

电子与钠原子散射的 S, T, U 参数研究*

游 泳^{1)†} 刘义保^{1)‡} 邓玲娜^{1)‡} 李 群^{1)‡}

1) 东华理工学院核资源与环境教育部重点实验室, 南昌 330013)

2) 东华理工学院物理系, 抚州 344000)

3) 清华大学物理系, 北京 100084)

(2006 年 5 月 30 日收到, 2006 年 11 月 16 日收到修改稿)

电子原子散射中的 S, T, U 参数可用来描述散射前后自旋状态的变化, 研究精细结构水平上的散射激发振幅之间的关系, 进而揭示电子原子碰撞过程中电子自旋-轨道耦合以及电子-电子交换等自旋相关效应. 采用扭曲波玻恩近似计算了钠原子受电子散射 $S \rightarrow P$ 跃迁中的 S, T, U 参数, 分析了多种入射能(2.2—60 eV)的电子与钠原子激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的 S, T, U 参数随散射角的分布, 其中对 10 eV 入射能的 S_p 参数与已报道实验数据符合一致. 结果表明, 较低能电子入射下的 S, T, U 参数随散射角的分布幅度和起伏都比较明显, 入射能大于 40 eV 的电子入射, S, T, U 参数的散射角分布变化很小.

关键词: 散射激发, S, T, U 参数, 散射振幅, 自旋相关效应

PACC: 3450, 3480D

1. 引 言

自 Bederson 等^[1]提出完备性散射实验的概念以来, 进一步激起人们对极化电子的研究热潮^[2-5]. 随着实验技术和计算机功能的大幅提高, 完备性散射实验中的观测量都能够用相应的散射理论加以解释, 同时, 理论的发展也为实验技术的发展提出了新的挑战. 研究电子原子碰撞中的 S, T, U 参数可以描述其碰撞前后自旋状态的变化, 分析电子原子碰撞过程中电子自旋-轨道耦合以及电子-电子交换等自旋相关效应, 也可研究精细结构水平上的散射激发振幅之间可能存在的关系. 通过 Kessler^[6]提出的“三重散射”实验可以用来测量 S, T, U 参数, 分析初始非极化束经散射后的极化度(S_p 参数), 左右微分截面的不对称度(S_a 参数), 初始极化束收缩变化量(T 参数)以及散射平面内自旋分量转动的大小(U 参数)(统称 S, T, U 参数), 从而得出散射后自旋状态的变化. 本文主要根据扭曲波玻恩近似(DWBA)计算出一级近似的散射振幅, 再由散射振幅和相位计算出 S, T, U 参数, 进而分析低能电子与钠原子碰撞散射前后的 S, T, U 参数随散射角变

化的情况.

2. 广义 S, T, U 参数

1985 年 Kessler^[6]提出 S, T, U 参数实验用于分析总电子角动量 $J = 0$ 的靶原子弹性散射, 随后 Anderson 和 Bartschat^[3]引入一组“广义 S, T, U 参数”($S_p, S_a, T_x, T_y, T_z, U_{xz}, U_{zx}$)进一步拓宽了该理论的研究领域.

根据自旋密度矩阵的厄密性和电子束与靶原子散射激发过程的宇称守恒, 可以定义以下 8 个独立参数来表征自旋密度矩阵元, 这 8 个参数称为广义 S, T, U 参数^[7].

$$\sigma_u \equiv \frac{1}{2} \sum_{m_1 m_0} m_1 m_0 \sigma_{m_1 m_0}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2J_0 + 1}} \sum_{M_1 M_0} |f(M_1 m_1, M_0 m_0)|^2 \quad (1a)$$

$$S_p \equiv \frac{2}{\sigma_u} \text{Im} \left\{ \frac{1}{2} \frac{1}{2} ; -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\}$$
$$= \frac{-2}{\sigma_u (2J_0 + 1)} \text{Im} \left\{ \sum_{M_1 M_0} f \left(M_1 \frac{1}{2}, M_0 \frac{1}{2} \right) \right.$$
$$\left. \times f^* \left(M_1 - \frac{1}{2}, M_0 \frac{1}{2} \right) \right\}, \quad (1b)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 30574079, 10647109)和江西省自然科学基金(批准号: 0512001)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: liuyb01@mails.tsinghua.edu.cn

$$S_a \equiv \frac{2}{\sigma_u} \text{Im} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\}, \quad = \frac{2}{\sigma_u} \text{Re} \left\{ \frac{1}{2} \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\}, \quad (1g)$$

$$= \frac{-2}{\sigma_u(2J_0 + 1)} \text{Im} \left\{ \sum_{M_1 M_0} f \left(M_1 \frac{1}{2}, M_0 - \frac{1}{2} \right) \times f^* \left(M_1 \frac{1}{2}, M_0 \frac{1}{2} \right) \right\}, \quad (1c)$$

$$U_{xz} \equiv \frac{1}{\sigma_u} \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{2} ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right] = -\frac{2}{\sigma_u} \text{Re} \left\{ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\}, \quad (1h)$$

$$T_x \equiv \frac{1}{\sigma_u} \left[-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} + -\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right], \quad (1d)$$

$$T_y \equiv \frac{1}{\sigma_u} \left[-\frac{1}{2} - \frac{1}{2} ; \frac{1}{2} \frac{1}{2} - -\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right], \quad (1e)$$

$$T_z \equiv \frac{1}{\sigma_u} \left[\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right] \quad (1f)$$

$$U_{xz} \equiv \frac{1}{\sigma_u} \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \frac{1}{2} - -\frac{1}{2} - \frac{1}{2}, \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right]$$

其中 σ_u 是非极化电子散射时的微分截面, S_p 为极化函数, 描述初始非极化束经散射后的极化; S_a 为非对称函数, 表述自旋极化束散射后的左右微分截面的不对称性; T_x, T_y, T_z 称为收缩函数, 表示初始极化束沿笛卡儿坐标轴方向上的变化; U_{xz}, U_{zx} 表示散射平面内自旋分量的转动. 图 1 给出了自然参照系下自旋散射前后变化的 S, T, U 参数表示, P 为电子自旋极化矢量, P_x, P_y, P_z 为自旋极化矢量在坐标轴上的三个分量.

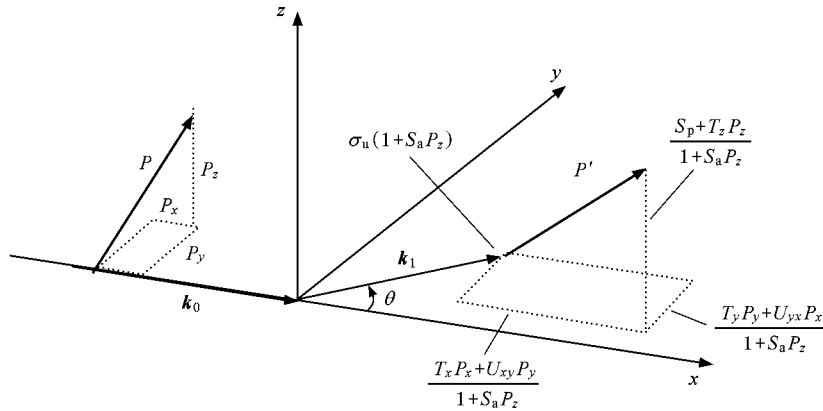


图 1 自然参考系中散射前后自旋变化的 S, T, U 参数示意图

3. 电子与钠原子碰撞散射中 S, T, U 参数的理论计算

根据 Hanne^[8]的思想, 在电子与碱金属原子散射激发过程中交换作用起绝对主要作用, 因此这组广义 S, T, U 参数可简化为 5 个参数(σ_u 作为绝对参数需测量),

$$S_p \equiv S_p^{1/2} = -2S_p^{3/2}, \quad (2a)$$

$$S_a \equiv S_a^{1/2} = -2S_a^{3/2}, \quad (2b)$$

$$T \equiv T_x^{1/2} = T_y^{1/2} = T_z^{1/2} = T_x^{3/2} = T_y^{3/2} = T_z^{3/2}, \quad (2c)$$

$$U \equiv U_{xz}^{1/2} = U_{zx}^{1/2} = -2U_{xz}^{3/2} = -2U_{zx}^{3/2}. \quad (2d)$$

再根据 Bartsch^[9]对于电子与准单电子原子的散射激发过程完备性问题的描述, 电子与碱金属原子

散射具有两种自旋散射通道, 即自旋单态($S = 0$)和自旋三重态($S = 1$), 对于不同精细结构水平上的激发振幅, 它们彼此之间是相互关联的. 电子与碱金属原子散射激发 $S \rightarrow P$ 过程的散射振幅表示为 $f_{\pm 1}^s$ 和 $f_{\pm 1}^t$,

$$f_{+1}^t = \alpha_+ e^{i\phi_+}, \quad (3a)$$

$$f_{-1}^t = \alpha_- e^{i\phi_-}, \quad (3b)$$

$$f_{+1}^s = \beta_+ e^{i\psi_+}, \quad (3c)$$

$$f_{-1}^s = \beta_- e^{i\psi_-}. \quad (3d)$$

因此, 可以通过散射振幅和相位计算 S, T, U 参数, 即

$$S_p = -\frac{1}{4\sigma_u} [\alpha_+^2 - \alpha_-^2 + \beta_+^2 - \beta_-^2], \quad (4a)$$

$$S_a = \frac{1}{4\sigma_u} [\text{Re} \{ 2\alpha_+ \beta_+ e^{i(\phi_+ - \psi_+)} - 2\alpha_- \beta_- e^{i(\phi_- - \psi_-)} \} - \chi(\alpha_+^2 + \alpha_-^2)], \quad (4b)$$

$$T = \frac{1}{4\sigma_u} [\operatorname{Re}\{2\alpha_+ \beta_+ e^{i(\phi_+ - \psi_+)} + 2\alpha_- \beta_- e^{i(\phi_- - \psi_-)}\} + \chi(\alpha_+^2 + \alpha_-^2)], \quad (4c)$$

$$U = \frac{1}{4\sigma_u} [\operatorname{Im}\{2\alpha_+ \beta_+ e^{i(\phi_+ - \psi_+)} - 2\alpha_- \beta_- e^{i(\phi_- - \psi_-)}\}], \quad (4d)$$

$$\sigma_u = \frac{3}{4}(\alpha_+^2 + \alpha_-^2) + \frac{1}{4}(\beta_+^2 + \beta_-^2). \quad (4e)$$

这里,上标“t”、“s”分别表示散射通道三态和单态,下标“ ± 1 ”表示 P 态轨道角动量磁量子数; $\alpha_{\pm}, \beta_{\pm}$ 分别表示散射通道三态和单态时振幅大小; ϕ_{\pm}, ψ_{\pm} 分别表示散射通道三态和单态时的相位.

对于电子与碱金属原子散射,选取静电势作为扭曲势^[10,11],散射振幅的计算方法参考了文献[12],散射振幅的输出可以用于计算散射激发过程中的可观测量.我们改编了 Linux 下的开放代码 ACVN^[13],提取所需的 S, T, U 参数.

4. 结果及分析

图 2 是用 DWBA 计算得到的多种入射能(2.2—60 eV)的电子与钠原子激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的 S, T, U 参数,而且是对未散射通道自旋分辨的受激 P 态($P_{1/2}$ 和 $P_{3/2}$)求加权平均,并与 10 eV 电子与钠原子散射激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的测量结果进行了比较.

1)首先分析极化函数 S_p 随着入射能增大其角分布变化的情况.当入射能为 2.2 eV 时,看不出极化函数角分布明显的变化,而且极化值近似为零.当入射能为 4 eV 时,极化函数在 45° 散射角处出现了极化的最大值,极化度约为 50%.当入射能为 8 eV 时, 45° 散射角的峰值减小到 25%,同时 100° 的散射角位置出现了一个反向的峰值,大小也在 50% 左右,在 150° 散射角处又出现正的峰值,约为 20%.当入射能为 10 eV 时,极化函数散射角分布变化幅度相应减小了,而且出现了多个小的峰值.入射能为 20 eV 的情况与 10 eV 的情况有些类似,只是极化函数峰值的散射角位置不同.入射能为 40 和 60 eV 时的极化函数很相似,都只是在 45° 散射角位置有个小的峰值,约为 10%,其他散射角的极化函数几乎为零.

2)对于非对称函数 S_a ,入射能为 2.2 eV 时,非对称函数几乎与相应入射能下的极化函数相反.入射能为 4.1 eV 时,非对称函数也是在 45° 散射角位

置有个极大值,约为 30%,同时在 135° 左右有个负的极大值,约为 25%.入射能为 8 eV 时的非对称函数出现的峰值情况与极化函数 S_p 类似,只是幅度比较小.入射能为 10 和 20 eV 时的非对称函数随散射角的变化比较接近,在 $75^\circ, 100^\circ, 140^\circ$ 和 165° 散射角位置处都有相似的峰值,而且一正一负地变化.入射能为 40 和 60 eV 时的非对称函数相近,而且与相应入射能的极化函数 S_p 相似.

3)收缩函数 T 在 2.2 eV 入射能时随散射角的变化向负值逐渐增大,在最大散射角 180° 时达到 0.25.在 4—10 eV 入射能下的散射角分布比较明显,而且都取正值,在小角度散射时 T 值比较大,然后随散射角增大而逐渐减小,在 85° 散射角附近达到最小值,大于这个散射角的三种入射能(4.1, 8 和 10 eV)下的收缩函数 T 的变化就不一致了.随着入射能的增大,收缩函数 T 就逐渐失去了变化.

4)反映散射平面内自旋分量转动的函数 U 随散射角的分布也是在较低入射能(4, 8 和 10 eV)下呈现一定的变化,随着入射能的增大,函数 U 几乎不变.

根据 NIST 小组^[14]测量 10 eV 电子与钠原子散射激发 $S \rightarrow P$ 跃迁自旋分辨的散射通道(末态为 $P_{1/2}$ 和 $P_{3/2}$)的自旋极化函数,参照(3a)式,对未散射通道自旋分辨的两种自旋极化函数求加权平均,得到了图 2 中 10 eV 入射能下的电子与钠原子散射的平均自旋极化函数,与 DWBA 的计算结果非常符合.其他入射能下相关实验测量结果还未见报道.

从以上结果可以得出,对于电子与钠原子散射激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程,当入射能比较低(4—20 eV)时,极化函数 S_p 和非对称函数 S_a 变化明显,而且存在极化和非对称特别显著的散射角;而入射能在 4—10 eV 范围内,函数 T 和函数 U 随散射角的分布变化较明显,其他能量下 T 和 U 的值几乎为零,即没有出现自旋偏转和反转的情况.关于非极化电子与非极化原子散射产生自旋极化的物理机理, Hanne^[15]曾做过半定量的分析,认为散射过程中的自旋交换效应是产生自旋极化的主要原因.考虑电子与碱金属原子散射激发,图 3 显示了散射激发后立即出现的有取向的 $L = 1$ 的原子.原子有未饱和的自旋($S = 1/2$),假设实验中观察到了 $J = 1/2$ 和 $J = 3/2$ 其中一个态的激发,如图 3(a)所示,并不是所有的原子自旋矢量都能与假定的 L 耦合产生总角动量 $J = 1/2$ 的态.要产生 $J = 1/2$ 的态,自旋矢量 S

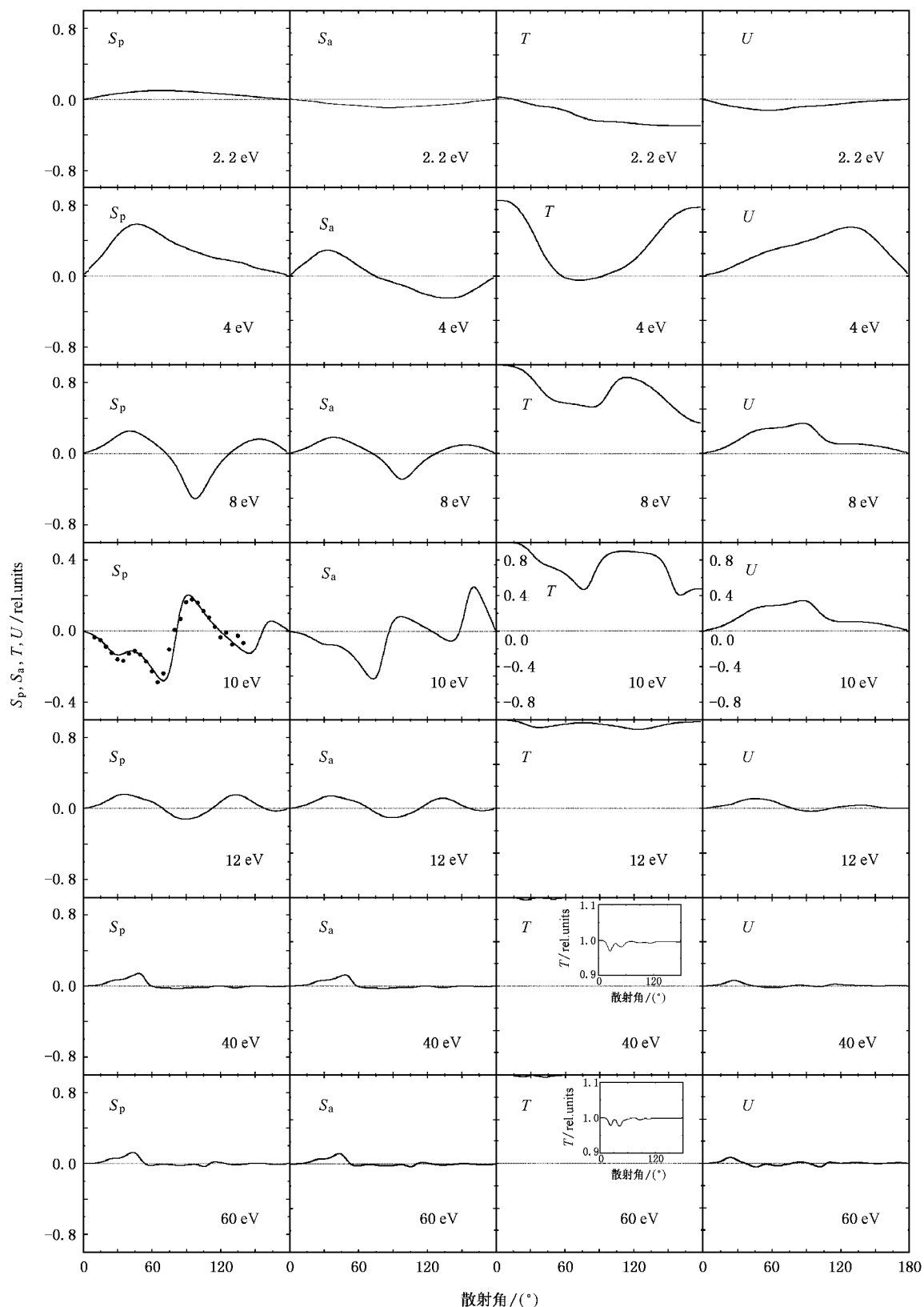


图2 不同入射能下电子与钠原子散射激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的 S, T, U 参数随散射角的分布 实线为 DWBA 计算结果, 10 eV 的 S_p 圆点为测量结果^[14]

允许的方向与 L 方向相反. 相应地, $J = 3/2$ 的态只能通过取向上与 L 平行的自旋矢量形成(图 3(b)). 尽管 S 和 L 在时间上不是常量, 它们绕 J 转动, 但是和自旋一样, 与轨道角动量取向无关的时间是可以不用考虑的. 以 $J = 1/2$ 态的散射激发为例, 如果有交换散射, 非极化电子或原子束可以看作由相对于散射平面的一半自旋向上和一半自旋向下的电子或原子组成. 无论产生原子轨道角动量取向的机制是什么, 结果是

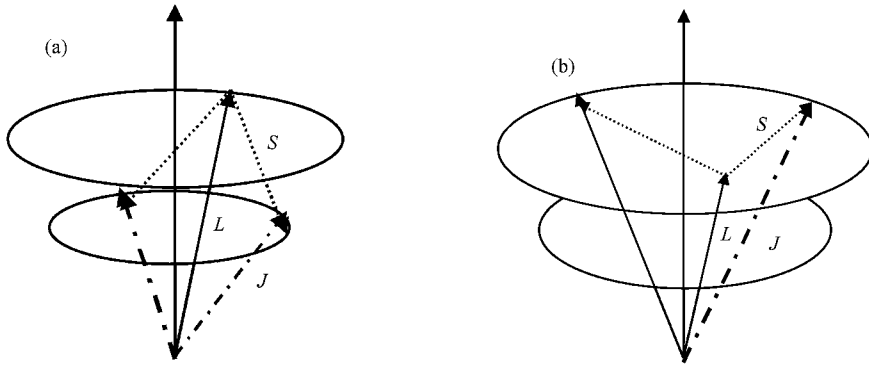


图 3 $L = 1$ 和 $S = 1/2$ 半经典矢量耦合模型 (a) 总角动量 $J = 1/2$ 的态, 自旋矢量与轨道矢量反平行 (b) 总角动量 $J = 3/2$ 的态, 自旋矢量平行于轨道矢量

5. 结 论

S, T, U 参数可以描述电子原子碰撞前后自旋状态的变化, 分析碰撞过程中电子自旋-轨道耦合以及电子-电子交换等自旋相关效应, 也可研究精细结构水平上的散射激发振幅之间可能存在的关系. 本文用 DWBA 比较系统地计算了多种入射能(2.2—60 eV)的电子与钠原子激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的 S, T, U 参数, 而且是对未散射通道自旋分辨的受激 P 态

显然的, 即两种电子都能被直接散射, 也就是没有自旋反转, 如果原子自旋初始取向向下, 就只有自旋向下的电子经历交换碰撞. 否则, 原子末态就不会有 $J = 1/2$ 态, 因此就出现了自旋极化的效应. 对于本文所讨论的钠原子 P 态, 根据角动量耦合理论和宇称守恒, 处于 $J = 1/2$ 和 $J = 3/2$ 态的比例是不一样的, 亦即耦合系数不同, 所以非自旋极化电子与非极化原子散射激发会出现自旋极化现象.

($P_{1/2}$ 和 $P_{3/2}$) 求加权平均, 并与 10 eV 电子与钠原子散射激发 $S \rightarrow P$ 跃迁过程的测量结果进行了比较. 结果表明, 用 S, T, U 参数分析散射前后自旋状态的变化比较合理, 因此可以用 S, T, U 参数来描述电子原子散射的动力学过程. 由于 S, T, U 参数实验上是可测量的, 本文也为实验提供了依据.

感谢德国 Muenster 大学 Kessler 教授、Hanne 教授和清华大学尚仁成教授的指导, 感谢庞文宁博士和丁海兵博士的有益讨论.

- [1] Bederson N 1970 *Comments At. Mol. Phys.* **2** 160
- [2] Anderson N, Hertel I V 1986 *Comments At. Mol. Phys.* **19** 1
- [3] Anderson N, Bartschat K 2001 *Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collisions* (New York: Springer)
- [4] Fan L L, Zhong Z P, Zhu L F *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 2478
- [5] Ding H B, Pang W N, Liu Y B *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 2440
- [6] Kessler J 1985 *Polarized Electrons* (2nd ed) (Berlin: Springer-Verlag)
- [7] Goersst H J, Nordbeck R P, Bartschat K 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** 2833
- [8] Hanne G F 1984 *Comments At. Mol. Phys.* **14** 163
- [9] Bartschat K 1983 *Comp. Phys. Commun.* **30** 383
- [10] Liu Y B, Pang W N, Ding H B *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3554 (in Chinese) [刘义保、庞文宁、丁海兵等 2005 物理学报 **54** 3554]
- [11] Liu Y B, Pang W N, Ding H B *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5121 (in Chinese) [刘义保、庞文宁、丁海兵等 2005 物理学报 **54** 5121]
- [12] Bartschat K 1996 *Computational Atomic Physics* (New York: Springer)
- [13] Bartschat K, Anderson N 1994 *Comp. Phys. Commun.* **84** 335
- [14] Scholten R E, Lorentz S R, McClelland J J *et al* 1991 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **24** L653
- [15] Hanne G F 1984 *Phys. Rep.* **95** 95

The S, T, U parameters study of electron scattering by sodium atom^{*}

You Yong^{1,2)} Liu Yi-Bao^{1,2,3)†} Deng Ling-Na^{1,2)} Li Qun^{1,2)}

1) *Key Laboratory of Nuclear Resources and Environment of Ministry of Education, East China Institute of Technology, Nanchang 330013, China*

2) *Department of Physics, East China Institute of Technology, Fuzhou 344000, China*

3) *Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*

(Received 30 May 2006; revised manuscript received 16 November 2006)

Abstract

The S, T, U parameters of sodium from $S \rightarrow P$ state excited by electron, which can describe the changes of spin moment before and after collision, are calculated using the distorted wave Born approach with the scattering amplitudes and phases. We analyze the S, T, U parameters under the incident electron energy from 2.2 to 60 eV. The S_p parameter better coincides with reported experiment at 10 eV incident electron energy. All results show that the distribution changes are more obvious at lower incident energy than at higher energy.

Keywords: scattering excitation, S, T, U parameters, scattering amplitude, relevant spin effects

PACC: 3450, 3480D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10574079, 10647109) and the Natural Science Foundation of Jiangxi Province, China (Grant No. 0512001).

[†] Corresponding author. E-mail: liuyb01@mails.tsinghua.edu.cn