

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2017-508286

(P2017-508286A)

(43) 公表日 平成29年3月23日(2017.3.23)

(51) Int.Cl. F 1 テーマコード (参考)
H O 1 L 21/027 (2006.01) H O 1 L 21/30 5 O 2 D 5 F 1 4 6

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 19 頁)

(21) 出願番号	特願2016-551283 (P2016-551283)	(71) 出願人	311015001
(86) (22) 出願日	平成27年2月10日 (2015.2.10)		コミサリヤ・ア・レネルジ・アトミク・エ
(85) 翻訳文提出日	平成28年9月8日 (2016.9.8)		・オ・エネルギー・アルテルナティブ
(86) 国際出願番号	PCT/EP2015/052798		フランス国、エフー75015・パリ、リ
(87) 国際公開番号	W02015/121269		ユ・ルブラン・25、パティマン “ル・ポ
(87) 国際公開日	平成27年8月20日 (2015.8.20)		ナン・デ”
(31) 優先権主張番号	1451085	(74) 代理人	110001173
(32) 優先日	平成26年2月12日 (2014.2.12)		特許業務法人川口国際特許事務所
(33) 優先権主張国	フランス (FR)	(72) 発明者	ベルダン, ジェローム
			フランス国、38240・メラン、アンパ
			ッス・ドゥ・ペルドヌ・13
		Fターム(参考)	5F146 AA17 AA28 DD03

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 ブロックコポリマーの自動組織化単位を画定する方法

(57) 【要約】

誘導輪郭線 (CG) と呼ばれる閉じた輪郭線内に拘束されたブロックコポリマーの自己組織化パターン (MMA) を決定する方法であって、コンピュータにより実行される以下のステップ、すなわち

a) 前記誘導輪郭線に類似した基準輪郭線 (CR) と呼ばれる閉じた輪郭線 (前記基準輪郭線には基準パターン (MR) と呼ばれる前記ブロックコポリマーの自己組織化パターンが関連付けられている) をデータベース内で選択するステップと、

b) 前記基準パターンの複数の点 (P) に幾何学的変換を適用して、決定したい自己組織化パターンの画像点 (PIM) と呼ばれる各々の点に変換するステップとを含む方法。

このような方法を実行するコンピュータプログラム製品。

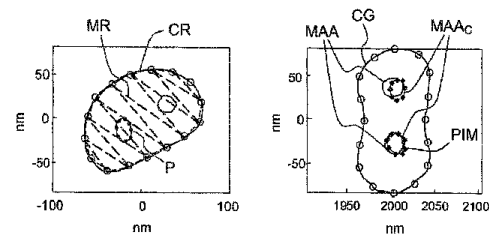


FIG.4

【特許請求の範囲】

【請求項 1】

誘導輪郭線（CG）と呼ばれる閉じた輪郭線内に拘束されたブロックコポリマーの自己組織化パターン（MMA）を決定する方法であって、コンピュータにより実行される以下のステップ、すなわち

a) 前記誘導輪郭線に類似した基準輪郭線（CR）と呼ばれる閉じた輪郭線（前記基準輪郭線には基準パターン（MR）と呼ばれる前記ブロックコポリマーの自己組織化パターンが関連付けられている）をデータベース内で選択するステップと、

b) 前記基準パターンの複数の点（P, P_m ）に幾何学的変換を適用して、決定したい自己組織化パターンの画像点（PIM）と呼ばれる各々の点に変換する（前記幾何学的変換は前記基準輪郭線を前記誘導輪郭線に変換可能にする幾何学的変換の関数である）ステップとを含む方法。

10

【請求項 2】

前記基準パターンが、少なくとも 1 個の第 1 相（PH1）および 1 個の第 2 相（PH2）を含み、前記基準パターンの前記点が前記第 1 相と前記第 2 相との境界をサンプリングすべく選択されている、請求項 1 に記載の方法。

【請求項 3】

前記データベースが、サンプリング方法に従いサンプリングされた複数の閉じた輪郭線を含み、前記方法が、同一のサンプリング方法に従い且つ前記データベースに含まれる前記閉じた輪郭線の少なくともいくつかと同数のサンプリング点（PE）で前記誘導輪郭線をサンプリングする先行ステップを含んでいる、請求項 1～2 のいずれか 1 項に記載の方法。

20

【請求項 4】

2 個の前記サンプリング点の間の曲線距離が、前記データベースに含まれる全ての閉じた輪郭線、および前記誘導輪郭線について、所定の長さ s_0 の半分～2 倍の範囲にある、請求項 3 に記載の方法。

【請求項 5】

前記所定の長さ s_0 が、 $L_0 / 5 \leq s_0 \leq 5 L_0$ 、好適には $L_0 / 2 \leq s_0 \leq 2 L_0$ 、更に好適には $L_0 / 2 \leq s_0 \leq L_0$ であり、 L_0 が前記ブロックコポリマーの自然周期である、請求項 4 に記載の方法。

30

【請求項 6】

a) 前記ステップが、

a 1) 前記誘導輪郭線と同数のサンプリング点を含む前記データベースから閉じた輪郭線を選択するステップと、

a 2) このように選択された閉じた輪郭線から、前記閉じた輪郭線および前記誘導輪郭線のサンプリング点の座標に依存する距離基準を最小化するものを選択するステップを含んでいる、請求項 3～5 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 7】

前記距離基準が、前記閉じた輪郭線および前記誘導輪郭線のサンプリング点の座標を各々表す 2 個の複素数ベクトルの離散的なフーリエ変換により得られる複素数係数の間の 2 次距離である、請求項 6 に記載の方法。

40

【請求項 8】

前記データベースが、前記閉じた輪郭線の各々について、前記輪郭線により囲まれた領域の三角形分割を画定するデータセットを含み、前記ステップ b) が、

b 1) 前記誘導輪郭線により囲まれた領域の三角形分割を決定して、前記三角形分割の各三角形（ T_m ）および各頂点が、基準輪郭線により囲まれた前記三角形分割の各三角形および各頂点に関連付けるステップと、

b 2) 各々が基準輪郭線に囲まれた領域の前記三角形分割の三角形に含まれる前記基準パターンの複数の点について、前記誘導輪郭線により囲まれた領域の前記三角形分割に関連付けられた三角形に含まれる画像点を決定するステップとを含んでいる、請求項 1～7

50

のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 9】

前記基準パターンの各前記点および前記基準パターンの画像点が、自身が各々含まれる三角形に関して、同一の重心座標を有している、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 10】

前記ステップ b 2) がまた、

b 2') 前記基準パターンの前記点の各々または少なくとも 1 個について、前記点 (P_m) を含み、且つ頂点が前記基準輪郭線に位置する少なくとも 1 個の追加的な三角形 ($T_{m, 2}; T_{m, 3}$) を構築するステップを含み、

前記基準パターンの画像点または各前記点が、前記点が含まれる三角形に関して、前記点が含まれる三角形に関して基準パターンの前記点の重心座標の線形結合により得られた重心座標を有している、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 11】

前記輪郭線の三角形分割が、前記サンプリング点の少なくともいくつかを頂点として選びながら実行される、請求項 8 ~ 10 のいずれか 1 項が請求項 3 に従属する場合に前記 1 項に記載の方法。

【請求項 12】

以下のステップ、すなわち

c) 初期化データとして前記画像点を用いながら、前記ブロックコポリマーの自己組織化モデルを用いて前記自己組織化パターンを決定するステップを含んでいる、請求項 1 ~ 11 のいずれか 1 項に記載の方法。

【請求項 13】

前記プログラムがコンピュータに実行された場合に、請求項 1 ~ 12 のいずれか 1 項に記載の方法のステップを実行するプログラムコード命令を含むコンピュータプログラム製品。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

【0001】

本発明は、閉じた輪郭線内に拘束されたブロックコポリマーの自己組織化パターンを決定するコンピュータ実装された方法に関する。

【背景技術】

【0002】

ブロックコポリマーの誘導自己組織化 (DSA) は、ナノスケールで表面パターンを形成可能にすることによりリソグラフィの解像度の限界を克服する技術として益々注目を集めている。特に、当該技術は、次世代集積回路におけるライン (導電トラック) および孔 (ビア) のパターン形成に良く適合していると思われる。

【0003】

ブロックコポリマー (BCP) の相分離は、自己組織化により、空間スケールが数ナノメートル~数十ナノメートルの範囲で変動する円筒、球または薄板形状のナノ領域を形成する。これら各種の構造のうち、円筒状の領域は、集積回路における相互接続孔の形成に特に適していることがわかる。グラフォエピタキシとして知られる方式において、BCP の自己組織化は、表面上に予め形成された誘導輪郭線またはテンプレート内で生じる。当該誘導輪郭線の壁により生じる横方向の強い拘束は、ナノ領域 (基板に垂直な円筒状領域の場合は六角形のパターン) の「自然な」自由表面構成を予測的に修正する。従って、適切な誘導輪郭線の使用により、集積回路の相互接続孔のパターンに対応するようにナノ円筒の任意の配置を形成できることが証明されている。

【0004】

グラフォエピタキシの誘導輪郭線は典型的にリソグラフィにより形成され、リソグラフィマスクにより求められ且つ画定されるものとは必然的に異なる形状を有する。従って、例えば走査型電子顕微鏡により観察される「真の」誘導輪郭線から得られる誘導自己組織

10

20

30

40

50

化パターンが、目標とするアプリケーションに応じて、予想されるパターンに充分近いかな否かを調べる必要がある。これを行うため、自己組織化プロセスの物理モデルに基づく数値シミュレーションを用いることが可能である。これらの物理モデルは、2種の広範な系統、すなわち粒子に基づくモデル、およびエネルギー場に基づくモデルに分けることができる。非限定的な例として、以下の文献が引用可能である。

－粒子に基づくモデルに関して、

－“Dissipative particle dynamics study on directed self-assembly in holes” T. Nakano; M. Matsukuma; K. Matsuzaki; M. Muramatsu; T. Tomita; T. Kitano Proc. SPIE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801J (March 26, 2013) 10

－“Molecular Dynamics Study of the Role of the Free Surface on Block Copolymer Thin Film Morphology and Alignment Christopher Forrey”, Kevin G. Yager, and Samuel P. Broadaway ACS Nano, 2011, 5(4), pp 2895-2907

－エネルギー場に基づくモデルに関して、

－“Computational simulation of block copolymer directed self-assembly in small topographical guiding templates” He Yi; Azat Latypov; H. -S. Philip Wong Proc. SPIE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801L (March 26, 2013) 20

－“Large-scale dynamics of directed self-assembly defects on chemically pre-patterned surface” Kenji Yoshimoto; Takashi Taniguchi Proc. SPIE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801I (March 26, 2013) 30

【先行技術文献】

【非特許文献】

【0005】

【非特許文献1】“Dissipative particle dynamics study on directed self-assembly in holes” T. Nakano; M. Matsukuma; K. Matsuzaki; M. Muramatsu; T. Tomita; T. Kitano Proc. SPIE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801J (March 26, 2013) 40

【非特許文献2】“Molecular Dynamics Study of the Role of the Free Surface on Block Copolymer Thin Film Morphology and Alignment Christopher Forrey”, Kevin G. Yager, and Samuel P. Broadaway ACS Nano, 2011, 5(4), pp 2895-2907

【非特許文献3】“Computational simulation of block copolymer directed self-assembly in small topographical guiding templates” He Yi; Azat Latypov; H. -S. Philip Wong Proc. SP 50

IE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801L (March 26, 2013)

【非特許文献4】“Large-scale dynamics of directed self-assembly defects on chemically pre-patterned surface” Kenji Yoshimoto; Takashi Taniguchi Proc. SPIE 8680, Alternative Lithographic Technologies V, 86801I (March 26, 2013)

【発明の概要】

【発明が解決しようとする課題】

10

【0006】

これらの方法は全て反復的アルゴリズムを実行するものであり、従って製造フェーズで用いるには余りにも低速過ぎる。

【課題を解決するための手段】

【0007】

本発明は、閉じた輪郭線内に拘束されたブロックコポリマーの自己組織化パターンを決定する、公知の方法よりも高速で十分に正確且つ予測的な方法を提供することにより、従来技術の上述の短所を克服することを目的とする。より具体的には、本発明は、集積回路の全領域にわたりこのような自己組織化パターンを決定すべく用いるのに充分高速な方法を提供することを目的とする。

20

【0008】

本発明によれば、上述の目的は、コンピュータのメモリに保存されたデータベース内で索引付けされ、且つ注目する誘導形状最も近いと認識された「基準」輪郭線の単純な幾何学的変換に基づく方法を用いて実現される。

【0009】

従って、当該目的を実現可能にする本発明の一主題は、誘導輪郭線と呼ばれる閉じた輪郭線内に拘束されたブロックコポリマーの自己組織化パターンを決定する方法であって、コンピュータにより実行される以下のステップ、すなわち

a) 前記誘導輪郭線に類似した基準輪郭線と呼ばれる閉じた輪郭線（前記基準輪郭線には基準パターンと呼ばれる前記ブロックコポリマーの自己組織化パターンが関連付けられている）をデータベース内で選択するステップと、

30

b) 前記基準パターンの複数の点に幾何学的変換を適用して、決定したい自己組織化パターンの画像点と呼ばれる各々の点に変換する（前記幾何学的変換は前記基準輪郭線を前記誘導輪郭線に変換可能にする幾何学的変換の関数である）ステップとを含んでいる。

【0010】

このような方法の各種の特定の実施形態によれば、

－前記基準パターンは、少なくとも1個の第1相および1個の第2相を含んでいてよく、前記基準パターンの前記点は前記第1相と前記第2相との境界をサンプリングすべく選択されている。

【0011】

40

－前記データベースは、サンプリング方法に従いサンプリングされた複数の閉じた輪郭線を含んでいてよく、本方法は、同一のサンプリング方法に従い且つ前記データベースに含まれる閉じた輪郭線の少なくともいくつかと同数のサンプリング点で前記誘導輪郭線をサンプリングする先行ステップを含んでいる。

【0012】

－2個の前記サンプリング点の間の曲線距離は、前記データベースに含まれる全ての閉じた輪郭線、および前記誘導輪郭線について、所定の長さ s_0 の半分～2倍の範囲にあってよい。

【0013】

－前記所定の長さ s_0 は、 $L_0 / 5 \leq s_0 \leq 5 L_0$ 、好適には $L_0 / 2 \leq s_0 \leq 2 L_0$

50

、更に好適には $L_0 / 2 \leq s_0 \leq L_0$ であってよく、 L_0 は前記ブロックコポリマーの自然周期である。

【0014】

－ a) 前記ステップは、

a 1) 前記誘導輪郭線と同数のサンプリング点を含む前記データベースから閉じた輪郭線を選択するステップと、

a 2) このように選択された閉じた輪郭線から、前記閉じた輪郭線および前記誘導輪郭線のサンプリング点の座標に依存する距離基準を最小化するものを選択するステップとを含んでいる。

【0015】

－前記距離基準は、前記閉じた輪郭線および前記誘導輪郭線のサンプリング点の座標を各々表す2個の複素数ベクトルの離散的なフーリエ変換により得られる複素数係数の間の2次距離であってよい。

【0016】

－前記データベースは、前記閉じた輪郭線の各々について、前記輪郭線により囲まれた領域の三角形分割を画定するデータセットを含んでいてよく、前記ステップb) は、

b 1) 前記誘導輪郭線により囲まれた領域の三角形分割を決定して、前記三角形分割の各三角形および各頂点が、基準輪郭線により囲まれた前記三角形分割の各三角形および各頂点に関連付けるステップと、

b 2) 各々が基準輪郭線に囲まれた領域の前記三角形分割の三角形に含まれる前記基準パターンの複数の点について、前記誘導輪郭線により囲まれた領域の前記三角形分割に関連付けられた三角形に含まれる画像点を決定するステップとを含んでいる。

【0017】

－前記基準パターンの各前記点および当該基準パターンの画像点は、自身が各々含まれる三角形に関して、同一の重心座標を有していてよい。

【0018】

－前記ステップb 2) はまた、

b 2') 前記基準パターンの前記点の各々または少なくとも1個について、前記点を含み、且つ頂点が前記基準輪郭線に位置する少なくとも1個の追加的な三角形を構築するステップを含み、

前記基準パターンの画像点または各前記点が、当該点が含まれる三角形に関して、当該点が含まれる三角形に関して基準パターンの前記点の重心座標の線形結合により得られた重心座標を有している。

【0019】

－前記輪郭線の三角形分割は、前記サンプリング点の少なくともいくつかを頂点として選びながら実行可能である。

【0020】

－このような方法はまた、以下のステップ、すなわち

c) 初期化データとして前記画像点を用いながら、前記ブロックコポリマーの自己組織化モデル（換言すれば、物理モデリングアルゴリズム）を用いて前記自己組織化パターンを決定するステップを含んでいる。

【0021】

本発明の別の主題は、前記プログラムがコンピュータに実行された場合に、このような方法のステップを実行するプログラムコード命令を含むコンピュータプログラム製品である。

【0022】

本発明の他の特徴、詳細事項および利点は、例示的に与える添付の図面を参照しながら行う以下の記述を精査することにより明らかになる。

【図面の簡単な説明】

【0023】

10

20

30

40

50

【図 1 A】誘導輪郭線および関連付けられた自己組織化パターンの走査型電子顕微鏡写真である。

【図 1 B】サンプリングされた同一輪郭線を三角形分割と共に示す。

【図 2 A】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 B】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 C】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 D】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 E】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 F】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

【図 2 G】データベースに保存可能な各基準プロファイルを示す。

10

【図 3】本発明の一特定の実施形態による方法における追加的な三角形の使用を示す。

【図 4】本発明の技術的な結果を示す。

【発明を実施するための形態】

【0024】

本発明について、考察対象のブロックコポリマーが円筒状（すなわち、自己組織化によりナノシリンダを形成している）P S - b - P M M A 型である例を用いて記述する。しかし、本発明は他の種類のブロックコポリマー（ジブロックコポリマー、星型または線形構造のトリブロックコポリマー等）およびそのようなコポリマーの混合体にも適用可能である。更に、使用するグラフォエピタキシ方法の種類（溶媒アニーリング、層グラフティング等）には一切制約が無い。

20

【0025】

図 1 A は、三葉形状の閉誘導輪郭線 C G により拘束されたブロックコポリマー（P S - b - P M M A）の自己組織化パターン M A A の走査型電子顕微鏡写真を示す。当該パターンは、連続的な第 1 相（図 1 B で P H 1 と表記）、および 3 個の円筒（図 1 B の C 1、C 2 および C 3）により形成された離散的な第 2 相（図 1 B で P H 2 と表記）を含んでいる。画像はデジタル化されてコンピュータにより取得される。次に、図 1 B に示すように、輪郭線 C G がサンプリングされる。この場合、サンプリングは規則的に、すなわちサンプリング点 P E が輪郭線に沿って互いに実質的に等距離に配置されている。以下に説明する計算効率の理由により、サンプリング点の個数が 2 のべき乗、ここでは $16 = 2^4$ であることが好適である。各点は、順番に輪郭線上に反時計回りに配置されている。基準 C G ' は、頂点がサンプリング点に一致し、且つ誘導輪郭線（離散化された輪郭線）に類似した多角形に対応している。円筒状領域 C 1、C 2 および C 3 の境界もまたサンプリングされるが、図には示されていない。

30

【0026】

次に、輪郭線 C G により（または、より正確には離散化された輪郭線 C G ' により）囲まれた領域の三角形分割が、三角形の頂点としてサンプリング点 E を取ることで画定される。図 1 B の基準 T_m でこれらの三角形の 1 個を識別する。

【0027】

図 1 B の種類の複数の離散化された画像は、所与のブロックコポリマーの自己組織化を誘導する異なる輪郭線に対応しており、データベースまたはライブラリを形成すべくコンピュータのメモリに保存される。これらの画像は、実際のサンプルに対応していてよく、または高精度の物理モデルから得ることができる。図は 2 A ~ 2 G に、このようなデータベースの画像を示す。

40

【0028】

データベース内では、各画像は以下のように表現されていてよい。

一誘導輪郭線のサンプリング点 P E の座標、特に、各サンプリング点は複素数 $z = x + jy$ で表すことができ、ここに「j」は虚数単位、(x, y) はサンプリング点の直交座標である。

【0029】

一三角形分割を識別するデータ。例えば、各三角形は、頂点としての役割を果たすサン

50

プリング点を識別する 3 個の整数により識別可能である。

【0030】

ー円筒状領域の境界の（より一般的には、自己組織化パターンの異なる相間の境界の）サンプリング点 P（図 2 A 参照）の座標。より具体的には、これらの点は各々、それを含む三角形の重心座標、および当該三角形の識別子により識別可能である。図 3 を参照しながら以下に説明するように、所与の点 P を複数の三角形内に配置でき、その場合、複数の組の重心座標をデータベースに保存可能である。三角形に関する点の重心座標は、その幾何学的重心となる前記点に関して前記三角形の頂点に付与すべき質量であることを想起されたい（注目点が三角形の外側に位置する場合、質量は恐らく負値）である。

【0031】

ーサンプリングされた輪郭線のフーリエ変換もまたデータベースに保存可能であるため、後で計算する必要がなくなる。上述のように、各サンプリング点は複素数により識別可能である。従って、離散化輪郭線 CG' は複素数ベクトルで表され、そのフーリエ変換が計算可能である。2 のべき乗に等しい個数のサンプリング点を選択することが好適である理由は、高速フーリエ変換 (FFT) アルゴリズムの使用が可能になるためである。

【0032】

有利な特徴として、2 個のサンプリング点間の曲線距離は、データベース内の全ての画像についてほぼ同じであり、より厳密には、基準長 s_0 の半分～2 倍の範囲である。より具体的には、隣接するサンプリング点の任意のペア間の距離「 s 」が不等式 $|s - s_0| \leq 0.4 s_0$ を満たすことを求めることが可能である。基準長は好適には、自由な、すなわち誘導輪郭線により拘束されないコポリマーの自己組織化の場合、コポリマーの自然周期 L_0 、すなわち領域間（例えば円筒状領域）の距離と同じオーダーである。例えば、 $L_0/5 \leq s_0 \leq 5 L_0$ の場合に、より具体的には $L_0/2 \leq s_0 \leq 2 L_0$ の場合に、特に具体的には $L_0/2 \leq s_0 \leq L_0$ の場合に、また特定の例として $s_0 = L_0$ の場合に可能である。

【0033】

長さ L の輪郭線のサンプリング点の個数は、次式により与えられる。

【数 1】

$$N = 2^{E \left(0.5 + \frac{\log \left(\frac{L}{s_0} \right)}{\log(2)} \right)}$$

ここに「 E 」は「床」関数である。

【0034】

本発明による方法を実装するために、以下に明らかになる理由により、サンプリング点の番号付けは任意でないことが好適である。

【0035】

これを行うため、特定の誘導輪郭線を、その重心「 g 」がデカルトの座標系の原点に来るように予め中心が置かれる。次に、輪郭線が反時計回りにサンプリングされる。上述のように、結果的に得られたサンプリング点の組は従って複素数 $(c_i)_{1 \leq i \leq N}$ を含んでいて、これらを分離する曲線距離が

【数 2】

$$s = \frac{L}{N}$$

に等しく、且つ x 軸とベクトル

【数 3】

$$\overrightarrow{gc_1}$$

が

【数 4】

$$\theta_0 = \frac{(\text{Arg}(\tilde{c}_2) + \text{Arg}(\tilde{c}_N))}{2}$$

10

に等しい角度をなす。ここに、

【数 5】

$$(\tilde{c}_i)_{1 \leq i \leq N}$$

は $(c_i)_{1 \leq i \leq N}$ の離散的フーリエ変換の値であり、「A r g」は当該複素数の偏角を与える関数である。 θ_0 が輪郭線を近似する楕円の長軸の傾きである点に注意されたい。

【0036】

このようにサンプリングされた誘導輪郭線に囲まれた領域の三角形分割は従って以下のよう実行可能である。

20

－第 1 の三角形 T_1 が頂点として点 $p_1 = c_1$ 、 $q_1 = c_2$ 、および $r_1 = c_N$ を有している。

【0037】

－三角形

【数 6】

$$(T_{2i})_{1 \leq i \leq \frac{N}{2}-2}$$

は頂点として点 $p_{2i} = c_{i+1}$ 、 $q_{2i} = c_{i+2}$ 、および $r_{2i} = c_{N-i+1}$ を有している。

30

【0038】

－三角形

【数 7】

$$(T_{2i+1})_{1 \leq i \leq \frac{N}{2}-2}$$

は頂点として点 $p_{2i+1} = c_{i+2}$ 、 $q_{2i+1} = c_{N-i}$ 、および $r_{2i+1} = c_{N-i+1}$ を有している。

【0039】

40

当該三角形分割は一般に、多角形 CG' が凸面でなければドロネー三角形分割でない点に注意することは興味深い。当該三角形分割がドロネー三角形分割でない場合、三角形は恐らく重なり合い、従って、パターン MAA の特定の点は恐らく複数の三角形に含まれるであろう。このことは本発明の方法の実施には影響を及ぼさない。

【0040】

データベースが形成されたならば、解決すべき問題は、所与のコポリマーの、データベースに含まれるもの以外の誘導輪郭線内における自己組織化パターンを決定することである。これを行うため、当該輪郭線（内部にコポリマーが無い）を上述のようにサンプリングする必要がある。輪郭線上のサンプリング点の個数 N は、データベースの少なくとも一部分について同一でなければならない。当該輪郭線に囲まれた領域の三角形分割は更に、

50

前記データベースを構築する間に用いたのと同じ方法で決定する必要がある。

【0041】

次に、N個のサンプリング点を有するデータベースに保存されている輪郭線のうち、自己組織化パターンを決定することが望ましい誘導輪郭線に最も類似しているものを決定することが必要である。このように決定された輪郭線を以下で「基準輪郭線」と呼ぶ。これを行うため、輪郭線の類似性の基準を定義する必要がある。有利な特徴として、但し非限定的に、これは輪郭線のフーリエ係数間の2次距離を求める問題であろう。

【数8】

$$\sum_{i=1}^N \left(|\tilde{c}'_i|^2 - |\tilde{c}_i|^2 \right) \quad 10$$

ここに、

【数9】

$$\tilde{c}_i$$

は特徴付け対象の誘導輪郭線の、および

【数10】

$$\tilde{c}'_i$$

は前記誘導輪郭線と比較されるデータベースの輪郭線の第iフーリエ係数である。輪郭線の離散的なフーリエ変換は上述のように計算され、各サンプリング点は複素数により表される。サンプリング点の番号付けは、このように計算された2次距離が意味を持つために、全ての輪郭線（例えば、但し非限定的に、上述のもの）に共通の方式に従う必要がある。輪郭線の回転に関する、およびサンプリングの起点に関する情報がフーリエスペクトルの位相に含まれる点に注意されたい。従ってこれらは望ましくは、輪郭線の比較を行う間は考慮に入れられない。

【0042】

換言すれば、二重フィルタがデータベースに適用される。最初に、特徴付け対象の輪郭線の長さに近い長さを有する輪郭線を予め選択しておき（サンプリング点の個数を数えることにより）、次いで適当な類似性基準を適用することにより単一の基準輪郭線を選択する。

【0043】

ライブラリ内で基準輪郭線が見つかったならば、特徴付け対象の誘導部は2組のサンプリング点の間の距離を最小化すべく回転される。当該位置は、ベクトル

【数11】

$$\overrightarrow{gc_1} \text{ および } \overrightarrow{g'c'_1}$$

がなす角度に等しい回転角を適用することにより良好な近似で得られ、 g' は基準輪郭線の重心である。

【0044】

この段階で、既知でデータベースに保存されている、基準輪郭線に関連付けられた自己組織化パターン（「基準パターン」）を、所与のブロックコポリマーが、特徴付け対象の誘導輪郭線の内部で自己組織化する際に得られるものと同様のパターンに変換する幾何学的変換が適用可能である。

【0045】

当該幾何学的変換は三角形分割に基づいており、より厳密には、特徴付け対象の輪郭線の各サンプリング点に基準輪郭線の各サンプリング点に関連付けられている（「～の画像である」という事実、および特徴付け対象の輪郭線に囲まれた領域の三角形分割の各三角形に、基準輪郭線により囲まれた領域の三角形分割の各三角形に関連付けられていると

10

20

30

40

50

いう事実に基づいている。従って、基準パターンの複数の点を識別して、これらの点の各々が含まれる三角形を決定して、当該三角形に、特徴付け対象の輪郭線により囲まれた領域の三角形分割に関連付けられた三角形に含まれる画像点に関連付けることが可能である。より具体的には、基準パターンの点は当該点を含む三角形に関する当該点の重心座標 (α, β, γ) により特徴付けることができ、当該基準パターンの画像点は当該点に関連付けられた三角形に関する同一の重心座標 ($\alpha_{IM}, \beta_{IM}, \gamma_{IM}$) = (α, β, γ) により特徴付けることができる。

【0046】

基準パターンの所与の点がどの三角形に位置するかを決定することは特に困難ではない。例えば、全ての三角形を順次考察しながら前記三角形の各々に関する点の重心座標を計算して行き、 $\alpha + \beta + \gamma = 1$ (α, β, γ は 0 ~ 1 の範囲) であれば処理を停止してよい。この段階で、当該情報はデータベースに保存可能である。

10

【0047】

効率の観点から、当該幾何学的変換は、有利な特徴として、基準パターン (図 2 A の点「P」) 内の円筒状領域の境界 (より一般的には相間境界) のサンプリング点だけに適用される。具体的には、これらの点に関する知識は、自己組織化パターンを良好な近似まで再構築するのに充分である。

【0048】

幾何学的変換の基礎となる三角形分割の特性的長さスケールが一般に誘導輪郭線の壁の長さよりも短く、このことがコポリマーの自己組織化により形成される円筒状領域の位置に影響を及ぼす事実から問題が生じる。本願発明者は従って、幾何学的変換において、ベース長がより長い追加的な三角形 (隣接するサンプリング点からなる 2 個の頂点を有していない) をも用いることが有利であろうと結論付けた。特に、多数の三角形 $nbTri = 3$ が一般的に満足であることが分かっている。

20

【0049】

三角形分割の三角形 T_m に関連付けられた追加的な三角形は偶数個であってよく、以下のよう定義できる。

$m = 2i + 1$ が奇数 (「 i 」は整数) の場合、

追加的な三角形 $T_{m, 2k}$ は頂点として点 $p_{m, 2k} = c_{i+2-k}$ 、 $q_{m, 2k} = c_{i+2+k}$ 、および $r_{m, 2k} = c_{N-i}$ を有し、追加的な三角形 $T_{m, 2k+1}$ は頂点として点 $p_{m, 2k+1} = c_{i+2}$ 、 $q_{m, 2k+1} = c_{N-i-k}$ 、および $r_{m, 2k+1} = c_{N-i+1+k}$ を有している。

30

【0050】

$m = 2i$ が偶数の場合、

追加的な三角形 $T_{m, 2k}$ は頂点として点 $p_{m, 2k} = c_{i+1-k}$ 、 $q_{m, 2k} = c_{i+2+k}$ 、および $r_{m, 2k} = c_{N-i+1}$ を有し、追加的な三角形 $T_{m, 2k+1}$ は頂点として点 $p_{m, 2k+1} = c_{i+1}$ 、 $q_{m, 2k+1} = c_{N-i+1-k}$ 、および $r_{m, 2k+1} = c_{N-i+1+k}$ を有している。

【0051】

ここに k は $1 \sim (nbTri - 1) / 2$ の範囲にある。上式において、点 c の添え字が $1 \sim N$ の範囲に無い場合がある。この場合、三角形を構築するのは不可能であり、重心座標の制約された組を用いる。

40

【0052】

図 3 に、基準輪郭線 CR の三角形分割の一部を形成している三角形 T_m 、および 2 個の追加的な三角形の $T_{m, 2}$ および $T_{m, 3}$ の内部に位置する点 P_m を示す。この場合、 $nbTri = 3$ である。

【0053】

追加的な三角形を用いる場合、幾何学的変換を再定義する必要がある。 $nbTri$ 個の三角形 (三角形分割に属する 1 個の三角形 T_m および $nbTri - 1$ 個の追加的な三角形) に含まれる基準パターン MR の点 P を考察するならば、画像点は、 T_m に関連付けられ

50

た特徴付け対象の輪郭線の三角形分割の三角形に位置し、当該三角形に関する当該画像点の重心座標は、基準輪郭線の各種の三角形における当該画像点の重心座標の加重平均により与えられる。加重係数は典型的に、基準輪郭線上に位置する点の画像が、特徴付け対象の輪郭線上に位置するように選択される。

【0054】

三角形 $T_{m, 1}$ 内に位置するガイドの所与の点 P は当該画像について次式のような点 P_{IM} を有している。

【数12】

$$P_{PIM} = \frac{\sum_{k=1}^{nbTri} \prod_{l \neq k} \alpha_l \beta_l \gamma_l (\alpha_k p_k + \beta_k q_k + \gamma_k r_k)}{\sum_{k=1}^{nbTri} \prod_{l \neq k} \alpha_l \beta_l \gamma_l} \quad 10$$

ここに、

－ P_{PIM} は画像点 P_{IM} の直交座標を表す複素数であり、

－ 添え字「 k 」は点 P を含む $nbTri$ 個の三角形 T_k 、典型的には、基準輪郭線により囲まれた領域の三角形分割に属する 1 個の三角形および追加的な ($nbTri - 1$) 個の三角形を識別し、

－ p_k 、 q_k および r_k は三角形 T_k の頂点の直交座標を表す複素数であり、

－ α_k 、 β_k 、 γ_k および α_1 、 β_1 、 γ_1 は各々、三角形 T_k および T_1 内の点 P の重心座標である。

【0055】

$nbTri = 1$ (追加的な三角形が無いことを意味する) である場合、上式が以下のよう簡素化される。

$$P_{PIM} = \alpha p + \beta q + \gamma r$$

【0056】

図4の右側およびの左側部分は各々、特徴付け対象の誘導輪郭線 CG および対応する基準輪郭線 CR を、関連付けられた基準パターン MR と共に示す。当該基準パターン MR に含まれる 2 個の円筒状領域の境界がサンプリングされ、サンプリング点の 1 個が基準 P により識別される。特徴付け対象の輪郭線 CG 内のサンプリング点の画像点を見つけるべく、 $nbTri = 3$ である上述のような幾何学的変換を適用する。例えば、基準 P_{IM} が上述の点 P の画像点を識別する。同図の右側部分において、基準 $MAAc$ は、基準パターンの円筒状領域の境界のサンプリング点の全ての画像点により形成される、計算された自己組織化パターンを識別する。この計算されたパターンが、ここでは実験的に決定された (しかし物理モデルを頼ってもよい) 「真の」自己組織化パターン MAA に、極めて近いことが分かるであろう。任意選択的に、計算された自己組織化パターン $MAAc$ を用いて自己組織化モデリングアルゴリズムを初期化することが可能であり、この場合、後者は僅かな反復だけで収束するものと思われる。これは例えば物理モデリングアルゴリズムを求める問題であろう。

【0057】

本発明の範囲から逸脱することなく、直前に述べた方法の複数の変型例に想到できよう。例えば、輪郭線のフーリエ係数間の 2 次距離以外の類似性基準を用いてもよい。更に、各輪郭線を 2 回サンプリングすることが考えられ、一方のサンプルを輪郭線の類似性の測定に、他方を三角形分割用の測定に用いてもよい。実際のサンプリングに関して、基準輪郭線と調査対象の輪郭線について同一方法を用いる前提で、各種の方法が用いてもよい。このようなサンプリング方法は特に、輪郭線上の N 個の点を識別すると共に、当該輪郭線上の第 1 の点の位置および当該輪郭線の周りの移動方向を設定できなければならない。更に、基準パターンの点と、計算された自己組織化パターン内における当該基準パターンの画像点との関係は点の重心座標に基づいていなくてもよい。これはより一般的に、基準輪郭

10

20

30

40

50

線を注目する誘導輪郭線に変換可能にする幾何学的変換の関数である幾何学的変換により与えられる任意の関係を求める問題であろう。

【図 1 A】

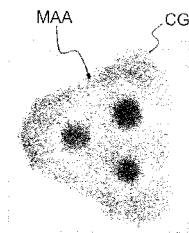


FIG.1A

【図 1 B】

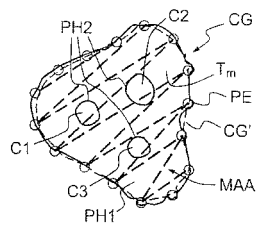


FIG.1B

【図 2 A】

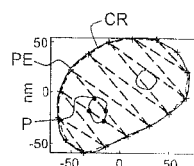


FIG.2A

【図 2 B】

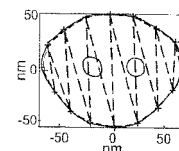


FIG.2B

【図 2 C】

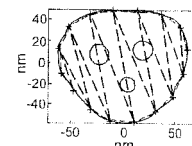


FIG.2C

【図 2 D】

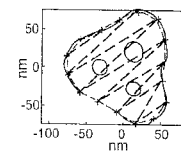


FIG.2D

【図 2 E】

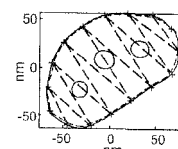


FIG.2E

【図 2 F】

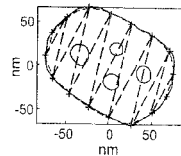


FIG.2F

【図 2 G】

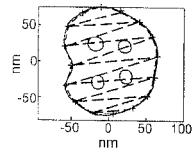


FIG.2G

【図 3】

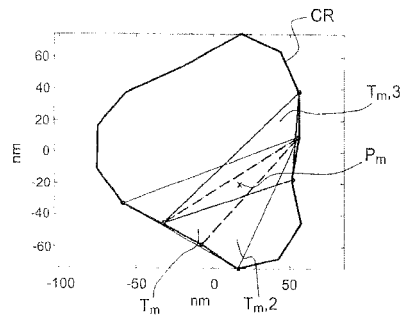


FIG.3

【図 4】

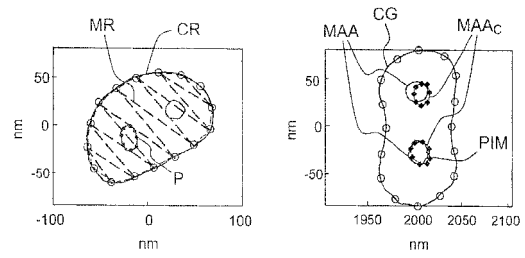


FIG.4

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2015/052798

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

INV. G06F19/00 G06K9/48 G06K9/62
ADD.

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

G06F G06K

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

EPO-Internal, INSPEC

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CHEN Q. ET AL: "Directed self-assembly of a colloidal kagome lattice", NATURE, vol. 469, no. 7330, 19 January 2011 (2011-01-19), pages 381-384, XP055156645, ISSN: 0028-0836, DOI: 10.1038/nature09713	1,13
A	abstract figures 1,3,4 dans Methods: colonne de droite, ligne 15-32 ----- -/--	2-12

☒ Further documents are listed in the continuation of Box C.☐ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

A document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

E earlier application or patent but published on or after the international filing date

L document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

O document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

P document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

T later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

X document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

Y document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

Z document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

30 March 2015

Date of mailing of the international search report

08/04/2015

Name and mailing address of the ISA/

European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2
NL - 2280 HV Rijswijk
Tel. (+31-70) 340-2040,
Fax: (+31-70) 340-3016

Authorized officer

Godzina, Przemysław

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No

PCT/EP2015/052798

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	MÜLLER M. ET AL: "Computational Approaches for the Dynamics of Structure Formation in Self-Assembling Polymeric Materials", ANNUAL REVIEW OF MATERIALS RESEARCH, vol. 43, no. 1, 1 May 2013 (2013-05-01), pages 1-34, XP055152976, ISSN: 1531-7331, DOI: 10.1146/annurev-matsci-071312-121618 the whole document -----	1-13
A	KIM H-CH. ET AL: "Block copolymer based nanostructures: materials, processes, and applications to electronics", CHEMICAL REVIEWS, vol. 110, no. 1, 1 December 2009 (2009-12-01), pages 146-177, XP055156903, ISSN: 0009-2665, DOI: 10.1021/cr900159v the whole document -----	1-13
A	JEONG S-J. ET AL: "Directed self-assembly of block copolymers for next generation nanolithography", MATERIALS TODAY, vol. 16, no. 12, 1 December 2013 (2013-12-01), pages 468-476, XP055152922, ISSN: 1369-7021, DOI: 10.1016/j.mattod.2013.11.002 the whole document -----	1-13

RAPPORT DE RECHERCHE INTERNATIONALE

Demande internationale n°

PCT/EP2015/052798

A. CLASSEMENT DE L'OBJET DE LA DEMANDE INV. G06F19/00 G06K9/48 G06K9/62 ADD.		
Selon la classification internationale des brevets (CIB) ou à la fois selon la classification nationale et la CIB		
B. DOMAINES SUR LESQUELS LA RECHERCHE A PORTE Documentation minimale consultée (système de classification suivi des symboles de classement) G06F G06K		
Documentation consultée autre que la documentation minimale dans la mesure où ces documents relèvent des domaines sur lesquels a porté la recherche		
Base de données électronique consultée au cours de la recherche internationale (nom de la base de données, et si cela est réalisable, termes de recherche utilisés) EPO-Internal, INSPEC		
C. DOCUMENTS CONSIDERES COMME PERTINENTS		
Catégorie*	Identification des documents cités, avec, le cas échéant, l'indication des passages pertinents	no. des revendications visées
X	CHEN Q. ET AL: "Directed self-assembly of a colloidal kagome lattice", NATURE, vol. 469, no. 7330, 19 janvier 2011 (2011-01-19), pages 381-384, XP055156645, ISSN: 0028-0836, DOI: 10.1038/nature09713	1,13
A	abrégé figures 1,3,4 dans Methods: colonne de droite, ligne 15-32 ----- -/--	2-12
☒ Voir la suite du cadre C pour la fin de la liste des documents ☐ Les documents de familles de brevets sont indiqués en annexe		
* Catégories spéciales de documents cités: "A" document définissant l'état général de la technique, non considéré comme particulièrement pertinent "E" document antérieur, mais publié à la date de dépôt international ou après cette date "L" document pouvant jeter un doute sur une revendication de priorité ou cité pour déterminer la date de publication d'une autre citation ou pour une raison spéciale (telle qu'indiquée) "O" document se référant à une divulgation orale, à un usage, à une exposition ou tous autres moyens "P" document publié avant la date de dépôt international, mais postérieurement à la date de priorité revendiquée "T" document ultérieur publié après la date de dépôt international ou la date de priorité et n'appartenant pas à l'état de la technique pertinent, mais cité pour comprendre le principe ou la théorie constituant la base de l'invention "X" document particulièrement pertinent; l'invention revendiquée ne peut être considérée comme nouvelle ou comme impliquant une activité inventive par rapport au document considéré isolément "Y" document particulièrement pertinent; l'invention revendiquée ne peut être considérée comme impliquant une activité inventive lorsque le document est associé à un ou plusieurs autres documents de même nature, cette combinaison étant évidente pour une personne du métier "Z" document qui fait partie de la même famille de brevets		
Date à laquelle la recherche internationale a été effectivement achevée		Date d'expédition du présent rapport de recherche internationale
30 mars 2015		08/04/2015
Nom et adresse postale de l'administration chargée de la recherche internationale Office Européen des Brevets, P.B. 5818 Patentaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016		Fonctionnaire autorisé Godzina, Przemysław

Formulaire PCT/ISA/210 (deuxième feuille) (avril 2005)

RAPPORT DE RECHERCHE INTERNATIONALE

Demande internationale n°

PCT/EP2015/052798

C(suite). DOCUMENTS CONSIDERES COMME PERTINENTS		
Catégorie*	Identification des documents cités, avec, le cas échéant, l'indication des passages pertinents	no. des revendications visées
A	MÜLLER M. ET AL: "Computational Approaches for the Dynamics of Structure Formation in Self-Assembling Polymeric Materials", ANNUAL REVIEW OF MATERIALS RESEARCH, vol. 43, no. 1, 1 mai 2013 (2013-05-01), pages 1-34, XP055152976, ISSN: 1531-7331, DOI: 10.1146/annurev-matsci-071312-121618 le document en entier -----	1-13
A	KIM H-CH. ET AL: "Block copolymer based nanostructures: materials, processes, and applications to electronics", CHEMICAL REVIEWS, vol. 110, no. 1, 1 décembre 2009 (2009-12-01), pages 146-177, XP055156903, ISSN: 0009-2665, DOI: 10.1021/cr900159v le document en entier -----	1-13
A	JEONG S-J. ET AL: "Directed self-assembly of block copolymers for next generation nanolithography", MATERIALS TODAY, vol. 16, no. 12, 1 décembre 2013 (2013-12-01), pages 468-476, XP055152922, ISSN: 1369-7021, DOI: 10.1016/j.mattod.2013.11.002 le document en entier -----	1-13

フロントページの続き

(81)指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US