

提到气体，大多数人会首先想到空气、氧气等，它们来得容易又便宜。但是，有些气体却价值连城，我们每年甚至要花费巨额资金去国外购买，这就是工业气体，包括氮气、氟气。它们是现代工业不可或缺的基础原料，广泛应用于钢铁、冶金、石油、化工、电子、医疗等重要行业，发挥着强有力的战略支撑作用，乃至被称为“工业的血液”。我国的工业气体长期依赖德国、美国和法国，生产集成电路所需的特种气体中，国产率只有20%。面对我国工业血液的“贫血”问题，我们该如何走出困境？

“工业的血液”

工业气体是指在工业生产中所使用的气体，可以作为生产原料、燃料、保护气、输送气、驱动气、换热介质等。在高精尖领域中，氧气和氢气可作为火箭的燃料，氮气是医院核磁共振仪的超导冷却剂，氖气是芯片光刻机光源的工作气体。工业气体的种类非常丰富，多达数百种，可分为大宗气体、特种气体两大类。大宗气体是指用量大、使用范围广的气体，比如从空气中分离得到的氧气、氮气、氩气以及化学合成的氨气、乙烯、丙烯、乙炔；特种气体是指被应用在特定领域对纯度、品质、性能有特殊要求的气体，比如芯片制造过程中用到的各种高纯气体，以及在国防、医疗、食品等领域用到的特殊气体。可见，工业气体渗透到工业生产的各个环节，发挥了不可替代的作用，因此被称为“工业的血液”。工业气体究竟有多重要？以半导体行业为例，芯片的制造会用到光刻机，光刻是用特定波长的激光让光刻胶发生化学反应，通过曝光和显影将设计在掩膜版上的图形转移到硅片上的过程。特定的波长是在常用的深紫外DUV光刻机中通过准分子激光器产生的，这种激光器内充填了97%的氟气。

全球70%的氟气由乌克兰供应，但乌克兰危机导致氟气停产，供应短缺，价格暴涨。氟气虽然存在于空气中，但只占0.0018%，它的制取离不开空气分离技术。

大型空气分离装置举足轻重

空气分离简称“空分”，是利用化工分离技术将空气中的各个成分分离开来获得各种气体产品。空分技术最初的目的并不是为了得到氟气，而是为了生产工业中大量使用的氧气和氮气。1903年，德国林德设计制成世界上第一台工业用的10立方米/小时制氧机，至今已过百年。长期以来世界空分市场被德、法、美等国的四大气体公司垄断。

空分的原理并不复杂，难点在于空气分离的设备，尤其是大型、特大型的空分设备。大型空分装置的制造能力是衡量一个国家空分技术水平的重要标志。我国的空分产业是从20世纪50年代起步的，经过摸索、合作、

如何顺好工业气体这口“气”

□ 任其龙



任其龙，中国工程院院士，浙江大学教授。长期从事化工分离领域的应用基础研究和工程实践，针对现代工业对高纯化学品的重大需求，创建了分子辨识分离工程平台技术，在工业气体分离、精细化学品分离等领域取得了重大突破，解决了组分极复杂、分子极相似混合物的分离难题，建成了十余条高纯化学品先进制造生产线，引领了我国化工分离领域的高质量发展。

自主研发等阶段，直到2000年前后，得益于钢铁、煤化工等产业的快速发展，我国大型、特大型空分成套技术与装备才有了质的飞跃。

长期以来，大型的空分设备基本上都由国外公司垄断。近年来，得益于煤化工的快速发展，我国空分设备迎来了转机。我国研制的十万等级（100000立方米/小时）空分装置，就是我国重大技术装备国产化里程碑式的一个成就。国内生产的空分设备不仅产氧质量好，而且能耗低、生产成本低、性能优，特别是长周期稳定运行远远超过了国外，成为我们的“大国重器”。大型空分技术的进步也为我国氟气的自主生产创造了条件，其他几种稀有气体也被附带提取了出来，包括贵如黄金的氖气、氙气等。目前我国占全球氟气市场份额的40%，超过了乌克兰，有力保障了我国相关产业的健康发展。

半导体生产要用到上百种气体

工业气体中的电子特气，包括氟气、氟气、含氟气体等，是集成电路制造、半导体显示、半导体器件制造过程中必不可少的关键材料。生产一枚芯片，需要100多种电子特气，而我们仅能生产约20%的品种，其余品种均依赖进口，有的品种1千克售价高达几十万元人民币。芯片的生产过程非常复杂，从生产多晶硅开始，到抛光、外延、扩散、成膜、沉积、刻蚀、掺杂、电镀、清洗、分装等环节，几乎都离不开电子特气的参与，电子特气是芯片制造中的第二大耗材。

按照所处的工序，电子特气可以分为外延气、沉积气、刻蚀气、掺杂气等，每一类都包含很多品种。沉积气是以硅烷等含硅气体为主，硅烷分解后可以在晶圆表面形成需要的薄膜；刻蚀气常用的是四氯化碳、八氟环丁烷等含氟的气体，它的作用是对经过光刻的硅片进行雕刻得到特定结

构的沟槽；掺杂气是含有砷、硼、磷等元素的气体，用于向硅片中掺入一些元素形成半导体的器件。气体是怎么在刻蚀环节中起作用的？目前主流的刻蚀方法是干法刻蚀，它包括化学刻蚀和物理刻蚀，其中的化学刻蚀用到的是含氟气体，基本原理是利用等离子体发生装置把含氟气体电离成氟的自由基，由氟的自由基与硅结合起来生成气态的四氟化硅，而四氟化硅容易被抽走不会残留，这样就可以在硅片上雕刻出一道道特定结构的沟槽。

电子特气生产技术门槛极高

电子特气的“特”，就特在纯度要求非常高，纯度指的是主成分的含量越高越好，洁净度指的是杂质的残留量越低越好。对于90纳米制程纯度要求在5到6个N，这里N指的是纯度百分比中的9个数。同时杂质要求小于10的负9次方，也就是十亿分之一。28纳米甚至7纳米、5纳米制程对电子特气的纯度要求就更高了，金属元素要净化到万亿分之一，相当于20个标准游泳池的水里杂质的量不能超过一滴水的量。为什么要如此苛刻的纯度呢？这是因为极微量的杂质都有可能对产品出现重大缺陷，比如水分、氧气等杂质会导致氧化金属和颗粒物，会导致短路以及线路的损坏。从28纳米到7纳米，产品的金属杂质必须下降100倍，污染粒子的体积必须缩小到4倍以下。随着工艺制程发展到10纳米以下，生产过程对于杂质过滤、洁净度的要求也会越来越严格。

这么苛刻的要求导致电子特气生产技术的门槛非常高，需要长期的积累和研发投入。同时生产过程要用到大量精密仪器设备，这是第一道难关。第二道难关是资质壁垒，电子特气品质对电气产品性能影响大，一旦质量出现问题下游客户将损失巨大。为保持气体供应的稳定，客户在与气体供应商建立合作关系以后，不会轻

易地更换气体供应商，如果想进入就必须经过严格的审查和认证，这个周期一般要长达2到3年。由于发达国家电子信息产业的起步早，在技术、资金、人才等方面有先发优势，我国不得不长期依赖进口，85%以上的市场份额被美、法、德、日等国的企业所垄断，特别是超高纯特气更是几乎全部依赖进口，卖不卖、卖多少全凭他们说了算。所以，我国必须尽快开发出关键电子特气的国产化技术化解“卡脖子”的风险，把国民经济的安全命脉牢牢地掌握在自己手中。从技术层面而言，我国电子气体行业需要在以下几个方面加以突破：一是净化材料，气体终端净化器的核心材料，如净化用的催化剂、吸附剂和膜材料等；二是新产品、新技术，电子特气更新换代快，新产品的研发、混配技术跟不上国外的研发速度，国内的三氟化氮和六氟化硫等电子特气产品，目前国际上已逐渐淘汰；三是设备方面，与高纯气体接触的器材必须满足洁净的标准，否则释放出来的微量杂质就会污染电子气体，生产用的容器、管道阀门等目前还需要大量进口，亟需我们尽快研发；四是检测技术方面，分析检测是品质保证的关键，部分纯度指标检测技术有一定的基础，但是在超痕量杂质高精度分析检测技术以及一些专用的仪器方面与国外差距巨大。近年来，我国一些企业经过多年的自主研发，部分电子特气产品已经实现量产，并且通过了国际龙头企业的认证，今后将会有更多的产品陆续进入全球半导体的供应链体系。

宇宙含量第二的地球珍稀气体

氮气是宇宙中含量第二高的元素，但在地球上却相当稀缺。氮气无色无味，非常轻又有惰性，一般状态下不会和其他物质反应，很安全，是一种关系国家安全、高新技术产业发展的战略性气体，广泛应用于深海潜

水、低温技术、火箭燃料、半导体制造、核磁共振等领域，有“黄金气体”之誉。比如，在半导体的制程里面，它可以掺到刻蚀气体里面来清洗，它的导热系数也高，可以把设备的热量及时地移走，不至于产生过热，提高了设备的安全性。航空航天发动机的燃料和氧化剂的输送系统都需要有氮气的密切参与。此外，宇宙飞船、液体燃料导弹等在加注燃料之前必须使用氮气清洗和增压，增压里面的液氢罐和管道系统在太空舱上各种气动阀门的驱动气体也是氮气。在核电领域，利用氮气导热系数高的特点，可以作为最先进的气冷式核反应堆的冷却介质。氮气在芯片和光纤的生产中也大有用武之地，利用它极不活泼的化学性质可用作生产过程中的保护气，利用它的高导热性和散热能力可以实现零部件的快速冷却，提高生产效率，并减少芯片和光纤的质量缺陷，每生产100公里的光纤就需要2个立方米的氮气。毫不夸张地说，如果没有氟气，医院的核磁共振检查将无法进行，宇宙飞船也无法升空。

氮气密度极小，地球引力不足以束缚它，因此氮在空气中的含量仅有百万分之4.6，所以用空分提氮是非常不经济的。氟气还有一部分与天然气伴生，储藏在地壳深处，天然气中氮的含量大约是空气的几十到上百万倍，是我们目前氟气最主要的来源。全球氟气总储量预估为484亿立方米，分布非常不均匀，主要集中在美国、阿尔及利亚、俄罗斯等国家。其中，美国氟气储量大约171亿立方米，全球



占比高达40%，而我国的氟气储量只有2%，导致工业应用中95%以上的氟气都依靠进口，而且我国天然气中氮的含量很低，平均只有0.04%，是美国的1/20，所以提取技术难度更大，成本也会更高。这对我们国家的战略安全构成了极大的威胁。二战期间，德国兴登堡号飞艇爆炸就是氟气资源受制于人的一个惨痛教训。

突破战略气体“卡脖子”危机

由于我国天然气的含氟量比较低，美国广泛采用的深冷法工艺并不适用我们。面对巨大的工业需求，要想避免氟气被“卡脖子”，我们必须自力更生，结合自身特点开发新的生产技术，自己生产氟气。天然气的成分比较复杂，除了甲烷，还有氟气、氢气、二氧化碳、水蒸气等，想要直接得到氟气，就必须将膜分离、常温变压吸附、低温吸附等新型分离技术和低温蒸馏技术耦合起来并用。膜分离的原理和过滤非常相似，利用不同分子的大小差异让小的分子通过，大的分子截留，氟气的分子是最小的，可以通过膜孔，而甲烷的分子比较大，无法通过膜孔，因此可以用膜分离来对天然气中的氟进行初步的提浓，把含量从0.1%以下提到26%。吸附分离的关键，是通过采用对氟气、甲烷等杂质气体有比较强吸附能力和脱除能力的吸附剂，把氟气的含量提高到99%，甚至99.999%以上。另一条比较经济的工艺路线，就是在生产液化天然气（LNG）的同时利用其副产的闪蒸气（BOG）来生产氟气。氟气的沸点低，在天然气的液化过程中自然被富集到气相当中，从而得到提浓，有利于后续的加工。2020年国产首套BOG提氟装置在宁夏盐池成功示范运行，填补了国内空白；2021年在内蒙古万瑞建成了年产50万方氟气国内最大的LNG联产提氟装置；2022年在重庆建成以低温吸附为核心的LNG氟气提纯项目，可以年产99.999%的氟气20吨以上。这些提氟装置的开发和投运有效地缓解了我国氟气供应的紧张局面，也部分缓解了国家战略气体资源的“卡脖子”问题。

未来，我们工业气体要面向新型工业化建设的任务，聚焦高端化、智能化、绿色化，找准“卡脖子”“掉链子”的薄弱环节，补短板、锻长板，提升产业体系自主可控能力，推动产业创新向原始创新和创新引领转变，在新征程中顺好工业这口“气”，进而扬眉吐气。



更多精彩内容扫码看视频

把准高性能计算时代脉动

□ 陈鹏

高性能计算被视为计算机科学与工程领域的“皇冠”。近年来，各国频繁启动国家层面的研发计划。所谓的高性能计算，其与一般计算相比，本质特征在于“算力聚合”，它的计算能力比一般计算机的计算能力要高出一个数量级。高性能计算通过聚合结构，使用多台计算机和存储设备，以极高速度进行计算，帮助人类探索科学、工程及社会领域中的一些世界级重大难题。

高性能计算的发展历史。1964年控制数据公司推出了CDC6600计算机。该型号计算机由西摩·克雷设计，综合采用了当时多项领先的技术，包括硅晶体管、多功能单元并行技术、专用I/O处理机等。CDC6600每一秒能执行三百万条指令，与当时其他型号的计算机相比，至少快3倍以上，其在算力的统治地位保持了5年之久。自此，高性能计算成为一个新术语，CDC6600通常被认为是第一台高性能计算机，西摩·克雷也被公认为“高性能计算机之父”。

自诞生以来，高性能计算的发展可以大致划分为四个阶段。

第一个阶段是“向量机时代”，伴随着1975年Cray-1计算机的问世，向量机成为高性能计算机的主流，向量部件、向量流水线、向量化、向量编译等向量化技术蓬勃发展。

第二个阶段是“并行处理时代”，在20世纪80年代后期，使用分布式内存的大规模并行计算在高性能计算领域大行其道。思维机器公司在1985年推出的CM-1是一台典型的大规模并行计算机，每个CM-1微处理器都配有4K比特随机存取存储器，基于超立体的阵列被设计为同时对多个数据点执行相同的操

作，即以单指令、多数据方式执行任务。CM-1最高可装配65536个独立处理器，每个处理器都非常简单，一次处理一位。在这个阶段中，并行向量机、对称多处理器、非一致性存储结构等技术迅速发展。

第三个阶段是“微处理时代”，在2000年初，基于微处理机的集群系统在高性能计算领域声名鹊起。与其他并行处理系统的核心区别在于，集群没有专用的、定制的硬件或软件，而是由廉价的个人计算机通过高速网络连接构成。在这一时期，多级互联网络、胖树和网桥等成为新的研究热点。

第四个阶段是“异构混合与云计算时代”，2005年以来，图形处理单元（GPU）已成为一个强大的计算平台，并已成功用于加速许多科学工作负载。通常，应用程序的计算密集型任务被卸载到GPU，GPU充当CPU的并行协处理器。在实际应用中，高性能计算机系统由许多节点组成，每个节点包含2到32个传统CPU和1到6个GPU，通常还包括一个高速网络和一个数据存储系统。

高性能计算扮演着越来越重要的角色。高性能计算的发展已历经了近1个甲子，从当初的M级计算到今天的E级计算，其计算速度已经增长了12个数量级。伴随着算力的不断增长，高性能计算在解决科学、工程与社会的“大挑战”过程中也扮演着越来越重要的角色。从宇宙学中天文N体模拟到高分辨率全球海洋模式，从高能物理中的格点量子色动力学到化学中的第一性原理计算，从全球气候预测到基因测序，从新材料研发到新药物研制，无一不依赖高性能计算。

可以说，高性能计算的发展日新月异，应用覆盖了人类社会经济的各个方面，要想窥高性能计算发展之全豹，可以透过“一榜一奖”管而窥之。这里所谓的“一榜”指的是TOP500榜单，“一奖”指的是戈登·贝尔奖。

TOP500榜单始于1993年，每年发布两次，汇编了世界前500台算力最强的计算机及其一些主要性能指标，其排名依据Linpack基准测试的结果。计算机的算力强弱通过求解密集线性方程组的速度来体现，通常以每秒浮点运算次数为重要的性能衡量指标。在2023年11月发布的最新TOP500榜单中，“前沿系统”（Frontier System）蝉联榜首，其最高性能达到E级（1.194E FLOPS）。“前沿系统”搭载了基于最新的惠普Cray EX235a架构的AMD EPYC 64C 2GHz处理器，共装配有近870万枚CPU和GPU核。

戈登·贝尔奖设立于1987年，每年颁发一次，该奖项旨在跟踪高性能计算的前沿进展，特别奖励将高性能计算应用于科学、工程 and 大规模数据分析的创新。奖项可能会授予在可扩展性和解决重要科学与工程问题时间方面的最高性能或特殊成就，表彰高性能计算应用领域所取得的杰出成果。

2023年戈登·贝尔奖被授予了计算材料领域，获奖项目为“量子精度的大规模材料建模：金属合金中准晶体和相互作用扩展缺陷的从头计算模拟”，该项研究基于TOP500榜首的“前沿系统”，通过薛定谔方程采用第一性原理方法进行模拟，模拟由近7.5万个原子组成的镁系统中的错位或缺陷，最终得出了迄今为止这种结构最详细的图像，其精度接

近量子精度。

值得一提的是，我国在高性能计算领域的研究水平一直都处于世界前列，共有104台机器入选最新TOP500榜单，在国家与地区排名中位列第二。我国自主研发的“神威·太湖之光”曾连续四次问鼎TOP500榜单的榜首。此外，我国高性能计算机领域的科学家也曾曾在2016年、2017年、2020年和2021年四次摘得戈登·贝尔奖的桂冠，其中2020年是中美合作团队共同获奖，站在了全球高性能计算应用领域的最前沿。

高性能计算的未来趋势。计算技术领域的格局目前正在经历一次变革，并走入一个新的阶段，登纳德定律早已消失，阿摩尔定律已至极限，摩尔定律也变得越来越难以遵循。晶圆级人工智能芯片、小芯片、可扩展甚至开放指令集架构等定制或者半定制芯片正大行其道，量子计算与量子网络呼之欲出，人工智能（深度学习、大模型）技术已经渗透到经济社会的各个领域，这些都深刻地影响着高性能计算的技术路线、产业环境和应用场景。

各类技术的交叉融合已经成为计算领域发展的最大趋势。传统的高性能计算技术与大数据和人工智能技术正在相互影响、相互渗透并相互融合，重新定义高性能计算，并引领高性能计算走向下一个巅峰。基于科学的模型正与数据驱动模型相结合，来表征复杂的系统和现象，共同开拓计算的新疆域，并开启科学研究的第四范式。

人类可以借助大数据和人工智能技术扩展高性能计算。在现有的高性能计算流程中增加深度学习的功能，实现高性能计算领域中庞大数据集内的模式识

别与分类，从而更好地解决类似“基因组测序”或“全球气候建模”等人类所面临的“大挑战”。

人类也可以借助高性能计算来扩展人工智能的规模。人工智能，尤其是以大规模为代表的新一代深度学习模型需要大量和快速精准的算力资源，这正是高性能计算领域最擅长之处。此外，依托高性能计算，大数据与人工智能科学家可以解决的问题规模得以扩大，用于解决问题的深度学习算法性能得以提升。深度学习神经网络固有的并行特征非常适合高度并行的高性能计算环境。在这些环境中，极高的计算性能、巨大的内存池和优化的节点间通信网络，都极大地扩展深度学习网络识别相关结构和模式的能力。

追逐“更高、更快、更强”的算力是高性能计算矢志不渝的宗旨，致力于解决科学、工程与社会领域中的“大挑战”也一直都是高性能计算的目标。因此，高性能计算被视为计算机科学与工程领域的“皇冠”，更是衡量国家网络空间实力的一项基准。牵住高性能计算这一“牛鼻子”，摸准高性能计算与大数据、人工智能技术交叉融合这一前沿发展“脉络”，就能牢牢把握住新一代计算技术自主发展的主动权，为数字经济健康自主发展及国家网络空间安全奠定坚实的基础。

