

Роль автоионизационных переходов в формировании протяженной тонкой структуры спектров высокоэнергетических вторичных электронов

© В.И. Гребенников, О.Б. Соколов, Д.Е. Гай*, Д.В. Сурнин*, Ю.В. Рац*

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

*Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук,
426001 Ижевск, Россия

(Поступила в Редакцию 13 апреля 1998 г.)

Обнаружена протяженная тонкая структура (ПТС) спектров вторичных электронов (ВЭ) за высокоэнергетическими (~ 720 и ~ 840 eV) *LVV* Оже-линиями в железе и никеле. Рассмотрены два механизма ее формирования: 1) прямые переходы электронов в конечное состояние p по "золотому правилу" Ферми; 2) процессы второго порядка типа автоионизации, проходящие через возбуждение основного электрона в промежуточное состояние q непрерывного спектра с последующим заполнением образовавшейся дырки валентным электроном и переходом электрона из промежуточного состояния q в конечное p . Интерференция прямой и отраженной от соседних атомов волн порождает ПТС как в конечном p -, так и в промежуточном q -состояниях с двумя различными периодами, которые определяются волновыми числами p и q . Сопоставление расчетных ПТС с экспериментально наблюдаемыми приводит к выводу о том, что структура формируется автоионизационными процессами второго порядка.

Электронная, рентгеновская, оптическая спектроскопия основана на переходах электронов из начальных состояний в конечные, которые обычно описываются "золотым правилом" Ферми. В традиционной спектроскопии такой подход хорошо себя зарекомендовал. Однако в последнее время появились новые экспериментальные методики, которые не укладываются в привычные теоретические схемы и требуют развития новых подходов для их математического описания. К их числу относится исследование протяженной тонкой структуры (ПТС) спектров вторичных электронов (ВЭ), возникающей за Оже-линиями в твердом теле. ПТС представляет собой осцилляции интенсивности ВЭ-эмиссии с периодом порядка десятка электрон-вольт (eV) и протяженностью в сотни eV, расположенные с высокоэнергетической стороны от *CVV* Оже-линии (переходы с участием основного уровня S и двух V -валентных электронов). Впервые такая структура наблюдалась Честером, Притчардом [1] и Джекинсом, Чангом [2] в 1971 г. В качестве механизма ее формирования в 1973 г. Мак-Доннел и др. [3] предложили когерентное рассеяние регистрируемых в эксперименте электронов на кристаллическом потенциале образца. Рассмотренный в [3] механизм эмиссии вторичных электронов энергетически не связан с Оже-переходом. В дальнейшем этот подход развивался целым рядом авторов [4–9]. Наиболее полные результаты в рамках его были получены в 1992 г. Аеби и др. [10]. Они рассчитали спектр ВЭ из меди и установили соответствие между вычисленными и экспериментальными особенностями в интервале кинетических энергий 150–250 eV. Вместе с тем рассчитанные максимумы оказались заметно сдвинутыми в сторону высоких энергий по сравнению с наблюдаемыми. Более того, расчет вообще не воспроизводит последние три экспериментальных пика.

Альтернативный механизм для объяснения особенностей спектра ВЭ за *MVV* Оже-линиями в переходных металлах был предложен Бадером и др. [11] в 1983 г. и применен в 1986 г. Де Кресчензи и др. [12,13] для интерпретации осцилляций в спектре ВЭ. В качестве механизма, формирующего ПТС, предлагалось рассматривать EXAFS-подобное рассеяние электронов в промежуточном состоянии, которое участвует в процессе автоионизации. Использование автоионизационного механизма позволило дать качественное объяснение расположению ПТС с высокоэнергетической стороны от *MVV* Оже-линии Co , Ni , Cu , поскольку данный процесс имеет энергетический порог, совпадающий с положением соответствующей Оже-линии. В 1992 г. Гребенниковым и Соколовым [14] было развито теоретическое описание этого процесса с учетом рассеяния электрона на окружающих атомах как в промежуточном, так и в конечном состоянии, что привело к появлению в спектре двух структурных слагаемых.

В рамках кластерного расчета в 1995 г. Ведринский и др. [8] оценили интенсивности различных процессов в области *MVV* Оже-линии меди. Был сделан вывод о том, что спектр формируется в основном за счет прямой эмиссии электронов из валентных состояний, а интенсивность автоионизационного процесса составляет 10–15%. К сожалению, в работе [8] был проведен расчет не самого спектра меди, а так называемой его Фурье-фильтрации, которая содержит вклад только от первой координационной сферы, если предполагать, что сигнал формируется осцилляцией только одного типа. Расчет [8] воспроизводит период колебаний Фурье-фильтрации, но заметно отличается от нее по амплитуде. Аналитические оценки для произвольных энергий внутренних уровней и кинетических энергий вкладов от различных процес-

сов, формирующих спектры эмиссии ВЭ, на модельных волновых функциях сделаны в работе [15], в которой показано, что при определенных условиях интенсивность автоионизационного процесса может быть сравнимой с интенсивностью прямых переходов. Упомянем также полемику представителей двух крайних взглядов на данную проблему Вудрофа [6] и Де Кресчензи [16], которая продолжается среди исследователей [4–10, 16–23] до сих пор.

Резюмируя вышеизложенное, можно определенно сказать, что в настоящее время нет установившихся представлений о физическом механизме, ответственном за формирование ПТС в спектрах ВЭ, что ведет к потере интереса со стороны экспериментаторов к данному методу спектроскопии. Это вызывает сожаление, поскольку изучение ПТС может оказаться весьма полезным и перспективным методом исследования локальной атомной структуры поверхности. К числу его преимуществ относятся селективность по энергии, позволяющая определять окружение атомов отдельных химических элементов, и, что важно, доступность и простота экспериментального оборудования, необходимого для его реализации: достаточно серийного Оже-анализатора.

Целью настоящей работы является постановка и проведение специальных экспериментов, которые вместе с теоретической интерпретацией их позволили бы установить физический механизм формирования ПТС в спектрах ВЭ.

1. Теоретическое описание

Рассмотрим процессы рождения ВЭ при неупругом рассеянии высокоэнергетических электронов (3–10 keV). На рис. 1, *a, b* показаны прямые переходы электрона с основного уровня (который, имея в виду дальнейшие эксперименты, обозначим символом L) и из валентной полосы β в некоторое конечное состояние p с энергией, изменяющейся от нуля до 1 keV, которое, собственно, и фиксируется детектором. Эти стандартные переходы описываются первым порядком теории возмущений.

Переход во втором порядке теории в то же самое конечное состояние p изображен на рис. 1, *c*. Он осуществляется в два этапа: сначала основной электрон переходит в некоторое промежуточное состояние q , а затем образовавшаяся дырка на уровне L заполняется валентным электроном β , промежуточный электрон q переводится в конечное состояние p . Существует также соответствующий обменный процесс (рис. 1, *d*). Переходы, показанные на рис. 1, *c, d*, весьма напоминают известный автоионизационный процесс [24] с той разницей, что его вторая ступень, собственно автоионизация, происходит в данном случае не из локализованного низкоэнергетического резонансного состояния, а из состояния q , принадлежащего непрерывному спектру. Не

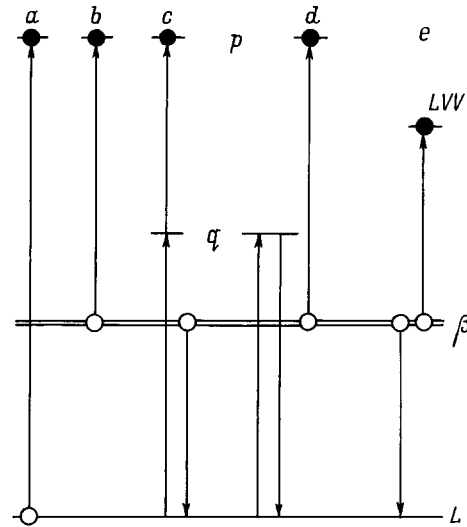


Рис. 1. Схема электронных переходов. *a, b* — прямые переходы с основного уровня L или из валентной полосы β в конечное состояние p ; *c, d* — автоионизационные переходы второго порядка через промежуточное состояние q в то же самое конечное состояние p ; *e* — LVV Оже-переход, определяющий энергетический порог процессов *c* и *d*.

забывая об этом различии, мы будем использовать для переходов второго порядка также термин автоионизация.

Амплитуда второго порядка содержит интегрирование по всевозможным промежуточным состояниям q . Однако известный резонансный знаменатель делает преобладающим вклад от возбужденных состояний, энергия которых с точностью до их ширины (в нашем случае 1–2 eV) удовлетворяет закону сохранения энергии [25], поэтому можно считать $E_p - E_q \approx |E_\beta - E_L|$. Отсюда, в частности, следует, что автоионизационные переходы (рис. 1, *c, d*) имеют энергетический порог, равный энергии соответствующей Оже-линии (рис. 1, *e*), в то время как прямые переходы (рис. 1, *a, b*) начинаются с нулевой кинетической энергии ВЭ.

Экспериментальный сигнал определяется суммой вкладов от всех процессов, показанных на рис. 1 (а также от переходов с других уровней, которые на рисунке опущены). Чтобы разобраться в том, какие из них наиболее важны, существуют два пути. Первый — провести теоретические оценки вероятностей всех переходов в твердом теле (ПТС формируется за счет рассеяния электронов на окружающих атомах). Второй — попытаться выявить качественные различия между промежуточным q - и конечным p -состояниями и, если таковые найдутся, путем сравнения характерных особенностей экспериментального сигнала с теоретически предсказанными определить роль процессов второго порядка. Мы воспользуемся вторым путем.

Поскольку и промежуточное q - и конечное p -состояния принадлежат непрерывному спектру, на первый взгляд может показаться, что принципиальное различие между ними отсутствует. В атоме так оно и есть на

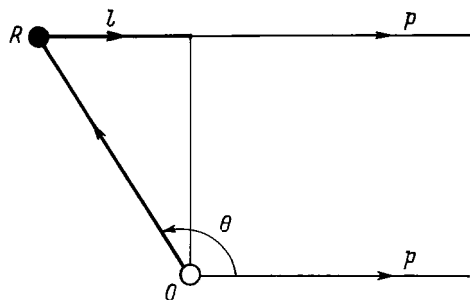


Рис. 2. Интерференция прямой и отраженной от соседнего атома электронных волн, приводящая к возникновению ПТС.

самом деле. Однако в конденсированном веществе волновые функции искажаются из-за упругого рассеяния волн на ближайшем окружении ионизируемого (центрального) атома, что приводит к появлению ПТС, как в EXAFS-спектроскопии [25–27]. Причина ее возникновения заключается в интерференции волн. На рис. 2 показаны две волны: одна — прямая, идущая в направлении детектора, вторая — возникающая в результате отражения от соседнего атома. Эти волны имеют разность фаз, которая определяется геометрической разностью хода $l = R(1 - \cos \theta)$ и волновым числом p , где R — расстояние до атома, а θ — угол рассеяния. Фазовый множитель $\exp(ipl)$ и приводит к осцилляциям интенсивности при изменении волнового числа p электрона (или его энергии $E_p = \hbar^2 p^2 / 2m$). В работах [25,26] показано, что при угловом усреднении (по условию эксперимента или, например, в поликристалле, аморфном веществе и т.д.) основной вклад в переменный сигнал вносит обратное рассеяние ($\theta = \pi$) с граничным значением разности хода волн $l = 2R$. Интерференция волн имеет место как в конечном p -, так и в промежуточном q -состояниях, поэтому эмиссионный ток содержит два осциллирующих слагаемых

$$J(p) = J_{\text{at}}(p) \left(1 + \text{Re} \sum_j [A(p)\chi(p) + 2B(p)\chi(q)] \right), \quad (1)$$

где

$$\chi(p) = f(p, \pi) (ipR_j^2)^{-1} W(p^2) \exp(i2(p + i\gamma)R_j). \quad (2)$$

Формула (1) содержит суммирование по атомам j окружения центрального атома. Вклад от промежуточного состояния q также дается равенством (2) с заменой p на q . Волновые числа связаны законом сохранения энергии

$$p^2/2 - q^2/2 = E_L. \quad (3)$$

Здесь E_L — энергия связи основного уровня (в атомных единицах), $E_\beta \cong 0$, $J_{\text{at}}(p)$ — атомный ток, $f(p, \pi)$ — амплитуда рассеяния назад на атоме с номером j , удаленном от центра на расстояние R_j , γ — обратная длина затухания волны в веществе, $W(p^2)$ — зависящий от температуры и квадрата переданного импульса фактор

Дебая–Уаллера, A и B — определенные весовые функции, задающие вероятности переходов, а также фазы рассеяния, на центральном атоме.

Осциллирующие множители $\chi(p)$ и $\chi(q)$ имеют такой же вид, как в теории рентгеновского поглощения EXAFS [27]. Величина B целиком определяется процессами второго порядка, в то время как A формируется в основном за счет переходов первого порядка [28–30].

Таким образом, ПТС спектра ВЭ отличается от рентгеновского поглощения EXAFS дополнительным осциллирующим слагаемым $\chi(q)$, зависящим от q — волнового числа электрона в промежуточном состоянии (в резонансном приближении полученным по закону сохранения энергии). В ПТС за низкоэнергетическими MVV (~ 60 eV) Оже-линиями в $3d$ -металлах, которые обычно и исследуются, коэффициент $A(p)$ больше, чем $B(p)$. Однако из-за их разной энергетической зависимости могут существовать отдельные области спектра, в которых это соотношение обратное. С учетом двух различных факторов Дебая–Уаллера $W(p^2)$ и $W(q^2)$, управляющих интенсивностью слагаемых, это может привести к аномалиям в температурном поведении ПТС спектров [31], которые наблюдаются в железе и никеле.

Тем не менее при возбуждении низкоэнергетических уровней различие между волновыми числами в конечном и промежуточном состояниях невелико, поэтому периоды осцилляций $\chi(p)$ и $\chi(q)$ отличаются незначительно, что не позволяет четко отделить их друг от друга.

Для того чтобы сделать это различие явным, мы решили снять ПТС над высокоэнергетическим и LVV Оже-линиями в железе и никеле.

2. Эксперимент

Эксперимент проводился на Оже-спектрометре JAMP-10S (JEOL) с энергоанализатором типа цилиндрическое зеркало ($\Delta E/E = 0.35\%$) в геометрии обратного рассеяния с вакуумом не хуже 10^{-7} Па. Исследовались поликристаллический образец Fe (99.99) и монокристалл Ni (200) (99.99). Поверхности образцов предварительно очищались в ультразвуковой ванне в чистом спирте и ацетоне. В аналитической камере прибора поверхность образцов очищалась методом ионного (Ar^+ , 1 kV) травления с последующим циклическим рекристаллизационным отжигом при 800 K [32]. На протяжении всего эксперимента химическая чистота поверхности контролировалась методом Оже-электронной спектроскопии, при этом количество примесных атомов, а именно аргона и углерода, в исследуемой области не превышало в совокупности одного атомного процента.

Спектры ВЭ железа и никеля сняты с шагом в 1 eV. Спектр является результатом суммирования 1000 сканов, где каждый скан был получен со статистикой 1000 отсчетов в каждой точке энергетической шкалы, при этом отношение интенсивности ПТС к интенсивности шума составляет $\sim 1/10$. ПТС LVV -спектра железа

получена в интегральном режиме, а ПТС L_{VV} -спектра никеля — в режиме первой производной (амплитуда модуляции $p-p$ 5V). Оба эксперимента проводились при комнатной температуре образцов. В процессе накопления спектров исследуемые поверхности очищались мягким ионным травлением (Ar, 500 V) в течение 30 s через каждые 10 сканов (~ 20 min). Использование промежуточного травления поверхности мягким ионным пучком позволяет поддерживать минимальное количество примесных атомов в течение всего эксперимента. Хотя для целей, поставленных в работе, тип структуры поверхности не имеет принципиального значения (важна только величина расстояния между соседними атомами), отметим, что, согласно многочисленным исследованиям (см., например, [33]), ионные пучки таких энергий практически не нарушают монокристалличность поверхности. Осциллирующие части ПТС спектров были выделены из экспериментальных результатов посредством вычитания неосциллирующей составляющей, которая аппроксимировалась сплайном. Спектр никеля, полученный в режиме первой производной, был предварительно численно проинтегрирован.

3. Результаты и обсуждение

ПТС спектров ВЭ железа и никеля изображены на рис. 3. На нижней и верхней горизонтальных осях указаны кинетические энергии ВЭ соответственно для железа и никеля. Оба спектра приведены в совмещенной шкале, за нуль которой принято положение L_3VV Оже-линии соответствующего элемента. Энергия, отсчитываемая от L_3VV Оже-пики, указана на средней оси. Если считать $E_\beta \approx 0$, то это будет энергия резонансных промежуточных состояний E_q . Напомним, что спектр никеля снят в режиме первой производной с последующим интегрированием, поэтому он содержит меньше шумов, чем спектр железа.

Протяженность тонкой структуры L_{VV} -спектров невелика (около 100 eV) по сравнению с M_{VV} -спектрами. Это связано с малым сечением возбуждения глубоких уровней и падением величины когерентного рассеяния для электронов большой кинетической энергии. Спектры железа и никеля содержат практически одинаковые осцилляции, на которые наложены четко выраженные L_1VV Оже-линии. В данном энергетическом интервале расположены еще две линии L_1M_1V и $L_1M_{2,3}V$. Вклад от этих, а также других Оже-линий от возможных примесных атомов подробно обсуждается далее. Будет показано, что их интенсивность пренебрежимо мала. Поэтому рассмотрим сначала эффекты когерентного рассеяния в промежуточном и конечном состояниях.

В основу анализа положим закон сохранения энергии (3), устанавливающий связь между наблюдаемыми электронами p и резонансными промежуточными состояниями q . Структурные слагаемые $\chi(q)$ и $\chi(p)$ приводят к осцилляциям в спектре (1) при изменении величины

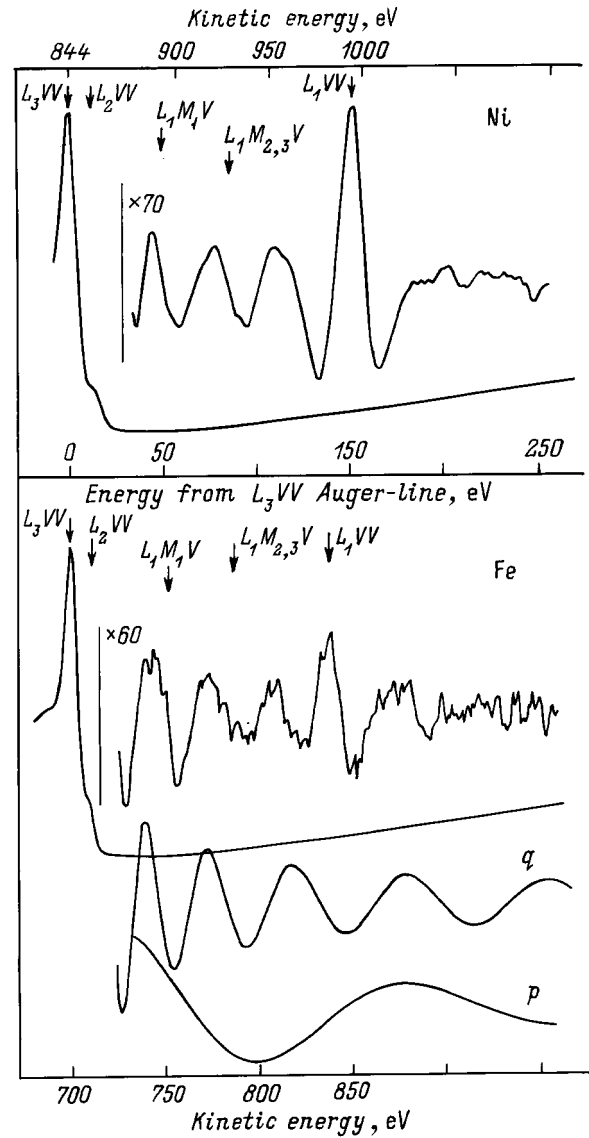


Рис. 3. Спектр вторичных электронов железа и никеля выше L_{VV} Оже-линий и их осциллирующие части. Стрелки показывают энергии всех Оже-линий. Расчетные сигналы от рассеяния в промежуточном состоянии (q) (одинаковые для Fe и Ni) и от рассеяния в конечном состоянии (p) для Fe.

импульса p или энергии E_p наблюдаемых электронов. Нетрудно получить простое соотношение между периодами осцилляций, происходящих от промежуточного и конечного состояний,

$$T_q/T_p = q/p = \sqrt{1 - E_L/E_p}. \quad (4)$$

Поскольку в случае L_{VV} -спектров энергия связи E_L (~ 720 eV в Fe и ~ 870 eV в Ni) и кинетические энергии E_p регистрируемых электронов достаточно близки во всем интервале существования ПТС, периоды T_q и T_p сильно отличаются друг от друга (примерно в 3 раза).

Интерференционные члены $\text{Re}\chi(p)$ и $\text{Re}\chi(q)$ (в произвольном масштабе) также изображены на рис. 3. Функции $\chi(q)$ в железе и никеле совпадают, поскольку в них одинаковые расстояния до соседних атомов $R = 2.48 \text{ \AA}$. Функции $\chi(p)$, вообще говоря, разные, но различия невелики, поэтому на рисунке приведена только одна из них (для железа). Сопоставление экспериментальных и расчетных кривых ясно указывает на то, что наблюдаемые ПТС происходят от когерентного рассеяния в промежуточных состояниях, участвующих в автоионизационном процессе. Некоторое отличие фазы экспериментального сигнала от расчетной функции $\chi(q)$ в области L_1VV Оже-линии может быть вызвано влиянием этой линии и связанных с ней возможных неточностей при вычитании фона — неосциллирующей части спектра. Практически полное совпадение осцилляций в спектрах железа и никеля связано с одинаковыми энергиями резонансных промежуточных состояний при выбранном способе отсчета кинетических энергий (при совпадающих межатомных расстояниях). Интерференция в конечных состояниях приводит к периодам, совершенно несоместимым с наблюдаемыми.

Заметим, что сопоставление периодов двух типов осцилляций, вычисленных по формуле (4), с экспериментальными результатами Де Кресчензи и др. [16] для ПТС $M_{4,5}VV$ -линий серебра (энергия $\sim 350 \text{ eV}$) приводит к аналогичным результатам и выводам.

Теперь возникает вопрос, почему, казалось бы, заведомо более слабый второй порядок теории возмущений вдруг стал сильнее первого? Конечно, дело здесь не в атомных вероятностях: $A(p) \gg B(p)$ в (1). Причины связаны с физикой твердого тела, и заключаются они в значительно большей вероятности когерентного упругого рассеяния низкоэнергетического q электрона на соседних атомах по сравнению с высокоэнергетическим p [31]. В равенстве (2) амплитуда $f(q, \pi) > f(p, \pi)$, но решающий вклад вносят факторы Дебая–Уаллера

$$W(p^2) = \exp\left(-\frac{2}{3}p^2\langle\Delta R^2\rangle\right) \quad (5)$$

и аналогичный $W(q^2)$, показатели экспоненты в которых фактически пропорциональны соответствующим энергиям E_p и E_q , в результате чего $W(q^2) \gg W(p^2)$. Именно по этой причине осцилляции, сформированные рассеянием в промежуточных состояниях, превышают аналогичные осцилляции, происходящие от рассеяния в конечных состояниях. Относительная интенсивность сигналов от промежуточного q - и конечного p -состояний получается из формулы

$$\frac{Bp|f(q, \pi)|W(q^2)}{Aq|f(p, \pi)|W(p^2)}. \quad (6)$$

Используя величины амплитуды обратного рассеяния электронов из таблиц Тео и Ли [34], оценки из [31] и факторы Дебая–Уаллера из [35], находим, что интенсивность осцилляции q -типа превосходит интенсивность

осцилляции p -типа примерно в 3 раза для Fe и в 10 раз для Ni.

Изучаемая тонкая структура спектров ВЭ представляет собой очень слабый сигнал с амплитудой около 1% от постоянной составляющей спектра. Это требует тщательной проверки и анализа возможных альтернативных объяснений экспериментальных результатов. Обратимся к результатам такого анализа.

В рассматриваемый энергетический интервал кроме наблюдаемой L_1VV Оже-линии попадают еще две линии (их энергии отмечены на рис. 3), которые раньше не регистрировались из-за их малой интенсивности. Можно было бы предположить также появление Оже-линий от неконтролируемых примесных атомов. В таком случае, может быть в данном прецизионном эксперименте проявляются именно такие Оже-линии, а вовсе не EXAFS-подобная структура? Для ответа на этот вопрос мы сняли спектры при повышенной температуре образцов (500 К) при таких же условиях и статистике, как и описанные выше спектры при $T = 300 \text{ K}$. При $T = 500 \text{ K}$ L_1VV Оже-линия осталась, а остальную структуру выделить из уровня шума не удалось. По нашему мнению, это свидетельствует в пользу рассмотренного EXAFS-подобного механизма. Оже-переходы являются сугубо атомными процессами и не должны зависеть от тепловых колебаний атомов. В противоположность этому в основе развиваемого в работе подхода лежит интерференция волн, которая определяется межатомным расстоянием и факторами Дебая–Уаллера (5), сильно убывающими с ростом температуры, $\langle\Delta R^2\rangle \propto T$.

Другой контрольный эксперимент был проведен с целью проверки порогового характера механизма формирования ПТС. Были сняты спектры с энергиями, меньшими энергии серии LMM Оже-линий (в интервале кинетических энергий 400–600 eV, там, где отсутствуют Оже-пики). Нам не удалось обнаружить ПТС в данной области спектра. Предполагается следующая интерпретация. Когерентное упругое рассеяние в конечных состояниях такой энергии мало (малы амплитуда рассеяния назад и фактор Дебая–Уаллера), а автоионизационный канал практически выключен, так как наиболее вероятная (резонансная) энергия промежуточных состояний $E_q \approx E_p - E_L < 0$ лежит в области занятых состояний. Этот канал открывается, когда энергия ВЭ превышает энергию Оже-линии.

Таким образом, теоретически и экспериментально показано, что протяженные тонкие структуры в спектрах ВЭ над высокоэнергетическими Оже-линиями ($L_{2,3}VV$ железа и никеля) представляют собой новое физическое явление, которое не укладывается в рамках стандартного "золотого правила" Ферми. В его основе лежит пороговый автоионизационный процесс, который следует дополнить когерентным упругим рассеянием электронов промежуточных состояний на ближайшем окружении центрального атома.

Список литературы

- [1] M.A. Chester, J. Pritchard. Surf. Sci. **28**, 460 (1971).
- [2] L.H. Jenkins, M.F. Chung. Surf. Sci. **26**, 151 (1971).
- [3] L. McDonnel, B.D. Powell, D.P. Woodruff. Surf. Sci. **40**, 669 (1973).
- [4] G.E. Becker, H.D. Hagstrum. J. Vacuum. Sci. Technol. **11**, 284 (1974).
- [5] E.G. McRae. Surf. Sci. **44**, 321 (1974).
- [6] D.P. Woodruff. Surf. Sci. **189/190**, 64 (1987).
- [7] R.G. Agostino, A. Amoddeo, L.S. Caputi, E. Colavito. Phys. Scripta **41**, 149 (1992).
- [8] R.V. Vedrinskii, A.I. Taranukhina, A.A. Novakovich, L.A. Bugaev. J. Phys.: Condens. Matter. **7**, L181 (1995).
- [9] N.K. Singh, R.G. Jones, D.P. Woodruff. Surf. Sci. Lett. **232**, L228 (1990).
- [10] P. Aebi, E. Erbudak, F. Vanini, D.D. Vvedensky. Surf. Sci. Lett. **264**, L181 (1992).
- [11] S.D. Bader, G. Zajac, J. Zak. Phys. Rev. Lett. **50**, 1211 (1983).
- [12] M. DeCrescenzi, E. Chinet, J. Derrien. Solid State Commun. **57**, 487 (1986).
- [13] E. Chainet, J. Derrien, R.C. Cinti, T.T.A. Nguyen, M. DeCrescenzi. J. de Phys. **C8-47**, C8-209 (1986).
- [14] V.I. Grebennikov, O.B. Sokolov. Phys. Scripta **41**, 5 (1992).
- [15] В.И. Гребенников, О.Б. Соколов. ФММ **78**, 113 (1994).
- [16] M. DeCrescenzi, A.P. Hichejck, T. Tylliszczak. Phys. Rev. **B39**, 9893 (1989).
- [17] T. Tylliszczak, A.P. Hichejck, M. DeCrescenzi. Phys. Rev. **B38**, 5768 (1988).
- [18] M. DeCrescenzi. Surf. Sci. Rep. **21**, 89 (1995).
- [19] L.S. Caputi, A. Amoddeo, R. Tucci, E. Cavalita. Surf. Sci. **251/252**, 262 (1991).
- [20] I. Davoli, R. Bernardini, C. Battistoni, P. Castucci, R. Gunnella, M. DeCrescenzi. Surf. Sci. **309**, 144 (1994).
- [21] L. Lozzi, M. Passacantando, P. Picozzi, S. Suntucci, M. DeCrescenzi. Surf. Rev. Lett. **2**, 225 (1995).
- [22] M. Tomellini, M. Fanfoni. Solid State Commun. **90**, 391 (1994).
- [23] M. DeCrescenzi, R. Gunnella, I. Davoli. J. Elec. Spectr. Rel. Phen. **79**, 29 (1995).
- [24] U. Fano, J.W. Cooper. Rev. Mod. Phys. **40**, 441 (1968).
- [25] В.И. Гребенников, О.Б. Соколов. ФТТ **37**, 3, 773 (1995).
- [26] V.I. Grebennikov, O.B. Sokolov. J. Phys.: Condens. Matter. **7**, 5713 (1995).
- [27] P.A. Lee, J.B. Pendry. Phys. Rev. **B11**, 2728 (1975).
- [28] D.E. Guy, V.I. Grebennikov, Y.U. Ruts, S.P. Sentemov, O.B. Sokolov. Jpn. J. Appl. Phys. **32**, Suppl. 32-2, 26 (1993).
- [29] D.E. Guy, Y.U. Ruts, S.P. Sentemov, V.I. Grebennikov, O.B. Sokolov. Surf. Sci. **298**, 134 (1993).
- [30] D.E. Guy, Y.U. Ruts, D.V. Surnin, V.I. Grebennikov, O.B. Sokolov. Physica **B208-209**, 87 (1995).
- [31] D.E. Guy, Y.U. Ruts, D.V. Surnin, V.I. Grebennikov, O.B. Sokolov. Surf. Rev. Lett. **4**, 224 (1997).
- [32] И.И. Новиков. Теория термической обработки металлов. Металлургия, М. (1978). 286 с.
- [33] K.N. Eltsov, A.N. Klimov, S.L. Priadkin, V.M. Shevlyuga, V.Yu. Yurov. Phys. Low-Dim. Struct. **7/8**, 115 (1996).
- [34] B.K. Teo, P.A. Lee. J. Am. Chem. Soc. **101**, 2815 (1979).
- [35] Landolt-Borstein. Phonon states of elements. Springer, Berlin (1981). V. 13a. 458 p.