

УДК 537.531:539.26:539.184

©1993

## РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОЭМИССИЯ В КРИСТАЛЛЕ KCl : ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

*P.B. Ведринский, A.A. Новакович, A.G. Бермус, M. Эланго,  
A. Аусмеес, A. Кикас, E. Номмисте, A. Саар*

Предложен новый метод расчета фотоэмиссионных спектров, впервые позволивший учесть влияние резонансных возбуждений кристалла в промежуточном состоянии на сечение процесса. Метод применен для расчета фотоэмиссионных спектров  $KM_1$  и  $KM_{2,3}$  в кристалле KCl, получаемых при энергиях фотонов, близких к  $KL_{2,3}$ -порогу. Расчеты показывают, что в фотоэмиссионных спектрах присутствует тонкая структура, напоминающая структуру  $KL_{2,3}$ -спектра поглощения, но несколько модифицированная и значительно менее контрастная. Все особенности расчетных спектров находят полное подтверждение в экспериментальных данных, полученных с использованием синхротронного излучения.

Процессы резонансной фотоэмиссии давно привлекают внимание экспериментаторов. К сожалению, теория этих процессов достаточно сложна и до сих пор слабо разработана. При ее построении возникают две основные трудности: необходимость при вычислении амплитуд вероятностей процессов проводить суммирование по бесконечным наборам промежуточных электронных состояний, что является непростой задачей даже в случае свободных атомов [1], и сильное влияние многоэлектронных эффектов на процессы, традиционно исследуемые экспериментаторами (резонансная фотоэмиссия из атомов переходных и редкоземельных металлов).

В настоящей работе предлагается новый подход к теории процессов резонансной фотоэмиссии, позволяющий преодолеть первую из указанных трудностей. Чтобы исключить из рассмотрения трудности, связанные с учетом многоэлектронных эффектов, в качестве объекта исследования был выбран кристалл KCl, в котором эти эффекты проявляются сравнительно слабо. Ниже рассматриваются процессы фотоэмиссии с 3s- и 3p-уровней калия, вызываемые рентгеновскими фотонами с энергиями, близкими к энергии 2p ионизации калия, а также процесс фотоэмиссии с 3p-уровня хлора при энергиях фотонов, близких к энергии 2p ионизации хлора.

Рассмотрение проводится на примере фотоэмиссии с 3p-уровня калия. В этом случае помимо процесса прямого выбивания электрона с 3p-уровня при поглощении фотона (рис. 1, диаграмма *a*) следует также учесть возможность образования на промежуточной стадии процесса виртуальных возбужденных состояний с дыркой на 2p-уровне и электроном в зоне проводимости. Такие промежуточные возбужденные состояния за счет межэлектронных взаимодействий могут превращаться в рас-

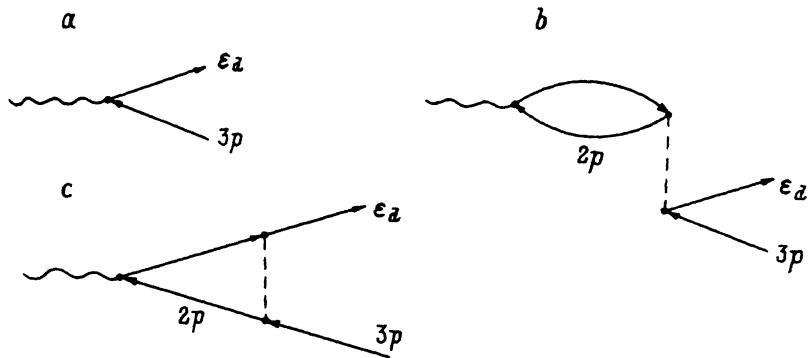


Рис. 1. Диаграммное представление амплитуды вероятности процесса фотоэмиссии электрона с 3p-уровня ионизируемого атома

сматриваемые конечные состояния с дыркой на 3p-уровне и быстрым фотоэлектроном. Это превращение может произойти двумя путями: за счет аннигиляции промежуточной электрон-дырочной пары и одновременного возникновения конечного состояния с дыркой на 3p-уровне (рис. 1, диаграмма b) и за счет неупругого рассеяния электрона на дырке, в результате которого состояние последней изменяется (рис. 1, диаграмма c).

Амплитуды вероятностей  $M_a$ ,  $M_b$ ,  $M_c$  процессов a – c можно вычислить либо методами стационарной теории неупругого рассеяния [2], либо методами диаграммной техники [1]. Поскольку начальные и конечные состояния для всех рассматриваемых процессов одни и те же, полная амплитуда вероятности процесса фотоэмиссии  $M$  равна сумме амплитуд  $M_a$ ,  $M_b$  и  $M_c$

$$M = M_a + M_b + M_c, \quad (1)$$

где

$$M_a = \int \Phi_{3p}^*(r) z R_L(\varepsilon, \mathbf{r}) d^3 r, \quad (2)$$

$$M_b = \sum_{2p} \sum_{\varepsilon_n > \mu} \int \frac{\chi_n(\mathbf{r}_1)\chi_n^*(\mathbf{r}_2)}{\varepsilon_{2p} + \Omega - \varepsilon_n + i\sigma} z_1 \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \times \\ \times \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_3) R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3}, \quad (3)$$

$$M_c = - \sum_{2p} \sum_{\varepsilon_n > \mu} \int \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) z_2 \frac{\chi_n(\mathbf{r}_2)\chi_n^*(\mathbf{r}_3)}{\varepsilon_{2p} + \Omega - \varepsilon_n + i\sigma} \times \\ \times \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3}. \quad (4)$$

Здесь использована атомная система единиц; энергия измеряется в ридбергах,  $\Omega$  — энергия фотона;  $\chi_n(\mathbf{r})$  — одноэлектронная волновая функция в зоне проводимости, вычисляемая в кристаллическом потенциале, построенном с учетом вклада оставной вакансии;  $R_L(\varepsilon, \mathbf{r})$  — волновая функция фотоэлектрона с моментом  $L = (l, m)$  относительно центра иона калия, вычисляемая в сферически-симметричном потенциале этого иона;

$\varepsilon$  — энергия электрона в конечном состоянии;  $\Phi_{2p}(\mathbf{r})$ ,  $\Phi_{3p}(\mathbf{r})$  — волновые функции электрона на  $2p$ -и  $3p$ -уровнях;  $\mu$  — энергия Ферми.

Наибольшие трудности при вычислении амплитуд  $M_b$  и  $M_c$  возникают из-за необходимости проводить суммирование по бесконечному набору промежуточных электронных состояний, волновые функции которых  $\chi_n(\mathbf{r})$  формируются в сложном потенциальном рельефе кристалла. Ясно, что суммирование в правых частях равенств (3) и (4) должно проводиться только по свободным электронным состояниям. Если распространить суммирование на все состояния, включая занятые, то возникающие суммы по полному набору промежуточных электронных состояний представляют собой запаздывающие одноэлектронные функции Грина, вычисляемые в потенциале кристалла. Естественно, добавленные вклады от занятых состояний должны быть вычтены из этих функций. Однако вследствие того, что в занятых электронных состояниях иона калия составляющие  $d$ -симметрии, дающие основные вклады в амплитуды  $M_b$  и  $M_c$ , присутствуют с малыми весами, суммами по занятым состояниям можно пренебречь. В результате мы приходим к соотношениям

$$M_b = \sum_{2p} \int \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) z_1 G^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \times \\ \times \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_3) R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3}, \quad (5)$$

$$M_c = - \sum_{2p} \int \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) z_2 G^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3; E) \times \\ \times \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3}, \quad (6)$$

где  $E = \varepsilon_{2p} + \Omega$  — энергия электрона в промежуточном состоянии,  $G^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E)$  — одноэлектронная запаздывающая функция Грина.

Для вычисления одноэлектронной функции Грина используем, как это обычно делается, muffin-tin( $MT$ ) приближение для потенциала кристалла и разложим функции Грина по угловым гармоникам [3]

$$G^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; E) = \sqrt{E} \sum_{L_1} R_{L_1}^*(E, \mathbf{r}_{<}) N_{L_1}(E, \mathbf{r}_{<}) + \\ + \sqrt{E} \sum_{L_1 L_2} [G_{L_1 L_2}^{00}(E) - 1\delta_{L_1 L_2}] R_{L_1}(E, \mathbf{r}_1) R_{L_2}^*(E, \mathbf{r}_2). \quad (7)$$

Здесь  $\mathbf{r}_{>} \mathbf{r}_{<}$  — соответственно больший и меньший по модулю из радиус-векторов  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . Начало координат выбрано в центре ионизуемого атома калия. Регулярное  $R_L$  и сингулярное  $N_L$  решения уравнения Шредингера в изолированной атомной сфере калия удовлетворяют на ее поверхности граничным условиям

$$R_L(E, \mathbf{r}_{mt}) = [J_l(kr_{mt}) \cos \delta_1(E) - n_1(kr_{mt}) \sin \delta_1(E)] Y_L(\hat{\mathbf{r}}_{mt}),$$

$$N_L(E, \mathbf{r}_{mt}) = [j_l(kr_{mt}) \sin \delta_1(E) + n_1(kr_{mt}) \cos \delta_1(E)] Y_L(\hat{\mathbf{r}}_{mt}),$$

$\delta_1(E)$  — сдвиг фазы при рассеянии  $l$ -волны потенциалом атомной сферы;  $k^2 = E: Y_L(\mathbf{r})$  — сферическая гармоника;  $J_l(x)$ ,  $n_l(x)$  — сферические функции Бесселя и Неймана соответственно.

После подстановки разложения (7) в выражения (5), (6), амплитуды  $M_b$ ,  $M_c$  выражаются через матричные элементы функции Грина  $G_{LL}^{00}(E)$ , записанные в представлении номер узла-орбитальный момент и вычисляемые для значения энергетического параметра  $E$ , которое определяется законом сохранения энергии

$$E = \varepsilon_{2p} + \Omega. \quad (8)$$

В результате выражения для амплитуд  $M_b$ ,  $M_c$  приобретают вид

$$\begin{aligned} M_b = & \sqrt{E} \sum_{2p} \sum_{L_1} \int z_1 \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) R_{L_1}^*(E, \mathbf{r}_<^{1,2}) H_{L_1}(E, \mathbf{r}^{1,2}) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) \times \\ & \times \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_3) R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3} + \\ & + \sqrt{E} \sum_{2P} \sum_{L_1 L_2} G_{L_1 L_2}^{00}(E) \int z_1 \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) R_{L_1}(E, \mathbf{r}_1) d^3 r_1 \times \\ & \times \int R_{L_2}^{P*}(E, \mathbf{r}_2) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) \frac{2}{|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3|} \times \\ & \times \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_3) R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^6 r_{2,3}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} M_c = & -\sqrt{E} \sum_{2p} \sum_{L_1} \int \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}(\mathbf{r}_1) \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_2) z_2 R_{L_1}^*(E, \mathbf{r}_<^{2,3}) \times \\ & \times H_{L_1}(E, \mathbf{r}_>^{2,3}) \frac{2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^9 r_{1,2,3} - \\ & - \sqrt{E} \sum_{2p} \sum_{L_1 L_2} G_{L_1 L_2}^{00}(E) \int \Phi_{2p}^*(\mathbf{r}_1) z_1 r_{L_1}(E, \mathbf{r}_1) d^3 r_1 \times \\ & \times \int \Phi_{3p}^*(\mathbf{r}_2) \Phi_{2p}(\mathbf{r}_2) \frac{2}{|\mathbf{r}_2 \mathbf{r}_3|} R_{L_2}^*(E, \mathbf{r}_3) R_L(\varepsilon, \mathbf{r}_3) d^6 r_{2,3}, \end{aligned} \quad (10)$$

где

$$H(E, \mathbf{r}) = N(E, \mathbf{r}) - iR(E, \mathbf{r}).$$

Первые слагаемые в данных выражениях представляют собой внутриатомные вклады в амплитуды, а вторые — сверхатомные. Функции  $R_L(E, \mathbf{r})$  и  $H_L(E, \mathbf{r})$ , фигурирующие в выражениях (9), (10), легко вычисляются в сферически-симметричном потенциале атомной сферы калия, матричные элементы  $G_{LL}^{00}(E)$  сравнительно несложно и достаточно точно находятся в рамках кластерного приближения [3,4]. Таким образом, выражения (9), (10) открывают возможности для эффективного теоретического изучения влияния электронных возбуждений, возникающих в промежуточных состояниях, на интенсивность фотоэмиссии с Зр-уровня калия

в кристалле KCl. Понятно, что выражения, аналогичные (9), (10), можно получить при исследовании других процессов фотоэмиссии, например фотоэмиссии с 3s-уровня калия.

Обсудим полученные результаты. Прежде всего отметим, что в выражениях (9), (10) отсутствует суммирование по промежуточным электронным состояниям, а энергетический параметр функции Грина  $E = \varepsilon_{2p} + \Omega$  однозначно определяется законом сохранения энергии (8). Расчеты спектров поглощения [4–6], выполненные методом функций Грина, показывают, что в случае, когда энергии фотонов близки к порогу ионизации какого-либо остовного атомного уровня, матричные элементы  $G_{LL}^{00}(E)$  имеют хорошо выраженную тонкую оклопороговую структуру. Особенно контрастной она оказывается вблизи порога 2p-ионизации калия в кристалле KCl [6]. В связи с этим есть все основания ожидать появления тонкой структуры в интенсивности фотоэмиссии с 3p-уровня калия, когда энергии фотонов оказываются близкими к порогу 2p-ионизации этого иона. Такая структура может оказаться более сложной, чем структура, наблюдаемая в спектре поглощения, поскольку последняя выражается только через мнимую часть функции Грина, в то время как интенсивность фотоэмиссии  $I$  выражается как через мнимую, так и вещественную ее часть. Интенсивность фотоэмиссионного спектра определяется соотношением

$$I = \sum (|M_a|^2 + 2\operatorname{Re} M_a^*(M_b + M_c) + |M_b + M_c|^2 = I_0 + I_1 + I_2, ) \quad (11)$$

где суммирование проводится по конечным состояниям электрон-дырочной пары. Если использовать для описания состояний последней представление орбитального момента, число слагаемых в (11) оказывается ограниченным, что позволяет проводить эффективное вычисление интенсивности фотоэмиссии  $I$  с помощью (11). Ясно, что величина  $I_0$  плавно зависит от энергии фотонов в рассматриваемой области ее изменения, в то время как величины  $I_1$  и  $I_2$  должны содержать хорошо выраженные тонкие структуры.

Мы провели расчет величин  $I_0$ ,  $I_1$  и  $I_2$  для 27-атомного кластера кристалла KCl  $O_h$  симметрии с центром на ионизируемом атоме калия. Как показывает опыт исследования спектров поглощения [4–6], использование такого кластера позволяет достичь хорошего согласия с экспериментом. Для расчета было использовано  $MT - X\alpha$  приближение для потенциала кристалла, построенного с учетом вклада потенциала остовной вакансии. Параметр  $\alpha$  подбирался таким, чтобы получить расчетный  $L_{2,3}$ -спектр поглощения, наилучшим образом согласующийся с экспериментальным. Как обычно бывает в случае свободных электронных состояний [7], найденное указанным образом значение энергетического параметра  $\alpha = 0.6$  оказалось несколько меньшим шварцевского.

Результаты выполненных расчетов представлены на рис. 2, где помимо зависимости  $I(\Omega)$  (кривая 1) показаны также зависимости  $I_0(\Omega)$  (кривая 3) и  $I_0(\Omega) + I_1(\Omega)$  (кривая 2). Для сравнения в нижней части рисунка приведен расчетный спектр поглощения кристалла KCl в окрестности 2p-порога ионизации калия (кривая 4). Как видно, в частотной зависимости интенсивности фотоэмиссии с 3p-уровня калия возникают ярко выраженные максимумы, подобные максимумам в спектре поглощения, слегка смешанные в коротковолновую сторону относительно последних. С длинноволновой стороны тонкой структуры в зависимости  $I(\Omega)$

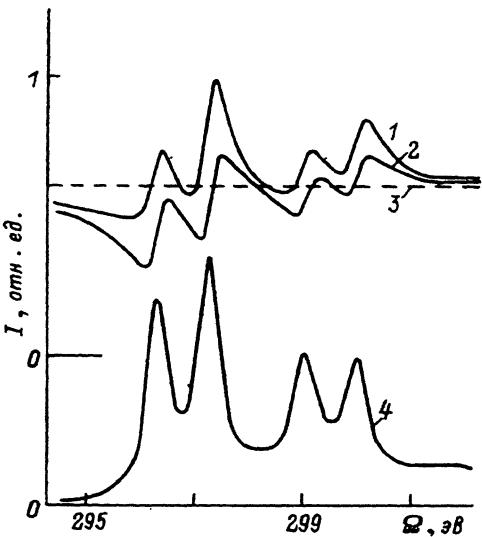


Рис. 2. Расчетная зависимость интенсивности фотоэмиссии с 3p-уровня К в кристалле KCl от энергии поглощенных фотонов (1-3). Расчетная зависимость коэффициента поглощения в окрестности 2p-порога ионизации К в кристалле KCl (4).

1 — полная; 2 — рассчитанная с точностью до членов, линейных по амплитуде вероятности возбуждения промежуточных состояний; 3 — интенсивность прямого перехода 3p — e.

присутствует хорошо заметный минимум. Сравнивая зависимости  $I(\Omega)$  и  $I_0(\Omega) + I_1(\Omega)$ , мы видим, что отмеченные выше особенности в частотной зависимости интенсивности фотоэмиссии с 3p-уровня калия обусловлены интерференцией амплитуд процессов прямого выброса электрона и выброса электрона, происходящего через промежуточное состояние с дыркой на 2p-уровне. Вклад квадратичного члена  $I_2(\Omega)$  в (11) оказывается одного порядка с вкладом интерференционного члена  $I_1(\Omega)$ . Его учет приводит к тому, что тонкая структура в суммарной интенсивности фотоэмиссии  $I(\Omega)$  становится более похожей на тонкую структуру в спектре поглощения. Следует также отметить, что тонкая структура в фотоэмиссионном спектре обусловлена взаимодействием виртуальных электронов с атомами окружения (вторые члены в выражениях (9), (10)), которые удерживают эти электроны около ионизируемого атома, что приводит к формированию хорошо выраженных резонансов d-симметрии на промежуточной стадии процесса фотоэмиссии.

Результаты расчета спектра фотоэмиссии с 3s-уровня калия показаны на рис. 3. Возникающая в этом случае тонкая структура имеет ряд осо-

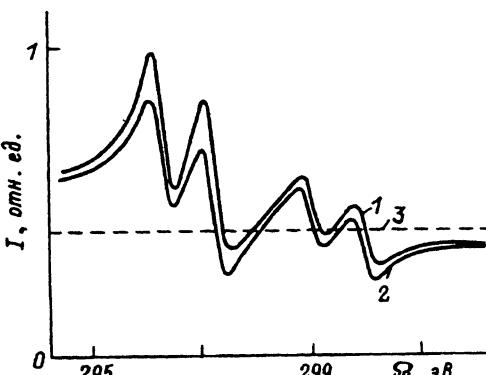


Рис. 3. Расчетная зависимость интенсивности фотоэмиссии с 3s-уровня К в кристалле KCl от энергии поглощенных фотонов.

1 — полная; 2 — рассчитанная с точностью до членов, линейных по амплитуде вероятности возбуждения промежуточных состояний; 3 — интенсивность прямого перехода 3s — e.

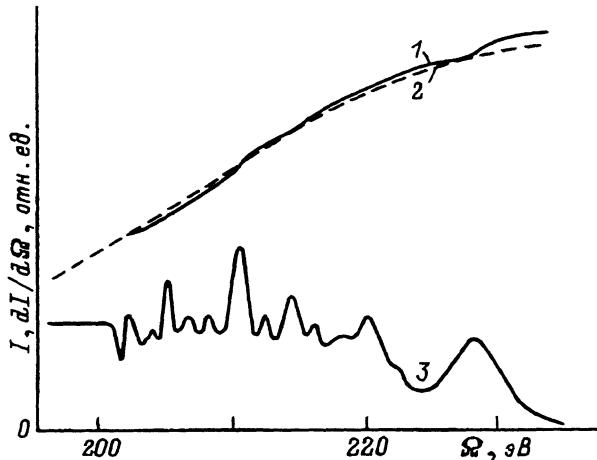


Рис. 4. Расчетная зависимость интенсивности фотоэмиссии с 3p-уровня Cl в кристалле KCl от энергии поглощенных фотонов.

1 — полная, 2 — интенсивность прямого перехода  $3p - \epsilon$ , 3 — производная полной интенсивности по энергии фотонов.

бенностей, отличающих ее от тонкой структуры в 3p спектре. Во-первых, резко меняются относительные интенсивности первых двух пиков, обусловленных переходами на орбитали  $E_g$ - и  $T_{2g}$ -симметрии, так что первый пик становится интенсивнее второго в отличие от случая 3p-уровня. Во-вторых, за счет изменения знаков матричных элементов, вычисляемых на радиальных атомных функциях, меняется характер интерференционного члена  $I_1(\Omega)$ , в результате чего минимумы в зависимости  $I(\Omega)$  оказываются расположеными с коротковолновой, а не длинноволновой стороны относительно максимумов, а максимумы в  $I(\Omega)$  смещаются в длинноволновую сторону относительно максимумов в  $L_{2,3}$ -спектре поглощения. В-третьих, вклад от квадратичного члена  $I_2(\Omega)$  в полную интенсивность 3s-спектра оказывается заметно меньшим, чем в случае 3p-спектра, так что тонкая структура в спектре фотоэмиссии с 3s-уровня калия в основном обусловлена интерференционным членом  $I_1(\Omega)$ .

Сопоставление спектров фотоэмиссии с 3s- и 3p-уровней калия с  $L_{2,3}$ -спектром поглощения калия в кристалле KCl показывает, что контрастность тонкой структуры в спектрах фотоэмиссии (пиковье значения превышают фон примерно в два раза) намного меньше, чем в спектре поглощения, где пикиевые значения превышают фон более чем на порядок.

Мы исследовали также тонкую структуру в спектре фотоэмиссии с 3p-уровня хлора в кристалле KCl, возникающую в случае, когда энергии фотонов порядка энергии 2p ионизации иона хлора в данном кристалле. Результаты расчета представлены на рис. 4. Известно, что тонкая структура в спектре поглощения хлора является достаточно хорошо выраженной, но намного менее контрастной, чем в случае  $L_{2,3}$ -спектра поглощения калия [8]. Тонкая структура в спектре фотоэмиссии с 3p-уровня хлора оказывается настолько малоконтрастной, что ее можно заметить, лишь исследуя частотную зависимость производной спектра  $dI(\Omega)/d\Omega$ .

Полученные результаты говорят о том, что тонкая структура фотоэмиссионных спектров, обусловленная резонансными эффектами на про-

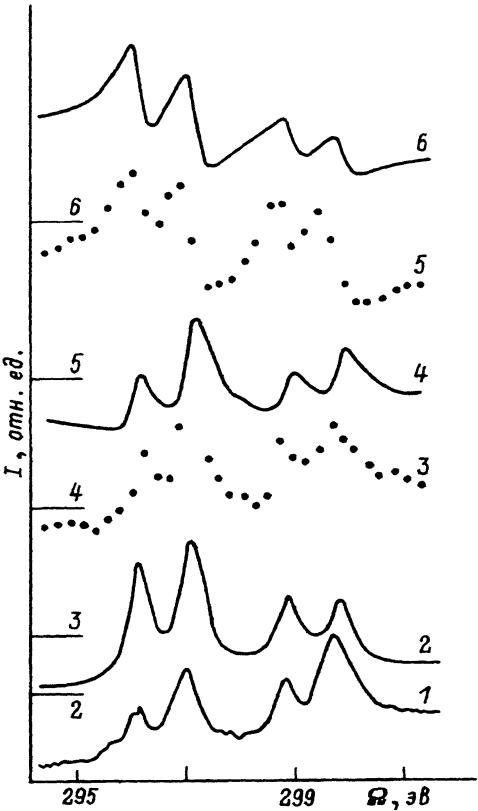


Рис. 5. Спектры поглощения и фотоэмиссии К в кристалле KCl ( $L_{2,3}$ -спектр поглощения: 1 — эксперимент, 2 — теория), интенсивность фотоэмиссии с  $3p$ -уровня (3 — эксперимент, 4 — теория), интенсивность фотоэмиссии с  $3s$ -уровня (5 — эксперимент, 6 — теория).

Пронумерованные горизонтальные линии указывают начало отсчета интенсивности для соответствующих кривых.

межуточной стадии процесса, является достаточно контрастной лишь в том случае, если на этой стадии происходит заселение электронных состояний стационарного или квазистационарного типа, волновые функции которых существенно перекрываются с волновой функцией ионизируемого уровня, как это имеет место в случае квазистационарных околопороговых  $d$ -состояний на ионе калия в кристалле KCl. Как известно [8], возникновение таких состояний связано с коллапсом волновой функции  $d$ -симметрии, ведущим к образованию в конечном итоге атомного  $3d$ -состояния. Тот факт, что волновые функции  $d$ -симметрии локализованы на более легком ионе Cl в существенно меньшей степени, что на ионе K, ведет к тому, что тонкая структура в фотоэлектронном спектре хлора выражена слабо.

Сопоставление расчетных и экспериментальных спектров фотоэмиссии с  $3p$ - и  $3s$ -уровней калия в кристалле KCl представлено на рис. 5. Экспериментальные спектры были получены группой авторов (М.А.Эланго и др.) с использованием синхротронного излучения в МАХ-лаборатории университета г.Лунд, Швеция. Первичный пучок монохроматизировался с разрешением порядка 0.3 эВ. Фотоэлектроны регистрировались анализатором (Scienta ESCA SES-200), который обеспечивал разрешение порядка 0.15 эВ. Одновременно со спектрами фотоэмиссии снимался  $L_{2,3}$ -спектр поглощения калия по полному квантовому выходу. Исследуемый образец представлял собой пленку с толщиной около 20 нм на

медной подложке, что практически полностью исключало эффекты зарядки образца. Более подробное описание эксперимента и полученных результатов будет дано в другой работе.

На рис. 5 приведены экспериментальный и расчетный  $L_{2,3}$ -спектры поглощения калия (кривые 1, 2), экспериментальный и расчетный спектры фотоэмиссии с 3р-уровня калия (кривые 3, 4) и экспериментальный и расчетный спектры фотоэмиссии с 3s-уровня калия (кривые 5, 6). Как видно из сопоставления расчетных и экспериментальных спектров фотоэмиссии, все указанные выше особенности рассчитанных фотоэлектронных спектров находят подтверждение в экспериментальных спектрах. Наибольшее отличие между теорией и экспериментом имеет место для отношения интенсивностей линий спин-дублета в спектре поглощения. Для описания «обращенного» спин-дублета в экспериментальном спектре поглощения необходимо учесть не принятый во внимание в данной работе эффект неупругого взаимодействия фотоэлектрона с оставной дыркой, имеющий существенно многоэлектронную природу.

В заключение следует отметить, что предложенный метод расчета позволяет дать адекватное теоретическое описание тонкой структуры в спектрах фотоэмиссии, обусловленной резонансными эффектами имеющими место на промежуточной стадии процесса фотопоглощения. Возникающая тонкая структура оказывается качественно сходной со структурой в соответствующем спектре поглощения, но значительно менее контрастной и отличающейся рядом характерных деталей, обусловленных интерференцией амплитуд процессов прямой фотоэмиссии и фотоэмиссии, происходящей через промежуточные состояния.

Р.В.Ведринский, А.А.Новакович, А.Г.Бермус выражают благодарность Министерству науки, высшей школы и технической политики Российской Федерации за финансовую поддержку работы по гранту номер 15-51-14.

### Список литературы

- [1] Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука, 1987. 272 с.
- [2] Гольдбергер М., Ватсон К. Теория атомных столкновений. М.: Мир, 1967. 823 с.
- [3] Ведринский Р.В., Новакович А.А. // Физика металлов и металловедение. 1975. Т. 39. № 1. С. 7-15.
- [4] Ведринский Р.В., Гегузин И.И. Рентгеновские спектры поглощения твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1991. 183 с.
- [5] Datsyuk V.N., Vedrinskii R.V., Gegusin I.I. // Phys. Stat. Sol. (b). 1986. V. 134. N 1. P. 175-184.
- [6] Vedrinskii R.V., Bugaev L.A., Gegusin I.I., Kraizman V.L., Novakovich A.A., Prosandeev S.A., Ruus R.E., Maiste A.A., Elango M.A. // Solid State Comm. 1982. V. 44. N 10. P. 1401-1407.
- [7] Bugaev L.A., Gegusin I.I., Datsyuk V.N., Novakovich A.A., Vedrinskii R.V. // Phys. Stat. Sol. (b). 1986. V. 133. N 1. P. 192-202.
- [8] Майсте А.А., Руус Е.А., Эланго М.А. // ЖЭТФ. 1980. Т. 79. № 5. С. 1671-1687.

Ростовский-на-Дону  
государственный университет  
НИИФ

Поступило в Редакцию  
22 января 1993 г.