

**ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

С 243

P17-88-478 e

Д.А.Светогорски

**СВОЙСТВА СЕЧЕНИЯ РАССЕЯНИЯ
НА АНИЗОТРОПНЫХ ТЕЛАХ
ПРИ МАЛЫХ УГЛАХ**

Направлено в "Journal de Physique"

1988

I. Введение

Одним из самых эффективных методов, которые в настоящее время используются для изучения структуры полимеров, является метод малоуглового рассеяния нейтронов. Проведение экспериментов на установках малоуглового рассеяния с позиционно-чувствительным детектором позволяет исследовать различные анизотропные системы, такие, например, как полимерные сетки /1-4/ или жидкокристаллические полимеры /5-8/. Как и ожидалось, полимерные клубки в этих материалах имеют анизотропную форму. Это проявляется в том, что в плоскости детектора кривые постоянной интенсивности в малоугловой области являются эллипсами.

Теория, описывающая рассеяние на анизотропных аксиально симметричных объектах, рассмотрена, например, в /9/. Теоретическое рассмотрение растянутых полимерных сеток изложено в работах /10-13/.

В настоящей работе проведено теоретическое исследование сечения рассеяния анизотропных тел при малых переданных импульсах. Оно не ограничивается рассмотрением аксиально-симметричного случая, не зависит от природы анизотропного объекта и рассматривает данную проблему с точки зрения малоуглового эксперимента.

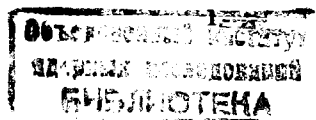
Результаты этого теоретического исследования можно использовать для расширения возможностей проведения эксперимента на установках малоуглового рассеяния нейтронов.

2. Формфактор при малых переданных импульсах

Упругое когерентное дифференциальное сечение рассеяния на совокупности из M одинаковых точечных рассеивателей имеет вид /14/:

$$\frac{dG}{d\Omega} = |v_{coh}|^2 \sum_{i,j=1}^M e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (I)$$

где v_{coh} - когерентная амплитуда рассеяния одного рассеивателя, \vec{q} - переданный импульс (точнее, волновой вектор рассеяния $|\vec{q}| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \theta/2$), где λ - длина волны излучения, θ - угол рассеяния), а \vec{r}_i - радиус-вектор i -го рассеивателя. Черта над суммой в (I) обозначает усреднения по всем конфигурациям системы рассеивателей.



Сечение рассеяния (I) пропорционально формфактору

$$P(\vec{q}) = \frac{1}{M^2} \sum_{i,j=1}^M e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \quad (2)$$

В маломугловой области, для которой справедливо неравенство

$$\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \ll 1, \quad (3)$$

формфактор (2) с достаточной точностью можно представить в виде

$$P(\vec{q}) = 1 - \frac{1}{2M^2} \sum_{i,j=1}^M [\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)]^2 \quad (4)$$

Так как формфактор не зависит от выбора координатной системы, то начало координат можно поместить в "центр инерции" системы. В этом случае выполняется соотношение

$$\sum_{i=1}^M \vec{r}_i = 0, \quad (5)$$

и соотношение (4) можно представить в виде

$$P(\vec{q}) = 1 - q_\alpha q_\beta \frac{1}{M} \sum_{i,j=1}^M (\vec{r}_i)_\alpha (\vec{r}_j)_\beta, \quad (6)$$

где α, β - индексы координат, а по повторяющимся индексам подразумевается суммирование. Из (6) видно, что в маломугловой области $P(\vec{q})$ определяется тензором R с компонентами (по определению)

$$R_{\alpha\beta} = \frac{1}{M} \sum_{i,j=1}^M (\vec{r}_i)_\alpha (\vec{r}_j)_\beta. \quad (7)$$

Тензор R симметричен, и поэтому существует координатная система, в которой он диагонален. Из определения (7) следует также, что диагональные компоненты положительны и, следовательно, квадратичная форма по переменным q_α в (6) в любой координатной системе положительна. Отсюда следует, что поверхности равной интенсивности функции $P(\vec{q})$ вблизи значений $q = 0$ есть эллипсоиды.

Если все диагональные компоненты тензора различны, - это трехосный эллипсоид, если две компоненты равны - эллипсоид вращения, а случай, когда одинаковы три компоненты, соответствует сфере.

Как хорошо известно, средний квадрат радиуса инерции R_g^2 системы по определению равен

$$\overline{R_g^2} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (\vec{r}_i \cdot \vec{r}_i). \quad (8)$$

Сравнение (7) и (8) дает связь между тензором R и радиусом инерции

$$\overline{R_g^2} = R_{xx} + R_{yy} + R_{zz} = \text{Tr } R. \quad (9)$$

Это выражение поясняет физический смысл тензора R . Естественно возникает вопрос о том, как с помощью эксперимента определить компоненты тензора R .

Представим для этого формфактора $P(\vec{q})$ в следующем виде

$$P(\vec{q}) = 1 - q^2 e_{\alpha\alpha} e_{\beta\beta} R_{\alpha\beta}, \quad (10)$$

где $q = |\vec{q}|$, а $\vec{r}_i = \vec{q}/q$. Очевидно, что при $q \rightarrow 0$ (\vec{r}_i постоянно) в эксперименте определяется величина

$$e_{\alpha\alpha} e_{\beta\beta} R_{\alpha\beta}, \quad (11)$$

которая является сверткой тензора $R_{\alpha\beta}$ с тензором $e_{\alpha\alpha} e_{\beta\beta}$.

В случае, когда все диагональные компоненты тензора R одинаковы, значение $e_{\alpha\alpha} e_{\beta\beta} R_{\alpha\beta}$ согласно (8) и (9) будет равно $1/3 R_g^2$.

Можно установить связь между тензором R и вторым моментом корреляционной функции системы. Как хорошо известно, формфактор $P(\vec{q})$ связан с корреляционной функцией G равенством

$$P(\vec{q}) = \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} G(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (12)$$

где

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{M^2} \sum_{i,j=1}^M \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j). \quad (13)$$

Разлагая экспоненту в (12) в ряд по степеням \vec{q} , получаем

$$\widehat{P}(\vec{q}) = 1 - q_\alpha q_\beta \int r_\alpha r_\beta G(\vec{r}) d\vec{r} / 2. \quad (14)$$

Сравнение (14) с (6) дает искомую связь

$$R_{\alpha\beta} = \int r_\alpha r_\beta G(\vec{r}) d\vec{r} / 2. \quad (15)$$

3. Проведение эксперимента

В традиционном эксперименте по маломугловому рассеянию измеряется формфактор $P(\vec{q})$ исследуемого объекта при $q \rightarrow 0$, причем только в одной плоскости обратного пространства. В случаях, когда объект сферически симметричен (изотропный случай), т.е. все компоненты тензора одинаковы, либо когда он имеет поворотную симметрию, т.е. одинаковы только две компоненты R , для определения тензора R достаточно провести одно измерение. (В последнем случае необходим азимутально чувствительный детектор).

В общем случае, т.е. когда все компоненты тензора R различны, одного измерения недостаточно.

Есть две возможности для определения тензора из эксперимента. Первая заключается в приготовлении двух или большего количества образцов, у которых различные оси симметрии лежали бы в плоскости детектора.

Вторая возможность заключается в измерении единственного образца, который поворачивается на различные углы относительно пучка. Между этими двумя возможностями нет принципиальных различий, однако вторая может оказаться дешевле.

Отметим также, что обработку экспериментальных данных во втором случае можно упростить с помощью развитых выше представлений.

Схема проведения эксперимента с поворотом образца изображена на рисунке. На нем плоскость образца повернута вокруг вертикальной оси относительно плоскости детектора на угол ψ .

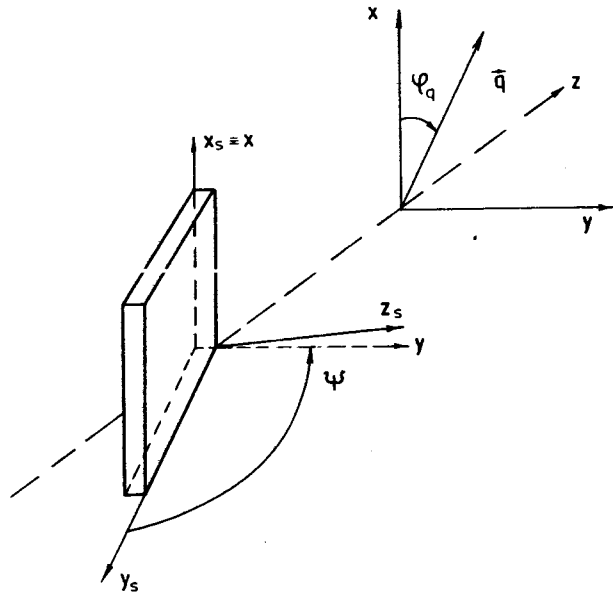


Рис. Схема проведения эксперимента с поворотом образца. Показана взаимная ориентация лабораторной системы координат (координаты X и Y лежат в плоскости детектора) и координатной системы, связанной с образцом (координаты X_s и Y_s лежат в плоскости образца). Вектор рассеяния q лежит в плоскости детектора, а psi - угол поворота образца.

Формфактор анизотропной рассеивающей системы в этом случае (образец повернут на угол psi) будет отличаться от формфактора системы в исходном положении (psi = 0).

Для первого можно записать

$$P_{\psi}(\vec{q}) = 1 - q^2 e_{q\alpha} e_{q\beta} R_{\alpha\beta}(\psi), \quad (16)$$

где $R(\psi)$ - тензор инерции повернутой системы в лабораторной системе координат. Его можно выразить через тензор $R(0)$ исходной системы посредством матрицы вращения $T(\psi)$

$$R_{\alpha\beta}(\psi) = \tilde{T}_{\alpha\gamma}(\psi) \tilde{T}_{\beta\delta}(\psi) R_{\gamma\delta}(0), \quad (17)$$

где

$$T(\psi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\psi & -\sin\psi \\ 0 & \sin\psi & \cos\psi \end{pmatrix}$$

Если при psi = 0 образец приготовлен так, что тензор $R(0)$ диагонален (разумная традиционная постановка эксперимента), то

$$R_{\alpha\beta}(\psi) = \sum_{\gamma=1}^3 \tilde{T}_{\alpha\gamma}(\psi) \tilde{T}_{\beta\gamma}(\psi) R_{\gamma\gamma}(0). \quad (18)$$

Для такого случая нетрудно (16) привести к следующему виду

$$P_{\psi}(\vec{q}) = 1 - q^2 \sum_{\gamma=1}^3 (T\vec{e})_{\gamma}^2 R_{\gamma\gamma}(0). \quad (19)$$

В лабораторной системе координат $e_{qx} = \cos\psi_q$, $e_{qy} = \sin\psi_q$, $e_{qz} = 0$ (см. рис. 1) и (19) можно представить в виде

$$P_{\psi}(\vec{q}) = 1 - q^2 [\cos^2\psi_q R_{xx}(0) + (\cos^2\psi R_{yy}(0) + \sin^2\psi R_{zz}(0)) \times \sin^2\psi_q]. \quad (20)$$

Из (20) видно, что при помощи двухкоординатного позиционно-чувствительного детектора при одном положении образца можно в одном измерении определить только величины

$$R_{xx}(0) \text{ и } \cos^2\psi R_{yy}(0) + \sin^2\psi R_{zz}(0). \quad (21)$$

Для нахождения компонентов R_{yy} и R_{zz} в отдельности необходимо провести еще одно измерение при другом psi.

В случае, когда рассеивающая система обладает поворотной симметрией ($R_{xx} = R_{yy}$), второе измерение не нужно.

Рассмотрим проблему экспериментального определения компонентов тензора R при помощи детектора, не обладающего азимутальной чувствительностью.

В работе /8/ для измерения "проекций" квадрата радиуса инерции (компонентов тензора R) был использован непроницаемый секториальный экран. Образец при этом поворачивался относительно оси симметрии экрана так, что плоскости образца и детектора оставались параллельными.

Возможно, однако, для этой цели использовать поворот образца, как это показано на рисунке, без использования секториального экрана. Действительно, детектор, не имеющий азимутальной чувствительности, интегрирует функцию $P(\varphi)$ по всем φ , т.е. измеряет величину

$$P_{\psi}(\varphi) = 2\pi \left[1 - \frac{\varphi^2}{2} (R_{xx} + \cos^2 \psi R_{yy} + \sin^2 \psi R_{zz}) \right]. \quad (22)$$

Из (22) видно, что величины R_{xx} , R_{yy} и R_{zz} можно определить из трех измерений при различных углах ψ .

В заключение автор выражает благодарность своим коллегам С.Г.Костромину, А.Б.Кунченко, Ю.М.Останевичу и В.П.Шибяеву за многочисленные обсуждения и стимулирующий интерес к работе.

Литература

1. Benoit H., Decker D., Duplessix R., Picot C., Rempp P., Cotton J.P., Farnoux B., Jannink G., Ober R. J. Polym. Sci., Polym. Phys. Ed. 1976, 14, 2119.
2. Bastide J., Duplessix R., Picot C., Candau S. Macromolecules 1984, 17, 83.
3. Beltzung M., Picot C., Herz J. Macromolecules 1984, 17, 663.
4. Yu. H., Kitano T., Kim C.Y., Amis E.J., Chang T., Landry M., Wesson J.A., Han C.C., Lodge T.P., Glinka C.J. Polym. Prepr., 1985, 26-2, 60.
5. Kirste R.G., Ohm H.G., Macromol. Chem. Rapid Commun. 6 (1985) 179.
6. Keller P., Carvalho B., Cotton J.P., Lambert M., Moussa F., Pepy G. J. Physique Lett. 46 (1985) L-1065.
7. Moussa F., Cotton J.P., Hardouin F., Keller P., Lambert M., Pepy G., Mauzac M., Richard H. J. Physique 48 (1987) 1079.
8. Kalus J., Kostromin S.G., Shibaev V.P., Kunchenko A.B., Ostanovich Yu.M., Svetogorsky D.A. Mol. Cryst. Liq. Cryst., 1988, 155, 347.
9. Summerfield G.C., Mildner D.F.R. J. Appl. Cryst., 1983, 16, 384.

10. Pearson D.S. Macromolecules 10 (1977) 696.
11. Warner M., Edwards S.F. J. Phys. A 11 (1978) 1649.
12. Ullman R. Macromolecules 15 (1982) 1395; 19 (1986) 1748.
13. Ergun B. Macromolecules 20 (1987) 1917.
14. Гуревич И.И., Тарасов Л.В.. Физика нейтронов низких энергий. М., Наука, 1965.

Рукопись поступила в издательский отдел
I июля 1988 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. (2 тома)	7 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р. 00 к.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р. 80 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р. 50 к.
—	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. (2 тома)	13 р. 50 к.
Д1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. (2 тома)	7 р. 35 к.
Д9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. (2 тома)	13 р. 45 к.
Д7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986.	7 р. 10 к.
Д2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа - 86". Дубна, 1986.	4 р. 45 к.
Д4-87-692	Труды Международного совещания по теории малочастичных и кварк-адронных систем. Дубна, 1987.	4 р. 30 к.
Д2-87-798	Труды VIII Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1987.	3 р. 55 к.
Д14-87-799	Труды II Международного симпозиума по проблемам взаимодействия мюонов и пионов с веществом. Дубна, 1987.	4 р. 20 к.
Д17-88-95	Труды IV Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1987.	5 р. 20 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Светогорски Д.А.

P17-88-478

Свойства сечения рассеяния на анизотропных телах при малых углах

Показано, что малоугловое сечение рассеяния (нейтронов) на анизотропной системе точечных рассеивателей определяется тензором вторых моментов ее корреляционной функции. Средний квадрат радиуса инерции этой системы есть след тензора вторых моментов. Предложен также простой способ для экспериментального определения тензора вторых моментов с помощью малоугловых измерений с поворотом образца.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод автора

Swetogorski D.A.

P17-88-478

Properties of the Cross Section of Small-Angle Scattering on Anisotropic Bodies

It is shown that the cross section of small-angle neutron scattering (SANS) on an anisotropic system of point scatterers is determined by the tensor of second moments of the correlation function of the system. The mean square radius of gyration of the system is the trace of the tensor of second moments. A simple method is proposed for experimental determination of the tensor of second moments by small-angle measurements with rotation of a sample.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988