

IBM 公司的研发合作领域

I. 应用于再生能源和环境保护的纳米材料

1. 采用溶解工艺的 CIGS 太阳能电池
2. 再生和循环材料：应用于塑料循环利用的高效有机催化剂
3. 用于水净化和脱盐处理的纳米膜

II. 应用于存储内存的纳米技术

1. 新的存储内存 (SCM)

III. 纳米仪器的研发

1. 用于观察分子级图像和进行能量损失谱分析的透射电子显微镜
2. 通用扫描探针纳米传感器
3. 硅纳米线在单分子质量和电荷检测中的应用

IV. 碳纳米管在纳米电子领域的应用

1. 用于超高性能薄膜电子的碳纳米管

V. 生物纳米技术在医疗保健和生命科学中的应用

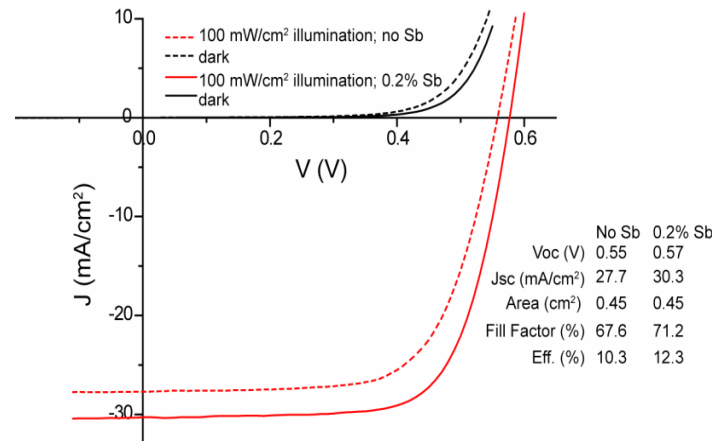
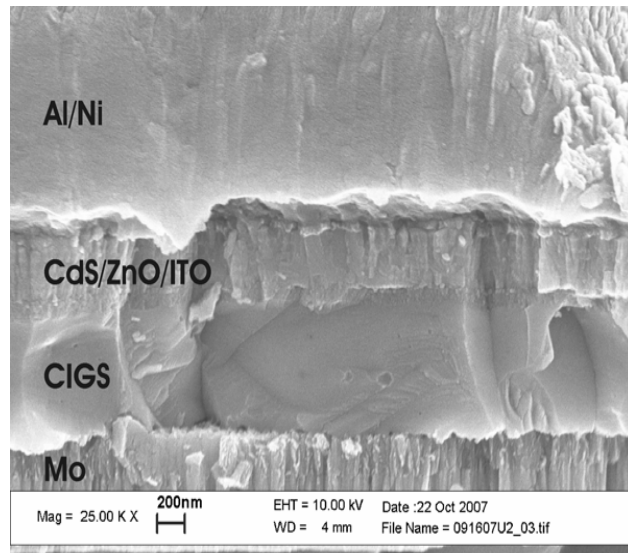
1. 纳米生物药物释放
2. 生命芯片：用于细胞水平分析和细胞结构学研究的微流体技术

VI. 用于生物学和材料创新的计算科学

1. 计算建模预测流感的遗传变异
2. 纤维素类生物燃料的生物信息技术
3. 基于小 RNA 的生物标记在诊断和治疗上的应用
4. 靶向治疗的基因组学研究
5. 设计先进功能材料的虚拟实验室

采用溶解工艺的 Cu-In-Ga-Se (CIGS) 太阳能电池

- IBM 研究人员已经探索出多条技术路线来设计光伏器件-特别是基于溶解法的 CIGS 薄膜沉淀太阳能电池
- 用新的化学方法溶解化合物半导体
- 目标:
 - 不影响效率, 大大降低成本
 - 在柔性或玻璃基质上大面积沉积薄膜光伏材料的生产



转换效率: 12.3%, 最高工艺温度: 550 °C

T.N. Theis, IBM Research

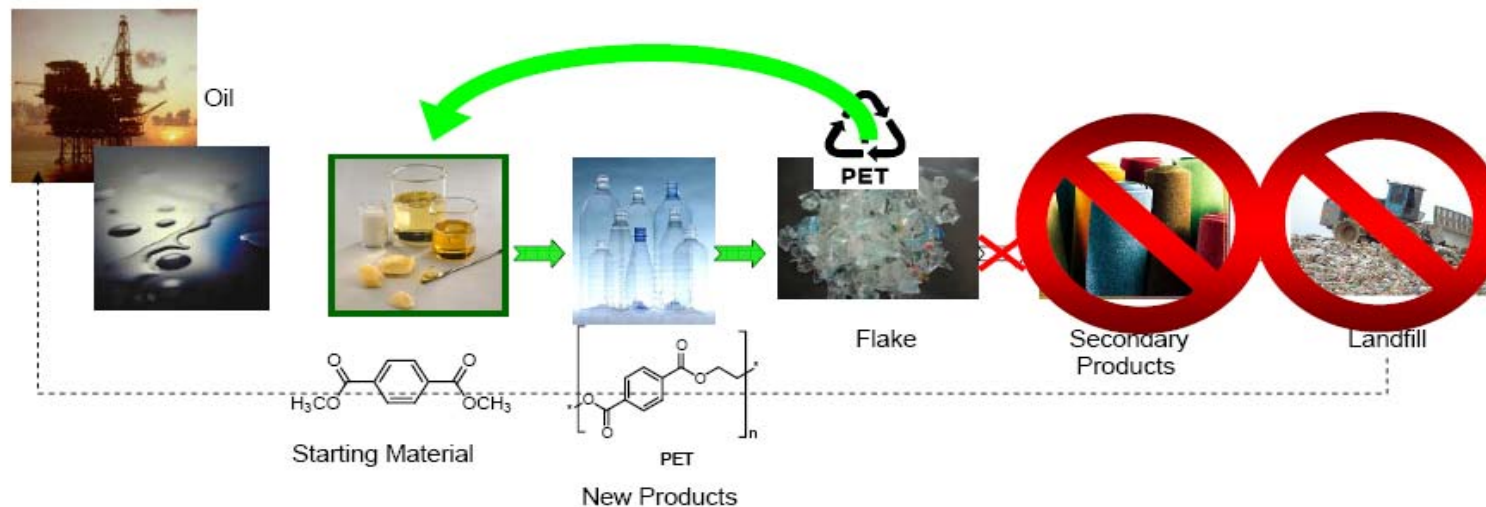
完全循环利用的塑料回收技术

当前问题:

- 当前塑料回收不节能
- 采用含有金属催化剂进行降解
- 仅限于一步回收，副产品直接进垃圾堆

IBM 解决方案:

- IBM 催化剂不含金属，采用低温过程消耗更少的能源
- 将塑料转化为生产用的原材料，产品和新的一样
- 从旧瓶到新瓶的无限循环利用，没有垃圾产生



注: Starting Material: 原材料; PET: 塑料产品; Flake: 碎片; Secondary Products: 副产品; Landfill: 垃圾

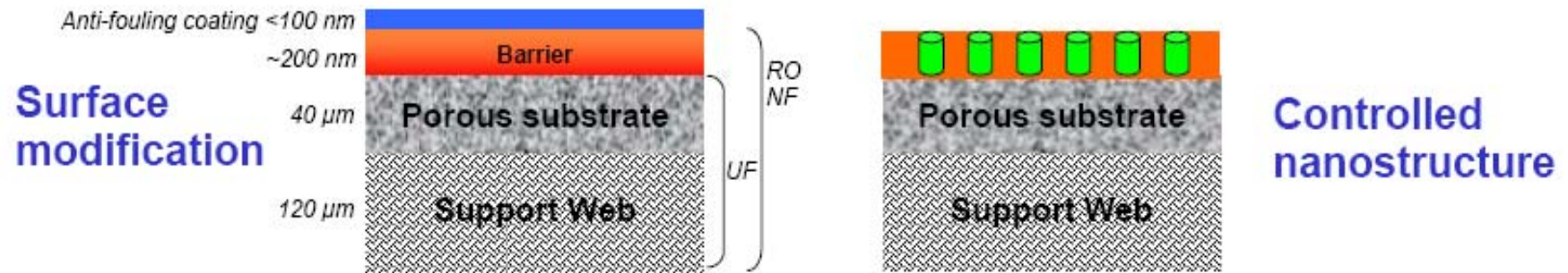
T.N. Theis, IBM Research

用于水净化和脱盐的纳米膜

- 基于微电子学模块结构来构建纳米膜（纳米结构化、等级化和可控表面）
- 提高膜的能效和寿命

RO（反渗透）和 NF（纳米过滤）

- 减少污染
- 减少跨膜压力
- 增强抗氧化性
- 提高分子和盐的排除率

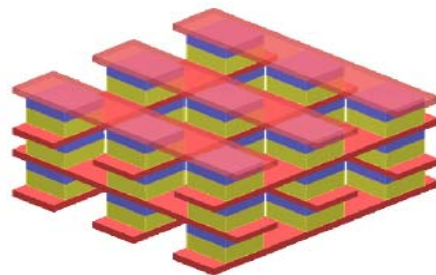


注：Surface modification: 表面修饰；Controlled nanostructure: 可控纳米结构；Porous substrate: 多孔基板；Support Web: 支撑层；Barrier: 隔层

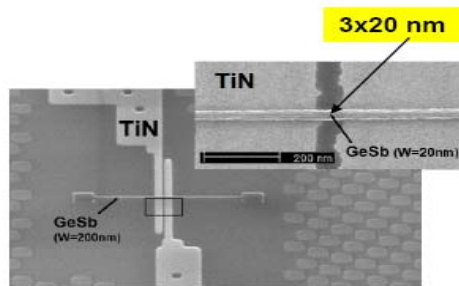
T.N. Theis, IBM Research

新的存储内存 (SCM)

- 商用电脑和消费类电子产品（手机，数码相机）由于快速、稳定的固态存储的出现而发生根本性改变，这种存储在价格上与硬盘相比具有竞争力。
- 系统将处理大量的数据，而且功耗更低。
- 结合 IBM 公司的研究，这种新的固态存储设备适合三维一体化以及制成超小尺寸。



Ultra High Density
Device Architectures



Extreme Scaling

注：Ultra High Density Device Architectures: 超高密度存储装置结构；
Extreme Scaling: 极端尺寸

T.N. Theis, IBM Research

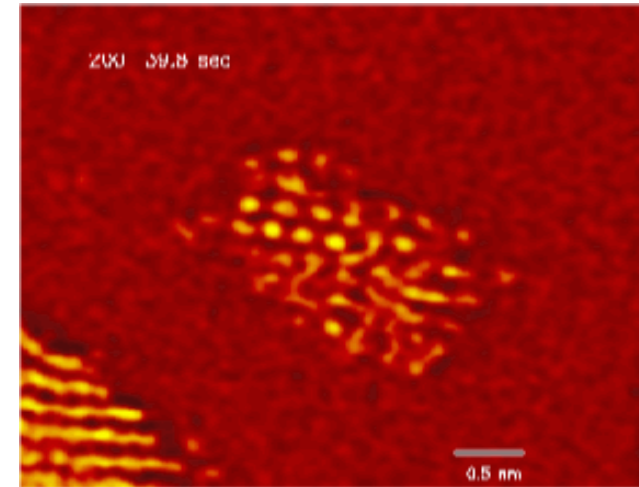
一种能够检测兆电子伏（meV）的电子能量损失光谱、空间分辨率达到0.05nm的透射电子显微镜

功能创新:

- 在纳米范围物体内存限制光子
- 集群物质和分子的振动光谱分析
- 密切相关系统的电子学分析
- 纳米尺寸物体的电子结构分析（碳纳米管，石墨，SC量子点）
- 自旋和电荷密度波的成像
- 原子表面的热力学，原子间的相互作用分析
- 物质结构和结合位点的三维结构分析

关键的技术难题:

- 在亚埃精度水平上的准确性和稳定性
- 达到兆电子伏能量分辨率的电子发射器定位系统
- 过程低温

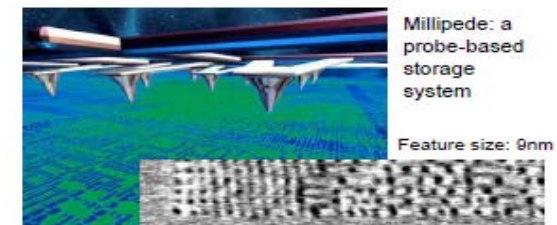
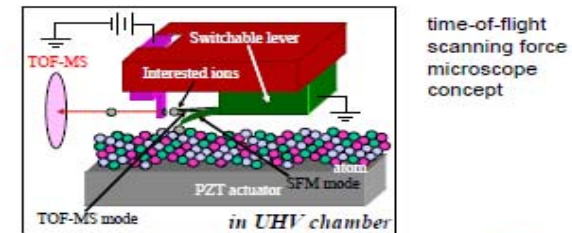
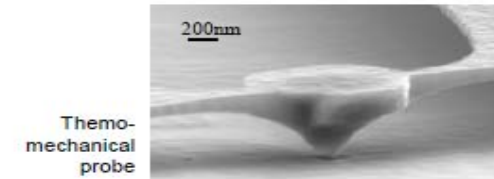


无定形碳上的金颗粒基团，使用IBM三级像差校正成像 [P.E.Batson, et al., Nature 418, 617-620 (8 August 2002)]。这种基团间的远距离相互作用发生在亚电子伏水平，目前无法进入显微镜光谱，从而不能被观测。

T.N. Theis, IBM Research

一种通用型扫描探针纳米传感器

- 用于在纳米水平分析表面修饰结构的多功能探测传感器及纳米工具
 - 利用微电子机械技术（MEMS）制造具有多种功能的探针
 - 开发专用定制设备
- 开发并推广通用纳米工具，使之成为在材料科学、生物学或纳米电子学中应用纳米技术的重要手段。
- IBM 拥有世界级水平的纳米探针研究实力
 - 探针技术的基础研究
 - 定制悬臂的开发
 - 定制仪器的开发
 - 基于探针的存储系统：第一个可靠的、高通量的表面纳米工程系统



注：Thermo-mechanical probe: 温度机械探头；

time-of-flight scanning force microscope concept: 飞行时间扫描力显微镜的概念

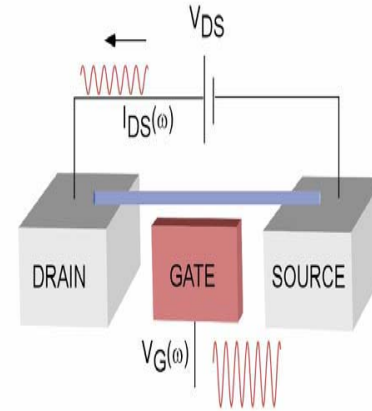
Controlled deposition of macromolecules: 大分子的可控沉积

Millipede: a probe-based storage system: 千足虫: 一个基于探针的存储系统

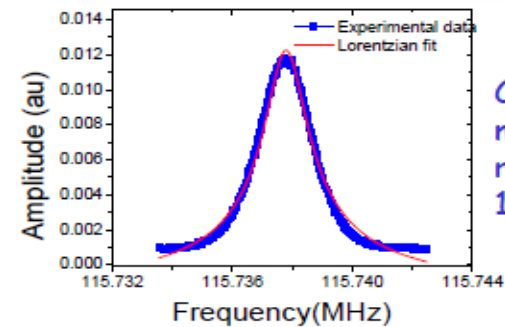
T.N. Theis, IBM Research

硅纳米线在单分子质量和电荷检测中的应用

- 目标：应用于有毒气体和污染气体检测的廉价固态质谱仪
 - 用于快速灵敏检测的综合探测器和信号放大器
 - IBM 具有专业制造纳米线设备的技术专长
- 技术难题：
- 用于 GHz 共振频率的高品质超小型纳米线
 - 超低噪音的综合探测和驱动电路



Length (L) and diameter (d) of an ideal nanowire	L=100 nm d=15 nm
Effective mass of wire M_{eff} [g]	$3.8 \cdot 10^{-17}$
Resonance frequency f_{res} [GHz]	2.7
Spring constant: k [N/m]	276
Quality factor: Q	$\sim 100,000$
shift for 1 a.m.u.: $\Delta\omega_{a.m.u.}$ [Hz]	60
Thermal noise: [Hz/Hz ^{0.5}]	0.1
Max. BW for 1 a.m.u.: [μ s]	~ 10



Current status:
measured nanowire
resonances up to
150 Mhz, $Q \sim 40,000$

当前状态：可测量的纳米线共振频率达到 150Mhz，质量因子达到 40,000

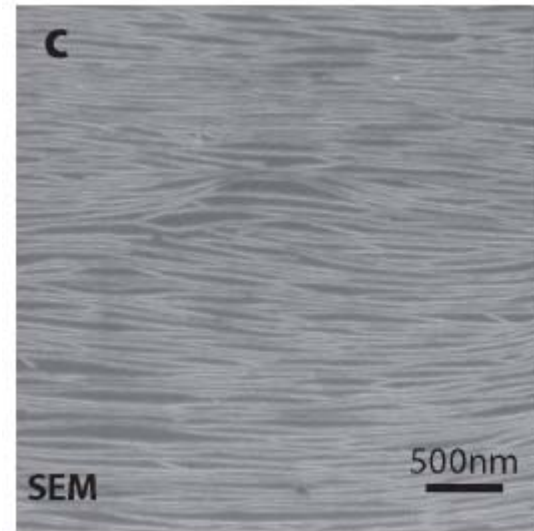
T.N. Theis, IBM Research

用于超高性能薄膜电子的碳纳米管

- 半导体纳米管高密度垫为廉价、灵活、高性能的薄膜电子的应用创造了条件
- 结合现有在碳纳米晶体管制造的研究应用、以及在纯化及单壁半导体碳纳米管的流体沉淀方面的研发

- J.B. Hannon et al., *Langmuir*, 21 (19), 8569 -8571 (2005)

- G.S. Tulevski, et al, High Yield Fabrication of Single-Walled Carbon Nanotube Devices via Self-Assembly, American Physical Society, APS March Meeting, March 5-9, (2007)

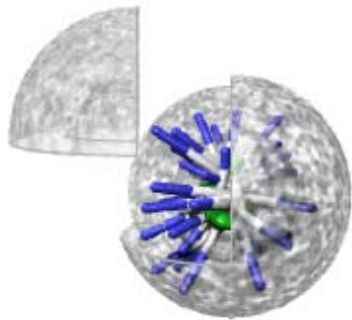


单壁半导体碳纳米管流体沉淀（扫描电镜图片）

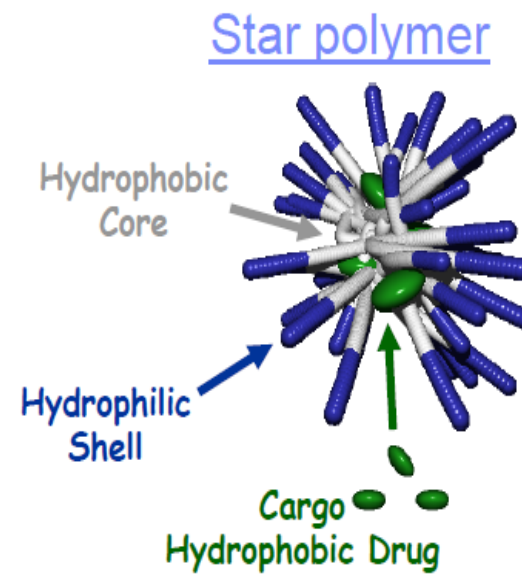
T.N. Theis, IBM Research

纳米结构在生物学上的应用

- 生产大分子或大分子基团
 - 将生物活性物质封装并送达特定细胞、器官和组织中
 - 当药物前体转化或在靶定组织中发挥药效时起到封闭催化剂的作用
 - 提高分析的灵敏度
- 实例
 - 两性分子阻断共聚物
 - 功能化星形共聚物
 - 二氧化硅和有机硅酸盐胶囊



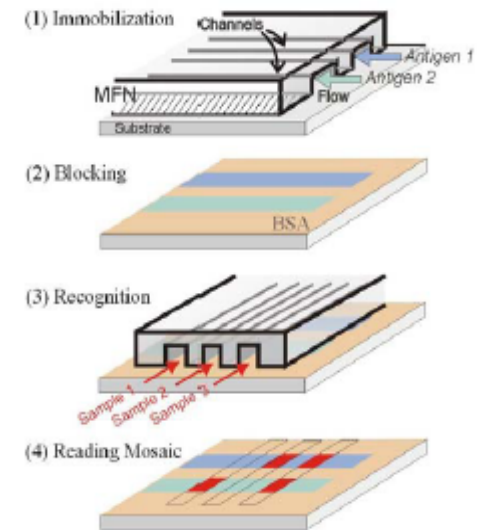
Silica Shell



注: Silica Shell: 硅表面
Star polymer: 星形聚合物
Hydrophobic Core: 疏水核心
Hydrophilic Shell: 亲水表面
Cargo Hydrophobic Drug: 疏水药物运输

生命芯片：用于细胞水平分析和细胞结构学研究的微流体技术

- 为运输组织、活体细胞和其他生物标本开发开放式微流体结构
 - 用于生物学分析
 - 活细胞组份的三维结构
- 综合纳米加工技术，微流体技术，细胞生物学和生物工程等多个技术特长
- 探索组织工程学研究的新方法



基于 IBM 微流体技术的免疫分析诊断芯片
详见文献：

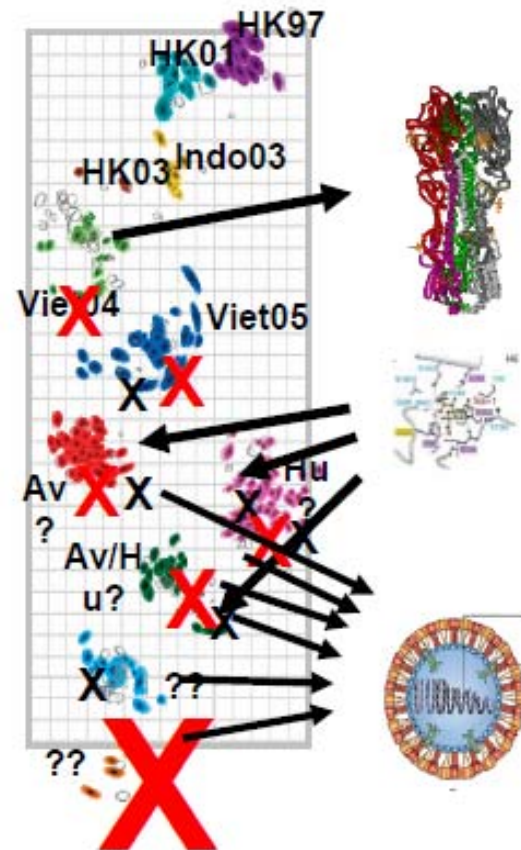
E.A. Delamarche et al. *Science* 276:779-781 (1997);

M. Wolf et al., *Biosens. Bioelectron.* 19:1193-1202 (2004).

N. Theis, IBM Research

计算建模预测流感的遗传变异

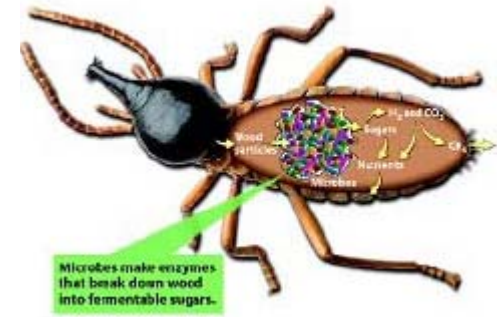
- 流感变异速度快
- 禽流感（H5N1）有大范围流行的可能性
- 计算建模
 - 分析流感基因组并预测其遗传变化
 - 建立蛋白结构变异的模型
 - 预测变异的生物学后果
- 在实验室环境下提供生物变异的计算预测
- 研究论文已经提交出版，详见文献
R. Zhou et al. PNAS 104:5824-5829 (2007)
Destruction of longrange interactions by a single mutation in lysozyme.



N. Theis, IBM Research

纤维素类生物燃料的生物信息学技术

- 目标：将农业废弃物（例如，玉米秆）转化成燃料大大提高能源利用效率。
- 通常做法
 - 降解纤维素->单糖->转化成乙醇
 - 通过观察和反向设计微生物消化纤维素的生化过程
 - 建立高效转化系统
- IBM 的生物信息技术优势可以阐明
 - 微生物群落的组成和工作模式，例如，
 - 鉴定出白蚁的肠道细菌
 - 鉴定出参与消化木材的细菌酶
 - 提高纤维素到糖的转化率
 - 小 RNA 在生物调节过程中的作用
- 潜在的研究项目包括：
 - 正向和反向遗传学研究：鉴定在生物质生产中发挥作用的基因
 - RNA 干涉技术 (RNAi) 和高通量筛选技术：研究细胞壁的表型特征，分析其生物质特性
 - 应用世界领先的超级计算技术 (IBM 蓝色基因项目) 和先进方法进行生物分子模拟，用来模拟纤维素酶消化纤维素的生化过程

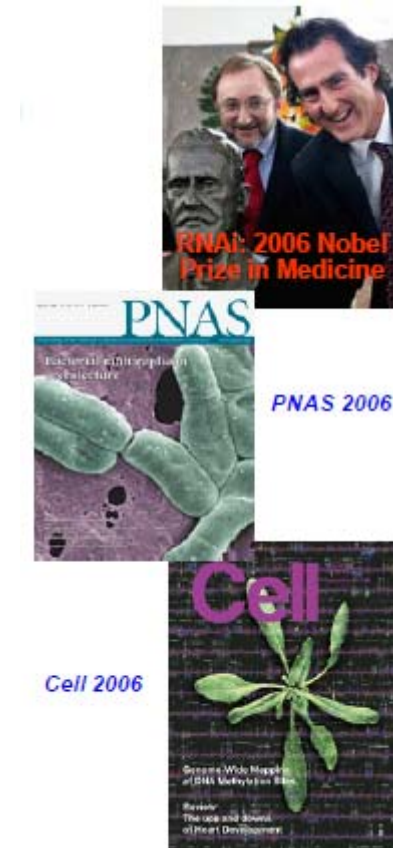


木材喂养的白蚁肠菌群代谢
基因组学研究和功能分析

N. Theis, IBM Research

基于小 RNA 的生物标记在诊断和治疗上的应用

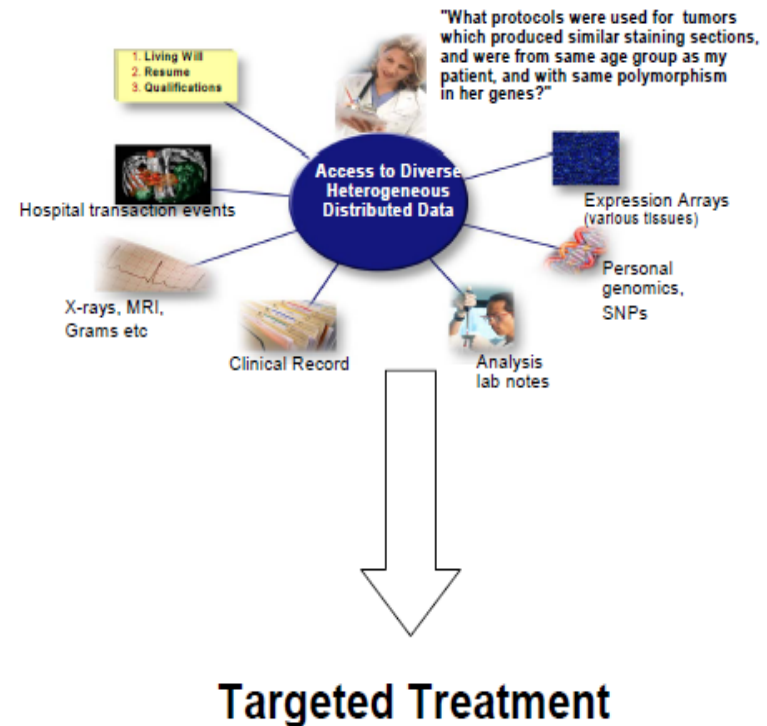
- 药物基因组学、生物标记的研究及小 RNA 在细胞功能中的调节作用越来越得到认同。
- 研究目标：寻找有助于疾病诊断和治疗的新的生物标记
- IBM 致力于用计算技术在基因组水平预测小 RNA 和药物的作用靶标，见文献 K. C. Miranda et al., *Cell*, 126:1203-1217 (2006)
 - 小 RNA 水平的调节是重要且广泛存在的
 - 体内有数万种小 RNA 存在
 - 小 RNA 在健康及疾病状态下调节很多生物学过程
- 与实验生物学家合作研究以下疾病领域
 - 肺癌
 - 阿尔茨海默氏症（老年性痴呆）
 - 糖尿病



N. Theis, IBM Research

靶向治疗的基因组学技术研究

- 以信息学为基础的医学研究
 - 创建以病人为中心的电子健康记录
 - 收集病人基因型及治疗结果等方面的信息
 - 分析数据确定疾病与基因的相关性
 - 确定特殊治疗方案的最适人群
- 见文献 I. M. Mullins et al.,
Computers in Biology and Medicine
36:1351-1377 (2006) Data mining and
clinical data repositories: Insights from
a 667,000 patient data set.



信息学可以整合各种数据资源，提出特定的治疗方案

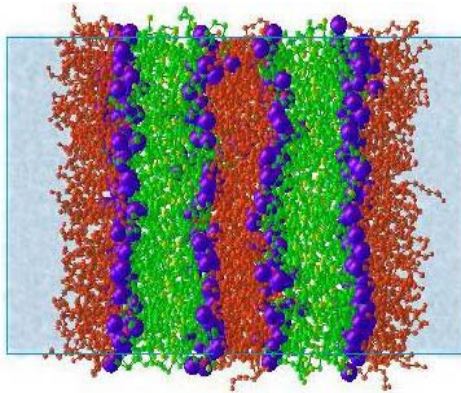
N. Theis, IBM Research

应用计算科学进行材料创新：设计先进功能材料的虚拟实验室

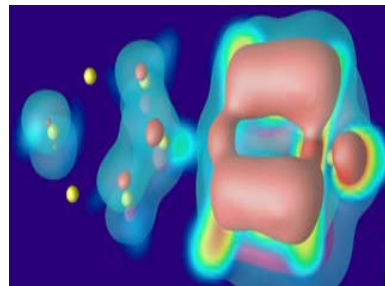
加速设计开发特殊用途的新材料

- 目前最先进的方法：初始电子结构计算；经典分子动力学；微型有限元模拟。
- “蓝色基因”高性能计算机硬件
- 10 万节点高效并行的创新算法

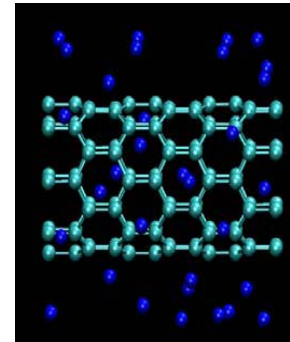
IBM “蓝色基因” 超级计算机



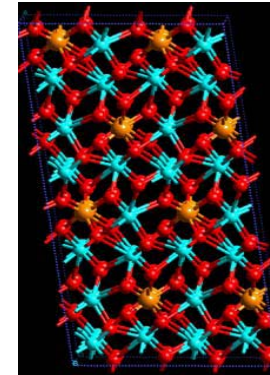
分子自组装



分子电子设备



碳纳米管化学



新型功能材料

N. Theis, IBM Research