

第十八题

韦璐 PB16000702

题目：

一篇应用MCMC 方法研究聚乙烯小球自组装结构的研究论文“Formation of wafer-scale monolayer close packed polystyrene spheres template by thermally assisted self-assembly”在投稿某刊物后被审稿人拒稿，现作者欲以向刊物编辑申诉。请根据文章内容和审稿人评审意见，撰写申诉理由（你认为，作者在文中阐述的方法和概念以及审稿人的评论意见有哪些是合理的，哪些是需要修正的，或者哪些是需要进一步阐明的）。进一步，如果你是作者的话，你将如何进行该工作以及建立模型？

解题：

这篇文章提出了一用旋涂法来制备大块PS 小球紧堆积阵列(胶状晶体)。文中使用新型

包含乙二醇和乙醇的分散体系和热处理辅助来获得质量较好的晶体，目的是预测最佳的热处理温度。文章研究了不同分散剂、不同热处理温度、不同小球体积分对产品质量的影响。文中报道的方法可以在较短的时间内长出能覆盖整块晶圆的、缺陷较少、堆积紧密、基本单层的胶状晶体。最后使用Monte Carlo方法对晶体形成的过程进行了数值模拟，计算了晶体的质量与热处理温度间的关系，只是存在一些问题：

一. 文中在进行模拟的时候采用了一种势能： $U_n = Ae^{-\frac{\Delta}{k_B T}} e^{-\frac{s}{\tau_0(1-\frac{T}{T_C})}} \ln(r_n)$,

这个势能只和温度影响半径等有关，但是忽略了液体蒸发，液流的影响，

小球和基板的作用等等因素。并且文中并没有给出来这个势能中的参数的

取值规律，只是知道都和温度有关，有点生硬。并且这里势能的计算并没有考虑所有粒子之间的相互作用，这个审稿人的描述以及作者的回复不太符合，在粒子排布紧密的时候可能会存在多体相互作用，此时也和两体情形不同，这些我觉得都应该进行修正。并且能量时间的图也和给出的式子不太能对应，我觉得势能模型应该继续修正不然没有应用价值。

二. 文中很奇怪的就在势能的表达式中加入了 s 的项，就是说包含了蒙特卡罗模拟的步数，但是这就是一个动态演化的过程而不是一个对平衡态的抽样过程了。而且为什么要对平衡态抽样呢，作者自行组装的时候热处理的时间短，这么点时间和温度怎么达到平衡态呢？作者是不是不应该讨论热力学效应而是采用粒子动力学的方法？

三. 我觉得作者在计算的时候只考虑了平面的粒子运动，但是我们不知道实验结果是否旋涂之后还是单层排布，或者什么条件下单层，这样可以确定我模拟的结果的应用范围。

四. 作者实验时候选取的温度是否过于单一？是否应该多做几种温度更有说服力？

五. 还是计算采用平面模拟的问题，这样是否无法表征实际晶体中的位错与裂痕？是否抽样的时候使得粒子自由运动？