



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Self-assembly of flexible and rigid structures: from colloidal molecules to lattices

Shelke, Y.P.

Citation

Shelke, Y. P. (2023, October 24). *Self-assembly of flexible and rigid structures: from colloidal molecules to lattices*. *Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/3645933>

Version: Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/3645933>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Samenvatting

Zelfassemblage biedt een veelbelovende route om complexe constructies en materialen te creëren met behulp van eenvoudige bouwstenen. Door middel van colloïdale zelfassemblage kunnen we de leidende principes van het zelfassemblageproces begrijpen en maken we de weg vrij voor diverse toepassingen in materiaalkunde, fotonica en elektronica. Deze samenvatting geeft een overzicht van de belangrijkste bevindingen en inzichten in de hoofdstukken 2, 3 en 4. Deze hoofdstukken duiken in de zelfassemblage van colloïdale moleculen die worden aangedreven door elektrostatische krachten, de gecontroleerde conformationele flexibiliteit van colloïdale moleculen en de zelfassemblage van flexibele colloïdale roosters, respectievelijk.

In hoofdstuk 2 verkenden we de zelfassemblage van colloïdale moleculen aangedreven door elektrostatische krachten. We ontdekten dat de vorm en de grootteverhouding van colloïdale deeltjes een cruciale rol speelt bij het beheersen van hun valentie. Door positief geladen kubussen en negatief geladen bollen te gebruiken, bereikten we hoge opbrengsten van verschillende soorten colloïdale moleculen met coördinatie getallen van AB_6 , AB_4 en AB_2 . Monte Carlo-simulaties hielpen ons bij het bepalen van de juiste grootteverhoudingen voor het verkrijgen van elk molecuultype en we ontdekten dat elektrostatische afstoting tussen de bollen belangrijk was voor het benutten van het sjablooneffect van de kubussen. We hebben ook opgemerkt dat de bollen bij voorkeur op de vlakken van de kubussen zijn geabsorbeerd, waardoor onregelmatige clusterformatie werd voorkomen. Deze aanpak biedt verschillende voordelen, zoals de instelbaarheid van de valentie door geometrische factoren, de veelzijdigheid in materiaalkeuze en de magnetische scheiding van overtollige deeltjes. De eenvoud en robuustheid van de methode maken het van toepassing op verschillende template geometrieën en voortstuwmechanismen, waardoor de weg openligt voor het creëren van nieuwe materialen en modelsystemen.

In hoofdstuk 3 demonstreerden we de zelfassemblage van colloïdale moleculen met richtingsafhankelijke bindingen en gecontroleerde conformationele flexibiliteit met behulp van bolvormige en kubische deeltjes. Door de grootteverhouding tussen bollen en kubussen te veranderen, bereikten we hoge opbrengsten van flexibele colloïdale moleculen met goed gedefinieerde coördinatiegetallen. De kritische factor voor het beperken van de beweging van de bollen op de zijden van de kubus werd geïdentificeerd als de grootteverhouding (α) en de DNA-patchgrootte tussen de bol en de kubus. Naarmate α groter werd, werd de beweging van de bollen beperkt tot een enkel vlak van de kubus. Een microscopisch model onthulde een effectief vrij-energielandschap als gevolg van de variatie in kromming van de kubus,

waardoor de kans dat de bollen van zijde wisselen aan de randen en de hoeken werd beperkt. Bovendien hebben we met temperatuur een reversibele schakel van bolbeweging op het oppervlak van de kubus aangetoond. Deze flexibele colloïdale moleculen werken als basiseenheden voor constructies van hogere orde en bieden waardevolle inzichten voor het ontwerp van materialen met instelbare conformationele flexibiliteit. Bovendien kunnen onze bevindingen leiden tot mogelijkheden voor de ontwikkeling van bestuurbare functionele apparaten en machines.

In hoofdstuk 4 verkenden we de zelfassemblage van binaire mengsels van colloïdale deeltjes gefunctionaliseerd met oppervlakte-mobiel DNA in flexibele vierkante colloïdale roosters. Bij gebruik van bollen van gelijke grootte switchte het rooster tussen vierkante en zeshoekige configuraties. Bollen en systemen van bollen en kubussen van ongelijke grootte behielden echter een vierkante configuratie met flexibiliteit. De combinatie van bollen en kubussen resulteerde in een vierkant rooster met beperkte flexibiliteit als gevolg van de beperkte bolbeweging. Clustergroeianalyse toonde aan dat het systeem met bollen van gelijke grootte de snelste groei vertoonde, terwijl het systeem met bollen en kubussen het langst duurde om vierkante roosters te vormen. De bevindingen benadrukken de invloed van deeltjesvorm, grootte en herconfiguratie op de groeidynamiek en roosterstructuur en bieden inzichten voor het ontwerpen van flexibele colloïdale materialen.

Over het algemeen dragen de hoofdstukken in dit proefschrift bij aan ons begrip van zelfassemblageprocessen in binaire colloïdale systemen. Het werpt ook licht op hoe de vorm, grootte en aantalverhouding van colloïdale deeltjes de uiteindelijke structuur van colloïdale moleculen in zowel elektrostatiche als DNA-gefunctionaliseerde colloïdale assemblage beïnvloeden, evenals in flexibele colloïdale roosters. Dit werk toont de potentie voor het creëren van nieuwe flexibele materialen met op maat ingestelde eigenschappen. De onderzoeksresultaten bieden ook fundamentele inzichten in het sturingsmechanisme van zelfassemblage en banen de weg voor de ontwikkeling van functionele materialen en apparaten met instelbare eigenschappen en gedrag.