

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



СЗУ2г1

Б-20

4/11/74

3 - 7526

838/2-74

А.М.Балагуров

УСЛОВИЯ НАБЛЮДЕНИЯ  
РАЗРЕШЕННЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ МАКСИМУМОВ  
В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С МОНОКРИСТАЛЛАМИ  
ПО МЕТОДУ ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

**1973**

**ЛАБОРАТОРИЯ НЕЙТРОННОЙ ФИЗИКИ**

3 - 7526

А.М.Балагуров

УСЛОВИЯ НАБЛЮДЕНИЯ  
РАЗРЕШЕННЫХ ДИФРАКЦИОННЫХ МАКСИМУМОВ  
В ЭКСПЕРИМЕНТАХ С МОНОКРИСТАЛЛАМИ  
ПО МЕТОДУ ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

Объединенный институт  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

1. Вопросы, связанные с возможностью наблюдения разрешенных, т.е. неперекрывающихся, дифракционных максимумов, имеют важное значение в структурных дифракционных экспериментах и особенно в экспериментах с макромолекулярными /биологическими/ кристаллами, что связано с большими размерами элементарной ячейки таких кристаллов и низкой степенью совершенства их структуры. Возможность наблюдения неперекрывающихся дифракционных максимумов зависит как от свойств дифрактометра, так и от параметров исследуемого кристалла и характеризуется дисперсией рассеянного пучка, называемой обычно разрешением <sup>1-3/</sup>.

При исследовании дифракции на монокристаллах по методу времени пролета разрешение естественным образом распадается на временное и угловое, связанные соответственно с временной и угловой дисперсиями рассеянного пучка. Ранее для метода времени пролета исследовалось лишь временное разрешение в случае поликристаллических образцов <sup>3,4/</sup>.

В настоящей работе вопросы разрешения рассмотрены, исходя из наличия у дифракционного максимума реальных контуров, временного и углового, связанных с неидеальностью дифрактометра и образца. Подобный подход использовался ранее для выбора оптимального режима сканирования в методе двухосевого спектрометра <sup>5/</sup>. Рассмотрение контура дифракционного максимума позволяет получить достаточно строгие условия неперекрывания соседних отражений и, следовательно, правильного измерения интегральных интенсивностей, что и является целью дифракционного эксперимента. Кроме того, при анализе условий временной фокусировки такой подход позволяет разделить вклады во временную диспер-

сию рассеянного пучка от мозаичности образца и от угловой расходимости первичного пучка.

2. Интегральная интенсивность дифракционного максимума при рассеянии идеально коллимированного пучка нейтронов на идеальном кристалле в кинематическом приближении /6/

$$I_0 = (2\pi)^3 \frac{V}{V_c^2} |F(\vec{\tau}_0)|^2 \frac{\Phi(k_0)}{2k_0^2 \sin^2 \theta_0}, \quad /1/$$

где  $V$  - объем кристалла,  $V_c$  - объем элементарной ячейки кристалла,  $F(\vec{\tau}_0)$  - структурный фактор отражения, определяемый вектором обратной решетки  $\vec{\tau}_0$ ,  $k_0$  - модуль волнового вектора нейтрона,  $2\theta_0$  - угол рассеяния,  $\Phi(k_0)$  - плотность потока нейтронов на образец. Параметры  $k_0$ ,  $\theta_0$  и  $\tau_0$  связаны формулой Брэгга-Вульфа  $2k_0 \sin \theta = 2\pi\tau_0$  и векторным равенством  $\vec{k}'_0 - \vec{k}_0 = 2\pi\vec{\tau}_0$ , где  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}'_0$  - волновые векторы нейтрона до и после рассеяния, дифракционный максимум при этом имеет нулевые временную и угловую ширины.

В действительности источник нейтронов имеет конечные линейные размеры, а кристалл состоит из мозаичных блоков. При этом значение интегральной интенсивности в кинематическом приближении не изменится, но угловая и временная контуры дифракционного максимума перестанут быть  $\delta$ -образными, и в этом случае под  $k_0$ ,  $k'_0$ ,  $\tau_0$  и  $\theta_0$  следует понимать соответствующие средние характеристики.

На рис. 1 представлена упрощенная схема дифракционного эксперимента по методу времени пролета. В начальный момент времени нейтрон с волновым вектором  $\vec{k}$  вылетает из замедлителя, рассеивается на мозаичном блоке с ориентацией  $\vec{\tau}$  и попадает в детектор, двигаясь по направлению  $\vec{k}'$ . При этом по-прежнему выполняются условия:

$$2k \sin \theta = 2\pi\tau, \quad \vec{k}' - \vec{k} = 2\pi\vec{\tau}, \quad |\vec{k}'| = |\vec{k}|. \quad /2/$$

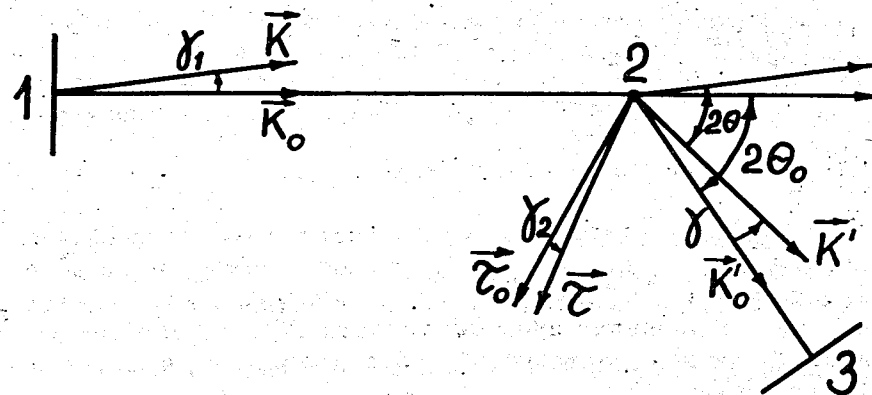


Рис. 1. Схема дифрактометра по времени пролета: 1 - источник пульсирующего пучка нейтронов; 2 - монокристаллический образец; 3 - детектор. Вектора  $\vec{k}_0$  и  $\vec{k}'_0$  - средние направления распространения первичных и рассеянных нейтронов,  $\vec{\tau}_0$  - средняя ориентация мозаичных блоков кристалла.

Для не очень больших углов рассеяния \* вертикальная расходимость первичного пучка слабо сказывается на изменении угла рассеяния, поэтому в первом приближении достаточно рассмотреть проекцию нейтронных путей на горизонтальную плоскость.

Введем распределения:  $P(\gamma_1)$  - плотность вероятности попадания нейтрона на образец под углом  $\gamma_1$  к направлению  $\vec{k}_0$  и  $W(\gamma_2)$  - плотность числа мозаичных блоков, ориентированных под углом  $\gamma_2$  к направлению  $\vec{\tau}_0$ . Плотность вероятности регистрации детектором нейтрона с волновым вектором  $\vec{k}'$  есть

$$G_s \sim P(\gamma_1) \cdot W(\gamma_2), \quad /3/$$

причем из условий /2/ с учетом малости углов  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  следует:

\*  $\text{tg } \theta_0 \ll 2/\phi^2$  где  $\phi$  - вертикальная расходимость первичного пучка /7/.

$$\begin{aligned} \gamma_1 + \gamma &= 2\gamma_2, \\ \gamma_1 - \gamma &= 2\xi \operatorname{tg} \theta_0, \end{aligned} \quad /4/$$

где  $\gamma$  - угол между векторами  $\vec{k}'_0$  и  $\vec{k}'$ ,  $\xi = \frac{k-k_0}{k_0}$  -

относительное отклонение модуля вектора  $\vec{k}$  от среднего значения  $k_0$ . Для рассматриваемой схемы, в первом приближении,  $\xi = \Delta k/k = \Delta t/t$ , где  $t$  - полное время пролета,  $\Delta t$  - отклонение времени пролета от среднего значения. Разрешая систему /4/ относительно  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ , для  $G_s$  получим:

$$G_s(\gamma, \xi) \sim P(\gamma + 2\xi \operatorname{tg} \theta_0) W(\gamma + \xi \operatorname{tg} \theta_0). \quad /5/$$

При интегрировании  $G_s(\gamma, \xi)$  по всем  $\gamma$  и  $\xi$  должно получиться правильное значение интегральной интенсивности  $I_0$  для произвольных функций  $P(\gamma_1)$  и  $W(\gamma_2)$ . Учитывая этот факт, нетрудно окончательно установить, что число нейтронов, регистрируемых детектором в единицу времени в интервале углов  $d\gamma$  и в интервале времени пролета  $d\xi$ , есть

$$dI_s(\gamma, \xi) = I'_0 P(\gamma + 2\xi \operatorname{tg} \theta_0) W(\gamma + \xi \operatorname{tg} \theta_0) d\gamma d\xi, \quad /6/$$

$$\text{где } I'_0 = I_0 \cdot \operatorname{tg} \theta_0 = (2\pi)^3 \frac{V}{V_c} |F(\vec{r}_0)|^2 \frac{\Phi(k_0)}{k_0^2 \sin 2\theta_0},$$

причем распределения  $P(\gamma_1)$  и  $W(\gamma_2)$  нормированы на единицу.

Интегрируя  $I_s(\gamma, \xi)$  по всем  $\gamma$  или по всем  $\xi$ , получим соответственно временной или угловой контуры дифракционного максимума:

$$I(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} I_s(\gamma, \xi) d\gamma, \quad I(\gamma) = \int_{-\infty}^{\infty} I_s(\gamma, \xi) d\xi. \quad /7/$$

Учет вкладов в /7/ от случайных переменных, не коррелирующих с  $\xi$  и  $\gamma$ , проводится вычислением свертки соответствующих распределений с  $I(\xi)$  и  $I(\gamma)$ . Например, неодновременность вылета нейтронов из замедлителя учитывается, если перейти от  $I(\xi)$  к

$$I'(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} I(\xi - \zeta) Q(\zeta) d\zeta, \quad /8/$$

где  $Q(\zeta)$  - плотность вероятности вылета нейтрона из замедлителя с отклонением  $\zeta$  от среднего момента вылета, выраженным в единицах полного времени пролета.

3. Для определения условий наблюдения разрешенных дифракционных максимумов необходимо задаться конкретным видом распределений  $P(\gamma_1)$ ,  $W(\gamma_2)$  и  $Q(\zeta)$ . Распределение ориентаций мозаичных блоков в кристалле обычно принимается /8/ гауссовым:

$$W(\gamma_2) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \eta} \exp\left(-\frac{\gamma_2^2}{2\eta^2}\right), \quad /9/$$

где  $\eta$  - мозаичность кристалла.

$P(\gamma_1)$  для плоского образца и плоского замедлителя имеет вид

$$P(\gamma_1) = \frac{1}{\beta_0 + \beta_1} \cdot \begin{cases} \frac{\beta_0 - \gamma_1}{\beta_0} & \text{для } |\gamma_1| \leq \beta_1, \\ \frac{\beta_0 - \gamma_1}{\beta_0} & \text{для } \beta_1 < |\gamma_1| \leq \beta_0, \\ \frac{\beta_0 - \gamma_1}{\beta_0} & \text{для } |\gamma_1| > \beta_0. \end{cases} \quad /10/$$

Здесь  $\beta_1 = \frac{S_1 - S_2}{2L_r}$ ,  $\beta_0 = \frac{S_1 + S_2}{2L_r}$ ,  $S_1$  и  $S_2$  - линейные раз-

меры замедлителя и образца соответственно,  $L_r$  - расстояние замедлитель-образец; предполагается, что  $L_r \gg S_1$  и  $L_r \gg S_2$ . Конкретный вид распределения  $P(\gamma_1)$  слабо сказывается на конечных результатах, поэтому удобно заменить /10/ на гауссову функцию

$$P(\gamma_1) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \gamma_0} \exp\left(-\frac{\gamma_1^2}{2\gamma_0^2}\right). \quad /11/$$

\* Знаки всех углов здесь и в дальнейшем выбраны положительными в направлении против часовой стрелки.

В дальнейшем будем считать  $S_2 \ll S_1$  /как правило, размеры биологических образцов удовлетворяют этому условию/, в этом случае наилучшее согласие результатов вычислений с зависимостями /10/ и /11/ достигается при  $\gamma_0 = \beta_0 / \sqrt{3}$  /см. приложение и рис. 2/.

При таких предположениях функции  $I(\xi)$  и  $I(\gamma)$  являются гауссовыми /в чем нетрудно убедиться, вычисляя интегралы /7//

$$I(\xi) = \frac{I_0}{\sqrt{2\pi D_\xi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2D_\xi}\right), \quad /12/$$

$$I(\gamma) = \frac{I_0}{\sqrt{2\pi D_\gamma}} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2D_\gamma}\right), \quad /13/$$

с дисперсиями

$$D_\xi = (\gamma_0^2 + \eta^2) / \text{tg}^2 \theta, \quad D_\gamma = \gamma_0^2 + 4\eta^2. \quad /14/$$

Распределение времени вылета нейтронов из замедлителя в первом приближении /достаточном для производимых ниже оценок/ также можно считать гауссовым,

$$Q(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D_t}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2D_t}\right), \quad /15/$$

где  $D_t$  - дисперсия времени вылета, выраженная в единицах полного времени пролета. Так как свертка двух гауссовых распределений есть снова гауссово распределение с дисперсией, равной сумме дисперсий сворачиваемых распределений, то учет  $Q(\zeta)$  приводит к

$$I'(\xi) = \frac{I_0}{\sqrt{2\pi D'_\xi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2D'_\xi}\right), \quad /16/$$

где  $D'_\xi = D_\xi + D_t$ .

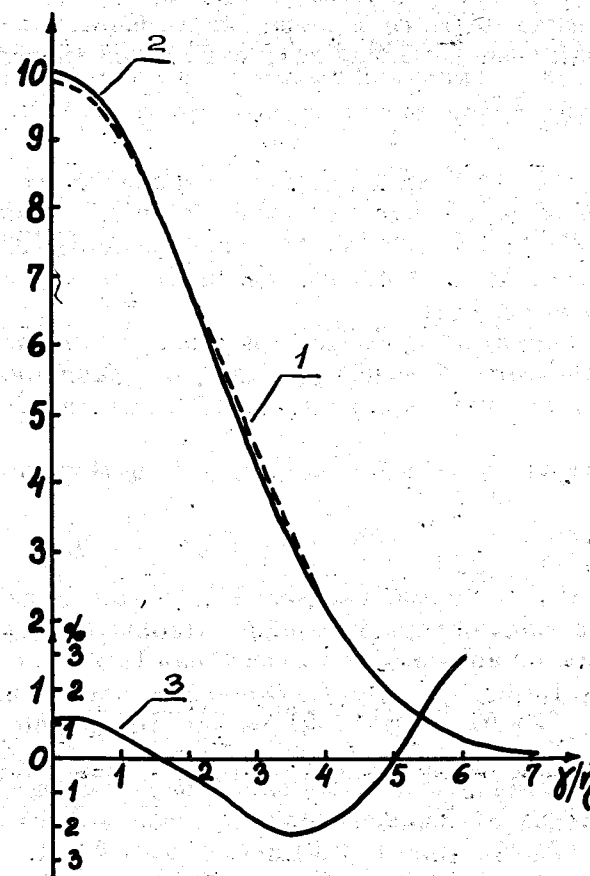


Рис. 2. Соответствие угловых контуров дифракционного максимума, рассчитанных с использованием распределений /10/ и /11/ для точечного образца. 1 - распределение /3'/ с  $\beta_0/\eta = 2$ ; 2 - распределение /2/ с  $\gamma_0 = \beta_0/\sqrt{3}$ ; 3 - относительная разность /3'/ и /2'/ . Кривые 1 и 2 в произвольных единицах, кривая 3 - в %. Совпадение кривых 1 и 2 еще лучше для меньших значений  $\beta_0/\eta$ .

В методе времени пролета правильное изменение интегральной интенсивности дифракционного максимума возможно, если соседние отражения не перекрываются хотя бы одной из координат - временной или угловой.

Поскольку 99,7% площади под гауссовой кривой лежит в пределах  $6\sqrt{D}$ , то в качестве условий неперекрывания /с точностью до 0,3%/ двух отражений можно выбрать:

$$6\sqrt{D_\xi} \leq \Delta_\xi \quad \text{и} \quad 6\sqrt{D_\gamma} \leq \Delta_\gamma, \quad /17/$$

где  $\Delta_\xi$  и  $\Delta_\gamma$  - временное и угловое расстояния между центрами отражений. Величины  $\Delta_\xi$  и  $\Delta_\gamma$  зависят от вектора  $\vec{r}$ , характеризующего положение отражения в пространстве обратной решетки, и от симметрии кристаллической решетки.

В качестве примера приложения соотношений /17/ к реальному случаю рассмотрим различные порядки отражения от плоскости /1,0,0/ кристалла кубической

симметрии. В этом случае для двух отражений  $\Delta_\xi = \frac{r_1 - r_2}{r_1}$ ,  $\Delta_\gamma = 2 \arccos\left(\frac{\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2}{r_1 r_2}\right)$ , где  $\vec{r} = \left(\frac{h_i}{a}, \frac{k_i}{a}, \frac{l_i}{a}\right)$ ,  $r_i = \frac{1}{a} (h_i^2 + k_i^2 + l_i^2)^{1/2}$ ,

$i = 1, 2$ ;  $(h, k, l)$  - миллеровские индексы отражения,  $a$  - размер элементарной ячейки. Необходимо рассмотреть условия неперекрывания отражения  $(n, 0, 0)$  с отражениями  $(n+1, 0, 0)$  и  $(n, 1, 0)$ . Очевидно, что разделить отражения  $(n, 0, 0)$  и  $(n+1, 0, 0)$  можно только по  $\xi$ , т.к. для них  $\Delta_\gamma = 0$ . В то же время отражения  $(n, 0, 0)$  и  $(n, 1, 0)$  проще различать по углу рассеяния, т.к. разница в  $\xi$  для этой пары отражений имеется лишь во втором порядке ( $\Delta_\xi \approx 1/2n^2$ ). Для  $(n, 0, 0)$  и  $(n+1, 0, 0)$   $\Delta_\xi \approx 1/(n+1)$ , а для  $(n, 0, 0)$  и  $(n, 1, 0)$   $\Delta_\gamma \approx 2/n$ , поэтому для правильного измерения интенсивности отражения  $(n, 0, 0)$  необходимо иметь

$$D_t + (\gamma_0^2 + \eta^2) / \text{tg}^2 \theta_0 \leq \frac{1}{36(n+1)^2} \quad \text{и} \quad \gamma_0^2 + 4\eta^2 \leq \frac{1}{36} \left(\frac{2}{n}\right)^2.$$

/18/

Величина  $D_t$  в /18/ зависит от полного времени пролета и, следовательно, от  $n$ , расходимость  $\beta_0$  первичного пучка в случае применения нейтронотода между замедлителем и образцом также становится функцией  $n$ . Итак,

в общем случае условия /18/ являются уравнениями относительно  $n$ , решение которых позволяет выделить в обратном пространстве область разрешенных отражений.

4. При решении системы уравнений /4/ относительно  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$  предполагалось, что  $\Delta k/k = \Delta t/t = \xi$  и не зависит в первом порядке от  $\gamma_1$  и  $\gamma_2$ . Это верно, если плоскость замедлителя перпендикулярна оси первичного пучка и плоскость детектора перпендикулярна оси рассеянного пучка. В противном случае относительное изменение полной пролетной базы  $L = L_r + L_c$  есть

$$\frac{\Delta L}{L} = -\gamma_1 \frac{L_r}{L} \text{tg} \alpha_r + \gamma \frac{L_c}{L} \text{tg} \alpha_c, \quad /19/$$

/обозначения см. на рис. 3/, а так как  $k = t/L$ , то  $\Delta k/k = \Delta t/t - \Delta L/L$  и уравнения /4/ переходят в

$$\begin{aligned} \gamma_1 + \gamma &= 2\gamma_2, \\ \gamma_1 - \gamma &= 2\xi \text{tg} \theta_0 + 2\gamma_1 \frac{L_r}{L} \text{tg} \alpha_r \text{tg} \theta_0 - 2\gamma \frac{L_c}{L} \text{tg} \alpha_c \text{tg} \theta_0, \end{aligned} \quad /20/$$

где по-прежнему  $\xi = \Delta t/t$ . Повторяя рассуждения предыдущего пункта, для временной дисперсии рассеянного

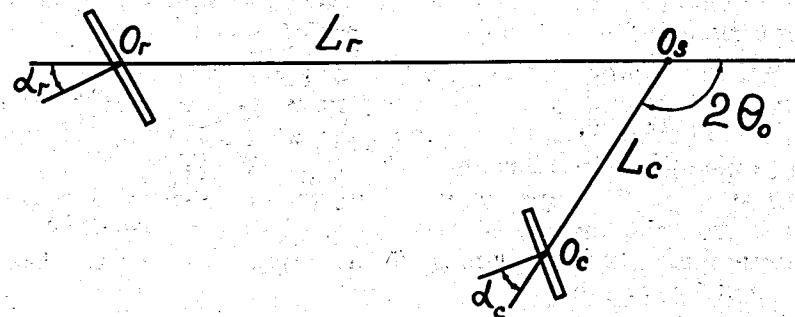


Рис. 3. Схема сфокусированного дифрактометра по времени пролета.  $O_1$ ,  $O_2$  и  $O_3$  - центры замедлителя, образца и детектора соответственно.

пучка /угловая дисперсия, очевидно, не изменится/  
получим следующее выражение:

$$D'_{\xi} = \frac{(1 - 2 \frac{L_c}{L} \operatorname{tg} \alpha_c \operatorname{tg} \theta_0)^2 \cdot \eta^2 + (1 - \frac{L_c \operatorname{tg} \alpha_c + L_r \operatorname{tg} \alpha_r}{L} \operatorname{tg} \theta_0)^2 \gamma_0^2}{\operatorname{tg}^2 \theta_0} + D_t \quad /21/$$

Из /21/ следует, что при выполнении условий \*

$$2 \frac{L_c}{L} \operatorname{tg} \alpha_c \operatorname{tg} \theta_0 = 1 \quad \text{и} \quad 2 \frac{L_r}{L} \operatorname{tg} \alpha_r \operatorname{tg} \theta_0 = 1 \quad /22/$$

угловая расходимость первичного пучка и мозаичность образца не дают вклада в  $D'_{\xi}$  и временное разрешение будет зависеть лишь от относительной ширины первичного импульса нейтронов. Это приводит к значительному улучшению временного разрешения, особенно в случае малых и средних углов рассеяния. В дифракционном эксперименте параметры  $\alpha_r$  и  $L_r$  фиксированы, и для строгого выполнения условий /22/ необходимо подбирать  $\alpha_c$  и  $L_c$  в зависимости от угла рассеяния. Из-за обычного условия  $L_c/L_r \ll 1$  /иначе линейные размеры детектора становятся чересчур большими/ строго удовлетворить /22/ в широком диапазоне углов рассеяния невозможно. Однако это же условие ( $L_c/L_r \ll 1$ ) позволяет при подходящем выборе угла наклона замедлителя сделать вклад слагаемого с  $\gamma_0^2$  в  $D'_{\xi}$  малым почти для всех углов рассеяния.

На рис. 4 представлены кривые  $n_{\xi}(\theta)$  /максимально разрешенного по времени пролета порядка отражения от плоскости (1,0,0) / в зависимости от угла Брэгга для значений параметров  $a = 30 \text{ \AA}$ ,  $\eta = 1^\circ$ ,  $\gamma_0 = 0,5^\circ$ ,  $L_r = 19 \text{ м}$ ,  $\alpha_r = 25^\circ$ , временная полуширина первичного импульса нейтронов - 104 мксек. Кривая 1 соответствует минимизации  $D'_{\xi}$  по двум параметрам  $\alpha_c$  и  $L_c$ , т.е.

\* Эти условия впервые установил А.Холас /4/ несколько другим методом.

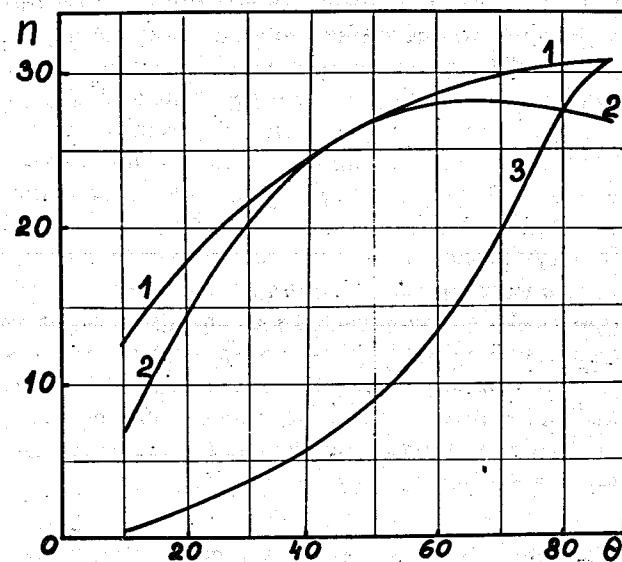


Рис. 4. Временное разрешение в зависимости от угла Брэгга. Объяснения в тексте.

полному соблюдению условий фокусировки. Кривая 2 построена для фиксированного расстояния образец-детектор  $L_c = 1 \text{ м}$ , при этом нарушается точная фокусировка замедлителя, но, как видно из рисунка, ухудшение разрешения незначительное. Кривая 3 построена для  $\alpha_c = \alpha_r = 0^\circ$ .

5. Для биологических кристаллов мозаичность обычно не меньше  $1^\circ$ . Как следует из /18/, число разрешенных по углу порядков отражения от плоскости (1,0,0) для  $\eta = 1^\circ$  не превышает 10. Это значительно меньше числа порядков, разрешенных по времени, и для сложных кристаллов может оказаться недостаточным для получения необходимой структурной информации. Надежным средством преодоления этой трудности может явиться регистрация углового распределения рассеянного пучка, что позволит с помощью стандартных математических приемов выделять правильное значение интегральной



интенсивности исследуемого отражения. Подобную регистрацию можно осуществить либо сканированием детектора по углу, либо применением позиционного счетчика. Однако регистрация углового распределения рассеянного пучка связана либо с потерями времени, как в случае сканирования по углу, либо с необходимостью иметь значительную память регистрирующей аппаратуры в случае использования позиционного счетчика. Более простым средством улучшения углового разрешения является установка дополнительного коллиматора между образцом и детектором. Так как угловая дисперсия не зависит от угла рассеяния и величины волнового вектора нейтрона, то при использовании коллиматора между образцом и детектором на любом угле рассеяния и для всех порядков отражения будет регистрироваться одинаковая часть интегральной интенсивности

$$I' = \int_{-\gamma_3}^{\gamma_3} I(\gamma) d\gamma = I_0 \cdot \frac{2}{\sqrt{2\pi D_\gamma}} \int_0^{\gamma_3} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2D_\gamma}\right) d\gamma, \quad /23/$$

где  $\gamma_3$  - максимальный угол отклонения от оси пучка, при котором нейтрон пройдет через коллиматор. Вводя параметр  $g = \gamma_3 / \sqrt{D_\gamma}$ , получим

$$I'(g) = I_0 \cdot \Phi(g), \quad \text{где}$$

$$\Phi(g) = \frac{2}{\sqrt{2\pi}} \int_0^g \exp(-x^2/2) dx - \text{интеграл вероятностей.}$$

Число разрешенных по углу порядков отражения для  $0 \leq g \leq 3$  растет, как  $6/(g+3)$ . Например, для  $g = 1$  число разрешенных порядков увеличивается в 1,5 раза, интенсивность при этом уменьшается всего на 31,7%.

Автор признателен И.М.Франку, Ю.М.Останевичу и В.К.Игнатовичу за полезные дискуссии.

## Приложение

Распределение нейтронов по углам попадания на образец в случае точечного образца:

$$P(\gamma_1) = \frac{1}{2\beta_0} \cdot \begin{cases} 1 & \text{для } |\gamma_1| \leq \beta_0, \\ 0 & \text{для } |\gamma_1| > \beta_0. \end{cases} \quad /1'/$$

Считая распределение  $W(\gamma_0)$  гауссовым, найдем, например, угловой контур дифракционного максимума. Подставляя /1'/ и /9/ в /7/, запишем:

$$\begin{aligned} J(\gamma) &= I_0' \int_{-\infty}^{\infty} P(\gamma + 2\xi \operatorname{tg} \theta_0) W(\gamma + \xi \operatorname{tg} \theta_0) d\xi = \\ &= \frac{I_0'}{2\beta_0 \sqrt{2\pi} \eta} \int_{\frac{-\gamma-\beta_0}{2 \operatorname{tg} \theta_0}}^{\frac{-\gamma+\beta_0}{2 \operatorname{tg} \theta_0}} \exp\left[-\frac{(\gamma + \xi \operatorname{tg} \theta_0)^2}{2\eta^2}\right] d\xi, \end{aligned}$$

пределы интегрирования получены из условия  $|\gamma + 2\xi \operatorname{tg} \theta_0| \leq \beta_0$ .

Сделаем замену переменной  $z = \frac{\gamma + \xi \operatorname{tg} \theta_0}{\sqrt{2}\eta}$ :

$$J(\gamma) = \frac{I_0'}{4\beta_0} \left[ \operatorname{erf}\left(\frac{\gamma + \beta_0}{2\sqrt{2}\eta}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\beta_0 - \gamma}{2\sqrt{2}\eta}\right) \right], \quad /2'/$$

где  $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-z^2) dz$ .

Дисперсия распределения /2'/  $D_J = \int_{-\infty}^{\infty} \gamma^2 J(\gamma) d\gamma = 4\eta^2 + \beta_0^2/3$ .

Функция типа /2'/ несколько неудобна для оценок; более приемлемое выражение получается, если предположить гауссовский вид распределения  $P(\gamma_1)$ . В этом случае вместо /2'/ имеем

$$I(\gamma) = \frac{I_0}{\sqrt{2\pi D_1}} \exp\left(-\frac{\gamma}{2D_1}\right) \quad /3'/$$

с дисперсией  $D_1 = 4\eta^2 + \gamma_0^2$ . Выбирая в качестве критерия наилучшего совпадения распределений /2'/ и /3'/ совпадение их дисперсий, получим  $\gamma_0 = \beta_0/\sqrt{3}$ . Рис. 2 иллюстрирует совпадение распределений  $J(\gamma)$  и  $I(\gamma)$  с  $\gamma_0 = \beta_0/\sqrt{3}$ .

### Литература

1. G.Caglioti, A.Paoletti, F.P.Ricci. *Nucl. Instr. & Meth.*, 9, 195 (1960).
2. M.J.Cooper. *Acta Cryst.*, A24, 624 (1968).
3. B.Buras, A.Holas. *Nucleonika*, XIII, 591 (1968).
4. A.Holas. *Report INR, 742/11/PS, Warsaw, 1966.*
5. S.A.Werner. *Acta Cryst.* A27, 665 (1971).
6. W.Marshall, S.W.Lovesey. *Theory of Thermal Neutron Scattering.* Oxford, 1971.
7. B.T.M.Willis. *Acta Cryst.*, 13, 763 (1960).
8. Д.Бэкон. *Дифракция нейтронов.* ИЛ, 1957.

Рукопись поступила в издательский отдел  
2 ноября 1973 года.