ром D осн. доля рассеянного излучения сосредоточена в области векторов рассеяния:

$$|s| = 4\pi\lambda^{-1}\sin\theta \leqslant 2\pi/D, \qquad (1)$$

где $s = \mathbf{k} - \mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_0$ и $\mathbf{k}$ — соответственно волновые векторы падающей и рассеянной волн, $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}_0| = 2\pi/\lambda$, 2θ — угол рассеяния, λ — длина волны падающего излучения. Если $D \gg \lambda$, то $\theta \ll 1$, т. е. рассеянное излучение сосредоточено вблизи первичного пучка. Интенсивность $I(s)$ излучения, рассеянного разупорядоченным ансамблем N идентичных атомов (мотивов атомов) с рассеивающей способностью (формфактором, см. *Атомный фактор*) $f(s)$, равна

$$\langle I(s)\rangle = \langle N\rangle \langle f^2(s)\rangle + \langle N\rangle \frac{\langle f(s)\rangle^2}{v_1} \int_0^\infty [1 - P(r)] \frac{\sin sr}{sr} 4\pi r^2 dr, \qquad (2)$$

где знак $\langle\ldots\rangle$ означает усреднение по ансамблю N частиц, $v_1 = V_0/\langle N\rangle$, V_0 — облучаемый объём образца, $P(r)$ — т. н. парная корреляц. ф-ция, r — расстояние между частицами. Первый член в (2) отвечает независимому рассеянию на мотивах атомов, второй — интерференции при рассеянии на этих мотивах.

Рассеивающие мотивы атомов иногда можно рассматривать как нек-рые частицы, включённые в однородную матрицу осн. вещества. Тогда ур-ние (2) соответствует т. н. разностной кривой рассеяния (разности интенсивностей излучений рассеянного всей системой и рассеянного матрицей осн. вещества). Если описывать рассеивающие мотивы атомов ф-цией распределения рассеивающей плотности $\rho(r)$, а плотность частиц матрицы обозначить ρ_s, то разность

$$\Delta\rho = \langle\rho(r)\rangle - \rho_s, \qquad (3)$$

являющаяся интегральной характеристикой объекта, показывает, насколько эти частицы «выделяются» на фоне окружающей среды; эта разность наз. к о н т р а с т о м частицы относительно матрицы.

Если ρ_s мало, то 2-м членом в (2) можно пренебречь (или исключить его с помощью последоват. экспериментов с веществами, характеризующимися различными ρ_s). В этом случае

$$\langle I(s)\rangle = \langle N\rangle \langle f^2(s)\rangle, \qquad (4)$$

т. н. интенсивность М. р. пропорциональна усреднённой по всем направлениям интенсивности рассеяния одной частицей. Если частицы неидентичны, то

$$\langle I(s)\rangle = \langle N\rangle \int_0^\infty \langle f^2(s, R)\rangle\, D_N(R) dR, \qquad (5)$$

где R — нек-рый характерный размер частицы, $f(s,R)$ — формфактор частицы с этим размером, $D_N(R)$ — распределение частиц по R.

В тех случаях, когда систему нельзя представить в виде рассеивающих мотивов атомов, вкраплённых в матрицу осн. вещества, М. р. может быть вызвано разл. причинами. Так, в однофазных объектах (напр., в жидкости) М. р. может быть обусловлено статистич. флуктуациями плотности, причём

$$I(0) = f^2(0)\langle N\rangle \frac{kT\beta}{v_1}, \qquad (6)$$

где β — коэф. изотермич. *сжимаемости* жидкости. Если система многофазная, рассеяние возникает как за счёт флуктуаций плотности, так и вследствие различия плотностей рассеивающих фаз. Для бинарных систем изотропное рассеяние на флуктуациях состоит из двух членов $S_{NN}(s) + S_{CC}(s)$, первый из к-рых обусловлен флуктуациями плотности, второй — флуктуациями концентраций. При резких границах фаз в качестве контраста будет выступать среднеквадратичная флуктуация

$$\langle\Delta\rho\rangle^2 = (\rho_1 - \rho_2)^2 \varphi_1\varphi_2, \qquad (7)$$

где ρ_1 и ρ_2 — плотности рассеивающих фаз, φ_1 и φ_2 — их объёмные доли, $\varphi_1 + \varphi_2 = 1$. В этом случае М. р. даёт информацию об интегральных характеристиках объекта (объёмные доли фаз, поверхность раздела и др.).

Интерпретация данных малоуглового рассеяния. Д л я и з о т р о п н ы х м о н о д и с п е р с н ы х с и с т е м усреднённая по всем ориентациям интенсивность рассеянного частицей излучения запишется в виде

$$I(s) = \int\int_V \rho(r_1)\rho(r_2) \frac{\sin sr_{12}}{sr_{12}}\, dr_1 dr_2 \qquad (8)$$

(ф-ла Дебая). Здесь интегрирование ведётся в пределах объёма частицы V, а $r_{12} = |r_1 - r_2|$. Интенсивность $I(s)$ связана с усреднённой самосвёрткой плотности (корреляц. ф-цией) частиц соотношением

$$\gamma(r) = \langle\rho(r) * \rho(-r)\rangle = \frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty I(s)\frac{\sin sr}{sr} s^2 ds. \qquad (9)$$

Ф-ции $I(s)$ и $\gamma(r)$ для простейшего случая однородного шара приведены на рис. 1, 2. Из кривой рас-

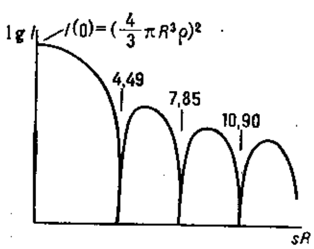

Рис. 1. Кривая интенсивности рассеяния однородным шаром радиуса R и плотности ρ: $I(s) = (^4/_3\pi R^3\rho)^2[3(\sin sR - sR\cos sR)/(sR)^3]^2$.

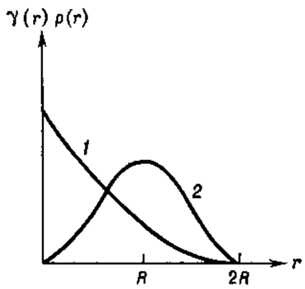

Рис. 2. *1* — Корреляционная функция $\gamma(r)$; *2* — функция $P(r)$ распределения частиц по расстояниям r; $P(r) = r^2\gamma(r)$.

сеяния можно определить ряд интегральных параметров частицы (т. н. инвариантов). При $s \to 0$ имеем

$$I(s) \simeq I(0) \exp(-s^2R_g^2/3), \qquad (10)$$

R_g — радиус инерции частицы (ф-ла Гинье); из условия $\gamma(r) \equiv 0$ при $r > l_{\text{макс}}$ определяется её макс. размер $l_{\text{макс}}$. Т. н. инвариант Порода

$$Q = \int_0^\infty s^2 I(s) ds = 2\pi^2 \int_V \rho^2(r) dr \qquad (11)$$

пропорционален квадрату контраста частицы относительно матрицы. При условии однородности частиц можно, кроме этого, определить её объём:

$$v = 2\pi^2 I(0)/Q, \qquad (12)$$

а также асимптотич. убывание $I(s)$ при $s \to \infty$:

$$I(s) \simeq c_4/s^4, \quad c_4 = \frac{Q}{\pi}\frac{S}{v}, \qquad (13)$$

где S — площадь поверхности частицы. Для сильно вытянутых и сильно сплющенных частиц можно определять соответственно параметры поперечного сечения и толщины.

При заданных инвариантах кривая рассеяния существенно зависит от формы частицы (рис. 3). Это служит основой для метода моделей, где с учётом вычисленных инвариантов и информации, полученной др. методами, рассчитываются интенсивности рассеяния неск. (как правило, однородными) моделями и сравниваются с экспериментом.