

картины рассеяния от обычной четырехлепестковой «сферолитной» картины рассеяния [3, 4] к «слоевым» линиям [10, 11] при удлинениях $\sim 1,8$ вблизи центра картины появляется интенсивное рассеяние «сферолитного» типа, также состоящее из четырех симметричных лепестков. Из рис. 3, на котором дано полное увеличенное изображение (рис. 3, а) и изображения, сформированные из центральной части картины рассеяния (рис. 3, б) и из «слоевых» линий (рис. 3, в), следует, что причиной появления этих новых рефлексов является развитие двулучепреломления матрицы, в которую вкраплены макрофибриллы [12] (ср. рис. 3, а, б и в, см. вклейку и стр. 2281).

Метод темнопольной оптической микроскопии найдет, вероятно, широкое применение для определения распределений по размерам и форме элементов, для выяснения вопросов, связанных с деталями структурных перестроек сферолитов при деформации, а также для выбора и уточнения моделей рассеивающих элементов при интерпретации картин рассеяния поляризованного света.

Институт высокомолекулярных соединений
АН СССР

Поступила в редакцию
18 IV 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Moore, C. Gieniewski, J. Polymer Sci., C13, 95, 1966.
2. Т. И. Волков, Высокомолек. соед., А9, 2734, 1967.
3. Р. Стейн, Новейшие методы исследования полимеров, «Мир», 1966, стр. 131.
4. Т. И. Волков, В. Г. Баранов, Новое в методах исследования полимеров, «Мир», 1968, стр. 7.
5. И. Т. Монева, Диссертация, 1970.
6. Ю. В. Бресткин, Б. М. Гинзбург, И. Т. Монева, Высокомолек. соед., А14, 2222, 1972.
7. Р. В. Поль, Оптика, Физматгиз, 1962.
8. Т. И. Волков, Г. С. Фаршян, В. Г. Баранов, С. Я. Френкель, Высокомолек. соед., А11, 108, 1969.
9. Н. М. Меланхолин, Методы исследования оптических свойств кристаллитов, «Наука», 1970.
10. В. Г. Баранов, К. А. Гаспарян, Р. С. Зурабян, Э. С. Эдильян, С. Я. Френкель, Высокомолек. соед., А11, 1247, 1969.
11. В. Г. Баранов, К. А. Гаспарян, J. Polymer Sci., 8, A-2, 1015, 1970.
12. В. Г. Баранов, С. Я. Френкель, Т. И. Волков, К. А. Гаспарян, Физика твердого тела, 11, 1220, 1969.

УДК 541.64:543.422.8

О РЕНТГЕНОИНТЕРФЕРОМЕТРИЧЕСКОМ МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ ВЕЩЕЙ

А. А. Мартirosyan, Ю. А. Рапян, П. А. Бевизргян

Предложен новый рентгеноинтерферометрический метод определения плотности полимеров. Этот метод отличается простотой и точностью результатов. По этому методу рассчитана средняя плотность изотактического полистирола.

Известно, что одной из важных характеристик полимерных веществ является плотность, знание которой дает определенное представление о структуре полимеров, что в значительной степени определяет их физические свойства. Для определения плотности вообще существует множество методов, из которых для полимерных веществ используются пикнометрический, дилатометрический, метод градиентных труб [1], рентгеновские методы (по определению трансляций ячейки и по полному внешнему отражению) [2, 3].

Если не требуется большой точности эксперимента, можно ограничиться результатами пикнометрического метода или метода градиентных труб (точность оценки плотности по этим методам не превышает $\pm 0,1\%$, даже при очень строгом соблюдении чистоты эксперимента). Однако для более точных измерений плотности эти два названных выше метода совершенно непригодны. В таких случаях лучше обратиться к рентгеновским методам.

Следует сказать, что рентгеновский метод полного внешнего отражения не может успешно использоваться для высокомолекулярных веществ. Его применение предполагает наличие зеркальной поверхности исследуемого образца [3], чего невозможно добиться для полимерных веществ; точность этого метода не превышает 1%. Второй упомянутый рентгеновский метод определения плотности кристаллической фазы полимеров связан с нахождением трансляций кристаллографической ячейки данного полимера [3]. Этот метод дает высокую точность результатов (точность 0,05%), одна-

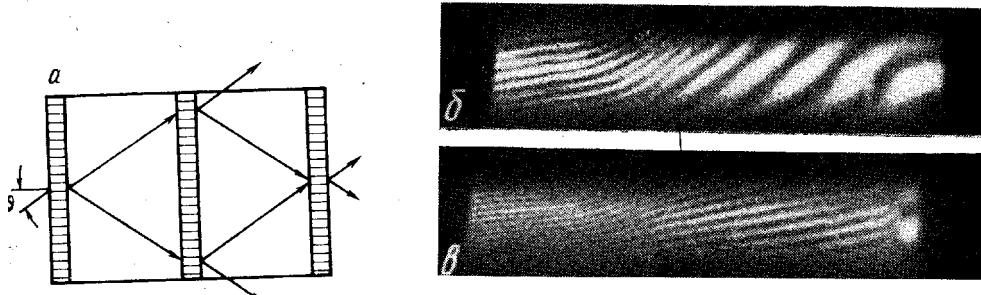
ко определение трансляций ячейки полимера является очень трудоемкой задачей, связанной со сложными экспериментом и расчетами. Кроме того, этот метод пригоден лишь для кристаллизующихся полимеров.

Нет сомнений, что для определения столь важной характеристики веществ, как плотность, нужна методика, которая могла бы дать более точные результаты и была бы проста в обращении. Предлагаемый нами рентгеноинтерферометрический метод является с этой точки зрения удобным и точным методом (точность 0,05%) определения плотности полимерных веществ как в твердом, так и в жидким состояниях [4]. Этот метод дает усредненное значение плотности аморфной и кристаллической фаз, поскольку в явлении преломления все вещество (если оно не находится в отражающем положении) участвует как аморфная среда. Его с успехом можно использовать в таких затруднительных случаях, когда такой метод прямого подсчета плотности, как пикнометрический, не может различить два близких по плотностям жидкокристаллических полимера. Преимуществом этого метода является и то, что в ходе нахождения плотности определяется и такой немаловажный параметр вещества, как показатель преломления рентгеновых лучей.

В настоящее время рентгеноинтерферометрия как метод исследования вещества сравнительно мало известна и поэтому нуждается в некоторых комментариях.

Методика эксперимента

Применение рентгеноинтерферометрического метода предполагает наличие интерферометра, который обычно изготавливается в виде Ш-образной фигуры (интерференция по Лауз) из почти бездислокационных моноокристаллов кремния по методике, изложенной в работе [5]. Пучок рентгеновых лучей, падая на первый блок интерферометра (расщепителя) под углом Брэгга, расщепляется на два пучка (прохождение



Ход лучей в трехблочном интерферометре (а); муаровая картина, полученная от интерферометра без клина (б) и с клином (в)

по Лауз), которые, отразившись от плоскостей среднего блока (зеркального), налагаются у входной поверхности третьего блока (анализатора) (рисунок, а). На регистрирующей пленке, вставленной параллельно блокам (перпендикулярно к отражающим плоскостям), получаются интерференционные полосы (муаровая картина) (рисунок, б).

Как известно, интерференционная картина получается при наложении двух ко- герентных волн. В рассматриваемом случае незначительные повороты пространственных решеток блоков интерферометра относительно друг друга и незначительные различия в значениях трансляций отдельных блоков приводят к образованию муаровой картины (рисунок, б).

При помещении на пути одного из расщепленных пучков клинообразного образца период полос муаровых картин изменяется, так как клин вводит в интерферирующие волны дополнительную разность фаз (рисунок, в). Определив период полос муаровых картин, полученных с клином и без клина, по формуле [6]

$$\delta = \frac{\lambda (l_0 - l)}{2l_0 l \operatorname{tg} \frac{\Phi}{2}},$$

где λ – длина волны, l_0 и l – расстояния между полосами муаровой картины без клина и с клином соответственно, Φ – преломляющий угол клина, можно определить единичный декремент показателя преломления рентгеновых лучей для данного образца и данной длины волны. Затем, имея в виду, что [7]

$$\delta = \frac{e^2}{2\pi m c^2 m_H} \cdot \frac{Z}{A} \rho \lambda^2 = 2,72 \cdot 10^{10} \frac{Z}{A} \rho \lambda^2,$$

где Z – полное число электронов в атоме, A – атомный вес данного вещества, λ – длина волны, можно определить ρ – плотность данного вещества. Этой методикой нами была определена средняя плотность изотактического полистирола. Исследования проводили на рентгеновской установке УРС-60 с излучением $\text{Cu} K\alpha$ на рентгено-дифракционной камере со сканирующим устройством типа А-3 (японского производства). Образцу полистирола шлифовкой придавали форму клина. Измерения проводили при комнатной температуре $22 \pm 0,3^\circ$.

Значение $\rho_{22 \pm 0,3^\circ}$, вычисленное по рентгеноинтерферометрическому методу, равно $1,0805 \pm 0,0005 \text{ г/см}^3$, тогда как по [8, 9] оно равно $1,08 \text{ г/см}^3$.

В заключение выражаем глубокую благодарность Ф. О. Эйрамджяну за любезное предоставление интерферометра и за консультации по интересующим нас вопросам.

Ереванский государственный
университет

Поступила в редакцию
13 VI 1973

ЛИТЕРАТУРА

1. А. А. Тагер, Физико-химия полимеров, Химия, 1968.
2. Л. Азаров, М. Бургер, Метод порошка и рентгенографии, Изд-во иностр. лит., 1961.
3. М. А. Блохин, Физика рентгеновых лучей, ГИТЛ, 1957.
4. А. О. Абоян, Ф. О. Эйрамджян, П. А. Безирганян, Изв. ВУЗов СССР, Физика, 12, 160, 1973.
5. Ф. О. Эйрамджян, П. А. Безирганян, Изв. АН АрмССР, Физика, 5, 453, 1970.
6. Ф. О. Эйрамджян, Т. О. Эйрамджян, П. А. Безирганян, Изв. АН АрмССР, Физика, 9, 242, 1973.
7. Р. Джеймс, Оптические принципы дифракции рентгеновых лучей, Изд-во иностр. лит., 1954.
8. G. Natta, P. Pino, P. Corradini, F. Danusso, E. Mantica, G. Mazzanti, G. Moraglio, J. Amer. Chem. Soc., 77, 1708, 1955.
9. G. Natta, Makromolek. Chem., 35, 94, 1960.

УДК 541.64:539.107:681.142

ИМИТАЦИЯ ДВИЖЕНИЯ МАКРОМОЛЕКУЛ НА ВИДЕОЭКРАНЕ ЭВМ

Ю. А. Таран, Л. Б. Стrogанов, Н. А. Платэ

Поворотно-изомерная модель использована для рассмотрения на видеоэкране ЭВМ (дисплее) теплового движения одной или двух макромолекул, представленных непересекающимися ломаными на квадратной решетке. При изменении внутрицепного взаимодействия, являющегося параметром в случае одной цепи, можно моделировать движение макромолекулы в растворителях различного состава. Изменение межцепного взаимодействия для двух цепей позволяет рассматривать процессы упорядочения и разупорядочения на двутяжевых структурах.

Современная вычислительная техника позволяет ставить и решать задачи о поведении моделей достаточно сложных молекулярных систем. Помимо приближенных расчетов по аналитическим схемам большое распространение получили прямые модельные расчеты, иначе имитация с помощью ЭВМ. Такие расчеты основаны или на интегрировании уравнений движения всех частиц системы, или на вероятностной монте-карловской процедуре, или на промежуточной схеме, использующей уравнение Ланжевена (применении к полимерам см. [1-3]). При этом ЭВМ необходима в качестве быстро действующего процессора и хранилища большого объема информации. Вывод данных осуществляется обычно в цифровом или графическом (графопостроитель) виде. Участие человека в моделируемом на ЭВМ процессе обычно сводилось к изменению параметров модели путем замены перфокарт и к обработке выданной ЭВМ цифровой информации.

Однако достаточно вспомнить историю открытия двойной спирали ДНК, чтобы понять, что наглядность и визуальность являются очень сильным методологическим средством научного познания. Наглядность в процессе математического моделирования поведения некоей молекулярной системы в настоящее время может обеспечить система вывода информации на видеоэкран компьютера, называемая дисплеем.

В последнее время эффективность использования видеоэкрана для визуализации сложных физических процессов и математических уравнений была продемонстрирована в серии интересных работ Гринфилда [4] по применению так называемой компьютерографии к решению гидродинамических и инженерно-конструкторских задач.

В применении к физике и физико-химии полимеров очень удобной для демонстрации на видеоэкране является поворотно-изомерная решеточная модель макромолеку-