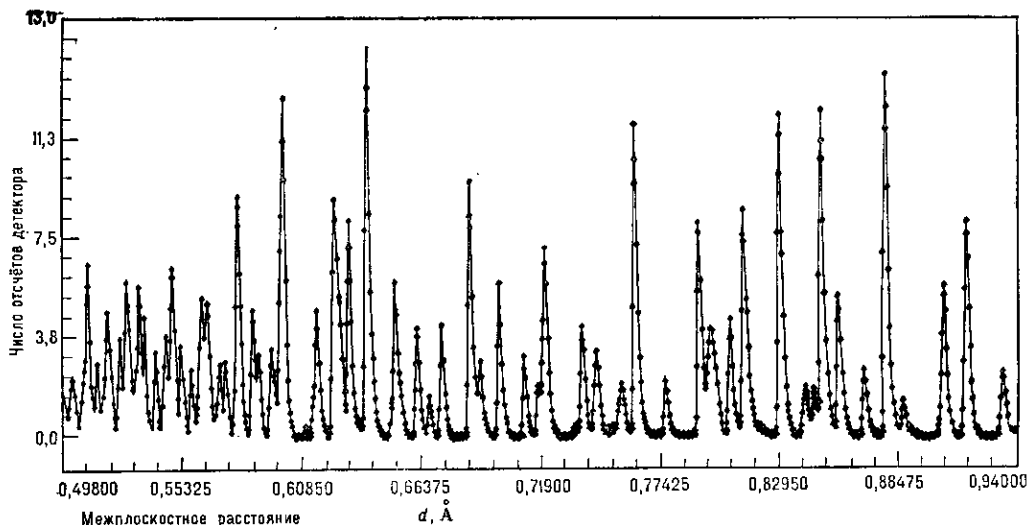


Рис. 5. Часть нейтронограммы поликристалла  $Al_2O_3$ .



рах и в нек-рых случаях о форме молекул. Если в отд. частях макромолекулы произвести изотопное замещение (обычно Н на D), то можно определить взаимное расположение и форму этих частей. При повышенных концентрациях макромолекул в растворах межмолекулярное взаимодействие становится существенным, что позволяет исследовать структуру самих растворов.

**Применения.** Н. с. часто применяется

после рентгеновского структурного анализа (РСА), что позволяет опустить начальные этапы анализа (напр., определение симметрии кристалла) и приступить сразу к уточнению структуры. Пространств. разрешение, достигаемое при Фурье-синтезе, в Н. с. может быть выше, чем в РСА. Это связано с разл. природой *атомного фактора*, к-рый для нейтронов определяется тепловым движением ядра, а для рентг. лучей — как тепловым движением, так и размерами электронной оболочки атома.

Совместное использование Н. с. и РСА позволяет найти распределение электронной плотности в атоме. Фурье-синтез электронной плотности в элементарной ячейке методом РСА восстанавливает распределение плотности электронов, размытое тепловым движением атома. Н. с. позволяет рассчитать электронную плотность сферически симметричной части атома, «размытую» тепловым движением. Разностный Фурье-синтез содержит информацию о несферич. части электронной оболочки атома, участвующей в хим. связях (рис. 4), что даёт возможность определить характер связи (одинарная, кратная,  $\sigma$ - или  $\pi$ -связь), заряд иона или ионной группы и др.

Применения Н. с. связаны с решением задач, недоступных для РСА. К их числу относятся: исследования структуры водородсодержащих соединений с целью определения координат атомов водорода и изучения структуры водородных связей; исследования соединений, одновременно содержащих лёгкие и тяжёлые элементы, соединений из элементов с близкими  $Z$ , в частности упорядочивающихся сплавов (FeCo, CuZn и др.).

Дефекты кристаллич. структуры (примеси, вакансии, флуктуация состава, статистич. разупорядоченность и др.) приводят к ослаблению и уширению осн. рефлексов и появлению диффузного рассеяния. Анализ спектра рассеянных нейтронов позволяет отделить рассеяние на статич. дефектах от рассеяния на колебаниях кристаллич. решётки.

Др. возможность Н. с. связана с применением нейтронов с  $\lambda > 2d_{\text{макс}}$ , где  $d_{\text{макс}}$  — макс. межплоскостное расстояние в кристалле. При этом дифракция на кристаллич. решётке полностью отсутствует и можно наблюдать рассеяние на достаточно крупных неоднородностях (зародыши новых фаз, поля деформации, микротрещины и др.) размерами до неск. сотен Å.

Для исследования поликристаллов применяются дифрактометры, обладающие высоким разрешением и широким диапазоном по  $\lambda$ . В одной порочковой нейтронограмме удаётся наблюдать неск. сотен рефлексов (рис. 5), что позволяет анализировать структуры с  $V_c \leq 2 \cdot 10^3 \text{ Å}^3$ .

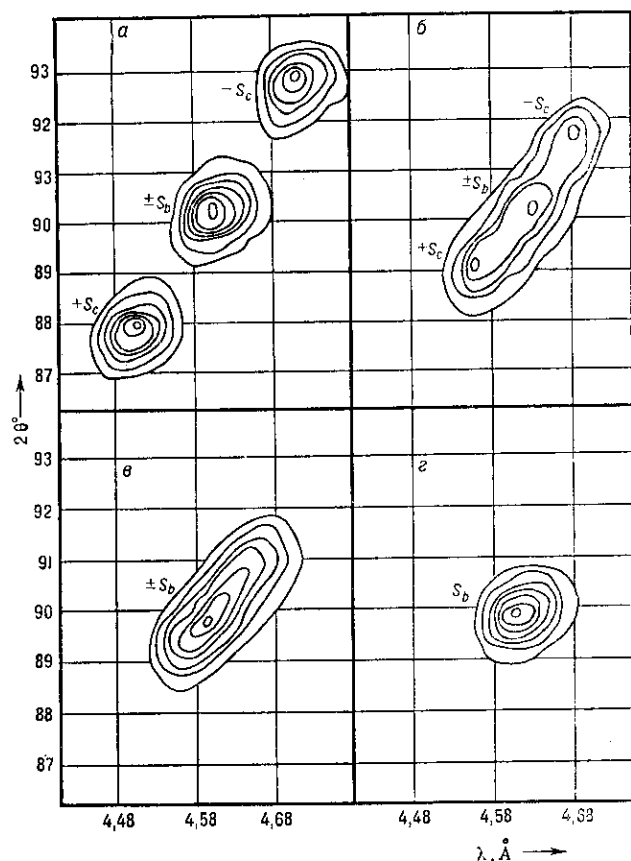


Рис. 6. Двумерные распределения интенсивности  $I$  в узле (002) кристалла — сегнетоэластика  $KD_3(SeO_3)_2$  при  $T = 52^\circ \text{ C}$  (a);  $-1^\circ \text{ C}$  (б);  $+4^\circ \text{ C}$  (в);  $100^\circ \text{ C}$  (г);  $S_b$  и  $S_c$  — компоненты узла, относящиеся к доменам двух возможных конфигураций; знаки  $\pm$  указывают на противоположную направленность спонтанной сдвиговой деформации, возникающей ниже точки фазового перехода 2-го рода.

Высокая проникающая способность нейтронов даёт возможность изучать толстые (до неск. см) изделия одновременно на большой площади (неск.  $\text{дм}^2$ ). Высокая разрешающая способность дифрактометров позволяет анализировать текстуру материалов с симметрией ниже кубической.