

УДК 544.72.05
ГРНТИ 31.15.35

**АМФИФИЛЬНЫЕ ПОВЕРХНОСТИ
ДИБЛОК-СОПОЛИМЕРНЫХ ЩЕТОК КАК ИДЕАЛЬНЫЕ
ШАБЛОНЫ ДЛЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
ФУЛЛЕРЕНО-ПОДОБНЫХ НАНОЧАСТИЦ:
ДДЧ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

О. А. Гуськова

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

Описываются диблок-сополимерные щетки как шаблоны для получения композитов с пространственно-упорядоченными наночастицами. В работе проведено ДДЧ моделирование систем, состоящих из привитых амфифильных полимерных цепей и модельных фуллерено-подобных наночастиц. Цель исследования заключается в том, чтобы определить условия, в которых происходит пространственная самоорганизация наночастиц на поверхности щетки или их инкапсулирование. Полученные результаты могут помочь в экспериментальных исследованиях для подбора условий контролируемой самосборки полупроводящих наночастиц в полимерах, например, для их последующего использования в нанофотонике.

Ключевые слова: полимерная щетка, диблок-сополимер, наночастицы, фуллерен, диссипативная динамика частиц (ДДЧ), самосборка.

Блок-сополимеры демонстрируют способность к самоорганизации благодаря разной химической природе сегментов, связанных в единую блочную структуру, которая препятствует макрофазному расслоению в образце. Морфология блок-сополимерных пленок, т.е. размеры и формы однотипных доменов (сферы, цилиндры, гироиды или ламели), зависит от (i) молекулярной массы блоков, (ii) статистики их распределения, (iii) силы взаимодействия между блоками, для оценки которой используются энтальпии смешения или *параметр* растворимости *Гильдебранда*, (iv) условий эксперимента (растворитель, температура), а также (v) от свойств поверхности, на которую наносится полимерное покрытие. Одной из наиболее важных областей применения упорядоченных полимеров является нанофотоника, главным направлением исследований которой выступает создание новых оптических материалов и устройств для эффективного управления фотонами и преобразования световой энергии [1]. Например, композитные материалы на основе сопряженных блок-сополимеров и фуллеренов рассматриваются как весьма перспективные элементы органических солнечных батарей [2; 3].

Главными факторами, лимитирующими эффективность работы подобных устройств пластиковой электроники, остаются морфология полимерно-фуллереновых активных слоев и точный контроль их толщины [4; 5]. Донорная фаза в композитных пленках представляет собой смесь упорядоченных кристаллических и неупорядоченных аморфных областей соответствующих блоков. Именно в аморфных зонах и происходит первичная агрегация акцептора, в данном случае фуллеренов, с последующим формированием их кристаллической фазы, а также смешанных кристаллов, в которых чередуются полимерные цепи и фуллереновые прослойки [6; 7]. Считается, что практически идеальной организацией акцепторной фазы в фотовольтаических ячейках с объемным гетеропереходом является разветвленная цепочечная структура, полученная в результате контролируемой агрегации фуллереновых наночастиц (НЧ). Чтобы повысить сродство НЧ к одному из блоков блок-сополимера, ее поверхность модифицируют химически, путем пришивки олигомерных цепочек. Такой подход используется для направленной агрегации НЧ в определенных доменах диблок-сополимерной пленки.

Фазово-разделенные упорядоченные диблок-сополимерные щетки сочетают в себе все вышеперечисленные свойства – их толщину можно контролировать в ходе синтеза, их свободная поверхность характеризуется определенным узором, который способствует латеральной организации НЧ с определенной периодичностью, и, кроме того, гомополимерные щетки уже используются как платформа для создания вертикально-ориентированных НЧ массивов полупроводников [8].

В статье представлены результаты изучения процессов самоорганизации НЧ на межфазных границах «диблок-сополимерные пленки (щетки)/растворитель» методами компьютерной имитации. В фокусе исследования находятся фуллерено-подобные наночастицы, имеющие разное сродство к блокам щетки и растворителю. Методика моделирования – диссипативная динамика частиц – давно и успешно применяется для исследования структурных свойств щеток [9] и нанокомпозитов на их основе [10; 11], для изучения процессов смачивания «мягких» поверхностей [12; 13], а также для исследования неравновесных процессов [14]. Детали модели и протокол компьютерного эксперимента описаны в следующем разделе статьи.

Методика компьютерного эксперимента и модели щетки и наночастиц

В мезоскопическом методе ДДЧ рассматривается поведение не отдельных атомов или атомных групп, а мономерных звеньев полимера или микроколичеств жидкости [15]. Идея подхода заключается в описании поведения системы частиц с учетом 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), рассчитывается по формуле:

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

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 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 $k_B T/r_c$ (Табл. 1 и 2 приведены ниже). В них обозначения А и В, НЧ, Р и С соответствуют звеньям полимерных блоков (А – привитой, В – свободный), наночастицам, растворителю и частицам непроницаемой стенки, 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 сортами i и j , то есть параметр a_{ij} фактически описывает несовместимость компонентов, как и параметр Флори-Хаггинса χ_{ij} .

В данном исследовании полимерная щетка выступает своеобразным трафаретом: ее поверхность состоит из чередующихся А и В областей [9; 11; 16]. Поскольку блоки привитых полимерных цепочек имеют разное сродство к растворителю (Θ -точка для выбранной модели системы составляет $a_{ij}=27.3$ [9]), последний селективно «растворяет» блок А ($a_{AP}=25$) и провоцирует коллапс блока В ($a_{AP}=40$). Экспериментальными примерами таких систем выступают полистирол-блок-полиметилметакрилатные щетки, экспонированные в циклогексан [17], а также полиметилметакрилат-блок-полиглицидилметакрилат и полибензилметакрилат-блок-полистирол в толуоле или ацетоне соответственно [18]. Указанные растворители являются термодинамически хорошими для первого (А) и термодинамически плохими для второго (В) блока. Селективность растворителя, а также несмешиваемость блоков между собой ($a_{AB}=40$) приводят к формированию шаблона – наблюдаются или сферические глобулы блока В, расположенные гексагонально на А-поверхности ($f=0.17$), или так называемая полосатая фаза, в которой чередуются полосы А и В ($f=0.37$), или перфорированная ламелярная морфология ($f=0.57$), где площадь поверхности щетки практически полностью занята блоком В. Рисунок поверхности определяется отношением длин

свободного и привитого блоков f . Морфология структуры при варьировании f была предсказана теоретически [19–21].

Длина ребер ячейки составляет $L_x=L_y=L_z=20 r_c$ для моделирования фуллерено-подобных наночастиц в растворителе и $L_x=L_y=60 r_c$ и $L_z=40 r_c$ для композитных систем. Полимерные цепочки длиной $N=30+1$ мономерных звеньев, связанных гармоническим потенциалом, пришиты на плоскую непроницаемую стенку ($z=0$) концом блока А. Плотность пришивки ρ_a определяется числом цепей на единицу площади стенки $L_x \cdot L_y$ ($\rho_a=0.5375 1/r_c^2$).

Наночастица, состоящая из 60 ДДЧ частиц радиуса r_c , связанных между собой гармоническим потенциалом, имеет геометрию фуллерена C_{60} (рис. 1,а). Форма и количество химически связанных «атомов» – не единственные схожие черты НЧ с фуллереном. Например, в первой системе, которая будет рассмотрена, принимается во внимание низкая растворимость фуллерена в большинстве растворителей [22]. Агрегация двадцати НЧ исследуется в объеме растворителя; 60 НЧ и их поведение исследуется вблизи диблок-сополимерной щетки. Необходимо отметить, что модель наночастицы, подобная фуллерену C_{20} , использовалась, например, при моделировании адсорбции заряженных НЧ на планарную полиэлектролитную щетку в водном растворе [23].

Молекула растворителя моделируется как ДДЧ-частица радиусом r_c . В методе ДДЧ предполагается, что в одной такой частице содержится три молекулы воды, поэтому общая плотность ρ системы моделирования равна 3.

Расчеты выполнены в программе DPDChem [24]. Длина траекторий составляет не менее $\tau=10^6$ ДДЧ шагов (время релаксации $\tau=5 \cdot 10^5$) с шагом интегрирования $\Delta\tau=0.04$.

Результаты и их обсуждение

А. Фуллерены в растворителе вблизи стенки

Сначала рассмотрим реперную систему, в которой изучается поведение фуллеренов в объеме растворителя. Фуллерены, согласно литературным данным [25], являются труднорастворимыми веществами. Даже в термодинамически хорошем (органическом неполярном) растворителе они могут формировать коллоидные агрегаты [26; 27]. В нашем случае фуллерено-подобные НЧ нерастворимы в растворителе, как следует из величины параметра взаимодействия (табл. 1).

Таблица 1

Параметры взаимодействия a_{ij} в единицах $k_B T/r_c$

$i \setminus j$	НЧ	Р	С
НЧ	25	40	40
Р	40	25	50
С	40	50	0

Стартовое расположение НЧ в ячейке показано на рис. 1,а. Видно, что НЧ имеют фуллерено-подобную форму усеченного икосаэдра и «полые» внутри. Из-за отталкивания между растворителем и наночастицами последние коллапсируют и агрегируют в ходе моделирования, что приводит в итоге к кластеру, адсорбированному на одной из стенок (рис. 1, б, в).

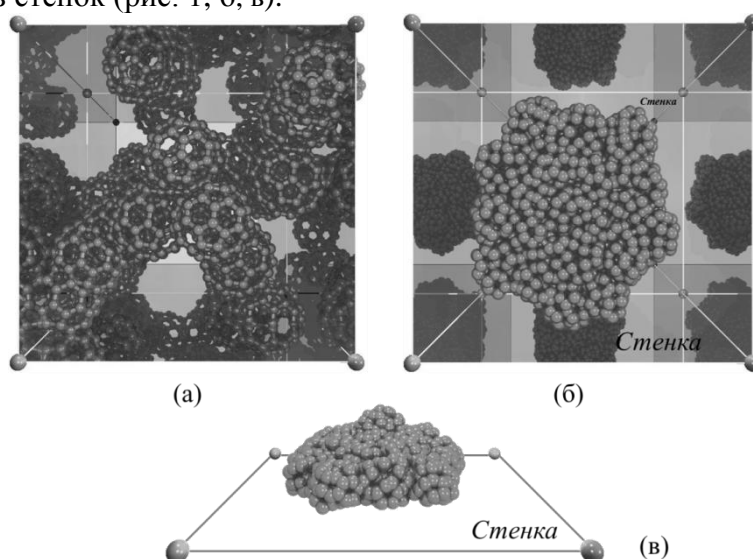


Рис. 1. Мгновенные фотографии системы (а) в начальный $\tau=0$ и (б) конечный момент времени $\tau=10^6$ ДДЧ шагов. Молекулы растворителя не показаны. Вершины ячейки моделирования и ее периодических копий изображены кружками. Стенки соответствуют граням ячейки на переднем и заднем планах; (в) – агрегат

Адсорбция на стенке обусловлена тем, что стенка не смачивается растворителем в большей степени, чем наночастицами. Геометрия контура контактной поверхности агрегата и стенки представляет собой круг радиуса $13.5 r_c$. Поверхность, экспонированная в растворитель, является выпуклой (рис. 1,в). Высота этой жидкой линзы составляет около $4 r_c$, как следует из приведенного на рис. 2 профиля плотности.

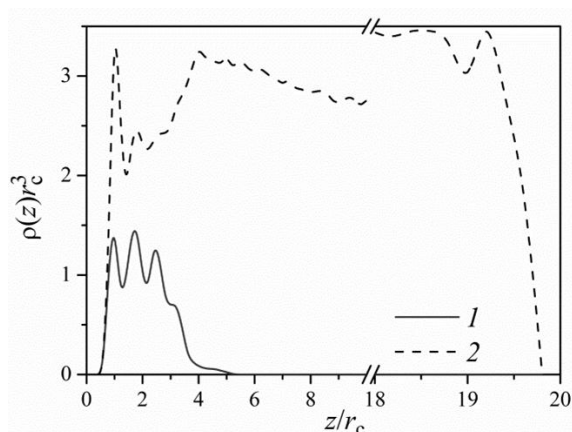


Рис. 2. Профиль плотности компонентов системы вдоль оси z ; стенки расположены при $z=0 r_c$ (см. рис. 1) и $20 r_c$. 1 – НЧ, 2 –растворитель

Внутри агрегата растворителя нет, т.е. центральные НЧ десольватированы. К аналогичному выводу пришли авторы работы [28], исследовавшие фуллереновые кластеры в воде.

На основе этого предварительного моделирования, целью которого была проверка модели НЧ, были подобраны также параметры системы для моделирования неагрегирующих и агрегирующих фуллеренов в комбинации с полимерной щеткой.

Б. Неагрегирующие фуллерены вблизи паттернированной «мягкой» поверхности диблок-сополимерной щетки

Рассмотрим композитную систему, в которой диблок-сополимерная щетка с $f=0.17, 0.37$ или 0.57 служит шаблоном для пространственного расположения растворимых НЧ. Параметры взаимодействия приведены в Табл. 2:

Таблица 2

Параметры взаимодействия a_{ij} в единицах $k_B T/r_c$

$i \setminus j$	A	B	НЧ	P	C
A	25	40	25	25	25
B	40	25	25/50	40	40
НЧ	25	25/50	25	25	40
P	25	40	25	25	50
C	25	40	40	50	0

Примечание. Значения $a_{B-НЧ}$ (25 или 50) будут указаны для конкретных примеров в тексте.

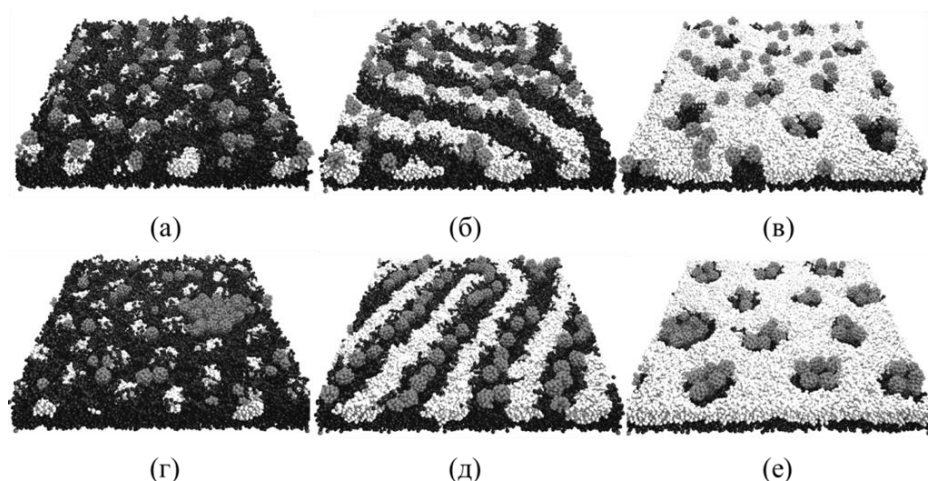


Рис. 3. Мгновенные фотографии системы для сферического $f=0.17$ (а), (г), полосатого паттерна $f=0.37$ (б), (д) и для перфорированной ламели $f=0.57$ (в), (е). Параметр $a_{B-NP}=25$ (верхний ряд, фотографии а–в) и 50 (нижний ряд, фотографии г–е)

Для неагрегирующих наночастиц с параметром $a_{A-NP}=25$, наиболее соответствует пример ПММА-блок-ПГМА в толуоле [18]. Действительно, растворимость фуллерена в толуоле составляет 2.8 мг/мл и является довольно высокой для этого класса веществ [25]. Для привитого ПММА блока толуол является термодинамически хорошим растворителем [29; 30] и плохим для ПГМА блока. В моделировании было установлено, что растворимые НЧ не агрегируют в растворителе, в противоположность поведению, описанному в предыдущем разделе статьи. По достижении состояния равновесия все НЧ оказываются на поверхности щетки (рис. 3): частиц или их агрегатов в объеме растворителя обнаружено не было.

Необходимо отметить, что фуллерено-подобные частицы находятся на межфазной границе А/В (ПММА/ПГМА), как следует из визуального анализа (рис. 3,а–в). НЧ нейтральны по отношению к обоим блоками, то есть параметры взаимодействия одинаковы и равны 25 (табл. 2), однако у А и В блоков разное отношение к растворителю. С одной стороны, НЧ предпочитали бы блок В – в этом случае они защищали бы этот блок от невыгодного взаимодействия с растворителем. С другой стороны, НЧ могут выступать неким медиатором для опосредованного взаимодействия между блоками на границе между их доменами, понижая поверхностное натяжение на интерфейсе, подобно поверхностно-активным веществам. Принимая во внимание оба возможных сценария, НЧ адсорбируются на А/В границе.

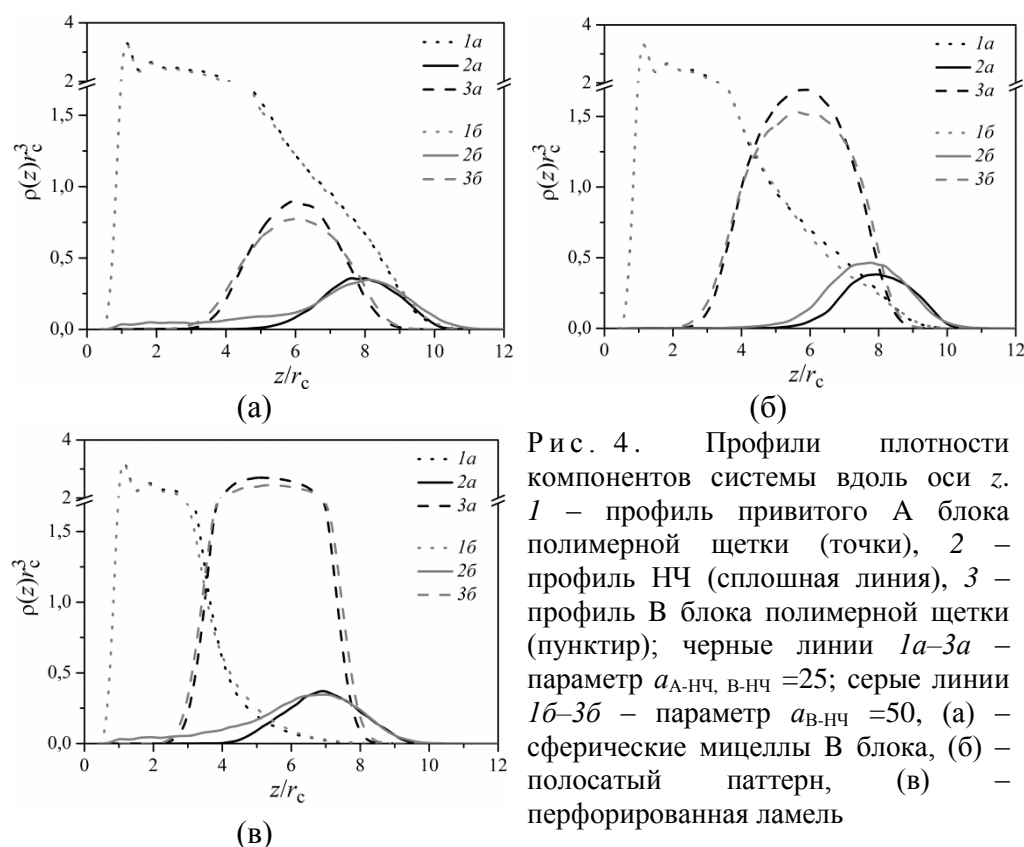


Рис. 4. Профили плотности компонентов системы вдоль оси z . 1 – профиль привитого А блока полимерной щетки (точки), 2 – профиль НЧ (сплошная линия), 3 – профиль В блока полимерной щетки (пунктир); черные линии 1а–3а – параметр $a_{A-НЧ, B-НЧ} = 25$; серые линии 1б–3б – параметр $a_{B-НЧ} = 50$, (а) – сферические мицеллы В блока, (б) – полосатый паттерн, (в) – перфорированная ламель

Такая поверхностная активность нейтральных к обоим блокам наночастиц была обнаружена в компьютерном эксперименте Шульцем и др. [31].

При $a_{B-НЧ} = 50$ наночастицы предпочитают находиться на поверхности А доменов, поскольку взаимодействие между В блоком и НЧ невыгодно. Они занимают практически всю доступную поверхность А блока в случае перфорированной ламели и образуют упорядоченные цепочки на полосатой фазе (рис. 3, е, д). Таким образом, А блок выступает областью преимущественной нуклеации НЧ на поверхности щетки, что также подтверждается профилями плотности, приведенными на рис. 4 (линии 2б, обозначенные серым цветом). Растворимость НЧ также предупреждает их агрегацию в контакте с растворителем, благодаря чему наблюдается формирование молекулярно-диспергированных фуллерено-подобных частиц, а не их агрегатов (капель [12; 16]), что также важно для применения таких систем в нанофотонике. Поскольку указанные границы обладают определенным паттерном, с помощью таких систем можно контролировать форму организации НЧ.

В. Агрегирующие фуллерены вблизи паттернированной «мягкой» поверхности диблок-сополимерной щетки

Агрегирующие НЧ, т.е. нерастворимые в растворителе, могут образовывать агрегаты до достижения поверхности полимерной щетки, другими словами, в объеме растворителя. Однако и в этом случае все НЧ в моделировании находятся на границе щетка/растворитель. Параметры взаимодействия перечислены в подписи к рис. 5, где представлены наиболее интересные формы самоорганизации. Экспериментальная система, отвечающая таким параметрам, могла бы состоять из полибензилметакрилат-блок-полистирольной щетки в ацетоне [18]. Растворимость фуллерена в ацетоне крайне мала – 0.001 мг/мл [25]; смешиваясь с полистиролом, фуллерены могут сегрегировать при изменении внешних условий даже при невысоких концентрациях (до 5% масс.) [32].

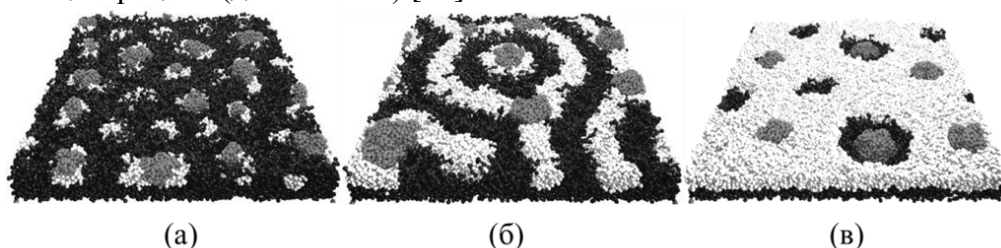


Рис. 5. Мгновенные фотографии системы для сферического $f=0.17$ (а), полосатого паттерна $f=0.37$ (б) и для перфорированной ламели $f=0.57$ (в). Параметры взаимодействия: $a_{A-НЧ}=a_{A-B}=a_{НЧ-Р}=40$, $a_{B-НЧ}=30$ (а, б), $a_{A-B}=a_{НЧ-Р}=40$, $a_{B-НЧ}=a_{A-НЧ}=25$ (в). Остальные параметры аналогичны перечисленным в Табл. 2

НЧ преимущественно располагаются на В сферических мицеллах (рис. 5,а) из-за предпочтительного взаимодействия с этим блоком. Подобные системы и закономерности их поведения были рассмотрены в предыдущих публикациях [11; 12; 16]. Для аналогичных параметров взаимодействия для полосатого паттерна в этих публикациях были описаны возможные нарушения периодичности структуры при наполнении В полос малыми наночастицами, содержащими 9 связанных между собой ДДЧ сфер. Обнаружено, что не только при увеличении концентрации наночастиц в образце, но также и при увеличении их размера (60 ДДЧ сфер в фуллерено-подобной НЧ) происходит заметное изменение морфологии щетки: от регулярно расположенных полос до формирования структур, напоминающих концентрические кольца (рис. 5,б). Для системы, в которой агрегирующие частицы являются нейтральными по отношению к обоим блокам (рис. 5,в), агрегаты могут формироваться в А или В блоках, при этом всегда имеют форму выпуклой линзы.

Агрегирующие наночастицы в выбранном растворителе всегда будут формировать кластеры на поверхности полимерной щетки, и ключевыми факторами, решающими, насколько упорядоченно будут организованы эти кластеры в латеральном направлении, являются

размеры НЧ и их концентрация, а также их афинность к одному из блоков.

Таким образом, для того, чтобы использовать диблок-сополимерные щетки как шаблоны для получения композитов с пространственно-упорядоченными наночастицами, необходимо так подбирать компоненты системы, чтобы НЧ были бы растворимы/не агрегировали в выбранном растворителе. В этом случае в зависимости от сродства НЧ к блокам полимерной щетки можно получить образцы с заданным расположением наночастиц на полимерной поверхности, а также подобрать условия их инкапсулирования. Полученные результаты могут помочь в экспериментальных исследованиях для подбора условий контролируемой самосборки полупроводящих наночастиц в полимерах, например, для их последующего использования в нанофотонике.

Список литературы

1. Progress in Nanophotonics (Ed.: Ohtsu M., Yatsui T.) Springer, 2015.
2. Dattani R., Bannock J.H., Fei Z., MacKenzie R.C.I., Guilbert A.A.Y., Vezie M.S., Nelson J., de Mello J.C., Heeney M., Cabral J.T., Nedoma A.J. // *J. Mater. Chem. A* 2014. V. 2. (35). P. 14711–14719.
3. Li F., Yager K.G., Dawson N.M., Jiang Y.B., Malloy K.J., Qin Y. // *Polym. Chem.* V. 6 (5). P. 721–731.
4. Janssen R.A.J., Nelson J. // *Adv. Mater.* 2013. V. 25 (13). P. 1847–1858.
5. Hoppe H., Niggemann M., Winder C., Kraut J., Hiesgen R., Hisch A., Meissner D., Sariciftci N.S. // *Adv. Funct. Mater.* 2004. V. 14 (10). P. 1005–1011.
6. Buchaca-Domingo E., Ferguson A.J., Jamieson F.C., McCarthy-Ward T., Shoaee S., Tumbleston J. R., Reid O.G., Yu L., Madec M.-B., Pfannmüller M., Hermerschmidt F., Schröder R.R., Watkins S.E., Kopidakis N., Portale G., Amassian A., Heeney M., Ade H., Rumbles G., Durrant J.R., Stingelin N. // *Mater. Horiz.* 2014. V. 1. P. 270–279.
7. Guilbert A.A.Y., Schmidt M., Bruno A., Yao J., King S., Tuladhar S.M., Kirchartz T, Alonso M.I., GoñiA.R., Stingelin N., Haque S.A., Campoy-Quiles M., Nelson J. // *Adv. Funct. Mater.* 2014. V. 24 (44). P. 6972–6980.
8. Snaith H.J., Whiting G.L., Sun B., Greenham N.C., Huck W.T.S., Friend R.H. // *Nano Lett.* 2005. V. 5 (9). P. 1653–1657.
9. Guskova O.A., Seidel C. // *Macromolecules* 2011. V. 44 (3). P. 671–682.
10. Guskova O.A., Pal S., Seidel C. // *Europhys. Lett.* 2009. V. 88 (3). P. 38006 (1–6).
11. Guskova O.A., Seidel C. // *Soft Matter* 2012. V. 8 (10). 2833–2843.
12. Гуськова О.А., Зайдель К. // Вестник ТвГУ. Сер. Химия. 2014. № 1. С. 44–55.

13. Léonforte F., Müller M. // *J. Chem. Phys.* 2011. V. 135 (21). P. 214703 (1–12).
14. Neratova I.V., Kreer T., Sommer J.-U. // *Macromolecules* 2015. (in press).
15. Hoogerbrugge P.J.; Koelman, J.M.V.A. // *Europhys. Lett.* 1992. V. 19. P. 155–160.
16. Гуськова О.А. // *Вестник ТвГУ. Сер. Химия.* 2012. Вып. 13 (7). С. 133–143.
17. Zhao B., Brittain W.J., Zhou W., Cheng S.Z.D. // *Macromolecules* 2000. V. 33 (23). P. 8821–8827.
18. Santer S., Rühle J. // *Polymer* 2004. V. 45. P. 8279–8297.
19. Zhulina E.B., Singh C., Balazs A.C. // *Macromolecules* 1996. V. 29 (25). P. 8254–8259.
20. Ferreira P.G., Leibler L. // *J. Chem. Phys.* 1996. V. 105. P. 9362–9370.
21. Matsen M.W., Griffiths G.H. // *Eur. Phys. J. E* 2009. V. 105. P. 219–227.
22. Guskova O.A., Varanasi S.R., Sommer J.-U. // *J. Chem. Phys.* 2014. V. 141 (14). P. 144303 (1–11).
23. Hu Y., Cao D. // *Langmuir* 2009. V. 25 (9). P. 4965–4972.
24. http://polymer.physik.uni-ulm.de/~khalatur/exchange/DPD_Chem/index.htm
25. Ruoff R.S., Tse D.S., Malhotra R., Lorents D.C. // *J. Phys. Chem.* 1993. V. 97 (13). P. 3379–3383.
26. Bezmelnitsin V.N., Eletsii A.V., Stepanov E.V. // *J. Phys. Chem.* 1994. V. 98 (27). P. 6665–6667.
27. Alargova R.G., Deguchi S., Tsujii K. // *J. Am. Chem. Soc.* 2001. V. 123 (43). P. 10460–10467.
28. Kim H., Bedrov D., Smith G.D. // *J. Chem. Theory Comput.* 2008. V. 4 (2). P. 335–340.
29. Поздняков А.О., Хандге У.А., Кончиц А.А., Альтштадт Ф. // *Письма в ЖТФ.* 2010. Т. 36 (20). С. 67–74.
30. Курмаз С.В., Ожиганов В.В. // *Высокомолекулярные соединения.* 2011. Т. 53 (3). С. 394–409.
31. Schultz A.J., Hall C.K., Genzer J. // *Macromolecules* 2005. V. 38 (7). P. 3007–3016.
32. Wong H.C., Cabral J.T. // *Macromolecules* 2011. V. 44 (11). P. 4530–4537.

**AMPHIPHILIC SURFACES OF DIBLOCK COPOLYMER BRUSHES
AS IDEAL SCAFFOLDS FOR SPATIAL ARRANGEMENT OF
FULLERENE-LIKE NANOPARTICLES: DPD SIMULATION**

O. A. Guskova

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

We describe the utilization of diblock copolymer brushes as scaffolds for spatial ordering of nano-inclusions. We perform DPD simulations on systems containing anchored amphiphilic chains and model fullerene-like particles in order to understand what system conditions promote either solute self-assembly at the interface or solute encapsulation. Our results can be used by experimentalists as a framework for optimizing the lateral organization of semiconducting nanoparticles and can be extended potentially to applications such as new hybrid photonics materials.

Key words: *polymer brush, diblock copolymer, nanoparticles, fullerene, dissipative particle dynamics (DPD), self-assembly.*

Об авторе:

ГУСЬКОВА Ольга Александровна – кандидат химических наук, научный сотрудник Института полимерных исследований общества Лейбница, e-mail: guskova@ipfdd.de