

从团簇物理到原子级制造

■ 文 / 宋凤麒
南京大学

摘要：原子级制造是人类制造技术向极微观深入发展的必然趋势，也是新一代制造体系中向极微观探索的核心方向。团簇作为物质中介于原子和固体之间的相对独立层次，是实现原子级制造的重要研究载体，团簇物理的基础研究，更是推动原子级制造从理论走向实践的关键支撑。从团簇物理研究出发，厘清原子级制造与传统制造的本质区别，探索团簇在材料创制、器件加工等领域的实际应用，能够为原子级制造的发展搭建完整的技术路径，推动这一前沿领域向产业化落地迈进。

一、原子级制造与传统微纳制造的本质区别

原子级制造并非传统微纳制造的线性发展，而是从材料本质、器件行为到制造工艺的全面变革。与传统微纳制造相比，原子级制造呈现出极限制造、量子制造、化学制造三大核心特征，这也是原子级制造区别于传统制造的核心所在。

极限制造体现在制造精度触及物理层面的极限，原子的不可分割性决定了制造过程中无法实现原子的拆分加工，这是传统制造从未面临的精度挑战，也要求原子级制造必须实现对原子的精准操控，而非传统制造中对宏观材料的切削与塑形。

量子制造体现在制造过程与产品性能均受量子效应主导。制造过程中，原子并不遵循传统机械加工的规律，会发生自组织现象，无法按照预设的加工要求成型；产品性能层面，原子级制造所得产物会呈现出独特的量子物

性，这类特性是传统制造产品所不具备的，也并非传统制造方法能够实现。

化学制造体现在原子级的精准操控会引发材料本质与物性的根本性变化。传统制造中，材料的基本属性固定不变，加工仅改变材料的形态与结构，而原子级制造能够让材料的化学定义与核心物性发生彻底重构，部分传统意义上的导体经原子级方法制备后，可转变为绝缘体，这也让原子级制造实现了从加工已有材料到创制全新材料的跨越。

团簇是物质中介于原子和固体之间的相对独立层次，核心特征为能够实现原子数量的精准控制，而原子级制造的核心要求正是对原子的精准操控，无论是单原子、原子层还是确定原子数量的原子团，均属于原子级制造的范畴，这也让团簇成为研究原子级制造的核心载体，团簇物理研究也成为原子级制造的重要基础。

二、团簇物理研究揭示原子级尺度的物性规律

团簇物理研究的核心价值，在于通过原子数量的精准控制，揭示原子级尺度下的物性变化规律，这一规律在金属等离激元、催化等多个领域的研究中均得到验证，也让团簇物理研究成为理解原子级尺度物性的关键。

在金属等离激元研究领域，传统纳米研究中始终难以观测到明显的量子效应，核心原因在于未实现原子数量的精准控制。而团簇物理研究发现，金属等离激元的物性随团簇原子数量的变化呈现出清晰的三段式演化规律：当团簇原子数量在八百个以上，对应尺度约 2.7 纳米时，其等离激元特性基本趋近宏观，主要表现为固体物理效应与纳米表面散射；当原子数量在三百到八百个之间时，呈现出量子尺寸效应与固体物理效应结合的特征；当原子数量在三百个以下时，则表现出类似分子等离激元的效应。这一研究结果表明，传统纳米颗粒因原子数量无序，本身难以呈现量子效应，而团簇的原子数量精准控制，才是揭示原子级量子规律的关键。

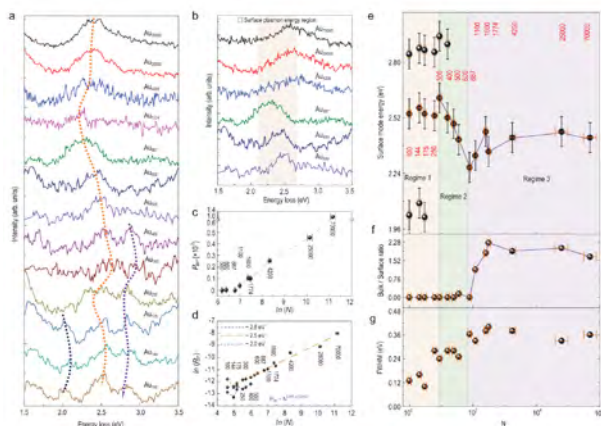


图1 金属等离激元的物性随团簇原子数量的变化呈现出清晰的三段式演化规律

在催化领域，团簇与化学领域合作开展的铂团簇催化特性研究，同样发现了与金属等离激元研究相似的规律。铂团簇的催化特性随原子数量的变化呈现出系统性的演化，当原子数量在七百个以上时，催化特性趋近宏观；当原子数量在七百到三百个之间时，呈现出量子固体相关效应；当原子数量在三百个以下时，表现出类分子的催化特征，从单原子的强极化，到团簇与载体的界面电荷转移，再到纳米颗粒的弱相互作用，催化特性随原子数量呈现出清晰的阶段变化。

上述研究均表明，团簇的原子数量控制相比传统纳米研究中的尺寸控制，能够更精细地反映原子级尺度的物性变化规律。同时，团簇具有极强的学科交叉性，可与化学、材料、机械、信息等多个学科深度融合，与化学交叉可实现分子的原子级创制，与材料交叉可实现合金的原子级调控，与机械交叉可实现器件的原子级加工，与信息交叉可参与芯片的原子级设计，团簇物理研究也因此从多个维度为原子级制造的发展提供支撑。

三、团簇技术在原子级材料创制中的应用——以钨铜合金为例

团簇技术在原子级制造中的应用，首先体现在原子级材料创制领域，以钨铜合金为研究对象的相关实践，成功突破了传统钨铜合金的制备瓶颈，验证了团簇技术在原子级材料创制中的实际价值。

钨铜合金被美国 2025 年核聚变路线图多次提及，是核聚变领域的关键材料，但钨铜属于高正混合焐体系，传统方法难以实现二者的原子级混溶，仅能制备出混合结构的复合材料。此前相关研究在低混合焐体系中实现了 1.8 纳米尺度的合金混溶，但对于钨铜这类合成能更高的体系，传统方法难以突破更小尺度的混溶难题。

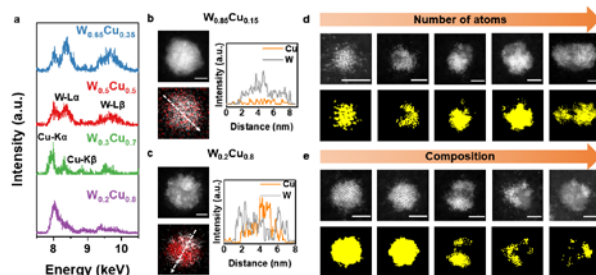


图2 W-Cu 团簇随钨含量、原子数量变化的演变及其互溶性

依托团簇能够精准控制原子数量的特征，相关研究成功制备出钨铜 0.85:0.15 配比的钨铜团簇，通过单晶衍射、多晶环等表征手段检测发现，该团簇形成了晶格常数为 3.88Å 的面立方结构，这一数值介于纯钨与纯铜的晶格常数之间，直接证实了钨铜在原子级的混溶。同时，通过改变原子配比与原子数量，在传统方法难以突破的微小尺度区间，成功绘制出钨铜合金的纳米相图，并发现钨铜合金混溶性的不对称性特征——钨含量偏高时更易形成合金，铜含量偏高时则几乎不具备合金形成的可能性。

钨铜团簇的混溶规律无法通过传统经典理论解释，相关计算研究揭示了全新的能量贡献机制：钨铜形成合

金时，铜的晶格会被拉伸，钨的晶格会被收缩，这种相互应变能够实现表面能的稳定化，而表面能的这一作用，是传统理论中未纳入考虑的关键因素。

传统团簇存在产量极低的问题，难以实现产业化应用，而相关研究攻克了团簇宏量化生产技术，目前已能实现单日一市斤金属团簇的制备。将团簇粉体应用于钨铜合金的粉末冶金工艺，少量掺杂即可让钨铜合金的致密度大幅提升，硬度实现翻倍，部分样品的硬度远超国家相关标准，第三方检测结果证实，钨 0.8、铜 0.2 配比的预研钨铜材料，硬度较传统材料提升一倍。

当前市场上的金属粉体仅有毫米、微米、纳米三种尺度，原子级精准调控的粉体尚无相关国家标准，属于市场空白领域。金属粉体作为高端制造的核心基础材料，相关领域已形成成熟的产业体系，原子级团簇粉体的出现，填补了这一领域的空白，也具备显著的商业化可能性。相较于核聚变等远期前沿技术，原子级制造的材料方向更贴近实际应用需求，有望在未来五年实现产业化落地。

四、团簇束流在原子级加工技术中的应用

团簇作为离子束，在原子级加工领域展现出独特的应用价值，核心解决了传统加工在二维材料、芯片制造中面临的表面损伤瓶颈，为二维材料的器件化、芯片制造的工艺升级提供了全新路径。

传统芯片制造的光刻、蚀刻、抛光、注入、层级五大工艺，应用于二维材料时存在难以克服的技术问题。二维材料本身易破损的特性，与传统加工的能量输出形成根本矛盾，传统离子束加工存在 50 电子伏的能量下限，而材料的化学键能仅为几个电子伏，这一能量差会对材料造成数十个原子层的损伤。国内某先进的二十纳米芯片，便因加工后表面出现严重损伤，迁移率仅为 1，远低于纯硅的百级水平，几乎失去实际应用价值。化学加工方法虽能避免部分物理损伤，却极易造成材料污染，这也让二维材料的芯片化面临巨大障碍。

团簇束流的核心优势，在于能够实现键能级的能量精准分配。团簇离子束的总能量可由数十个甚至上百个原子共同承担，例如 200 电子伏的团簇离子束，经多个原子分担后，单个原子的能量可降至化学键能水平，从而实现键能选择性加工，从根本上抑制加工过程中的表面损伤，这是传统单原子离子束无法实现的技术优势。

团簇束流在注入、清洗、抛光、表面改性等原子级加工环节的应用价值，均通过相关实验得到验证。注入工艺中，将金团簇注入石墨烯，可实现 1 纳米精度的注入深度控制，成功制备出二硫化钼异质结，开关比达到 10^6 ，迁移率表现符合预期，解决了传统离子注入对二维材料的破坏性问题；清洗工艺中，团簇束流可将能量控制在吸附键能与化学键能之间，在去除石墨烯、金刚石表面污染物的同时，保持材料本征结构完整，经团簇束流处理后的石墨烯拉曼光谱基本无变化，还能降低接触电阻、提升迁移率，同时可保留金刚石导电所需的氢原子层，避免其导电性丧失；抛光工艺中，传统抛光超薄膜时易出现“挖底”问题，即在降低粗糙度的同时破坏材料厚度，而团簇束流可实现无剪裁抛光，将钼膜的粗糙度减半甚至降至原有水平的三分之一，且材料厚度基本不变；表面改性工艺中，利用团簇离子束处理氮化镓，可在无损伤的前提下改变其肖特基势垒高度，有效提升器件的可靠性，为第三代半导体的加工提供了全新方法。

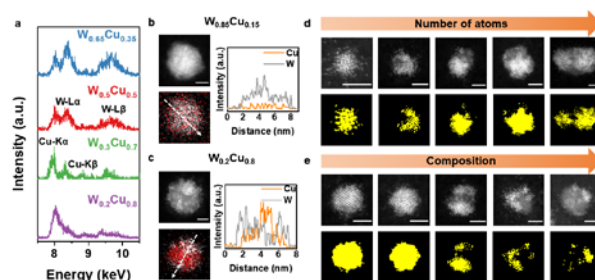


图 3 硅片几乎不刻蚀的抛光

总体而言，团簇束流能够将能量精准聚集在材料表面，实现对材料的无损加工，这一特性让其在二维材料、半导体器件加工领域具备巨大的应用潜力，也丰富和完善了原子级制造的技术体系。

五、原子级制造的发展支撑：大科学装置建设

诺贝尔化学奖获得者斯莫利曾提出，团簇是人工分子的创造。原子级制造的发展无需追求遥不可及的技术目标，只需实现从原子到人工分子创造的关键一步，便能在材料、加工等多个领域产生广泛的应用价值。分子、材料与加工是自然科学和产业公共基础，这一步的实现，将推动整个制造体系的底层变革。

基于团簇物理与原子级制造的研究积累，南京大学提出并启动了原子级制造大科学装置的建设工作，目前这一长度达五十余米的装置已进入验收阶段。该装置的核

心优势，在于依托团簇的多元应用潜力，实现了多领域、多工艺的整合，选换不同元素可制备人工分子，选择金属团簇可实现原子级材料创制，选择气体团簇可开展原子级加工，应用范围极为广泛，具备作为大科学装置为多学科、多领域提供研究支撑的技术潜力。借助这一装置，能够实现团簇制备、原子级加工、材料创制、性能测试等原子级制造全流程的研究与验证，为原子级制造的基础研究和应用落地提供核心平台支撑。

当前，原子级制造大科学装置的建设工作仍在积极推进，相关科研团队也在汇聚更多科研力量，共同推动原子级制造领域的发展。从团簇物理到原子级制造的研究实践表明，原子级制造相比其他前沿技术，更贴近实际需求，且其偏向制造、偏向材料的特性，让其能够在更多领域实现技术渗透，未来有望成为新一代制造体系的核心支撑，为高端制造、核聚变、半导体等领域的发展提供全新的技术路径。

作者简介：

宋凤麒，南京大学原子制造研究院院长，南京原子制造研究所所长，主要研究方向为原子制造科学与技术。2012年任南京大学教授，2015年获国家基金委优秀青年基金、教育部青年长江学者，2020年获国家基金委杰出青年基金。原子级微制造实验设施首席科学家。任X科技委十三五、十四五原子制造主题专家组组长、首席科学家，X重大专项总体专家组成员、材料与制造LY专家委员会委员。国家基金委原子制造交叉论坛召集人，表界面问题重大研究计划指导专家组成员。工业和信息化部高新技术司“原子级制造”重点专项动议材料编写组召集人，十五五先进制造科技创新规划编写专家组成员。团队致力于原子级制造研究，近期聚焦建设原子级制造重大科技基础设施。在原子团簇束流源关键技术及装备、原子团簇材料与器件方面取得诸多代表性成果：研发的高通量原子团簇束流装备，支撑新物质工程化创制和晶圆超平坦化加工，入选了国家十三五科技创新成就展；提出原子级存储和多态晶体管新原理；研发的原子团簇金属粉体已孵化徐州国基原子制造有限公司，已验在航空发动机核心部件修补、固体燃料等领域的应用；验证团簇原子级制造在碳基芯片的应用。自工作以来发表论文200余篇，近五年发表论文100余篇，授权专利30余项。