Теоретическое изучение распределения растворителя в тонких пленках диблок-сополимеров, набухших в парах неселективного растворителя

Гумеров Рустам Анрикович

Аспирант 3-го года обучения

Половников Кирилл Евгеньевич

Студент 5-го курса

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, Москва, Россия*

E-mail: gumerov@polly.phys.msu.ru, polovnikov@polly.phys.msu.ru

Блок-сополимеры широко применяются для создания различных наноструктурированных материалов, таких как массивы нанопроводов, органические фотовольтаические устройства, диэлектрические отражатели и т.д. Такие материалы имеют в своей основе тонкие полимерные пленки, состоящие из молекул, способных к самоорганизации в упорядоченные нанодомены (параллельные и перпендикулярные цилиндры и ламелли). Установлено, что ориентация таких нанодоменов зависит от ряда факторов – главным образом, от взаимодействия полимера с подложкой и свободной поверхностью, толщины пленки и от молекулярной массы сополимера. Простейшим и наиболее распространенным методом получения полимерных пленок является так называемый spin-coating: капля полимерного раствора растекается по вращающейся подложке под воздействием сил инерции. При этом происходит испарение растворителя, что приводит к формированию сухой полимерной пленки. Однако полученная пленка изобилует дефектами, и ее внутренняя структура далека от равновесной. Для устранения дефектов пленку подвергают обработке парами растворителя, что приводит к увеличению подвижности цепей, с последующим высушиванием. Важной особенностью таких блок-сополимерных систем является неравномерное распределение растворителя внутри системы: максимумы концентраций располагаются на границах АВ-доменов. Данное поведение может быть объяснено экранировкой невыгодных контактов между полимерными звеньями различной химической структуры молекулами растворителя. Подобная физическая картина была продемонстрирована в работе по компьютерному моделированию [1, 2], а затем подтверждена экспериментально [3]. В частности, было показано, что растворитель проникает в пленку в большинстве своем через межфазные границы.

В нашей работе мы провели теоретическое изучение расплава диблок-сополимера, набухшего в неселективном растворителе. Главной целью исследования было определение зависимости распределения растворителя от его качества и количества, от несовместимости различных мономерных звеньев между собой и от длины блоков. Также нами было показано изменение коэффициента поверхностного натяжения от перечисленных выше параметров. Результаты наших исследований хорошо согласовались с полученными ранее данными эксперимента и компьютерного моделирования.

Литература

1. Glagoleva, A.; Erukhimovich, I.; Vasilevskaya, Void Microstructuring in Lamellar Phase of Amphiphilic Macromolecules, *V. Macromol. Theory Simul.* 2013,22, 31–35.
2. Rudov, A. A.; Patyukova, E. S.; Neratova, I. V.; Khalatur, P. G.; Posselt, D.; Papadakis, C. M.; Potemkin, I. I., Structural Changes in Lamellar Diblock Copolymer Thin Films upon Swelling in Nonselective Solvents, *Macromolecules*, 2013, 46, 5786–5795.
3. A. Stenbock-Fermor, A.A. Rudov, R.A. Gumerov, L.A. Tsarkova, A. Böker, M. Möller, I.I. Potemkin, Morphology-controlled kinetics of solvent up-take by block copolymer films in nonselective solvent vapors, *ACS Macro Letters*, 2014, 3, 803–807.