

# Neutronowe badania materii w warunkach nano-ograniczenia przestrzennego

2020

1920

Ewa Juszyńska-Gałązka, Wojciech Zając

*Instytutu Fizyki Jądrowej im. H. Niewodniczańskiego PAN, Kraków*

1920-2020



100 LAT POLSKIEGO TOWARZYSTWA FIZYCZNEGO

Materia molekularna poddana przestrzennemu ograniczeniu, np. poprzez umieszczenie w porach membran o średnicy kilkunastu do kilkudziesięciu nanometrów, wykazuje charakterystyczne niejednorodności rozkładu i uporządkowania molekuł. Np. przy powierzchni takich nanonęk prętobodobne ciekłe kryształy tworzą stan znany jako paranematyczny. Niejednorodności rozkładu materii poznajemy m.in., poprzez badanie fluktuacji średniej gęstości długości rozpraszania neutronów metodą małokątowego rozpraszania (ang. small angle neutron scattering – SANS). Ostatnio rozważaliśmy substancję mezogenną 8CFPB wbudowaną w matrycę  $\text{Al}_2\text{O}_3$  o różnych rozmiarach cylindrycznych porów  $\varnothing=20, 30, 40$  nm i dużej ich monodispersyjności, w zakresie temperatur stanów ciekłokrystalicznych. Rozpatrywaliśmy temperaturowe zmiany fluktuacji przestrzennych, gdzie występują wspomniane fluktuacje. Niejednorodność rozkładu przestrzennego, zwłaszcza cząsteczek prętopodobnych, wiąże się z nieco innymi, niż w próbkach objętościowych, oddziaływaniami międzymolekularnymi, wpływającymi na zmianę gęstości stanów wibracyjnych. Metoda nieelastycznego rozpraszania neutronów (inelastic neutron scattering, INS) dostarcza w tym zakresie informacji komplementarnych w stosunku do spektroskopii optycznej. Komplementarność ta polega m.in. na wyjątkowej czułości INS na drgania atomów wodoru, brak reguł wyboru i dostępność obszaru drgań poniżej  $400\text{ cm}^{-1}$ , niewidocznych w spektroskopii w środkowej podczerwieni. Nadto neutrony, w odróżnieniu od fotonów zakresu IR są sonda dobrze penetrującą. W praktyce eksperymentalnej zatem, INS dla organicznych substancji molekularnych, dostarcza wyłącznie gęstości stanów wibracyjnych atomów wodoru, bez domieszki stanów wibracyjnych matrycy nanoporowatej. Metoda INS zastosowana do tych samych substancji w ograniczeniu przestrzennym i w próbkach objętościowych, poddanych pomiarom w temperaturach helowych, pozwala na przykład analizować naddatek gęstości stanów fononowych charakterystyczny dla szkła fazy częściowo pozbawionej porządku w stosunku do niskoenergetycznego stanu krystalicznego. Stąd wnosimy, między innymi, o kruchości badanego szkła. Ponadto, informacje o dynamice protonów w związkach częściowo fluorowanych (w ostatnim czasie bardzo atrakcyjnych ze względów aplikacyjnych) pozwalają nam wskazać np. drganie C-F, które nie jest łatwe do identyfikacji metodami optycznymi (FTIR), gdyż jest czułe na wpływ innych drgań. Ponadto, do pełnego opisu dynamiki wibracyjnej materii miękkiej stosujemy obliczenia teoretyczne z użyciem metod DFT. Dla niskoenergetycznych struktur molekularnych realizowanych w odpowiednich stanach termodynamicznych konstruowane są widma, które pozwalają wskazać elementy oddziaływań międzycząsteczkowych jak również dynamiki poszczególnych grup atomowych.

**Słowa kluczowe:** [materia w nanoporach, nieelastyczne rozpraszanie neutronów, INS, małokątowe rozpraszanie neutronów, SANS]

