

плавления и получить оценки скорости перемешивания. М. д. м. применяют, в частности, для исследования простых ван-дер-ваальсовых жидкостей. Были определены ур-ние состояния, бинарные и тернарные ф-ции распределения, разл. сведения о микроструктуре, коэф. переноса, получено хорошее согласие с экспериментом. Исследованы ван-дер-ваальсовы одноатомные жидкости и газы в тонких слоях и вблизи адсорбирующих стенок. Смоделированы нек-рые фазовые переходы, адсорбция, образование кластеров и т. д. С помощью разл. модификаций М. д. м. исследовали жидкие металлы для выяснения их структурных и динамич. (транспортных) свойств, а также ур-ний состояний и нек-рых свойств поверхностей металлов. М. д. м. применяют для изучения взаимодействия молекулярных и атомных пучков с поверхностями разл. природы и радиац. повреждений твёрдых тел. М. д. м. позволил исследовать динамику отд. полимерных цепей, растворов и расплавов полимеров, его используют также для исследования биополимеров (белков и нуклеиновых к-т), воды, водных растворов и адсорбции воды, для описания классич. стадии хим. реакций и коагуляции коллоидов, расчёта вязкости в потоке и др.

*Лит.*: Вычислительные методы в физике атомных и молекулярных столкновений, пер. с англ., М., 1974; Крокстон К., Физика жидкого состояния, пер. с англ., М., 1978; Федосеев Д. В., Чужко Р. К., Гривцов А. Г., Гетерогенная кристаллизация из газовой фазы. Вопросы кинетики и численного моделирования, М., 1978; Лагарков А. Н., Сергеев В. М., Метод молекулярной динамики в статистической физике, «УФН», 1978, т. 125, с. 409; Моделирование на ЭВМ дефектов в кристаллах, Л., 1979; Бёрд Г., Молекулярная газовая динамика, пер. с англ., М., 1981; Полухин В. А., Ухин В. Ф., Дзугутов М. М., Компьютерное моделирование динамики и структуры жидких металлов, М., 1981; Методы Монте-Карло в статистической физике, пер. с англ., М., 1982; Лихтенберг А., Либман М., Регулярная и стохастическая динамика, пер. с англ., М., 1984; Хокни Р., Истуд Дж., Численное моделирование методом частиц, пер. с англ., М., 1987. А. Г. Гривцов.

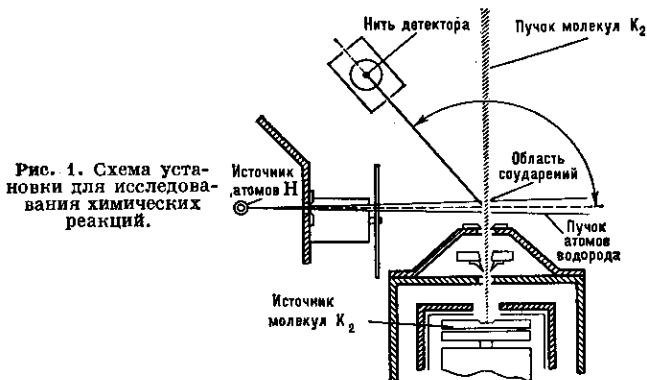
**МОЛЕКУЛЯРНЫЕ И АТОМНЫЕ ПУЧКИ** — направленные потоки молекул или атомов, движущихся в вакууме практически без столкновений друг с другом и с молекулами остаточных газов. М. и а. п. позволяют изучать свойства отд. частиц, пренебрегая эффектами, обусловленными столкновениями, кроме тех случаев, когда сами столкновения являются объектом исследований. Первый эксперимент с атомным пучком был осуществлён в 1911 Л. Дюнуайе (L. Duroyer), к-рый продемонстрировал прямой протек в вакууме атомов Na. В дальнейшем эксперименты были продолжены в 1929 О. Штерном (O. Stern), к-рый использовал М. и а. п. для измерения скорости молекул и эфф. сечений их соударений друг с другом, а также для исследования явлений, обусловленных электронными спинами и магн. моментами ядер. В 1937 И. Раби (I. Rabi) использовал М. и а. п. в изобретённом им резонансном методе измерения магн. моментов ядер, к-рый в дальнейшем стал одним из осн. методов *радиоспектроскопии*, позволившим измерить с большой точностью фундам. характеристики молекул, атомов и атомных ядер [Н. Рамзей (N. F. Ramsey) и др.].

Источник, в к-ром формируются М. и а. п., представляет собой камеру, соединённую с высоковакуумным объёмом (камера взаимодействия) при помощи отверстия в тонкой стенке (или узкого капилляра в толстой стенке). Исследуемые частицы вводятся в источник в виде газа или пара при давлении неск. мм рт. ст. Для формирования М. и а. п. давление газа в источнике должно быть достаточно малым, чтобы ср. длина  $l$  свободного пробега частиц внутри источника была равна или несколько больше диаметра соединит. отверстия. В этом случае частицы вылетают из источника независимо друг от друга. Для капилляра длина  $l$  должна быть соизмерима также с длиной капилляра. Рост  $l$  за счёт уменьшения давления в источнике уменьшает интенсивность М. и а. п., не улучшая их свойств. Для увеличения интенсивности пучков применяют источники с неск. отверстиями или капиллярами, рас-

стояние между к-рыми должно быть несколько больше их диаметра.

Соударения с частицами остаточного газа разрушают М. и а. п. тем быстрее, чем хуже вакуум. Длина М. и а. п. в идеальном вакууме была бы чрезвычайно велика, т. е. возможны были бы только соударения «до-гона». Для получения в камере взаимодействия предельно достижимого вакуума её отделяют от камеры источника ещё одной — буферной камерой, откачиваемой высоковакуумным насосом. Если давление паров исследуемого вещества при комнатной темп-ре недостаточно велико, его вводят в камеру в форме твёрдых (жидких) образцов и нагревают камеру до темп-ры, обеспечивающей нужное давление.

**Взаимодействие частиц.** Метод М. и а. п. даёт возможность изучать акт столкновения между двумя частицами в отличие от хим. и газодинамич. методов, в к-рых из-за множеств. столкновений частиц друг с другом наблюдаются лишь усреднённые эффекты. В нек-рых экспериментах измеряются эфф. сечения упругих и неупругих соударений частиц, движущихся под разными углами и с разными скоростями. В др. экспериментах наблюдаются хим. реакции между частицами и изучается угл. и энергетич. распределение продуктов реакции [Лестер (Lester), 1971; Дж. Росс (J. S. Ross), 1966; Р. Дж. Гордон (R. J. Gordon) и др., 1971]. Типичный эксперимент 2-го типа показан на рис. 1.



Атомы водорода вылетают из источника в камеру, где сталкиваются и вступают в хим. реакцию с двухатомными молекулами щелочного металла, напр. K<sub>2</sub>. Угл. распределение продуктов реакции измеряется с помощью детекторов с *поверхностной ионизацией* (горячие нити Pt и W). Т. к. вольфрамовый детектор одинаково чувствителен к частицам K<sub>2</sub> и KOH, а платиновый — менее чувствителен к KOH, то, комбинируя оба детектора, можно различать эти молекулы. Иногда М. и а. п. предварительно поляризуют или, наоборот, измеряют появляющуюся поляризацию. В нек-рых экспериментах исследуется возбуждение колебат. уровней энергии у продуктов реакции.

**Резонансные эксперименты (метод Раби).** Частицы, вылетая из источника в вакуум (давление  $p \leq 1,33 \cdot 10^{-5}$  Па или  $10^{-7}$  мм рт. ст.), пролетают через неоднородное магн. поле, создаваемое магнитом А (рис. 2), к-рое по-разному искривляет их траектории в зависимости от взаимодействия их магн. моментов с неоднородным магн. полем и от их скорости. Далее частицы пролетают через однородное магн. поле, создаваемое магнитом С. В этом поле расположена диафрагма, ограничивающая пучок, и устройство, формирующее эл.-магн. поле, частота к-рого  $\omega_p$  может настраиваться на частоту исследуемого энергетич. перехода:

$$\omega = (\mathcal{E}_2 - \mathcal{E}_1)/\hbar,$$

где  $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$  — энергии частицы в двух состояниях. Неоднородное поле магнита В, противоположное по направлению полю А, но подобное ему по структуре,