

HW15

PB17000002 古宜民

2020.1.13

文中方法概念以及审稿人意见中的几点问题

- 文章中，作者假设小球体系的势能满足(7)式，也就是小球只和最近的球有相互作用，但直观感受这一假设并不正确，因为如果小球被多个球围住，每个球对其都会有大小相近的相互作用，在堆积较密的时候，一个球周围的6个球距离都与其相近，只考虑一个球对其的作用是不妥当的。正如Referee所说，这种假设no guarantee。如果要说明假设成立，需要更多的理论指导或实验。
- 作者在对小球的分析以及Monte Carlo模拟中，都只考虑了一层小球的情况，如二维傅里叶变换等都是二维模拟，但实际情况是很多时候小球会出现大量的堆积情况，这时上层小球对下次的作用力直观理解是不可忽略的，并且甚至要大过下层小球间的相互作用（直观感受会将下层的小球“推开”）。所以正确的方法是进行三维模拟，而不能仅仅局限于平面。
- 最后虽然作者的Monte Carlo模拟结果和实际得到的最优温度符合，但仅仅是取值很稀疏的几个温度并没有足够的说服力表面模拟的过程和实际过程是对应的，这一点在Rebuttal Letter中也有提及。如果要说明二者相符，需要更多的实验数据，如小球分布的密度函数、堆积情况、球间平均距离，以及二维离散傅里叶变换结果等更多参数的实验-理论对比。
- 在与Referee的争论中，Referee认为Monte Carlo方法出现了错误，采样方式不对，但作者并没有对此作出有效回答，以至于双方沟通不清楚。
- 关于文章是否有创新这一点，虽然文章里说明了能够大规模（wafer scale）制作，但这也算是唯一一个创新的点了，而作者却并未在文章中强调。

作者可以进行的进一步工作

如前所说，作者的方法确实不够完善，可以后继：

- 进行三维模拟
- 进行更多实验说明理论模型适用
- 如Abstraction所说，尝试在多种材料上进行操作以及用不同直径大小的聚乙烯小球
- 找到更多创新的点

关于文章的后续

在网上查到，这篇文章最后在投稿一年之后发表在了Langmuir上，其中采用了更多方法，进行了更多实验，最终文章名为Fabrication of Wafer-Size Monolayer Close-Packed Colloidal Crystals via Slope Self-Assembly and Thermal Treatment，其中主要的一个区别是小球的自组装方法由旋涂改为了创新性的斜面方法。同时在多种材料（不只是硅片表面）进行了实验验证。而在新的文章里，只字未提在本文中特色描述的Monte Carlo模拟，在本文中得出的45度为最佳自组装温度的结论在新文章里也只是作为简单参数给出。可见本文中描述的Monte Carlo方法确实并无亮点，而文章的特色在于能够高效制作wafer尺度的胶体晶体，这是前人的方法没有达到的。