进展



# 原子制造的物质科学基础

戴庆<sup>1†</sup>, 宋凤麒<sup>2†</sup>, 潘曹峰<sup>3†</sup>, 刘开辉<sup>7</sup>, 姚广保<sup>4</sup>, 郑浩<sup>5</sup>, 谭元植<sup>6</sup>, 潘金波<sup>9</sup>, 杜灵杰<sup>2</sup>, 黄璞<sup>2</sup>, 王曾晖<sup>8</sup>, 陈辉<sup>9</sup>, 张晨栋<sup>10</sup>, 费付聪<sup>2</sup>, 徐红星<sup>11</sup>, 戴亚飞<sup>12\*</sup>

- 1. 国家纳米科学中心, 北京 100190;
- 2. 南京大学原子制造研究院, 南京 210093;
- 3. 北京航空航天大学原子制造研究院, 北京 100191;
- 4. 上海交通大学化学化工学院, 上海 200240;
- 5. 上海交通大学物理与天文学院, 上海 200240;
- 6. 厦门大学化学化工学院, 厦门 361005;
- 7. 北京大学物理学院, 北京 100871;
- 8. 电子科技大学基础与前沿研究院, 成都 611731;
- 9. 中国科学院物理研究所, 北京 100190;
- 10. 武汉大学物理科学与技术学院, 武汉 430072;
- 11. 武汉大学微电子学院, 武汉 430072;
- 12. 国家自然科学基金委员会交叉科学部,北京 100085
- † 同等贡献
- \*联系人, E-mail: daiyf@nsfc.gov.cn

2024-02-14 收稿, 2024-04-16 修回, 2024-04-24 接受, 2024-04-25 网络版发表 国家重点研发计划(2022YFA1402404)、国家自然科学基金(T2241027, 12025404, T2325007, 62250073, U21A20459, 52025023)和广东省基础 与应用基础研究基金(2021B0301030002)资助

**摘要** 近年来,原子制造技术备受关注,已成为各国积极追求的前沿制造技术领域.一代物质科学,一代制造革新, 原子制造技术的发展不仅仰赖于深厚的物质科学底蕴,还需要解决高效的原子精准操控与测量、原子尺度结构的 物性设计等多个方面的基础科学问题.2023年3月,国家自然科学基金委员会交叉科学部在武汉召开了主题为"原 子制造的物质科学基础"的战略研讨会.本文基于会议研讨的相关内容,对原子制造技术的发展背景、概念内涵以 及所面临的挑战进行了凝练,并提出如何利用该技术推动物质科学的快速发展,同时也就国家自然科学基金委员 会对该领域的顶层设计和战略规划提出了政策建议.

关键词 原子制造,物质科学,原子操控,原子级制造,单原子器件,物质创制

人类制造技术经历了宏观制造(毫米级)、介观制造(亚毫米特征尺度)、微米制造和纳米制造等阶段,特征尺寸不断缩小,器件的集成度和核心性能指标也随之不断提升.原子作为常规物质世界的最小构建单元,在制造领域具有极其重要的地位.随着特征尺度的进

一步微缩,原子制造是人类制造技术的自然演进,已成 为迄今为止制造科学发展的终极目标.原子制造是一 种极限微制造技术,其操控能力达到了原子级精确度, 产品结构实现了逐一原子的完美排列,产品性能得到 原子级别的优化.原子制造能够实现集成度和性能指

引用格式: 戴庆, 宋凤麒, 潘曹峰, 等. 原子制造的物质科学基础. 科学通报, 2024, 69: 1–12 Dai Q, Song F Q, Pan C F, et al. The fundamental physical science of atom manufacturing (in Chinese). Chin Sci Bull, 2024, 69: 1–12, doi: 10.1360/TB-2024-0170 标几乎接近常规极限的全新一代产品.与此同时,原子制造也代表了对分子级物质属性的突破和改造,因此可以实现物质合成、材料制备乃至器件创制的底层创新.

随着人类步入原子制造时代,我们将迈向一个全 新的技术时代. 2015年以来, 美国国防高级研究计划局 (Defense Advanced Research Projects Agency, DAR-PA)、能源部、日本相关机构和我国多个部委都部署实 施了原子制造相关技术开发的重大计划. 2022年, 中国 科学技术协会评选的十大科学问题<sup>[1]</sup>、中国工程院评 选的信息方向十大研究/开发前沿都关注了原子制造的 相关技术、《美国先进制造国家战略》也强调了原子 制造在微电子工艺方面的重要性. 原子制造正在成为 世界大国间先进制造技术竞争的一个焦点. 成为我国 建设制造强国、争夺国际先进制造价值链主动权亟待 攻克的关键技术之一. 然而, 原子制造技术的深入发展 很大程度上依赖于原子尺度物质科学的基础研究.如 何实现原子精准操控:如何突破原子制造中尺寸和效 率两大瓶颈;如何通过原子制造实现物性的颠覆;如何 理解原子尺度上制造与物质的融合,都是迫切需要解 决的问题.

国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金 委)交叉科学部于2023年3月30~31日在武汉举办了主 题为"原子制造的物质科学基础"的战略研讨会(https:// www.nsfc.gov.cn/publish/portal0/tab1341/info89134. htm),逾100位来自物理、化学、机械、材料、信息、 生命和宏观政策等研究领域的国内知名学者参加了此 次研讨,对原子制造领域的发展现状与趋势、未来迫 切需要解决的基于原子制造的物质科学基础问题进行 了分析与梳理,为自然科学基金委未来在该领域的顶 层设计和战略规划提出了建议.

# 1 原子制造的内涵及意义

原子制造是指制造精度达到原子级别的加工与制 造,旨在精准地控制、增加或消除原子及其基本构 建单元,以构建按需设计的原子尺度功能微结构.这种 方法能够高效创造具备原子级特性的、在宏观尺度下 完美精确的产品,形成一个涵盖科学和技术的完整 体系.

原子制造技术尤其注重对原子的精准操控,即对 单个原子或其基本构成单位的多种自由度进行精确的 操纵与控制.原子制造是人类物质合成的一种极限,是 一种成千上万原子任意支配的"自由",而原子操控则 是其中的关键核心技术. 越是追求自由, 越要在精准操 控上练功,这样才能顺着精准操控、高效操控走向最 终的智能操控或者自由操控.从这一点上来看,我们就 很容易体会到近来关注精准化学的重要意义。原子操 控能力的探索,一方面以生长技术表现为材料的合成 能力、另一方面则牵引着加工能力向极限化智能化演 进,因此也是人类未来很长一段时间改造物质世界的 一种终极能力. 首先, 原子精准操控是原子制造的核心 能力.这一概念不同于亚纳米制造,亚纳米制造精确度 非常高,但还没有达到单个原子的操控水平.而原子制 造以实现特定原子精确结构和构筑原子特性物性微结 构产品为目标,始于对原子精准操控能力的探索.其次, 原子精准操控不仅仅是对单一原子的操控,而且涵盖 了对原子基元的操纵. 这里的"原子基元"指的是单个 原子中心、原子线、原子片层、原子团簇等具有原子 特性物性的基本单元. 与传统的纳米尺寸基元相比, 原 子基元呈现出更显著的量子效应、与块体性质更大的 本质区别. 最后, 原子精准操控根据原子基元划分为两 个主要过程: 一是原子基元的制备过程, 二是基于原子 基元构筑功能微结构的过程. 原子基元的生成不仅包 括纯人工精确控制,还包括在特定外部条件下,原子的 自发反应或聚合形成. 原子基元的性质决定了产品的 关键微观物性.利用原子基元构筑微结构的过程则是 原子制造的核心步骤、它决定了在宏观产品中微观原 子基元特性的实际体现程度.

原子制造的内涵决定了衡量原子制造产品的标准: 以原子为单位对产品进行调控,如果这种调控对产品 的核心性能产生决定性影响,那么该产品就属于原子 制造范畴.比如,Au<sub>20</sub>团簇,当加减一个原子时,其金字 塔状的原子结构便会完全崩塌,导致性质发生根本性 改变<sup>[2]</sup>;双层MoS<sub>2</sub>,若减少一层,其对称性将被完全破 坏,将引发光倍频效应<sup>[3]</sup>等.这一判据明确了原子制造 的关键特性,即原子单位的微小改变也可能对产品的 性能产生重大影响.这种对微观尺度极其敏感的特性 使得原子制造成为一门具有深远意义的技术领域,该 特性的发现也有助于更加深刻地理解物质世界的奥妙, 并能基于此创造出各种功能强大、性能优异的新型 产品.

原子制造如能实现,将具有深远意义.原子制造是 基于原子级极限尺度的操控能力,通过原子级别的精 确控制,实现全新结构的制造,这将极大地推动和提升 人类对物质世界认知和改造的能力。但是原子级别精 确控制的难度远超乎想象,比如,以制备包含1000个原 子的团簇为例,通常认为,堆积1000个原子的难度就是 进行1000次原子搬运,这难度似乎只是线性增加.然而, 实际情况却并非如此,随着堆积原子数的增加,团簇呈 现的结构多样性也会随之增加,而且不同结构的能量 差异将逐渐减小、这将导致多个能量接近的异构体可 能会同时存在.因此,如果不施加外部能量约束,通过 原子制造获得确定结构的原子团簇的可能性将会急剧 下降,这也导致原子堆积的难度远非线性这么简单.以 上问题背后实际蕴含着对巨大熵增的控制。该问题如 能解决,将有望成为物质科学领域的重大原创突破.这 也表明原子精确操控可能在相当长的一段时间内将是 人类能力的极限之一. 当前, 原子制造只在起步阶段, 主要针对单原子点阵、原子团簇构建和二维原子层异 质结等开展研究. 这些初始研究将引导人类不断探索 抑制原子制造体系复杂性的全新途径.

原子制造的深远意义还在于原子制造的产品常常 展现出与常规块材截然不同的奇特物性,具有巨大的 产业潜力. 以器件为例, 首先, 从尺度上来看, 原子制 造器件的特征尺寸将比纳米制造小一个数量级. 当尺 度缩小到原子极限时,这意味着集成度和核心性能将 接近极限水平. 以单原子存储器为例, 它的存储密度有 望比当前的硬盘高出多个数量级. 其次, 从加工精度来 看,原子级完美的产品有可能具备理论预测的本征性 能. 举例来说, 如果能将FINFET鳍栅的粗糙度抑制到 原子级水平,器件的电子迁移率将能提高10倍以上,接 近硅的本征数值. 再次, 从原子构建的角度来看, 原子 制造有望创造出与当下产品具有完全不同属性的物质. 例如,目前通常使用铜来制作电路连接,不论是100 nm 的铜线还是10 nm的铜线都具备良好的导电性.然而, 由2个原子组成的铜簇或者仅有2原子宽的铜带是绝缘 体<sup>[4]</sup>,但这种绝缘体却可以同时具备催化或者特异性传 感性质. 原子制造就是通过极致精确的原子操控来获 得部分性能数量级提升,或者本征特性彻底改变,部分 物性无限逼近理论极限、甚至可以获得超越现有极限 的全新物性,从而赋予高端产品和高端产业以更强大 的性能. 若能掌握原子制造技术, 将能在国际制造业竞 争中占据主动地位. 最后, 原子和原子基元的尺度将发 挥使其超越经典物理特性的量子特性优势. 在即将到 来的量子科技变革中,原子制造产品必将逐步替代现 有主要依赖传统制造的量子器件,原子制造也将成为 量子科技的核心和底层技术.

因此,这一领域将成为未来的科技发展前沿,未来 技术的发展将赋予原子制造"任意创制物质材料、极 限集成未来信息"的能力,这也将进一步推动我国在科 技领域的地位,为全球科技进步做出卓越贡献(图1).

### 2 原子制造发展态势

基于原子制造的物质科学发展面临着以下三大核 心问题:(1)如何发展一套适用于原子制造的基础理论 体系和设计路线?(2)如何发展满足制造需求的大规 模、可集成的高效原子精准操控和高精度测量技术? (3)如何发挥原子尺度多载流子协同的优势,设计并获 得各种微观奇特物性,并将其在宏观产品中得到展现? 原子制造领域一直在思考以上问题,国内外都取得了 一些初步的进展.

#### 2.1 原子制造的基础理论

原子制造的基础理论首要任务在于解决原子制造 的科学可行性问题.这个问题的核心是如何通过人工 手段有效抑制熵增,以获得具有特殊功能和确定结构 的原子制造产品.随着原子制造产品中包含的原子或 原子基元数量的增加,原子制造所需的代价将急剧上 升,这也意味着原子制造的可行性将急剧下降.因此, 原子制造必须全面考虑其系统复杂性,在结构和能量 空间上进行有效设计,形成一套基础理论和方法体系, 以确保原子制造目标的实现和路线的科学可行.

随着计算机性能的显著提升,基于量子力学的第 一性原理计算已经成为原子制造研究中广泛应用的理 论工具.它可以在理论上准确预测单原子体系和长程 有序晶体体系中的结构和物理化学性质.然而,在实际 复杂系统中仍然面临诸多挑战.首先,在真实实验环境 中,材料的构筑和加工通常涉及外部场效应、缺陷引



图 1 原子制造: 物质科学基础与前沿应用交叉 Figure 1 Atom manufacturing: An interdisciplinary science of fundamental material science and cutting-edge applications

入、界面效应等因素,这些因素会导致理论预测的原 子级材料构筑在实验中难以重现,很大程度上制约了 材料和器件的开发效率. 其次, 在原子制造方面, 目前 理论计算预测和设计同样面临较大的挑战. 原子制造 不仅涉及材料的构筑等静态计算,同时还涉及热力学 和动力学平衡等动态过程, 受多个因素的影响, 具有极 高的复杂性.因此,如何实现跨越时间和空间尺度,同 时考虑材料合成、原子构筑等方法在真实实验条件下 的影响, 缩小理论预测和实验制备之间的鸿沟, 是一个 亟须解决的具有挑战性的难题.目前,国际上在这一领 域已经初步取得了一些重要进展.例如,我国研究人员 已经成功发展了自适应局部基组线性标度方法<sup>[5]</sup>,这一 优化算法使得计算量与计算体系尺度的关系从指数级 下降到线性关系、从而在处理复杂体系时大幅减少了 计算成本.利用现有的计算方法,理论学者进行了大量 预测, 涵盖了各种量子材料中的反常基元结构, 以及众 多新型量子效应和奇特物性,例如量子反常霍尔效 应、配对密度波、马约拉纳费米子等[6~8].通过这些理 论预测、我国已经建立了包含大量新材料和其独特物 性的数据库、其中包括磁性拓扑材料数据库、拓扑材 料非线性光学数据库、二维铁电材料数据库、离子层 状材料数据库等. 这不仅为我国在原子制造领域的研 究提供了坚实的理论基础,也为材料科学和物理学的 发展作出了重要贡献.

#### 2.2 高效原子精准操控/测量技术

原子精准操控技术向高效和大规模发展是原子制造的关键一步,原子制造不仅需要确保原子级的一致性,还需要克服从原子组装到产品制备的尺度障碍,以及从少数几个原子到摩尔级别原子的效率挑战.

原子精准操控对象涵盖多个体系,包括单原子、 单分子、类单原子、原子团簇、原子层体系等.技术 方法包括扫描隧道显微镜、单原子离子注入、原子团 簇束流、冷原子离子囚禁、精准化学操控与组装、原 子级薄膜生长工艺等多个方面.此外,规模化的原子基 元制备、结构组装、宏观量级制造、装配集成和高分 辨检测等技术手段,也都是该领域研究的重点.如果能 有效利用或创新上述技术方法,将可以助力实现原子 精准操控,推动原子制造领域的发展,为材料科学和工 程领域提供新的思路,满足现代制造业对高度精确、 高效率、大规模制造的需求.

国外在20世纪70~80年代就提出了通过操控单个

原子来制造物质的原创思想,近年来已经进入操控能力、效率规模和功能设计同步深入发展阶段,我国近年来在相关方面也取得了一些重要进展.

2.2.1 基于扫描隧道显微镜的单原子精准操控

人类实现对单个原子的观察和操控的梦想起始于 20世纪80年代. 1982年, IBM苏黎世实验室的Binnig等 人<sup>[9]</sup>发明了扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM), 首次实现了对材料表面单个原子的直接 观察. 8年后, IBM Almaden实验室的Eigler和Schweizer<sup>[10]</sup>进行了一项演示实验, 成功操控了35个氙原子, 拼写出了"IBM"标志. 我国在20世纪90年代也开始了 对STM技术的研究, 用于原子观察与精准操控. 1993 年, 我国庞世瑾研究组<sup>[11]</sup>利用STM成功操控硅原子, 刻 蚀出了原子级线宽的"中国"二字. 这些里程碑式的成 就标志着人类对原子级别的探索和操控进入了全新的 阶段, 为原子制造和物质科学的发展奠定了坚实的基 础. 由此可见, 科学技术的不断创新正在推动着人类实 现越来越精确和复杂的原子级操作.

在过去几十年间,这一技术从初创与演示起步迅 速发展,出现了一批基于STM技术的新物态与新器件 设计.我国科研人员也作出了重要贡献,例如中国科学 院物理研究所高鸿钧课题组<sup>[12]</sup>所实现的磁性原子链边 缘态和马约拉纳零能模,西安交通大学潘毅团队与德 国莱布尼兹研究所Fölsch团队合作<sup>[13]</sup>实现的无耗散拓 扑边界态、栅控可重构量子点等.目前我国科研人员 已经能将STM技术拓展到二维层状材料和多原子体系 的操控,并开始在实验室中开展有关新物态研究与单 原子比特门等原子器件的制造.

2022年,澳大利亚新南威尔士大学的Simmons课题 组<sup>[14]</sup>基于STM开发了由10个原子组成的量子芯片.最 近,该团队与我国南方科技大学贺煜<sup>[15]</sup>合作取得了单 原子量子比特的成果,并演示了比特门的计算操作. 同年,美国Zyvex公司展示了一种基于STM的原子精 准操控亚纳米分辨单原子刻蚀系统,制造出0.768 nm 线宽芯片(https://www.newswire.com/news/the-worldslst-sub-nanometer-resolution-lithography-system-21823319). 在单原子集成芯片和通用量子计算机前景 的驱动下,STM原子操控及器件制造这一方面仍将持 续发展.

2.2.2 类单原子中心和固态色心的操控开发

单原子器件并不是由单个原子构成,而是在器件 效应发生时,外场实际施加和实际功能效应发生在单

4

个原子上,比如,含有单个功能原子的配合物、内嵌单 个原子的富勒烯、金刚石中的氮-空位色心(NV色 心)、光晶格囚禁的冷原子/离子以及单原子催化中心 都可以视作单原子器件的模型平台.这些模型平台的 研究有助于深入理解单原子器件的工作原理和性能, 同时为探索和开发更复杂的单原子器件提供了重要的 基础.单原子器件的发展具有广泛的应用前景,可用于 各种领域,如量子计算、传感技术、纳米电子学等,对 于推动科学和技术的发展具有重要意义.

在化学领域,我国最早提出了单原子催化的概念. 北京大学马丁团队<sup>[16]</sup>利用Pt@α-MoC催化,首次达到 并超过美国能源部对甲醇重整产氢催化剂的要求;中 国科学技术大学吴宇恩团队[17]在大幅度降低金属用量 探索绿色化学方面也取得重要进展,这些研究都具备 广泛的应用前景,在冷原子操控上,中国科学院武汉物 理与数学研究所詹明生团队[18]演示了单个超冷分子的 相干合成;山西大学张靖团队<sup>[19]</sup>利用冷原子玻色-爱因 斯坦凝聚(Bose-Einstein condensate, BEC)实现了莫尔 条纹. 在色心操控方面, 浙江大学杜江峰团队<sup>[20]</sup>实现了 三维色心阵列的制备,同时实现了室温系统中目前最 高保真度的量子逻辑门操控、并在磁场、重力、微波 等的精密测量中取得了重要进展. 在单原子晶体管方 面,早在2002年,康奈尔大学McEuen课题组<sup>[21]</sup>就展示 了基于包含单个Co原子的配合物分子的单原子晶体 管;同期,中国科学院物理研究所梁文杰团队<sup>[22]</sup>也取得 了相关领域重要成果; 2020年, 南京大学宋凤麒团队及 其合作者<sup>[23]</sup>基于C<sub>8</sub>,笼中单个Gd原子,实现了单原子存 储晶体管并演示了单分子驻极体物理; 2022年, 厦门大 学谢素原和洪文晶课题组[24]采用类似机制实现了室温 的存算器件. 以上工作中单原子中心呈现了高相干 性、高选择性、高活性等特点,对其操控引发了一系 列有趣的器件效应.

2.2.3 原子团簇束流及其尺寸控制合成

团簇束流技术是最早具备一定原子尺度操控能力的技术之一. 其基本流程包括通过激光烧蚀、离子溅射、热蒸发等方法产生高密度的原子蒸汽, 再通过原子相互碰撞并冷却, 生成各种不同原子数和结构的团簇, 最后通过质谱筛选, 获得目标原子团簇. 这种技术的可控性使人类能够操控和构建分子, 因此, 这种原子制造的产品被视为人工分子. 其中, 最具代表性的成果之一是1985年发现了富勒烯C<sub>60</sub><sup>[25]</sup>. 科学家Smalley等人因此获得了1996年的诺贝尔化学奖. 随后, 类似的方法

也被用于发现其他有趣的原子团簇,如Au<sub>20</sub><sup>[2]</sup>,Au<sub>32</sub><sup>[26]</sup>, B<sub>40</sub><sup>[27]</sup>等.团簇束流技术的发展不仅丰富了我们对原子 尺度世界的理解,还为材料科学和纳米技术领域的研 究提供了重要工具,为原子制造的研究打开了新的 视野.

虽然气相束流技术在原子制造方面具有普适性, 但其应用受到团簇束流装置流量较低的限制.早期的 典型束流流量仅为0.1 pA<sup>[28]</sup>,相当于每秒10<sup>5</sup>个团簇,这 远不能满足人工分子鉴定(每秒需要10<sup>15</sup>个团簇)或者表 面加工(每秒需要10<sup>12</sup>个团簇)的需求.然而,近年来国内 外均已取得了重要的进展.一些研究团队,如英国伯明 翰大学Palmer团队<sup>[29]</sup>和日本庆应大学Nakajima团队<sup>[30]</sup>, 已经实现了纳安级别的束流.在中国,近年来也展示了 多种10 nA以上的团簇束流,初步验证了材料级别研究 的可行性.从化学的角度来看,尺寸聚焦技术已经展现 出强大的能力,已经成功宏量制备了数百种团簇材料. 此外,厦门大学谢素原团队<sup>[31]</sup>还研发了年产吨级富勒 烯的装备.这些技术的进展为原子制造的实现提供了 更多可能途径,让我们看到了原子制造领域巨大的 潜力.

2.2.4 原子层及其叠层结构的操控制备

原子层操控技术是离实际应用最近的原子精准操 控方向之一. 它通过精确控制原子在某个维度上的生 长,实现任意单层原子薄膜的制备.此外,还可以将不 同种类的单层材料排列组合,从而获得多种同质或异 质叠层原子层材料. 这些材料不仅继承了单层材料的 出色性能,还展现出超越单层材料的新奇物理特性.因 此,原子层操控技术既是新材料和新物态研究的重要 工具, 也已被证明是先进电子器件的核心所在. 一个成 功的案例是传统的分子束外延技术在HgCdTe红外传 感器开发中的应用<sup>[32]</sup>.这种技术已经取得了巨大成功, 为红外传感器领域带来了重大突破. 近年来, 随着石墨 烯和二维材料的发现,这一领域取得了迅猛的发展.人 们的兴趣也逐渐从石墨烯向二维材料,再向叠层原子 层材料转移. 在材料操控与制备方面, 国内外多家科研 机构、包括北京大学、南京大学、中国科学院物理研 究所、台积电、韩国蔚山国立科学技术院、美国麻省 理工学院等,已能够实现晶圆级单层原子层单晶薄膜 的精确制备.其中,北京大学刘开辉课题组<sup>[33]</sup>成功将单 晶石墨烯的横向尺寸推进至米级. 此外, 以单晶单层材 料为基元,构建叠层原子层材料也取得了一系列重大 进展. 北京大学刘开辉课题组<sup>[34]</sup>提出了一种新的恒温 溶解-扩散-析出机制, 在单晶镍表面合成了厘米级单晶 石墨, 厚度可达30 μm, 相当于10万层单层石墨烯. 南京 大学王欣然课题组<sup>[35]</sup>则通过表面能和原子级台阶的控 制, 成功制备出晶圆级双层MoS<sub>2</sub>. 同时, 中国科学院物 理研究所张广宇课题组<sup>[36]</sup>利用表面近邻效应, 逐层制 备了至多4层的MoS<sub>2</sub>高质量晶圆. 韩国蔚山国立科学 技术院Shin团队<sup>[37]</sup>在单晶镍(111)表面成功合成了 10 cm<sup>2</sup>的多层单晶氮化硼薄膜, 可精确调控层数在2~6 层. 上述晶圆级原子层及其叠层材料的可控精准制备, 为未来器件的大规模制造和实用化奠定了充足的材料 基础.

2.2.5 原子级精准组装

化学操控和组装是实现从原子或原子功能基元 到宏观材料或器件的重要技术手段.通过氢键、范德 华作用力等弱相互作用力将原子或原子功能基元进 行精准定位、有序排布或定向移动,逐步实现从原子 到宏观的跨尺度跨晶格类型的结构构筑,并通过原子 或原子功能基元的任意组合实现材料或器件的功能 定制.

基于DNA的精准操控组装是该领域的一个典型代 表.上海交通大学樊春海团队与同济大学柳华杰团 队<sup>[38]</sup>合作,利用DNA折叠的原子精度定位组装能力, 成功实现了高通量的铁原子图案制造.哈佛大学尹鹏 团队和北京大学孙伟团队<sup>[39]</sup>利用DNA折叠技术,实现 了碳纳米管的高密度组装,解决了碳纳米管阵列的高 密度和高规整度排列问题,成功制备了高性能场效应 晶体管.上海交通大学刘小果团队<sup>[40]</sup>则利用可任意定 制结构的DNA框架与离子前体结合,通过还原反应形 成了具有特定形状和尺寸的功能材料,初步实现了材 料的结构和功能定制.此外,哈佛大学尹鹏团队和北京 大学沈杰团队<sup>[41]</sup>基于DNA掩模的图形转移技术,成功 实现了超越光刻加工极限的硅基底材料的刻蚀加工. 这些相关技术的实现为实现材料和电子器件的功能定 制铺平了道路.

#### 2.3 原子制造体系的奇特物性与效应

如何利用原子制造技术获得远超出常规的微观奇 特物性,并控制放大过程,使这一微观奇特物性在宏观 产品中得以展示,是另一个值得深入探讨的问题.近年 来,国内外在极限性能原子制造新材料、原子精准操 控体系中的电子器件新效应、原子尺度微结构中的光 传输、原子量子态的精确操控以及原子制造与先进传 感和仪表装备等方面进行了系统的研究工作,取得了 一定的进展.

2.3.1 原子制造新材料与性能

原子制造技术的终极目标是精确操控每一个原子, 使其在材料的光电、催化、存储、传感、结构等方面 最大程度发挥极限性能.

为满足这一需求,科学家展开了系统性的研究,旨 在开发具有极限性能的原子制造新材料.这一过程包 括原子尺度的材料设计和奇特物性的原子基元制备, 并通过有效的组装将原子级的量子特性推广到介观和 宏观尺度,以获得全新的极限材料.例如,单个原子层 的过渡金属硫族化合物具备出色的光学倍频性能<sup>[42]</sup>, 通过进一步精心设计原子层结构的排列,可以使其光 学倍频性能进一步增强,并形成大尺寸可控叠层光电 晶体.与传统非线性光学材料相比,这些材料在达到相 同性能的前提下可减轻数百倍重量.

2.3.2 新型电子器件

借助原子制造技术,可以充分利用原子级系统的 超薄、超小以及物性易于调控等特性,设计性能突破 性提升的后摩尔时代电子器件原型,这为我国突破现 有封锁、实现技术换道超车提供了新的路径和机会.

目前, 我国已经提出了多种具备潜力的新方案, 以 应对原子制造电子器件的挑战, 其中包括使用原子层 叠层器件构型, 实现层状双浮栅神经器件<sup>[43]</sup>; 采用三端 子单分子器件构型, 实现在室温下的单原子存算演 示<sup>[24]</sup>; 以及借助原子制造技术, 开发新型微波传感方 案, 从而显著提高传感精度<sup>[44]</sup>等. 这些基于原子制造方 法构建的新兴电子器件相较于传统器件表现出了明显 的性能提升.

2.3.3 奇特的光传输效应

原子尺度下的光与物质相互作用经历了重大变革, 其应用领域包括光电集成回路、光子芯片、量子信 息、化学生物传感和纳米能源等众多领域.实现原子 尺度的精细光传输与操控一直是科研和产业应用中的 长期挑战,这一挑战的核心是如何精确操控原子尺度 下的表界面结构,以构建具有特定功能的光学界面,这 就需要不断发展可控的光激发技术和超高精度的表征 手段等.

近年来,我国在先进的原子制造技术和超高时空 分辨设备的发展方面取得了重要进展,为解决这些难 题奠定了技术基础,部分指标已达到国际领先水平.基 于原子制造技术,构筑了一系列极化激元器件,通过构 筑原子尺度上的光学功能界面,实现了一系列突破,例 如极化激元晶体对称性破缺成像<sup>[45]</sup>、负折射聚焦<sup>[46]</sup>、 纳腔双曲回音壁模式<sup>[47]</sup>和超快光电子发射<sup>[48]</sup>等.这些 创新不仅提升了精密光学仪器的成像分辨能力和谱学 灵敏度,还实现了在单原子层材料上对光场精细操控 的世界纪录(近500倍光压缩)<sup>[49]</sup>.原子界面光学效应展 现了超低损耗光子信息传输和超高压缩存储高通量信 息能力.以上进展为实现光子计算、光电集成和存算 一体等多种光子芯片奠定了坚实基础.此外,利用原子 制造的极化激元腔来激发分子的极化激元态,可以实 现精准的化学操控和组装,例如选择性切断分子化学 键、实现重组酶聚合酶的生物体外扩增等.

2.3.4 原子态的量子调控

量子科技的发展既需要原子制造这样精细的制造 技术,提高加工能力以实现更高性能,也需要基于原子 体系发展全新的量子计算和测量路线,以突破量子科 技走向应用的关键瓶颈.

在量子调控领域,对于色心中的单缺陷中心(可以 认为是类单原子),其量子相干时间需要远远超过超导 量子比特的相干时间,才能进行量子逻辑操作,使得原 本在超导量子计算中需要复杂纠错设计的任务变得不 再必要.因此,在单原子体系中进行量子计算具有天然 的优势,也许是实现通用量子计算的一个重要路径.可 见,无论是利用扫描隧道显微技术操控制造量子比特, 对色心单原子态进行操控,还是进行原子系统量子模 拟,这些方面的技术发展都离不开原子制造技术的 支撑.

在量子模拟领域,我国已经能够通过扫描隧道显 微技术实现单原子对马约拉纳零能模的量子物理演 示<sup>[50]</sup>;已经实现了10万级规模的原子阵列制备,且单个 原子位置精度优于30 nm<sup>[51]</sup>;也能够在原子层系统中成 功模拟和测量量子霍尔效应、量子反常霍尔效应、分 数量子反常霍尔效应等新奇量子效应<sup>[52-54]</sup>.

2.3.5 原子制造与先进传感和仪表装备

原子制造有望催生新一代精密仪器.除了具有原 子制造能力的精密装备以外,原子制造还从3个角度与 先进传感仪表形成了交叉支撑:第一,原子级加工能力 使得传感器的结构更加完美,使其逼近预期的性能;第 二,原子尺度结构是最小的传感体,有可能出现最灵敏 的传感表现;第三,原子制造的设计理念可以实现传感 体的原子创制,使其在特异性、多功能性方面有全新 的表现. 我国在发展具备原子精准操控/检测能力的先进仪 器和设计制造基于原子精准操控、高性能的仪器仪表 等方面已经开展了一系列研究工作.例如,在团簇结构 与物性研究方面,已完成了材料基因式的自动合成搜 索;在原子电路加工方面,已经完成亚纳米/单原子电 路的小批量加工装备;在高灵敏机械与传感方面,已经 在原子尺度机械器件的位移测量中实现了10<sup>-15</sup> m/Hz<sup>1/2</sup> 的位移测量灵敏度;利用单分子器件实现了对单个三 硝基甲苯(TNT)分子的选择性探测;利用色心技术制备 了能够感知极微小重力变化的重力测量计等.

# 3 原子制造领域未来重点研究方向

物质科学作为制造科学的基石,推动着制造领域 持续变革.从微纳制造的角度看,原子制造是一个崭新 的起点,未来若能获得全面发展,将超越当前单个原子 和单层原子的单自由度操控,实现对复杂多维、动态 和智能物质的精准操控,开创全新制造时代.因此,必 须加强对原子尺度物质科学的基础研究,以确保我国 在未来原子制造的深入发展中保持竞争优势.基于原 子制造当前基础和未来发展态势,该领域亟须开展以 下工作.

#### 3.1 原子制造的物质科学基础理论

面对真实世界中的多体、多尺度和多载流子复杂 系统,当前的理论方法尚不足以应对,需要建立和完善 原子制造领域的基础理论研究.首先,在理论设计方面, 亟须解决一些关键问题,例如针对通过实验构建的人 工晶格结构,相关理论计算却几乎未能开展,亟须发展 亚稳态人工结构理论,揭示亚稳态结构的稳定机制,探 索新的物性,开发潜在的新型器件应用以及颠覆性性 能. 针对真实实验和应用环境下的条件, 如缺陷、界 面、外场、有限温度和有限压强等,需要建立关于材 料结构和物性的数据库,发展多场调控下的结构和物 性理论计算方法, 以实现对材料结构和物性在真实环 境下的稳定性和调控机理的预测. 其次, 需要充分考虑 原子尺度物性与实际尺度物性的关联性, 以实现在实 际条件下原子制造方法的准确预测. 由于实验条件涉 及跨时间、跨空间尺度,以及多因素的热力学和动力 学平衡过程,需要发展基于大数据的人工智能辅助预 测技术,以克服现有理论计算所面临的挑战,从而实现 原子制造方案和路线的高效和精确预测. 推动原子制 造领域的理论、算法、软件和数据库的创新发展、将 为原子制造从概念变为现实提供关键的理论支持.

#### 3.2 原子制造的基元操控基础技术

原子制造技术关键在于实现从原子精准操控基 元、基元组装功能结构、功能结构集成,到最终实现 微系统和产品的完整技术路线.其中,最核心是开展原 子精准操控技术研究,以实现原子级一致性,推动原子 精准操控技术朝着高效、大规模发展迈出关键一步. 这需要克服从原子组装到产品之间的尺度鸿沟,突破 从少数几个原子到摩尔级数量原子的效率鸿沟,并通 过发展检测和表征技术来保障其可行性.

不同操控对象对技术有不同要求,亟须发展的技术包括: STM原子操控及其高效工具开发;范德华材料表面STM原子操纵技术;单原子体系的化学构筑与操控;固态单原子中心的宏量制备与操控;高空间精度固态原子阵列制备及宏观纠缠态产生、操控与检测;可固态集成的冷原子/离子技术;新型原子层的构筑与精准制备;在原子体系中对新量子物态的模拟和调控;在线动态原子级测量技术等.

在团簇方向,需进一步提高气相束流技术的束流 强度达到微安乃至毫安级,实现在数小时内对任意原 子数目的团簇进行毫克到克级的制备,完成对其结 构、物性及应用探索研究;通过化学配体工程及反应 过程热力学、动力学调控,实现团簇结构聚焦及演化, 获得多种具有新颖光、电、磁等功能的团簇材料;发 展对团簇结构的后功能化及结构衍生的操控方法,拓 展及操控团簇结构类型,实现团簇的能级结构及其性 能的调控;通过物理、化学等手段及其交叉融合,拓展 团簇类型,如非碳、硼、硅的非金属团簇体系,零价镧 系金属团簇体系,零价主族金属团簇体系等.

原子层精准制备方向,期待以晶圆级单晶单层原 子层材料(包括石墨烯、氮化硼、过渡金属硫族化合 物等)为基元,利用层间弱范德华耦合特性,围绕原子层 材料的层数、层间转角、堆垛构型、不同组分等多个 调控自由度,开发叠层原子制造新技术.通过设计生长 源供应模式、生长衬底的表面原子级结构及各组分溶 解平衡关系等,实现原子层材料层数连续可调、层间 转角和堆垛方式精准可控,以及不同组分的大面积异 质构筑,为探索叠层原子层材料的本征物性,并推动其 为大规模集成电子芯片、非常规超导、铁电非易失存 储、超薄非线性光学晶体、超快光电响应等诸多新兴 领域的应用研究提供关键材料支撑.

精准化学操控组装方向,希望结合界面组装技术, 实现DNA框架结构从原子尺度到宏观晶圆尺度的跨尺 度精准定位组装; 以此为基础, 结合单原子、原子簇、 原子层等原子功能基元,实现基于DNA框架精准组装 的原子功能基元跨尺度材料定制和原子尺度功能器件 的构筑;通过进一步挖掘DNA原子精度的定位组装能 力,结合图形转移技术,推动刻蚀和加工精度向原子极 限尺度进发;结合自上而下的加工制造技术,推动原子 功能基元器件的大规模一致性生产和互联集成应用. 针对原子尺度功能器件的精细加工和集成需求、探索 基于DNA组装的高性能原子尺度功能器件的加工方 法; 实现基于框架核酸的原子精度图形图案转移: 发展 界面组装工艺、实现基于DNA框架的原子功能基元从 原子尺度到晶圆尺度的精准结构构筑和功能定制:发 展原子功能基元器件与现有硅基芯片的兼容工艺, 探 索百纳米尺度三维芯片互联技术、实现从原子功能器 件到大面积芯片加工集成.

#### 3.3 面向实际应用的原子制造

#### 3.3.1 面向极限性能新材料

面向未来材料,希望能够利用原子制造技术,真正 把材料的性能推向极限化和实用化,包括:第一,面向 极限效荷比材料的设计与制备研究;第二,面向极限物 理化学性能开展的基元级材料设计与制备研究;第三, 面向复合功能开展的基元组装和协同性能研究.例如, 利用原子制造技术实现极限感光能力和极限条纹间距 的X波段光刻胶;实现极限耐高温的同材键合材料和高 熔点差混溶制造,进而用于航空航天领域低温修补高 温金属材料;实现化学转化领域的极限催化效能,推动 工程化创制和新催化体系的工业革新;实现极限光电 转化材料设计,催生高效率太阳能电池、电致发光器 件等.

3.3.2 面向电子信息领域

面向电子信息领域后摩尔时代的需求,基于原子 制造,期待未来器件集成度、传感灵敏度等关键指标 能实现数量级的提升,具备基本加工制造工艺.具体包 括:晶体管的厚度和沟道长度实现数量级缩小,形成真 正意义上的原子尺度晶体管;原子层堆叠集成度实现 进一步提高,在原子层叠层器件的设计方面取得突破; 通过物理、化学、生物等多学科交叉,实现单原子存 算器件,三维极限集成;利用固态单原子探针实现集成 电路的高精度检测;原子级微波器件灵敏度进一步提 升,效荷比相比传统器件实现3~5个数量级的超越.整体上,原子制造技术有望推动实现电子信息领域系统性革新,为我国"卡脖子"问题贡献从元器件到制造工艺的独特方案.

3.3.3 面向光子科学领域

面向国家对新型光子计算芯片的战略需求,利用 原子制造技术可以实现高集成度和高通量高速计算的 极化激元光子芯片开发.借助原子层堆叠技术将光子 计算芯片尺度推进到亚十纳米;利用超高时空分辨成 像技术将极化激元光子芯片的表征分辨率达到亚埃 级,可实现毫瓦量级低功耗的计算成像光子芯片.此 外,通过注入电子调控手段,可将原子级光子芯片打 造成超高频(大于1000 GHz)光电一体的计算芯片,为 解决目前光子计算机所面临的光电集成难题提供新 思路.

3.3.4 面向量子科技领域

面向下一代量子科技的发展、量子计算、量子测 量、量子模拟等方面都面临深度革新,量子计算方面, 希望通过原子精准操控,实现突破量子容错极限的拓 扑量子计算的器件制备. 量子精密测量方面, 期待实现 大规模阵列量子传感器件的制备、把类单原子模型的 原子制造技术推向极限,并发展基于固态原子的超高 分辨、超快量子传感技术. 在此基础上, 利用固态单原 子、原子系综及原子阵列开展微弱磁、电、力以及未 知新物理量的精密测量, 期望通过原子制造技术, 推动 测量技术走向更高精度,实现对大量标准模型外新物 理问题的检验. 量子模拟方面, 希望在小尺度凝聚态体 系如原子层异质结中,实现对于手性引力子的模拟,验 证大统一场模型的凝聚态物理方案,并实现可进行电 光学操控的引力子器件. 此外, 各种量子效应要能实现 真正应用必须建立量子相干时间和量子相干长度的调 控技术,开放相关装备,希望原子级精准的构筑工艺能 助力各种量子效应逐渐走向实际应用.

3.3.5 面向先进传感与仪表装备

针对目前传统传感器技术逐步趋于成熟、微电机 系统(micro-electro-mechanical systems, MEMS)器件性 能进一步提升空间较为有限、难以满足未来高性能传 感需求的现状,需要将先进仪器与装备进一步用于原 子制造,并利用原子制造实现颠覆性的高性能传感器 件与仪表装备.一方面,为原子制造技术的实现提供仪 器层面的技术支撑,如研发诸如单离子/阵列的可控注 入设备等高性能原子制造仪器装备;另一方面,利用原 子制造技术,研制基于原子制造的高性能仪器仪表,例 如具有优异灵敏度(比现有同等部署环境下的技术水 平提高3~4个数量级)、大带宽、宽动态范围的弱力、 电、磁传感器,为未来针对微弱信号的超高灵敏探测 提供技术手段.这些超灵敏传感器有望助力实现超高 分辨率的单电子自旋磁共振成像、纳米机器人高精度 自主惯性导航等颠覆性应用.

### 3.4 原子制造将成为物质科学未来新形态

长远来看,原子制造可以实现物质的"物理"合成,即可以利用原子随意"制造"人工分子或者人工物质, 从而为物质科学研究提供一种底层手段和丰富的研 究对象,彻底革新物质科学乃至自然科学的研究规 律,也可以说未来原子制造也即一种新形态的物质 科学.

面向这一美好前景,亟待发展原子制造的普适路 径,探索发展不依赖于体系特征的原子精准操控方法 或者工具装备,突破分子、晶体等传统物质和材料的 形态,系统开展基于原子构建人工分子、人工材料和 人工器件的研究,建立结构、物性和功能的物质数据 库,并开展相关大型科学设施的预研,应对物质合成路 径逐渐复杂化的难题,孕育我国物质科学的原始创新, 争夺我国新材料行业的国际话语权.

# 4 总结与展望

综上所述,随着原子制造技术的不断发展,可以预 见未来将进入一个"以原子为加工对象、以原子定义 加工精度、以原子定制产品性能"的原子制造时代.原 子制造相关的各类技术近几十年来已取得很大进展, 其制造速度、精度和质量正在不断提升,许多技术未 来都有望成为大规模制造应用的基础技术.同时,原子 制造技术也在不断催生新材料和新器件,作为迄今为 止所能想象到的最为精细的制造手段,相信未来将催 生出更多物质科学新形态(图2).

但是原子制造仍处于初始阶段,尚未形成成熟 的、系统的理论和技术体系,我们一方面需重点关注 物理丰富的表界面原子制造基础理论,为原子制造的 发展提供系统支撑;另一方面也需关注通用物质制备 关键技术的发展,为新物质创制提供核心技术支持.只 有加强相关领域的更深入的基础研究,才能推动原子 制造领域快速发展,实现原子定制和物性飞跃,真正推 动人类制造技术进入原子时代.



图 2 未来原子制造产品

Figure 2 Future products of atom manufacturing

#### 参考文献。

- 1 30! CAST released the 2022 major issues and problems (in Chinese). China Science Daily, 2022-06-28 [30个! 中国科协发布2022重大问题难题. 中国科学报, 2022-06-28]
- 2 Li J, Li X, Zhai H J, et al. Au<sub>20</sub>: A tetrahedral cluster. Science, 2003, 299: 864-867
- 3 Kumar N, Najmaei S, Cui Q, et al. Second harmonic microscopy of monolayer MoS 2. Phys Rev B, 2013, 87: 161403
- 4 Graham R L, Alers G B, Mountsier T, et al. Resistivity dominated by surface scattering in sub-50 nm Cu wires. Appl Phys Lett, 2010, 96: 042116
- 5 Hu W, Qin X, Jiang Q, et al. High performance computing of DGDFT for tens of thousands of atoms using millions of cores on Sunway TaihuLight. Sci Bull, 2021, 66: 111-119
- 6 Yu R, Zhang W, Zhang H J, et al. Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators. Science, 2010, 329: 61-64
- 7 Agterberg D F, Davis J C S, Edkins S D, et al. The physics of pair-density waves: Cuprate superconductors and beyond. Annu Rev Condens Matter Phys, 2020, 11: 231–270
- 8 Kitaev A Y. Unpaired Majorana fermions in quantum wires. Physics-Uspekhi, 2001, 44: 131-136
- 9 Binnig G, Rohrer H, Gerber C, et al. Surface studies by scanning tunneling microscopy. Phys Rev Lett, 1982, 49: 57-61
- 10 Eigler D M, Schweizer E K. Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope. Nature, 1990, 344: 524-526
- 11 Bai C L. Nanoscience and Technology (in Chinese). Kunming: Yunnan Science and Technology Press, 1995 [白春礼. 纳米科学与技术. 昆明: 云 南科技出版社, 1995]
- 12 Li M, Li G, Cao L, et al. Ordered and tunable Majorana-zero-mode lattice in naturally strained LiFeAs. Nature, 2022, 606: 890-895
- 13 Pham V D, Pan Y, Erwin S C, et al. Topological states in dimerized quantum-dot chains created by atom manipulation. Phys Rev B, 2022, 105: 125418
- 14 Kiczynski M, Gorman S K, Geng H, et al. Engineering topological states in atom-based semiconductor quantum dots. Nature, 2022, 606: 694-699
- 15 He Y, Gorman S K, Keith D, et al. A two-qubit gate between phosphorus donor electrons in silicon. Nature, 2019, 571: 371–375
- 16 Lin L, Zhou W, Gao R, et al. Low-temperature hydrogen production from water and methanol using Pt/α-MoC catalysts. Nature, 2017, 544: 80-83
- 17 Wang X, Wang W, Qiao M, et al. Atomically dispersed Au1 catalyst towards efficient electrochemical synthesis of ammonia. Sci Bull, 2018, 63: 1246–1253
- 18 He X, Wang K, Zhuang J, et al. Coherently forming a single molecule in an optical trap. Science, 2020, 370: 331-335
- 19 Meng Z, Wang L, Han W, et al. Atomic Bose-Einstein condensate in twisted-bilayer optical lattices. Nature, 2023, 615: 231-236
- 20 Li R, Kong F, Zhao P, et al. Nanoscale electrometry based on a magnetic-field-resistant spin sensor. Phys Rev Lett, 2020, 124: 247701
- 21 Park J, Pasupathy A N, Goldsmith J I, et al. Coulomb blockade and the Kondo effect in single-atom transistors. Nature, 2002, 417: 722–725
- 22 de Leon N P, Liang W, Gu Q, et al. Vibrational excitation in single-molecule transistors: Deviation from the simple Franck-Condon Prediction.

Nano Lett, 2008, 8: 2963-2967

- 23 Zhang K, Wang C, Zhang M, et al. A Gd@C82 single-molecule electret. Nat Nanotechnol, 2020, 15: 1019-1024
- 24 Li J, Hou S, Yao Y R, et al. Room-temperature logic-in-memory operations in single-metallofullerene devices. Nat Mater, 2022, 21: 917–923
- 25 Kroto H W, Allaf A W, Balm S P. C60: Buckminsterfullerene. Chem Rev, 1991, 91: 1213–1235
- 26 Johansson M P, Sundholm D, Vaara J. Au<sub>32</sub>: A 24-carat golden fullerene. Angew Chem Int Ed, 2004, 43: 2678–2681
- 27 Zhai H J, Zhao Y F, Li W L, et al. Observation of an all-boron fullerene. Nat Chem, 2014, 6: 727-731
- 28 Rohlfing E A, Cox D M, Kaldor A. Production and characterization of supersonic carbon cluster beams. J Chem Phys, 1984, 81: 3322–3330
- 29 Ellis P R, Brown C M, Bishop P T, et al. The cluster beam route to model catalysts and beyond. Faraday Discuss, 2016, 188: 39-56
- 30 Zhang C, Tsunoyama H, Akatsuka H, et al. Advanced nanocluster ion source based on high-power impulse magnetron sputtering and time-resolved measurements of nanocluster formation. J Phys Chem A, 2013, 117: 10211–10217
- 31 Xie S Y, Fu C Y, Chen M M, et al. Continuous combustion production equipment for synthesizing ton-grade fullerenes and a synthetic process therefor (in Chinese). PRC Patent, CN109467075B, 2020-04-24 [谢素原, 付超勇, 陈淼淼, 等. 一种合成吨级富勒烯的连续燃烧生产设备及其 合成方法. 中国专利, CN109467075B, 2020-04-24]
- 32 Da G, Zhen L, Rong H, et al. Research on molecular beam epitaxy growth HgTe/CdTe superlattic. Laser Infrared, 2023, 53: 1384–1387
- 33 Xu X, Zhang Z, Dong J, et al. Ultrafast epitaxial growth of metre-sized single-crystal graphene on industrial Cu foil. Sci Bull, 2017, 62: 1074–1080
- 34 Zhang Z, Ding M, Cheng T, et al. Continuous epitaxy of single-crystal graphite films by isothermal carbon diffusion through nickel. Nat Nanotechnol, 2022, 17: 1258–1264
- 35 Li T, Guo W, Ma L, et al. Epitaxial growth of wafer-scale molybdenum disulfide semiconductor single crystals on sapphire. Nat Nanotechnol, 2021, 16: 1201–1207
- 36 Wang Q, Tang J, Li X, et al. Layer-by-layer epitaxy of multi-layer MoS<sub>2</sub> wafers. Natl Sci Rev, 2022, 9: nwac077
- 37 Ma K Y, Zhang L, Jin S, et al. Epitaxial single-crystal hexagonal boron nitride multilayers on Ni (111). Nature, 2022, 606: 88–93
- 38 Zhang Y, Wang F, Chao J, et al. DNA origami cryptography for secure communication. Nat Commun, 2019, 10: 5469
- 39 Sun W, Shen J, Zhao Z, et al. Precise pitch-scaling of carbon nanotube arrays within three-dimensional DNA nanotrenches. Science, 2020, 368: 874–877
- 40 Qu Z, Zhang Y, Dai Z, et al. DNA framework-engineered long-range electrostatic interactions for DNA hybridization reactions. Angew Chem Int Ed, 2021, 60: 16693–16699
- 41 Shen J, Sun W, Liu D, et al. Three-dimensional nanolithography guided by DNA modular epitaxy. Nat Mater, 2021, 20: 683-690
- 42 Trovatello C, Marini A, Xu X, et al. Optical parametric amplification by monolayer transition metal dichalcogenides. Nat Photonics, 2021, 15: 6–10
- 43 Ning H, Yu Z, Zhang Q, et al. An in-memory computing architecture based on a duplex two-dimensional material structure for in situ machine learning. Nat Nanotechnol, 2023, 18: 493–500
- 44 Sun W, Chen Y, Zhuang W, et al. Sizable spin-to-charge conversion in PLD-grown amorphous (Mo, W)Te<sub>2-x</sub> films. Nanotechnology, 2023, 34: 135001
- 45 Hu G, Ma W, Hu D, et al. Real-space nanoimaging of hyperbolic shear polaritons in a monoclinic crystal. Nat Nanotechnol, 2023, 18: 64–70
- 46 Hu H, Chen N, Teng H, et al. Gate-tunable negative refraction of mid-infrared polaritons. Science, 2023, 379: 558-561
- 47 Guo X, Li N, Yang X, et al. Hyperbolic whispering-gallery phonon polaritons in boron nitride nanotubes. Nat Nanotechnol, 2023, 18: 529-534
- 48 Li C, Chen K, Guan M, et al. Extreme nonlinear strong-field photoemission from carbon nanotubes. Nat Commun, 2019, 10: 4891
- 49 Alcaraz Iranzo D, Nanot S, Dias E J C, et al. Probing the ultimate plasmon confinement limits with a van der Waals heterostructure. Science, 2018, 360: 291–295
- 50 Fan P, Yang F, Qian G, et al. Observation of magnetic adatom-induced Majorana vortex and its hybridization with field-induced Majorana vortex in an iron-based superconductor. Nat Commun, 2021, 12: 1348
- 51 Bothwell T, Kennedy C J, Aeppli A, et al. Resolving the gravitational redshift across a millimetre-scale atomic sample. Nature, 2022, 602: 420-424
- 52 Chang C Z, Zhang J, Feng X, et al. Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator. Science, 2013, 340: 167–170
- 53 Zhang Y, Tan Y W, Stormer H L, et al. Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. Nature, 2005, 438: 201–204
- 54 Park H, Cai J, Anderson E, et al. Observation of fractionally quantized anomalous Hall effect. Nature, 2023, 622: 74-79

Summary for "原子制造的物质科学基础"

# The fundamental physical science of atom manufacturing

Qing Dai<sup>1†</sup>, Fengqi Song<sup>2†</sup>, Caofeng Pan<sup>3†</sup>, Kaihui Liu<sup>7</sup>, Guangbao Yao<sup>4</sup>, Hao Zheng<sup>5</sup>, Yuanzhi Tan<sup>6</sup>, Jinbo Pan<sup>9</sup>, Lingjie Du<sup>2</sup>, Pu Huang<sup>2</sup>, Zenghui Wang<sup>8</sup>, Hui Chen<sup>9</sup>, Chendong Zhang<sup>10</sup>, Fucong Fei<sup>2</sup>, Hongxing Xu<sup>11</sup> & Yafei Dai<sup>12\*</sup>

- <sup>2</sup> Institute of Atom Manufacturing, Nanjing University, Nanjing 210093, China;
- <sup>3</sup> Institute of Atom Manufacturing, Beihang University, Beijing 100191, China;
- <sup>4</sup> School of Chemistry and Chemical Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China;
- <sup>5</sup> School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China;
- <sup>b</sup> School of Chemistry and Chemical Engineering, Xiamen University, Xiamen 361005, China;
- <sup>7</sup> School of Physics, Peking University, Beijing 100871, China;
- <sup>8</sup> Institute of Fundamental and Frontier Sciences, University of Electronic Science and Technology, Chengdu 611731, China;
- <sup>9</sup> Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China;
- <sup>10</sup> School of Physics and Technology, Wuhan University, Wuhan 430072, China;
- <sup>11</sup> School of Microelectronics, Wuhan University, Wuhan 430072, China;
- <sup>12</sup> Department of Interdisciplinary Sciences, National Natural Science Foundation of China, Beijing 100085, China

† Equally contributed to this work

\* Corresponding author, E-mail: daiyf@nsfc.gov.cn

Atom manufacturing, a highly specialized sector within the broader realm of advanced manufacturing, has recently become a focal point of global innovation, reflecting significant interest from numerous nations. This cutting-edge field leverages the evolving principles of material science to facilitate precise atomic-level manipulation and measurement, setting a new paradigm in manufacturing technology. By controlling the physical properties of materials at the atomic scale, atom manufacturing promises to revolutionize product design and performance across multiple industries.

The continuous advancements in material science are crucial for the progress of atom manufacturing. These advancements not only enable the development of new manufacturing techniques but also pose a series of complex scientific challenges. These include the precise placement and bonding of atoms, which are fundamental for creating materials with predefined attributes. This capability could lead to the development of novel materials that are lighter, stronger, or more reactive than those currently available.

The Department of Interdisciplinary Sciences of the National Natural Science Foundation of China underscored the significance of these developments in March 2023 during a symposium held in Wuhan titled "The Fundamental Material Science of Atom Manufacturing". This event marked a significant milestone, providing a platform for experts to exchange insights and address the critical challenges facing the field. The discussions from this symposium have significantly contributed to a deeper understanding of the strategic needs and scientific directions in atom manufacturing.

This paper not only reviews the historical context and foundational principles of atom manufacturing but also discusses the inherent scientific challenges and opportunities that it presents. It elaborates on how atom manufacturing can substantially accelerate advancements in material science, enabling the creation of materials with highly customized properties tailored to specific industrial applications.

Moreover, the document includes policy recommendations aimed at fostering the growth and effective regulation of atom manufacturing. Endorsed by the National Natural Science Foundation Committee, these recommendations advocate for robust government support for foundational research and suggest establishing collaborative frameworks to involve multiple stakeholders, including academic institutions, industry leaders, and policy makers. By promoting an integrated approach, these policies aim to harness the full potential of atom manufacturing while ensuring sustainable and ethical development. This strategic oversight is intended to position atom manufacturing at the forefront of global technology innovation, driving progress and competitiveness in a rapidly evolving world.

# atom manufacturing, material science, atom manipulation, atomic-scale manufacturing, single-atom devices, material synthesis

#### doi: 10.1360/TB-2024-0170

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> National Center for Nanoscience and Technology, Beijing 100190, China;