晓材matmole——中国科学技术大学讲座

药融云·2023/11

一、背景介绍

二、产品架构

三、功能介绍

四、产品特点

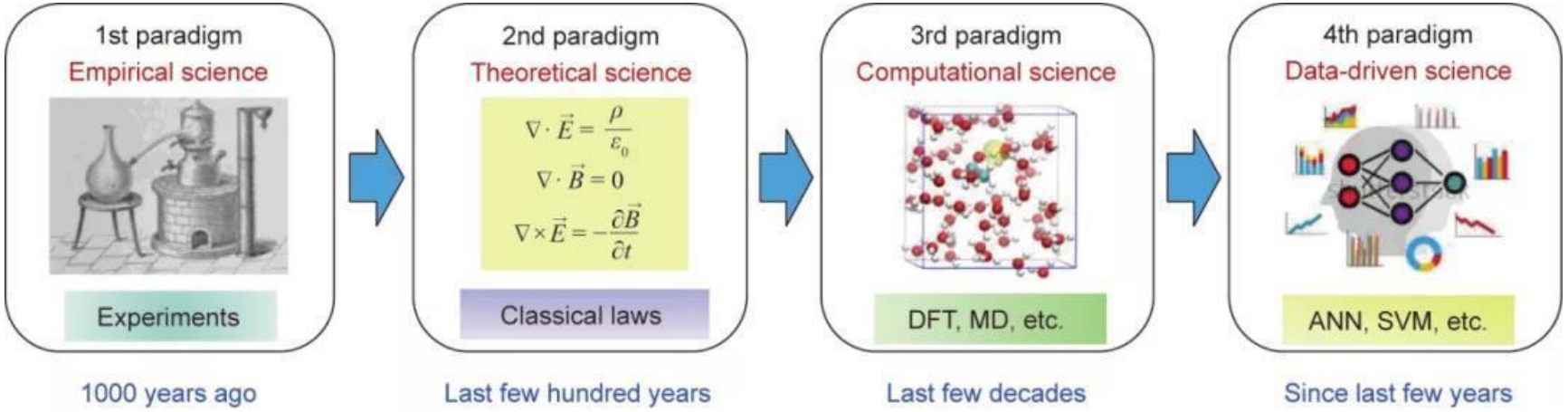
一、背景介绍

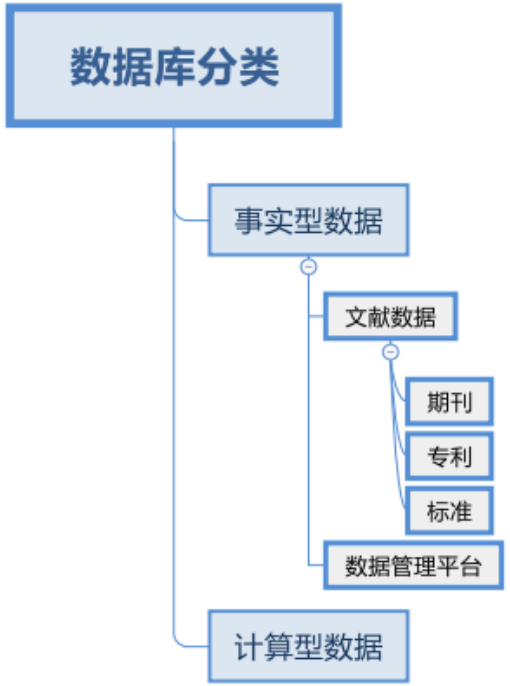
一、背景介绍

基于科学发展第四范式——**数据驱动**的高速发展和国家“十三五”规划中对“材料基因工程”的相关要求，晓材Matmole项目应运而生。

晓材Matmole是高质量的科学知识数据库，主要收录了材料科学及其相关领域的事实型数据。包含了海量的专业数据，数据内容处于国内领先地位，力求打造国内材料科学事实型数据库典范。

晓材Matmole主要面向高校，企业及个人，提供优质的KaaS（Knowledge as a Service），为用户提供一个专业、快捷多视角的材料科学知识数据信息系统，让数据赋能研发，辅助提高新材料研发效率，为材料科研工作者提供全方位的数据查询服务。





二、产品架构

二、产品架构

晓材matmole数据库平台

材料知识工程系统

- 相图数据库
- 金属材料库
- 晶体数据库
- 高分子材料库
- 纳米材料库
- 离子液体库
- 材料性能库
- 材料腐蚀库
- 焊接材料库
- ……

数据生产中心

- 文献智能抽取
- 众包团队补充

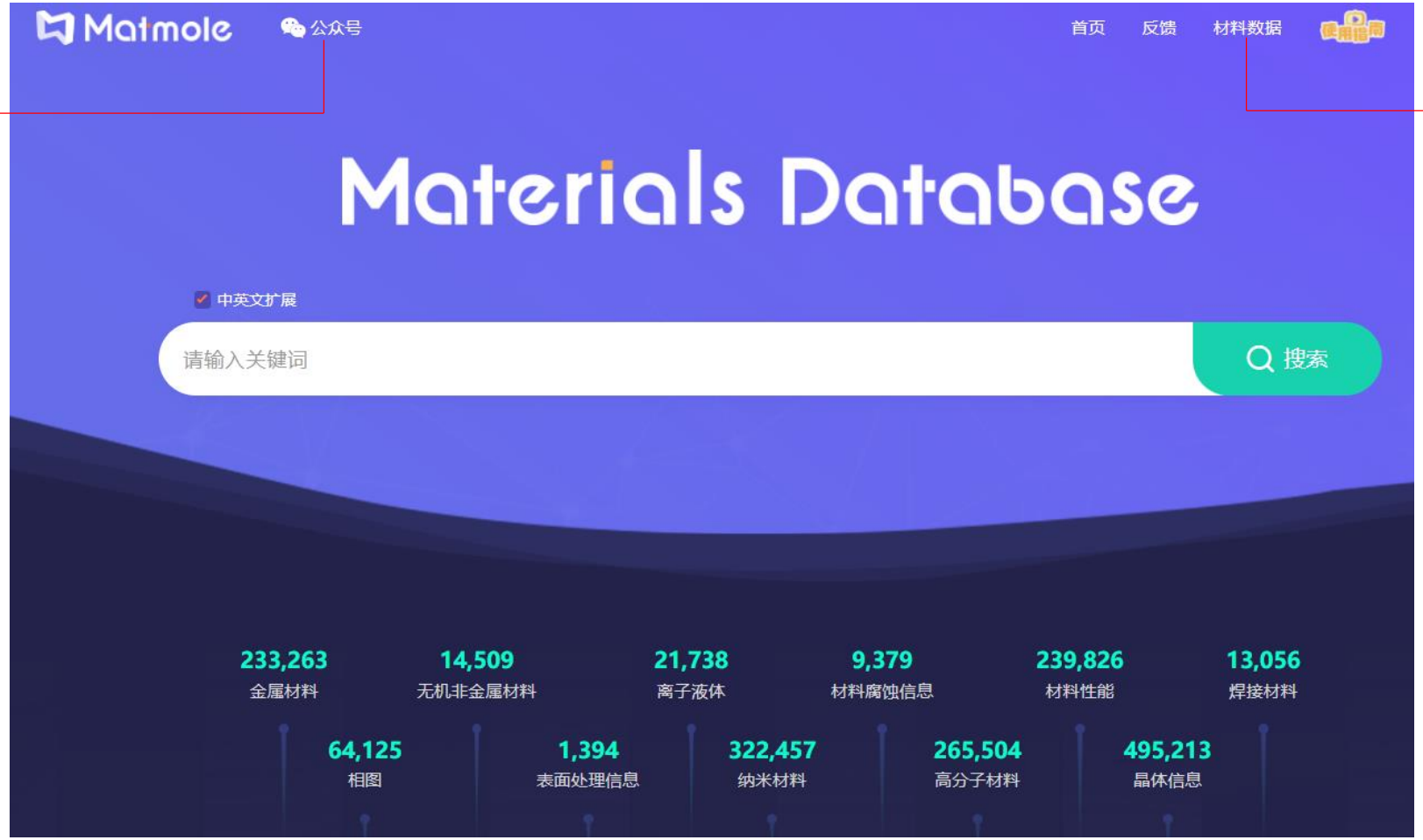
三、功能介绍

3.1、综合检索

晓材matmole访问网址：https://mat.bcpmdata.com/

扫码关注微信公众号

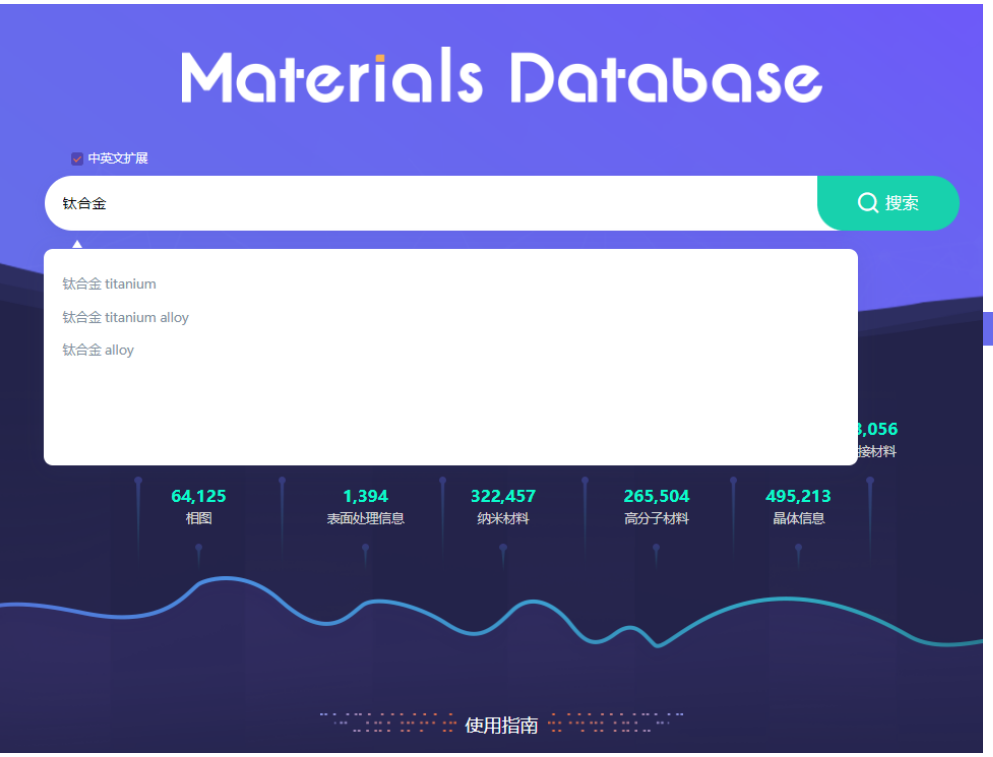
主界面

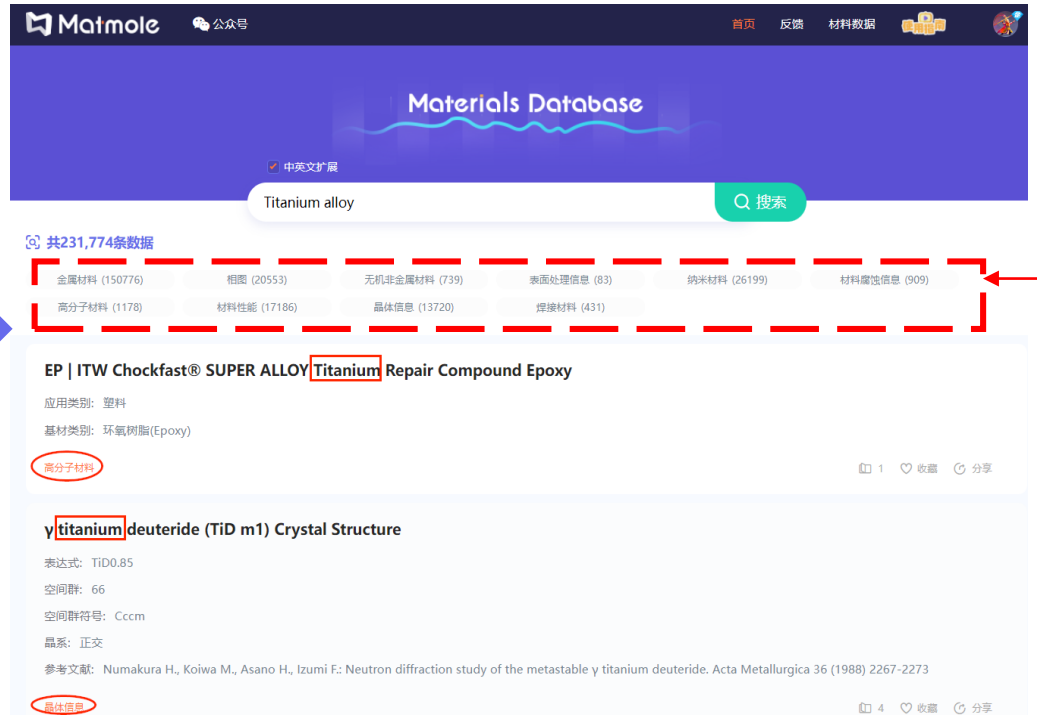


3.1、综合检索

通过晓材Matmole首页的“综合检索”，对数据进行快速的全文/综合，中英文检索。

本例中，我们搜索“钛合金”，即可找到所有有关“钛合金”的数据。





可根据需要进入不同的数据库

3.2、高级检索

为满足用户更精准的检索要求，提供尽可能多的筛选条件，可以快速定位想要的数据。

以下我们用“相图材料库”举例。

1、点击进入相图数据库，右侧栏为高级检索栏：

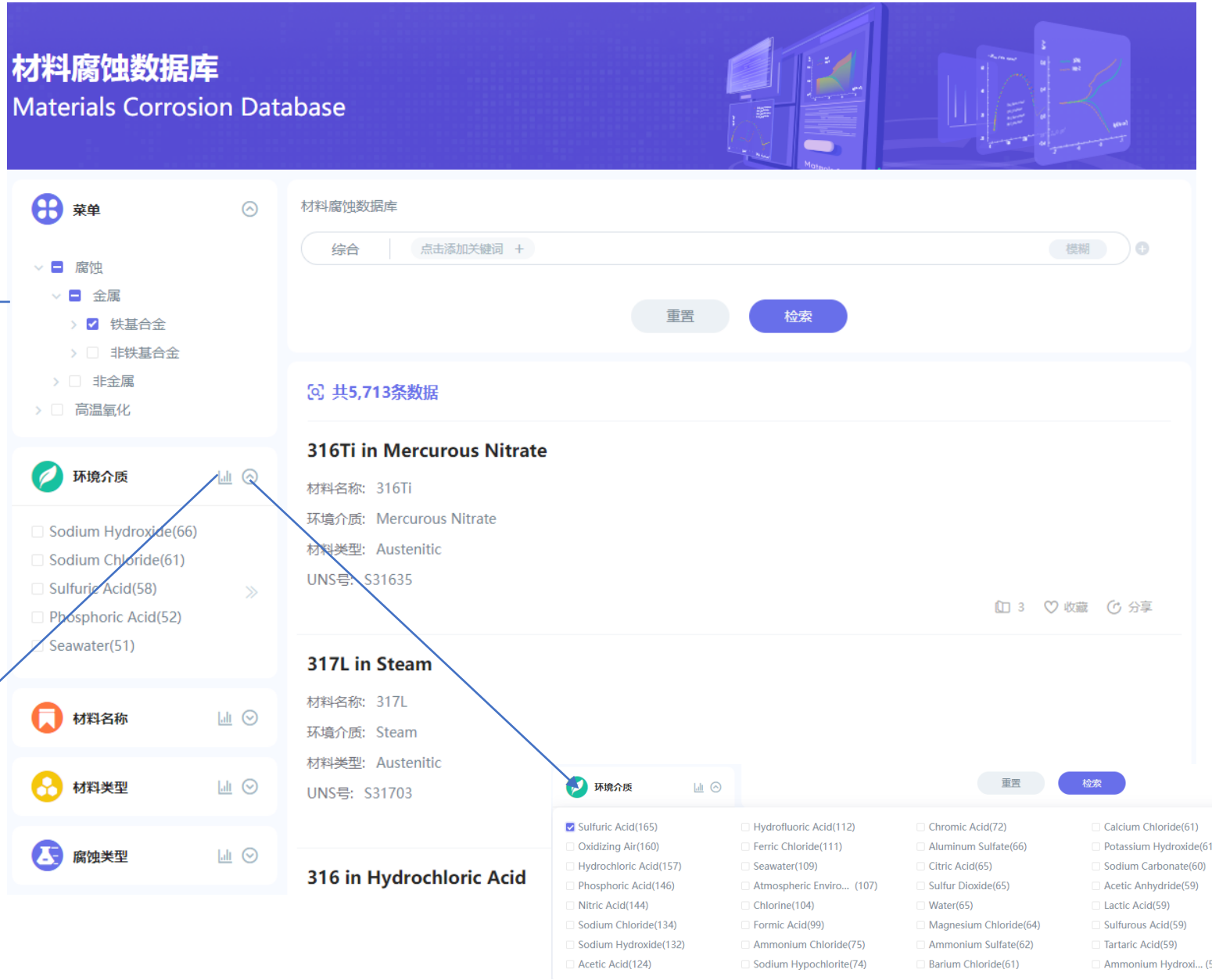
1. 默认只有一个“综合检索框”，可以名称、关键词等直接搜索
2. 点击+，添加搜索框，每次添加都默认“标题检索字段”
3. 从第二个搜索框起，可选择：
   AND→交集
   OR →并集
   NOT→不包含
4. 多重筛选项，进一步缩小目标检索范围

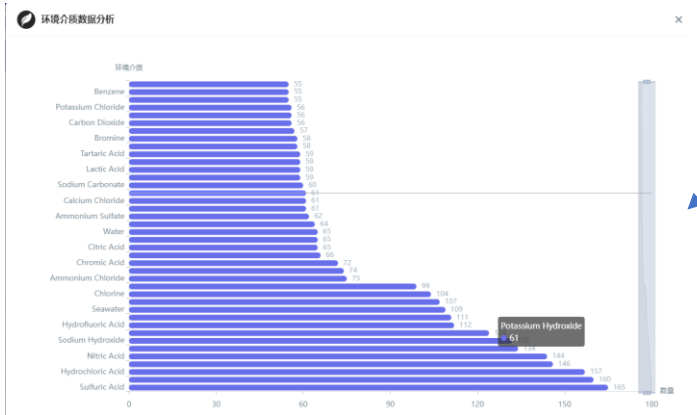
3.3、树状聚类检索

数据库左侧为树状结构和聚类检索项，提供多维度检索

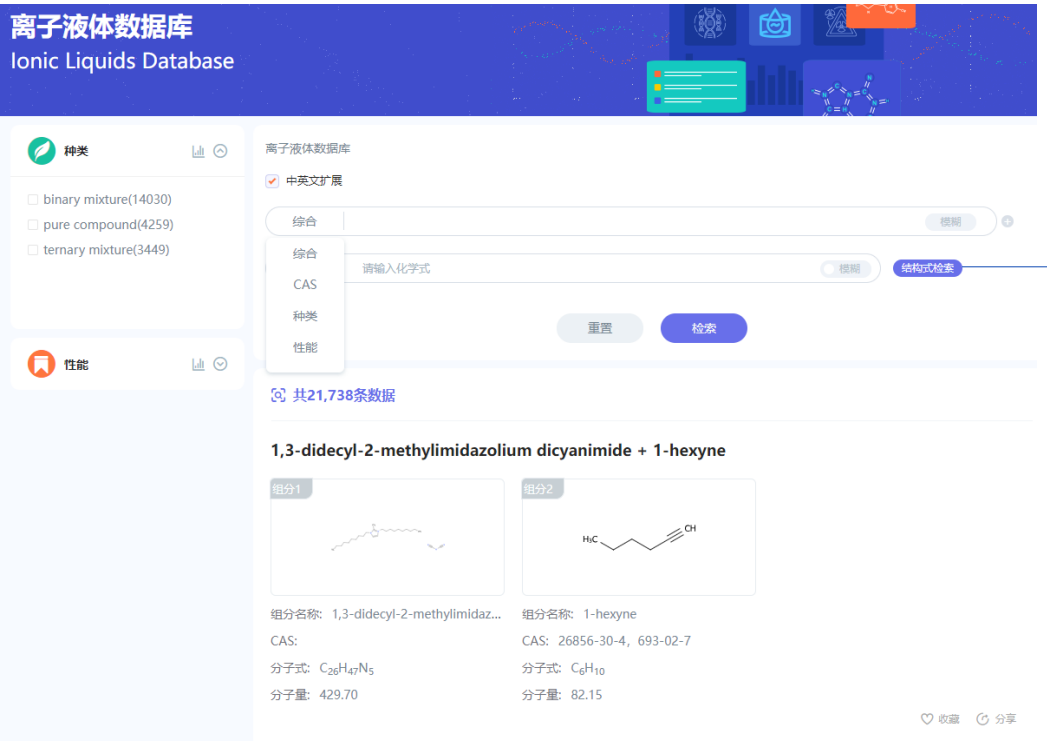
树状结构

1. 树状结构会根据用户选择实时进行数据反馈；
2. 支持多选
3. 聚类项数据可视化展示：每个聚类，都支持数据可视化统计



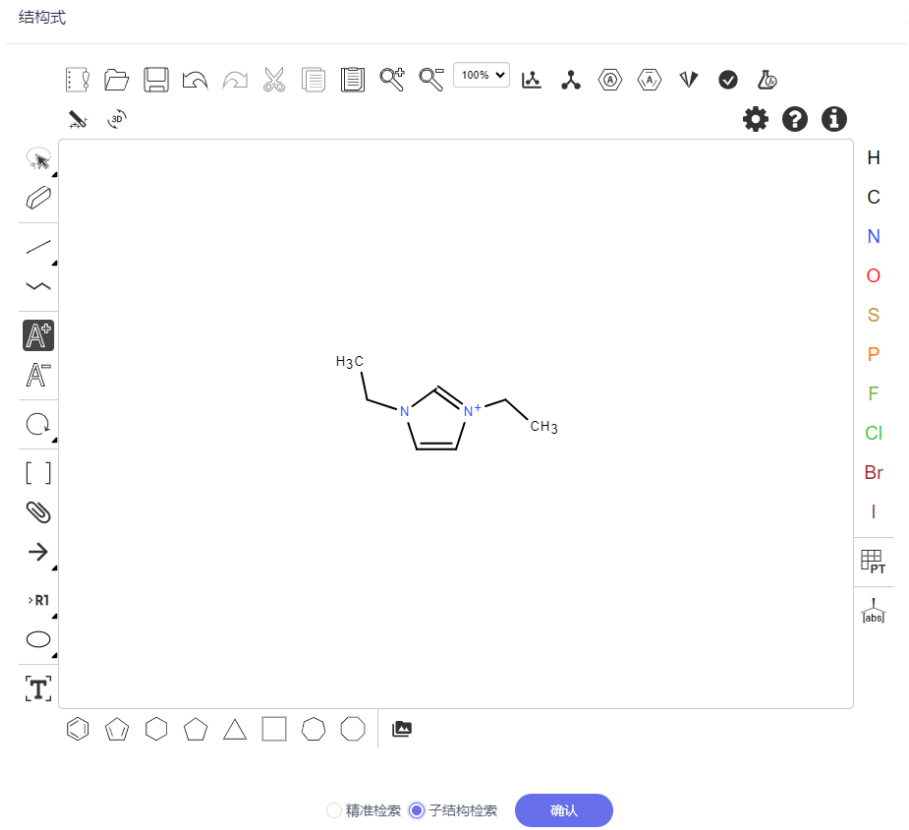


3.4、结构式检索



1

在结构式检索工具中，可以绘制化学结构式，上传图片，上传结构文件进行识别



3.5、材料性能查询

首页>高分子材料数据库>数据详情

LDPE | Eastman Tenite Polyethylene 1810A Low Density Polyethylene - Molding

收藏 分享

数据概况 基本信息 产品简介 材料性能

基本信息

应用类别	塑料
属性类别	热塑性塑料
数据类别	polymer
材料牌号	Eastman Tenite Polyethylene 1810A Low Density Polyethylene - Molding
产品类别	LDPE
来源类别	industry
基材类别	聚乙烯(PE)

材料性能

物理性能

performance	value	unit	condition	method
密度	0.921	g/cc		ASTM D4883
熔体流动	0.70	g/10 min	Load 2.16 kg, Temperature 190 °C	ASTM D1238

机械性能

performance	value	unit	condition	method
抗拉强度(极限)	13.8	MPa	500 mm/min (20 in./min)	ASTM D638
抗拉强度(屈服)	11.0	MPa	500 mm/min (20 in./min)	ASTM D638
断裂伸长率	500	%	500 mm/min (20 in./min)	ASTM D638
弯曲模量	0.221	GPa	Strain 2.00 %	ASTM D 790

热性能

performance	value	unit	condition	method
维卡软化点	95.0	°C		ASTM D1525
脆化温度	-73.0	°C		ASTM D746

首页>离子液体数据库>数据详情

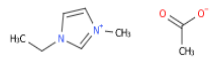
1-ethyl-3-methylimidazolium acetate

收藏 分享

数据概况 基本信息 物化性质

基本信息

组分1



名称	1-ethyl-3-methylimidazolium acetate
CAS	143314-17-4
分子式	$C_8H_{14}N_2O_2$
分子量	170.21

物化性质

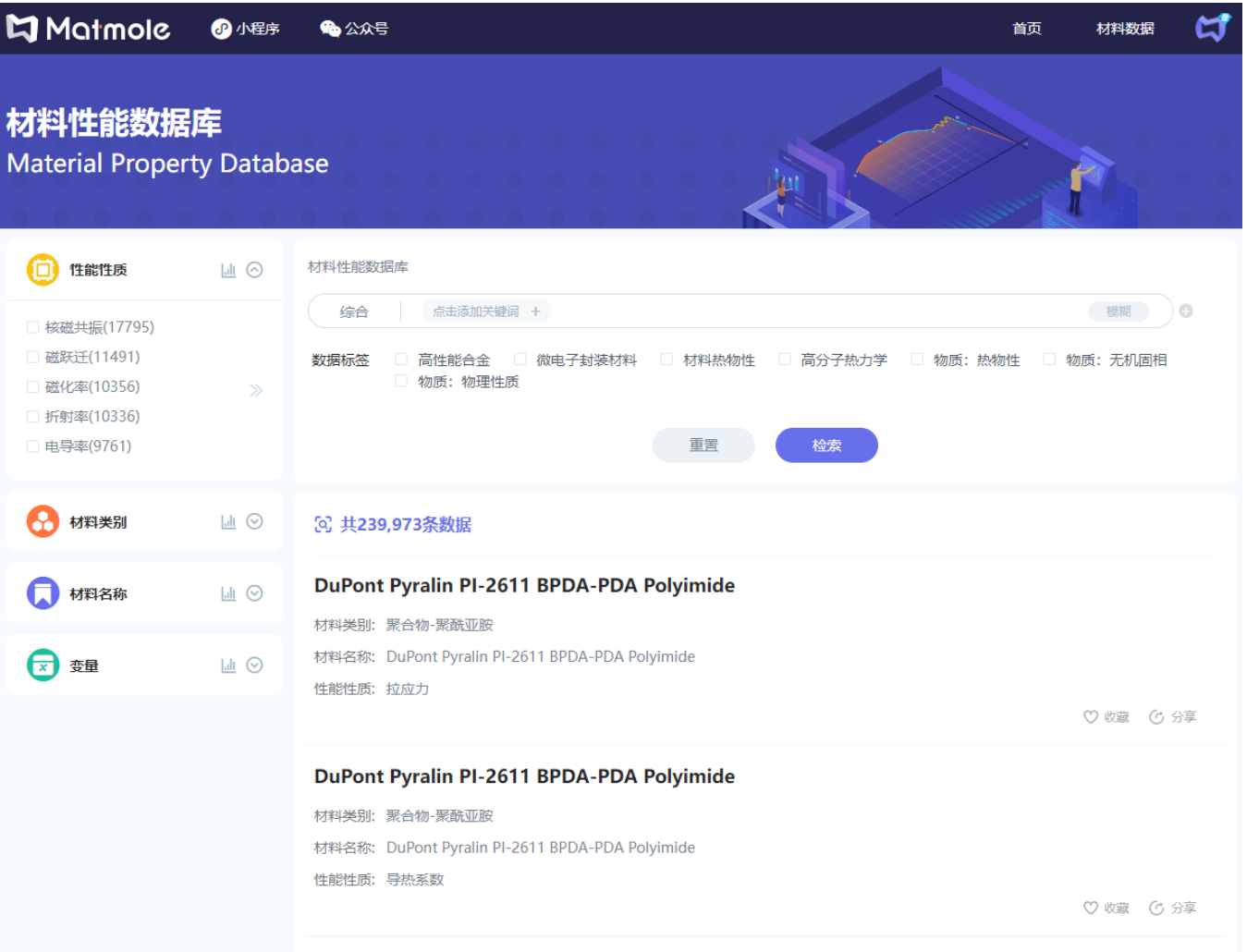
Density

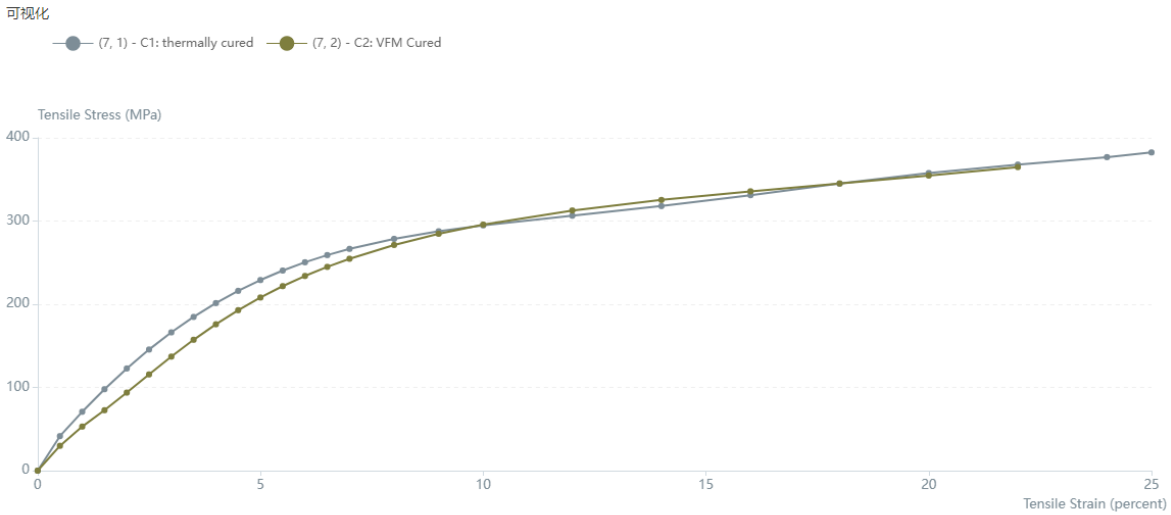
已选择 x轴 请选择 y轴 请选择 重置 绘图 下载CSV

Temperature, K	Pressure, kPa	Specific density, kg/m^3, Liquid	Specific density, kg/m^3, Liquid(deviation)	Density(g/cm3)	P(MPa) (The default value is 0.1 MPa)	Temperature(K)	Reference
293.14	5000	1104.5	± 4.1				
293.15	500	1103.6	± 4.1				
293.15	2500	1103.7	± 4.1				

3.5、材料性能查询

材料性能库包含了众多材料（金属、无机非金属、高分子等）的各种性能，诸如力学/电学/热力学等等物化性能参数，通过多维度的检索条件， 能够快速定位到目标数据，同时我们对部分性能进行了可视化的展示， 能够更直观的查看相关性能的变化趋势，为相关的科学研究提供参考依据。





3.6、材料组成确定

首页>金属材料数据库>数据详情

X5CrNiMo17-12-2, BS EN 10088-3 (bright bars)

收藏 分享

数据概况 | 基本信息 | 化学组成 | 机械性能 | 相关组织

基本信息

材料名称	X5CrNiMo17-12-2,1.4401	国家	英国
标准机构	BSI (United Kingdom)	标准号	BS EN 10088-3
标准状态	Active	标准类型	Standard
标准年份	2005	数据来源	Worldwide Guide to Equivalent Irons and Steels, 5th ed. ASM International 2006
形式	Wrought	材料种类	铁基合金,奥氏体不锈钢,高合金钢

说 明 Semi-finished products, standard grade austenitic corrosion resisting; bright bars, solution ann; mech props vary with size.

化学组成

化学元素	含量
基本元素	Fe (Iron)
C	0.07% (maximum)
Cr	16.5 to 18.5%
Fe	62.7 to 71.5% (estimate)
Mn	2% (maximum)
Mo	2 to 2.5%
N	0.11% (maximum)
Ni	10 to 13%
P	0.045% (maximum)
S	0.03% (maximum)
Si	1% (maximum)
备注	Fe is listed as a Base element for this material, but its % value is not listed in the specification. The value shown is a calculated one.

机械性能

属性	值
屈服强度	200MPa (minimum)
抗拉强度	500 to 950MPa
延伸率	25% strain (minimum)

相关组织

缩写	UNE	运行状态	Active
组织名称	UNE	组织类型	Standards Organization

化学组成

化学元素	含量
基本元素	Fe (Iron)
C	0.07% (maximum)
Cr	16.5 to 18.5%
Fe	62.7 to 71.5% (estimate)
Mn	2% (maximum)
Mo	2 to 2.5%
N	0.11% (maximum)
Ni	10 to 13%
P	0.045% (maximum)
S	0.03% (maximum)
Si	1% (maximum)
备注	Fe is listed as a Base element for this material, but its % value is not listed in the specification. The value shown is a calculated one.

3.6、材料组成确定

晶体信息

Phase Label	Published Phase Label	Formula	Phase Prototype	Pearson Symbol	Hermann Mauguin Symbol	Space Group Value	Reference	Crystallographic Info
(Fe) rt	α	Fe	W	cI2	Im-3m	–		
Fe_3C m	cem	Fe_3C	Fe_3C-b	oP16	Pnma	–		
(Fe) ht	γ	$FeC_{0.063}$	Cu	cF4	Fm-3m	–		

晶体系统信息

Phase Label	Published Phase Label	Formula	Phase Prototype	Pearson Symbol	Hermann Mauguin Symbol	Space Group Value	Reference	Crystallographic Info
Fe_5C_2 m-tricl	undefined	Fe_5C_2	Fe_5C_2	aP28	P-1	undefined		
Fe_4C m	undefined	Fe_4C	Fe_4C	cP5	P-43m	undefined		
(C) lon	undefined	C	C-b	hP4	$P6_3/mmc$	undefined		
(C) gra rhom	undefined	C	C	hR6	R-3m	undefined		
(C) gra	undefined	C	C-a	hP4	$P6_3/mmc$	undefined		
(C) tf	undefined	C	C	cI16	Im-3m	undefined		

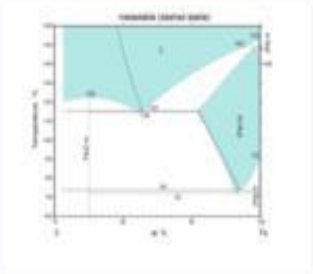
Carbon-Iron Binary Ph

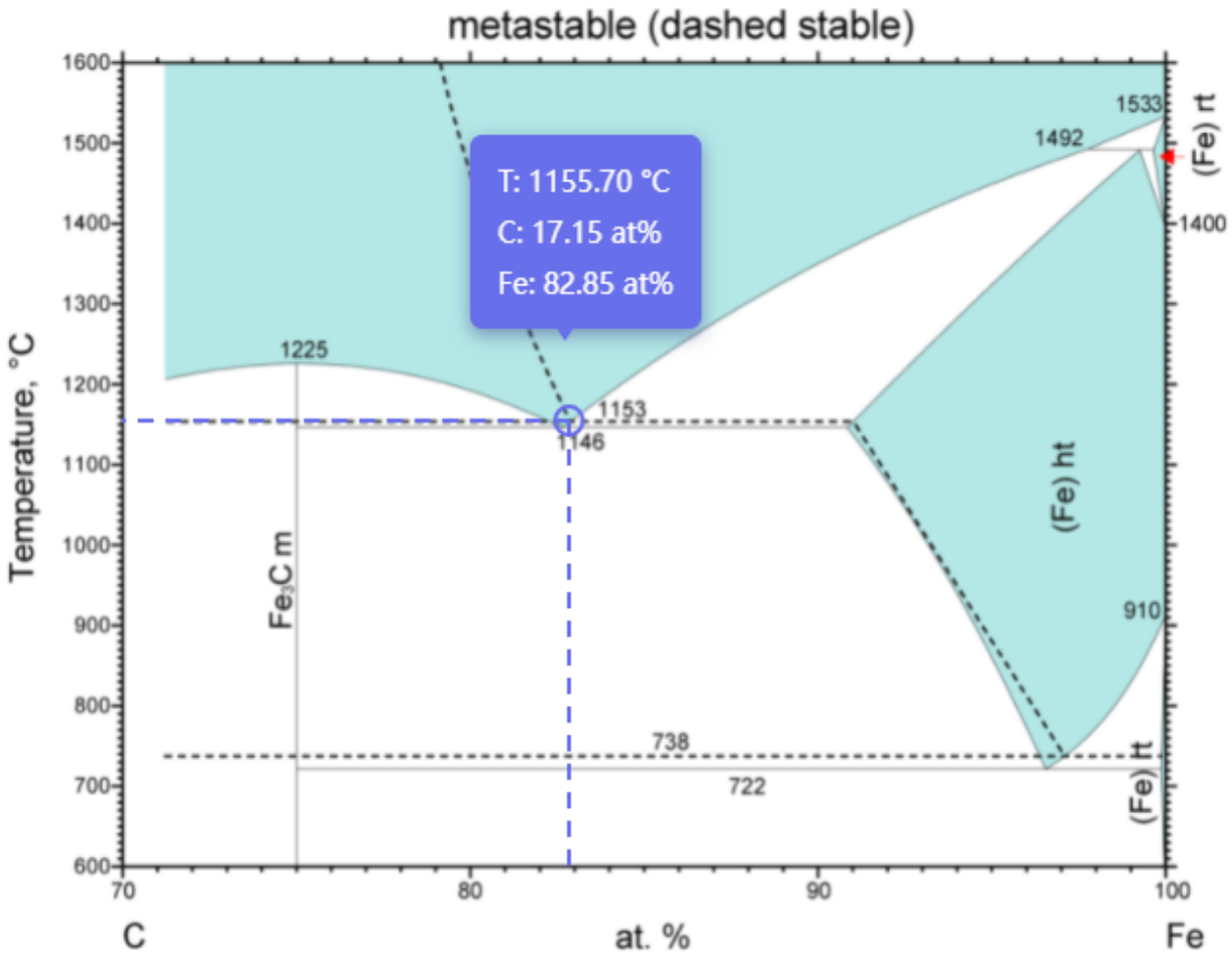
组元: C-Fe

组元数量: 二元

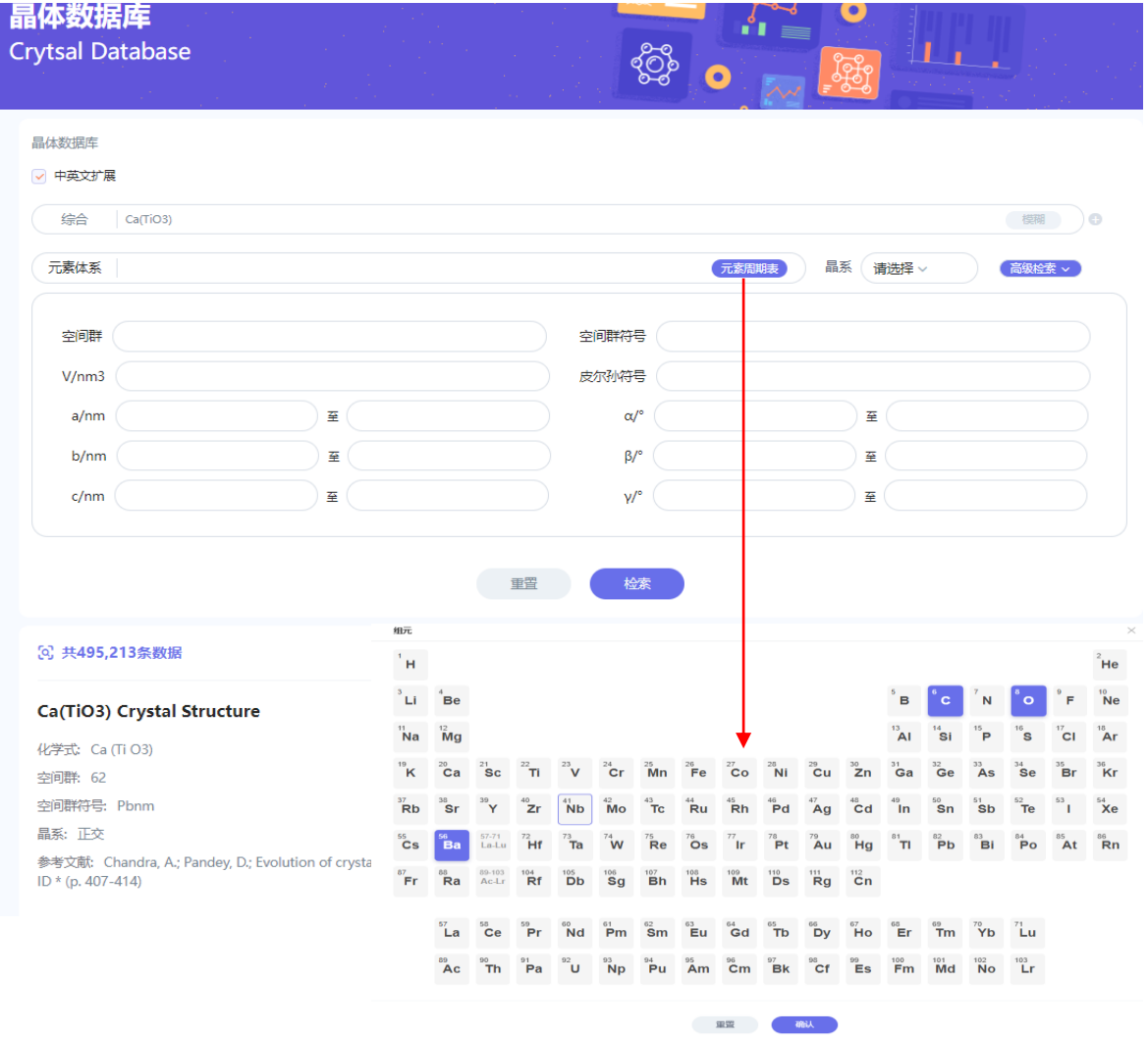
材料类型: 合金相图

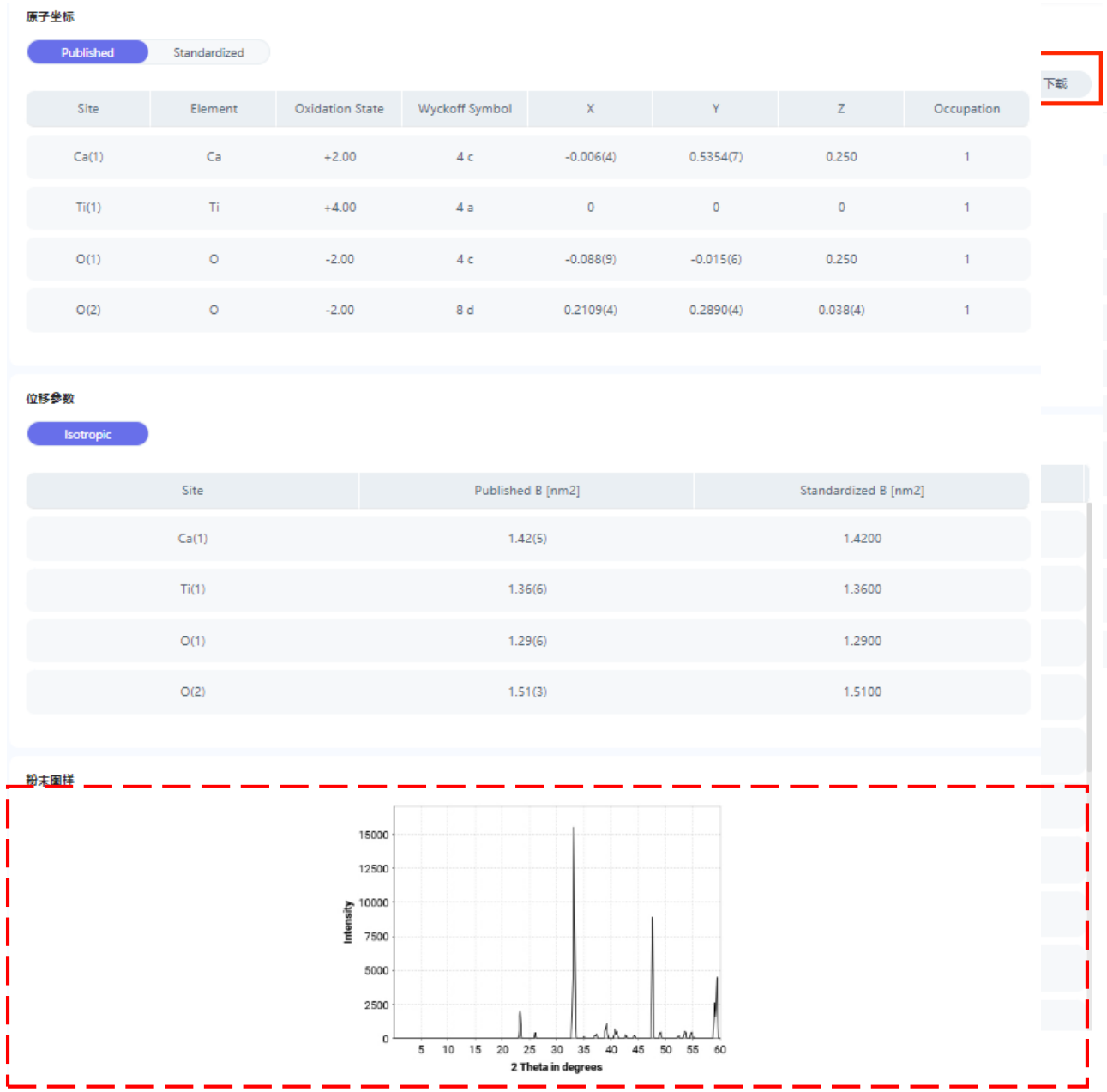
相图





3.7、材料结构查询


晶体数据库
Crytsal Database
晶体数据库
中英文扩展
综合
Ca(TiO3)
模糊
元素体系
元素周期表
晶系
请选择
高级检索
空间群
空间群符号
V/nm3
皮尔孙符号
a/nm
至
α/°
b/nm
β/°
c/nm
γ/°
重置
检索
共495,213条数据
Ca(TiO3) Crystal Structure
化学式：Ca (Ti O3)
空间群：62
空间群符号：Pbnm
晶系：正交
参考文献：Chandra, A.; Pandey, D.; Evolution of crysta
ID * (p. 407-414)
组元
重置
确认


原子坐标
Published
Standardized
下载
Site | Element | Oxidation State | Wyckoff Symbol | X | Y | Z | Occupation
Ca(1) | Ca | +2.00 | 4 c | -0.006(4) | 0.5354(7) | 0.250 | 1
Ti(1) | Ti | +4.00 | 4 a | 0 | 0 | 0 | 1
O(1) | O | -2.00 | 4 c | -0.088(9) | -0.015(6) | 0.250 | 1
O(2) | O | -2.00 | 8 d | 0.2109(4) | 0.2890(4) | 0.038(4) | 1
位移参数
Isotropic
Site | Published B [nm2] | Standardized B [nm2]
Ca(1) | 1.42(5) | 1.4200
Ti(1) | 1.36(6) | 1.3600
O(1) | 1.29(6) | 1.2900
O(2) | 1.51(3) | 1.5100
粉末图样
Intensity
2 Theta in degrees

3.8、材料工艺查询

材料腐蚀数据库

首页>材料腐蚀数据库>数据详情

316 in Water

收藏 分享

数据概况 | 基本信息 | 环境信息 | 腐蚀数据

基本信息

材料名称	316	材料类别	Austenitic
UNS号	S31600		

环境信息

环境介质	Water
化学式	H_2O
室温物理状态	Liquid
分子量	18g (estimate)
沸点 Ref	100°C
熔点 Ref	0°C

腐蚀数据

一键重置

腐蚀评级	腐蚀速率(mm/yr)	温度(°C)	条件	来源
A (Resistant)	≤ 0.0508	20	Tap water	Thyssen Edelstahl werke AG 1989
A (Resistant)	≤ 0.0508	20	Tap water	Thyssen Edelstahl werke AG 1989

材料焊接数据库

首页>焊接材料数据库>数据详情

316 L

收藏 分享

数据概况 | 基本信息 | 焊接位置 | 化学组成 | 机械性能

基本信息

船级社认证	CE	牌号	316 L
标准厂家	AWS;EN;DIN	产品形式	实心焊丝
说明	GMAW-GTAW Solid wires	气体参考	en iso 14175:M11, M12, M13
再干燥温度	not required	类型	Solid stainless steel welding wire (AISI 316)
焊接方法	气体保护焊		
符合标准	AWS A 5.9: ER 316L; EN 14343-A: G 19 12 3 L; DIN 8556: SG X2 CrNiMo 19.12;		
应用领域	The alloy is widely used in the chemical and food-processing industries, as well as in shipbuilding and various types of architectural structure.		

焊接位置

化学组成

元素	值	单位	注解
C	0.035	%	
Cr	16-18	%	
Ni	10-15	%	

3.8、材料工艺查询

表面处理数据库
Surface Treatment Database

涂层类别
- 硬质涂层(136)
- 面漆：低VOC(87)
- 底漆：无铬(78)
- 面漆：VOC(70)
- 封闭/转化膜：三价铬(44)

沉积方式
- 其他(226)
- 浸涂/喷涂/刷涂/擦拭(140)
- 电镀/化学镀(103)
- 涂料(67)
- 转化处理(50)

替代工艺
- 铬酸盐底漆(298)
- 铬酸盐转化膜(252)
- 镀镉(247)
- 镀硬铬(223)
- 高VOC材料(222)

表面处理数据库

中英文扩展

综合 | 模糊

数据类型 涂层 文档

重置 检索

共1,394条数据

cWorks - Corrosion Identification and Management Software for Aircraft Corrosion Control (cWorks –Corrosion Control System) 2011

文档类型：简报

收藏 分享

Application of Several HVOF Coatings on Different Base Materials 2006

替代工艺：镀硬铬

文档类型：技术报告

收藏 分享

Implementation of Rare Earth Primers and Pretreatments for Military Applications 2012

首页>表面处理数据库>数据详情

Application of Several HVOF Coatings

收藏 分享

数据概况 基本信息 补充信

基本信息

数据编码	Doc-228
文档级别	Dist A Unlimited

补充信息

替代工艺	镀硬铬
通用系统	Aircraft - rotary wing
测试详情	Axial fatigue,Tensile testing

涂层信息

数据编码
Coating-006
Coating-007

测试信息

数据编码
Test-005
Test-007

联系人信息

数据编码
Contact-136

总结

完整的报告是Doc-213。单击上方的原始文档按钮可直接转到

文件

文件类型	文件总页数	文件大小
pdf	36	30.69MB

在线预览 下载文件

上一页 1 \ 36 跳转到 下一页

From: "Validation of HVOF Thermal Spray Coatings as a Replacement for Hard Chrome Plating on Helicopter Dynamic Components"
Distribution Unlimited

CUSTOMER: **SAIC/GEO-CENTERS**
4555 OVERLOOK AVE, WASHINGTON DC 20375

hitemco *engineered coatings*
160 SWEET HOLLOW ROAD
OLD BETHPAGE NY, 11804

REPORT NO. HTC2006-001
PROJECT NO. HTC 81001/1-4

TITLE:

Application of Several HVOF Coatings on Different Base Materials

SUMMARY / ABSTRACT:

Background
The DOD Hard Chrome Alternatives Team (HCAT) is executing a project to qualify HVOF thermal spray coatings as a replacement for electrolytic hard chrome plating on helicopter dynamic components. A Materials Joint Test Protocol (MJTP) has been developed based on stakeholder requirements for the qualification. Axial fatigue testing is a part of that MJTP. The HCAT has a requirement for the application of several HVOF coatings onto several different base materials.

Conclusion
In response to your "Request For Quote" and "Statement Of Work" forwarded to us Nov. 09, 2005 HITEMCO has performed the required work as described. Reference Customer P.O. 4500809222 and Hitemco quotation NY-05-4458.

Hitemco has a utilized our dedicated spray cell outfitted with sophisticated tooling, temperature monitoring and experienced operators dedicated to the successful completion of the requested work. The parameters used were those optimized and used for all other HCAT programs. All test results including almen, microhardness, bond strength, temperature profile and photomicrograph analysis is included.

ISSUE DATE: **July 30, 2006**
CLASSIFICATION:

AUTHOR:
James Mallon
Sales Engineering Coordinator
TEL. NO.: (516)-752-7882
FAX. NO.: (516)-752-7951
E-MAIL: jim.mallon@hitemco.com

DEPARTMENT: Applications Engineering

PROJECT TEAM:
R. Maragh – Process Eng.
R. Montalbano – Application Eng.
K. Larson – Metallographic Lab.

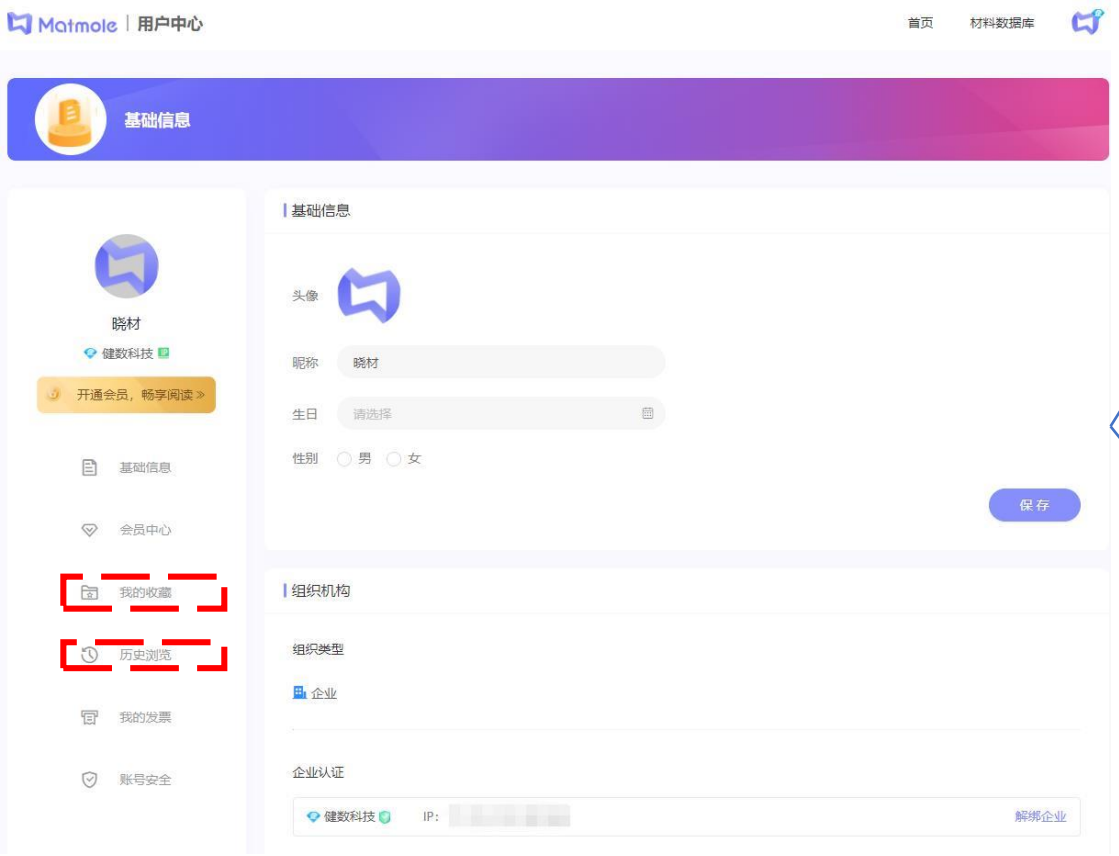
APPROVED BY:
Ed Garofalo
Vice President
TEL. NO.: (516)-752-7882 x13
FAX. NO.: (516)-752-7951
E-MAIL: edwin.garofalo@hitemco.com

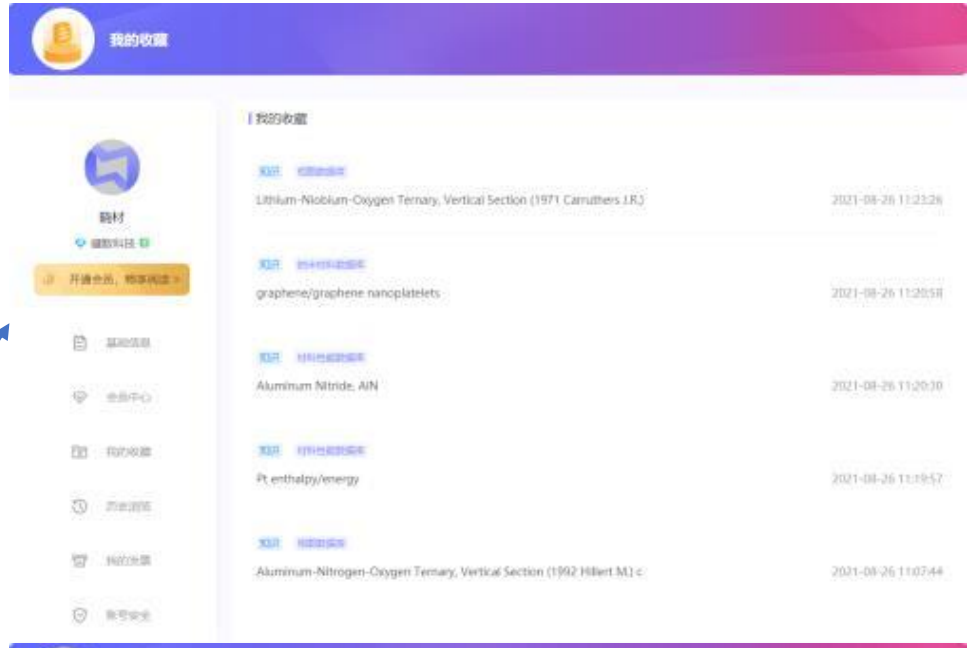
DISTRIBUTION:
B. Sartwell - ETP Manager / Naval Research Lab.
T. Barnard - President Hitemco
D. Pepino - QC Manager Hitemco
Project Folder - R&D Hitemco

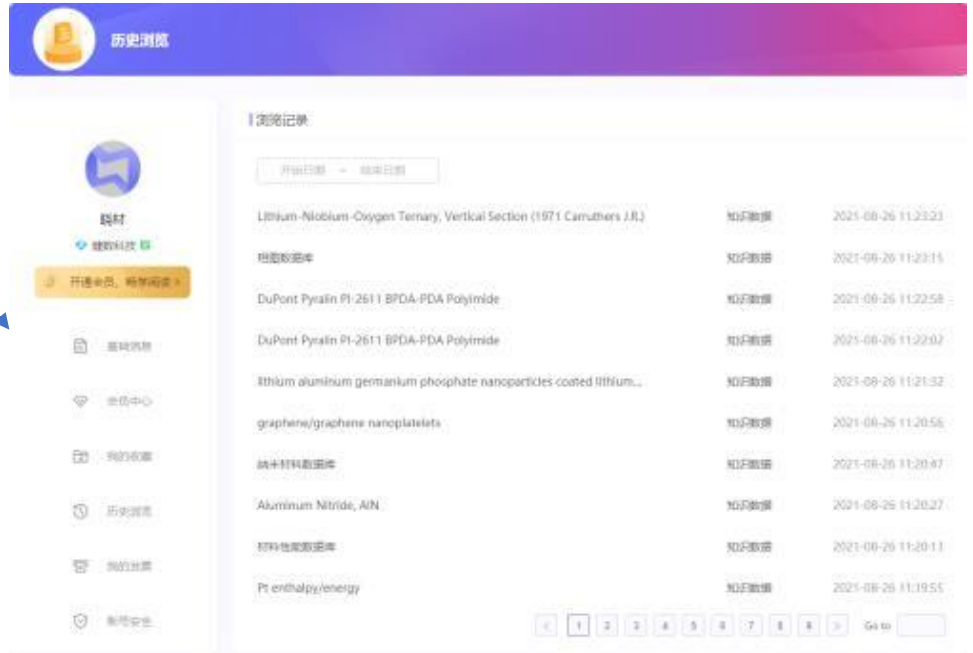
INDUSTRY SEGMENT:
[ ]
[x] AERO
[ ] IGT

3.9、用户中心

点击右上角头像可进入用户中心，在这里可以查看用户基本信息、权限信息、收藏夹及历史记录，方便回溯看过及收藏的内容。







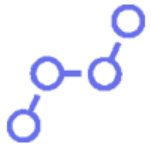
四、产品特点

4、产品特点

利用计算机技术，在海量互联网资源和大量科学文献中提取关键元数据，按照数据内容类别建立知识工程体系，形成专业的材料科学智能检索系统。

数据全面，定期更新

海量专业数据进行有效整合，可视化展示，并进行定期更新。填补国内科学数据库空白，数据覆盖面全，种类丰富。



数据多维度深度加工

各数据库精细化特色设计，并不断优化，性能强大。个性化检索方案，便于用户快速定位，随时查询，为用户提供一站式服务。

个性化数据库设计

通过全面的数据整合加工，将材料数据与工艺/性能、文献深度结合，为用户提供多维度，多视角的材料科学综合数据平台，为学习和研发提供强大助力。

服务灵活定制

依托强大的专业数据团队和计算机技术团队，我们的服务具有高度可定制的特点，涵盖了数据采集，数据清洗，平台开发等。

晓材 Matmole

谢谢

智能呈现世界科学家的知识，高效传递全球工程师的经验

Presenting the Konwledge of Worldwide Scientists Intelligently, Providing the Experience of Global Engineers Efficiently

网站地址： https://matmole.com/