

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ИСКАЖЕНИЙ НА ФОРМУ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННОЙ ФУНКЦИИ И ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПО ЕЕ ИЗМЕНЕНИЮ С ТЕМПЕРАТУРОЙ ДЕФЕКТНОСТИ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

© А.А.Сидорович

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Поступила в Редакцию 25 мая 1995 г.
В окончательной редакции 16 мая 1996 г.)

Рассмотрен вклад динамических искажений, обусловленных скоррелированными колебаниями атомов, в изменение формы интерференционной функции. Сделан вывод об отсутствии их влияния на увеличение угловых ширин рефлексов с уменьшением температуры. Рассчитаны интерференционные функции для искажений смещения и замещения. Показано, что искажения смещения уменьшают полуширину интерференционной функции решетки, а искажения замещения незначительно ее увеличивают. Предложена модель ансамбля искаженных и неискаженных решеток, адекватно описывающая наблюдаемое в эксперименте значительное уменьшение угловой ширины экваториальных рефлексов полиэтилена и графита с ростом температуры. На основании расчета модели сделан вывод о наличии в поликристаллах полиэтилена и графита как кристаллитов с идеальной регулярной решеткой, так и кристаллитов, у которых все брэгговские плоскости смещены относительно регулярного расположения. Экспериментально подтверждено, что доля сильно искаженных кристаллитов образуется в поликристалле полиэтилена в процессе ориентации и возрастает за счет доли неискаженных при сильном нагружении. Показано, что распределение искажений блоков алюминия описывается формулой квадратичного гауссова смещения.

В ряде экспериментальных работ [1-3] обнаружено уменьшение с ростом температуры угловой полуширины (ширины на половине высоты) рентгеновских рефлексов от цепных (полимеры), слоистых (графит поликристаллический) и трехмерных изотропных (алюминий) материалов.

Для ориентированных полимеров величина уменьшения полуширины рефлекса (220) при увеличении температуры от 90 до 350 К составляет 40% для мелкокристаллического полиэтилена (количество брэгговских плоскостей равно 40) и 50% для крупнокристаллического (кристаллит состоит из 80 брэгговских плоскостей). У графита уменьшение полуширины рефлекса (220) с ростом температуры составляет 13%. Полуширина рефлекса (222) алюминия с ростом температуры от 90 до 475 К уменьшается на 10%.

Количество плоскостей определялось из наблюдаемых угловых значений ширины рефлексов на половине высоты на первом и втором порядках отражения при учете собственной ширины первичного пучка. Значение размера кристаллита в поперечном относительно брэгговских плоскостей направлении оценивалось из графика, где по оси ординат отложено значение $[\Delta\varphi_S \cos(\varphi_m/2)]^2$, а по оси абсцисс $\sin^2(\varphi_m/2)$. $\Delta\varphi_S$ — наблюдаемое значение полуширины, φ_m — положение центра тяжести наблюдаемого рефлекса. Через две точки, соответствующие первому и второму порядкам отражения, проводится прямая, пересечение которой с осью ординат равно $0.93\lambda/L$, где L — размер кристаллита, λ — длина волны излучения. Получаемое таким образом значение размера кристаллита в направлении, перпендикулярном брэгговским плоскостям, делится на соответствующее межплоскостное расстояние, что дает искомое значение количества плоскостей.

Уменьшение полуширины большеугловых рентгеновских рефлексов с увеличением температуры может быть связано либо со скоррелированными колебаниями атомов около своего положения равновесия, которые описываются волнами нормальных колебаний в модели Борна-Кармана [4], либо с увеличением поля искажения дефекта при уменьшении температуры, которое вызывается уменьшением межплоскостных расстояний.

При скоррелированном смещении атомов волной тепловых колебаний возникает явление диффузного рассеяния [5], заключающееся в том, что часть энергии рефлекса рассеивается в виде двух максимумов-сателлитов по обе стороны от основного рефлекса. Расстояние от центра рефлекса до центра сателлита обратно пропорционально длине волны смещения, а пиковая интенсивность сателлита равна произведению пиковой интенсивности рефлекса на квадрат относительного смещения брэгговской плоскости волной. При низких температурах возбуждены нулевые колебания всех частот спектра нормальных колебаний и тепловые колебания длинных волн. Сателлитные максимумы от длинных волн смещения находятся в зоне основного максимума, а на расстоянии в десятки угловых минут от центра рефлекса. Наблюдаемая интерференционная картина есть сумма рефлекса и сателлитов, которые, находясь в области рефлекса, увеличивают его полуширину. С ростом температуры возбуждаются более коротковолновые колебания, сателлитные максимумы которых находятся вне рефлекса. При этом длинноволновые составляющие в колебаниях атомов становятся менее коррелированными, и интенсивность сателлитов от них снижается, что приводит к уменьшению полуширины с ростом температуры. Для того чтобы сателлит находился в области рефлекса, необходимо, чтобы длина волны смещения была меньше 100 \AA . Энергия нормальных колебаний, ограниченных длиной волны в 8 \AA , в 10^5 раз больше энергии нормальных колебаний, ограниченных длиной волн в 100 \AA [6].

Из опытов по измерению диффузного рассеяния известно [5], что величина интенсивности сателлитов при комнатной температуре составляет 10^{-2} – 10^{-3} от интенсивности рефлекса. Следовательно, интенсивность сателлита, образованного большой волной смещения, при низкой температуре составляет тысячную долю интенсивности основного рефлекса и вызывает изменение его полуширины лишь в сотые доли процента.

Поскольку колебательное движение атомов не может быть причиной заметного изменения полуширины рефлекса, то все наблюдаемое изменение следует объяснять только увеличением поля искажения дефектов решетки при понижении температуры. Наличие дефектов в решетке изменяет фазу структурного фактора ячейки F_n : $F_n = f \exp(-2\pi i \mathbf{h} \Delta \mathbf{d}_n)$, где f — фактор рассеяния, $\Delta \mathbf{d}_n$ — смещение атома из узла средней решетки, \mathbf{h} — единичный вектор. При этом величина $\sum_n \Delta d_n$ может быть не равна нулю, следовательно, может меняться среднее межплоскостное расстояние \bar{d} . То же может происходить при уменьшении температуры. В искаженной дефектами внедрения решетке среднее уменьшение межплоскостного расстояния с температурой меньше, чем в идеальной. Дефекты не дают атомам, составляющим брэгговские плоскости, сжаться на величину, определяемую коэффициентом термического расширения α идеальной решетки.

Рассмотрим, может ли изменение искаженности одной решетки привести к наблюдаемому изменению полуширины в десятки процентов? Поскольку в узлах ячейки элементарной решетки рассматриваемых материалов находятся атомы одного сорта, то угловое распределение дифрагированного излучения сведется к угловому распределению интерференционной функции.

Для расчета интерференционной функции принимается простая модель искаженной решетки кристаллита: сами кристаллографические плоскости остаются неискаженными (плоскими, без включений), они параллельны друг другу во всем объеме кристаллита (т. е. формфактор постоянен для всех ячеек), а искаженность заключается в отклонении межплоскостных расстояний от исходного значения d . Величина смещения Δd от исходного значения откладывается по оси, перпендикулярной брэгговским плоскостям. Таким образом, фактически рассматривается дифракция на одномерной системе точек.

Обычно эта задача решается методом функций Паттерсона, которые определяют электронную плотность в каждом узле обратной решетки. Функция интерференции в обратном пространстве является трансформантой Фурье для пространства объекта. Поскольку функция Паттерсона, определяемая в пространстве объекта, — величина вещественная, а функция интерференции в обратном пространстве в общем случае — комплексная, то решение задачи об определении типа дефекта по наблюдаемой интерференционной функции может не иметь единственного решения [7].

Функция интерференции есть функция рассеяния I , помноженная на комплексно-сопряженную I^* . Для идеальной решетки функция рассеяния — сумма ряда

$$1 + \exp(-i\mathbf{h}d) + \exp(i\mathbf{h}d) + \dots + \exp(-n i\mathbf{h}d) + \exp(n i\mathbf{h}d),$$

которая преобразуется в выражение

$$\sin[(n + 0.5)hd] / \sin(hd/2).$$

Функция интерференции тогда имеет вид

$$\sin^2[(n + 0.5)hd] / \sin^2(hd/2).$$

Если предположить, что решетка искажена так, что одна ее половина сжата, а другая растянута (каждая n плоскость сдвинута на величину Δd_n), но при этом среднее межплоскостное расстояние \bar{d} равно межплоскостному расстоянию идеальной решетки d , то функция рассеяния для такой решетки будет суммой ряда

$$1 + \exp(ih\Delta d_1)[\exp(-ihd) + \exp(ihd)] + \dots + \exp(ih\Delta d_n) \times \\ \times [\exp(-nihd) + \exp(nihd)], \\ \exp(ih\Delta d) = \cos h\Delta d + i \sin h\Delta d.$$

Функция I^* будет такой же суммой, но с множителями $\exp(-ih\Delta d)$. Интерференционная функция от такой решетки будет вещественной. Ее полуширина для стопки из 41 плоскости N и при максимальном относительном смещении плоскости $\Delta d/d = 0.02$ будет иметь величину 0.99 полуширины интерференционной функции неискаженной решетки. Такие искажения называются искажениями смещения. При их описании отсчет смещения ведется от местоположения плоскостей в регулярной структуре, из которых смещения произошли.

Другой тип искажений, когда положение плоскостей не связывается с их местом в неискаженной решетке, называется искажением замещения. Если задать измененные межплоскостных расстояний при удалении от центра кристаллита функцией nd/γ_n , где $\gamma < 1$, n — номер плоскости, то амплитуда дифрагированных волн в этом случае будет суммой ряда

$$1 + \exp\left(\frac{hd}{\gamma}\right) + \exp\left(-\frac{hd}{\gamma}\right) + \dots + \exp\left(\frac{ni \cdot hd}{\gamma_n}\right) + \exp\left(-\frac{ni \cdot hd}{\gamma_n}\right).$$

Полуширина интерференционной функции для искажения замещения при $N = 41$ и максимальном относительном смещении плоскости из положения равновесия $\Delta d/d = 0.02$ будет иметь значение 1.02 полуширины интерференционной функции идеальной решетки. Следовательно, можно сделать вывод о том, что реальное искажение одной отдельно взятой решетки (кристаллита) не может вызывать значительное изменение угловой ширины рефлекса (при значениях относительного смещения $\Delta d/d = 0.03$ рефлекс расплывается в гало). Поэтому если температура влияет на статические искажения решетки кристаллита, то объяснить значительное изменение угловой ширины рефлекса с температурой (до 40% у рефлекса (220) от ориентированного полиэтилена) изменением величины искажений в отдельном кристаллите не представляется возможным. Следовательно, наблюдаемое уменьшение полуширины с ростом температуры следует объяснять наличием в поликристалле ансамбля решеток с разной степенью искаженности, у которых разные коэффициенты термического расширения.

Представим систему из разноискаженных кристаллитов простой моделью из двух кристаллитов. Рассматривается два случая. Пусть в одном случае имеются две идеальные одинаковые решетки, а в другом — одна идеальная, а вторая — искаженная дефектами внедрения. Схемы рефлексов от таких решеток показаны на рис. 1. Интерференция от двух независимых решеток есть просто арифметическая сумма интерференций от каждой решетки. Предполагается, что

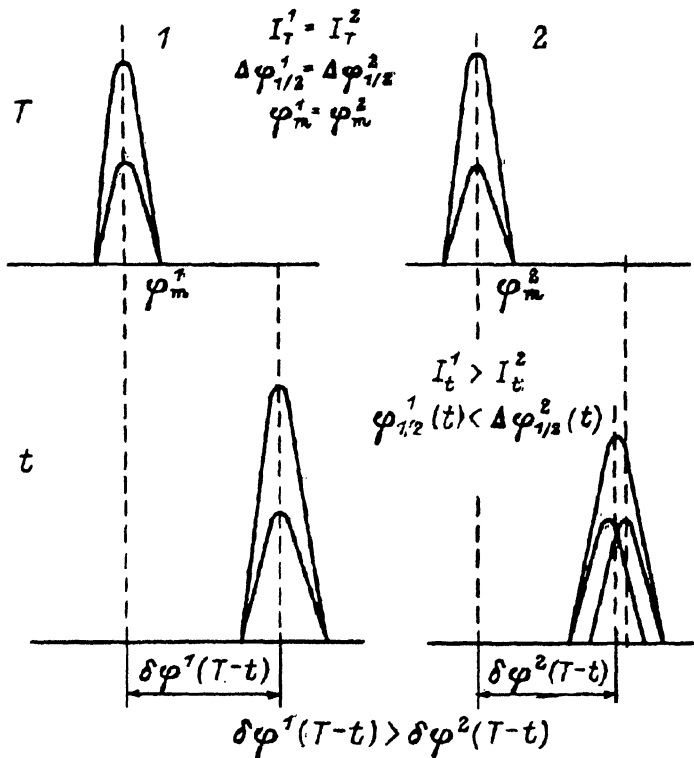


Рис. 1. Модель изменения углового положения, пиковой интенсивности и полуширины рефлекса при изменении температуры в случае дифракции на двух независимых решетках.

1 — две идеальные решетки, 2 — идеальная и дефектная решетки. T — высокая температура, t — низкая температура. I — пиковое значение интенсивности, φ — угловое положение центра тяжести пика, $\Delta\varphi_{1/2}$ — значение полуширины, $\delta\varphi$ — угловое смещение центра тяжести рефлекса при изменении температуры от высокой к низкой.

при высокой температуре обе суммы интерференций от двух идеальных и идеальной и дефектной решетки тождественны, их центры тяжести совпадают, они имеют одинаковую интенсивность и полуширину. Для полиэтилена такое предположение оправдано из-за значительной атомно-молекулярной динамики конденсированных цепей углерода в кристаллах, на что указывает большое значение коэффициента термического расширения при комнатной температуре. При низкой температуре t рефлекс от суммы решеток с искажениями внедрения смещается на угловое расстояние $\delta\varphi$, меньшее, чем рефлекс от суммы двух идеальных решеток, поскольку среднее межплоскостное расстояние при низкой температуре в искаженной решетке больше, чем в идеальной. В результате полуширина контура рефлекса от суммы искаженной и неискаженной решеток больше, а пиковая интенсивность меньше, чем у суммы двух идеальных решеток.

Зависимости пиковых значений интенсивности рефлексов первого и второго порядков отражения от температуры при условии нескоррелированности колебаний должны описываться соотношениями Дебая-Уоллера $I'(T) = I_0' \exp(-MT)$, $I''(T) = I_0'' \exp(-4MT)$, но такое

соотношение показателей экспонент у первого и второго порядка для графита и измеряемых рефлексов полиэтилена не выполняется [8].

Выбор модели описания поликристалла как суммы разноискаженных решеток приводит к тому, что температурное поведение рефлексов следует анализировать не по пиковой I_t , а по интегральной интенсивности I_{int} . Между интегральной и пиковой интенсивностями существует следующее соотношение: $I_{\text{int}} = I_t \Delta\varphi_{1/2}$, где $\Delta\varphi_{1/2}$ — угловая полуширина рефлекса. Действительно, при таком анализе соответствие измеряемых значений интенсивности зависимости Дебая–Уоллера улучшается, хотя и не приводит к полному совпадению. Подобное отклонение интенсивностей от зависимостей Дебая–Уоллера имеется и для меридиональных рефлексов в полиэтилене, у которых полуширина с температурой не меняется, поэтому выяснение причин несоответствия (которое, возможно, само связано с дефектами решеток) является самостоятельным предметом исследования. Приближение к зависимости Дебая–Уоллера при анализе интегральных интенсивностей рефлексов свидетельствует в пользу выбранной модели.

Таким образом, на простейшей модели из двух кристаллитов с разноискаженными решетками показаны следующие температурные эффекты: изменение угловой ширины рефлекса, уменьшение температурного сдвига рефлекса, отклонение от фактора Дебая–Уоллера.

Далее рассмотрены различные случаи распределения искажений в объеме отдельного кристаллита и распределение кристаллитов по искажениям в поликристалле.

Максимальное отклонение межплоскостных расстояний в искаженной решетке от идеального значения Δd ограничивается величиной, связанной с термическим расширением идеальной решетки $\Delta d/d = \alpha \Delta T$, где α — коэффициент линейного расширения, ΔT — диапазон изменения температуры.

Выбраны четыре типа искажений решетки, которая состоит из двух симметричных половин (рис. 2).

Первый тип — это четыре дефекта, каждый искажает положение двух плоскостей. Второй — три дефекта, каждый искажает положение трех плоскостей, третий — два дефекта, каждый искажает положение шести плоскостей, и, наконец, четвертый тип имеет место, когда один дефект искажает положение всех плоскостей полурешетки.

Для каждого типа искажений выбрано пять видов распределения долей искаженных и неискаженных решеток в ансамбле. Первый — «гауссов», когда основная масса кристаллитов (90%) не искажена, а на максимальное значение смещения плоскости Δd искажено минимальное число кристаллитов (10%). Далее в распределении постепенно увеличивается доля искаженных кристаллитов за счет неискаженных. При втором виде распределения уменьшается доля неискаженных кристаллитов до 75% и увеличивается доля искаженных до 25%. При третьем виде распределения 33% кристаллитов не искажено, в 33% кристаллитов плоскости максимально смещены, а в остальных 33% смещение межплоскостных расстояний составляет половину от максимально допустимого. При четвертом виде распределения 50% кристаллитов не искажено, 33% искажено на максимальную величину смещения, 17% искажено на величину смещения, составляющего половину от максимального. И наконец, пятый вид распределения, когда 50% решеток

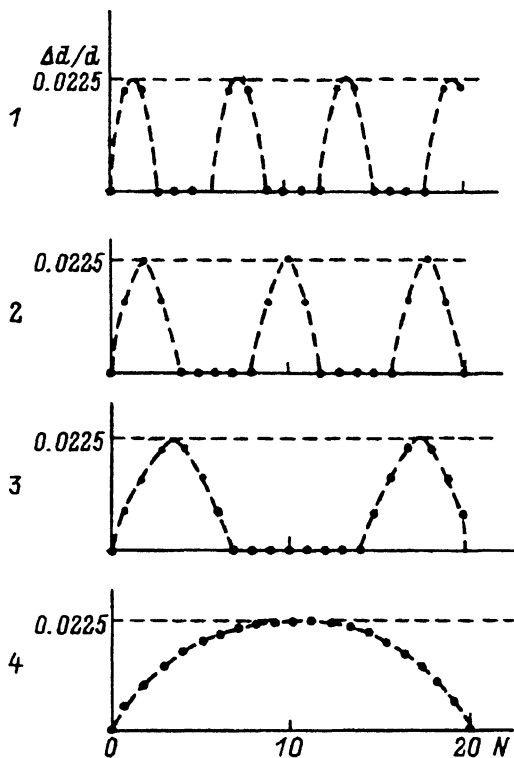


Рис. 2. Типы поля дефектов, искажающих идеальную решетку. N — номер плоскости в половине решетки, $\Delta d/d$ — величина смещения плоскости.

ансамбля не искажено, а 50% искажено на максимально допустимую величину смещения межплоскостного расстояния.

В таблице приведены данные расчета полуширины интерференционной функции ансамбля разноискаженных решеток относительно ансамбля идеальных решеток: $\Delta\varphi_{1/2}(d + id)/\Delta\varphi_{1/2}(id)$ для решеток, состоящих из 41 плоскости, и при величине максимального смещения $\Delta d/d = 0.0225$ в зависимости от типа дефекта и вида распределения ансамбля. Значение $N = 41$ соответствует количеству брэгговских плоскостей в поперечном направлении мелкокристаллического полиэтилена, а величина $\Delta d/d = 0.0225$ — произведению значения его ко-

Относительное изменение полуширины ансамбля по-разному искаженных интерференционных функций (%)

Тип	Вид				
	1	2	3	4	5
1				16	23
2	6	20	24	32	50
3	5	12	34	45	—
4	20	42	—	—	—

эффициента термического расширения α на разность температуры ΔT . Это модель изменения дифракции с температурой мелкокристаллического полиэтилена.

Из приведенных данных следует, что только при бимодальном и близком к нему распределении долей искаженных и неискаженных решеток (исключая маловероятный тип 4, когда смещены все плоскости в искаженной решетке) значение относительного изменения полуширины $\Delta\varphi_{1/2}(d + id)/\Delta\varphi_{1/2}(id)$ совпадает с наблюдаемым уменьшением угловой ширины рефлекса (220) мелкокристаллического полиэтилена с ростом температуры, которое достигает 40%.

Поперечные размеры решетки крупнокристаллического полиэтилена в 2 раза больше, чем у решетки мелкокристаллического. Экспериментально измеряемое относительное уменьшение полуширины с ростом температуры рефлекса (220) крупнокристаллического полиэтилена составляет 50%, однако ее дефектность (выражающаяся в боковых углеродных цепях на цепи скелета молекулы), установленная независимо, меньше [2]. Действительно, расчет показывает, что при меньшей дефектности, когда смещается каждая пятая, а не каждая вторая, третья плоскость, при бимодальном распределении долей искаженных и неискаженных решеток относительное изменение полуширины интерференционной функции ансамбля равно 50%.

Наблюдаемое уменьшение угловой ширины рефлекса (220) графита с ростом температуры составляет 13%. Для решетки из 55 плоскостей и при величине относительного смещения, соответствующей коэффициенту термического расширения графита, величина относительного изменения полуширины в 13% наблюдается только при бимодальном распределении веса искаженных и неискаженных решеток. При всех остальных распределениях ансамбля относительное изменение полуширины меньше.

Поскольку распределение долей искаженных и неискаженных решеток в поликристаллах полиэтилена и графита бимодально, то поэтому наблюдаемое среднее межплоскостное расстояние \bar{d} больше, чем табличное d у идеальной неискаженной решетки ($\Delta\bar{d}/d = \alpha\Delta T/2$).

Для графита наблюдаемое значение $\bar{d} = 3.37 \text{ \AA}$. Из бимодального распределения $d = \bar{d}/(1 + \alpha\Delta T/2)$. Из последнего выражения получаем, что $d = 3.35 \text{ \AA}$. Это значение межплоскостного расстояния идеальной решетки равно табличному значению.

Такие же рассуждения справедливы для полиэтилена. Наблюдаемое по центру тяжести рефлекса (220) значение межплоскостного расстояния мелкокристаллического полиэтилена больше, чем у крупнокристаллического, которое в свою очередь больше табличного. Однако полученный результат (бимодальное распределение весовой доли искаженных и неискаженных решеток) искусственен и представляет результат сильно упрощенного моделирования. Следует учитывать, что в реальном ансамбле присутствуют все четыре типа дефектности и имеется распределение кристаллитов по типам поля дефектов. Для того чтобы изменение полуширины достигало требуемых величин, можно полагать, что 30% кристаллитов не искажено, 5% искажено по четвертому типу смещения, по второму типу искажено 35% кристаллитов, а по третьему типу — 30%. Такое распределение полей дефектов описывает уменьшение полуширины с ростом температуры для полиэтилена и графита.

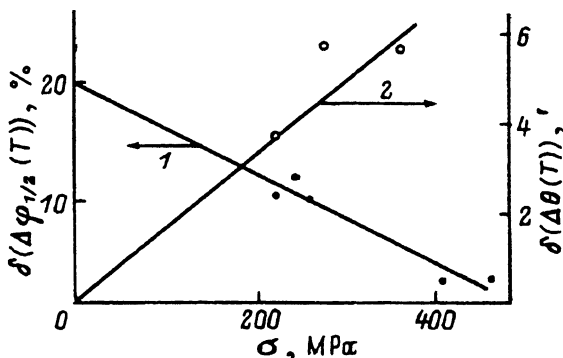


Рис. 3. Зависимость относительного изменения полуширины рефлекса (110) при температурах 90 и 300 К $\delta(\Delta\varphi_{1/2}(T))$ от нагрузки, $\delta(\Delta\varphi_{1/2}(T)) = \Delta\varphi_{1/2}(t, \sigma) / \Delta\varphi_{1/2}(T, \sigma)$ (1), и разность углового смещения $\delta(\Delta\Theta(T))$ рефлекса (110) при изменении температуры от 90 до 300 К ориентированного технического полиэтилена в зависимости от нагрузки (в угловых минутах), $\delta(\Delta\Theta(T)) = \{[\Theta(t) - \Theta(T)] - [\Theta(t, \sigma) - \Theta(T, \sigma)]\}$ (2).

Были произведены рентгенодифракционные измерения технического полиэтилена. Уменьшение полуширины рефлекса (110) технического неориентированного полиэтилена с ростом температуры от 90 до 293 К составляет 2,5%, а ориентированного — 6%, поэтому появление доли от общего числа сильно искаженных кристаллитов в высокоориентированном полиэтилене следует объяснять процессом ориентационной вытяжки. В неориентированном полиэтилене таких сильно искаженных кристаллитов нет.

Чтобы убедиться в том, что температурное изменение полуширины экваториальных рефлексов связано с разной искаженностью кристаллитов ансамбля, составляющих поликристалл, необходимо попытаться изменить их распределение по дефектности. Проще всего это сделать осевым нагружением.

Можно ожидать, что увеличение нагрузки высокоориентированного полиэтилена вызовет увеличение доли искаженных кристаллитов за счет неискаженных. Это будет приводить к тому, что полуширина рефлекса под нагрузкой при изменении температуры от комнатной до азотной будет увеличиваться на меньшую величину, чем у рефлекса без нагрузки, а сам рефлекс при изменении температуры — смещаться на меньший угол. Это предположение подтверждается результатами ранее проведенных измерений Исмонкулова [9]. Нагрузка монотонно снижает величину относительного уменьшения полуширины рефлекса (110) с ростом температуры (прямая 1 на рис. 3). При нагрузках $\sigma = 500$ МПа изменения полуширины с температурой практически нет. У нагруженных образцов также монотонно, с ростом нагрузки, уменьшается угловое смещение рефлекса (110) при изменении температуры от азотной до комнатной (прямая 2 на рис. 3).

Проведен расчет модели по-разному искаженных решеток для полиэтилена. Доля слабо искаженных решеток увеличена на 20% за счет доли неискаженных (с 30 до 10%). Центр тяжести суммы интерференционных функций такой системы по сравнению с первоначальной (в ансамбле 30% кристаллитов не искажено) сместился в сторону мень-

ших углов на 8 угловых минут, а ее полуширина только на 6% больше полуширины функции ансамбля идеальных решеток. Это соответствует экспериментально наблюдаемому относительному уменьшению полуширины рефлекса (220) с температурой $\delta(\Delta\varphi_{1/2})$ и температурному сдвигу рефлекса $\delta\varphi$ под нагрузкой. У нагруженного образца относительное уменьшение полуширины с температурой составляет 5%. Уменьшение углового смещения рефлекса при изменении температуры составляет 6 угловых минут по сравнению с температурным смещением рефлекса без нагрузки. Совпадает также асимметричность наблюдаемого рефлекса и рассчитанных интерференционных сумм. Вопрос о влиянии нагрузки на огибающую рефлекса требует отдельного рассмотрения. В этой связи можно только отметить, что процесс нагружения описывается такой же моделью-суммой по-разному искаженных решеток кристаллитов, но величина искажений при нагрузке больше, поскольку она не ограничена коэффициентом теплового расширения.

Если попытаться описать применяемой моделью искаженных плоскостей решетку алюминия, состоящую из 300 плоскостей, то наблюдаемое изменение полуширины в 10% будет выполняться при гауссовом распределении долей искаженных и неискаженных решеток, когда только небольшое число блоков ансамбля искажено, а подавляющая масса не искажена либо искажена слабо. Из модели ансамбля по-разному искаженных решеток следует, что в этом случае пиковая интенсивность I_t соответствует зависимости Дебая-Уоллера, а угловое положение наблюдаемого рефлекса φ_T — угловому положению идеальной решетки. Действительно, для алюминия изменение пиковой интенсивности с температурой соответствует фактору Дебая-Уоллера, а величина $\bar{d} = 2.339$, что немного отличается от табличного значения $d = 2.336$. Это подтверждает результаты, полученные для графита и полиэтилена, а также правильность всей экспериментальной методики. При гауссовом размытии узла обратной решетки дефектами для полуширины справедлива формула квадратичного гауссова смещения [5].

Автор благодарен А.И. Слущкеру за консультации.

Список литературы

- [1] Г. Дадобаев, А.И. Слущкер. Высокомолекуляр. соединения А24, 1, 30 (1982).
- [2] Ю.А. Зубов, С.Н. Чвадун. Высокомолекуляр. соединения А26, 8, 1766 (1981).
- [3] А.А. Сидорович, А.И. Слущкер, С.Н. Журков. ФТТ 32, 5, 1363 (1990).
- [4] Б. Вундерлих, Г. Баур. Теплоемкость линейных полимеров. М. (1972). 236 с.
- [5] А. Гинье. Рентгенография кристаллов. М. (1961). 600 с.
- [6] Ч. Киттель. Введение в физику твердого тела. М. (1978). 792 с.
- [7] М.А. Кривоглаз. Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами. М. (1967). 336 с.
- [8] Г. Дадобаев, А.И. Слущкер. ФТТ 23, 7, 1936 (1981).
- [9] К. Исмонкулов, А.И. Слущкер, А.В. Савицкий, А.А. Сидорович. Высокомолекуляр. соединения А28, 5, 978 (1986).