

ГАЗОВАЯ ЭЛЕКТРОНОГРАФИЯ НА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКАХ – НАПРАВЛЕНИЕ РАЗВИТИЯ МЕТОДА

Иванов А.А.

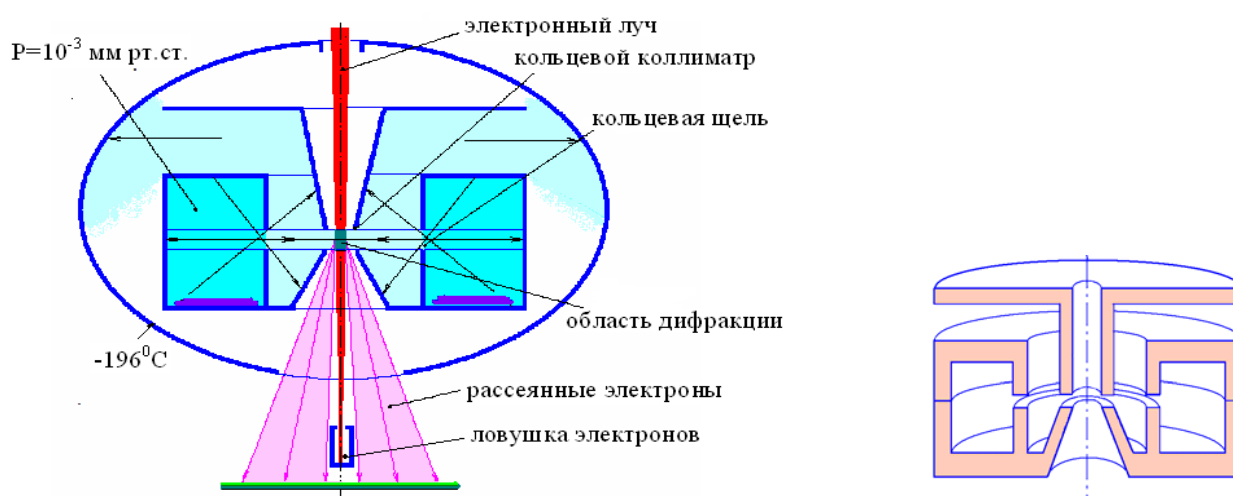
Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, кафедра физической химии.

Газовая электронография [1] позволяет получить экспериментальную информацию о взаимном расположении ядер, валентных и деформационных углах, о заселенностях электронных, колебательных и вращательных уровней, уточняя такие молекулярные величины как равновесные геометрические параметры и константы внутримолекулярных функций потенциальной энергии. Метод основан на дифракции монохроматического луча быстрых электронов, рассеянных на “точечном” объеме свободных молекул.

Традиционные условия проведения электронографического эксперимента мало отличаются от условий проведения первых экспериментов тридцатых годов прошлого века. Случайный фактор в виде постороннего приборного фона, возникающего при напуске в высоковакуумную дифракционную камеру интенсивной струи пара, вносит значительный вклад в системную ошибку. Нет единой технологии получения дифракционной картины, кроме того, ограничены возможности самого эксперимента.

Кардинальным решением экспериментальных проблем в ГЭ является переход от традиционного режима вязкой струи пара к режиму молекулярного пучка.

Реконструированный электронограф позволяет поддерживать неизменным приборный фон $2 \cdot 10^6$ э/см² на максимальных углах рассеяния $S=8\text{Å}^{-1}$ в условиях реального эксперимента. Конструкция высокотемпературного испарителя (1500°C) со щелевым соплом [2] обеспечивает молекулярный поток при давлении пара $1 \cdot 10^{-2}$ мм рт. ст..



На примере молекулы йода экспериментально установлено, что при температуре -30°C , что соответствует давлению пара $1 \cdot 10^{-3}$ мм рт. ст., можно получать максимальные

углы рассеяния электронов до $S=28\text{Å}^{-1}$. Необходимую концентрацию молекул в области дифракции обеспечивает ячейка Кнудсена [3], имеющая вид полого кольца.

Щель для выхода пара расположена по периметру на внутренней поверхности кольца. В центре кольцевого коллиматора формируется “точечный”, ограниченный по высоте, объем молекул.

Предложенный вариант проведения электронографического эксперимента в условиях молекулярного потока позволяет создать единую технологию получения электронограмм в идентичных условиях состояния молекул. Помимо этого, устраняется целый ряд недостатков традиционной технологии проведения эксперимента. Появилась возможность ввести новую техническую характеристику газового электронографа в виде зависимости фоновой электронной плотности $N_{эп}/\text{см}^2$ от угла рассеяния $S, \text{Å}^{-1}$ при определенных значениях заряда зондирующего луча.

Определена величина минимальной интенсивности рассеяния полезного сигнала равная $2,5 \cdot 10^4 \text{ э}/\text{см}^2$, которая является главным критерием выбора системы регистрации дифракционной картины.

Оценка количества молекул-мишеней и электронов, участвующих в процессе дифракции, позволила составить номограмму определения ожидаемых максимальных углов рассеяния в зависимости от условия эксперимента..

Установлено, что нет необходимости испарять граммы исследуемого вещества, достаточно иметь в “точечном” объеме всего $3 \cdot 10^9$ молекул-мишеней.