

合肥研究院提出高分子片晶小角X射线散射新机制

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/6808.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

合肥研究院提出高分子片晶小角X射线散射新机制。众所周知，高分子在结晶时形成折叠链片晶并进一步组装成片晶簇和球晶。片晶厚度和长周期决定着高分子的热力学性质，是结晶高分子的两个重要的物理量。小角X射线散射是探测这些纳米尺寸有序结构的有力武器。长期以来，人们认为小角X射线散射来自于片晶簇内电子密度的相关性，并提出利用相关函数来测定片晶厚度。近日，中国科学院合肥物质科学研究院应用技术研究所先进材料中心田兴友课题组博士李向阳研究发现，片晶体系的小角散射实际上来源于衰减波诱导的散射。相关研究成果以A new small-angle X-ray scattering model for polymer spherulites with a limited lateral size of the lamellar crystals为题发表在国际晶体联合会会刊IUCrJ上。

传统理论之所以认为小角散射来自于电子密度相关性主要是基于在处理宽角X射线衍射所形成的经验。在宽角范围，只有当入射X-射线与晶面的入射角等于或者非常接近于散射角时，晶面才能形成强烈散射，晶面间才能形成强烈的干涉，这就是所谓的布拉格条件。它假设，在小角范围内也严格遵守这样的条件。在这样的假设下，在某一小 q 处的散射强度取决于片晶簇内距离为 Z 的两个界面电子密度间的相关性。相关性越强，他们的电子密度的乘积统计值越大，散射越强。然而，简单计算就可发现，对于侧向尺寸为几百个纳米的片晶，在宽角范围内它严格遵守这一条件，而在小角范围内，在一个很宽的散射角范围内都能形成强烈的散射，例如图1中夹角分别为 0.285° 和 15° 的晶面。这导致两个后果。一，球晶内多个片晶簇对小 q 区同一 q 处的散射有贡献。他们之间的干涉必须考虑。二，衰减波诱导的散射变得显著。对于满足全反射条件的片晶簇，虽然它偏离布拉格条件，但是在小 q 区它的形状因子仍很强。

研究人员详细计算了球晶内各种片晶簇的散射。片晶簇之间的干涉也进行了计算。结果表明，由入射X射线直接诱导的散射不是结晶高分子小角X射线散射的主要来源。如图2b所示，它形成的是双峰结构，在实际散射中从没有观察到。由入射波直接诱导的散射很弱。一是由于这种散射本身就很弱，它的强度取决于晶体和非晶的相对电子密度差，二是由于片晶簇之间的相干相消。衰减波诱导的散射才是高分子片晶散射的真正来源。由于较强的形状因子和结构因子有效避免了干涉，它具有强烈的散射。它能形成通常小角X射线散射所看到的散射图案：小 q 区的Guinier散射，中 q 区的长周期峰，高 q 区的Porod散射，如图2a所示。

研究人员也估算了避免片晶簇之间干涉的条件。结果表明，为避免干涉，片晶的侧向尺寸在小 q 区要大于10微米。这意味着传统的小角X射线散射理论在实际高分子片晶体系难以成立，因为一般的高分子体系中片晶侧向尺寸只有几百个纳米。实际的高分子片晶散射很可能来源于衰减波诱导的散射。研究人员成功地从等规聚丙烯的散射中找到了衰减波存在的证据。这项研究纠正了人们长期以来对小角X射线片晶散射的误解。该研究是在国家自然科学基金(21774133)的支持下完成的。

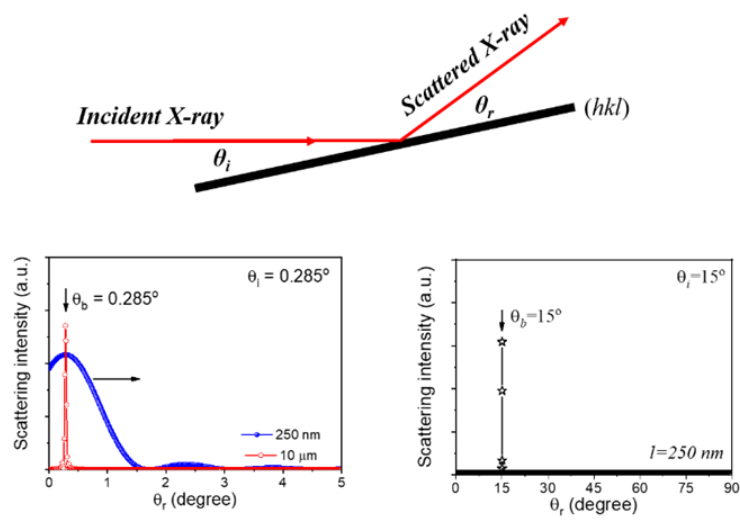
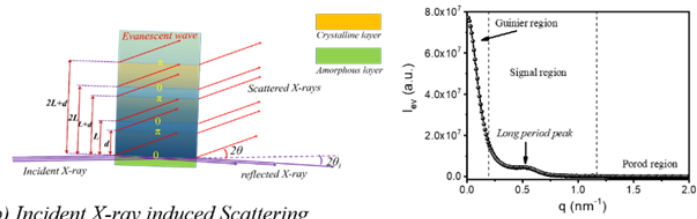
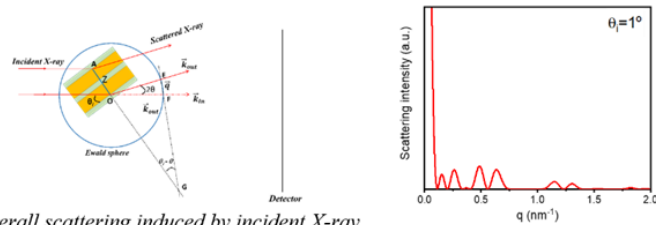


图 1. 与入射X射线夹角为 0.285° 或 15° 的晶面在不同反射角的散射强度。

(a) Evanescent wave-induced Scattering



(b) Incident X-ray induced Scattering



(c) Overall scattering induced by incident X-ray

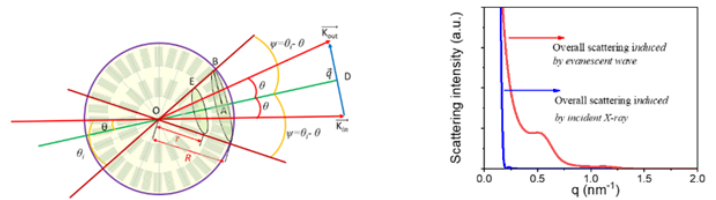


图 2. (a) 由衰减波诱导的单个片晶簇的散射， (b) 入射波直接诱导的单个片晶簇的散射， (c) 球晶内由入射波诱导的总散射。

本文版权归作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://iikx.com)转发