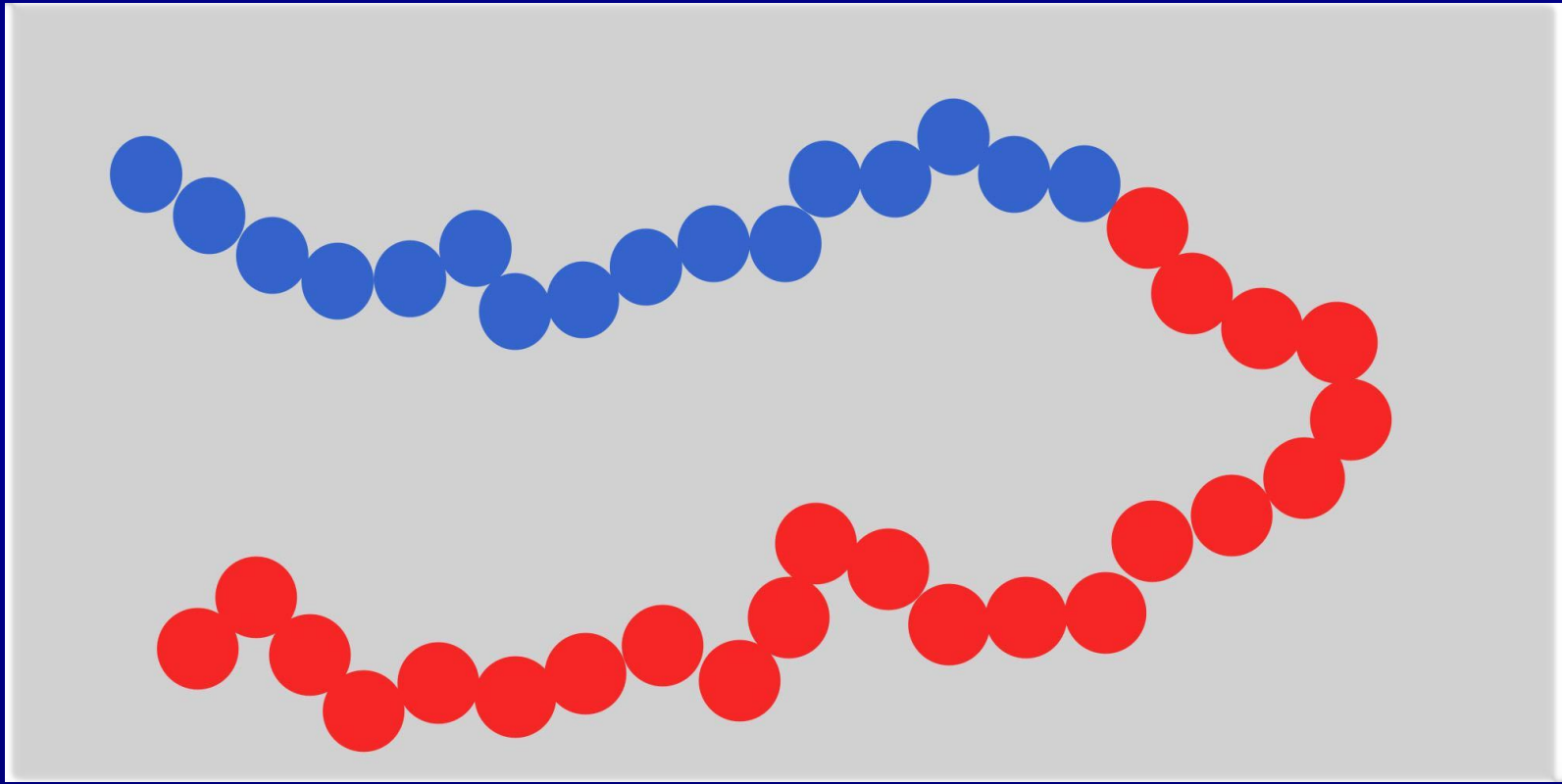
Микрофазное расслоение в расплаве двойных гребнеобразных полимеров

Выполнил студент Палюлин В.В.

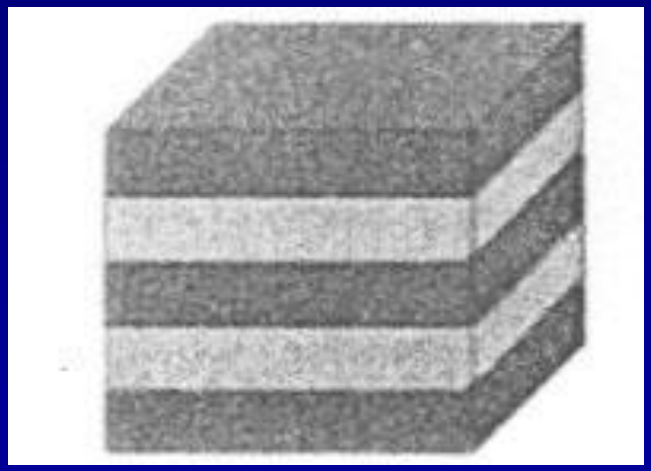
Научный руководитель: к.ф.-м.н. Потемкин И.И.

Микрофазное расслоение

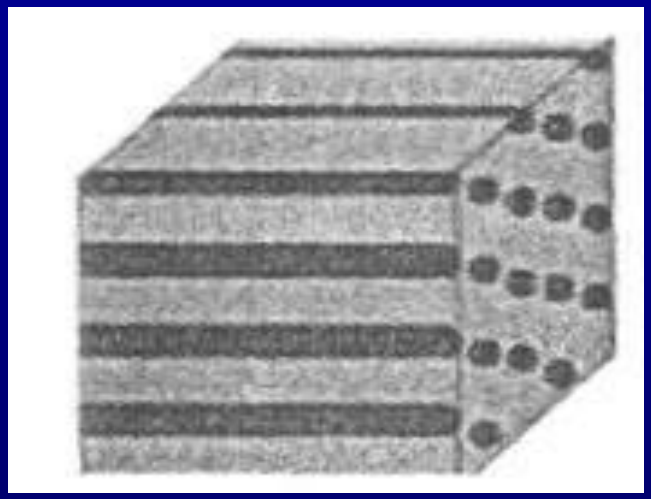


Микрофазное расслоение

Упорядоченные структуры: ламеллярная

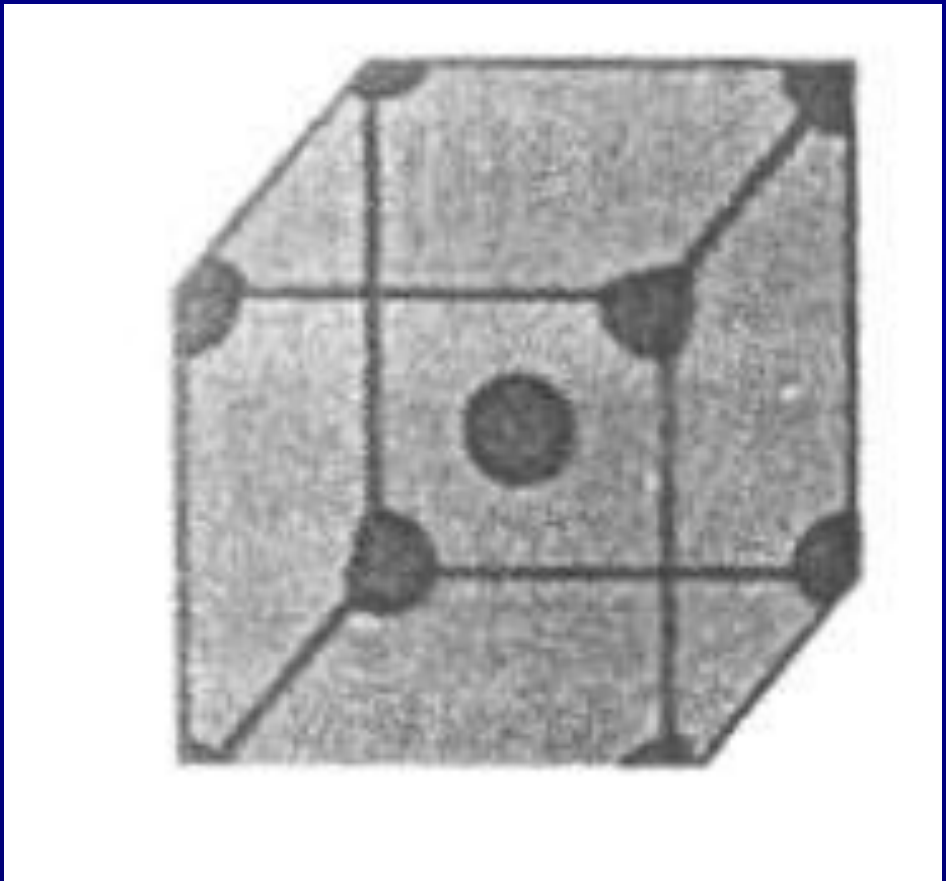


Упорядоченные структуры: цилиндрическая



Микрофазное расслоение

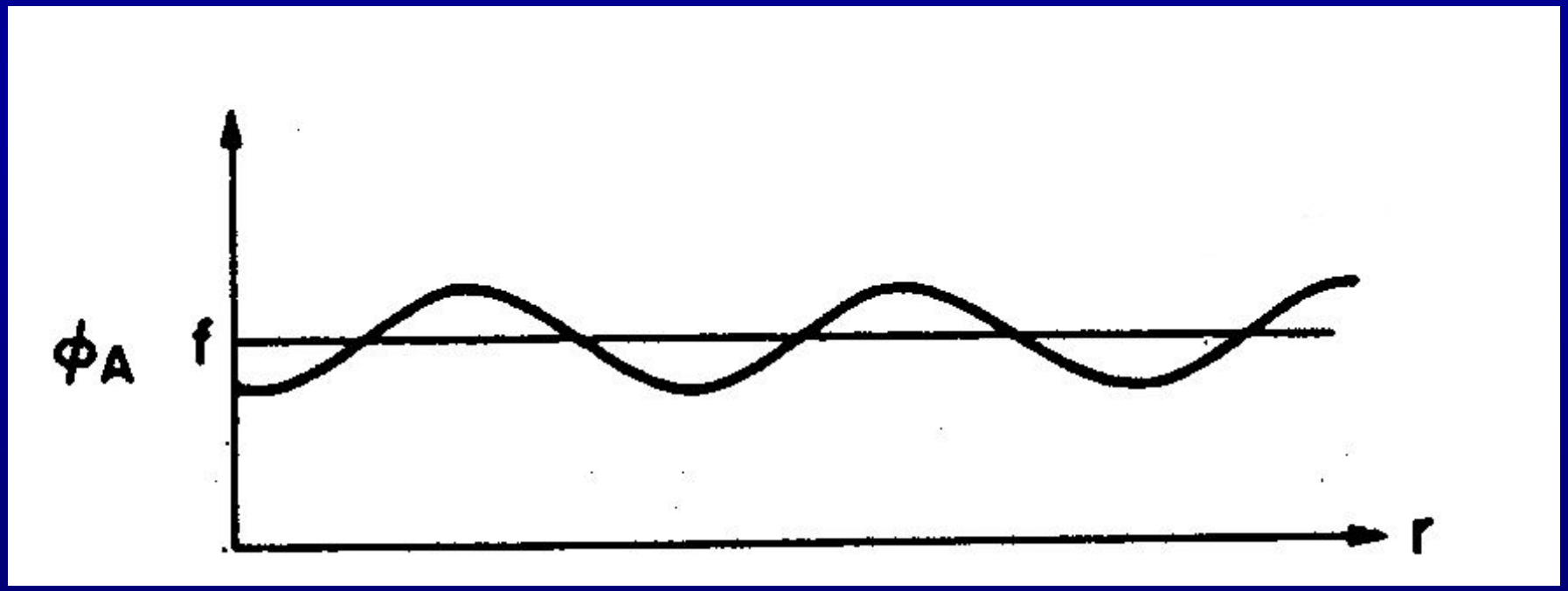
Упорядоченные структуры: сферическая



Основные подходы в изучении микрофазного расслоения:

режим слабой сегрегации

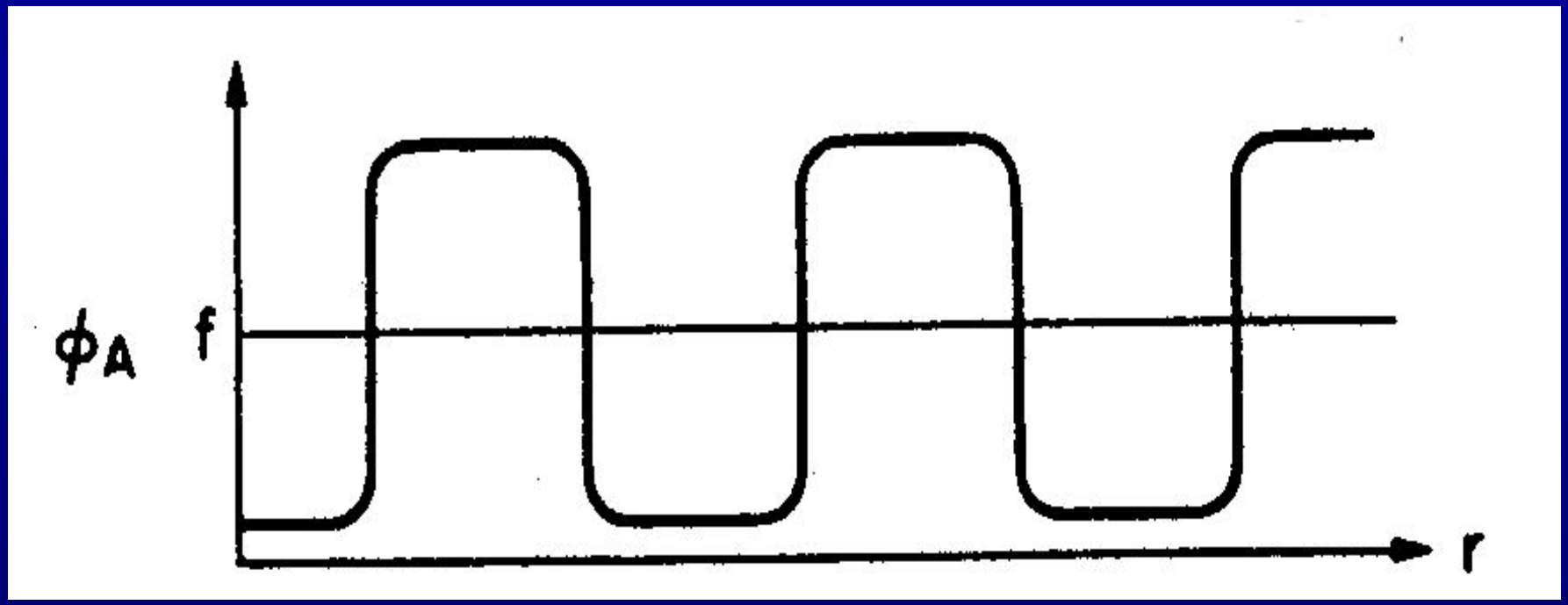
Профиль плотности звеньев А:



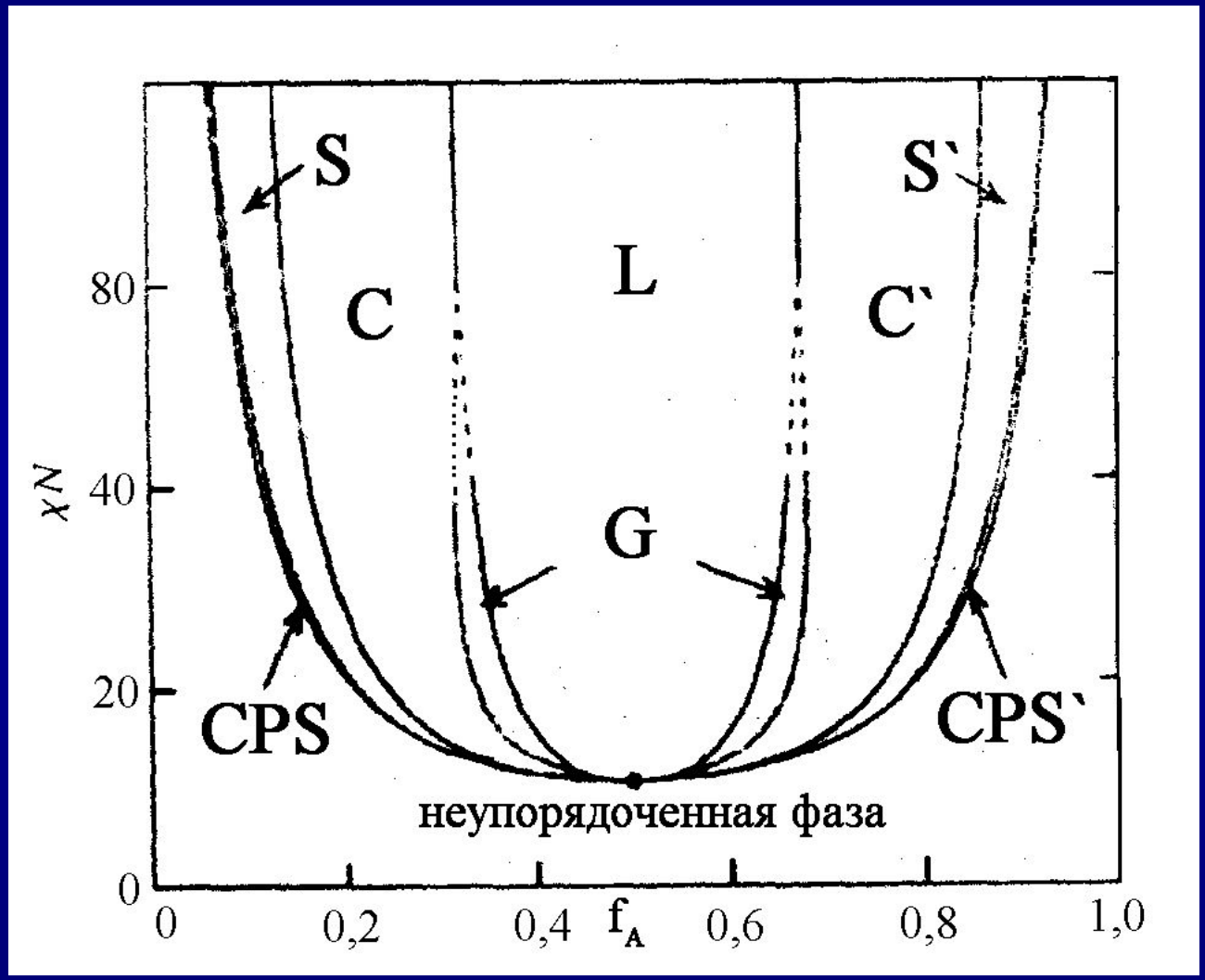
Основные подходы в изучении микрофазного расслоения:

режим сильной сегрегации

Профиль плотности звеньев А:

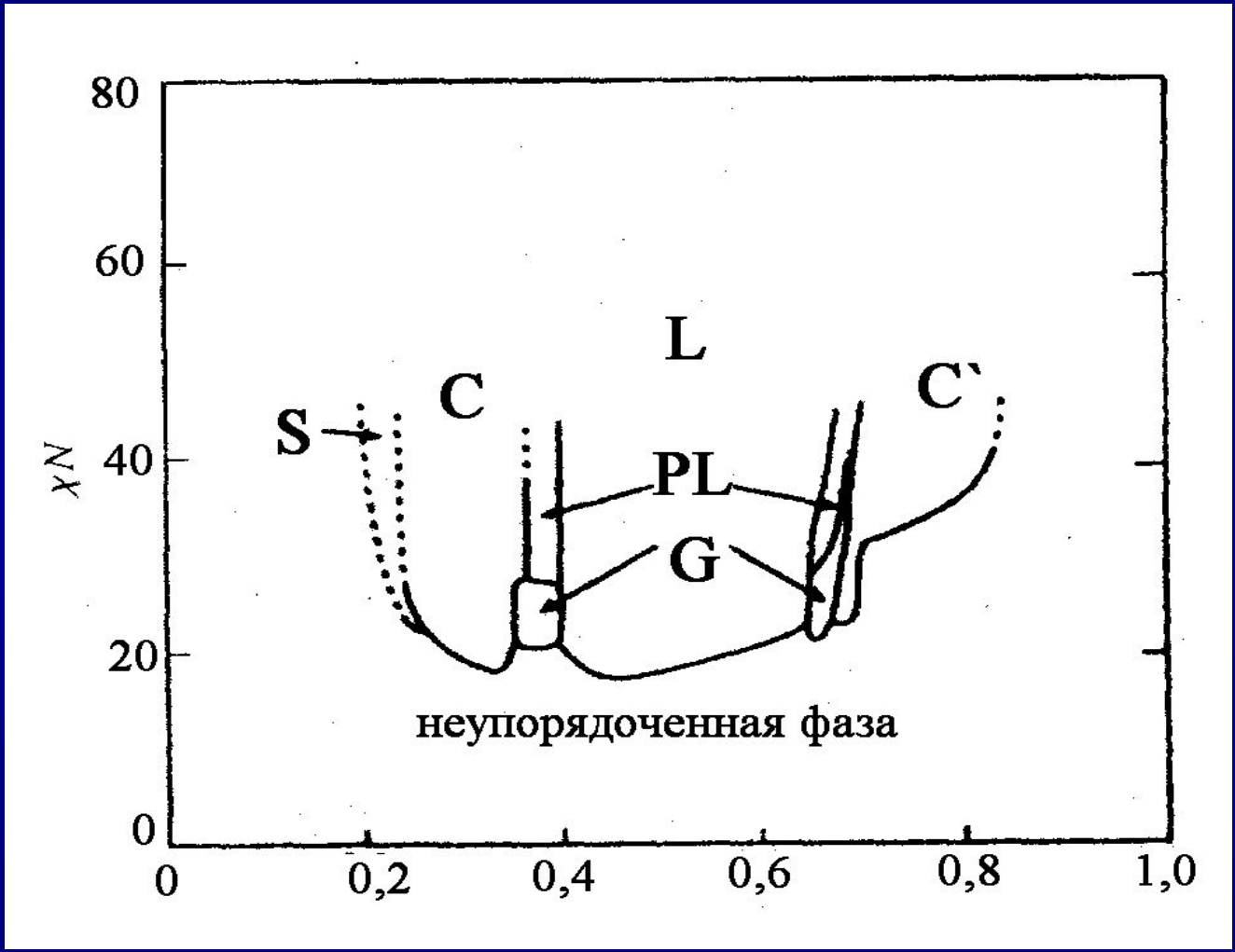


Теория самосогласованного поля



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

Экспериментальные данные

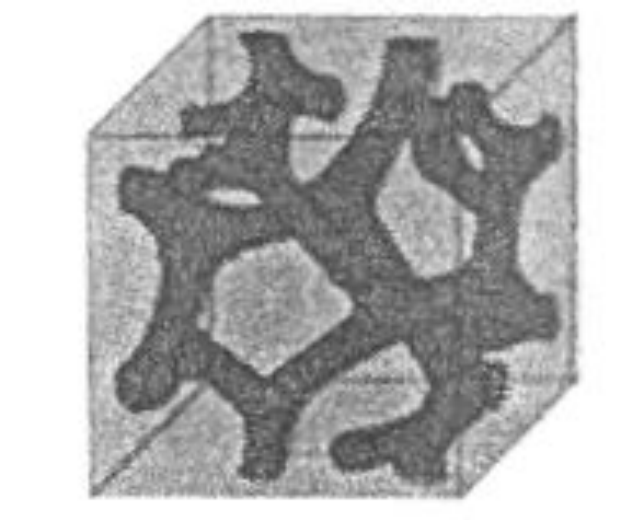


A.K. Khandpur, S. Foster, F.S. Bates, I.W. Hamley, A.J. Ryan, W. Bras, K. Amdal, K. Mortensen, *Macromolecules,* **28**,8796 (1995)

Микрофазное расслоение

Упорядоченные структуры: перфорированная ламеллярная

Упорядоченные структуры: гироид

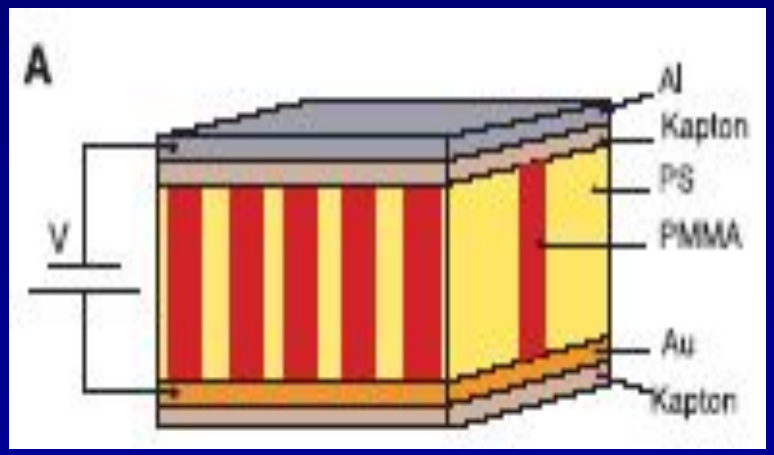


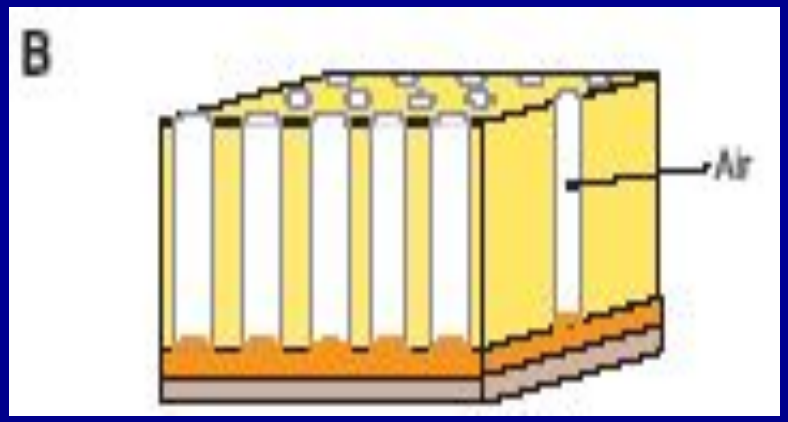
Создание массивов нанопроводов

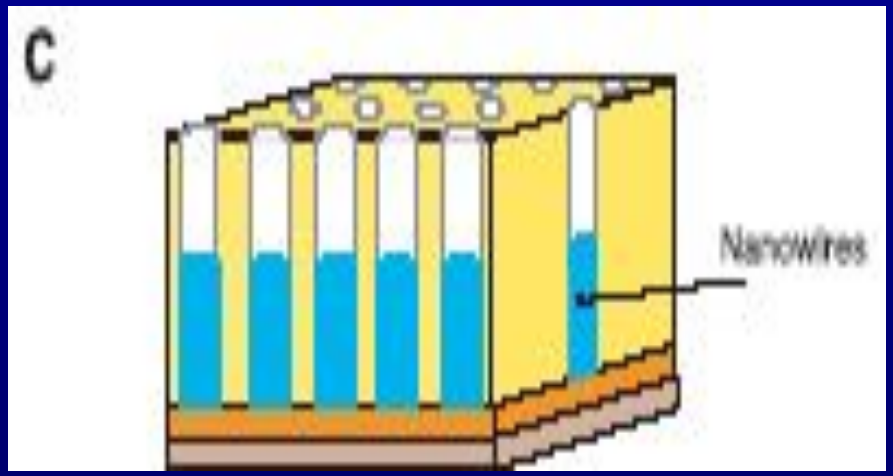
Плотность хранения информации
превышает 1 терабит/см^2

Ultrahigh-Density Nanowire Arrays Grown in Self-Assembled Diblock Copolymer Templates, Science, **290**, 2126,(2000)

Создание массивов нанопроводов







Литография с использованием микрофазных структур

- Создание периодических массивов “дыр” с плотностью ~ 10^{11} на $см^2$

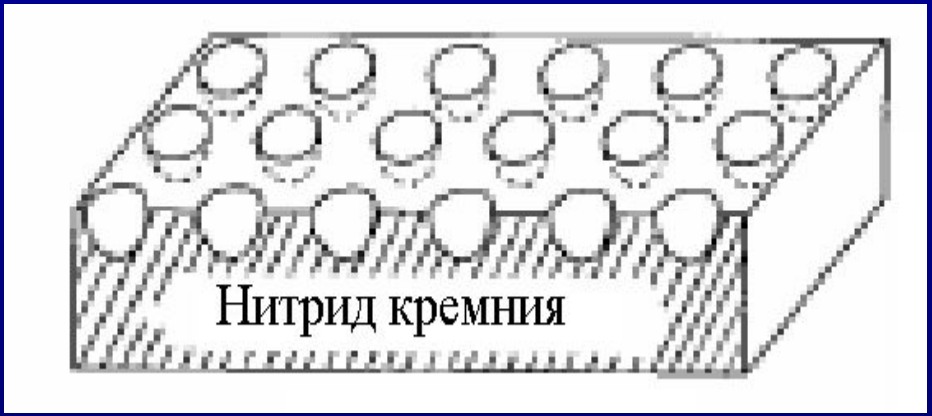
- Block-copolymer Lithography: Periodic Arrays of 10^{11} Holes in 1 sq. sm, Science, **276**, 1401,(1997)

Литография

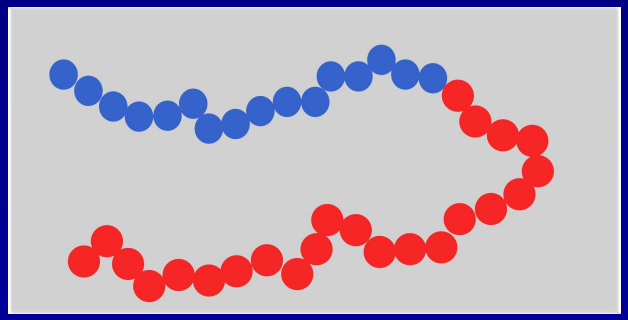
Нитрид кремния

Озонированный образец
Нитрид кремния

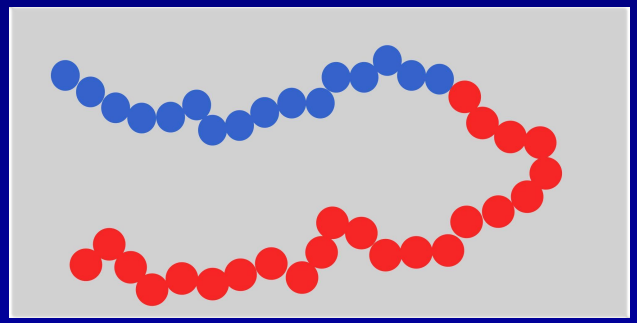
пучок ионов CF_4
Нитрид кремния


Нитрид кремния

Двойной гребнеобразный полимер

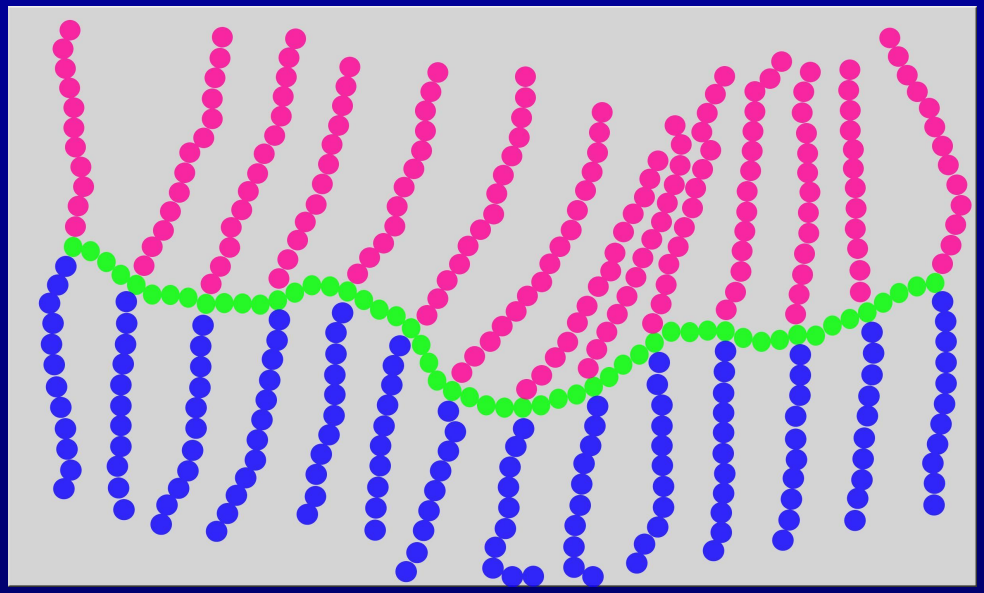


+



+ . . .

=



Основные предположения при теоретическом анализе задачи

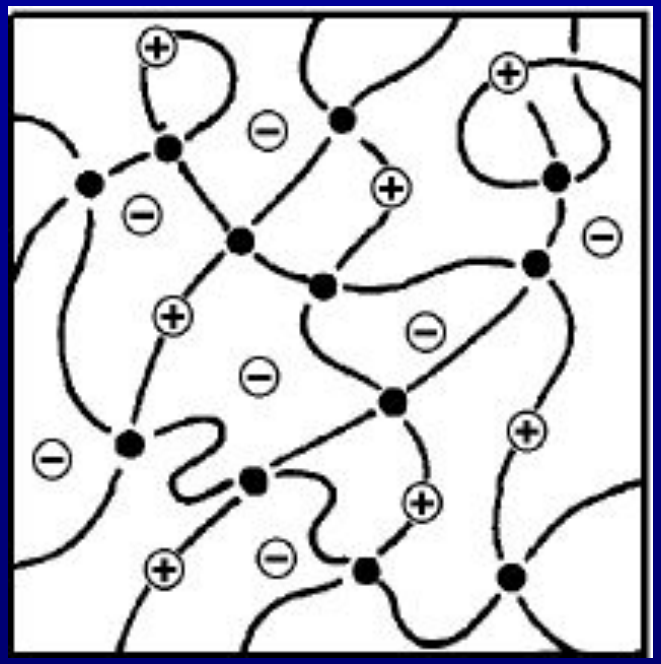
- Слабая сегрегация
- Одинаковые размеры звеньев
- Взаимодействие звеньев описывается параметром χ_{AB}

План решения

1. Найти статистическую сумму макромолекулы, т.е. свободную энергию $F=-T\ln Z$
2. Разложить свободную энергию в ряд по параметру порядка
3. Определить параметры критической точки по теории Ландау

Освоение методов статистической физики

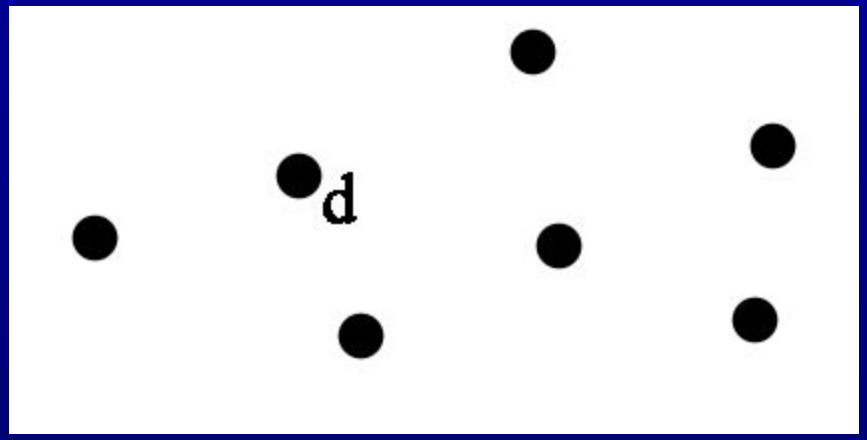
Полиэлекролитный гель набухает в избытке растворителя.
Число мономерных звеньев субцепи геля равно N,
число заряженных групп на субцепь равно m, N>>m>>1.
Используя выражение Флори для упругой свободной энергии
и пренебрегая взаимодействиями исключенного объема звеньев,
вычислить коэффициент набухания геля α.



$$\alpha = \sqrt{\frac{N}{\sigma}}$$

Освоение методов статистической физики

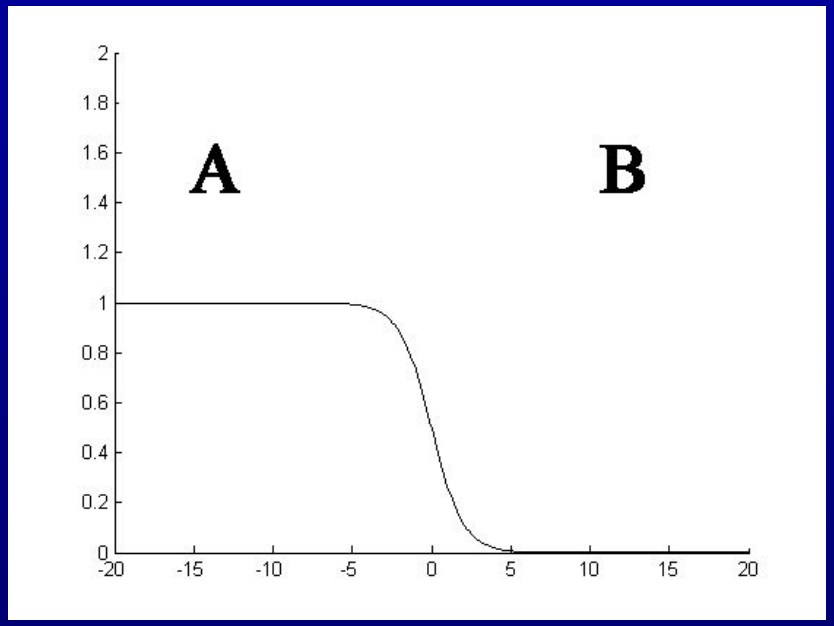
Молекулы разреженного газа обладают дипольным моментом d. Вычислить второй вириальный коэффициент электростатического взаимодействия молекул, считая их шариками радиуса r_0 и, предполагая, что взаимодействия малы: $d^2/r_0^3T<<1$.



$$B = \frac{256\pi^3 r_0^3}{3} - \frac{4\pi^3 d^4}{9T^2 r_0^3}$$

Освоение методов статистической физики

Для межфазной границы смеси гомополимеров сортов A и B одинаковой длины (N_A=N_B=N), вычислить коэффициент поверхностного натяжения раствора в пределе сильной несовместимости мономерных звеньев ($\chi N >> 1$). Энтропийные потери на межфазной границе за счет их неоднородного распределения учесть в приближении Лифшица



$$\sigma = \sqrt{\frac{\chi}{6}} aT$$

Изучение метода приближения случайных фаз

$$Z = const \exp\left(-\frac{1}{2} \int \frac{d^3 q}{(2\pi)^3} t_q^{-1} \rho_q \rho_{-q} \right)$$

$$\rho_q = \int dx \psi(x) e^{iqx} \quad \rho(x) = \psi(x) + \langle \rho(x) \rangle$$

$$t_q = \frac{N^2}{V} g_1\left(N \frac{a^2 q^2}{6}, 1 \right), \quad g_1(x, f) = 2\left[fx + \exp(-fx) - 1 \right] / x^2$$

Изучение метода приближения случайных фаз

$$Z = const \exp\left(-\frac{1}{2}\int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\left(t_{1q}t_{3q} - t_{2q}{}^2\right)^{-1}\left(t_{3q}\rho_q\rho_{-q} - 2t_{2q}n_q\rho_{-q} + t_{1q}n_q n_{-q}\right)\right)$$

$$t_{1q} = \frac{N^2}{V} g_1\left(N\frac{a^2q^2}{6}, 1\right), \quad g_1(x, f) = 2\left[fx + \exp(-fx) - 1\right]/x^2$$

$$t_{2q} = \frac{2}{Vy}(1 - \exp(-Ny)), \quad y = \frac{a^2q^2}{6}$$

$$t_{3q} = \frac{2}{V}(1 + \exp(-Ny)), \quad y = \frac{a^2q^2}{6}$$

Выводы

- При исследовании учебных задач было начато освоение математического аппарата метода случайных фаз, а также других методов статистической физики

- Сформулированы основные приближения, с учетом которых будет производится решение задачи