

中国科学院国家科学图书馆

科学研究动态监测快报

2013年7月25日 第1期（总第1期）

基础前沿科学专辑

- ◇ 汤森路透发布《研究前沿 2013》
- ◇ 德国公布大型科研基础设施路线图
- ◇ 能源部宣布资助具成本竞争力的下一代高效照明
- ◇ 物理学对英国经济增长的重要性
- ◇ 德国科学家制造出磁单极子
- ◇ 稠密氢在高压下表现出多样性
- ◇ AFM 展示界面反应前后分子图像
- ◇ 拉曼成像分辨率突破 1nm
- ◇ 硼硅新结构有望成为锂离子电池材料
- ◇ 纳米粒子开启清洁能源新方案
- ◇ 锂电池：利用蟹壳的纳米结构制作电极材料
- ◇ 微波波谱区分手性化合物
- ◇ 谷歌与 NASA 联合打造量子计算机实验室

中国科学院发展规划局

中国科学院国家科学图书馆

中国科学院国家科学图书馆

北京市海淀区北四环西路 33 号

邮编：100190

电话：82626611-6161

电子邮件：lizexia@mail.las.ac.cn

目 录

专题报道

汤森路透发布《研究前沿 2013》 1

科技战略

德国公布大型科研基础设施路线图 7

项目资助

能源部宣布资助具成本竞争力的下一代高效照明 7

学科评估

物理学对英国经济增长的重要性 9

研究进展

德国科学家制造出磁单极子 10

稠密氢在高压下表现出多样性 10

AFM 展示界面反应前后分子图像 11

拉曼成像分辨率突破 1nm 12

硼硅新结构有望成为锂离子电池材料 13

纳米粒子开启清洁能源新方案 13

锂电池：利用蟹壳的纳米结构制作电极材料 14

微波波谱区分手性化合物 15

快讯

谷歌与 NASA 联合打造量子计算机实验室 16

汤森路透发布《研究前沿 2013》

2013年4月，汤森路透发布《研究前沿 2013 报告》。报告列出了 2013 年 10 大科学与社会科学领域中的 TOP 10 研究前沿。这里我们选择编译了四个基础前沿科学方向的研究前沿。

1、数学、计算机科学与工程学

表 1.1 数学、计算机科学与工程学领域研究前沿 TOP 10

排名	研究前沿	核心文章数	被引用次数	核心文章平均年
1	高能可充电锂空气电池	49	2006	2010.8
2	非线性分数微分方程的边界值问题	47	1172	2010.2
3	生物柴油燃烧的化学反应动力学机制	49	1555	2010.0
4	非局部 Timoshenko 梁理论和碳纳米管	39	1480	2009.8
5	约束的全变分图像去噪和恢复	49	2741	2009.7
6	石墨烯晶体管	16	2270	2009.7
7	新一代 DNA 测序数据分析	6	2025	2009.6
8	纳米流体传热	40	1928	2009.6
9	利用钙循环过程捕获二氧化碳	36	1562	2009.6
10	差分进化算法和文化基因计算	30	1351	2009.6

约束全变分图像的去噪和恢复

这一研究前沿的核心文章提出几种方法和算法，用于从可能是稀疏数据、含有噪音的数据、模糊数据、缺失数据的数据源中恢复或还原信号、图像和视频，这些方法和算法可以应用在医疗成像和情报搜集。具体的例子包括：在充满噪声的视频中跟踪移动的物体，从卫星观测图像定位地面上的物体，指挥无人机，尽量减少 CT 扫描的辐射量等。

关键作者：多篇核心文章的作者

数学、计算机科学与工程学的研究前沿主要是在交叉学科中遴选。无论是根据传统的期刊领域划分，还是根据核心论文作者所在机构的领域划分，本方向大约有一半的论文来自数学领域，而另一半论文来自计算机科学与工程领域，基本上各占一半。共引聚类方法揭示研究共同问题的研究人员之间的联系，但其专业背景表明他们并不属于相同的“无形学院”。表 1.2 是“无形学院”突出的作者，他们是本研究前沿中核心论文数量最多的作者。

表 1.2 多篇核心文章的作者

核心文章数	作者	职位	机构

7	Stanley Osher	Professor of mathematics and Director of Applied mathematics; also, Director of special Projects, institute for Pure and Applied mathematics	University of California los Angeles
5	Jian-feng Cai	Assistant Professor of mathematics	University of Iowa
5	Emmanuel J. Candès	Simons Chair in mathematics and statistics, Professor of mathematics and of statistics, and Professor of electrical engineering	Stanford University
5	Mário A.t. Figueiredo	Professor of Electrical and Computer Engineering	Instituto Superior técnico, lisbon
5	Zuowei Shen	Tan Chin Tuan Centennial Professor	National University of Singapore

(刘小平编译)

2、物理

表 2.1 排名前十位的物理学研究前沿

排名	研究前沿	核心文章数	被引用次数	核心文章平均年
1	碱金属掺杂铁硒超导体	49	2000	2011.2
2	自旋-轨道耦合玻色爱因斯坦凝聚	48	1752	2011.1
3	暗物质直接探测实验	48	3285	2010.6
4	马约拉纳费米子的证据	44	2887	2010.6
5	顶夸克前后不对称性	48	2213	2010.6
6	利用囚禁离子进行量子模拟	36	2017	2010.5
7	铁基超导体的节点能隙结构	36	1863	2010.4
8	全息费米表面和纠缠熵	37	2643	2010.1
9	解释量子失谐	41	3650	2010.0
10	拓扑绝缘体	45	8957	2009.9

碱金属掺杂铁硒超导体

自 1986 年发现铜氧化物的高温超导特性后 (J. Georg Bednorz 和 K. Alex Müller 因此获得 1987 年的诺贝尔物理学奖), 科学家们发现了一系列具有较高超导转变温度的化合物。最近的突破, 是在 2006 年和 2008 年, 铁基化合物的超导特性得到了确认, 2010 年, 硒取代了铁磷化合物中的砷, 在铁原子层和硒原子层之间会插入钾、铷、铯、铊, 这就是超导体中著名的铁硫族超导体。

对该研究前沿的 49 篇高被引核心文章的作者所在机构和国别进行分析, 结果表明 (表 2.2), 中国在凝聚态物理学的这一前沿领域占据了主导地位。表 2.2 中还列出了核心文章最多的作者, 这些作者都来自中国。

表 2.2 碱金属掺杂铁硒超导体研究前沿核心文章的国别、机构和作者排名
(括号内为文章数量)

排名	国别	%	机构	%	科学家	%
1	中国 (30)	61.2	中国科学院 (15)	30.6	陈根富, 中国人民大学 (9)	18.4
2	美国 (15)	30.6	中国人民大学 (13)	26.5	陈仙辉, 中国科学技术大学 (8)	16.3
3	德国 (7)	14.3	中国科学技术大学 (8)	16.3	何俊宝、王笃明, 中国人民大学 (7); 应剑俊, 中国科学技术大学 (7)	14.3
4	日本 (5); 摩尔多瓦 (5); 瑞士 (5)	10.2	浙江大学 (7)	14.3	王向锋, 中国科学技术大学 (6)	12.2
5	法国 (4)	8.2	德国奥格斯堡大学 (6)	12.2	方明虎、董持衡、王杭栋, 浙江大学 (5); 胡江平, 中国科学院 (5); 王爱峰、张猛, 中国科学技术大学 (5)	10.2

关于搜寻希格斯玻色子

搜寻希格斯玻色子也是最热的研究前沿之一, 该研究前沿其中的 38 篇核心文章, 均发表于 2012 年。该研究前沿的引用次数位于物理学领域的 22 位, 皆因其基础文献都发表于 2012 年, 从而造成截至 2012 年底的引用次数很少, 而本报告选取的是引用次数排名前十位的研究前沿, 因此搜寻希格斯玻色子没有入选。不过, 如果把方法转变一下, 把流行的基础文献放在第一位, 总引用次数其次, 这样就能获得本年度最热的研究前沿, 但不一定是最大的研究前沿。汤森路透未来的研究前沿报告将重点关注表征和识别最热和新兴的研究前沿。

(黄龙光编译)

3、化学和材料科学

表 3.1 化学和材料科学 TOP10 研究前沿

排名	研究前沿	核心文章数	被引用次数	核心文章平均年
1	增强的可见光催化制氢	43	1620	2011.2
2	钨或铈催化氧化 C-H 键活化	46	1900	2011.0
3	聚集诱导发光特性和化合物	47	1989	2010.9
4	有机合成中的光氧化还原催化	32	1945	2010.5
5	对映体选择性有机磷催化	35	1927	2010.5
6	纳米孔 DNA 测序	33	1914	2010.5
7	基于小分子溶液加工的体相异质结型太阳	31	1841	2010.5

	能电池			
8	氮掺杂的石墨烯	26	2364	2010.4
9	基于卷对卷工艺的聚合物太阳能电池	35	3969	2010.3
10	用于锂离子电池阳极的硅纳米线	50	2896	2010.3

聚合物太阳能电池工艺

近来有很多关于聚合物太阳能电池的研究。与硅基太阳能电池不同，聚合物太阳能电池是通过有机聚合物将太阳光转化为电能。尽管光伏效率和耐用性仍需改进，但由于其潜在的低成本和环境友好性，聚合物太阳能电池具有相当诱人的发展前景。

在这一前沿领域的研究涉及制造聚合物太阳能电池的卷对卷工艺——即在薄片上印制电池。这一过程将能满足大批量生产的需要，并实现太阳能电池面板的轻质化和柔性化。这样的太阳能电池面板将用于给移动设备供电和将电力输送至遥远的地区等。

来自于丹麦技术大学的 Frederik C. Krebs 教授是该研究前沿领域的 35 篇核心论文中 31 篇的作者（表 3.2）。或许有人认为这么集中的分布是因为这是个非常小的领域且只有他自己关心，但实际则不然。该领域核心论文的总被引次数中，有 95% 是来自 Krebs 及其团队以外的人。这些数据清晰地反映了 Krebs 教授在聚合物太阳电池卷对卷工艺研究中的核心地位。表 3.2 列出的是该领域被引次数最多的 5 篇论文，全部出自 Krebs 及其同事之手。

表 3.2 “基于卷对卷工艺的聚合物太阳能电池”领域被引次数最多的 5 篇论文

被引次数	作者	标题/来源	机构
630	M. Jorgensen, K. Norrman, f.C. Krebs	“Stability/Degradation of Polymer Solar Cells,” Solar Energy Materials and Solar Cells, 92 (7): 686-714, July 2008	Technical University of Denmark
593	F.C. Krebs	“Fabrication and Processing of Polymer Solar Cells: A Review of Printing and Coating Techniques,” Solar Energy Materials and Solar Cells, 93 (4): 394-412, April 2009	Technical University of Denmark
414	F.C. Krebs, S.A. Gevorgyan, J. Alstrup	“A Roll-to-Roll Process to Flexible Polymer Solar Cells: Model Studies, Manufacture and Operational Stability Studies,” Journal of Materials Chemistry, 19 (30): 5442-5451, 2009	Technical University of Denmark
289	F.C. Krebs, T. Tromholt, M. Jorgensen	“Upscaling of Polymer Solar Cell Fabrication using Full Roll-to-Roll Processing,” Nanoscale, 2 (6): 873-886, 2010	Technical University of Denmark
287	F.C. Krebs, M. Jorgensen, K. Norrman, O.	“A Complete Process for Production of Flexible Large Area Polymer Solar Cells Entirely using Screen Printing-First Public Demonstration,” Solar	Technical University of Denmark,

Hagemann, J. Alstrup, T.D. Nielsen, J. Fyenbo, K. larsen, J. Kristensen	Energy Materials and Solar Cells, 93 (4): 422-441, April 2009	and Mekoprint A/S, Støvring, Denmark
---	--	--

(边文越 编译)

4、天文学和天体物理学

表 4.1 天文学和天体物理学的 TOP10 研究前沿

排序	研究前沿	核心论文	引用次数	核心论文的平均年
1	伽利略宇宙学	34	1584	2010.7
2	在哈勃超深空探索极端红移星系	31	2415	2010.3
3	电子伏尺度惰性中微子	41	2472	2010.2
4	赫歇尔空间天文台及初期性能	9	1456	2010.2
5	开普勒任务和太阳系外行星的寻找	47	4211	2010.0
6	中子星观测和核对称能	18	1536	2009.9
7	大规模的早型星系的演变	18	1724	2009.6
8	费米大视场望远镜观测伽马射线源	8	1531	2009.5
9	来自日出卫星 (Solar-B) 搭载的太阳光学望远镜和太阳动力学天文台 (SDO) 的数据	24	3023	2009.4
10	Ia 超新星光变曲线和暗能量	19	5920	2009.2

开普勒任务及系外行星的搜索

2009 年, NASA 启动了开普勒任务, 其目的是在银河系内“适居带”中搜寻类地行星, 它的传感器已经受到银河系中超过 15 万颗恒星数据的训练。候选的行星在经过其母恒星时, 会使得恒星的光线瞬间变暗。这一现象会被开普勒望远镜捕获并记录下来。候选行星需要通过恒星 3 次才能被确认下来。迄今为止, 开普勒任务已经标记了 1200 多个类地行星。报告中的研究前沿还包括了开普勒任务之前启动的其他任务所做的相关研究, 如 2006 年法国和巴西启动的联合任务——科罗望远镜等。“开普勒任务”研究前沿中的 47 篇核心论文讨论了数据的采集过程, 以及几个已观测到行星的具体特点。

系外行星探索: 迅速增长的研究方向

表 4.2 中给出了 2007 年来“开普勒任务”研究前沿相关的 47 篇核心论文每年的: 1) 核心论文数; 2) 引用核心论文的数量; 3) 二次间接引用核心论文的数量 (下图可以看出从相对小的核心内容映射出的研究活动的迅速扩展)。可以明显看出, 系外行星探索是一个迅速增长的研究方向, 这也反映在已验证的太阳系外行星目录的迅速增加。

表 4.2 2007-2012 年研究前沿中核心论文的延展扩散情况

出版年	核心论文的数量	引用核心论文的论文数量	二次间接引用核心论文的论文数量
2007	5	53	31
2008	4	161	262
2009	6	235	642
2010	11	412	1158
2011	17	594	1736
2012*	4	593	2090
total	47	2048	5919

*包括 2012 年接收，2013 年发表的论文。

文中数据来源于：汤森路透 ESI。

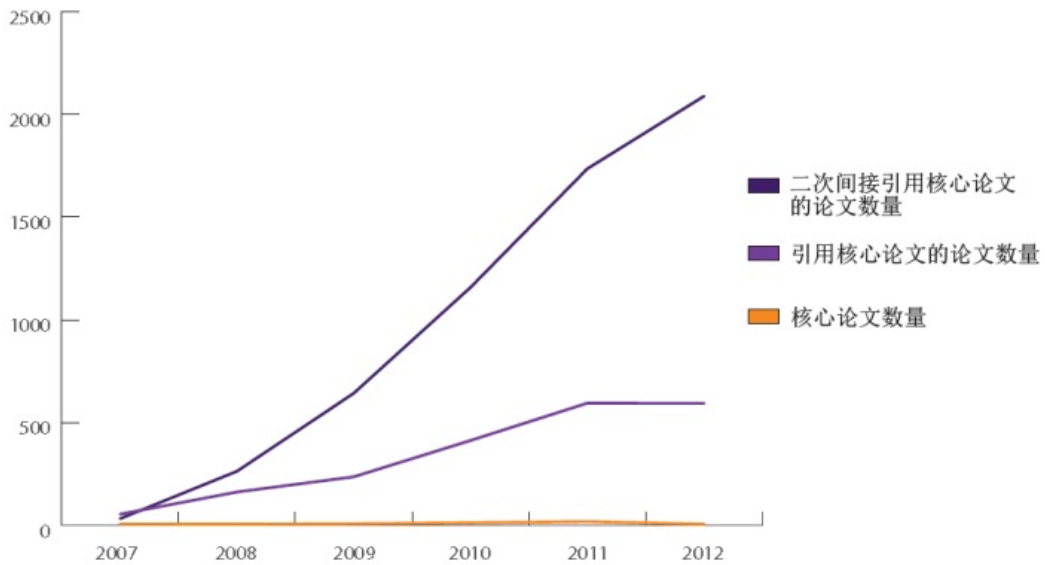


图 4.1 系外行星研究：小核心的基础论文衍生出大量的报告和引用次数。

(李泽霞 编译)

交叉与重大前沿团队 编译自：

<http://sciencewatch.com/articles/research-fronts-2013-100-top-ranked-specialties-sciences-and-social-sciences>

原文题目：Research Fronts 2013: 100 Top-Ranked Specialties in the Sciences and Social Sciences

检索日期：2013 年 6 月 20 日

德国公布大型科研基础设施路线图

4月29日，德国联邦教研部部长在柏林公布了“教研部大型科研基础设施路线图”，介绍了德国目前正在建的24个大型科研基础设施项目和3个新项目，其中的新项目是由教研部在2011年委托德国科学委员会对9个大型科研基础设施计划草案进行评估后选出，并纳入此次公布的“教研部大型科研基础设施路线图”。

这3个新项目分别是：（1）自然工程学领域的切伦科夫望远镜阵列（CTA），以提高对银河和银河系外围复杂结构的认知，总建设成本预计为1.91亿欧元；（2）生物学领域的欧洲化学生物学开放筛选平台（EU-Openscreen），用以发现新生物活性物质，总建设成本预计为5500万欧元；（3）环境科学领域的全方位观测飞机（IAGOS）。通过该飞机从飞行高度层获取的大气数据可以更准确地预测天气，确定大气污染对飞行的影响，总建设成本预计为4000万欧元。新项目的的设计、运行和使用都将在德国及欧洲研究区进行。

此次公布的路线图为试行版，教研部希望通过与科研组织广泛对话确定路线图经试行阶段后是否可以延续，如有可能，路线图将从2014年起进入规范阶段。

葛春雷 编译自 <http://www.bmbf.de/press/3442.php>

原文题目：Neue Roadmap für Forschungsinfrastrukturen

检索日期：2013年5月3日

项目资助

能源部宣布资助具成本竞争力的下一代高效照明

美国能源部长 Ernest Moniz 于6月4日宣布将开展五项制造研发项目以支持节能照明产品。这些项目将侧重于在降低生产成本的同时继续提高LED及OLED的质量和性能。如今LED照明效率比传统照明高了六、七倍，寿命也长了25倍。能源部的此次投资高达1000万美元，与私营部门的资助相当。

根据能源部最新统计数据，美国安装的LED灯具数量在过去2年里呈10倍增长——从2010年的450万套增至2012年的4900万套。这些灯具——包括嵌灯和街灯等日常室内外设备——预计每年节省6.75亿美元的能源成本。同时，LED更换灯泡的成本大约减少了54%。如果在接下来的二十年内全部改用LED照明，那么美国将节省2500亿美元的能源成本，而照明耗电量也将减少50%

左右。到 2030 年，大概有 75% 的照明产品交易都将涉及 LED，节省下的能源大约能为 2600 万户美国家庭供电。

然而，虽说 LED 和 OLED 照明的生命周期十分诱人，但目前二者的最初成本却高于传统照明的成本。今天宣布的这些资助项目将大大降低设备生产成本，同时提高照明质量和性能：

Cree 有限公司（投资 230 万美元）——该项目将开发出一种适用于更大区域范围、连结多套照明设备的模块化设计。在减少原材料、降低生产成本的同时确保高质高效的照明。Cree 所用方法是统一设计和无缝制造同一套 LED 装置的不同组成部分——包括电气系统、力学系统及光学系统，帮助进一步降低组装成本并保证高性能。

Eaton 公司（投资 240 万美元）——该项目将开发一种全新的生产过程，简化 LED 装置设计，撤去不必要的材料和组成部分。如果采用这种方法，LED 芯片将直接置于散热片上，从而改良了传热过程并提高了 LED 效率。

OLEDWorks 有限责任公司（投资 100 万美元）——OLEDWorks 工程将开发并示范新的喷印设备（除转印或丝印），降低生产总成本，如果批量生产将提高成本竞争力。制造商可以使用这种技术进一步控制喷印过程，充分利用昂贵的有机材料，尽可能提高这类材料的发光效率。

Philips Lumileds（投资 180 万美元）——标准的覆晶设备是在蓝宝石衬底上反向生长出 LED，所以必须小心地刻蚀衬底，将其移出设备之后才让光线通过。而 Philips Lumileds 的项目将设计出新的方案：新设备将对蓝宝石衬底进行处理，因此无需移除衬底，这样就在保证照明质量的情况下降低生产成本。

PPG Industries 有限公司（投资 230 万美元）——OLED 一般印在优质玻璃衬底上，然后贴到各种导电层上。PPG Industries 的项目将设计出一种低成本的生产过程，使一种同时包含玻璃衬底和其他必备导电层的集成衬底实现商业化。该项目将使用标准级的玻璃，在降低成本的同时保持性能。一旦这种低成本的集成衬底投入商业使用，那么就能为这种新兴产业建立起可靠优质的供应链。

这一次是能源部自 2010 年以来对固态照明生产项目进行的第四轮资助，进一步促进了美国与能效技术相关的制造业及其技术领先地位，从而创造就业、促进出口并巩固了美国作为全球清洁能源竞赛领跑者的地位。

李泽霞 编译自：

<http://www.doe.gov/articles/energy-department-announces-new-investments-drive-cost-competitive-next-generation>

原文题目：Energy Department Announces New Investments to Drive Cost-Competitive Next Generation Efficient Lighting

检索日期：2013 年 6 月 20 日

物理学对英国经济增长的重要性

2013年5月，英国物理学会发布了名为《物理学对英国经济增长的重要性》的报告，指出了物理学在英国经济中发挥的作用。

1. 物理学是英国工业战略的核心：以物理学为基础的企业，其经济产出占英国经济产出的8.5%。

这些企业雇佣的员工超过100万人，占英国全部劳动力的4%。促进英国未来经济增长的各个部门——从农业技术到企业服务到近海风力发电，将建立在物理学的创新应用和受过物理学训练的人所掌握的技能的基础上。以物理学为基础的高附加值制造业，雇佣的员工有50多万人，使英国经济直接获益200多亿英镑，并为航天航空部门和电力部门的增长创造了各种产品和设备。光子学和精密光学等物理学技术促进了信息经济和生命科学的进步。

物理学推动了整个英国的就业。大型雇主，如北爱尔兰的希捷公司，利用物理学开发先进计算机硬盘。牛津仪器公司是世界一流的制造商，也是新材料开发所用科学仪器的出口商。在英国，以物理学为基础的企业雇佣的员工，比金融部门和建筑业雇佣的都多。

近年来，经济低迷对以物理学为基础的部门产生较大影响，但有信号表明，物理学可以引导经济复苏。2009年以物理学为基础的企业的出口额为100多亿英镑。要发展和调整英国经济，使之有利于高技术、知识密集型的行业，需要对以物理学为基础的企业提供更多的支持，通过创新型的政府采购和更便利的资金获取途径来促进其成长。因此，对物理学进行持续稳定的资助，并能随时提供受过物理学培训的工人，这些将使英国物理学乃至英国经济繁荣发展。

2. 物理学是英国工业增长的有力驱动：从能源到新药研发，物理学驱动新技术的创新和开发。

（1）核能和近海风力发电

以物理学为基础的发电和配电行业，直接雇佣了50万名员工，总增加值（GVA）为70亿英镑。物理学是新核电站和风电场的核心，从基础设施的设计和建造到能量的有效获取和储存。

（2）企业服务

以物理学为基础的企业服务对英国GVA的直接贡献为40亿英镑。全英国的企业服务都依赖于半导体。

（3）航天航空业和汽车业

以物理学为基础的运输业为英国直接带来6万个就业岗位和50亿英镑的

GVA。以物理学为基础的技术，如先进材料，正驱动着航天航空部门的发展。例如，纳米材料目前已用于飞机涂层来减少摩擦，从而减少了耗油量和飞行动力成本。

(4) 生命科学和农业技术

物理学技术对促进生命科学的发展至关重要。物理学在 DNA 的发现中发挥了根本性的作用。过去 60 年，物理学通过高分辨率照相机和光镊等技术，持续支持生命科学领域的研究。

黄龙光 编译自：http://www.iop.org/publications/iop/2013/file_60318.pdf

原文题目：The Importance of Physics to Economic Growth

检索时间：2013 年 6 月 25 日

研究进展

德国科学家制造出磁单极子

2013 年 5 月，德国科隆大学、慕尼黑大学和德雷斯顿大学的科学家通过融合微小的磁性漩涡结构（这些磁性漩涡结构称为 skyrmions），在融合点上制造出了一个人造磁单极子，其属性与狄拉克在 1931 年假设的磁单极子一模一样。该研究成果已经发表在《科学》杂志上。

磁单极子指一些仅带有南极或北极单一磁极的磁性物质。德国科学家是在固体中发现这种新型人造磁单极子的，但这些磁单极子只能存在于材料中。除了基础研究，这种磁单极子还可能具有应用的潜力。磁性漩涡结构在未来能否用于计算机组件的生产，目前已经有不少研究小组在进行研究。

黄龙光 编译自：<http://www.sciencedaily.com/releases/2013/05/130531103910.htm>

原文题目：Artificial Magnetic Monopoles Discovered

检索时间：2013 年 6 月 25 日

稠密氢在高压下表现出多样性

氢是宇宙中含量最丰富的元素。如果我们要了解物质以及富氢行星的本质特征，就必须知道氢元素是如何应对极端压力与温度的。最近，卡内基研究所的科学家使用强红外放射线照射氢，揭示了它在极端压力下的反应，并详细展示了一种固态氢的新形态，令人惊叹不已。

正常条件下的氢气由两个原子组成。随着压力增强，氢原子开始呈现出不同的形态。我们将这些形态称之为相，目前已知氢有三种固相。人们推测，氢在高压下甚至会转变成金属，变得具有导电性。它甚至可能会变成超导体或永不凝固的超流体——一种全新的物态。来自卡内基地球物理实验室的研究小组，

利用强红外放射线观察了被高强度压缩的氢的结构、键合及电子性质，相关研究结果发表在 5 月 21 日《物理评论快报》上。

利用布鲁克海文国家实验室国家同步光源地球物理实验室的实验设备，该小组发现从 220 万倍标准大气压及约 80°F 到至少 340 万倍标准大气压及约 -100°F 的条件下，这种新形态都能保持稳定。他们的实验结果显示，氢在这种条件下呈现出的形态与氢的其他已知结构有着天壤之别。新相的结构中存在着两种独特的氢分子。一种分子与其邻近分子的相互影响非常微弱，但通常受到如此高压的分子都不会出现这种情况。另一种分子与其邻近原子键合了起来，形成了奇异的平面薄片。

观测结果还显示，处于这种条件下的固态氢呈现出一种介于半导体（如硅）和半金属（如石墨）之间的状态。这一观测结果推翻了之前认为氢在这种压力和温度下会形成稠密原子金属的假设。这项研究结果为基本理论的发展提供了重要的实验基础。

李泽霞 编译自：http://carnegiescience.edu/news/dense_hydrogen_new_light

原文题目：Dense Hydrogen in a New Light

检索日期：2013 年 6 月 20 日

AFM 展示界面反应前后分子图像

高分辨原子力显微镜（AFM）有了新的用武之地——获取个体分子反应前后的图像。加州大学伯克利分校 Felix R. Fischer 和 Michael F. Crommie 领导的研究小组用 AFM 得到了一种烯二炔化合物和其环化产物的图像，环化反应发生在银表面。该成果发表在《科学》上。

Fischer 透露，他们之所以选择烯二炔化合物作为研究对象，是因为它可能生成类似石墨烯的结构，该结构可以用于分子电子学。

烯二炔化合物有多种环化路线，生成多种产物，难以识别。由于谱峰重叠，质谱和核磁有时也不能判定产物结构。

自从 IBM 的研究人员用 AFM 获得并五苯分子的原子和成键图像后，AFM 就被广泛用于协助判断天然产物结构、识别键级区别和揭示异构体互变。

Fischer 和 Crommie 等人将 1,2-bis[(2-ethynylphenyl)ethynyl]benzene 分子沉积到银表面，用 AFM 拍摄了图像。然后将银表面加热至 90 °C 以上使分子发生环化反应，他们又拍摄了产物照片。他们发现一半的反应分子转化成了多环芳烃结构，该结构由五个六元环和两个五元环稠和组成。还有四分之一的反应物转化成 4 个六元环相连结构，这四个六元环通过 1 个四元环和 2 个五元环相连。

剩下的反应产物是一些低聚分子和少量的多环异构体。

Fischer 表示研究结果从两方面给他们带来惊喜。一是反应主要生成两类产物，二是生成的产物是他们始料未及的。在该实验中，如果将表面反应的反应路径转移到溶液中进行，将会有很高的活化能壁垒。Fischer 认为，这一反应路径的实现可能与反应分子与界面原子的相互作用有关。

IBM 的研究人员 Leo Gross（曾用 AFM 对并五苯分子成像）认为，这项工作展现了 AFM 的科研价值。通过不断改进，AFM 能展现出更多原子细节，AFM 正不断证明其在结构测定方面的潜力。

边文越 编译自：<http://cen.acs.org/articles/91/i22/Reaction-Snapshots.html>

原文题目：Reaction Snapshots

检索日期：2013 年 5 月 31 日

拉曼成像分辨率突破 1nm

来自中国的研究人员实现了分辨率突破 1nm 的拉曼光谱成像。过去，该技术最高的分辨率在 3-15nm 之间。

圣母大学的光谱成像专家 Zachary D. Schultz 指出，扫描隧道显微镜 (STM) 在电子云密度成像方面的分辨率已经达到 1nm 以下，但是对分子的振动模式实现低于 1nm 的分辨率是非常了不起的。由此，科学家可以获得分子不同部位的化学键的信息。

中国科技大学侯建国院士和董振超教授领导的团队通过联用 STM 与针尖增强拉曼光谱 (TERS)，实现了这一高分辨率。

研究人员将样品分子置于 STM 的探针尖与金属衬底之间形成的纳腔中。在入射激光的激发下，通过调控等离激元，使其与入射光和拉曼发射产生双重共振，从而将分辨率提高至 1nm 以下。

董振超透露，在超高真空和低温的操作环境下，STM 和 TERS 的联用展现了很好的操控和调节能力。研究人员将烷基取代的卟啉分子置于银表面。在拉曼成像中，分子展现出清晰的四叶状形状。

董振超期待该方法可用于研究生物分子和细胞，以及催化、分子电子学等其他需要单分子分辨的领域。

边文越 编译自：

<http://cen.acs.org/articles/91/i23/Raman-Imaging-Breaks-Nanometer-Barrier.html>

原文题目：Raman Imaging Breaks The Nanometer Barrier

检索日期：2013 年 6 月 10 日

硼硅新结构有望成为锂离子电池材料

如果锂离子电池的容量能进一步扩大，那么笔记本电脑和电动汽车将运行更长时间。电极材料对电池容量起到了决定性影响。目前的负极一般由石墨组成，石墨层能储存锂原子。慕尼黑工业大学（TUM）的科学家现在开发出一种由硼和硅组成的材料，能够藉此发展出高容量电池系统。

锂离子电池在运行时会产生锂原子，而负极材料的石墨层会吸收锂原子。但是，石墨容量有限，六个碳原子才能吸收一个锂原子。硅却能吸收十倍以上量的锂。可惜的是，硅在吸收锂原子的过程中会强烈膨胀，这是电池应用领域的未解难题。

为了寻求能够替代纯硅的材料，慕尼黑工业大学的科学家目前合成了一种由硼和硅组成的全新结构，这种结构能够充当电极材料。与金刚石中的碳原子相似，这种全新的硼硅酸锂化合物（ LiBSi_2 ）中的硼原子和硅原子呈现出四面体的连接方式。但与金刚石不同，硼原子和硅原子之间还形成了通道。相关的研究成果发表在 2013 年 4 月 22 日的《德国应用化学国际版》上。

慕尼黑工业大学无机化学研究院的 Thomas Fässler 教授表示，“具有通道的开放式结构原则上能储存和释放锂原子，这一点是其成为锂离子电池负极材料的重要条件。”

高压合成

在亚利桑那州立大学化学与生化系的高压实验室里，科学家让初始材料硼化锂和硅发生反应。在 10 万大气压和 900°C 的压力和温度条件下，形成了硼硅酸锂。而原始材料的合适比例以及正确的参数，强烈依赖于直觉和丰富的实验经验。

硼硅酸锂能在空气和湿气中保持稳定，并能承受 800°C 的高温。下一步，Thomas Fässler 及其研究生 Michael Zeilinger 希望进一步观察该材料能吸收多少锂原子，它在放电时是否会膨胀。这种材料呈晶状结构，因此应该十分坚固，在作为金刚石替代物方面前景诱人。

李泽霞 编译自：<http://www.tum.de/en/about-tum/news/press-releases/short/article/30868/>
原文题目：New framework from boron and silicon could smooth the way to higher capacities:

Promising material for lithium-ion batteries

检索日期：2013 年 6 月 20 日

纳米粒子开启清洁能源新方案

一项新发现可能让清洁能源技术变得更廉价。以宾州大学化学教授 Raymond Schaak 为首的研究团队发现，镍和磷这两种大量存在于地球的廉价元

素所组成的一种纳米粒子可以有效地触发或催化由水制氢这一重要化学反应。研究结果将刊登在《美国化学会志》上。

Schaak 解释道，磷化镍纳米粒子能促进由水制氢这个对包括燃料电池和太阳能电池在内的许多能源生产技术十分重要的过程。水的价格便宜且储量丰富，因此是一种理想的燃料。不过我们需要从水中提取出氢来。氢的能量密度高，是一种强大的能源载体，但制氢也需要能量。为了实现制氢，科学家们一直试图找到一种能用廉价催化剂触发所需化学反应的方法。铂可以很好地实现这个功能，但由于铂很稀有，且价格昂贵，他和他的团队一直在找寻替代物质。曾经有人预测磷化镍纳米粒子可能是个不错的备选方案，经过他和他的团队多年磷化镍纳米粒子的研究，证实磷化镍纳米粒子确实能在制氢过程中起到不小的作用，是已知最好的铂替代物。

后续测试工作是由加州理工学院的研究人员完成的，他们测试了纳米粒子在催化必要的化学反应方面的表现。加州理工学院的乔治·里昂·阿吉罗斯化学教授 Nathan S. Lewis 领导的研究团队完成了这些测试：研究人员将纳米粒子放到钛箔上，然后将箔片浸泡到硫酸溶液中。接着，研究人员施加电压，测量所产生的电流。他们发现，不仅产生了预期的化学反应，其发生效率还相当高。

Schaak 指出，“纳米技术已经为我们开启了通向更廉价更清洁更高效能源的大门。现在的目标就是要进一步提高这些纳米粒子的性能，并研究它们发挥这些作用的原因。另外，我们团队相信，我们在磷化镍领域取得的成功可以帮助大家发现其他也由地球富含物质组成的新的催化剂。如果能对这次发现有所领悟，说不定以后还能开发出更好的催化剂。”

李泽霞 编译自：<http://science.psu.edu/news-and-events/2013-news/Schaak6-2013>

原文题目：Nanoparticle Opens the Door to Clean-Energy Alternatives

检索日期：2013年6月20日

锂电池：利用蟹壳的纳米结构制作电极材料

市场上大多数锂离子电池使用锂钴氧化物阴极和碳阳极。斯坦福大学材料科学家崔毅（音译）表示，如果锂离子电池使用硫做阴极或者硅做阳极，那么理论能量存储容量将提高 10 倍。

但是，由硫、硅制得的电极具有结构上和化学上的缺陷，会导致电池寿命降低。为了解决这一问题，一些研究人员尝试在纳米结构中（如碳纳米纤维）填入硫或硅。这种结构有足够的空间，可以供电极自由地膨胀和收缩。研究人员通过模板法生成这些纳米纤维，而模板通常由氧化铝制得。崔毅的团队认为可以用便宜且环境友好的蟹壳制造模板。之前的研究显示，蟹壳含有约 70nm

宽的碳酸钙纳米通道，大小正适合包含电极材料。

为了制作模板，他们首先烧掉蟹壳上的有机物质，然后将碳酸钙壳研成粉末。接下来，他们将粉末与多巴胺溶液混合，从而在碳酸钙模板表面形成多巴胺聚合物涂层。通过 800°C 焙烧，聚合物转化为碳。最后，研究人员用稀盐酸除去碳酸钙模板。剩下的就是成捆的 65nm 宽的中空碳纳米纤维。研究人员通过加热方法将硫填充进纳米结构，或者用化学气相沉积法将硅填充进去。随后，他们测量了每种材料作为电极的性能。

在电极寿命测试中，在 200 次充放电循环后，含硫电极的能量储存容量还剩 60%，而含硅电极还有 95%。崔毅介绍，手机电池在 500 次充放电循环后，还剩下约 80% 的储能容量。然而，他指出，由于测试设备还不是真正的电池，所以还难以把他们制备的电极与商业电极进行全方位比较。加州大学圣巴巴拉分校的材料科学家 Galen D. Stucky 指出，这是一项重要的进步。但是，他也指出这种材料长时间保留高储能容量的能力还不足以用于混合动力汽车等实际应用。

边文越 编译自：

<http://cen.acs.org/articles/91/web/2013/06/Crab-Shells-Help-Researchers-Make.html>

原文题目：Crab Shells Help Researchers Make New Battery Materials

检索日期：2013 年 6 月 20 日

微波波谱区分手性化合物

许多有机化合物具有手性，且手性对映体不易被区分。虽然手性对映体的物理性质大部分相同，但生理功能可能大相径庭。

测量手性的方法包括旋光度法、振动圆二色法和拉曼光活性法。现在，微波波谱法加入到这个行列中。微波波谱测量分子的转动能量级差。据《自然》杂志报道，对指定的化合物而言，微波法的灵敏性和选择性要优于其他方法。

弗吉尼亚大学的微波波谱专家 Brooks H. Pate 认为这是一个重大的突破，可能对物理化学、分析化学和代谢物组学等学科产生重大影响。作为发明者之一，哈佛大学的物理学家 John M. Doyle 认为该技术将大大惠及药物分析。

由哈佛大学 Doyle 和 David Patterson 以及德国马克普朗克研究所 Melanie Schnell 发明的这项技术的原理在于操纵分子的电偶极矩。电偶极矩反映了分子电荷在空间分离的程度和方向。该方法是对冷的气相分子（如丙二醇）施加两个微波频率的电场。这两个极化方向不同的电场与分子的偶极相互作用，使分子发射出在其他方向上极化的微波。一对对映体有两组偶极矩是完全相同的，但第三组偶极矩大小相同方向相反，这成为区分异构体的特征元素。由于偶极矩方向相反，对映异构体发射出的微波呈 180° 反相。Doyle 设定左旋的分子是

正值，而右旋的分子是负值。这种微波反相的性质被用于判断绝对手性，微波的频率用于识别化学样品，而微波的强度用于判断相对浓度。

该项技术要求通过气相样品分子与低温缓冲气体的碰撞使温度从室温快速冷却至 7K。冷却使样品的信号更好，从而提高了该方法的灵敏性。由于微波谱图的峰窄且彼此分开，该方法适合混合有多种化合物的情况。由于没有两种分子能有三个转动频率完全相同，因此该方法具有很好的样品选择性。美国雪城大学的退休化学教授 Laurence A. Nafie 认为，在化学学科 200 年的手性发展史上，这项技术具有里程碑意义。

边文越 编译自：

<http://cen.acs.org/articles/91/i21/Microwaves-Distinguish-Mirror-Image-Compounds.html>

原文题目：Microwaves Distinguish Mirror-Image Compounds

检索日期：2013 年 5 月 27 日

快讯

谷歌与 NASA 联合打造量子计算机实验室

世界上第一家商业化的量子计算公司——加拿大 D-Wave 系统公司最近迎来了一个新的大客户：美国国家航空航天局（NASA）、谷歌公司和非盈利性的大学太空研究协会（Universities Space Research Association, USRA）。这三个机构将安装 D-Wave 系统公司最新开发的“D-Wave Two”量子计算机，在美国加州莫菲特场的 NASA 艾姆斯研究中心（Ames Research Center）打造一个量子人工智能实验室。这个实验室将研究机器学习等领域，这对实现语言翻译、图像搜索和语音命令识别等功能很有用。

这个由谷歌公司牵头的合作联盟是第二个购买 D-Wave 公司量子计算机的客户，第一个是总部在美国马里兰州贝塞斯达的航空巨头洛克希德-马丁公司。洛克希德-马丁公司于 2011 年购买了一台 D-Wave 公司的量子计算机，将其安装在美国洛杉矶南加州大学的新量子计算中心。

这两个量子计算中心，都保留了 20% 的计算机时间，对外部研究人员开放。到目前为止，人们大多使用这些量子计算机来探索量子计算的可能应用和研究量子计算机如何运行，而不是解决以前无法解答的问题。

黄龙光 编译自：

<http://www.nature.com/news/google-and-nasa-snap-up-quantum-computer-1.12999>

原文题目：Google and NASA snap up quantum computer

检索时间：2013 年 6 月 25 日

版权及合理使用声明

中科院国家科学图书馆《科学研究监测动态快报》（简称《快报》）遵守国家知识产权法的规定，保护知识产权，保障著作权人的合法权益，并要求参阅人员及研究人员认真遵守中国版权法的有关规定，严禁将《快报》用于任何商业或其他营利性用途。未经中科院国家科学图书馆同意，用于读者个人学习、研究目的的单篇信息报道稿件的使用，应注明版权信息和信息来源。未经中科院国家科学图书馆允许，院内外各单位不能以任何方式整期转载、链接或发布相关专题《快报》。任何单位要链接、整期发布或转载相关专题《快报》内容，应向国家科学图书馆发送正式的需求函，说明其用途，征得同意，并与国家科学图书馆签订协议。中科院国家科学图书馆总馆网站发布所有专题的《快报》，国家科学图书馆各分馆网站上发布各相关专题的《快报》。其它单位如需链接、整期发布或转载相关专题的《快报》，请与国家科学图书馆联系。

欢迎对中科院国家科学图书馆《科学研究监测动态快报》提出意见与建议。

中国科学院国家科学图书馆

National Science Library of Chinese Academy of Sciences

《科学研究动态监测快报》(简称系列《快报》)是由中国科学院国家科学图书馆总馆、兰州分馆、成都分馆、武汉分馆以及中科院上海生命科学信息中心编辑出版的科技信息报道类每月快报刊物,由中国科学院规划战略局、基础科学局、资源环境科学与技术局、生命科学与生物技术局、高技术局研究与发展局等中科院职能局、专业局或科技创新基地支持和指导,于2004年12月正式启动。每月1日或15日出版。2006年10月,国家科学图书馆按照统一规划、系统布局、分工负责、系统集成的思路,对应院1+10科技创新基地,重新规划和部署了系列《快报》。系列《快报》的重点服务对象首先是中科院领导、中科院专业局职能局领导和相关管理人员;其次是包括研究所领导在内的科学家;三是国家有关科技部委的决策者和管理人员以及有关科学家。系列《快报》内容将恰当地兼顾好决策管理者与战略科学家的信息需求,报道各科学领域的国际科技战略与规划、科技计划与预算、科技进展与动态、科技前沿与热点、重大研发与应用、科技政策与管理等方面的最新进展与发展动态。

系列《快报》现有13个专辑,分别为由中国科学院国家科学图书馆总馆承担的《基础前沿科学专辑》、《现代农业科技专辑》、《空间光电科技专辑》、《科技战略与政策专辑》;由兰州分馆承担的《资源环境科学专辑》、《地球科学专辑》、《气候变化科学专辑》;由成都分馆承担的《信息科技专辑》、《先进工业生物科技专辑》;由武汉分馆承担的《先进能源科技专辑》、《先进制造与新材料科技专辑》、《生物安全专辑》;由上海生命科学信息中心承担的《生命科学专辑》。

编辑出版: 中国科学院国家科学图书馆

联系地址: 北京市海淀区北四环西路33号(100190)

联系人: 冷伏海 王俊

电话: 010-62538705、010-82626611-6159

电子邮件: lengfh@mail.las.ac.cn; wangj@mail.las.ac.cn

基础前沿科学专辑

联系人: 黄龙光 李泽霞

电话: 010-82626611-6161

电子邮件: huanglg@mail.las.ac.cn; lizexia@mail.las.ac.cn
