ПОВЕРХНОСТЬ. РЕНТГЕНОВСКИЕ, СИНХРОТРОННЫЕ И НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ, 2017, № 9, с. 5–16

УДК 538.9

МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЯНИЕ НЕЙТРОНОВ НА ФРАКТАЛЬНЫХ ОБЪЕКТАХ

© 2017 г. Е. Г. Яшина[1, 2,*], С. В. Григорьев[1, 2]
[1]Санкт-Петербургский государственный университет, 198504 Санкт-Петербург, Россия
[2]Петербургский институт ядерной физики НИЦ КИ, Гатчина, 188300 Санкт-Петербург, Россия
*E-mail: yashina_91@inbox.ru

Поступила в редакцию 19.10 2016 г.

Представлен расчет корреляционной функции изотропной фрактальной частицы конечного размера ξ и размерности D. Показано, что корреляционная функция $\gamma(r)$ для объемных и поверхностных фракталов описывается общим выражением и пропорциональна функции Макдональда $(D-3)/2$-го порядка, помноженной на степенную функцию $r^{(D-3)/2}$. Асимптотика корреляционной функции в пределе $r/\xi < 1$ как для объемных, так и для поверхностных фракталов совпадает с соответствующими корреляционными функциями неограниченных фракталов. В методе спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов измеряется одномерная корреляционная функция $G(z)$, которая для фрактальной изотропной частицы описывается аналогичным выражением, со сдвигом индекса функции Макдональда и показателя степенной функции на 1/2. Пограничный случай перехода от объемного к поверхностному фракталу, соответствующий кубической зависимости сечения рассеяния нейтронов Q^{-3}, приводит к точному аналитическому выражению для одномерной корреляционной функции $G(z) = \exp(-z/\xi)$, а асимптотика корреляционной функции в области фрактального поведения при $r/\xi < 1$ пропорциональна $\ln(\xi/r)$. Это соответствует особому типу самоподобия с аддитивным законом масштабирования, а не мультипликативным, как в случае объемного фрактала.

Ключевые слова: физика конденсированного состояния, малоугловое рассеяние нейтронов.

DOI: 10.7868/S0207352817090013

ВВЕДЕНИЕ

С момента своего создания теория фракталов применяется для описания физических объектов и процессов. Объект называется фрактальным, если он обладает свойством самоподобия, т.е. повторяет свое геометрическое строение на разных масштабах. В качестве количественной меры геометрической сложности используется фрактальная размерность D_F (размерность Хаусдорфа–Безиковича), которая показывает, насколько плотно и равномерно элементы объекта заполняют пространство. Для фрактальных объектов чаще всего D_F имеет дробное значение. Чтобы определить фрактальную размерность объекта, вводится специальная мера M_D (мера Хаусдорфа), которая по своему смыслу может быть длиной, площадью или объемом, в зависимости от того, какова размерность пространства, в котором рассматривается объект. Мера M_D определяется следующим выражением:

$$M_D = N(\delta)\,\delta^D, \tag{1}$$

где δ – пространственная переменная (расстояние, масштаб), а $N(\delta)$ – количество уменьшенных в $1/\delta$ раз копий, необходимых для заполнения исходного объекта. Исследуется поведение меры M_D при все большем уменьшении масштаба, т.е. при $\delta \to 0$. Если предел $\lim_{\delta\to 0} M_D$ конечен при некотором значении $D = D_F$, то утверждается, что объект имеет фрактальную размерность D_F, и, если она дробная, то объект называется фракталом. Альтернативное определение фрактала звучит следующим образом: фрактал – это множество, у которого размерность Хаусдорфа–Безиковича D_F больше топологической размерности D_T (для точки $D_T = 0$, для отрезка $D_T = 1$, для плоской фигуры $D_T = 2$ и т.д.) [1].

Концепция фрактальности оказалась необыкновенно продуктивной для описания объектов микромира. В рамках фрактального анализа описываются структуры полимеров [2–6], биологических клеток [7–12], пористых структур [13, 14], нанокластеров [15–19] и т.д. Наиболее развитым и востребованным методом определения фрактальности таких объектов является малоугловое рассеяние нейтронного, рентгеновского или синхротронного излучений. Измеряемая в этом методе величина (сечение рассеяния в зависимости от переданного импульса) хотя и опосредовано, но связана с флуктуациями рассеивающей плотности $\rho(\mathbf{r})$, и равна фурье-образу корреляционной функции объекта $\gamma(r)$, которая определяется выражением

$$\gamma(r) = \left\langle \int_{R^3} \rho(\mathbf{r}') \cdot \rho(\mathbf{r}' + \mathbf{r})\, d\mathbf{r}' \right\rangle, \qquad (2)$$

где угловые скобки обозначают усреднение по угловым компонентам, а $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – пространственная координата. Таким образом, для того, чтобы описать рассеяние на фрактальном объекте нужно знать его корреляционную функцию.

Если известна функция рассеивающей плотности $\rho(\mathbf{r})$, то сечение рассеяния определено однозначно. Однако функция плотности известна только для ряда идеальных геометрических фигур (шара, эллипсоида, цилиндра и т.п.), для которых прямая задача решена точно. В большинстве случаев форма (структура) рассеивающего объекта неидеальна, и приходится иметь дело с обратной задачей, т.е. по сечению рассеяния пытаться восстановить функцию плотности. Как хорошо известно, решение обратной задачи не приводит к однозначному ответу, поскольку сечение рассеяния зависит от модуля плотности рассеяния $|\rho(\mathbf{r})|$. Заметим, что обратное преобразование Фурье даст в результате корреляционную функцию объекта. Однако точно восстановить по ней функцию плотности не представляется возможным из-за так называемой “фазовой” проблемы дифракции.

В случае с фрактальными объектами предположение о рассеивающей плотности берется прямо из определения фрактала, т.е. из свойства самоподобия. Это свойство легко конвертируется (как степенной закон) от функции плотности в парную корреляционную функцию, а затем в сечение рассеяния. Решение обратной задачи точно и, по-видимому, однозначно воспроизводит фрактальные свойства системы – степенной закон распределения плотности. Однако конкретный вид фрактала (его точное геометрическое строение) остается неизвестным, и его интерпретируют в рамках фрактальных моделей, используя дополнительные данные, например сканирующей электронной микроскопии.

В настоящей работе рассматривается рассеяние нейтронов на фрактальной частице в стандартном методе малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) [20, 21] и в методе спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов (СЭМУРН) [22, 23]. Для реальных фрактальных систем важен вопрос о характерном верхнем пределе фрактальной частицы. Во-первых, для новой методики исследования надатомного строения вещества СЭМУРН совершенно необходима возможность измерения полной корреляционной функции частицы, т.е. без знания верхней границы фрактальной частицы невозможно определить фрактальную размерность системы. Во-вторых, вопрос о парной корреляционной функции частицы с фрактальной поверхностью никогда не рассматривался. Он фактически был заменен рассмотрением объемного фрактала на поверхности без обсуждения вопроса о том, как происходит переход от фрактальной поверхности к однородному ядру частицы. В-третьих, вопрос о промежуточной структуре между объемным и поверхностным фракталом до сих пор не рассматривался в литературе. Существует противоречивое мнение о нефизичности такой промежуточной структуры, и что она не реализуется в природе. Мы показали, что переход осуществляется через особый тип фракталов – логарифмический фрактал. В последнем случае искусственное введение ограничения на размер объемного фрактала в выражении для корреляционной функции объекта приводит к неверному результату, в случае, когда фрактальная размерность приближается к $D = 3$. Такое ограничение маскирует появление логарифмического фрактала, в результате чего он оказался нерассмотренным при исследованиях фракталов методом малоуглового рассеяния.

Для выработки единого подхода к задаче о малоугловом рассеянии нейтронов на фрактальных объектах, мы ищем решение обратной задачи, основываясь на следующих предположениях. Во-первых, фрактальная частица имеет характерный размер ξ, а во-вторых, рассеяние нейтронов на объемной или поверхностной фрактальной частице описывается единым выражением для сечения рассеяния от переданного импульса. Такой подход оказался на удивление продуктивным, позволил получить корреляционную функцию фрактальной частицы и открыл новый класс объектов с фрактальной зависимостью для $D = 3$, т.е. логарифмический фрактал.

КОНЦЕПЦИЯ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НА ФРАКТАЛЬНЫХ ОБЪЕКТАХ И ЕЕ ПРОТИВОРЕЧИЯ

Нефрактальный объект. Классический случай рассеяния на нефрактальных трехмерных неоднородностях рассматривался в работах [24, 25], где рассеивающий объект представляет собой двухфазную систему с распределенными случайным образом полостями различной формы в однородном материале. Плотность в этом случае описывается ступенчатой функцией следующего вида [25]:

$$\rho(r) = \begin{cases} \rho_0 = \text{Const}, & \text{если } r \text{ находится в веществе,} \\ 0, & \text{если } r \text{ находится в поре.} \end{cases}$$

Тогда корреляционная функция будет равна следующему выражению [25]:

$$\gamma(r) = \exp(-r/\xi), \tag{3}$$

где ξ – корреляционная длина поры. Тогда соответствующее корреляционной функции сечение рассеяния имеет следующий вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) = \frac{A}{(1+(Q\xi)^2)^2}, \tag{4}$$

где A – константа, а Q – модуль вектора переданного импульса. Описанный случай аналогичен случаю рассеяния на нефрактальных объемных частицах со средним размером ξ.

Другим классическим случаем рассеяния на нефрактальном объекте является магнитное рассеяние на критических флуктуациях [26–28]. Выражение корреляционной функции было получено из соображения равновесности значения параметра порядка, иными словами, из условия минимизации свободной энергии [26], и выглядит следующим образом:

$$\gamma(r) = \frac{1}{r}\exp(-\mathrm{r}/\xi), \tag{5}$$

где величину ξ принято называть радиусом корреляций. Соответствующее корреляционной функции сечение рассеяния имеет следующий вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) = \frac{A}{(1+(Q\xi)^2)}. \tag{6}$$

Этот случай можно соотнести со случаем рассеяния на нефрактальных двумерных частицах со средним размером ξ.

Объемные фракталы. В работах [20, 21] было предложено следующее описание рассеяния на объемных фракталах. Корреляционная функция определялась, как вероятность найти рассеиватель на расстоянии r от другого рассеивателя, расположенного в начале координат, и выражалась через число рассеивателей $N(r)$ в сфере радиусом r следующим соотношением:

$$N(r) = \frac{N}{V_0}\int_0^r \gamma(r')4\pi r'^2\,dr', \tag{7}$$

где N – общее число рассеивателей, а V_0 – объем образца. С другой стороны, фрактальный объект характеризуется пространственным особенным распределением отдельных рассеивателей. Их число задается согласно следующему выражению:

$$N(r) = \left(\frac{r}{r_0}\right)^{D_m}, \tag{8}$$

где r_0 – характерный размер каждого отдельного рассеивателя, а D_m – фрактальная размерность, которая лежит в диапазоне $2 < D_m < 3$.

Дифференцируя уравнения (7), (8), и приравнивая правые части, можно получить выражение для корреляционной функции:

$$\gamma(r) = \frac{D_m V_0}{4\pi N}\left(\frac{r}{r_0}\right)^{D_m-3}. \tag{9}$$

Выражение для корреляционной функции (9) не учитывает конечного размера фрактальной частицы, поэтому в работе [20] была искусственно введена экспоненциальная "срезка" с параметром ξ:

$$\gamma(r) = \frac{D_m V_0}{4\pi N}\left(\frac{r}{r_0}\right)^{D_m-3}\exp\left(-\frac{r}{\xi}\right). \tag{10}$$

Такая "срезка" естественным образом получается в теории критических явлений (5) [26–28], но является произволом в выражении для корреляционной функции фрактального объекта.

В ряде работ [29–33] эта корреляционная функция представлена следующим образом:

$$\gamma(r) = r^{D-3}\exp\left(-\frac{r}{\xi}\right). \tag{11}$$

В своих работах [20, 21] авторы предположили, что сечение рассеяния зависит главным образом от структурного фактора, а форм-фактор индивидуального рассеивателя можно считать константой, слабо зависящей от переданного импульса. Тогда преобразование Фурье от корреляционной функции (10) дает выражение для эффективного структурного фактора [29], которое выглядит следующим образом:

$$S(Q) = 1 + \frac{D\Gamma(D_m-1)\sin\left[(D_m-1)\arctan(Q\xi)\right]}{(Qr_0)^{D_m}\left(1+\frac{1}{(Q\xi)^2}\right)^{\frac{D_m-1}{2}}}, \tag{12}$$

где $\Gamma(x)$ – гамма-функция.

Разложение выражения (12) по малому параметру ($1/Q\xi \ll 1$) в области переданных импульсов ($1/\xi < Q < 1/r_0$), где частица проявляет свои фрактальные свойства, дает простую степенную зависимость:

$$I(Q) \cong S(Q) \sim Q^{-D_m}. \tag{13}$$

Именно выражением (13) пользуются для определения фрактальной размерности различных частиц: наклон кривой малоуглового рассеяния в двойном логарифмическом масштабе равен фрактальной размерности D_m. Основываясь на выражении (13), можно утверждать, что для объемных фракталов наклон кривой малоуглового рассеяния меняется от 2 до 3.

В работах по рассеянию нейтронов и ренгеновского излучения на фрактальных объектах остался незамеченным тот факт, что выражение (12) является приблизительным и в некотором диапазоне размерностей вблизи $D_m \sim 3$ просто неверным. Если, исходя из логики (10), (12), (13), рассмотреть случай $D_m = 3$, то, с одной стороны, согласно корреляционной функции объемного фрактала (10), мы получим нефрактальный объемный объект (плотный шар), описываемый выражениями (3), (4), а с другой стороны, согласно (13), получим фрактальный объект, рассеивающий по закону Q^{-3}. Поскольку фрактальная размерность D_m в (10) плавно меняется от 2 до 3, соответствующая степень в малоугловом рассеянии также плавно меняется от 2 до 4. Это значит, что наклон кривой малоуглового рассеяния не равен фрактальной размерности ($3 \neq 4$)! Сразу отметим, что причиной вышеописанных затруднений является произвольно добавленный характер экспоненциальной "срезки" в выражении для корреляционной функции (10).

Этот факт стал объектом научных дискуссий между двумя группами: Peter Pfeifer и др. [34] и Pozen Wong и др. [35], не приведших к правильному единому мнению. Суть разногласий заключалась в том, что первая группа [34] интерпретировала закон рассеяния Q^{-3} как предельный случай в рамках концепции объемных фракталов, используя выражение (13). Авторы работы [35], занимаясь поверхностными фракталами, сопоставляли объект, рассеивающий по закону рассеяния со степенью равной 3, с логарифмической шероховатостью. Ниже мы представляем новый способ получения корреляционной функции, позволяющий избежать этих разногласий.

Поверхностные фракталы. В работах [20, 21], кроме рассеяния на объемных фракталах, рассмотрено рассеяние на поверхностных фракталах, беря за основу корреляционную функцию, полученную в работе [36], посвященной рассеянию на системе с фрактальными порами. Корреляционная функция в этом случае определяется следующим образом [36]:

$$\gamma(r) = [Z(r) - c] / (1 - c), \quad (14)$$

где $Z(r)$ – усредненная по всем точкам образца и его ориентациям, вероятность найти вторую точку в твердом материале (не в поре) на расстоянии r от точки, находящейся в начале координат, при условии, что она расположена тоже в твердом материале; $(1 - c)$ – это часть объема образца, которую занимают поры. Число кубов с ребром r, которое требуется, чтобы сделать слой, покрывающий все точки фрактальной поверхности поры можно выразить как

$$n = N_0\, r^{-Ds}, \quad (15)$$

где D_s – фрактальная размерность (по своему смыслу D_s не отличается от D_m, $2 < D_s < 3$, это объемный фрактал на поверхности); N_0 – константа, отвечающая за постоянную характеристику фрактальных границ. Объем фрактального слоя задавался следующим выражением:

$$V_b = nr^3 = N_0 r^{\,3-D_s}. \quad (16)$$

Для $x \le r$ была введена вероятность, усредненная по всем ориентациям r, такая, что если точка твердого материала находится на расстоянии x от поверхности поры, то появляется еще одна точка твердого материала на расстоянии r от первой. В этом приближенном вычислении $Z(r)$ предполагалось, что для малых r граничная поверхность является плоскостью, и $p(r)$ имеет следующий вид:

$$p(x, r) = (r + x)/2r. \quad (17)$$

Функция $Z(r)$ находится из уравнений (15)–(17) при условии, что r стремится к нулю следующим образом:

$$Z(r) \cong \frac{cV - V_b}{cV} + \frac{V_b}{crV}\int_0^r p(x, r)dx = \\ = 1 - N_0 r^{3-D} / 4cV. \quad (18)$$

Корреляционная функция $\gamma(r)$ находится из (14) и (18) в виде:

$$\gamma(r) = 1 - N_0 r^{3-D_s} / 4c(1 - c)V. \quad (19)$$

Соответствующее этой корреляционной функции сечение рассеяния равно:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) = \frac{B}{Q^{6-D_s}}, \quad (20)$$

где B – константа. В работе [21] предполагалось, что при рассеянии на поверхностных фракталах, сечение рассеяния главным образом зависит от форм-фактора, а структурный фактор можно считать константой, так как рассеяние происходит на поверхности частицы. Явным недостатком этого предположения является отсутствие конечности фрактала и, это приводит к тому, что при каком-то определенном параметре системы (N_0, D, c, V), значении r корреляционная функция $\gamma(r)$ становится отрицательной.

Описанный выше случай соответствует рассеянию на поверхностных фракталах [20], фрактальная размерность поверхности которых равна D_s, которая изменяется от 2 до 3, в то время как показатель степени в малоугловом рассеянии меняется от 4 до 3, соответственно.

Сечение рассеяния на фрактальных объектах. На сегодняшний момент накоплен огромный экспериментальный опыт по малоугловому рассеянию нейтронов на фрактальных объектах [2–19]. Основываясь на этом опыте, и учитывая характер рассеяния, а именно, форму степенной функции от модуля переданного импульса в области, где фрактальное поведение возможно, а также конечные размеры рассеивателя, сечение рассеяния можно записать в самом общем виде как

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) = \frac{A}{(1+(Q\xi)^2)^{D/2}}, \qquad (21)$$

где A – постоянная величина. Отметим, что (21) в своих крайних случаях нефрактальных объектов при значениях $D = 2$ и 4 сводится к (6) и (4), соответственно.

Нет сомнений, что выражение (21) должно описывать рассеяние на фрактальной частице при $Q\xi \ll 1$. Также немаловажным является следующий комментарий: в классическом малоугловом рассеянии нейтронов часто используют выражение $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \sim Q^{-D}$, поскольку, во-первых справедливо полагают, что фрактальная частица определяется размерностью D, а, во-вторых, разрешения, достигаемого в эксперименте, бывает недостаточно для определения размера частицы ξ. Последнее обстоятельство, тем не менее, нисколько не мешает установить фрактальную размерность, что делает малоугловое рассеяние нейтронов совершенно незаменимым методом исследовании фрактальных объектов.

Напротив, для нового метода исследования нано- и микрочастиц спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов определение размера фрактальной частицы является абсолютно необходимым для однозначного определения фрактальной размерности. В этом методе измеряется аналог корреляционной функции $\gamma(r)$, а именно, спин-эхо корреляционной функция $G(z)$ в широком диапазоне корреляционных длин от 20 нм до 20 мкм. Отметим также, что получение корреляционной функции $\gamma(r)$ и ее аналога, спин-эхо функции $G(z)$, из сечения рассеяния нейтронов (21) оказывается совершенно естественным в логике постановки спин-эхо эксперимента. Эта процедура позволила выявить особенности корреляционной функции для фрактальных частиц с размерностью $D \sim 3$. Данная область размерностей была на удивление плохо интерпретирована в литературе. Ниже мы даем четкую и строгую интерпретацию закона рассеяния Q^{-3}, как рассеяния на логарифмическом фрактале.

СЕЧЕНИЕ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ И КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ

Основы метода СЭМУРН. В методе СЭМУРН используется явление ларморовской прецессии магнитного момента нейтрона в магнитном поле для декодирования угла рассеяния при взаимодействии нейтрона с частицей [22]. В эксперименте измеряется поляризация нейтронного пучка P при его прохождении через образец толщины l. При этом производится сканирование по пространственной координате z, перпендикулярной направлению нейтронного пучка, также называемой спин-эхо длиной. Измеренная поляризация изменяется следующим образом [23, 37]:

$$P(z) = \exp(l\sigma(G(z) - 1)), \qquad (22)$$

где σ – полное сечение рассеяния нейтронов и $G(z)$ – корреляционная функция СЭМУРН. Функция $G(z)$ связана с сечением рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ преобразованием Ханкеля[22]:

$$G(z) = \frac{1}{\sigma k_0^2}\int_{R^2} \cos(zQ_z)\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)dQ_y dQ_z, \qquad (23)$$

где k_0 – величина волнового вектора падающего на образец нейтрона, Q_z и Q_y – проекции переданного импульса рассеяния на соответствующие оси.

В работе [38] было показано, что функция $G(z)$ есть не что иное, как двумерная проекция вдоль оси прохождения нейтронного пучка пространственной корреляционной функции частицы, т.е. она выражается следующим соотношением:

$$G(z) = \int_R \gamma(x,0,z)dx. \qquad (24)$$

В свою очередь корреляционная функция $\gamma(r)$ выражается через свою проекцию $G(z)$ с помощью интегрального преобразования как [45]:

$$\gamma(r) = -\frac{\xi}{\pi}\int_r^\infty \frac{G'(z)}{\sqrt{z^2 - r^2}}dz. \qquad (25)$$

Таким образом, зная закон рассеяния, можно вычислить функцию СЭМУРН, а затем, используя (25), корреляционную функцию исследуемого объекта.

Метод СЭМУРН является комплементарным классическому методу МУРН. Он, во-первых, существенно расширяет пространственный диапазон исследования и, во-вторых, позволяет исследовать аналог корреляционной функции рассеивающего объекта в реальном пространстве. Однако оба метода позволяют получить информацию только о корреляционной функции рассеивающего объекта, а не о его плотности. Зная одну из функций $G(z)$, $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ или $\gamma(r)$ и делая соответствующее интегральное преобразование, можно без потери информации найти две остальные.

На рис. 1 дано схематичное представление соотношений между сечением рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$, корреляционной функцией $\gamma(r)$ и ее проекцией или СЭМУРН функцией $G(z)$.

Над стрелками подписаны соответствующие преобразования, переводящие эти функции одна

Рис. 1. Схематичное представление соотношений между функциями $G(z)$, $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ и $\gamma(r)$ [45].

в другую: преобразование Фурье – для $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ и $\gamma(r)$, преобразование Ханкеля – для $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$ и $G(z)$, преобразование Абеля – для $\gamma(r)$ и $G(z)$.

Иначе говоря, в методах МУРН и СЭМУРН измеряется пространственная корреляционная функция, и главной задачей остается ее интерпретация в терминах плотности рассеивающего образца. К сожалению, точное определение рассеивающей плотности $\rho(\mathbf{r})$ невозможно, и мы можем только строить модели, которые адекватно описывали бы корреляционную функцию. Также следует отметить, что все рассматриваемые в данной работе плотности рассеяния предполагаются анизотропными.

Функция СЭМУРН. Для описания эксперимента по спин-эхо малоугловому рассеянию нейтронов требуется знать закон рассеяния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$. Затем, делая интегральное преобразование Ханкеля, можно получить выражение для корреляционной функции объекта, измеряемой в эксперименте.

Покажем, что закон рассеяния (21) при произвольном значении D можно проинтегрировать, следуя выражению (23), тем самым получая функцию спин-эхо для объекта любой фрактальной размерности.

Перейдем в (23) к безразмерной переменной $\xi Q = t$, а затем – в полярные координаты:

$$G(z) = \frac{A}{\xi^2 \sigma k_0^2} \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} \cos\left(\frac{z}{\xi} t \cos(\varphi)\right) \frac{t d\varphi}{\left(t^2+1\right)^{D/2}}. \quad (26)$$

Далее проинтегрируем по угловой компоненте вектора переданного импульса:

$$G(z) = \frac{2\pi A}{\xi^2 \sigma k_0^2} \int_0^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{z}{\xi} t\right) t dt}{\left(t^2+1\right)^{D/2}}, \quad (27)$$

где $J_0(x)$ – функция Бесселя первого рода нулевого порядка. Интеграл (27) тоже берется и равен:

$$G(z) = \frac{2\pi A}{\xi^2 \Gamma(D/2) \sigma k_0^2} \left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(\frac{z}{\xi}\right), \quad (28)$$

где $K_\nu(x)$ – функция Макдональда порядка ν, $\Gamma(x)$ – гамма-функция. Можно показать, что полное сечение рассеяния нейтронов равно:

$$\sigma = \frac{2\pi A}{k_0^2} \int_R \frac{Q dQ}{\left(1+(Q\xi)^2\right)^{D/2}} = \frac{2\pi A}{\xi^2 k_0^2} \frac{1}{(D-2)}. \quad (29)$$

После нормировки на σ, получаем функцию $G(z)$ в виде:

$$G(z) = \frac{2}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)} \left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D}{2}-1} K_{\frac{D}{2}-1}\left(\frac{z}{\xi}\right). \quad (30)$$

Таким образом, мы показали, что функция спин-эхо $G(z/\xi)$ является функцией Макдональда ν-го порядка, помноженной на степенную функцию $(z/2\xi)^\nu$. При этом параметр ν линейно связан со степенью фрактальности объекта $\nu = D/2-1$. Другими словами, показано, что форма корреляционной функции в методе СЭМУРН прямо определяется фрактальной степенью рассеивающего объекта.

В некоторых случаях формула (30) заметно упрощается. Наиболее простой функция спин-эхо получается при $D = 3$:

$$G(z) = \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\frac{1}{2}} K_{\frac{1}{2}}\left(\frac{z}{\xi}\right) = \exp\left(-\frac{z}{\xi}\right). \quad (31)$$

Того же результата можно добиться, посчитав интеграл (23) с сечением (21) при $D = 3$ (см. Приложение А).

На рис. 2 изображена функция спин-эхо $G(z)$ для различных степеней $D = 4$, 3.75, 3.5, 3.25, 3.0, 2.75, 2.5, 2.25. Отметим, что для степени $D = 3$ функция спин-эхо имеет простую экспоненциальную зависимость $\exp(-z/\xi)$. Спин-эхо функции $G(z)$ для поверхностных ($D > 3$) и объемных ($D < 3$) фракталов лежат выше и ниже экспоненциальной зависимости, соответственно. Пунктирной линией показана аппроксимация теоретической функцией (50) (см. подробно в Приложении В).

Корреляционная функция фрактального объекта. Для нахождения корреляционной функции фрактального объекта $\gamma(r)$ будем использовать соотношение (25). Для этого посчитаем производную от спин-эхо функции по z:

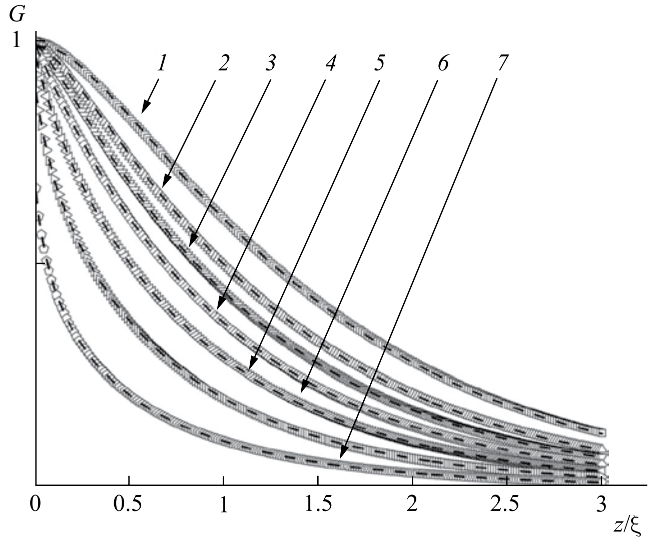

Рис. 2. Спин-эхо функции G при различных значениях показателя степенной функции в сечении малоуглового рассеяния D. Кривые с *1* по *3* соответствуют поверхностным фракталам (*1* – $D = 4$, *2* – $D = 3.5$, *3* – $D = 3.25$). Кривая *4* соответствует промежуточному значению параметра $D = 3$, т.е. логарифмическому фракталу. Кривые с *5* по *7* соответствуют объемным фракталам (*5* – $D = 2.75$, *6* – $D = 2.5$, *7* – $D = 2.25$).

$$G'(z) = \frac{2}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)}\frac{d}{dz}\left(\left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D}{2}-1}K_{\frac{D}{2}-1}\left(\frac{z}{\xi}\right)\right) = \tag{32}$$

$$= \frac{-2}{\xi\,\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)}\left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D}{2}-1}K_{\frac{D}{2}-2}\left(\frac{z}{\xi}\right),$$

и, подставив ее в (25), получим

$$\gamma(r) = \frac{2}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)(2\xi)^{\frac{D}{2}-1}}\frac{1}{\pi}\int_r^\infty \frac{(z)^{\frac{D}{2}-1}K_{\frac{D}{2}-2}\left(\frac{z}{\xi}\right)}{\sqrt{z^2-r^2}}dz. \tag{33}$$

Сделаем замену $z = xr$ и возьмем интеграл:

$$\gamma(r) = \frac{2\,r^{\frac{D}{2}-1}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)(2\xi)^{\frac{D}{2}-1}}\frac{1}{\pi}\int_1^\infty \frac{(x)^{\frac{D}{2}-1}K_{\frac{D}{2}-2}\left(\frac{xr}{\xi}\right)}{\sqrt{x^2-1^2}}dx =$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}\,\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)}\left(\frac{r}{2\xi}\right)^{(D-3)/2}K_{(D-3)/2}\left(\frac{r}{\xi}\right). \tag{34}$$

Легко заметить, что получившееся выражение для корреляционной функции (34), с точностью до константы, равно функции СЭМУРН (30) со сдвинутым на 1/2 индексом.

Можно привести некоторую интегральную оценку средней плотности частицы, корреляционная функция которой удовлетворяет выражению (34), поскольку смысл корреляционной функции – это вероятность найти ненулевую плотность на расстоянии r от выбранной начальной точки, усредненная по всем точкам частицы. Таким образом, корреляционная функция – это аналог плотности. Проинтегрировав ее по трехмерному пространству, можно получить объем частицы. В корреляционной функции (34) учтен конечный размер частицы, поэтому такая процедура не требует дополнительных модификаций для учета ее границы. Интегрирование приводит к следующему результату:

$$V_D = \frac{2^{(9-D)/2}\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)}\int_0^\infty\left(\frac{r}{\xi}\right)^{(D-3)/2}\times$$

$$\times K_{(D-3)/2}\left(\frac{r}{\xi}\right)r^2dr = 4\pi(D-2)\xi^3. \tag{35}$$

При $D = 2$, что соответствует плоским частицам, объем всей частицы равен нулю, при $D = 4$ объект полностью заполняет отведенное ему трехмерное пространство, и, без ограничения общности, мы называем его объемным шаром с четкой границей. Так можно сравнить степень заполненности пространства объектами с различными фрактальными свойствами. Например, поверхностный фрактал с фрактальной степенью $D_s = 2.5$ заполняет пространства в три раза больше, чем объемный фрактал с такой же размерностью $D_m = 2.5$. Видно, что $D = 3$ никаким особым образом не выбивается из общей тенденции. Можно заключить, что этот объект занимает пространства в два раза меньше, чем плотный шар. Также он "выигрывает" по заполнению пространства у любого объемного фрактала и "проигрывает" любому поверхностному.

На малых расстояниях r корреляции между точками, находящихся внутри частицы, преобладают над корреляциями между точками вблизи ее границы. Поэтому рассмотрим подробно корреляционные функции (34) при $r/\xi \ll 1$ для того, чтобы понять, что происходит внутри частицы. Пользуясь интегральным представлением для функции Макдональда (44) (см. Приложение В), можно получить асимптотические выражения для (34) при $r/\xi \ll 1$.

Для объемных фракталов, т. е. при $2 < D < 3$, получается следующее выражение:

$$\gamma(r) \sim \left(\frac{r}{\xi}\right)^{D-3}. \tag{36}$$

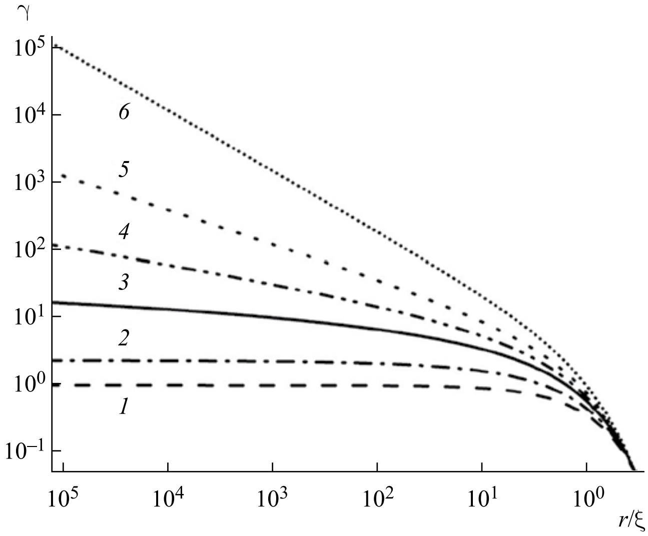

Рис. 3. Пространственная корреляционная функция при разных значениях показателя степенной функции в сечении малоуглового рассеяния D в двойном логарифмическом масштабе. Кривые *1* и *2* соответствуют поверхностным фракталам (*1* – $D = 4$, *2* – $D = 3.5$). Кривая *3* соответствует промежуточному значению параметра $D = 3$, т.е. логарифмическому фракталу. Кривые с *4* по *6* соответствуют объемным фракталам (*4* – $D = 2.75$, *5* – $D = 2.5$, *6* – $D = 2.1$).

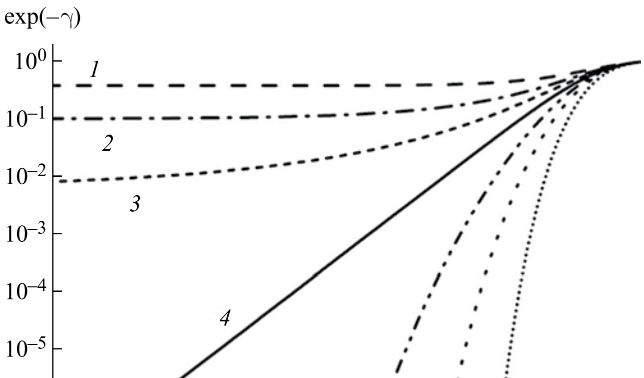

Рис. 4. Функция $\exp(-\gamma(r))$ при различных значениях показателя степенной функции, описывающей малоугловое рассеяние нейтронов D. Кривые с *1* по *3* соответствуют поверхностным фракталам (*1* – $D = 4$, *2* – $D = 3.5$, *3* – $D = 3.25$). Кривая *4* соответствует промежуточному значению параметра $D = 3$, т.е. логарифмическому фракталу. Кривые с *5* по *7* соответствуют объемным фракталам (*5* – $D = 2.75$, *6* – $D = 2.5$, *7* – $D = 2.1$).

Для $D = 3$ асимптотика соответствующей корреляционной функции выражается в виде логарифма:

$$\gamma(r) \sim \ln(\xi / r). \tag{37}$$

Таблица 1. Функция СЭМУРН $G(z)$ и пространственная корреляционная функция $\gamma(r)$ при разных значениях показателя степенной функции в сечении малоуглового рассеяния (21)

D	$G(z)$	$\gamma(r)$	$\gamma(r)$ при $r/\xi<1$
4	$\left(\frac{z}{\xi}\right)K_1\left(\frac{z}{\xi}\right)$	$\exp\left(-\frac{z}{\xi}\right)$	$1-r$
3.5	$\left(\frac{z}{\xi}\right)^{\frac{3}{4}}K_{\frac{3}{4}}\left(\frac{z}{\xi}\right)$	$\left(\frac{r}{\xi}\right)^{-\frac{1}{4}}K_{-\frac{1}{4}}\left(\cdot\right.$	$1–0.96\, r^{1/2}$
3	$\exp\left(-\frac{z}{\xi}\right)$	$K_0\left(\frac{r}{\xi}\right)$	$\ln(r/\xi)$
2.5	$\left(\frac{z}{\xi}\right)^{\frac{1}{4}}K_{\frac{1}{4}}\left(\frac{z}{\xi}\right)$	$\left(\frac{r}{\xi}\right)^{-\frac{1}{4}}K_{-\frac{1}{4}}\left(\frac{r}{\xi}\right)$	$\left(\frac{r}{\xi}\right)^{-1/2}$
2	$K_0\left(\frac{z}{\xi}\right)$	$\left(\frac{r}{\xi}\right)^{-1}\exp\left(-\frac{r}{\xi}\right)$	$\left(\frac{r}{\xi}\right)^{-1}$

Для демонстрации логарифмического поведения корреляционной функции (34) при $D = 3$ на рис. 4 построены функции $\exp(-\gamma(r))$ при разных значениях D. Видно, что при $D = 3$ соответствующая функция линейна при $r/\xi \lesssim 1$.

Для поверхностных фракталов, т. е. при $3 < D < 4$ асимптотика соответствующей корреляционной функции имеет вид:

$$\gamma(r) \sim 1 - \alpha\left(\frac{r}{\xi}\right)^{D-3}, \tag{38}$$

где $\alpha = \pi 2^{4-D} / (D-3)\Gamma^2(D-3)/2\sin(\pi(D-3)/2)$. Если в этом случае положить $D = 6 - D_s$, то (38) с точностью до констант совпадает с (19).

Во всех случаях приближение $r/\xi \lesssim 1$ хорошо работает, демонстрируя фрактальные особенности частицы (рис. 3, рис. 4). В табл. 1 приведены функции СЭМУРН $G(z)$ и соответствующие им корреляционные функции $\gamma(r)$ при разных значениях показателя степени в сечении малоуглового рассеяния нейтронов, представленного в выражении (21).

ВИД КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ

Функция $\gamma(r)$ фрактальной частицы характеризуется, во-первых, быстрым (экспоненциальным) спадом при $r/\xi > 1$, который соответствует рассеянию на частице, как на целом объекте и, во-вторых, фрактальным поведением при $r/\xi \lesssim 0.1$. Первое утверждение становится ясным, если вспомнить асимптотику функций Макдональда при $z \to \infty$, которая универсальна для любого показателя n и пропорциональна $(1/z)^{1/2}\exp(-z)$. Тогда выражение для корреляционной функции выглядит следующим образом:

$$\gamma(r) \sim \left(\frac{r}{\xi}\right)^{\frac{D-4}{2}} \exp\left(-\frac{r}{\xi}\right). \quad (39)$$

Важно отметить, что асимптотическое выражение для корреляционной функции Ур. (39) совпадает со своим точным значением при $D = 2, 4$, а именно, для простых случаев плоских и объемных частиц. Возможно, этот факт послужил некоторой предпосылкой к тому, что в работах [20, 21] было предложено использовать подобное выражение в качестве корреляционной функции объемных фракталов (10). При значениях $r/\xi \lesssim 0.1$ корреляционная функция поверхностного фрактала ($4 > D > 3$) (рис.3) пропорциональна $1 - \alpha\left(\frac{r}{\xi}\right)^{D-3}$.

Это свидетельствует о том, что поверхностный фрактал имеет однородное по плотности ядро и вносит главный вклад в корреляции на малых расстояниях, при которых $\alpha\left(\frac{r}{\xi}\right)^{D-3} \ll 1$. При увеличении аргумента рассеяние происходит на фрактальной поверхности при $\alpha\left(\frac{r}{\xi}\right)^{D-3} \ll 1$. Параметры α и D определяют толщину фрактальной поверхности и размер плотного ядра. При стремлении $D \to 3$ (рис. 3), размер плотного ядра уменьшается и, в момент, когда $D = 3$ оно полностью пропадает, и поверхностный фрактал превращается в логарифмический фрактал, а соответствующая корреляционная функция пропорциональна $\ln(\xi/r)$. Это свидетельствует о том, что частица имеет иерархически разветвленную структуру, похожую на дерево, что обеспечивает максимальную доступность любого участка извне. Этот факт указывает на то, что коллоидные фрактальные кластеры являются предельно разветвленными. В терминах поверхностных фракталов это можно переформулировать следующим образом: поверхность такого объекта присутствует на всех масштабах длины и, вследствие этого, она имеет максимально возможную площадь. Стоит упомянуть, что в работах [48–50] исследовалась структурная организация почвенных коллоидов методом МУРН. Согласно экспериментальным данным, в целом ряде случаев измеряемая фрактальная размерность почв близка к значению $D = 3$. Далее при $3 > D > 2$ (рис. 3) логарифмический фрактал переходит в объемный, с корреляционной функцией $(r/\xi)^{D-3}$, соответственно.

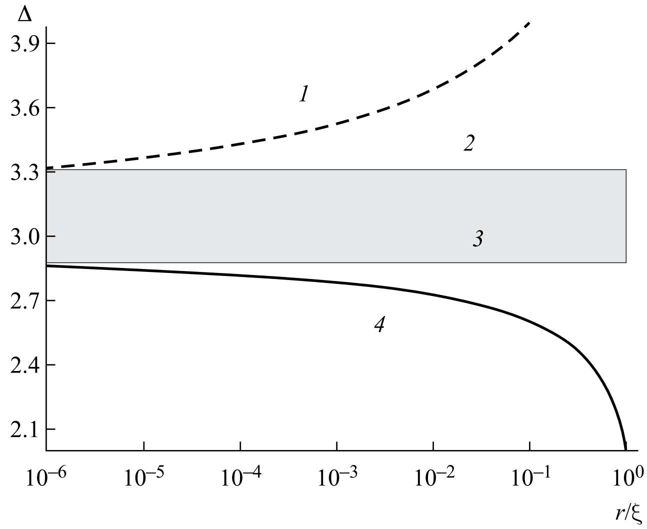

Рис. 5. Диаграмма, характеризующая скорость изменения корреляционной функции фракталов (ее производной) с масштабом, в зависимости от показателя степени D в диапазоне размеров $10^{-6} < r/\xi < 1$. Кривая *1* соответствует условию: $\gamma'_{\text{sur}} = \gamma'_{\ln}$. Кривая *2* соответствует условию: $D = 3.3$. Кривая *3* соответствует условию $D = 2.9$. Кривая *4* соответствует условию: $\gamma'_{\text{vol}} = \gamma'_{\ln}$.

Следует отдельно рассмотреть вопрос о том, при каких значениях D поверхностный и объемный фракталы переходят в логарифмический. Иными словами, является ли логарифмический фрактал вырожденным случаем, когда $D = 3$, или он может покрывать некоторый диапазон значений, близких, но не равных 3? В первом приближении диапазон значений D, в котором логарифмический фрактал может оказаться ярче выраженным, по сравнению со степенными (поверхностным и объемным) фракталом, можно оценить по скорости изменения корреляционной функции (ее производной) с изменением масштаба. Принимая во внимание нижний предел отношения, который имеет физический смысл, $r/\xi = 10^{-5}$ (при максимальном $\xi = 10$ мкм и минимально возможном $r = 1$Å), можно сравнить различные типы фракталов. Сравнивая производные корреляционных функций, описывающие объемный фрактал (36) и фрактал логарифмический (37) $\gamma'_{\text{vol}}(r) < \gamma'_{\ln}(r)$, можно сделать вывод, что скорость изменения корреляций логарифмического фрактала больше, чем объемного фрактала при $D < 2.9$ во всем интересующем нас диапазоне ($10^{-5} < r/\xi < 1$). Аналогичный анализ можно провести для логарифмического и поверхностного фракталов, получив границу $D = 3.3$.

На рис. 5 верхняя кривая удовлетворяет уравнению $\gamma'_{\text{sur}}(r) = \gamma'_{\ln}(r)$, а нижняя кривая удовлетворяет уравнению $\gamma'_{\text{vol}}(r) = \gamma'_{\ln}(r)$ в пространстве параметров (D, r/ξ). Поле между этими кривыми удовлетворяет условию доминирования скорости корреляций логарифмического фрактала по сравнению с прочими в зависимости от параметров D, r/ξ. Можно предположить, что полоса удовлетворяет условию доминирования скорости корреляций логарифмического фрактала по сравнению с прочими фракталами в зависимости от r/ξ во всем диапазоне $10^{-5}< r/\xi<1$. Как видно из рис. 5, фрактал можно считать логарифмическим, если значение D близко к 3, т.е. в диапазоне $D \in [2.9, 3.3]$ для всех $r/\xi \in 10^{-5}$–10^{-1}.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показаны недостатки и противоречия концепции рассеяния на фрактальных объектах, сформировавшейся в конце прошлого столетия. Представлен подход для расчета корреляционной функции, основанный на анализе сечения рассеяния. В этом подходе профиль сечения рассеяния нейтронов рассматривается как наблюдаемое свойство фрактальной частицы. В модели учитываются два основных параметра частицы: конечный размер ξ и степень ее фрактальности D, детектируемые через призму малоуглового нейтронного рассеяния. Описание охватывает в единой картине поверхностные и объемные фракталы, а ния $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \sim Q^{-3}$. Корреляционная функция γ(r) для объемных и поверхностных фракталов описывается общим выражением и пропорциональна функции Макдональда $(D–3)/2$-го порядка, помноженной на степенную функцию $r^{(D-3)/2}$. При $2 < D < 3$ корреляционная функция соответствует объемному фракталу с $D = D_m$, при $D = 3$ – логарифмическому, при $3 < D < 4$ – поверхностному с $D = 6 - D_s$ (D_m и D_s – фрактальные размерности объемного и поверхностного фрактала). Кроме того, корреляционные функции для неограниченных фракталов, как объемных, так и поверхностных, совпадают с асимптотикой полученного выражения при $r/\xi < 1$, где ξ – корреляционная длина частицы.

Также получено выражение для одномерной корреляционной функции G(z), которая измеряется в методе спин-эхо малоуглового рассеяния нейтронов. Функция спин-эхо длины фрактального объекта описывается аналогичным выражением, со сдвигом индекса функции Макдональда и показателя степенной функции на 1/2. Пограничный случай перехода от объемного к поверхностному фракталу, соответствующий кубической зависимости сечения рассеяния нейтронов $\frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \sim Q^{-3}$ в пространстве переданных импульсов, соответствует $G(z) = \exp(-z/\xi)$. Корреляционная функция при $r/\xi < 1$ (в области фрактального поведения) пропорциональна $\ln(\xi/r)$.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №16-02-00987 а, №17-02-00313 а).

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А. Случай $D = 3$. Спин-эхо функция при $D = 3$ выражается следующим образом:

$$G(z) = \frac{A}{\sigma k_0^2}\int\limits_R \cos\left(\frac{z}{\xi}t_z\right)dt_z \int\limits_R \frac{dt_y}{\left(1 + t_y^2 + t_z^2\right)^{3/2}}, \quad (40)$$

это выражение (23), где введена замена $Q\xi = \sqrt{t_y^2 + t_z^2}$.

Для начала проинтегрируем по t_y. Интеграл легко берется, если сделать замену переменной $\frac{t_y}{\sqrt{t_y^2+1}} = \sin\mathrm{h}(\alpha)$.

$$\int\limits_R \frac{dt_y}{\left(1 + t_y^2 + t_z^2\right)^{3/2}} = \frac{2}{t_z^2 + 1}. \quad (41)$$

Тогда спин-эхо функция выглядит следующим образом:

$$G(z) = \frac{2A}{\sigma k_0^2}\int\limits_R \frac{\cos\left(\frac{z}{\xi}t_z\right)dt_z}{t_z^2 + 1} = \frac{2A}{\sigma k_0^2}\exp\left(-\frac{z}{\xi}\right). \quad (42)$$

Для взятия интеграла использовалась лемма Жордана. Полное сечение рассеяния равно:

$$\sigma = \frac{2A}{k_0^2}\int\limits_R \frac{1}{t_z^2 + 1} = \frac{2\pi A}{k_0^2}, \quad (43)$$

тогда нормированная проекция корреляционной функции равна $\exp\left(-\frac{z}{\xi}\right)$.

Приложение В. Приближение $G(z)$ элементарной функцией. Воспользуемся для функции Макдональда следующим интегральным представлением:

$$K_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\frac{\exp(-x)}{\Gamma(n+1/2)} \times \\ \times \int\limits_0^\infty \exp(-t)t^{n-1/2}(1 + t/2x)^{n-1/2}\,dt. \quad (44)$$

при $x \to 0$ выражение (44) можно представить в следующем виде:

$$K_n(x) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \frac{1}{\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right)} \frac{1}{(2x)^{n-\frac{1}{2}}} \times \\ \times \int_0^\infty \exp(-t) t^{2n-1} dt = \frac{2^{n-1}\Gamma(n)}{x^n}, \quad (45)$$

а при $x > 1/2$ имеем:

$$K_n(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \exp(-x)\left(1 + \sum_{r=1}^{\infty} \frac{\Gamma\left(n+\frac{1}{2}-r\right)}{\Gamma(n+1/2)} \times \right. \\ \left. \times \frac{\left(n-\frac{1}{2}\right)\ldots(n-r+1/2)}{r!} (2x)^{-r}\right), \quad (46)$$

$$K_n(x) \cong \sqrt{\frac{\pi}{2x}} \exp(-x)(1+1/x)^{\frac{(D-3)(D-1)}{8}}. \quad (47)$$

Тогда в приближении $z/\xi \to 0$ функция СЭМУРН имеет вид:

$$\mathrm{G}(z) \cong 1, \quad (48)$$

а в приближении $z/\xi > 1/2$:

$$G(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)} \left(\frac{z}{2\xi}\right)^{\frac{D-3}{2}} \times \\ \times \exp(-z/\xi)(1+\xi/z)^{\frac{(D-3)(D-1)}{8}}. \quad (49)$$

Приближенное выражение (49) описывает точное выражение (48) при всех z/ξ за исключением области небольших значений аргумента. Видно, что при $D > 3$ и при $r = 0$ функция СЭМУРН $G(0) = 0$, а при $D < 3$ и при $r = 0$ функция СЭМУРН $G(0) = \infty$. Только при $D = 3$ и при $r = 0$ функция СЭМУРН $G(0) = 1$, а формула (49) не имеет особенности и равна убывающей экспоненте, что совпадает с (48). Для избежания особенности в окрестности нуля в формуле (49) введем дополнительный параметр a_0 и скорректируем выражение (49) следующим образом:

$$G(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{D}{2}-1\right)} \left(\frac{z+a_0}{2\xi}\right)^{\frac{D-3}{2}} \times \\ \times \exp(-z/\xi)(1+\xi/(z+a_0))^{\frac{(D-3)(D-1)}{8}}. \quad (50)$$

С физической точки зрения это вполне оправданно, поскольку фракталы имеют нижний предел.

На рис. 2 точками представлено точное решение (30) для функции СЭМУРН при разных значениях параметра D. Пунктирной линией изображена аппроксимация этих функций выражением (50), в которой были свободными оба параметра (D и ξ). Значение параметра D в ходе аппроксимации с точностью до нескольких сотых совпало с его заданным значением, а параметр ξ для каждой кривой был равен 1, с высокой точностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mandelbrot B.* The Fractal Geometry of Nature. San Francisco: CA: Freeman, 1983. 470 p.
2. *Maccarthy D. W., Mark J. E., Schaefer D. W.* // J. of Polymer Science: Part B: Polymer Physics. 1998. V. 36. P. 1167.
3. *Dale W. Schaefer, Ryan Justic S.* // Macromolecules. 2007. V. 40(24). P. 8501.
4. *Roe R. J.* Methods of X-ray and Neutron Scattering in Polymer Science. New York: Oxford University Press, 2000. 420 p.
5. *Harold D. Bale and Paul W. Schmidt* // Physical Review L. 1984. V. 53. № 6. P. 596.
6. *Hurd A. J., Schaefer D. W., Martin J. E.* // Physical Review A. 1987. V. 35. № 5. P. 2361.
7. *Ilatovskiy A., Lebedev D., Filatov M., Petukhov M., Isaev-Ivanov V.* // J. Phys.: Conf. Ser. 351. 2012.
8. *Bancaud A., Lavelle C., Huet S., Ellenberg J.* // Nucl. Acids Res. 2012. V. 40. № 18. P. 8783.
9. *Schmidt P. W.* The Fractal Approach to Heterogeneous Chemistry: Surfaces, Colloids, Polymers, 1989. P. 67.
10. *Lebedev D. V., Filatov M. V., Kuklin A. I., Islamov A. Kh., Kentzinger E., Pantina R. A., Toperverg B. P., Isaev-Ivanov V. V.* // FEBS Lett. 2005. V. 579. P. 1465.
11. *Metze K.* // Expert Rev. Mol. Diagn. 2013. 13(7). P. 719.
12. *Mirny L. A.* // Cromosome Res. 2011. V. 19(1). P. 37.
13. *Elias-Kohav T., Shelntuch M.*// Chem. Engin. Sci. 1991. V. 46. № 11. P. 2787.
14. *Jonson L., Li X., Logan B.*// Environmental Sci. and Techn. 1996. V. 30. № 6. P. 1911.
15. *Suslick K. S.* // Annu. Rev. Mater. Sci. 1999. V. 29. P. 295.
16. *Hangxun Xu, Brad W. Zeigera, Kenneth S. Suslick* // Chem. Soc. Rev. 2013. V. 42. P. 2555.
17. *Saez V., Mason T. J.* // Molecules. 2009. V. 14. P. 4284.
18. *Bang J. H., Suslick K. S.* // Adv. Mater. 2010. V. 22. P. 1039.
19. *Meskin P. E., Ivanov V. K., Barantchikov A. E., Churagulov B. R., Tretyakov Yu.D.* // Ultrason. Sonochem. 2006. V. 13. P. 47.
20. *Teixeira J.* // In On Growth and Form / Eds. H. E. Stanley and N. Ostrowsky. Dordrecht: Nijhoff, 1986. P. 145–162.21.
21. *Teixeira J.* // J. Appl. Cryst. 1988. V. 21. P. 781.
22. *Rekveldt M. Th.* // J. Nucl. Instrum. Methods. B. 1996. V. 114. P. 366.

23. *Rekveldt M. Th., Bouwman W. G., Kraan W. H., Uca O., Grigoriev S. V., Habich K., Keller T. //* Lecture Notes in Physics. 2003. V. 601. P. 87.
24. *Debye P., Bueche A. M.* // J. Appl. Phys. 1949. V. 20. P. 518.
25. *Debye P., Anderson H. R., Brumberger H.* // J. Appl. Phys. 1957. V. 28(6). P. 679.
26. *Паташинский А. З., Покровский В. Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. М.: Наука, 1975.
27. *Малеев С. В., Рубан В. А.* // ЖЭТФ. 1972. Т. 62. № 2. С. 415.
28. *Stanley H. E.* Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena. Oxford: Clarendon Press, 1971.
29. *Chen S.-N., Bendedouch D.* In Enzyme Structure, Method in Enzymology. New York: Academic Press, 1985.
30. *Wong Po-zen, Cao Qi-zhong* // PRB. 1992. V. 45. № 14.
31. *Sinha S. K.* // Physica. D. 1989, V. 38. P. 310.
32. *Freltoft T., Kjems J. K., Sinha S. K.* // PRB,. 1986. V. 33. № 1. P. 269.
33. *Kjems J. K., Freltoft T., Richter D., Sinha S. K.* // Physica. B. 1986. V. 136. P. 285.
34. *Pfeifer Peter., Schmidt P. W.* // PRL. 1988. V. 60. № 13. P. 1345.
35. *Wong Po-zen, Bray A. J.* //PRL. 1988. V. 60. № 13. P. 786.
36. *Harold D. Bale and Paul W. Schmidt* // PRL.1984. V. 53 № 6. P. 596.
37. *Rekveldt M. Th., Plomp J., Bouwman W. G., Kraan W. H., Grigoriev S.& Blaauw M. //* Rev. Sci. Instr. 2005. V. 76. P. 252.
38. *Krouglov T., de Schepper I. M., Bouwman W. G., Rekveldt M. Th.* // J. Appl. Crystallogr., 2003, V. 36, P. 117–124.
39. *Bouwman W. G., Krouglov T. V., Plomp J., Rekveldt M. Th.* // Physica. B. 2004. V. 357. P. 66.
40. *Krouglov T., Bouwman W. G., Plomp J., Rekveldt M. Th., Vroege G.J., Petukhov A.V.* // J. Appl. Cryst. 2003. V. 36. P. 1417.
41. *Andersson R., Bouwman W. G., Plomp J., Mulder F. M., Schimmel H. G., De Schepper I. M.* // Powder Technology. 2009. V. 189. P. 6.
42. *Andersson R., Bouwman W.G., Luding S., de Schepper I.M.* // Granular Matter. 2008. V. 10. P. 407.
43. *Andersson R., van Heijkamp L.F., de Schepper I. M., Bouwman W. G.* // J. Appl. Cryst. 2008. V. 41. P. 868.
44. *Andersson R., Bouwman W.G., Luding S., de Schepper I.M.* // Phys. Rev. E. 2008. V. 051303–1(8). P. 77.
45. *Andersson R.A.* Microstructure in Powders: Spin-echo Small-angle Neutron Scattering Measurements. PhD thesis. Delft University of Technology. IOS press, 2008.
46. *Wong P.-Z., Bray A.J.* // J. Appl. Cryst., 1988. V. 21. P. 786.
47. *Indekeu J. O., Fleerackers G.* // Phys. A. 1998. V. 261. P. 294.
48. *Федотов Г. Н., Третьяков Ю. Д., Пахомов Е. И., Куклин А. И., Исламов А.Х., Початкова Т.Н.* // ДАН. 2006. Т. 409. № 2. С. 199.
49. *Федотов Г. Н., Третьяков Ю. Д., Путляев В. И., Пахомов Е. И., Куклин А. И., Исламов А. Х.* // ДАН. 2006. Т. 412. № 6. С. 772.
50. *Федотов Г. Н., Третьяков Ю. Д., Иванов В. К., Куклин А. И., Исламов А. Х., Путляев В. И., Гаршев А. В., Пахомов Е. И.* // ДАН. 2005. Т. 404. № 5. С. 638.

Small-Angle Neutron Scattering by Fractal Objects

E. G. Iashina, S. V. Grigoriev

The paper presents calculations of the correlation function of fractal isotropic particles with size ξ and fractal dimension D. It is shown that the correlation function $\gamma(r)$ of volume or surface fractal is described as generalized expression and is proportional to the Macdonald function of order $(D–3)/2$, multiplied by a power function. Asymptotic expressions for the correlation functions of the both type of fractals (volume and surface) in the range $r/\xi<1$ are equal to the correlation functions of unlimited fractals. The one-dimensional correlation function of isotropic fractal particles $G(z)$ which measured in the method of spin-echo small-angle neutron scattering (SESANS) is described by a similar expression with a translation of the index of the Macdonald functions and the power function to 1/2.The power-law character of the neutron scattering intensity versus the scattering vector with parameter $D = 3$ or close to 3 corresponds to the exponential law of the SESANS function $G(z) = \exp(-z/\xi)$. The spatial pair correlation function that corresponds to the sample in this case is equal to $\gamma(r) \sim \ln(\xi/r)$. It has an unusual scaling law. The correlation function increases with an additive rather than multiplicative constant, upon reducing the scale by a fixed rescaling factor. This leads to a logarithmic law instead of the usual power law for fractals.

Keywords: condensed matter physics, small-angle neutron scattering.