

瑞典钢铁公司 (SSAB) 推出全球首款用于商业交付的无排放钢粉，由回收的 SSAB Zero[®] 钢制成，结合了 SSAB 高强度钢的特性和 3D 打印的轻结构。SSAB Zero[®] 是使用不含化石能源的回收废钢制成的钢材，炼钢过程几乎实现了零排放，于 2023 年投入商业使用¹¹。

2023 年 SSAB 向市场推出了首款传统钢粉 SSAB AM Engineering，现在又推出了 SSAB AM Tough Zero[®]，进一步扩大了产品组合。SSAB 还将以 HYBRIT 技术为基础，限量供应其独特的非化石能源钢粉。HYBRIT 技术不使用煤炭去除铁矿石中的氧气，而是使用非化石能源生产的氢气来制造用于钢铁生产的海绵铁，这样就避免了二氧化碳的排放，而副产品则是水。

为 3D 打印量身定做的熔融钢水会被高压雾化气体击碎，形成小球状液滴，然后凝固成钢粉。3D 打印高强度钢部件有助于减少原材料用量，减轻最终产品的重量并提高其功能性。这对于汽车或重型机械等试图减轻重量、提高性能并减少二氧化碳排放量的行业尤为重要。SSAB 已经向部分客户提供了非化石能源钢粉，2023 年 HT 激光公司 3D 打印了第一个适用于林业机械的非化石能源钢部件；2022 年 Triwa 推出了第一款使用非化石能源钢粉制造的手表消费品。

大规模计算和化学剥离方法结合制备二维材料

MAX 相材料是由三种元素组成的天然层状碳氮化物，M 为过渡金属，A 为主族元素，X 为碳或氮，通过选择性蚀刻掉 MAX 相中的 A 元素可得到 MXenes 二维材料。瑞典林雪平大学开发了一个理论模型，通过识别适于选择性蚀刻的三维材料，预测在酸性条件下通过化学剥离形

¹¹ SSAB launches world's first emission-free steel powder.
<https://www.ssab.com/en/news/2024/03/ssab-launches-worlds-first-emissionfree-steel-powder>

成的二维材料¹²。

研究人员通过国家超级计算机中心的大规模计算，从包含 66643 种三维材料的数据集中确定了 119 种潜在的可蚀刻候选材料。下一步是在实验室中创建材料，研究人员从母体材料 YRu_2Si_2 中去除了 Y 元素，得到二维 $\text{Ru}_2\text{Si}_x\text{O}_y$ 材料。实验室中创建的材料还需要进一步验证，研究人员使用扫描透射电子显微镜在原子水平上检测该材料及其结构，证实理论模型运行良好，所创建的材料由正确的原子组成。该理论模型能够付诸实践，从而将化学剥离的概念扩展到更多的材料家族，而不仅仅是 MXenes 材料，因此具有更广阔的化学应用空间。

上述研究工作发表在 *Science*（文章标题：Two-dimensional materials by large-scale computations and chemical exfoliation of layered solids）。

¹² A new world of 2D material is opening up.
<https://liu.se/en/news-item/ny-varld-av-2d-material-oppnas>

