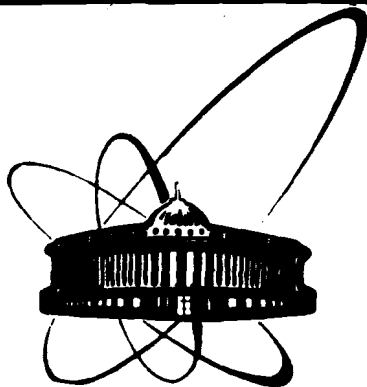


89-608



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

К 91

14-89-608

А.Б.Кунченко, Д.А.Светогорски, И.Сивриев

**ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПНЫХ СТРУКТУР  
МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО  
РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ ПРИ ПОМОЩИ  
ПОВОРОТА ОБРАЗЦА**

Направлено на 8 Международную конференцию  
социалистических стран по жидким кристаллам,  
ПНР, 28 августа - 1 сентября 1989 г.

**1989**

## 1. Введение

В последнее время наблюдается возрастание интереса к изучению различных анизотропных материалов, в частности полимерных жидких кристаллов, в которых макромолекулярный клубок имеет анизотропную форму /1-5/.

Возникают некоторые методические трудности при экспериментальных исследованиях таких объектов, что связано с анизотропией формфактора макромолекулярного клубка. В работе /6/ подробно теоретически исследован анизотропный формфактор в области Гинье и Дебая при наличии аксиальной симметрии у рассеивающего объема. В работе /7/ рассмотрен общий случай анизотропии в области Гинье. Показано, что в этой области формфактор определяется некоторым симметричным тензором  $R$ , и все его три главных значения могут быть определены из асимптотической зависимости формфактора при  $q \rightarrow 0$ . Однако даже при использовании двухкоординатного позиционно-чувствительного детектора это невозможно сделать с помощью одного измерения, если все три главных значения тензора  $R$  различны. При рассмотрении этой проблемы оказалось, что необходимый при этом поворот образца и, соответственно, проведение измерений при трех различных углах ориентации относительно пучка позволяет определить три искомые компоненты тензора  $R$  и при помощи интегрирующего по азимутальному углу кольцевого малоуглового детектора.

В данной работе рассматривается с экспериментальной точки зрения задача определения анизотропного формфактора или структурного фактора (для простоты мы будем работать с последним понятием) во всей малоугловой области, а не только в области Гинье. Эта задача будет обсуждаться как для двухкоординатного детектора, так и для интегрирующего по азимутальному углу кольцевого детектора.

## 2. Поворот образца

Метод поворота образца традиционно применяется как в рентгеновской, так и в нейтронной дифракционной технике, поэтому остановимся здесь лишь на основных особенностях этого метода.

В малоугловом эксперименте измеряется структурный фактор  $S(\vec{q})$ , где  $\vec{q}$  - волновой вектор рассеяния. Необходимость поворота образца

тельно образца будет соответствовать своя ориентация в пространстве кольцевого детектора. Его положение в пространстве можно описать с помощью единичного вектора  $\vec{e}$ , нормального к поверхности детектора. Этот физический детектор измеряет структурный фактор  $S$  для различных значений  $q$ . Абстрагируясь от конкретной конструкции кольцевого детектора, будем считать, что он состоит из большого числа бесконечно тонких колец с радиусами, соответствующими текущей координате обратного пространства  $q$ , и ориентацией в пространстве, определяемой вектором  $\vec{e}$ .

Таким образом, с учетом поворота детектора независимой текущей координатой обратного пространства становится векторная величина  $\vec{q}_0$ , имеющая направление  $\vec{e}$  и абсолютную величину, равную  $q$ . Иначе говоря, измеряемая в эксперименте величина структурного фактора  $S^0$  является однозначной функцией вектора  $\vec{q}_0$ .

В лабораторной системе координат  $K_l$  абстрактный кольцевой детектор всегда имеет постоянную ориентацию  $\vec{e}_{0l} = (0, 0, 1)$ . Поэтому соотношение (4) можно записать следующим образом:

$$S^0(\vec{q}_0^l) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_l S_T(\vec{q}^l(\varphi_l)), \quad (5)$$

где  $\begin{cases} \vec{q}_0^l = q(0, 0, 1) \\ \vec{q}^l(\varphi_l) = (q_x^l = q \cos \varphi_l, q_y^l = q \sin \varphi_l, 0). \end{cases}$

В соотношении (5) величина  $S_T$  представлена как функция декартовых координат, которые, в свою очередь, выражены через  $q, \varphi_l, \theta_l = \frac{\pi}{2}$ . Такая запись позволяет легко перейти от координатной системы  $K_l$  к  $K$  (см. рис. 1). С помощью соотношения (1) в координатной системе  $K$  выражение (5) можно представить следующим образом:

$$S^0(\vec{q}_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi S(\vec{q}(\varphi)), \quad (6)$$

где  $\vec{q}_0 = T\vec{q}_0^l$  и  $\vec{q}(\varphi) = T\vec{q}^l(\varphi)$ .

Из последнего выражения видно, что, поворачивая образец так, чтобы единичный вектор  $\vec{q}_0/q_0$  занимал все положения на единичной сфере, мы можем измерить значения структурного фактора для всех значений обратного пространства  $q$  (по крайней мере, для всех реально достижимых значений  $q$  физического кольцевого детектора).

Следовательно, зная  $S^0(\vec{q}_0)$ , можно попытаться найти и структурный фактор  $S(q)$ . Это возможно, если между функциями  $S^0(\vec{q}_0)$  и  $S(q)$  имеется взаимно однозначное соответствие.

Для установления такого соответствия запишем выражение (6) в виде

$$S^0(q; \vec{e}_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\varphi d\theta \sin \theta \delta(\vec{e}_0 \cdot \vec{e}) S(q; \vec{e}), \quad (7)$$

где  $\vec{e}_0 = \vec{q}_0/q = (\sin \theta_0 \cos \varphi_0, \sin \theta_0 \sin \varphi_0, \cos \theta_0)$ ,  
 $\vec{e} = \vec{q}/q = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \varphi)$

и  $\delta(\dots)$  - дельта-функция Дирака.

Выражения (7) и (6) эквивалентны, так как для любого вектора  $\vec{e}_0$ , стоящего под интегралом в правой части, можно провести вращение координатной системы таким образом, чтобы вектор  $\vec{e}$  стал полярной осью новой координатной системы. При этом функция  $\delta(\cos \theta)$  в (7) снимает интегрирование по  $\theta$  и мы возвращаемся к выражению (6).

Сформулируем задачу следующим образом. На единичной сфере задана функция  $f(\vec{e})$ , где  $\vec{e}$  - единичный радиус вектор. Необходимо решить, при каких условиях и как можно найти эту функцию, если известна функция  $f^0(\vec{e}_0)$  связана с  $f(\vec{e})$  соотношением

$$f^0(\vec{e}_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\varphi d\theta \sin \theta \delta(\vec{e}_0 \cdot \vec{e}) f(\vec{e}). \quad (8)$$

Интегральное уравнение типа (8) можно решить следующим образом.

Введем обозначение  $\cos \gamma = \vec{e}_0 \cdot \vec{e}$ . Тогда разложение  $\delta$ -функции по полиномам Лежандра будет иметь вид

$$\delta(\cos \gamma) = \sum_{l=0}^{\infty} B_l P_l(\cos \gamma). \quad (9)$$

Если принять нормировку  $P_l(1) = 1$ , то  $\int_{-1}^1 P_l^2(x) dx = \frac{2}{2l+1}$ . Коэффициенты  $B_l$  определяются умножением равенства (9) на  $P_n(\cos \gamma)$  с последующим интегрированием

$$\int_0^\pi \delta(\cos \gamma) P_n(\cos \gamma) \sin \gamma d\gamma = B_n \frac{2}{2n+1}.$$

Так как

$$\int_{-1}^1 \delta(x) P_n(x) dx = P_n(0),$$

то  $B_n = P_n(0) \cdot (2n+1)/2$ .

Для  $P_n(0)$  известно, что

$$P_n(0) = \begin{cases} (-1)^{n/2} \frac{1 \cdot 3 \cdots (n-1)}{2 \cdot 4 \cdots n}, & \text{если } n - \text{четное} \\ 0, & \text{если } n - \text{нечетное} \end{cases}$$

и, следовательно,

$$B_n = \frac{(2n+1)}{2} (-1)^{n/2} \frac{1 \cdot 3 \cdots (n-1)}{2 \cdot 4 \cdots n} [1 + (-1)^n] / 2.$$

Известная "теорема сложения" для полиномов Лежандра дает возможность представить  $P_l(\cos \gamma)$  через сферические функции

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_0, \varphi_0) Y_l^m(\theta, \varphi), \quad (10)$$

где  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  - базисная система взаимно ортогональных по индексам  $m$  и  $l$  нормированных функций, а  $(\cos \gamma) = \vec{e}_0 \cdot \vec{e} = \cos \theta_0 \cos \theta + \sin \theta_0 \sin \theta \cdot \cos(\varphi_0 - \varphi)$ .

При помощи (10) выражение (9) можно представить в виде

$$\delta(\cos \gamma) = \delta(\vec{e}_0 \cdot \vec{e}) = \sum_{l=0}^{\infty} 2\pi P_l(0) \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\theta_0, \varphi_0) Y_l^m(\theta, \varphi). \quad (11)$$

Подставляя это выражение в интегральное уравнение (8), мы можем проинтегрировать по  $\theta, \varphi$ , а умножая обе его стороны на  $Y_k^n(\theta_0, \varphi_0) \sin \theta_0$  и интегрируя по  $\theta_0$  и  $\varphi_0$ , получаем

$$f_{l,m}^0 = P_l(0) f_{l,m}; \quad l = 0, 2, 4, \dots, \quad (12)$$

где  $f_{l,m} = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(\theta, \varphi) Y_l^m(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi$ .

То же самое имеет место и для  $f_{l,m}^0$ , а величина  $P_l(0)$  в (11) определена выше.

В более простом случае цилиндрической симметрии  $S$  и  $S^0$  зависят только от  $\theta$  и  $\theta_0$  соответственно, если ось цилиндрической симметрии выбрана в качестве полярной оси сферической координатной системы.

В этом случае (12) упрощается:

$$f_l^0 = P_l(0) f_l; \quad l = 0, 2, 4, \dots, \quad (13)$$

где  $f_l = \int_0^\pi d\theta \sin \theta f(\theta) P_l(\cos \theta)$ ,

$$f_l^0 = \int_0^\pi d\theta \sin \theta f^0(\theta) P_l(\cos \theta).$$

Наличие только четных индексов  $l$  в разложении обеих функций  $f$  по сферическим функциям означает, что восстановление функции  $f(\vec{e})$  возможно только в том случае, если  $f(\vec{e})$  является четной функцией. Если это не так, то при интегрировании уравнения (8) нечетные члены исчезают и мы получаем только четную часть функции  $f^0(\vec{e}_0)$ . Следовательно, восстановлению подлежит только четная часть функции  $f(\vec{e})$ .

Для нашего конкретного случая решение интегрального уравнения (7) можно записать в виде

$$S_{\ell m}^0(q) = P_\ell(0) \cdot S_{\ell m}(q), \quad \ell = 0, 2, 4, \dots, \quad (14)$$

где  $P_\ell(0) = (-1)^{\ell/2} \cdot \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (\ell-1)}{2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot \ell} \{1 + (-1)^\ell\} / 2$ ,

или  $P_{2k}(0) = (-1)^k \cdot \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2k-1)}{2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot 2k}$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$

Четность функции  $S(q, \vec{e})$  определяется четностью корреляционной функции, для которой это условие выполняется всегда в отсутствие внешних полей. Из вышесказанного следует, что нахождение  $S(\vec{q})$  сводится к экспериментальному определению  $S^0(\vec{q})$  с последующим разложением этой функции по сферическим функциям. Соотношение (14) позволяет найти разложение  $S^0(\vec{q})$  по сферическим функциям и, суммируя этот ряд, получить искомую величину  $S(\vec{q})$ .

Так как  $S^0(\vec{q})$  и  $S(\vec{q})$  имеют простую математическую связь, то точность определения  $S(\vec{q})$  определяется точностью в определении  $S^0(\vec{q})$  и наоборот. Поэтому количество нейтронов, необходимое для определения  $S(q)$  с помощью позиционно-чувствительного детектора, должно быть достаточным и для определения  $S^0(\vec{q})$  с помощью кольцевого детектора. Это, парадоксальное на первый взгляд, утверждение можно пояснить следующим образом.

Измерительной ячейкой позиционно-чувствительного детектора является квадрат со сторонами  $\Delta x \cdot \Delta y$ , с помощью которого для данного  $\vec{q}$  перекрывается диапазон  $\Delta q_x \cdot \Delta q_y$ . Пусть для того, чтобы определить  $S(\vec{q})$  с достаточной точностью, необходимо, чтобы в эту ячейку попало  $K$  нейтронов. Измерительной ячейкой для измерения  $S^0(q)$  является кольцо с радиусом  $q$  и толщиной  $\Delta q$ . Точность определения  $S^0(\vec{q})$  будет совпадать с точностью определения  $S(q)$ , если в это кольцо попадет такое же количество нейтронов  $K$ , как и в предыдущем случае. Так как площадь кольца больше площади ячейки, то время измерения во втором случае при том же количестве зарегистрированных нейтронов будет определяться соотношением

$$\Delta t^0 = \frac{\Delta q_x \cdot \Delta q_y}{2\pi q \cdot \Delta q} \cdot \Delta t,$$

где  $\Delta t$  - время регистрации в первом случае (ячейкой  $\Delta q_x \cdot \Delta q_y$ ).

В общем случае для измерения  $S^0(\vec{q})$  необходимо получить набор экспериментальных данных для сетки значений вектора  $\vec{q}$  и угла  $\theta$ , изображенной на рис. 2.

Для любого положения образца, повернутого на некоторый угол, можно измерить набор значений  $S^0(q)$ , равный по числу количеству

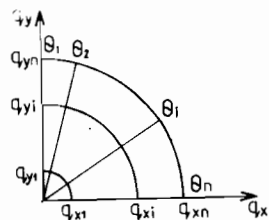


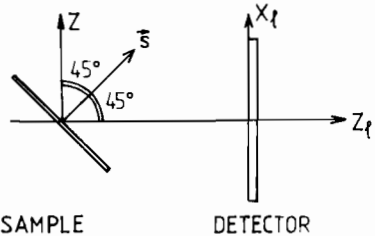
Рис. 2. Сетка значений  $q_i = \sqrt{q_{xi}^2 + q_{yi}^2}$  и  $\theta_i$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ), для которой производится измерение структурного фактора  $S^0$  с помощью установки, собранной по схеме, изображенной на рис. 3.

детектирующих колец детектора. Значения  $q$  в этом случае – набор дуг по числу детектирующих колец, изображенных на рис. 2.

Предположим, что в случае использования позиционно-чувствительного детектора для определения всех значений  $S^0(q)$  (за одно измерение) на сетке значений вектора  $\vec{q}$  и угла  $\theta$  необходимо затратить время  $t$ . Тогда общее время, необходимое для измерения всех значений  $S^0(q)$  с помощью кольцевых детекторов на той же сетке должно остаться тем же самым. При этом, если измерения проводятся для  $n$  радиальных лучей (значений угла  $\theta_i$ ), время измерения для каждого угла должно составить  $t/n$ .

#### 4. Измерение структурного фактора макромолекулы в полимерном жидком кристалле при помощи кольцевого детектора

Использование метода поворота анизотропного образца относительно кольцевого детектора практически не уступает по эффективности проведению эксперимента с использованием двухкоординатного позиционно-чувствительного детектора. Это связано с двумя факторами. Во-первых, с наличием аксиальной симметрии макромолекул жидкокристаллических полимеров и, во-вторых, с возможностью так ориентировать ось аксиальной симметрии, чтобы она составила произвольный угол с нормалью к плоскости образца. Рассмотрим этот случай более подробно. На рисунке 3 предложена схема такого эксперимента.



изменение угла между осями  $Z$  и  $Z_l$  от  $0$  до  $\frac{\pi}{2}$ .

Рис. 3. Схема эксперимента для определения анизотропного структурного фактора  $S^0$  для ЖК-полимеров. Образец изготовлен так, что ось азимутальной симметрии  $Z$  заключает угол  $45^\circ$  с вектором нормали к плоскости образца  $\vec{S}$ . Повороту образца вокруг оси  $\vec{S}$  на  $\pi$  соответствует

Предложенная схема позволяет осуществить измерение полного анизотропного структурного фактора  $S^0$  с помощью поворота одного образца, не меняя при этом эффективную толщину образца. В эксперименте образец поворачивается вокруг оси  $\vec{S}$  от  $0^\circ$  до  $180^\circ$ , при этом угол между осями  $Z$  и  $Z_l$  изменяется от  $90^\circ$  до  $0^\circ$ . Найдем связь между этими углами. Введем для этой цели координатную систему  $K_S$ , связанную с образцом таким образом, что ее ось  $Z_S$  направлена по оси  $\vec{S}$ , а ось  $X_S$  лежит в плоскости, определяемой вектором  $\vec{S}$  и осью пучка  $Z_l$ . В этой координатной системе векторы  $\vec{e}_z$  и  $\vec{e}_{z_l}$  имеют следующие компоненты:

$$\begin{aligned} \vec{e}_z &= \left( \sin \frac{\pi}{2} \cos \varphi_S, \sin \frac{\pi}{2} \sin \varphi_S, \cos \frac{\pi}{4} \right), \\ \vec{e}_{z_l} &= \left( \sin \frac{\pi}{2} \cos 0, \sin \frac{\pi}{2} \sin 0, \cos \frac{\pi}{4} \right). \end{aligned}$$

Взаимное расположение этих векторов определяется их скалярным произведением

$$\begin{aligned} (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_{z_l}) &= \cos \theta = \sin^2 \frac{\pi}{4} \cos \varphi_S + \cos^2 \frac{\pi}{4}, \\ \text{или} \quad \cos \theta &= \cos^2 \frac{\varphi_S}{2}. \end{aligned} \quad (15)$$

Соотношение (15) дает искомую связь между углами  $\theta$  и  $\varphi_S$ , где  $\theta$  – угол между векторами  $\vec{e}_z$  и  $\vec{e}_{z_l}$  (этот угол необходимо знать при расчете сетки значений углов  $\theta$ ), а  $\varphi_S$  – угол поворота образца вокруг оси  $\vec{S}$  при проведении измерений. Для получения полной информации о структурном факторе  $S^0$  вполне достаточно провести измерения для набора углов  $\theta$ , лежащих в диапазоне от  $0$  до  $\frac{\pi}{2}$ . Это является следствием четности функции  $S^0$ .

Экспериментально измеренные значения функции  $S^0$  в зависимости от  $q$  и  $\cos \theta$  необходимо аппроксимировать  $\mathcal{N}$  четными полиномами Лежандра. Выбор числа  $\mathcal{N}$  зависит от "гладкости" функции  $S^0$ .

$$S_{\text{эксп}}^0(q, \cos \theta) = \sum_{l=0}^{2\mathcal{N}} S_l^0(q) P_l(\cos \theta). \quad (16)$$

При помощи формулы (13) находим

$$S^0(q, \cos \theta) = \sum_{l=0}^{2\mathcal{N}} S_l^0(q) P_l(0) P_l(\cos \theta). \quad (17)$$

Это выражение можно получить для структурного фактора анизотропной макромолекулы жидкокристаллического полимера с помощью проведения эксперимента по малому углу рассеянию нейтронов. В случае, когда структура корреляционной функции (а следовательно, и функции  $S^0$ ) известна и зависит от небольшого числа параметров, можно рассчитать функцию  $S^0$  теоретически и определить неизвестные параметры с помощью

прямого сравнения с экспериментальными данными. Особенно интересно провести такое сравнение в области Гинье.

Как было показано в [7], анизотропный структурный фактор в области Гинье имеет вид

$$S(\vec{q}) = \text{const} \left[ 1 - q^2 \sum_{\alpha=1}^3 R_{\alpha\alpha} (\vec{e}_{\alpha})^2 \right], \quad (18)$$

где  $\vec{e} = \vec{q}/q$ , а  $R_{\alpha\alpha}$  - диагональные компоненты тензора, которые связаны со средним квадратом радиуса инерции  $R_g^2$  соотношением

$$\langle R_g^2 \rangle = \sum_{\alpha=1}^3 R_{\alpha\alpha}.$$

Для частного случая, когда имеется азимутальная симметрия исследуемого объекта (вокруг оси Z), можно представить структурный фактор в виде

$$S(\vec{q}) \sim 1 - q^2 [R_{zz} e_z e_z + R_{xx} (e_x e_x + e_y e_y)].$$

В сферических координатах

$$S(q, \cos\theta) \sim 1 - q^2 [R_{zz} \cos^2\theta + R_{xx} \sin^2\theta] \quad (19)$$

или

$$S(q, \cos\theta) \sim 1 - q^2 [R_{xx} + (R_{zz} - R_{xx}) \cos^2\theta].$$

Структурный фактор проще всего в этом случае получить, если представить  $S$  через полиномы Лежандра. Обозначим для этой цели  $\cos\theta = u$  и выразим  $1$  и  $u^2$  через  $P_0$  и  $P_2$  следующим образом:

$$1 = P_0(u); \quad u^2 = \frac{2}{3} P_2(u) + \frac{1}{3} P_0(u),$$

где  $P_2(u) = \frac{1}{2}(3u^2 - 1)$ .

При помощи этих соотношений получаем

$$S(q, u) \sim S_0(q) P_0(u) + S_2(q) P_2(u),$$

где

$$S_0(q) = 1 - \frac{1}{3} (2R_{xx} + R_{zz}) q^2,$$

$$S_2(q) = 1 - \frac{2}{3} (R_{zz} - R_{xx}) q^2.$$

Далее, согласно (17) получаем для  $S^0$ :

$$S^0(q, u) \sim S_0(q) P_0(0) P_0(u) + S_2(q) P_2(0) P_2(u).$$

Известна общая формула для  $P_{2k}(0)$ :

$$P_{2k}(0) = (-1)^k \frac{1 \cdot 3 \cdot \dots \cdot (2k-1)}{2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot (2k)},$$

из которой следует, что  $P_0(0) = 1$  и  $P_2(0) = -1/2$ . Тогда можно записать для  $S^0$ :

$$S^0(q, \cos\theta) \sim 1 - q^2 \left[ \frac{R_{zz} + R_{xx}}{2} + \frac{R_{xx} - R_{zz}}{2} \cos^2\theta \right]$$

или

$$S^0(q, \theta) \sim 1 - q^2 \left[ R_{xx} \cos^2\theta + \frac{R_{zz} + R_{xx}}{2} \sin^2\theta \right]. \quad (20)$$

Именно этот структурный фактор будет наблюдаться в области Гинье при помощи установки, изображенной на рис. 3. Как было показано ранее, кривые равной интенсивности при измерении величины  $S$  в области Гинье представляют собой эллипсы. Из соотношения (20) следует, что кривые равной интенсивности при измерении величины  $S^0(q)$  будут также эллипсами, но с отличающимися от предыдущего случая полуосями.

Проанализируем возможности предлагаемого метода для определения компонентов тензора  $R_{xx}$  и  $R_{zz}$  по отдельности. Для этой цели обозначим отношение двух экстремальных значений  $S$  (максимального и минимального) для фиксированного  $q$  через  $a$  и аналогично для  $S^0$  через  $a^0$ . Для этих величин можно записать

$$a = \frac{R_{xx}}{R_{zz}} \quad \text{и} \quad a^0 = \frac{2R_{xx}}{R_{xx} + R_{zz}}.$$

Между ними имеется связь

$$a^0 = \frac{2a}{1+a} \quad \text{или} \quad a = \frac{a^0}{2-a^0}. \quad (21)$$

Из (21) следует, что при  $a \gg 1$  (большая анизотропия)  $a^0 \rightarrow 2$ , что снижает точность восстановления  $a$ . Этот вывод более нагляден для относительных погрешностей:

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{2}{2-a^0} \frac{\Delta a^0}{a^0} \quad \text{или} \quad \frac{\Delta a}{a} = (1+a^0) \frac{\Delta a^0}{a^0}. \quad (22)$$

Это неверно при  $a \ll 1$ . Отметим, что случай  $a \gg 1$  соответствует сплюсненным эллипсоидам, а  $a \ll 1$  - вытянутым.

В рассматриваемом случае (изучение структурного фактора макромолекулы) отмеченная выше потеря точности при  $a \gg 1$  незначительна. Это связано с тем, что в этом случае структурный фактор зависит только от  $R_{xx}$  и  $R_{zz}$  в области гораздо шире, чем область Гинье. В этой области он имеет следующий вид [9]:

$$S(\vec{q}) \sim \frac{2}{x^2} (e^{-x} - 1 + x), \quad (23)$$

где

$$x = 3q^2 (R_{xx} \sin^2\theta + R_{zz} \cos^2\theta).$$

Можно показать с помощью прямых расчетов, что в области больших  $x$ , где  $S(\vec{q}) \sim 2/x$ ,

$$S^0(q, \theta) \sim \frac{2}{3q^2 \sqrt{R_{xx}} \sqrt{R_{zz} \sin^2\theta + R_{xx} \cos^2\theta}}.$$

Нетрудно убедиться, что в этой области не наблюдается аномальной

потери точности, как в случае  $a \gg l$ . Поэтому измерения компонентов  $R_{xx}$  и  $R_{zz}$  в отдельности для анизотропных клубков ЖК-полимеров при помощи предлагаемой методики возможно при любых значениях параметра анизотропии  $a$ .

В заключение хотим поблагодарить своих коллег Ю.М.Останевича, И.Натканца, В.Б.Приезжева и В.И.Лазина за стимулирующие дискуссии и интерес к работе.

#### Литература

1. Bastide J., Duplessix R., Picot C., Candau S.-Macromolecules 1984, 17, 83.
2. Beltzung M., Picot C., Herz J.-Macromolecules 1984, 17, 663.
3. Yu H., Kitano T., Kim C.Y., Amis E.J., Chang T., Landry M., Wesson J.A., Nan C.C., Lodge T.P., Glinka C.J.-Polym. Prepr., 1985, 26-2, 60.
4. Kirste R.G., Ohm H.G. -Macromol.Chem.Rapid Commun. 6,(1985),179.
5. Keller P., Carvalho B., Cotton J.P., Lambert M., Moussa F., Pery G.J.-Physique Lett. 46,(1985) L-1065.
6. Summerfield G.C., Mildner D.F.R.-J.Appl. Cryst.,1983, 16, 384.
7. Светогорски Д.А. ОИЯИ, PI7-88-478, Дубна, 1988.
8. Гуревич И.И., Тарасов Л.В.-Физика нейтронов низких энергий. М.: Наука, 1965.
9. Светогорски Д.А. ОИЯИ, PI7-88-597, Дубна, 1988.

Рукопись поступила в издательский отдел  
17 августа 1989 года.

Кунченко А.Б., Светогорски Д.А., Сивриев И.  
Исследование анизотропных структур методом  
малоуглового рассеяния нейтронов при помощи  
поворота образца

14-89-608

С точки зрения эксперимента по малоугловому рассеянию нейтронов рассматривается задача определения анизотропного формфактора /структурного фактора/ макромолекулярного клубка жидкокристаллического /ЖК/ полимера. Показано, что поворот произвольно ориентированного образца ЖК-полимера и проведение измерений при трех различных углах его ориентации относительно пучка позволяет определить все компоненты тензора, характеризующего структурный фактор макромолекулярного клубка при помощи интегрирующего по азимутальному углу кольцевого детектора рассеянных нейтронов. Для получения полной информации о структурном факторе объекта с аксиальной симметрией макромолекулярного клубка при подходящей ориентации образца достаточно провести измерения с поворотом образца на  $\pi$  вокруг одной оси.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Kunchenko A.B., Svetogorski D.A., Sivriev I.  
Investigation of Anisotropic Structures by Small Angle  
Neutron Scattering with the Help of the Sample Turn

14-89-608

From the experimental point of view on small angle neutron scattering a problem is considered of determining the anisotropic form-factor (structure factor) of a macromolecular coil of liquid crystal polymer (LCP). It is shown that the turn of the arbitrarily oriented sample of the liquid crystal polymer and the measurement at three different angles of its orientation about the beam enable to determine all tensor components, characterizing the structure factor of the macromolecular coil with the help of the ring-like neutron scattered detector, integrating over the azimuthal angle. To get full information concerning the structure factor of the object with the axial symmetry of the macromolecular coil at suitable sample orientation it is enough to carry out measurements with the sample turn on  $\pi$  around its axis.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989