

## НОВЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ФИЗИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ

УДК 53.07+538.9

КВАЗИУПРУГОЕ РАССЕЙЯНИЕ НЕЙТРОНОВ  
КАК УНИКАЛЬНАЯ МЕТОДИКА ИЗУЧЕНИЯ  
ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ  
В ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ И ЖИДКОСТЯХ

© Авторы, 2022

doi: 10.25210/jfor-2203-028036 | edn: HSSNIB

**Белушкин А. В.** — член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н., Лаборатория нейтронной физики им. И.М. Франка, Институт ядерных исследований, Дубна; Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва; Институт физики, Казанский федеральный университет, Казань.

E-mail: belushk@nf.jinr.ru

**Аннотация**

Запуск уникального высокопоточного реактора ПИК в Петербургском институте ядерной физики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» требует создания на его базе комплекса высокотехнологичных экспериментальных станций, которые позволят в полной мере использовать его научный потенциал. Одним из типов таких станций могли бы стать спектрометры квазиупругого рассеяния нейтронов для изучения процессов диффузии в твердых телах и жидкостях. В данной работе рассмотрены современные научные проблемы в данной области и современные спектрометры для таких исследований.

**Ключевые слова:** *рассеяние нейтронов, диффузия атомов и молекул, нейтронные спектрометры*

**Abstract**

The start-up of the high flux neutron reactor source PIK at Petersburg Nuclear Physics Institute of NRC “Kurchatov institute” requires a creation on its base a set of advanced experimental stations to fully exploit its scientific potential. One type of these stations could be a quasielastic neutron scattering spectrometers for the investigations of diffusion processes in solids and liquids. Present work outlines the modern research activities in this field as well as existing advanced spectrometers.

**Keywords:** *neutron scattering, diffusion of atoms and molecules, neutron spectrometers*

**Введение**

Запуск в России уникального высокопоточного реактора ПИК в Петербургском институте ядерной физики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» [1] требует создания на его базе комплекса высокотехнологичных экспериментальных станций, которые позволят в полной мере использовать его научный потенциал. Одной из таких станций должен стать, по мнению автора, спектрометр квазиупругого рассеяния нейтронов для изучения процессов диффузии атомов и молекул в твердых телах и жидкостях. Данная методика до сегодняшнего дня не получила своего развития в нашей стране, поскольку для ее эффективной реализации требуются источники нейтронов с высоким потоком нейтронов низких энергий (менее 10 мэВ), что возможно достичь только на реакторах большой мощности и оснащенных специальными низкотемпературными замедлителями. Реактор ПИК предоставляет такие возможности.

Процессы диффузии имеют большое значение в формировании функциональных свойств материалов и возникновения определенных физических и химических свойств. Для их изучения используют ряд методов, среди которых можно отметить микроскопические. К ним относятся диэлектрическая релаксация, релаксация спинов положительных мюонов и ядерный магнитный резонанс. Характерный диапазон времен, доступный для исследований данными методами, составляет от  $10^{-4}$  до  $10^{-12}$  секунд. Недостатком указанных методов является отсутствие чувствительности к пространственным характеристикам процессов диффузии. Рассеяние нейтронов предоставляет исследователю зачастую уникальные возможности для получения информации об исследуемом объекте. Описание этих возможностей и недавние примеры исследований в различных областях естественных наук можно найти, например, в обзоре [2]. Для изучения процессов диффузии на молекулярном и атомном уровнях приведем следующие преимущества нейтронных методов. С их помощью возможно различить трансляционную диффузию, характеризующуюся массопереносом, и локализованную диффузию, например вращения молекул или отдельных молекулярных групп вокруг центра или осей инерции. Достаточно просто вычислить аналитические функции, описывающие эти движения. Пространственные и временные характеристики, изучаемые нейтронными методами,



позволяют проводить прямое сопоставление экспериментальных данных с результатами моделирования методами молекулярной динамики. Водород и дейтерий обладают сильно различными сечениями взаимодействия с нейтроном. Это позволяет особенно эффективно изучать процессы диффузии водорода в веществе, что важно для различных областей знания, как будет подчеркнуто ниже. С помощью частичного детерирования исследуемых многокомпонентных водородсодержащих объектов можно выделять в сигнале нейтронного рассеяния вклады от различных подсистем таких объектов. И, конечно, нейтронные методы не претендуют на всеохватность, но служат важным дополнительным методом для получения наиболее полной и достоверной информации об изучаемых материалах и их микроскопических свойствах. На рис. 1 приведены характерные временные и пространственные интервалы доступные различным микроскопическим методам исследования диффузионных процессов.

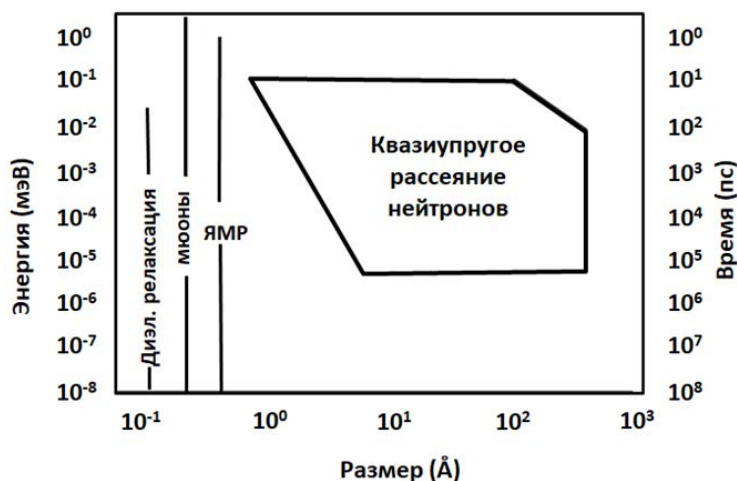


Рис. 1. Диапазон расстояний, характерных времен и энергий, доступный различным методам изучения процессов диффузии

### Описание методики эксперимента

Рассмотрим эксперименты по рассеянию нейтронов, в которых проводится анализ изменения энергии нейтрона.

Схема эксперимента показана на рис. 2. Падающий на образец пучок нейтронов характеризуется волновым вектором  $\vec{k}_i$ , а рассеянный волновым вектором  $\vec{k}_f$ . Угол между этими двумя векторами  $\varphi$  называется углом рассеяния, а вектор  $\vec{q} = \vec{k}_i - \vec{k}_f$  называется вектором рассеяния. Треугольник, образованный этими тремя векторами, называется *треугольником рассеяния*.

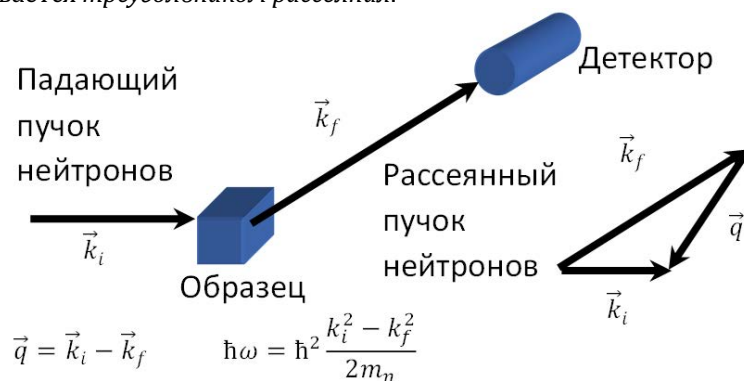


Рис. 2. Схема эксперимента по рассеянию нейтронов.

Очевидно, что можно выделить два случая: когда энергия нейтрона не меняется ( $\delta E = 0$  — упругое рассеяние) и когда энергия нейтрона меняется ( $\delta E = \hbar\omega$  — неупругое рассеяние). Однако в ряде случаев реализуется квазиупругое рассеяние нейтронов, то есть такое, когда процесс взаимодействия нейтрона с веществом приводит к уширению упругой линии, при этом максимум интенсивности рассеяния приходится на нулевое значение изменения энергии. Следующий рис. 3 схематично иллюстрирует эти процессы. На рисунке положительные значения энергии отвечают потере энергии нейтроном при взаимодействии с образцом, отрицательные — соответственно приобретению энергии нейтроном.

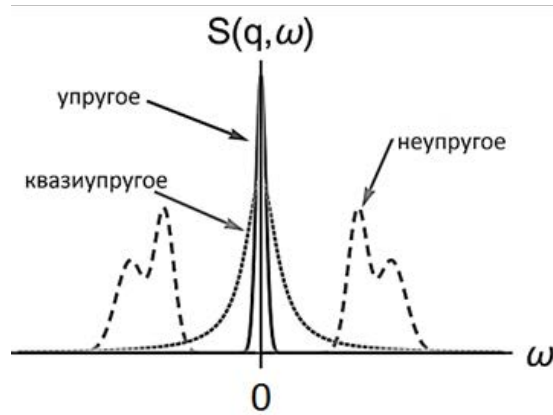


Рис. 3. Схематическая иллюстрация сигналов упругого, неупругого и квазиупругого рассеяния нейтронов.

Характерную разрешающую способность спектрометра  $\Delta E$  для наблюдения процесса диффузии, характеризуемого временем  $\tau$ , можно оценить с помощью соотношения неопределенностей Гейзенберга

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar \quad (1)$$

Видно, что для наблюдения быстрых процессов (когда  $\tau$  мало) достаточно иметь умеренное разрешение установок  $\Delta E$ , в то время как для наблюдения медленных процессов ( $\tau$  велико) требуется высокая разрешающая способность. Типичная разрешающая способность нейтронных спектрометров квазиупругого рассеяния составляет  $0.01 \text{ мкэВ} \leq \Delta E \leq 100 \text{ мкэВ}$ . Для получения такого разрешения используются различные экспериментальные методики, примеры которых приведены в табл. 1.

Характерные времена  $\tau$ , которые можно измерять с помощью методов нейтронного рассеяния, оказываются типичными для обширного класса диффузионных процессов в твердых телах и жидкостях. Этот факт делает рассеяние нейтронов мощным и уникальным методом для изучения свойств материалов для хранения водорода, водородных топливных ячеек, диффузии на поверхностях, диффузионных процессов в полимерных смесях и полимерных электролитах, в пористых материалах, геологических структурах, многокомпонентных жидкостях, ионных проводниках и т.д. Другим важным параметром, описывающим процесс рассеяния, является изменение волнового вектора нейтрона в процессе рассеяния на изучаемом объекте. Через этот параметр возможно определить геометрические характеристики процесса диффузии. Для нейтронов низких энергий возможно исследование в диапазоне волновых векторов от  $0.01 \text{ \AA}^{-1}$  до  $5 \text{ \AA}^{-1}$ . Эта область соответствует характерным расстояниям от  $1000 \text{ \AA}$  до  $1 \text{ \AA}$ . Таким образом, диапазон расстояний, доступный для изучения методом квазиупругого рассеяния нейтронов, перекрывает характерные значения длин, описывающих элементарный акт диффузии в твердых телах и жидкостях. В последнее время указанные возможности нейтронных методов вызывают особый интерес у специалистов, работающих в области биологии и медицинских исследований. Активно ведутся исследования диффузии воды в биологических структурах, взаимосвязи структуры, динамики и функциональных свойств биополимеров, взаимодействия клеточных мембран и мембранных белков с другими молекулярными структурами клеток, направленной доставки лекарств, связывания белков и т.д. [3–9].

Таблица 1. Экспериментальные нейтронные методы для изучения квазиупругого рассеяния

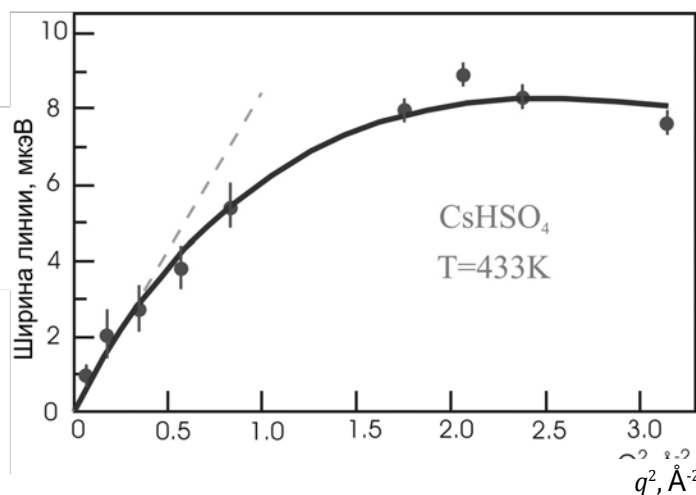
Типичные времена $\tau$ , с	Разрешение $\Delta E$ , мкэВ	Спектроскопическая методика
$10^{-11}$	10–100	Времяпролетный спектрометр неупругого рассеяния прямой геометрии
$10^{-9}$	0.3–20	Спектрометр обратного рассеяния
$10^{-7}$	0.005–1	Спиновое эхо

### Основные теоретические положения

Подробное изложение теории квазиупругого рассеяния нейтронов и примеры использования различных моделей для описания процессов диффузии в конденсированных средах можно найти в [10–13]. Здесь приведем лишь основные понятия. Водород обладает рекордно большим сечением некогерентного рассеяния нейтронов. В связи с этим, при измерениях на водородсодержащих образцах доминирующий вклад в сигнал рассеяния дает именно некогерентное рассеяние на водороде. В экспериментах по некогерентному рассеянию нейтронов измеряется пространственный и временной фурье-образ автокорреляционной функции.

Автокорреляционная функция есть вероятность того, что если в момент времени  $t = 0$  атом находился в точке с координатой  $\vec{R}(0)$ , то в момент времени  $t$  этот же атом будет находиться в точке с координатой  $\vec{R}(t)$ . То есть, по определению, автокорреляционная функция  $G_a(\vec{r}, t)$  есть усредненная по всем начальным положениям частицы вероятность найти данную частицу в узле с координатой  $\vec{r}$  в момент времени  $t$ . Таким образом задача интерпретации нейтронных данных по квазиупругому некогерентному рассеянию сводится к решению модельного дифференциального уравнения для движения протонов в изучаемом объекте и усреднению полученного выражения для вероятности переходов протона из одной возможной позиции в другую по всем возможным начальным позициям. Затем Фурье преобразование полученной функции координат и времени дает нам закон рассеяния нейтронов в зависимости от вектора рассеяния (разницы волновых векторов нейтрона до и после взаимодействия с образцом) и изменения энергии нейтрона за счет взаимодействия с образцом.

В случае трансляционной диффузии наблюдается однородное уширение упругой линии в спектре рассеяния нейтронов. Получаемый в эксперименте закон рассеяния представляет собой функцию Лоренца (точнее говоря, свертку функции Лоренца с функцией разрешения установки), ширина которой изменяется с ростом величины вектора рассеяния нейтронов. Ширина  $\Delta\omega(\vec{q})$  зависит от времени жизни частицы в узле  $\tau$  и от геометрии распределения узлов, по которым движется частица, в пространстве. В итоге адекватная модель позволяет получать из экспериментальных данных геометрические и временные характеристики процесса диффузии. На рис. 4 показан пример исследования диффузии протонов в суперпротонном проводнике  $\text{CsHSO}_4$  [14]. Видно, что в пределе малых значений векторов рассеяния нейтронные результаты хорошо согласуются с данными ядерного магнитного резонанса [15], а выбранная модель диффузии протонов адекватно описывает результаты нейтронного эксперимента.

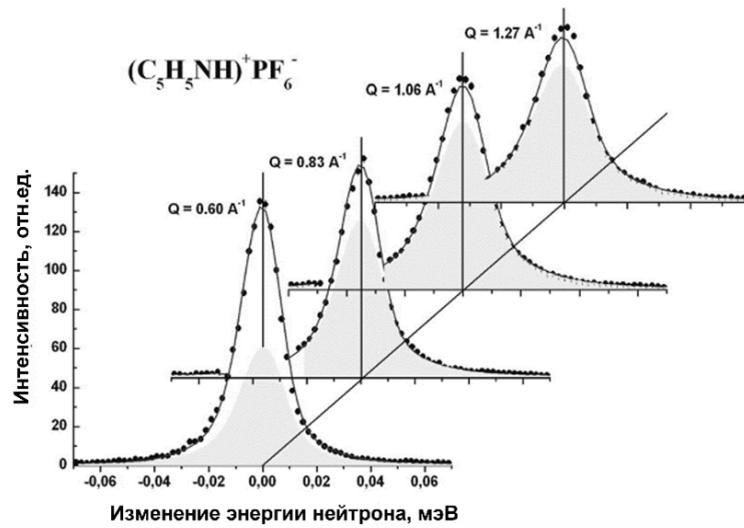


**Рис. 4.** Зависимость ширины линии квазиупругого рассеяния в зависимости от квадрата вектора рассеяния нейтронов в суперпротонном проводнике  $\text{CsHSO}_4$ . Точки — экспериментальные данные с указанием ошибок, сплошная кривая — модельное описание процесса диффузии протонов. Пунктиром показана зависимость в пределе малых значений векторов рассеяния с коэффициентом диффузии, определенным по данным ядерного магнитного резонанса.

В отличие от выше рассмотренного случая трансляционной диффузии, для вращательной диффузии имеем две компоненты в спектре. Одна компонента — упругая с интенсивностью  $A_0(q)$ , а вторая — квазиупругая с интенсивностью  $A_1(q)$  и имеющая форму функции Лоренца. Ширина квазиупругой компоненты определяется временем жизни диффундирующей частицы в узлах, между которыми она совершает переходы в процессе диффузии. Упругая компонента в спектре обусловлена тем, что центр масс объекта, совершающего вращательную диффузию, остается неподвижным. Упругая компонента спектра несет информацию только о геометрических процессах вращательной диффузии (через вид коэффициента  $A_0(q)$ ), в то время как квазиупругая компонента спектра дает информацию и о характерных временах процесса диффузии через ширину квазиупругой линии. Характерными особенностями спектра вращательной диффузии, в отличие от случая трансляционной диффузии, является:

- а) независимость ширины квазиупругой компоненты от значения вектора рассеяния нейтронов;
- б) уменьшение интенсивности упругой компоненты спектра и соответствующее увеличение интенсивности квазиупругой компоненты с ростом значения вектора рассеяния.

Типичный вид закона рассеяния для вращательной диффузии показан на рис. 5 [16].

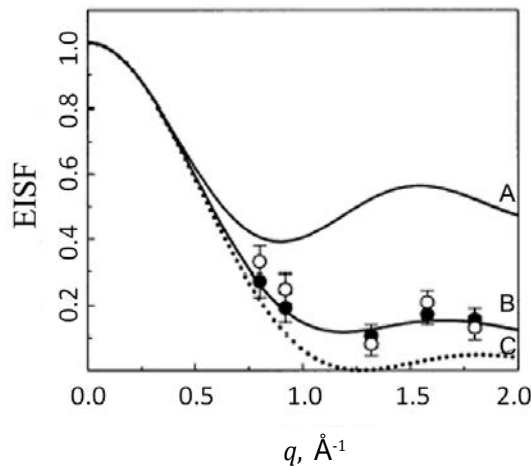


**Рис. 5.** Спектр квазиупругого рассеяния нейтронов на гексафторофосфате пиридина. Точки — эксперимент при  $T = 250$  К, сплошная линия — модельное описание процесса диффузии молекулы пиридина в кристалле. Серым цветом показан вклад квазиупругой компоненты в полную интенсивность нейтронного рассеяния.

При экспериментальном исследовании процессов вращательной диффузии интенсивность упругой компоненты спектра  $A_0(q)$  играет особую роль и называется **упругим некогерентным структурным фактором (EISF)**. Он определяется как часть полной интенсивности рассеяния, заключенная в упругой компоненте. Данную функцию можно непосредственно получить из экспериментальных данных следующим образом:

$$A_0(q) = \frac{I^u(q)}{I^u(q) + I^{qu}(q)}, \quad (2)$$

где  $I^u(q)$  — интегральная интенсивность упругой компоненты спектра, а  $I^{qu}(q)$  — интегральная интенсивность квазиупругой компоненты спектра. Упругий некогерентный структурный фактор имеет важный физический смысл, который состоит в том, что  $A_0(q)$  описывает дифракцию нейтронной волны на **одной** частице (в нашем случае протоне), распределенной по всем возможным для нее положениям в кристалле. Сравнение различных моделей для геометрических характеристик диффузионного процесса с экспериментальным упругим некогерентным структурным фактором позволяет сделать выбор в пользу наиболее адекватного описания. В качестве примера на рис. 6 показан EISF для процесса диффузии молекул бензола в двух типах цеолитов в сравнении с тремя возможными моделями [17].



**Рис. 6.** Зависимость экспериментального EISF от величины вектора рассеяния нейтронов для бензола, адсорбированного в цеолите HZSM-5 (темные точки) и в CaZSM-5 (светлые точки). Линии иллюстрируют результаты модельных расчетов. А — вращения молекулы бензола вокруг оси симметрии 2 порядка. В — вращения молекулы вокруг оси 6 порядка. С — модель изотропного вращения молекулы.

### Спектрометры обратного рассеяния

Спектроскопия обратного рассеяния использует тот факт, что неопределенность в длине волны  $\lambda$  нейтронного пучка после Брэгговского отражения от монокристалла уменьшается с увеличением угла рассеяния  $2\theta$ . Это легко показать, если продифференцировать закон Брэгга:

$$\lambda = 2d \sin \theta. \quad (3)$$

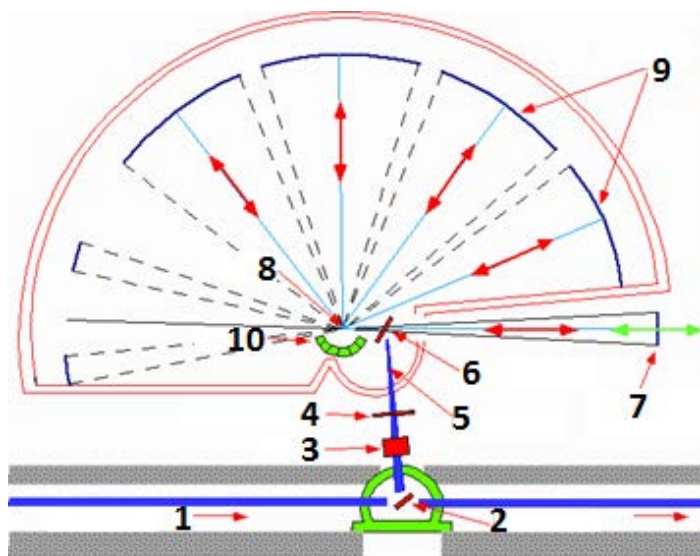
Разделив результат дифференцирования на  $\lambda$  получаем

$$\frac{\Delta \lambda}{\lambda} = \frac{\Delta d}{d} + \frac{\Delta \theta}{\tan \theta}, \quad (4)$$

где  $\Delta \theta$  — угловая расходимость нейтронного пучка. При  $\theta \rightarrow 90^\circ$  второе слагаемое стремится к нулю. Большинство спектрометров обратного рассеяния использует отражение «назад» от плоскостей {111} идеальных кристаллов кремния для монохроматизации как падающего на образец, так и рассеянного пучка.

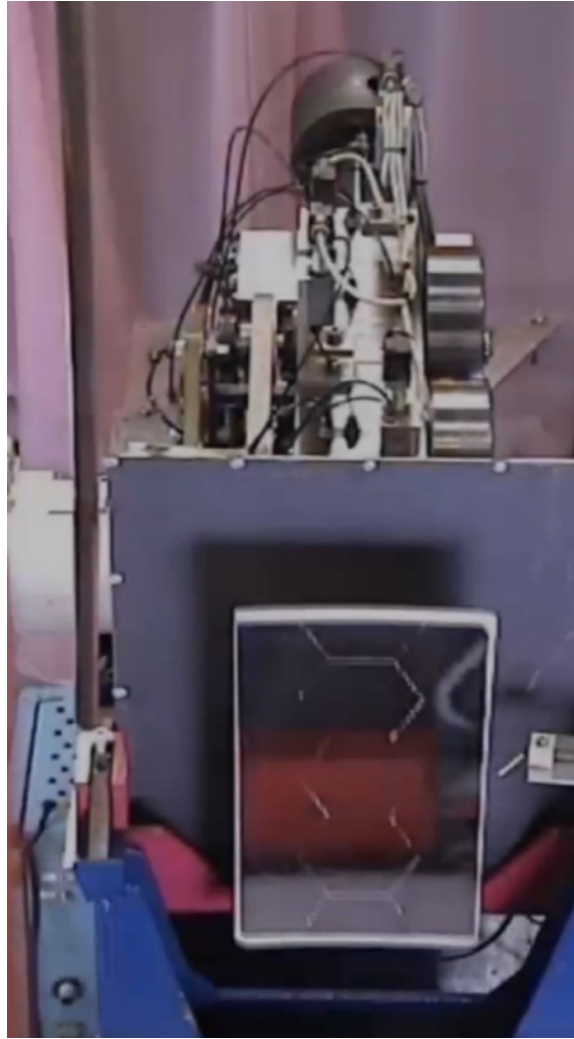
Спектрометр обратного рассеяния с колеблющимся монокристаллом-монохроматором (пример — IN16B, Институт Лауэ-Ланжевена, Франция)

Схема спектрометра показана на рис. 7. Первичный спектрометр состоит из нейтронновода (1), первого монокристаллического дефлектора (2) из пиролиитического графита PG(002), бериллиевого фильтра (3), фонового прерывателя нейтронного пучка (4), вторичного дефлектора PG(002) (6), который можно вращать и выводить из нейтронного пучка для прохождения нейтронов, отраженных от кремниевого монохроматора Si{111}, присоединенного к доплеровскому приводу (7). Первый дефлектор выделяет из полихроматического нейтронного пучка нейтроны с длиной волны  $6.271 \text{ \AA}$  ( $E = 2.08 \text{ мэВ}$ ).



**Рис. 7.** Схема спектрометра обратного рассеяния IN16B в Институте Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция для исследований квазиупругого рассеяния нейтронов. 1 — нейтронновод, 2 — первый монокристаллический дефлектор из пиролиитического графита PG(002), 3 — бериллиевый фильтр, 4 — фоновый прерыватель нейтронного пучка, 5 — фокусирующий нейтронновод, 6 — вторичный дефлектор нейтронного пучка, 7 — кремниевый монохроматор Si{111}, присоединенный к доплеровскому приводу, 8 — изучаемый образец, 9 — кристаллы анализаторы Si{111}, 10 — детекторы нейтронов.

Бериллиевый фильтр убирает высшие порядки отражения от PG(002), а прерыватель обеспечивает модуляцию пучка, генерируя нейтронные импульсы с определенной периодичностью и шириной импульсов. Второй дефлектор направляет нейтроны на Si{111} монохроматор. Этот дефлектор может поворачиваться в пучке, так что нейтроны, отраженные от кремниевого монохроматора попадают на изучаемый образец (8). Отражение назад под углом Брэгга  $90^\circ$  от высокой степени совершенства Si{111} выделяет узкую монохроматическую линию нейтронов с длиной волны  $6.271 \text{ \AA}$ . Эта длина волны может изменяться доплеровским приводом (рис. 8), обеспечивающим колебания кремниевого кристалла вдоль направления нейтронного пучка. Таким образом, получается нейтронный импульс, содержащий нейтроны в диапазоне длин волн, определяемых скоростью колебаний доплеровского привода. Нейтроны рассеиваются образцом, изменяя свою энергию. Но только те нейтроны, чья энергия после рассеяния удовлетворяет условиям отражения назад от набора, расположенных вокруг образца кристаллов анализаторов Si{111} (9), попадают в детекторы и регистрируются круговым сектором из набора  $^3\text{He}$  пропорциональных счетчиков (10).



*Рис. 8. Фото Доплеровского привода. На переднем плане показан кремниевый монокристалл, на заднем плане — механическая часть привода.*

Начальная энергия нейтронов варьируется в некотором диапазоне около средней энергии  $E_0$ . Движение монохроматора происходит вдоль оси совпадающей с направлением [111] кремниевых монокристаллов. Таким образом реализуется геометрия обратного рассеяния, обеспечивая требуемое разрешение в диапазоне микроэлектронвольт. Изменение энергии нейтронов около среднего значения  $E_0$  можно записать как

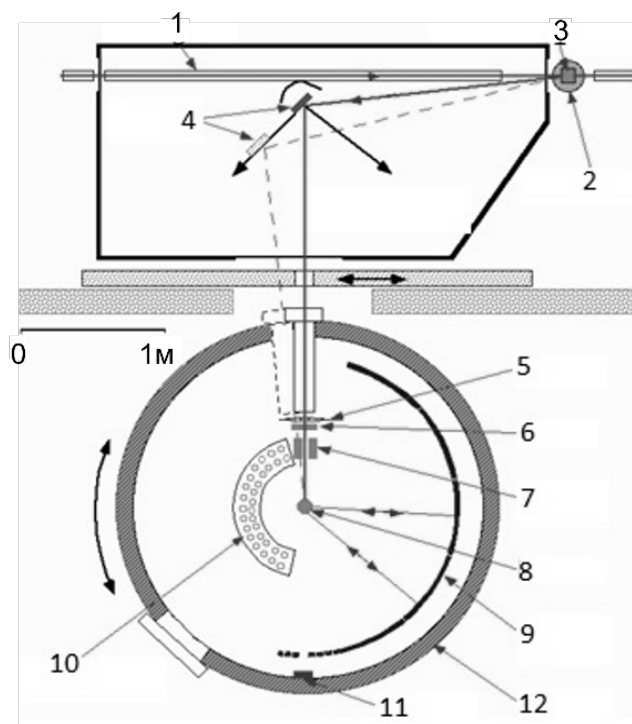
$$\Delta E = E_m - E_0 = 2E_0 \left( \frac{v_m}{v_0} \right) + E_0 \left( \frac{v_m}{v_0} \right)^2, \quad (5)$$

где  $v_m$  — скорость движения кристалла-монохроматора,  $v_0$  — скорость нейтронов с энергией  $E_0$ .

#### **Спектрометр обратного рассеяния с изменяемой температурой монокристалла-монохроматора (пример — IN13, Институт Лауэ-Ланжевена, Франция)**

Схема спектрометра показана на рис. 9.

Начальный полихроматический нейтронный пучок отражается по углом Брэгга близким к  $90^\circ$  кристаллом монохроматором  $\text{CaF}_2$  (422), обеспечивающим высокую степень монохроматичности отраженных нейтронов (разброс по энергиям 10 мкэВ). Этот пучок отражается дефлектором  $\text{PG}(002)$  и направляется на исследуемый образец. Прерыватель нейтронного пучка модулирует нейтронный поток в виде периодических импульсов. Регистрируются только те нейтроны, которые проходят путь от образца до анализатора и обратно к детекторам за время между двумя последовательными импульсами. Изменение энергии нейтронов взаимодействующих с образцом обеспечивается изменением температуры кристалла монохроматора, относительно температуры кристаллов анализаторов  $\text{CaF}_2$  (422), чья температура сохраняется постоянной. Интенсивность упругого рассеяния (передача энергии = 0) или неупругого рассеяния (доступный энергетический диапазон для данного спектрометра составляет  $\pm 200$  мкэВ) анализируется как функция угла рассеяния.



**Рис. 9.** Схема спектрометра обратного рассеяния с изменяемой температурой монокристалла-монохроматора IN13 в Институте Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция для исследований квазиупругого рассеяния нейтронов. Горизонтальный отрезок показывает масштаб. 1 — нейтронный пучок, 2 — криопечка, 3 — монокристалл-монохроматор  $\text{CaF}_2$  (422), 4 — монокристалл-дефлектор из пиролитического графита PG(002), 5 — прерыватель нейтронного пучка, 6 — мониторный счетчик нейтронов, 7 — коллиматор, 8 — образец, 9 — кристаллы анализатора  $\text{CaF}_2$  (422), 10 — детекторы нейтронов, 11 — ловушка прямого пучка, 12 — биологическая защита спектрометра.

## Заключение

Рассмотренные в обзоре нейтронные станции идеально подходят для изучения микроскопической динамики медленных движений в сложных жидкостях, прыжковой диффузии в твердых телах. Данные вопросы актуальны для понимания свойств коллоидных систем, полимеров, ионных жидкостей, материалов для хранения водорода, развития пищевых технологий и изучения экологических процессов. Но этими проблемами возможности спектрометров квазиупругого рассеяния не ограничиваются. Широкое использование описанная методика находит в изучении квантового туннелирования, критической магнитной динамики, магнитных флуктуаций, возбуждений в состоянии спиновой жидкости и во многих других современных проблемах свойств конденсированного состояния вещества.

Таким образом создание спектрометра обратного рассеяния на высокопоточном исследовательском реакторе ПИК в Петербургском институте ядерной физики Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» заслуживает рассмотрения и проработки вопроса о его создании.

Статья подготовлена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Соглашение № 075-10-2021-115 от 13 октября 2021 г., внутренний номер 15.СИН.21.0021).

## Список литературы

1. Ковальчук М. В., Смольский С. Л., Коноплев К. А. Исследовательский реактор ПИК // Кристаллография. 2021. Т. 66. № 2. С. 184–190. DOI: 10.31857/S0023476121020053
2. Белушкин А. В. Сравнение возможностей методов неупругого рассеяния синхротронного излучения и нейтронов для исследований атомной, молекулярной и магнитной динамики в конденсированных средах // Кристаллография. 2022. Т. 67. № 1. С. 41–57.
3. Vural, D., Xiaohu, Hu et al. Quasielastic Neutron Scattering in Biology: Theory and Applications // Biochimica et Biophysica Acta. 2017. Vol. 1861. P. 3638–3650. DOI: 10.1016/j.Bbagen.2016.06.015
4. Ashkar, R., Bilheux, H.Z., Bordallo, H. et al. Neutron Scattering in the Biological Sciences: Progress and Prospects // Acta Cryst. 2018. Vol. D74. P. 1129–1168. DOI: 10.1107/S2059798318017503
5. Combet, S. An Introduction to Neutrons for Biology // EPJ Web of Conferences. 2020. Vol. 236. P. 01001–01018. DOI: 10.1051/Epjconf/202023601001
6. Yamada, T., Seto, H. Quasi-Elastic Neutron Scattering Studies on Hydration Water in Phospholipid Membranes // Frontiers in Chemistry. 2020. Vol. 8. P. 1–5. DOI: 10.3389/Fchem.2020.00008
7. Shou, K., Sarter, M., and de Souza, N.R. Effect of Red Blood Cell Shape Changes on Haemoglobin Interactions and Dynamics:



- a Neutron Scattering Study // R. Soc. Open Sci. 2020. Vol. 7. P. 201507–201526. DOI: 10.1098/Rsos.201507
8. *Bicout, D. J., Cisse, A., Matsuo, T., and Peters, J.* The Dynamical Matryoshka Model: 1. Incoherent Neutron Scattering Functions for Lipid Dynamics in Bilayers // *BBa — Biomembranes*. 2022. Vol. 1864. P. 183944–183963. DOI: 10.1016/j.Bbamem.2022.183944
  9. *Martins, M.L., Bordallo, H.N., and Mamontov, E.* Water Dynamics in Cancer Cells: Lessons From Quasielastic Neutron Scattering // *Medicina*. 2022. Vol. 58. P. 654–670. DOI: 10.3390/Medicina58050654
  10. *Bee, M.* Quasi-Elastic Neutron Scattering Principles and Application in Solid State Chemistry. Bristol, 1988. 444 p.
  11. *Hempelmann, R.* Quasi-Elastic Neutron Scattering and Solid State Diffusion, Oxford Series on Neutron Scattering in Condensed Matter 13. Clarendon Press, Oxford, 2000. 320 p.
  12. *Telling, M.T.F.* Quasi-Elastic Neutron Scattering — a Tool for the Study of Biological Molecules and Processes // in: Dynamics of Biological Macromolecules by Neutron Scattering. 2011. P. 4–21. DOI: 10.2174/978160805219611101010004
  13. *Berrod, Q., Lagrenū, K., Ollivier, J., and Zanotti, J.-M.* Inelastic and Quasi-Elastic Neutron Scattering. Application to Soft-Matter // *EPJ Web of Conferences*. 2018. Vol. 188. P. 05001–05036. DOI: 10.1051/Epjconf/201818805001
  14. *Belushkin, A.V., Carlile, C.J., and Shuvalov, L.A.* The Diffusion of Protons in the Superionic Conductor CsHSO<sub>4</sub> by Quasielastic Neutron Scattering // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1992. Vol. 4. P. 389–398. DOI: 10.1088/0953-8984/4/2/008
  15. *Blinč, R., Dolinšek, J., Lahajnar, G., Zupančič, I., Shuvalov, L.A., and Baranov, A.I.* Spin-Lattice Relaxation and Self-Diffusion Study of the Protonic Superionic Conductors CsHSeO<sub>4</sub> and CsHSO<sub>4</sub> // *Physica Status Solidi. B*. 1984. Vol. 123. Iss. 1. P. K83-K87. DOI: 10.1002/Pssb.2221230159
  16. *Wasicki, J.W., Kozak, A., Pajak, Z., Czarnecki, P., Belushkin, A.V., and Adams, M.A.* Neutron, Nuclear Magnetic Resonance, and Dielectric Study of Ion Motion in Pyridinium Hexafluorophosphate // *J. Chem. Phys.* 1996. Vol. 105. Iss. 21. P. 9470–9477. DOI: 10.1063/1.472808
  17. *Mitra, S., Mukhopadhyay, R.* Molecular Dynamics Using Quasielastic Neutron Scattering Technique // *CURRENT SCIENCE*. 2003. Vol. 84. Iss. 5. P. 633–662.

**Поступила 19 августа 2022 г.**

## QUASIELASTIC NEUTRON SCATTERING AS A UNIQUE METHOD FOR THE STUDY OF DIFFUSION PROCESSES IN SOLIDS AND LIQUIDS

A.V. BELUSHKIN

doi: 10.25210/jfop-2203-028036 | edn: HSSNIB

The creation in Russia of a unique high-flux PIK reactor at the St. Petersburg Institute of Nuclear Physics of the National Research Center «Kurchatov Institute» requires the creation of a complex of high-tech experimental stations on its basis, which will make it possible to fully use its scientific potential. One of such stations, in the opinion of the author, should be a quasi-elastic neutron scattering spectrometer for studying the processes of diffusion of atoms and molecules in solids and liquids. This technique has not yet been developed in our country, since its effective implementation requires neutron sources with a high neutron flux of low energies (less than 10 meV), which can only be achieved on high-power reactors equipped with special low-temperature moderators. The PIK reactor provides such opportunities.

Neutron scattering often provides the researcher with unique opportunities to obtain information about the object under study. Using neutrons, it is possible to distinguish between translational diffusion, characterized by mass transfer, and localized diffusion, for example, rotations of molecules or individual molecular groups around a center or axes of inertia. Spatial and temporal diffusion characteristics studied by neutron methods allow direct comparison of experimental data with the results of modeling by molecular dynamics methods.

To obtain information about the characteristics of diffusion processes using neutron scattering, it is necessary to organize the experiment in such a way that, firstly, the resolution will be sufficient to observe the broadening of an elastic line due to diffusion processes, and, secondly, to be able to investigate the dependence of this broadening and the relative intensities of the elastic and quasi-elastic components on the neutron wave vector variation. This problem can be solved in several ways, both on stationary and pulsed neutron sources.

Various types of spectrometers make it possible to carry out studies in a wide range of characteristic times of processes and at various spatial scales. This review discusses the basic principles of the theory and design of neutron backscattering spectrometers, which allow one to study diffusion processes with a characteristic time of about  $10^{-9}$  s. Such times are characteristic of many diffusion processes occurring in biological systems, the study of which is currently one of the main priorities of neutron research.