

УДК 678.01:53

МОДЕЛИРОВАНИЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ
ЛИНЕЙНОПОЛЯРИЗОВАННОГО СВЕТА НА ПОЛИМЕРНЫХ
АНИЗОТРОПНЫХ ОБЪЕКТАХ

Ю. В. Бресткин, Б. М. Гинзбург

При дифрактометрических исследованиях структуры полимеров часто используют метод моделей. Этот метод находит широкое применение особенно в тех случаях, когда дифракционная картина бедна и проведение синтеза Фурье затруднено [1, 2]. Для выбора модели, описывающей строение объектива, привлекают всевозможные косвенные данные и далее сравнивают дифракцию от такой модели с экспериментально наблюдаемой картиной рассеяния; совпадение этих картин является критерием правильности выбора модели, хотя и не исключает ее неоднозначности.

Дифракционная картина может быть получена либо расчетным путем, либо непосредственно от модели, представляющей собой фигуру, геометрически подобную предполагаемой структуре; при этом длина волны излучения должна быть изменена пропорционально коэффициенту подобия [1—3]. В последнем случае удается избежать проведения громоздких расчетов.

Для оптического моделирования рассеяния рентгеновских лучей квазиплоскими объектами, расположеннымными нормально к направлению падающей волны [1, 3], с успехом применяют установку, схематически изображенную на рис. 1. Аналогичную установку мы использовали для моделирования малоуглового рассеяния линейнополяризованного света плоскими оптически анизотропными объектами. Такое моделирование осуществляется, по-видимому, впервые и требует применения некоторых специфических приемов, которые описываются ниже.

Рассмотрим мгновенную картину рассеяния при облучении объекта параллельным пучком света, полагая мгновенное значение напряженности электрического поля равным единице. При указанных условиях амплитуда волны, рассеянной под малыми углами плоским оптическим изотропным объектом, определяется выражением [4]:

$$A = k \rho \cdot \cos \delta \cdot ds$$

где

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{s} \cdot \vec{r}) \quad (1)$$

Здесь k — константа, не представляющая в дальнейшем интереса; ρ — плотность рассеивающих элементов в элементе площади ds ; λ — длина волны; $s = s_0 - s'$, s_0 и s' — единичные векторы, совпадающие по направлению с падающей и рассеянной волнами; r — вектор, проведенный из произвольно выбранного центра объекта в элемент площади ds ; δ — разность фаз между лучом, идущим из элемента площади ds в направлении s' , и лучом, идущим в том же направлении из центра.

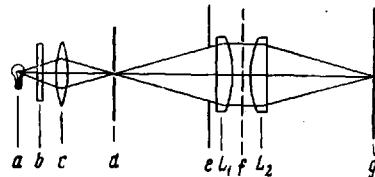


Рис. 1. Схема установки для наблюдения дифракции Фраунгофера от плоских объектов: a — источник света; b — светофильтр; c — конденсор; d — диафрагма диаметром $\sim 0,05$ мм, расположенная в фокальной плоскости длиннофокусной линзы L_1 ; e — диафрагма; f — объект; g — плоскость изображения картины дифракции, совпадающая с фокальной плоскостью длиннофокусной линзы L_2

Амплитуда волны, рассеянной под малыми углами плоским оптически анизотропным объектом при облучении его линейнополяризованным светом, определяется как [5]

$$A = k \int_s \rho (\vec{M} \cdot \vec{O}) \cos \delta \cdot dt \quad (2)$$

Здесь \vec{M} — дипольный момент, возбужденный в элементе площади ds электрическим полем падающей волны; \vec{O} — единичный вектор, перпендикулярный к плоскости поляризации анализатора. Остальные обозначения те же, что и в формуле (1).

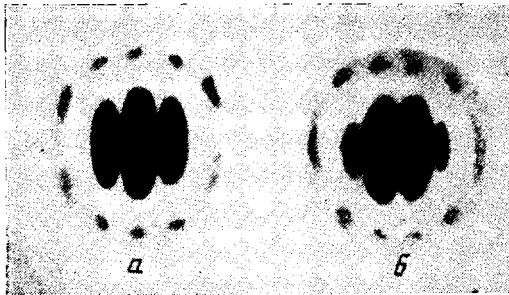


Рис. 2. *a* — Негатив дифракционной картины от двух близкорасположенных круглых отверстий; *b* — то же при совмещении одного из отверстий с фазопереворачивающим фильтром. При переходе от *a* к *b* интерференционные максимумы и минимумы меняются местами

Входящее в формулу (2) скалярное произведение $(\vec{M} \cdot \vec{O})$ может иметь как положительные, так и отрицательные значения.

Представим выражение (2) в виде:

$$A = k \int_s \rho' \cdot \cos \delta' \cdot ds \quad (3)$$

где $\rho' = \rho |(\vec{M} \cdot \vec{O})|$

$$\delta' = \begin{cases} \frac{2\pi}{\lambda} (\vec{s} \cdot \vec{r}), & (\vec{M} \cdot \vec{O}) > 0 \\ \frac{2\pi}{\lambda} \left[(\vec{s} \cdot \vec{r}) + \frac{\lambda}{2} \right], & (\vec{M} \cdot \vec{O}) < 0 \end{cases}$$

Сравнивая выражения (1) и (3), нетрудно убедиться, что изотропный объект можно использовать в качестве модели объекта анизотропного, если выполнить следующие условия:

1) изотропный объект должен обладать распределением плотности рассеивающих элементов, определяемым функцией $\rho |(\vec{M} \cdot \vec{O})|$;

2) должна быть создана дополнительная разность фаз в полволны между лучами, идущими от частей объекта, которым соответствуют положительные и отрицательные значения произведения $(\vec{M} \cdot \vec{O})^*$.

Второе требование можно выполнить, вводя в пространство между линзой L_1 (рис. 1) и объектом фазовые (точнее, фазопереворачивающие) фильтры и совмещая их с частями объекта, которым соответствуют значения $(\vec{M} \cdot \vec{O})$ какого-либо одного знака (выбор безразличен, так как он может оказаться только на знаке амплитуды, что не имеет значения для картины рассеяния).

Толщина прозрачных пластин h , которые могут быть использованы в качестве фазопереворачивающих фильтров, связана с их показателем преломления n следующим очевидным равенством

$$(n - 1) \cdot h = z \cdot \lambda + \lambda / 2, \text{ где } z = 0, 1, 2 \dots$$

При недостаточной монохроматичности источника z не должно превосходить 1—2. В качестве фазовых фильтров мы использовали слюдяные пластины. Их толщину контролировали по наблюдениям дифракции от двух близко расположенных круглых отверстий. Одно из отверстий совмещали с испытываемым фильтром; пластину считали пригодной, если при этом происходило преобразование дифракционной картины, изображенное на рис. 2.

Приведенные выше соображения были использованы для конструирования модели однородного по плотности плоского (дисковидного) сферолита, элементы площади которого обладают как радиальной (α_r), так и тангенциальной (α_t) составляющими поляризуемости.

Для данного объекта, согласно [5],

$$(\vec{M} \cdot \vec{O}) \sim (\alpha_r - \alpha_t) \sin \beta \cos \beta \text{ при } H_v\text{-поляризации} \quad (4)$$

и

$$(\vec{M} \cdot \vec{O}) \sim \alpha_t \cos^2 \beta + \alpha_r \sin^2 \beta \text{ при } V_v\text{-поляризации} \quad (5)$$

* Аналогичные соображения о разности фаз между лучами, идущими от различных частей анизотропных объектов, привели к одному из возможных объяснений центрального пятна на H_v -дифрактограммах сферолитов [6].

Здесь β — угол между направлением вектора напряженности электрического поля падающей волны и линией, соединяющей элемент площади с центром сферолита.

Из уравнения (4) следует, что моделью сферолита при H_v -поляризации может служить диск с распределением плотности рассеивающих элементов

$$\rho \sim |\sin \beta \cos \beta| \quad (6)$$

Ввиду того, что функция (4) меняет знак с изменением угла β , при моделировании H_v -дифракции сферолита требуются фазовые фильтры. Последние ставили на пути лучей, падающих на секторы модели с угловыми размерами по β от $\pi/2$ до π и от $3\pi/2$ до 2π .

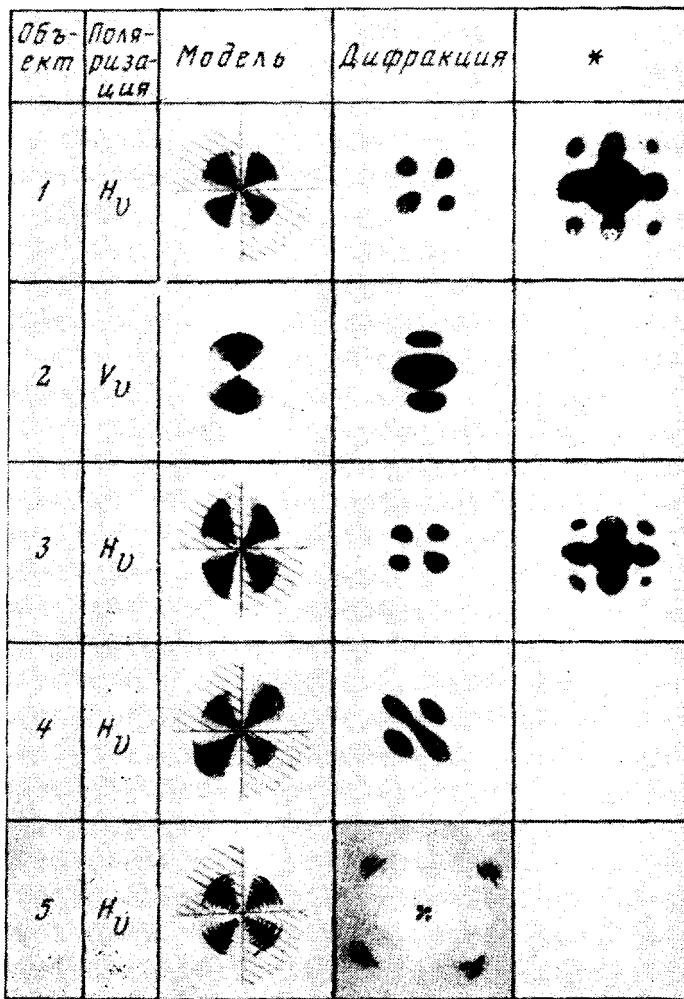


Рис. 3. Негативы моделей и дифракционных картин для сферолита (1, 2), деформированного (3, 4) и кольчатого (5) сферолитов. При моделировании V_v -дифракции сферолита предполагали $a_t \gg a_r$. Дифракционная картина кольчатого сферолита значительно уменьшена по сравнению с другими. Звездочкой отмечены рисунки, соответствующие дифракции от моделей 1 и 3, но без введения фазовых фильтров

Согласно уравнению (5), моделью сферолита при V_v -поляризации является диск с распределением плотности

$$\rho \sim \cos^2 \beta + a_r / a_t \sin^2 \beta, \quad (7)$$

так как функция (5) знакопостоянна и фазовые фильтры не требуются.

Фотографии моделей, которые имеют распределение плотности рассеивающих элементов, примерно соответствующее функциям (6) и (7), приведены на рис. 3. Здесь

же приведены соответствующие им дифрактограммы. Полученные дифрактограммы весьма близки к картинам рассеяния линейнополяризованного света от реальных полимерных пленок, содержащих сферолиты*.

Аналогичным образом были сконструированы оптические модели деформированного и кольчатого сферолитов. При этом были использованы данные об их структуре, имеющиеся в литературе [5, 6, 8]. Фотографии моделей и соответствующие им дифрактограммы приведены на том же рис. 3.

Весьма характерно рассеяние, наблюдаемое в центре дифрактограммы, в случае сферолита, вытянутого под углом 45° к одной из плоскостей поляризации; аналогичное явление наблюдается в реальных полимерных системах [6].

Ввиду того, что метод оптического моделирования позволяет получать дифрактограммы без их расчета, он может оказаться весьма полезным для быстрой расшифровки реальных картин рассеяния. Возможно, что этот метод найдет применение при изучении процессов перестройки надмолекулярной организации полимеров и других прозрачных оптически анизотропных объектов.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить искреннюю признательность С. Я. Френкелью за плодотворную дискуссию.

Выводы

1. Показано, что малоугловое рассеяние линейнополяризованного света анизотропными квазиплоскими объектами можно моделировать рассеянием неполяризованного света двумерными изотропными объектами. Последние должны не только обладать соответствующим распределением плотности рассеивающих элементов, но и должны быть частично совмещены с фазопереворачивающими пластинами.

2. Предложены оптические модели квазиплоского сферолита при H_v - и V_v -поляризации, а также кольчатого и деформированного сферолитов при H_v -поляризации.

Институт высокомолекулярных
соединений АН СССР

Поступила в редакцию
4 X 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. R. Hosemann, S. N. Bagchi, Direct analysis of diffraction by matter, North Holland Publ. Co., Amsterdam, 1962.
2. R. Bonart, R. Hosemann, Makromolek. Chem., 39, 105, 1960.
3. C. A. Taylor, Europ. Polymer J., 2, 279, 1966.
4. Б. К. Вайнштейн. Дифракция рентгеновских лучей на цепных молекулах, Изд-во АН СССР, 1963.
5. R. S. Stein, M. B. Rhodes, J. Appl. Phys., 31, 1873, 1960.
6. Ю. В. Бресткин, Б. М. Гинзбург, И. Т. Монева, С. Я. Френкель, Физика твердого тела, 10, 3130, 1968.
7. В. Г. Баранов. Оптика и спектроскопия, 21, 610, 1966.
8. R. S. Stein, P. Erhardt, J. J. van Aartsen, S. Clough, M. B. Rhodes, J. Polymer Sci., C13, 1, 1966.

IMITATION OF LOW ANGLE SCATTERING OF LINEARLY POLARIZED LIGHT WITH POLYMERIC ANISOTROPIC BODIES

Yu. V. Brestkin, B. M. Ginsburg

Summary

Low angle scattering of linearly-polarized light with anisotropic quasi-flat bodies can be imitated with scattering of unpolarized light with two-dimensional isotropic bodies. The latter have to possess not only corresponding distribution of density of the scattering elements but also have to be partly matched with phase-inversion plates. Optical models of quasi-flat spherulites at H_v and V_v polarization have been proposed.

* Сходство дифрактограмм от модели одного сферолита и от пленки, содержащей большое количество сферолитов, объясняется их беспорядочным расположением в реальных образцах. Известно также, что картина рассеяния от трехмерных сферолитов, которые, как правило, содержит полимерная пленка, мало отличается от картины рассеяния от плоского сферолита [7].