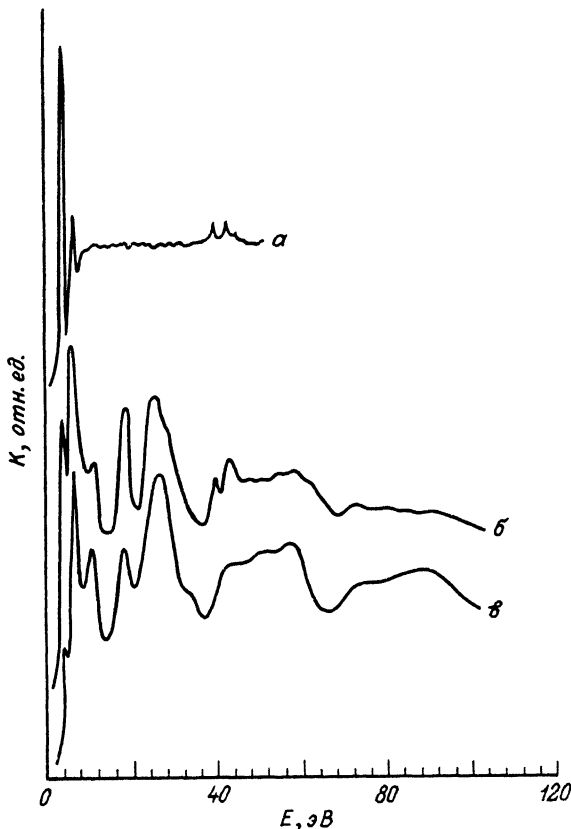


## АНАЛИЗ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ РЕНТГЕНОВСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО НЕОНА

А. В. Солдатов, Т. С. Иванченко, И. Е. Штехин, А. Бианкони<sup>1</sup>

Исследование ближней тонкой структуры рентгеновского поглощения (международный термин XANES) представляет собой уникальный метод изучения электронной подсистемы твердого тела [1].

Спектры поглощения, возникающие при переходах между локализованными состояниями (например,  $L_{2,3}$ -края поглощения), даже в случае твердого тела в некоторых случаях могут быть удовлетворительно описаны на основе квазимолекулярного подхода [2, 3]. Однако в случае, когда рентгеновское поглощение соответствует электронному переходу в зону делокализованных состояний (как это имеет место в случае  $K$ -,  $L_1$ -краев поглощения), квазиатомарный подход для кристаллов не дает удовлетворительных результатов, так как не позволяет описать появляющиеся на спектре осцилляции в запороговой области спектра. Учет более тонких эффектов многоэлектронной корреляции в области непрерывного спектра приводит лишь к некоторому изменению абсолютной величины сечения фотопоглощения, не меняя ее качественного (практически линейного) поведения [4]. С другой стороны, сопоставление экспериментальных данных для газовой фазы [5] и твердого тела [6] неона показывает, что в запороговой области наблюдаются координальные изменения спектра (см. рисунок). Инертные газы являются удачным объектом для исследования вклада многоэлектронных эффектов и описываемого в одноэлектронном приближении твердотельного эффекта, заключающегося в многократном рассеянии электрона на атомах кристалла. Из-за отсутствия иных химических связей, кроме взаимодействия Ван-дер-Ваальса, в неоне нет причин для



$a$  — экспериментальный спектр поглощения газообразного неона [5];  $b$  — спектр неона в кристаллической фазе;  $c$  — теоретический спектр, полученный в настоящей работе, нормированный на значение атомарного коэффициента поглощения при 100 эВ.

Нуль энергетической шкалы соответствует «staffin-тип» нулю расчета. Спектры совмещены в единую энергетическую шкалу по положению первого максимума.

<sup>1</sup> Физический факультет Римского университета (Италия).

появления каких-либо новых по сравнению с изолированными атомами многоэлектронных эффектов [7]. Указанные причины, а также низкая температура (6.3 К) пленки Ne во время измерения XANES, которая значительно уменьшила обычно наблюдаемое размытие спектра за счет колебаний кристаллической решетки, делают весьма интересным анализ рентгеновского поглощения в кристаллическом Ne на основе теории многократного рассеяния [8].

Используемая нами схема была описана ранее [9, 10]. Мы предполагали, что кристаллический Ne имеет ГЦК решетку с параметром 4.426 Å [11]. Максимальный из использованных нами кластеров состоял из 6 сфер и содержал 87 атомов. Расчет был проведен в модели полной релаксации (приближении «Z + 1» [12]) Muffin-tin (MT) радиус центрального атома был равен 1.88 Å, остальных атомов — 1.09 Å. В расчете учитывались фазовые сдвиги с орбитальным моментом вплоть до 4. Мнимая часть потенциала включала в себя постоянный член (0.4 эВ), соответствующий времени жизни остошной вакансии и аппаратурному уширению, а также зависящий от энергии член, описывающий длину свободного пробега фотоэлектрона. Из-за того, что последняя функция непосредственно для кристаллического Ne неизвестна, мы использовали усредненную функцию для металлов [12]. Несмотря на последнее приближение, соответствие наших теоретических данных и эксперимента весьма хорошее (см. рисунок). Единственной структурой экспериментального спектра, не воспроизводимой в нашем подходе, является двойной пик в районе 40 эВ, который наблюдается и на спектре газообразной фазы [5] и связан с двухэлектронным возбуждением.

Таким образом, анализ XANES неона в кристаллической фазе показал, что тонкая структура его рентгеновского поглощения практически полностью определяется процессами многократного рассеяния фотоэлектрона на кластере атомов большого размера. Процессы двухэлектронного возбуждения приводят к появлению двух небольших деталей структуры в области около 30 эВ выше основного края поглощения.

#### Список литературы

- [1] Bianconi A., Garcia J., Benfatto M. // *Topics in Current Chemistry*. 1988. V. 145. P. 29.
- [2] Павлычев А. А., Виноградов А. С., Кондратьева И. В., Зимкина Т. М. // *ФТТ*. 1985. Т. 27. № 1. С. 209—212.
- [3] Павлычев А. А., Виноградов А. С., Потапов С. С. // *ФТТ*. 1988. Т. 30. № 12. С. 3683—3689.
- [4] Yavna V. A., Hopersky A. N., Nanolinsky A. M., Popov V. A. // *Proc. 2nd European Conf. on progress in X-ray Synchrotron Radiation Research*. SIF, Bologna, 1990. P. 101.
- [5] Esteve J. M., Gauthé B., Dhez P., Karnatak R. C. // *J. Phys. B: At. Mol. Phys*. 1983. V. 16. P. L263.
- [6] Hiraya A., Fukui K., Tseng P. K., Murata T., Watanall M. // *J. Phys. Soc. Jpn*. 1991. V. 60. P. 1824.
- [7] Ведринский Р. В., Гегузин И. И. *Рентгеновские спектры поглощения твердых тел*. М.: Энергоатомиздат, 1991. 184 с.
- [8] Durham P. // *X-ray Absorption: Principle, Applications, Techniques of EXAFS, SEXAFS, XANES* (Ref. 1). P. 53.
- [9] Солдатов А. В., Иванченко Т. С., Бианкони А. // *ФТТ*. 1991. № 9. С. 2783—2785.
- [10] Солдатов А. В., Иванченкс Т. С., Бианкони А. // *ФММ*. 1991. № 9. С. 205—206.
- [11] Wyckoff R. W. G. // *Crystal structures*. Interscience, New York, 1965.
- [12] Keski-Rahkonen O., Krause M. O. // *Atomic data and nuclear data tables*. 1974. V. 14. P. 139.

Ростовский  
государственный университет

Поступило в Редакцию  
7 февраля 1992 г.