

# СЭМУРН и ФРАКТАЛЫ

Пустовойт Полина,  
Санкт-Петербургский Государственный  
Университет

# Содержание

- Корреляционная функция
- СЭМУРН
  - Принцип работы СЭМУРН
  - СЭМУРН в Дельфте
  - Преимущества СЭМУРН
  - Что измеряется в эксперименте?
- Фракталы
- Изучение организации фрактальных кластеров
- Анизотропия в СЭМУРНе
- Заключение

# Корреляционная функция

$$\gamma(\mathbf{r}) = \frac{\int_V \Delta\rho(\mathbf{r}')\Delta\rho(\mathbf{r}'+\mathbf{r})d\mathbf{r}'}{\int_V \Delta\rho(\mathbf{r}')\Delta\rho(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'} \quad \Delta\rho(r) = \rho(r) - \bar{\rho}$$

$$\left[ \begin{array}{l} C(r) = \langle \Delta\rho(0)\Delta\rho(r) \rangle \\ C(0) = \Delta\rho_s^2 \phi(1 - \phi). \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \phi = \frac{1}{V} \int \rho(r) \\ \Delta\rho_s = \rho_1 - \rho_2 \end{array} \quad \longrightarrow \quad \gamma(r) = \frac{C(r)}{C(0)}$$

- Изотропное распределение плотности

$$G(z) = \frac{2}{\xi} \int_z^\infty \frac{\gamma(r)r}{\sqrt{r^2 - z^2}} dr \quad \xrightarrow{\text{Abel transform}} \quad \gamma(r) = \frac{\xi}{\pi} \int_r^\infty \frac{G(r) - G(z)}{(z^2 - r^2)^{3/2}} z dz$$

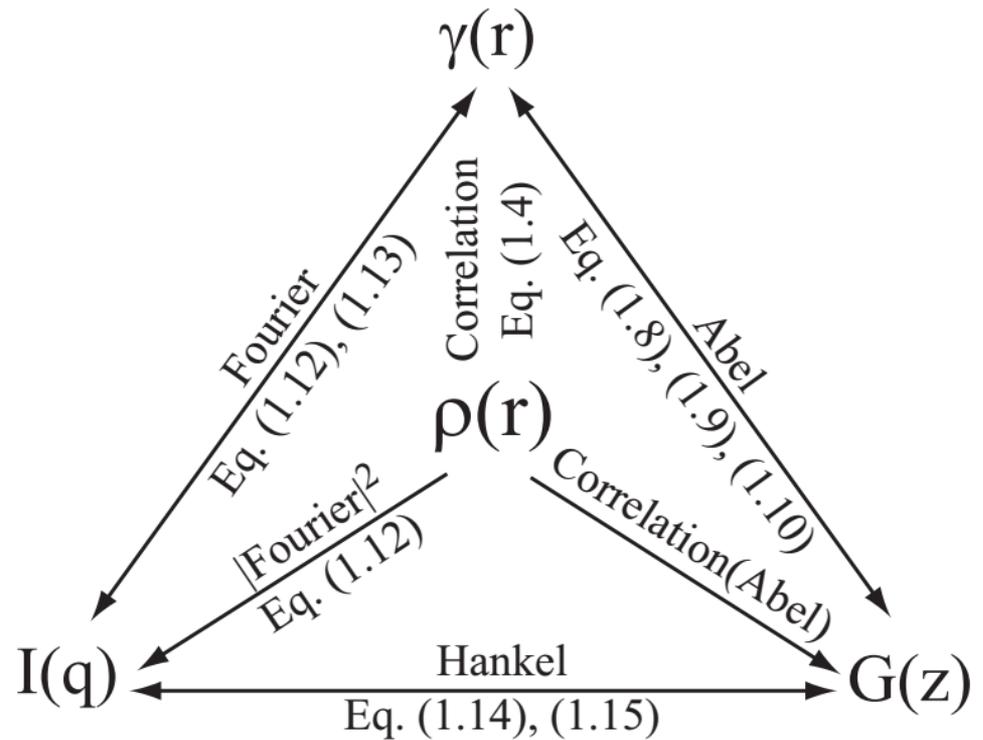
$$\xi = 2 \int_0^\infty \gamma(r) dr$$

# Цикл Фурье-Абеля-Ханкеля

$$I(q) = 4\pi \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{qr} \gamma(r) r^2 dr,$$

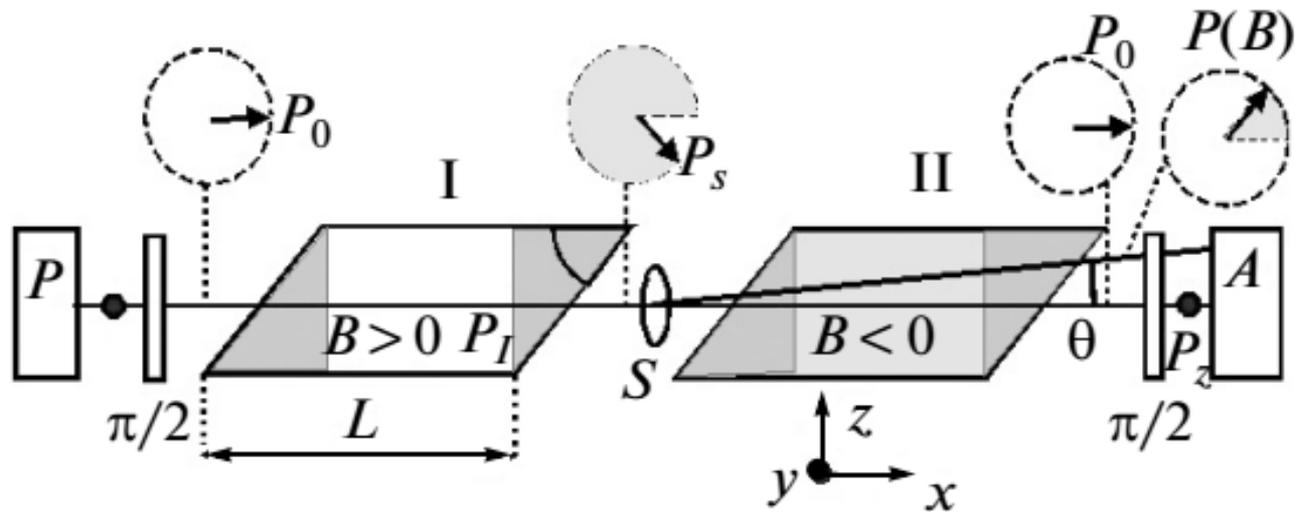


$$\gamma(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{\sin(qr)}{qr} I(q) q^2 dq$$

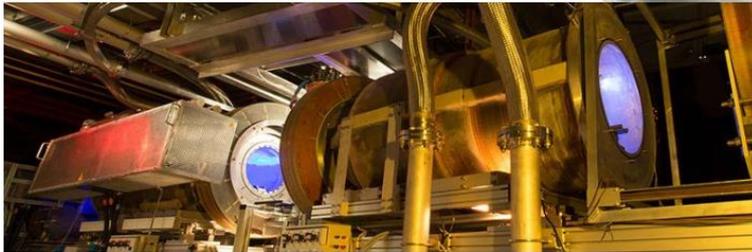
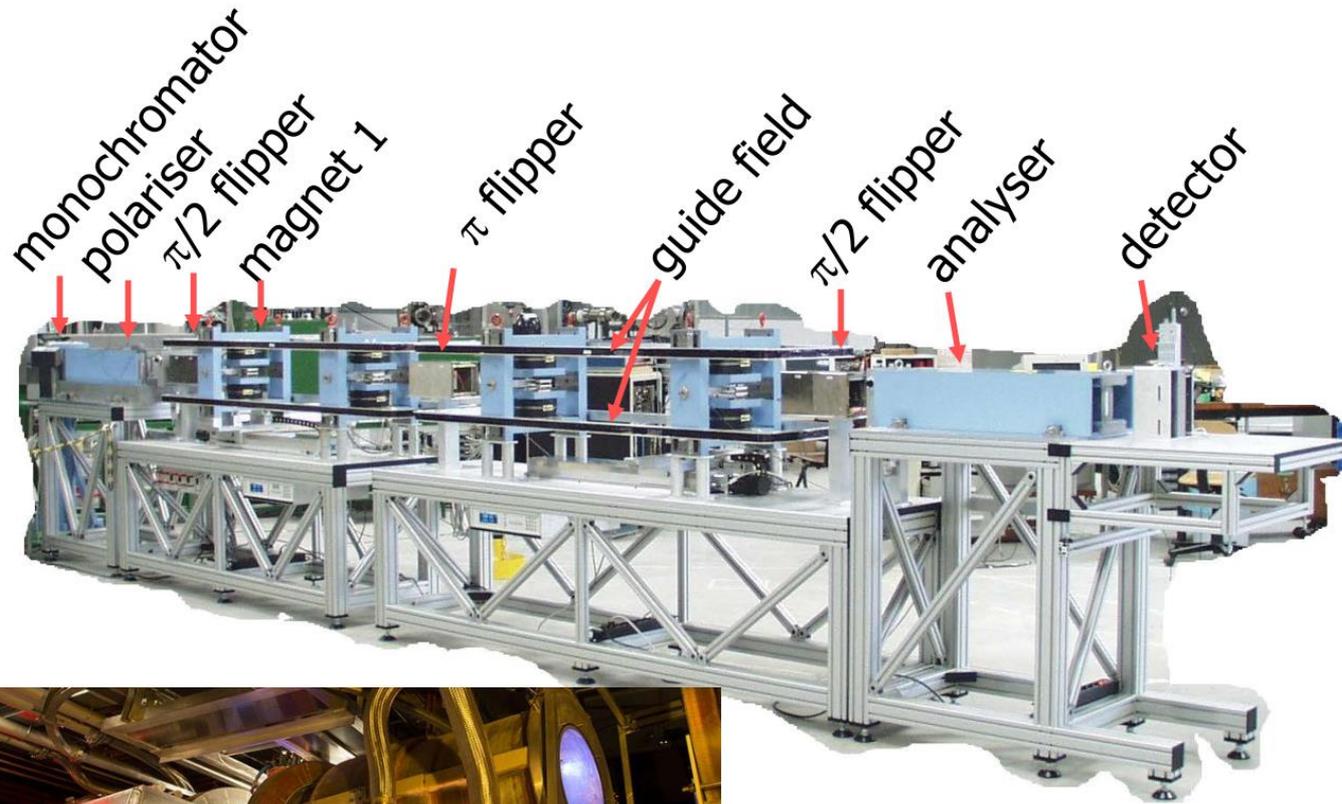


# СЭМУРН

- **Метод спинового эха в малоугловом рассеянии нейтронов (СЭМУРН)** основан на Ларморовской прецессии нейтронов в магнитных полях скошенной геометрии.

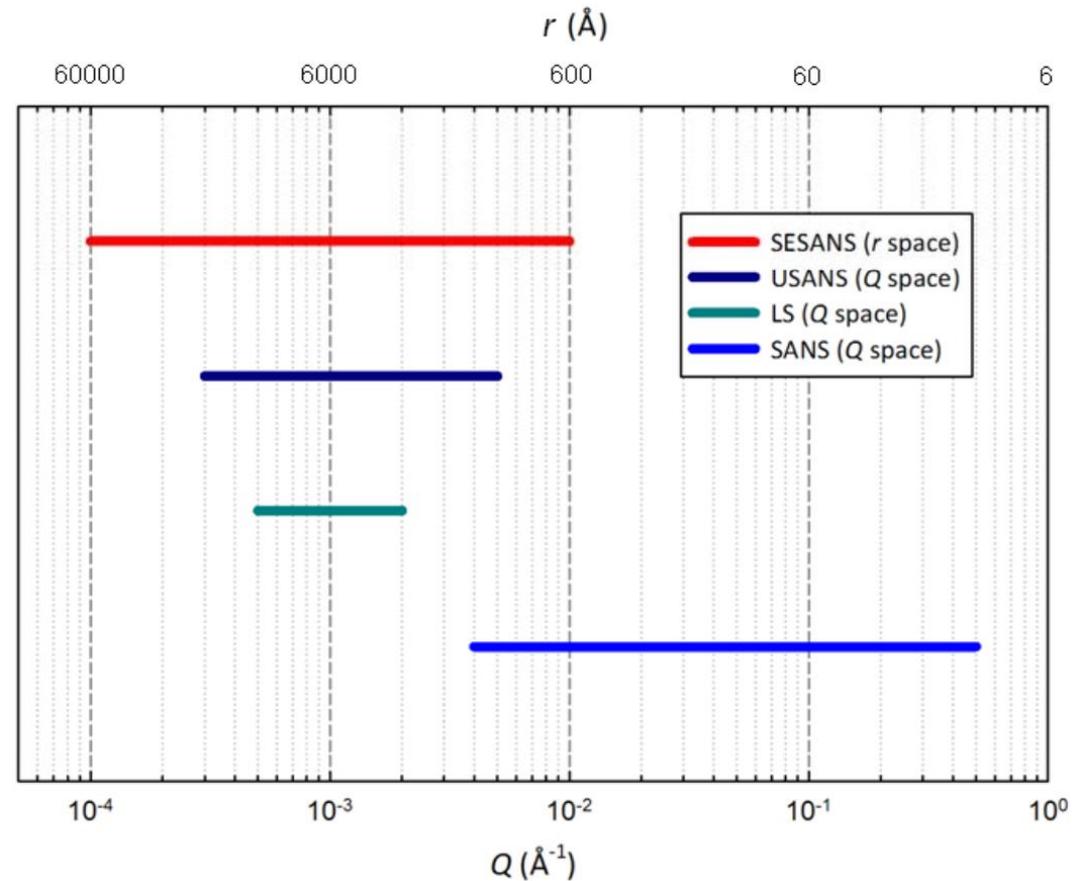


# СЭМУРН в Дельфте



# Преимущества СЭМУРН

- Измерение в прямом пространстве
- Высокая интенсивность нейтронов
- Может изучать неоднородности размерами от 20нм до 20мкм



# СЭМУРН

- Спин-эхо длина  $z$  ( $30\text{нм} < z < 20\text{мкм}$ ) – параметр в прямом пространстве, характеризующий расстояние, на котором измеряются корреляции.

- Поляризация

$$P(z) = e^{\Sigma_t(G(z)-1)} \quad \Sigma_t = t\lambda^2 \Delta\rho_0^2 \phi_1 \phi_2 \xi$$

- Для структуры без дальнего порядка  $G(\infty) = 0$

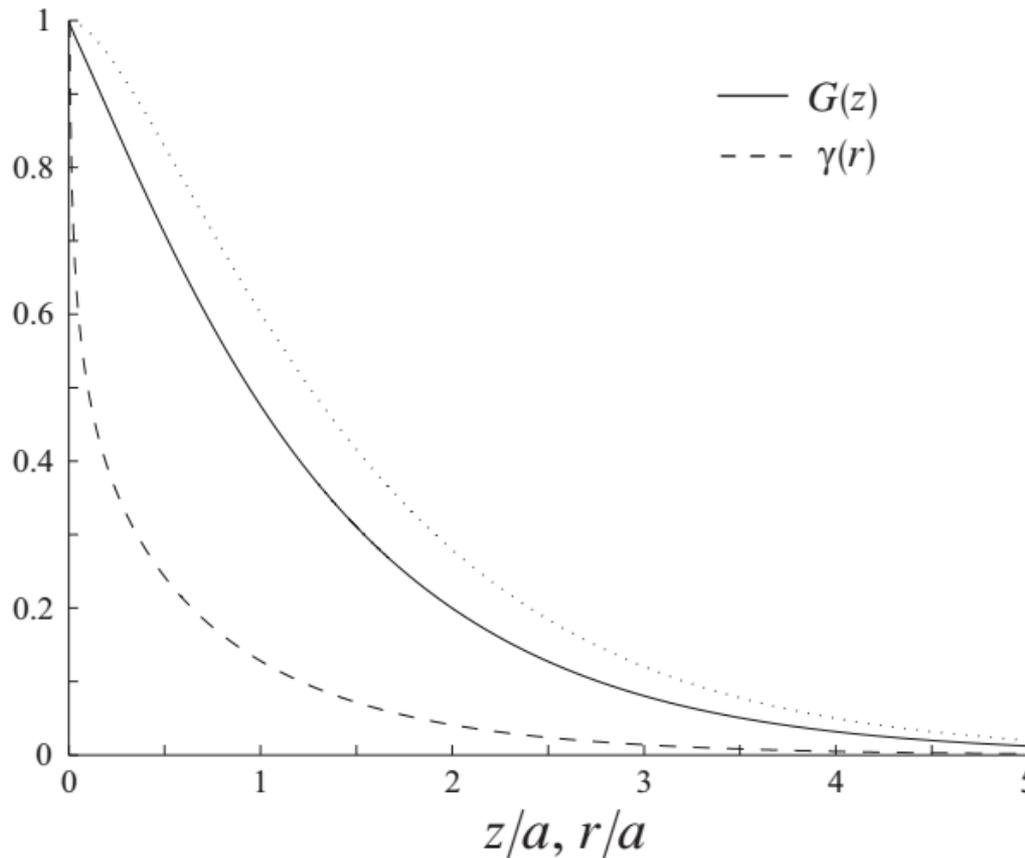
$$P(\infty) = e^{-\Sigma t}$$

- Предел поляризации пропорционален корреляционной длине.

# Фракталы

$\gamma(r) \propto r^{d-3}$       экспоненциальная обрезка

$$\gamma(r) = (r/a)^{d-3} e^{-r/a}$$



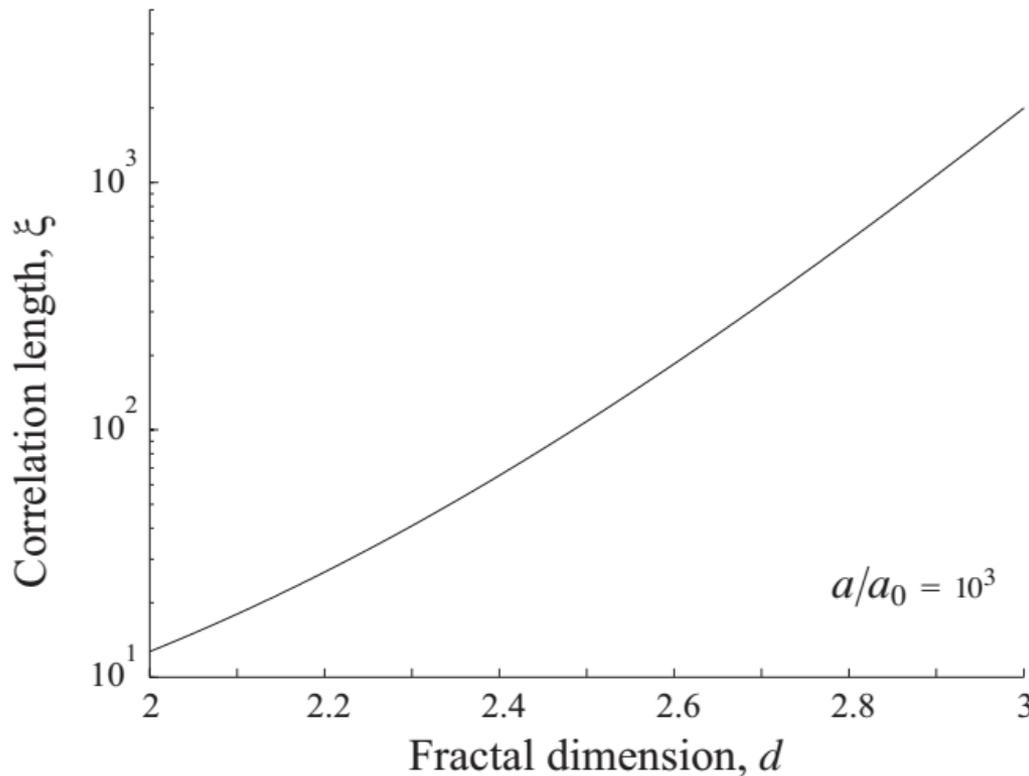
$G(z)$

$$\xi = 2a_0 e^{a_0/a} E_{3-d}(a_0/a)$$

$$E_n(x) = \int_1^\infty \frac{e^{-xt} dt}{t^n}$$

# Фракталы

$$\xi = 2a_0 e^{a_0/a} E_{3-d}(a_0/a)$$



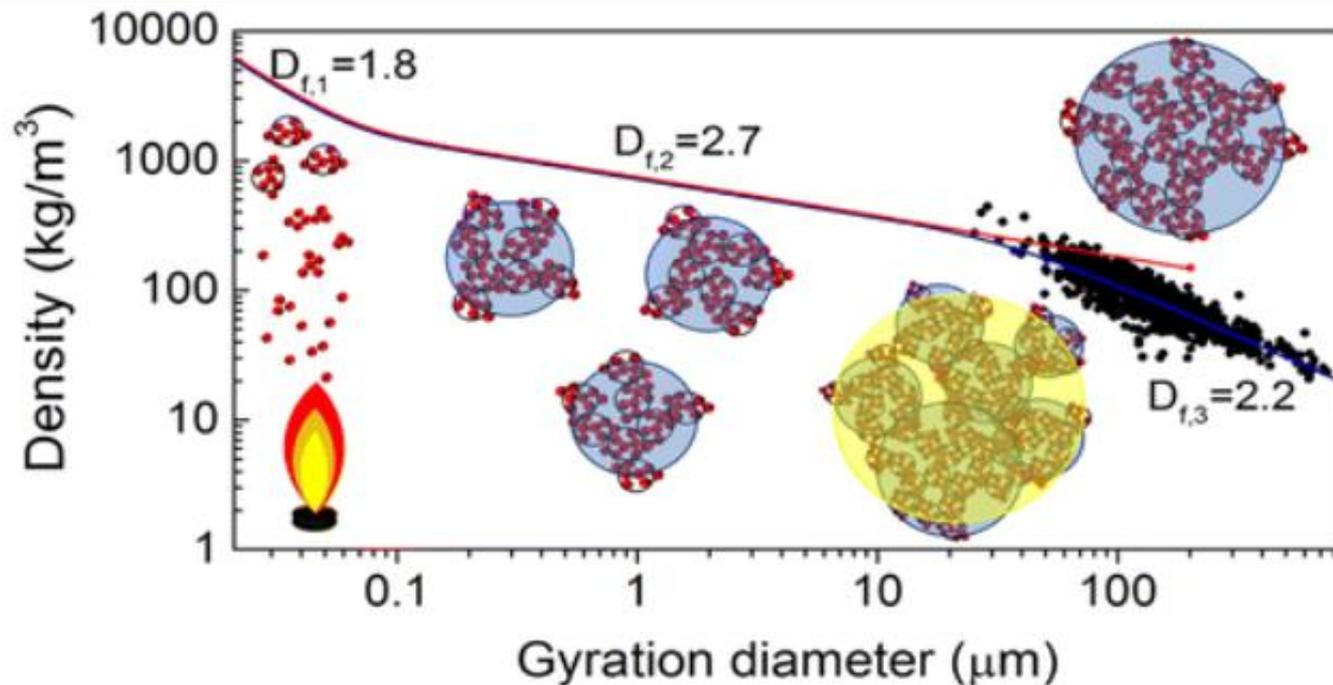
Корреляционная длина  $\xi$  как функция фрактальной размерности  $d$ .

Для конечного фрактала можно увидеть, что корреляционная длина уменьшается с уменьшением размерности фрактала.

Для экспериментов СЭМУРН это означает меньшее рассеяние и соответственно меньшая деполяризация для меньших размерностей.

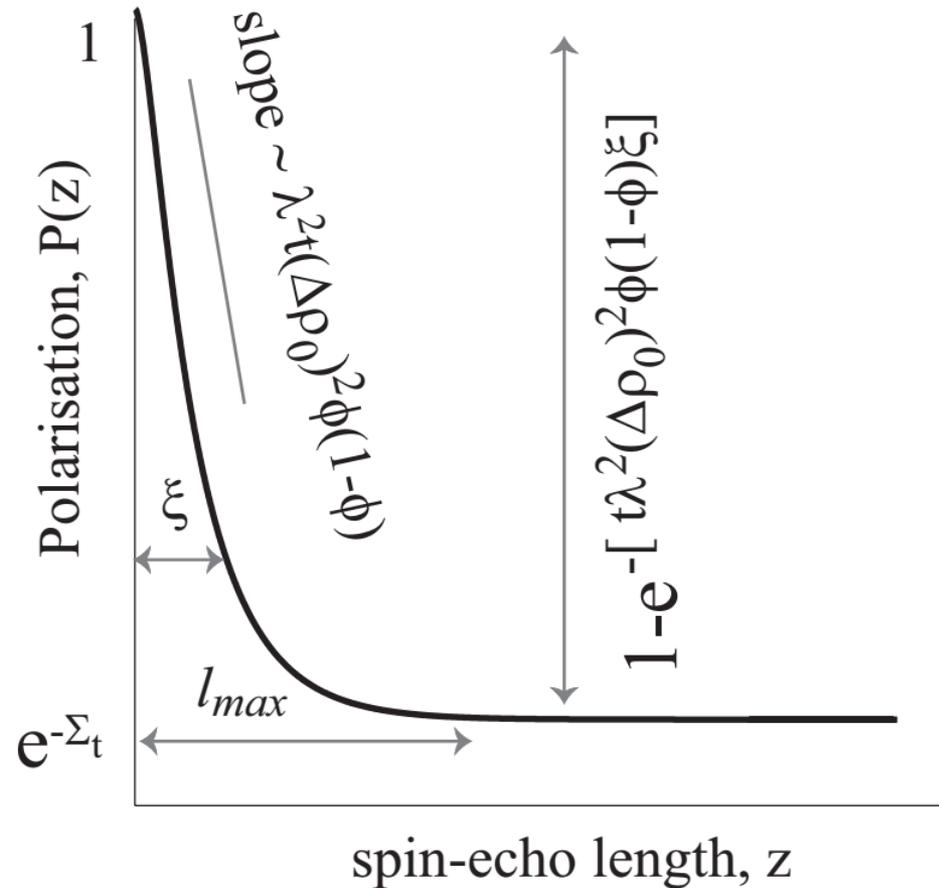
# Организация фрактальных кластеров

- Используя СЭМУРН можно измерить различную фрактальную организацию кластеров наночастиц в зависимости от размеров кластера.



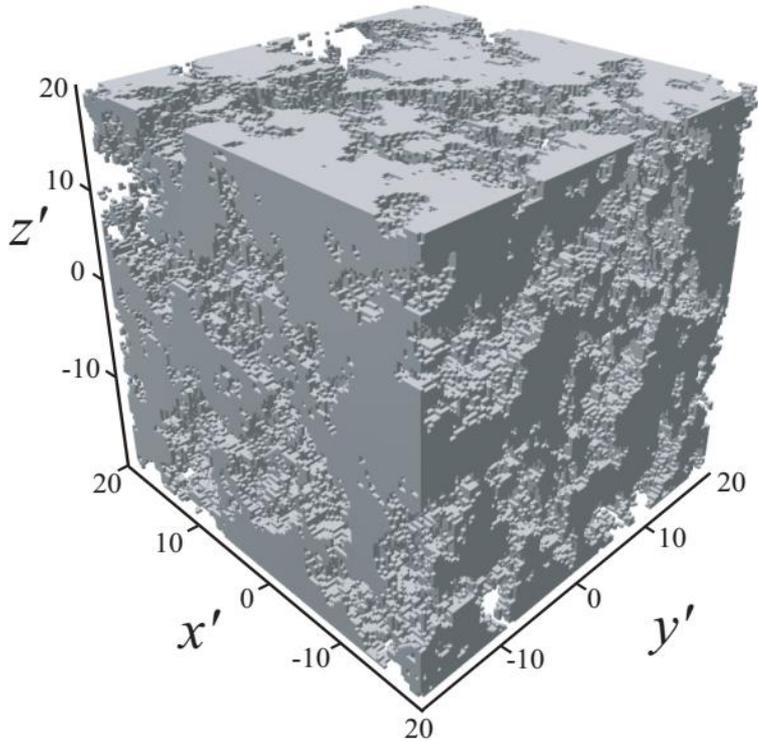
# Анизотропия

- Изотропия – все наклоны одинаковы для разных направлений.
- $l_{max}$  наибольший масштаб длины характеризующий распределение плотности.  $\xi$  - корреляционная длина распределения плотности и средний размер, описывающий микроструктуру.

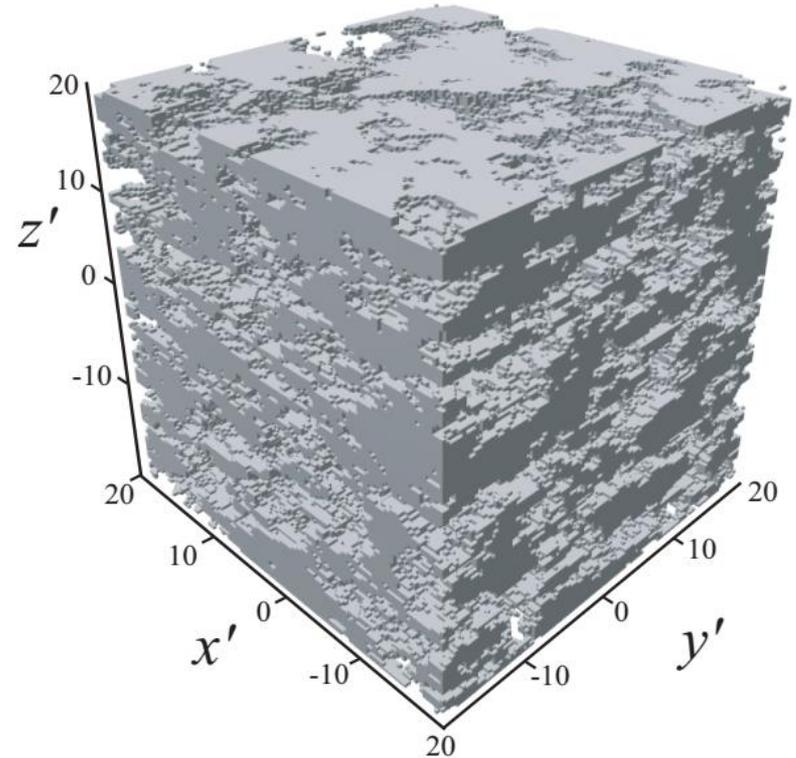


# Анизотропия

Изотропный



Анизотропный (вдоль  $z$ )



# Анизотропия

- Ортогональные проекции. Таким образом, ширина кривой  $G(z)$  характеризует одну корреляционную длину, когда  $z$  параллельно  $x'$  и когда  $z$  параллельно  $y'$  и другую, когда  $z$  параллельно  $z'$ .

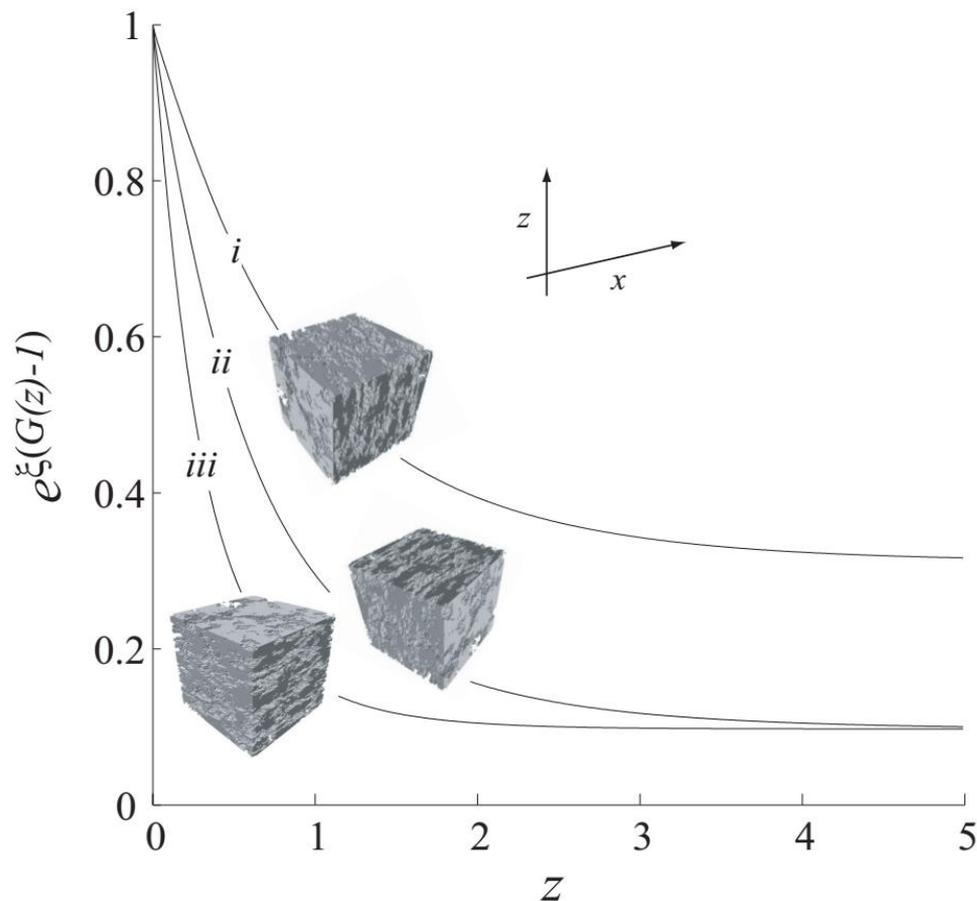


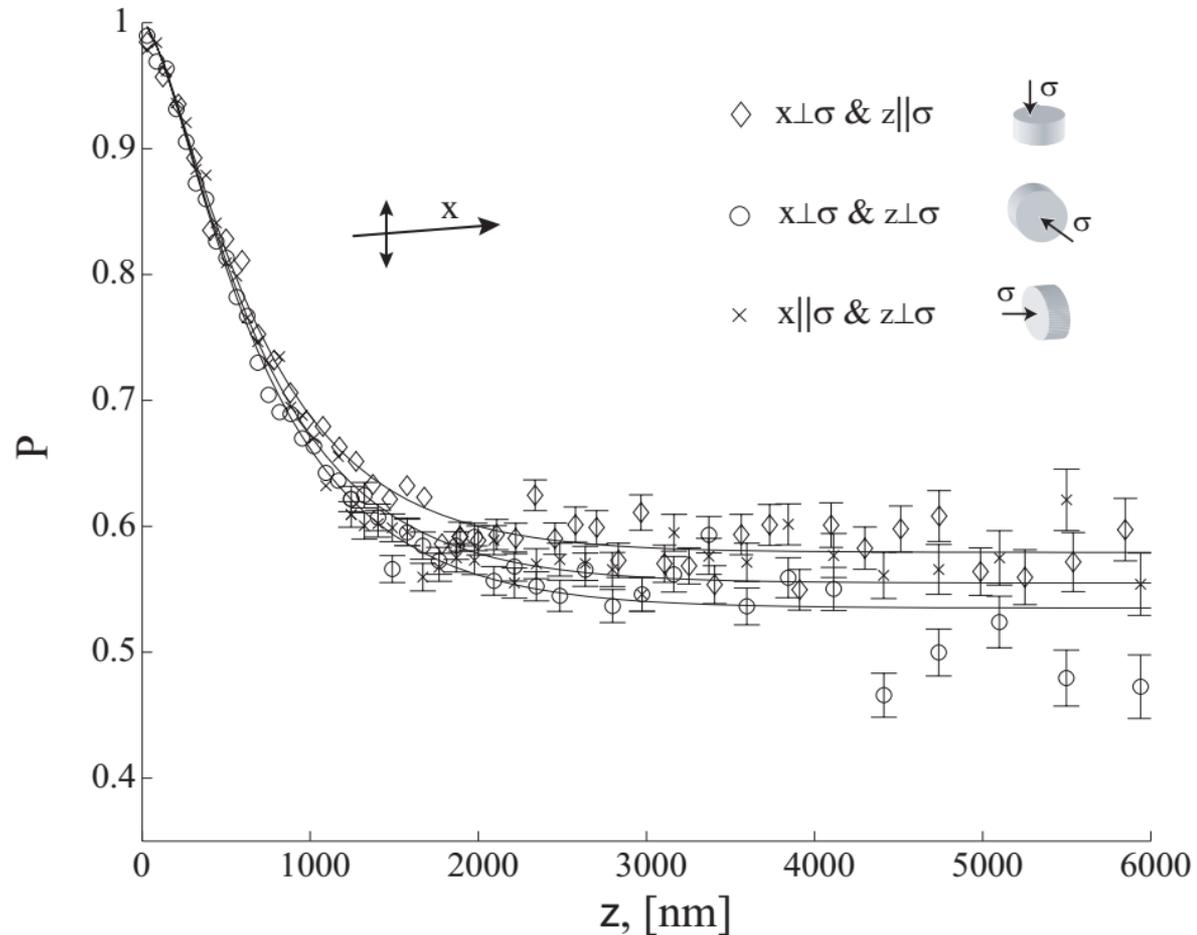
Figure 3.5: Numerical solution of Eq. (3.21) with  $d=2.8$ ,  $a_{x'}=a_{y'}=1$  and  $a_{z'}=0.5$ , illustrating how anisotropy manifests in a SESANS experiment. The  $(x, z)$  coordinate system represent the SESANS instrument coordinate system, where  $x$  is the neutron beam path and correlations are measured along  $z$ .

# Structure, anisotropy and fractals in compressed cohesive powders

- Образцы – Порошок кремния, состоящий из сферических гранул и порошок углеродных нанотрубок (оба порошка имеют фрактальную структуру)
- Распределение плотности  $\rho(r)$  флуктуирует (вокруг своего среднего значения). Эти флуктуации могут иметь некоторый характеристический размер (радиус частиц) и могут быть инвариантны относительно масштаба (фракталы), регулярны (кристаллиты), случайны. Все вместе это структура образца.

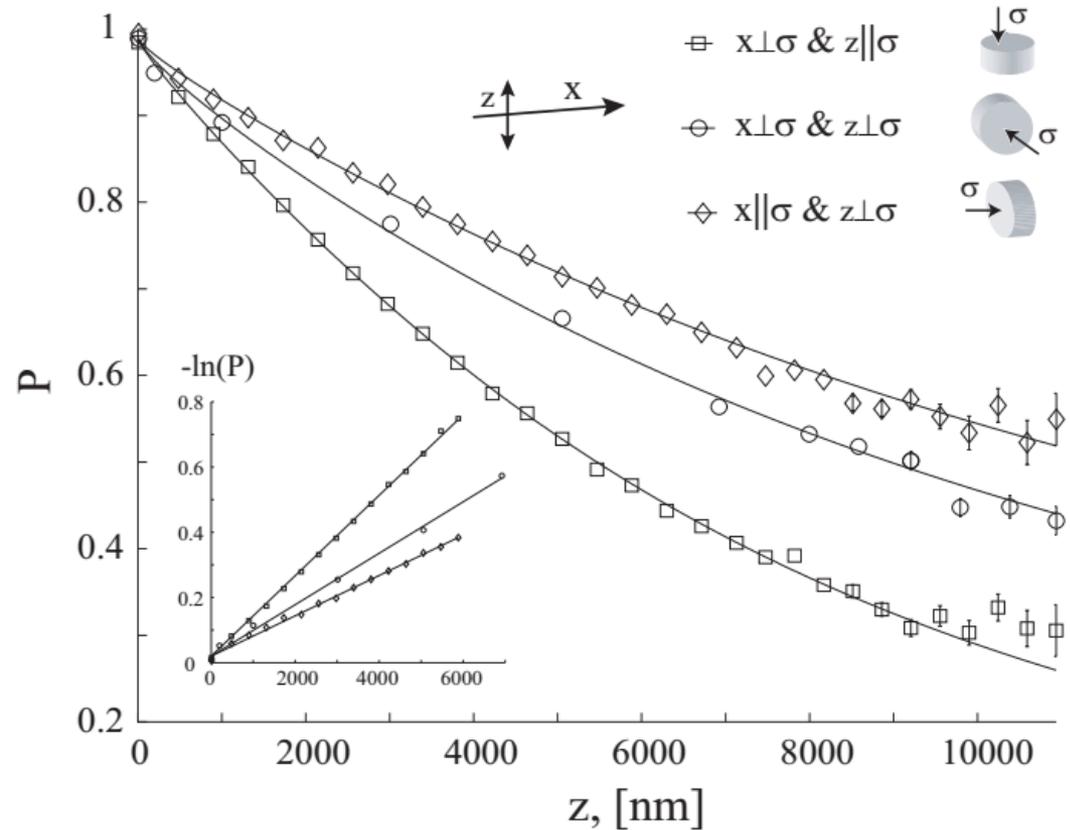
# Анизотропия. Пример

- Порошок кремния (сферические гранулы с размерами от  $3\mu\text{m}$ )
- Изотропный



# Анизотропия. Пример

- Порошок нанотрубок (трубки длиной 10-100nm, диаметром 1-2nm)
- Анизотропный



# Заключение

- СЭМУРН – сильный метод для изучения структуры вещества в прямом пространстве
- СЭМУРН может измерять неоднородности от 20nm до 20μm
- Фрактальные характеристики могут быть найдены при помощи СЭМУРН
- СЭМУРН может измерять анизотропию
- В экспериментах СЭМУРН можно проследить динамику образования фрактальных кластеров.



# Измерения в СЭМУРН

- Поляризация прошедшего пучка

$$P_m I_m = P_0 I_{ns} + P_s^* I_s:$$

$$P_s^* I_s = I_0 x \frac{1}{k_0^2} \int dQ_y dQ_z P_s(Q_z) \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q)$$

$$P_s(Q_z) = P_0 \cos(Q_z \delta)$$

$$P_m = P_0(1 - \sigma x) + P_0 x \left( \frac{1}{k_0} \right)^2 \times$$

$$\times \int dQ_y dQ_z \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \cos(Q_z \delta).$$



$$\frac{(P_m - P_0)}{P_0} \rightarrow \frac{dP}{P} =$$

$$= -dx \left[ \sigma - \frac{1}{k_0^2} \int dQ_y dQ_z \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \cos(Q_z \delta) \right],$$

# Измерения в СЭМУРН

- Поляризация

$$\begin{aligned} & \frac{(P_m - P_0)}{P_0} \rightarrow \frac{dP}{P} = \\ & = -dx \left[ \sigma - \frac{1}{k_0^2} \int dQ_y dQ_z \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \cos(Q_z \delta) \right], \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad \frac{P_m(l, \sigma)}{P_0} = \exp \{ -l\sigma [1 - G(\delta)] \}$$

- Корреляционная функция

$$\begin{aligned} G(\delta) &= \int dx \langle \rho(r) \rho(r + \delta) \rangle \\ &= \frac{1}{k_0^2} \int dQ_y dQ_z \frac{d\sigma}{d\Omega}(Q) \cos(Q_z \delta) \end{aligned}$$