

интервал $\Delta k = 4\pi \sin\theta (1/\lambda_{\text{макс}} \div 1/\lambda_{\text{мин}})$. При этом интегральная интенсивность рефлекса:

$$I(h, k, l) = \Phi(\lambda) \frac{\lambda^4}{2\sin^2\theta} \frac{|F(h, k, l)|^2}{V_c} A(\lambda, \theta) Y(\lambda, \theta),$$

где $\Phi(\lambda)$ — спектральная плотность потока нейтронов, падающих на образец ЭВМ управляет положениями

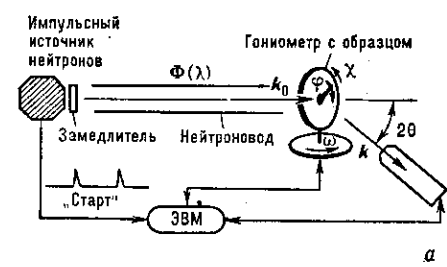
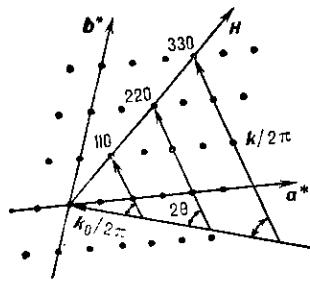


Рис. 2. а — схема дифрактометра по времени пролёта на импульсном источнике нейтронов; б — построение Эвальда.



образца и детектора и организует накопление и обработку эксперим. данных).

Разрешающая способность нейтронных дифрактометров $\Delta H/H \sim 10^{-2}$; в дифрактометрах высокого разрешения $\Delta H/H \sim 5 \times 10^{-4}$. При этом параметры элементарной ячейки кристалла определяются с относит. точностью $\sim 5 \times 10^{-5}$ и достигается практи-

чески полное разделение упругого и неупругого компонентов в рассеянном нейтронном пучке (см. *Неупругое рассеяние нейтронов*).

На рис. 3 приведено распределение $\rho(r)$ в кристалле KN_2PO_4 вблизи водородной связи $\text{O} - \text{H} - \text{O}$. Смеще-

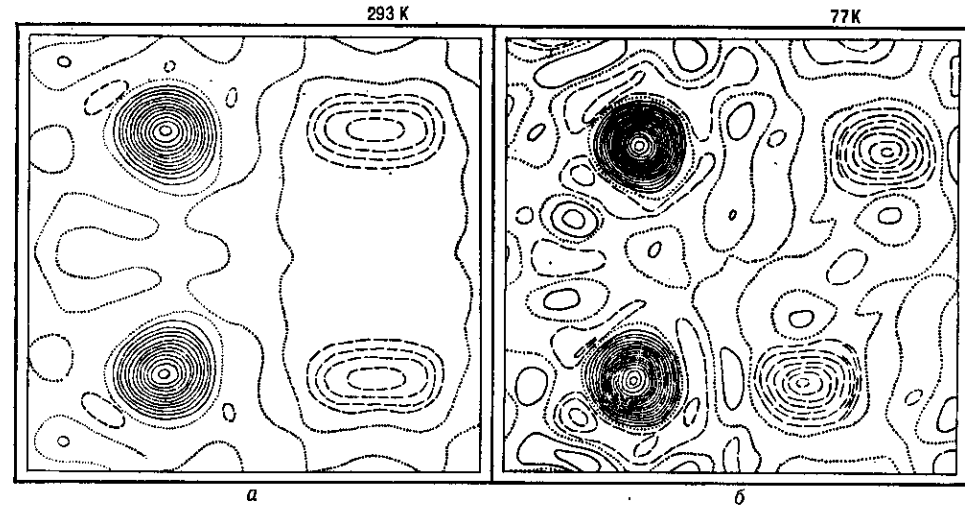


Рис. 3. Фрагмент проекции плотности амплитуды рассеяния $\rho(r)$ на плоскость (001) в кристалле KN_2PO_4 при $T = 293 \text{ K}$ (а) и $T = 77 \text{ K}$ (б). Показаны 2 атома O ($\rho > 0$, непрерывные линии) и два атома H ($\rho < 0$, разрывные линии); точки соответствуют $\rho = 0$.

ние H ($b = -0,374 \cdot 10^{-12} \text{ см}$) к одному из атомов O при $T = 77 \text{ K}$ связано с фазовым переходом KN_2PO_4 в сегнетоэлектрич. состоянии.

Аморфные тела и жидкости не обладают дальним порядком в расположении атомов, но обладают ближним порядком — нек-рой упорядоченностью на расстояниях, сравнимых с размерами атомов (см. *Дальний*

и ближний порядок). Для описания ближнего порядка используется корреляц. ф-ция $g(r)$, имеющая смысл вероятности обнаружить к.-л. ядро в точке r (в объёме dV), если др. ядро находится в начале координат. Дифференц. сечение когерентного рассеяния (в случае атомов одного сорта) имеет вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2 \left[1 + \int_V g(r) \exp(ikr) dV \right]$$

или после усреднения по ориентациям (для изотропного вещества)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = b^2 \left[1 + 4\pi \int g(r) \frac{\sin(\kappa r)}{\kappa r} r^2 dr \right]. \quad (3)$$

Ф-ция $g(r)$ может быть найдена из (3) с помощью обратного преобразования Фурье.

Если вещество содержит атомы неск. видов (α и β), то $g(r)$ можно представить в виде суперпозиции парциальных корреляц. ф-ций $g_{\alpha\beta}(r)$, описывающих распределение расстояний между атомами сортов α и β . Парциальные ф-ции $g_{\alpha\beta}$ в сечении рассеяния входят в качестве слагаемых с коэф., пропорциональных произведению соответствующих когерентных амплитуд рассеяния b_α и b_β . Это позволяет использовать для нахождения $g_{\alpha\beta}$ т. н. изотопное замещение. Напр., при исследовании структуры воды выделяют 3 вида расстояний: $\text{H} - \text{H}$, $\text{O} - \text{O}$ и $\text{H} - \text{O}$, к-рые удаётся определить, изучая рассеяние нейтронов в смесях $\text{H}_2\text{O} - \text{D}_2\text{O}$. Таким способом были исследованы структуры ряда электролитов (напр., растворы NiCl_2 , CaCl_2 в воде), аморфных металлов и др. аморфных веществ. Замещение H на D оказалось эффективным при исследовании структуры жидких кристаллов и фазовых превращений в них.

Разбавленные растворы макромолекул и молекулярные газы. Выражение (1) для интенсивности в этом случае остаётся в силе, однако интегрирование можно ограничить объёмом одной молекулы или макромоле-

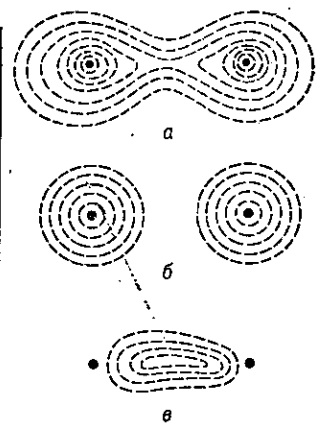


Рис. 4. а — электронная плотность, определённая методом РСА; б — вычисленная по нейтронным данным для сферически-симметричного атомного фактора; в — разностная плотность.

кулы, т. е. пренебречь межмолекулярным взаимодействием. Когерентное рассеяние в основном происходит при углах $\theta < \lambda/R$, где R — характерный размер частицы, и быстро затухает с увеличением θ . В случае макромолекул обычно $R \gg \lambda$ и рассеяние сосредоточено в области малых θ (см. *Малогоуговое рассеяние*). Из зависимости $I(\kappa)$ можно извлечь информацию о разме-