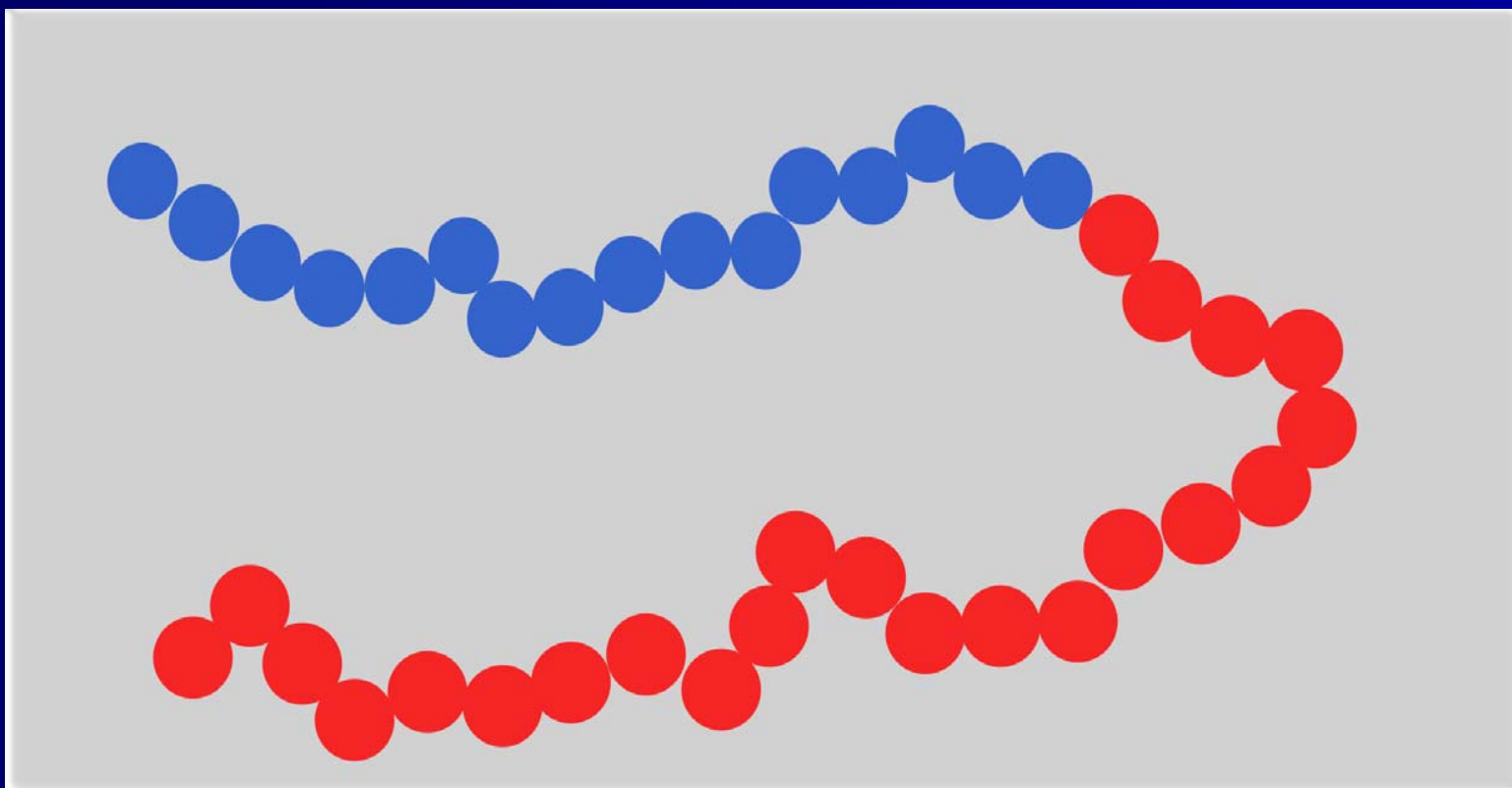


**Микрофазное расслоение
в расплаве двойных
гребнеобразных полимеров**

Студент 5 курса Палюлин В.В.

Научный руководитель: д.ф.-м.н. Потемкин И.И.

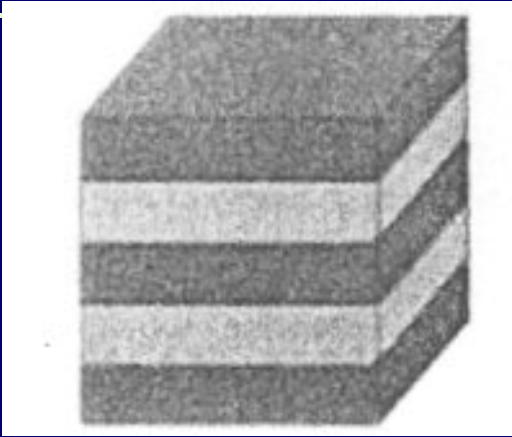
Микрофазное расслоение



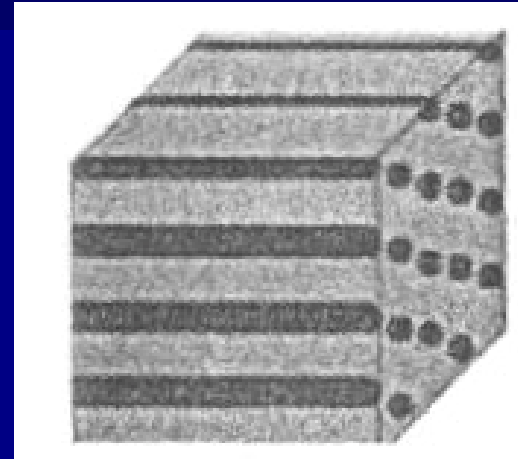
Микрофазное расслоение:

Классические устойчивые морфологии

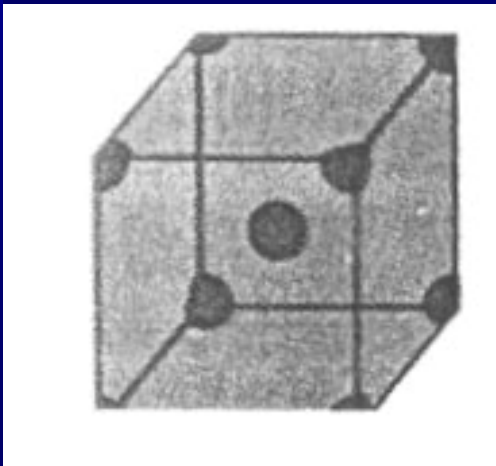
ламеллярная



цилиндрическая



сферическая



гибрид



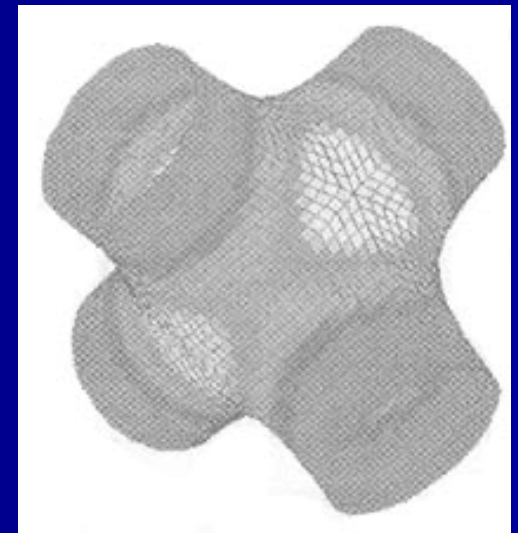
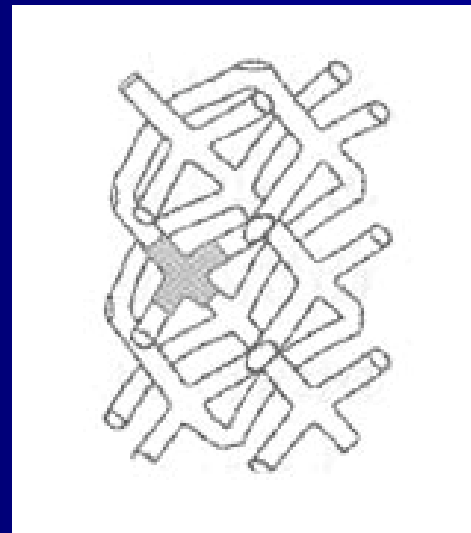
Микрофазное расслоение:

Метастабильные и нестабильные морфологии

Перфорированная
ламеллярная

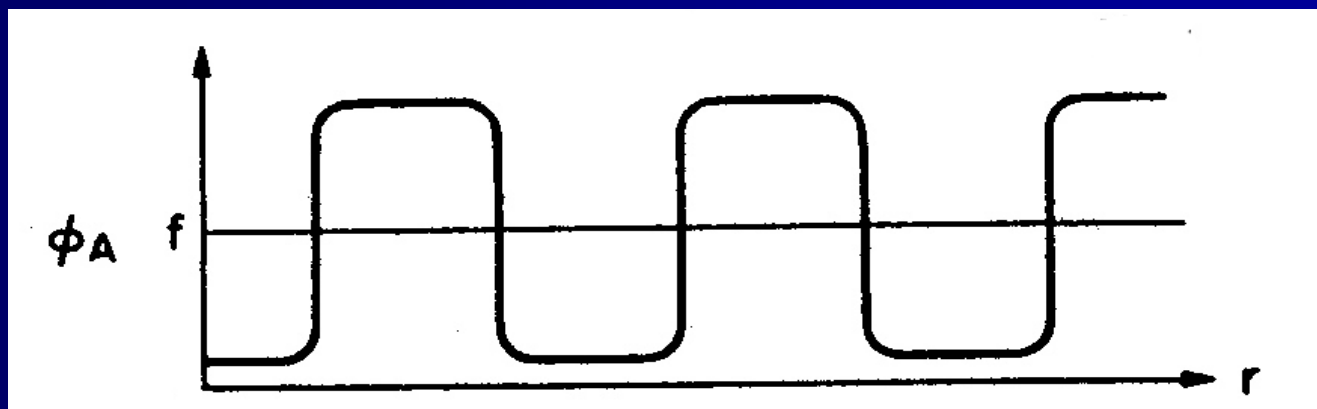
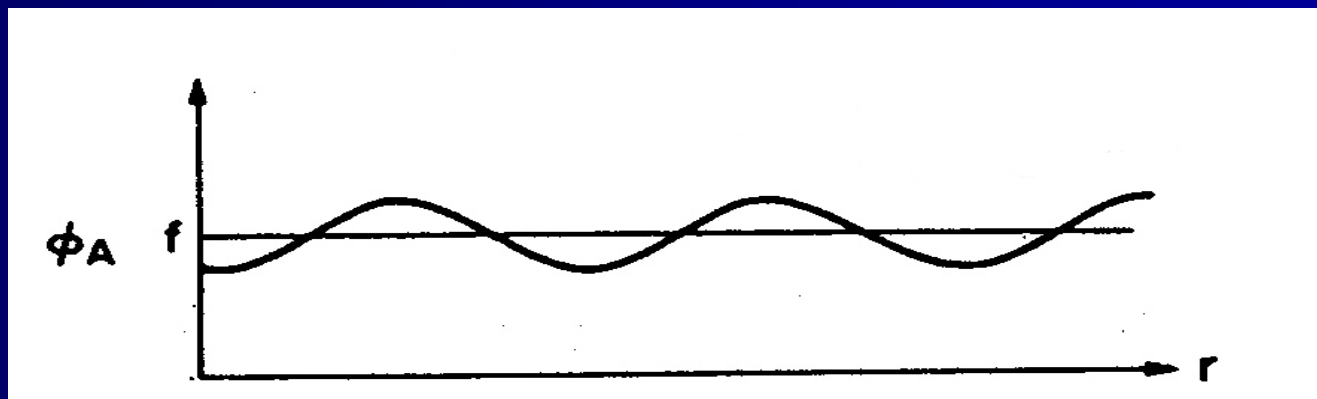


“Двойной алмаз”
(double diamond)

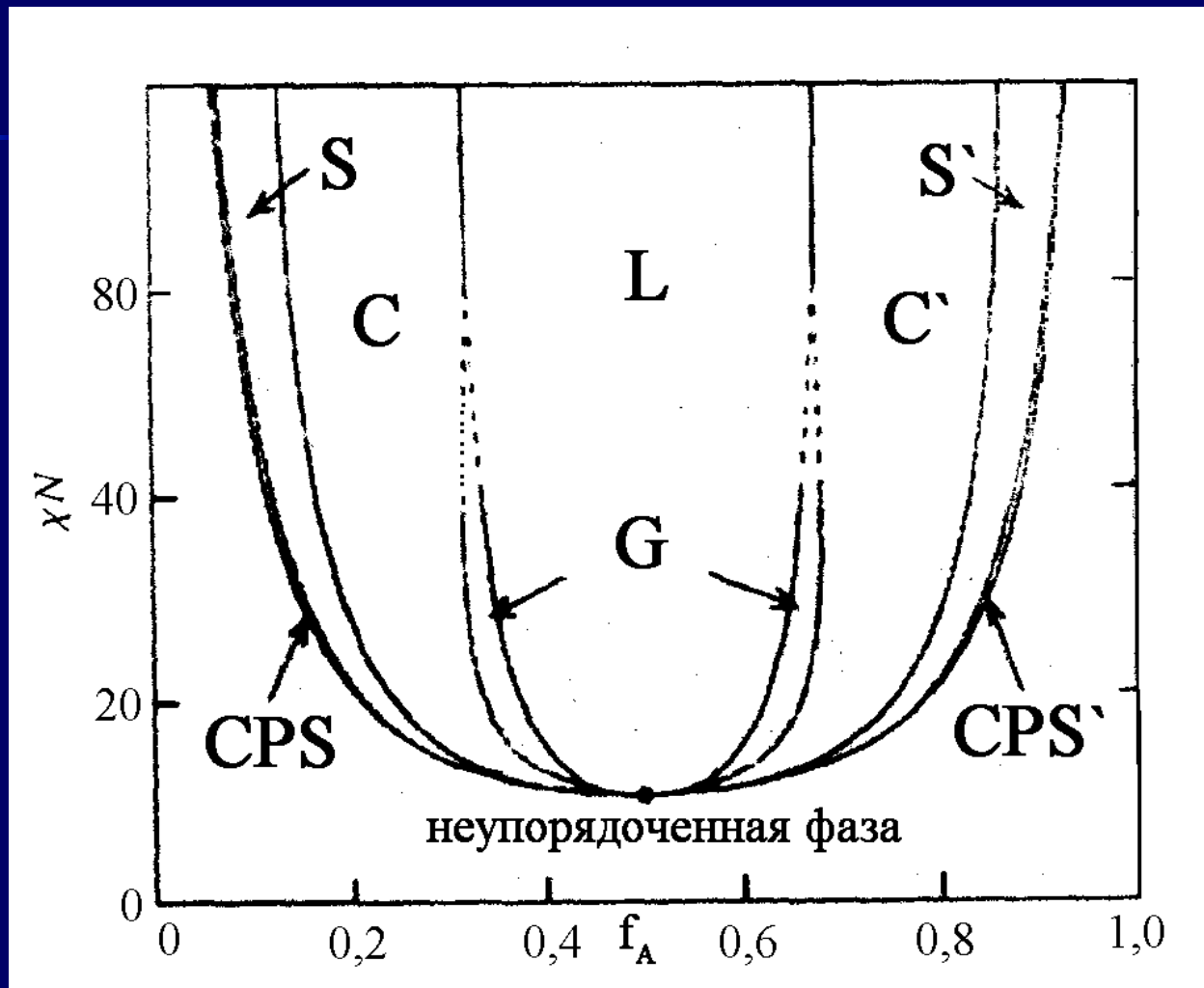


Основные подходы в изучении микрофазного расслоения: *режимы слабой и сильной сегрегации*

Профиль плотности звеньев А:

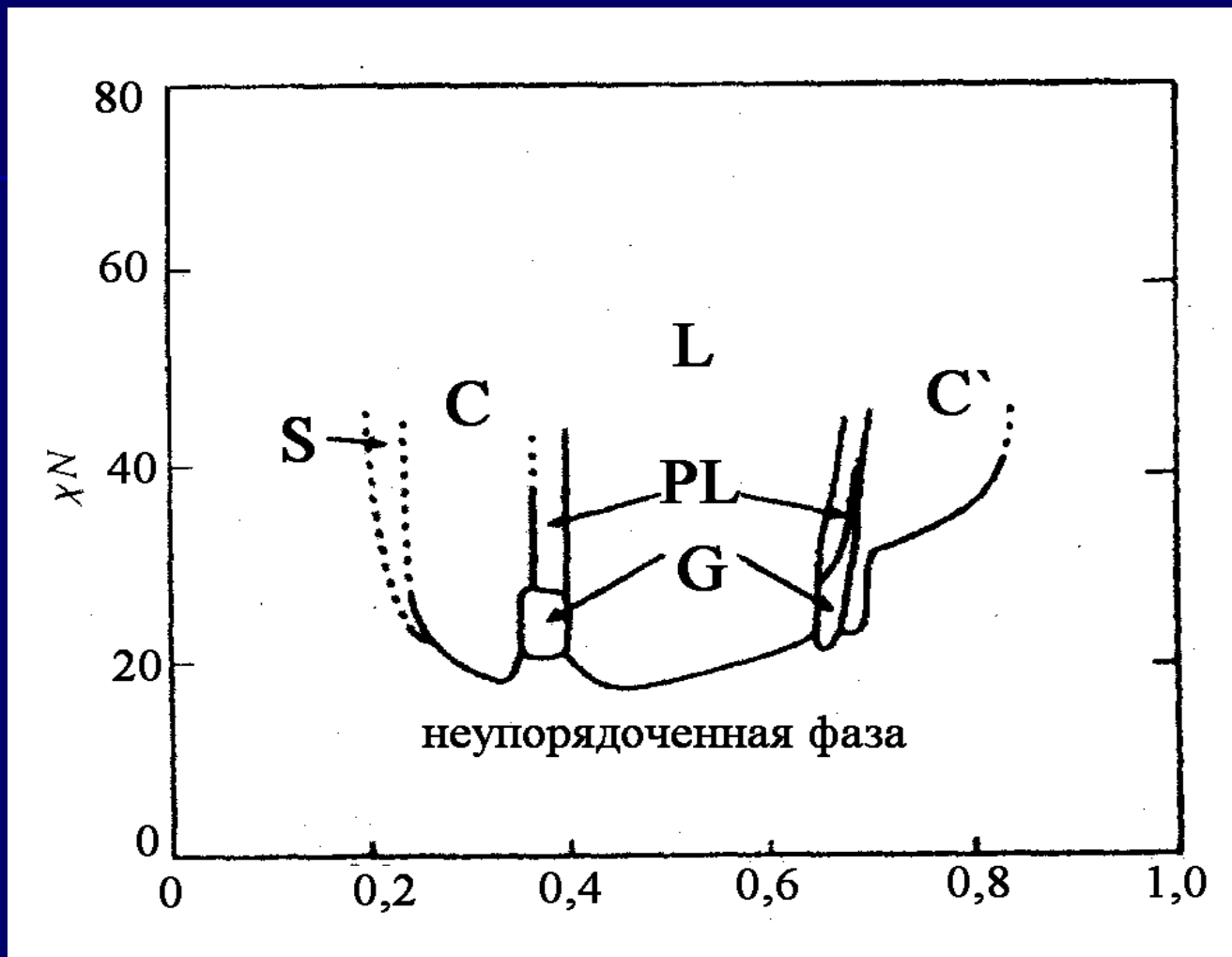


Теория самосогласованного поля



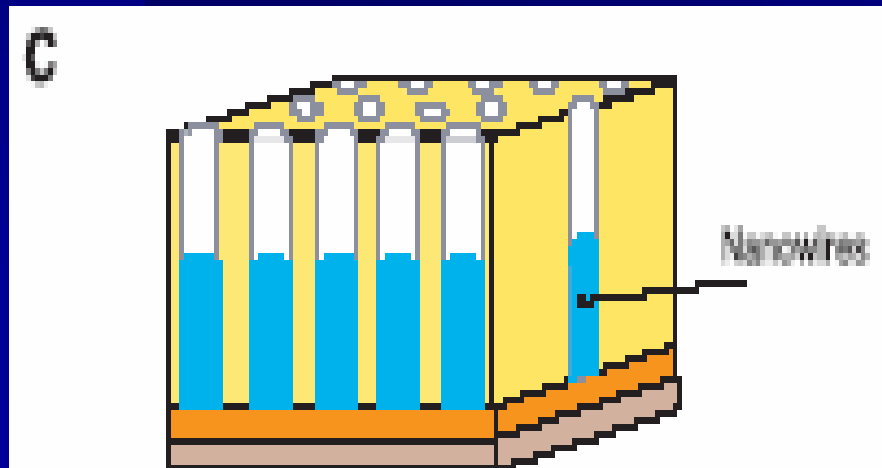
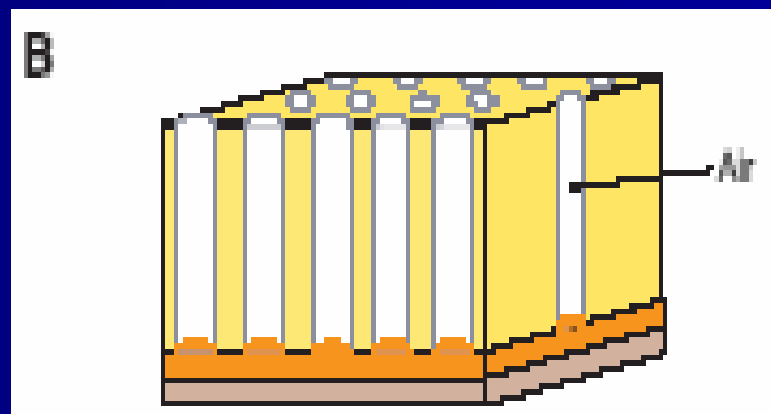
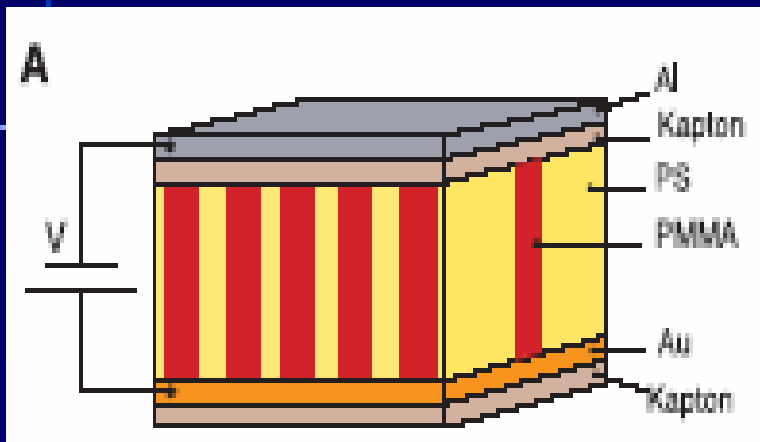
M.W. Matsen, M. Schick, *Phys. Rev. Lett.*, **72**, 2660 (1994)

Экспериментальные данные

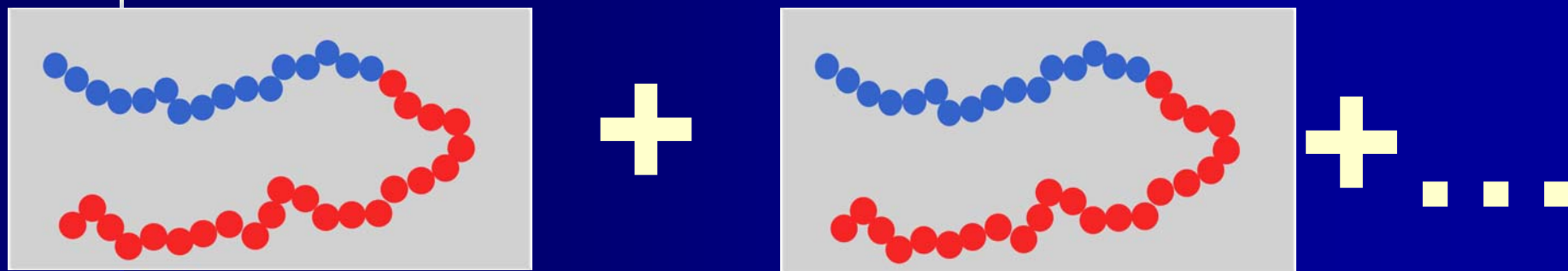


A.K. Khandpur, S. Foster, F.S. Bates, I.W. Hamley, A.J. Ryan, W. Bras, K. Amdal, K. Mortensen, *Macromolecules*, **28**,8796 (1995)

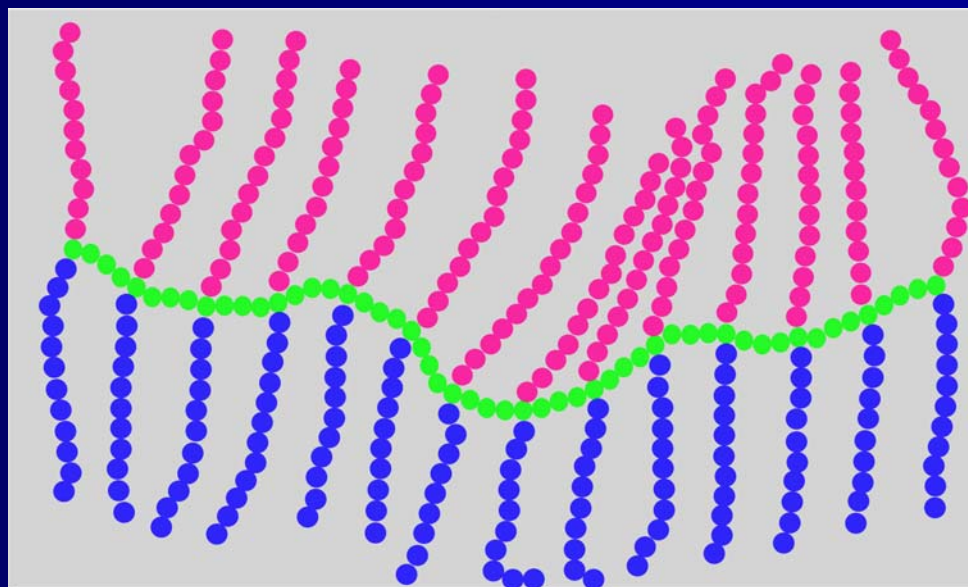
Создание массивов нанопроводов



Двойной гребнеобразный полимер



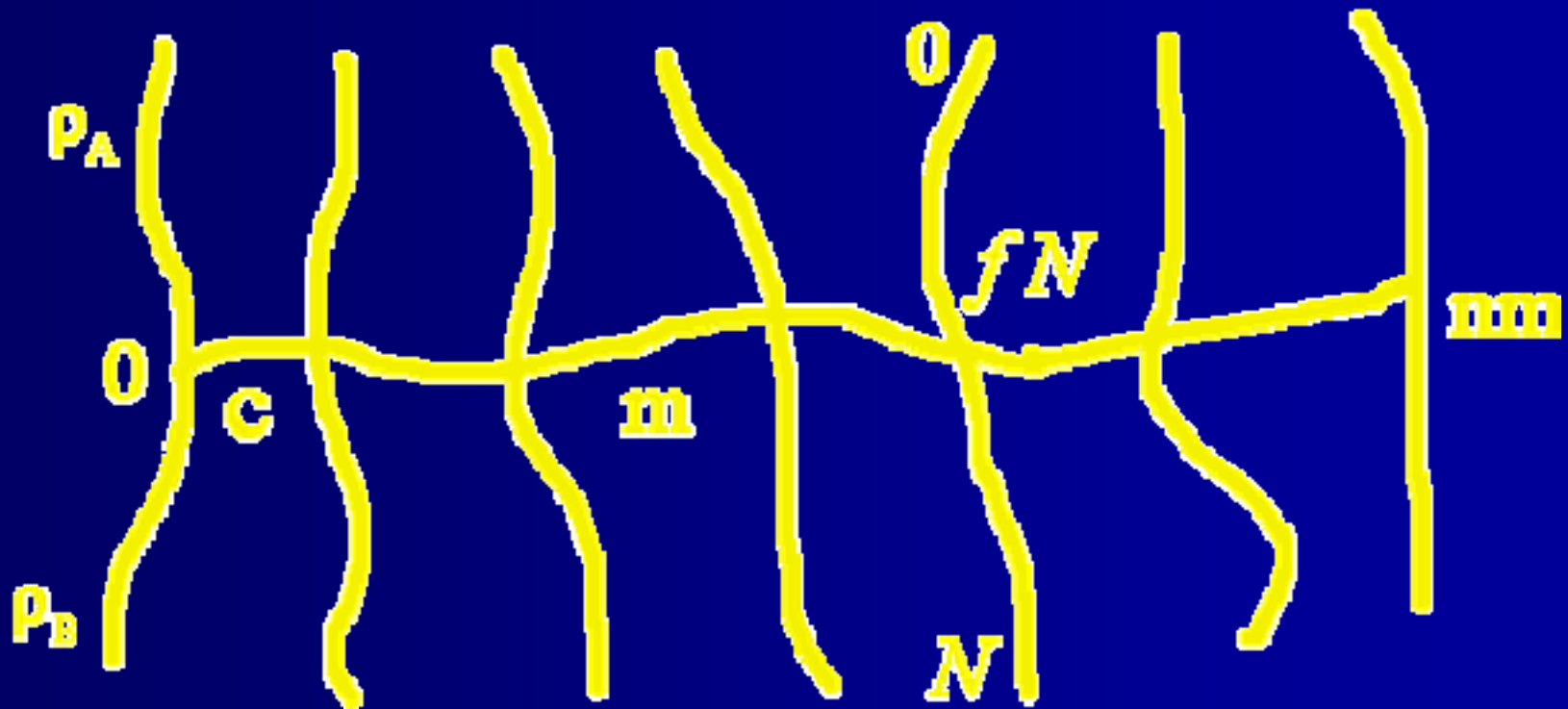
=



Основные предположения при теоретическом анализе задачи

- Слабая сегрегация
- Одинаковые размеры звеньев
- Взаимодействия звеньев описываются параметрами χ_{ij}

Описание системы



После минимизации

$$Z = \text{const} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} G(q) \rho_A(q) \rho_A(-q)\right)$$

$$\rho_A(q) = \int \rho(x) e^{-iqx} dx$$

Проверка результата была проведена
при помощи исследования частных случаев

Пределные случаи

- При $n=0$ (диблок-сополимер) результат совпадает с результатом Лейблера, Leibler L., Theory of Microphase Separation in Block copolymers, *Macromolecules*, **13**, 1602 (1980)
- При $n=1$ (H-образная молекула) результат полученный отдельно для частного случая и из общей формулы совпадают
- $G^{-1} \rightarrow 0$ при $N \rightarrow 0$ (расплав гомополимера)

Учет объемных взаимодействий

Свободная энергия объемных взаимодействий

$$H = \chi_{AB} \rho_A(q) \rho_B(-q) + \chi_{AC} \rho_A(q) c(-q) + \chi_{BC} \rho_B(q) c(-q)$$

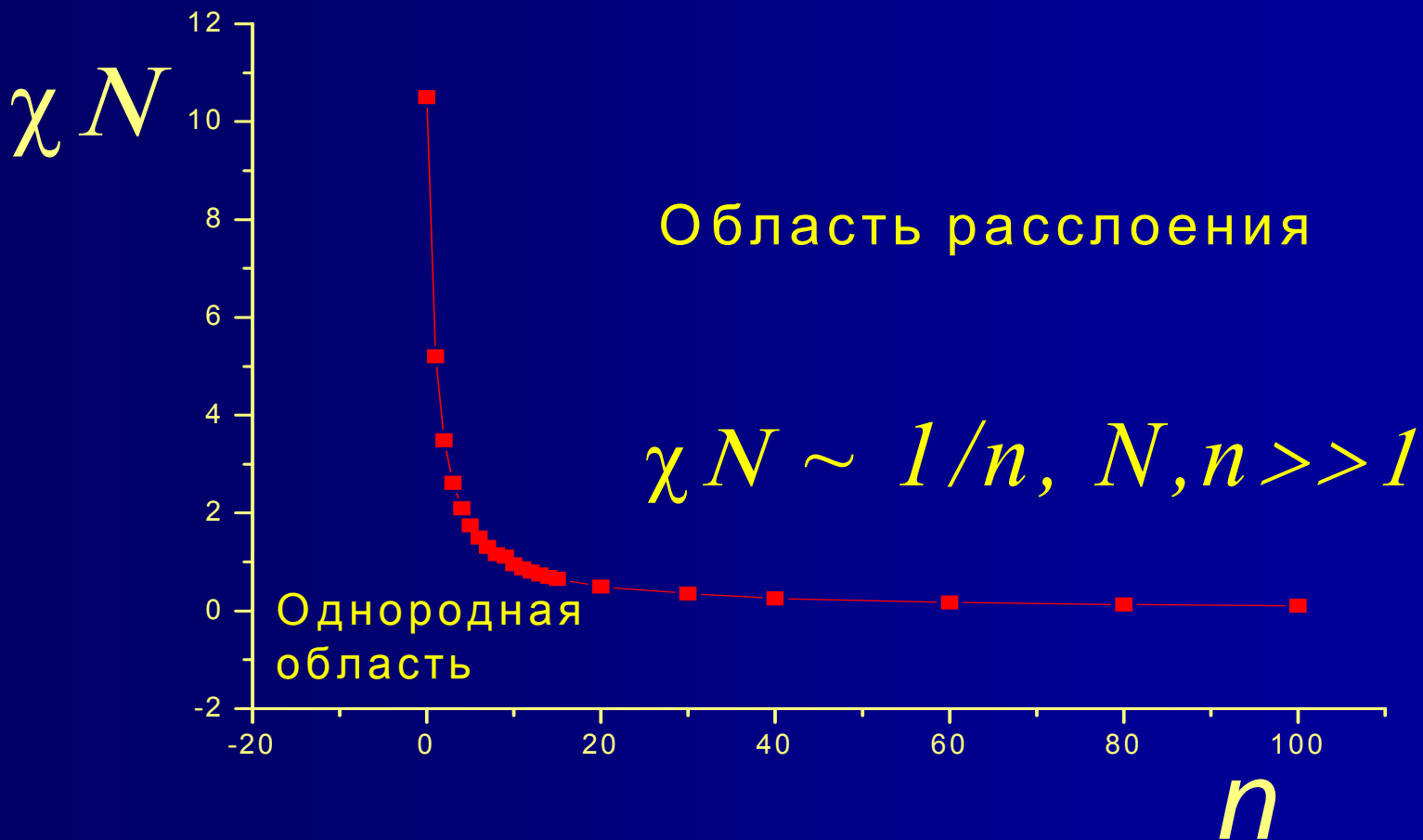
Минимизированная энергия с учетом взаимодействий

$$Z = \text{const} \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} G_{\text{int}}(q) \rho_A(q) \rho_A(-q) \right)$$

Точка спинодали: $(G_{\text{int}}(q^*))^{-1} = 1/G_{\text{int}}(q^*) = \infty$

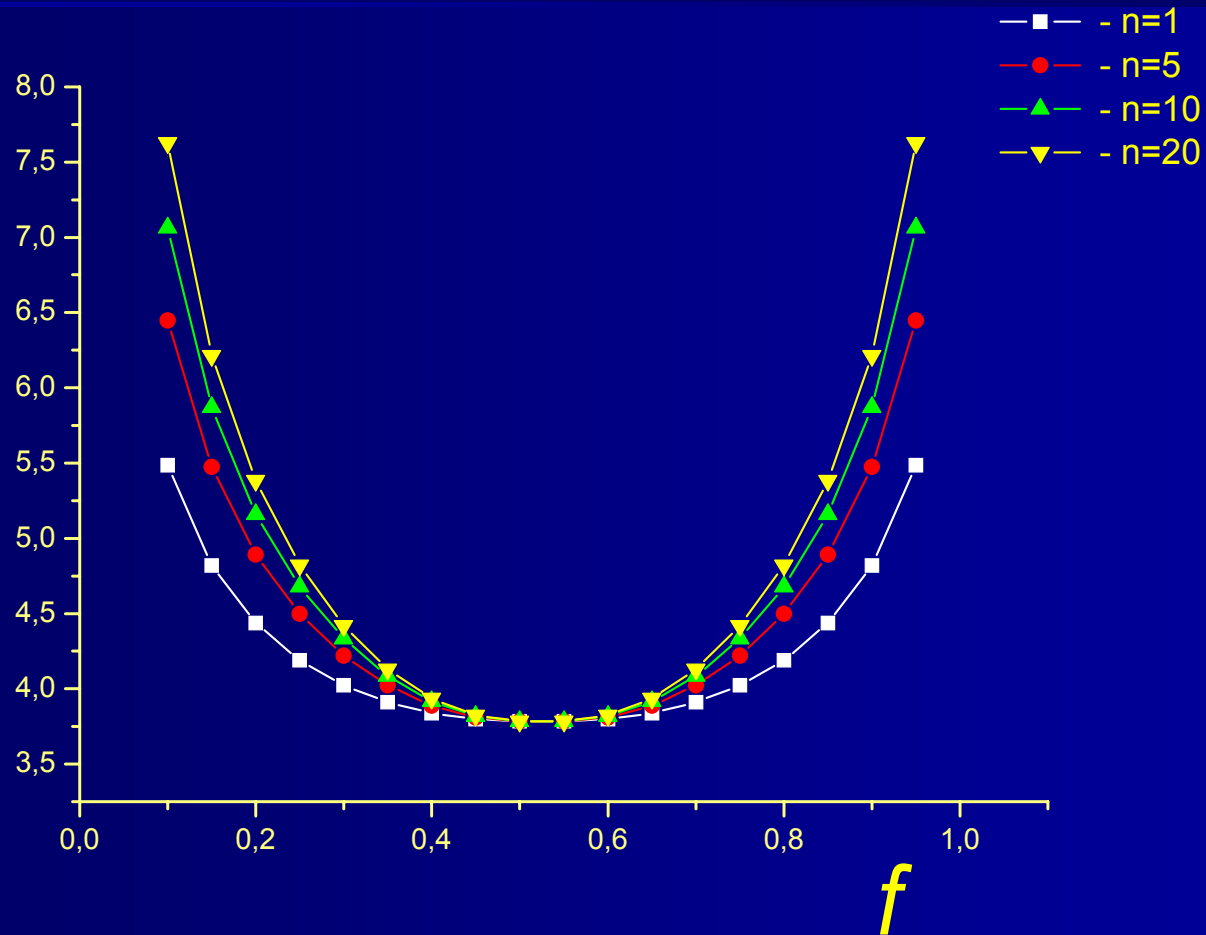
\Rightarrow Можем найти χ_c, q^*

Зависимость χ_c от количества пришитых диблок-сополимеров при $f=0.5$

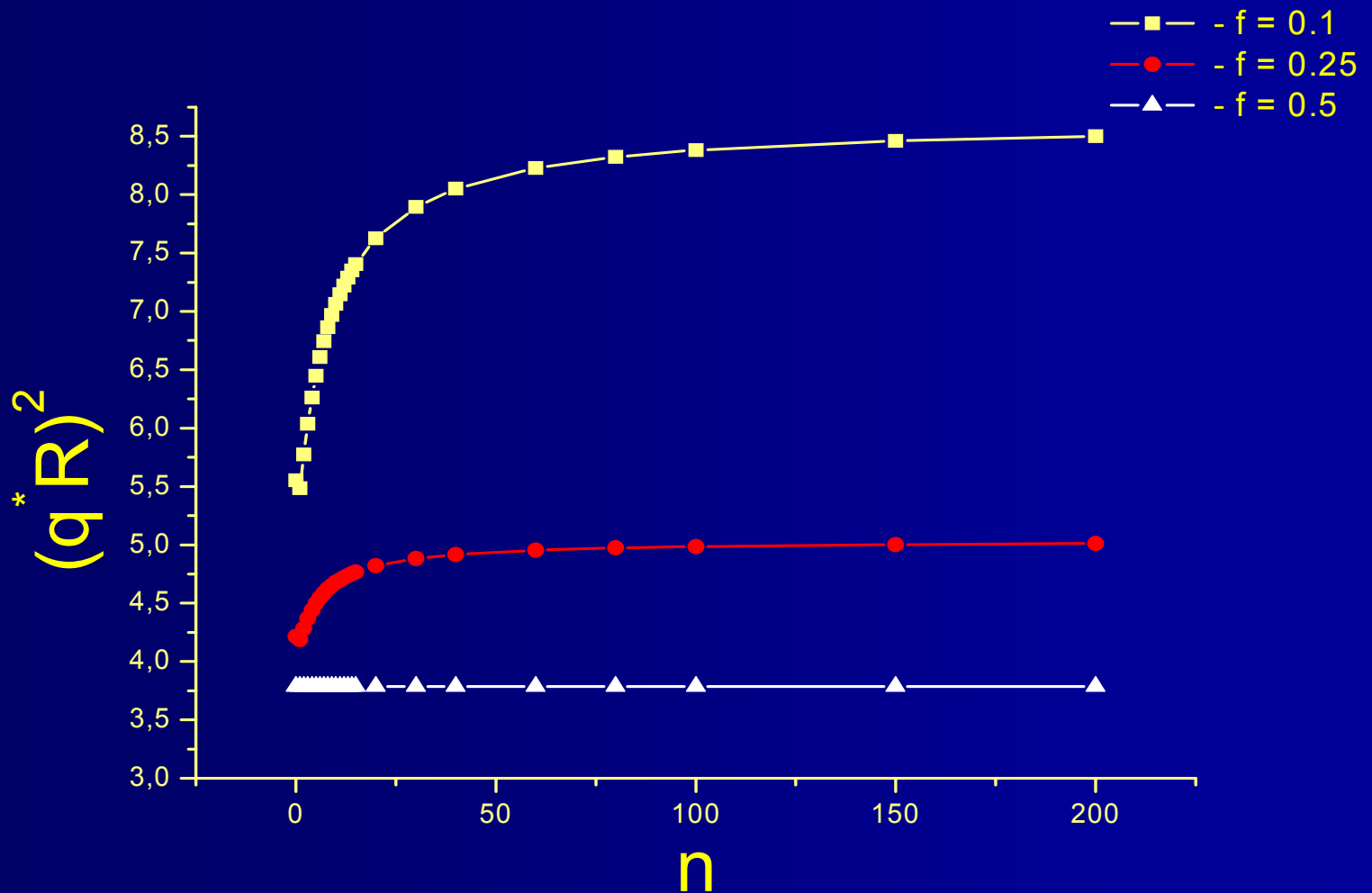


Зависимость волнового вектора в точке спинодали от состава

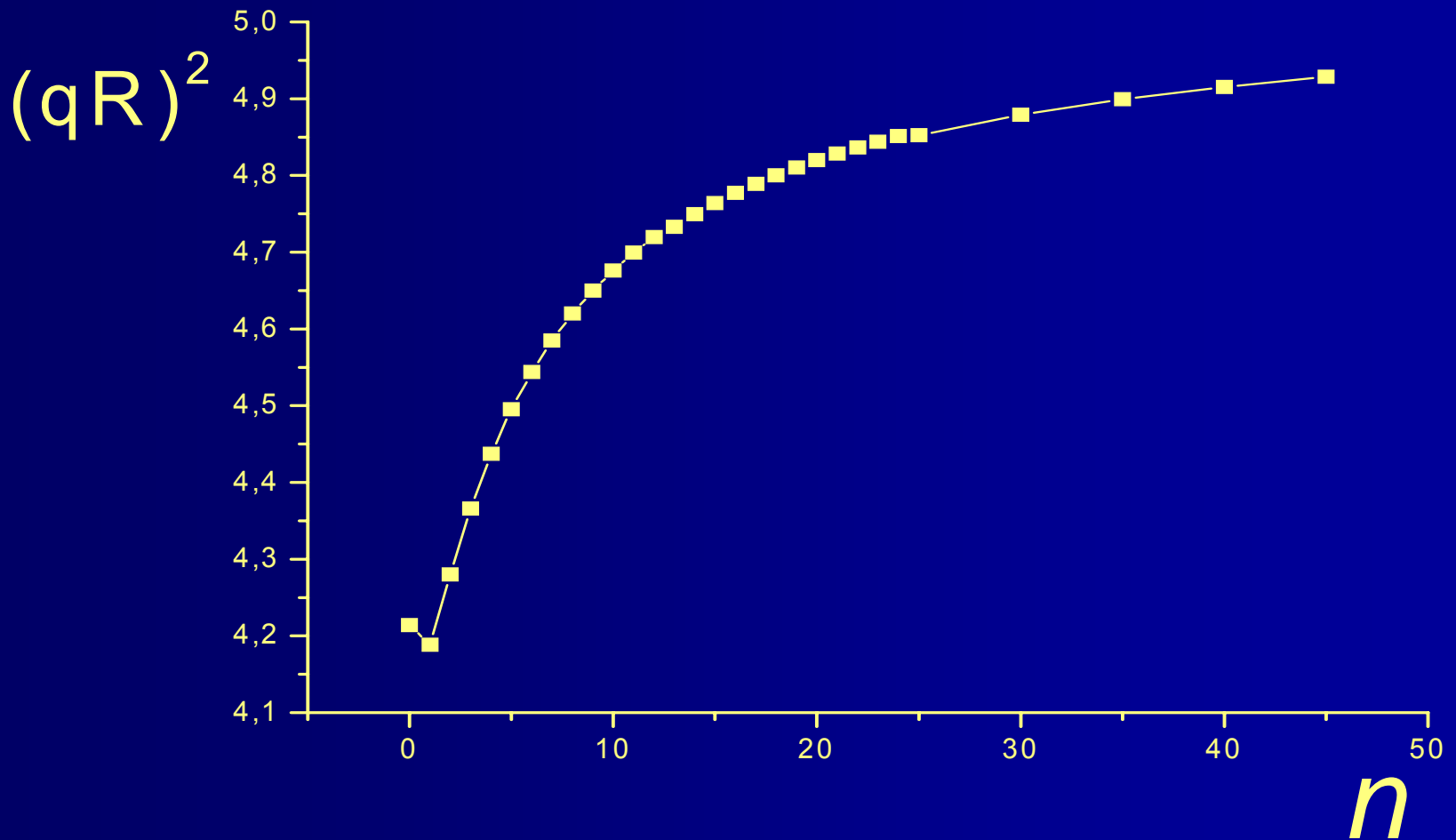
$(q^* R)^2$



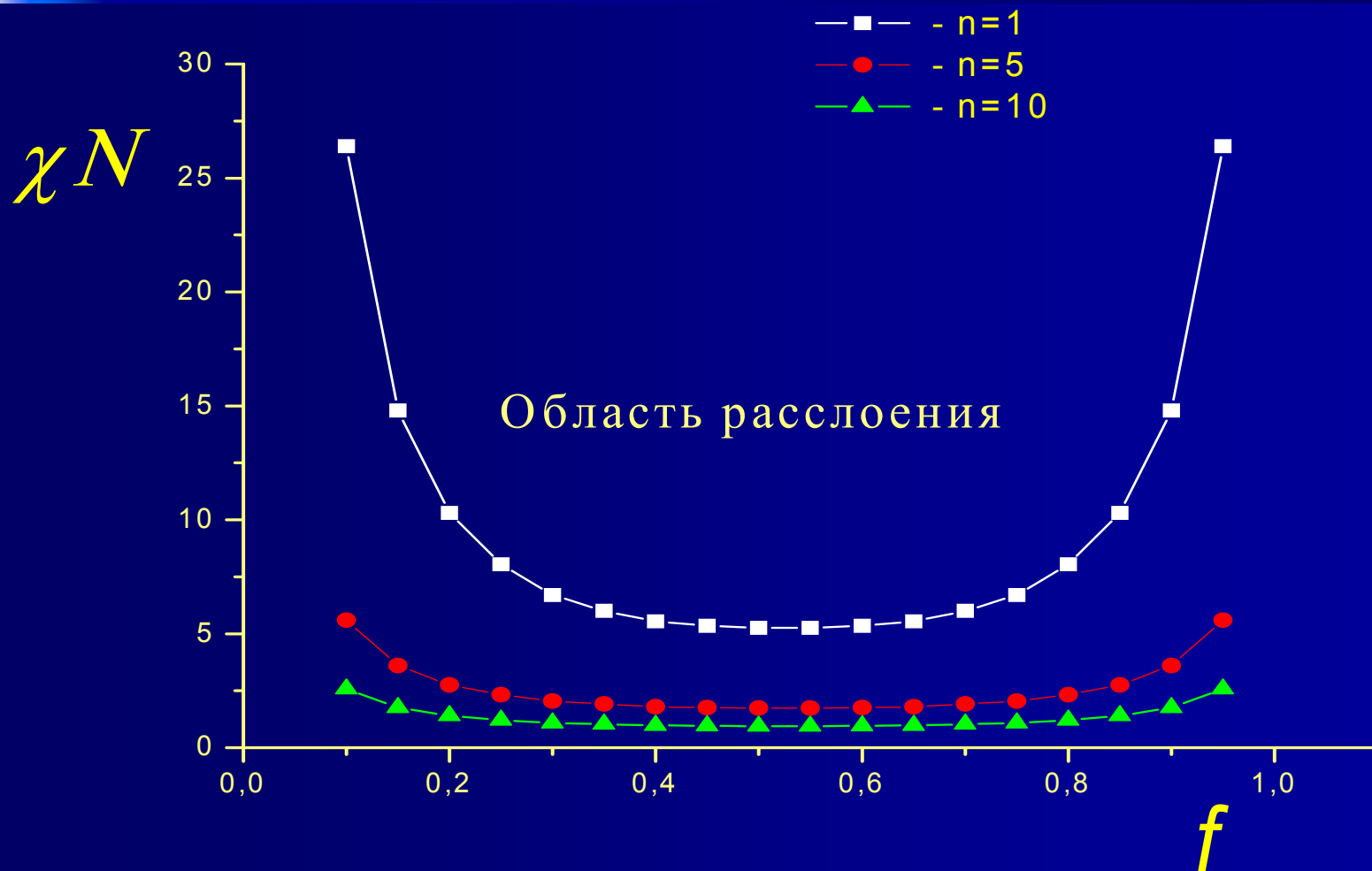
Зависимость волнового вектора в точке спинодали от n



Кривая зависимости волнового вектора в однородной фазе при постоянных χ от n , $f=0.25$



Кривые спинодали при разных n



Выводы

- Был произведен расчет статистической суммы для двойного гребнеобразного полимера и исследован случай $m=1$, $\chi_{ab} \neq 0$, $\chi_{ac} = \chi_{bc} = 0$
- В предельном случае $n=0$ результаты согласуются с результатами для расплава диблок-сополимеров

Выводы

- Исследование зависимости положения критической точки от n показало, что χ_c уменьшается с ростом n , причем при больших n ($n \rightarrow \infty$) $\chi_c \sim 1/n$, а при $n, N \rightarrow \infty$ $\chi_c \sim 1/nN$,

что позволяет предполагать возможность возникновения микрофазового расслоения при росте числа сшитых диблок-сополимеров (сшивке химическими связями или физическими взаимодействиями)

Выводы

- Зависимость критического волнового вектора в точке спинодали от состава и кривые спинодали при разных n выглядят схожим образом
- При малых n и несимметричном составе $f \neq 0.5$ при постоянном χ волновой вектор в максимуме растёт (т.е. период уменьшается), стремясь при больших n к константе