

(12) 特許協力条約に基づいて公開された国際出願

(19) 世界知的所有権機関
国際事務局

(43) 国際公開日
2025年1月2日(02.01.2025)



(10) 国際公開番号

WO 2025/004836 A1

(51) 国際特許分類:
G03F 7/033 (2006.01) G03F 7/004 (2006.01)
C08F 212/08 (2006.01)

(21) 国際出願番号: PCT/JP2024/021577

(22) 国際出願日: 2024年6月13日(13.06.2024)

(25) 国際出願の言語: 日本語

(26) 国際公開の言語: 日本語

(30) 優先権データ:
特願 2023-104223 2023年6月26日(26.06.2023) JP

(71) 出願人: 株式会社レゾナック (RESONAC CORPORATION) [JP/JP]; 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 Tokyo (JP).

(72) 発明者: ▲高▼松 宏樹(TAKAMATSU, Hiroki); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 南 拓也(MINAMI, Takuya); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 澤木 琢(SAWAKI, Taku); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 戸田 夏木(TODA, Natsuki); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP). 吉原 謙介(YOSHIHARA, Kensuke); 〒1057325 東京都港区東新橋一丁目9番1号 株式会社レゾナック内 Tokyo (JP).

(74) 代理人: 伊東 忠重, 外(ITO, Tadashige et al.); 〒1000005 東京都千代田区丸の内二丁目1

番1号丸の内 M Y P L A Z A (明治安田生命ビル) 16階 Tokyo (JP).

(81) 指定国(表示のない限り、全ての種類の国内保護が可能): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, 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, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(84) 指定国(表示のない限り、全ての種類の広域保護が可能): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), ユーラシア (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), ヨーロッパ (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

添付公開書類:

— 国際調査報告 (条約第21条(3))

(54) Title: PHOTSENSITIVE RESIN COMPOSITION, FILM-SHAPED RESIN, AND RESIN SHEET

(54) 発明の名称: 感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シート

(57) Abstract: Disclosed is a photosensitive resin composition which contains a polymer composed of a plurality of kinds of monomers, wherein: the dispersion term of the Hansen solubility parameter as calculated on the basis of the monomers is 16.99 to 17.35 inclusive; the number of carboxylic acids in each molecule as calculated on the basis of the monomers is 0.272 to 0.304 inclusive; the logarithmic value of the octanol/water partition coefficient as calculated on the basis of the monomers is 2.16 to 2.79 inclusive; and the glass transition temperature as calculated on the basis of the monomers is 354 K to 382 K inclusive.

(57) 要約: 複数種類のモノマーから構成されるポリマーを含有する感光性樹脂組成物は、モノマーに基づいて算出されるハンセンの溶解度パラメータの分散項が16.99以上17.35以下であり、モノマーに基づいて算出される分子中のカルボン酸の数が0.272以上0.304以下であり、モノマーに基づいて算出されるオクタノール/水分分配係数の対数値が2.16以上2.79以下であり、モノマーに基づいて算出されるガラス転移温度が354 K以上382 K以下である。



WO 2025/004836 A1

明 細 書

発明の名称：感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シート

技術分野

[0001] 本開示は、感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シートに関する。

背景技術

[0002] 半導体ウェハ等の基板上に配線を作成するために、感光性を有する樹脂シート（「ドライフィルムレジスト」とも呼ばれる）が用いられている（例えば、特許文献1参照）。近年、半導体パッケージ基板の配線微細化に伴い、高解像かつ高密着を両立するドライフィルムレジストが求められている。

先行技術文献

特許文献

[0003] 特許文献1：特開2013-216804号公報

発明の概要

発明が解決しようとする課題

[0004] しかしながら、従来のドライフィルムレジストは、ポリマーの解像性又は密着性が十分ではなく、微細な配線を形成することが困難であった。

[0005] 本開示の一態様は、解像性及び密着性に優れた感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シートを提供する。

課題を解決するための手段

[0006] 本開示は、以下に示す構成を備える。

[0007] <1> 複数種類のモノマーから構成されるポリマーを含有する感光性樹脂組成物であって、

前記モノマーに基づいて算出されるハンセンの溶解度パラメータの分散項が16.99以上17.35以下であり、

前記モノマーに基づいて算出される分子中のカルボン酸の数が0.272以上0.304以下であり、

前記モノマーに基づいて算出されるオクタノール／水分配係数の対数値が

2. 16以上2.79以下であり、

前記モノマーに基づいて算出されるガラス転移温度が354 K以上382 K以下である、

感光性樹脂組成物。

[0008] <2> 前記ハンセンの溶解度パラメータの分散項が17.04以上17.19以下であり、

前記カルボン酸の数が0.273以上0.290以下であり、

前記オクタノール／水分配係数の対数値が2.29以上2.78以下であり、

前記ガラス転移温度が365 K以上382 K以下である、

上記<1>に記載の感光性樹脂組成物。

[0009] <3> 前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンを含む、

上記<1>又は上記<2>に記載の感光性樹脂組成物。

[0010] <4> 前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンのいずれとも異なる第三成分を含み、

前記第三成分は、3-フェノキシベンジルアクリレート、3-{2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3, 5-ジオキサ-2, 4, 6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパー2-エン酸プロピル、2-メチルプロパー2-エン酸オクタデシル、2-メチル-2-プロペン酸4-ヒドロキシフェニル、2-メチルプロパー2-エン酸オクタデシル、メタクリル酸ジシクロペンタニル、プロパー2-エン酸デシル、アクリル酸ドデシル、又は2-プロペン酸イソオクタデシルエステルである、

上記<1>に記載の感光性樹脂組成物。

[0011] <5> 前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンのいずれとも異なる第三成分を含み、

前記第三成分は、10-ヒドロキシ-2, 2, 4-トリメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3, 8-ジオキサ-2, 4-ジシラウンデカ

ン-1-イル 2-メチルプロパ-2-エン酸、プロパ-2-エン酸ヘキサデシル、ドコシルプロ-2-エン酸、2-メチルプロパ-2-エン酸 1-エチルシクロヘキシル、ドコシルプロ-2-エン酸、プロパ-2-エン酸テトラデシル、2-メチルプロパ-2-エン酸アダマンタン-1-イル、3-{2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3, 5-ジオキサ-2, 4, 6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパ-2-エン酸プロピル、又は2-プロペン酸イソオクタデシルエステルである、

上記<2>に記載の感光性樹脂組成物。

[0012] <6> 前記ポリマーは、前記第三成分の配合量が、13重量%以上22重量%以下である、

上記<4>又は上記<5>に記載の感光性樹脂組成物。

[0013] <7> 上記<1>から上記<6>のいずれかに記載の感光性樹脂組成物をフィルム上に形成することによって得られるフィルム状樹脂。

[0014] <8> 基材と、前記基材上に形成された上記<1>から上記<6>のいずれかに記載の感光性樹脂組成物からなる樹脂層と、を備える樹脂シート。

発明の効果

[0015] 本開示の一態様によれば、解像性及び密着性に優れる感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シートを提供することができる。

図面の簡単な説明

[0016] [図1]図1は、実施例1の抽出結果を示す図である。

[図2]図2は、実施例2の抽出結果を示す図である。

[図3]図3は、フィルム状樹脂の一例を示す模式図である。

[図4]図4は、樹脂シートの一例を示す模式図である。

[図5]図5は、組成提案システムの全体構成の一例を示すブロック図である。

[図6]図6は、コンピュータのハードウェア構成の一例を示すブロック図である。

[図7]図7は、組成提案システムの機能構成の一例を示すブロック図である。

[図8]図8は、実験データの一例を示す図である。

[図9]図9は、記述子データの一例を示す図である。

[図10]図10は、密着予測モデルの一例を示すブロック図である。

[図11]図11は、密着予測モデルの精度の一例を示すグラフである。

[図12]図12は、解像予測モデルの一例を示すブロック図である。

[図13]図13は、解像予測モデルの精度の一例を示すグラフである。

[図14]図14は、記述子計算処理の一例を示すフローチャートである。

[図15]図15は、モデル学習処理の一例を示すフローチャートである。

[図16]図16は、組成提案処理の一例を示すフローチャートである。

発明を実施するための形態

[0017] 以下、本開示の各実施形態について添付の図面を参照しながら説明する。
なお、本明細書及び図面において、実質的に同一の機能構成を有する構成要素については、同一の符号を付することにより重複した説明を省略する。

[0018] [感光性樹脂組成物]

本実施形態における感光性樹脂組成物は、ドライフィルムレジストを製造するために用いられる組成物である。感光性樹脂組成物は、複数種類のモノマーから構成されるポリマーを含有する。ポリマーを構成するモノマーは、少なくともアクリル酸（AA）及びスチレン（STC）を含む。以下、感光性樹脂組成物に含有されるポリマーを、「ベースポリマー」と呼ぶ。

[0019] 感光性樹脂組成物は、ベースポリマーに加えて、（メタ）アクリレート化合物、エポキシ樹脂及び光開始剤などを含有してもよい。ベースポリマーを構成するモノマーは、アクリル酸及びスチレンのいずれとも異なる第三成分を含んでもよい。

[0020] 本実施形態では、アクリル酸の配合量は、18重量%以上26重量%以下とする。また、スチレンの配合量は、60重量%以上80重量%以下とする。第三成分の配合量は、ベースポリマーのうちアクリル酸とスチレンとを除いた部分である。すなわち、第三成分の配合量は、 $(100 - (\text{アクリル酸の配合量} + \text{スチレンの配合量}))$ [重量%] である。第三成分の配合量は、

13重量%以上22重量%以下であることが好ましい。

[0021] <評価指標>

本実施形態における感光性樹脂組成物を用いて製造されるドライフィルムレジストは、高解像かつ高密着を両立する。本実施形態では、解像性は「解像 $3x/x$ 」を評価指標とする。また、密着性は「 $16\mu\text{m}$ ピッチ密着」を評価指標とする。

[0022] 解像 $3x/x$ は、ドライフィルムレジストにおいて細線パターンを形成した時のライン幅を $3x$ 、ライン間のスペース幅を x としたとき、パターンが形成できる最小の x の値である。解像 $3x/x$ は、 x の値が小さいほど解像性が高いと評価できる。パターンが形成できることは、残渣やレジストの倒壊がないかを顕微鏡を用いて、作成したパターンを観察することで確認することができる。

[0023] $16\mu\text{m}$ ピッチ密着は、ドライフィルムレジストにおいて細線パターンを形成した時、ラインのピッチが $16\mu\text{m}$ の評価パターンにおいてスペース幅を広くしたときに、パターンを形成できる最小のライン幅である。 $16\mu\text{m}$ ピッチ密着は、ライン幅の値が小さいほど密着性が高いと評価できる。パターンが形成できることは、残渣やレジストの倒壊がないかを顕微鏡を用いて、作成したパターンを観察することで確認することができる。

[0024] $16\mu\text{m}$ ピッチ密着は、オフセットパターン密着でもよい。オフセットパターン密着は、ドライフィルムレジストにおいて細線パターンを形成した時、ライン幅とスペース幅の合計が $16\mu\text{m}$ となる評価パターンにおいてスペース幅を広くしたときに、パターンを形成できる最小のライン幅である。オフセットパターン密着は、値が小さいほど密着性が高いと評価できる。

[0025] <パラメータ>

本実施形態における感光性樹脂組成物は、ベースポリマーを構成するモノマーに基づいて算出される4つのパラメータが所定の範囲に含まれる。第1のパラメータは、ハンセンの溶解度パラメータの分散項（以下、「 $HSP_{\delta D}$ 」とも呼ぶ）である。第2のパラメータは、分子中のカルボン酸の数（

以下、単に「カルボン酸の数」とも呼ぶ)である。第3のパラメータは、オクタノール/水分配係数の対数值(以下、「log P」とも呼ぶ)である。第4のパラメータは、ガラス転移温度(以下、「ポリマーTg」とも呼ぶ)である。

[0026] 《ハンセンの溶解度パラメータの分散項(HSP_{δD})》

ハンセンの溶解度パラメータは、ポリマー間の相互作用の強さを表すため、解像性又は密着性に影響を及ぼすと考えられる。なお、ハンセンの溶解度パラメータのうち、極性項δPや水素結合項δHではなく、分散項δDを用いるのは、スチレンのベンゼン環の相互作用の強さを表すと考えられるためである。

[0027] ベースポリマーのHSP_{δD}は、ベースポリマーを構成する各モノマーのHSP_{δD}をモル比で重み付け加算することで算出される。具体的には、ベースポリマーのHSP_{δD}は、式(1)により算出することができる。

[0028] [数1]

$$X = \sum_i n_i x_i \quad \dots(1)$$

[0029] ただし、XはベースポリマーのHSP_{δD}であり、 x_i はi番目のモノマーのHSP_{δD}であり、 n_i はi番目のモノマーのモル比である。

[0030] なお、モノマーのHSP_{δD}は、例えば、HSPiPを用いて計算することができる。HSPiPは、ハンセンの溶解度パラメータを計算することに特化したソフトウェアである。

[0031] ベースポリマーのHSP_{δD}は、16.99以上17.35以下であることが好ましく、17.04以上17.19以下であることがより好ましい。

[0032] 《分子中のカルボン酸の数》

ドライフィルムレジストでは、現像及び剥離の際にカルボン酸が塩基と反応する。そのため、分子中のカルボン酸の数は、解像性及び密着性に影響を及ぼすと考えられる。

[0033] ベースポリマーのカルボン酸の数は、ベースポリマーを構成する各モノマーのカルボン酸の数をモル比で重み付け加算することで算出される。具体的には、ベースポリマーのカルボン酸の数は、上記の式(1)により算出することができる。

[0034] ただし、式(1)において、 X はベースポリマーのカルボン酸の数であり、 x_i は*i*番目のモノマーのカルボン酸の数であり、 n_i は*i*番目のモノマーのモル比である。

[0035] なお、モノマーのカルボン酸の数は、例えば、RDKitを用いて計算することができる。RDKitは、ケモインフォマティクス分野で広く用いられているオープンソースのライブラリである。

[0036] ベースポリマーのカルボン酸の数は、0.272以上0.304以下であることが好ましく、0.273以上0.290以下であることがより好ましい。

[0037] 《オクタノール／水分配係数の対数値 ($\log P$)》

ドライフィルムレジストでは、現像する際に水溶液を使う。そのため、ベースポリマーの親水性が解像性又は密着性に影響を及ぼすと考えられる。また、親水性を示す指標は、ポリマー間の相互作用の指標にもなり得ると考えられる。

[0038] ベースポリマーの $\log P$ は、ベースポリマーを構成する各モノマーの $\log P$ をモル比で重み付け加算することで算出される。具体的には、ベースポリマーの $\log P$ は、上記の式(1)により算出することができる。

[0039] ただし、式(1)において、 X はベースポリマーの $\log P$ であり、 x_i は*i*番目のモノマーの $\log P$ であり、 n_i は*i*番目のモノマーのモル比である。

[0040] なお、モノマーの $\log P$ は、例えば、COSMOtherm (登録商標

)を用いて計算することができる。COSMOthermは、COSMO-RS法を用いた熱力学物性推算ソフトウェアである。COSMO-RS法は、量子化学計算で得られた分子の表面電荷に基づいて化学物質の物性を推算する手法である。

[0041] ベースポリマーのlog Pは、2.16以上2.79以下であることが好ましく、2.29以上2.78以下であることがより好ましい。

[0042] ≪ガラス転移温度（ポリマーTg）≫

ポリマーTgは、ポリマー鎖の運動性を表す。そのため、ベースポリマーのポリマーTgが解像性又は密着性に影響を及ぼすと考えられる。

[0043] ベースポリマーのポリマーTgは、ベースポリマーを構成する各モノマーで構成されるホモポリマーのポリマーTgを用いてFox式により算出する。具体的には、ベースポリマーのポリマーTgは、式(2)により算出することができる。

[0044] [数2]

$$\frac{1}{TG} = \sum_i \frac{n_i}{TG_i} \quad \dots(2)$$

[0045] ただし、TGは共重合ポリマー（すなわち、ベースポリマー）のポリマーTgであり、TG_iはi番目のモノマーで構成されるホモポリマーのポリマーTgであり、n_iはi番目のモノマーのモル比である。

[0046] なお、ホモポリマーのポリマーTgは、文献値を用いてもよいし、学習済みの機械学習モデルを用いた予測値を用いてもよい。

[0047] ベースポリマーのポリマーTgは、354 K以上382 K以下であることが好ましく、365 K以上382 K以下であることがより好ましい。

[0048] <抽出方法>

本実施形態における感光性樹脂組成物は、所定の生成条件に従って生成した多数の候補組成から、解像3x/x及び16μmピッチ密着がいずれも目

標値を満たす候補組成を抽出したものである。本実施形態では、解像 $3 \times / \times$ 及び $16 \mu\text{m}$ ピッチ密着は、学習済みの機械学習モデルを用いて予測される。機械学習モデル及び機械学習モデルを用いた予測方法については後述する。

[0049] 本実施形態では、生成条件を以下のように定める。

- ・ アクリル酸の配合量は、 18 重量%以上 26 重量%以下の範囲において、 1 重量%間隔で生成する。すなわち、アクリル酸の配合量の選択肢として、 18 重量%、 19 重量%、 20 重量%、 \dots 26 重量%を生成する。
- ・ スチレンの配合量は、 60 重量%以上 80 重量%以下の範囲において、 2 重量%間隔で生成する。すなわち、スチレンの配合量の選択肢として、 60 重量%、 62 重量%、 64 重量%、 \dots 80 重量%を生成する。
- ・ 各モノマーの配合量の総和は 100 重量%とする。すなわち、第三成分の配合量は、 $(100 - (\text{アクリル酸の配合量} + \text{スチレンの配合量}))$ [重量%] とする。
- ・ 第三成分は、予め準備したモノマーの選択肢から選択する。例えば、 200 種類程度のモノマーを選択肢に含めてもよい。

[0050] 候補組成は、以下のようにして生成する。まず、アクリル酸の配合量の選択肢とスチレンの配合量の選択肢とのすべての組み合わせを生成する。次に、配合量の組み合わせそれぞれについて、第三成分の配合量を計算する。そして、配合量の組み合わせそれぞれについて、モノマーの選択肢すべてを第三成分として組み合わせる。これにより、すべての候補組成が生成される。

[0051] ≪実施例1≫

実施例1では、 $16 \mu\text{m}$ ピッチ密着が 4.7 未満、かつ、解像 $3 \times / \times$ が 7 未満を目標特性とし、学習済みの機械学習モデルを用いて予測した予測値が目標特性を満たす候補組成を抽出した。

[0052] 従来から知られている感光性樹脂組成物に含まれるベースポリマーでは、 $16 \mu\text{m}$ ピッチ密着の最良値が 4.7 であった。そのため、 $16 \mu\text{m}$ ピッチ密着の目標値は、 4.7 に設定した。また、従来のベースポリマーでは、解

像 $3 \times / \times$ の最良値は 5.5 であったが、ドライフィルムレジストに求められる性能として、解像 $3 \times / \times$ が 7 であれば十分に高い基準である。

[0053] 図 1 は、実施例 1 の抽出結果を示す図である。図 1 に示されるように、上記の目標特性を満たす候補組成は、各パラメータが以下の範囲に含まれている。

- ・ HSP_{δD} は、16.99 以上 17.35 以下である。
- ・ カルボン酸の数は、0.272 以上 0.304 以下である。
- ・ log P は、2.16 以上 2.79 以下である。
- ・ ポリマー T_g は、354 K 以上 382 K 以下である。

[0054] また、実施例 1 で抽出された候補組成は、第三成分の配合量が 13 重量% 以上 22 重量% 以下である。

[0055] さらに、実施例 1 で抽出された候補組成は、第三成分が、以下のいずれかである。

- ・ 3-フェノキシベンジルアクリレート (3-phenoxybenzyl acrylate)
- ・ 3-{2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3, 5-ジオキサ-2, 4, 6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパー 2-エン酸プロピル (3-{2, 2, 6, 6-tetramethyl-4-[(trimethylsilyl)oxy]-3, 5-dioxa-2, 4, 6-trisilaheptan-4-yl}propyl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ 2-メチルプロパー 2-エン酸オクタデシル (octadecyl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ 2-メチル-2-プロペン酸 4-ヒドロキシフェニル (4-hydroxyphenyl 2-methyl-2-propenoate (PQMA))
- ・ 2-メチルプロパー 2-エン酸オクタデシル (octadecyl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ メタクリル酸ジシクロペンタニル (Dicyclopentanyl methacrylate (TCDMA))
- ・ プロパー 2-エン酸デシル (decyl prop-2-enoate)

- ・ アクリル酸ドデシル (Dodecyl acrylate (LA))
- ・ 2-プロペン酸イソオクタデシルエステル (2-Propenoic acid isoctadecyl ester (ISTA))

《実施例2》

実施例2では、16 μmピッチ密着が4.7未満、かつ、解像3x/xが6未満を目標特性とし、学習済みの機械学習モデルを用いて予測した予測値が目標特性を満たす候補組成を抽出した。すなわち、実施例2では、実施例1よりも高い解像性を示す候補組成を抽出した。

[0056] 図2は、実施例2の抽出結果を示す図である。図2に示されるように、上記の目標特性を満たす候補組成は、各パラメータが以下の範囲に含まれている。

- ・ HSP_{δD}は、17.04以上17.19以下である。
- ・ カルボン酸の数は、0.273以上0.290以下である。
- ・ log Pは、2.29以上2.78以下である。
- ・ ポリマーT_gは、365 K以上382 K以下である。

[0057] また、実施例2で抽出された候補組成は、第三成分の配合量が13重量%以上22重量%以下である。

[0058] さらに、実施例2で抽出された候補組成は、第三成分が、以下のいずれかである。

- ・ 10-ヒドロキシ-2,2,4-トリメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3,8-ジオキサ-2,4-ジシラウンデカン-11-イル 2-メチルプロパー-2-エン酸 (10-hydroxy-2,2,4-trimethyl-4-[(trimethylsilyl)oxy]-3,8-dioxa-2,4-disilaundecan-11-yl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ プロパー-2-エン酸ヘキサデシル (hexadecyl prop-2-enoate)
- ・ ドコシルプロパー-2-エン酸 (docosyl prop-2-enoate)
- ・ 2-メチルプロパー-2-エン酸 1-エチルシクロヘキシル (1-ethylcyclohexyl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ ドコシルプロパー-2-エン酸 (docosyl prop-2-enoate)

- ・ プロパー 2-エン酸テトラデシル (tetradecyl prop-2-enoate)
- ・ 2-メチルプロパー 2-エン酸アダマンタン-1-イル (adamantan-1-yl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ 3-{2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル) オキシ]-3, 5-ジオキサ-2, 4, 6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパー 2-エン酸プロピル (3-{2, 2, 6, 6-tetramethyl-4-[(trimethylsilyl)oxy]-3, 5-dioxa-2, 4, 6-trisilaheptan-4-yl}propyl 2-methylprop-2-enoate)
- ・ 2-プロペン酸イソオクタデシルエステル (2-Propenoic acid isoctadecyl ester (ISTA))

[フィルム状樹脂]

本実施形態におけるフィルム状樹脂について、図3を参照しながら説明する。図3は、フィルム状樹脂の一例を示す模式図である。

[0059] 図3に示されるように、本実施形態におけるフィルム状樹脂は、感光性樹脂組成物をフィルム状に成形したものである。すなわち、感光性樹脂組成物をフィルム状に成形することで、フィルム状樹脂1を得ることができる。

[0060] [樹脂シート]

本実施形態における樹脂シートについて、図4を参照しながら説明する。図4は、樹脂シートの一例を示す模式図である。

[0061] 図4に示されるように、本実施形態における樹脂シート2は、基材3及び樹脂層4を含む。樹脂層4は、感光性樹脂組成物を基材3上に塗布し、乾燥させることによってフィルム状に成形したものである。すなわち、樹脂層4は、感光性樹脂組成物をフィルム状に成形したフィルム状樹脂1からなる。

[0062] [組成提案システム]

本実施形態における感光性樹脂組成物に含有されるベースポリマーの組成は、例えば、組成提案システムにより提案されたものである。本実施形態における組成提案システムは、感光性樹脂組成物に含有されるベースポリマーの組成を提案する情報処理システムである。

[0063] 組成提案システムは、ベースポリマーの候補組成に基づいてベースポリマーの物性値を予測し、その予測結果が目標特性を満たす候補組成を提案する。本実施形態では、ベースポリマーの物性値は、解像性に関する物性値及び密着性に関する物性値を含む。したがって、組成提案システムは、高解像かつ高密着を両立するベースポリマーの候補組成を提案することができる。

[0064] <全体構成>

本実施形態における組成提案システムの全体構成について、図5を参照しながら説明する。図5は、本実施形態における組成提案システムの全体構成の一例を示すブロック図である。

[0065] 図5に示されているように、本実施形態における組成提案システム1000は、提案装置10及び端末装置20を含む。提案装置10及び端末装置20は、LAN (Local Area Network) 又はインターネット等の通信ネットワークN1を介してデータ通信可能に接続されている。

[0066] 提案装置10は、感光性樹脂組成物に含有されるベースポリマーの組成を提案するパーソナルコンピュータ、ワークステーション又はサーバ等の情報処理装置である。提案装置10は、端末装置20から提案条件を受信する。提案条件は、候補組成の生成条件及び候補組成を満たすべき目標特性を含む。提案装置10は、生成条件に基づいて候補組成を生成し、各候補組成についてベースポリマーの物性値を予測する。提案装置10は、目標特性を満たす候補組成を示す提案情報を生成し、端末装置20に送信する。

[0067] 端末装置20は、組成提案システム1000のユーザが操作するパーソナルコンピュータ、スマートフォン又はタブレット端末等の情報処理端末である。端末装置20は、ユーザの操作に応じて、生成条件及び目標特性を示す提案条件を提案装置10に送信する。端末装置20は、提案装置10から受信した提案情報をユーザに対して出力する。

[0068] 組成提案システム1000のユーザは、端末装置20に出力された提案情報を参照し、その提案情報に示された候補組成に従ってベースポリマーを作成することができる。また、ユーザは、候補組成に従って作成したベースポ

リマーを用いて感光性樹脂組成物を製造することができる。提案情報に示された候補組成は高解像及び高密着を両立する感光性樹脂組成物を実現するベースポリマーであるため、ユーザは高解像及び高密着を両立する感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シートを製造することができる。

[0069] なお、図5に示した組成提案システム1000の全体構成は一例であって、用途や目的に応じて様々なシステム構成例があり得る。例えば、提案装置10及び端末装置20の1つ以上が、組成提案システム1000に複数台含まれていてもよい。例えば、提案装置10は、複数台のコンピュータにより実現してもよいし、クラウドコンピューティングのサービスとして実現してもよい。図5に示す提案装置10、端末装置20のような装置の区分は一例である。

[0070] <ハードウェア構成>

本実施形態における組成提案システム1000のハードウェア構成について、図6を参照しながら説明する。

[0071] ≪コンピュータのハードウェア構成≫

本実施形態における提案装置10及び端末装置20は、例えばコンピュータにより実現される。図6は、本実施形態におけるコンピュータ500のハードウェア構成の一例を示すブロック図である。

[0072] 図6に示されているように、コンピュータ500は、CPU (Central Processing Unit) 501、ROM (Read Only Memory) 502、RAM (Random Access Memory) 503、HDD (Hard Disk Drive) 504、入力装置505、表示装置506、通信I/F (Interface) 507及び外部I/F 508を有する。CPU 501、ROM 502及びRAM 503は、いわゆるコンピュータを形成する。コンピュータ500の各ハードウェアは、バスライン509を介して相互に接続されている。なお、入力装置505及び表示装置506は外部I/F 508に接続して利用する形態であってもよい。

[0073] CPU 501は、ROM 502又はHDD 504等の記憶装置からプログラムやデータをRAM 503上に読み出し、処理を実行することで、コンピ

ュータ500全体の制御や機能を実現する演算装置である。

[0074] ROM502は、電源を切ってもプログラムやデータを保持することができる不揮発性の半導体メモリ（記憶装置）の一例である。ROM502は、HDD504にインストールされている各種プログラムをCPU501が実行するために必要な各種プログラム、データ等を格納する主記憶装置として機能する。具体的には、ROM502には、コンピュータ500の起動時に実行されるBIOS（Basic Input/Output System）、EFI（Extensible Firmware Interface）等のブートプログラムや、OS（Operating System）設定、ネットワーク設定等のデータが格納されている。

[0075] RAM503は、電源を切るとプログラムやデータが消去される揮発性の半導体メモリ（記憶装置）の一例である。RAM503は、例えば、DRAM（Dynamic Random Access Memory）やSRAM（Static Random Access Memory）等である。RAM503は、HDD504にインストールされている各種プログラムがCPU501によって実行される際に展開される作業領域を提供する。

[0076] HDD504は、プログラムやデータを格納している不揮発性の記憶装置の一例である。HDD504に格納されるプログラムやデータには、コンピュータ500全体を制御する基本ソフトウェアであるOS、及びOS上において各種機能を提供するアプリケーション等がある。なお、コンピュータ500はHDD504に替えて、記憶媒体としてフラッシュメモリを用いる記憶装置（例えばSSD：Solid State Drive等）を利用するものであってもよい。

[0077] 入力装置505は、ユーザが各種信号を入力するために用いるタッチパネル、操作キーやボタン、キーボードやマウス、音声等の音データを入力するマイクロホン等である。

[0078] 表示装置506は、画面を表示する液晶や有機EL（Electro-Luminescence）等のディスプレイ、音声等の音データを出力するスピーカ等で構成されている。

[0079] 通信 I / F 5 0 7 は、通信ネットワークに接続し、コンピュータ 5 0 0 がデータ通信を行うためのインタフェースである。

[0080] 外部 I / F 5 0 8 は、外部装置とのインタフェースである。外部装置には、ドライブ装置 5 1 0 等がある。

[0081] ドライブ装置 5 1 0 は、記録媒体 5 1 1 をセットするためのデバイスである。ここでいう記録媒体 5 1 1 には、CD-ROM、フレキシブルディスク、光磁気ディスク等のように情報を光学的、電気的あるいは磁氣的に記録する媒体が含まれる。また、記録媒体 5 1 1 には、ROM、フラッシュメモリ等のように情報を電気的に記録する半導体メモリ等が含まれていてもよい。これにより、コンピュータ 5 0 0 は外部 I / F 5 0 8 を介して記録媒体 5 1 1 の読み取り及び／又は書き込みを行うことができる。

[0082] なお、HDD 5 0 4 にインストールされる各種プログラムは、例えば、配布された記録媒体 5 1 1 が外部 I / F 5 0 8 に接続されたドライブ装置 5 1 0 にセットされ、記録媒体 5 1 1 に記録された各種プログラムがドライブ装置 5 1 0 により読み出されることでインストールされる。あるいは、HDD 5 0 4 にインストールされる各種プログラムは、通信 I / F 5 0 7 を介して、通信ネットワークとは異なる他のネットワークよりダウンロードされることでインストールされてもよい。

[0083] <機能構成>

本実施形態における組成提案システムの機能構成について、図 7 乃至図 9 を参照しながら説明する。図 7 は、本実施形態における組成提案システムの機能構成の一例を示すブロック図である。

[0084] <<提案装置>>

図 7 に示されているように、本実施形態における提案装置 1 0 は、実験データ記憶部 1 0 0、記述子計算部 1 0 1、記述子記憶部 1 0 2、教師データ生成部 1 0 3、モデル学習部 1 0 4、モデル記憶部 1 0 5、提案条件取得部 1 0 6、候補組成生成部 1 0 7、説明変数計算部 1 0 8、物性値予測部 1 0 9 及び提案情報生成部 1 1 0 を備える。

- [0085] 実験データ記憶部100、記述子記憶部102、モデル記憶部105は、図6に示されているHDD504によって実現される。
- [0086] 記述子計算部101、教師データ生成部103、モデル学習部104、提案条件取得部106、候補組成生成部107、説明変数計算部108、物性値予測部109及び提案情報生成部110は、図6に示されているHDD504からRAM503上に展開されたプログラムがCPU501に実行させる処理によって実現される。
- [0087] 実験データ記憶部100には、様々なドライフィルムレジストに関する実験結果を示す実験データが記憶されている。実験データは、実験に用いたドライフィルムレジストを示す情報に、そのドライフィルムレジストに含有されるベースポリマーの組成（実験組成）、及び実験で観測した物性値（実験値）が関連付けられたデータである。
- [0088] 図8は、本実施形態における実験データの一例を示す図である。図8に示されているように、実験データは、データ項目として、実験に用いたドライフィルムレジストを示す情報（フィルム）、実験組成及び実験値などを有する。実験組成は、アクリル酸の配合量、スチレンの配合量、第三成分の配合量、及び第三成分であるモノマーを識別する識別情報を含む。実験値は、16 μ mピッチ密着及び解像3x/xを含む。
- [0089] 識別情報は、例えば、化合物名、構造式、SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) 情報、ECFP (Extended Connectivity Circular Fingerprints) 情報等である。識別情報は、これらに限定されず、モノマーを識別可能なあらゆる情報を用いることができる。
- [0090] 図7に戻って説明する。記述子計算部101は、ベースポリマーを構成し得るモノマーに関する記述子を計算する。本実施形態では、記述子計算部101は、記述子を計算するモノマーのリストを予め与えられており、HDD504等の記憶部に記憶されているものとする。モノマーのリストには、アクリル酸、スチレン及び第三成分が含まれる。モノマーに関する記述子は、各モノマーに関するHSP__ δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマー

Tgを含む。記述子計算部101は、モノマーを識別する識別情報に、モノマーに関する記述子を関連付けた記述子データを生成する。

[0091] 記述子記憶部102には、記述子計算部101により生成された記述子データが記憶される。

[0092] 図9は、本実施形態における記述子データの一例を示す図である。図9に示されているように、記述子データは、データ項目として、モノマーを識別する識別情報、HSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを有する。記述子データは、その他の記述子を格納するデータ項目を有してもよい。

[0093] 図7に戻って説明する。教師データ生成部103は、予測モデルを学習するための教師データを生成する。予測モデルは、ベースポリマーの物性値を予測する機械学習モデルである。

[0094] 具体的には、教師データ生成部103は、実験データ記憶部100から読み出した実験データに含まれる実験組成に基づいて、実験組成に関する説明変数を計算する。実験組成に関する説明変数は、HSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを含む。教師データ生成部103は、記述子記憶部102から読み出したモノマーのHSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを、実験組成に含まれる各モノマーの配合量に基づいて重み付け加算することで、実験組成に関するHSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを計算する。

[0095] 次に、教師データ生成部103は、実験データに含まれる実験値を取得する。具体的には、教師データ生成部103は、実験データに含まれる16 μ mピッチ密着及び解像3x/xを取得する。そして、教師データ生成部103は、実験組成に関する説明変数に、目的変数の正解値として実験値を組み合わせることで、実験組成に関する教師データを生成する。

[0096] モデル学習部104は、教師データ生成部103により生成された教師データに基づいて、予測モデルを学習する。予測モデルは、解像性を示す物性値（すなわち、解像3x/x）を予測する予測モデル（以下、「解像予測モ

デル」と呼ぶ)、及び密着性を示す物性値(すなわち、 $16\mu\text{m}$ ピッチ密着)を予測する予測モデル(以下、「密着予測モデル」と呼ぶ)を含む。

[0097] モデル記憶部105には、モデル学習部104により生成された学習済みの予測モデルが記憶される。すなわち、モデル記憶部105には、学習済みの解像予測モデル及び学習済みの密着予測モデルが記憶される。

[0098] 提案条件取得部106は、ベースポリマーの組成に関する条件を示す提案条件を取得する。提案条件取得部106は、端末装置20から提案条件を示す情報を受信することで、提案条件を取得してもよい。提案条件取得部106は、入力装置505から入力された提案条件を受け付けることで、提案条件を取得してもよい。提案条件取得部106は、HDD504等の記憶部に予め記憶された提案条件を読み出すことで、提案条件を取得してもよい。

[0099] 提案条件は、候補組成の生成条件、及び候補組成が満たすべき目標特性を含む。生成条件は、アクリル酸の配合量に関する条件、スチレンの配合量に関する条件、第三成分として用いるモノマーのリストを含む。目標特性は、解像性に関する物性値に対する目標値、及び密着性を示す物性値に対する目標値を含む。提案条件の全部又は一部は、予め定めて記憶部に記憶されていてもよい。

[0100] 候補組成生成部107は、提案条件取得部106により取得された提案条件に含まれる生成条件に基づいて、候補組成を生成する。具体的には、候補組成生成部107は、生成条件に従って、アクリル酸の配合量の選択肢、及びスチレンの配合量の選択肢を生成する。次に、候補組成生成部107は、アクリル酸の配合量とスチレンの配合量とを組み合わせ、第三成分の配合量を計算する。そして、候補組成生成部107は、配合量の組み合わせそれぞれに、リストに含まれるすべてのモノマーを第三成分として組み合わせる。これにより、すべての候補組成が生成される。

[0101] 説明変数計算部108は、候補組成生成部107により生成された候補組成に基づいて、その候補組成に関する説明変数を計算する。説明変数計算部108が説明変数を計算する方法は、教師データ生成部103が説明変数を

計算した方法と同様である。

[0102] 物性値予測部109は、説明変数計算部108により計算された説明変数を、モデル記憶部105から読み出した予測モデルに入力することで、候補組成に関する物性値を予測する。具体的には、物性値予測部109は、候補組成に関する説明変数を学習済みの解像予測モデルに入力することで、解像性に関する物性値を予測する。次に、物性値予測部109は、候補組成に関する説明変数を学習済みの密着予測モデルに入力することで、密着性に関する物性値を予測する。

[0103] 提案情報生成部110は、物性値予測部109により予測された物性値に基づいて、提案情報を生成する。提案情報生成部110は、提案情報を端末装置20に送信する。

[0104] 提案情報は、物性値予測部109により予測された物性値が、提案条件に含まれる目標特性を満たす候補組成に関する情報を含む。提案情報は、物性値予測部109により予測された物性値が、提案条件に含まれる目標特性を満たさない候補組成に関する情報を含んでもよい。

[0105] 例えば、提案情報生成部110は、物性値が目標特性を満たす候補組成を抽出し、抽出された候補組成を所定の規則（例えば、物性値の昇順又は降順、特定のモノマーの配合量の昇順又は降順など）で整列した提案情報を生成してもよい。また、例えば、提案情報生成部110は、すべての候補組成を物性値が良好な順番で整列した提案情報を生成してもよい。

[0106] <<端末装置>>

図7に示されているように、本実施形態における端末装置20は、提案条件入力部201及び提案情報表示部202を備える。

[0107] 提案条件入力部201及び提案情報表示部202は、図6に示されているHDD504からRAM503上に展開されたプログラムがCPU501に実行させる処理によって実現される。

[0108] 提案条件入力部201は、ユーザの操作に応じて、提案条件の入力を受け付ける。提案条件入力部201は、受け付けた提案条件を示す情報を提案装

置 1 0 に送信する。

[0109] 提案情報表示部 2 0 2 は、提案装置 1 0 から提案情報を受信する。提案情報表示部 2 0 2 は、受信した提案情報を表示装置 5 0 6 に出力する。

[0110] <予測モデル>

本実施形態における予測モデルについて、図 1 0 乃至図 1 3 を参照しながらより詳細に説明する。

[0111] 図 1 0 は、密着予測モデルの一例を示すブロック図である。図 1 0 に示されるように、密着予測モデル 3 0 1 は、カルボン酸の数、HSP δ D 及び $\log P$ を説明変数とし、16 μ m ピッチ密着を目的変数とする機械学習モデルである。

[0112] 密着予測モデル 3 0 1 は、一例として、ガウス過程回帰に基づく機械学習モデルである。カーネル関数は、scikit-learn で実装する場合、一例として、`ConstantKernel() * RBF(np.ones(3)) + WhiteKernel()` を用いることができる。なお、scikit-learn は、オープンソースの機械学習ライブラリである。

[0113] 図 1 1 は、密着予測モデルの予測精度の一例を示すグラフである。図 1 1 は、学習済みの密着予測モデル 3 0 1 に対して、交差検証により予測精度を評価した結果である。ここでは、評価指標として決定係数 (R^2) 及び二乗平均平方根誤差 (RMSE ; Root Mean Squared Error) を用いた。図 1 1 に示されているように、 R^2 は 0.95 であり、RMSE は 0.72 であった。図 1 1 には、密着予測モデル 3 0 1 によれば、高精度に 16 μ m ピッチ密着を予測できることが示されている。

[0114] 図 1 2 は、解像予測モデルの一例を示すブロック図である。図 1 2 に示されるように、解像予測モデル 3 0 2 は、カルボン酸の数、HSP δ D 及びポリマー T_g を説明変数とし、解像 $3 \times / \times$ を目的変数とする機械学習モデルである。

[0115] 解像予測モデル 3 0 2 は、一例として、ガウス過程回帰に基づく機械学習モデルである。カーネル関数は、scikit-learn で実装する場合、一例として

、ConstantKernel() * RBF() + WhiteKernel()を用いることができる。

[0116] 図13は、解像予測モデルの予測精度の一例を示すグラフである。図13は、学習済みの解像予測モデル302に対して、交差検証により予測精度を評価した結果である。ここでは、図11と同様に、評価指標としてR²及びRMSEを用いた。図13に示されているように、R²は0.83であり、RMSEは1.03であった。図13には、解像予測モデル302によれば、高精度に解像3x/xを予測できることが示されている。

[0117] <処理手順>

本実施形態における組成提案システム1000が実行する提案方法の処理手順について、図14乃至図16を参照しながら説明する。本実施形態における提案方法は、記述子計算処理（図14参照）、モデル学習処理（図15参照）及び組成提案処理（図16参照）を含む。

[0118] <<記述子計算処理>>

図14は、本実施形態における記述子計算処理の一例を示すフローチャートである。記述子計算処理は、モノマーに関する記述子データを生成する処理である。

[0119] ステップS1において、提案装置10の記述子計算部101は、記憶部からモノマーのリストを読み出す。次に、記述子計算部101は、読み出したリストから記述子を計算するモノマーを取得する。

[0120] ステップS2において、提案装置10の記述子計算部101は、ステップS1で取得したモノマーに関する記述子を計算する。具体的には、記述子計算部101は、当該モノマーに関するHSP_{δD}、カルボン酸の数、logP及びポリマーT_gを計算する。

[0121] ステップS3において、提案装置10の記述子計算部101は、ステップS2で計算した記述子に、モノマーを識別する識別情報を関連付ける。これにより、記述子データが生成される。次に、記述子計算部101は、記述子データを記述子記憶部102に記憶する。

[0122] ステップS2からステップS3までの処理は、ステップS1で読み出した

リストに含まれるすべてのポリマーについて繰り返し実行される。

[0123] 《モデル学習処理》

図15は、本実施形態におけるモデル学習処理の一例を示すフローチャートである。モデル学習処理は、予測モデルを学習する処理である。

[0124] ステップS11において、提案装置10の教師データ生成部103は、実験データ記憶部100から実験データを読み出す。次に、教師データ生成部103は、実験データから学習に用いる実験組成を選択する。

[0125] ステップS12において、提案装置10の教師データ生成部103は、ステップS11で選択した実験組成に含まれる各モノマーに関する記述子データを、記述子記憶部102から読み出す。次に、教師データ生成部103は、読み出した記述子データからHSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを取得する。

[0126] ステップS13において、提案装置10の教師データ生成部103は、ステップS12で取得した記述子に基づいて、実験組成に関する説明変数を計算する。具体的には、教師データ生成部103は、モノマーに関するHSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgを、実験組成に含まれる各モノマーの配合量に基づいて重み付け加算する。これにより、実験組成に関するHSP δ D、カルボン酸の数、logP及びポリマーTgが計算される。

[0127] そして、教師データ生成部103は、ステップS11で選択した実験組成に対応する実験値を取得する。具体的には、教師データ生成部103は、実験データに含まれる16 μ mピッチ密着及び解像3x/xを取得する。次に、教師データ生成部103は、実験組成に関する説明変数に、目的変数の正解値として実験値を組み合わせる。これにより、実験組成に関する教師データが生成される。教師データ生成部103は、実験組成に関する教師データをモデル学習部104に送る。

[0128] ステップS14において、提案装置10のモデル学習部104は、教師データ生成部103から実験組成に関する教師データを受け取る。次に、モデ

ル学習部104は、教師データに含まれる説明変数を、学習中の予測モデルに入力することで、実験組成に関する物性値を予測する。

[0129] 具体的には、まず、モデル学習部104は、教師データに含まれるカルボン酸の数、HSP δ D及びlogPを、学習中の密着予測モデルに入力する。密着予測モデルは、入力されたカルボン酸の数、HSP δ D及びlogPに基づいて、16 μ mピッチ密着を予測し、その予測値を出力する。

[0130] 次に、モデル学習部104は、教師データに含まれるカルボン酸の数、HSP δ D及びポリマーTgを、学習中の解像予測モデルに入力する。解像予測モデルは、入力されたカルボン酸の数、HSP δ D及びポリマーTgに基づいて、解像3x/xを予測し、その予測値を出力する。

[0131] ステップS15において、提案装置10のモデル学習部104は、ステップS14で予測した予測値と教師データに含まれる正解値との誤差を計算する。次に、モデル学習部104は、予測値と正解値との誤差が最小化するように、予測モデルのパラメータを更新する。

[0132] 具体的には、モデル学習部104は、ステップS14で密着予測モデルから出力された16 μ mピッチ密着の予測値と教師データに含まれる16 μ mピッチ密着の正解値との誤差を計算し、その誤差が最小化するように密着予測モデルのパラメータを更新する。また、モデル学習部104は、ステップS14で解像予測モデルから出力された解像3x/xの予測値と教師データに含まれる解像3x/xの正解値との誤差を計算し、その誤差が最小化するように解像予測モデルのパラメータを更新する。

[0133] ステップS16において、提案装置10のモデル学習部104は、学習が完了したか否かを判定する。学習が完了したか否かは、ステップS14で計算した誤差が収束したか否か、又は所定の繰り返し回数を超過したか否か等により判定すればよい。学習が完了していない場合（NO）、モデル学習部104はステップS15に処理を戻す。学習が完了していない場合（NO）、モデル学習部104はステップS11に処理を戻して、実験データをさらに取得してもよい。この場合、教師データ生成部103が異なる実験組成を

選択し、ステップS 15からS 16までの処理を再度実行する。学習が完了した場合（YES）、モデル学習部104はモデル学習処理を終了する。

[0134] <<組成提案処理>>

図16は、本実施形態における組成提案処理の一例を示すフローチャートである。組成提案処理は、学習済みの予測モデルに基づいて目標特性を満たす候補組成を提案する処理である。

[0135] ステップS 21において、端末装置20の提案条件入力部201は、ユーザの操作に応じて、提案条件の入力を受け付ける。提案条件は、候補組成の生成条件、及び候補組成が満たすべき目標特性を含む。提案条件の全部又は一部は、予め定められていてもよい。全部の提案条件が予め定められている場合、ステップS 21の処理を実行しなくてもよい。

[0136] 提案条件入力部201は、提案条件を受け付けると、提案条件を示す情報を提案装置10に送信する。提案装置10では、提案条件取得部106が、端末装置20から提案条件を示す情報を受信する。

[0137] ステップS 22において、提案装置10の提案条件取得部106は、提案条件を示す情報に含まれる生成条件を取得し、候補組成生成部107に送る。また、提案条件取得部106は、提案条件を示す情報に含まれる目標特性を取得し、提案情報生成部110に送る。

[0138] ステップS 23において、提案装置10の候補組成生成部107は、提案条件取得部106から生成条件を受け取る。次に、候補組成生成部107は、生成条件に基づいて、候補組成を生成する。候補組成生成部107は、生成した候補組成を説明変数計算部108に送る。

[0139] ステップS 24において、提案装置10の説明変数計算部108は、候補組成生成部107から候補組成を受け取る。次に、説明変数計算部108は、候補組成に基づいて、その候補組成に関する説明変数を計算する。説明変数を計算する方法は、ステップS 13で、教師データ生成部103が説明変数を計算した方法と同様である。説明変数計算部108は、候補組成に関する説明変数を物性値予測部109に送る。

- [0140] ステップS25において、提案装置10の物性値予測部109は、説明変数計算部108から候補組成に関する説明変数を受け取る。次に、物性値予測部109は、モデル記憶部105から学習済みの密着予測モデル及び学習済みの解像予測モデルを読み出す。
- [0141] 続いて、物性値予測部109は、候補組成に関するカルボン酸の数、HSP δ D及びlogPを、学習済みの密着予測モデルに入力する。密着予測モデルは、入力されたカルボン酸の数、HSP δ D及びlogPに基づいて、16 μ mピッチ密着を予測し、その予測値を出力する。
- [0142] また、物性値予測部109は、候補組成に関するカルボン酸の数、HSP δ D及びポリマーTgを、学習済みの解像予測モデルに入力する。解像予測モデルは、入力されたカルボン酸の数、HSP δ D及びポリマーTgに基づいて、解像3x/xを予測し、その予測値を出力する。
- [0143] そして、物性値予測部109は、候補組成に関する物性値を提案情報生成部110に送る。具体的には、物性値予測部109は、密着予測モデルが出力した16 μ mピッチ密着の予測値、及び解像予測モデルが出力した解像3x/xの予測値を提案情報生成部110に送る。
- [0144] ステップS26において、提案装置10の提案情報生成部110は、提案条件取得部106から目標特性を受け取る。また、提案情報生成部110は、物性値予測部109から候補組成に関する物性値を受け取る。
- [0145] 次に、提案情報生成部110は、候補組成に関する物性値が目標特性を満たすか否かを判定する。具体的には、提案情報生成部110は、16 μ mピッチ密着の予測値が目標特性に含まれる16 μ mピッチ密着の目標値未満であるか否かを判定する。また、提案情報生成部110は、解像3x/xの予測値が目標特性に含まれる解像3x/xの目標値未満であるか否かを判定する。
- [0146] 提案情報生成部110は、16 μ mピッチ密着の予測値及び解像3x/xの予測値がいずれも目標値未満である場合、候補組成に関する物性値が目標特性を満たすと判定する。一方、提案情報生成部110は、16 μ mピッチ

密着の予測値又は解像 $3 \times / \times$ の予測値の少なくともいずれか一方が目標値以上である場合、候補組成に関する物性値が目標特性を満たさないと判定する。

[0147] 候補組成に関する物性値が目標特性を満たすと判定した場合（YES）、提案情報生成部 110 はステップ S27 に処理を進める。一方、候補組成に関する物性値が目標特性を満たさないと判定した場合（NO）、提案情報生成部 110 はステップ S27 をスキップする。

[0148] なお、提案情報に目標特性を満たさない候補組成を含める場合、ステップ S26 は実行しなくてもよい。

[0149] ステップ S27 において、提案装置 10 の提案情報生成部 110 は、物性値が目標特性を満たすと判定した候補組成に関する情報を、提案情報に追加する。提案情報は、候補組成及び物性値を含む。候補組成は、アクリル酸の配合量、スチレンの配合量、第三成分の配合量、及び第三成分であるモノマーを識別する識別情報を含む。物性値は、 $16 \mu\text{m}$ ピッチ密着の予測値及び解像 $3 \times / \times$ の予測値を含む。

[0150] ステップ S24 からステップ S27 までの処理は、ステップ S23 で生成された候補組成すべてについて、繰り返し実行される。

[0151] ステップ S28 において、提案装置 10 の提案情報生成部 110 は、提案情報を端末装置 20 に送信する。端末装置 20 では、提案情報表示部 202 が、提案装置 10 から提案情報を受信する。

[0152] ステップ S29 において、端末装置 20 の提案情報表示部 202 は、提案情報を表示装置 506 に表示する。ユーザは、端末装置 20 の表示装置 506 に表示された提案情報を参照し、その提案情報に示された候補組成に従って、感光性樹脂組成物に含有するベースポリマーを製造することができる。ユーザは、端末装置 20 の表示装置 506 に表示された提案情報を検討し、新たな提案条件を入力することで、より適切なベースポリマーの組成を探索することができる。

[0153] <実施形態の効果>

本実施形態における感光性樹脂組成物は、複数種類のモノマーから構成されるポリマーを含有し、モノマーに基づいて算出される所定の説明変数が所定の範囲に含まれる。所定の範囲は、解像性に関する物性値及び密着性に関する物性値を目的変数とする機械学習モデルの予測結果が所定の目標値を満たす組成に基づいて決定されている。したがって、本実施形態によれば、解像性及び密着性に優れた感光性樹脂組成物、フィルム状樹脂及び樹脂シートが提供される。

[0154] 本実施形態における提案装置10は、所定の生成条件に基づいて生成した候補組成について、学習済みの予測モデルに基づいて解像性に関する物性値及び密着性に関する物性値を予測し、それらの予測結果が所定の目標特性を満たす候補組成を提案する。したがって、本実施形態によれば、解像性及び密着性に優れた感光性樹脂組成物を実現するベースポリマーの組成を提案することができる。

[0155] 以上、本開示の実施形態について詳述したが、今回開示された実施形態は、すべての点において例示であって制限的なものではない。実施形態は、添付の請求の範囲及びその主旨を逸脱することなく、様々な形態で変形及び改良が可能である。上記複数の実施形態に記載された事項は、矛盾しない範囲で他の構成も取り得ることができ、また、矛盾しない範囲で組み合わせることができる。

[0156] 本願は、日本国特許庁に2023年6月26日に出願された日本国特許出願2023-104223号の優先権を主張するものであり、その全内容を参照することにより本願に援用する。

符号の説明

- [0157]
- 1 フィルム状樹脂
 - 2 樹脂シート
 - 3 基材
 - 4 樹脂層
- 10 提案装置

- 1 0 0 実験データ記憶部
- 1 0 1 記述子計算部
- 1 0 2 記述子記憶部
- 1 0 3 教師データ生成部
- 1 0 4 モデル学習部
- 1 0 5 モデル記憶部
- 1 0 6 提案条件取得部
- 1 0 7 候補組成生成部
- 1 0 8 説明変数計算部
- 1 0 9 物性値予測部
- 1 1 0 提案情報生成部
- 2 0 端末装置
- 2 0 1 提案条件入力部
- 2 0 2 提案情報表示部
- 1 0 0 0 組成提案システム

請求の範囲

- [請求項1] 複数種類のモノマーから構成されるポリマーを含有する感光性樹脂組成物であって、
- 前記モノマーに基づいて算出されるハンセンの溶解度パラメータの分散項が16.99以上17.35以下であり、
- 前記モノマーに基づいて算出される分子中のカルボン酸の数が0.272以上0.304以下であり、
- 前記モノマーに基づいて算出されるオクタノール／水分配係数の対数値が2.16以上2.79以下であり、
- 前記モノマーに基づいて算出されるガラス転移温度が354 K以上382 K以下である、
- 感光性樹脂組成物。
- [請求項2] 前記ハンセンの溶解度パラメータの分散項が17.04以上17.19以下であり、
- 前記カルボン酸の数が0.273以上0.290以下であり、
- 前記オクタノール／水分配係数の対数値が2.29以上2.78以下であり、
- 前記ガラス転移温度が365 K以上382 K以下である、
- 請求項1に記載の感光性樹脂組成物。
- [請求項3] 前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンを含む、
- 請求項1又は2に記載の感光性樹脂組成物。
- [請求項4] 前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンのいずれとも異なる第三成分を含み、
- 前記第三成分は、3-フェノキシベンジルアクリレート、3-{2, 2, 6, 6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3, 5-ジオキサ-2, 4, 6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパー2-エン酸プロピル、2-メチルプロパー2-エン酸オクタデシル、2-メチル-2-プロペン酸4-ヒドロキシフェニ

ル、2-メチルプロパー2-エン酸オクタデシル、メタクリル酸ジシクロペンタニル、プロパー2-エン酸デシル、アクリル酸ドデシル、又は2-プロペン酸イソオクタデシルエステルである、

請求項1に記載の感光性樹脂組成物。

[請求項5]

前記モノマーは、アクリル酸及びスチレンのいずれとも異なる第三成分を含み、

前記第三成分は、10-ヒドロキシ-2,2,4-トリメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3,8-ジオキサ-2,4-ジシラウンデカン-11-イル 2-メチルプロパー2-エン酸、プロパー2-エン酸ヘキサデシル、ドコシルプロパー2-エン酸、2-メチルプロパー2-エン酸 1-エチルシクロヘキシル、ドコシルプロパー2-エン酸、プロパー2-エン酸テトラデシル、2-メチルプロパー2-エン酸アダマンタン-1-イル、3-{2,2,6,6-テトラメチル-4-[(トリメチルシリル)オキシ]-3,5-ジオキサ-2,4,6-トリシラヘプタン-4-イル} 2-メチルプロパー2-エン酸プロピル、又は2-プロペン酸イソオクタデシルエステルである、

請求項2に記載の感光性樹脂組成物。

[請求項6]

前記ポリマーは、前記第三成分の配合量が、13重量%以上22重量%以下である、

請求項4又は5に記載の感光性樹脂組成物。

[請求項7]

請求項1から6のいずれかに記載の感光性樹脂組成物をフィルム上に形成することによって得られるフィルム状樹脂。

[請求項8]

基材と、前記基材上に形成された請求項1から6のいずれかに記載の感光性樹脂組成物からなる樹脂層と、を備える樹脂シート。

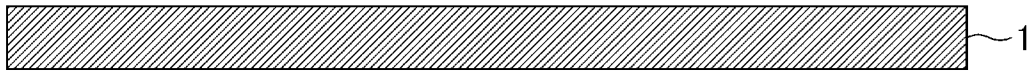
[図1]

第三成分のモノマー	アクリル酸 (wt%)	スチレン (wt%)	第三成分 (wt%)	HSP- δ D	LogP	カルボン酸の数	ポリマ Tg (K)	16 μ m 密着	解像 3x/x
3-phenoxybenzyl acrylate	18	60	22	17.35	2.40	0.274	367	4.4	7.0
3-[2,2,6,6-tetramethyl-4-[(trimethylsilyloxy)-3,5-dioxo-2,4,6-trisilaheptan-4-yl]propyl 2-methylprop-2-enoate	19	60	21	16.99	2.52	0.296	364	4.7	6.3
octadecyl 2-methylprop-2-enoate	18	60	22	17.13	2.79	0.280	364	3.8	6.0
4-hydroxyphenyl 2-methyl-2-propenoate (PQMA)	20	68	12	17.31	2.16	0.278	376	4.7	6.9
octadecyl 2-methylprop-2-enoate	20	60	20	17.1	2.65	0.304	365	4.6	6.3
3-phenoxybenzyl acrylate	19	68	13	17.3	2.33	0.272	371	4.7	6.8
Dicyclopentanyl methacrylate (TCDMA)	19	60	21	17.17	2.36	0.282	381	4.5	6.0
decyl prop-2-enoate	19	62	19	17.10	2.49	0.278	354	4.4	7.0
Dodecyl acrylate (LA)	19	60	21	17.08	2.56	0.284	358	4.1	6.6
2-Propenoic acid isooctadecyl ester (ISTA)	19	62	19	17.1	2.64	0.29	364	3.9	6.1

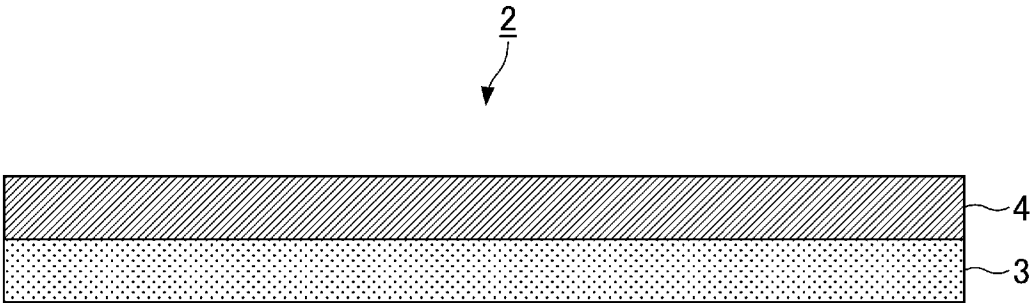
[図2]

第三成分のモノマー	アクリル酸 (wt%)	スチレン (wt%)	第三成分 (wt%)	HSP- δ D	LogP	カルボン酸の数	ポリマ Tg (K)	16 μ m 密着	解像 3x/x
10-hydroxy-2,2,4-trimethyl-4-[(trimethylsilyloxy)-3,8-dioxo-2,4-disilaundecan-11-yl] 2-methylprop-2-enoate	18	60	22	17.04	2.47	0.285	370	4.5	5.8
hexadecyl prop-2-enoate	19	68	13	17.19	2.51	0.275	371	4.5	5.9
docosyl prop-2-enoate	18	62	20	17.15	2.78	0.278	370	3.9	5.8
1-ethylcyclohexyl 2-methylprop-2-enoate	20	66	14	17.17	2.29	0.282	373	4.6	5.9
docosyl prop-2-enoate	19	62	19	17.14	2.71	0.290	370	3.8	5.9
tetradecyl prop-2-enoate	19	68	13	17.18	2.49	0.273	370	4.7	5.9
adamantan-1-yl 2-methylprop-2-enoate	19	60	21	17.15	2.36	0.282	382	4.5	5.9
3-[2,2,6,6-tetramethyl-4-[(trimethylsilyloxy)-3,5-dioxo-2,4,6-trisilaheptan-4-yl]propyl] 2-methylprop-2-enoate	18	64	18	17.07	2.53	0.275	365	4.6	5.9
2-Propenoic acid isooctadecyl ester (ISTA)	19	64	17	17.14	2.60	0.283	365	3.9	5.9

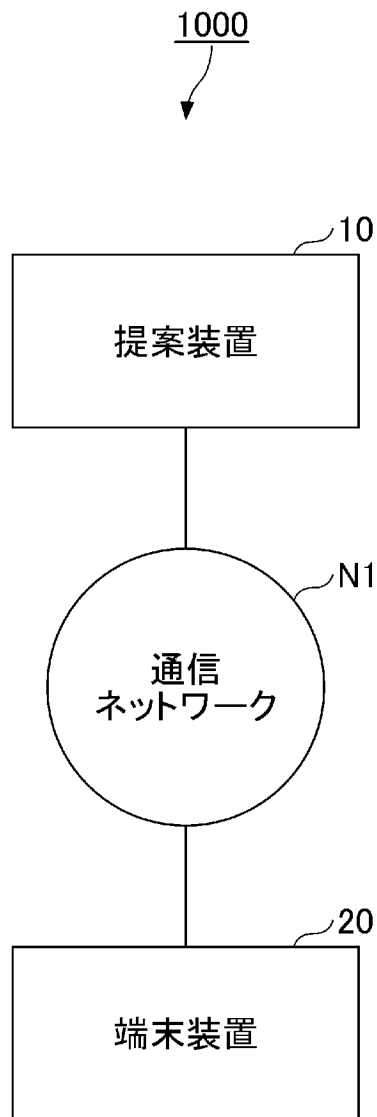
[図3]



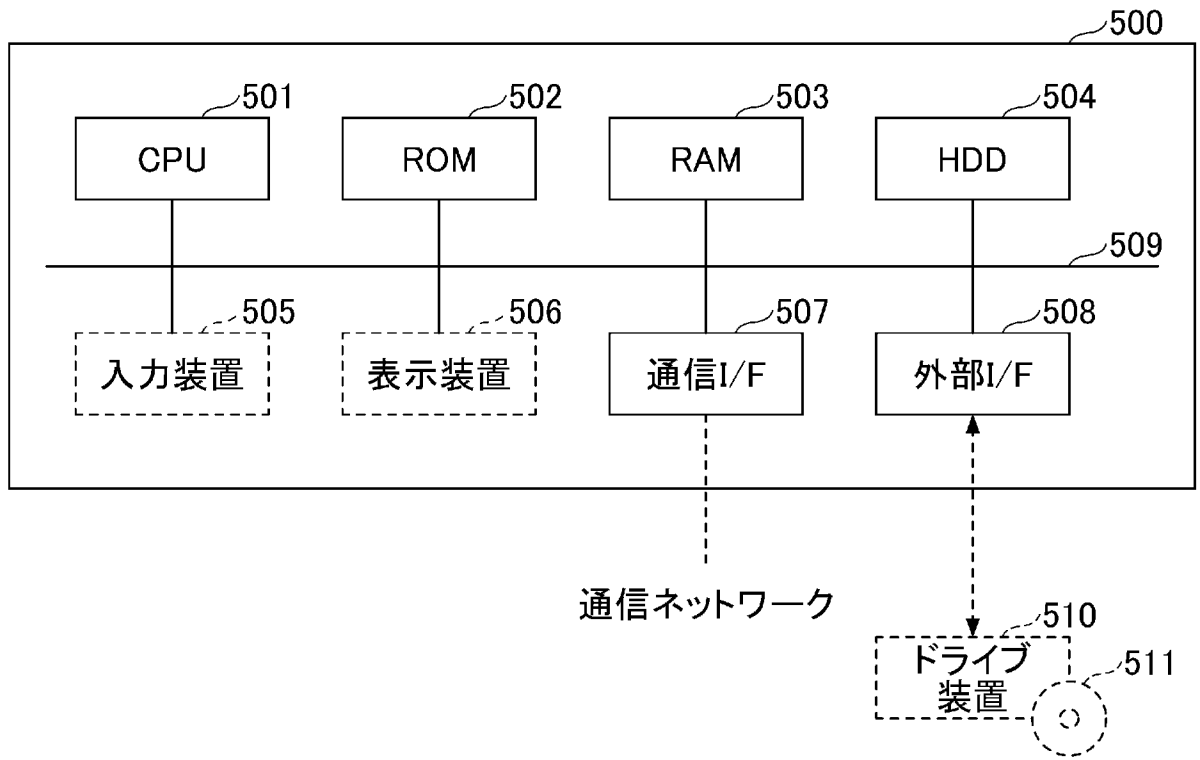
[図4]



[図5]



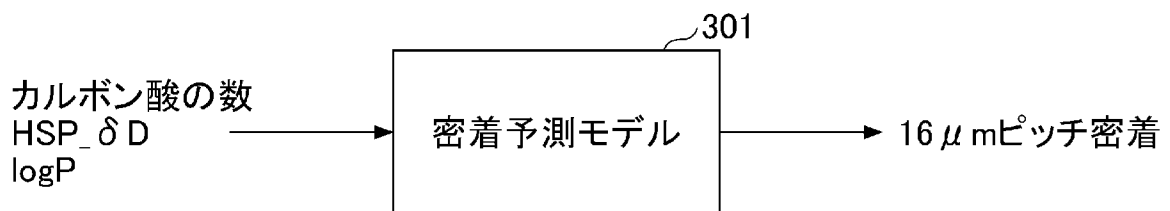
[図6]



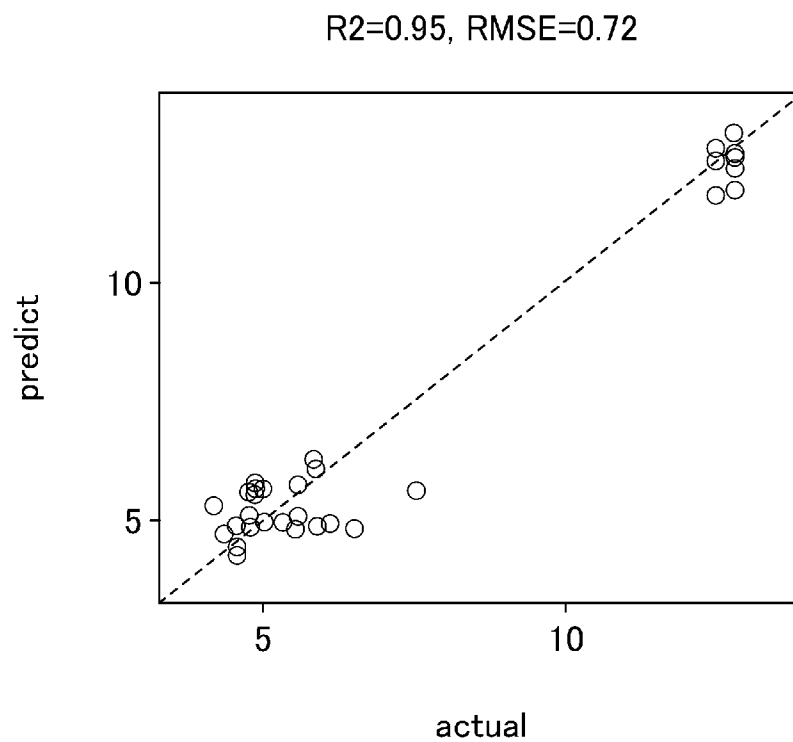
[図9]

モノマー	HSP_δD	カルボン酸 の数	logP	ポリマーTg (K)	...
モノマーA	16.80	0.280	2.00	370	...
モノマーB	17.00	0.290	2.40	380	...
モノマーC	17.20	0.260	2.20	350	...
...

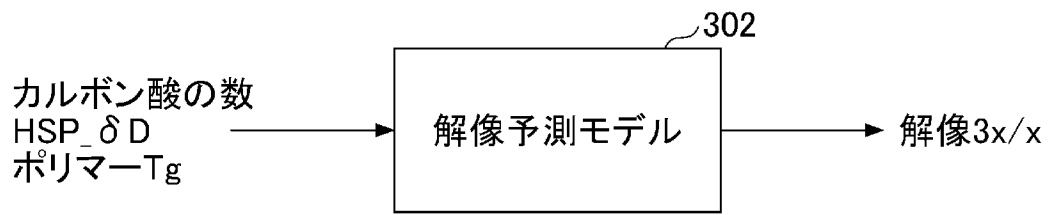
[図10]



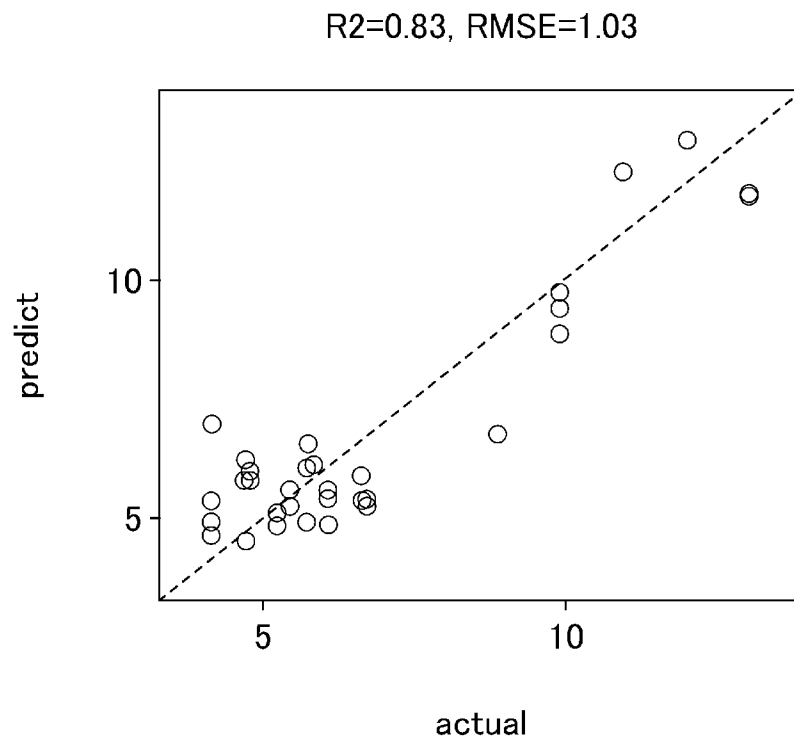
[図11]



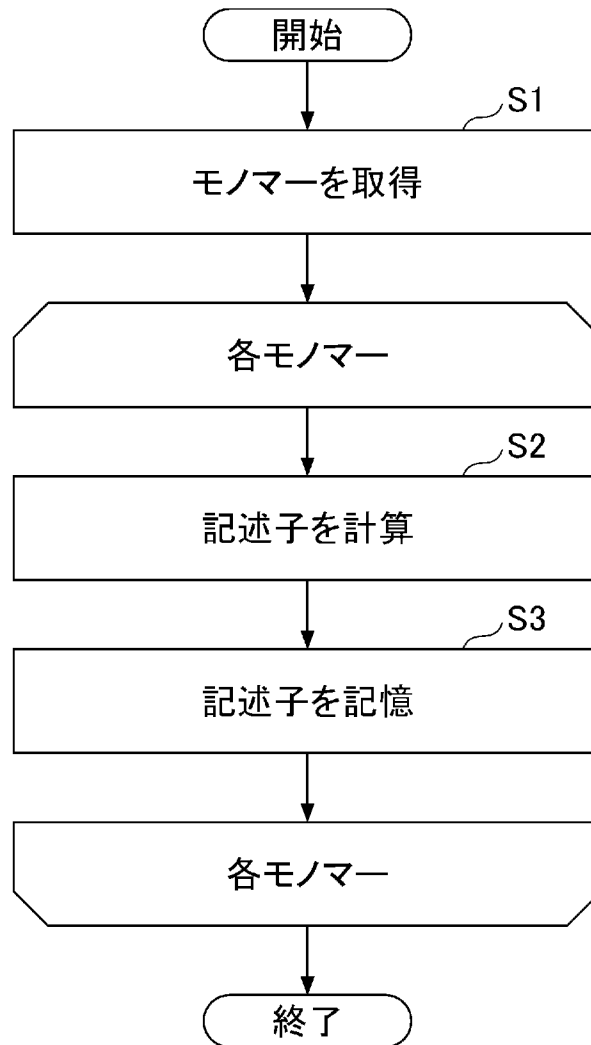
[図12]



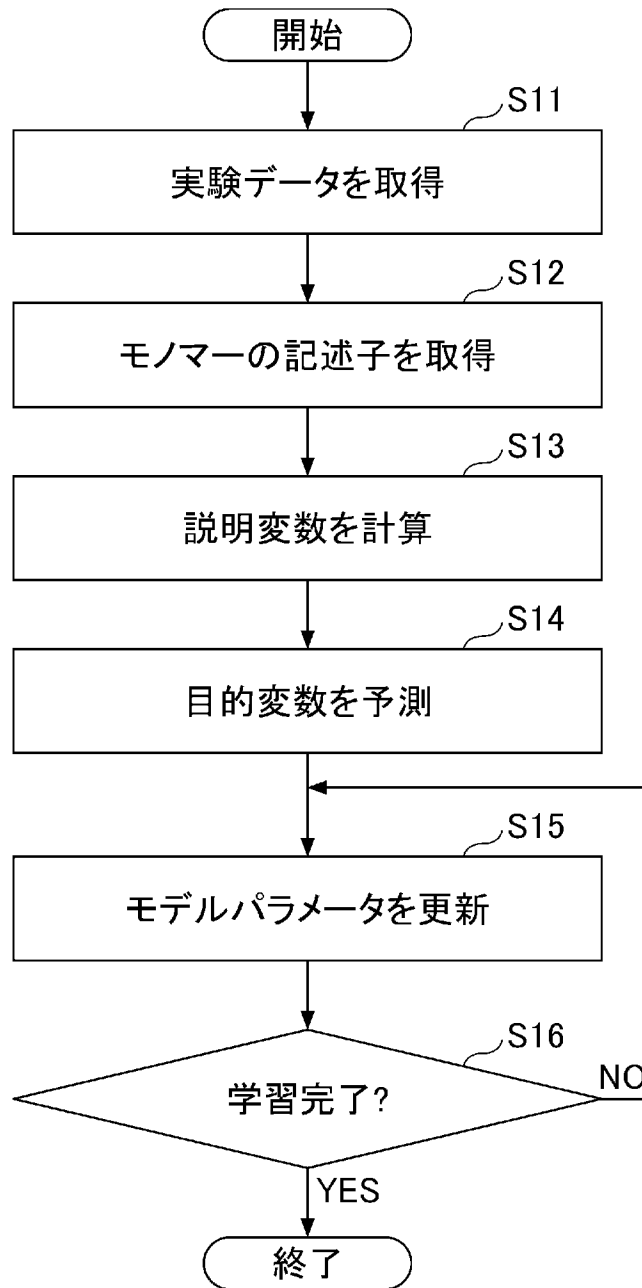
[図13]



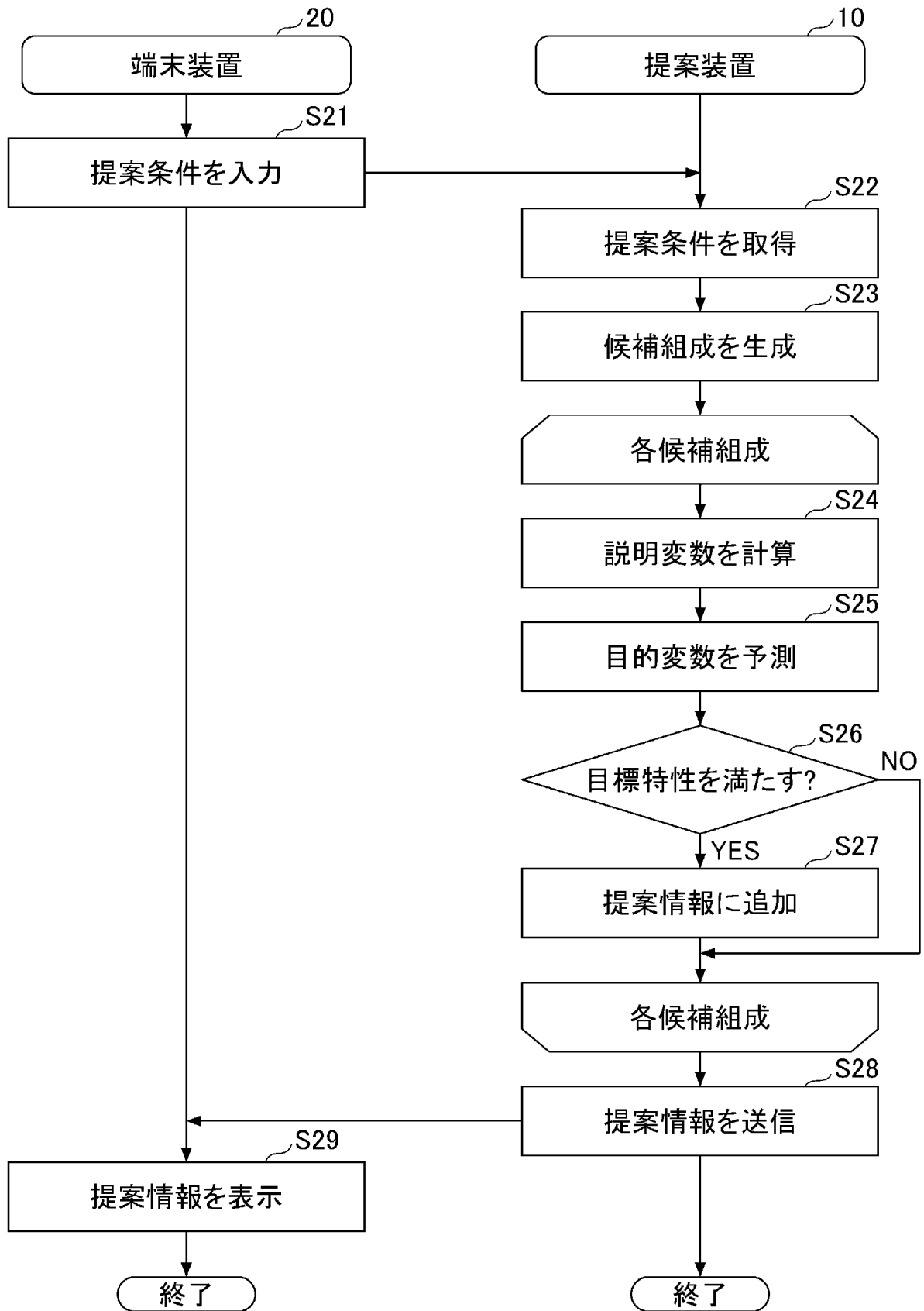
[図14]



[図15]



[図16]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/JP2024/021577

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER		
<i>G03F 7/033</i> (2006.01)i; <i>C08F 212/08</i> (2006.01)i; <i>G03F 7/004</i> (2006.01)i FI: G03F7/033; G03F7/004 512; C08F212/08		
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) G03F7/033; C08F212/08; G03F7/004		
Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched Published examined utility model applications of Japan 1922-1996 Published unexamined utility model applications of Japan 1971-2024 Registered utility model specifications of Japan 1996-2024 Published registered utility model applications of Japan 1994-2024		
Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) CAplus/REGISTRY (STN)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2022/030053 A1 (SHOWA DENKO MATERIALS CO., LTD.) 10 February 2022 (2022-02-10) paragraphs [0024], [0030]-[0031], examples	1-8
A	JP 2005-257812 A (HITACHI CHEMICAL CO., LTD.) 22 September 2005 (2005-09-22) examples	1-8
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input checked="" type="checkbox"/> 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 "D" document cited by the applicant in the international application "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 "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 01 August 2024		Date of mailing of the international search report 13 August 2024
Name and mailing address of the ISA/JP Japan Patent Office (ISA/JP) 3-4-3 Kasumigaseki, Chiyoda-ku, Tokyo 100-8915 Japan		Authorized officer Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No. PCT/JP2024/021577

Patent document cited in search report	Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)	Publication date (day/month/year)
WO 2022/030053 A1	10 February 2022	US 2023/0273518 A1 paragraphs [0027], [0033]- [0034], examples CN 116209571 A KR 10-2023-0050360 A TW 202206468 A	
JP 2005-257812 A	22 September 2005	(Family: none)	

<p>A. 発明の属する分野の分類（国際特許分類（IPC）） G03F 7/033(2006.01)i; C08F 212/08(2006.01)i; G03F 7/004(2006.01)i FI: G03F7/033; G03F7/004 512; C08F212/08</p>										
<p>B. 調査を行った分野</p>										
<p>調査を行った最小限資料（国際特許分類（IPC）） G03F7/033; C08F212/08; G03F7/004</p>										
<p>最小限資料以外の資料で調査を行った分野に含まれるもの</p> <table border="0"> <tr> <td>日本国実用新案公報</td> <td>1922 - 1996年</td> </tr> <tr> <td>日本国公開実用新案公報</td> <td>1971 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国実用新案登録公報</td> <td>1996 - 2024年</td> </tr> <tr> <td>日本国登録実用新案公報</td> <td>1994 - 2024年</td> </tr> </table>			日本国実用新案公報	1922 - 1996年	日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年	日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年	日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年
日本国実用新案公報	1922 - 1996年									
日本国公開実用新案公報	1971 - 2024年									
日本国実用新案登録公報	1996 - 2024年									
日本国登録実用新案公報	1994 - 2024年									
<p>国際調査で使用した電子データベース（データベースの名称、調査に使用した用語） CAplus/REGISTRY (STN)</p>										
<p>C. 関連すると認められる文献</p>										
引用文献の カテゴリー*	引用文献名 及び一部の箇所が関連するときは、その関連する箇所の表示	関連する 請求項の番号								
X	WO 2022/030053 A1 (昭和電工マテリアルズ株式会社) 10.02.2022 (2022 - 02 - 10) [0024], [0030] - [0031], 実施例	1-8								
A	JP 2005-257812 A (日立化成工業株式会社) 22.09.2005 (2005 - 09 - 22) 実施例	1-8								
<p><input type="checkbox"/> C欄の続きにも文献が列挙されている。 <input checked="" type="checkbox"/> パテントファミリーに関する別紙を参照。</p>										
<p>* 引用文献のカテゴリー “A” 特に関連のある文献ではなく、一般的技術水準を示すもの “D” 国際出願で出願人が先行技術文献として記載した文献 “E” 国際出願日前の出願または特許であるが、国際出願日以後に公表されたもの “L” 優先権主張に疑義を提起する文献又は他の文献の発行日若しくは他の特別な理由を確立するために引用する文献（理由を付す） “O” 口頭による開示、使用、展示等に言及する文献 “P” 国際出願日前で、かつ優先権の主張の基礎となる出願の日の後に公表された文献 “T” 国際出願日又は優先日後に公表された文献であって出願と抵触するものではなく、発明の原理又は理論の理解のために引用するもの “X” 特に関連のある文献であって、当該文献のみで発明の新規性又は進歩性がないと考えられるもの “Y” 特に関連のある文献であって、当該文献と他の1以上の文献との、当業者にとって自明である組合せによって進歩性がないと考えられるもの “&” 同一パテントファミリー文献</p>										
国際調査を完了した日	01.08.2024	国際調査報告の発送日 13.08.2024								
名称及びあて先 日本国特許庁(ISA/JP) 〒100-8915 日本国 東京都千代田区霞が関三丁目4番3号	権限のある職員（特許庁審査官） 塚田 剛士 2C 8359 電話番号 03-3581-1101 内線 3221									

国際調査報告
パテントファミリーに関する情報

国際出願番号

PCT/JP2024/021577

引用文献	公表日	パテントファミリー文献	公表日
WO 2022/030053 A1	10.02.2022	US 2023/0273518 A1 [0027], [0033]-[0034], Examples CN 116209571 A KR 10-2023-0050360 A TW 202206468 A	
JP 2005-257812 A	22.09.2005	(ファミリーなし)	