

拓撲導向物質生成系統：多尺度幾何約束、 自組裝與時間編程的製造架構

v2.0 / 2026-07-29 / Neo.K（許釜崙） / 概念技術論文／研究議程

證據狀態：架構提案；尚未形成整合原型，文中性能數字均為驗收門檻或示例條件，不代表已完成實驗成果

<https://thisoneisneok.com/html/papers/ccp-04.html>

Topology-Guided Material Synthesis System: A Manufacturing Architecture for Multiscale Geometric Constraints, Self-Assembly, and Time-Programmed Processes

作者：Neo.K（許釜崙）

機構：一言諾科技有限公司（EveMissLab）

版本：v2.0 公開修訂版

日期：2026 年 7 月 29 日

文件性質：概念技術論文／研究議程

前版：《拓撲約束物質生成系統：超越光刻極限的四維製程革命》（v1.0）

證據狀態：架構提案；尚未形成整合原型，文中性能數字均為驗收門檻或示例條件，不代表已完成實驗成果

開源聲明：本文公開系統架構、數學模型與驗證方法；特定材料配方、製程窗口與設備實作可另依專利、商業機密或合作協議管理

SECTION

摘要

本文提出拓撲導向物質生成系統（Topology-Guided Material Synthesis System, TGMSS），一個將幾何模板、定向自組裝、材料沉積、時間程序、逆向設計與閉環量測整合為單一製程圖的研究架構。其核心命題不是「用幾何取消物理極限」，也不是「讓原子在虛空中自動坍縮成任意器件」，而是：藉由可設計的邊界條件、界面化學、局部場、材料供應與時間順序，縮小物質演化的可達狀態集合，使目標結構在統計上更容易形成。

TGMSS 將「拓撲」與「幾何」嚴格區分。拓撲描述連通分量、孔洞、空腔與網路關係；幾何描述尺寸、曲率、間距、表面粗糙度與局部形狀。兩者共同構成製程約束，但不能互相取代。系統以多尺度狀態場、製程圖與不確定性模型表達材料演化，並將模板製造、定向自組裝、原子層沉積、化學氣相沉積、電化學沉積、退火、選擇性移除與量測校正視為可組合的操作模組。

本文提出六層架構：目標與證據層、結構表示層、物理—化學演化層、製程操作層、逆向設計與主動學習層、閉環量測與追溯層。本文同時重新界定「四維製程」：第四維不是額外空間，而是可控的時間程序，即材料與邊界條件隨時間改變的製程軌跡。Casimir、van der Waals、毛細、靜電與臨界漲落力被納入「表面與漲落誘導力模組」，但僅在其尺度、材料與環境條件可量測時使用，不被假定為通用的原子搬運機制。

為避免概念論文將目標值誤寫成成果，本文建立 E0–E5 證據分級、可製造性約束、不確定性證書與 V0–V6 驗證流程。建議的最小原型不是直接製造 3 nm 電晶體，而是以可量測的三維奈米光子或感測結構為目標，採用「可移除支架＋保形沉積＋選擇性去模板」路線，驗證拓撲保持、尺寸收縮、缺陷率與功能響應。AOCLS 在此架構中是潛在的三維模板寫入與光化學控制模組，而非整套系統成立的唯一前提。

關鍵詞：拓撲導向製造、定向自組裝、模板輔助製造、原子層沉積、逆向設計、主動學習、四維製程、多尺度製造、Casimir–van der Waals 力、AOCLS

SECTION

一、研究問題：從「直接雕刻」轉向「可達狀態塑形」

1.1 先進製造並不存在單一的「物理硬牆」

先進微納製造受到多種不同約束：成像解析度、隨機缺陷、線邊粗糙度、材料擴散、量子穿隧、界面陷阱、沉積保形性、熱預算、機械穩定性、量測能力與成本。這些約束的作用尺度與因果機制不同，不能被壓縮成一個固定的奈米數值。

以 EUV 為例，投影系統的特徵尺寸通常以類似下式的工程關係描述：

$$CD \approx k_1(\lambda)/(NA),$$

其中 CD 為可印製臨界尺寸， λ 為波長，NA 為數值孔徑， k_1 則吸收照明、光罩、光阻、計算光刻與製程控制等因素。High-NA EUV 已將 NA 提高至 0.55，設備標稱解析度達到約 8 nm；但最終可量產的結構仍取決於曝光、光阻隨機性、疊對、蝕刻與良率，而非只由衍射公式決定。[1]

因此，本文不採用「EUV 卡死於 12 nm」或「進入三維後衍射極限消失」的敘述。三維製造的真正價值是增加結構自由度、縮短某些互連、建立體積功能與異質界面；它不會自動取消每個局部製程步驟的解析度、粗糙度與缺陷限制。

1.2 生成不是無中生有，而是縮小可達狀態集合

令材料系統的狀態為：

$$z(x,t) = \text{bigl}(m, \rho, \phi, T, u, \sigma, c, q, \text{bigr}),$$

其中：

- m ：材料相與成分；
- ρ ：密度或孔隙率；
- ϕ ：電、光、化學或其他有效勢；
- T ：溫度；
- u ：位移或流場；
- σ ：應力；
- c ：反應物、溶劑或缺陷濃度；
- q ：離散製程狀態。

材料在製程控制 $u_p(t)$ 、邊界條件 $cal-B(t)$ 與擾動 $\xi(t)$ 下演化：

$$(\partial z)/(\partial t) = \text{cal-F}(\text{bigl}(z, u_p, cal-B, \xi, \text{bigr}).$$

對一組製程參數 θ ，系統所能到達的終態不是唯一點，而是機率分布：

`pbigl(z_fmidθbigr).`

TGMSS 的任務不是保證每個原子落在指定座標，而是設計 θ ，使目標結構集合 $\text{cal-}Y_*$ 的形成機率提高：

$$\theta^{(*)} = \operatorname{argmax}_{\theta} \Pr[z_f \in \text{cal-}Y_* \mid \theta],$$

同時滿足成本、安全、材料與設備約束。

1.3 「約束即生成」的工程化表述

本文保留前版「約束即生成」的直覺，但將其改寫為可驗證命題：

當模板、界面能、反應選擇性、局部場與時間程序共同降低非目標構型的可達性時，物質演化可被導向一組較小的終態分布。

這個命題並不保證任意結構皆可生成。可達性受到以下因素限制：

- 熱力學穩定態與亞穩態；
- 動力學障礙與反應時間；
- 物質輸運與前驅物可及性；
- 模板缺陷與尺度收縮；
- 表面能、黏附與毛細崩塌；
- 量測與控制頻寬；
- 去模板時的結構保持能力。

所以，TGMSS 首先是一個可達性分析與製程編排系統，其次才是製造設備概念。

二、術語校正：拓撲、幾何與四維製程

2.1 拓撲不能取代幾何

令製造結構所佔區域為 $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ 。其拓撲可由 Betti 數描述：

$$\begin{aligned} \beta(\Omega) \\ = \\ \text{bigl}(\beta_0, \beta_1, \beta_2 \text{bigr)}, \end{aligned}$$

其中：

- β_0 ：連通分量數；
- β_1 ：獨立環路或貫穿孔洞數；
- β_2 ：封閉空腔數。

Euler 示性數為：

$$\begin{aligned} \chi \\ = \\ \beta_0 - \beta_1 + \beta_2. \end{aligned}$$

這些指標能辨識「斷線」「短路」「孔洞消失」「封閉空腔形成」等結構事件，但無法描述線寬、孔徑、曲率、間距與表面粗糙度。幾何特徵需另以：

$$\begin{aligned} g(\Omega) \\ = \\ \text{bigl}(\\ \text{CD, AR, } \kappa, R_q, d_{\min}, V, A_s, \dots \\ \text{bigr)} \end{aligned}$$

表示，其中 AR 為深寬比， κ 為曲率， R_q 為均方根粗糙度。

因此，合格判定必須同時包含：

合格
=
拓撲正確
 $\wedge$
幾何容差內
 $\wedge$
材料與功能合格.

2.2 四維製程的嚴格定義

本文所稱「四維製程」不表示在額外空間維度中加工，而是將時間程序納入設計變數。令製程軌跡為：

Π
=
{
u_p(t),
cal-B(t),
cal-M(t)
}_ (t \in [0, t_f]),

其中 cal-M(t) 表示材料供應或反應環境。兩個具有相同終態材料與幾何的製程，若溫度、沉積、清洗或退火順序不同，可能產生完全不同的晶相、殘餘應力與缺陷分布。

因此：

4D 製程
=
3D 結構設計
+
時間依賴的製程軌跡設計.

2.3 拓撲約束的三個層級

TGMSS 將約束分為三類：

層級 A：硬拓撲約束

例如必須保持導電網路連通、不得形成封閉氣泡、孔道必須貫通。

層級 B：軟幾何約束

例如線寬、孔徑、曲率與間距允許在容差內變動。

層級 C：統計功能約束

例如光學頻帶、催化活性、感測靈敏度或熱導率需以一定信賴度達標。

這種分層可避免把所有目標都錯誤地稱為「拓撲不變量」。

SECTION

三、可用的物質導向機制

3.1 模板與支架：約束的主要載體

TGMSS 不將氣凝膠視為唯一或天然完美模板。可選模板包含：

- 光刻或電子束製作的引導圖形；
- 奈米壓印模板；
- 區塊共聚物定向自組裝；
- DNA origami 與 DNA 可編程晶格；
- 膠體晶體與奈米粒子超晶格；
- 陽極氧化鋁孔道；
- 兩光子聚合或其他 3D 列印支架；
- 氣凝膠、乾凝膠與多孔氧化物；
- 生物分子或蛋白質自組裝模板。

區塊共聚物定向自組裝已能形成亞 10 nm 圖形，但缺陷密度、圖形註冊、退火窗口與複雜非週期結構仍是關鍵限制。[2] DNA 可編程自組裝則提供高度可設計的奈米結構與材料定位能力，近年已出現與晶片整合之三維奈米器件概念驗證，但其產率、尺度放大、環境穩定性與 CMOS 相容性仍需評估。[3-5]

模板選擇應依下式評估：

$$\begin{aligned} S_{\text{(template)}} &= \\ &w_{\text{rR}} \\ &+w_{\text{T}} \\ &+w_{\text{mM}} \\ &+w_{\text{sS}} \\ &-w_{\text{dD}} \\ &-w_{\text{cC}}, \end{aligned}$$

其中 R 為解析能力、T 為吞吐、M 為材料相容性、S 為結構穩定性、D 為缺陷風險、C 為成本。

3.2 保形沉積與材料轉換

模板本身通常不是最終功能材料。TGMSS 以保形沉積、浸潤、反應轉換與選擇性移除，把幾何資訊轉移到功能材料：

- 在模板表面形成成核層；
- 使用 ALD、CVD、電化學沉積、溶液浸潤或分子自組裝覆蓋；
- 透過退火、氧化、還原、硫化或交換反應改變材料相；
- 選擇性移除模板；
- 進行支撐、封裝或界面鈍化。

ALD 的優勢是以自限性表面反應控制薄膜厚度並覆蓋複雜表面，但在高深寬比孔道中仍受前驅物擴散、反應飽和、孔口提前封閉與製程時間限制。所謂「原子層」描述的是厚度控制機制，不等於可將單個原子任意放置於三維座標。

令孔道深度為 L 、有效擴散係數為 $D_{\text{(eff)}}$ ，則前驅物特徵擴散時間可粗略表示為：

$$\tau_D \sim (L^2)/(D_{\text{eff}}).$$

當脈衝與暴露時間小於 τ_D 時，深部覆蓋可能不足；若沉積厚度接近孔口半徑，則可能在內部尚未填滿前發生封口。因此可製造性必須顯式納入逆向設計。

3.3 自組裝與定向自組裝

自組裝系統的自由能可抽象表示為：

$$\begin{aligned} \text{cal-G} \\ = \\ \text{cal-G}_{\text{(bulk)}} \\ + \\ \text{cal-G}_{\text{(interface)}} \\ + \\ \text{cal-G}_{\text{(elastic)}} \\ + \\ \text{cal-G}_{\text{(field)}} \\ + \\ \text{cal-G}_{\text{(template)}}. \end{aligned}$$

模板、表面化學與外場的作用，是改變自由能地形及動力學路徑，使目標構型成為更容易到達的穩態或亞穩態。實際製程還需考慮成核、缺陷消除、晶粒競爭與退火時間。

本文不假定自組裝能精確產生任意非週期器件。較合理的近期任務包括：

- 週期線／孔圖形；
- 規則或準規則三維晶格；
- 已知對稱性的光子與聲子結構；
- 可容忍統計缺陷的感測與催化表面；
- 可用上層互連修正的局部組件。

3.4 表面與漲落誘導力模組

在奈米間隙中，van der Waals、Casimir-Lifshitz、靜電、毛細與溶劑臨界漲落力可能顯著影響組裝與黏附。平行理想導體板的零溫 Casimir 壓力為：

$$P_C = -(\pi^2 \hbar c)/(240a^3),$$

其中 a 為間距。真實系統則必須考慮材料介電函數、表面粗糙度、溫度、幾何、介質與殘餘電位，不能直接以理想公式外推到原子傳送。

近期實驗已利用包含 Casimir-van der Waals 作用的表面力，使懸浮矽奈米結構自對準並形成原子尺度間隙的光子腔，證明表面力可以成為特定結構的組裝觸發器。[6] 但這不等於可以在一般氣凝膠孔道中建立被動「原子傳送帶」。

TGMSS 對此模組採取四項限制：

- 只在幾何、材料與介質已知時建模；
- 先排除靜電、毛細與化學黏附等混淆因素；
- 以微／奈米物體或界面自對準為近期目標，不宜稱單原子定位；
- 若作用力小於熱噪聲、布朗運動或製程擾動，則不得視為可控制動力。

以特徵能量比判斷可控性：

$$\Gamma = (|\Delta U_{\text{surface}}|)/(k_B T).$$

只有在 Γ 足夠大、且能量地形具有可重現方向性時，表面力才可能成為有效製程機制。

3.5 外場與化學選擇性

相較於被動 Casimir 機制，近期更可控的導向方式包括：

- 電泳與介電泳；
- 磁性粒子操控；
- 光鉗與光熱場；

- 電化學選擇性沉積；
- 表面配體與 DNA 雜交；
- 溫度、pH、溶劑與離子強度程序；
- 毛細與蒸發驅動組裝。

TGMSS 不預設單一機制優越，而是把它們視為可被製程圖選擇的操作元件。

SECTION

四、六層系統架構

4.1 Layer 0：目標、用途與證據規格

輸入不應只是一個 STL 或體素模型，而應包含：

```
cal-S_(*)  
=  
(  
   $\Omega_*$ ,  
   $m_*$ ,  
   $p_*$ ,  
  g_(tol),  
  f_(tol),  
  cal-E_(req)  
)
```

其中：

- Ω_* ：目標結構；
- m_* ：材料與相；
- p_* ：功能性質；
- g_(tol)：幾何容差；

- $f_{\text{(tol)}}$ ：功能容差；
- $\text{cal-E}_{\text{(req)}}$ ：所需證據等級。

同一個概念原型與可量產醫療器材，所需的驗證、追溯與風險管理完全不同。

4.2 Layer 1：多尺度結構表示

單一體素表示會在原子、奈米、微米與宏觀尺度間迅速失去效率。TGMSS 採用混合表示：

- 隱式場：描述材料區域與界面；
- 網格／體素：支援有限元素與圖像式量測；
- 圖結構：描述孔道、連通與製程依賴；
- 單元格與生成規則：描述週期或分形結構；
- 原子／分子局部模型：只在關鍵界面啟用。

令尺度集合為：

```
cal-L
=
{ $\ell_{\text{(atom)}}$ ,  $\ell_{\text{(nano)}}$ ,  $\ell_{\text{(micro)}}$ ,  $\ell_{\text{(macro)}}$ }.
```

跨尺度傳遞不是假設所有尺度同時計算，而是建立局部上採樣與有效參數映射：

```
cal-H( $i \rightarrow j$ ):
 $z_{\text{(}\ell_{\text{(i)}}\text{)}}$ 
| ->
 $z_{\text{(}\ell_{\text{(j)}}\text{)}}$ .
```

4.3 Layer 2：多物理與化學演化模型

根據應用選擇模型，而不是把所有方程一次疊加。模型庫可包含：

- Maxwell 方程與光化學反應；

- Cahn-Hilliard／相場模型；
- 反應—擴散方程；
- 流體、毛細與蒸發模型；
- 固體力學與殘餘應力；
- 熱傳與相變；
- 分子動力學、DFT 或 NEGF 的局部高保真模型；
- Casimir-Lifshitz 或 colloidal／critical Casimir 模型。

多模型之間需有明確的適用域 cal-D ：

cal-M
僅在
 $z \in \text{cal-D}$
時有效。

任何代理模型若輸入落在域外，必須提高不確定性並回退至高保真求解器或實驗。

4.4 Layer 3：製程操作圖

令製程圖為有向圖：

$\text{cal-P}=(V,E),$

其中節點 $v \in V$ 是操作，邊 $e_{ij} \in E$ 表示前置依賴與材料狀態轉移。操作例子包括：

- 寫入引導圖形；
- 形成多孔支架；
- 表面官能化；
- 定向自組裝；
- ALD／CVD／電鍍；

- 退火與相轉換；
- 選擇性蝕刻；
- 清洗與乾燥；
- 量測與返工。

製程圖必須包含失敗與返工邊，而不是只描述理想流程。每個節點都有：

```
o⊠
=
(
θ⊠,
cal-W⊠,
C⊠,
R⊠,
M⊠
),
```

分別表示參數、製程窗口、成本、風險與量測需求。

4.5 Layer 4：逆向設計、多保真與主動學習

TGMSS 不宣稱「維度超過 50 就只有 AI 可解」，也不存在一般性的 $O(d \log d)$ 深度學習保證。高維設計能否有效求解，取決於目標平滑性、有效維度、可微性、先驗知識、資料量與高保真評估成本。

系統可組合：

- 伴隨法與拓撲最佳化；
- 貝葉斯最佳化；
- 演化策略；
- 可微模擬；
- 生成模型；
- 神經算子與代理模型；

- 多保真模型；
- 主動學習與實驗設計。

整體目標函數可寫為：

$$\begin{aligned}
 J(\theta) &= \\
 &\lambda_{pL}(\text{property}) \\
 &+ \\
 &\lambda_{gL}(\text{geometry}) \\
 &+ \\
 &\lambda_{\square L}(\text{topology}); \\
 &+ \\
 &\lambda_{mL}(\text{manufacturability}) \\
 &+ \\
 &\lambda_{uU}(\theta) \\
 &+ \\
 &\lambda_{cC}(\theta) \\
 &+ \\
 &\lambda_{rR}(\theta).
 \end{aligned}$$

其中 U 為不確定性， C 為成本， R 為安全與可靠度風險。

為處理批次差異，採用穩健最佳化：

$$\begin{aligned}
 &\min_{\theta} \\
 &\mathbb{E}_{\xi} \\
 &\mathbb{E}[J(\theta, \xi)] \\
 &+ \\
 &\eta \\
 &\text{CVaR}_{\alpha} \\
 &\mathbb{E}[J(\theta, \xi)].
 \end{aligned}$$

這會抑制只在理想參數下表現極佳、稍有擾動就失效的脆弱設計。

多保真逆向設計已被用於光子表面與材料設計，將低成本代理模型與高保真模擬、實驗或局部最佳化結合；主動學習也能把新實驗集中於資訊增益最高的區域。[7-9] 但這些方法仍需要資料品質、域外偵測與實驗驗證，不能被描述為自動產生真理。

4.6 Layer 5：閉環量測、資料血統與證書

製程每一階段產生：

- 原始量測；
- 校正參數；
- 製程批次與設備狀態；
- 模型版本；
- 不確定性；
- 缺陷與返工記錄。

最終結果應附帶製造證書：

```
cal-C_(fab)
=
(
cal-P,
θ,
cal-D,
cal-M,
U,
cal-Q
),
```

其中 cal-D 為資料，cal-M 為模型與版本，U 為不確定性，cal-Q 為品質判定。

SECTION

五、AOCLS 在 TGMSS 中的位置

5.1 AOCLS 不是全部製程，而是可插拔模板寫入模組

AOCLS 可承擔：

- 三維光場生成；
- 多深度曝光；
- 動態光化學控制；
- 模板或犧牲支架的快速寫入；
- 製程前虛擬預覽。

但 TGMSS 不依賴 AOCLS 才能成立。近期原型可以使用電子束、奈米壓印、兩光子聚合、區塊共聚物、自組裝模板或現成多孔支架。這使架構可以先驗證「製程編排與閉環控制」，再決定 AOCLS 是否在特定尺度具有吞吐或自由度優勢。

5.2 與 AOCLS 虛擬光刻引擎的接口

AOCLS 模擬引擎輸出：

```
hatΩ_(template),
```

```
U_(optical),
```

```
U_(process),
```

分別表示預測模板結構、光學不確定性與製程不確定性。TGMSS 再把該模板送入沉積、自組裝、退火與去模板流程，預測最終功能材料：

```
hatΩ_(final)
=
cal-T_(process)
(
hatΩ_(template),
θ_(post)
).
```

因此，「虛擬光刻精度高」不代表「最終器件精度高」。沉積收縮、界面反應、蝕刻與乾燥崩塌都必須納入後段模型。

SECTION

六、可製造性與風險邊界

6.1 幾何可製造性

候選結構至少應滿足：

$$\begin{aligned}d_{\text{(min)}} &\geq d_{\text{(tool)}}; \\ AR &\leq AR_{\text{(max)}}; \\ R_{\text{(curv)}} &\geq R_{\text{(min)}}; \\ \tau_{\text{(transport)}} &\leq \tau_{\text{(process)}}; \\ \sigma_{\text{(max)}} &\leq \sigma_{\text{(allow)}}.\end{aligned}$$

其中工具限制不只來自曝光，也包括沉積、清洗、前驅物輸運、蝕刻與量測。

6.2 模板缺陷與誤差放大

令模板誤差為 $\delta\Omega_{\boxtimes}$ ，最終誤差為：

$$\begin{aligned}\delta\Omega_{\text{f}} \\ \approx \\ J_{\text{(cal-T)}} \\ \delta\Omega_{\boxtimes} \\ + \\ \delta\Omega_{\text{(process)}},\end{aligned}$$

其中 $J_{\text{(cal-T)}}$ 是製程轉移對模板誤差的敏感度。某些沉積會平滑小缺陷，另一些步驟會放大孔口堵塞、局部粗糙與尺寸偏差。因此需要敏感度分析，而非假設模板忠實一比一複製。

6.3 氣凝膠與多孔模板的限制

若使用氣凝膠，需明確驗證：

- 孔徑分布而非只報平均孔徑；
- 機械強度與熱循環；
- 收縮與乾燥裂紋；
- 表面羥基與前驅物反應；
- 高深寬比中的質傳；
- 去模板選擇比；
- 殘留污染。

氣凝膠可作為高孔隙率支架或功能材料，但目前不應被描述為可生成任意原子級無缺陷器件的「空間模具」。

6.4 Casimir 與表面力的失效模式

- 作用力不可與靜電殘餘區分；
- 表面粗糙造成局部接觸；
- 毛細乾燥導致不可逆 stiction；
- 材料光學常數不確定；
- 熱擾動壓過方向性；
- 多體效應使兩體近似失效；
- 結構一旦黏合即無法返工。

任何 Casimir 輔助製程都應配置對照組：材料替換、間距掃描、介質替換、表面電位量測與溫度掃描。

6.5 安全、環境與雙重用途

可能涉及奈米粒子、揮發性前驅物、高能光源、真空、強電場與有毒蝕刻化學品。公開架構不代表可跳過：

- 化學品危害與廢棄物處理；

- 奈米粉體暴露與封閉；
- 雷射與高壓安全；
- 生醫材料的毒理與無菌要求；
- 軍民兩用、出口與供應鏈規範。

SECTION

七、證據分級與驗證制度

7.1 E0-E5 證據分級

等級 定義 可使用措辭

E0 概念與機制假說 提出、假設、可能

E1 數學或數值模擬 模擬顯示、在指定模型下

E2 單一模組實驗 原型量測、元件級驗證

E3 整合原型 在整合平台上觀察到

E4 外部重現 由獨立團隊重現

E5 試產或長期運行 在限定製程窗口內證實

本文整體屬 E0；引用的既有技術各自具有不同證據等級，不能因整合於同一架構就視為 TGMSS 已被驗證。

7.2 驗證流程 V0-V6

V0：機制可辨識性

確認欲利用的作用機制可與混淆因素分離。

V1：數位模型校準

以簡單幾何與已知材料校準模擬器，建立誤差條帶。

V2：模板製造

量測拓撲、尺寸、粗糙度、孔徑分布與缺陷率。

V3：材料轉移

完成沉積／浸潤，量測覆蓋率、成分、晶相與孔口封閉。

V4：去模板與結構保持

量測收縮、崩塌、裂紋與殘留。

V5：功能驗證

量測光、電、熱、機械或化學功能，與基線比較。

V6：重複性與外部重現

跨批次、跨設備、跨操作者或跨實驗室驗證。

7.3 不確定性證書

每一候選製程輸出：

```
cal-U
=
(
  U_(model),
  U_(parameter),
  U_(process),
  U_(measurement),
  U_(domain)
).
```

若域外不確定性 $U_{\text{(domain)}}$ 超標，系統不得自動執行高成本或不可逆製程，而應要求高保真模擬、額外量測或人工審核。

SECTION

八、最小可行原型：三維奈米光子／感測結構

8.1 為何不從 3 nm 電晶體開始

先進電晶體需要晶圓級缺陷控制、原子級界面、摻雜、接觸、蝕刻、封裝與可靠度整合。即使模板成功，也不代表器件可工作。直接以 3 nm FinFET 作為第一個原型，無法區分失敗來自模板、材料、界面、電性或量測。

因此 MVP 應選擇：

- 對三維拓撲敏感；
- 可用 SEM、FIB-SEM、X-ray 或光譜量測；
- 不要求完整 CMOS 製程；
- 可容忍有限缺陷；
- 有明確功能基線。

8.2 建議原型

目標：製作一個三維週期網路或奈米間隙陣列，用於光子頻帶、SERS 或折射率感測。

基線流程：

- 以兩光子聚合、奈米壓印或現成自組裝模板製作支架；
- 量測模板 Ω_{t} ；
- 使用 ALD 沉積 Al_2O_3 、 TiO_2 或 ZnO ；
- 選擇性移除聚合物模板；
- 量測最終拓撲 Ω_{f} ；
- 比較光譜或感測性能；
- 將偏差回饋至逆向設計。

模板輔助沉積與 DNA／自組裝整合已展示形成三維奈米框架與晶片整合結構的可行路徑，可作為 TGMSS 的工程基線，而不必先依賴尚未完成的 AOCLS 硬體。[4,5,10]

8.3 驗收指標

不預先宣稱固定性能，而設定測量方式：

類別 指標

拓撲 $\Delta\beta_{\text{TM}}$, $\Delta\beta_{\text{TE}}$, $\Delta\beta_{\text{TM}}$

幾何 尺寸偏差、收縮率、粗糙度、孔隙率

材料 厚度均勻性、成分、晶相、污染

缺陷 斷裂、堵塞、短路、空腔、裂紋密度

功能 頻帶位置、Q 值、SERS 增益或感測靈敏度

製程 週期時間、良率、材料消耗、返工率

模型 校準誤差、置信區間、域外拒絕率

8.4 對照組

至少包含：

- 無拓撲／幾何最佳化的基線模板；
- 無 AI、使用傳統參數掃描的流程；
- 單保真與多保真逆向設計比較；
- 不同模板材料；
- 若測試 Casimir／表面力，加入表面電位與介質對照。

SECTION

九、研究路線圖

階段 A：製程圖與數位孿生

- 建立統一結構表示；

-
- 實作拓撲與幾何品質指標；
 - 串接一個光學或擴散模擬器；
 - 建立製程資料血統；
 - 完成 V0–V1。

階段 B：模板—沉積—去模板閉環

- 選擇一種模板與一種 ALD 材料；
- 完成 V2–V4；
- 量測誤差轉移矩陣；
- 建立第一版代理模型。

階段 C：主動學習與功能器件

- 將實驗選擇轉為資訊增益問題；
- 完成光學／感測功能驗證；
- 測試跨批次穩健性；
- 完成 V5。

階段 D：AOCLS 接入

- 將 AOCLS 作為替代模板寫入模組；
- 比較解析度、吞吐、可重構性與成本；
- 建立光刻誤差到最終功能的全鏈路模型。

階段 E：跨實驗室重現與應用分支

- 由外部團隊重現；

- 再分支至光子、催化、能源、生醫或半導體；
- 只有完成 E4 後，才評估試產與商業化。

SECTION

十、可證偽命題

本文提出以下可被實驗推翻的命題：

命題 H1：聯合拓撲—幾何最佳化優於只最佳化功能值

在相同實驗預算下，加入拓撲、幾何與可製造性損失的模型，應降低斷裂、堵塞與不可製造候選比例。

命題 H2：多保真主動學習能降低高成本評估數

在達到相同功能誤差與置信度時，多保真主動學習所需的高保真模擬／實驗數應少於均勻掃描與純隨機搜索。

命題 H3：時間程序是獨立設計自由度

即使終態材料量與模板相同，不同沉積—退火—移除順序會產生統計上可辨識的晶相、應力或缺陷差異。

命題 H4：表面力只能在限定域內提供可重現導向

若 Casimir-van der Waals 或其他表面力被納入製程，其導向效果應隨間距、材料、介質與溫度呈可重現規律；若無法與靜電、毛細或化學黏附區分，該機制即不成立。

命題 H5：AOCLS 的價值必須由全鏈路功能而非模板成像單獨判定

即使 AOCLS 形成更複雜模板，若最終沉積、去模板與功能良率沒有提升，則其製程價值不成立。

SECTION

十一、結論

拓撲導向物質生成不應被理解為「控制虛空，使原子自動坍縮成任意物體」。更可靠的工程表述是：

以拓撲、幾何、界面化學、局部場與時間程序共同塑造材料演化的可達狀態，並透過逆向設計、量測回饋與證據分級逐步提高形成目標結構的機率。

這一框架的價值不在於否定光刻、沉積、自組裝或材料科學，而是把它們從彼此分離的工具，重組為一個具有明確狀態、依賴、失敗路徑與證據輸出的製程系統。

AI 在此可以成為代理模型、實驗選擇器、逆向設計器與異常偵測器，但不是技術成立的形而上前提。若低維模型、伴隨法、物理啟發式或人工設計更有效，系統就應使用它們。真正的目標不是證明「只有 AI 能做到」，而是建立一個能比較不同方法、拒絕域外預測、保留失敗資料並逐步累積可重現證據的製造研究平台。

TGMSS 的近期成功標準，不是宣稱原子級任意製造，而是完成第一條可重現的：

目標規格

→

模板／自組裝設計

→

材料轉移

→

去模板

→

功能量測

→

模型更新

閉環。當這條鏈路能夠被跨批次、跨設備甚至跨實驗室重現時，「約束導向生成」才從概念宣言進入工程技術。

SECTION

參考文獻

[1] ASML, “TWINSKAN EXE:5000 — High-NA EUV lithography system,” official technical product information, accessed 2026.

[2] S. Maekawa et al., “Chemically tailored block copolymers for highly reliable sub-10-nm patterns by directed self-assembly,” Nature Communications, 15, 5671, 2024. DOI: 10.1038/s41467-024-49839-0.

-
- [3] R. Veneziano et al., “Designer nanoscale DNA assemblies programmed from the top down,” *Science*, 352, 1534–1538, 2016. DOI: 10.1126/science.aaf4388.
- [4] A. Michelson et al., “Scalable fabrication of chip-integrated 3D-nanostructured electronic devices via DNA-programmable assembly,” *Science Advances*, 11, eadt5620, 2025. DOI: 10.1126/sciadv.adt5620.
- [5] B. Shen et al., “Plasmonic nanostructures through DNA-assisted lithography,” *Science Advances*, 4, eaap8978, 2018. DOI: 10.1126/sciadv.aap8978.
- [6] A. N. Babar et al., “Self-assembled photonic cavities with atomic-scale confinement,” *Nature*, 624, 57–63, 2023. DOI: 10.1038/s41586-023-06736-8.
- [7] L. Grbčić et al., “Inverse design of photonic surfaces via multi-fidelity machine learning,” *npj Computational Materials*, 2025. DOI: 10.1038/s41524-025-01518-4.
- [8] X. Q. Han et al., “InvDesFlow-AL: active learning-based workflow for inverse materials design,” *npj Computational Materials*, 2025. DOI: 10.1038/s41524-025-01830-z.
- [9] B. Sanchez-Lengeling and A. Aspuru-Guzik, “Inverse molecular design using machine learning: Generative models for matter engineering,” *Science*, 361, 360–365, 2018. DOI: 10.1126/science.aat2663.
- [10] X. Lyu et al., “Capillary trapping of various nanomaterials on additively manufactured templates,” *Nature Communications*, 15, 2024. DOI: 10.1038/s41467-024-51086-2.
- [11] G. Wang et al., “Nanoalignment by critical Casimir torques,” *Nature Communications*, 15, 2024. DOI: 10.1038/s41467-024-49220-1.
- [12] F. Schmidt et al., “Tunable critical Casimir forces counteract Casimir–Lifshitz attraction,” *Nature Physics*, 19, 2023. DOI: 10.1038/s41567-022-01795-6.

SECTION

版本紀錄

- v1.0：以「四維製程、氣凝膠拓撲模板、Casimir 原子導向與 AI 不可替代性」為核心的概念產品稿。
- v2.0：改寫為可公開的多尺度製程研究架構；區分拓撲與幾何；重新定義四維製程；將 Casimir 降為限定條件下的表面力模組；移除未驗證的原子級製造、成功案例、AGI／意識與商業數字；加入證據分級、可製造性、不確定性與 MVP 驗證路線。