

ется извлечение из наблюдаемой зависимости $I(\mathbf{x})$ сведений о ф-ции $\rho(r)$, описывающей исследуемую структуру.

Кристаллы. Кристаллы обладают периодич. атомной структурой. Положение атома в кристалле может быть задано вектором $r_{Nj} = \mathbf{p}_j + t_N$, где \mathbf{p}_j указывает на положение j -го атома в N -й элементарной ячейке, а t_N — задаёт положение N -й ячейки в кристалле. Плотность амплитуды рассеяния:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{Nj} b_{jN} \delta(\mathbf{r} - r_{Nj}),$$

где b_{jN} характеризует вероятность рассеяния нейтрона каждым ядром, а δ -функция указывает положение ядра. Суммирование ведётся по всем атомам кристалла. Величины b определяются на кристаллах с известной структурой или методами *нейтронной оптики*. Значение b установлево для 150 (из 276) стабильных нуклидов, в т. ч. практически для всех нуклидов первой половины периодич. системы элементов.

Интенсивность пучка рассеянных нейтронов пропорц. дифференц. сечению рассеяния, к-рое для одной элементарной ячейки кристалла имеет вид:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left| \sum_j b_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}_j) \right|^2 \frac{(2\pi)^3}{V_c} \delta(\mathbf{x} - 2\pi\mathbf{H}). \quad (2)$$

Здесь V_c — объём элементарной ячейки, \mathbf{H} — вектор *обратной решётки*, задаваемой с помощью *индексов кристаллографических* (h, k, l). Дельта — ф-ция в (2) показывает, что рассеяние нейтронов будет наблюдаться в виде узких дифракц. максимумов интенсивности (рефлексов) при $\mathbf{x} = 2\pi\mathbf{H}$, т. е. при выполнении *Брэгга — Вульфа условия*. Множество векторов $\mathbf{H}(h, k, l)$ задано трансляц. симметрией кристалла, поэтому по совокупности векторов \mathbf{H} , для к-рых наблюдаются дифракц. максимумы, можно определить размеры и симметрию элементарной ячейки.

Комплексная величина $F(\mathbf{x}) = \sum_j b_j \exp(i\mathbf{k}\mathbf{p}_j)$ наз. *структурной амплитудой*. Т. к. $\mathbf{x} = 2\pi\mathbf{H}$, то $F(\mathbf{x}) = F(h, k, l) = F(\mathbf{H})$. Квадрат модуля $|F(\mathbf{x})|^2$ определяет интенсивность дифракц. максимума, к-рая, т. о., зависит от совокупности $\{b_j, \mathbf{p}_j\}$, полностью описывающих структуру элементарной ячейки. Восстановление сорта ядер (b_j) и их расположения в элементарной ячейке (\mathbf{p}_j) производится по совокупности измеренных значений $F(\mathbf{H})$ с помощью обратного преобразования Фурье (фурье-синтеза, или «свёртки»):

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{1}{V_c} \sum_{\mathbf{H}} F(\mathbf{H}) \exp(-2\pi i\mathbf{H}\mathbf{r}).$$

Эта схема решения структурной задачи является упрощённой. Тепловые колебания ослабляют интенсивность пиков. Учёт тепловых колебаний атомов в кристалле приводит к умножению каждого слагаемого в (2) на $\exp(-W_j)$, где $W_j = \kappa^2 \langle u_j^2 \rangle$ — *Дебая — Уоллера фактор*, $\langle u_j^2 \rangle$ — среднеквадратичная проекция амплитуды тепловых колебаний ядра на направление \mathbf{x} . Ослабление прямого и дифрагированного пучков происходит в реальном кристалле также из-за поглощения и рассеяния нейтронов (α к с т и н к ц и и). Др. трудность связана с тем, что измеряемая интенсивность дифракц. максимумов пропорц. квадрату модуля структурной амплитуды $|F(\mathbf{H})|^2$ и информация о её фазе оказывается утраченной; для $\rho(r)$ при этом нет однозначного решения.

Для определения фазы $F(\mathbf{H})$ используются ядра, обладающие низколежащими нейтронными резонансами (см. *Нейтронная спектроскопия*), вблизи к-рых b становится комплексной величиной и сильно зависит от λ (^{113}Cd , ^{140}Sm , ^{156}Gd и ^{157}Cd). Если структура содержит один из этих нуклидов, его положение опреде-

ляется методом Паттерсона (см. *Рентгеновский структурный анализ*), а затем из анализа интенсивностей рефлексов, измеренных при неск. λ , вычисляются фазы $F(\mathbf{H})$. При этом достигается различие интенсивностей для рефлексов соответствующих \mathbf{H} и $-\mathbf{H}$ порядка 10%. Др. способ определения фаз структурных амплитуд состоит в замещении одного из компонентов структуры его изотопом (см. ниже).

Экспериментальные методы. Измерение интенсивностей и положений большого числа (10^2 — 10^3) дифракц. максимумов осуществляется с помощью нейтронных дифрактометров. Их разнообразие связано с разными типами *нейтронных источников*, способами монохроматизации нейтронов и их регистрации. На ядерных реакторах непрерывного действия в основном применяется т. н. *двухосный дифрактометр* (рис. 1, а). Поток нейтронов с максвелловским

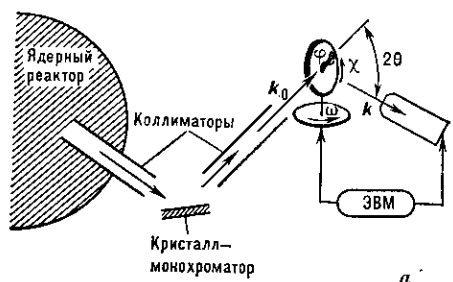
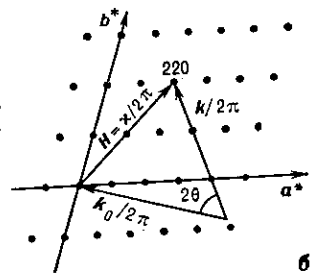


Рис. 1. а — схема двухосного дифрактометра на ядерном реакторе; б — построение Эвальда, α^* , β^* — оси координат обратного пространства.

распределением скоростей (т. е. λ) коллимируется, монохроматизируется (вектор \mathbf{k}_0 фиксируется по величине и направлению) и попадает на исследуемый кристалл, укрепленный на трёхосовом гониометре. Вращением кристалла вокруг осей ω , χ , ϕ и детектора Д (углы ω , χ , ϕ и детектора Д любой вектор \mathbf{H} обратной решётки совмещается с \mathbf{x} и наблюдается дифракц. максимум. Поиск и измерение обычно осуществляются либо путём малых поворотов исследуемого кристалла (обычно т. н. ω -сканирование, при к-ром производится поворот вектора \mathbf{x} в обратном пространстве, а его длина остаётся неизменной), либо согласованным поворотом кристалла и детектора (ω — 2θ -сканирование), при к-ром изменяется длина \mathbf{x} , но не меняется его ориентация (рис. 1, б). Для кристалла единичного объёма интегральная интенсивность рефлекса



$$I(h, k, l) = \Phi_0 \frac{\lambda^3}{\sin 2\theta} \frac{|F(h, k, l)|^2}{V_c} A(\lambda, \theta) Y(\lambda, \theta),$$

где Φ_0 — поток монохроматизир. нейтронов на образце, A и Y — множители, учитывающие поглощение и экстинкцию.

В случае импульсных источников нейтронов (рис. 2, а) на кристалл попадает немонохроматич. поток нейтронов (вектор \mathbf{k}_0 фиксирован только по направлению) и рассеяние наблюдается при постоянном угле 2θ . Вращением кристалла совмещаются только направления векторов \mathbf{H} и \mathbf{x} . Детектор регистрирует (разделённые по времени пролёта нейтронов от источника до детектора) дифракц. максимумы отражений от кристаллографич. плоскости всех порядков. Интенсивность I измеряется как ф-ция времени пролёта или, что эквивалентно, как ф-ция λ нейтронов. При фиксир. положениях кристалла и детектора направление \mathbf{x} в обратном пространстве сохраняется (рис. 2, б), а его длина пробегает