



数值模拟驱动的原子制造在二维场效应晶体管中的应用

郭浩^{1,2}, 潘金波^{1,3*}, 杜世萱^{1,3,4*}

1. 中国科学院物理研究所, 北京凝聚态物理国家实验室, 北京 100190

2. 河北科技师范学院城市建设学院, 秦皇岛 066004

3. 中国科学院大学物理科学学院, 北京 100049

4. 松山湖材料实验室, 东莞 523808

* 联系人, E-mail: jbpan@iphy.ac.cn; sxdu@iphy.ac.cn

2025-09-29 收稿, 2025-11-21 修回, 2025-11-25 接受, 2025-11-26 网络版发表

国家重点研发计划(2024YFA1207803, 2022YFA1204104)、国家自然科学基金(12202134)、河北省自然科学基金(A2024407001)和中国博士后科学基金(2024M763510)资助

摘要 原子制造作为先进材料发展的前沿方向, 旨在通过对原子、原子团簇乃至原子层的精准操控, 实现结构设计、性能调控与功能集成, 为新材料和新器件的“自下而上”设计提供可行路径, 并支撑光电、存储和传感等领域的应用. 尽管实验技术已在一定程度上实现了原子级操控, 但受环境复杂性与制备精度限制, 二维材料及其异质结构在规模化构建和性能优化等方面仍面临严峻挑战. 在此背景下, 数值模拟已成为推动原子制造进一步发展的重要工具. 基于量子力学的模拟方法不仅能够解析原子尺度电子结构和多物理场耦合机制, 还可揭示原子堆砌、界面行为与结构演化规律, 为实验设计提供理论支撑并降低试错成本. 二维场效应晶体管作为下一代高效、低功耗电子器件的核心组成部分, 是实现纳米尺度电子器件高性能和高度集成化的关键. 本文系统梳理了数值模拟在原子制造二维场效应晶体管设计中的研究进展, 重点介绍了数值模拟的关键作用及其发展、材料数据库的构建与应用, 沟道材料与栅介电层的筛选策略、接触工程与界面优化方法, 以及输运模拟在器件性能预测中的价值. 同时, 本文探讨了高通量计算与人工智能在材料与器件智能设计中的应用潜力, 并展望了数值模拟驱动的原子制造未来发展方向.

关键词 原子制造, 数值模拟, 二维场效应晶体管, 材料筛选, 界面设计, 高通量计算与机器学习

原子是材料构成的基本单元, 其排列方式和相互作用决定了材料的物理和化学特性. 随着对材料性能调控需求的不断提升, 原子制造逐渐成为先进材料领域的重要发展方向. 原子制造是指在单原子、原子团簇或原子层级进行结构构筑、性能调控和功能集成的先进制造技术^[1], 旨在通过精准操控单个原子推动材料在光电、催化、存储和传感等领域实现性能边界拓展^[2], 并为下一代高性能、低功耗电子器件的设计提供

材料基础与技术路径. 早在1989年, IBM Almaden实验室的Eigler和Schweizer使用扫描隧道显微镜(scanning tunneling microscope, STM)在晶体Ni表面操纵35个Xe原子, 构建出世界上最小的“IBM”标志^[3]. 1995年, 中国科学院北京真空物理开放实验室庞世瑾研究组也利用STM针尖操控Si原子排布出原子级线宽的“中国”字样^[4]. 随着实验设备和技术的发展, 2022年Adam Foster等人^[5]采用深度强化学习方法, 高效学习STM系统的

引用格式: 郭浩, 潘金波, 杜世萱. 数值模拟驱动的原子制造在二维场效应晶体管中的应用. 科学通报

Guo H, Pan J, Du S. Application of numerical simulation-driven atomic manufacturing in two-dimensional field-effect transistors (in Chinese). Chin Sci Bull, doi: [10.1360/CSB-2025-5600](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5600)

原子尺度操控策略, 并成功实现对Ag原子的精确操控与自动组装, 推动了原子制造的智能化进程. 尽管实验上已能够实现一定程度的原子操控, 但受限于环境温度、设备精度及复杂界面等多重因素, 二维材料的原子级构筑与性能调控仍面临诸多挑战. 例如, 在二维材料及其异质结构的规模化制备中, 实验难以精准掌控原子堆砌与界面结构; 从原子堆砌到宏观器件的演化过程中, 还存在熵增失控、亚稳态演化以及核运动与量子限域效应等复杂问题^[6-9].

基于量子力学原理, 数值模拟不仅能够在原子尺度精确解析材料的电子结构与本征性能, 实现对材料性质与行为的调控, 还可用于预测原子堆砌与界面结构演化, 解析熵增、亚稳态演化及量子效应等复杂过程, 并在更大尺度上揭示结构演化规律, 为二维材料的原子级构筑、原子制造以及器件设计提供理论指导. 随着模拟方法与计算资源的迅猛发展, 数值模拟的应用已从单纯的机理揭示拓展到结构设计、材料筛选、功能调控、界面优化和器件性能预测等多个方面. 本文将系统梳理数值模拟在原子制造以及二维场效应晶体管(two-dimensional field-effect transistors, 2D FETs)设计与优化中的广泛应用. 首先, 本文介绍了数值模拟在原子制造中的关键作用及其发展; 其次, 本文梳理了国内外主流材料数据库及其在材料设计、筛选与性能

调控中的支撑作用; 进一步, 本文重点讨论了二维半导体沟道材料与范德华(van der Waals, vdW)栅介电层的筛选策略、界面工程与器件性能优化方法; 在此基础上, 本文评述了载流子注入效率、低接触电阻及界面质量对2D FETs整体性能的影响, 以及金属、半金属接触材料的设计策略与优化路径; 最后, 本文对数值模拟驱动原子制造在下一代高性能电子器件设计中的发展趋势与应用前景提出了展望.

1 数值模拟的关键作用及其发展

1.1 数值模拟的关键作用

理论分析、数值模拟和实验验证共同构成了原子制造领域协同发展的三大支柱. 其中, 数值模拟作为连接理论与实验的关键桥梁, 具有不可替代的重要作用. 它不仅能够在原子尺度精准解析材料结构、界面行为及多物理场耦合机制, 还可高效预测调控策略、优化制备参数、降低实验试错次数与成本. 数值模拟不仅推动了材料设计向精准化发展, 也提升了制造过程的可控性和实验方案的高效性, 从而与理论分析和实验验证协同构建出原子制造的闭环研究体系(图1(a)). 得益于计算能力的快速提升, 基于量子力学的第一性原理方法已成为原子制造研究中不可或缺的关键手段.

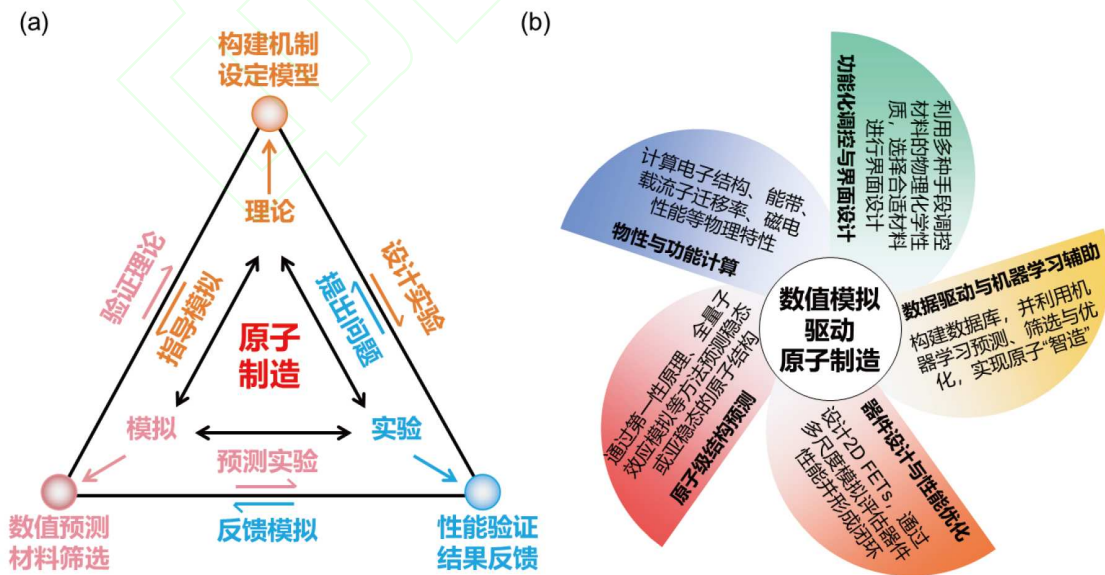


图 1 (网络版彩色)(a) 原子制造过程中理论、模拟和实验三者之间的互联关系; (b) 数值模拟驱动原子制造及其辅助2D FETs设计与优化的流程图

Figure 1 (Color online) (a) The interplay among theory, simulation, and experimentation in the atomic fabrication process; (b) flowchart of atomic manufacturing driven by numerical simulation and its assistance in the design and optimization of 2D FETs

该方法能够从理论层面精确揭示单原子体系及长程有序晶体的结构特征与物理化学性质,为原子级精准调控与设计奠定坚实基础^[2]。

数值模拟在原子制造中承担着从材料结构预测到器件设计与性能优化的全过程指导作用(图1(b))。首先,可利用第一性原理计算与全量子效应模拟进行原子级结构预测,筛选出稳定或亚稳态候选结构;随后,通过电子结构、能带、载流子迁移率及磁电性能等物性与功能计算,评估材料的潜在应用价值;在此基础上,结合多种手段实现功能化调控与界面设计,确保材料与器件环境的良好匹配;与此同时,数据驱动与机器学习能够加速材料的预测、筛选和优化过程,为原子“智造”提供智能支撑;最终,数值模拟还可直接服务于2D FETs的设计与性能优化,通过评估其接触电阻、开关比等电学性能形成闭环反馈,从而推动原子制造向高性能、低功耗发展提供坚实的理论支撑与技术路径。

1.2 数值模拟的发展

在原子制造的理论研究中,不同的数值模拟方法和工具扮演着至关重要的角色。常用的计算手段包括密度泛函理论(density functional theory, DFT)、分子动力学(molecular dynamics, MD)和蒙特卡罗模拟(Monte Carlo, MC)等(图2(a))。其中,DFT能够在量子力学框架下精确描述原子尺度小体系材料的能带结构、自旋极

化、铁电和铁磁等本征特性,并揭示缺陷调控、界面耦合及多物理场响应机制,为实验设计提供理论依据与数据支撑;然而其计算量随体系尺寸呈高次幂增长,通常仅适用于数百原子以内的体系,且计算精度和成本受泛函选择的影响较大。MD模拟基于经典力学,可揭示有限温度与时间下材料的结构演化、热稳定性及机械响应,适合分析材料在外场、应变和缺陷作用下的动态过程;其时空尺度可达数百万原子与纳秒至微秒量级,但结果精度依赖于势函数的准确性,且在经典近似下难以获得电子结构信息。MC方法依托统计物理,通过随机采样获得平衡态热力学量,常用于研究相变温度、缺陷平衡浓度及大尺度磁性或拓扑序演化;它能在更大尺度上实现统计平均,但计算过程中不含真实时间变量,只能提供静态或准静态信息,且所需的相互作用参数通常需由DFT计算或实验预先确定。总体而言,DFT在小体系中计算精度最高但代价较大;MD可兼顾中尺度下的温度与动力学过程,但牺牲了电子自由度;MC适用于大尺度平衡统计,但缺乏动力学信息。因此,在实际研究中,常需将三种方法结合使用,以实现从原子尺度到宏观尺度的多层次耦合研究。

近年来,围绕低维材料的结构预测、物理特性分析及器件性能评估等方面,国内外学者开发了多种高效算法与软件工具,为原子级调控和器件设计提供了重要支撑(图2(b))。在晶体结构预测方面,Oganov等人^[10]采用进化算法开发的USPEX与马琰铭等人^[11]采

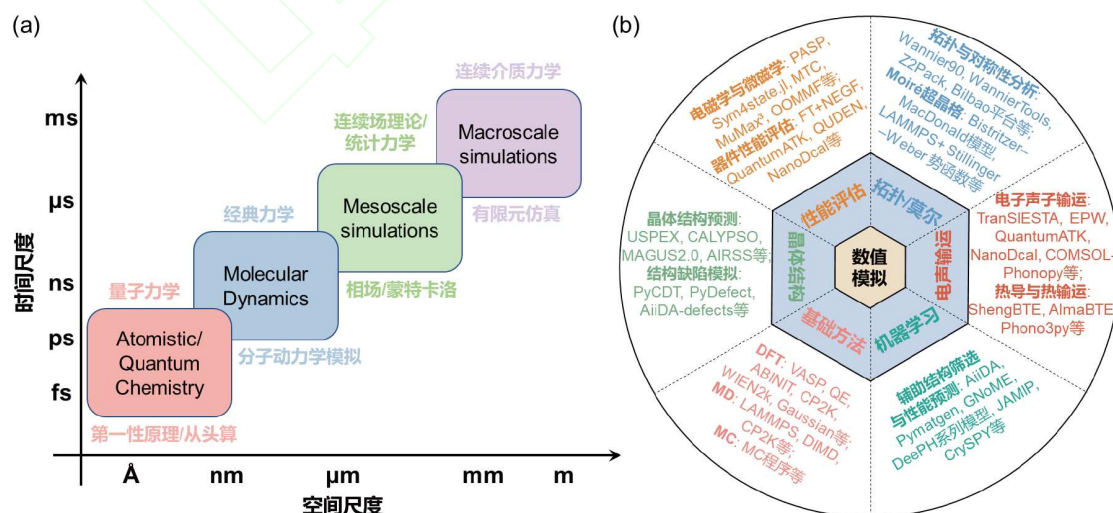


图2 (网络版彩色)(a)不同尺度的数值模拟方法分类及其理论依据;(b)低维材料理论研究中常用数值模拟方法及代表性软件生态图谱示意图
Figure 2 (Color online) (a) Classification of numerical simulation methods at different scales and their theoretical foundations; (b) schematic of the ecosystem map of commonly used numerical simulation methods and representative software in theoretical studies of low-dimensional materials

用粒子群优化算法开发的CALYPSO均可实现全局结构搜索,支持可变晶胞和可变组分的多目标优化,实现极端条件下晶体结构的预测;孙建等人^[12]开发的MAGUS 2.0将对称性原理融入机器学习与图论框架,高效生成低能候选结构,使复杂晶体结构的搜索效率提升4倍以上.在机器学习加速结构筛选方面,DeepMind的GNoME项目通过图神经网络势场,成功筛选出220万个二维及三维稳定结构^[13];徐勇和段文晖等人^[14,15]开发的DeepH系列模型,构建了从秒级电子结构到通用材料大模型的全链条AI+DFT解决方案,为高效预测电子结构和加速新材料发现提供了全新路径;张立军等人^[16]开发的JAMIP集成了高通量材料计算、数据管理与存储,以及机器学习/数据挖掘功能,能够自动生成、分析、管理和学习大规模材料数据,为基于材料信息学或材料基因工程的新材料发现与设计提供全链条方法与软件支撑;Yamashita等人^[17]开发的晶体结构预测工具CrySPY集成随机搜索、进化算法与机器学习,可自动完成新型材料结构生成、优化、能量评估与高效筛选,内置的多种搜索算法可显著降低计算成本.在结构缺陷分析方面,Python软件包pyCDT, pyDefect和AiiDA-defects等可实现点缺陷热力学形成能等性质的自动化计算^[18].在电磁学性质分析方面,向红军等人^[19]开发的PASP采用非共线四态映射,对二维磁性体系可自洽求解磁各向异性能与拓扑霍尔响应;王金兰等人^[20]开发的蒙特卡罗软件MTC (Multi-dimensional Curie Temperature Simulation)可在任意维度晶格中并行扫描温度-电场-磁场三维空间,快速获得居里温度相图;杜世萱等人^[21]开发的Sym4state.jl程序,将群论对称性分析嵌入四态法流程,可实现对任意磁有序晶体中全部磁结构的高效穷举分类;Vansteenkiste等人^[22]开发的MuMax³与Donahue等人^[23]开发的OOMMF作为微磁学标准工具,均支持Dzyaloshinskii-Moriya相互作用模块,可高效模拟斯格明子与双半子的拓扑电荷输运,为二维铁磁、反铁磁自旋电子器件及拓扑磁畴工程提供定量设计平台.在拓扑与对称性分析方面,Wannier90、WannierTools、Z2Pack以及Bilbao Crystallographic Server可用于计算拓扑不变量、表面态谱及费米弧^[24-26].对于莫尔超晶格,Bistritzer-MacDonald模型可预测电子能带和相图^[27];而LAMMPS结合Stillinger-Weber势可提供原子尺度结构与应力分布^[28].在电子和声子输运方面,TranSIESTA^[29]、Nanocal^[30]和QuantumATK^[31]均内置非平衡格林函数(non-equilibrium Green's func-

tion, NEGF)引擎,可在原子尺度计算FETs的电子透射谱,并进一步耦合声子模块得到电声耦合强度与载流子迁移率;EPW则通过插值Wannier函数快速给出动量分辨的电声散射率,直接预测载流子迁移率和电声散射极限^[32].在热导与热输运方面,ShengBTE^[33]和AlmaBTE^[34]可预测晶格热导及热输运特性;Phonopy和Phono3py则可用于声子性质分析、非谐效应研究以及热导率和温度重整化效应的计算研究^[35];多尺度耦合COMSOL相场与Phonopy声子热输运,可分析石墨烯纳米孔阵列的声子输运及其对热导率的影响^[36].在器件性能评估方面,假定接触界面无结构缺陷、具有弹道输运和理想欧姆接触,利用DFT+NEGF方法计算所得亚10 nm栅长的双栅FETs的亚阈值摆幅、开态电流和延迟时间等关键性能指标与实验结果偏差均小于5%^[37];QUDEN量子输运模拟器结合了NEGF和弹道势垒顶部模型,可用于快速评估和优化1D及准1D纳米带通道FETs的本征性能,实现从原子制造到器件性能评估的衔接^[38].

综上,数值模拟在原子制造中贯穿结构预测、性能分析与器件应用全过程.借助高通量计算与人工智能,各类软件与算法平台不断完善和拓展,实现了材料结构与性能预测的高效化、自动化与智能化,不仅可实现二维材料及2D FETs的精准设计与性能优化,还为原子级器件构筑提供系统的理论指导与可靠的数据支持.

1.3 材料数据库的构建

随着材料科学与计算能力的迅速发展,传统依赖经验和反复试验的材料研发模式在效率上逐渐显露局限性,而基于数据与算法驱动的方法正逐步成为从原子尺度材料设计到二维电子器件优化的重要途径.材料数据库作为人工智能辅助材料研究的基础平台,其功能不断扩展,已从最初的理论高通量计算与实验数据校验,发展为涵盖多种功能导向的专题数据库,逐步构建起多层次、互为补充、协同支撑的材料数据体系.图3对常用材料数据库进行了系统梳理与分类,并按不同的类别与方向进行了归纳.

在综合材料属性方面,Materials Project^[39]、OQMD^[40]、AFLOW^[41]与JARVIS^[42]等高通量数据库提供了DFT框架下的形成能、能带结构、态密度、弹性常数以及声子谱等核心物性数据,为稳定性判定、相图绘制、电子结构分析以及机器学习模型的训练和验



图3 (网络版彩色)常用材料数据库统计列表。*代表由中国学者构建的材料数据库

Figure 3 (Color online) Statistical list of commonly used materials databases. Red stars indicate databases constructed by Chinese scholars

证奠定了数据基础。在二维材料领域, C2DB^[43]、2D MatPedia^[44]与JARVIS-2D^[42]等专项数据库集中收录了单层二维材料的结构参数、形成能、带隙、磁矩、介电张量与极性空间群下的铁电极化等关键信息, 为2D FETs的材料筛选与界面设计提供了重要参考。曾海波等人^[45]基于C2DB数据库通过高通量第一性原理计算与量子输运模拟, 从1608种二维材料中筛选出192种具有本征亚热电子输运潜力的“孤立能带”沟道材料, 证明了金属-氧化物-半导体场效应晶体管(metal-oxide-semiconductor field-effect transistor, MOSFET)可突破室温下60 mV/dec亚阈摆幅的热力学极限, 为设计超低功耗2D FETs提供了新思路。杜世萱等人^[46-48]搭建的2D Interface Database、2D charged building block database和ionic layered structures数据库(<http://n11.iphy.ac.cn/>)可以实现二维材料与基底界面的系统性分析、带电构筑单元的高效筛选, 以及新型层状结构的设计与预测。在拓扑材料领域, Materiae^[49]、Topological Materials Arsenal^[50]以及Topological Materials Database^[51]等平台系统整理了拓扑不变量、对称性指标、表面态和输运性质等信息, 并基于群论可以高效实现拓扑判定。在磁性分析方面, MAGNDATA汇编了两千余条标准化的磁结构信息^[52,53], 结合Materials Project^[39]与JARVIS^[42]的磁性数据条目, 可用于磁序建模、交换作

用与各向异性分析。除理论计算数据库外, Bilbao Crystallographic Server整合了群论与对称性工具, 并提供空间群、不可约表示、声子选择定则等功能, 为材料电子结构与激发过程提供理论约束与解释^[54-56]。在实验与结构基准方面, ICSD (Inorganic Crystal Structure Database)^[57]和COD (Crystallography Open Database)^[58]为相鉴定、XRD模拟及理论结构校准提供了可溯源依据。

总体来看, 从综合性数据平台到二维、拓扑、磁性等专项数据库, 再到实验结构数据源, 材料数据库的广度与深度持续演化, 为2D FETs设计中材料的筛选、结构设计与性能优化提供了丰富的数据资源。然而, 不同数据库在计算参数设定、收敛标准及结构描述方式上仍存在差异。例如, Materials Project^[39]的计算结果多采用PBE泛函并忽略自旋轨道耦合效应, 而JARVIS^[42]在部分体系中引入了vdW修正与自旋轨道耦合的影响; C2DB^[43]与2D MatPedia^[44]分别采用原胞与常规超胞进行结构描述, 导致同一材料在能带路径和对称性分析上存在差异。其次, 数据库在数据质量控制方面也缺乏统一规范。部分数据库未统一设定收敛标准和K点密度, 而且缺乏与实验结果的交叉校验。这些不一致性降低了跨数据库结果的可比性, 也削弱了基于多源数据机器学习模型的泛化能力。此外, 现有数据库在覆盖范

围与计算精度方面也存在局限. 例如, 大部分数据库聚焦于理想化晶体结构, 尚未系统涵盖缺陷、应变及温度等实际因素的影响, 限制了其在复杂器件模拟中的适用性. 目前, 中国学者主导的数据库在数据质量和特色标注上与国际先进材料数据库的差距逐渐缩小, 但在全球化使用率、持续更新与维护方面仍存在较大不足, 未来亟需瞄准以下几个关键点进一步完善: (1) 建立统一的数据标准与元数据规范, 在数据格式、计算参数、结构标注和质量评估上实现标准化, 提升结果的可重复性与互操作性; (2) 构建可持续的更新与维护机制, 形成动态更新与反馈的良性生态; (3) 强化数据库与人工智能工具的融合, 提供高性能应用程序编程接口(API), 促进数据库智能化升级; (4) 拓展器件专项数据库的建设, 例如, 面向2D FETs与新型芯片及电子器件的设计, 构建涵盖材料优选、界面特性、载流子输运及器件性能评估的数据库, 实现从材料到器件的

全链条数据支撑.

2 数值模拟在2D FETs设计中的应用

2D FETs作为后摩尔时代集成电路和低功耗电子器件的核心候选, 研究其设计与优化对推动新一代信息技术的发展具有重要意义^[59,60]. 在2D FETs的设计与优化过程中, 数值模拟发挥着从材料本征性质解析到器件整体性能评估的关键作用^[37]. 具体而言, 数值模拟不仅可以辅助晶圆级、高质量二维半导体沟道材料和vdW栅介电层的筛选与优化^[61-63], 还能为理想的金属-半导体接触界面和介电层-沟道界面的构筑提供有效指导^[64,65]. 而这些功能性材料与关键界面正是决定2D FETs载流子输运能力、静电控制能力、接触电阻以及功耗与能效等核心性能的关键因素(图4). 数值模拟依托量子力学原理, 精准揭示材料的本征特性并预测器件整体性能, 为实验提供性能参数图谱与优化路径, 推

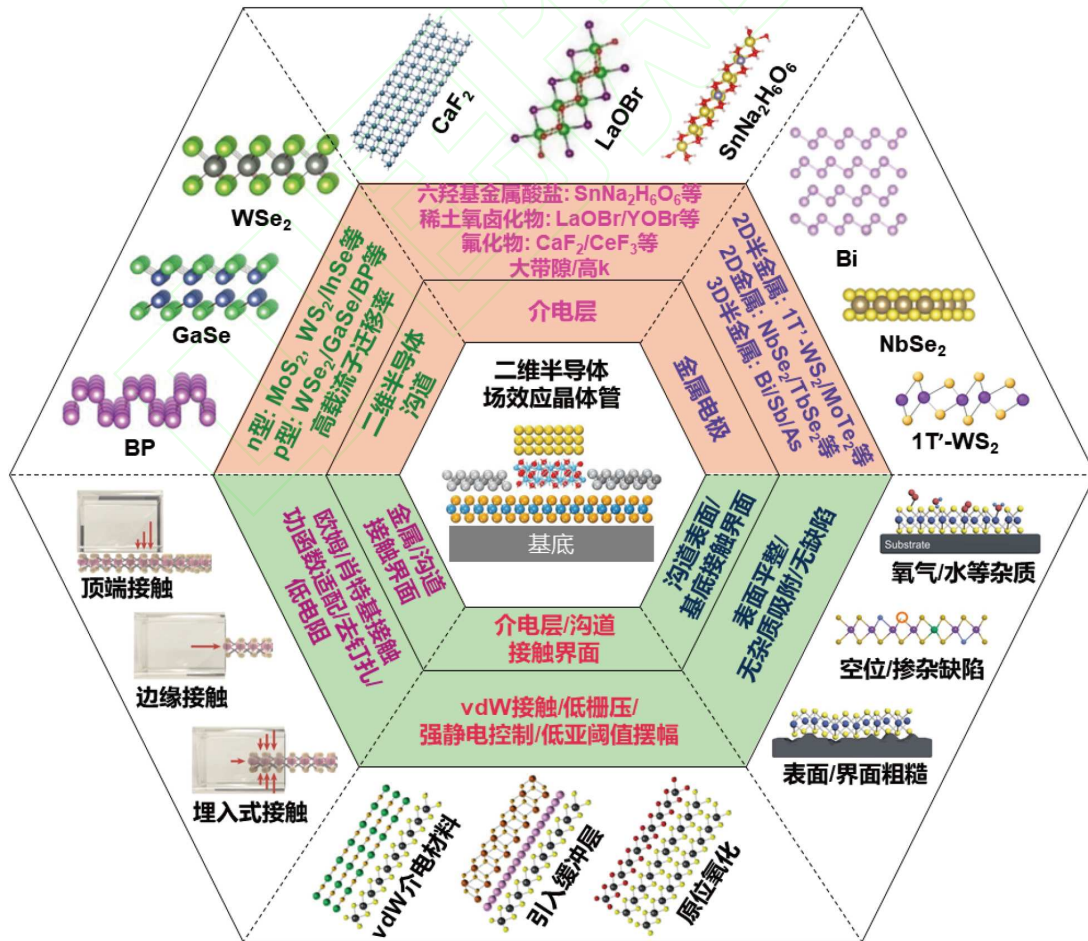


图 4 (网络版彩色)决定2D FETs整体性能的核心材料与关键界面

Figure 4 (Color online) Core materials and critical interfaces that determine the overall performance of 2D FETs

动原子制造从“实验室研究”走向“产业化应用”。本节将重点探讨数值模拟在2D FETs设计中的应用, 涵盖二维沟道材料与vdW栅介电层的筛选, 以及界面设计与性能优化的前沿进展。

2.1 二维半导体沟道材料的筛选

二维半导体材料(如MoS₂、InSe、Bi₂O₂Se等)因其原子级超薄厚度(≤1 nm)、表面无悬挂键、可调带隙及高载流子迁移率等特性, 被IRDS视为后摩尔时代最具前景的沟道材料, 有望推动晶体管进一步微缩并加速新型技术的发展^[66-68]。二维半导体凭借其远小于硅基沟道的有效厚度, 可显著提升栅极静电控制能力, 有效抑制短沟道效应^[66,69]。研究表明, 即使沟道厚度小于1 nm, 二维过渡金属硫化化合物(transition metal dichalcogenides, TMDs)也能保持较高的载流子迁移率^[66]和较低的漏电流^[70], 使其在高开关速度和低静态功耗之间取得平衡。而且, 实验上已成功制备了晶圆级二维TMDs^[71], 为2D FETs的制备提供了有力支撑^[72]。二维TMDs中的MoS₂和WSe₂分别是n型和p型半导体沟道的典型代表, 其单层薄膜的载流子迁移率分别是410 cm² V⁻¹ s⁻¹^[73]和117 cm² V⁻¹ s⁻¹^[74], 均满足IRDS的要求(>100 cm² V⁻¹ s⁻¹)^[75]。除2D TMDs外, 二维Bi₂O₂Se兼具与硅相当的带隙和电子迁移率, 并且在缩减至0.61 nm单层厚度时, 其载流子迁移率在室温下仍能达到180 cm² V⁻¹ s⁻¹^[76]。吕劲等人^[77]基于DFT+NEGF预测单层Bi₂O₂Se构成的n型MOSFET在2 nm栅长下开态电流为960 μA μm⁻¹, p型MOSFET在3 nm栅长下开态电流为1127 μA μm⁻¹, 均满足IRDS高性能指标。

此外, 2023年, 刘远越等人^[78]基于C2DB数据库^[43], 通过高通量DFT计算报道了近百种具有高载流子迁移率的二维半导体, 如BSb、ZrI₂、Sn₂H₂和Ga₂Ge₂Te₂等(图5(a-c)), 为高性能器件应用和新奇物理研究开辟了新的材料体系。目前, 理论与实验研究最广泛的仍是以MoS₂为代表的n型半导体场效应晶体管。然而, 为设计高性能的互补金属氧化物半导体(CMOS)器件, 还需要性能优异且与n型器件兼容的p型半导体晶体管。现阶段, 关于p型2D FETs的研究相对有限, 即便依赖静电调控和接触金属功函数调控等策略可以实现CMOS的基本功能^[79,80], 但p型逻辑器件的性能在2 nm技术节点仍难以满足IRDS的技术要求(载流子有效迁移率>100 cm² V⁻¹ S⁻¹, 接触电阻<257 Ω μm, 亚阈值摆幅<72 mV/dec)。为此, 陈翔等人^[81]系统总结了单质、硫

属化物、氧化物等多类p型二维半导体材料的带隙、载流子迁移率等基本性质, 梳理了合成方法及相关电子器件的设计与应用, 为后续p型2D FETs的研究提供了重要参考。2024年, Giustino等人^[63]基于MC2D数据库^[82], 结合高通量计算与从头算玻尔兹曼输运方程, 在5619种层状化合物中分层筛选出16种具有高载流子迁移率的二维半导体沟道材料。其中, 单层WS₂在室温下的理想空穴迁移率可达1342 cm² V⁻¹ s⁻¹(图5(d)), 展现出作为二维p型半导体沟道材料的突出潜力。

2.2 vdW栅介电层的筛选

在2D FETs中, 栅介电层的主要功能是作为电容实现对沟道载流子的静电调控, 对器件的开关比起着至关重要的作用^[59]。简单来说, 栅介电层就像“水龙头”一样, 决定了2D FETs的开关状态^[66]。栅介电层的本征特性直接影响栅极对沟道的可控性, 进而影响2D FETs的阈值电压、亚阈值摆幅和漏电流等性能^[59]。因此, 选用高质量的栅介电层是提升2D FETs栅极静电控制能力、抑制短沟道效应并降低漏电流的关键。

在2D FETs中, 载流子被限制在原子级厚度的二维半导体沟道内, 其原子级超薄厚度容易导致载流子直接隧穿, 而且在其表面均匀生长和成核高介电常数 κ 的栅介电层是一项关键挑战^[83]。对于2D FETs, 栅介电层的核心性能指标是带隙和介电常数^[66,84], 其中带隙在4~8 eV、介电常数在20~40之间的介电材料更适合作为栅介电层^[85]。较大的带隙有助于抑制隧穿漏电流, 而较高的介电常数能够减小等效氧化层厚度(equivalent oxide thickness, EOT)并增强栅极对沟道的静电调控能力。但是, 这两项指标往往难以同时达到最优, 因此在筛选栅介电层时, 需要合理权衡带隙和介电常数^[59]。此外, 栅介电层还需要具有良好的热力学和机械稳定性, 以及化学惰性。例如, 虽然HfO₂具有高介电常数(~25)和宽带隙(~5.53 eV), 但DFT计算表明其表面的Hf原子容易与MoS₂形成Hf-S键, 导致载流子转移滞后和亚阈值摆幅增大, 因此HfO₂并不适合作为MoS₂沟道的介电层^[86]。

通过DFT计算可以预测栅介电层的本征参数, 如介电常数、带隙、电子亲和势、离子化能以及带隙类型, 从而判断其是否具备作为栅介电层的潜力。例如, Vandenberghe等人^[87]以介电常数、带隙及电子亲和能为介电层筛选指标, 以等效氧化层厚度和漏电流作为介电层的性能判据, 利用DFT计算在32种可剥离vdW

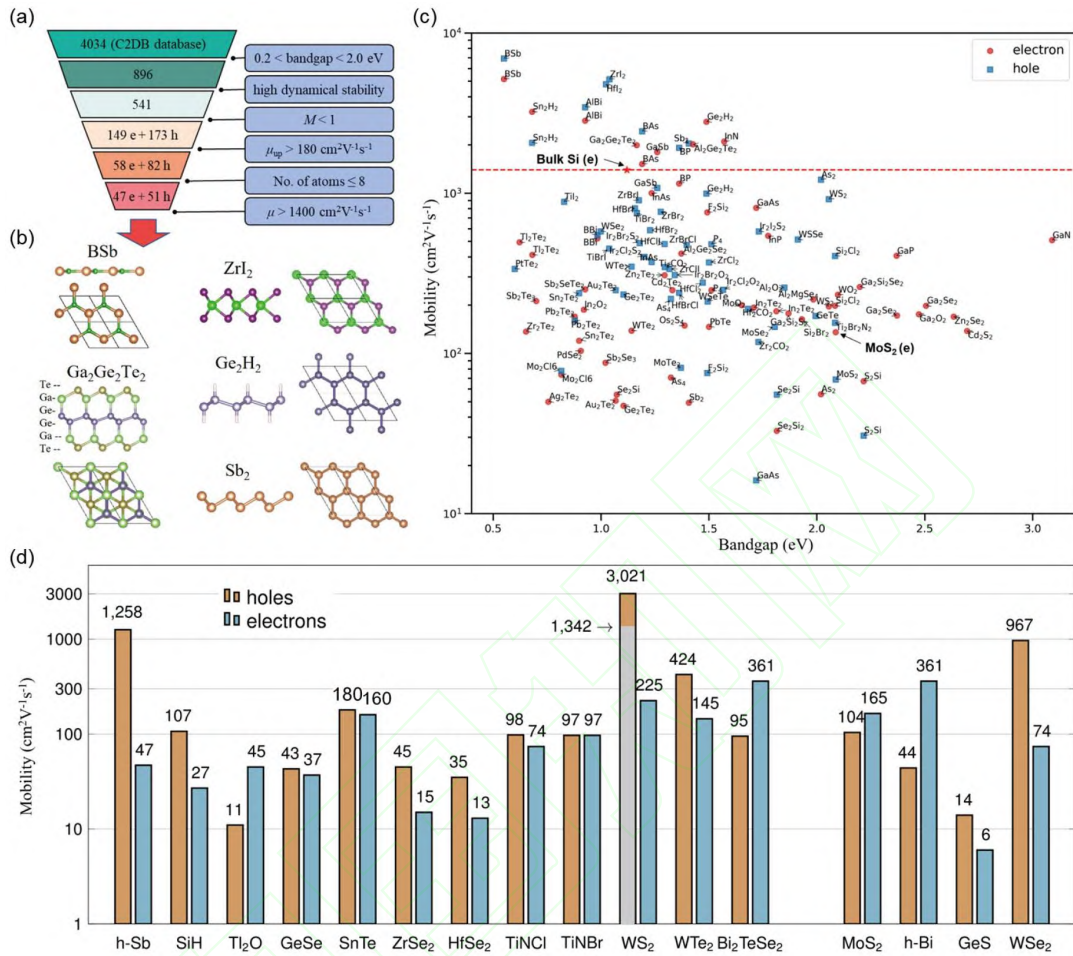


图 5 (网络版彩色)(a) 高载流子迁移率二维半导体的筛选流程图^[78]; (b) 载流子迁移率超过 $1400 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 的二维半导体晶体结构^[78]; (c) 不同二维半导体的载流子迁移率与带隙关系图^[78]; (d) 基于从头算玻尔兹曼输运方程计算得到的二维半导体的空穴和电子迁移率^[63]

Figure 5 (Color online) (a) Schematic of the screening workflow for 2D semiconductors with high carrier mobility^[78]; (b) crystal structures of 2D semiconductors with carrier mobility exceeding $1400 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ^[78]; (c) relationship between carrier mobility and bandgap for different 2D semiconductors^[78]; (d) hole and electron mobilities of 2D semiconductors calculated from first-principles using the Boltzmann transport equation^[63]

材料中筛选出 HoOI 、 LaOBr 、 LaOCl 、 LaOI 、 SrI_2 和 YOBr 共六种兼具高介电常数 (>15)、低漏电流与低等效氧化层厚度单层介电材料, 为实现二维高 κ 栅介电层提供积极参考(图6(a)). 而高通量计算能够在材料数据库中快速筛选出具有高 κ 、宽带隙、良好界面稳定性的候选栅介电层, 机器学习则可以基于已有的计算与实验数据建立代理模型, 大幅降低筛选成本并加速新材料的发现^[61,62]. 例如, 程龙等人^[61] 基于C2DB数据库^[90], 利用高通量计算筛选出 $\text{SnNa}_2\text{H}_6\text{O}_6$ 、 $\text{GeLi}_2\text{H}_6\text{O}_6$ 、 $\text{HfNa}_2\text{H}_6\text{O}_6$ 、 $\text{ZrNa}_2\text{H}_6\text{O}_6$ 等11种面外介电常数大于5的二维材料(图6(b)), 可用作二维 MoS_2 或 WS_2 场效应晶体管的介电层. 杜世萱等人^[62] 也利用拓扑缩放算法和高通量计算, 从Materials Project数据库

中筛选并获得了252种二维vdW材料的带隙和介电常数, 其中9种因与 MoS_2 具有大于1 eV的能带偏移(图6(c)), 是极具前景的二维栅介电层. 此外, 具有较大带隙和较高介电常数的氟化物(如 BaF_2 、 CaF_2 、 LaF_3 、 CeF_3 、 MgF_2 、 SrF_2 和 EuF_3 等, 图6(d)) 也被证明是优于传统氧化物的介电层材料, 而且由于其表面钝化无悬挂键, 可以与二维半导体沟道形成理想的vdW接触^[88]. 其中, CaF_2 因其宽带隙及与特定半导体的良好兼容性而被广泛使用(图6(e))^[89,91].

2.3 2D FETs的界面设计

2D FETs的制备涉及不同材料的异质集成, 在器件中形成多种vdW接触界面, 并显著影响电子输运和器

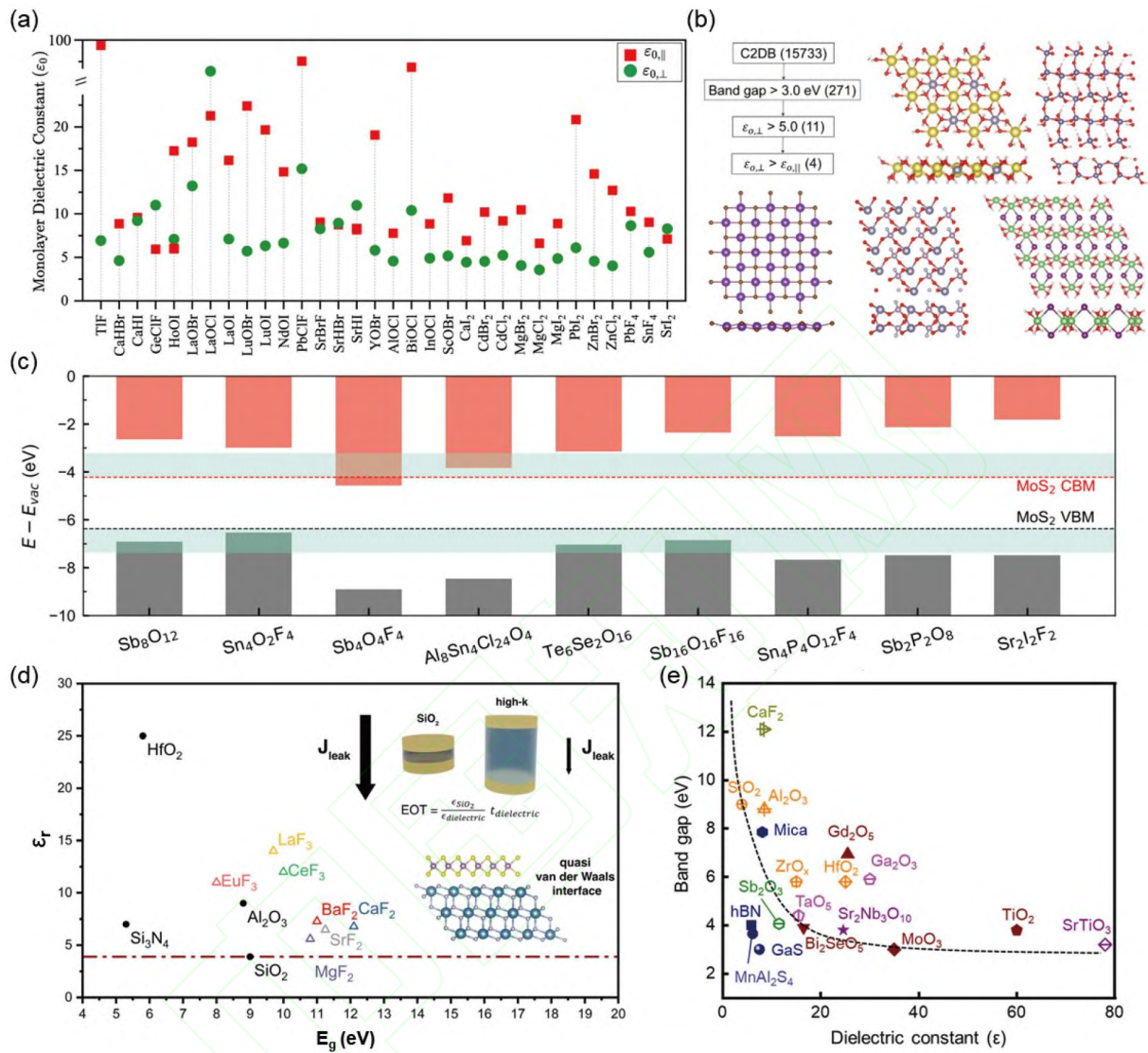


图 6 (网络版彩色)(a) 高通量筛选获得32种层状vdW介电材料的单层静态面内与面外介电常数^[87]; (b) 二维介电材料的高通量筛选流程以及具有高介电常数二维介电材料的晶格结构^[61]; (c) 9种宽带隙、高介电常数的介电材料与单层MoS₂的能带对齐^[62]; (d) 传统介电材料和氟化物介电材料的介电常数与带隙对应关系^[88]; (e) 基于介电常数和带隙的多种介电材料基准比较, 实心符号表示层状材料, 空心符号表示非层状材料^[89]
Figure 6 (Color online) (a) In-plane and out-of-plane static dielectric constants of 32 layered vdW dielectric monolayers obtained via high-throughput screening^[87]; (b) high-throughput screening workflow for 2D dielectric materials and the lattice structures of 2D dielectric materials with wide bandgaps and high dielectric constants^[61]; (c) band alignments of monolayer MoS₂ and 9 dielectric materials with wide bandgaps and high dielectric constants^[62]; (d) relationship between dielectric constant and bandgap for conventional and fluoride dielectric materials^[88]; (e) benchmark of various dielectric materials based on their dielectric constant and bandgap, where solid symbols represent layered materials, while open symbols indicate nonlayered materials^[89]

件整体性能(图4)^[66,92]。诺贝尔物理学奖得主Herbert Kroemer曾提出: 界面即是器件(the interface is the device), 高度强调了界面在半导体器件中的关键作用。2D FETs中的金属-半导体沟道接触界面决定了载流子注入效率与接触电阻, 常见构型包括顶端接触、边缘接触及埋入式接触(图4)。其中, 顶端接触结构的vdW间隙会引入隧穿势垒, 限制载流子注入效率并增大接触

电阻^[93]; 边缘接触可显著缩短接触长度并降低接触电阻^[94], 但由于二维半导体沟道边缘的化学复杂性及制程精度要求高, 其规模化实现仍具挑战^[95]; 埋入式接触兼具两者优势, 可在顶端、底部及边缘同时形成电接触, 从而有效降低接触电阻并提升可扩展性^[68], 但实验刻蚀凹陷时容易造成晶格损伤与界面粗糙, 引起器件性能可重复性差和制造良品率低等问题。栅介电层与

二维半导体沟道接触界面是2D FETs中的另一关键界面,其接触质量直接影响器件的栅控能力、漏电流以及亚阈值摆幅等性能^[83].该界面中空位、电荷杂质及局域应变等缺陷会增强散射、形成界面偶极并导致功率下降^[96].高 κ 单晶绝缘体(如 CaF_2 、 Al_2O_3 、 SrTiO_3 等)可与二维半导体沟道形成无悬挂键的vdW平滑界面,从而显著降低亚阈值摆幅并改善器件稳定性^[97,98].引入缓冲层(如 Sb_2O_3 、 Al_2O_3)也可实现栅介电层的均匀沉积并减少界面缺陷,从而提高栅控能力^[99,100].此外,利用原生氧化物(如 Bi_2SeO_5)作为 $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{Se}$ 沟道的栅介电层,也被证明可有效提升界面接触质量和器件性能^[101].

在金属-半导体沟道接触界面中,过高的接触电阻是制约2D FETs性能提升的核心瓶颈之一.理论研究表明,接触电阻的主要来源于金属与半导体间的费米能级钉扎效应(图7(a))、vdW间隙以及非理想肖特基势垒等多重因素的耦合作用^[102].理想2D FETs中金属-半导体沟道接触的终极目标是获得低接触电阻,并借助金属功函数的调控实现半导体沟道载流子类型的调制^[59,66].然而,常见的具有高功函数的三维金属与TMDs之间的晶格失配容易导致晶格无序和缺陷,形成具有强共价或离子相互作用的接触界面,致使金属诱导出间隙态(metal-induced gap states, MIGS)并形成严重的费米能级钉扎(图7(b,c))^[65,103,104].即使三维金属与二维半导体通过vdW接触获得原子级洁净界面、削弱费米能级钉扎,但极薄的vdW间隙在本征肖特基势垒之前仍会引发额外的隧穿势垒,降低金属的电荷注入效率,从而导致接触电阻再度升高^[65,105].值得注意的是,尽管第一性原理模拟能有效预测界面性质,但在定量描述器件性能时仍需综合考虑真实接触界面效应及传输的非理想性.例如,基于DFT+NEGF方法预测的栅长为1 nm的双栅单层 MoS_2 -MOSFET,其亚阈值摆幅(66 mV/dec)^[106]与实验结果(65 mV/dec)^[69]高度一致.然而,模拟得到的最大开态电流却比实验值高出数倍,其原因在于理论计算时采用了弹道输运和理想欧姆接触假设,而实际器件中金属电极引入的肖特基势垒和沟道中的载流子散射效应会在一定程度上抑制电流传输.

研究表明,三维半金属电极(如Bi、Sb、As)在费米能级处的态密度接近零,可有效抑制金属诱导的间隙态,实现优异的能级匹配,从而显著削弱费米能级钉扎效应并降低肖特基势垒和接触电阻(图7(c,d))^[107~109].

而且,三维半金属具有强自旋轨道耦合和明显的表面态,其面外p轨道可与TMDs形成较强的波函数交叠,有助于提高界面电子耦合强度,从而在一定程度上削弱由vdW间隙引入的额外隧穿势垒,使其接触性能接近量子极限^[107].除三维半金属外,数值模拟计算发现部分二维层状金属和半金属的功函数具有较大的可调范围,可抑制金属-半导体接触界面的费米钉扎效应并具有与传统三维半金属相同的作用,进一步激励了更多具有适合功函数的二维金属/半金属的探索.例如,理论计算表明,钇(Y)掺杂可诱导二维InSe发生由半导体到金属的相变,可使InSe-MOSFETs形成欧姆接触,接触电阻低至 $62 \Omega \mu\text{m}$ ^[100].舒海波等人^[110]利用DFT+NEGF的高通量计算方法从870种功能化的MBenes金属材料中筛选出了8种高稳定性铈/镨基金属相,其功函数覆盖2.58~6.51 eV(图7(e)),可与 MoS_2 、 WSe_2 等多种典型二维半导体形成n或p型欧姆接触,其接触电阻低至 $41.6 \Omega \mu\text{m}$,已逼近量子极限(图7(f,g)).功能化的MXenes电极的功函数介于1.83~5.74 eV(图7(h)),可与单层 MoS_2 可形成欧姆接触,其中 $\text{M}_2\text{X}(\text{OH})_2$ 与单层 MoS_2 的接触电阻低至 $100 \Omega \mu\text{m}$ ^[104].具有较高功函数的 NbS_2 、 TaS_2 、 TiSe_2 和 NbTe_2 等二维金属,也能与单层 MoS_2 形成欧姆接触并有效降低接触电阻^[104,111].此外,将半导体 2H-MoS_2 转化为接触区金属化 $1\text{T}'\text{-MoS}_2$ 也可将接触电阻降至 $240 \Omega \mu\text{m}$ ^[112].而且, $1\text{T}'$ 相的 MoTe_2 、 WTe_2 、 PtTe_2 和 VSe_2 的功函数范围为4.3~5.8 eV(图7(i)),高于三维半金属Bi(4.1 eV)和Sb(4.4 eV),因此更有希望与p型半导体沟道形成欧姆接触,从而降低接触电阻(图7(j,k))^[113,114].二维狄拉克半金属 ZrTe_2 与 MoS_2 的接触界面也表现出欧姆接触特性,而且态密度计算表明金属诱导的带隙态已被有效抑制^[115].

在2D FETs顶栅结构中,构建二维半导体沟道与栅介电层平滑的vdW接触界面,实现有效栅控但不损伤半导体沟道,是栅介电层和二维半导体沟道接触界面的目标.减小亚阈值摆幅是提升器件能效的关键,但是界面缺陷引入的寄生电容与栅电容耦合,将使亚阈值摆幅显著增大,从而增大功耗.若栅介电层存在空洞、裂纹等宏观缺陷,即使材料本征带隙足够宽,也会引起漏电流增加、关态电流和开关比降低等问题,导致器件整体功耗显著增加^[116].因此,2D FETs的高性能实现不仅依赖于栅介电层的本征性能(带隙与介电常数),还需保证界面与栅介电层的宏观完整性,两者须协同优化.

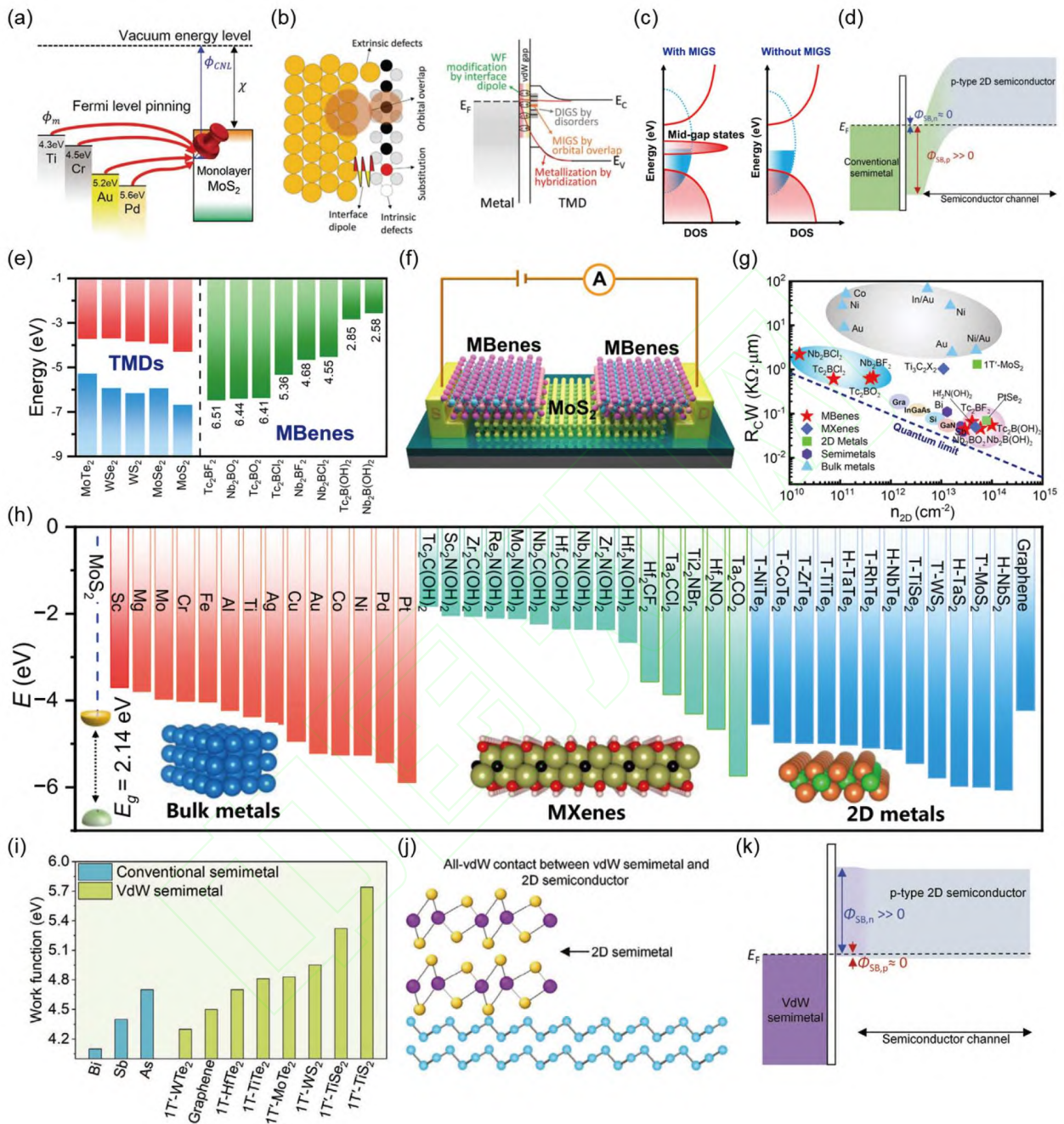


图 7 (网络版彩色)(a) 体相金属与单层MoS₂能带排列及费米能级钉扎示意图^[103]; (b) 体相金属与单层TMDs实际接触界面结构及能带排列示意图^[65]; (c) 存在和不存在金属诱导间隙态时金属-半导体异质结的态密度^[104]; (d) 传统半金属与二维半导体接触的能带示意图^[114]; (e) 5种单层TMDs与8种MBenes金属的能带排列^[110]; (f) 使用MBenes作为接触电极的MoS₂场效应晶体管示意图^[110]; (g) MoS₂场效应晶体管在不同类型接触电极下的接触电阻, 蓝色虚线表示量子极限^[110]; (h) 体相金属、功能化MXenes和二维金属电极的功函数^[104]; (i) 传统三维半金属与vdW半金属的功函数^[114]; (j) vdW半金属与二维半导体接触的晶体结构示意图^[114]; (k) vdW半金属与二维半导体接触的能带示意图^[114]

Figure 7 (Color online) (a) Schematic of the band alignment and Fermi level pinning between bulk metals and monolayer MoS₂^[103]; (b) schematic of the actual interfacial structure and band alignment between bulk metals and monolayer TMDs^[65]; (c) schematic of the density of states in the metal-semiconductor junctions with and without MIGS^[104]; (d) band structures of conventional semimetal-semiconductor contacts^[114]; (e) band alignment of 5 monolayer TMDs with 8 MBenes metals^[110]; (f) schematic of a MoS₂ FET using MBenes as contact electrodes, with the blue dashed line indicating the quantum limit^[110]; (g) contact resistance of MoS₂ transistors with different types of contact electrodes, with the blue dashed line indicating the quantum limit^[110]; (h) work function of bulk metals, MXenes, and 2D metals^[104]; (i) work functions of conventional 3D semimetals and vdW semimetals^[114]; (j) schematic of the crystal structure for vdW semimetal-2D semiconductor contact^[114]; (k) band structures of vdW semimetal-2D semiconductor contacts^[114]

3 机器学习辅助2D FETs设计

随着人工智能算法的快速发展,机器学习已成为原子尺度材料设计的重要推动力.其核心优势在于结合第一性原理计算与高通量筛选,依托材料数据库的大量数据以及智能预测模型的训练,实现新型材料和功能物质的高效筛选与性能预测,从而推动原子“智造”的发展.

在范德华介电材料筛选方面,杜世萱等人^[62]对522种范德华绝缘体的介电常数进行高通量DFT计算,结果表明模拟获得的介电常数与实验值偏差小于2,意味着DFT计算能够提供较高的计算精度,但成本高、效率低.相比之下,基于DFT计算数据构建的“两步式”XGBoost机器学习分类器可实现对宽带隙(≥ 2.5 eV)和高介电常数(≥ 5)栅介电层的高效筛选,准确率超过80%.通过主动学习,该模型还挖掘出49种新型高介电常数范德华绝缘体,进一步拓展了2D FETs栅介电层的探索空间(图8(a~c)).由此可见,DFT计算与机器学习模式的深度结合不仅能在保证计算精度的同时显著提升筛选效率,还可通过主动学习与DFT复核降低模型偏差,从而提高预测的可靠性.在工艺优化与器件建模方面,王泽恒等人^[117]将量子机器学习应用于氮化镓(GaN)高电子迁移率晶体管的欧姆接触建模,提出量子核对齐回归器,仅需5个量子比特即可运行,并在真实实验中实现了接触优化.周鹏等人^[118]利用机器学习评估并协同优化MoS₂顶栅FET制造工艺参数,显著提升了器件性能与晶圆级均匀性,并成功构建出由5900个晶体管组成的超大规模集成微处理器(图8(d~f)).在结构与性能优化方面,Byoung Don Kong等人^[119]结合深度神经网络与高通量计算优化了石墨烯FETs栅极结构,实现了在保持高迁移率的同时引入有效传输带隙,并将最大振荡频率提升至59.6 GHz(~20倍),为高性能射频FETs的设计提供了可扩展的数据驱动方法.刘卫国等人^[64]则结合对抗神经网络与变分主动学习算法,在有限数据条件下高效预测2D FETs的接触势垒与隧穿概率,为高性能电子器件的快速设计和优化提供了理论支持(图8(g)).

综上,机器学习已成为推动二维半导体器件从材料发现、器件设计到工艺优化全链条发展的重要工具,不仅显著提升了预测效率与准确性,也为“数据-模型-实验”闭环体系的建立提供了新的可能性.这一趋势不仅将推动原子尺度低维器件向智能化、精准化设计迈

进,也将为后摩尔时代新型集成电路的跨越式发展提供坚实的理论基础和技术支撑.

4 总结与展望

原子制造作为后摩尔时代材料与器件构筑的新范式,数值模拟在其发展中发挥了核心作用,尤其在2D FETs设计与优化过程中展现出独特的价值.本文围绕“材料筛选-界面设计-器件优化”这一主线,系统总结了数值模拟在推动原子制造从理论分析到器件设计全过程的关键作用与最新进展.首先,本文回顾了数值模拟方法的发展脉络,指出随着材料数据库与机器学习的快速发展,原子制造正逐步实现从材料发现、机理解析到器件优化的智能化发展,为低维材料的精准构筑和新一代智能材料体系的开发奠定基础.其次,本文结合2D FETs的核心需求,重点讨论了二维半导体沟道材料与栅介电层的筛选、接触界面的精准集成及其调控策略,展示了数值模拟在降低接触电阻、优化亚阈值摆幅和提升栅控能力等方面的独特价值.最后,本文强调了机器学习在器件设计与性能优化中的重要作用.如前文所述,数值模拟不仅能够在量子尺度揭示电子结构、预测性能与输运行为,还可通过高通量计算与机器学习方法的深度融合,实现从原子级结构预测到器件性能优化的闭环设计流程,有效弥合了理论与实验之间的鸿沟.然而,在结构预测的可验证性、性能调控的可控性以及复杂环境下建模的准确性等方面,数值模拟在迈向规模化原子制造的过程仍面临诸多挑战.例如,部分理论预测的新材料在实际条件下可能因热力学不稳定、缺陷生成或掺杂破坏晶格等因素而难以稳定存在.针对这些问题,未来需重点突破以下关键方向:

(1) 全量子效应与多体理论的引入.当前大多数模拟基于玻恩-奥本海默近似,忽视了原子核的量子性及其与电子的非绝热耦合,导致计算结果与实验观测存在偏差.未来研究亟需发展全量子模拟方法,并全面考虑原子核与电子自由度,以更准确地描述能量势垒、反应路径和界面电子行为.

(2) 跨物理场与多变量协同模拟.原子制造过程往往处于电场、光场、热场和应力等多种外场作用下,现有模拟仍局限于零温和理想晶格条件,难以捕捉真实环境中的演化规律.未来需发展跨物理场、多变量耦合的计算方法,构建“结构-物性-外场”多维数据库,以预测外场加载下的构筑路径与缺陷行为.

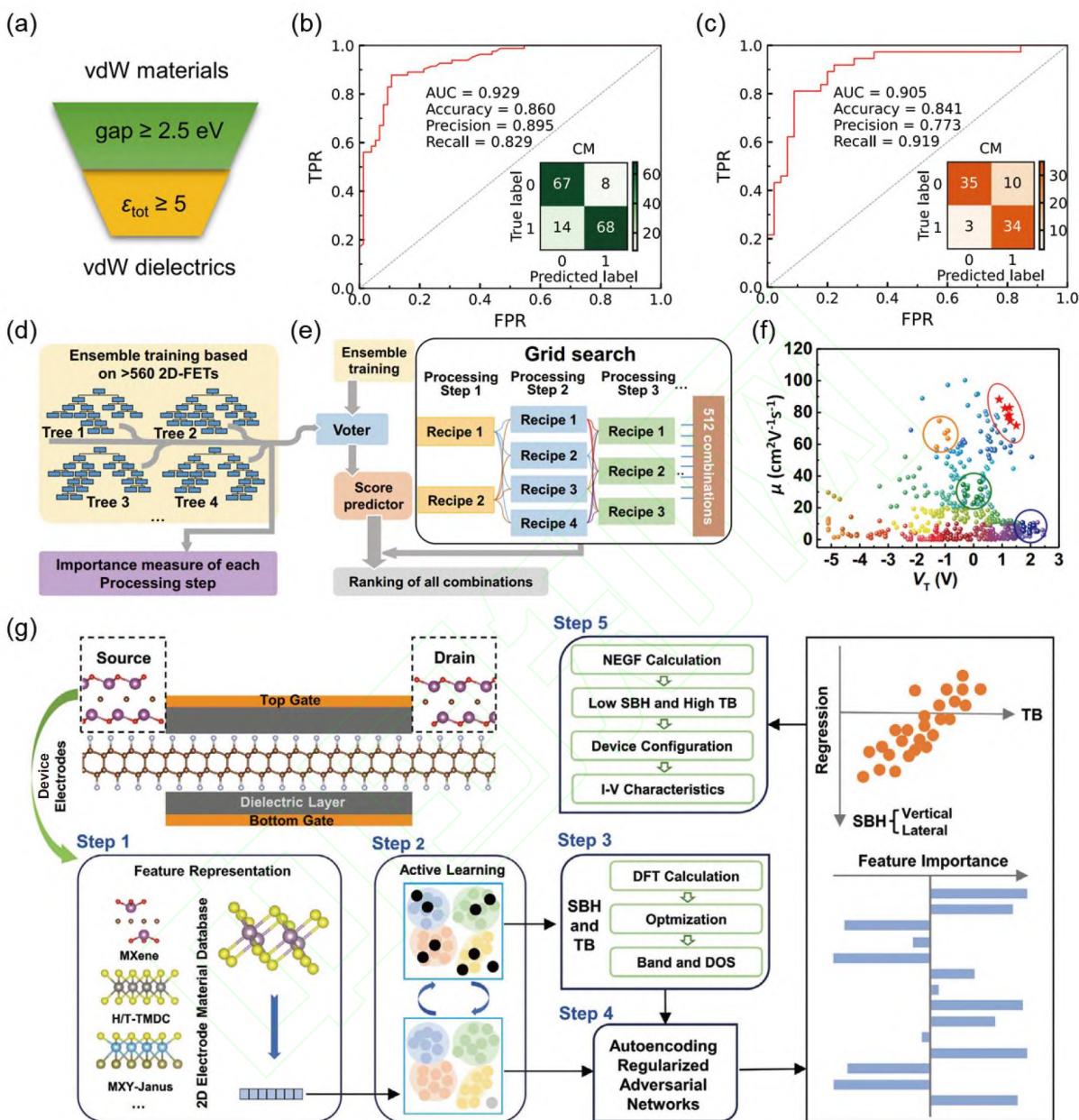


图 8 (网络版彩色)(a) 带隙 ≥ 2.5 eV和介电常数 ≥ 5 介电材料的筛选流程图^[62]; (b) 测试集上带隙分类器的受试者工作特征曲线(红色)^[62]; (c) 测试集上介电常数分类器的受试者工作特征曲线(红色)^[62]; (d) 机器学习辅助MoS₂器件工艺优化中基于决策树算法的集成学习示意图^[118]; (e) 基于机器学习的协同优化流程图^[118]; (f) 超过500个MoS₂顶栅FETs的载流子迁移率 μ 与阈值电压 V_T 的关系图, 每种颜色对应一种工艺配方^[118]; (g) 基于机器学习算法的二维电极材料高效筛选流程^[64]

Figure 8 (Color online) (a) Schematic workflow for screening materials with a band gap (≥ 2.5 eV) and dielectric constant (≥ 5)^[62]; (b) receiver operating characteristic (ROC) curve (red line) of the gap classifier on the test set^[62]; (c) ROC curve (red line) of the dielectric constant classifier on the test set^[62]; (d) schematic of ensemble learning (EL) based on the decision-tree algorithm for machine learning (ML)-assisted MoS₂ device process optimization^[118]; (e) diagram of co-optimization procedure based on ML^[118]; (f) more than 500 MoS₂ TG-FETs summarized in a μ - V_T plot, each color corresponds to one process recipe^[118]; (g) workflow for the efficient screening of 2D electrode materials using the ML algorithm^[64]

(3) 多尺度建模与亚稳态结构预测. 实验不断涌现的亚稳态原子级结构与人工晶格对模拟提出挑战, 现有建模在稳定性判据和新奇量子态识别上明显不足.

未来需发展覆盖“原子-结构-器件”尺度的多尺度建模框架, 尤其关注缺陷调控及外场调节下的亚稳态预测.

(4) 人工智能辅助的智能模拟与自主设计. 原子制

造跨越广泛的空间与时间尺度，但传统计算常面临精度与效率的矛盾。未来需构建具备自主学习能力的预测平台，实现从原子级材料筛选到器件结构设计的闭

环优化流程，从而推动原子制造由“被动模拟”向“主动设计”跃迁，实现2D FETs在性能与能效协同优化中的智能化演进。

参考文献

- 1 Fang F. Atomic and close-to-atomic scale manufacturing: perspectives and measures. *Int J Extrem Manuf*, 2020, 2: 030201
- 2 Dai Q, Song F, Pan C, et al. The fundamental physical science of atom manufacturing (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2024, 69: 2777–2788 [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: 2777–2788]
- 3 Eigler D M, Schweizer E K. Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope. *Nature*, 1990, 344: 524–526
- 4 Gu Q J, Liu N, Zhao W B, et al. Regular artificial nanometer-scale structures fabricated with scanning tunneling microscope. *Appl Phys Lett*, 1995, 66: 1747–1749
- 5 Chen I J, Aapro M, Kipnis A, et al. Precise atom manipulation through deep reinforcement learning. *Nat Commun*, 2022, 13: 7499
- 6 Liu L, Li T, Gong X, et al. Homoepitaxial growth of large-area rhombohedral-stacked MoS₂. *Nat Mater*, 2025, 24: 1195–1202
- 7 Li J, Yang X, Zhang Z, et al. Towards the scalable synthesis of two-dimensional heterostructures and superlattices beyond exfoliation and restacking. *Nat Mater*, 2024, 23: 1326–1338
- 8 Wyatt B C, Yang Y, Michałowski P P, et al. Order-to-disorder transition due to entropy in layered and 2D carbides. *Science*, 2025, 389: 1054–1058
- 9 Liu A, Zhang X, Liu Z, et al. The roadmap of 2D materials and devices toward chips. *Nano-Micro Lett*, 2024, 16: 119
- 10 Lyakhov A O, Oganov A R, Stokes H T, et al. New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX. *Comput Phys Commun*, 2013, 184: 1172–1182
- 11 Wang Y, Lv J, Zhu L, et al. CALYPSO: a method for crystal structure prediction. *Comput Phys Commun*, 2012, 183: 2063–2070
- 12 Wang J, Gao H, Han Y, et al. MAGUS: machine learning and graph theory assisted universal structure searcher. *Natl Sci Rev*, 2023, 10: nwad128
- 13 Merchant A, Batzner S, Schoenholz S S, et al. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*, 2023, 624: 80–85
- 14 Tang Z, Li H, Lin P, et al. A deep equivariant neural network approach for efficient hybrid density functional calculations. *Nat Commun*, 2024, 15: 8815
- 15 Li H, Wang Z, Zou N, et al. Deep-learning density functional theory Hamiltonian for efficient *ab initio* electronic-structure calculation. *Nat Comput Sci*, 2022, 2: 367–377
- 16 Zhao X G, Zhou K, Xing B, et al. JAMIP: an artificial-intelligence aided data-driven infrastructure for computational materials informatics. *Sci Bull*, 2021, 66: 1973–1985
- 17 Yamashita T, Kanehira S, Sato N, et al. CrySPY: a crystal structure prediction tool accelerated by machine learning. *Sci Tech Adv Mater-Methods*, 2021, 1: 87–97
- 18 Shen J X, Voss L F, Varley J B. Simulating charged defects at database scale. *J Appl Phys*, 2024, 135: 145102
- 19 Lou F, Li X Y, Ji J Y, et al. PASP: property analysis and simulation package for materials. *J Chem Phys*, 2021, 154: 114103
- 20 Zhang Y, Wang B, Guo Y, et al. A universal framework for metropolis Monte Carlo simulation of magnetic Curie temperature. *Comput Mater Sci*, 2021, 197: 110638
- 21 Wan G, Li Y, Lai T, et al. Sym4state.jl: an efficient computation package for magnetic materials. *Comput Phys Commun*, 2024, 303: 109283
- 22 Vansteenkiste A, Leliaert J, Dvornik M, et al. The design and verification of MuMax3. *AIP Adv*, 2014, 4: 107133
- 23 Donahue M J, Porter D G. OOMMF User's Guide: Version 1.0. Interagency Report NISTIR, 1999. 6376
- 24 Wu Q S, Zhang S N, Song H F, et al. WannierTools: an open-source software package for novel topological materials. *Comput Phys Commun*, 2018, 224: 405–416
- 25 Mostofi A A, Yates J R, Lee Y S, et al. wannier90: a tool for obtaining maximally-localised Wannier functions. *Comput Phys Commun*, 2008, 178: 685–699
- 26 Gresch D, Autès G, Yazyev O V, et al. Z2Pack: numerical implementation of hybrid Wannier centers for identifying topological materials. *Phys Rev B*, 2017, 95: 075146
- 27 Miao W, Li C, Han X, et al. Truncated atomic plane wave method for subband structure calculations of moiré systems. *Phys Rev B*, 2023, 107: 125112
- 28 Naik S, Naik M H, Maity I, et al. Twister: construction and structural relaxation of commensurate moiré superlattices. *Comput Phys Commun*, 2022, 271: 108184

- 29 Papior N, Lorente N, Frederiksen T, et al. Improvements on non-equilibrium and transport Green function techniques: the next-generation transiesta. *Comput Phys Commun*, 2017, 212: 8–24
- 30 Taylor J, Guo H, Wang J. *Ab initio* modeling of quantum transport properties of molecular electronic devices. *Phys Rev B*, 2001, 63: 245407
- 31 Smidstrup S, Markussen T, Vanraeyveld P, et al. QuantumATK: an integrated platform of electronic and atomic-scale modelling tools. *J Phys-Condens Matter*, 2020, 32: 015901
- 32 Noffsinger J, Giustino F, Malone B D, et al. EPW: a program for calculating the electron–phonon coupling using maximally localized Wannier functions. *Comput Phys Commun*, 2010, 181: 2140–2148
- 33 Li W, Carrete J, A. Katcho N, et al. ShengBTE: a solver of the Boltzmann transport equation for phonons. *Comput Phys Commun*, 2014, 185: 1747–1758
- 34 Raya-Moreno M, Cartoixà X, Carrete J. BTE-Barna: an extension of almaBTE for thermal simulation of devices based on 2D materials. *Comput Phys Commun*, 2022, 281: 108504
- 35 Togo A, Chaput L, Tadano T, et al. Implementation strategies in phonopy and phono3py. *J Phys-Condens Matter*, 2023, 35: 353001
- 36 Cui L, Wei G, Li Z, et al. Thermal transport in graphene nanomesh: unraveling the role of Brillouin zone folding, phonon localization and phonon confinement. *Int J Heat Mass Transfer*, 2021, 165: 120685
- 37 Quhe R, Xu L, Liu S, et al. Sub-10 nm two-dimensional transistors: theory and experiment. *Phys Rep*, 2021, 938: 1–72
- 38 Matic M, Poljak M. QUDEN: a Matlab package for first-principles quantum-transport engineering of 2D material-based nanodevices. *Int J Numer Model*, 2025, 38: e70079
- 39 Spotte-Smith E W C, Cohen O A, Blau S M, et al. A database of molecular properties integrated in the Materials Project. *Digital Discov*, 2023, 2: 1862–1882
- 40 Kirklin S, Saal J E, Meredig B, et al. The Open Quantum Materials Database (OQMD): assessing the accuracy of DFT formation energies. *npj Comput Mater*, 2015, 1: 15010
- 41 Curtarolo S, Setyawan W, Hart G L W, et al. AFLOW: an automatic framework for high-throughput materials discovery. *Comput Mater Sci*, 2012, 58: 218–226
- 42 Choudhary K, Garrity K F, Reid A C E, et al. The joint automated repository for various integrated simulations (JARVIS) for data-driven materials design. *npj Comput Mater*, 2020, 6: 173
- 43 Haastrup S, Strange M, Pandey M, et al. The Computational 2D Materials Database: high-throughput modeling and discovery of atomically thin crystals. *2D Mater*, 2018, 5: 042002
- 44 Zhou J, Shen L, Costa M D, et al. 2DMatPedia, an open computational database of two-dimensional materials from top-down and bottom-up approaches. *Sci Data*, 2019, 6: 86
- 45 Qu H, Zhang S, Cao J, et al. Identifying atomically thin isolated-band channels for intrinsic steep-slope transistors by high-throughput study. *Sci Bull*, 2024, 69: 1427–1436
- 46 Deng J, Pan J, Du S. Databases of 2D material-substrate interfaces and 2D charged building blocks. *Chin Phys B*, 2024, 33: 026101
- 47 Zhang X L, Pan J, Jin X, et al. Database construction for two-dimensional material-substrate interfaces. *Chin Phys Lett*, 2021, 38: 066801
- 48 Deng J, Pan J, Zhang Y F, et al. Database construction of two-dimensional charged building blocks for functional-oriented material design. *Nano Lett*, 2023, 23: 4634–4641
- 49 Zhang T, Jiang Y, Song Z, et al. Catalogue of topological electronic materials. *Nature*, 2019, 566: 475–479
- 50 Tang F, Po H C, Vishwanath A, et al. Comprehensive search for topological materials using symmetry indicators. *Nature*, 2019, 566: 486–489
- 51 Vergniory M G, Elcoro L, Felser C, et al. A complete catalogue of high-quality topological materials. *Nature*, 2019, 566: 480–485
- 52 Gallego S V, Perez-Mato J M, Elcoro L, et al. *MAGNDATA*: towards a database of magnetic structures. I. The commensurate case. *J Appl Crystallogr*, 2016, 49: 1750–1776
- 53 Gallego S V, Perez-Mato J M, Elcoro L, et al. *MAGNDATA*: towards a database of magnetic structures. II. The incommensurate case. *J Appl Crystallogr*, 2016, 49: 1941–1956
- 54 Aroyo M I, Perez-Mato J M, Orobengoa D, et al. Crystallography online: Bilbao Crystallographic Server. *Bulg Chem Commun*, 2011, 43: 183–197
- 55 Aroyo M I, Perez-Mato J M, Capillas C, et al. Bilbao Crystallographic Server: I. databases and crystallographic computing programs. *Z für Kristallographie-Crystalline Mater*, 2006, 221: 15–27
- 56 Aroyo M I, Kirov A, Capillas C, et al. Bilbao Crystallographic Server. II. Representations of crystallographic point groups and space groups. *Acta Crystallogr Found Crystallogr*, 2006, 62: 115–128
- 57 Belsky A, Hellenbrandt M, Karen V L, et al. New developments in the Inorganic Crystal Structure Database (ICSD): accessibility in support of materials research and design. *Acta Crystallogr B Struct Sci*, 2002, 58: 364–369
- 58 Gražulis S, Chateigner D, Downs R T, et al. Crystallography Open Database – an open-access collection of crystal structures. *J Appl Crystallogr*,

- 2009, 42: 726–729
- 59 Zeng S, Liu C, Zhou P. Transistor engineering based on 2D materials in the post-silicon era. *Nat Rev Electr Eng*, 2024, 1: 335–348
- 60 Wang S, Liu X, Zhou P. The road for 2D semiconductors in the silicon age. *Adv Mater*, 2022, 34: 2106886
- 61 Du G, Li C, Shan L, et al. High-throughput predictions of two-dimensional dielectrics with first-principles calculations. *Phys Rev B*, 2023, 108: 235409
- 62 Li Y, Wan G, Zhu Y, et al. High-throughput screening and machine learning classification of van der Waals dielectrics for 2D nanoelectronics. *Nat Commun*, 2024, 15: 9527
- 63 Ha V A, Giustino F. High-throughput screening of 2D materials identifies p-type monolayer WS₂ as potential ultra-high mobility semiconductor. *npj Comput Mater*, 2024, 10: 229
- 64 Li P, Dong L, Li C, et al. Machine learning to promote efficient screening of low-contact electrode for 2D semiconductor transistor under limited data. *Adv Mater*, 2024, 36: e2312887
- 65 Liu X, Choi M S, Hwang E, et al. Fermi level pinning dependent 2D semiconductor devices: challenges and prospects. *Adv Mater*, 2022, 34: e2108425
- 66 Liu C, Wu S, Zhang Y, et al. Interfaces in two-dimensional transistors: key to pushing performance and integration. *Mater Sci Eng-R-Rep*, 2025, 162: 100883
- 67 Liu Y, Duan X, Shin H J, et al. Promises and prospects of two-dimensional transistors. *Nature*, 2021, 591: 43–53
- 68 Kim K S, Kwon J, Ryu H, et al. The future of two-dimensional semiconductors beyond Moore's law. *Nat Nanotechnol*, 2024, 19: 895–906
- 69 Desai S B, Madhupathy S R, Sachid A B, et al. MoS₂ transistors with 1-nanometer gate lengths. *Science*, 2016, 354: 99–102
- 70 Liu H, Neal A T, Ye P D. Channel length scaling of MoS₂ MOSFETs. *ACS Nano*, 2012, 6: 8563–8569
- 71 Yu H, Liao M, Zhao W, et al. Wafer-scale growth and transfer of highly-oriented monolayer MoS₂ continuous films. *ACS Nano*, 2017, 11: 12001–12007
- 72 Shim J, Bae S H, Kong W, et al. Controlled crack propagation for atomic precision handling of wafer-scale two-dimensional materials. *Science*, 2018, 362: 665–670
- 73 Kaasbjerg K, Thygesen K S, Jacobsen K W. Phonon-limited mobility in *n*-type single-layer MoS₂ from first principles. *Phys Rev B*, 2012, 85: 115317
- 74 Chen P, Pan J, Gao W, et al. Anisotropic carrier mobility from 2H WSe₂. *Adv Mater*, 2022, 34: e2108615
- 75 Wang Y, Kim J C, Li Y, et al. P-type electrical contacts for 2D transition-metal dichalcogenides. *Nature*, 2022, 610: 61–66
- 76 Zhou X, Liang Y, Fu H, et al. Step-climbing epitaxy of layered materials with giant out-of-plane lattice mismatch. *Adv Mater*, 2022, 34: e2202754
- 77 Quhe R, Liu J, Wu J, et al. High-performance sub-10 nm monolayer Bi₂O₂Se transistors. *Nanoscale*, 2019, 11: 532–540
- 78 Zhang C, Wang R, Mishra H, et al. Two-dimensional semiconductors with high intrinsic carrier mobility at room temperature. *Phys Rev Lett*, 2023, 130: 087001
- 79 Nipane A, Karmakar D, Kaushik N, et al. Few-layer MoS₂ *p*-type devices enabled by selective doping using low energy phosphorus implantation. *ACS Nano*, 2016, 10: 2128–2137
- 80 Baugher B W H, Churchill H O H, Yang Y, et al. Optoelectronic devices based on electrically tunable p–n diodes in a monolayer dichalcogenide. *Nat Nanotech*, 2014, 9: 262–267
- 81 Xiong Y, Xu D, Feng Y, et al. P-type 2D semiconductors for future electronics. *Adv Mater*, 2023, 35: e2206939
- 82 Campi D, Mounet N, Gibertini M, et al. Expansion of the materials Cloud 2D database. *ACS Nano*, 2023, 17: 11268–11278
- 83 Wang Y, Sarkar S, Yan H, et al. Critical challenges in the development of electronics based on two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nat Electron*, 2024, 7: 638–645
- 84 Wang B, Huang W, Chi L, et al. High-*k* gate dielectrics for emerging flexible and stretchable electronics. *Chem Rev*, 2018, 118: 5690–5754
- 85 Yang S, Liu K, Xu Y, et al. Gate dielectrics integration for 2D electronics: challenges, advances, and outlook. *Adv Mater*, 2023, 35: e2207901
- 86 Yang M, Chai J W, Callsen M, et al. Interfacial interaction between HfO₂ and MoS₂: from thin films to monolayer. *J Phys Chem C*, 2016, 120: 9804–9810
- 87 Osanloo M R, Van de Put M L, Saadat A, et al. Identification of two-dimensional layered dielectrics from first principles. *Nat Commun*, 2021, 12: 5051
- 88 Dadashnia B, Rasouli S, Weber W M, et al. Thin fluoride insulators for improved 2D transistors: from deposition methods to recent applications. *Physica Rapid Res Ltrs*, 2025, 2500200
- 89 Jung M, Kim J, Lee G. Advances in gate dielectrics for 2D electronics. *Physica Rapid Res Ltrs*, 2025, 2500133
- 90 Sødequist J, Olsen T. Magnetic order in the computational 2D materials database (C2DB) from high throughput spin spiral calculations. *npj Comput Mater*, 2024, 10: 170
- 91 Wang S, Liu X, Xu M, et al. Two-dimensional devices and integration towards the silicon lines. *Nat Mater*, 2022, 21: 1225–1239

- 92 Schulman D S, Arnold A J, Das S. Contact engineering for 2D materials and devices. *Chem Soc Rev*, 2018, 47: 3037–3058
- 93 Tung R T. The physics and chemistry of the Schottky barrier height. *Appl Phys Rev*, 2014, 1: 011304
- 94 Wang L, Meric I, Huang P Y, et al. One-dimensional electrical contact to a two-dimensional material. *Science*, 2013, 342: 614–617
- 95 Yeh C-H, Cao W, Pal A, et al. Area-selective-cvd technology enabled top-gated and scalable 2D-heterojunction transistors with dynamically tunable Schottky barrier. In: IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), 2019. 23–24
- 96 Raja A, Waldecker L, Zipfel J, et al. Dielectric disorder in two-dimensional materials. *Nat Nanotechnol*, 2019, 14: 832–837
- 97 Liu K, Jin B, Han W, et al. A wafer-scale van der Waals dielectric made from an inorganic molecular crystal film. *Nat Electron*, 2021, 4: 906–913
- 98 Huang J K, Wan Y, Shi J, et al. High- κ perovskite membranes as insulators for two-dimensional transistors. *Nature*, 2022, 605: 262–267
- 99 Xu Y, Liu T, Liu K, et al. Scalable integration of hybrid high- κ dielectric materials on two-dimensional semiconductors. *Nat Mater*, 2023, 22: 1078–1084
- 100 Jiang J, Xu L, Qiu C, et al. Ballistic two-dimensional InSe transistors. *Nature*, 2023, 616: 470–475
- 101 Li T, Tu T, Sun Y, et al. A native oxide high- κ gate dielectric for two-dimensional electronics. *Nat Electron*, 2020, 3: 473–478
- 102 Kang J, Liu W, Sarkar D, et al. Computational study of metal contacts to monolayer transition-metal dichalcogenide semiconductors. *Phys Rev X*, 2014, 4: 031005
- 103 Kim C, Moon I, Lee D, et al. Fermi level pinning at electrical metal contacts of monolayer molybdenum dichalcogenides. *ACS Nano*, 2017, 11: 1588–1596
- 104 Gong M, Xie D, Tian Y, et al. Unraveling the role of interfacial interactions in electrical contacts of atomically thin transition-metal dichalcogenides. *ACS Nano*, 2025, 19: 4718–4730
- 105 Chen R S, Ding G, Zhou Y, et al. Fermi-level depinning of 2D transition metal dichalcogenide transistors. *J Mater Chem C*, 2021, 9: 11407–11427
- 106 Quhe R, Li Q, Zhang Q, et al. Simulations of quantum transport in sub-5-nm monolayer phosphorene transistors. *Phys Rev Appl*, 2018, 10: 024022
- 107 Shen P C, Su C, Lin Y, et al. Ultralow contact resistance between semimetal and monolayer semiconductors. *Nature*, 2021, 593: 211–217
- 108 Chou A S, Wu T, Cheng C C, et al. Antimony semimetal contact with enhanced thermal stability for high performance 2D electronics. In: IEEE Int Electron Devices Meeting, 2021. 7.2.1–7.2.4
- 109 Li W, Gong X, Yu Z, et al. Approaching the quantum limit in two-dimensional semiconductor contacts. *Nature*, 2023, 613: 274–279
- 110 Li M, Cao D, Xie D, et al. Computational discovery of metallic MBenes for two-dimensional semiconductor contacts approaching the quantum limit. *npj Comput Mater*, 2025, 11: 139
- 111 Yang N, Lin Y C, Chuu C P, et al. *Ab initio* computational screening and performance assessment of van der Waals and semimetallic contacts to monolayer WSe₂ P-type field-effect transistors. *IEEE Trans Electron Devices*, 2023, 70: 2090–2097
- 112 Kappera R, Voiry D, Yalcin S E, et al. Phase-engineered low-resistance contacts for ultrathin MoS₂ transistors. *Nat Mater*, 2014, 13: 1128–1134
- 113 Li H, Li Q, Li Y, et al. Recent experimental breakthroughs on 2D transistors: approaching the theoretical limit. *Adv Funct Mater*, 2024, 34: 2402474
- 114 Zhang X, Yu H, Tang W, et al. All-van-der-Waals barrier-free contacts for high-mobility transistors. *Adv Mater*, 2022, 34: e2109521
- 115 Wen X, Lei W, Li X, et al. ZrTe₂ compound Dirac semimetal contacts for high-performance MoS₂ transistors. *Nano Lett*, 2023, 23: 8419–8425
- 116 Illarionov Y Y, Knobloch T, Jech M, et al. Insulators for 2D nanoelectronics: the gap to bridge. *Nat Commun*, 2020, 11: 3385
- 117 Wang Z, Wang F, Li L, et al. Quantum kernel learning for small dataset modeling in semiconductor fabrication: application to ohmic contact. *Adv Sci*, 2025, 12: e06213
- 118 Chen X, Xie Y, Sheng Y, et al. Wafer-scale functional circuits based on two dimensional semiconductors with fabrication optimized by machine learning. *Nat Commun*, 2021, 12: 5953
- 119 Seo G M, Baek C K, Kong B D. Enhancing radio frequency performance of graphene field-effect transistors through machine-learning-based physical prediction and optimization. *ACS Appl Electron Mater*, 2024, 6: 4138–4148

Summary for “数值模拟驱动的原于制造在二维场效应晶体管中的应用”

Application of numerical simulation-driven atomic manufacturing in two-dimensional field-effect transistors

Hao Guo^{1,2}, Jinbo Pan^{1,3*} & Shixuan Du^{1,3,4*}

¹ Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

² School of Urban Construction, Hebei Normal University of Science & Technology, Qinhuangdao 066004, China

³ School of Physical Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

⁴ Songshan Lake Materials Laboratory, Dongguan 523808, China

* Corresponding authors, E-mail: jbpan@iphy.ac.cn; sxdu@iphy.ac.cn

Atomic manufacturing, as a frontier area of advanced materials research, aims to achieve precise manipulation of atoms, atomic clusters, and atomic layers to realize structural design, property regulation, and functional integration. Such a bottom-up strategy provides a feasible route for designing novel materials and devices, enabling ultimate applications in optoelectronics, data storage, and sensing. Although experimental techniques have achieved atomic-level control to some extent, large-scale fabrication and performance optimization of two-dimensional (2D) materials and their heterostructures still face significant challenges due to environmental complexity and limitations in fabrication precision. Against this backdrop, numerical simulation has emerged as a crucial tool for advancing atomic manufacturing. Based on quantum mechanics, simulation methods not only enable precise analysis of electronic structures, interfacial behaviors, and multiphysical coupling mechanisms at the atomic scale but also reveal the principles of atomic assembly, entropy evolution, and structural stability, providing theoretical guidance for experimental design and reducing trial-and-error costs. With the rapid progress of computing power and algorithms, the role of simulation has expanded from mechanism exploration to structure prediction, materials screening, interface optimization, and device performance evaluation. Combining density functional theory (DFT), molecular dynamics (MD), and Monte Carlo (MC) simulations allows researchers to bridge scales from atomic precision to macroscopic response, forming a closed-loop system that links theoretical analysis, simulation prediction, and experimental verification. In parallel, the establishment of high-throughput materials databases and the integration of artificial intelligence have greatly accelerated data-driven material discovery and device optimization. Comprehensive databases such as Materials Project, AFLOW, and JARVIS, as well as specialized ones like C2DB, provide extensive datasets on formation energies, band structures, and dielectric responses, enabling efficient screening of 2D channel materials, van der Waals (vdW) gate dielectrics, and metal contacts. Moreover, emerging machine learning algorithms and graph neural network models, exemplified by GNoME and DeepH, are fostering the transition from computational manufacturing to intelligent manufacturing, empowering the autonomous prediction and optimization of atomic configurations and device architectures. Two-dimensional field-effect transistors (2D FETs), as the core components of next-generation high-performance, low-power electronic devices, are key scientific research platforms for the application of simulation-driven atomic manufacturing. This review systematically summarizes recent advances in numerical simulation for the atomic manufacturing of 2D FETs, focusing on the development and integration of simulation methods, database construction, channel and dielectric screening strategies, and contact engineering. It highlights how transport simulations based on non-equilibrium Green's function (NEGF) methods can predict charge injection, contact resistance, and switching behavior with near-experimental accuracy. Finally, the review discusses emerging opportunities for high-throughput computation and AI-assisted design in realizing autonomous atomic manufacturing, outlining future directions toward intelligent, multiscale, and sustainable design of 2D electronic devices.

atomic manufacturing, numerical simulation, 2D field-effect transistors, materials screening, interface design, high-throughput computation and machine learning

doi: [10.1360/CSB-2025-5600](https://doi.org/10.1360/CSB-2025-5600)