

P14-2002-250

В. И. Горделий, А. И. Куклин

**МАЛОУГЛОВОЕ РАССЕЙНИЕ НЕЙТРОНОВ  
НА РЕАКТОРЕ ИБР-2**

## Введение

Методы изучения малых (от нескольких ангстрем до нескольких тысяч ангстрем) объектов включают в себя, кроме традиционной оптической микроскопии, такие мощные методы как электронный (SEM, STEM, TEM), атомный силовой микроскоп (AFM). Несмотря на свои огромные возможности, необходимо отметить, что эти локальные методы позволяют изучать только поверхность объекта.

Малоугловое рассеяние нейтронов как эффективный метод для изучения фундаментальных проблем и для решения важнейших технологических задач широко применяется при исследованиях надатомной структуры вещества [1]. Он используется в физике конденсированного состояния, физико-химии дисперсных систем, агрегатов поверхностно-активных веществ, биофизике и молекулярной биологии, для исследования полимерных веществ, в металлургии и других областях науки и техники. Важнейшей особенностью малоуглового рассеяния является возможность анализа структуры разупорядоченных систем. Этот метод, например, часто является единственным способом получения прямой структурной информации о системах с хаотическим и частично упорядоченным расположением неоднородностей плотности с характерными размерами порядка 10 – 10000 Å; он дает возможность исследовать дисперсную структуру сплавов, порошков, стекол (механизмы разделения фаз, размер и степень полидисперсности частиц), особенности строения полимеров в различных агрегатных состояниях, весовые и геометрические характеристики биологических макромолекул и их комплексов, биологические надмолекулярные структуры, такие, как биологические мембраны и вирусы. Существенное различие длин рассеяния нейтронов на водороде и дейтерии, а также возможность избирательного дейтерирования макромолекул и надмолекулярных структур делает малоугловое рассеяние нейтронов незаменимым инструментом исследования биологических, коллоидных объектов, а также полимеров и жидких кристаллов.

Малоугловое рассеяние нейтронов имеет ряд важнейших особенностей, отличающих его от малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРР). Это прежде всего определяется общими особенностями взаимодействия тепловых нейтронов с веществом: большой глубиной проникновения в вещество, зависимостью рассеяния от изотопного состава вещества и от его магнитных свойств, что делает малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) незаменимым методом исследования структуры вещества.

Все малоугловые спектрометры в мире имеют огромный спрос на измерительное время для проведения экспериментов. Это свидетельствует об огромных возможностях этого метода. И, конечно же, не случайно, что именно этот метод был доминирующим в научной деятельности Юрия Мечиславовича Останевича.

Установка малоуглового рассеяния по методу времени пролета была введена в строй сначала на реакторе ИБР-30 [2], а затем и на высокопоточном импульсном реакторе ИБР-2 Ю.М.Останевичем с коллегами [3]. Первый спектрометр малоуглового рассеяния располагался на 5-м канале реактора

ИБР-30. Малоугловой спектрометр имел щелевую коллимацию, а в качестве детекторов служили пропорциональные счетчики типа NW1-52, которые располагались вертикально в плоскости, перпендикулярной пучку. Примечательно, что центральная часть плоскости детектирования, через которую проходил прямой пучок, не была занята ни счетчиками, ни какими-либо конструкционными материалами. Такая конструкция (эта идея – пропускать прямой пучок – была позже реализована и на ИБР-2) позволяла весьма эффективно снизить фон от прямого пучка в области детекторов.

Следующим шагом по развитию малоугловых спектрометров было создание на реакторе ИБР-2 установки МУРН, расположенной на 4-м канале [4]. Созданная установка является уникальной как по характеристикам, по геометрии, так и конструктивной реализации. В частности, геометрия установки – аксиально-симметричная, детекторы имеют отверстие в центральной части для пропускания прямого пучка и перед детектором находится стандартный рассеиватель (металлический ванадий), с помощью которого во время измерения образца регулярно производится абсолютная калибровка сечения рассеяния с систематической погрешностью не более 10%. Несмотря на то, что в последнее время спектрометр существенно модернизировали, идеи, заложенные Ю.М.Останевичем, созданная установка работают до сих пор на физику, химию, молекулярную биологию и биофизику, материаловедение.

Спектрометр ЮМО (назван в честь Ю.М. Останевича) является установкой малоуглового рассеяния нейтронов, обеспечивающей широкий круг систематических исследований в различных областях физики конденсированного состояния вещества, физико-химии и биологии на мировом уровне. Более 50% экспериментов на установке выполняются зарубежными исследователями или в тесном сотрудничестве с ними.

## Метод малоуглового рассеяния нейтронов, конкретные реализации инструментов, их сравнение

Из названия “малоугловое” становится ясно, что рассеяние идет на малые углы. Второй важный момент - это то, что из всех видов рассеяния нас интересует только когерентная и упругая составляющие.

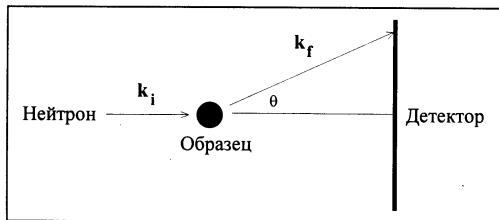


Рис.1. Схема малоуглового эксперимента

На рис.1 представлена схема малоуглового эксперимента. Основными элементами установки и эксперимента должны быть источник нейтронов с

коллимирующей системой, образец и детектор. Интенсивность, получаемая на детекторе определяется как:

$$J_s = I_o(\lambda)\varepsilon(\lambda)T_s(d\Sigma/d\Omega)_s\Omega_s d_s, \quad (1)$$

где  $I_o(\lambda)$  – интенсивность нейтронного пучка на образце;  $\varepsilon(\lambda)$  – эффективность детектора,  $T_s$  – пропускание образца,  $\Omega_s$  – телесный угол, под которым виден детектор из позиции образца,  $d_s$  – толщина образца,  $(d\Sigma/d\Omega)_s$  – дифференциальное сечение рассеяния  $1 \text{ см}^3$  образца.

Интересующим экспериментатора параметром в уравнении (1) является дифференциальное сечение рассеяния, причем только когерентная составляющая. Для того чтобы получить этот параметр в абсолютных единицах, нужно провести измерение вещества с известным сечением. На большинстве малоугловых инструментов поступают так: помещают в позицию образца, например, воду. Заменяя индексы “s” в (1) в этом случае на “w” и нормируя, получим

$$\frac{J_s}{J_w} = \frac{T_s(d\Sigma/d\Omega)_s\Omega_s d_s}{T_w(d\Sigma/d\Omega)_w\Omega_w d_w}, \quad (2)$$

где знаки w относятся к рассеянию на воде. Таким образом, интересующее нас сечение рассеяния будет выражаться как

$$(d\Sigma/d\Omega)_s = \frac{J_s T_w \Omega_w d_w}{J_w T_s \Omega_s d_s} (d\Sigma/d\Omega)_w. \quad (3)$$

Для того чтобы определить левую часть в уравнении (3), необходимо произвести дополнительный эксперимент по измерению пропускания образца и стандартного рассеивателя. Другой подход, реализованный на установке МУРН Ю.М.Останевичем, сводится к тому, что измерения стандартного рассеивателя производятся непосредственно в процессе эксперимента с образцом.

Стандартная процедура измерения на малоугловой установке ЮМО включает в себя измерение образца ( $J_s$  – интенсивность на детекторе),

$$J_s = I_o(\lambda)\varepsilon(\lambda)T_s(d\Sigma/d\Omega)_s\Omega_s d_s, \quad (4)$$

и измерение образца с ванадием одновременно ( $J_{s+v}$ ) [4]. Геометрия установки предусматривает, что во втором случае измерение включает в себя первое измерение:

$$J_{s+v} = J_s + I_o(\lambda)\varepsilon(\lambda)T_v T_s(d\Sigma/d\Omega)_v\Omega_v d_v, \quad (5)$$

где  $I_o(\lambda)$  – интенсивность нейтронного пучка на образце;  $\varepsilon(\lambda)$  – эффективность детектора;  $T_v$  – пропускание ванадиевого рассеивателя;  $\Omega_v$  – телесный угол, под

которым виден детектор из позиции ванадиевого рассеивателя;  $d_v$  – толщина ванадиевого стандарта;  $(d\Sigma/d\Omega)_v$  – дифференциальное сечение рассеяния ванадиевого стандарта. Эти короткие измерения чередуясь повторяются для того, чтобы исключить влияние долговременных колебаний мощности реактора в процессе эксперимента.

Из комбинации (4) и (5) можно получить

$$\frac{(d\Sigma/d\Omega)_s}{(d\Sigma/d\Omega)_v} = \frac{J_s}{J_{s+v} - J_s} \frac{T_v \Omega_v d_v}{\Omega_s d_s} \quad (6)$$

Из уравнения (6) и схемы измерений видно, что, во-первых, проводить дополнительный эксперимент для измерения пропускания образца не нужно, во-вторых, полученный результат устойчив к долговременным колебаниям мощности, и, наконец, в-третьих, можно проводить обработку данных непосредственно в процессе эксперимента.

Другой отличительной чертой спектрометра МУРН является использование центрального отверстия в детекторах для пропускания прямого пучка нейтронов. Пучок нейтронов, падающий на образец, имеет широкий спектр [5] по длине волны, а используются только тепловые нейтроны. Наличие центрального отверстия существенно понижает фон от нейтронов, которые рассеивались бы на конструктивных деталях детектора. Кроме того, центральное отверстие в детекторах позволило начать в 2000 году работу на спектрометре в так называемом двухдетекторном варианте, который расширил динамический диапазон переданных импульсов в 2 раза и во столько же сократил время на эксперимент [6]. На 4-м канале ИБР-2 используются специфические детекторы, представляющие собой газонаполненные ( $He^3$ ) пропорциональные кольцевые счетчики оригинальной конструкции [7]. Данные детекторы запатентованы. Один из соавторов этих работ – Ю.М.Останевич. Подобные детекторы автоматически, не используя компьютерную обработку, производят суммирование данных по каждому из кольцевых детекторов. Не имея, правда, азимутальной чувствительности, подобные детекторы показали исключительно высокую работоспособность и нетребовательность к обслуживанию в течение продолжительного времени.

## Объекты исследования на МУРН

В данной главе будут рассмотрены только те объекты, которые исследовались на малоугловой установке в Дубне до 1993 года. По каждому из направлений исследований будут рассмотрены только некоторые работы, которые, как представляется авторам, характеризуют разностороннюю и эффективную работу Ю.М.Останевича. Мы надеемся, что вместе с обзорами других авторов будет представлена достаточно полная характеристика научной активности Ю.М.Останевича в области исследований с помощью малоуглового рассеяния нейтронов.

Представляет интерес обзор, подготовленный еще до начала исследований на установке МУРН на ИБР-2 [8]. Здесь были рассмотрены вопросы

теоретического и практического применения малоуглового рассеяния для изучения биологических объектов. В частности, приведены краткие сведения о взаимодействии тепловых нейтронов с ядрами, дано сравнение амплитуд рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов, сделан ряд выводов, например, о роли некогерентного сечения в малоугловом рассеянии нейтронов, которое мало для всех атомов, за исключением атома водорода. Соответственно делается вывод о необходимости дейтерирования водородсодержащих материалов для существенного уменьшения фонового рассеяния. В разделе об упорядоченности и структурных исследованиях обсуждается степень разрешимости задачи восстановления пространственного распределения плотности в исследуемом объекте, которая зависит от периодичности исследуемой структуры. Наличие большого числа структурных уровней в молекулярной биологии создает широкие возможности для методов как высокого (дифракция), так и низкого разрешения (малоугловое рассеяние). Рассмотрены также теоретические подходы для изучения однородной и неоднородной частиц, радиуса инерции, приближение Гинье, определения молекулярной массы и “сухого” объема частицы, приведены таблицы амплитуд рассеяния аминокислотных остатков и нуклеотидов, нейтронографические характеристики биологических макромолекул, рассмотрены практические аспекты экспериментальных исследований – определение точек компенсации, молекулярных масс и объемов, радиусов инерции, изучение крупномасштабных неоднородностей в частице. Интересен также раздел об итогах и перспективах, где отмечена, в частности, необходимость использования координатно-чувствительных детекторов, а для импульсных источников нейтронов добавляется возможность одновременно с широким диапазоном углов использовать весь спектр тепловых нейтронов и тем самым вести измерения в трехмерном объеме пространства векторов рассеяния.

### **Исследование липидных и биологических мембран**

Ю.М.Останевич внес существенный вклад в развитие исследований биологических объектов с помощью малоуглового рассеяния нейтронов на установке МУРН. В начале 80-х годов начались исследования структуры модельных биологических мембран на дифрактометре ДН-2. А затем была выполнена первая работа по изучению структуры мультислойных мембран на установке МУРН [9]. И хотя работа такого типа могла бы быть успешно выполнена и на рентгеновском дифрактометре, она была методически важной и позволила оценить некоторые возможности малоуглового рассеяния нейтронов в исследованиях мультислойных мембран на установке МУРН.

Следующая же работа на МУРН по исследованию кластерной структуры липидного бислоя могла быть выполнена только с помощью рассеяния нейтронов. Существующие на то время литературные данные говорили в пользу того, что в латеральном направлении мембрана не является однородной. В 1982 В.Г. Ивков [10], анализируя экспериментальные данные, высказал гипотезу динамической кластерной структуры липидного бислоя. В соответствии с этой концепцией, на границах между кластерами должны быть дефекты, заполненные водой. Рассеивающие плотности липидов и воды близки как в случае нейтронов, так и рентгена. Однако для нейтронов контраст между липидной частью и дефектами, заполненными тяжелой водой, огромен. Ю.М. Останевич сразу поддержал этот

эксперимент и оказал неоценимую помощь в реализации эксперимента. Эти исследования внесли важный вклад в развитие кластерной модели липидного бислоя и позволили впервые оценить размер кластеров и выяснить топологию границ доменов [11-13].

### Полимеры и их свойства

Исследования полимеров на установке МУРН были начаты с изучения полиэлектролитов [14,15]. Полиэлектролиты – это макромолекулы, содержащие группы атомов, способные в определенных условиях диссоциировать, образуя заряженный полиион и малые противоионы. В растворе молекула полиэлектролита – полиион, окруженный эквивалентным количеством противоионов. Заряды, возникающие на макромолекуле, меняют и конформацию макромолекулы и свойства самого растворителя. Благодаря электростатическому отталкиванию макромолекула полииона стремится развернуться, нарушая тем самым форму обычного статистического клубка.

В работе [16] представлены результаты исследования водных растворов полиметакриловой кислоты при различных степенях ее нейтрализации. Одни и те же растворы были исследованы с помощью малоуглового рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов. Изучалась гидратация и локальная конформация полиметакриловой кислоты в растворе тяжелой воды при концентрации полимера  $0.036 \text{ г.см}^{-3}$ , в диапазоне степеней нейтрализации от 0 до 1 с нейтрализующими добавками на основе натрия и лития. Было обнаружено большое различие радиусов инерции поперечного сечения. Интерпретация этого сделана на основе представлений о гидратной оболочке, окружающей полиион. Толщина оболочки соответствует мономолекулярному слою воды с плотностью, превышающей плотность нормальной воды на 10%. Наблюдается также и монотонно возрастающая конденсация противоионов на полимерной цепи с ростом степени нейтрализации. Обнаружено, что персистентная длина при степени нейтрализации 0.5 составляет  $12 \text{ \AA}$ , в то время как при степени нейтрализации 0.2 длина была  $8 \text{ \AA}$ . Интересно, что персистентная длина при увеличении степени нейтрализации выше 0.5 остается постоянной. Длина персистенции определяется взаимодействием нескольких соседних по цепи мономеров. Ее постоянство при степени нейтрализации меньше 0.2 указывает на то, что в этой области маловероятно появление двух и более ионизированных мономеров в качестве ближайших соседей. А это как раз и приводит к тому, что локальная структура цепи остается неизменной, а длина персистенции полииона при низких степенях ионизации совпадает с длиной персистенции для нейтральной цепи. Что касается стабилизации персистентной длины при увеличении степени нейтрализации выше 0.5, то авторы объясняют это тем, что массивная гидратная оболочка также оказывает определенное влияние на длину персистенции как путем создания стерических ограничений на поворотную подвижность мономеров, так и локальным изменением диэлектрической проницаемости.

В следующих работах по изучению полиэлектролитов изучалась межмолекулярная корреляционная функция в полуразбавленных бессолевых растворах полиметакриловой кислоты [17,18]. В описанной выше работе были получены данные о строении поперечного сечения гидратированного полииона и

о связывании противоионов. Эту информацию удалось получить исследуя кривую рассеяния в области сравнительно больших длин вектора рассеяния, где эффекты межмолекулярной интерференции играют пренебрежимо малую роль. Исследование растворов полиэлектролитов в масштабах размеров отдельной макромолекулы, однако, сильно затруднено тем, что в области малых переданных импульсов кривая рассеяния определяется двумя функциями – структурным фактором и формфактором, зависящими от внутримолекулярной и межмолекулярной интерференции. В [17] описывается, что с помощью малоуглового рассеяния нейтронов исследованы межмолекулярные корреляции в бессолевах растворах полиметакриловой кислоты (ПМК). Вид этой функции существенно зависит от степени нейтрализации ПМК. При нулевой степени нейтрализации относительная концентрация мономеров близка к 1 и почти не зависит от расстояния до мономерного звена, выбранного в качестве начала координат и принадлежащего выделенной макромолекуле. Для всех степеней нейтрализации от 0 до 1 функция межмолекулярных корреляций является монотонно возрастающей функцией, достигающей 1 в области 120 – 150 Å.

Осцилляций, которые можно было бы рассматривать как указания на упорядочение макромолекул в растворе, не было обнаружено. Сама же форма кривых функций межмолекулярных корреляций согласуется с концепцией корреляционной полости. Радиус такой полости немонотонно зависит от степени нейтрализации: в первой области преобладающую роль играет межмолекулярное отталкивание, а во второй – разбухание макромолекул и их взаимное проникновение, связанное с нехваткой свободного объема в растворе.

Другое направление в изучении полимеров – изучение жидкокристаллических полимеров [18]. Образец при приготовлении ориентировался в магнитном поле. Данные были получены как на рентгеновском, так и на нейтронном малоугловых спектрометрах. Но если для рентгеновской установки использовался позиционно-чувствительный детектор, то для нейтронного спектрометра – кольцевой детектор, не имеющий азимутальной чувствительности. Благодаря специальной методике [19] были получены проекции радиуса гирации, измеренные вдоль и перпендикулярно смектическим слоям.

## Материаловедение

Первые эксперименты в этом направлении были связаны с исследованием металлического стекла при низкотемпературном отжиге [20,21]. В качестве предмета исследования был взят  $Ti_{41}Zr_{41}Si_{18}$ . Изучалась тепловая стабильность такого металлического стекла. Приведены и обсуждаются данные для отожженного стекла при 500°C для различных времен. Обнаружены сравнительно крупные (около 100 Å) неоднородности, которые при низкотемпературном отжиге полностью релаксируют в стеклообразное состояние. Релаксация неоднородностей сопровождается аномальной зависимостью микротвердости сплава от температуры. В этой работе обсуждаются возможные микроскопические модели и ограничения, накладываемые на них имеющимися экспериментальными данными, в частности, оценивается вклад флуктуаций плотности. Было показано, что исследованные материалы релаксируют полностью. Это обстоятельство, а также корреляция с аномальной температурной



зависимостью микротвердости позволила авторам работы с уверенностью исключить роль поверхностных неоднородностей. Описанные в работе явления представляют интерес с точки зрения существования иерархии неравновесных структур в металлических стеклах.

Юрий Мечиславович Останевич очень легко откликнулся на новое. Примером этому может служить работа по изучению фрактальных свойств апатит-карбонатных руд [22]. Исследовалась структура основных компонентов таких руд. Было показано, что поверхности минеральных зерен карбонатов, взятых из различных сортов руд, являются фрактальными с фрактальными размерностями между 2 и 2.25. Работа позволила сделать вывод, что для апатитов фрактальная пористость более развита. Эта работа была важна для понимания процессов флотации, использующихся для обогащения руд.

### **Изучение малых молекул**

Ю.М.Останевич активно занимался возможностью применения малоуглового рассеяния для изучения малых молекул [23, 24]. Такие эксперименты не легко реализовать из-за того, что сечение рассеяния каждой одиночной частицы падает как квадрат объема. В то же самое время фон (от всех источников) остается неизменным. Это лимитирует нижнюю границу молекулярных весов исследуемых объектов. С другой стороны, для нейтронного малоуглового рассеяния можно использовать методику изотопного замещения, что приводит к существенному росту интенсивности рассеяния, поскольку последняя пропорциональна квадрату контраста. Для столь низких сечений рассеяния Юрий Мечиславович предложил специальную процедуру [23], где помимо стандартного учета некогерентной амплитуды рассеяния применялись процедуры переливания образца-фона, периодическое измерение пустой кюветы и независимое измерение ванадиевого стандарта 3-мм толщины в качестве образца. Были реализованы эксперименты с зависимостью свойств образцов от температуры и концентрации, вариации контраста в изотопических смесях воды, а также измерения формфактора одиночных частиц с использованием смесей протонированной и дейтерированной тетраметилурии (ТМУ) в двух различных смесях тяжелой и легкой воды. В результате удалось выяснить, что в водных растворах ТМУ происходят структурные изменения, гидрофобное взаимодействие между молекулами ТМУ становится более сильным при высоких температурах, взаимодействующие пары представлены в относительно разбавленных растворах, а предпочтительной организацией для водных молекул является сферическая оболочка. Полученные радиусы гирации для разных смесей были около 3Å. Это действительно был тонкий и уникальный эксперимент.

### **Изучение плотности воды в малых объемах**

Вопрос о плотности воды в малых объемах активно изучался Н.И. Горским и Ю.М. Останевичем [25-27]. Были изучены обращенные мицеллы в системе АОТ (натриевая соль 1,4 –бис-(2-этилгексил)-2-сульфосукциновой кислоты) – бензол – вода. Используя метод вариации контраста растворителя, установили, что объем, приходящийся на одну молекулу АОТ, неожиданно возрастает. Оказалось, что с добавлением в систему тяжелой воды происходит драматическое увеличение

объема, которое превышает ожидаемое исходя из объема воды. В [27] приведена зависимость объема воды в зависимости от молярного соотношения воды и АОГ. Обнаружено, что увеличение объема происходит более чем в 3 раза. Следовательно, если говорить о плотности, то в малых объемах происходит соответствующее уменьшение плотности. Этот вывод является фундаментальным, основанным на бесспорных экспериментальных данных.

## Будущее МУРН

### Основные тенденции в развитии МУРН

Несмотря на свой солидный возраст (более 30 лет) малоугловое рассеяние нейтронов как метод имеет большие перспективы и возможности. Основное изменение, которое произошло за эти годы, – способы детектирования нейтронов. Практически все используемые ныне детекторы – это позиционно-чувствительные детекторы большой площади. Позиционная чувствительность дает возможность изучать анизотропные объекты, а большая площадь позволяет расширить диапазон по переданному импульсу, что позволяет решить, по крайней мере, две задачи: сократить время на накопление экспериментальных данных и, для веществ с необратимым фазовым переходом, произвести одновременные измерения в максимально возможном диапазоне переданных импульсов ( $q$ -диапазоне). В обзоре [8] (1982 г.) была отмечена эта тенденция в развитии малоуглового рассеяния нейтронов.

Кроме того, большинство исследовательских каналов снабжены холодным замедлителем. Проект такого замедлителя реализован и на ИБР-2, на малоугловой установке в том числе, с активным участием Ю.М.Останевича, хотя измерения с первым метановым замедлителем начались только в 1994 году.

Одно из важнейших изменений, происшедшее с начала развития МУРН, — использование метода вариации контраста, и здесь Юрий Мечиславович внес свой достойный вклад вместе с коллегами, проведя экспериментальную проверку метода тройного изотопического замещения в малоугловом нейтронном рассеянии [28].

За последние годы изменения коснулись также и возможности создания различных условий на образце. Это не только температура и давление, но и освещение образца, травление пленок, помещение образцов с магнитными (а иногда и немагнитными) свойствами в сильное магнитное поле и т.п. Большинство указанных условий создают анизотропию на образце и поэтому требуют изучения с помощью позиционно-чувствительного детектора (ПЧД).

Следующим шагом в развитии является метод вращения анизотропного образца – предложенный и теоретически обоснованный Д.Светогорски метод получения дополнительной информации об анизотропии исследуемого объекта при помощи поворота образца [29, 30]. Этот вопрос неоднократно обсуждался с Ю.М.Останевичем. И только отсутствие ПЧД на малоугловой установке в Дубне не позволило реализовать тогда такие эксперименты, однако они были реализованы впервые на малоугловой установке в Юлихе в 1996 году. На конференции по малоугловому рассеянию нейтронов была представлена работа, где приводился пример практического применения такого метода [31]. Метод

вращения образца использовался также и при изучении трековых мембран [32]. Было установлено, что для хорошо ориентированных, монодисперсных отверстий, возникающих в полимерных пленках в результате облучения высокоэнергетическим потоком тяжелых ядер и последующего травления, ориентация образца чрезвычайно важна для получения информации о размерах таких пор.

Решение задач методом малоуглового рассеяния нейтронов определяется прежде всего состоянием установок. Одним из главных направлений развития является существенное улучшение разрешения и продвижение в сторону меньших переданных импульсов и, соответственно, в область больших размеров, к так называемым USANS-спектрометрам [33,34].

Кроме того, для стационарных реакторов осуществляются попытки получить хорошее разрешение с помощью установки совершенных кристаллов и позиционно-чувствительных детекторов с хорошим пространственным разрешением см., например, [35].

Ю.М.Останевич вместе с Ю. Никитенко предложили оригинальный метод получения поляризованных нейтронов на импульсных нейтронных источниках, используя качающийся поляризатор [36], позволяющий увеличить степень поляризации в расширенном диапазоне длин волн.

Интересным направлением в развитии МУРН может быть использование информации о степени протонирования (дейтерирования) образца. Как можно из малоугловых данных получать эту информацию, описано в работе [37].

И, наконец, важнейшим направлением является развитие методов обработки данных. Как уже отмечалось выше, Ю.М.Останевич, предложив с коллегами оригинальный детектор, фактически упростил процедуру обработки. Много его идей и решений заложено в программу первичной обработки данных SAS [38]. Эта программа является основной для первичной обработки данных до сих пор.

## **О конкуренции и взаимодополняемости МУРН, МУРР и микроскопии**

Во введении уже кратко отмечались особенности методов МУРН, МУРР и различных видов микроскопии. Для того чтобы адекватно оценивать тенденции в развитии и перспективы, нужно еще раз сформулировать достоинства и недостатки методов. В таблице представлены результаты такого сравнения. Отличие микроскопии от методов малоуглового рассеяния прежде всего в характере наблюдения. Если для микроскопии этот параметр является локальным, то для методов малоуглового рассеяния он интегральный.

**Таблица. Сравнение 3-х методов при изучении структуры различных материалов**

№ п/п	Параметр	МУРН	МУРР	Микроскопия
1	Характер наблюдения	Интегральный	Интегральный	Локальный
2	Размеры объекта	10 – 10000Å	10 – 10000Å	20Å- мм
3	Вид пространства изображения	Обратное	Обратное	Прямое
4	Область наблюдения	Объем	Объем	Поверхность, частицы на поверхности
5	Область применимости	Жидкие, твердые, газообразные с хорошим контрастом	Жидкие, твердые, Газообразные с невысоким порядковым номером в таблице Менделеева	Преимущественно твердые
6	Параметры, которые могут быть получены	Форма и размер частиц в матрице, распределение по размерам, плотность внутри частицы, параметры структурной организации, молекулярный вес, агрегационное число, персистентная длина, толщины слоев, фрактальная размерность, мозаичность	Форма и размер частиц, распределение по размерам, плотность внутри частицы, параметры структурной организации, молекулярный вес, агрегационное число, Персистентная длина, толщины слоев, фрактальная размерность, мозаичность	Размер и форма частиц в реальном пространстве, распределение по размерам после обработки существенной площади объекта
7	Особенности	Контраст создается ядерной плотностью между матрицей и глобулами (объектом)	Контраст создается электронной плотностью	Контраст создается электронной плотностью, электронной, рентгеновской и световой отражающими способностями
8	Недостатки	Неоднозначная интерпретация, сложность метода, низкая чувствительность и разрешение	Неоднозначная интерпретация, сложность метода, низкая чувствительность и разрешение	Поверхностные свойства объекта, локальность
9	Преимущества	Вариация контраста, высокая степень проникновения в вещество, "мягкость" по отношению к биологическим и полимерным объектам, возможность изучать магнитные структуры	Высокая скорость накопления данных, доступность и относительная дешевизна	Наглядность, однозначность интерпретации полученного результата

Как видно из таблицы, вопрос о применимости того или иного метода зависит от конкретной задачи. Второй вывод, который можно сделать из той же таблицы, – это то, что указанные методы комплементарны. И, наконец, расширение списка в разделе микроскопии вряд ли существенно изменит содержание и значение разделов, где описываются малоугловые инструменты на основе рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей. У метода малоуглового рассеяния всегда останется поле деятельности, которое не может быть покрыто другими структурными методами.

### Заключение

Созданный Ю.М.Останевицем и его коллегами спектрометр малоуглового рассеяния нейтронов уже доказал свою высокую эффективность в широком круге исследований в физике полимеров, биологии, коллоидной химии, материаловедении. Юрий Мечиславович очень часто выступал идейным вдохновителем и организатором многих научных работ и направлений. Практически все работы, сделанные с помощью малоуглового спектрометра, обсуждались с Ю.М. Останевицем. Его очень точные замечания и вопросы при обсуждении, свидетельствовавшие об энциклопедичности знаний и глубоком понимании физики, нередко давали новое направление исследованиям. Затронутые в этой статье работы – только малая часть того, что стояло за кропотливой, вдумчивой и напряженной работой этого, без всякого сомнения, удивительно талантливого и преданного науке человека.

Авторы благодарят коллег за поддержку и помощь, Г.Н. Бобарыкину за внимательное чтение рукописи, В.Г.Симкина за помощь и настойчивость, без которой этот обзор не появился бы, а Л.П.Черненко за ценные замечания.

### Литература

- [1] Д.И.Свергун, Л.А.Фейгин. Рентгеновское и нейтронное малоугловое рассеяние, “Наука”, Москва, 1986.
- [2] Б.И.Воронов, И.Гладких, Н.И.Лузанов, А.Б.Кунченко, Ю.М.Останевиц, И.Хорват, Л.Чер. Спектрометр для исследования малоуглового рассеяния нейтронов по методу времени пролета. Препринт ОИЯИ P9-451, Дубна, 1976
- [3] В.А.Вагов, А.Б.Кунченко, Ю.М.Останевиц, И.М.Саламатин. Установка малоуглового рассеяния нейтронов по методу времени пролета на импульсном реакторе ИБР-2. Препринт ОИЯИ P83-898, Дубна, 1976.
- [4] Yurii M.Ostanevich. Time-of-flight small-angle scattering spectrometers on pulsed neutron sources, J.Makromol.Chem., macromol.Symp.15, 91-103 (1988).
- [5] Бобарыкина Г.Н., Богдзель А.А., Горделий В.И., Исламов А.Х., Коновалов В.Ю., Куклин А.И., Рогов А.Д. Спектр и нейтронные потоки на 4-м канале реактора ИБР-2. Препринт ОИЯИ P13-2002-249, Дубна, 2002 .

[6] Kuklin A.I., Islamov A.Kh., and V.I. Gordeliy, Two Detectors System for Small Angle Neutron Scattering Instrument, J.App.Cryst., submitted.

[7] Б.Н.Ананьев, А.Б.Кунченко, В.И.Лазин, Ю.М.Останевич, Е.Я.Пикельнер Кольцевой многоконтровой детектор медленных нейтронов с гелием-3  
Сообщения ОИЯИ, 3-11502, Дубна, 1978.

[8] Ю.М.Останевич, И.Н.Сердюк, Нейтронографические исследования структуры биологических макромолекул, УФН, 1982, том 137, вып.1, стр.85-116.

[9] G.Klose, S.Buckner, V.Yu.Bezzabotnov, S.Borbely and Yu.M. Ostanevich. Hydration and swelling of the total lipid fraction of egg yolk and the influence of some additives studied by small-angle neutron scattering. J. Chemistry and Physics of lipids, 41 (1986) 293-307.

[10] В.Г.Ивков, Г.Н.Берестовский. Динамическая структура липидного бислоя, Москва, Наука, 1981.

[11] V.I.Gordeliy, V.G.Ivkov, Yu.M.Ostanevich, L.S.Yaguzhihinsky. Detection of Structural Defects in Lecithin Membranes by Small-Angle Neutron Scattering. The Cluster Model of a Lipid Billayer. JINR Preprint E14-89-652, Dubna, 1989.

[12] В.И.Горделий, Л.С.Ягужинский, Ориентированные модельные мембраны для нейтронографических исследований. Журнал Биофизика, 34, вып.4 (1989), 589-592.

[13] V.I.Gordeliy, V.G.Ivkov, Yu.M.Ostanevich and L.S.Yaguzhihinsky Detection of structural defects in phosphatidylcholine membranes by small-angle neutron scattering. The cluster model of a lipid bilayer Bioch. et Biophys. Acta 1061 (1991) 39-48.

[14] В.Ю.Беззаботнов, Д.Главата, Ю.М.Останевич, И.Плештил. Малоугловое рассеяние в растворах полиэлектролитов: Гидратация и конформация полиметакриловой кислоты. Препринт ОИЯИ P14-85-923, Дубна, 1985.

[15] J.Plestil, Yu.M. Ostanevich and V.Yu.Bezzabotnov and D.Hlavata. Small-angle scattering by polyelectrolyte solutions. Hydration and conformation of poly(methacrylic acid). Polymer, 1986, Vol 27, 1241-1246.

[16] В.Ю.Беззаботнов, Д.Главата, И.Лабски, Ю.М.Останевич, И.Плештил. Малоугловое рассеяние в растворах полиэлектролитов: Межмолекулярная корреляционная функция в полуразбавленных бессолевых растворах полиметакриловой кислоты. Препринт ОИЯИ P14-86-692, Дубна, 1986.

[17] J.Plestil, Yu.M. Ostanevich and V.Yu.Bezzabotnov and D.Hlavata and J.Labsky. Small-angle scattering from polyelectrolyte solutions: Dimensions of poly(methacrylic acid) chains in salt-free solutions. Polymer, 1986, Vol 27, 839-842.

- [18] J.Kalus, S.G.Kostromin, V.P.Shibaev, A.B.Kunchenko, Yu.M. Ostanovich, D.A.Svetogorsky. Small angle neutron scattering study of comb-like liquid crystal polysiloxane macromolecule. Conformation in smectic phase. *J. Mol.Cryst.Liq.Cryst.* 1988, pp. 347-355.
- [19] А.Б.Кунченко, Д.А.Светогорски. Определение радиуса инерции анизотропного объекта методом малоуглового рассеяния нейтронов с помощью детектора, не имеющего азимутальной чувствительности. Препринт ОИЯИ Р14-86-855, Дубна, 1986.
- [20] В.Ю.Беззаботнов, Ш.Борбей, Ю.К.Ковнеристый, Т.В.Могутова, Т.Т.Нартова, Ю.М.Останевич, Л.С.Смирнов, О.Б.Тарасова. Наблюдение в быстрозакаленных сплавах неоднородностей, релаксирующих в металлическое стекло при низкотемпературном отжиге. Препринт ОИЯИ Р14-88-290, Дубна, 1988.
- [21] S.Borbely, L.S.Smirnov, Yu.K.Kovneristii, T.T.Nartova, O.B.Tarasova, V.Yu.Bezzabotnov and Yu.M.Ostanovich. Thermal Stability of  $Ti_{41}Zr_{41}Si_{18}$  Metallic Glass studied by Small-Angle Neutron Scattering. *J. Phys.Stat sol.* 164, 343-350 1991.
- [22] V.Yu.Bezzabotnov, V.I.Gordely, A.A.Kornyshev, A.K.Kostin, Yu.M.Ostanovich. On the fractal nature of carbonate and apatite rocks. *JINR Preprint*, E14-89-336, 1989
- [23] V.Yu.Bezzabotnov, L.Cser, T.Grosz, G.Jancso and Yu.M.Ostanovich. Small-Angle Neutron Scattering in Aqueous Solutions of Tetramethylurea. *J. of Physical Chemistry*, 96, pp. 976-982 1992.
- [24] L.Cser, B.Farago, T.Grosz, G.Jancso and Yu.M.Ostanovich. Structure and dynamics of aqueous solutions of tetramethylurea. *Physica B* 180&181 (1992) 848-850.
- [25] Н.И.Горский, Ю.М.Останевич. Обращенные мицеллы в системе АОТ - Бензол - вода; Исследования малоугловым рассеянием нейтронов. Препринт ОИЯИ Р14-89-522, Дубна, 1989.
- [26] Nikolai Gorski and Yurii Ostanovich. Inverted Micelles in a Ternary System AOT-Water-Benzene as Studied by Small-Angle Neutron Scattering. *Ber.Bunsenges.Phys.Chem.* 94, 737-741 (1990).
- [27] N.Gorski and Y.M.Ostanovich. Small-angle neutron scattering (SANS) determination of the volume occupied by a single water molecule in the inverted micellar systems AOT + X(H,D)2O + C10 D22 by internal contrast variation technique. *Jorurnal De Physique IV*, volume 3, 149-152, декабрь 1993 г.
- [28] M.Yu.Pavlov, I.N.Rublevskaya and I.N.Serdyuk, G.Zaccai, R.Lieberman and Yu.M.Ostanovich. Experimental Verification of the Triple Isotopic Substitution Method in Small-Angle Neutron Scattering. *J.Appl.Cryst* (1991) 24, 243-254.
- [29] А.Б.Кунченко, Д.А.Светогорски, И.Сивриев. Исследование анизотропных структур методом малоуглового рассеяния нейтронов при помощи поворота образца. Препринт ОИЯИ, Р14-89-608, Дубна, 1989.

- [30] D.Svetogorsky. The properties of Anisotropic Small-Angle Scattering  
J.Appl.Cryst.1990, 23,79-81.
- [31] Jun-ichi Suzuki. Three-dimensional small-angle neutron scattering (3D-SANS)  
analysis and its applications. J. Appl.Cryst.(2000). 33, 785-787.
- [32] G.Pepy, A.Kuklin. An orientation process to study nuclear membranes by small  
angle neutron scattering. Nucl.Instr. and Meth. B 185 (2001) 198-203.
- [33] H.Matsuoka, T.Harada, T.Ikeda,H.Yamaoka. Ultra-small-angle X-ray and neutron  
scattering studies on colloidal crystals. J. Appl.Cryst.(2000). 33, 855-859.
- [34] M.M.Agamalian, et al. Phase behavior of blends of linear and branched  
polyethylenes on micron length scales via ultra-small angle neutron scattering  
(USANS). J. Appl.Cryst.(2000). 33, 843-846.
- [35] M.Hainbuchner et al. The new high resolution ultra small-angle neutron scattering  
instrument at the High Flux Reactor in Grenoble. J. Appl.Cryst.(2000). 33, 851-854.
- [36] Yu.V.Nikitenko and Yu.M.Ostanevich.  
Proposal of a wide-band mirror polarizer of slow neutrons at a pulsed neutron source.  
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A325 (1993) 485-488.
- [37] V.Yu.Bezzabotnov and Yu. M.Ostanevich.  
Solution of some experimental problems met in the time-of-flight small angle neutron  
scattering. Physica B 156&157 (1989) 595-597.
- [38] <http://www.jinr.ru/~tsap/Koi/jinrlib/Xw012.htm>

---

Получено 25 ноября 2002 г.



Горделий В. И., Куклин А. И.  
Малоугловое рассеяние нейтронов на реакторе ИБР-2

P14-2002-250

Этот небольшой обзор посвящен Ю. М. Останевичу, лауреату Государственной премии РФ за 2000 год в области науки и техники, внесшему выдающийся вклад в создание высокоэффективного малоуглового спектрометра мирового уровня на ИБР-2. Этот обзор не претендует на освещение всей многогранной научной деятельности Ю. М. Останевича в области малоуглового рассеяния нейтронов. Но мы хотели бы подчеркнуть решающий вклад Ю. М. Останевича в создание уникального спектрометра на реакторе ИБР-2 и его выдающийся вклад в развитие исследований в различных областях науки на этом спектрометре.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Gordeliy V. I., Kuklin A. I.  
Small Angle Scattering at the IBR-2 Reactor

P14-2002-250

This is a short review intended to honor the eminent Russian physicist Professor Yu. M. Ostanovich, laureate of the 2000 Award of the Russian Federation on Science and Technology for substantial contribution to the development of highly effective SANS spectrometer at IBR-2. Not pretending to highlight all the numerous sides of his scientific activities, in this review we wanted to emphasize his decisive role in installation of the unique spectrometer at IBR-2 and his notable contribution to the development and investigation of different scientific fields at this spectrometer.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*  
Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 24.12.2002.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.

Усл. печ. л. 0,94. Уч.-изд. л. 1,39. Тираж 280 экз. Заказ № 53683.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований  
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: [publish@pds.jinr.ru](mailto:publish@pds.jinr.ru)

[www.jinr.ru/publish/](http://www.jinr.ru/publish/)