

М. Л. Карпець^{1,2,*}, Т. В. Тропін², Л. А. Булавін^{1,3}, Ю. В. П. Шмельцер⁴

¹ Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна

² Об'єднаний інститут ядерних досліджень, Дубна, Росія

³ Інститут проблем безпеки АЕС НАН України, Київ, Україна

⁴ Інститут фізики Університету Росток, Росток, Німеччина

*Відповідальний автор: karpetsmax@gmail.com

НЕЙТРОННА РЕФЛЕКТОМЕТРІЯ ПРИ ДОСЛІДЖЕННІ СТРУКТУРИ ТОНКИХ ПЛІВОК ПОЛІМЕРНИХ НАНОКОМПОЗИТІВ. МОДЕЛЮВАННЯ

Змодельовано експеримент із нейтронної рефлектометрії при дослідженні структурної організації фулеренів у полімерній матриці в тонких плівках. Розглянуто декілька фізично обґрунтованих моделей структурної організації фулеренів у нанокompозитах – рівномірний розподіл, їхня концентрація в шарі на поверхнях полімеру та підкладки. Проведений аналіз результатів указує на можливість застосування нейтронної рефлектометрії при дослідженні структури тонких плівок із масовою концентрацією фулеренів, що перевищує 1 %.

Ключові слова: нейтронна рефлектометрія, структура полімерних нанокompозитів, тонкі плівки, фулерени.

М. Л. Карпец^{1,2,*}, Т. В. Тропин², Л. А. Булавин^{1,3}, Ю. В. П. Шмельцер⁴

¹ Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко, Киев, Украина

² Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, Россия

³ Институт проблем безопасности АЭС НАН Украины, Киев, Украина

⁴ Институт физики Университета Росток, Росток, Германия

*Ответственный автор: karpetsmax@gmail.com

НЕЙТРОННАЯ РЕФЛЕКТОМЕТРИЯ ПРИ ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ ТОНКИХ ПЛЕНОК ПОЛИМЕРНЫХ НАНОКОМПОЗИТОВ. МОДЕЛИРОВАНИЕ

Моделируется эксперимент по нейтронной рефлектометрии при исследовании структурной организации наночастиц фуллерена в тонкой пленке полимерного нанокompозита. Рассмотрены несколько физически обоснованных моделей структурной организации наночастиц - равномерное распределение, слой у поверхности и возле поверхности полимера. В результате расчетов показано, что определение структурной организации наночастиц в тонких пленках нанокompозита возможно при массовой концентрации фуллеренов, превышающей 1 %.

Ключевые слова: нейтронная рефлектометрия, тонкие пленки, полимерные нанокompозиты, полистирол, фуллерены.

M. L. Karpets^{1,2,*}, T. V. Tropin², L. A. Bulavin^{1,3}, J. W. P. Schmelzer⁴

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine

² Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia

³ Institute for Safety Problems of Nuclear Power Plants, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

⁴ Institute of Physics, University of Rostock, Rostock, Germany

*Corresponding author: karpetsmax@gmail.com

NEUTRON REFLECTOMETRY FOR STRUCTURAL STUDIES IN THIN FILMS OF POLYMER NANOCOMPOSITES. MODELING

Experiment on neutron reflectometry is modeled during the study of the structural organization of fullerene nanoparticles in a thin film of a polymer nanocomposite. Several physically based models of structural organization of the nanoparticles in polymer matrix are considered – in particular the uniform distribution, dense substrate layer, a layer on the surface of a polymer. The calculations show that it is possible to apply neutron reflectometry for clarifying the structural organization of nanoparticles in the nanocomposites with the mass concentration of fullerenes exceeding 1 %.

Keywords: neutron reflectometry, thin films, polymer nanocomposites, fullerenes.

REFERENCES

1. L.A. Bulavin et al. *Neutron Spectroscopy of Condensed Matter* (Kyiv: Akadempriodyka, 2005) 640 p. (Ukr)
2. E.Slaver. *Polymer Thin Films* (Scitus Academics LLC, 2016) 304 p.
3. T. Kanaya et al. Annealing effects on thickness of polystyrene thin films as studied by neutron reflectivity. *Polymer* 44 (2003) 3769.
4. Yiu-Wing Mai, Zhong-Zhen Yu. *Polymer Nanocomposites* (Moskva: Tekhnosfera, 2011) 688 p. (Rus)
5. M.A. Holmes, M.E. Mackay, R.K. Giunta. Nanoparticles for dewetting suppression of thin polymer films used in chemical sensors. *Journal of Nanoparticle Research* 9 (2007) 753.
6. D.B. Hall, P. Underhill, J.M. Torkelson. Spin coating of thin and ultrathin polymer films. *Polymer Engineering and Science* 38 (1998) 2039.
7. A.J. Jackson. Introduction to small-angle neutron scattering and neutron reflectometry. *Lectures "NCNR/NSF Summer School"* (2008) p. 16.
8. P.R. Bevington. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences* (New York: McGraw-Hill, 1969) 336 p.
9. A.V. Belushkyn. *Introduction to the Technique of Neutron Scattering: Course of Lectures* (Moskva: Izdatelstvo MSU, 2000) 167 p. (Rus)
10. L.G. Parratt. Surface Studies of Solids by Total Reflection of X-Rays. *Phys. Rev.* 95 (1954) 359.
11. V.K. Yhnatovych. *Neutron Optics* (Moskva: Fizmatlit, 2006) 336 p. (Rus)
12. L.A. Bulavin. *Neutron Diagnostics of a Liquid State of a Substance* (Chornobyl: Institute for Safety Problems of NPP, NASU, 2012) 532 p. (Ukr)
13. M.V. Avdeev, V.L. Aksenov, T.V. Tropin. Models of Cluster Formation in Solutions of Fullerenes. *Rus. J. Phys. Chem. A* 84(8) (2010) 1273. (Rus)
14. A. Nelson. Co-refinement of multiple contrast neutron/X-ray reflectivity data using MOTOFIT. *Journal of Applied Crystallography* 39 (2006) 273.
15. R. Dattani, J.T. Cabral. Polymer fullerene solution phase behavior and film formation pathway. *Soft Matter* 11 (2015) 3125; [Electronic Supplementary Material \(ESI\) for Soft Matter](#).
16. M.A. Yaklin, P.M. Duxbury, M.E. Mackay. Control of nanoparticle dispersion in thin polymer films. *Soft Matter* 4(12) (2008) 2441.

Надійшла 31.08.2018

Received 31.08.2018