

УДК 535.34—32 01

© 1991

## ВЛИЯНИЕ ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ В ОКРУЖЕНИИ НА ТОНКУЮ СТРУКТУРУ РЕНТГЕНОВСКИХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ

*А. А. Павлычев, А. Барри, А. С. Виноградов*

В рамках квазиатомного подхода рассмотрены интерференционные эффекты, возникающие при ионизации внутренней электронной оболочки в твердом теле, и их роль в формировании тонкой структуры рентгеновских спектров поглощения. Основное внимание уделено анализу эффектов, которые обусловлены интерференцией фотоэлектронных волн, рассеянных атомами из разных координационных сфер. Найдено аналитическое выражение для амплитуды фотоэлектронной волны, отраженной от окружения, с учетом интерференционных эффектов в нем. Показано, что интерференционные эффекты в окружении могут быть разделены на две группы: эффекты преломления, влияние которых прослеживается в широком (несколько сотен электронвольт) интервале энергий фотоэлектронов, и резонансные эффекты в окружении, которые заметны в непосредственной близости к порогу. Эти эффекты приводят к сдвигу, изменениям интенсивности и формы полос поглощения, а также при наличии сильных резонансных эффектов в окружении к появлению новых дополнительных экстремумов в спектре. Вследствие интерференционных эффектов в окружении различные координационные сферы взаимосвязанным образом действуют на спектр поглощения атома. В качестве примера в работе рассмотрено влияние изучаемых эффектов на тонкую структуру К-спектров фотопоглощения атомов азота и кремния в кристаллах гексагонального нитрида бора и кремния.

Анализ тонкой структуры (ТС) рентгеновских спектров поглощения (РСП) широко применяется для изучения локального строения вещества (см., например, [1, 2]). В основе использования данной методики лежит тот факт, что ТС РСП есть результат интерференции, выходящей из ионизируемого атома и рассеянных на атомах окружения фотоэлектронных волн. Механизм формирования ТС РСП детально изучен для высоких кинетических энергий  $E$  фотоэлектронов (EXAFS-область), где доминирует однократное рассеяние на атомах окружения. В этом случае различные КС участвуют в формировании ТС РСП независимым образом, так как роль многократного рассеяния здесь незначительна. По мере уменьшения  $E$  вероятность многократного рассеяния фотоэлектронов возрастает, что приводит к взаимосвязи вкладов от различных КС и как следствие к значительному усложнению интерференционной картины. В настоящее время механизм формирования ТС РСП в области малых  $E$  изучен достаточно полно лишь в случае, когда многократное рассеяние фотоэлектронов велико только внутри кластера, ограниченного ближайшей КС [ $3^{11}$ ], и практически не исследован, когда эффектами многократного рассеяния на следующих КС пренебречь нельзя. Анализу роли возникающих интерференционных эффектов в окружении (ИЭВО) в процессе формирования ТС РСП твердых тел и посвящена данная работа.

### 1. К в а з и а т о м н ы й п о д х о д

Для решения поставленной выше задачи используется квазиатомный подход: спектральное поведение сечения фотопоглощения основной электронной оболочкой в твердом теле рассматривается как близкое к атом-

тому, отличающимся от которого вызваны воздействием внешнего поля на процесс фотоионизации атома [10-14]. (Далее ионизируемый атом обозначим как  $g$ , а окружающие его атомы — как  $g_j$ ). Внешнее к атому  $g$  поле создается потенциалами атомов и характеризуется псевдопотенциалом  $W$ . Волновые функции атома  $g$  в поле  $W$  определяются как собственные функции оператора полной энергии атома с эффективным потенциалом  $V$ , который складывается из потенциалов атома  $g$  и  $W$ . Примерный вид потенциала  $V$  изображен на рис. 1,  $a$ , естественным образом в нем выделяются область внутренней ямы  $r < r_g$  и область ее окружения. Последнюю можно ограничить интервалом  $r_g < r < R_g$ , в котором потенциал  $V$  (или  $W$ ) анизотропен и радиально неоднороден. Отметим, что частным случаем такого потенциала является, например, двухдолинный потен-

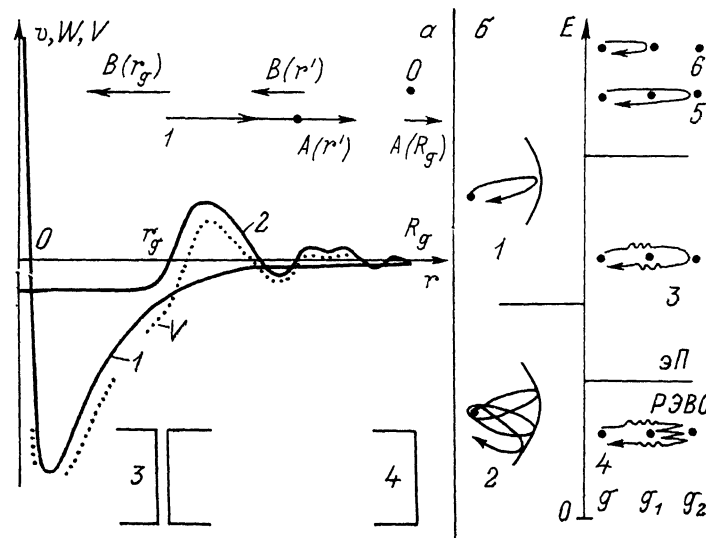


Рис. 1. Квазиатомное описание механизма формирования ТС РСП.

$a$  — эффективный потенциал, действующий со стороны изолированного атома на электрон с орбитальным моментом  $l$  (1) и центрально-симметричная часть потенциала окружения (2). 3 — эффект многократного отражения, 4 — ИЭВО. Величины стрелок, направленных вправо и влево, соответствуют амплитудам расходящихся и сходящихся к атому  $g$  волн на разных расстояниях от него;  $b$  — диаграммное представление интерференционных эффектов во внутренней яме потенциала  $V$  (слева) и в области окружения (справа), одно (1)- и много (2)-кратное отражение фотоэлектрона от окружения, ЭП (3) и РЭВО (4), совокупность диаграмм 5 и 6 отвечает за отражение в отсутствие ИЭВО.

циал, который широко используется для объяснения многих особенностей распределения спектральной плотности сил осцилляторов рентгеновских переходов [15-17].

Действие потенциала окружения на расходящиеся из атома фотоэлектронные волны  $\{\varphi^+(E, \mathbf{r})\}$  ( $r > r_g$ ) приводит к появлению сходящихся (отраженных от окружения) волн  $\{\varphi^-(E, \mathbf{r})\}$  [6, 10-14, 18] (рис. 1,  $a$ ). Амплитуды парциальных волн, прошедших сквозь окружение  $\{A_{l\nu r}(E)\}$  и отраженных от окружения  $\{B_{l\nu r}(E)\}$  (матрицы  $A(E)$  и  $B(E)$  соответственно), характеризуют изменение потока  $\mathbf{j}$  фотоэлектронов через сферу большого радиуса, например  $R_g$ , охватывающую атом  $g$ , и позволяют находить ТС РСП атома в веществе <sup>1</sup> [6, 10-14]. Если энергетическими потерями фотоэлектронов в окружении можно пренебречь ( $\text{Im}W=0$ ), то для расчета ТС РСП необходимо знать одну из матриц  $A(E)$  или  $B(E)$ , связанных между собой условием сохранения потока фотоэлектронов,  $\text{div } \mathbf{j}=0$ .

<sup>1</sup> Предполагается, что  $W$  действует только на свободные состояния атома  $g$ , с которыми связана ТС РСП. Изменения занятых электронных состояний полагаем известными, их влияние на РСП учитывается выбором исходного потенциала атома или иона [10].

Формализм фазовых функций [19] позволяет получить систему уравнений для матриц  $A(E, r)$  и  $B(E, r)$  и с их помощью вычислить матрицы  $A(E) \equiv A(E, R_g)$  и  $B(E) \equiv B(E, r_g)$ , минуя этап нахождения волновых функций [11-13]

$$\frac{d}{dr} B = [\Phi^+ + B\Phi^-]W[\Phi^+ + \Phi^-B], \quad B(E, R_g) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{d}{dr} A = -\Phi^+W[\Phi^+ + \Phi^-B]A, \quad A(E, r_g) = \{\delta_{l_0 \pm 1, l'}\}, \quad (2)$$

$\Phi^\pm$  — диагональные матрицы с элементами  $\varphi_l^\pm \delta_{ll'}$ ;  $W$  — матрица атомного фотоэлектрона с окружением

$$W_{ll'\Gamma} = \sum_{\lambda \geq 0} W_\lambda(r) \int K_{\lambda\Gamma}^* K_{\lambda\Gamma} K_{l'\Gamma} d\Omega,$$

$W_\lambda - 2^\lambda$  — полный момент в разложении потенциала окружения относительно центра атома  $g$ ;  $\Omega$  — угловые переменные в системе координат с центром на атоме  $g$ ;  $K_{l\Gamma}$  — решеточные гармоники соответствующего порядка;  $(d/dr)B$  и  $(d/dr)A$  — матрицы  $\{dB_{ll'\Gamma}(E, r)/dr\}$  и  $\{dA_{ll'\Gamma}(E, r)/dr\}$ ; через  $l$  и  $l'$  обозначены орбитальные моменты фотоэлектронных волн до и после их взаимодействия с окружением;  $\Gamma$  — индекс неприводимого представления точечной группы симметрии атома  $g$  в кристалле.

Граничное условие для уравнения (1) — отсутствие отраженных волн от области  $r > R_g$ , а для уравнения (2) — единичные амплитуды расходящихся  $El_0 \pm 1$ -волн на границе области внутренней потенциальной ямы ( $nl_0$  — ионизируемая оболочка в атоме  $g$ ). Приведенные уравнения по существу определяют локальные электронно-оптические свойства среды, в которую погружен атом  $g$ , и позволяют рассчитывать, например, отражающую и пропускающую способность, коэффициент преломления, функцию энергетических потерь фотоэлектронов и другие электронно-оптические характеристики области окружения, с помощью которых может быть найдена ТС РСП атома.

## 2. Анализ ИЭВО

В силу высокой пространственной локализации ионизируемой  $nl_0$ -оболочки вблизи ядра атома  $g$  для вычисления спектрального хода сечения фотопоглощения достаточно рассчитать интерференционную картину в области внутренней ямы потенциала  $V$ , например, используя данные об амплитудах отраженных от окружения волн. Если отражающая способность окружения оказывается высокой, то интерференционная картина в области  $r < r_g$  формируется в ходе многократного отражения фотоэлектрона в системе атом  $g$  — окружение, а если — низкой, то однократного отражения (рис. 1, б). Уравнение (1) показывает, что отражающая способность окружения зависит не только от величины потенциала  $W$ , но и от интерференционных эффектов, которые имеют место внутри области  $r_g < r < R_g$  (т. е. ИЭВО) и определяются неоднородностью потенциала  $W$ .

Для анализа уравнения (1) необходим ряд упрощений. Прежде всего ограничимся рассмотрением  $K$ -спектров, что позволяет получить более простые соотношения, не снижая общности результатов. Далее пренебрежем угловой деформацией  $E_p$ -волны в поле  $W$  (диагональное приближение), т. е. не будем учитывать смешивание  $p$ -волн с другими ( $l' \neq l$ ) атомными парциальными волнами ( $B_{pl'\Gamma} = 0$ ). Это приближение позволяет с хорошей точностью описать основные детали ТС РСП в широком классе химических соединений [10-14, 20-22]. Отображенные недиагональные элементы  $B_{pl'\Gamma}$  отвечают за те особенности в распределении спектральной плотности сил осцилляторов рентгеновских переходов, которые связаны

с  $l'$ -резонансами и с эффектами фокусировки фотоэлектронных волн [23]. Использование диагонального приближения позволяет перейти от матричного уравнения (1) к скалярному

$$\begin{aligned} \frac{dB_{pp\Gamma}(E, r)}{dr} &= \frac{1}{2i\sqrt{E}} W^\Gamma(E, 2) [\varphi_p^+ + B_{pp\Gamma}(E, r) \varphi_p^-]^2 = \\ &= W^\Gamma \sum_{x=0, 1, 2} c_x B_{pp\Gamma}^x(E, r), \quad B_{pp\Gamma}(E, R_g) = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Если при решении уравнения (3) членами с  $x \geq 1$  пренебречь, то приходим к кинематическому (борновскому) приближению, которое означает, что изменения атомных  $\varphi_p^+(E, r)$  функций в окружении малы и их можно не учитывать. В этом случае амплитуда волны, отраженной всем окружением, складывается из амплитуд  $b_s$  волн, отраженных отдельно взятыми КС:  $B = \sum b_s$ . Члены с  $x=1$  и 2 описывают взаимодействие расходящейся волны с отраженной (1) и отраженных между собой (2), а оба вместе — ИЭВО. Включение этих членов ведет к последовательному учету при формировании амплитуды отраженной окружением волны эффектов преломления (ЭП) [13] и резонансных эффектов в окружении (РЭВО) (т. о. ИЭВО = ЭП + РЭВО).

Анализ роли РЭВО наиболее сложен, поскольку аналитического решения уравнения (3) (с  $x=0, 1, 2$ ) в общем виде не существует. Поэтому заменим потенциалы атомов  $g_j$  потенциалами нулевого радиуса [24] (это корректно, если  $kr_j \ll 1$ , где  $k$  — скорость электрона, а  $r_j$  — радиус атома  $g_j$ ). Тогда решение уравнения (3)

$$B(E) = \frac{1}{\prod_{s \leq S} (1 - a_{s, s+1})} \sum_{s=1}^S \left[ b_s \prod_{s' < s} q_{s'} (1 - a_{s+1, s+2}) \right] \quad (4)$$

(индексы  $pp\Gamma$  у соответствующих величин здесь и далее опущены), число КС в окружении равно  $S$

$$q_s = \exp[i(4\varphi_s + \pi)], \quad (5)$$

$$a_{s, s'} = \rho_s \rho_{s'} \exp 2i\delta_{s, s'}, \quad (6)$$

$$\delta_{s, s'} = k(R_{s'} - R_s) + \varphi_s + \varphi_{s'}. \quad (7)$$

Здесь учтено, что, согласно [25, 26],  $b_s = \rho_s \exp 2i\tau_s$ , где  $\rho_s = (1 + \xi_s^2)^{-1/2}$ ,  $\tau_s = kR_s + \varphi_s$ ,  $\varphi_s = \tan^{-1}\xi_s$ ,  $\xi_s = 2k/w_s$ , а  $w_s = 1/2 \cdot N_s \bar{a}_s / R_s^2$  — отражающая способность  $s$ -й КС, которая зависит от координационного числа  $N_s$ , расстояния до нее  $R_s$  и длин рассеяния  $\bar{a}_s$  атомов, ее образующих. Функция  $g_s(k)$  характеризует изменение фазовой скорости (преломление) фотоэлектронной волны при прохождении  $s$ -й КС, а величина  $a_{s, s'}$  — интерференцию волн, отраженных от  $s$ - и  $s'$ -й КС. Результатом многократных отражений в слое между  $s$ - и  $s'$ -й КС является появление в (4) множителей вида  $1/(1 - a_{ss'})$ , отвечающих за РЭВО.

Для дальнейшего упрощения анализа предположим, что в окружении не малы амплитуды только двух отраженных волн (двухволновое приближение), тогда

$$B \approx \frac{b_1 + b_2 q_1}{1 - a_{12}}. \quad (8)$$

Структуру амплитуды  $B$  поясним при помощи диаграммы на рис. 1,  $b$  [13, 22]. Совокупность диаграммы (3) и (4) описывают ЭП и РЭВО соответственно. В их отсутствие амплитуда  $B$  складывается из независимых процессов отражения (рассеяния назад), как это показано с помощью диаграммы (5) и (6).

$$\rho = |B| = \left[ \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos 2\vartheta_{12}}{1 + \rho_1^2\rho_2^2 - 2\rho_1\rho_2 \cos 2\vartheta_{12}} \right]^{1/2}. \quad (9)$$

Видно, что  $\rho(k)$  осциллирует (рис. 2), причем положения локальных максимумов и минимумов определяются оптической разностью хода  $\vartheta_{12}/k$  фотоэлектрона в слое между 1-й и 2-й КС. При  $2\vartheta_{12} = \pi 2n$  ( $n=1, 2, \dots$ ) величина  $\rho(k)$  достигает минимума  $T_n$  («окно» прозрачности), где  $\rho(T_n) = |\rho_1 - \rho_2| / (1 - \rho_1\rho_2)$ . Существенно, что

$$\rho(T_n) \approx 0, \quad \rho_1 \approx \rho_2, \quad (10)$$

даже если  $\rho_{1(2)} \sim 1$ . Возникновение «окна» связано с резонансным туннелированием фотоэлектрона через окружение. При  $2\vartheta_{12} = \pi(2n+1)$  ( $n=1, 2, \dots$ ) наблюдается область повышенного отражения  $A_n$  ( $\rho(A_n) = (\rho_1 + \rho_2) / (1 + \rho_1\rho_2)$ ), обусловленная запиранием канала туннелирования фотоэлектронов из-за самопоглощения интерферирующих волн в окружении.

Очевидно, что изменения в спектральном поведении  $\rho$  (а также фазы отражения  $\varphi$ ), вызванные ИЭВО, влияют на ТС РСП. В диагональном приближении последняя может быть найдена на основе следующего соотношения [13, 18]:

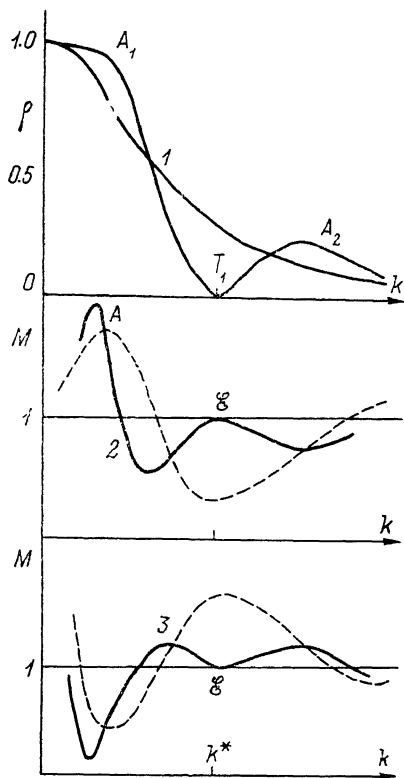


Рис. 2. Спектральный ход коэффициента отражения (1) и модулирующих функций (2 и 3) в отсутствие (штрихи) и с учетом РЭВО (сплошная линия).

Зависимость  $\rho(k)$  соответствует случаю  $\rho_1 = \rho_2$ .

$$M(k) = 1 + 2 \sum_{m \geq 1} \rho^m(k) \cos [2m(\delta_1(k) + \varphi(k))], \quad (11)$$

где  $m$  — кратность отражения от окружения;  $\delta_1$  — фаза рассеяния, соответствующая ионизации  $K$ -оболочки в атоме  $g$ ;  $\varphi = \arg B$ .

Для исследования поведения  $M(k)$  достаточно привести анализ производных  $d^m M / dk^m$ , но такой подход из-за большого числа возможных соотношений между параметрами, входящими в (11), оказывается чересчур громоздким. На рис. 2, б показаны функции  $M(k)$ , полученные без учета (штрихи) и с учетом ИЭВО (сплошная линия). Хорошо заметны изменения интенсивности, ширины и энергетического положения деталей ТС, например полосы  $A$ ; особо отметим появление дополнительного экстремума  $\mathcal{E}$  [22]. Механизм его формирования связан с РЭВО и может быть объяснен следующим образом. Пусть вследствие РЭВО образуется «окно» прозрачности вблизи  $k^*$  (рис. 2, а). Следовательно, при  $k \rightarrow k^*$  величина  $M \rightarrow 1$ , т. е. сечение фотопоглощения будет стремиться к атомному значению. Таким образом, если без учета РЭВО функция  $M$  вблизи  $k^*$  меньше, чем единица, то вследствие РЭВО может появиться дополнительный максимум (рис. 2, кривая 2) или, наоборот, минимум, если  $M > 1$  (рис. 2, кривая 3).

Перейдем к анализу ТС РСП конкретных объектов. Прежде всего рассмотрим с помощью полученных аналитических соотношений (5)—(9) и (11) НК-спектр поглощения кристалла гексагонального нитрида бора ( $h$ -BN). Экспериментальный спектр [27] в диапазоне энергий фотонов 400—420 эВ приведен на рис. 3. В ходе анализа этого спектра в работе [28] было обращено внимание на ряд характерных особенностей, заключающихся: а) в высокой интенсивности полос непрерывного поглощения  $B$  и  $C$  по отношению к длинноволновой полосе  $A$  и б) в наличии дополнительного максимума  $C'$ , а также было высказано предположение об их связи с ИЭВО.

Роль ИЭВО в формировании спектрального хода сечения  $N1s-E_{pe'}$ -перехода в  $h$ -BN должна быть достаточно заметной, так как  $pe'$ -состояния атома азота ориентированы вдоль гексагонально упакованных слоев,

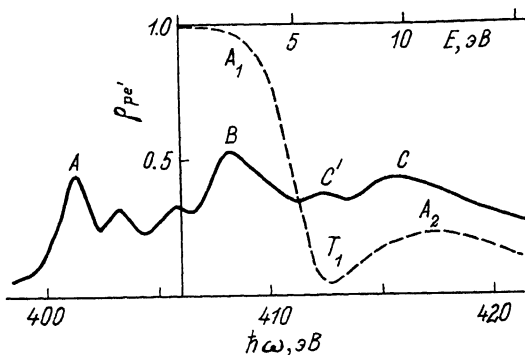


Рис. 3. НК-спектр поглощения  $h$ -BN, эксперимент [27].

Штриховая линия — коэффициент отражения от окружения  $Npe'$ -электронов.

причем 2-я КС образована шестью атомами N, тогда как 1-я КС — тремя атомами B с меньшими, чем у атома N, длинами рассеяния. В результате этого коэффициенты отражения от первых двух КС оказываются примерно равными и в спектральной зависимости коэффициента отражения  $Npe'$ -электронов от окружения появляются отчетливые осцилляции.

Расчитанная зависимость  $\rho_{pe'}(E)$  представлена на рис. 3. Интерференция отраженных волн в слое между 1-й и 2-й КС приводит к увеличению отражения  $Npe'$ -электронов с энергиями  $E < 4$  эВ ( $A_1$ ) и  $9 < E < 17$  эВ ( $A_2$ ), а также к образованию «окна» прозрачности ( $T_1$ ) вблизи 7 эВ. НК-спектр фотопоглощения и зависимость  $\rho_{pe'}(E)$  сопоставлены на рис. 3 в единой энергетической шкале таким образом, что нуль кинетической энергии фотоэлектронов совмещен со значением 406.0 эВ в РСП, где, согласно [29], расположен край непрерывного поглощения. Видно, что положения полос  $B$  и  $C$  приходятся на область  $A_1$  и  $A_2$ , а максимум  $C'$  — на  $T_1$ . Такое расположение деталей ТС РСП и особенностей поведения  $\rho_{pe'}(E)$  позволяет объяснить 1) повышение интенсивности полос  $B$  и  $C$  и 2) формирование максимума  $C'$ . Последний можно интерпретировать как дополнительный экстремум, механизм формирования которого был описан выше.

#### 4. К - спектр $c$ -Si

Анализ роли ИЭВО в формировании ТС К-спектра поглощения кристаллического кремния ( $c$ -Si) проведен на основе сравнения результатов расчетов с более «реалистичным» потенциалом окружения. При построении  $W$  не использовалось приближение потенциалов нулевого радиуса и были учтены конечные размеры атомов  $g_j$ . С этой целью потенциалы этих ато-

мов заменялись модельными потенциалами Хейне—Абаренкова<sup>[30]</sup>. Кроме того, согласно работам [21, 31], область окружения была расширена до 12 КС.

На рис. 4 приведены рассчитанные интервалы  $0 < E < 800$  эВ ТС К-спектра *c*-Si без учета ИЭВО ( $x=0$ ), с учетом только ЭП ( $x=0.1$ ), а также РЭВО ( $x=0, 1, 2$ ) (кривые 1—3 соответственно). Сравнивая кривые 1 и 2, видим, что при  $E > 450$  эВ они практически совпадают, а на участке  $140 < E < 450$  эВ преломление фотоэлектронных волн вызывает «растяжение» ТС РСП: экстремумы на кривой 2 по отношению к кривой 1 смещены в сторону порога.<sup>2</sup> При  $E < 140$  эВ роль ЭП еще более возрастает: наблюдается не только сдвиг, но и сильное искажение формы и интен-

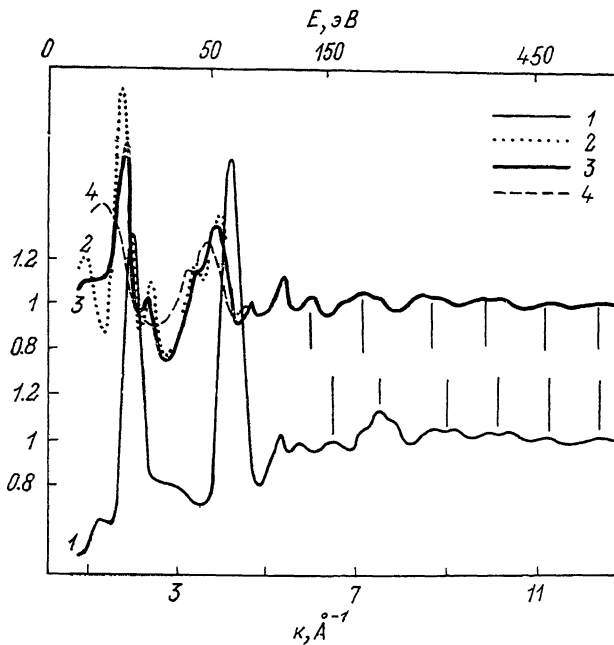


Рис. 4. ТС К-спектра поглощения *c*-Si.

Расчеты выполнены в кинематическом приближении (1), с учетом ЭП (2), с полным учетом ИЭВО (т. е. ЭП+РЭВО) (3) и в приближении однократного отражения (4).

сивностей деталей спектра. В свою очередь, сравнивая кривые 2 и 3, видим, что РЭВО также обуславливают изменения в энергетических положениях и интенсивностях полос поглощения при  $E < 15$  эВ. Появления дополнительных экстремумов в ТС К-спектра *c*-Si не обнаружено; по-видимому, это объясняется меньшей величиной РЭВО в *c*-Si по сравнению с *h*-BN.

На рис. 4 (кривая 4) показана ТС К-спектра *c*-Si, рассчитанная в приближении однократного отражения. Сравнивая кривые 3 и 4, находим, что эффекты многократного отражения необходимо принимать во внимание при  $E < 30$  эВ. Таким образом, из проведенного анализа результатов расчетов следует, что влияние ЭП на ТС РСП прослеживается в широком интервале энергий фотоэлектронов  $E < 450$  эВ, эффектов многократного отражения от окружения в существенно более узком интервале  $E < 30$  эВ и, наконец, РЭВО непосредственно вблизи порога  $E < 15$  эВ. Следовательно, можно указать четыре прилегающих друг к другу участка: 1) до 15 эВ, 2) от 15 до 30 эВ, 3) от 30 до 450 эВ и 4) свыше 450 эВ, в которых детали механизма формирования ТС РСП различаются. В таблице для указанных участков спектра отмечены те интерференционные

<sup>2</sup> Отсюда следует, что коэффициент преломления фотоэлектронов в окружении атома Si больше единицы.

эффекты, которые вносят заметный вклад в процесс формирования ТС К-спектра поглощения *c*-Si.

В заключение обратим внимание на то, что широко используемое представление о независимости вкладов, вносимых разными КС в ТС РСРП уже при  $E > 50$  эВ, оказывается достаточно приближенным из-за наличия ЭП, влияние которых прослеживается при заметно более высоких кинетических энергиях фотоэлектронов. На наш взгляд, именно неучет ЭП отвечает за меньшую точность в определении расстояния до атомов

Интерференционные эффекты,  
участвующие в формировании ТС К-спектра поглощения  
*c*-Si при разных значениях кинетической энергии  
фотоэлектронов

E, эВ	Однократное отражение $m = 1$	Множественное отражение $m > 1$	ИЭВО	
			ЭП. $x = 1$	РЭВО. $x = 2$
<15	+	+	+	+
15—30	+	+	+	
30—450	+		+	
>450	+			

второй и более далеких КС по сравнению с точностью, достигаемой при нахождении расстояний до ближайшей КС. Кроме того, для определения длин связей между атомами в химическом соединении в последнее время используется факт их линейной корреляции с энергией  $\sigma$ -резонанса в спектре [<sup>32—34</sup>]. Следует заметить, что такая корреляция имеет место только тогда, когда РЭВО не играют ощутимой роли в формировании  $\sigma$ -резонанса. Иначе возникает сильная взаимосвязь между КС, вследствие которой энергии  $\sigma$ -резонанса нельзя сопоставить только одно межатомное расстояние.

#### С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Int. Conf. EXAFS—V J. de Physique. 1985. V. 47. P. 8.
- [2] EXAFS Spectroscopy. Technique and Application / Ed. B. K. Teo and D. C. Joy. N. Y.—London, 1981.
- [3] Ведринский Р. В. // Автореф. докт. дис. РГУ, 1984.
- [4] Виноградов А. С. // Автореф. докт. дис. ЛГУ, 1988.
- [5] Нефедов В. И., Фомичев В. А. // Журн. структурн. химии. 1968. Т. 9. № 2. С. 279—284.
- [6] Ведринский Р. В., Крайзман В. Л. // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. № 4. С. 1215—1221.
- [7] Aberd T., Dehmer J. L. // J. Phys. C. 1973. V. 6. N 5. P. 1450—1459.
- [8] Swanson J. R., Dill D., Dehmer J. L. // J. Chem. Phys. 1981. V. 75. N 2. P. 619—624.
- [9] Павлычев А. А., Виноградов А. С. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 12. С. 3564—3568.
- [10] Павлычев А. А., Виноградов А. С. // Сб. «Молекулярные и электронные процессы на межфазовых границах». (Вопросы электроники тв. тела. В. II) / Под ред. О. М. Артамонова. Л., 1989. С. 132—150.
- [11] Pavlychev A. A., Vinogradov A. S. // Proc. Brit.—Germ.—Sov. workshop «Today and Tomorrow of Photoionization». Leningrad, 1990.
- [12] Павлычев А. А., Кондратьева И. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 3. С. 837—843.
- [13] Павлычев А. А., Виноградов А. С., Потапов С. С. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 12. С. 3683—3690.
- [14] Pavlychev A. A., Vinogradov A. S., Akimov V. N., Nekipelov S. V. // Physica Scripta. 1990. V. 41. N 1. P. 160—163.
- [15] Баринский Р. Л. // Сб. «Рентгеновские спектры и электронная структура вещества». Киев, 1969. Т. 2. С. 222—228.
- [16] Нефедов В. И. // Журн. структурн. химии. 1970. Т. 11. № 2. С. 292—298.
- [17] Dehmer J. L. // J. Chem. Phys. 1972. V. 56. N 10. P. 4496—4504.
- [18] Pendry J. B. // Comment. Sol. St. Phys. 1983. V. 10. N 4. P. 219—231.
- [19] Бабилов В. В. Метод фазовых функций в квантовой механике. М.: Наука, 1976. 287 с.
- [20] Павлычев А. А., Виноградов А. С., Кондратьева И. В. // ФТТ. 1986. Т. 28. № 9. С. 2881—2884.
- [21] Павлычев А. А., Барри А., Потапов С. С. // ФТТ. 1991. Т. 33. № 2. С. 557—561.
- [22] Pavlychev A. A., Barry A., Vinogradov A. S. // Physica Scripta. 1991.



- [23] Xu M. L., Barton J. J., van Hove M. A. // *Phys. Rev. B*. 1989. V. 39. N 12. P. 8275—8283.
- [24] Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., 1975.
- [25] Pavlychev A. A., Barry A. // *Physica Scripta*. 1990. V. 41. N 1. P. 157—159.
- [26] Павлычев А. А., Барри А. // *ФТТ*. 1990. Т. 32. № 1. С. 127—132.
- [27] Некипелов С. В., Акимов В. Н., Виноградов А. С. // *ФТТ*. 1991. Т. 33. № 3. С. 663—667.
- [28] Виноградов А. С., Некипелов С. В., Павлычев А. А. // *ФТТ*. 1991. Т. 33. № 3. С. 896—902.
- [29] Hosoi J., Oikawa T., Inoue M., Matsui Y., Endo T. // *J. Electron Spectr. Rel. Phenom.* 1982. V. 27. P. 243—254.
- [30] Abarenkov I. V., Heine V. // *Phil. Mag.* 1965. V. 12. N 4. P. 529—537.
- [31] Pavlychev A. A., Barry A., Potapov S. S. // *Sol. St. Comm.* 1991.
- [32] Hitchcock A. P., Stöhr J. // *J. Chem. Phys.* 1987. V. 87. N 5. P. 3253—3261.
- [33] Sette F., Stöhr J., Hitchcock A. P. // *Chem. Phys.* 1988. V. 110. N 2. P. 517—526.
- [34] Некипелов С. В., Акимов В. Н., Виноградов А. С. // *ФТТ*. 1988. Т. 30, № 12. С. 3647—3652.

Санкт-Петербургский  
государственный университет

Поступило в Редакцию  
21 мая 1991 г.