

УДК 541.64:539.26

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ФУРЬЕ-АНАЛИЗА ПРОФИЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ЛИНИИ ДЛЯ РАСЧЕТА ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КРИСТАЛЛИТОВ ПО РАЗМЕРАМ В ОРИЕНТИРОВАННОМ ЛИНЕЙНОМ ПОЛИЭТИЛЕНЕ

*Озерин А. Н., Зубов Ю. А.*

Изучены возможности и ограничения метода Фурье-анализа профиля рентгеновской дифракционной линии в применении к расчету в ориентированных полимерах функции распределения кристаллитов по размерам. Выполнены расчеты функций распределения кристаллитов по размерам в продольном направлении для модельных и экспериментальных профилей дифракционной линии 002 одноосноориентированных образцов линейного ПЭ, включая образец с большими продольными размерами кристаллитов. Показано, что средний размер, характеризующий распределение, хорошо согласуется с эффективным размером кристаллитов, рассчитанным из интегральной ширины линии. На основании расчетов сделан вывод об образовании кристаллитов больших продольных размеров в ориентированном линейном ПЭ при увеличении кратности ориентационной вытяжки.

Известно, что кристаллизующиеся полимеры неоднородны по строению. Они состоят из чередующихся кристаллических областей малого размера (кристаллитов) и некристаллических (аморфных) областей. В процессе деформации или термообработки кристаллических полимеров происходит изменение размеров и строения этих областей, что сопровождается изменением комплекса физико-механических свойств образцов. По этой причине изменение размеров кристаллитов при деформации и термообработке полимеров подробно изучалось [1]. При этом, как правило, ограничивались значениями эффективных размеров кристаллитов, определяемых методом дифракции рентгеновых лучей в больших углах по ширине соответствующих дифракционных рефлексов.

Однако для решения ряда задач информация о средних размерах кристаллитов недостаточна. Например, оперируя только средним размером кристаллитов, трудно объяснить экспериментальный факт [2] превышения эффективного размера кристаллитов над величиной большого периода (включающего кристаллит и аморфную область) при больших кратностях ориентационной вытяжки полимерных образцов. Для решения этого и ряда других вопросов необходимо знать распределение кристаллитов по размерам. Принципиально данная задача может быть решена методом Фурье-анализа профиля дифракционной линии.

Теоретическое выражение, связывающее трансформанту Фурье наблюдаемого профиля дифракционной линии с распределением кристаллитов по размерам, было получено давно [3, 4], однако его практическое применение требует достоверного определения профиля линии в точках, удаленных от центра профиля. Поэтому многие авторы [5, 6], применяя метод Фурье-анализа профиля дифракционной линии, были вынуждены все же ограничиваться только средними размерами кристаллитов, характеризующими статистику распределения по размерам.

Наряду с этим в ряде работ [7–9] был разработан и применен метод нахождения распределения кристаллитов по размерам, основанный на

Фурье-анализ профиля линии, измеренной только в некоторой окрестности центра линии. Поскольку метод Фурье-анализа профиля линии не является тривиальным с точки зрения его практического использования, представляется необходимым подробно изложить его теоретические основы.

**Теоретические основы метода.** Следуя работам [7—9], рассмотрим профиль  $I(s)$  дифракционной линии Дебая — Шеррера с индексами  $hkl$  на рентгенограмме поликристаллического вещества. Предположим [4, 7—9], что вся совокупность кристаллитов представляет собой набор линейных структур  $\rho_n(x)$ , перпендикулярных плоскости  $(hkl)$ .  $\rho_n(x)$  есть электронная плотность  $n$ -й линейной структуры ( $n=1, 2 \dots, N$ ) в точке  $x$ , которая является координатой, перпендикулярной отражающей плоскости  $(hkl)$ . Пусть трансформанта Фурье  $\rho_n(x)$  есть  $A_n(s)$ , тогда [4]

$$I(s) = \sum_1^N |A_n(s)|^2 = N |A_0(s)|^2 \quad (1)$$

Соотношение (1) вводит некоторую эквивалентную структуру  $\rho_0(x)$ , которая определяется как

$$\rho_0(x) * \rho_0(x) = (1/N) \sum_1^N (\rho_n(x) * \rho_n(x)) \quad (2)$$

Здесь и далее символ  $*$  означает свертку функций. Соотношение (1) показывает, что линейные структуры  $\rho_n(x)$  дифрагируют рентгеновы лучи независимо друг от друга, следовательно, фазовый угол дифрагированных лучей определить в этом случае невозможно.

Трансформанты Фурье обеих частей (2) будут удовлетворять соотношению (1), если  $A_0(s)$  является трансформантой Фурье  $\rho_0(x)$

$$A_0(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x) \exp(2\pi i s x) dx \quad (3)$$

Припишем формально некоторый фазовый угол  $\omega(s)$  квадратному корню из  $I(s)$

$$A_0(s) = (I(s))^{1/2} \exp(2\pi i \omega(s)) \quad (4)$$

Тогда из уравнения (3) получим

$$\rho_0(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} A_0(s) \exp(-2\pi i s x) ds \quad (5)$$

Соотношение (5) позволяет определить  $\rho_0(x)$  из экспериментального профиля  $I(s)$ . При этом выбор фазового угла  $\omega(s)$ , как показано в работах [7—9], не влияет на расчет функции распределения кристаллитов по размерам, так что можно положить, например,  $\omega(s)=0$  в соотношении (4).

Из соотношения (5) следует, что измерения  $I(s)$  должны простираться бесконечно в обратном пространстве, что практически недостижимо. Поэтому для получения максимальной информации из измерений  $I(s)$  в ограниченной области обратного пространства в работах [7—9] предложили использовать функцию

$$\varphi_{hkl} = \int_{-\infty}^{+\infty} A_0(s' + s_{hkl}) K(s') \exp(-2\pi i s' x) ds', \quad (6)$$

где  $s' = s - s_{hkl}$  — координата обратного пространства;  $K(s') = \sin(\pi a_{hkl} s') / (\pi s')$  — интегральное ядро;  $a_{hkl} = 1/s_{hkl}$  — межплоскостное расстояние;  $s_{hkl}$  означает положение центра тяжести линии.

Функция  $\varphi_{hkl}$  может быть рассчитана из экспериментальной функции  $A_0(s)$ , определенной только в некоторой окрестности  $s = s_{hkl}$ , так как значение  $K(s')$  падает как  $(s')^{-1}$  с ростом  $s'$  и равно нулю на других рефлексах с индексами  $nh$ ,  $nk$ ,  $nl$  ( $n \neq 1$ ).

На основании теоремы о свертке функций соотношение (6) можно записать в виде

$$\varphi_{hkl} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x') \Delta(x - x') \exp(2\pi i s_{hkl} x') dx' \quad (7)$$

$$\Delta(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(s) \exp(-2\pi i s x) ds = \begin{cases} 1 & |x| < (1/2) a_{hkl} \\ 0 & |x| > (1/2) a_{hkl} \end{cases} \quad (8)$$

Из соотношений (7) и (8) следует, что  $\varphi_{hkl}(x)$  является структурным фактором  $\rho_0(x)$ , ограниченным областью  $x - (1/2)a_{hkl}$  и  $x + (1/2)a_{hkl}$ . Предположим, что  $\rho_0(x)$  – функция линейного расположения точечных атомов

$$\rho_0(x) = \sum_m g_m(x - ma_{hkl} - \varepsilon_m) p(m), \quad (9)$$

где функция  $g_m(x)$  имеет узкий пик нормированной площади при  $x=0$  и  $p(m)$  есть мера электронной плотности при  $x=ma_{hkl}+\varepsilon_m$ .

Тогда из соотношений (7) – (9) получаем

$$\varphi_{hkl}(ma_{hkl}) = p(m) \exp(2\pi i s_{hkl} \varepsilon_m) \quad (m=0; \pm 1; \pm 2 \dots) \quad (10)$$

Соотношение (10) является основным для определения структуры  $\rho_0(x)$  из экспериментального профиля линии  $I(s)$ .

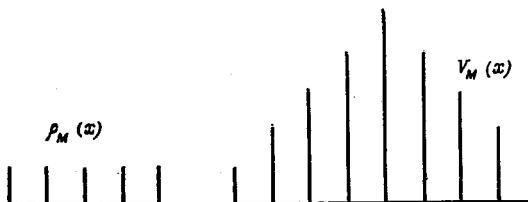


Рис. 1. Линейная решетка  $\rho_M(x)$ , составленная из  $M$  атомов, и ее самосвертка  $V_M(x)$

Структура  $\rho_0(x)$  может не соответствовать какой-либо реальной структуре из набора линейных структур  $\rho_n(x)$ . Однако из соотношения (2) видно, что самосвертка  $\rho_0(x)$

$$V(x) = \rho_0(x) * \rho_0(x) = \sum_m \sum_{m'} g_m(x - ma_{hkl} - \varepsilon_m) * g_{m'}'(x - m'a_{hkl} - \varepsilon_{m'}) p(m) p(m') \quad (11)$$

представляет собой парное распределение атомов в исследуемом веществе. Так как  $g_m(x)$  предполагаются достаточно узкими и могут быть аппроксимированы  $\delta$ -функцией, то

$$V(x) = \sum_m \sum_{m'} p(m) p(m') g(x - (m - m') a_{hkl} - (\varepsilon_m - \varepsilon_{m'})) \quad (12)$$

Для получения функции распределения кристаллитов по размерам положим искусственно все  $\varepsilon_m = 0$  в  $\rho_0(x)$  и  $V(x)$ , т. е. заменим  $\rho_0(x)$  на

$$\rho^0(x) = \sum_m g_m(x - ma_{hkl}) p(m) \quad (13)$$

$$V^0(x) = \rho^0(x) * \rho^0(x) = \sum_m \sum_{m'} p(m) p(m') g(x - (m - m') a_{hkl}) \quad (14)$$

$V^0(x)$  является трансформантой Фурье действительного профиля линии  $I^0(x)$ , который получился бы в отсутствие нарушений кристаллической решетки, приводящих к несимметричной форме профиля линии. Запишем

$$V^0(x) = \sum_M (G(M)/M) V_M(x) \quad (15)$$

Здесь  $V_M(x)$  означает самосвертку линейной решетки  $\rho_M(x)$ , составленной из  $M$  точечных атомов единичного электронного содержания (рис. 1). Смысл такого разложения в ряд становится понятным, если выполнить преобразование Фурье обеих частей уравнения (15)

$$I^0(s) = \sum_M (G(M)/M) \sin^2(\pi M a_{hkl} s) / (\pi a_{hkl} s)^2 \quad (16)$$

Коэффициенты разложения  $G(M)/M$  – есть функция распределения линейных решеток  $\rho_M(x)$  по размерам и пропорциональны числовому долю линейных структур размером  $Ma_{hkl}$  в исследуемом веществе.

Из работ [3, 4] следует, что профиль линии  $hkl$  таков же, как и профиль дифракционной картины от совокупности параллельных и некогерентных отрезков прямых, длины которых распределены, как размеры кристаллитов, перпендикулярные отражающей плоскости ( $hkl$ ). Следовательно, коэффициенты  $G(M)/M$  в соотношении (16) являются одновременно и функцией распределения кристаллитов по размерам. Ясно, что  $G(M)$  представляет собой массовую (объемную) долю кристаллитов размером  $M_{hkl}$ .

На основании треугольной формы  $V_M(x)$  можно получить соотношение для определения  $G(M)/M$  из  $V^0(x)$

$$G(M)/M = \Delta V^0(M_{hkl}) - \Delta V^0((M-1)a_{hkl}) \quad (17)$$

$$\Delta V^0(M_{hkl}) = V^0((M-1)a_{hkl}) - V^0(M_{hkl}) \quad (18)$$

Для расчета  $G(M)/M$  мы полагали  $\varepsilon_m=0$  в соотношении (10), т. е. неявно предположили, что профиль  $I(s)$  является симметричным. Если экспериментальный профиль линии асимметричен, то функция  $\Phi_{hkl}$  в соотношении (6) будет комплексной и величина нарушений решетки  $\varepsilon_m$ , приводящих к асимметрии профиля, может быть рассчитана [7–9] из соотношения (10) по одному порядку отражения. Для учета

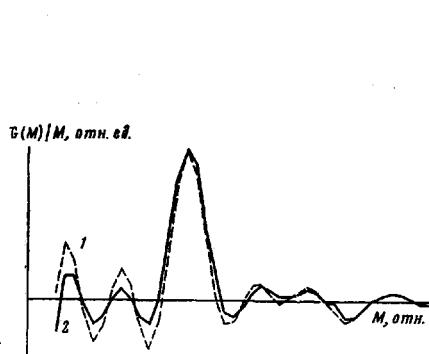


Рис. 2

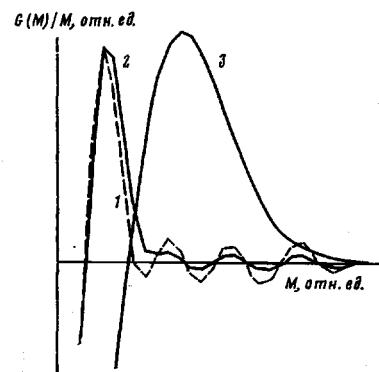


Рис. 3

Рис. 2. Вид функции распределения  $G(M)/M$ , рассчитанной для профиля линии  $I(s) = \sin^2(\pi s a) / (\pi s a)^2$  при некотором значении  $a$  без учета (1) и с учетом  $s$ -множителей Ланцшоша (2)

Рис. 3. Вид функции распределения  $G(M)/M$ , рассчитанной для профиля линии  $I(s) = \exp(-a^2 s^2)$  при  $a = a_0$  (1) и  $3a_0$  (3), без учета (1) и с учетом  $s$ -множителей (2)

согласно методу [7–9] нарушений, приводящих к симметричному расширению дифракционной линии, требуется по крайней мере два порядка отражения, как и для классического метода [5, 6], или дополнительные предположения о природе нарушений и их влиянии на ширину линии.

Суммируя изложенное, последовательность расчета функции распределения  $G(M)/M$  из экспериментального профиля линии  $I(s)$  можно представить в следующем виде.

1. Регистрируют профиль линии  $I(2\theta)$  в шкале  $2\theta$  в максимально доступной области углов дифракции.

2. Профиль  $I(2\theta)$  переводят в  $I(s)$ , используя соотношение  $s = 2 \sin \theta / \lambda$ .

3. Рассчитывают  $A_0(s) = (I(s))^{1/2}$ , полагая  $\omega(s) = 0$ .

4. По соотношению (6) рассчитывают  $\Phi_{hkl}(x)$  при  $x = 0; \pm a_{hkl}; \pm 2a_{hkl}$  (практически нужно брать шаг, по  $x$  кратный нескольким межплоскостным расстояниям  $a_{hkl}$ , и число шагов ограничивать несколькими десятками).

5. Из соотношения (10) находят  $p(m)$  при  $x = na_{hkl}$  в предположении  $\varepsilon_m = 0$  ( $m = 0; \pm 1; \pm 2 \dots$ ).

6. Подсчитывают парные суммы  $\sum_m \sum_{m'} p(m)p(m')$ , в которых суммирование

проводят только для таких  $m$  и  $m'$ , что  $|m-m'| = n = 0; 1; 2 \dots$ . Подсчитанные суммы являются значениями  $V^0(x)$  при  $x = na_{hkl}$ .

7. Из соотношений (17) и (18) рассчитывают  $G(M)/M$  в точках  $M = na_{hkl}$ .

**Расчет модельных распределений.** Известно [4], что если профиль линии описывается функцией Лауз вида  $I(s) = \sin^2(\pi s a) / (\pi s a)^2$ , то в распределении кристаллитов по размерам будут представлены только кристаллиты с размером  $x=a$ , т. е. функцией распределения в этом случае будет  $\delta$ -функция. Для проверки этого результата согласно методике, изложенной выше, были рассчитаны функции  $G(M)/M$  для профилей Лауз с различными параметрами  $a$  (рис. 2).

Численные расчеты проводили на ЭВМ с использованием алгоритмического языка ФОКАЛ. Протяженность линии по подошве в 5–7 раз превышала полуширину линии, что хорошо моделирует экспериментально доступные для регистрации протяженности дифракционных линий.

Из рис. 2 следует, что функция распределения  $G(M)/M$  действительно имеет в этом случае вид узкого максимума при  $M=a$ , конечная ширина

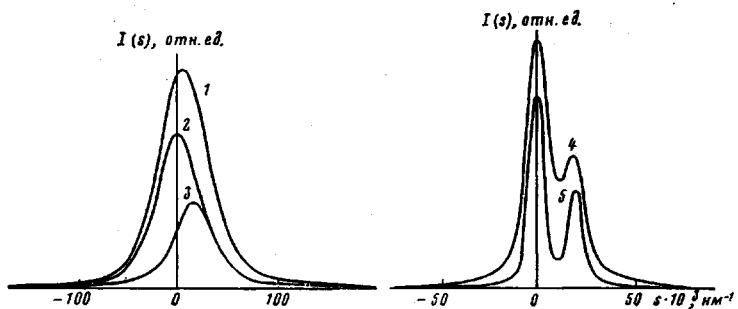


Рис. 4. Экспериментальные профили  $I(s)$  рефлексов 002 образцов ПЭ1-10 (1) и ПЭ2 (4). Профиль (5) соответствует рефлексу эталона. Показано внесение поправки на  $K_\alpha$ -дублет (профили 2 и 3)

на которого обусловлена обрывом профиля линии  $I(s)$  по координате  $s$  при больших значениях  $s$ . Это же ограничение приводит к тому, что со стороны малых значений  $M$  существует область недостоверных решений, которая должна быть исключена из рассмотрения [4].

Характерной особенностью найденной функции  $G(M)/M$  является периодическая осцилляция значений функции, амплитуда которой (слабо) уменьшается по мере роста  $M$ . Подобные осцилляции – следствие конечного числа слагаемых в выражении для численного интегрирования по соотношению (6). Как показано в работе [10], при неудачном выборе числа слагаемых в интегральной сумме осцилляции могут достигать очень большой амплитуды вплоть до потери устойчивости решения, что усложняет идентификацию ложных максимумов на кривой распределения. Возможно, что именно этими причинами обусловлено появление множественных пиков с кратными значениями  $M$  на кривых  $G(M)/M$  в работах [8, 9].

Функции распределения  $G(M)/M$  (рис. 3), рассчитанные для профилей вида  $I(s) = \exp(-a^2 s^2)$ , проявляют те же особенности, что и на рис. 2.

Уменьшения влияния ложных максимумов на вид функции  $G(M)/M$  можно добиться применением так называемых б-множителей Ланцша ([11], с. 301), которые улучшают сходимость численных решений, связанных с преобразованием Фурье. В нашем случае применение б-множителей при вычислении  $\varphi_{kl}$  из соотношения (6) привело к заметному уменьшению амплитуды ложных максимумов на кривой распределения (рис. 2 и 3), и этот прием мы использовали в дальнейшем при обработке экспериментальных профилей линий.

Внешний вид рассчитанных модельных функций распределения кристаллитов по размерам можно использовать в качестве критерия правильности аппроксимации исходного профиля  $I(s)$  той или иной аналитической функцией. Если функция распределения имеет вид узкого симметричного

максимума (рис. 2), то профиль  $I(s)$  близок к функции Лауз; если функция распределения подобна функции Максвелла вида  $M^2 \exp(-kM^2)$  (рис. 3), то профиль  $I(s)$  близок к гауссовой функции.

Расчет функций распределения в ориентированном ПЭ. В качестве примера практического применения метода Фурье-анализа профиля линии рассмотрим результаты расчета функции распределения кристаллитов по размерам в продольном направлении для ориентированных образцов линейного ПЭ с молекулярной массой  $3 \cdot 10^4$  (ПЭ1).

Образцы прессовали при  $160^\circ$ , быстро охлаждали в воде со льдом и после этого одноосно растягивали при  $65^\circ$  со скоростью движения зажима 16 мм/мин. Исследовали образцы, растянутые «в шейку» с кратностью ориентационной вытяжки  $\lambda=10$  (ПЭ1-10) и предельно вытянутые с  $\lambda=25$  (ПЭ1-25).

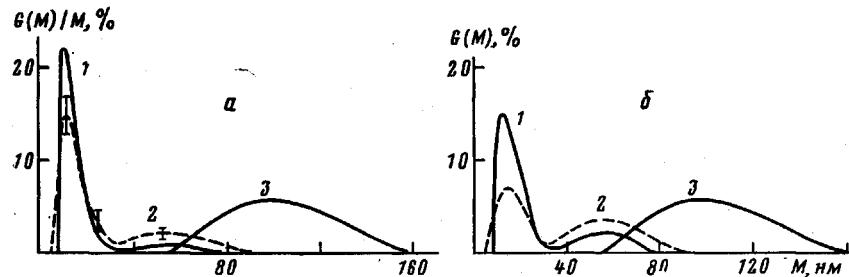


Рис. 5. Функции числового (а) и объемного (б) распределения кристаллов по размерам в продольном направлении для образцов ПЭ1-10 (1), ПЭ1-25 (2) и ПЭ2 (3). Вертикальные отрезки (а) показывают величину ошибки вычисления

Регистрацию экспериментальных профилей рефлексов 002 ( $2\theta=74,5^\circ$ ) образцов проводили на дифрактометре ДРОН-2,0 на  $\text{Cu } K_\alpha$ -излучении с использованием Ni-фильтра. Использовали схему съемки «на просвет» с шаговой регистрацией дифракционной линии с шагом в шкале  $2\theta$  0,01 и  $0,02^\circ$  и временем накопления, обеспечивающим накопление  $5 \cdot 10^3 - 10^4$  импульсов в максимуме линии. Угловой диапазон съемки в 5–6 раз превышал ширину линии (рис. 4).

В измеренные профили линий после отделения диффузного рассеяния и сглаживания хвостов линии вносили поправку на  $K_\alpha$ -дублет [12] (рис. 4) и инструментальный фактор. В качестве эталона использовали рефлекс 110 кристаллического графита ( $2\theta=77,5^\circ$ ). Применили итерационный метод расчета исправленного профиля линии [13]. Поправки на поляризационный фактор, фактор Лоренца, поглощение и температурный фактор не вводили, так как угловой диапазон регистрации рассеяния был мал. Для перевода измеренных профилей линии из шкалы  $2\theta$  в шкалу  $s$  использовали интерполяцию кубическими сплайнами [14].

Особый интерес с точки зрения правильности внесения всех поправок и проверки возможностей метода Фурье-анализа профиля линии представляло изучение образца ориентированного ПЭ, содержащего кристаллиты большого размера (ПЭ2). Образец ПЭ2 был получен отжигом в условиях высокого гидростатического давления [15]. В этом образце экспериментальный профиль рефлекса 002 приближается к профилю линии эталона (рис. 4). Поэтому результаты расчетов для образца ПЭ2 также представлены в данной работе.

Определение величины большого периода в образцах проводили в малоугловой камере КРМ-1 с разрешением 100 нм.

Все численные расчеты были выполнены на ЭВМ. Значения функции распределения  $G(M)/M$  рассчитывали для трех различных значений шага по координате  $M$ , что позволило надежно идентифицировать положение максимумов на кривой распределения и усреднить влияние осцилляций решения на искомую функцию распределения. Значение макси-

мально возможного шага  $\Delta M$  по координате  $M$  выбирали из условия теоремы выборки [11]  $2\Delta s \Delta M < 1$ , где  $2\Delta s$  — протяженность исследуемой дифракционной линии.

Результаты расчета функций числового  $G(M)/M$  и объемного распределений  $G(M)$  для исследуемых образцов представлены на рис. 5. Видно, что все образцы содержат широкий набор кристаллитов различных продольных размеров. В таблице приведены параметры, характеризующие статистику распределения кристаллитов по размерам в продольном направлении.

По мере увеличения кратности ориентационной вытяжки  $\lambda$  происходит увеличение средних по распределению продольных размеров кристаллитов и возрастание полидисперсности (образцы ПЭ1-10 и ПЭ1-25). Образцы ПЭ2 имеют минимальные среди исследуемых образцов полидисперсность и дисперсию распределения.

Теоретическое рассмотрение показывает ([4], с. 402), что средняя по объемному распределению величина кристаллита  $l_w$  должна совпадать с его эффективным размером  $l_{002}$ , вычисленным из интегральной ширины рефлекса. Для проверки этого положения из интегральных ширин рефлексов 002 в соответствии с методикой, разработанной ранее [15], были рассчитаны эффективные размеры кристаллитов  $l_{002}$  исследуемых образцов (таблица). Из данных таблицы следует, что  $l_{002}$  и  $l_w$  близки между собой для всех образцов, что подтверждает корректность расчета функции распределения.

Параметры распределения кристаллитов по размерам в ориентированном ПЭ

Образец	$L$	$l_{002}$	$l_N$	$l_W$	$PD$	$D_N$	$D_W$
	нм						
ПЭ1-10	20	21	17	24	1,42	0,65	0,76
ПЭ1-25	20	42	24	39	1,60	0,77	0,61
ПЭ2	—	123	109	116	1,06	0,25	0,23

Примечание.  $L$  — большой период;  $l_{002}$  — средний эффективный размер кристаллитов;  $l_N$ ,  $l_W$  — среднечисленный и среднеобъемный продольный размер кристаллитов;  $PD$  — полидисперсность;  $D_N$ ,  $D_W$  — дисперсия численного и объемного распределений.

На основании результатов расчета (рис. 5) наблюдаемый в данной работе экспериментальный факт [2] превышения эффективного размера кристаллитов  $l_{002}$  над величиной большого периода  $L$  в ориентированном ПЭ можно интерпретировать как следствие образования кристаллитов большого продольного размера при увеличении кратности вытяжки.

Таким образом, метод [7-9] Фурье-анализа профиля дифракционной линии позволяет достаточно просто находить функции распределения кристаллитов по размерам и может быть широко использован для анализа изменения строения ориентированных полимеров в процессе деформации и термообработки.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Марихин В. А., Мясников Л. П. Надмолекулярная структура полимеров. Л.: Химия, 1977.
2. Clements J., Jakeways R., Ward I. M., Longman G. W. Polymer, 1979, v. 20, № 3, p. 295.
3. Berlau F. Acta cristallogr., 1950, v. 3, № 1, p. 14.
4. Гинье А. Рентгенография кристаллов. М.: Физматгиз, 1961.
5. Buchanan D. R., Miller R. L. J. Appl. Phys., 1966, v. 37, № 11, p. 4003.
6. Crist B., Cohen J. B. J. Polymer Sci. Polymer Phys. Ed., 1979, v. 17, № 6, p. 1001.
7. Doi K. Acta cristallogr., 1961, v. 14, № 8, p. 830.
8. Yoda O., Doi K., Tamura N., Kuriyama I. J. Appl. Phys., 1973, v. 44, № 5, p. 2211.
9. Yoda O., Tamura N., Doi K. J. Mater. Sci., 1976, v. 11, № 4, p. 696.

10. Креславский М. Р., Смушков И. В. В кн.: Аппаратура и методы рентгеновского анализа. Л.: Машиностроение, 1978, вып. 20, с. 45.
11. Хемминг Р. В. Численные методы. М.: Физматгиз, 1972, с. 313.
12. Rachinger W. A. J. Sci. Instr., 1948, v. 25, № 2, p. 254.
13. Хакимова Д. К., Нагорный В. Г., Смольянинов А. А. Кристаллография, 1973, т. 18, вып. 3, с. 480.
14. Форсайт Дж., Мальком М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980, с. 86.
15. Зубов Ю. А., Селихова В. И., Щирец В. С., Озерин А. Н. Высокомолек. соед. А, 1974, т. 16, № 7, с. 1681.

Научно-исследовательский  
физико-химический институт  
им. Л. Я. Карпова

Поступила в редакцию  
5.VIII.1982

FOURIER-ANALYSIS OF THE PROFILE OF X-RAY DIFFRACTION  
LINE FOR COMPUTATION OF THE DISTRIBUTION FUNCTION  
OF CRYSTALLITES BY DIMENSIONS IN ORIENTED LINEAR  
POLYETHYLENE

Ozerin A. N., Zubov Yu. A.

S u m m a r y

The capabilities and restrictions of the X-ray diffraction line profile Fourier-analysis as applied to the computation in oriented polymers of the distribution function of crystallites by dimensions have been examined. Distribution functions of crystallites by dimensions in a longitudinal direction for model and experimental profiles of 002 diffraction line of uniaxially oriented samples of linear PE, including the sample with large longitudinal dimensions of the crystallites, were computed. The mean dimension, intrinsic to the distribution, was shown to be in accord with the effective size of crystallites, calculated from the integral line-width. The formation of crystallites of large longitudinal dimensions was deduced in oriented linear PE on increasing the multiplicity of orientational strain.