

Для изучения рассеяния атомных или молекулярных потоков (рис. 1) монокристаллич. (или газовую) мишень (1), играющую роль дифракц. решётки, помещают в камеру (2), в к-рой поддерживается высокий вакуум (вакуум необходим для устранения паразитного рассеяния на остаточном газе и его адсорбции на поверхности монокристалла). На мишень направляют узкий молекулярный пучок (3). Распределение интенсивности рассеянных пучков в пространстве измеряют с помощью

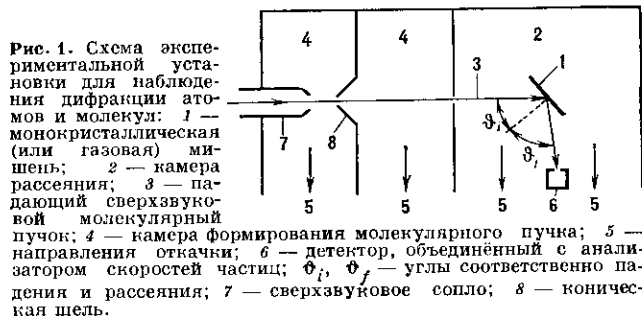


Рис. 1. Схема экспериментальной установки для наблюдения дифракции атомов и молекул: 1 — монокристаллическая (или газовая) мишень; 2 — камера рассеяния; 3 — падающий сверхзвуковой молекулярный пучок; 4 — камера формирования молекулярного пучка; 5 — направления откочки; 6 — детектор, объединённый с анализатором скоростей частиц; ϕ_i , ϕ_f — углы соответственно падения и рассеяния; 7 — сверхзвуковое сопло; 8 — коническая щель.

детектора (6). Для создания условий Д. а. и м. (см. Брэгга — Вульфа условие) изменяют взаимную ориентацию молекулярного пучка, мишени и детектора. Упругие и неупругие составляющие в рассеянных потоках регистрируются, напр., с помощью времяпролётного анализатора распределения частиц по скоростям.

Особенности Д. а. и м. в сравнении с дифракцией др. волновых объектов (электронов, нейтронов, фотонов и т. д.) связаны с наличием собств. линейного размера дифрагирующих частиц $\sim 1 \text{ \AA}$, с их малой кинетич. энергией, существованием внутр. электронных (а для молекул ещё и колебательных и вращательных) степеней свободы, возможностью пространственной ориентации молекулы относительно дифракц. решётки, специфич. особенностей потенциала взаимодействия.

Д. а. и м., как и др. виды дифракции, используют для структурных исследований. Наличие большого собств. размера (сечение рассеяния для атомов He или H больше, чем сечение нейтрона, примерно в 10^{10} раз) обеспечивает малую проникающую способность частиц, что позволяет исследовать поверхностные структуры, двумерные фазовые переходы, параметры динамики поверхностной части кристаллич. решётки (Дебая — Уоллера фактор, дисперсию фононов), явления адсорбции и катализа. Малая кинетич. энергия частиц недостаточна для инициирования поверхностных хим. реакций, часто возникающих под действием электронов с энергиями в 20—200 эВ.

При Д. а. и м. взаимодействуют внеш. электронные оболочки частиц пучка и мишени. Т. к. при объединении атомов в молекулы и кристаллы внеш. оболочки испытывают наиб. деформации, Д. а. и м. используются при изучении этих деформаций. В то же время при определении структурных амплитуд в др. типах структурного анализа (см. Рентгеновский структурный анализ, Нейтронография, Электронография) используют атомные факторы, рассчитываемые математически или получаемые экспериментально, к-рые при рассмотрении явлений Д. а. и м. применить нельзя, т. к. они в этом случае оказываются разными для разл. хим. соединений. Интерпретация дифракц. исследований часто проводится с помощью модели жёсткой гофриров. поверхности, характеризующей амплитудой гофра A .

Угловая локализация дифракционных (т. е. связанных с упругим рассеянием) максимумов определяется условием Вульфа — Брэгга (или условием Лауэ). Для получения соответствующих интенсивностей необходимо решить дифференц. (Шрёдингера) или интегр. (Липмана — Швингера) ур-ния дифракц. задачи. Рассчитывать интенсивности дифракц. максимумов необходимо, напр., для нахождения распределения электронной плотности по

поверхности кристалла путём сопоставления вычисленных и экспериментально найденных интенсивностей.

При решении с помощью Д. а. и м. структурных задач возникают те же проблемы (напр., многократности рассеяния, фазовая проблема), что и в др. дифракц. структурных методах, используются в осн. те же приёмы решения (метод последоват. приближения, метод ф-ций Паттерсона и т. п.). Особенности Д. а. и м. потребовали разработки и новых приёмов. Так, температурный фактор Дебая — Уоллера приходится вычислять с учётом рождения или гибели фонона, достаточно большого времени пребывания частиц в зоне действия потенциала, размеров рассеиваемых частиц при рассмотрении её взаимодействия одновременно с неск. атомами решётки (вследствие дальнего действия потенциала).

Для Д. а. и м. закон сохранения энергии с учётом неупругих взаимодействий имеет вид

$$\hbar^2 k_f^2 / 2m = (\hbar^2 k_i^2 / 2m) \pm \Phi \pm B, \quad (1)$$

где k_f и k_i — импульсы рассеянной и падающей молекулы соответственно; Φ — энергия рождения или гибели фононов, B — изменение энергии внутр. степеней свободы молекулы (при Д. а. и м. на поверхности в осн. изменяется вращат. энергия). Закон сохранения импульса при этом выражается ур-нием

$$k_f = k_i + G + Q + P, \quad (2)$$

где Q и P — соответственно векторы, связанные с рождением и гибелью фононов и изменением внутр. (вращат.) энергии молекулы, G — вектор обратной решётки. Экспериментально установлено, что из двух возможных каналов изменения вращат. энергии молекулы — за счёт её собств. поступат. энергии и за счёт взаимодействия с фононами кристаллич. поверхности — сечение первого из них оказывается больше.

Для упрощения изучения динамики и структуры решётки целесообразно использовать потоки «бесструктурных» частиц, напр. атомов He. В однофононном приближении выражения (1) и (2) приобретают вид

$$k_f^2 = k_i^2 \pm \frac{2m\omega}{\hbar}, \quad (3)$$

$$k_f = k_i + G + Q \quad (4)$$

(ω — частота фонона). Ф-лы (3) и (4) отражают переход поступат. энергии молекулы в колебат. энергию кристаллич. решётки.

В соответствии с флуктуац. теорией эл.-магн. взаимодействия действующая притягивающая (дисперсионная) часть потенциала $U(z)$ удовлетворительно описывается ф-лой

$$U(z) = -Cz^{-3}$$

(z — координата, нормальная к поверхности кристалла). Константы C , полученные с помощью дифракц. экспериментов, хорошо соответствуют результатам вычислений (когда они возможны), использующих зависимость поляризуемости и диэлектрич. проницаемости от комплексной частоты.

При перекрывании электронных оболочек подлетающей частицы и частиц поверхности твёрдого тела происходит их отталкивание друг от друга, причём критична потенциальная кривой в области отталкивания зависит от координаты в плоскости решётки и определяется периодически изменяющейся электронной плотностью поверхности, к-рая является, т. о., дифракц. решёткой для частиц пучка. Микроскопич. теория этой части взаимодействия ещё мало разработана. Чёткость картин дифракции на щёлочно-галогенидных кристаллах объясняется различием радиусов анионов и катионов в них. При Д. а. и м. на плотноупакованных гранях металлов с малыми миллеровскими индексами чётких максимумов нет, т. к. электронная плотность поверхности в этом случае нивелирована коллективизированными электронами; поэтому для наблюдения