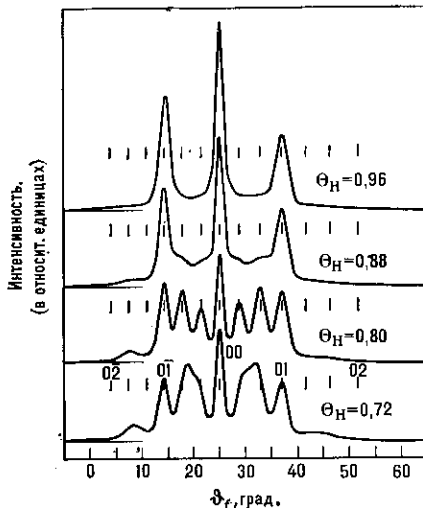


Д. а. и м. на металлах используют ступенчатые vicinalные грани с большими индексами [Cu (117), Pt (997)].

Методами Д. а. и м. изучены поверхностные структуры щелочно-галогидных и др. ионных кристаллов (NiO, MgO), полупроводников (Si, GaAs), графита, TaS₂, кремниевых и углеродных покрытий платины, карбида вольфрама, металлич. монокристаллов (Au, Cu, Ag) и разл. адсорбц. слоёв на них. На рис. 2 приведена картина, полученная при дифракции атомов He на адсорбц. слоях водорода на поверхности Ni (100). На основе приведённых картин Д. а. и м., относящихся к разл. степеням θ_n адсорбц. покрытия поверхности, фиксируются концентрационные фазовые переходы в решётке адсорбирован. водорода и, в частности, появле-

Рис. 2. Картины дифракции пучка гелия на адсорбционных структурах водорода на поверхности Ni(100); $\lambda = 0,63$ Å, температура поверхности 100К, угол падения 25°, рассеяние в плоскости падения. По нижней оси абсцисс отложен угол рассеяния, штрихи относятся к индексам обратной решётки в соответствии с приведёнными обозначениями. θ_n — степень заполнения поверхности адсорбированным водородом.



ние при $\theta_n \approx 0,8$ сверхрешётки со структурой (2×6) . Исследования картин дифракции на чистой поверхности Ni (110) и той же поверхности, покрытой адсорбиров. водородом, позволили установить, что амплитуда гофра А изменяется от 0,05 до 0,25 Å.

При первых исследованиях Д. а. и м. на поверхностях кристаллов Штерном, Эстерманом, Р. Фришем (Frisch), Ф. Кнауэром (F. Knaueg) был обнаружен ещё один квазитоновый эффект — селективная адсорбция (СА), состоящая в том, что на дифракц. картине возникают дополнит. максимумы и минимумы. Согласно Дж. Леннард-Джонсу (J. Lennard-Jones) и Э. Девонширу (E. Devonshire) (1936), СА объясняется захватом в слабо связанные поверхностные состояния части дифрагирующих частиц, к-рые удовлетворяют определ. условиям резонанса. В этом состоянии частицы теряют поступат. степень свободы по нормали к поверхности и продолжают двигаться параллельно поверхности с энергией

$$\mathcal{E}_\parallel = \mathcal{E}_i + |\mathcal{E}_j|,$$

где \mathcal{E}_j — энергия связанного состояния (исск. мэВ). Условием для СА является выполнение соотношения

$$k_{Gz}^2 = (2m/\hbar^2) \mathcal{E}_j < 0,$$

где k_{Gz} — z-проекция волнового вектора дифрагирующей частицы. Т. к. вектор обратной решётки $G = G(m, n)$, где m, n — порядок дифракц. рефлексов, дифракц. картина при СА содержит дополнит. экстремумы порядка m, n (на это указывает индекс G у вектора k). Т. о., угл. локализация особенностей СА на дифракц. картинах при учёте всех остальных геом. параметров эксперимента позволяет вычислить энергетич. уровни \mathcal{E}_j , а также нек-рые из параметров потенциала взаимодействия $U(z)$ дифрагирующих частиц

и поверхности кристалла. Если представить $U(z)$ в виде потенциала Морзе:

$$U(z) = D \{ \exp[-2\bar{k}(z-z_e)] - 2 \exp[-\bar{k}(z-z_e)] \}$$

\bar{k} — масштабный множитель обратной решётки, z_e — положение дна потенц. ямы (не связанное с \mathcal{E}_j), D — глубина ямы), то для \mathcal{E}_j получим соотношение

$$\mathcal{E}_j = \left[-D^{1/2} - \frac{\hbar \bar{k}}{\sqrt{2m}} \left(j + \frac{1}{2} \right) \right]^2, \\ j = 0, 1, 2, \dots \leq \frac{\sqrt{2mD}}{\hbar \bar{k}} - \frac{1}{2}.$$

Ниже приведены энергетич. параметры (\mathcal{E}_j и D в мэВ) поверхностей LiF и графита:

	D	\mathcal{E}_0	\mathcal{E}_1	\mathcal{E}_2
LiF (100) . .	-8,10	-5,59 ± 0,1	-2,00 ± 0,1	—
Графит (001)	-15,55	-11,62 ± 0,12	-5,38 ± 0,12	-1,78 ± 0,12

Погрешности значений \mathcal{E}_j являются следствием в осн. разброса частиц по скоростям, конечности апертур источника молекул и детектора, а также ширины уровней \mathcal{E}_j : $\Gamma \sim \hbar/\tau$, где τ — время жизни частицы в адсорбиров. состоянии. Для определения Γ или τ с помощью СА требуется точность измерений, на порядок превышающая существующую.

Интерференционно-дифракц. явления наблюдаются также при рассеянии молекулярных пучков на газовых мишенях. На основе изучения взаимодействия пересекающихся молекулярных пучков возникла новая область исследований — столкновительная спектроскопия. При измерении пространственной и энергетич. зависимостей сечений столкновений установлены особенности потенциала взаимодействия: во мн. случаях он оказывается многопараметрическим, как правило, неизотропен, немонотонен, часто со мн. экстремумами (см. также *Молекулярные и атомные пучки*).

Изучение поверхностных структур и динамики решётки с помощью Д. а. и м., а также столкновит. спектроскопия дают уникальную информацию, недоступную др. методам.

Лит.: Флерова М. Н., Дифракция молекулярных лучей от кристаллов, «УФН», 1935, т. 15, с. 614; Эстерман И. И., Техника молекулярных пучков, там же, 1947, т. 32, с. 89; Никитин Е. Е., Овчинникова М. Я., Интерференционные явления в атомном рассеянии, там же, 1971, т. 104, с. 379; Лифшиц В. М., Пятаевский Л. П., Статистическая физика, ч. 2, М., 1978; Гудман Ф., Вахман Г., Динамика рассеяния газа поверхностью, пер. с англ., М., 1980; Леонас В. В., Межмолекулярные взаимодействия и столкновения атомов и молекул, М., 1980; Engel T., Rieder K.-H., Structural studies of surfaces with atomic and molecular beam diffraction, в кн.: Structural studies of surfaces, В. — Heidelberg — N. Y., 1982. Ю. Н. Любитов.

ДИФРАКЦИЯ ВОЛН — в первоначальном узком смысле — огибание волнами препятствий, в современном, более широком — любые отклонения при распространении волн от законов *геометрической оптики*. К Д. в. фактически относят все эффекты, возникающие при взаимодействии волн с объектом любых размеров, даже малых по сравнению с длиной падающей волны λ , когда сопоставление с лучевым приближением совершенно не показательно. При таком общем толковании Д. в. тесно переплетается с явлениями распространения и рассеяния волн в неоднородных средах.

Первая волновая трактовка Д. в. дана Т. Юнгом (Th. Young, 1800), вторая — О. Френелем (A. Fresnel, 1815). В картине волнового поля, возникающей за препятствием, Юнг усматривал сочетание собственно Д. в. и интерференции. Для объяснения Д. в., помимо обычных законов распространения волн в направлении лучей, он ввёл принцип поперечной передачи амплитуды колебаний непосредственно вдоль волновых фронтов, указав, что скорость этой передачи пропорциональна