

«Тонкие пленки блок-сополимеров»

Выполнила: студентка группы 207,

Ларина Александра

Научный руководитель:

Д.ф.-м.н., проф. Потемкин Игорь Иванович

Блок-сополимеры –
класс макромолекул,
состоящих из
различных
гомополимерных
блоков

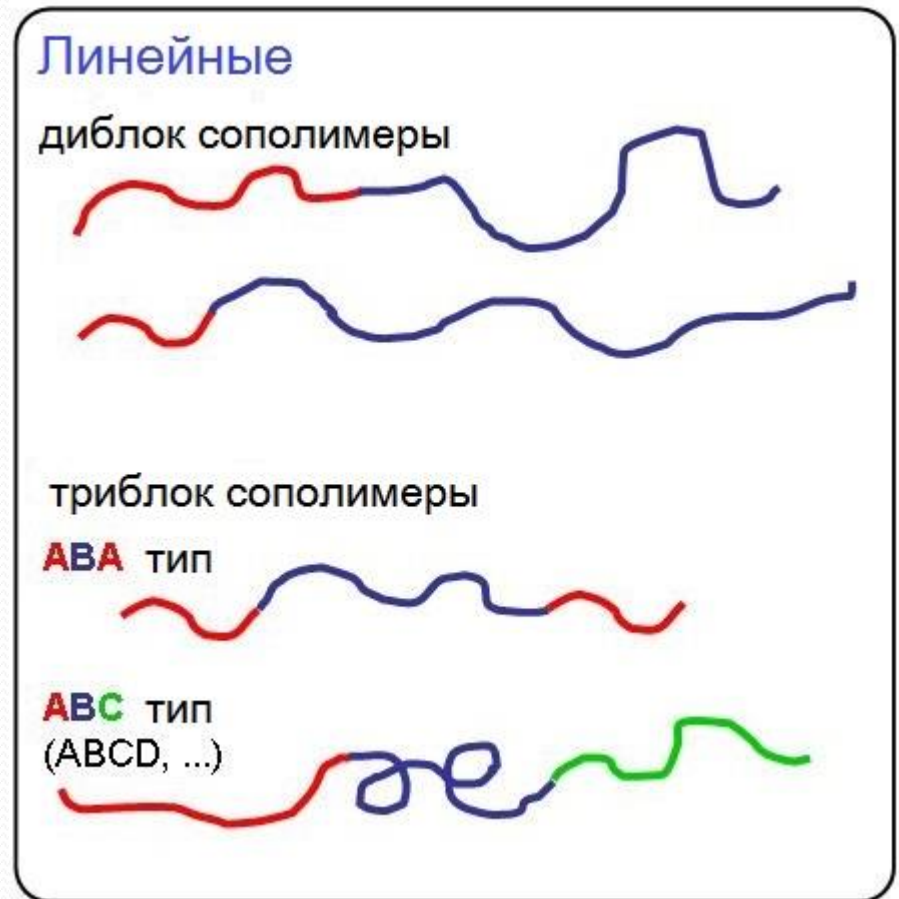
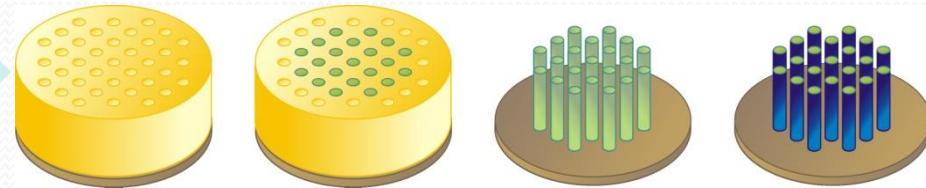
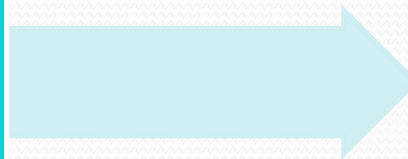


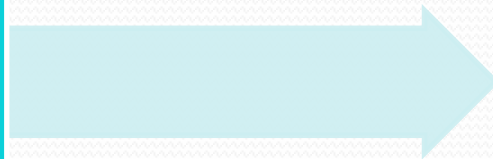
Рис. Виды линейных блок-сополимеров

Применение блок-сополимеров

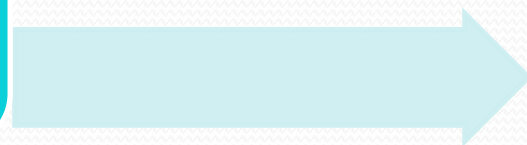
Наноструктуриро
ванные шаблоны



Фотонные
кристаллы



Биодатчики



Цель исследования

Задача № 1

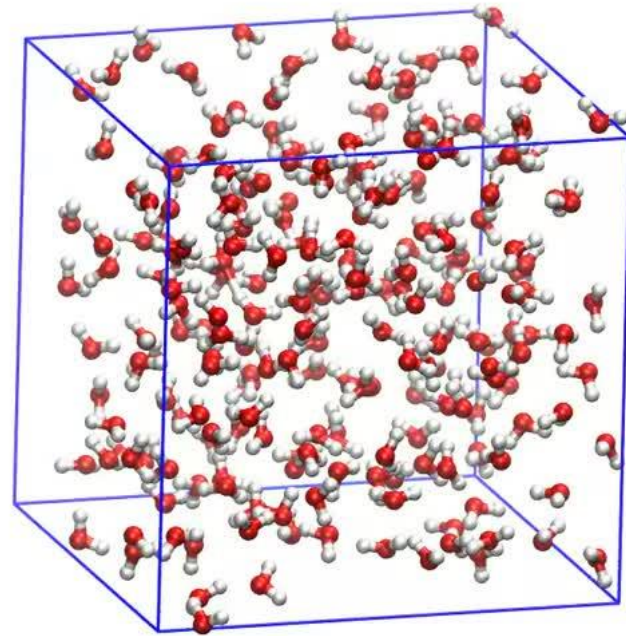
- исследование зависимости структуры пленки от композиции диблок-сополимеров

Задача № 2

- исследование набухания диблок-сополимерной пленки в селективном растворителе

Метод моделирования

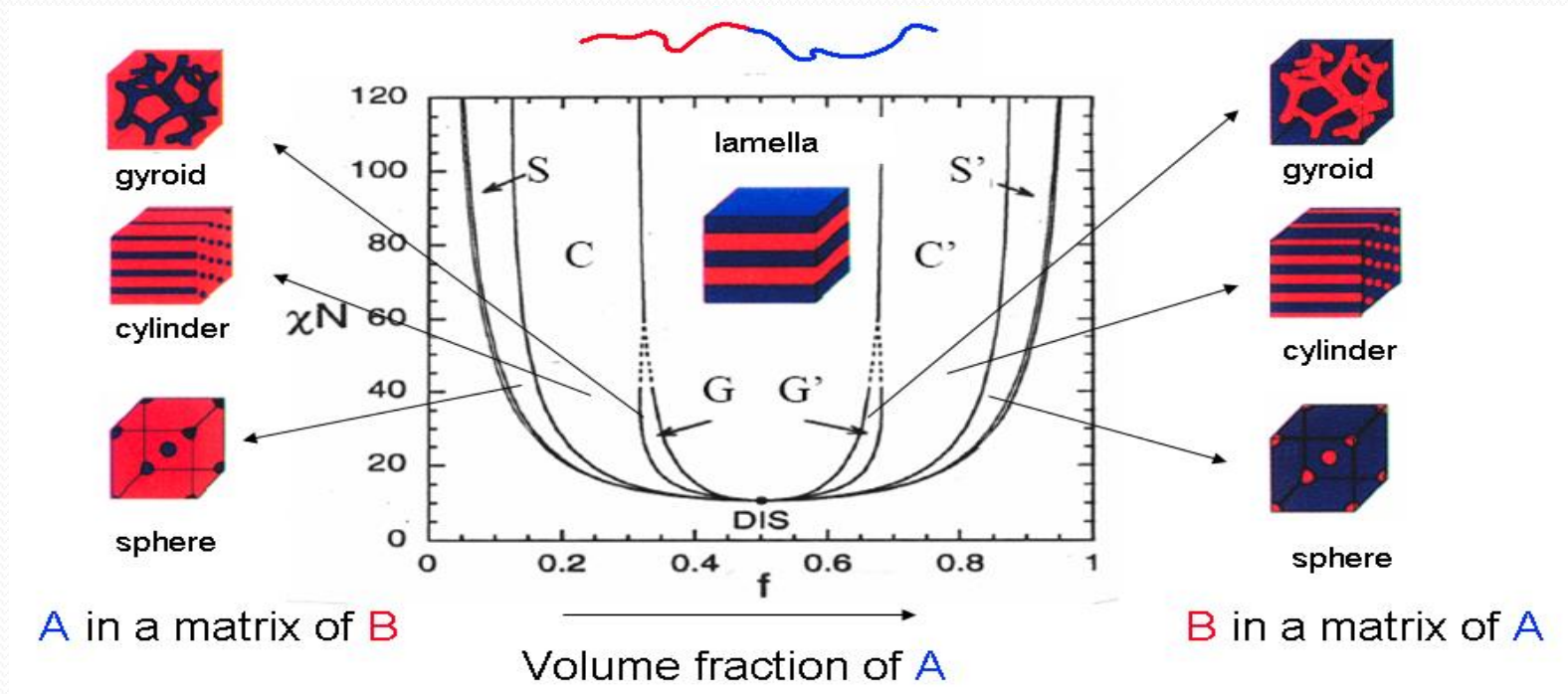
Метод
диссипативной
динамики
частиц (DPD)



Сила, действующая на
каждую частицу:

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R)$$

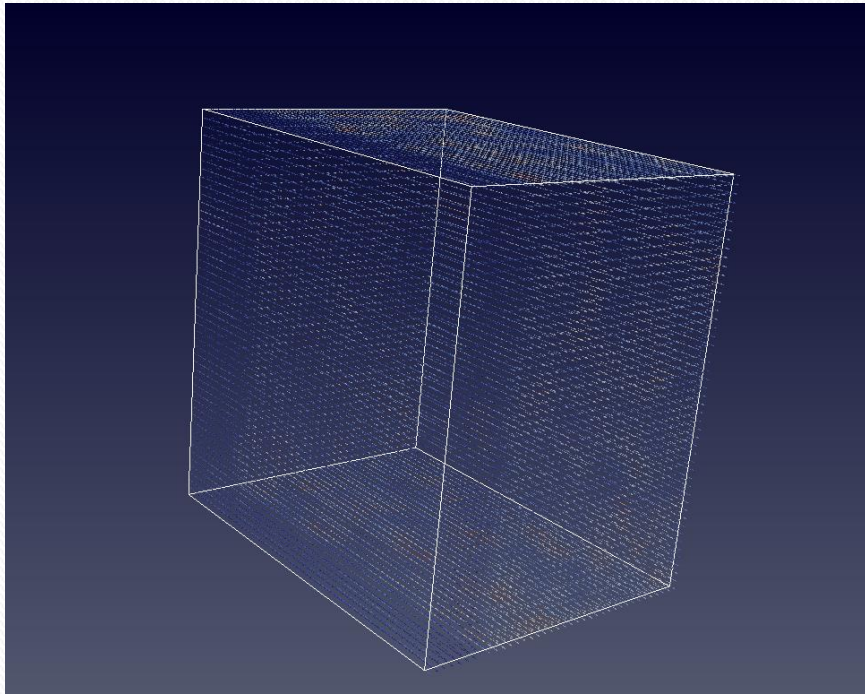
Задача исследования структуры от композиции f



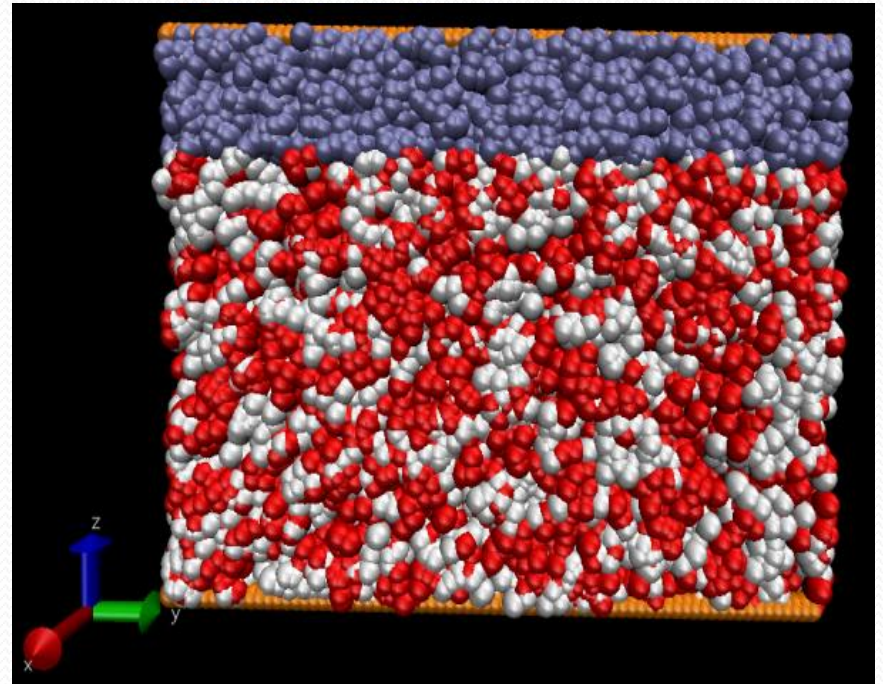
Фазовая диаграмма, теоретически полученная
Метсеном и Шиком

(Matsen M. W., Schick M. Stable and Unstable Phases of a Diblock Copolymer Melt. // Phys. Rev. Lett., 1994, 72, p. 2660)

Параметры моделирования задачи № 1



Ячейка постоянного объема с
размерами $V = 50 \times 50 \times 38$

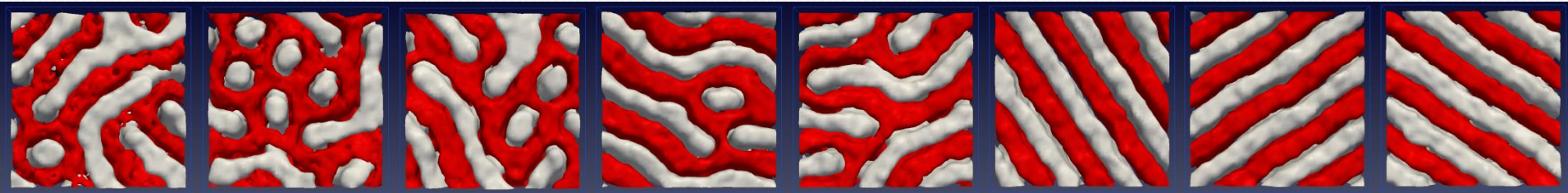


Начальная система – слой полимерных цепочек
(обозначены **красным** и белым цветами) и слой
плохой для обоих сортов блоков растворителя
(обозначен **синим** цветом), **оранжевым**
обозначены жесткие стенки

Параметры моделирования задачи № 1 (продолжение)

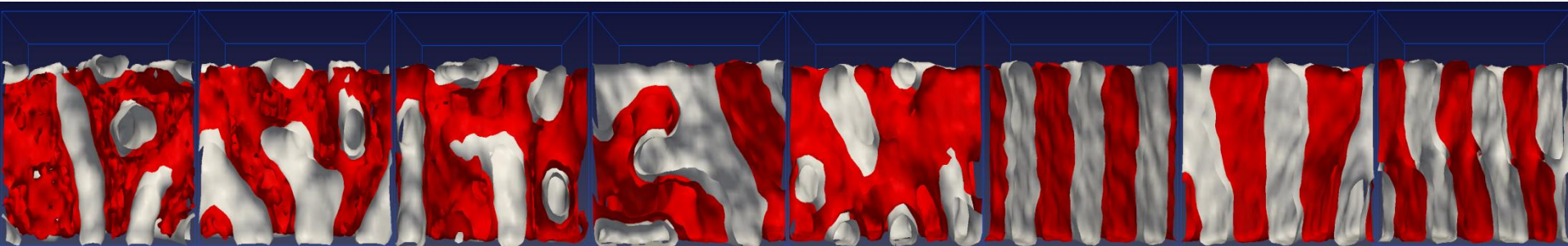
- Диапазон изменения композиции $f = N_A/N$: 0.27-0.5
- Объемная доля полимера 0.8; остальные 0.2 – плохой растворитель
- Ограничение по координате z – жесткие стенки ($z=0$, $z=30$)

Результаты



$f=0.27$ $\triangleright$ 0.30 $\triangleright$ 0.33 $\triangleright$ 0.37 $\triangleright$ 0.40 $\triangleright$ 0.43 $\triangleright$ 0.47 $\triangleright$ 0.50

Вид снизу. Белым цветом обозначены блоки сорта А, красным – сорта В



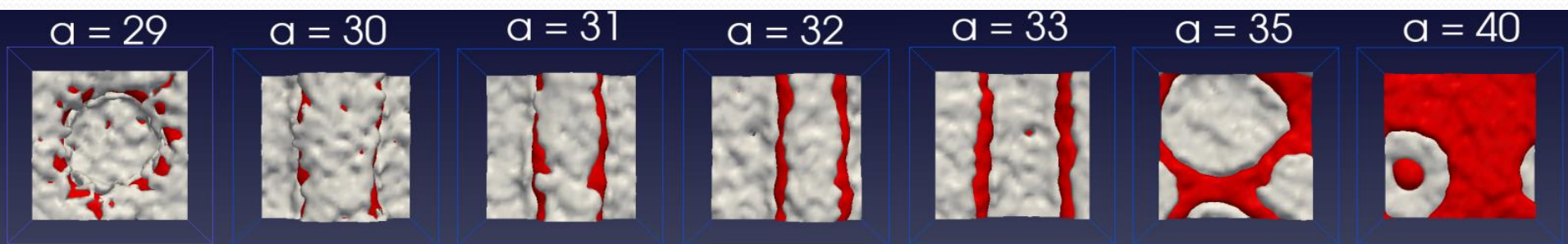
$f=0.27$ $\triangleright$ 0.30 $\triangleright$ 0.33 $\triangleright$ 0.37 $\triangleright$ 0.40 $\triangleright$ 0.43 $\triangleright$ 0.47 $\triangleright$ 0.50

Вид сбоку

Набухание пленки в селективном растворителе, параметры моделирования

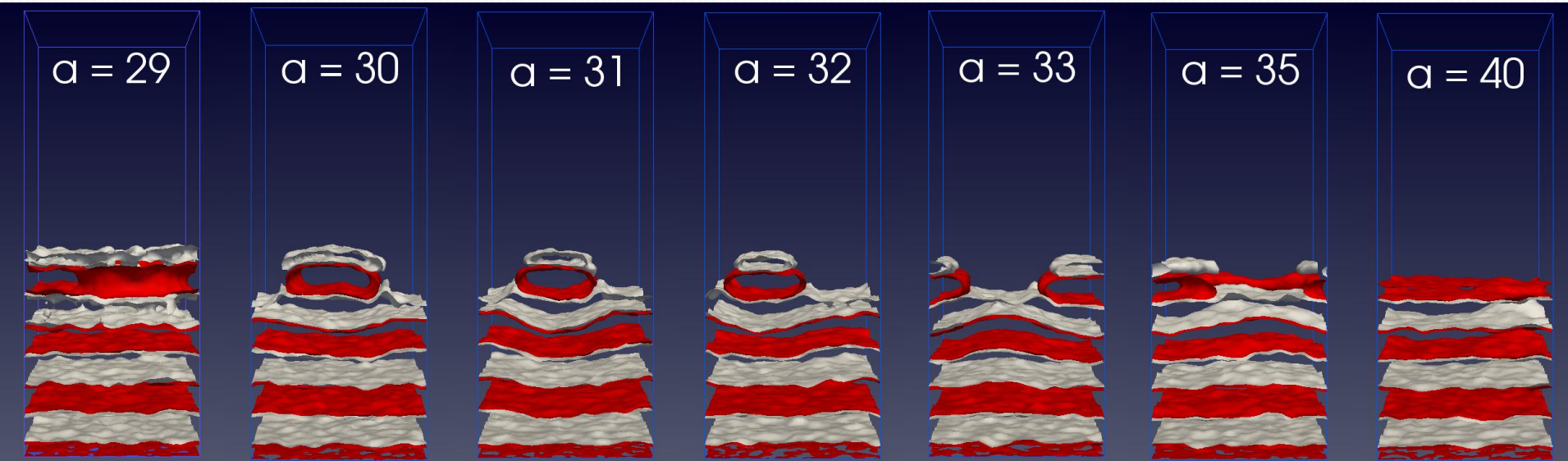
- Ячейка постоянного объема $V = 40 \cdot 40 \cdot 100$
- Начальная система – параллельные/перпендикулярные ламелли
- Диапазон изменения параметра взаимодействия блока А с растворителем от 29 до 40
- Параметр взаимодействия блока В с растворителем постоянен и равен 40
- Объемная доля блок-сополимера 0.4
- Ограничение по координате z – жесткие стенки ($z=0$, $z=100$)

Параллельная ориентация ламелл



Вид сверху. Снимки пленки с параллельными ламеллями при различных значениях параметра: дыры ($\alpha=29$), полосы ($\alpha=30-33$), перфорированная структура ($\alpha=35, 40$).

Белым цветом обозначены блоки сорта А, **красным** – сорта В.



Вид сбоку

Перпендикулярная структура ламелл

$\alpha = 29$

$\alpha = 30$

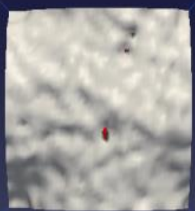
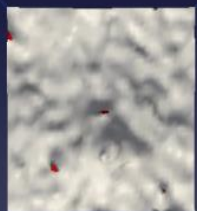
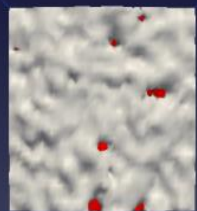
$\alpha = 31$

$\alpha = 32$

$\alpha = 33$

$\alpha = 35$

$\alpha = 40$



Вид сверху. Снимки пленки с перпендикулярными ламеллями при различных значениях параметра α . Белым цветом обозначены блоки сорта А, **красным** – сорта В.

$\alpha = 29$

$\alpha = 30$

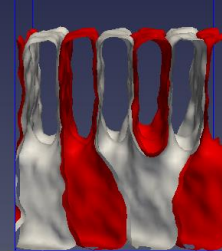
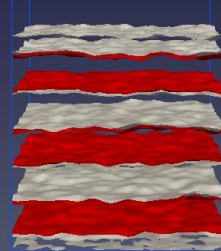
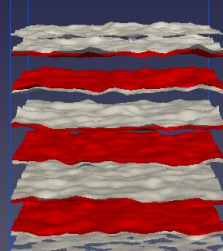
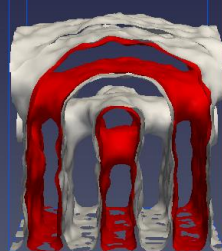
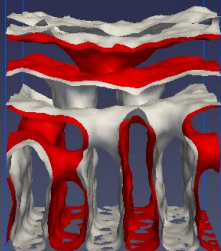
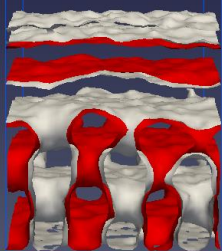
$\alpha = 31$

$\alpha = 32$

$\alpha = 33$

$\alpha = 35$

$\alpha = 40$



Вид сбоку

Выводы

- изучено изменение структуры тонкой пленки в зависимости от композиции блок-сополимера, рассмотрены полученные морфологии: цилиндрическая, ламеллярная и переходная между указанными двумя

Выводы

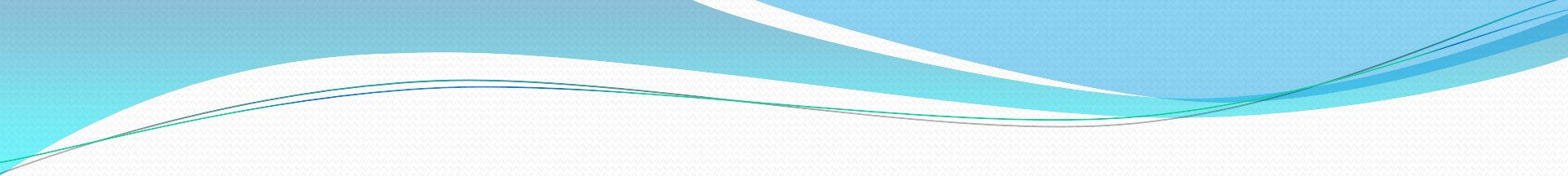
- исследовано набухание пленки блок-сополимеров в селективном растворителе в случае параллельной и перпендикулярной ориентации ламелей по отношению к подложке



Параллельная ориентация –
набухание пленки,
конформационные
изменения в верхнем
бислое



Перпендикулярная ориентация –
переориентация ламеллярной
структуры из перпендикулярной в
параллельную



Спасибо за внимание!