

上海科学技术情报研究所
上海市前沿技术发展研究中心
技术与创新支持中心(TISC)



2023 年

第 16 期

专利与创新

PATENT AND INNOVATION

定向自组装光刻专利技术态势

编者按

定向自组装光刻(DSA, Directed Self-Assembly)技术在 193nm 光刻技术之上,通过对嵌段聚合物进行模板导向、定向自组装形成光刻条纹,得到光刻图形。十年前,DSA 作为 2012 年 SPIE 高级光刻大会的热门话题,是半导体行业的研发前沿。然而,因其具有缺陷控制等问题,随着 EUV 接近投产,DSA 被大多数公司搁置。如今,DSA 重新回归,被认为可以从根本上改善 EUV 光刻固有的系统性和随机性变化,再次引起了行业内的广泛关注。

在国外,JSR、默克公开定向自组装技术专利,隆德大学发文探索 III-V 纳米线阵列的定向自组装处理方法,芝大搭建高通量“混搭”平台筛选优化嵌段共聚物体系结构。在国内,中科院微电子研究所公开使用定向组装形成图案的方法专利,青岛芯恩公开图案化方法及图案结构专利,复旦大学发表基于深度学习的定向自组装模板设计成果,并与北京航空航天大学、华东理工大学两校合作基于贝叶斯优化研究嵌段共聚物自组装结构的反向设计。笔者梳理近期国内外在定向自组装光刻领域取得的基础研究和专利成果,供读者参考。

目 录

定向自组装光刻技术概述	4
定向自组装光刻技术发展进程	4
定向自组装光刻基础研究态势	5
定向自组装光刻专利申请态势	9
定向自组装光刻专利动态	14
JSR 公开定向自组装光刻工艺专利	14
默克公开用于定向自组装的刷装聚合物专利	14
中科院微电子研究所公开使用定向组装形成图案的方法专利 ...	15
青岛芯恩公开图案化方法及图案结构专利.....	16
定向自组装光刻技术动态	17
隆德大学发文探索 III-V 纳米线阵列的定向自组装处理方法	17
芝大搭建高通量“混搭”平台筛选优化嵌段共聚物体系结构 ...	18
复旦大学发表基于深度学习的定向自组装模板设计成果.....	19
复旦等校基于贝叶斯优化研究嵌段共聚物的自组装结构.....	20

定向自组装光刻技术概述

定向自组装光刻技术发展进程

十年前，当业界还在努力提供 EUV 光刻技术时，定向自组装光刻(DSA)已经成为了研发的前沿，几乎所有制造商都决心要扩展 193i 的极限。这是 2012 年 SPIE 高级光刻大会的热门话题，一位来自应用材料公司的与会者将其颠覆行业的潜力比作 1969 年的伍德斯托克音乐会。

然而，与半导体行业中的许多新技术一样，对 DSA 能够解决重大行业挑战的潜力的承诺和兴奋，很快就遇到了其自身难以克服的挑战。缺陷控制、可扩展性以及与现有工作流程集成的复杂性阻碍了进度。随着 EUV 接近投产，DSA 被大多数公司搁置。

但 DSA 最初针对的问题（例如在当前光刻技术的极限下改进图案精度）并没有消失。此外，一些新的问题正在出现，例如最先进的 EUV 节点中的随机缺陷。

“对 DSA 的普遍批评是，由于结构的自组装性质，很难控制缺陷，” imec 研发团队负责人 Hyo Seon Suh 说道。“但 EUV 的随机缺陷也难以控制，这就是为什么许多行业以及我们的核心芯片制造商合作伙伴再次将 DSA 视为纠正随机问题的可行选择。”

英特尔的发言人表示，该公司目前正在寻求多种利用定向自组装（DSA）的集成工艺流程。“我们在 SPIE 等会议上公开讨论过的一个工艺流程是使用 DSA 进行 EUV 光刻胶校正。DSA 可以从根本上改善 EUV 光刻固有的系统性和随机性变化。利用这项技术，英特尔展示了 DSA 增强型 EUV 多重图案化方法，最终金属间距为 18 纳米，并具有强大的电气性能。”

Brewer Science 首席技术官 Rama Puligadda 表示：“DSA 即将回归。”
“但以一种非常不同的形式。它被用来辅助 EUV，不是为了改进间距，而是为了矫正线条。”

这是定向自组装重新出现的时刻。随着缺陷率的下降和新计量选项的上线，DSA 提供了一种可行的制造工艺，可在 193i 和 EUV 光刻的较低节点进行图

案校正。最引人注目的是，它可以扩展 193nm 光刻技术，而无需购买 EUV 光刻机。

十年前，DSA 领域迎来了一个充满希望的开端，随后又在实验室里苦苦挣扎了数年，如今，DSA 领域突然发展得更加迅速。尽管 DSA 尚未用于生产，但对新工艺流程和更高质量聚合物的研究可以在重复结构中比以往更精细地控制特征尺寸和图案。

资料来源：Semiconductor Engineering 2023-08-17 新闻

定向自组装光刻基础研究态势

笔者在 The Lens 全球专利和学术数据库中使用检索式(title:("Directed Self-assembly Lithography" OR "Directed self-assembly") OR abstract:("Directed Self-assembly Lithography" OR "Directed self-assembly"))进行检索，检索后筛去不相关的主题，检索时间为 2023 年 8 月 28 日。

1、技术研发趋势

国外定向自组装光刻（DSA）基础研究经历了萌芽期（1980-2006）、成长期（2007-2013）、成熟期（2014-2016）、衰退期（2017 至今）。

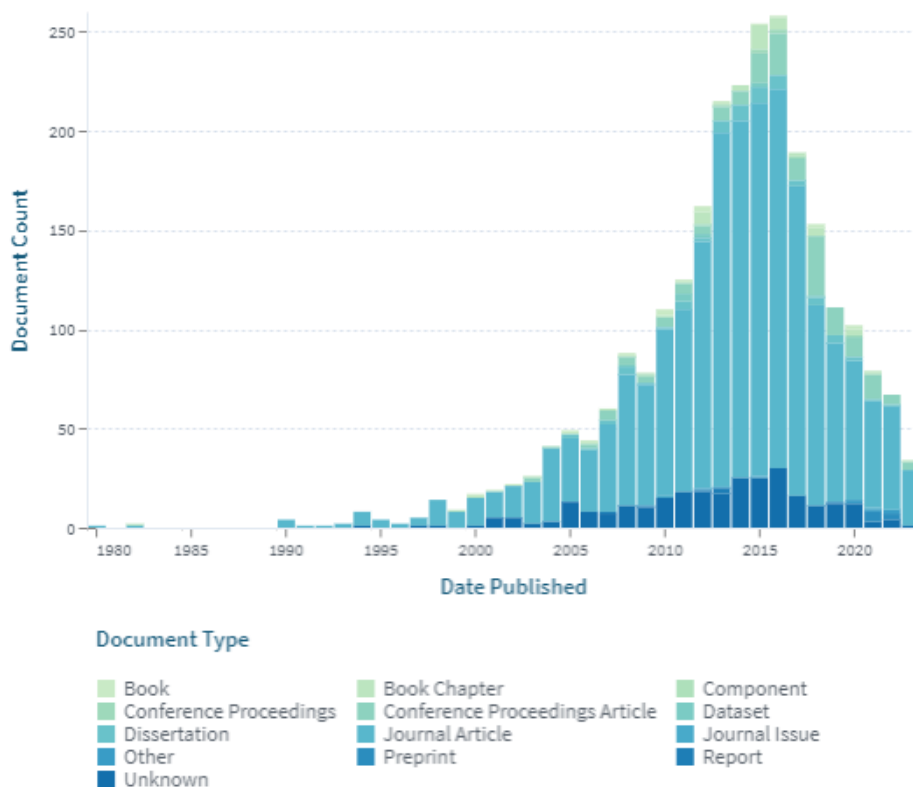


图1 国外 DSA 基础研究发表趋势

国内 DSA 基础研究在 2020 年前整体呈上升趋势，并于 2020 年达到顶峰，2020 年后国内 DSA 基础研究呈下降趋势。

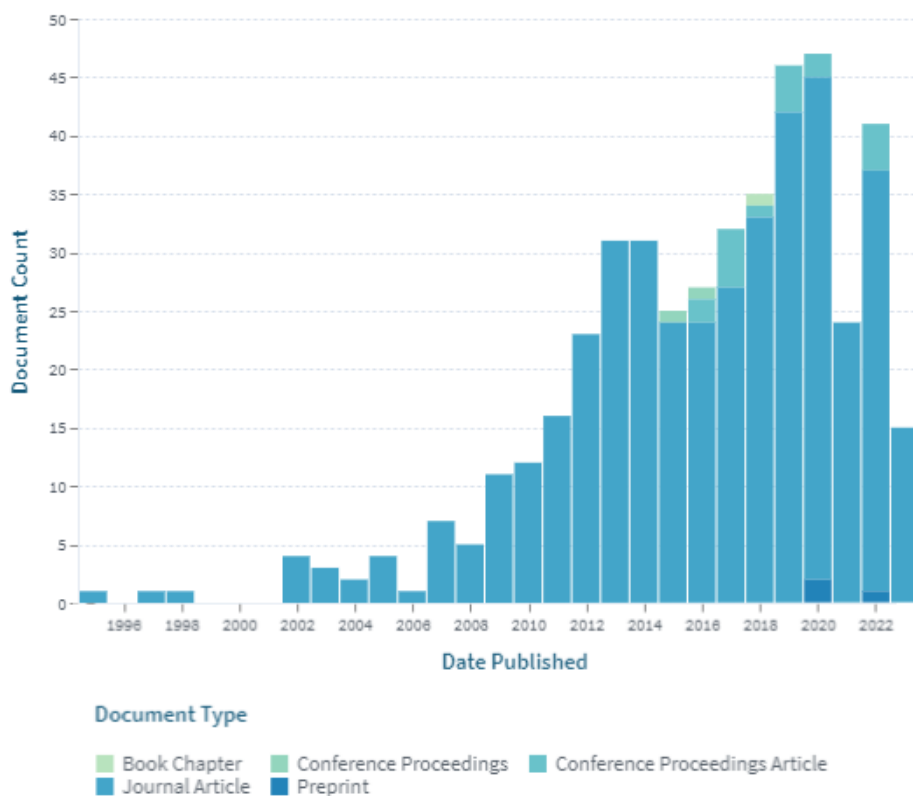


图2 国内 DSA 基础研究发表趋势

2、主要研究机构

国外 DSA 领域前十位的研究机构分别是：IBM、芝加哥大学、比利时微电子研究中心、法国原子能和替代能源委员会、麻省理工学院、韩国科学技术院、比利时鲁汶大学、法国科学院、佐治亚理工学院、阿科玛集团，其中高校和院所占八位，企业仅有两家。国内 DSA 领域前十位的研究机构由排名第一的中国科学院和九所高校组成，国内企业较少开展基础研究。

顶级机构徽标网格				
				
Ibm 75	University of Ch... 72	Imec 67	French Alternati... 66	Massachusetts I... 54
				
Kaist 52	Katholieke Univ... 49	Centre National... 43	Georgia Institut... 38	Arkema 37

图 3 国外 DSA 主要研究机构

顶级机构徽标网格				
				
Chinese Acade... 94	Fudan University 40	University of Ch... 23	Jilin University 18	Nanjing Univers... 17
				
Zhengzhou Uni... 16	University of Ch... 16	The Chinese Un... 15	Nankai University 15	South China Un... 14

图 4 国内 DSA 主要研究机构

3、热门研究领域

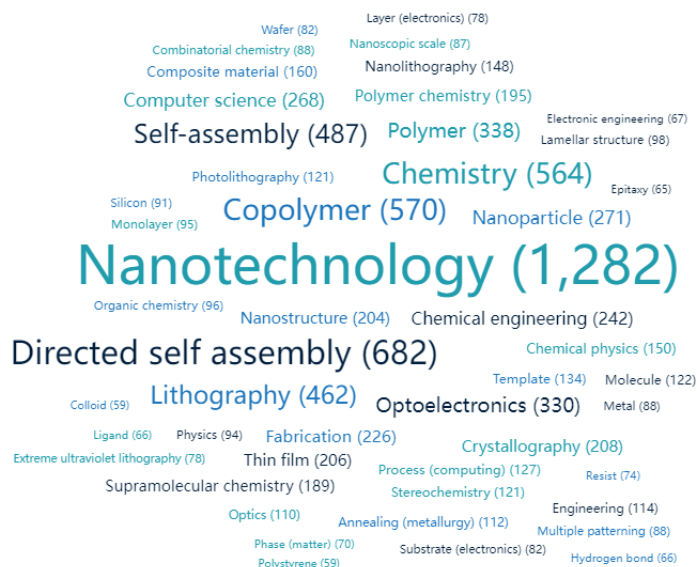


图 5 国外 DSA 热门研究领域

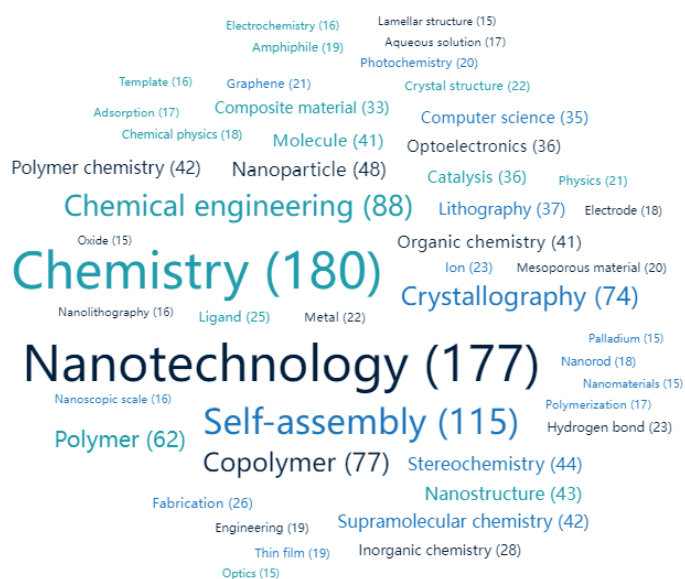


图 6 国内 DSA 热门研究领域

4、研究成果质量

在国外，比利时鲁汶大学和伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校的研究成果被引次数位居前二，且远超其它机构。在国内，中科院的研究成果被引次数最高，且高于国外最高被引次数。

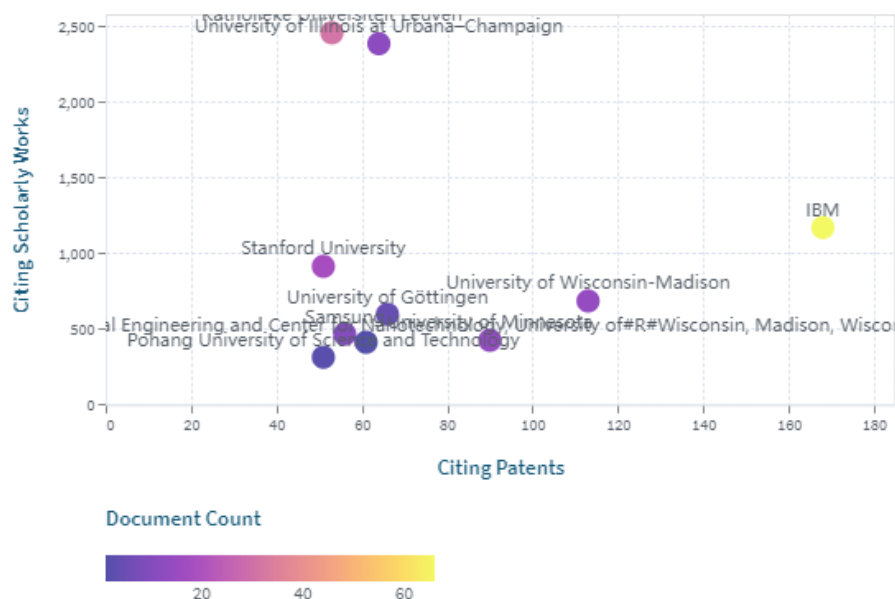


图7 国外 DSA 研究机构引文比较

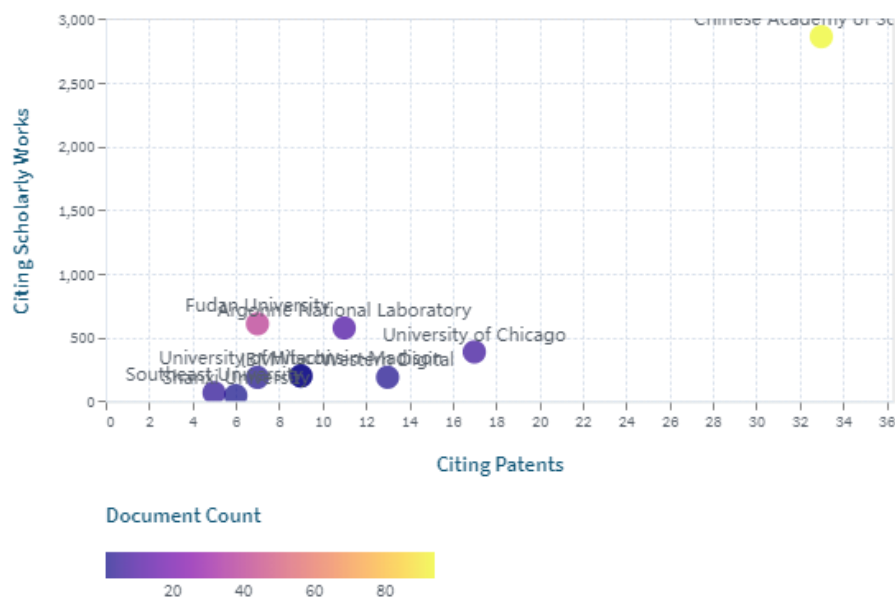


图8 国内 DSA 研究机构引文比较

资料来源：上海科学技术情报研究所检索分析 2023-08-29

定向自组装光刻专利申请态势

笔者在 The Lens 全球专利和学术数据库中使用检索式(title:("Directed Self-assembly Lithography" OR "Directed self-assembly") OR abstract:("Directed Self-assembly Lithography" OR "Directed self-assembly"))进

行检索，检索后筛去不相关的主题，检索时间为 2023 年 8 月 28 日。

1、专利申请趋势

国外定向自组装光刻（DSA）专利申请经历了萌芽期（2002-2011）、成长期（2012-2014）、成熟期（2015-2016）、衰退期（2017 至今）。国内 DSA 专利申请经历了萌芽期（2010-2012）、成长期（2013-2016）、衰退期（2017 至今）。

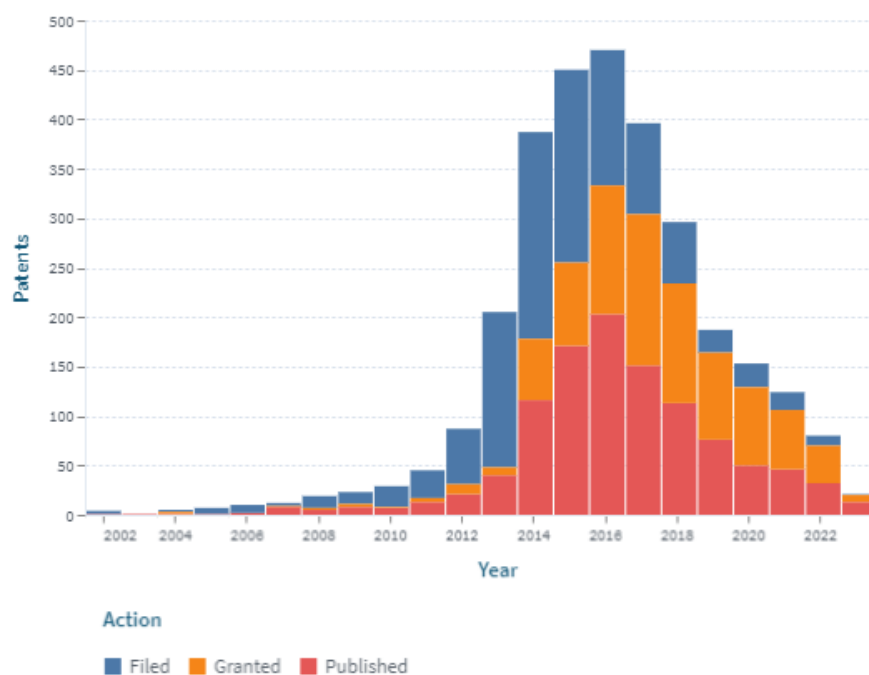


图1 国外 DSA 专利申请趋势

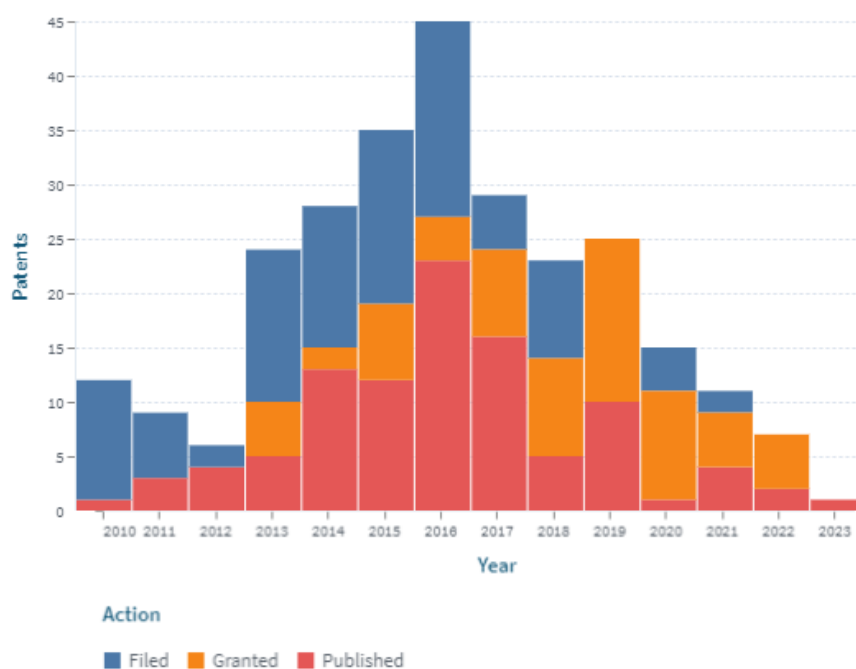


图 2 国内 DSA 专利申请趋势

2、主要申请人

国外 DSA 领域前十位专利申请人包含九家企业：IBM、东京电子、英特尔、Rohm & Haas Elect Mat、格芯公司、陶氏公司、布鲁尔科学公司、默克专利、JSR 株式会社，和加利福尼亚大学。国内 DSA 领域前十位专利申请人被国外企业占据，国内申请人仅台积电和中科院微电子研究所。

顶级申请人				
				
Ibm 162	Tokyo Electron ... 121	Intel Corp 83	Rohm & Haas El... 58	Globalfoundrie... 56
				
Univ California 46	Dow Global Tec... 44	Brewer Science ... 43	Merck Patent G... 29	Jsr Corp 29

图 3 国外 DSA 主要专利申请人

顶级申请人				
				
Rohm & Haas El... 10	Ibm 10	Dow Global Tec... 8	Intel Corp 7	Univ California 5
				
Taiwan Semico... 5	Inst Microelectr... 5	Az Electronic M... 5	Globalfoundrie... 4	Du Pont 3

图 4 国内 DSA 主要专利申请人

3、专利热点技术

国外 DSA 专利热点技术有使用图案化方法的光刻工艺（G03F7/0002）、制造或处理半导体或固体器件或其部件的方法或设备（H01L21/0337、H01L21/0271）、纳米结构的制造或处理（B82Y40/00）。国内 DSA 专利热点技术有使用图案化方法的光刻工艺（G03F7/0002）、制造或处理半导体或固体器件或其部件的方法或设备（H01L21/0337）、纳米结构的制造或处理（B82Y40/00）、薄膜图案化工艺（B81C2201/0149）。

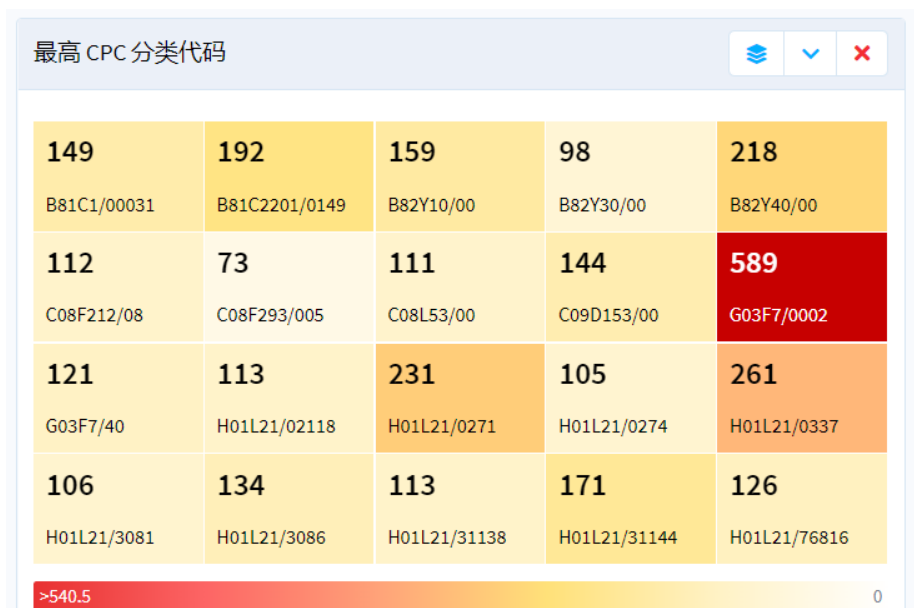


图 5 国外 DSA 专利热点技术

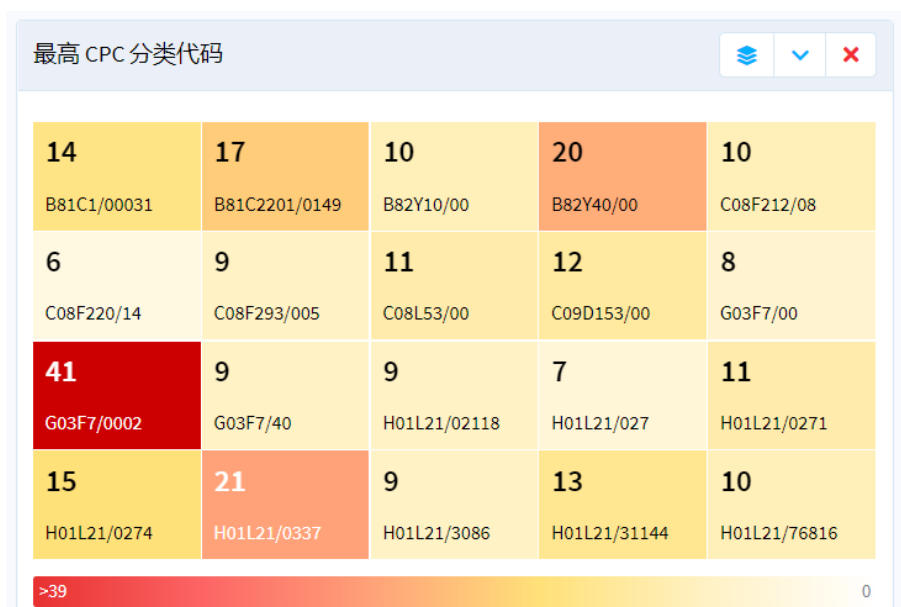


图 6 国内 DSA 专利热点技术

4、专利质量

国外 DSA 专利质量较高，且最高被引专利出现于 2015 年。与国外相比，国内专利质量低，且专利最高被引次数逐年下降。

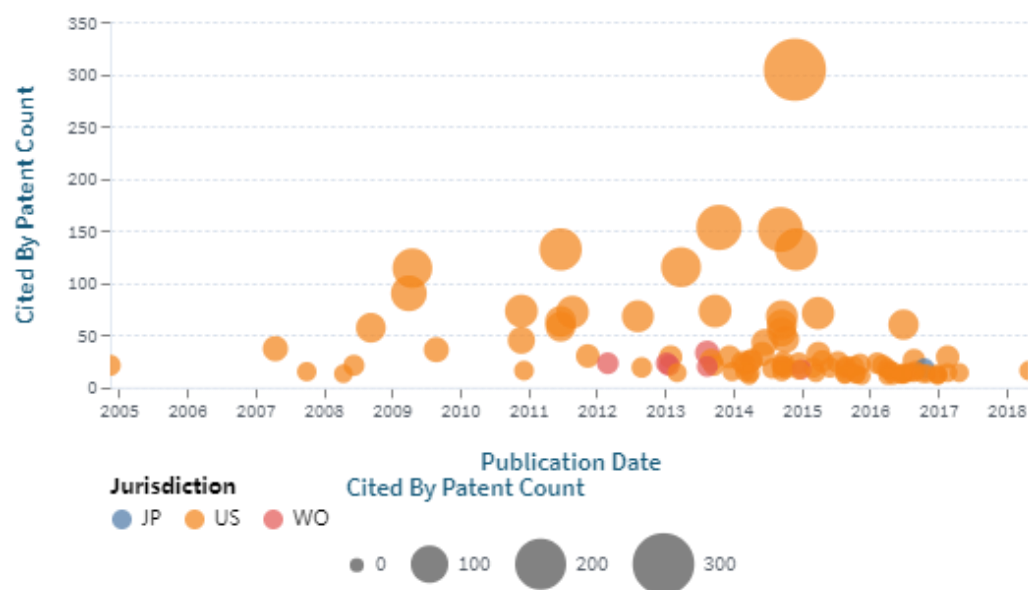


图 7 国外 DSA 专利质量

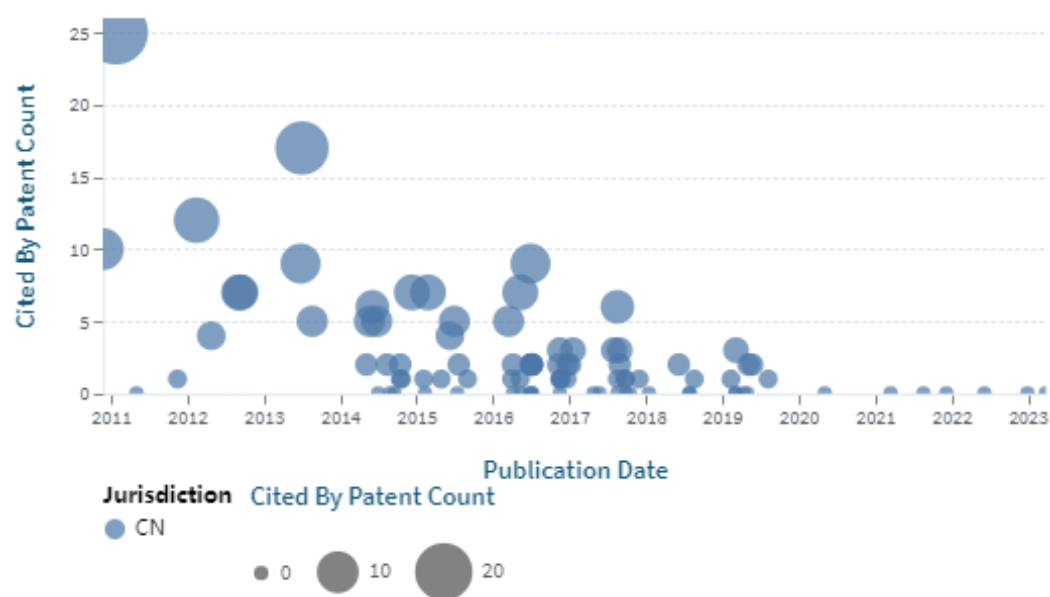


图 8 国内 DSA 专利质量

资料来源：上海科学技术情报研究所检索分析 2023-08-29

定向自组装光刻专利动态

JSR 公开定向自组装光刻工艺专利

定向自组装光刻工艺通过共聚彼此性质不同的单体获得的嵌段共聚物，并使用定向自组装形成超细图案。当使用这种方法时，含有嵌段共聚物的膜的退火导致具有相同性质的聚合物结构的聚集趋势，可以以自对准方式形成图案。

已知，在这种定向自组装光刻工艺中，通过在特定底层膜上形成包含将自组装的聚合物等组分的膜，有效地引起通过上述定向自组装的相分离。已经对该底层膜进行了各种研究，并且已知当嵌段共聚物定向自组装时，通过适当控制底层膜的表面自由能，可以形成各种相分离结构（参见 JP-A-2008-36491 和 JP-A-2012-174984）。作为构成这种底层膜的聚合物，例如，已经提出了由两种具有不同组成的单体如苯乙烯和甲基丙烯酸甲酯组成的无规共聚物。

JSR 申请了一项涉及本公开涉及组合物、底层膜、定向自组装光刻工艺的美国专利，专利名为“COMPOSITION, UNDERLAYER FILM, AND DIRECTED SELF-ASSEMBLY LITHOGRAPHY PROCESS”，该专利于 2023 年 8 月 17 日公开，公开号为 US20230259032A1。

该发明包含三个方面，分别是一种组合物，组合物包括聚合物和溶剂；利用上述组合物形成的定向自组装膜的底层膜；以及定向自组装光刻工艺。定向自组装光刻工艺包括通过将上述组合物直接或间接施加在衬底的一个表面上来形成底层膜。将用于形成定向自组装膜的组合物施加到底层膜的表面上与基底相对的一侧，从而形成涂膜。将涂膜相分离以形成具有多个相的定向自组装膜后，去除多个相中的一部分以形成图案。

资料来源：Justia Patents 2023-08-17

默克公开用于定向自组装的刷装聚合物专利

嵌段共聚物的定向自组装是一种可用于产生用于制造微电子器件的越来越小的图案化特征的方法，可以实现纳米级的特征临界尺寸(CD)。定向自组装嵌

段共聚物包含一个抗蚀刻聚合物单元的嵌段和一个高度可蚀刻聚合物单元的嵌段，它们当在基底上涂覆、配向和蚀刻时会形成具有高分辨率图案的区域。

默克专利股份有限公司就含有侧接磷酸酯结构部分的新型化合物申请了一项名为“用于定向自组装(DSA)的被磷酸酯封端的刷状聚合物”的发明专利，并于2023年7月25日公开，公开号为CN116490527A。

该化合物其可与丙烯酸酯单体或苯乙烯系单体反应以分别形成具有磷酸酯端基的丙烯酸酯聚合物或苯乙烯系聚合物，它们当用旋转流延溶剂配制时，在金属基底上分别选择性地形成极性或非极性钉扎层刷状物层，而不接枝在非金属基底上。极性或非极性钉扎层刷状物层可用于在 DSA 中使用的特定器件结构中的定向自组装，其中二嵌段共聚物或三嵌段共聚物的每个嵌段都必须沉降在既含有金属区域又含有介电区域(例如 Si、SiOX)的基底上。为了解决这个问题，这些不同的区域需要分别被涂覆以两种不同的组分，其类似于二嵌段共聚物中的两个嵌段。此处，含有这些极性和非极性末端磷酸酯结构部分的组合物与所述金属区域相互作用，但不与所述介电区域相互作用。

资料来源：壹专利 2023-07-25

中科院微电子研究所公开使用定向组装形成图案的方法专利

随着半导体存储器上目标图案变得越来越小，EUV 光刻技术和侧墙辅助图案(Spacer Assisted Patterning)技术越来越被应用到半导体装置的制造领域，但是考虑到 EUV 光刻技术的设备价格以及工艺不够成熟的问题，通常采用侧墙辅助自对准双重图案(Spacer Assisted Double Patterning，简称 SADP)、四重图案技术(Quadruple Patterning)，具体的来说，SADP 工艺一般包括曝光-刻蚀-侧墙沉积-去除心轴层-刻蚀(Litho-Etch-Spacer Depo-Mandrel Removal-Etch)的步骤，这样可以在晶圆上做出更小的图案。随着图形尺寸的进一步减小，双重图形已经无法满足需求，出现了四重图案技术(Quad Patterning)，但其制造工艺难度较高。

为制造出尺寸更小的图案，中科院微电子研究所与真芯半导体有限责任公司提出一种形成图案的方法。该方法需要首先在半导体衬底上依次形成目标

层、转印层以及第一引导图案；再使用定向自组装工艺在所述第一引导图案上形成沿水平方向或者垂直方向排布的第一刻蚀图案，以所述第一刻蚀图案为掩模，刻蚀转印层，以形成第一转印图案。得到第一转印图案后，形成与其垂直相交的第二转印图案。最终以第一转印图案、第二转印图案为掩模，刻蚀目标层从而得到目标图案。

中科院微电子研究所与真芯半导体有限责任公司就该方法申请了发明专利“形成图案的方法”，并于 2022 年 6 月 10 日公开，公开号为 CN114613671A。

资料来源：壹专利 2022-06-10

青岛芯恩公开图案化方法及图案结构专利

随着半导体器件的整合度的提高，整个芯片的面积随着储存器容量增加而逐渐变大，但实际上半导体器件中每个储存单元的布局图案面积越来越小。布局图案的节距(pitch)，例如某个图形的关键尺寸(critical dimension, CD)或图案之间的间距随着半导体器件微缩而越来越小。

DSA(Directed self-assembly, 定向自组装)技术是将嵌段共聚物(Block Copolymer, BCP)或是聚合物混合物沉积在衬底上，通常采用旋转涂布，并经由退火过程以“指挥”其形成有序的结构。在一定的条件下，此类共聚物相的嵌段分离为微域(也称为“域”)，且在此过程中，能够形成不同的化学组合物的纳米特征，因而能够通过 DSA 技术形成具有纳米特征的节距图案。但是，现有的 DSA 技术制造的图案的关键尺寸或间距仍旧较大，无法进一步突破。

芯恩集成电路有限公司就现有技术的缺点展开研究，研究涉及一种图案化方法、图案化结构及半导体器件。芯恩就该研究申请发明专利“一种图案化方法、图案化结构及半导体器件”，该专利于今年 3 月 28 日公开，公开号为 CN115863152A。

该发明的图案化方法包括：提供一衬底；在衬底的一表面形成图形外延诱导结构，图形外延诱导结构包括第一间隔和由第一间隔间隔开的第一凸起，第一凸起的材料为嵌段共聚物；在第一间隔内填充诱导层，并对形成第一凸起嵌段共聚物进行定向自组装，以形成多个改质区域；选择性去除嵌段共聚物中

的部分改质区域，以形成图案化结构，图案化结构的间隔尺寸与第一间隔的尺寸相同。发明中的图案化方法及结构能够在应用于生产半导体器件时，提高半导体器件的空间利用率。

资料来源：壹专利 2023-03-28

定向自组装光刻技术动态

隆德大学发文探索 III-V 纳米线阵列的定向自组装处理方法

制造下一代晶体管需要升级当前技术，例如缩小尺寸和增加结构密度。进一步开发加工技术来制造大面积的小间距垂直 III-V 纳米线，将是实现高密度栅极全能晶体管的重要一步。

瑞典隆德大学的研究人员于 2022 年 4 月在学术期刊《先进电子材料》（Advanced Electronic Materials）上发表了一篇题为“硅上密集垂直 III-V 纳米线的定向自组装及其对栅极全方位沉积的影响”（Directed Self-Assembly for Dense Vertical III-V Nanowires on Si and Implications for Gate All-Around Deposition）的研究。

该研究演示了如何通过嵌段共聚物 (BCP) 的定向自组装 (DSA) 处理具有可控行数的 III-V 纳米线阵列，从单行到 500nm 波段。研究表明，相对于衬底晶体方向的 DSA 取向会影响纳米线的面形，从而影响纳米线间距和栅极全方位沉积的可能性。由电子束光刻定义的导线引导的高 κ 聚(苯乙烯)-嵌段聚(4-乙烯基吡啶)BCP 图案被转移到氮化硅中。然后将氮化硅用作选择性区域金属有机气相外延掩膜，在硅平台上的砷化铟 (InAs) 缓冲层上生长 44-60nm 行距的垂直 InAs 纳米线。此外，文章展示了高 κ 氧化物和氮化钛在高模式密度下的沉积，进一步说明了制备下一代晶体管时需要考虑的因素。

资料来源：Semiconductor Engineering 2022-07-29 新闻

芝大搭建高通量“混搭”平台筛选优化嵌段共聚物体系结构

当下，电子器件正朝着更加节能化和小型化的方向发展，市场对于更小体积晶体管的需求尤为迫切。为此，科学家也一直在寻找新的材料和新的光刻方法。

在用于定向自组装和纳米光刻的嵌段共聚物（block copolymers, BCPs）的设计中，材料在加工、结构和缺陷等方面存在局限性。尽管迭代合成策略提供了性能优异的 BCP，但是识别具有所需属性的材料仍充满挑战。

近期，美国芝加哥大学团队开发了一个高通量的聚合物实验平台，他们用“混搭”的方式来筛选和优化自组 BCP 在半导体制造中光刻构图的体系结构。

在 A-block-B 的两嵌段共聚物基础之上与点击化学(click chemistry)结合组合成就了高通量的聚合物平台。这个平台具有 A-block- (B-random-C) 的聚合物架构。

通过这个架构，垂直自组装的决定因素包括热力学 Flory-Huggins interaction parameter 和嵌段的表面能可以得到模块化设计。

使用者通过选择不同的起修饰作用的小分子可迅速合成数十甚至上百种聚合物的材料库，通过调节小分子的比例，这些聚合物可垂直自组装形成 8-20 纳米的结构，为半导体行业日益突出的小型化需求和发展提供了新的解决方案。

前不久，相关论文以《纳米光刻用共变嵌段共聚物的优化设计》(Optimized design of block copolymers with covarying properties for nanolithography) 为题发表在 Nature Materials 上。

该论文共同第一作者为芝加哥大学茨克分子工程学院博士后研究员冯宏博博士、摩西·多莱西 (Moshe Dolejsi) 博士、南京工业大学生物技术与制药工程学院朱宁教授。

冯宏博表示，前瞻性地来看，通过该高通量平台可迅速地产生大量的实验数据，通过与机器学习相结合可以加速加深研究人员对共聚物的结构性质的理解。

因此，目前该团队正在与机器学习相关课题组进行密切合作，期待在此方面有新的进展。该高通量平台与机器学习的结合，也有望加速材料研发的进

度。

“通过该高通量实验平台最显著优势是高效，未来若有机器学习的加持，仅从分子结构就可预测 BCP 的性质。假如使用者需要 8.5 纳米的芯片，它会直接告诉你材料配比是怎样的。”他说。

未来，冯宏博计划将该工具作为底层关键技术，应用在能源、生物技术以及医疗等更多领域。

资料来源：DeepTech 深科技 2023-01-24 新闻

复旦大学发表基于深度学习的定向自组装模板设计成果

由于不同链段之间相互作用差异，嵌段共聚物（BCP）在体相中可自组装形成各种复杂有序的纳米尺度结构，为纳米制造、光刻、仿生等领域提供了各种候选基础结构。然而，在实际应用中，BCP 体相自组装缺乏可设计性，研究人员通过嵌段共聚物定向自组装（DSA）来克服这一缺陷。DSA 技术采用预先制造的粗糙化学/物理模板对 BCP 自组装行为进行定向调控，制造出特征尺寸为几到几十纳米的图案，其包含半导体领域所需的高分辨率点、线、折角等结构。与传统光刻技术相比，DSA 能有效降低工艺成本，目前已经在 FinFETs、储存器器件等制造领域得到应用。在模板设计方面，由于通过实验方法的设计效率有限，研究人员经常使用计算机模拟，如自洽场（SCFT）模拟，结合优化算法与机器学习技术，基于给定模板模拟 DSA 过程，并通过迭代不断优化模板。尽管如此，此类正向设计方法效率仍不高，尤其是对于需要数千次迭代才能达到预期结果的复杂目标图案来说。

针对上述挑战，复旦大学李剑锋课题组首次提出了一种仅使用机器学习来解决 DSA 引导模板反向设计的方法。相较于利用迭代与优化算法的正向设计方法，这种反向设计方法可以从目标自组装图案一步直接预测出可能的引导模板。本研究将复杂的 DSA 模板设计问题归结为多标签分类任务，使用自洽场（SCFT）模拟 DSA 过程，生成大量模板与图案样本构成数据集。从基本的两层卷积神经网络（CNN）到深度神经网络（具有 8 个残差块的 32 层 CNN），训练了一系列神经网络（NN）模型；并提出了适用于自组装相形态相关问题、针对

性很强的数据增强技术，以提高神经网络模型的性能。通过数据增强与模型结构优化，对测试集样本预测的全匹配准确率从基线模型的 $\sim 59.8\%$ 显著提高至 $\sim 97.1\%$ 。需要强调的是，该问题的随机预测准确率仅为 $1/2^{25}$ ，可见该问题的挑战性以及本研究中模型优化方法的有效性。另外值得一提的是，最优模型不仅在模拟测试集上表现优异，对人工设计图案的模板预测任务同样表现出了出色的泛化能力，使用最优模型预测出的引导模板在模拟 DSA 过程后得到的自组装图案成功对人工设计图进行了重现。该研究表明，仅通过机器学习而无需任何正向模拟迭代，来解决 DSA 引导模板设计问题是可能的，从而大大提升了设计效率，尤其是对于较为复杂的目标图案。

该研究以“Template Design for Complex Block Copolymer Patterns Using a Machine Learning Method”为题在 2023 年 6 月发表于《ACS Applied Materials & Interfaces》。

资料来源：中国聚合物网 2023-07-18 新闻

复旦等校基于贝叶斯优化研究嵌段共聚物的自组装结构

嵌段共聚物是构建各种周期性纳米结构的理想材料之一，特别是多嵌段共聚物为制备各种具有特殊应用的新颖纳米结构提供了绝佳的平台。然而多嵌段共聚物的可变参数众多、拓扑结构多变。在高维空间中快速找到目标结构的稳定参数一直以来是嵌段共聚物自组装领域的巨大挑战之一。

近期，复旦大学李卫华教授团队与北京航空航天大学蒋滢研究员团队、华东理工大学张良顺教授团队合作，设计了一个嵌段共聚物反向设计框架（图 1），用于在高维空间中快速搜索目标自组装结构的稳定参数。整个方向设计流程是一个循环迭代的过程，框架主要由贝叶斯优化（BO）、SCFT、傅里叶变换辅助的三维卷积神经网络（FFT-3DCNN）三个部分构成。其中，BO 部分在每一步给出一个探索的参数点。SCFT 部分则计算在此参数点下每一个结构的自由能。需要说明的是 SCFT 的计算结果存在一定的不确定性，有可能收敛到初始结构之外的其它结构。为了将错误收敛的结构识别出来，作者引入了 FFT-3DCNN 部分，用来保证返回给 BO 的自由能均为有效值。

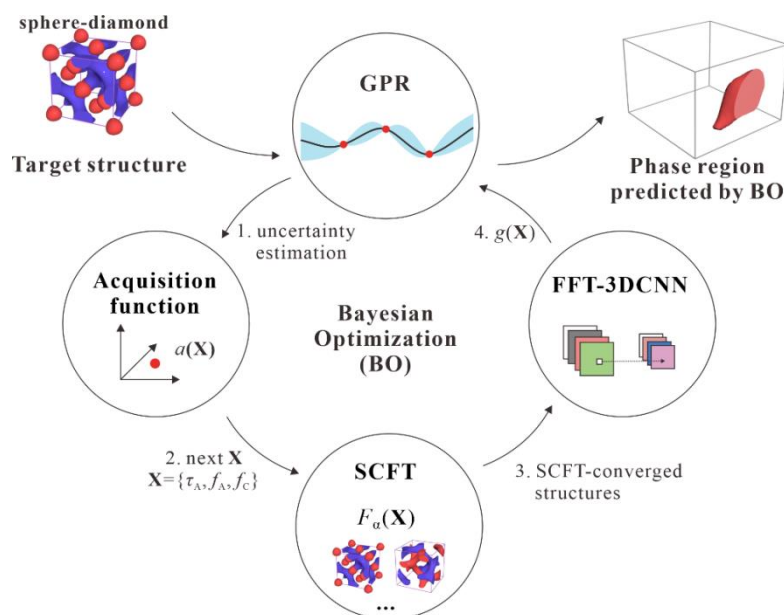


图1 嵌段共聚物反向设计框架

随后，作者选取了一个三维参数空间来测试上述方案的效率。经过测试，这个方案能在极少的迭代步数下找到目标结构的稳定参数点。此外，他们还惊喜的发现，采用BO给出的200个采样点，就可以将目标结构在三维空间中的稳定相区粗略地绘制出来。此三维相区的二维切面与手工计算的二维相图中该结构的相区吻合良好。

该工作以“Inverse Design of Complex Block Copolymers for Exotic Self-Assembled Structures Based on Bayesian Optimization”为题于2023年3月发表在《ACS Macro Letters》上。

资料来源：中国聚合物网 2023-03-23 新闻

地址：上海市永福路 265 号
邮编：200031
编辑：李嘉欣
责编：路炜
编审：林鹤
电话：021-64455555
邮件：istis@libnet.sh.cn
网址：www.istis.sh.cn