<Оптика атмосферы и океана>, **6**, №3 (1993)

УДК 539.184.2

В.П. Демкин, А.А. Печерицын

ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА НЕУПРУГОЕ РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Разработан метод расчета сечений возбуждения атомов быстрыми электронами. Использован метод разложения на парциальные волны с учетом антисимметричных свойств волновой функции. В операторе рассеяния учтены спин-зависящие взаимодействия.

В приближении Борна проведен расчет сечения возбуждения атома гелия на интеркомбинационном переходе $1\,{}^1S–3\,{}^3S$. Анализ результатов расчета показывает, что вклад от релятивистских поправок в операторе рассеяния следует учитывать при энергиях электрона —10 кэВ.

Учет спина в теории рассеяния приводит к ряду интересных явлений, имеющих фундаментальное значение [1, 2]. Среди них, в связи с развитием поляризационной спектроскопии, значительный интерес представляют процессы рассеяния, приводящие к поляризации атомных состояний. В случае электрон-атомных столкновений учет спиновых свойств объясняет эффект спиновой поляризации электронов и появление интеркомбинационных переходов в атоме.

В квантовой теории рассеяния зависимость амплитуды рассеяния от спина является следствием обменных эффектов между состояниями налетающего и атомного электронов [3]. Однако с ростом энергии обменная часть амплитуды рассеяния убывает как ε^{-3} [4] и при энергиях несколько сот электронвольт становится несущественной. Другим способом учета спиновых свойств частиц является учет релятивистских поправок в операторе рассеяния. В приближении Брейта [5] такие поправки описываются операторами взаимодействия «спин — своя орбита» (H_1), «спин — чужая орбита» (H_2) и «спин — спин» (H_3):

$$H_1 = \frac{e^2}{2m^2c^2}\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{r_i^3}(\mathbf{l}_i s_i)\,, \tag{1}$$

$$H_2 = -\frac{e^2}{2m^2c^2}\sum_{i\neq j}^{N}\frac{1}{r_{ij}^3}[\mathbf{r}_{ij}\mathbf{p}_i]\,(\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j)\,, \tag{2}$$

$$H_3 = -\frac{e^2}{m^2c^2}\sum_{i>j}^{N}\left\{-\frac{8\pi}{3}\,\mathbf{s}_i\mathbf{s}_j)\,\delta(r_{ij}) + \frac{1}{r_{ij}^3}\left[\;(\mathbf{s}_i\mathbf{s}_j) - \frac{3}{r_{ij}^2}(\mathbf{s}_i\mathbf{r}_{ij})\,(\mathbf{s}_j\mathbf{r}_{ij})\right],\right\} \tag{3}$$

где $s_i\mathbf{l}_i$ – спиновый и орбитальный моменты электрона с импульсом $\mathbf{p}_i$ и радиус-вектором $\mathbf{r}_i$.

Причиной малости спин-зависящих взаимодействий по сравнению с электростатическим взаимодействием является входящий в них малый параметр (ξ). Его можно выделить явно, рассмотрев размерные множители соответствующих операторов. Тогда получим для спин-орбитального взаимодействия:

$$\zeta = \alpha\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}\,\mathrm{Ry} \tag{4}$$

для спин-спинового

$$\zeta = 2\,\alpha^2\,\mathrm{Ry}\,, \tag{5}$$

где α – постоянная тонкой структуры, $\beta = (v/c)$. Следовательно, наиболее существенный вклад в сечение неупругого рассеяния вносит взаимодействие «спин – чужая орбита», так как оно явно зависит от импульса налетающего электрона. Сечение рассеяния электрона на операторе H_3 пропорционально α^4 lnε, в то время как сечение возбуждения атома по интеркомбинационному переходу резко убывает с ростом энергии. Оценки показывают, что для оптически запрещенных переходов при энергиях несколько килоэлектронвольт вклад оператора H_2 в амплитуду рассеяния становится сравним с вкладом оператора электростатической энергии.

В [6] получена формула для сечения интеркомбинационных переходов в борцовском приближении с учетом оператора H_2 в операторе рассеяния. Проведенный расчет для перехода $1^1S - 2^3S$ атома гелия показал, что в области энергии 8 кэВ оператор H_2 вносит заметный вклад в сечение рассеяния.

В данной статье нами развит более общий метод расчета сечений возбуждения атомов с учетом оператора H_2 на основе метода разложения на парциальные волны [2].

Будем описывать состояние атома в (LS) – типе связи квантовыми числами $\gamma L_1 S_1 M_{l_1} M_{s1}$. а состояние налетающего электрона – волновым вектором **k** и проекцией спина на ось Z/μ. Амплитуда перехода

$$\Gamma = (\gamma_0 L_1 S_1 M_{L1} M_{S1};\ \mathbf{k}_0\ \mu_0) - \Gamma' = (\gamma' L_1' S_1' M_{L1}' M_{S1}';\ \mathbf{k}\mu),$$

имеет вид

$$f_{\Gamma'\Gamma} = -\frac{2\pi m}{h^2} \cdot \langle \Gamma' \mid V \mid \Gamma \rangle , \tag{6}$$

где V – оператор взаимодействия, включающий в себя операторы электростатического и спин-орбитального взаимодействий:

$$V = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{e^2}{r_{Ni}} - \frac{e^2 h}{2m^2 c^2} \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{r_{Ni}^3} [\mathbf{r}_{Ni}\, \mathbf{p}_N]\, (\mathbf{s}_N + 2\mathbf{s}_i) . \tag{7}$$

В общем случае амплитуда рассеяния с учетом антисимметризации волновых функций имеет вид

$$f_{\Gamma'\Gamma} = -\frac{m}{2\pi h^2} \int A \Phi^*_{\gamma'}(\xi)\, \chi^*_{\mu'}(\eta_N)\, e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_N}\, V \Psi(\zeta)\, d(\zeta), \tag{8}$$

где A – оператор антисимметризации, $\Psi(\zeta)$ – волновая функция системы электрон – атом.

Разложим функцию Ψ по собственным функциям гамильтониана атома:

$$\Psi = \sum_{\gamma\mu} A F_{\gamma\mu}(\mathbf{r})\, \Phi_\gamma(\xi)\, \chi_\mu(\eta_N) . \tag{9}$$

Для разделения угловых и радиальных переменных разложим, волновые функции налетающего электрона до н после столкновения по сферическим гармоникам:

$$F_{\gamma\mu} = \sum_{\lambda m} i^\lambda \sqrt{4\pi\, (2\lambda + 1)}\, g_{\gamma\lambda\mu}(k_0\, r)\, Y_{\lambda_0}(\hat{\mathbf{r}}) , \tag{10}$$

$$e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{\lambda m} i^\lambda \sqrt{(2\lambda + 1)}\, j_\lambda(\kappa r)\, Y^*_{\lambda m}(\hat{\mathbf{k}})\, Y_{\lambda m}(\hat{\mathbf{r}}) . \tag{11}$$

Тогда, подставив эти разложения в (8), получим

$$f_{\Gamma'\Gamma} = -\frac{2m}{h^2} \sum_{\lambda\lambda' m'} i^{\lambda-\lambda'} \sqrt{4\pi\, (2\lambda' + 1)\, (2\lambda + 1)}\, Y_{\lambda' m'}(\hat{\mathbf{k}}) \sum_{\gamma\mu} \langle \gamma';\ \ \lambda'\, m'\, \mu' \mid V \mid \gamma' ;\ \ \lambda 0 \mu \rangle . \tag{12}$$

Перейдем к представлению связанных моментов: $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{L}_1 + \lambda$, $\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}_1 + s$, $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S}$, где $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{S}$, $\boldsymbol{J}$ – полные моменты системы электрон + атом. Обозначим новый набор квантовых чисел через $\Lambda{:}\Lambda = L_1 S_1 \lambda s L S J M$. Тогда амплитуду рассеяния можно переписать в виде

$$f_{\Gamma'\Gamma} = -\frac{2m}{h^2}\sum_{\lambda\lambda' m'} i^{\lambda-\lambda'}\sqrt{4\pi\,(2\lambda'+1)\,(2\lambda+1)}\;Y_{\lambda' m'}(\hat{\mathbf{k}})\sum_{\gamma\mu}\;\sum_{\Gamma/\Lambda\Gamma'/\Lambda'}(\Gamma\,|\,\Lambda)(\Gamma'\,|\,\Lambda')<\Lambda'\,|\,\mathrm{V}\,|\,\Lambda>. \tag{13}$$

Здесь через $(\Gamma\,|\,\Lambda)$ обозначен коэффициент перехода от Γ к Λ, равный:

$$(\Gamma\,|\,\Lambda) = <L_1M_{L_1},\,\lambda m\,|\,LM_L><S_1M_S,\,s\mu\,|\,SM_S><LM_L,\,SM_S\,|\,JM>\,. \tag{14}$$

Суммирование в (13) идет по тем квантовым числам из Λ, которые не входят в Γ, т.е. $\Gamma/\Lambda = LM_LSM_SJM$.

Матричные элементы, входящие в (13), вычислялись методом теории углового момента [5]. В нижеследующих формулах матричный элемент прямого электростатического взаимодействия обозначен через $V^{(\text{эл})}_{\Lambda'\Lambda}$, обменного взаимодействия – $V^{(\text{об})}_{\Lambda'\Lambda}$, спин-орбитального – $V^{(\text{СО})}_{\Lambda'\Lambda}$.

$$V^{(\text{эл})}_{\Lambda'\Lambda} = (-1)^{L+L_1'+L_1+L_0}\,[L_1',\,L_1,\,\lambda',\,\lambda,\,l',\,l]\sum_k\begin{Bmatrix}L_1\,\lambda'\,L\\ 1\,L_1\,k\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}L_1'\,l'\,L_0\\ l\,L_1\,k\end{Bmatrix}F^{\kappa}(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')\,, \tag{15}$$

$$V^{(\text{об})}_{\Lambda'\Lambda} = (-1)^{S_1'+S_1+l'+l+1}\sum_k\,[L_1',\,L_1,\,S_1',\,S_1,\,\lambda',\,\lambda,\,l',\,l]\begin{Bmatrix}\lambda' & l & k\\ L & L_1 & \lambda\\ L_1' & L_0 & l'\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\frac{1}{2} & S_0 & S_1\\ \frac{1}{2} & S & 1\end{Bmatrix}G^{\kappa}\,(\gamma\gamma',\,\lambda'\lambda), \tag{16}$$

$$V^{(\text{СО})}_{\Lambda'\Lambda} = \alpha^4\,[L',\,L,\,S',\,S,\,L_1',\,L_1,\,S_1',\,S_1,\,l',\,l,\,\lambda',\,\lambda]\left(\frac{3}{2}\right)^{1/2}\begin{Bmatrix}L' & S' & J\\ S & L' & 1\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}S_1 & S & \frac{1}{2}\\ S' & S_1 & 1\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}S_1 & \frac{1}{2} & S_0\\ \frac{1}{2} & S_1' & 1\end{Bmatrix}\times$$

$$\times\Bigg[\sum_k(-1)^{\kappa}\Bigg\{\Big[(\kappa+2)\,(2\kappa+3)\,T_{\kappa+1\;\kappa+1}\begin{Bmatrix}k{+}1 & 1 & k{+}1\\ 1 & l' & 1\end{Bmatrix}+(2\kappa+1)\,(2\kappa+3)\,T_{\kappa+1\;\kappa}\begin{Bmatrix}k{+}1 & 1 & k\\ \lambda & \lambda' & \lambda\end{Bmatrix}\Big]\times$$

$$\times\sqrt{\lambda(\lambda+1)\,(2\lambda+1)}\,\overset{b}{R}_k(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')-\sqrt{(k+1)\,(k+2)\,(2k+3)}\;T_{\kappa+1\;\kappa+1}\,\overset{b}{\xi}_{\kappa+1}(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')\Bigg\}+$$

$$+\sum_k(-1)^{\kappa}\Bigg\{\Big[\kappa(\kappa+1)\,T_{\kappa\kappa}\begin{Bmatrix}k & 1 & k\\ \lambda & \lambda' & \lambda\end{Bmatrix}+(2\kappa+1)\,(2\kappa+3)\,T_{\kappa\,\kappa+1}\begin{Bmatrix}k & 1 & k{+}1\\ \lambda & \lambda' & \lambda\end{Bmatrix}\Big]\times$$

$$\times\sqrt{\lambda(\lambda+1)\,(2\lambda+1)}\,\overset{a}{R}_k(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')-\sqrt{\kappa(\kappa+1)\,(2\kappa+1)}\,T_{\kappa\kappa}(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')\Bigg\}\Bigg], \tag{17}$$

где введены обозначения:

$$[j_1,j_2,\,...]\equiv\sqrt{(2j_1+1)\,(2j_2+1)\,...}\,, \tag{18}$$

$$F^{\kappa}(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')=\begin{pmatrix}l' & k & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda' & k & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\int\frac{r_<^k}{r_>^{k+1}}R_{\gamma'}(r_1)\,j_{\gamma'}(\kappa r_2)\,R_{\gamma}(r_1)\,g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2)\,r_1^2\,r_2^2\,dr_1\,dr_2, \tag{19}$$

$$G^{\kappa}(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')=\begin{pmatrix}l' & k & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda' & k & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\int\frac{r_<^k}{r_>^{k+1}}R_{\gamma'}(r_2)\,j_{\lambda'}(\kappa r_1)\,R_{\gamma}(r_1)\,g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2)\,r_1^2\,r_2^2\,dr_1\,dr_2\,, \tag{20}$$

$$\overset{a}{R}_k(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')=\begin{pmatrix}l' & k & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda' & k & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\int_0^{\infty}dr_2\,j_{\lambda'}(\kappa r_2)\,g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2)\,\frac{1}{r_2^{k+1}}\int_0^{r_2}r_1^{k+2}\,R_{\gamma'}(r_1)\,dr_1\,, \tag{21}$$

$$\overset{b}{R}_k(\gamma\gamma',\,\lambda\lambda')=\begin{pmatrix}l' & k & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\lambda' & k & \lambda\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\int_0^{\infty}dr_2\,j_{\lambda'}(\kappa r_2)\,g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2)\,r_2^{k+2}\int_{r_2}^{\infty}\frac{1}{r_1^{k+1}}R_{\gamma'}(r_1)\,R_{\gamma}(r_1)\,dr_1\,, \tag{22}$$

$$\xi_k^a(\gamma\gamma', \lambda\lambda') = \begin{pmatrix} l' & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda' & k & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty dr_2 j_{\lambda'}(\kappa r_2) \frac{d}{dr_2} g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2) \frac{1}{r_2^{k+1}} \int_0^{r_2} r_1^{k+2} R_{\gamma'}(r_1) R_\gamma(r_1)\, dr_1, \tag{23}$$

$$\xi^b(\gamma\gamma', \lambda\lambda') = \begin{pmatrix} l' & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda' & k & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^\infty dr_2 j_{\lambda'}(\kappa r_2) \frac{d}{dr_2} g_{\gamma\lambda\mu}(\kappa_\gamma r_2)\, r_2^{k+2} \int_0^\infty \frac{1}{r_1^{k+1}} R_{\gamma'}(r_1) R_\gamma(r_1)\, dr_1, \tag{24}$$

$$T_{\kappa x} = \begin{Bmatrix} L_1' & \lambda' & L' \\ L_1 & \lambda & L \\ k & \varkappa & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & l & L_0 \\ l' & L_1' & k \end{Bmatrix}. \tag{25}$$

При вычислениях предполагалось, что в переходах в атоме принимает участие только оптический электрон и к внешней оболочке применимо приближение генеалогической схемы.

С учетом (15) – (17) выражение для амплитуды рассеяния примет вид

$$f_{\Gamma'\Gamma} = -2a_0 \sum_{\lambda\lambda' m'} i^{\lambda-\lambda'} \sqrt{4\pi(2\lambda'+1)(2\lambda+1)}\, Y_{\lambda' m'}(\hat{\mathbf{k}}) \sum_{\gamma\mu} \sum_{\Gamma|\Lambda\Gamma'|\Lambda'} (\Gamma|\Lambda)(\Gamma'|\Lambda')\,[V_{\Lambda'\Lambda}^{(\text{эл})} + V_{\Lambda'\Lambda}^{(\text{об})} + V_{\Lambda'\Lambda}^{(\text{со})}]. \tag{26}$$

Вычисление матричных элементов (15)–(17) сводится к вычислению радиальных интегралов (19)–(25). Для определения неизвестной радиальной функции налетающего электрона $g_{\gamma\lambda\mu}(r)$ необходимо решить уравнение

$$D_\beta^{(l)}(r)\, g_\beta^{JM}(r) = \frac{2m}{(h/2\pi)^2} \sum_{\beta'} \sqrt{\frac{(2j'+1)}{(2j+1)}}\, i^{J'-J} \langle\Lambda|V|\Lambda'\rangle\, g_{\beta'}^{JM}(r), \tag{27}$$

где β – набор квантовых чисел $\{\gamma, J, j\}$ $D_\beta^{(l)}(r)$ – дифференциальный оператор, $D_\beta^{(l)}(r) = \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2\beta$.

В простейшем случае борновского приближения $g_{\gamma\lambda\mu}(r) = j_\lambda(r)\delta_{\gamma\gamma_0}$, где γ_0 – начальное состояние атома.

Угловая зависимость амплитуды рассеяния выделена явно и определяется сферическими функциями $Y_{\lambda' m'}$.

В области больших энергий электронов необходимо учитывать большое число парциальных волн. Оценки показывают, что при ε ~ 10 кэВ требуется учитывать около 100 парциальных волн.

Разработанный метод использовался для расчета сечения возбуждения перехода $1^1S - 3^3S$ атома гелия. Результаты расчета приведены в таблице.

Энергия электрона, кэВ	Сечение возбуждения, πa_0^2	
	обменное	спин-орбитальное
1	$8{,}89 \cdot 10^{-6}$	$6{,}67 \cdot 10^{-11}$
2	$1{,}25 \cdot 10^{-6}$	$1{,}26 \cdot 10^{-10}$
3	$3{,}93 \cdot 10^{-7}$	$2{,}20 \cdot 10^{-10}$
5	$9{,}00 \cdot 10^{-8}$	$1{,}01 \cdot 10^{-9}$
7	$3{,}39 \cdot 10^{-8}$	$1{,}44 \cdot 10^{-9}$
8	$2{,}30 \cdot 10^{-8}$	$1{,}56 \cdot 10^{-9}$
9	$1{,}63 \cdot 10^{-8}$	$1{,}65 \cdot 10^{-9}$
10	$1{,}20 \cdot 10^{-8}$	$1{,}72 \cdot 10^{-9}$

Как видно из таблицы, с увеличением ε обменное сечение рассеяния на электростатическом потенциале убывает, в то время как сечение, соответствующее спин-орбитальному взаимодействию, возрастает. При 10 кэВ их отношение составляет около 0,14, т.е. спин-орбитальное взаимодействие дает уже заметный вклад в сечение. При более высоких энергиях сечение будет определяться только спин-орбитальным взаимодействием, так как обменное сечение продолжает убывать.

Рассматриваемый интервал энергий, где релятивистские поправки вносят существенный вклад в сечение рассеяния, является в настоящее время экспериментально достижимым. В качестве примера можно привести разряды, возбуждаемые пучком убегающих электронов [7]. Передача энергии от электронной компоненты плазмы идет в основном по оптически разрешенным переходам. Интеркомбинационные переходы в данном случае могут служить для диагностики высокоэнергетической части функции распределения электронов и ее анизотропных свойств.

1. Давыдов С.А. Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1973. 703 с.
2. Друкарев Г.Ф. Столкновения электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978. 256 с.
3. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 320 с.
4. Лендьел В.И., Салак М. Нерелятивистская квантовая теория рассеяния. Львов: Вища школа, 1983. 136 с.
5. Очкур В.И. //ЖЭТФ. 1963. Т. 45. В. 3(9). С. 734-740.
6. Mittleman M.H. //Phys. Rev. 1967. V. 164. № 1. P. 48—50.
7. Бохан П.А. //ЖТФ. 1986. Т. 56. № 6. с. 1230—1236.

Томский государственный университет им. В.В. Куйбышева

Поступила в редакцию
21 декабря 1992 г.

V.P. Demkin, A.A. Petcheritsin. **Influence of Spin-Orbital Interaction on the Inelastic Scattering of High-Energy Electrons.**

A technique developed for calculating cross-sections of excitation of atoms by fast electrons is presented. To do this a technique of expansion over partial wave functions, taking into account antisymmetric properties of the wave function, is used. The scattering operator takes into account spin-dependent interactions.

Cross-section of the intercombination transition $1\,^1S$–$3\,^3S$ of the helium atoms has been calculated using Born approximation. Analysis of the calculational results shows that corrections of the scattering operator for relativistic effects have to be accounted for at the electron energies of the order of 10 keV and above.