

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

УДК 544.72.05
ГРНТИ 31.15.35

КАПЛИ ИЗ НАНОЧАСТИЦ НА МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЕ ПОЛИМЕРНАЯ ЩЕТКА/РАСТВОРИТЕЛЬ

О. А. Гуськова¹, К. Зайдель²

¹Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, Hohe Str. 6, 01069
Dresden, Germany

²Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Science Park Golm, 14424 Potsdam, Germany

Рассматривается поведение наночастиц на ультратонких полимерных слоях (гомополимерных щетках), находящихся в контакте с растворителем. Результаты моделирования методом диссипативной динамики частиц показывают, что варьируя параметры взаимодействия между компонентами системы, возможно контролировать организацию наночастиц на свободной поверхности щетки, где нановключения агрегируют с образованием капель различной формы.

Ключевые слова: полимерная щетка, наночастицы, смачивание, растекание, краевой угол смачивания, правило Антонова, компьютерное моделирование, диссипативная динамика, S - и E -коэффициенты.

Взаимодействие между полимерной щеткой и коллоидными частицами (металлические наночастицы, квантовые точки, фуллерены, углеродные нанотрубки, белковые глобулы, клетки, дендримеры, полимерные частицы и т.д.) является центральным предметом в науке о материалах, поскольку сочетание составных частей означает не только комбинацию их свойств, но и проявление в конечном счете новых характеристик гибридных материалов. Например, золотые наночастицы (НЧ), упорядоченные в массивы на поверхности полиэтиленгликольных щеток, проявляют поверхностный плазмонный резонанс (если расстояние между частицами не превышает $2.5d$, где d – диаметр наночастицы) именно благодаря nanoорганизации частиц со строгим порядком [1].

Несмотря на разницу в природе НЧ, используемых в нано- и биотехнологии [1; 2], взаимодействие между полимерной щеткой и нановключениями в обоих случаях зависит от плотности пришивки цепей ρ_a , термодинамического качества растворителя (температуры), химических свойств полимера и его архитектуры, размеров и формы наночастиц, взаимодействий между полимером и НЧ [3; 4]. Чтобы охарактеризовать организацию НЧ в полимерной щетке, т. е. распределение наполнителя по полимеру, Гальпериным и др. [3] была предложена следующая классификация для системы, находящейся в растворителе при изменении его качества:

- НЧ, проникающие в щетку за счет трансляционной энтропии и имеющие отталкивательные взаимодействия с полимером и поверхностью пришивки (стенкой);
- в случае притяжения между НЧ и полимером частица может претерпевать первичную адсорбцию на стенку
- или вторичную адсорбцию на полимерных цепочках на поверхности или внутри полимерного слоя.

В зависимости от размера НЧ и плотности пришивки полимерных цепей ρ_a Ким и др. [5] разработали теорию инфильтрации нановключений и их упорядочения в щетке, принимая во внимание взаимодействия исключенного объема. Похожие идеи рассматривались также Биндером и др. [6]. По классификации, предложенной в [5], НЧ могут быть «растворимыми» и «нерастворимыми» в полимерной щетке в зависимости от баланса притяжения и отталкивания всех компонентов системы. «Растворимые» НЧ распределяются по всей толщине щетки, в то время как «нерастворимые» частицы формируют агрегаты, или капли на границе раздела двух фаз – полимера и растворителя [5; 7]. Форма агрегатов также зависит от концентрации (n – число НЧ) НЧ: при низкой концентрации форма напоминает вертикально ориентированный цилиндр, при высоких – вытянутые кластеры располагаются горизонтально и напоминают по форме французский багет (по терминологии [5; 7]). При промежуточных концентрациях образуется линзообразная капля (рис. 1).

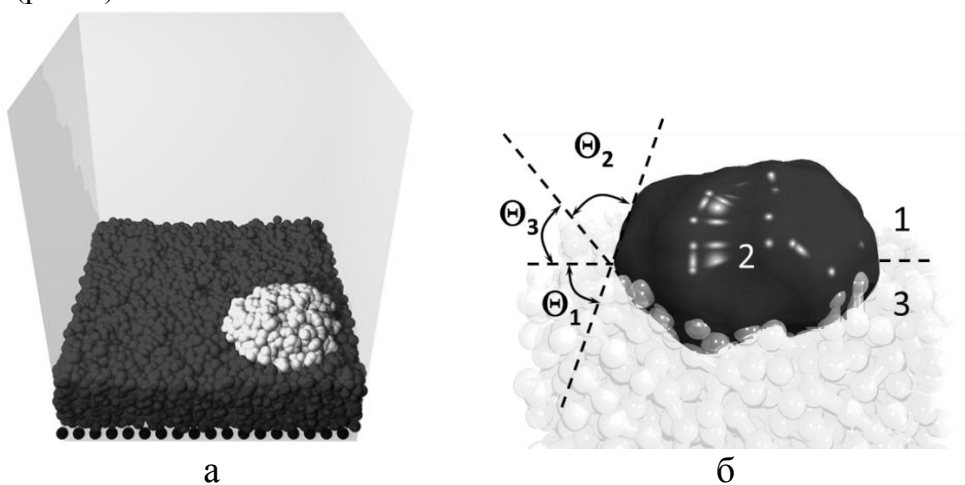


Рис 1. Мгновенная фотография системы при $n=64$. Агрегат из «нерастворимых» НЧ при $n=64$ образуется на полимерной щетке (а), растворитель не показан; б – частичное смачивание границы двух несмешивающихся жидкостей 1 (растворитель) и 3 (щетка) третьей фазой 2 (НЧ). Линзообразная капля характеризуется тремя краевыми углами смачивания: $\Theta_1 + \Theta_2 + \Theta_3 = \pi$ [8]

Конечная форма капель из «нерастворимых» НЧ характеризуется тремя поверхностными натяжениями: γ_{13} , γ_{12} и γ_{23} на соответствующих

границах раздела фаз (рис. 1) [5, 8]. Их значения определяют коэффициенты $S \equiv \gamma_{13} - \gamma_{23} - \gamma_{12}$ и $E \equiv \gamma_{13} + \gamma_{23} - \gamma_{12}$. В теории для полимерных щеток было показано [5], что если $S > 0$, $E > 0$, то частицы смачивают межфазную границу полимер/растворитель (общий случай для трехфазной системы будет описан ниже). Если же $S < 0$, $E > 0$, тогда агрегат будет располагаться на поверхности полимерной щетки. Эта теория, подкрепленная данными компьютерного моделирования [9–11], объясняет структурообразование в системе нанокристаллы золота/этиленпропиленовая щетка, обнаруженное в эксперименте [12; 13].

В предыдущих исследованиях агрегации НЧ на полимерной щетке [11] использовалось достаточно грубое приближение для оценки коэффициентов S и E , в котором поверхностному натяжению γ_{ij} соответствовал параметр взаимодействия a_{ij} (основной параметр в методе диссипативной динамики частиц, который будет описан далее), где i и j – сорта частиц, или фазы (рис. 1), хотя установленная зависимость поверхностного натяжения от параметров взаимодействия между разными компонентами гораздо сложнее [14; 15]. Кроме того, в компьютерном эксперименте [16–18], а также в теории самосогласованного поля [19] рассматривалось смачивание твердых полимерных поверхностей, т.е. растекание капли по недеформируемой границе.

В данном исследовании рассматривается влияние короткодействующих взаимодействий на процессы смачивания наночастицами границы щетка/растворитель с помощью параметра a_{ij} . НЧ моделируются «нерастворимыми», т.е. агрегирующими с образованием капли на мягкой, деформируемой свободной поверхности полимерной щетки. Способность к деформации контролируется плотностью пришивки цепочек $= \rho_a R_{ee}^2$, где R_{ee} – среднее расстояние между концами цепи полимера в расплаве при длине цепи N . Таким образом, в данном исследовании независимым способом меняется и деформируемость поверхности, и несовместимость между НЧ и полимером.

Модель и метод моделирования

Метод диссипативной динамики (ДДЧ) является огрубленным мезоскопическим методом моделирования, в котором рассматривается поведение не отдельных атомов или атомных групп, а мономерных звеньев полимера или микроколичеств жидкости [20; 21]. Этот метод применялся для моделирования организации наночастиц на гомополимерной щетке [11], для изучения микрофазного расслоения в диблок-сополимерных привитых слоях, а также для исследования смачивания структурированных поверхностей [22–24]. Суть метода заключается в описании поведения системы частиц с учетом законов макроскопической гидродинамики и диссипации. Элементарной частицей в методе ДДЧ является мягкая сфера с массой $m=1$, движущаяся по уравнениям Ньютона. Полная сила, действующая на i -частицу (r_c – радиус частицы, являющийся также единицей длины и радиусом взаимодействия), запи-

сывается в следующем виде: $\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R)$, где первое слагаемое

описывает консервативные силы взаимодействия частиц, второе слагаемое – диссипативные силы (силы трения, в первую очередь вязкость), и, наконец, третье слагаемое является силой, отвечающей за случайные блуждания (броуновское движение). При $r_{ij} < r_c$ слабо меняющаяся консервативная сила описывается следующим уравнением:

$\mathbf{F}_{ij}^C = a_{ij} (1 - r_{ij}/r_c) \hat{\mathbf{r}}_{ij}$ (при $r_{ij} > r_c$ значение силы равно нулю), где отталкивание между частицами задается параметром a_{ij} в единицах $k_B T/r_c$ (см. таблицу). Здесь обозначения B, P, S и W соответствуют полимерным частицам (**brush**), НЧ (**particle**), растворителю (**solvent**) и частицам непроницаемой стенки (**wall**) соответственно, а фактор $k_B T$ определяет тепловую энергию при температуре T . Невалентные взаимодействия в системе носят исключительно отталкивательный характер. Чем больше значение a_{ij} , тем сильнее отталкивание между соответствующими частицами i и j , т.е. параметр a_{ij} фактически описывает несовместимость компонентов, как и параметр Флори-Хаггинса χ_{ij} . Пользуясь феноменологическими соотношениями [25], можно всегда соотнести модельные параметры a_{ij} с параметрами реальных полимеров χ_{ij} .

Параметры взаимодействия a_{ij} , используемые в моделировании (в единицах $k_B T/r_c$)

i\j	B	P	S	W
B	25	a_{PB}	50	25
P	a_{PB}	25	a_{PS}	25
S	50	a_{PS}	25	0
W	25	25	0	0

Примечание. Значения a_{PB} и a_{PS} будут указаны для конкретных примеров в тексте.

В данном исследовании полимерная щетка выступает прототипом деформируемой поверхности, в которой гибкие полимерные цепочки длиной $N=30+1$ пришиты на плоскую непроницаемую стенку. Ячейка моделирования представляет собой параллелепипед (рис. 1) с длиной ребер $L_x=L_y=65r_c$ у основания, представляющего собой стенку, и $L_z=80r_c$. Непроницаемая неподвижная стенка состоит из трех слоев частиц с расстоянием между слоями $0.4r_c$, чтобы не допустить прохождение растворителя, полимера или НЧ сквозь стенку. Периодические граничные условия накладывались на два направления из трех: x и y .

Первый сегмент каждой полимерной цепочки в щетке необратимо (химически) пришивался к стенке, образуя гексагональную решетку (рис. 1). Связи между полимерными звеньями задавались гармоническим потенциалом. Плотность пришивки ρ_a определяется числом цепей на единицу площади стенки $L_x \cdot L_y$. Этот параметр (а также длина цепи N) контролирует деформируемость поверхности [9]. Расчеты проводятся для пяти значений ρ_a (рис. 2), но большинство расчетов выполнено при

$\rho_a=0.3$ и 0.6 . Это дает возможность исследовать различные физические режимы для деформируемой поверхности: при низкой плотности поверхность является очень мягкой, при высокой плотности полимерные цепи вытягиваются из-за взаимодействий исключенного объема и поверхность характеризуется как менее деформируемая [9].

НЧ представляет собой собой агрегат, составленный из девяти ДДЧ-сфер радиуса r_c , связанных между собой гамоническим потенциалом. Радиус инерции НЧ составляет $R_g=0.75r_c$. В расчетах варьируется число НЧ n : 32, 64, 128 и 256. Наночастицы моделируются «нерастворимыми», т.е. образующими капли разной формы на межфазной границе полимер/растворитель при варьировании параметров a_{PB} и a_{PS} , отвечающих за короткодействующие силы. Большинство расчетов выполнено при $n=64$ и 128.

Растворитель моделировался как ДДЧ-частица радиусом r_c . В методе ДДЧ предполагается, что в одной такой частице содержится три молекулы воды, поэтому общая плотность системы $\rho=3$. Используя объем молекулы воды, в [26] было показано, что единица длины r_c составляет 6.46 \AA и единица времени τ соответствует 14.1 ± 0.1 пс. В большинстве расчетов параметр взаимодействия $a_{BS}=50$, т.е. цепи полимерной щетки находятся в сколлапсированном состоянии. В этом случае поверхность между щеткой и растворителем напоминает границу между плотной полимерной пленкой и растворителем.

Расчеты выполнены в программах DPDChem [27] и DMPC Simulation Code (DPD/MD Polymer Code) [28]. Длина траекторий составляет 10^7 ДДЧ шагов с шагом интегрирования 0.04τ .

Результаты и их обсуждение

А. Свободная поверхность полимерной щетки

Сначала исследовались полимерные щетки различной толщины (при варьировании плотности пришивки полимерных цепей) при ухудшении качества растворителя (рис. 2а). Из рисунка следует, что шероховатость привитого слоя незначительно (на величину одного мономерного звена) возрастает с увеличением толщины пленки, что согласуется с экспериментальными исследованиями (рис. 2б) [29–31]. В эксперименте толщина пленки изменялась двумя способами: изменением длины полимерных цепей или варьированием плотности пришивки. При ухудшении качества растворителя поверхность между щеткой и растворителем становится более гладкой (рис. 2а): при одной и той же плотности пришивки шероховатость пленки растет с уменьшением a_{BS} .

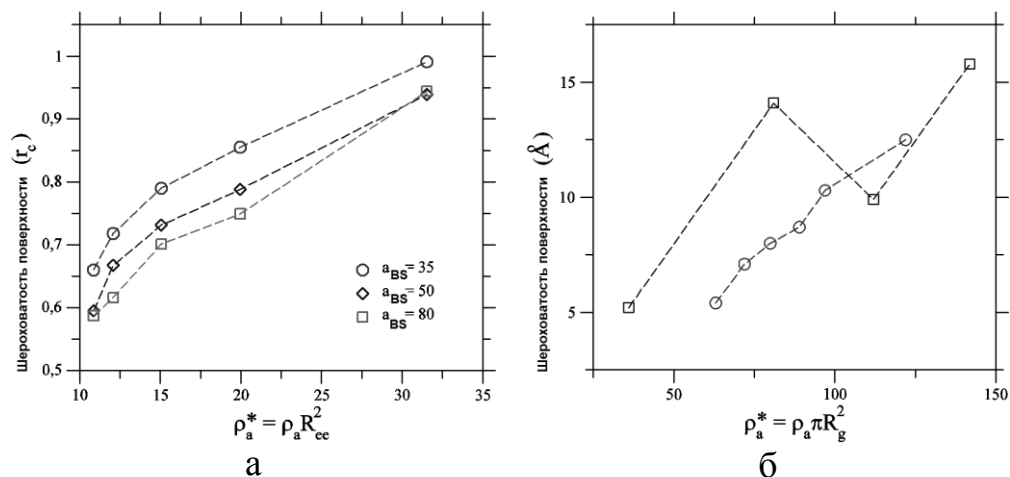


Рис. 2. Шероховатость свободной поверхности щетки: а – расчеты при трех значениях a_{BS} как функция плотности пришивки $\rho_a^* = \rho_a R_{cc}^2$; б – графическое представление экспериментальных данных по шероховатости поверхности полистирольной щетки при изменении молекулярной массы полимерных цепей при фиксированной плотности (кружки) или плотности пришивки при фиксированной длине цепи макромолекул (квадраты) [29–31]

Поверхностное натяжение на границе щетка/растворитель можно контролировать короткодействующими силами, например Ван-дер-Ваальсовыми [32], с помощью параметра a_{BS} .

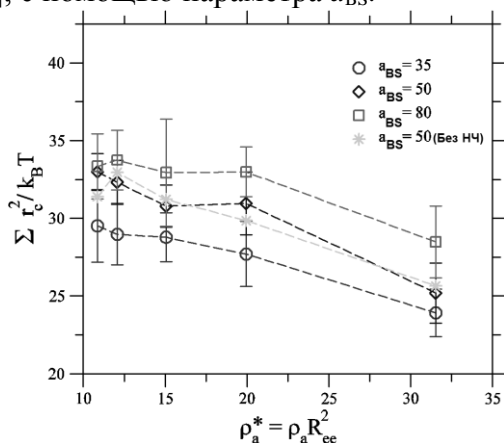


Рис. 3. Поверхностное натяжение $\gamma_{13} = \Sigma r_c^2 / k_B T$ на границе щетка/растворитель как функция плотности пришивки $\rho_a^* = \rho_a R_{cc}^2$ для трех значений a_{BS} (с НЧ) и при $a_{BS}=50$ без НЧ. Показаны стандартные отклонения величин

Рис. 3 показывает изменение поверхностного натяжения на межфазной границе щетка/растворитель с ростом плотности пришивки (натяжение γ_{13} рассчитывалось по методике, описанной в [33]). При промежуточных значениях $\rho_a^* = \rho_a R_{cc}^2$ поверхностное натяжение меняется довольно слабо, что согласуется с результатами [9].

Б. Форма жидких линз

При наличии третьей фазы в системе (НЧ в виде капли на границе щетка/растворитель) межфазная поверхность уже не является плоской, и необходимо принимать во внимание эффекты, связанные с ее кривизной. В этом случае фазе 2 энергетически невыгодно растекаться по фазе 3 (рис. 1), и она формирует жидкую линзу. Антоновым [34] было показано, что при достижении равновесия в общем случае трехфазной системы между поверхностными натяжениями выполняется равенство $\gamma_{13} = \gamma_{23} + \gamma_{12}$. Если равновесие не достигнуто, то это равенство не выполняется, $\gamma_{13} < \gamma_{23} + \gamma_{12}$ (рис. 4) и образуются капли. В теории Кима и др. [5] аналогичным неравенством описано поведение капли на полимерной щетке.

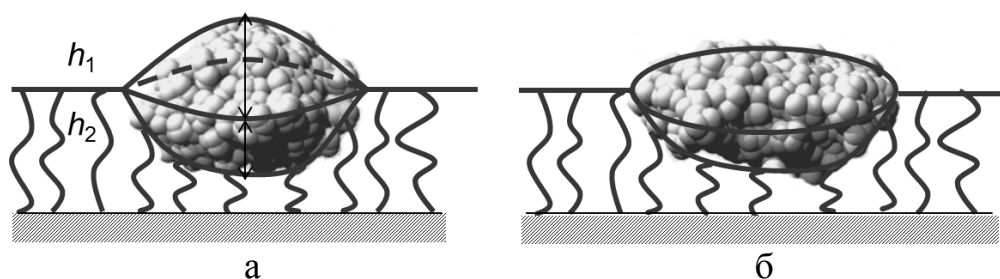


Рис. 4. Формы плавающих капель при $a_{PB}=50$ (а) и $a_{PB}=30$ (б) при $n=64$, $a_{BS}=50$, $a_{PS}=75$ и $\rho_a=0.6$; для первого набора параметров линза образована из двух шаровых сегментов с высотами h_1 и h_2 , для второго набора параметров капля имеет форму полулинзы (один шаровой сегмент) с практически плоской контактной линией с растворителем. Полимерная щетка показана схематически

Структура таких линз определяется плотностями сосуществующих фаз и межфазными энергиями [35]. На рис. 4 показаны различные формы жидких линз, обнаруженных в компьютерном эксперименте. В большинстве случаев линзы были образованы из двух шаровых сегментов с высотами h_1 и h_2 (рис. 4а). Однако с уменьшением отталкивания между щеткой и НЧ (при фиксированном значении $a_{PS}=75$) капля обнаруживает заметное отклонение от этой формы (рис. 4б).

Рассмотрим подробнее влияние силы отталкивания a_{PB} на положение капли в щетке и соотношение высот ее шаровых сегментов (рис. 5). С ростом параметра a_{PB} с 50 до 80 щетка выталкивает каплю в растворитель, как видно из профилей плотности, приведенных на рис. 5а. Одновременно с изменением позиции капли в щетке растет отношение h_1/h_2 , также указывающее на увеличение числа НЧ в шаровом сегменте, экспонированном в растворитель (рис. 5б).

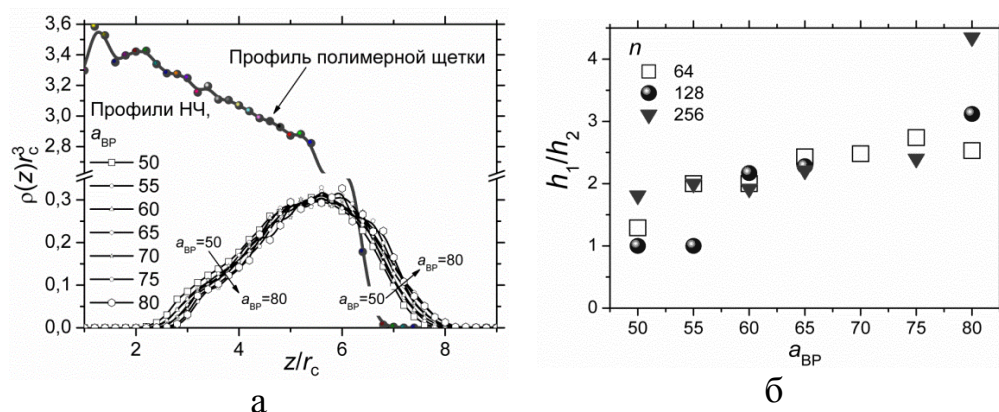


Рис. 5. Профили плотности щетки и наночастиц при $n=64$ (а) и отношение h_1/h_2 для капель $n=64, 128$ и 256 (б) как функция параметра a_{PB} ($a_{BS}=50, a_{PS}=75, \rho_a=0.6$)

В. Коэффициенты S и E

Прямое измерение краевых углов смачивания поверхностей микроскопическими количествами жидкости является непростой задачей [19]. Во-первых, довольно сильно нарушена граница капля/растворитель (пар) вблизи контактной линии, поскольку поверхностное натяжение на контактной линии в трехфазной системе сильно деформирует каплю. Во-вторых, для сферических микрокапель большую роль играет линейное натяжение, из-за которого появляется зависимость краевого угла смачивания от радиуса капли r_b по уравнению Гретца [36]. В эксперименте линейное натяжение препятствует растеканию капли, если радиус смачивания $r_b < 20-30$ нм. В предыдущих работах при изучении полимерных капель на поверхности щетки [9; 37], чтобы избежать дополнительного вклада от линейного натяжения, моделировались цилиндрические капли, которые простирались по полимерной щетке вдоль одного направления (x или y).

Контактные углы Θ_1, Θ_2 и Θ_3 (рис. 1б) определялись из анализа графиков контуров плотности капель в координатах $y/r_c - z/r_c$ как функции параметра a_{PB} и размера капель (числа НЧ) в капле. Аналогичная методика расчета контактных углов описана в [9]. Затем значения углов, а также поверхностного натяжения на щетке γ_{13} использовались для расчета двух натяжений γ_{12} и γ_{23} и коэффициентов S и E (рис. 6 и 7).

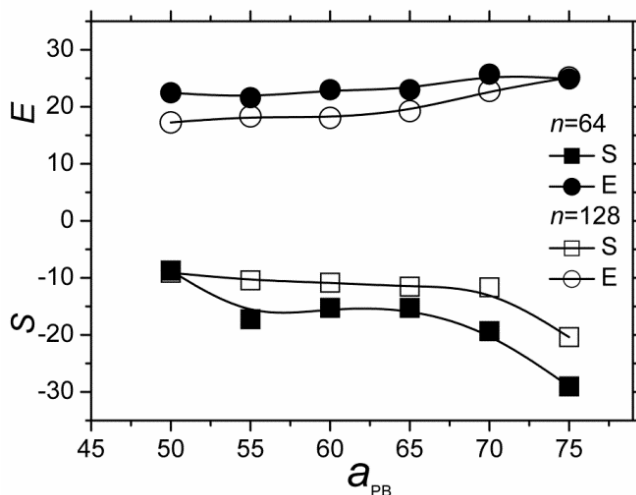


Рис. 6. S и E -коэффициенты для капель НЧ при $n=64$ и 128 как функция параметра a_{PB} ($a_{BS}=50$, $a_{PS}=75$, $\rho_a=0.6$)

Как следует из рис. 6, для всех значений a_{PB} коэффициенты $S < 0$ и $E > 0$, что в согласии с теорией Кима и др. [5, 7] указывает на агрегацию наночастиц на поверхности полимерной щетки. С ростом несовместимости между частицами щетки и НЧ оба коэффициента, оставаясь в области отрицательных и положительных значений, растут по модулю, что указывает на еще бóльшую несмачиваемость полимерной поверхности каплей из наночастиц.

Поскольку в данной работе рассматриваются капли в форме линз, необходимо учитывать кривизну контура смачивания $1/r_b$ (рис. 7). Несмотря на то что для всех значений n капли остаются микроскопическими (их радиусы в пересчете значительно меньше 20 нм даже для $n=256$) и линейное натяжение влияет на значения краевых углов смачивания, коэффициенты S и E изменяются лишь незначительно и для всех размеров каплей $S < 0$ и $E > 0$.

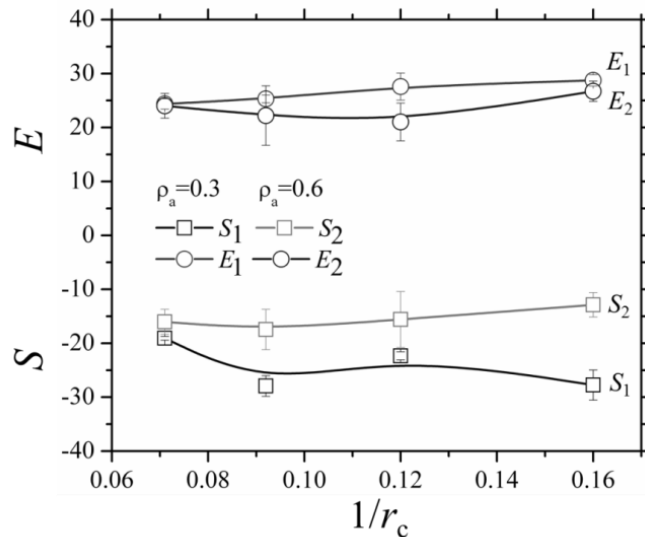


Рис. 7. Коэффициенты S и E как функция $1/r_b$, где r_b – радиус капли в плоскости x - y для $n=32$ (максимальное значение $1/r_b$), 64, 128 и 256 (минимальное значение $1/r_b$) при $\rho_a=0.3$ (S_1 , E_1) и $\rho_a=0.6$ (S_2 , E_2); $a_{BS}=50$ и $a_{PS}=75$. Показаны стандартные отклонения величин

В данной работе выполнялось моделирование межфазной границы щетка/НЧ/растворитель методом диссипативной динамики частиц. Частицы моделировались «нерастворимыми», т.е. образующими капли на свободной поверхности щетки. Во-первых, внимание уделялось свойствам деформируемой поверхности полимерной щетки – шероховатости ее поверхности и поверхностному натяжению. Смачивание поверхности щетки исследовалось в зависимости от плотности пришивки цепей, а также параметра взаимодействия между щеткой и НЧ. Были обнаружены капли НЧ, имеющие форму линзы, состоящей из двух или одного шаровых сегментов. Во-вторых, были рассчитаны S и E -коэффициенты. Эти данные находятся в согласии с теоретическими предсказаниями [7] и результатами компьютерного моделирования [11].

Работа выполнена в Институте коллоидов и границ раздела Макса Планка (г. Потсдам).

Список литературы

1. Onses M.S., Nealey P.F. // Small. 2013. V. 9. P. 4168–4174.
2. Rahim F.A., Dong-Hwan K. // RSC Adv. 2013. V. 3. P. 9785–9793.
3. Halperin A., Kröger M., Zhulina E.B. // Macromolecules 2011. V. 44. P. 3622–3638.
4. Binder K., Milchev A. // J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys. 2012. V. 50. P. 1515–1555.
5. Kim J.U., O'Shaughnessy B. // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. P. 238301 (1–4).
6. Yaneva J., Dimitrov D.I., Milchev A., Binder K. // J. Colloid Int. Sci. 2009. V. 336. P. 51–58.
7. Kim J.U., O'Shaughnessy B. // Macromolecules 2006. V. 39. P. 413–425.
8. Van Eijk M.C.P., Leermakers F.A.M. // J. Chem. Phys. 1999. V. 110. P. 6491–6499.
9. Léonforte F., Müller M. // J. Chem. Phys. 2011. V. 135. P. 214703 (1–12).
10. Bresme F., Quirke N. // J. Chem. Phys. 2000. V. 112. P. 5985–5990.
11. Guskova O. A., Pal S., Seidel C. // Europhys. Lett. 2009. V. 88. P. 38006 (1–6).
12. Liu Z., Pappacena K., Cerise J., Kim J.U., Durning C.J., O'Shaughnessy B., Levicky R. // Nanolett. 2002. V. 2. P. 219–224.
13. Liu Z., Levicky R. // Nanotechnology 2004. V. 15. P. 1483–1488.
14. Groot R.D., Warren P.B. // J. Chem. Phys. 1997. V. 107. P. 4423–4435.
15. Gao L., Shillcock J., Lipowsky R. // J. Chem. Phys. 2007. V. 126. P. 015101 (1–8).
16. Hirvi J.T., Pakkanen T.A. // J. Chem. Phys. 2006. V. 125. P. 144712 (1–11).
17. Fan C.F., Çağın T. // J. Chem. Phys. 1995. V. 103. P. 9053–9061.
18. Tretyakov N., Müller M., Todorova D., Thiele U. // J. Chem. Phys. 2013. V. 138. P. 064905 (1–15).
19. Müller M., MacDowell L.G. // J. Phys.: Condens. Matter 2003 V. 15. P. 609–653.
20. Hoogerbrugge P.J., Koelman J.M.V.A. // Europhys. Lett. 1992. V. 19. P. 155–160.

21. Español P., Warren P.B. // *Europhys. Lett.* 1995. V. 30. P. 191–196.
22. Guskova O.A., Seidel C. // *Macromolecules*. 2011. V. 44. №3. P.671–682.
23. Guskova O.A., Seidel C. // *Soft Matter* 2012. V. 8. P. 2833–2843.
24. Rudov A.A., Khalatur P.G., Potemkin I.I. // *Macromolecules* 2012. V. 45. P. 4870–4875.
25. Groot R.D., Warren P.B. // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 107, № 11. P. 4423–4435.
26. Groot R.D., Rabone K.L. // *Biophys. J.* 2001. V. 81. P. 725–736.
27. http://polymer.physik.uni-ulm.de/~khalatur/exchange/DPD_Chem
28. www.mpikg.mpg.de/8935/research_report_859795?c=400602
29. Kim H., Zhang H., Narayanan S., Wang J., Prucker O., Rühle J., Foster M.D. // *Polymer* 2005. V. 46. P. 2331–2337.
30. Akgun B., Lee D.R., Kim H., Zhang H., Prucker O., Wang J., Rühle J., Foster M.D. // *Macromolecules* 2007. V. 40. P. 6361–6369.
31. *Polymer Brushes: Synthesis, Characterization, Applications* (Ed.: Advincula R.C., Brittain W.J., Caster K.C., Rühle J.). Weinheim: Wiley VCH, 2004. 501 p.
32. Yerushalmi-Rozen R., Klein J. // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1997. V. 9. P. 7753–7765.
33. Grafmüller A., Shillcock J., Lipowsky R. // *Mol. Simul.* 2009. V. 35. P. 554–560.
34. Antonoff G. // *Kolloid-Z.* 1932. V. 59. P. 7–12.
35. Ролдугин В.И. *Физикохимия поверхности. Долгопрудный: Изд. «Интеллект», 2008. 568 с.*
36. GRETZ R.D. // *J. Chem. Phys.* 1966. V. 45. P. 3160–3161.
37. Léonforte F., Servantie J., Pastorino C., Müller M. // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2011. V. 23. P. 184105 (1–21).

NANOPARTICLE DROPLETS AT THE POLYMER BRUSH/SOLVENT INTERFACE

¹O. A. Guskova, ²C. Seidel

¹Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, Hohe Str. 6, 01069
Dresden, Germany

²Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Am Mühlenberg, 1, 14476
Potsdam, Germany

The behaviour of nanoparticles at the homopolymer brush/solvent interface is investigated by dissipative particle dynamics. The simulation results show that the shape of nanodroplets located on the brush surface can be controlled by tuning the interaction parameters.

Key words: *polymer brush, nanoparticles, wetting, spreading, contact angle, Antonov's rule, computer simulation, dissipative particle dynamics, spreading (S) and entry (E) coefficients.*

Об авторах:

ГУСЬКОВА Ольга Александровна – кандидат химических наук, научный сотрудник (Leibniz Institute of Polymer Research Dresden, Germany), e-mail: guskova@ipfdd.de

SEIDEL Christian – Dr. habil. (Max Planck Institute of Colloids and Interfaces), e-mail: seidel@mpikg.mpg.de