

Дополнит. информация о внутр. структуре частицы можно получить с помощью т. н. метода вариации контраста. При изменении рассеивающей плотности матрицы справедлива ф-ла

$$I(s) = (\Delta\rho)^2 I_c(s) + 2\Delta\rho I_{CS}(s) + I_S(s), \quad (14)$$

где $I_c(s)$ — рассеяние «формой» частицы, $I_S(s)$ — рассеяние на её неоднородностях (т. е. при $\Delta\rho = 0$), $I_{CS}(s)$ — перекрёстный член. Аналогичные зависимости можно записать и для инвариантов. Для многокомпонентных частиц можно также «заменить» одну из компонент (поместив рассеивающие частицы в среду с плотностью, равной плотности этой компоненты) аналогично тому, как это делается в оптике (см. Иммерсионный метод), и наблюдать рассеяние на остальных компонентах.

Вариация контраста может быть применена и в несколько другом виде, когда изменяют не плотность матрицы, а плотность отд. участков частицы и, анализируя изменения в кривой рассеяния, находят расстояние между этими участками. В М. р. рентг. излучения для этого присоединяют к частице тяжёлоатомные метки (вводят в молекулы тяжёлые атомы), в М. р. нейтронов применяют изотопное замещение. Вариаций конт-

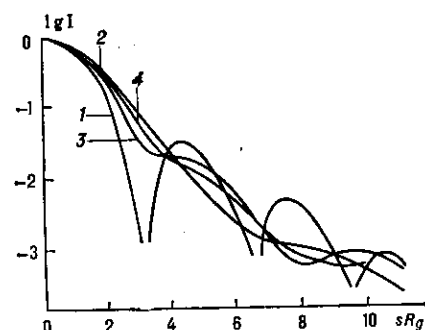


Рис. 3. Нормированные интенсивности малоуглового рассеяния частицами различной формы с одинаковыми R_g и v : 1 — шаровой слой; 2 — трёхосный эллипсоид с отношением осей 0,5 : 1 : 1,5; 3 — четыре соприкасающихся эллипсоида вращения; 4 — литая модель по мотивам модели 3.

раста удаётся добиться в рентгеновских экспериментах также с использованием аномального пропускания эффекта.

Существуют также прямые методы интерпретации интенсивности М. р., где при определ. ограничениях удаётся восстанавливать структуру частиц — ф-цию $\rho(r)$. Простейший случай — сферически-симметричная частица. В этом случае

$$\rho(r) = \rho(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty (\pm \sqrt{I(s)}) \frac{\sin sr}{sr} s^2 ds \quad (15)$$

и для восстановления структуры требуется установить знак для амплитуд рассеяния $\sqrt{I(s)}$. Для аксиально-симметричных частиц удаётся с помощью разложения по сферическим гармоникам синтезировать ограниченное число возможных решений, выбор между которыми ведётся с помощью дополнит. информации.

Осн. класс монодисперсных объектов, изучаемых методом М. р., — растворы биополимеров и их комплексов. Метод позволяет определять общие геометрические и весовые характеристики биол. частиц, их форму, а иногда и детали внутр. структуры. На рис. 4 приведён пример восстановления структуры бактериального вируса Т7 в растворе с помощью прямого метода.

Для полидисперсных систем частиц наиб. актуальна задача восстановления ф-ции распределения по размерам $D_N(R)$ из ур-ния

$$I(s) = \int_0^\infty I(sR) D_N(R) dR. \quad (16)$$

Функцию $D_N(R)$ определяют методом М. р. для раствора полимеров, пористых материалов, металлов и сплавов и т. д.

Помимо этого, возможно определение усреднённых по ансамблю значений инвариантов, с помощью к-рых рассчитываются общие характеристики дисперсной фазы. В частности, для двухфазных систем

$$Q = 2\pi^2 \Phi_1 \Phi_2 (\rho_1 - \rho_2)^2 v_0, \quad (17)$$

$$S_0/v_0 = \pi \Phi_1 \Phi_2 c_4 Q,$$

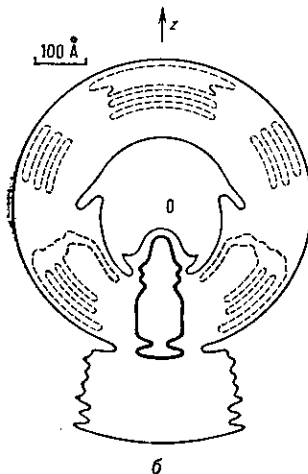
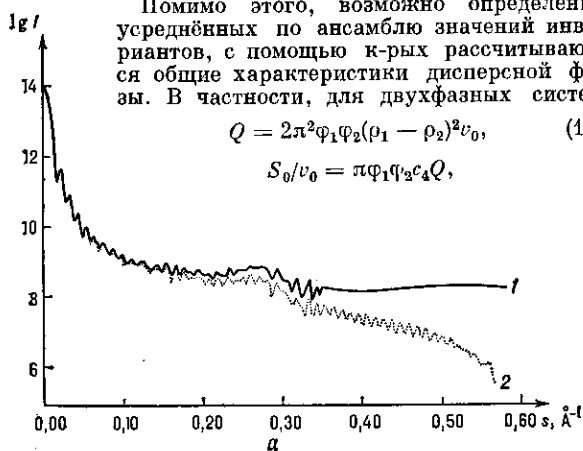


Рис. 4. а — Кривые рентгеновского малоуглового рассеяния бактериофагом Т7 в растворе (1 — экспериментальная кривая; 2 — рассеяние восстановленной структуры); б — восстановленная по данным малоуглового рассеяния структура Т7; рассчитанная в аксиально-симметричном приближении карта электронной плотности (сечение, содержащее ось вращения z). Сплошные изолинии соответствуют электронной плотности $0,38e \cdot \text{Å}^{-3}$ (гидратированный белок), штриховые — $0,42e \cdot \text{Å}^{-3}$ (сильногидратированная ДНК), жирная линия — $0,52e \cdot \text{Å}^{-3}$ (слабогидратированная ДНК).

где S_0 — площадь поверхности раздела фаз. Для получения дополнит. информации о системе используют разл. модификации методов вариации контраста.

М. р. используется также для определения строения частично упорядоченных объектов — т. н. ориентированных систем. В частности, при изучении слоистых структур (кристаллич. полимеры, жидкие кристаллы, тонкие плёнки) по меридиональным рефлексам определяются толщина слоёв D и профиль рассеивающей плотности по нормали к плоскости слоя $\rho(x)$. Для центросимметричного случая

$$\rho(x) = \frac{F_0}{D} + \frac{2}{D} \sum_n \pm |F_n| \cos(-2\pi xh/D), \quad (18)$$

где F_n — амплитуда n -го рефлекса.

Знание профиля электронной плотности позволяет исследовать детали упаковки молекул разного сорта, в частности мультислоевыми структурами. На рис. 5 и 6 приведены рентгенограммы М. р. и распределение $\rho(x)$ для сверхрешётки из двух видов молекул бегената бария и октадецилфенола.

Техника эксперимента. Т. к. распределение интенсивности М. р. рентг. лучей и тепловых нейтронов