

# Röntgen-Kleinwinkelstreuung von isotropen Proben ohne Fernordnung. I. Allgemeine Theorie

VON GREGOR DAMASCHUN UND HANS-VOLKER PÜRSCHHEL

Forschungszentrum für Molekularbiologie und Medizin der DAW zu Berlin, 1115 Berlin, Lindenberger Weg 70, Deutsche Demokratische Republik

(Eingegangen am 26. Mai 1969 und wiedereingereicht am 19. Januar 1970)

The spatial correlation function  $C(x)$  calculated with the aid of the scattered intensity  $\varphi(b)$  is assumed to be sufficiently convergent for  $X \geq L$ .  $L$  is the correlation range of the electron density. Then  $\varphi(b)$  and  $C(x)$  may be replaced by a trigonometrical progression  $\varphi_k = \varphi(k/2X)$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ , where  $X$  is the upper limit of integration of the Fourier representation of  $\varphi(b)$ .  $C(x)$  may be determined from  $\varphi_k$  with the aid of a summation formula. For the non-measurable limit of the scattered intensity at zero angle  $\varphi(0)$  there exists a mathematical representation by the other values  $\varphi_k$ . The moments  $C_n$  of  $C(x)$  are also determined by the  $\varphi_k$ , particularly the radius of gyration and some characteristic quantities are given by rapidly convergent series.

## Einführung

Die bei Röntgen-Streuxperimenten an isotropen Proben gewonnene, auf die Streuung eines freien Elektrons bezogene Intensitätskurve  $I(b)$  wird nach Berücksichtigung verschiedener Korrekturen mit Hilfe des Fourier-Integraltheorems transformiert

$$I(b) = \frac{2}{b} \times \int_0^\infty Q(x) x \sin(2\pi b x) dx, \quad (1)$$

$$Q(x) = \frac{2}{x} \times \int_0^\infty I(b) b \sin(2\pi b x) db, \quad (2)$$

$b = 2\lambda^{-1} \sin \theta$ ,  $x$  – Ortskoordinate,  $\theta$  – Bragg'scher Winkel. Die Funktion  $Q(x)$  ist nach Hosemann & Bagchi (1962) das räumlich gemittelte Faltungsquadrat der Elektronendichte  $\varrho(\mathbf{x})$  der untersuchten Probe. Je nach dem Anwendungsbereich der Streutheorie – Flüssigkeitsstreuung, Röntgen-Kleinwinkelstreuung (RKWS) u.a. – wird die Funktion  $Q(x)$  unter Benutzung von Näherungen in verschiedene Teile zerlegt. Diese Problematik ist eingehend bei Hosemann & Bagchi diskutiert.

In die Theorie der RKWS wurde von Debye & Bueche (1949), Debye, Anderson & Brumberger (1957) und von Porod (1951a,b) die in der allgemeinen  $Q$ -Funktion enthaltene Korrelationsfunktion

$$C(x) = \frac{\langle \eta_A \cdot \eta_B \rangle}{\langle \eta^2 \rangle} \quad (3)$$

$$C(x) = \lim_{v \rightarrow \infty} \left\langle \frac{\frac{1}{v} \int_v \eta(\mathbf{x}') \eta(\mathbf{x}' - \mathbf{x}) dv'}{\frac{1}{v} \int_v \eta^2(\mathbf{x}') dv'} \right\rangle \quad (3a)$$

eingeführt.  $\eta_A$  und  $\eta_B$  sind die Abweichungen der lokalen Elektronendichte in den Punkten  $A$  und  $B$  von der mittleren Elektronendichte  $\langle \varrho \rangle$  der Probe.  $A$  und  $B$  haben den Abstand  $x$  voneinander, die Mittlung er-

folgt über alle Lagen von  $A$  und  $B$ . Es gilt

$$\varrho(\mathbf{x}) = \langle \varrho \rangle + \eta(\mathbf{x}) \quad \text{mit} \quad \langle \eta \rangle = 0. \quad (4)$$

Da die  $Q$ -Funktion nach Hosemann & Bagchi (1962) als Faltungsquadrat der Elektronendichtefunktion

$$Q(\mathbf{x}) = \varrho(\mathbf{x}) * \varrho(\mathbf{x}) = \int \varrho(\mathbf{y}) \varrho(\mathbf{x} + \mathbf{y}) d\mathbf{y}$$

definiert ist, folgt nach Hosemann (1969) für das Faltungsquadrat der  $\eta$ -Funktion

$$\eta(\mathbf{x}) * \eta(-\mathbf{x}) = Q(\mathbf{x}) - \langle \varrho \rangle * \langle \varrho \rangle.$$

Zwischen  $I(b)$  und  $C(x)$  besteht nach Guinier & Fournet (1955) der Zusammenhang

$$I(b) = \langle \eta^2 \rangle V \int_0^\infty 4\pi x^2 C(x) \frac{\sin(2\pi b x)}{2\pi b x} dx, \quad (5)$$

wobei

$$\langle \eta^2 \rangle = \langle \varrho^2 \rangle - \langle \varrho \rangle^2 \quad (6)$$

und  $V$  das streuende Volumen ist.

Bei sehr verdünnten monodispersen Systemen von regellos angeordneten Partikeln mit konstanter Überschusselektronendichte  $\eta_0$  im Innern gilt speziell (Guinier & Fournet, 1955)

$$I(b) = N \eta_0^2 v_c \int_0^L 4\pi x^2 C_0(x) \frac{\sin(2\pi b x)}{2\pi b x} dx \quad (7a)$$

$$= Nz^2 \Phi(b), \quad (7b)$$

wobei  $N$  die Anzahl der streuenden Partikeln,  $v_c$  das Volumen einer Partikel und  $L$  ihr grösster Durchmesser ist.  $\Phi(b)$  ist die durch  $\Phi(0) = 1$  normierte Streukurve und  $z$  die Anzahl der Überschusselektronen einer Partikel.  $C_0(x)$  ist in diesem Fall eine charakteristische Funktion einer Partikel

$$C_0(x) = C(x) = \frac{\langle s(\mathbf{x}) * s(\mathbf{x}) \rangle}{v_c}, \quad (8)$$

$s(x)$  ist die Ewaldsche Gestaltsfunktion einer Partikel (Hosemann & Bagchi, 1962).

Besteht in der untersuchten Probe keine Fernordnung wird die Funktion  $C(x)$  mit wachsendem  $x$  immer kleiner. Die experimentell ermittelten Funktionen  $C(x)$  bzw.  $Q(x)$  können unter der Voraussetzung, dass sie hinreichend schnell gegen Null konvergieren schliesslich auf Grund der unvermeidlichen Fehler bei der Registrierung der Streukurve für alle Werte  $x > L$  innerhalb der Messgenauigkeit nicht mehr von Null bzw. einem konstanten Endwert unterschieden werden. Für die Funktion  $C_0(x)$  (8) gilt streng

$$C_0(x) \equiv 0 \text{ für } x \geq L, \quad (9)$$

wenn  $L$  der grösste Durchmesser der Partikeln ist.

Unter Umständen ist es möglich, vor der Durchführung oder vor der Auswertung eines Streuexperimentes eine Schranke  $X$  für die Strecke  $L$  anzugeben, für die gilt

$$X \geq L. \quad (10)$$

Kennt man eine solche Schranke  $X$  für  $L$ , können die Fourierintegrale (1, 2, 5, 7) und alle aus ihnen abgeleiteten Beziehungen durch sehr einfach zu handhabende Summenformeln ersetzt werden.

Die sich hieraus ergebenden Konsequenzen für die Planung von Messungen und ihre Auswertung werden im folgenden am Beispiel der RKWS isotroper Proben erläutert. Wir möchten aber betonen, dass sich ein Teil der angegebenen Beziehungen sinngemäss für die Streuung beliebiger isotroper Proben übertragen lässt, ihre Gültigkeit also nicht auf den diskutierten Fall der RKWS beschränkt ist.

### Theoretische Grundlagen

#### Die Korrelationsfunktion

Der Zusammenhang zwischen der normierten Streukurve  $\varphi(b)$  und der Korrelationsfunktion  $C(x)$  ist bei isotropen Systemen durch die folgende Gleichung gegeben,

$$b\varphi(b) = 2 \int_0^{\infty} xC(x) \sin(2\pi bx) dx, \quad (11)$$

wobei  $\varphi(0) = v_c$  ist. Nach dem Fourier-Integraltheorem ist

$$xC(x) = 2 \int_0^{\infty} b\varphi(b) \sin(2\pi bx) db \quad (12)$$

das Spektrum der Funktion  $b\varphi(b)$ .

Die Funktion  $C(x)$  habe die Eigenschaft  $C(x) \equiv 0$  für  $x \geq L$ . Ferner sei ein Wert bekannt, für den gilt  $X \geq L$ . Denkt man sich den Verlauf von  $xC(x)$  entsprechend Fig. 1 periodisch fortgesetzt, so lässt sich  $xC(x)$  durch die Fourier-Reihe

$$xC(x) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k \sin\left(k\pi \frac{x}{X}\right) \quad (13)$$

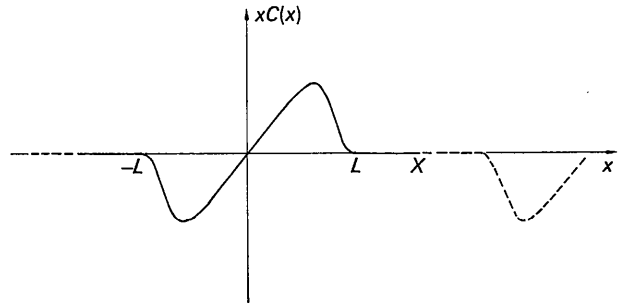


Fig. 1. Periodische Fortsetzung der Funktion  $xC(x)$ ;  $L$  - Korrelationsreichweite,  $X$  - beliebige Strecke für deren Länge  $X \geq L$  gilt.

mit den Koeffizienten

$$g_k = \frac{2}{X} \int_0^X xC(x) \sin\left(k\pi \frac{x}{X}\right) dx \quad (14)$$

darstellen. Ein Vergleich der Gleichungen (14) und (11) zeigt, dass die Fourier-Koeffizienten  $g_k$  durch die Werte der Funktion  $\varphi_k = \varphi(b_k)$  an den diskreten Probenpunkten  $b_k = k/2X$  bestimmt werden:

$$g_k = \frac{k}{2X^2} \varphi\left(\frac{k}{2X}\right) = \frac{k}{2X^2} \varphi_k, \quad k = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (15)$$

Für die Korrelationsfunktion  $C(x)$  erhält man durch Einsetzen von (15) in (13),

$$C(x) = \frac{1}{2X^2} \sum_{k=1}^{\infty} k\varphi\left(\frac{k}{2X}\right) \frac{\sin(k\pi x/X)}{x}, \quad (16)$$

eine Darstellung durch die Werte der Streufunktion  $\varphi$  an den Probenpunkten  $b_k$ . Da die Funktion  $xC(x)$  bei physikalisch realen Verläufen von  $\eta(x)$  den Dirichlet'schen Bedingungen (Bronstein & Semendjajew 1959) genügt, gibt die Gleichung (16) den Verlauf der Korrelationsfunktion im Intervall  $[L - 2X, 2X - L]$  mathematisch streng wieder, sofern nur  $X \geq L$  gewählt wurde. Liegt  $X$  dagegen im Intervall  $(0, L)$ , wird der Verlauf von  $C(x)$  nur im Intervall  $[-X, +X]$  richtig beschrieben. Bemerkenswert an Gleichung (16) ist, dass der ohnehin nicht messbare Wert  $\varphi(0)$  nicht auftritt (s.u.).

#### Die Streukurve

Die in Gleichung (16) auftretende Streufunktion  $\varphi(b)$  hängt mit der in relativen Einheiten, z.B. in Impulsen pro Zeiteinheit oder in Schwärzungswerten, gemessenen Streufunktion  $S(b)$  (Signalfunktion) wie folgt zusammen:

$$S(b) = \gamma\varphi(b). \quad (17)$$

Für den Fall der RKWS ist der Faktor  $\gamma$  nach Hosemann & Bagchi (1962) im allgemeinen praktisch konstant, d.h. nicht von  $b$  abhängig. Man erhält demnach aus (16) die Korrelationsfunktion zunächst bis auf diesen Faktor:

$$\gamma C(x) = \frac{1}{2X^2} \sum_{k=1}^{\infty} kS\left(\frac{k}{2X}\right) \frac{\sin(k\pi x/X)}{x}. \quad (18)$$

Verwendet man die definitionsgemäss geltende Bedingung (3)

$$C(0) = 1, \quad (19)$$

so lässt sich dieser Faktor aus der Signalfunktion berechnen:

$$\gamma = \frac{\pi}{2X^3} \sum_{k=1}^{\infty} S_k k^2. \quad (20)$$

Der Summenausdruck (20) entspricht der Porodschen Invarianten (Porod, 1951), mit seiner Hilfe kann  $\gamma$  in (18) eliminiert werden.

Nach den Gleichungen (16) und (11) ist unter den obigen Voraussetzungen der gesamte Verlauf der normierten Streukurve  $\varphi(b)$  durch deren Werte  $\varphi_k$  an den diskreten Punkten  $b_k$  vollständig bestimmt:

$$\begin{aligned} \varphi(b) = & \frac{1}{2bX} \sum_{k=1}^{\infty} k \varphi_k \\ & \times \left[ \frac{\sin(k\pi - 2bX)}{k\pi - 2bX} - \frac{\sin(k\pi + 2bX)}{k\pi + 2bX} \right]. \quad (21) \end{aligned}$$

Wiederum unter der zusätzlichen Voraussetzung  $\gamma = \text{const.}$  erhält man unter Anwendung der Additionstheoreme für trigonometrische Funktionen

$$S(b) = 2 \frac{\sin(2\pi bX)}{2\pi bX} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \frac{1}{1 - (2bX/k)^2} S_k, \quad (22)$$

und daraus für den Wert der Signalfunktion beim Winkel  $b=0$  den Wert

$$S(0) = 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} S_k. \quad (23)$$

Der Wert  $S(0)$  bzw.  $\varphi(0)$  ist also eindeutig durch alle übrigen  $S_k$  bzw.  $\varphi_k$  festgelegt (s.o.).

### Die Momente der Korrelationsfunktion

#### Charakteristische Parameter

Das  $n$ -te Moment  $C_n$  der Korrelationsfunktion  $C(x)$  wird durch den Ausdruck

$$\begin{aligned} C_n &= \int_0^{\infty} x^n C(x) dx \\ &= \int_0^L x^n C(x) dx = \int_0^X x^n C(x) dx \quad (24) \end{aligned}$$

definiert. Die  $C_n$  sind aus RKWS-Diagrammen weitgehend hypothesenfrei berechenbare Grössen. Für die Existenz der Momente  $C_n$  ist das Fehlen einer Fernordnung in der bezüglich ihres Streudiagrammes isotropen Probe Voraussetzung. Die Funktion  $C(x)$  muss mit wachsendem  $x$  so schnell gegen Null konvergieren, dass die Integrale (24) einen endlichen Wert besitzen. Die Momente  $C_n$  sind Parameter der Probe, d.h. sie beschreiben Eigenschaften der Funktionen  $\eta(x)$  und  $C(x)$ . Bei einer reinen Partikelstreuung sind die Momente  $C_n$  Parameter der streuenden Partikeln. Durch die Bildung dimensionsloser Koeffizienten aus

Potenzen verschiedener  $C_n$  erhält man dimensionslose Formfaktoren, die eine gegenüber Ähnlichkeitstransformationen invariante Beschreibung der streuenden Substanz ermöglichen.

Nach Damaschun & Pürschel (1968), Damaschun, Müller, Pürschel & Sommer (1969), Damaschun & Pürschel (1969), Damaschun, Pürschel & Sommer (1969) lassen sich aus den Momenten  $C_n$  die von Debye, Anderson & Brumberger (1957) und von Porod (1951a,b) für Zweiphasensysteme eingeführten Parameter Korrelationslänge  $l_c$ , Korrelationsfläche  $f_c$  und Korrelationsvolumen  $v_c$  und die Momente der Sehnenverteilungsdichte (intersect distribution function) bestimmen;

$$l_c = 2C_0, \quad (25)$$

$$f_c = 2\pi C_1, \quad (26)$$

$$v_c = 4\pi C_2. \quad (27)$$

Bei dichtgepackten Systemen von Partikeln mit konstanter Elektronendichte im Innern mit messbaren interpartikulären Interferenzen kennzeichnen diese Parameter nicht nur die Partikeln, ihr Wert wird durch die wechselseitige Anordnung der Partikeln bestimmt.

Das Gleiche gilt für die Parameter Streumassenradius  $R_{sc}$  und mittlerer Elektronenabstand  $\bar{a}_c$  (Damaschun & Pürschel, 1969), die mit den  $C_n$  durch die Gleichungen

$$\bar{a}_c = \frac{C_3}{C_2}, \quad (28)$$

$$R_{sc}^2 = \frac{C_4}{2C_2} \quad (29)$$

verknüpft sind. Bei monodispersen verdünnten Systemen von Partikeln mit konstanter Elektronendichte im Innern bei denen die interpartikulären Interferenzen entweder vernachlässigbar sind oder durch Messungen bei verschiedenen Partikelkonzentrationen eliminiert werden, sind die  $C_n$  und damit die durch die Gleichungen (25)–(29) definierten Parameter Masse für die Form und die Abmessungen der Partikel. Bei verdünnten monodispersen Systemen von Partikeln mit nicht konstanter Elektronendichte im Innern hängen die  $C_n$  von den Abmessungen, der Form und vom Verlauf der Funktion  $\eta(x)$  im Innern der Partikel ab. Durch eine nicht konstante Elektronendichte im Innern von Partikeln und durch interpartikuläre Interferenzen können beispielsweise Korrelationslängen des Betrages Null oder imaginäre Streumassenradien auftreten, obwohl die Partikeln endliche Abmessungen besitzen. Bei verdünnten monodispersen Systemen streuender Partikeln erhält man den grössten Durchmesser der Partikeln durch den Grenzübergang

$$L = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{|C_{n-1}|}. \quad (30)$$

Wie im nächsten Abschnitt gezeigt werden wird, lassen sich die Momente  $C_n$  in einfacher Weise aus diskreten

Werten  $S(b_k)$  der Streufunktion berechnen. Falls für die streuende Probe ein Modell mit endlich vielen freien Parametern  $p_i$  aufgestellt werden kann, z.B. Form und Abmessungen der Partikel, Massenverteilungsfunktion, Abstandsverteilungsfunktion von vorgegebenem mathematischem Typ oder ähnliches, lassen sich diese Parameter  $p_i$  aus dem Gleichungssystem

$$C_n \text{ exp} = f_n(p_i), \quad n \geq i \quad (31)$$

bestimmen. Für die Bestimmung von Partikelform und Partikelabmessungen bei monodispersen verdünnten Systemen haben Damaschun, Pürschel & Sommer (1969) ein derartiges Verfahren beschrieben.

#### Berechnung der Momente $C_n$

Durch Ausführen der Integration (24) in der Gleichung (16) erhält man für die Momente  $C_n$  der Korrelationsfunktion  $C(x)$  folgende Summendarstellungen, mit deren Hilfe sie direkt aus der Streukurve berechnet werden können.

$$C_n = \frac{X^{n-2}}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k \alpha_{nk} \quad (32)$$

mit

$$\alpha_{0k} = k\pi Si(k\pi) \quad (33)$$

$$\alpha_{1k} = 1 - (-1)^k \quad (34)$$

$$\alpha_{2k} = (-1)^{k-1} \quad (35)$$

$$\alpha_{nk} = (-1)^{k-1} - \beta_{nk} \quad \text{für } n \geq 3. \quad (36)$$

Es bedeutet dabei

$$\beta_{nk} = \sum_{m=1}^{\lfloor \frac{n-3}{2} \rfloor} (-1)^{k+m} \frac{(n-1)(n-2)\dots(n-2m)}{(k\pi)^{2m}} + [1 - (-1)^k] (-1)^{(n-3)/2} \frac{(n-1)!}{(k\pi)^{n-1}}$$

für  $n \geq 3$  und  $n$  ungerade,

$$\beta_{nk} = \sum_{m=1}^{\frac{n-2}{2}} (-1)^{k+m} \frac{(n-1)(n-2)\dots(n-2m)}{(k\pi)^{2m}}$$

für  $n \geq 4$  und  $n$  gerade.

Aus der in relativen Einheiten gemessenen Signalfunktion  $S(b)$  ergeben sich die Momente  $C_n$  bei Berechnung nach der Gleichung (32) zunächst bis auf den konstanten Faktor

$$\gamma C_n = \frac{X^{n-2}}{2\pi} \sum_{k=1}^{\infty} S_k \cdot \alpha_{nk}. \quad (37)$$

$\gamma$  ist mit Gleichung (20) eliminierbar, man erhält damit für die Momente

$$C_n = \frac{X^{n+1}}{\pi^2} \cdot \frac{\sum_{k=1}^{\infty} S_k \alpha_{nk}}{\sum_{k=1}^{\infty} S_k k^2}. \quad (38)$$

Unter Umständen ist es für den Fall  $n \geq 3$  vorteilhafter, statt der Momente  $C_n$  selbst, die Verhältnisse

$C_n/C_2$  zu betrachten. Dies wird bereits durch einen Vergleich der Koeffizienten  $\alpha_{nk}$  und  $\alpha_{2k}$  nahegelegt. Man erhält unter Beachtung von Gleichung (19)

$$\frac{C_n}{C_2} = X^{n-2} \left[ 1 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} S_k \beta_{nk} / S(0) \right]. \quad (39)$$

Für die beiden Größen mittlerer Elektronenabstand  $\bar{a}_c$  und Streumassenradius  $R_{sc}$  gilt nach den Gleichungen (26–30) speziell

$$\bar{a}_c = \frac{C_3}{C_2} \quad (40)$$

und

$$2R_{sc}^2 = \frac{C_4}{C_2}. \quad (41)$$

#### Beziehungen zwischen den Momenten $C_n$

Entwickelt man in Gleichung (11) die Funktion  $\sin(hx)$ ,  $h=2\pi b$ , in eine Taylorreihe, erhält man nach Porod (1948) eine Darstellung der Streukurve  $\varphi(h)$  durch die geraden Momente  $C_{2n}$  der Korrelationsfunktion  $C(x)$

$$\varphi(h) = 4\pi \sum_{v=1}^{\infty} \frac{(-1)^{v-1}}{(2v-1)!} h^{2v-2} C_{2v}. \quad (42)$$

Die spaltverschmierte Streukurve  $\bar{\varphi}(h)$ ,

$$\bar{\varphi}(h) = 2 \int_0^{\infty} \varphi(\sqrt{h^2 + t^2}) dt, \quad (43)$$

kann man nach Damaschun & Pürschel (1969) durch eine Reihenentwicklung mittels der ungeraden Momente  $C_{2n+1}$  darstellen

$$\bar{\varphi}(h) = \pi^2 \sum_{v=0}^{\infty} \frac{(-1)^v}{2^{2v-2}(v!)^2} h^{2v} C_{2v+1}. \quad (44)$$

Aus einem Vergleich von (42) und (44) folgt unter Beachtung von (43), dass die geraden und ungeraden Momente  $C_n$  nicht unabhängig voneinander sein können. Die zwischen ihnen bestehende Beziehung erhält man durch Aufschreiben der Ausdrücke für die Probenpunkte  $h_k = \pi k / X$ :

$$C_n = 2X^{n-2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{v=1}^{\infty} (-1)^{v-1} \frac{(2\pi)^{(2v-2)}}{(2v-1)!} \times \alpha_{nk} \left( \frac{k}{2X} \right)^{(2v-2)} C_{2v}. \quad (45)$$

Sämtliche Momente  $C_n$  können mittels (45) durch die geraden Momente  $C_{2n}$  dargestellt werden.

#### Diskussion und Zusammenfassung

Falls die aus experimentellen Werten der normierten Streufunktion  $\varphi(b)$  mittels Gleichung (12) berechnete Korrelationsfunktion  $C(x)$ , die prinzipiell immer fehlerbehaftet ist, mit wachsendem  $x$  einen hinreichend stark abfallenden asymptotischen Verlauf gegen den Wert Null hat, so kann sie für alle Werte  $x \geq L$  nicht

mehr von Null unterschieden werden. Diese Bedingung ist streng erfüllt, falls die Annahmen zutreffen, die üblicherweise (Siehe Guinier & Fournet, 1955) bei der Untersuchung der RKWS von sehr verdünnten Systemen regellos angeordneter Einzelobjekte gemacht werden. Sie kann aber darüber hinaus auch bei der Untersuchung 'dicht gepackter' isotroper Systeme ohne Fernordnung zutreffen.

Ist ferner vor der Untersuchung eine Schranke  $X$  für die Korrelationsreichweite  $L$  bekannt, für die nur  $X \geq L$  zu gelten braucht, so können die beiden aus dem Fourier-Integraltheorem abgeleiteten Grundgleichungen (11, 12) der Theorie der RKWS isotroper Systeme (Debye *et al.*, 1957; Porod, 1951; Guinier & Fournet, 1966; Hosemann & Bagchi, 1962; Luzzati, 1963) durch die Gleichungen

$$\varphi\left(\frac{k}{2X}\right) = \frac{4X}{k} \int_0^X x C(x) \sin\left(k\pi \frac{x}{X}\right) dx, \quad (15)$$

$$C(x) = \frac{1}{2X^2} \sum_{k=1}^{\infty} k \cdot \varphi\left(\frac{k}{2X}\right) \frac{\sin(k\pi x/X)}{x}, \quad (16)$$

$k=1, 2, 3, 4, \dots$

$$C(x) \equiv 0 \text{ für } x \geq L$$

und

$$X \geq L,$$

ersetzt werden.

Der Verlauf der Streukurve ist vollständig durch die Werte  $S_k = S(k/2X)$ ,  $k=1, 2, 3, 4, \dots$ , bestimmt. Zwischenwerte können eindeutig mit Hilfe der Interpolationsformeln (21, 22) berechnet werden. Dieser Sachverhalt ist ein Spezialfall des Sampling-Theorems in der Informationstheorie (Siehe Brillouin, 1956).

Aus den Gleichungen (15, 16) werden Beziehungen abgeleitet, die Analoga in entsprechenden Integralbeziehungen haben; z.B. entspricht Gleichung (20) der sogenannten Invariante der Streukurve von Porod (1951) oder Gleichung (16) ersetzt die Gleichung (12) bei der Berechnung der Korrelationsfunktion.

Darüber hinaus können jedoch auch streng gültige Relationen zur Bestimmung weiterer Grössen aus der

Streukurve angegeben werden – z.B. für den Wert  $S(0)$  (23) und für den Streumassenradius  $R_s$  (41) – die bisher mit Hilfe von Näherungsbeziehungen, insbesondere mit Hilfe der Guinierschen Näherung (Siehe Hosemann & Bagchi, 1962), aus der Streukurve bestimmt wurden.

Für ausführliche Diskussionen und ihre Hilfe bei der Kontrolle von Rechnungen möchten wir den Herren J. J. Müller, J. Polster und G. Sommer aus Jena herzlichst danken. Herrn Prof. Hosemann und Herrn Dr Wilke vom Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin danken wir für ihre Ratschläge, Hinweise und Diskussionen, die uns viele Anregungen gegeben haben.

#### Literatur

- BRILLOUIN, L. (1956). *Science and Information Theory*. New York, London: Academic Press.
- BRONSTEIN, I. N. & SEMENDJAJEW, K. A. (1959). *Taschenbuch der Mathematik*. Leipzig: B. G. Teubner Verlagsgesellschaft.
- DAMASCHUN, G., MÜLLER, J. J., PÜRSCHEL, H.-V. & SOMMER, G. (1969). *Mh. Chem.* **100**, 1701.
- DAMASCHUN, G. & PÜRSCHEL, H.-V. (1968). *Acta biol. med. germ.* **21**, 401.
- DAMASCHUN, G. & PÜRSCHEL, H.-V. (1969). *Mh. Chem.* **100**, 510.
- DAMASCHUN, G., PÜRSCHEL, H.-V. & SOMMER, G. (1969). *Acta Cryst.* **A25**, 708.
- DEBYE, P., ANDERSON, H. R. & BRUMBERGER, H. (1957). *J. Appl. Phys.* **28**, 679.
- DEBYE, P. & BUECHE, A. M. (1949). *J. Appl. Phys.* **20**, 518.
- GUINIER, A. & FOURNET, G. (1955). *Small-Angle Scattering of X-rays*. New York: John Wiley.
- HOSEMANN, R. & BAGCHI, S. N. (1962). *Direct Analysis of Diffraction by Matter*. Amsterdam: North-Holland Publishing Co.
- HOSEMANN, R. (1969). Persönliche Mitteilung.
- LUZZATI, V. (1963). In *X-ray Optics and Microanalysis*. 133 ff., New York, London: Academic Press.
- POROD, G. (1948). *Acta Phys. Austr.* **2**, 255.
- POROD, G. (1951a). *Kolloid-Z. u. Z. Polymere* **124**, 83;
- POROD, G. (1951b). *Kolloid-Z. u. Z. Polymere* **125**, 51.