

А. М. БАЛАГУРОВ, Д. Т. АЗНАБАЕВ, Б. МУХАМЕТУЛЫ

СОВРЕМЕННАЯ СТРУКТУРНАЯ НЕЙТРОНОГРАФИЯ НА ИМПУЛЬСНЫХ ИСТОЧНИКАХ НЕЙТРОНОВ

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна,
Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Рассмотрена ситуация с нейтронными дифракционными исследованиями на импульсных источниках нейтронов. Изложены общие вопросы структурной нейтронографии с использованием метода времени пролета, рассмотрены эксперименты с высоким разрешением на поликристаллических веществах, структурный анализ и специальные эксперименты на монокристаллах, а так же исследование переходных процессов малой длительности. Особое внимание уделено темам, сформировавшимся в последнее время: дифрактометрии очень высокого разрешения, нейтронным фурье-дифрактометрам и исследованием, выполняемым в реальном масштабе времени.

1. Введение. Нейтронные дифрактометры давно уже стали обязательным прибором на исследовательских ядерных реакторах. Число выполненных на них экспериментов и объем накопленной информации вряд ли можно оценить, настолько они велики. Ценность полученных с помощью дифракции нейтронов данных представляется вполне бесспорной. Эти факты дают основание утверждать, что структурная нейтронография прочно заняла место одного из основных методов исследования конденсированных сред на микроуровне.

Характерная черта современного состояния нейтронографии – ее продолжающееся быстрое развитие. В основном оно обусловлено общим техническим прогрессом – увеличением мощности источников, появлением нового поколения электроники, развитием методов регистрации нейтронов, в частности, появлением позиционно-чувствительных детекторов, и т.д. Существенно, что улучшение количественных показателей дифракционного эксперимента дало возможность постановки качественно новых задач, которые в принципе не могли быть решены ранее. Но, пожалуй, наиболее значительный скачок в развитии нейтронографии связан с созданием мощных импульсных источников нейтронов.

Еще в конце 60-х годов Р. Брагером был сделан прогноз [1], что именно импульсные источники придут на смену поколению высокопоточных стационарных исследовательских реакторов, создававшихся в то время. Сейчас ясно, что прогноз осуществился в том смысле, что, действительно, в 70-х – начале 80-х годов была построена целая серия мощных импульсных источников нейтронов: 1970 г. - ИБР-30 (ОИЯИ), 1977 г. - WNR (LANSCE с 1986 г., США), 1981 г. - IPNS-1 (США), 1984 г. - ИБР-2 (ОИЯИ), 1985 г. - SNS (Англия) и KENS-1 (Япония).

В течение последних лет на этих источниках были созданы нейтронные дифрактометры по времени пролета, которые по своим возможностям не только не уступают обычным дифрактометрам на стационарных реакторах, но и по целому ряду характеристик превосходят их. Разработанность методики проведения экспериментов на новых дифрактометрах так же уже мало в чем уступает традиционной. Производительность новых дифрактометров довольно высока, и, несмотря на их все еще небольшое число, выполненные на них исследования занимают все более заметное место в мировом потоке нейтронографических работ.

В настоящем обзоре рассмотрена ситуация с нейтронными дифракционными исследованиями на импульсных источниках на начало 90-х годов. Обзор имеет методическую направленность, т.е. основное внимание уделено методам извлечения и анализа кристаллографической и кристаллофизической информации из данных, получаемых в дифракционных экспериментах на импульсных

источниках нейтронов, а так же сравнению возможностей обычных дифрактометров и дифрактометров по времени пролета.

Для краткости в дальнейшем эти два основных типа будем обозначать как ДА-дифрактометр и ТОФ-дифрактометр соответственно, имея в виду аббревиатуру английских терминов Double Axes и Time-Of-Flight. Собственно задачи нейтронографии предполагаются известными, они многократно изложены в книгах и обзорах [2-5], поэтому приводимые примеры конкретных исследований являются лишь иллюстрацией тех или иных аспектов их осуществления на импульсных источниках.

Многочисленные и разнообразные нейтронографические исследования можно разбить на три группы экспериментов, проведение которых требует специфической организации, дифрактометра, а именно, отдельно будут рассмотрены:

- эксперименты, выполняемые на монокристаллах,
- исследования переходных процессов в кристаллических материалах.

Отличительной чертой современного ТОФ-дифрактометра для поликристаллов является высокая разрешающая способность, для монокристаллов – применение позиционного чувствительного детектора (ПЧД) с хорошим пространственным разрешением, для изучения переходных процессов – высокая светосила.

Подробнее эти условия обсуждаются в соответствующих разделах обзора после рассмотрения некоторых общих вопросов.

2. Исследования монокристаллов на тоф-дифрактометрах. ТОФ-дифрактометр для монокристаллов. Аппаратурной особенностью современного монокристалльного ТОФ-дифрактометра является наличие одно- или двухкоординатного ПЧД. Именно позиционный детектор в сочетании с разверткой дифракционного спектра по длине волны позволил кардинально модернизировать схему эксперимента и реализовать так называемую «многомерную дифрактометрию» [41, 42]. На самом деле, многомерность сводится к двух-или трехмерному случаю, если используется, соответственно, одно-или двухкоординатный ПЧД. При этом одной координатой всегда является время пролета, и развертка по нему соответствует сканированию обратного пространства кристалла вдоль радиуса-вектора $\mathbf{H}$, другими координатами являются позиционные группы детектора, что в обратном пространстве соответствует сканированию в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{H}$, при этом осуществляется параллельный набор информации о кристалле в некотором объеме обратного пространства без каких-либо поворотов образца или детектора. Величина наблюдаемого объема зависит от телесного угла детектора Ω_d и от ограничений на минимальное и максимальное значения модулей векторов обратного пространства. Последнее связано с уменьшением потока нейтронов при больших и малых длинах волн. Если средний угол Брэгга Θ_0 не мал, наблюдаемый объем (в трехмерном случае) есть

$$V^* \approx \frac{2}{3} (\lambda_{\min}^{-3} - \lambda_{\max}^{-3}) \sin^2 \theta_0 \Omega_d,$$

где $\lambda_{\min}$, $\lambda_{\max}$ – границы рабочего интервала спектра нейтронов. Число узлов обратной решетки, содержащихся в V^* , слабо зависит от ориентации кристалла и составляет $n \approx V^* V_c$, где V_c – объем элементарной ячейки кристалла. При $\lambda_{\min} = 1 \text{ \AA}$, $\lambda_{\max} \gg \lambda_{\min}$, $\Theta_0 = 45^\circ$ и $\Omega_d = 0,02$ объем V^* составит $\sim 10^{-2} \text{ \AA}^{-3}$, и для кристаллов со средним периодом элементарной ячейки 10 Е одновременно будут наблюдаться 10 узлов обратной решетки.

Полное число одновременно наблюдаемых «элементов» обратного пространства детектора. Разрешение современного двухкоординатного ПЧД достигает 3 мм, полное число позиционных элементов составляет 10^3 и больше. Поскольку каждому позиционному элементу соответствует временной спектр, который может состоять из нескольких тысяч каналов, то для параллельной регистрации полного набора данных необходим объем оперативной памяти в несколько миллионов слов. В принципе современная электроника позволяет решить эту проблему. В то же время этот объем данных зачастую оказывается избыточным и, в зависимости от конкретных обстоятельств, возможно существенное его сокращение.

Задачи, решаемые на монокристаллах ТОФ-дифрактометрах, условно можно разбить на два типа: классический структурный анализ, когда измеряются интенсивности большего числа дифракционных пиков, и специальные эксперименты по анализу формы узлов обратной решетки.

3. Структурный анализ на ТОФ-дифрактометре. Идеология структурного анализа монокристаллов на ТОФ-дифрактометре в принципиальных пунктах ничем не отличается от стандартной методики: измеряются интегральные интенсивности большого числа дифракционных пиков I_{int} , в соответствии находятся модули структурных факторов, тем или иным способом определяются их фазы, после чего выполняется синтез рассеивающей плотности или с помощью МНК проводится уточнение структуры. Новые моменты возникают в самом процессе измерения I_{int} и в появлении больших возможностей для решения фазовой проблемы.

Структурные работы с монокристаллами на ТОФ-дифрактометрах развивались несколько медленнее, чем порошковые, хотя первые удачные попытки были сделаны еще 15 лет тому назад [43]. В этой работе, выполненной на импульсном реакторе ИБР-30 (средняя мощность 20 кВт), исследовался монокристалл дейтерированного лантан-магниевого нитрата $\text{La}_2\text{Mg}_3(\text{NO}_3)_{12}\text{D}_{20}$ (LMN) (пр. гр. $R\bar{3}$, гексагональные параметры решетки $a = 11,041$ Е, $c = 34,610$ Е). Из-за низкого уровня интенсивности использовался образец большого размера $5 \times 25 \times 25$ мм, что позволило измерить 164 независимых ненулевых рефлекса. Уточнение проводилось только для координат и изотропных тепловых параметров атомов дейтерия, для остальных атомов использовались рентгеновские данные. Для учета экстинкции применялось приближение Захариазена, а эффективный спектр описывался параметрической формулой, моделирующей максвелловское распределение с учетом поглощения на пролетных базах и эффективности детектора. Несмотря на ограниченный массив экспериментальных данных и существенно более сложный учет поправочных множителей, чем в случае ДА-дифрактометра, полученные данные оказались достаточно точными. Так, их сравнение с результатами уточнения водородной структуры LMN на ДА-дифрактометре [44] показало совпадение относительных координат атомов в пределах $(1-2) \cdot 10^{-3}$. Насколько существенно за прошедшие годы на импульсных источниках удалось продвинуться по уровню светосилы дифрактометров, можно судить по результатам работы [45], в которой изучалась модуляция структуры Bi-2212 на кристалле размером $1,5 \cdot 1,0 \cdot 0,03$ мм, т.е. в $7 \cdot 10^4$ раз меньшем по объему, чем LMN. В этой работе было подтверждено, во-первых, что в среднем структуру $\text{Bi}_2(\text{Sr}, \text{Ca})_3\text{Cu}_2\text{O}_{8+\gamma}$ можно описать в рамках группы $Amaa$ с параметрами решетки $a = 5,397$ Е, $b = 5,401$ Е и $c = 30,716$ Е, кроме того, были обнаружены и измерены сателлитные рефлексы, соответствующие вектору модуляции $\mathbf{k} = 2\pi[\tau, 0, 1]$ с $\tau = 0,213$, т.е. с периодом модуляции $4,69$ Е вдоль направления a . Уточнение структуры в рамках группы $Pnaa$ с элементарной ячейкой $19abc$ подтвердило предполагавшуюся причину модуляции структуры — внедрение одного дополнительного атома кислорода в BiO -слой, что приводит к заметной модуляции положений атомов и в других слоях.

Успеху этой работы способствовало, конечно, и то, что ТОФ-дифрактометр обеспечил непрерывное сканирование больших объемов обратного пространства. Это обстоятельство является особенно важным при изучении именно несоизмеримо модулированных структур, когда заранее невозможно предсказать как собственно координаты сателлитных пиков, так и их изменения в ходе фазового перехода или при воздействии внешнего поля. В работах [46, 47], выполненных на ТОФ-дифрактометре ДН-2, была получена обширная информация по модуляции структуры сегнетоэлектрика с размытым фазовым переходом $\text{Sr}_x\text{Ba}_{1-x}\text{Nb}_2\text{O}_6$ в широком интервале температуры, внешнего электрического поля и вариации состава.

Как было показано выше, эффективность процесса измерения рефлексов от монокристалла на ТОФ-дифрактометре с двухкоординатным ПЧД растет пропорционально объему элементарной ячейки кристалла. Следует поэтому ожидать, что основной структурной задачей для монокристалльных ТОФ-дифрактометров может стать анализ органических и биологических кристаллов с большими V_c . Первое нейтронографическое исследование структуры белкового кристалла миоглобина было выполнено еще в 1968 г. на Брукхейвенском реакторе [48]. Аналогичные эксперименты были проведены с кристаллами трипсина и лизоцима в 70-х годах, но широкого распространения они не получили, в основном, из-за большой трудоемкости их выполнения на ДА-дифрактометре. Действительно, чистое время измерения 10^4 рефлексов от кристалла миоглобина, которые были необходимы для построения фурье-синтеза с разрешением 2 Е, составило около 10^3 часов, что находится на границе разумной продолжительности одного

эксперимента. Простые оценки показывают, что на современном ТОФ-дифрактометре это время можно сократить по крайней мере в 10 раз.

Интересным следствием увеличения объема элементарной ячейки кристалла является быстрое уменьшение влияния экстинкции на измеряемые интенсивности, что снимает одну из основных проблем структурного анализа на ТОФ-дифрактометре. Этот эффект связан с уменьшением в среднем величины структурных факторов кристалла при усложнении структуры. Оценить его количественно можно следующим образом [49].

Для доли рефлексов, имеющих $|F|^2$ больше некоторой заданной величины z , справедливо выражение:

$$n(z) = \exp\left(-z / \overline{|F|^2}\right),$$

где $\overline{|F|^2} = \sum b_i^2 = N \overline{b^2}$, N – число атомов в ячейке, b_i – когерентная длина рассеяния i -го атома.

В случае кристалла миоглобина, использованного в [48] ($b^2 = 0,38 \cdot 10^{-24} \text{ см}^2$, $T = 0,27 \text{ см}$), из 10000 измеренных пиков только для 750 экстинкция будет заметна – $y \leq 0,99$, и только для 40 она будет существенна – $y \leq 0,85$.

Таблица 1. Параметры нейтронных резонансов ядер, которые могут быть использованы для определения фаз структурных факторов [16]

Изотоп	E_0 , эВ	λ_0 , Å	$2g\Gamma_{n0}$, Мес, мЭВ	Γ , мЭВ	b_0 , 10^{-12} см	b_i , 10^{-12} см	b_i/b_0
^{113}Cd	0,178	0,678	0,968	115	0,68	4,6	6,8
^{149}Sm	0,098	0,915	0,6	61	0,79	7,2	9,1
^{155}Gd	0,027	1,747	0,13	108	0,81	1,7	2,1
^{157}Gd	0,031	1,614	0,59	106	0,81	7,1	8,8
<i>Примечание.</i> E_0 , λ_0 – резонансные энергия и длина волны, g – статистический фактор резонанса, Γ_{n0} и Γ – нейтронная и полная ширины резонанса, b_0 и b_i – потенциальная и мнимая (при $\phi = \lambda_0$) части амплитуды рассеяния (10^{-12} см).							

Для реализации этой программы ТОФ-дифрактометр подходит намного лучше, чем ДА-дифрактометр: нет проблем со сменой и выбором нужной длины волны, поток нейтронов в области $\lambda \leq 1 \text{ Å}$ существенно выше, на- конец, разрешающая способность при малых длинах волн также намного лучше на ТОФ-дифрактометре.

Сжатие информации в эксперименте с монокристаллом. В структурном эксперименте с монокристаллом на ТОФ-дифрактометре возможно значительное сокращение объема регистрируемой информации. Это связано с тем, что стандартная реализация процесса накопления дифракционных данных с постоянным шагом сканирования по длине волны (ширина канала временного анализатора) и по угловым переменным (ширина позиционной группы детектора) приводит к большой избыточности регистрируемой информации. Например, при использовании двухкоординатного ПЧД, имеющего 1024 ячейки (32 на 32 по обеим координатам), и регистрации временных спектров в интервале 10 Е требуется объем оперативной памяти около 4×10^6 слов. Идея сжатия информации состоит в том, что для структурного анализа нужны значения только интегральных интенсивностей дифракционных пиков, а не полное измеряемое распределение $I(Q)$. Для отделения фона и обработки частично перекрывающихся пиков достаточно иметь 4–6 точек на каждой стороне параллелепипеда, в который вписан пик. При этом для регистрации даже 100 пиков нужно иметь не более 21 600 ячеек памяти. Т.е. реализация накопления дифракционных спектров в некоторой модификационной системе координат позволила бы во много раз сократить объем регистрируемых данных. Выбор системы координат для регистрации допускает известный произвол. Можно привести аргументы в пользу следующих двух вариантов: направления

разбиения Q-пространства совпадают с направлениями элементарных трансляций в обратной решетке кристалла, один из векторов новой системы координат параллелен вектору Q_0 (направленному, например, в центр детектора), а два других перпендикулярны ему. В первом варианте достигается наиболее симметричное заполнение обратного пространства ячейками разбиения, так как формы обратной элементарной ячейки и ячейки разбиения совпадают. Во втором варианте осуществляется наиболее экономное покрытие наблюдаемого объема обратного пространства ячейками разбиения и, кроме того ориентация сетки разбиения Q-пространства не зависит от ориентации кристалла. В любом случае на этапе накопления необходимо выполнить две операции: перейти от координат x, y, t (где x, y – место регистрации нейтрона в детекторе, t – время пролета) к координатам в пространстве Q-отнести событие регистрации к какой-либо ячейке Q-пространства, т.е. увеличить ее содержание на единицу. Подходящий для этой цели алгоритм опубликован в литературе [52], но до практической реализации дело пока не дошло.

Более простым и уже реализованным [53] способом сжатия объема регистрируемой информации является применение специальных временных кодировщиков с растущей во времени шириной канала. Идея их применения проистекает из того, что при регистрации дифракционной картины от брэгговской плоскости монокристалла наблюдаются порядки отражения, расположенные на временной оси в положениях $t_n = t_1/n$, где t_1 – время пролета для первого порядка отражения, n – номер порядка. Если ширина канала временного кодировщика, с помощью которого формируется временная шкала, постоянна, то заполнение памяти анализатора полезной информацией будет очень неравномерным, так как расстояние между соседними порядками отражения изменяется как t_n^2 . Легко видеть, что если ширина временного канала будет расти как t^2 , то дифракционные порядки отражения расположатся эквидистантно. Действительно, $\Delta N \sim \Delta k \sim \Delta t/t^2$, N – модуль вектора обратной решетки, k – модуль волнового вектора нейтрона, и $\Delta N = \text{const}$, если $\Delta t \sim t^2$, что и требуется, так как в шкале N порядки отражения расположены эквидистантно: $H_n = nH_1$.

Связь между номером временного канала и временем пролета нейтрона, если ширина канала изменяется по закону $\tau(t) = t^2/\beta$, можно получить из соотношения между дифференциалами $dN(t) = dt/\tau(t)$, из которого следует, что

$$N(t) = \int_{t_0}^t dt / \tau(t) = \beta(1/t_0 - 1/t) = M_{\max} (1 - t_0/t),$$

где t_0 – время начала регистрации; $M_{\max} = \beta/t_0$ – максимальный номер канала. Если $t \gg t_0$, то коэффициент сжатия, т.е. уменьшение необходимого числа каналов по сравнению со случаем $\tau = \text{const}$, есть $(t_{\max}/t_0)$ и при регистрации всех порядков отражения от 1-го до n -го составит n .

При использовании этого приема сжатия информации необходимо учитывать несколько обстоятельств. Во-первых, происходит искажение формы пиков и смещение их максимумов (и центров тяжести). Во-вторых, вследствие того, что ширина канала становится быстро растущей функцией номера канала

$$\tau(N) = \tau_0 / (1 - N/N_{\max})^2,$$

квазипостоянные по времени пролета функции (например, фон детектора) превратятся в растущие в соответствии. Ширина дифракционных пиков никогда не растет быстрее, чем t , поэтому в некоторых случаях более оптимальным может быть линейное, $\sim t$, увеличение ширины временного канала.

Анализ формы узлов обратной решетки. Необходимость анализа формы узлов обратной решетки кристалла возникает во многих задачах, решаемых на монокристаллах. Остановимся здесь только на эксперименте с кристаллом-ферроэластиком, испытывающим фазовый переход в низкосимметричную фазу. Известно, что такой переход сопровождается разбиением кристалла на домены – трансформационные двойники, что и приводит к изменению формы (расщеплению) брэгговских пиков.

Форма одиночного дифракционного пика определяется формулой (1), и для выделения вклада собственно кристалла необходимо знать функцию разрешения и проводить деконволюцию $I(Q_0)$. Однако, если ширина функции разрешения мала по сравнению с величиной расщепления пиков в ходе фазового перехода (что, собственно, является необходимым условием для успеха экспери-

мента), то обычно достаточным является учет только основных факторов, определяющих R , причем в гауссовом приближении. В этом приближении удобно объединить мозаичность кристалла с функцией разрешения. Тогда дифракционный пик представляется эллипсоидом в Q -пространстве с размерами и ориентацией, определяемыми дисперсиями учтенных распределений.

Например, в двумерном варианте (сканирование по времени пролета с использованием однокоординатного ПЧД) форма пика есть [54]

$$I(\xi\gamma) = I_0 \exp(-A\xi^2 - B\xi\gamma - C\gamma^2),$$

где $\xi = (k - k_0)/k_0$ – относительное отклонение модуля волнового вектора нейтрона от номинального значения, $\gamma = 2(\theta - \theta_0)$ – отклонение угла

Брэгга от номинального значения, A , B и C – величины, зависящие от дисперсий основных функций распределения, влияющих на форму пика, а именно: распределения нейтронов по углу в первичном пучке, распределения ориентаций мозаичных блоков и распределения времени вылета нейтронов из источника.

Образование доменной структуры в кристалле-ферроэластике приводит к расщеплению пиков (образованию составной обратной решетки [55]). Результирующее распределение можно представить как сумму нескольких функций $I(\xi, \gamma)$ со сдвигами по осям ξ и γ :

$$I_s(\xi, \gamma) = \sum r_i I(\xi - \xi_i, \gamma - \gamma_i),$$

где r_i – весовые множители, (ξ_i, γ_i) – положение i -й компоненты. Найденные из эксперимента положения компонент могут быть связаны с координатами соответствующих точек в обратном пространстве кристалла, т.е. могут быть определены угол спонтанного сдвига, изменения линейных размеров элементарной ячейки и т.п. Объем обратного пространства, в котором распределено I_s , обычно легко наблюдается на TOF-дифрактометре с ПЧД. Поскольку все распределение (34) измеряется параллельно, то очевиден огромный выигрыш во времени по сравнению с точечным сканированием, если учесть, что число точек, подлежащих измерению, достигает нескольких тысяч. Кроме того, важным фактором оказывается неизменность ориентации кристалла при съемке, что резко упрощает анализ данных.

Рассмотрим, как изложенные соображения были использованы при анализе доменной структуры сегнетоэлектрика-сегнетоэластика KD_2PO_4 на TOF-дифрактометре на импульсном реакторе ИБР-30 в ЛНФ ОИЯИ [56].

Заключение. Итак, за последние годы нейтронография на импульсных источниках прошла впечатляющий путь развития. Именно на импульсных источниках удалось преодолеть практический предел плотности нейтронного потока 10^{15} н/см²/с с поверхности замедлителя, характерный для стационарных реакторов, а также существенно улучшить разрешающую способность нейтронных дифрактометров. Рекордными характеристиками в настоящее время являются поток $\sim 10^{16}$ н/см²/с (ИБР-2, ОИЯИ) и разрешение 0,0005 (HRPD, ФДВР), что позволило выйти на качественно новый уровень решения дифракционных задач-секундное временное разрешение в RT-экспериментах и *ab initio* определение структуры в эксперименте.

Дальнейшее развитие нейтронографии на импульсных источниках будет, по-видимому, связано в основном с совершенствованием существующей техники.

Планы улучшения существующих источников включают, например, сокращение длительности импульса быстрых нейтронов (в 2 раза) на ИБР-2, увеличение тока протонов на мишени (в 2-3 раза) на ISIS [77]. Эта модернизация, безусловно улучшая качество экспериментов, все же не является принципиальной.

Больше перспектив заключает в себе развитие самих TOF-дифрактометров. Например, достигнутым уровнем светосилы является значение $I \approx 10^6$ на дифрактометре ДН-2 (ИБР-2, ОИЯИ), но вполне реально на этом источнике достичь $I = (2-4) \cdot 10^7$, т.е. сразу в 20-40 раз больше [78]. Это позволит от тестовых экспериментов с регистрацией нейтронограммы от одного импульса источника перейти к практическим исследованиям необратимых переходных процессов в кристалле с временным разрешением 1 мс. Пока такое разрешение в дифракционных экспериментах достигнуто только на источниках синхротронного излучения.

Другим перспективным применением фурье-метода может быть использование его в геометрии пропускания. Как показано в [79], при этом достигаются два важных эффекта: исчезает угловой

вклад в функцию разрешения, и, следовательно, $\Delta d/d$ может быть доведено до 0,0003. Кроме того, применяя процедуру фильтрации измеренного спектра пропускания, можно по брэгговским скачкам определять значения структурных факторов, не вводя поправок на эффективный спектр нейтронов, поглощение и экстинкцию, т.е. резко уменьшая систематические ошибки.

Из рассмотренных применений ТОФ-дифрактометров для решения кристаллографических и кристаллофизических задач наиболее быстро и успешно был развит прецизионный структурный анализ поликристаллов. Медленнее развивался структурный анализ монокристаллов, но, с другой стороны, именно в исследованиях монокристаллов перспективы применения

ТОФ-дифрактометров особенно велики. Это относится и к собственно структурным экспериментам (анализ кристаллов с большими элементарными ячейками), и к пока еще довольно редким работам по совместному анализу брэгговского и диффузного рассеяния от кристаллов с частично разупорядоченной структурой. Нет сомнений и в дальнейшем успешном развитии на ТОФ-дифрактометрах нейтронографии в реальном масштабе времени. Эта тема включает в себя огромное число задач, тесно перекрывающихся с проблемами химии, биологии, материаловедения и др. наук, как фундаментального, так и прикладного (индустриального) плана, и в перспективе именно она может стать ведущей на импульсных источниках нейтронов.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Brugger R.M. // Phys. Today. – 1968. – V. 21. – P. 23.
- 2 Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенник К. Структурная нейтронография. – М.: Атомиздат, 1979. – Т. 1.
- 3 Fuess H. Modern Physics in Chemistry / Eds. E. Fluck, V. I. Goldanskii. – London: Acad. Press, 1979. – V. 2. – P. 1.
- 4 Александров Ю.А., Шарапов Э.И., Чер Л. Дифракционные методы в нейтронной физике. – М.: Энергоиздат, 1981.
- 5 Уиндзор К. Рассеяние тепловых нейтронов от импульсных. – М.: Энергоатомиздат, 1985.
- 6 Рассеяние тепловых нейтронов / Ред. П. Игельстафф. – М.: Атомиздат, 1971.
- 7 Франк И.М. // ЭЧАЯ. – 1971. – Т. 2(4). – С. 807-860.
- 8 Балагуров А.М., Бескровный А.И., Попа Н. // ОИЯИ. – РЗ-84-765. – Дубна, 1984.
- 9 Taylor J. C - Aust. // J. Phys. – 1985. – V. 38. – P. 519.