

К ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКОГО К-ПОГЛОЩЕНИЯ

Э. М. КАЗАРЯН, К. И. КАРАХАНЯН, П. А. БЕЗИРГАНЯН, С. К. АВЕТИСЯН

В атомном приближении теоретически изучен вопрос о влиянии относительной подвижности дырки на тонкую структуру K -спектров рентгеновского поглощения ионных кристаллов. В частности, показано, что кроме основного $s \rightarrow p$ электронного перехода подвижность дырки приводит к дополнительным переходам $s \rightarrow s$ и $s \rightarrow d$, которыми, по-видимому, обусловлено возникновение некоторых пиков в области основного K -края. Расчеты, проведенные как для области непрерывного спектра, так и для области дискретного спектра, сравниваются с экспериментальными данными для K -спектра поглощения Li в кристаллах $LiCl$ и LiF .

Вся область тонкой структуры K -спектра поглощения атома в соединении, как известно, формально разбивается на две части: основной край поглощения, простирающийся на расстояние $20 \div 30$ эв от края и имеющий вид резких и узких пиков, и кроноговская или далекая тонкая структура, расположенная до $200—300$ эв от границы. Возникновение тонкой структуры основного края обычно объясняется как результат перехода K -электрона, вырванного под действием рентгеновских лучей на связанные уровни системы, а возникновение далекой тонкой структуры обусловлено рассеянием вырванного K -электрона в потенциальных полях атомов, близко расположенных к поглощающему атому [1—7]. Кроме того, экспериментально доказано, что тонкая структура основного края очень чувствительна к изменению типа (эффективного заряда) атома в соединении [2].

При интерпретации возникающих максимумов у края поглощения Li в $LiCl$, $LiBr$, LiF и в других соединениях авторы работ [4—7] находят соответствие между положением максимумов этой структуры вблизи края и энергиями, соответствующими переходам K -электронов в np -возбужденные состояния свободного иона Li^+ . Для объяснения структуры в более далекой энергетической области предложен механизм двойной ионизации. При другой интерпретации положение максимумов тонкой структуры сопоставляется с энергиями разрешенных переходов электронов в зону проводимости кристалла, а сами максимумы рассматриваются как результат переходов K -электронов лития в возбужденные состояния вблизи особых точек зоны проводимости кристалла [4—7].

В настоящей работе исследуется тонкая структура основного K -края поглощения атома с учетом относительной подвижности дырки, роль которой рассматривалась в работах [8, 9]. Учет подвижности дырки приводит к дополнительному потенциалу, имеющему несферический характер.

Для K -поглощения потенциал электронно-дырочного взаимодействия имеет вид [8]

$$V_{1n'} = -\frac{e^2}{\epsilon r} - \frac{A_{n'}}{r^2} (\sqrt{2} \sin \theta \cos \varphi + \cos \theta), \quad (1)$$

где

$$A_{n'} = \frac{32 \sqrt{3} e^2 a_0 \sqrt{n'^2 - 1}}{3 \left(Z_1 + \frac{Z_{n'}}{n'} \right)^5} Z^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Z_{n'}}{n'} \right)^{\frac{5}{2}}. \quad (1')$$

Здесь Z_1 и $Z_{n'}$ — экранированные заряды ядра в единицах заряда электрона, соответствующие случаям, когда дырка находится в состоянии K или n' , ϵ — диэлектрическая проницаемость кристалла, a_0 — боровский радиус. Второй член в (1) целиком обусловлен подвижностью дырки.

При вычислении коэффициента K -поглощения (КП) рентгеновских лучей с учетом потенциала (1), т. е. с учетом подвижности дырки, оказывается, что КП у края имеет несколько максимумов. Это означает, что возникновение некоторых максимумов для КП у края можно интерпретировать как результат подвижности дырки.

Для вычисления КП атома будем исходить из результатов [2], где показано, что КП в дипольном приближении имеет вид

$$\tau(\nu) = \frac{8 \pi^3 e^2 \nu}{c} |r_{kn^*}|^2, \quad (2)$$

где ν — частота падающего рентгеновского излучения, e — заряд электрона, c — скорость света, $|r_{kn^*}|$ — матричный элемент радиуса-вектора электрона, вырванного из K -оболочки, n^* — набор квантовых чисел, характеризующих конечное состояние электрона,

$$|r_{kn^*}| = \int \psi_k^* r \psi_{n^*} dV \quad (3)$$

и

$$|x_{kn^*}| = \int \psi_k^* r \psi_{n^*} \sin \theta \cos \varphi dV, \quad (3')$$

x_{kn^*} — компонента радиуса-вектора электрона в направлении оси x , совпадающей с направлением поляризации фотона.

Волновая функция электрона на K -оболочке имеет вид

$$\psi_k = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z_1}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Z_1}{a_0} r}. \quad (4)$$

Для нахождения волновой функции $\psi_{n^*} = Y(\theta, \varphi) R_l(r)$ электрона в конечном состоянии необходимо решить уравнение Шредингера с потенциалом (1). После подстановки и разделения переменных получаем [8]

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_1}{dr} \right) + \frac{2m_{\text{экс}}^*}{\hbar^2} \left(E' + \frac{e^2}{\epsilon r} + \frac{ae^2}{r} - \frac{\hbar^2 \lambda'}{2m_{\text{экс}}^* r^2} \right) R_1 = 0, \quad (5)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial Y_1}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y_1}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_{\text{экс}}^*}{\hbar^2} A_{n'} (\sqrt{2} \sin \theta \cos \varphi + \cos \theta) Y_1 + \lambda' Y_1 = 0. \quad (6)$$

Здесь λ' — постоянная величина, подлежащая определению, αe — эффективный заряд атома в конечном состоянии.

Используя теорию возмущений, из (6) можно найти влияние подвижности дырки на состояние электрона с орбитальным квантовым числом l . Расчеты показывают, что подвижность дырки приводит к расщеплению уровня с орбитальным квантовым числом l на два подуровня:

$$\lambda' = l(l+1) \pm \lambda, \quad (7)$$

где λ — величина, целиком обусловленная подвижностью дырки [8],

$$\lambda = \frac{2^{12}}{9} \left(\frac{m_{\text{эк}}^*}{m_0} \right) Z_1^3 \frac{\left(\frac{Z_{n'}}{n'} \right)^5}{\left(Z_1 + \frac{Z_{n'}}{n'} \right)^{10}} (n'^2 - 1), \quad (8)$$

m_0 — масса свободного электрона.

При вычислении интеграла (3') нет необходимости знать явный вид функции Y_l (в силу сферической симметрии волновой функции К-электрона нужно вычислить интеграл по углам от функции Y_l), так как рассматривается полная вероятность всех переходов и необходимо провести суммирование по всем возможным значениям магнитного квантового числа. В результате получаем

$$\int Y_l \sin \vartheta \cos \varphi d\Omega = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} \left(1 + \sqrt{\frac{\lambda}{4}} + \sqrt{\frac{5\lambda}{288}} \right). \quad (9)$$

Первый член в (9) обусловлен дипольным переходом из состояния s в состояние p ($l=1$), которое получается при неподвижной дырке. Вторым и третьим членами обусловлены соответственно недипольными переходами $s \rightarrow s$ ($l=0$) и $s \rightarrow d$ ($l=2$).

Ясно, что подвижность дырки приводит к дополнительным переходам электрона. Это, по-видимому, можно объяснить как результат взаимодействия электрона с магнитным полем дырочного тока. Подставим значения λ' из (7) в (6) и примем $m_{\text{эк}}^* = m_0$ [9]. Переходя к безразмерным величинам и вводя обозначения

$$\eta = \alpha + \frac{1}{\varepsilon}, \quad E' = \frac{m_0 \gamma^2 e^4}{\hbar^2} E,$$

получим

$$\frac{d^2 R_1}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR_1}{dr} - \frac{L(L+1)}{r^2} + 2 \left(E + \frac{1}{r} \right) R_1 = 0, \quad (10)$$

где

$$L(L+1) = l(l+1) \pm \lambda. \quad (11)$$

Из (11) следует, что L играет роль орбитального квантового числа. Эффективное орбитальное квантовое число L , как видно из (11), не принимает целочисленных значений. Для значений λ , взятых из [9], в таблице приведены значения L для всех возможных переходов К-спектра поглощения Li в кристаллах $LiCl$, $LiBr$ и LiF .



Дальнейшее исследование проводится отдельно для непрерывного и дискретного спектров.

Непрерывный спектр

Решая уравнение (10) при нецелочисленных значениях L [10, 11], получаем

$$R_{EL} = \sqrt{\frac{2\pi}{k}} \frac{e^{\frac{\pi\eta}{k}} (L+1) (2kr)^L e^{-kr}}{\Gamma(2L+2) \prod_{s=1}^{\infty} \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{k^2(L+s)^2}} \times} \times F\left(\frac{i\eta}{k} + L+1, 2L+2, 2ikr\right). \quad (12)$$

Состояние электрона в непрерывном спектре характеризуется энергией $E > 0$ и эффективным орбитальным квантовым числом L , а $k = \sqrt{2E}$.

Значение энергии падающего рентгеновского кванта удовлетворяет условию

$$h\nu - E_k = T, \quad (13)$$

где E_k — энергия связи K -электронов в атоме, T — кинетическая энергия вырванного электрона. Фигурирующая в (12) функция $\Gamma\left(L+1 - \frac{i\eta}{k}\right)$ представлена в виде бесконечного произведения.

Подставляя (4) и (12) в (3') и учитывая (9), после интегрирования для данного перехода j получаем [12]

$$x'_{kE} = b_j \sqrt{\frac{2\pi}{k}} \frac{2Z_j^{\frac{3}{2}} e^{\frac{\eta\pi}{2k}}}{(L_j^{\alpha} + 1) \Gamma(2L_j^{\alpha} + 2)} \frac{\Gamma(L_j^{\alpha} + 4) \Gamma(L_j^{\alpha} + 1)}{\prod_{s=1}^{\infty} \sqrt{1 + \frac{\eta^2}{k^2(L_j^{\alpha} + s)^2}} \times} \times \frac{(2k)^{L_j^{\alpha}}}{(Z_1 + ik)^{L_j^{\alpha} + 4}} F\left(\frac{i\eta}{k} + L_j^{\alpha} + 1, L_j^{\alpha} + 4, 2L_j^{\alpha} + 2, \frac{2ik}{Z_1 + ik}\right), \quad (14)$$

где коэффициенты b_j определяются из (9): для перехода $s \rightarrow p$ ($j=1$)

$$b_1 = 1, \text{ для } s \rightarrow s \text{ (} j=2 \text{)} \quad b_2 = \sqrt{\frac{1}{4}}, \text{ а для } s \rightarrow d \text{ (} j=3 \text{)} \quad b_3 = \sqrt{\frac{5\lambda}{288}}$$

Значения L_j^{α} для разных переходов приведены в таблице (α указывает расщепление уровня).

Используя формулу преобразования для гипергеометрической функции

$$F(\alpha, \beta, \gamma, Z) = (1-Z)^{\gamma-\alpha-\beta} F(\gamma-\alpha, \gamma-\beta, \gamma, Z)$$

и ограничиваясь вблизи края первыми двумя членами гипергеометрического ряда, после возведения в комплексную степень из (14) для $|x'_{kE}|$

Таблица

Кристаллы	ϵ	4λ	П е р е х о д ы									
			$s \rightarrow s$		$s \rightarrow p$				$s \rightarrow d$			
			L_1^0	$h\nu_{L_1^0}$	L_1^1	L_2^1	$h\nu_{L_1^1}$	$h\nu_{L_2^1}$	L_1^2	L_2^2	$h\nu_{L_1^2}$	$h\nu_{L_2^2}$
<i>LiCl</i>	2,75	2,381	0,420	12,749 2,004	1,187	0,786	1,035 0,320	-1,606 -0,448	2,116	1,878	0,205 0,087	-0,243 -0,101
<i>LiBr</i>	3,16	2,381	0,420	11,882 1,867	1,187	0,786	0,964 0,294	-1,496 -0,417	2,116	1,878	0,191 0,081	-0,226 -0,094
<i>LiF</i>	1,92	3,576	0,568	15,858 2,492	1,272	0,665	1,287 0,398	-1,993 -0,557	2,172	1,815	0,255 0,109	-0,302 -0,125

получаем

$$|x_{kE}^i|^2 = \frac{8kZ_1^3}{\pi} B(L_j^\alpha) \frac{e^{\frac{2\pi}{k} [(L_j^\alpha + 1) Z_1 + (L_j^\alpha - 2) \eta]^\alpha} (2k)^{L_j^\alpha}}{(Z_1^2 + k^2)^{L_j^\alpha + 5} \prod_{s=1}^{\infty} \left[1 + \frac{\eta^2}{k^2 (L_j^\alpha + s)^2} \right]} \times e^{-\frac{4\eta}{k} \operatorname{arctg} \frac{Z_1}{k}}, \quad (15)$$

где

$$B(L_j^\alpha) = b_j \left[\frac{\Gamma(L_j^\alpha + 1) \Gamma(L_j^\alpha + 4)}{(L_j^\alpha + 1) \Gamma(2L_j^\alpha + 1)} \right]^2.$$

Усредняя (15) по всем направлениям распространения падающих лучей и учитывая, что атом имеет для K -электрона, после суммирования (15) по всем возможным переходам получаем окончательное выражение КП для данного перехода K -электрона в область непрерывного спектра энергий:

$$\tau(\nu) = \frac{256 \pi^3 e^2}{ck^2} \nu (2k)^{2L_j^\alpha} B(L_j^\alpha) \prod_{s=1}^{\infty} \left[\frac{1 + \frac{\eta^2}{k^2 (1+s)^2}}{1 + \frac{\eta^2}{k^2 (L_j^\alpha + s)^2}} \right] \times \frac{Z_1^3 \eta (k^2 + \eta^2) [(L_j^\alpha + 1) Z_1 + (L_j^\alpha - 2) \eta]^2}{(Z_1^2 + k^2)^{L_j^\alpha + 5}} \times e^{-\frac{4\eta}{k} \operatorname{arctg} \frac{Z_1}{k}} \frac{1}{1 - e^{-\frac{2\pi\eta}{k}}}. \quad (16)$$

При

$$\eta = Z_1, \quad L_j^\alpha = 1, \quad \lambda = 0 \quad (17)$$

(15) совпадает с соответствующим выражением КП без учета подвижности дырки.

Для дальнейшего исследования (16) вблизи K -края используем полученные результаты для свободного атома. Так как начальный уровень перехода электрона один и тот же (меняются только конечные состояния), то для расчета тонкой структуры основного края достаточно ограничиться вычислением взаимных расстояний между уровнями энергии дискретных конечных состояний электрона в свободном атоме и границей сплошного спектра [2].

Из (10) без учета поляризации атомного остатка имеем

$$E(L) = -\frac{m_0 e^4 \eta^2}{2\hbar^2 (p_1 + L + 1)^2}, \quad p_1 = 0, 1, 2, \dots \quad (18)$$

Как видно из (18), подвижность дырки приводит к смещению энергетических уровней. При $L = l$ (18) переходит в энергию уровня $E(l)$ в случае неподвижной дырки. Величина сдвига равна

$$h\nu_L = E(l) - E(L). \quad (19)$$

Для разных переходов значения $h\nu_L$ приведены в таблице для К-спектра поглощения Li в $LiCl$, $LiBr$ и LiF . В таблице L_1 и L_2 — решения (11), верхние индексы показывают значения l на конечном уровне перехода. В значениях $h\nu_L$ верхнее число получено из (19) при $\rho_1 = 0$, а нижнее — при $\rho_1 = 1$.

Как видно из таблицы, значения $h\nu_L$ для переходов $s \rightarrow p$ при $\rho_1 = 1$ и для переходов $s \rightarrow d$ очень малы и их можно не учитывать. Обозначим через $h\nu_{L_2^0}$ значения $h\nu_L$ для переходов $s \rightarrow s$ при $\rho_1 = 1$. Все значения $h\nu_{L_2^1}$ отрицательны, что означает, что уровень $E(L)$ находится выше уровня $E(l)$. Отсюда следует, что для сообщения электрону кинетической энергии T необходим рентгеновский квант не с энергией $h\nu$, как в (13), а с энергией, большей на величину $h\nu_{L_2^1}$. Следовательно, в данном случае (13) принимает вид

$$h\nu + h\nu_{L_2^1} = E_k - T. \quad (20)$$

Для остальных переходов имеем

$$h\nu - h\nu_L = E_k - T, \quad (21)$$

так как все $h\nu_L > 0$.

Как и в [2], примем следующие обозначения с учетом (20) и (21):

$$\eta = Z_1 [9], \quad \nu_\infty = \frac{E_k}{h} = Z^2 R_y = \frac{Z^2}{4\pi},$$

$$n^* = \frac{Z_1}{k}, \quad k^2 = \left(\frac{Z^2}{n^{*2}} \right) R_y.$$

Для перехода $s \rightarrow L_1^1$

$$\nu + \nu_{L_1^1} = (Z_1^2 + k^2) R_y = \nu_\infty \left(1 + \frac{1}{n_{L_1^1}^{*2}} \right), \quad n_{L_1^1}^* = \sqrt{\frac{\nu_\infty}{\nu + \nu_{L_1^1} - \nu_\infty}}, \quad (22)$$

для остальных переходов

$$\nu - \nu_L = (Z_1^2 + k^2) R_y = \nu_\infty \left(1 + \frac{1}{n_L^{*2}} \right), \quad n_L^* = \sqrt{\frac{\nu_\infty}{\nu - \nu_L - \nu_\infty}}, \quad (23)$$

где ν_∞ — граничная частота, $1 R_y = 13,6$ эв.

Используя (22) и (23), учитывая все переходы и введя обозначения

$$L_1^0 = L_1, \quad L_2^0 = L_2, \quad L_1^1 = L_3, \quad L_2^1 = L_4, \quad -\nu_{L_1^1} = \nu_{L_1}, \quad (24)$$

представим (16) в виде (в атомных единицах)

$$\tau(\nu) = \sum_{l=1}^4 A(L_l) \prod_{s=1}^{\infty} \frac{[(\nu - \nu_{L_l} - \nu_\infty)(1+s)^2 + \nu_\infty](L_l + s)^2}{[(\nu - \nu_{L_l} - \nu_\infty)(L_l + s)^2 + \nu_\infty](1+s)^2} \times$$

$$\times \left(\frac{\nu - \nu_{L_1} - \nu_{\infty}}{\nu_{\infty}} \right)^{L_1 - 1} \frac{\nu_{L_1 + 2}}{(\nu - \nu_{L_1})^{L_1 + 3}} \frac{e^{-in_{L_1}^* \operatorname{arctg} n_{L_1}^*}}{1 - e^{-2\pi n_{L_1}^*}}, \quad (25)$$

где

$$A(L) = \frac{2^4 \pi e^2}{mc} \left[\frac{2^L \Gamma(L+1) \Gamma(L+4) (2L-1)}{(L+1) \Gamma(2L+2)} \right]^2.$$

При условии (17) формула (25) переходит в выражение КП в случае неподвижной дырки [2]:

$$\tau_0(\nu) = 2^8 \frac{\pi e^3 \nu_{\infty}^3}{mc \nu^4} \frac{e^{-4n^* \operatorname{arccotg} n^*}}{1 - e^{-2\pi n^*}}. \quad (25')$$

Вблизи края поглощения (25) и (25') преобразуются к виду [2]

$$\tau(\nu) = \sum_{l=1}^4 A(L_l) \prod_{s=1}^{\infty} \frac{[(\nu - \nu_{L_l} - \nu_{\infty})(1+s)^2 + \nu_{\infty}](L_l + s)^2}{[(\nu - \nu_{L_l} - \nu_{\infty})(L_l + s)^2 + \nu_{\infty}](1+s)^2} \times \\ \times \left(\frac{\nu - \nu_{L_l} - \nu_{\infty}}{\nu_{\infty}} \right)^{L_l - 1} \frac{\nu_{L_l + 2/3}}{(\nu - \nu_{L_l})^{L_l + 5/3}}, \quad (26)$$

$$\tau_0(\nu) = 2^8 \frac{\pi}{m e^3 c} \frac{\nu_{\infty}^{5/3}}{\nu^{8/3}}. \quad (26')$$

Для качественного исследования представим функцию (26) в символическом виде, используя (24),

$$\tau(\nu) = B_1(L_1^0) \frac{(\nu - \nu_{L_1^0} - \nu_{\infty})^{L_1^0 - 1}}{(\nu - \nu_{L_1^0})^{L_1^0 + 5/3}} + B_2(L_2^0) \frac{(\nu - \nu_{L_2^0} - \nu_{\infty})^{L_2^0 - 1}}{(\nu - \nu_{L_2^0})^{L_2^0 + 5/3}} + \\ + B_3(L_1^1) \frac{(\nu - \nu_{L_1^1} - \nu_{\infty})^{L_1^1 - 1}}{(\nu - \nu_{L_1^1})^{L_1^1 + 5/3}} + B_4(L_2^1) \frac{(\nu + \nu_{L_2^1} - \nu_{\infty})^{L_2^1 - 1}}{(\nu - \nu_{L_2^1})^{L_2^1 + 5/3}}. \quad (27)$$

В (26') при $\nu < \nu_{\infty}$ функция $\tau_0(\nu)$ равна нулю, при $\nu = \nu_{\infty}$ имеет скачок, а при $\nu > \nu_{\infty}$ она падает приблизительно по закону обратных кубов.

Из четвертого члена (27) видно, что $\tau(\nu)$ обращается в нуль при $\nu < \nu_{\infty} - \nu_{L_2^1}$, а при $\nu = \nu_{\infty} - \nu_{L_2^1}$ функция стремится к бесконечности. Энергетическое расстояние от края ($h\nu_{L_2^1} = h\nu - h\nu_{\infty}$) для K -спектра поглощения Li в $LiCl$, $LiBr$ и LiF принимает соответственно значения 1,606, 1,496 и 1,993 (см. табл.). Эти значения близки к энергии связи рентгеновского экситона в соответствующих кристаллах [6, 7]. Расхождение можно объяснить приближенностью формулы (18), в которой пренебрегалось поляризацией атомного остатка, что приводит к увеличению $E(e)$ и, следовательно, уменьшению разности (19).

При увеличении частоты ν функция $\tau(\nu)$ падает (так как остальные члены (27) равны нулю), а на крае принимает определенное значение.

При частоте $h\nu > h\nu_{\infty} + h\nu_{L_1}$ ($L_1^0 > 1$) функция возрастает, а при $h\nu = h\nu_{\infty} + h\nu_{L_2^0}$ принимает бесконечное значение (второй член в (27)), так как $L_1^0 < 1$. При возрастании частоты функция снова убывает, а при значении $h\nu = h\nu_{\infty} + h\nu_{L_1^0}$ становится бесконечно большой. Зависимость функции $B_s(L)$ от частоты исследовалась с помощью ЭВМ. Оказалось, что она очень слабо зависит от частоты. Учет перехода $s \rightarrow d$ приводит к колебаниям функции $\tau(\nu)$ непосредственно у края поглощения. Обращение коэффициента поглощения в бесконечность связано с приближенностью вычисления КП, при котором не учитываются релаксационные процессы, которые возникают в кристаллах при поглощении рентгеновского кванта [13], а также температурные эффекты.

Таким образом, приходим к выводу, что учет подвижности дырки приводит к образованию нескольких пиков.

Дискретный спектр

В этом случае уравнение (10) имеет решение

$$R_{nL} = \frac{2 \left(\frac{\eta}{a_0} \right)^{3/2}}{n^2 \Gamma(2L+2)} \sqrt{\frac{\Gamma(L+n+1)}{(n-L-1)!}} \left(\frac{2\eta r}{na_0} \right)^L \times \\ \times e^{-\frac{\eta r}{na_0}} F\left(-n+L+1, 2L+2, \frac{2\eta r}{na_0}\right). \quad (28)$$

Аналогичным образом для КП получаем

$$\tau(\nu) = 2^8 (ea_0)^2 n^2 R_y \sum \left\{ \left[\frac{2^{L_1} \Gamma(L_1+4)}{\Gamma(2L_1+2)} \right]^2 \times \right. \\ \times \left. \frac{\Gamma(L_1+n+1)}{(n-L_1-1)!} \frac{\eta^{3+2L_1}}{n^{2L_1+4} Z_1^{2L_1+3}} \left[1 + \frac{\eta}{nZ_1} (L_1-1) - \frac{\eta(2-L_1)}{Z(L_1+1)} \right]^2 \right\} \times \\ \times \frac{\left(1 - \frac{\eta}{nZ_1} \right)^{2a-6}}{\left(1 + \frac{\eta}{nZ_1} \right)^{2n+2(L_1+2)}}. \quad (29)$$

При условии (17) формула (29) переходит в выражение для КП при неподвижной дырке. Сравнение показывает, что учет подвижности дырки не приводит к существенному изменению КП для дискретного спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Э. Е. Вайнштейн. Рентгеновские спектры атомов в молекулах химических соединений и в сплавах, Изд. АН СССР, 1950, стр. 104.
2. Р. Л. Баринский, В. И. Нефедов. Рентгеноспектральное определение заряда атомов в молекулах, Изд. Наука, 1966.
3. Т. М. Эмкина, В. А. Фомичев. Ультрамягкая рентгеновская спектроскопия, Л., 1971.
4. A. Milgram, M. P. Givens. Phys. Rev., 125, 1506 (1962).
5. A. B. Kuz, T. Miakawa, S. Oyama. Phys. Stat. Sol., 34, 581 (1969).
6. А. М. Саар, А. А. Майсте, М. А. Эланго. ФТТ, 15, 2505 (1973).
7. А. А. Майсте, А. М. Саар, М. А. Эланго. ФТТ, 16, 1720 (1974).
8. К. И. Караханян, Э. М. Казарян, П. А. Безиргянян. ФТТ, 18, 511 (1976).
9. К. И. Караханян, Э. М. Казарян, П. А. Безиргянян. ФТТ, 19, 539 (1977).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Изд. Наука, 1974.
11. В. А. Фок. Начала квантовой механики, Изд. Наука, 1976.
12. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, Изд. Наука, 1971.
13. М. А. Эланго. Электронные процессы в щелочногаленидных кристаллах, Тарту, 1970.

ՌԵՏԳՆԵՆԱՆ Կ-ԿԼԱՆՄԱՆ ՏԵՍՈՒԹՅԱՆ ՎԵՐԱԲԵՐՅԱԼ

Է. Մ. ԳԱԶԱՐՅԱՆ, Կ. Ի. ԿԱՐԱԽԱՆՅԱՆ,
Պ. Ա. ԲԵԶԻՐԳՅԱՆՅԱՆ, Ս. Կ. ԱՎԵՏԻՍՅԱՆ

Ատոմային մոտավորությամբ տեսականորեն ուսումնասիրված է իոնային բյուրեղներում ռենտգենյան կլանման Կ-սպեկտրի նուրբ կառուցվածքի վրա խոռոչի հարաբերական շարժունակության ազդեցության հարցը: Մասնավորապես ցույց է տրված, որ խոռոչի շարժունակությամբ բերում է բացի հիմնական $s \rightarrow p$ էլեկտրոնային անցումից լրացուցիչ $s \rightarrow s$ և $s \rightarrow d$ անցումների, որոնցով հավանաբար պայմանավորված է կլանման կորի որոշ վերելքների (պիկերի) առաջացումը Կ-կորի հիմնական տիրույթում:

TO THE THEORY OF X-RAY K-ABSORPTION

E. M. KAZARYAN, K. I. KARAKHANYAN, P. A. BEZIRGANYAN,
S. K. AVETISYAN

The influence of relative mobility of holes upon the fine structure of K spectra of X -ray absorption of ionic crystals is investigated theoretically in atomic approximation. In particular, it is shown that besides the ground $s \rightarrow p$ electron transition, the hole mobility leads to additional $s \rightarrow s$ and $s \rightarrow d$ transitions due to which some extra peaks in the range of basic K -edge arise.