1979 г. Апрель Том 127, вып. 4
УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

539.186.2

ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ЭЛЕКТРОННЫХ И АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

Г. Ф. Друкарев, В. Д. Объедков

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ

Один из простейших примеров поляризационных эффектов проявляется в задаче об отражении плоской электромагнитной волны от границы раздела двух сред. Электрическое поле волны характеризуется не только величиной вектора напряженности поля, но и его направлением. В силу этого картина отражения, описываемая общеизвестными формулами Френеля, является гораздо более сложной, чем, скажем, отражение продольных звуковых волн в жидкости.

Подобно этому картина рассеяния электрона силовым центром из-за наличия спина оказывается гораздо более сложной, чем картина рассеяния частицы, не обладающей спином. Рассеяние частицы без спина на силовом центре полностью характеризуется амплитудой, зависящей от угла рассеяния и энергии частицы. В отличие от этого, картина рассеяния частицы со спином характеризуется не только зависимостью от угла и энергии, но также зависимостью от проекции спина частицы на некоторое выделенное направление до и после рассеяния, т. е. описывается не одной амплитудой, а несколькими, которые образуют в совокупности матрицу относительно спиновых переменных. В дальнейшем будем называть эту матрицу амплитудной матрицей M. Так, например, при рассеянии электрона на силовом центре число различных комбинаций проекций спина электрона до и после рассеяния равно 4. Следовательно, для полного описания картины рассеяния нужны четыре амплитуды. В случае столкновения двух частиц со спином 1/2 *) число различных комбинаций проекций спина «снаряда» и мишени до и после рассеяния равно 16, так что необходимо шестнадцать амплитуд, которые образуют амплитудную матрицу размерности 4×4. Очевидно, что в общем случае столкновения частиц со спинами s_1 и s_2 амплитудная матрица имеет размерность $(2s_1 + 1)^2\,(2s_2 + 1)^2$.

Однако не все амплитуды являются независимыми. Фактически количество независимых амплитуд меньше, чем указано выше. Число таких независимых амплитуд, с помощью которых строится амплитудная матрица, устанавливается, как будет видно дальше, из простых и наглядных теоретических соображений, основанных на принципе инвариантности этой матрицы.

Для того чтобы исследовать экспериментально во всех деталях картину рассеяния частиц, обладающих спином, недостаточно одного лишь определения дифференциального эффективного сечения, основанного на регистрации попадания частиц в детектор безотносительно к проекции спина. В связи с этим встает вопрос о полном опыте, т. е. о числе и характере измерений, необходимых для определения всей совокупности параметров, характеризующих картину рассеяния. Теоретический анализ возможных экспериментов по рассеянию частиц со спином осложняется тем обстоятельством, что практически невозможно осуществить точную настройку по спину всех частиц, вылетающих из источника, т. е. невозможно создать определенное спиновое состояние всего пучка в целом в квантовомеханическом смысле слова. Можно создать лишь более или менее преимущественную ориентацию спинов частиц в пучке, что аналогично частичной поляризации пучка света в оптике.

Поляризацию пучка частиц принято характеризовать средним значением спина $\mathbf{P} = \langle \hat{\mathbf{s}} \rangle / s$ (s — максимальное значение проекции спина). Множитель $1/s$ введен для того, чтобы максимальное значение $|\mathbf{P}|$ было равно единице. $\mathbf{P}$ является псевдовектором. Для частиц со спином 1/2 это единственно возможная поляризационная характеристика. Для частиц с более высокими значениями спина существуют также тензорные величины, образованные из комбинаций спиновых операторов, имеющих тензорный характер преобразований при вращениях системы координат. Например, выстроенность для частиц со спином 1 описывается средними значениями компонент симметричного тензора второго ранга $s_{ij} = (^1/_2)\,(s_i s_j + s_j s_i) - (^2/_3)\,\delta_{ij}$. В частично поляризованном пучке не существует единой спиновой волновой функции для всех частиц. Описание такого пучка производится с помощью матрицы плотности ρ [1].

В теоретическом анализе картины рассеяния поляризованных пучков частиц можно выделить три уровня детализации:

а) *Феноменологический анализ эксперимента, т. е. установление общего вида зависимости сечения от поляризационных характеристик пучков, а также установление общей связи между поляризационными характеристиками до и после рассеяния.* Общий вид этих зависимостей устанавливается путем перебора всех возможных инвариантов, составленных из векторных

*) Здесь и далее спин выражен в долях $\hbar$.

или тензорных характеристик поляризации, относительно преобразования координат. Так, например, в нерелятивистском приближении дифференциальное сечение упругого рассеяния при столкновении частиц со спинами 1/2 имеет вид

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 (\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2), \tag{1.1}$$

где $\mathbf{P}_1$ и $\mathbf{P}_2$ — векторы поляризации пучков частиц, σ_0, σ_1 — функции угла рассеяния и энергии. При учете релятивистских эффектов появляются другие инварианты, содержащие импульсы сталкивающихся частиц. Столь же просто устанавливается и общее выражение для поляризации одного из пучков после столкновения, например, $\mathbf{P}_1'$. Поскольку из $\mathbf{P}_1$ и $\mathbf{P}_2$ можно составить три псевдовектора $\mathbf{P}_1$, $\mathbf{P}_2$, $[\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2]$, то

$$\mathbf{P}_1' = \alpha\mathbf{P}_1 + \beta\mathbf{P}_2 + \gamma\,[\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2], \tag{1.2}$$

где α, β, γ — функции угла и энергии. Для феноменологического анализа экспериментов вполне достаточно простых и общих соображений такого рода.

б) *Установление явного вида параметров, характеризующих сечение и поляризацию* (т. е. величин типа σ_0, σ_1, α,β,γ в формулах (1.1), (1.2)) *через элементы матрицы плотности* ρ *и амплитудной матрицы* M. Первая из них задает начальное спиновое состояние сталкивающихся частиц, а вторая описывает динамику столкновения. Рассмотрение основано на формулах для усредненного по спинам сечения $\sigma = \mathrm{Sp}\,(M\rho M^+)$ и среднего значения спинового оператора $\langle L \rangle = \mathrm{Sp}\,(\hat{L}M\rho M^+)/\sigma$ после рассеяния, вывод которых дан в п. б) гл. 3.

На этом уровне детализации теория является более сложной, но и здесь для многих целей оказывается достаточно использовать алгебраическую структуру амплитудной матрицы, которая устанавливается из общих и очевидных соображений инвариантности. Примеры приведены ниже.

в) *Установление связи между элементами амплитудной матрицы и видом потенциальной энергии взаимодействия частиц*. Для того чтобы проследить эту связь, уже недостаточно общих соображений инвариантности, а нужно рассматривать динамику процесса столкновения по существу. На этом уровне теория становится еще более сложной. Здесь уже необходимо формулировать уравнения для волновых функций сталкивающихся частиц и после соответствующего парциального анализа находить амплитудную матрицу рассеяния.

Разумеется, при таком последовательном подходе для сечений и поляризаций автоматически получаются выражения такого же типа, которые следуют из соображений инвариантности, однако коэффициенты в них уже выражаются через величины, характеризующие взаимодействие между частицами. Примеры таких выражений приводятся ниже.

Следует отметить, что при рассмотрении упругого рассеяния электрона на атоме поляризационные характеристики зависят лишь от полного спина атома. То обстоятельство, что полный спин атома складывается из спинов отдельных электронов, никак не сказывается на поляризационных эффектах, и в этом смысле внутренняя структура атома не проявляется. Свойства симметрии волновой функции всех электронов, участвующих в процессе,— как налетающего, так и атомных,— учитываются через зависимость амплитуды рассеяния от суммарного спина системы «атом + + электрон». Однако при рассмотрении неупругих столкновений, которы могут сопровождаться изменением спина атома, необходимо в явном виде учитывать структуру атома. Это достигается выражением амплитудной матрицы через операторы, действующие на спиновые переменные всех электронов, участвующих в переходе.

Основы теории поляризационных явлений при столкновении нуклонов были сформулированы в 50-х годах в связи с исследованиями в ядерной физике (см., например, обзор С. И. Биленького, Л. И. Лапидуса, Р. М. Рындина в УФН [2]). Однако в электронно-атомных столкновениях есть специфические особенности, требующие дальнейшего развития теории.

В результате уже первых экспериментальных и теоретических исследований, выполненных для систем сталкивающихся поляризованных электронов, обнаружился ряд обстоятельств, которые делают эксперименты с поляризованными пучками интересными и перспективными. Назовем некоторые из них.

Так, измерение асимметрии сечения при рассеянии поляризованных электронов на атомах позволяет исследовать весьма интересные и тонкие релятивистские эффекты, ускользающие от внимания в экспериментах без селекции по спинам. Далее, измерение поляризации электронов в определенных условиях может служить индикатором типа связи электронных моментов в атомах и молекулах.

С помощью поляризованных электронных пучков можно осуществить селективное заселение состояний с определенными проекциями момента при возбуждении атомов, диагностику метастабильных состояний. Поляризационные явления можно использовать для исследования структуры больших молекул, поверхностей и т. д.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ ПОЛУЧЕНИЯ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ ПУЧКОВ

а) Рассеяние электронов на бесспиновых мишенях (рассеяние Мотта)

Реальный прогресс в физике поляризованных электронов начался совсем недавно, менее десяти лет назад, когда появились достаточно интенсивные источники поляризованных электронов. Физические условия, при которых возникает поляризация свободных электронов, впервые были указаны Моттом [3,4]. Используя уравнение Дирака, Мотт показал, что электроны, упруго рассеянные на бесспиновых ядрах, приобретают поляризацию благодаря спин-орбитальному взаимодействию в сплошном спектре. Оценивая величину поляризации, возникающей при рассеянии, Мотт указал, что пока скорость электрона гораздо меньше скорости света, ожидаемая поляризация должна быть крайне малой. Это замечание стимулировало эксперименты с быстрыми электронами, которые, однако, долгое время были безрезультатными. С другой стороны, техника рассеяния низкоэнергетических электронов, развитая в дифракционных опытах и в исследованиях эффекта Рамзауэра, позволила бы обнаружить значительную поляризацию сравнительно медленных электронов (с энергией вплоть до 100 *эв*) сразу же после предсказания эффекта, если бы соответствующие эксперименты были поставлены. И только после расчетов Месси и Мора [5,6], которые показали, что поляризация должна быть значительной уже при сравнительно малых электронных скоростях, были выполнены первые эксперименты (начиная с 1949 г. [7]), которые подтвердили существование заметных поляризационных эффектов. В настоящее время рассеяние неполяризованных электронов на бесспиновых мишенях используется как источник получения ориентированных электронных пучков. Из огромного числа результатов, полученных по рассеянию Мотта, приведем наиболее характерный [8] (рис. 1). Как видно из рис. 1, поляризация является сложной функцией угла рассеяния. Картина поляризации также сложно зависит от энергии рассеяния, откуда ясно, сколь непросты задачи теоретиского расчета поляризации в реальных системах. Заметим, что максимум поляризации соответствует минимуму дифференциального сечения, что ухудшает возможности дальнейшего использования полученных электронных пучков. Однако оптимальным выбором угла рассеяния и энергии

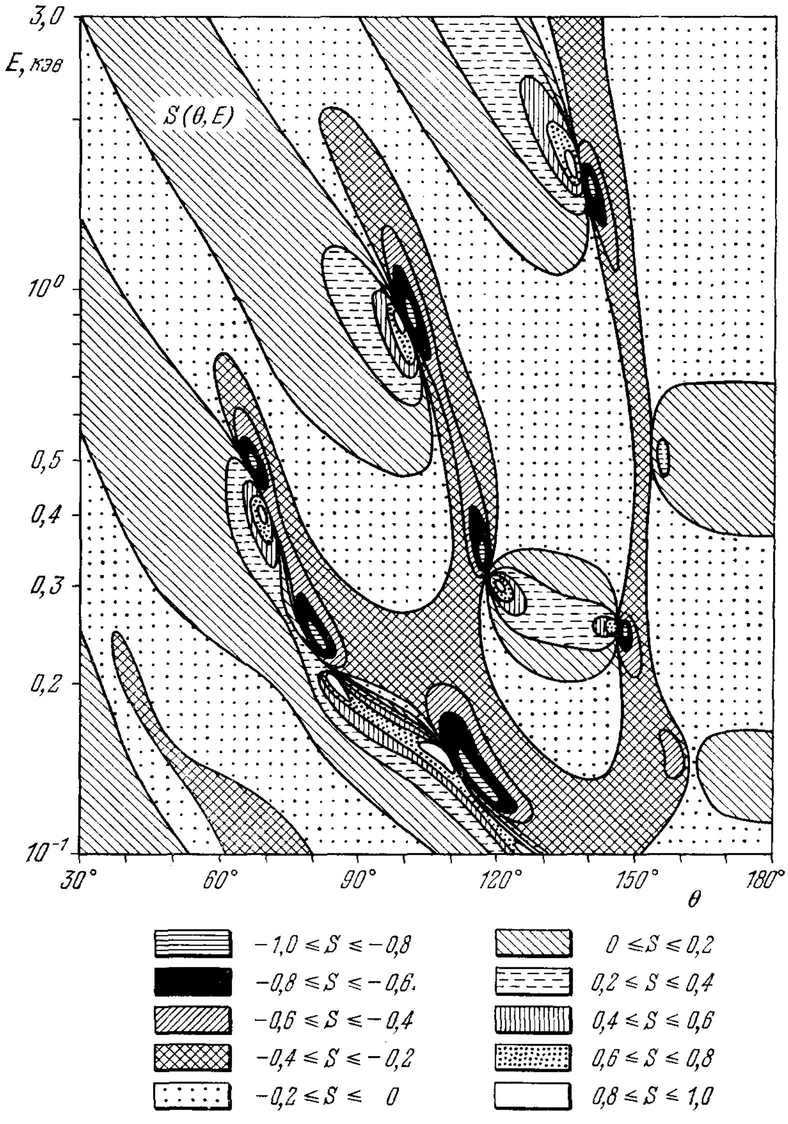

Рис. 1. Контуры поляризации $P = S(\theta, E)$ электрона, рассеянного атомом ртути [8].

столкновения можно получать поляризованные пучки, пригодные для дальнейших экспериментов. Если пользоваться в качестве количественного критерия оптимальности величиной $i = P^2 I$ (P — степень поляризации, I — ток рассеянных электронов), то достигаемое значение $i \approx 10^{-9}$ a ставит обсуждаемый процесс в число процессов средней эффективности. Наиболее полные сведения о рассеянии Мотта приведены в [8,9].

б) Фотоионизация поляризованных атомов щелочных металлов

Одна из первых идей, относящихся к образованию поляризованных электронов, была высказана в работе Фюсса и Хеллмана [10], которые предложили получать ориентированные электроны фотоионизацией поляризованных щелочных атомов.

Схема полного эксперимента сводится к получению поляризованного атомного пучка пропусканием его через неоднородное магнитное поле, после чего атомный пучок облучается ультрафиолетовым светом в присутствии магнитного поля.

Магнитное поле в фотоионизационной камере должно быть достаточно сильным ($\approx$ 400 *гс*), чтобы электронный и ядерный спины можно было считать невзаимодействующими. В противном случае электронная поляризация существенно уменьшается из-за взаимодействия с ядерным спином. Лучший результат получен в работе [11] для атома Li. Использовался импульсный источник света и получен поток электронов с максимальной интенсивностью в импульсе $2 \cdot 10^9$ и степенью поляризации 0,78. Для атомов калия $P \sim 0{,}55$[12]. В экспериментах с источниками света непрерывного действия ток падает до 10^7 *электрон/сек*.

Несмотря на принципиальную простоту метода, он оказывается в экспериментальном отношении гораздо более сложным, чем рассеяние Мотта.

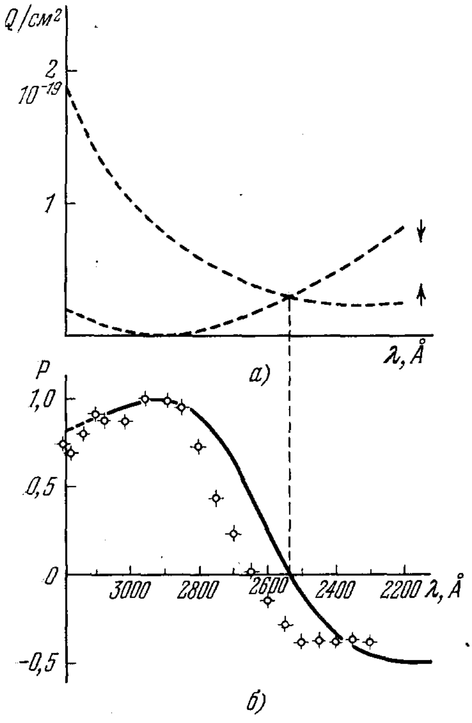

Рис. 2. Сечения $Q_{1/2}$ и $Q_{3/2}$ фотоионизации цезия (*а*) и поляризация P электронов эмиссии (*б*) [14].

в) Фотоионизация атомов поляризованным светом (эффект Фано)

Фано принадлежит оригинальная идея получения поляризованных электронов без предварительной ориентации атома [13]. На примере атома Cs Фано показал, что фотоионизация неполяризованного атома в состоянии $^2S_{1/2}$ поляризованным по кругу светом приводит к образованию поляризованных электронов благодаря спин-орбитальному взаимодействию в сплошном спектре. Согласно правилам отбора фотоэлектроны образуются в континуальных $\varepsilon^2P_{1/2}$-и $\varepsilon^2P_{3/2}$-состояниях. Волновые функции этих состояний отличаются друг от друга вследствие того, что спин-орбитальное взаимодействие имеет разные знаки при моментах $j = 1/2$ и $j = 3/2$. Поскольку сечения фотоионизации Q_j, отвечающие разным j, не равны, электронные потоки поляризованы. Ясно, что полная поляризация достигается при таких частотах света, которым соответствует нулевое значение одного из сечений $Q_{1/2}$ или $Q_{3/2}$. Описанная ситуация иллюстрируется рис. 2. На рис. 2, *а* приведены сечения, отвечающие разным направлениям спина фотоэлектронов, на рис. 2,*б* — экспериментальные данные для Cs^{14} и расчет [13]. Помимо самостоятельного значения эффект Фано представляет интерес как источник поляризованных электронов. Используя для фотоионизации импульсный лазер, в работе [15] было получено $3\times\times 10^9$ электронов на импульс со средним значением поляризации 0,9.

В ряде других работ [16–18] идея Фано или близкие ей использованы для поиска других атомных систем, кроме Cs, где поляризация фотоэлектронов могла бы быть значительной.

г) Отрыв поляризованного атомного электрона при столкновениях

Весьма перспективной представляется такая схема получения поляризованных электронов, в которой используются ориентированные атомы в метастабильных состояниях. В этих состояниях, как правило, отрыв электрона происходит с большой вероятностью, как при столкновениях с другими атомами, так и при радиационном облучении.

Наиболее разработанная экспериментальная методика ориентации атома оптической накачкой относится к гелиевой плазме [19–21]. В газовом разряде часть атомов He находится в метастабильным состоянии 2^3S_1. При воздействии поляризованным по кругу светом, соответствующим резонансной линии 1,08 *мкм*, возбуждаются магнитные подуровни $m_J = 0$, 1 и 2 состояния 2^3P_J (согласно правилу отбора $\Delta m_J = 1$). При девозбуждении этого состояния в результате обратного радиационного перехода ($\Delta m_J = 0, \pm 1$) подуровень $m_J = 1$, естественно, оказывается перезаселенным по сравнению с подуровнями $m_J = 0, -1$. Следовательно, атомы гелия в состоянии 2^3S_1 частично ориентированы. При отрыве электрона в результате столкновения с другими атомами в газе появляются свободные поляризованные электроны. К числу наиболее эффективных процессов отрыва электрона относится процесс пеннинг-ионизации ($A^* + B \rightarrow A + B^+ + e$), сопровождаемый ионизацией атома.

Сечение отрыва электрона при пеннинг-ионизации имеет порядок 10^{-14} *см*^{2} для оптически разрешенных переходов и остается порядка газокинетического, если возбужденный атом находится в метастабильном состоянии. Специальным подбором партнеров можно добиться полной передачи приготовленной атомной поляризации свободному электрону. Подобный путь получения поляризованных электронов был использован в [22], где атомы He (2^3S_1), ориентированные оптической накачкой, приводили к ионизации атомов Cd или Zn в результате процесса

$$\mathrm{He}\,(2^3S_1) + \mathrm{Cd} \rightarrow \mathrm{He}\,(1^1S_0) + \mathrm{Cd}^+ + e.$$

Как показано в [23], начальная поляризация атома полностью передается ионизированному электрону. Без сомнения, можно подобрать многие другие процессы, в которых происходит отрыв атомного электрона без деполяризации. Назовем только один из таких возможных процессов [24]:

$$\mathrm{He}\,(2^1S_0) + \mathrm{Cs}\,(^2S_{1/2}) \rightarrow \mathrm{He}\,(1^1S_0) + \mathrm{Cs}^+ + e.$$

В этом процессе ориентированный атом находится в основном состоянии что позволяет значительно увеличить интенсивность тока поляризованных электронов по сравнению с обычной схемой эксперимента, когда вначале ориентирован возбужденный атом. В связи с высказанной идеей о пеннинг-ионизации ориентированных атомов в основном состоянии отметим особо процесс, который предоставляет возможность получения высокополяризованных электронов почти нулевой энергии [24]:

$$O(^1S_0) + Cs(^2S_{1/2}) \to O(^3P_0) + Cs^+ + e.$$

Дефект резонанса составляет $\Delta E = 2169$ *см*$^{-1}$.

Представляет интерес также реакция

$$O(^1S_0) + Rb(^2S_{1/2}) \to O(^3P_0) + Rb^+ + e,$$

в которой достигается почти точный резонанс ($\Delta E = -115$ *см*$^{-1}$), но отрыв электрона происходит вследствие пересечения уровней.

д) Обменная спиновая поляризация

Бёрк и Шей [25] впервые обратили внимание на возможность получения поляризованных электронов в результате упругого рассеяния первоначально неполяризованных электронов на ориентированных одноэлектронных атомах. В этом случае механизмом поляризации, очевидно,

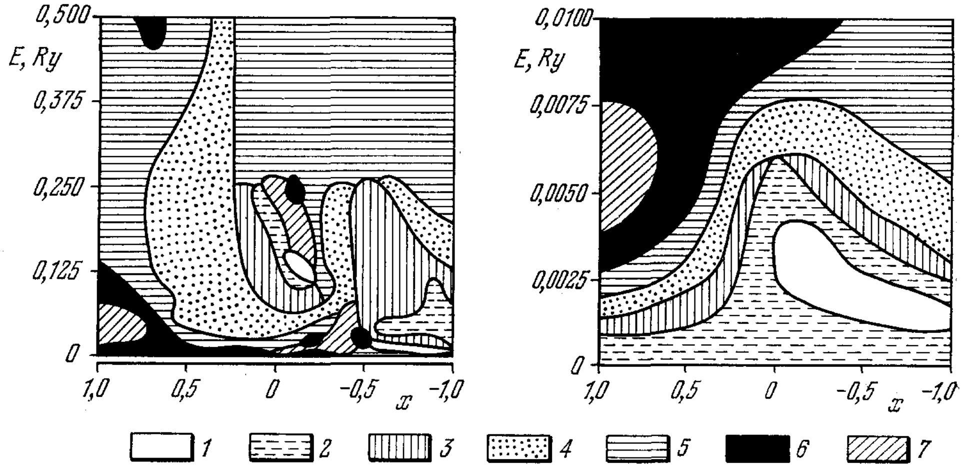

Рис. 3. Картина спиновой поляризации электронов, рассеянных на атомах рубидия [27]. $1 - 0{,}8 \leqslant P \leqslant 1{,}0$, $2 - 0{,}6 \leqslant P \leqslant 0{,}8$, $3 - 0{,}4 \leqslant P \leqslant 0{,}6$, $4 - 0{,}2 \leqslant P \leqslant 0{,}4$, $5 - 0 \leqslant P \leqslant 0{,}2$, 6: $-0{,}1 \leqslant P \leqslant 0$, 7: $-0{,}3 \leqslant P \leqslant -0{,}1$.

является обменное рассеяние электрона на атоме, в результате которого приготовленная атомная поляризация передается свободным электронам. Столь же очевидно, что при рассеянии поляризованных электронов на атоме в результате обменного рассеяния мишень становится частично поляризованной, а рассеянные электроны — деполяризованными. Величина обменной спиновой поляризации даже в случае простейших двухэлектронных систем настолько неявно зависит от взаимодействия в конкретной атомной системе, что заранее невозможно с определенностью предсказать область значительной поляризации. Поэтому в последние годы были выполнены численные расчеты поляризации при рассеянии электрона на атомах щелочных металлов [26, 27]. Один из характерных результатов приведен на рис. 3,4.

В общем случае необходимо отметить, что максимум поляризации рассеянных электронов соответствует таким условиям столкновения, когда дифференциальное сечение близко к своему минимальному значению [28].

Это обстоятельство приводит к потоку довольно низкой интенсивности. В эксперименте [29] была достигнута величина $P \sim 0{,}5$ при среднем токе $I \sim 10^{-13}$ a. Типичные величины i в интервале 10^{-14} — $5 \cdot 10^{-12}$ a относятся

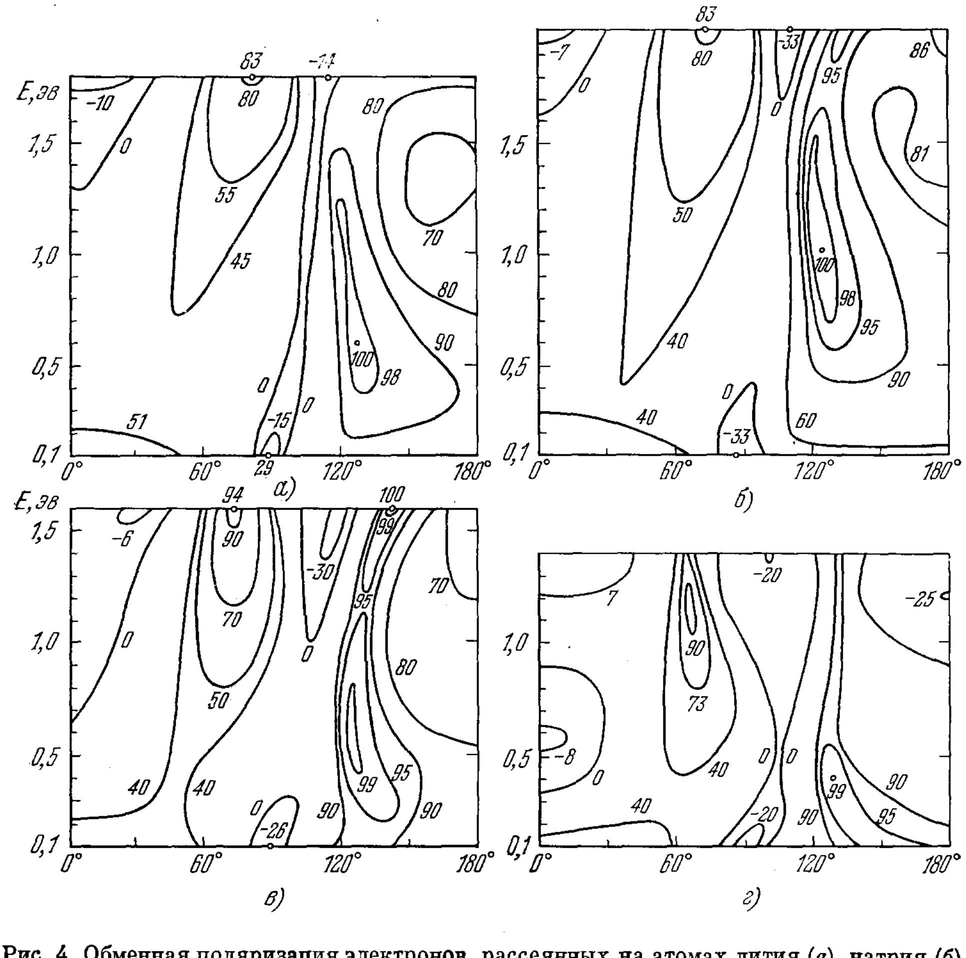

Рис. 4. Обменная поляризация электронов, рассеянных на атомах лития (*а*), натрия (*б*), калия (*в*) и цезия (*г*) как функция энергии электрона и угла рассеяния [26].

скорее к низким значениям эффективности обменного рассеяния как источника поляризованных электронов.

е) Низкоэнергетическая электронная дифракция на поверхности

В теоретических работах [30, 31] была предсказана спиновая поляризация электронов, отраженных от поверхности твердых тел. При дифракции на поверхности эффект определяется совокупным действием ряда факторов, которые отсутствуют при рассеянии на свободных атомах, где результат определяется одним атомным полем. К числу таких факторов в первую очередь относятся периодичность кристаллической решетки, поверхностный потенциальный барьер и многократное рассеяние. Первые экспериментальные результаты подтверждают существование эффекта [32].

ж) Многофотонная ионизация

В работах [33-35] приведены примеры многофотонной ионизации атома поляризованным лазерным светом, когда электроны эмиссии оказываются поляризованными. Например, для атома в основном $P_{1/2}$-состоянии можно подобрать такой квант, чтобы при первом поглощении возбуждалось промежуточное атомное $S_{1/2}$-состояние. Поскольку в таком состоянии m_J равно m_s и в силу правил перехода возбуждаются только подуровни с $m_s = 1/2$, все возбужденные атомы оказываются полностью поляризованными. При поглощении второго кванта эти электроны ионизируются. Экспериментальное исследование этого эффекта начато в [36] на Na и в [37] на Cs.

з) Эмиссия электронов из магнитных материалов

Идея получения поляризованных электронов из ферромагнетиков представляется одной из наиболее очевидных. Однако реальный прогресс в этом направлении начался лишь в последние годы в связи с улучшением криогенной вакуумной техники. Экспериментальный образец (игла) охлаждается и подвергается воздействию сильного электрического поля или ультрафиолетового света. При сравнительно интенсивных потоках степень поляризации оказывается достаточно высокой, порядка 0,5 [38, 39].

3. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ 1/2 НА МИШЕНЯХ СО СПИНОМ 1/2

а) Амплитудная матрица

Будем рассматривать рассеяние электрона на мишени со спином 1/2, например на атоме с одним электроном вне замкнутой оболочки, и для краткости будем называть такую систему двухэлектронной. Как отмечалось во введении, имеется 16 возможных амплитуд, отличающихся значениями проекций спинов двух электронов. Однако не все из них независимы. Нахождение числа независимых амплитуд эквивалентно установлению алгебраической структуры амплитудной матрицы. Эта структура находится из общих требований инвариантности M-матрицы. Последнее означает, что поскольку амплитудная матрица является скалярной величиной, она может включать векторные характеристики системы только в таких комбинациях, которые остаются инвариантными относительно сдвига, вращения и инверсии координат и обращения времени. Единственными векторами в обсуждаемой двухэлектронной системе являются спиновые векторы σ_1 и σ_2 Паули и волновые векторы $\mathbf{k}$ и $\mathbf{k}'$ налетающего электрона до и после рассеяния. Из волновых векторов построим три взаимно ортогональных единичных вектора

$$\mathbf{n}=\frac{[\mathbf{k}\mathbf{k}']}{|[\mathbf{k}\mathbf{k}']|},\qquad \mathbf{p}=\frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}+\mathbf{k}'|},\qquad \mathbf{q}=\frac{\mathbf{k}-\mathbf{k}'}{|\mathbf{k}-\mathbf{k}'|},\tag{3.1}$$

первый из которых направлен по нормали к плоскости рассеяния. Учтем также, что в силу известных свойств матриц Паули достаточно рассмотреть лишь инварианты, содержащие σ_1 и σ_2 в степени не выше первой. Теперь несложно выписать все инварианты, составленные из введенных векторов.

Поскольку при пространственном отражении

$$\mathbf{n} \to \mathbf{n}, \quad \mathbf{p} \to -\mathbf{p}, \quad \mathbf{q} \to -\mathbf{q}, \quad \boldsymbol{\sigma}_1 \to \boldsymbol{\sigma}_1, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 \to \boldsymbol{\sigma}_2,$$

а при обращении времени

$$\mathbf{n} \to -\mathbf{n}, \quad \mathbf{p} \to -\mathbf{p}, \quad \mathbf{q} \to \mathbf{q}, \quad \boldsymbol{\sigma}_1 \to -\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2 \to -\boldsymbol{\sigma}_2,$$

можно образовать только семь инвариантов

$$I, \quad \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2, \quad \boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}, \quad (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}), \quad (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{p}), \quad (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{q})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{q}). \tag{3.2}$$

Далее, в силу соотношения

$$\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 = (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}) + (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{p}_1) + (\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{q})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{q}) \tag{3.3}$$

из составленных инвариантов независимыми являются только шесть. Отсюда следует искомый результат, а именно, тот факт, что алгебраическая структура амплитудной матрицы имеет вид

$$M = a_1 I + a_2(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n}) + a_3(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}) + a_4(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}) + \\ + a_5(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{p}) + a_6(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{q})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{q}). \tag{3.4}$$

Более подробно следовало бы вместо $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$ писать $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_1 = \boldsymbol{\sigma}_1 \otimes I$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_2 = I \otimes \otimes \boldsymbol{\sigma}_2$, где $\otimes$ — знак прямого произведения, однако в дальнейшем мы не будем употреблять такой развернутой записи.

В формуле (3.4) коэффициенты $a_1, \ldots, a_6$ играют роль амплитуд рассеяния, число которых, таким образом, оказывается равным шести. Эти амплитуды описывают все возможные процессы, которые имеют место при рассеянии электрона на мишени со спином 1/2, и, в частности, они включают в себя также релятивистское рассеяние, которое существует наряду с потенциальным.

Здесь важно подчеркнуть, что знание амплитудной матрицы в форме (3.4) достаточно для многих целей теоретического анализа, например, как будет показано ниже, для исследования асимметрии рассеяния. Однако ясно также, что установление явного вида амплитуд $a_1, \ldots, a_6$, их связи с типом взаимодействия и их полная интерпретация может быть достигнута только в результате парциального анализа. Результаты такого анализа и явный вид амплитуд $a_1, \ldots, a_6$ можно найти в [40], мы же ограничимся указанием физического смысла этих амплитуд. Предварительно удобно переписать (3.4) в виде

$$M = a_1 I + a_2'(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{n} + a_2''(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{n} + \\ + a_4(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{n})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{n}) + a_5(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{p}) + a_6(\boldsymbol{\sigma}_1\mathbf{q})(\boldsymbol{\sigma}_2\mathbf{q}). \tag{3.5}$$

Пользуясь свойствами операторов $(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{n}$ и $(\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{n}$, можно установить, что амплитуда a_2' соответствует спин-орбитальному взаимодействию в системе, которое сохраняет полный спин, в то время как a_2'' представляет все взаимодействия, не сохраняющие полный спин двух электронов. Амплитуды a_4, a_5, a_6 описывают рассеяние, сопровождающееся изменением проекции полного спина в результате релятивистских взаимодействий в системе. При отсутствии релятивистских взаимодействий амплитуды a_2', a_2'' обращаются в нуль, а в амплитудах a_4, a_5, a_6 сохраняется только та часть, которая описывает рассеяние с сохранением проекции спина частиц. В результате M-матрица редуцируется к виду

$$M = aI + b\boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2, \tag{3.6}$$

где амплитуды a, b можно связать с обычными амплитудами прямого и обменного рассеяний (см. (3.4)). Далее, если релятивистское взаимодействие может быть представлено как спин-орбитальное $(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_2)\mathbf{L}$, M-матрица представляется выражением

$$M = aI + b\sigma_1\sigma_2 + h(\sigma_1 + \sigma_2)\,\mathbf{n}. \tag{3.7}$$

Заметим, что операторная форма записи для M при желании может быть заменена матричной. Последняя, однако, зависит от выбора оси квантования, и поэтому операторная форма является более удобной для общих исследований. Идеи, сходные с использованными выше, используются в следующих разделах для построения амплитудных матриц в других системах.

б) Матрица плотности конечного состояния

Приведем вывод основной формулы, используемой в расчетах сечения и поляризационных характеристик при столкновениях ориентированных частиц.

Пусть частица со спином s_1 сталкивается с мишенью, обладающей спином s_2. Процесс рассеяния описывается амплитудной матрицей, элементы которой обозначим через $\langle m_1'm_2' \mid M \mid m_1m_2 \rangle$. Здесь m_1, m_2 — проекции спинов сталкивающихся частиц на некоторое фиксированное направление в начальном состоянии, m_1', m_2' — проекции спинов в конечном состоянии, M — оператор, действующий на спиновые переменные и зависящий от угла рассеяния и энергии столкновения. Дифференциальное сечение σ, просуммированное по проекциям спинов в конечном состоянии и усредненное по спинам в начальном состоянии, равно

$$\sigma = \sum_{m_1',\, m_2'} \overline{\langle m_1'm_2' \mid M \mid m_1m_2\rangle^* \langle m_1'm_2' \mid M \mid m_1m_2\rangle} \tag{3.8}$$

(черта означает усреднение). По определению эрмитова сопряжения

$$\langle m_1'm_2' \mid M \mid m_1m_2\rangle^* = \langle m_1m_2 \mid M^+ \mid m_1'm_2'\rangle.$$

Подставив это в (3.8), мы можем выполнить суммирование по $m_1'm_2'$ (пользуясь правилом умножения матриц), после чего получится

$$\sigma = \overline{\langle m_1m_2 \mid M^+M \mid m_1m_2\rangle}. \tag{3.9}$$

Для того чтобы выполнить усреднение по значениям m_1m_2, нам необходимо знать вероятность различных значений спиновых проекций в начальном состоянии.

Следует иметь в виду, что пучок частиц, обладающих некоторой поляризацией, вообще говоря, не описывается какой-либо определенной волновой функцией, а описывается более общей величиной — матрицей плотности ρ. Подробное изложение описания состояний с помощью матрицы плотности содержится в известной статье У. Фано [1].

Необходимые вероятности даются диагональными элементами матрицы плотности $\langle m_1m_2 \mid \rho \mid m_1m_2 \rangle$. С помощью этих величин усредненное сечение выражается формулой

$$\sigma = \sum_{m_1,\, m_2} \langle m_1m_2 \mid \rho \mid m_1m_2\rangle \langle m_1m_2 \mid M^+M \mid m_1m_2\rangle, \tag{3.10}$$

т. е. фактически сводится к сумме диагональных элементов произведения ρ и M^+M:

$$\sigma = \mathrm{Sp}\,(\rho M M^+) = \mathrm{Sp}\,(M\rho M^+). \tag{3.11}$$

Заметим, что выражение $\rho' = M\rho M^+$ можно рассматривать как матрицу плотности после столкновения. Исходя из этого, среднее значение любой величины L после столкновения можно найти по формуле

$$\langle L\rangle = \frac{\mathrm{Sp}\,(\hat{L}\rho')}{\sigma}. \qquad (3.12)$$

Закончим этот раздел формулами для сечения рассеяния и поляризации рассеянного электрона, которые понадобятся ниже. Вычисление основано на формулах (3.11), (3.12) с матрицей M в виде (3.4) и матрицей плотности ρ в виде

$$\rho = \frac{1}{4}\left(I + \sum_{\alpha} P_{1\alpha}\sigma_{1\alpha} + \sum_{\alpha} P_{2\alpha}\sigma_{2\alpha} + \sum_{\alpha,\alpha'} Q_{\alpha\alpha'}\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha'}\right), \qquad (3.13)$$

где $P_{1\alpha}$, $P_{2\alpha}$ — начальные поляризации электронов, элементы $Q_{\alpha\alpha'}$ образуют матрицу спиновых корреляций электронов в направлениях α и α' соответственно. Для дифференциального сечения получаем

$$\sigma = \sigma_0\left[1 + \mathbf{P}_1^0(\mathbf{P}_1\mathbf{n}) + \mathbf{P}_2^0(\mathbf{P}_2\mathbf{n}) + \sum_{\alpha\alpha'} P_{1\alpha}P_{2\alpha'}C_{\alpha\alpha'}\right]; \qquad (3.14)$$

здесь σ_0 — сечение рассеяния неполяризованных электронов на неполяризованных атомах, P_1^0, P_2^0 — поляризации электронов и атомов, возникающие при рассеянии неполяризованных частиц; $C_{\alpha\alpha'}$ — тензор, составленный из $a_1, \ldots, a_6$. Перейдем к рассмотрению поляризации после рассеяния. Для компоненты поляризации электронов, рассеянных в первоначально неориентированной системе, получаем

$$P'_{2\alpha} = P_2^0\delta_{\alpha n}. \qquad (3.15)$$

В случае произвольной начальной поляризации формулы для $P'_{1\alpha}$, $P'_{2\alpha}$ можно найти в [40]

в) Асимметрия сечения и спиновая поляризация

На основании соотношений (3.14), (3.15) Фараго предложил простой путь изучения релятивистских эффектов в рассеянии при низких энергиях [41]. Идея основана на том факте, что при рассеянии неполяризованных электронов ориентированными атомами должна возникать азимутальная (лево-правая) асимметрия сечения в том случае, если имеется интерференция между потенциальным и релятивистским взаимодействиями. Действительно, из (3.14) следует, что асимметрия, определенная как

$$A = \frac{\sigma(\theta) - \sigma(-\theta)}{\sigma(\theta) + \sigma(-\theta)}, \qquad (3.16)$$

равна (при $P_2 = 0$, $P_1 \neq 0$)

$$A = P_1^0(\mathbf{P}_1\mathbf{n}) \equiv A'(\mathbf{P}_1\mathbf{n}), \qquad (3.17)$$

или в явном виде через амплитуды

$$A' = \frac{2\,\mathrm{Re}\,(a_1 a_2^* + a_3 a_4^*)}{\sigma_0}. \qquad (3.18)$$

Выражение для P_2^0 имеет вид

$$P_2^0 = \frac{2\,\mathrm{Re}\,(a_1 a_3^* + a_2 a_4^*)}{\sigma_0}. \qquad (3.19)$$

В работе [42] установлена точная связь между асимметрией сечения рассеяния и поляризацией, которую приобретает электрон при рассеянии в первоначально неориентированной системе благодаря релятивистским взаимодействиям, не сохраняющим полный спин или проекцию спина. Вводя амплитуды $a_2' = a_2 + a_3$ и $a_2'' = a_2 - a_3$, можно определить поляризацию

$$P_c = \frac{2\,\mathrm{Re}\,(a_1 a_2'^* + a_1' a_4^*)}{\sigma_0}, \tag{3.20}$$

возникающую в системе благодаря взаимодействиям, сохраняющим полный спин системы (но не сохраняющим его проекцию), и поляризацию

$$P_n = \frac{2\,\mathrm{Re}\,(a_2'' a_4^* - a_1 a_2''^*)}{\sigma_0}, \tag{3.21}$$

возникающую вследствие процессов, нарушающих полный спин двухэлектронной системы во внешнем поле. Согласно (3.19) полная приобретенная поляризация есть $P_2^0 = P_c + P_n$. Из (3.18) при этом следует, что асимметрия равна

$$A' = P_c - P_n. \tag{3.22}$$

Из этого соотношения следует важный результат, что при всех взаимодействиях, сохраняющих полный спин, асимметрия должна совпадать с поляризацией. Поэтому измерение асимметрии в ориентированной системе есть альтернатива для детектирования поляризации, приобретаемой электроном в неориентированной системе. Ясно, что при подходящих условиях отмеченое равенство может служить принципиальной основой для устройства детектора поляризации в двухэлектронных системах. В работе [43] вычислены поляризация и асимметрия в системе «электрон + + атом цезия» путем решения уравнения Дирака с релятивистским хартри-фоковским потенциалом для Cs и межэлектронным взаимодействием в форме Брейта.

Из численных результатов при $E = 1{,}427$ *эв* следует практически полное совпадение асимметрии и поляризации, причем величина A' достигает в максимуме значения —0,587! С ростом энергии асимметрия начинает исчезать, в то время как поляризация имеет заметные значения. С точки зрения проведенного анализа (формула (3.22)) это означает, что процессы, сохраняющие спин и нарушающие его, приобретают сравнимое значение. Поэтому можно сказать также, что измерение асимметрии и поляризации может быть использовано для анализа роли взаимодействий при столкновениях. Важно отметить при этом, что измерение асимметрии выполняется в однократном опыте по рассеянию, что может быть сделано без значительных экспериментальных трудностей.

Идею Фараго можно дополнить предложением измерения асимметрии *в рассеянии поляризованных электронов на неполяризованных атомах*. Согласно (3.14) в этом случае должна возникать асимметрия

$$A = P_2^0\,(\mathbf{P}_2\mathbf{n}) \equiv A'\,(\mathbf{P}_2\mathbf{n}), \tag{3.23}$$

которая в точности совпадает с поляризацией электрона после рассеяния в неориентированной системе. Оба типа экспериментов, когда вначале поляризован только один из двух электронов, представляют принципиальную возможность определения поляризации P_n, возникающей вследствие несохранения полного спина в системе. Совершенно ясно, что такая поляризация специфична для многоэлектронных систем и отличается принципиально от механизма поляризации, рассмотренного Моттом и хорошо известного в ядерной физике.

г) Рассеяние в случае взаимодействия, зависящего от спина

Конкретизируем дальнейший анализ, считая, что наряду с центральным полем существует спин-орбитальное взаимодействие в сплошном спектре. Потенциал взаимодействия можно представить в форме

$$v = v_1(r) + \frac{1}{2} v_2(r)(\sigma_1 + \sigma_2)\mathbf{L} = v_1(r) + v_2 \mathbf{SL}, \tag{3.24}$$

где $\mathbf{L}$ — оператор орбитального момента. Рассматриваемое взаимодействие сохраняет моменты S^2 и L^2, но не сохраняет проекции моментов. Для нахождения амплитудной матрицы, отвечающей этому типу взаимодействия, нужно выполнить парциальный анализ для отделения угловых и спиновых переменных в уравнении рассеяния. Эта процедура выполняется стандартным образом и приводит к следующему результату для оператора M:

$$M = \frac{1}{4}(3F + G) I + \frac{1}{4}(F - G)\sigma_1\sigma_2 + H\mathbf{Sn}; \tag{3.25}$$

здесь G, F — амплитуды рассеяния в синглетном и триплетном состояниях соответственно и H — амплитуда, обязанная своим происхождением спин-орбитальному взаимодействию. Из сравнения с (3.4) видно, что (3.25) получается из общего выражения при $a_2 = a_3$, $a_4 = a_5 = a_6$, однако этот количественный результат, как отмечалось выше, уже не может быть получен из принципа инвариантности, а следует из парциального анализа для конкретного взаимодействия. Видно также, что амплитуда a_2'', описывающая процессы с нарушением полного спина, обращается в нуль, как и должно быть, поскольку v сохраняет полный спин.

Вместо амплитуд G и F, описывающих рассеяние в представлении полных моментов, можно естественным образом ввести две другие амплитуды на основании следующих соображений. Составляя матричные элементы от M для разных спиновых состояний, находим, в частности (α и β — спиноры с положительной и отрицательной проекцией на ось квантования),

$$\begin{aligned} \langle \alpha_1\beta_2 | M | \alpha_1\beta_2 \rangle &= \frac{1}{2}(G + F) \equiv f, \\ \langle \alpha_2\beta_1 | M | \alpha_1\beta_2 \rangle &= \frac{1}{2}(G - F) \equiv g. \end{aligned} \tag{3.26}$$

Отсюда следует, что амплитуды f и g, определенные выше, можно интерпретировать как амплитуды прямого и обменного рассеяния. Совершенно аналогичным образом можно установить, что амплитуда H описывает рассеяние в триплетном состоянии с изменением проекции полного спина. Действительно, обозначая через χ_{1M_S} спиновые функции триплетных состояний, после вычислений находим

$$\langle \chi_{11} | M | \chi_{10} \rangle = \sqrt{2}\, i e^{i\varphi} H. \tag{3.27}$$

Для сравнения отметим, что при рассеянии электрона на бесспиновой мишени амплитудная матрица имеет вид

$$M = m + h\sigma\mathbf{n}, \tag{3.28}$$

и что соотношение $\langle \beta | M | \alpha \rangle = i e^{i\varphi} h$ позволяет интерпретировать h как амплитуду переворота спина. Таким образом, спин-орбитальное взаимодействие в двухэлектронных системах поворачивает спин, тогда как в одноэлектронных — опрокидывает его (известное явление spin-flip).

Обратим внимание также, что оператор M можно переписать иначе с помощью синглетного и триплетного операторов проектирования:

$$\hat{\Pi}_0 = \frac{1}{4}(I - \sigma_1\sigma_2), \quad \hat{\Pi}_1 = \frac{1}{4}(3I + \sigma_1\sigma_2). \tag{3.29}$$

Получаем

$$M = G\hat{\Pi}_0 + F\hat{\Pi}_1 + H\mathbf{Sn}. \tag{3.30}$$

Структура этого выражения в отсутствие спин-орбитального взаимодействия ($H = 0$) дает рецепт построения оператора M для сталкивающихся частиц с произвольным спином, а именно, $M = \sum G_S\hat{\Pi}_S$, где $\hat{\Pi}_S$ — проекционные операторы на состояния с полным спином S и G_S — амплитуды рассеяния в этих спиновых состояниях. Закончим этот раздел вычислением асимметрии сечения, вызванной взаимодействием, зависящем от спина. Если до столкновения одна из частиц была поляризована, то сечение рассеяния равно

$$\sigma = \frac{1}{4}(3F\bar{F} + G\bar{G}) + 2H\bar{H} + (\bar{F}H + F\bar{H})\,\mathbf{P}_1\mathbf{n} \equiv \sigma_0(\theta) + S(\theta)\,\mathbf{P}_1\mathbf{n}. \tag{3.31}$$

Отсюда для асимметрии находим

$$A = \frac{S(\theta)}{\sigma_0(\theta)}\,\mathbf{P}_1\mathbf{n} \equiv A'\mathbf{P}_1\mathbf{n}. \tag{3.32}$$

Из этого результата видно, что ненулевая асимметрия возникает вследствие интерференции потенциального рассеяния в триплетном состоянии с рассеянием, вызванным спин-орбитальным взаимодействием. Поэтому эксперименты по нахождению асимметрии являются прямым тестом на примесь взаимодействий, отличных от центрального.

Вычисляя поляризацию электрона после рассеяния в неориентированной системе, находим, что

$$\mathbf{P}_1 = \frac{\mathbf{n}S(\theta)}{\sigma_0(\theta)}. \tag{3.33}$$

Из сравнения двух последних результатов находим, что $A' = P'$ в согласии с общим соотношением (3.22) для взаимодействий, сохраняющих полный спин ($P_n = 0$).

д) Обменная поляризация

При низких энергиях, когда спин-орбитальным взаимодействием можно пренебречь, в первоначально ориентированной системе изменение поляризации происходит благодаря обменному рассеянию. Действительно, обменное рассеяние в двухэлектронной системе приводит к замене «атомный электрон $\rightleftarrows$ свободный». По этой причине неполяризованный электронный пучок становится частично поляризованным при рассеянии на ориентированном атоме, в то время как атом деполяризуется. Аналогично возникает поляризация атома при столкновении с поляризованным пучком электронов. В общем случае, когда оба электрона предварительно ориентированы, происходит обменное перераспределение этой поляризации. Обсуждаемая поляризация называется обменной. Это название подчеркивает также тот факт, что поляризационные эффекты являются следствием принципа Паули и не связаны со спиновой зависимостью взаимодействия.

Количественная теория обменной поляризации основана на амплитудной матрице вида

$$M = G\hat{\Pi}_0 + F\hat{\Pi}_1, \tag{3.34}$$

и спиновой матрице плотности в форме (3.13). Из расчетов, которые впервые были выполнены в [25], для сечения рассеяния и поляризаций электронов следуют формулы:

$$\left.\begin{aligned} \sigma P'_e &= n(\theta) P_e + p(\theta) P_a + iq(\theta)[\mathbf{P}_e\mathbf{P}_a], \\ \sigma P'_a &= n(\theta) P_a + p(\theta) P_e - iq(\theta)[\mathbf{P}_e\mathbf{P}_a], \\ \sigma &= \sigma_0(\theta) + m(\theta)(\mathbf{P}_e\mathbf{P}_a), \end{aligned}\right\} \tag{3.35}$$

где

$$\left.\begin{aligned} n(\theta) &= \frac{1}{4}(2F\bar{F} + \bar{F}G + F\bar{G}), \\ p(\theta) &= \frac{1}{4}(2F\bar{F} - \bar{F}G - F\bar{G}), \\ q(\theta) &= \frac{1}{4}(\bar{F}G - F\bar{G}), \\ \sigma_0(\theta) &= \frac{1}{4}(3F\bar{F} + G\bar{G}), \\ m(\theta) &= \frac{1}{4}(F\bar{F} - G\bar{G}). \end{aligned}\right\} \tag{3.36}$$

Очевидно, что в неориентированной системе ($P_e = P_a = 0$) обменное взаимодействие не создает поляризации.

Новый аспект в физике атомных столкновений, связанный с использованием поляризованных электронов, заключается в том, что такие опыты позволяют разделить прямое и обменное рассеяние и найти $|f|$, $|g|$ и разность фаз этих амплитуд. С этой целью достаточно найти из эксперимента сечение рассеяния в неориентированной системе:

$$\sigma_0(\theta) = \frac{1}{2}(f\bar{f} + g\bar{g}) + \frac{1}{2}|f - g|^2, \tag{3.37}$$

и измерить $\sigma_d = f\bar{f}$ и $\sigma_{ex} = g\bar{g}$.

Опыт по нахождению σ_0 является традиционным, а для нахождения σ_d и σ_{ex} необходимо измерение деполяризации электронов, рассеянных на неориентированной мишени, и измерение возникшей поляризации P'_a мишени.

Убедимся в этом. Из (3.35) при $P_a = 0$ следует

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_0(\theta) P'_e}{P_e} &= n(\theta) = |f|^2 - \frac{1}{2}(\bar{f}g + f\bar{g}), \\ \frac{\sigma_0(\theta) P'_a}{P_e} &= p(\theta) = |g|^2 - \frac{1}{2}(\bar{f}g + f\bar{g}). \end{aligned} \tag{3.38}$$

Из этих соотношений получаем

$$\begin{aligned} |g|^2 &= \sigma_0\left(1 - \frac{P'_e}{P_e}\right) = \sigma_{ex}, \\ |f|^2 &= \sigma_0\left(1 - \frac{P'_a}{P_e}\right) = \sigma_d, \end{aligned} \tag{3.39}$$

что и доказывает сделанные выше утверждения. Измерение трех сечений указанным образом позволяет определить $|f|^2$, $|g|^2$ и $|f - g|^2$, что в свою очередь означает восстановление трех из четырех параметров комплексных величин $f = |f| e^{i\varphi}$ и $g = |g| e^{i\phi}$, а именно,

$$|f|, \ |g|, \ \cos(\varphi - \phi) = \frac{|f|^2 + |g|^2 - |f - g|^2}{2|f||g|}. \tag{3.40}$$

Систематические расчеты обменной поляризации $P_e' = p(\theta)/\sigma_0(\theta)$ при рассеянии на атомах Li, Na, K, Cs в приближении сильной связи выполнены в [26]. Результаты приведены на рис. 4.

Из этих расчетов следует одно интересное обстоятельство. Именно, энергия E_c, при которой достигается полная поляризация $P_e' = P_a$, связана с атомным номером соотношением $E_c \approx \mathrm{const} \cdot Z$.

Доказательство этого соотношения в общем виде отсутствует.

4. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ В ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЯХ НА БЕССПИНОВЫХ МИШЕНЯХ

Начальное спиновое состояние частиц со спином $S = 1$ характеризуется векторной и тензорной поляризациями, которые определяются величинами

$$\begin{aligned} P_\alpha &= \frac{1}{2} \mathrm{Sp}(\rho, \sigma_{1\alpha} + \sigma_{2\alpha}), \\ Q_{\alpha\alpha'} &= \mathrm{Sp}(\sigma, \sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha'}). \end{aligned} \tag{4.1}$$

Матрица плотности триплетного состояния имеет вид

$$\rho = \frac{1}{4}\left[I + \sum_\alpha P_\alpha (\sigma_{1\alpha} + \sigma_{2\alpha}) + \sum_{\alpha, \alpha'} Q_{\alpha\alpha'}\sigma_{1\alpha}\sigma_{2\alpha'}\right], \tag{4.2}$$

при условии

$$\sum_\alpha Q_{\alpha\alpha} = \langle\sigma_1\sigma_2\rangle = 1. \tag{4.3}$$

Амплитудная матрица рассеяния рассматриваемой частицы на бесспиновой мишени образована двумя амплитудами F и H, если взаимодействие описывается согласно (3.24), и может быть записана в операторной форме следующим образом:

$$M = F\hat{\Pi}_1 + H\mathbf{Sn}. \tag{4.4}$$

Из общего вида оператора M видно, что в результате рассеяния метастабиль должен приобрести поляризацию. Расчет этой поляризации согласно общей схеме вычислений приводит к результату

$$\mathbf{P}' = \frac{\mathbf{n}S(\theta)}{\sigma_0(\theta)}, \tag{4.5}$$

где $\sigma_0 = F\overline{F} + (8/3)\, H\overline{H}$. Также не сложно убедиться, что при рассеянии ориентированного метастабиля на бесспиновой мишени сечение зависит от векторов $\mathbf{P}$ и $\mathbf{n}$ следующим образом:

$$\sigma = \sigma_0 + 2S(\theta)\,\mathbf{Pn}, \tag{4.6}$$

и, следовательно, существует асимметрия

$$A' = \frac{2S(\theta)}{\sigma_0(\theta)}, \tag{4.7}$$

связанная с поляризацией соотношением

$$A' = 2P'. \tag{4.8}$$

Этот результат является следствием запрета триплет-синглетных переходов при рассматриваемом взаимодействии. Можно убедиться также, что по этой же причине изменение тензорной поляризации атома происходит таким образом, что величина $\sum Q_{\alpha\alpha} = \text{const}$, т. е. сохраняется при столкновении.

Исследование поляризации связано с интересным аспектом в теории столкновений — использованием оптических потенциалов и определением параметров этих потенциалов. Действительно, в области энергий, отвечающих максимальному значению поляризации, энергетически открыты неупругие каналы, влияние которых на упругое рассеяние можно учесть в рамках оптической модели. В частности, полагая

$$v = v_1 (1 + i\zeta) + \eta \frac{1}{r} \frac{\partial v_1}{\partial r} (\sigma_1 + \sigma_2) \mathbf{L}, \tag{4.9}$$

можно показать [44], что после рассеяния появляется векторная поляризация $P' = P(\zeta, k, \theta)$, зависящая от параметра ζ:

$$\mathbf{P}' = \mathbf{n} \cdot \frac{8\zeta\eta k^2 \sin^2\theta}{3(1 + \zeta^2 + 8k^4\eta^2 \sin\theta)}. \tag{4.10}$$

Таким образом, определение поляризации позволяет восстанавливать параметры ζ оптических потенциалов, которые можно использовать для разных задач физики атомных столкновений. В свою очередь измерение поляризации можно на основании (4.8) заменить измерением асимметрии.

Другой аспект, связанный с ориентированными метастабилями, проявляется в процессах пеннинг-ионизации. Например, в процессе

$$\mathrm{He}\,(2^3S) + \mathrm{Cd} \to \mathrm{He}\,(1^1S) + \mathrm{Cd}^+ + e,$$

излучение ионов Cd^+ характеризуется асимметрией интенсивностей $I_\pm$ излучения, соответствующих право- и левокруговой поляризациям. В частности, для перехода $5^2D_{5/2} \to 5^2D_{1/2}$ ($\lambda = 4416$ Å) в Cd^+ асимметрия излучения A связана с начальной поляризацией метастабиля соотношением $A = (I_+ - I_-)/(I_+ + I_-) = 0{,}7P$. Поэтому измерение асимметрии излучения в оптическом эксперименте позволяет найти начальную поляризацию атома.

5. РАССЕЯНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА МИШЕНИ СО СПИНОМ $s=1$

Рассеяние электрона на основных или метастабильных состояниях атомов и молекул с $s = 1$ представляет мало изученную задачу. Приведем основные результаты теории поляризации в таких системах [45–47].

Из требований инвариантности следует, что в нерелятивистском приближении амплитудная матрица имеет структуру

$$M = AI + B\mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}. \tag{5.1}$$

Поскольку $\langle \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma} \rangle = 1$ при полном спине $j = 3/2$ и $\langle \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma} \rangle = -2$ при $j = 1/2$, то, вводя квадруплетную F и дублетную G амплитуды, можно записать (5.1) в виде

$$M = \frac{1}{3}(2F + G) I + \frac{1}{3}(F - G)\mathbf{s}\boldsymbol{\sigma} =$$

$$= G \cdot \frac{1}{3}(1 - \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}) + F \cdot \frac{1}{3}(2I + \mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}) \equiv G\hat{\Pi}_{1/2} + F\hat{\Pi}_{3/2}, \tag{5.2}$$

где $\hat{\Pi}_{1/2}$ и $\hat{\Pi}_{3/2}$ — проекционные операторы на спиновые функции с полным значением спина j. Вместо F и G по аналогии с двухэлектронной системой можно ввести амплитуды прямого f и обменного g рассеяния на основании равенств

$$\left\langle \frac{1}{2}\,1\,|\,M\,|\,\frac{1}{2}\,1\right\rangle = \frac{1}{3}\,F \equiv f,$$
$$\left\langle -\frac{1}{2}\,1\,|\,M\,|\,\frac{1}{2}\,0\right\rangle = \frac{\sqrt{2}}{3}\,(F-G) \equiv -\sqrt{2}\,g. \tag{5.2'}$$

Из второго соотношения следует, что обменное рассеяние приводит к появлению противоположного направления спина в рассеянном пучке, т. е. имитирует релятивистское явление опрокидывания спина — спин-флип. В этих амплитудах M-матрица приобретает вид

$$M = (f - g)\,I - g\mathbf{s}\boldsymbol{\sigma}. \tag{5.3}$$

Матрицу плотности представим в виде произведения $\rho = \rho_1\rho_2$, где $\rho_2 = \frac{1}{2}\,(I + \mathbf{P}_e\boldsymbol{\sigma})$ — спиновая матрица плотности электрона, а ρ_1 — мишени. Выберем в качестве базисных матриц в разложении ρ_1 матрицы s_i спина 1 и компоненты тензора второго ранга

$$s_{ij} = \frac{1}{2}\,(s_i s_j + s_j s_i) - \frac{2}{3}\,\delta_{ij} I, \tag{5.4}$$

с условием $\sum s_{ii} = 0$. Тогда

$$\rho_1 = \frac{1}{3}\left[I + \frac{3}{2}\sum P_{ai} s_i + 3\sum Q_{ij} s_{ij}\right], \tag{5.5}$$

где $P_{ai} = \langle s_i \rangle$ — компоненты вектора поляризации, которые описывают ориентацию, $Q_{ij} = \langle s_{ij} \rangle$ — компоненты тензора поляризации, которые описывают выстроенность мишени. Таким образом, спиновое состояние мишени с $s = 1$ в общем случае характеризуется восемью реальными параметрами вместо трех для частицы со спином 1/2. Считая начальное состояние поляризации обеих частиц произвольным, получаем для сечений и поляризаций

$$\sigma = |f - g|^2 + 2|g|^2 + (2|g|^2 - \bar{f}g - f\bar{g})\,(\mathbf{P}_e\mathbf{P}_a), \tag{5.6}$$

$$\sigma P'_{ei} = \left(|f-g|^2 - \frac{2}{3}|g|^2\right) P_{ei} + (3|g|^2 - \bar{f}g - f\bar{g})\,P_{ai} + i\,(f\bar{g} - \bar{f}g)\,[\mathbf{P}_a\mathbf{P}_e]_i + 2|g|^2 \sum_j Q_{ij} P_{ej}, \tag{5.7}$$

$$\sigma P'_{ai} = \frac{i}{3}\,(3|g|^2 - \bar{f}g - f\bar{g})\,P_{ei} + (|f-g|^2 + |g|^2)\,P_{ai} + \frac{1}{2}\,(\bar{f}g - f\bar{g})\,[\mathbf{P}_a\mathbf{P}_e]_i - (\bar{f}g + f\bar{g}) \sum_j Q_{ij} P_{ej}. \tag{5.8}$$

На основании этих результатов можно установить типы экспериментов для определения $|f|$, $|g|$ и относительной фазы ψ этих амплитуд. Измерение деполяризации электронов на неполяризованной мишени позволяет найти сечение чисто обменного рассеяния:

$$\sigma_{ex} = \frac{9}{8}\,\sigma_0\left(1 - \frac{P'_e}{P_e}\right) \equiv 3|g|^2. \tag{5.9}$$

Прямое сечение $\sigma_d = |f|^2$ находится измерением возникшей поляризации мишени

$$\sigma_d = \sigma_0\left(1 - \frac{3P'_a}{2P_e}\right). \tag{5.10}$$

Измеряя также сечение рассеяния без поляризации

$$\sigma_0 = |f|^2 + 3|g|^2 - (\bar{f}g + f\bar{g}), \tag{5.11}$$

можно получить, используя все три измерения, $|f|^2$, $|g|^2$ и $\bar{f}g + f\bar{g}$, откуда находятся $|f|$, $|g|$ и $\cos\psi$. Из приведенных формул следует, что поляризация атома, возникающая при столкновении, не превосходит (2/3) P_e, в то время как при рассеянии неполяризованного пучка электронов на ориентированном атоме может происходить полная передача поляризации электрону. К числу замечаний общего характера относятся следующие. В неориентированной системе поляризация при обменном рассеянии не возникает. Поляризация в пучке электронов появляется только в том случае, если мишень имеет векторную ориентацию; тензорной поляризации недостаточно для появления $P'_e \neq 0$. Рассеяние поляризованных электронов создает в неориентированной мишени только векторную поляризацию $P_a = (2/3)\ P_e$. Можно убедиться также, что максимальная поляризация в пучке достигается при таких энергиях и углах рассеяния, когда сечение близко к своему минимуму. Эксперименты по рассеянию поляризованных электронов на атомах в триплетных состояниях отсутствуют. Результаты расчета [48] поляризации при рассеянии электрона на метастабиле He (2^3S) приведены на рис. 5.

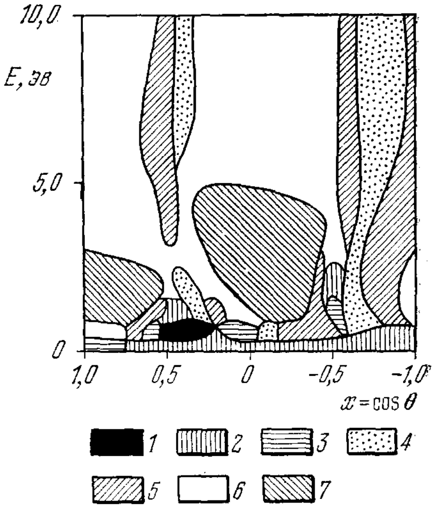

Рис. 5. Обменная поляризация электронов, рассеянных атомами гелия. *1* — $0{,}8 \leqslant P \leqslant 1{,}0$, *2* — $0{,}6 \leqslant P \leqslant 0{,}8$, *3* — $0{,}4 \leqslant P \leqslant 0{,}6$, *4* — $0{,}2 \leqslant P \leqslant 0{,}4$, *5* — $0{,}0 \leqslant P \leqslant 0{,}2$, *6*: $-0{,}2 \leqslant P \leqslant 0$, *7*: $-0{,}45 \leqslant P \leqslant -0{,}2$.

Полученные результаты могут быть использованы для описания рассеяния поляризованных электронов молекулами. Отметим одно возможное применение поляризованных электронов для исследования характеристик электронных состояний отрицательных молекулярных ионов. Многие процессы, происходящие при рассеянии электронов на молекулах, имеют резонансный характер вследствие образования молекулярных отрицательных ионов на промежуточной стадии реакции. Измерение деполяризации рассеянных электронов на неполяризованных молекулах со спином 1 (к числу таких молекул относятся, например, O_2, NH, SO, S_2 и др.) можно использовать для установления мультиплетности молекулярных ионов. Действительно, деполяризация электронов в терминах амплитуд дублетного G и квартетного F рассеяния равна (см. (5.6) — (5.7))

$$D = \frac{5F\bar{F} - 2F\bar{G} - 2\bar{F}G - G\bar{G}}{3(2F\bar{F} + G\bar{G})}. \tag{5.12}$$

Отсюда следует, что при энергии столкновения, отвечающей энергии промежуточного дублетного состояния, деполяризация должна быть близка к своему минимальному значению, равному —1/3, в то время как значение D, близкое к 5/6, свидетельствует о рассеянии через квартетное молекулярное состояние. Наиболее желательным типом эксперимента является измерение деполяризации в неупругих процессах, поскольку в них резонансы проявляются наиболее отчетливо.

В заключение этого раздела обсудим вопрос о проявлении структуры мишени в поляризационных эффектах. Во введении отмечалось, что поляризационные характеристики зависят лишь от полного спина мишени безотносительно к тому, что он складывается из спинов отдельных электронов. Это утверждение остается справедливым во всех случаях, когда спин мишени сохраняется при столкновении. В тех случаях, когда обменное или релятивистское взаимодействие приводит к изменению спина мишени (синглет-триплетные переходы в обсуждаемой системе), амплитудная матрица должна включать спиновые операторы всех электронов. Например, в обсуждаемой трехэлектронной системе наиболее общее инвариантное выражение нерелятивистской M-матрицы имеет вид

$$M = aI + b\sigma_1\sigma_2 + c\sigma_1\sigma_3 + d\sigma_2\sigma_3, \tag{5.13}$$

где $a, \ldots, d$ — амплитуды рассеяния. Прямые, хотя и трудоемкие расчеты, доказывают эквивалентность трехчастичного подхода, основанного на матрице (5.13), двухчастичному (5.1) для случая, когда спин мишени не изменяется при столкновении. При неупругих столкновениях, однако, обменное взаимодействие вызывает триплет-синглетные переходы. Единственно адекватным подходом в этом случае становится описание, основанное на трехчастичной матрице (5.13), которое, таким образом, явно принимает во внимание структуру мишени (подробнее см. п. а) гл. 7).

Интересные аспекты связаны с релятивистскими взаимодействиями в трехчастичной системе. Из общих соображений ясно, что благодаря таким взаимодействиям в неориентированной системе возникает поляризация налетающего электрона. В этом явлении можно различить три механизма, приводящих к появлению ориентации. Первый из них связан с изменением проекции спина налетающего электрона и вполне аналогичен механизму поляризации, рассмотренному Моттом. Второй связан с изменением величины полного спина системы (дублет-квартетные переходы) и аналогичен механизму, отмечавшемуся выше для двухэлектронных систем (см. (3.21)). В этом случае, таким образом, речь идет о нарушении полного спина системы как о причине появления поляризации. Наконец поляризация электрона возникает вследствие изменения спина мишени (синглет-триплетные переходы), вызванного релятивистским взаимодействием с налетающим электроном. Суммарная поляризация, возникающая при изменении спинов и их проекций, количественно связана с асимметрией сечения упругого рассеяния электрона на мишени с векторной поляризацией. Детальный анализ затронутых вопросов будет дан в отдельной статье; здесь же отметим желательность экспериментального исследования поляризации и асимметрии в интересах дальнейшего развития физики электронно-атомных столкновений.

6. РАССЕЯНИЕ ЧАСТИЦ СО СПИНОМ $s = 1$

Примером таких процессов являются столкновения в оптически накачанной гелиевой плазме He (2^3S). Полное описание всех возможных процессов в системах частиц со спином $s = 1$ осуществляется, как это следует из парциального анализа, девятнадцатью различными амплитудами рассеяния. В нерелятивистском приближении амплитудная матрица содержит всего три амплитуды и в операторном виде представляется следующим инвариантным выражением

$$M = aI + b\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 + c\,(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2)^2. \tag{6.1}$$

Это выражение можно переписать иначе, используя спиновые проекционные операторы

$$\left.\begin{aligned}\hat{\Pi}_0 &= -\frac{1}{3}[I-(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2)^2],\\ \hat{\Pi}_1 &= \frac{1}{2}[2I-\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2-(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2)^2],\\ \hat{\Pi}_2 &= \frac{1}{6}[2I+3\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2+(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2)^2].\end{aligned}\right\} \tag{6.2}$$

Вводя также амплитуды

$$G_S=\frac{1}{2ik}\sum_L (2L+1)\,T_{SL}P_L(\cos\theta), \tag{6.3}$$

которые описывают рассеяние при значениях полного спина $S=0,\ 1,\ 2$ вместо (6.1) получаем

$$M=\sum_S G_S\hat{\Pi}_S. \tag{6.4}$$

Выбирая матрицу плотности в виде $\rho=\rho_1\rho_2$, где $\rho_{1,\,2}$ заданы разложениями (5.5) при условии $Q_{ij}=\delta_{ij}Q_i$, для сечения находим выражение следующей структуры:

$$\sigma=A+B\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2+C\sum_i Q_i^{(1)}Q_i^{(2)}. \tag{6.5}$$

Выражения коэффициентов в этом результате, выраженные через амплитуды G_S, а также формулы для поляризаций частиц после рассеяния, можно найти в [49]. Используя эти результаты, можно предложить схему эксперимента для определения модулей амплитуд и двух относительных фаз. Для выполнения минимальной программы — определения модулей амплитуд — достаточно трех экспериментов по рассеянию. Один из них является традиционным и связан с нахождением сечения σ_0 рассеяния неполяризованных частиц. В двух других находятся сечение σ рассеяния частиц, имеющих одинаковую векторную поляризацию P и деполяризацию D одной из частиц после рассеяния. Выбор состояний, обладающих только векторной поляризацией, определяется тем, что такие состояния могут быть получены экспериментально оптической накачкой или рассеянием поляризованных электронов на мишенях со спином 1 (см.[5]), а также тем обстоятельством, что схема полного опыта для них оказывается максимально простой. Обозначая $\sigma_1=D\sigma$ и замечая, что $B=(\sigma-\sigma_0)/P^2$, получаем искомые формулы для модулей амплитуд рассеяния:

$$\begin{aligned}|G_0|^2&=\frac{1}{19}(81\sigma_0-40B-62\sigma_1),\\ |G_1|^2&=\frac{1}{19}(45\sigma_0+20B-26\sigma_1),\\ |G_2|^2&=\frac{1}{19}(-9\sigma_0-4B+28\sigma_1).\end{aligned}$$

Определение относительных фаз между амплитудами требует, как и следовало ожидать, еще трех независимых экспериментов.

В заключение этого раздела отметим, что анализ полной амплитудной матрицы 9×9 позволяет выяснить некоторые аспекты, связанные с характером взаимодействия в системе частиц со спином $s=1$. В частности, оказывается, что спин-орбитальное взаимодействие изменяет начальное состояние таким образом, что можно говорить о повороте спина одной частицы. Можно показать, что взаимодействие, которое переворачивает спин одной из частиц, порождает амплитуды вида $H = \sum h_L P_H^{(2)}$, а взаимодействие, приводящее к перевороту спинов обоих частиц (двойной спин-флип), амплитуды $R = \sum r_L P_h^{(4)}$.

Можно убедиться также, следуя анализу в п. б) гл. 3, что спин-орбитальное взаимодействие вызывает асимметрию сечения рассеяния, которая количественно пропорциональна величине поляризации, возникающей при рассеянии неполяризованных частиц в присутствии спин-орбитального взаимодействия.

7. ПЕРЕХОДЫ С ИЗМЕНЕНИЕМ СПИНА МИШЕНИ

Такие столкновения являются характерными для многоэлектронных систем, в которых обменное рассеяние может изменить спин одного (или обоих) партнеров по столкновению. Ниже будут рассмотрены примеры таких столкновений.

Ограничимся взаимодействиями, которые сохраняют полные моменты и их проекции. Тогда можно ввести оператор $\hat{A}_{SM_S}$, который переводит начальное спиновое состояние с функцией $\chi_{SM_S}^{(i)}$ (S — полный спин системы, M_S — его проекция) в конечное с функцией $\chi_{SM_S}^{(f)}$ согласно соотношению

$$\hat{A}_{SM_S}\chi_{SM_S}^{(i)} = \chi_{SM_S}^{(f)}. \tag{7.1}$$

Если процесс разрешен при нескольких значениях полного спина, то амплитудная матрица имеет вид

$$M = \sum_S \hat{A}_{SM_S} G_S(\theta), \tag{7.2}$$

где $G_S(\theta)$ — амплитуды, соответствующие значениям полного спина S, при которых происходят переходы с перераспределением спинов отдельных частиц системы.

а) Синглет-триплетное возбуждение мишени

При синглет-триплетном переходе в атоме полный спин системы, включающей, кроме атома, налетающий электрон, равен $^1/_2$. Полагая, что двухэлектронная мишень описывается приближением LS-связи, и составляя спиновые функции $\chi_{1/2m}^{(i)}$ и $\chi_{1/2m}^{(f)}$ в трехэлектронной системе, находим согласно (7.1) оператор

$$\hat{A}_{1/2} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \sigma_1 (\sigma_2 - \sigma_3), \tag{7.3}$$

где 2, 3 — индексы атомных электронов. После возбуждения возникает новое спиновое состояние, которое описывается матрицей плотности

$$\rho' = \sum_{M_L M_S} \hat{A}_{1/2} \rho \hat{A}_{1/2}^{\dagger} |G_{LM_L}|^2, \tag{7.4}$$

где G_{LM_L} — амплитуда перехода в состояние ^3L и ρ — начальная матрица плотности:

$$\rho = \frac{1}{8} (I + \mathbf{P}\sigma_1)(I - \sigma_2\sigma_3). \tag{7.5}$$

Можно убедиться, что после перехода возникает новая спиновая корреляция между атомными электронами, которая отвечает значению спина атома $s = 1$. Используя (7.4), находим

$$\langle\sigma_2\sigma_3\rangle' = \frac{\mathrm{Sp}\,(\rho'\sigma_2\sigma_3)}{\mathrm{Sp}\,\rho'} = 1, \tag{7.6}$$

как и должно быть в триплетном состоянии. Вычисляя поляризации после столкновения, получим, что возбужденный атом приобретает поляризацию (2/3) P, а неупруго рассеянный электрон деполяризован в отношении $P'/P = -1/3$.

В работе [51] приведены результаты измерения деполяризации электрона в результате возбуждения $^1S \to {}^3P$-перехода в атоме ртути. Деполяризация отличается от значения $-1/3$ и оказывается сложной функцией энергии столкновения. Отсюда следует, что приближение LS-связи является недостаточным для описания тяжелого атома в процессах рассеяния. Поэтому заранее ясно, что деполяризация при надлежащей теоретической интерпретации может служить характеристикой типа атомной связи.

б) Тонкая структура атома

Удовлетворительного согласия с полученными экспериментальными данными для деполяризации удается добиться, приняв во внимание тонкую структуру атома и промежуточный тип связи.

Если спин-орбитальное взаимодействие внутри атома можно учесть в рамках теории возмущений, считая приближение LS-связи нулевым, то M-матрица обсуждаемого перехода становится равной

$$M\,(JM_J) = \sum_{M_L+M_S=M_J} C^{JM_J}_{LSM_LM_S}\hat{A}_{SM_S}G^S_{LM_L}\,(\theta). \tag{7.7}$$

После вычислений с матрицей плотности конечного состояния

$$\rho'\,(J) = \sum_{M_J} M\,(JM_J)\,\rho M^+\,(JM_J) \tag{7.8}$$

(ρ см. в (7.5)), можно найти деполяризации электронов, возбудивших отдельные компоненты триплета ^3P_J. Приведем результаты расчета деполяризации $D\,(^3P_J) = P'/P$ электронов, рассеянных в направлении вперед после возбуждения $^1S \to {}^3P_J$-перехода в ртути [50]:

$$D\,(^3P_0) = -1,\quad D\,(^3P_1) = 0,\quad D\,(^3P_2) = -0{,}4. \tag{7.9}$$

Из последних экспериментальных данных [51] для $D\,(^3P_J)$ следует, что в пределах точности эксперимента они совпадают с вычисленными значениями.

в) Деполяризация как тест типа атомной связи

Интересный аспект, связанный с деполяризацией, состоит в том, что эта величина является тестом на тип атомной связи. Действительно, рассмотрим ситуацию, когда наряду с триплетным $^3P_1$-уровнем возбуждается синглетный $^1P_1$. Как отмечалось выше, при рассеянии вперед происходит полная деполяризация электронов, возбудивших $^3P_1$-уровень, тогда как при возбуждении синглетного состояния деполяризации, очевидно, не происходит. Следовательно, при промежуточном типе связи, когда синглетное состояние в определенной доле примешано к триплетному, деполяризация должна принимать промежуточные значения между 0 и 1 в зависимости от веса примеси. Пользуясь матрицей перехода в смешанное состояние

$\psi(^3P_1) = \alpha\psi(^3P_1) + \beta\psi(^1P_1)$, которая равна

$$M = \alpha M(1, M_J) + \beta g_{1M_L}\hat{\Pi}_0 \qquad (7.10)$$

(g_{1M_L} — синглетная амплитуда возбуждения $^1P_1$-уровня, $\hat{\Pi}_0$ — синглетный проекционный оператор ($M(1, M_J)$ — (см. (7.7)), получаем для деполяризации электронов при возбуждении смешанного состояния

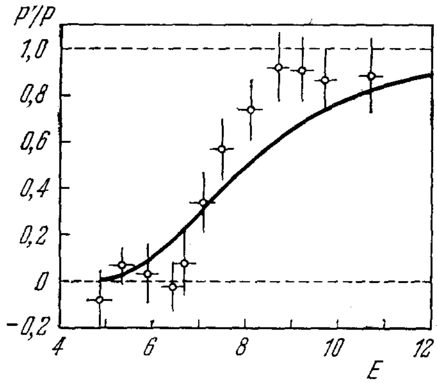

Рис. 6. Отношение P'/P конечной и начальной поляризаций электрона, рассеянного в направлении вперед после возбуждения 6^3P_1-уровня атома ртути, как функция начальной энергии электрона.

Экспериментальные точки по [51], сплошная линия — расчет [52].

$$D = \frac{-\alpha^2|G^1_{11}|^2 + \beta(|g_{10}|^2 + 2|g_{11}|^2)}{\alpha^2(|G^1_{10}|^2 + 2|G^1_{11}|^2) + \beta(|g_{10}|^2 + 2|g_{11}|^2)}. \qquad (7.11)$$

При рассеянии вперед

$$D = \frac{\beta^2|g_{10}|^2}{\alpha^2|G^1_{10}|^2 + \beta^2|g_{10}|^2}. \qquad (7.12)$$

Отсюда видно, что с ростом энергии, когда роль обменного рассеяния $\sim |G^1_{10}|^2$ начинает падать, деполяризация стремится к 1 от значения $D = 0$ в пороге, что качественно полностью согласуется с экспериментом [51]. Численные расчеты [52], выполненные по формуле (7.12) с простыми предположениями относительно амплитуд, находятся в удовлетворительном согласии с упомянутым экспериментом (рис. 6).

г) Проявление молекулярного спино-рбитального взаимодействия в деполяризации электронов

Совершенно аналогичным образом можно использовать деполяризацию электронов, возбудивших синглет-триплетный переход в молекуле для выяснения роли спин-орбитального взаимодействия внутри молекулы. Одним из проявлений этого взаимодействия в молекулах является существование так называемых смешанных состояний, не имеющих определенного значения полного спина. Для таких состояний интенсивность переходов возрастает на несколько порядков по сравнению с переходами между чистыми состояниями с определенным спином, где переход запрещен в электрическом дипольном приближении. Можно видеть, что примесь состояния с другим спином, например, примесь синглетного состояния к триплетному, совершенно отчетливо проявляется в деполяризации электронов, возбудивших это смешанное состояние. Действительно, используя оператор (7.3), описывающий переходы в LS-связи, после простых вычислений находим величину деполяризации

$$D = \frac{-(1/3)\,a^2 g\bar{g} + b^2 f\bar{f}}{a^2 g\bar{g} + b^2 f\bar{f}}, \qquad (7.13)$$

где a, b — веса чистых состояний и g, f — амплитуды возбуждения этих состояний. Поскольку с ростом энергии электронов прямое возбуждение начинает преобладать над обменным, которое возбуждает чистое триплетное состояние, D будет изменяться от значения $-1/3$ вблизи порога до 1. При отсутствии примеси синглетного состояния D при любых энергиях должно оставаться равным $-1/3$ (тонкая структура отсутствует, т. е. предполагается, что речь идет о переходах между Σ-состояниями).

д) Спин-орбитальное взаимодействие в сплошном спектре

Возникновение поляризации электрона при рассеянии на мишени со спином $s = 0$, которая в результате неупругого процесса приобретает спин $s = 1$, представляет обобщение известной задачи Мотта. Для перехода $^1S \rightarrow {}^3S$ (атом не имеет тонкой структуры) в [53] получено в результате парциального анализа для рассматриваемой трехэлектронной системы с учетом спин-орбитального взаимодействия в сплошном спектре следующее выражение для поляризации неупруго рассеянного электрона:

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{n}\,\mathrm{Im}\,(m\bar{h})}{|m|^2+|h|^2}; \tag{7.14}$$

здесь m и h — амплитуды возбуждения. При незначительном спин-орбитальном взаимодействии $h \rightarrow 0$ и электроны остаются неполяризованными.

е) Тонкая структура и возникновение поляризации рассеянных электронов

В [54] предсказано появление поляризации в пучке рассеянных электронов благодаря тонкой структуре, вызванной спин-орбитальным взаимодействием внутри атома. Поляризация направлена по нормали к плоскости рассеяния. Отличительной чертой этой поляризации является отсутствие параметра малости, связанного со спин-орбитальным взаимодействием между атомными электронами. Экспериментальное подтверждение этого эффекта в настоящее время отсутствует. Возможным типом эксперимента для обнаружения поляризации такого рода является упругое рассеяние медленных электронов на атомах с выраженной тонкой структурой (например, на атоме кислорода). Малые энергии позволят исключить поляризацию благодаря моттовскому рассеянию и тем самым позволят исследовать эффект в чистом виде.

ж) Пеннинг-ионизация в оптически накачанной гелиевой плазме

Процессы ионизации в гелии

$$\mathrm{He}\,(2^3S) + \mathrm{He}\,(2^3S) \rightarrow \mathrm{He} + \mathrm{He}^+ + e, \tag{7.15}$$

где один из атомов испытывает триплет-синглетный переход, представляют другой тип процессов с изменением спина одного из сталкивающихся партнеров. Несохранение спина атома вследствие того, что двухэлектронная система может находиться в триплетном или синглетном состояниях, означает, что обсуждаемая задача не может быть сведена к двухчастичной, как в гл. 6, а должна рассматриваться как четырехэлектронная, т. е. с максимальной степенью детализации.

Отсюда, в частности, следует, что последовательное описание поляризационных явлений осуществляется матрицами 16×16. Поскольку процесс (7.15) разрешен при значениях полного спина $S = 0,1$, то согласно (7.2) амплитудная матрица может быть представлена в форме

$$M=\hat{A}_0G_0+\hat{A}_1G_1. \tag{7.16}$$

Для операторов перехода $\hat{A}_s$ находим, используя определение (7.1) и явный вид спиновых функций системы (7.15), следующие выражения:

$$\left.\begin{aligned}\hat{A}_0&=\frac{\sqrt{3}}{4}(\sigma_2-\sigma_1)(\sigma_3-\sigma_4),\\ \hat{A}_1&=\frac{\sqrt{3}}{4}(\sigma_2-\sigma_1)(\sigma_3+\sigma_4).\end{aligned}\right\} \tag{7.17}$$

Используя двухэлектронные матрицы плотности для каждого атома, для сечения находим

$$\left.\begin{aligned}\sigma&=A+B(\mathbf{P}_a\mathbf{P}_b)+C\sum_i Q_i^{(a)}Q_i^{(b)},\\ A&=\frac{3}{4}(|G_0|^2+3|G_1|^2),\\ B&=-\frac{3}{2}(|G_0|^2+|G_1|^2),\\ c&=\frac{3}{4}(|G_0|^2-|G_1|^2).\end{aligned}\right\} \tag{7.18}$$

Видно, в частности, что для чистого состояния, отвечающего начальному спину $S=2$ (в этом случае $\mathbf{P}_a\mathbf{P}_b=1$, $\sum Q_i^{(a)}Q_i^{(b)}=1$), сечение перехода обращается в нуль тождественно. Этот результат согласуется с правилом Вигнера о сохранении полного спина. Дальнейшие результаты приведем для атомов с векторной поляризацией. Поскольку для атомов с начальной векторной поляризацией $Q_{ij}=(^1/_3)\,\delta_{ij}$, сечение становится равным

$$\sigma=|G_0|^2+2|G_1|^2+B(\mathbf{P}_a\mathbf{P}_b)\equiv\sigma_0+B(\mathbf{P}_a\mathbf{P}_b). \tag{7.19}$$

Отсюда видно, что у атомов с одинаковой начальной поляризацией $P_a=$ $=P_b=P$ модули амплитуд связаны с сечениями следующим образом:

$$|G_0|^2=\frac{4}{3}B-\sigma_0,\quad |G_1|^2=-\frac{2}{3}B+\sigma_0,\quad B=\frac{\sigma-\sigma_0}{P^2}. \tag{7.20}$$

Это означает, что двух экспериментов — по измерению сечения σ_0 неполяризованных атомов и сечения σ ионизации для атомов с одинаковой начальной поляризацией — достаточно для восстановления модулей амплитуд пеннинг-ионизации. Практический интерес представляет вопрос о количестве поляризации, приобретаемой электроном в результате ионизации в ориентированной гелиевой плазме. Актуальность этого вопроса связана с попытками использовать пеннинг-ионизацию в ориентированных средах для создания источников поляризованных электронов. Согласно существующему мнению, начальная поляризация атома в системе (7.15) передается электрону почти полностью. Более подробное исследование [49] показывает, что в типичных условиях эксперимента степень поляризации электрона $P'\sim(^3/_4)\,P$, т. е. достигает высокого значения. Благоприятной особенностью обсуждаемого процесса является практическая независимость поляризации от энергии столкновения при большом сечении процесса.

Если иметь в виду другие аспекты этого процесса, то следует сказать, что изучение поляризации позволяет анализировать начальные метастабильные состояния атомов и прослеживать влияние ориентации и выстроенности на различные характеристики плазмы, такие, например, как электропроводность, светимость и др.

8. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Из проведенного рассмотрения следует, что анализ рассеяния поляризованных электронов на атомах и молекулах является тонким и весьма чувствительным инструментом для исследования элементарных процессов, свойств и структуры мишеней. В частности, этот анализ позволяет изучать новые характеристики рассеяния (например, асимметрию рассеяния, модули амплитуд), роль релятивистских взаимодействий, свойства метастабильных состояний, тип атомной связи, геометрическую структуру больших молекул, параметры квазистационарных состояний и т. п. Дальнейший прогресс в физике поляризованных электронов в первую очередь зависит от постановки новых экспериментов с поляризованными электронами, число которых в настоящее время крайне ограничено.

Назовем некоторые типы экспериментов, которые представляются наиболее реальными в ближайшее время:

1) Измерение асимметрии рассеяния электронов ориентированными мишениями со спином $^1/_2$ и 1. Изучение связи между асимметрией и поляризацией, возникающей при рассеянии в неориентированной системе.

2) Изучение новых механизмов поляризации электрона. К этому кругу проблем относится исследование механизмов поляризации, связанных с несохранением полного спина системы, с изменением спина мишени, а также экспериментальное обнаружение эффекта возникновения поляризации благодаря тонкой структуре атома.

3) Исследование поляризации в условиях резонансного рассеяния на атомах и молекулах с целью оценки параметров квазистационарных состояний и классификации этих состояний.

4) Измерение деполяризации рассеянных электронов с целью установления типа связи, роли тонкой структуры и т. д.

5) Исследование больших молекул, простых кристаллов, структуры магнитных материалов с помощью поляризованных электронов.

Перечень не претендует на полноту. Несомненно, в процессе развития исследований с поляризованными электронами будут выявлены новые интересные возможности практического применения поляризационных явлений.

Ленинградский государственный университет
им. А. А. Жданова

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Fano U.— Rev. Mod. Phys., 1957, v. 29, p. 74.
2. Биленький С. М., Лапидус Л. И., Рындин Р. М.— УФН, 1964 т. 84, с. 243.
3. Mott N. F.— Proc. Roy. Soc. Ser. A, 1929, v. 124, p. 425.
4. Mott N. F.— Ibid., 1932, v. 135, p. 429.
5. Massey H. S. W., Mohr C. B. O.— Ibid., 1941, v. 177, p. 341.
6. Mohr C. B. O.— Ibid., 1943, v. 182, p. 189.
7. Kollath R. —Phys. Bl., 1949, Bd. 5, S. 66.
8. Kessler J.— Pev. Mod. Phys., 1969, v. 41, p. 3.
9. Walker D. W.— Adv. Phys., 1971, v. 20, p. 257.
10. Fuess E., Hellmann H.— Phys. Zs., 1930, Bd. 31, S. 465.
11. Hughes V. W., Long R. L., Luell M. S., Posner M., Raith W.— Phys. Rev. Ser. A, 1972, v. 5, p. 195.
12. Baum G., Koch U.— Nucl. Instr., 1969, v. 71, p. 189.
13. Fano U.,— Phys. Rev., 1969, v. 178, p. 131.
14. Heizmann U., Kessler J., Lorentz J.— Zs. Phys., 1970, Bd. 240, S. 42.
15. Drachenfels W. V., Koch U. T., Lepper R. D., Müller T. M., Paul W.— Zs. Phys., 1974, Bd. 269, S. 387.
16. Seward H. A.— Phys. Rev. Ser. A, 1970, v. 2, p. 2260.

17. Черепков Н. А.— ЖЭТФ, 1973, т. 65, с. 933.
18. Heizmann U., Heuer H., Kessler J.— Phys. Rev. Lett., 1976, v. 36, p. 1444.
19. McCusker M. V., Hatfield L. L., Walters G. W.— Phys. Rev. Ser. A, 1972, v. 5, p. 177.
20. Житников Р. А., Блинов Е. В., Власенко Л. С.— ЖЭТФ, 1973, т. 64, с. 98.
21. Shearer L. D.— Phys. Rev., 1968, v. 166, p. 30.
22. Shearer L. D.— At. Phys. Lnd. 1971, v. 2, p. 87.
23. Drukarev G. F., Ob'edkov V. D., Janev R. K.— Phys. Lett. Ser. A, 1972, v. 42, p. 213.
24. Объедков В. Д.— Письма ЖЭТФ, 1975, т. 21, с. 222.
25. Burke P. G., Shey H. M.— Phys. Rev., 1962, v. 126, p. 163.
26. Karule E.— J. Phys. Ser. B, 1972, v. 5, p. 2051.
27. Объедков В. Д., Моссалами И. Х.— Вестн. Ленингр. ун-та, 1971, № 22, с. 43.
28. Друкарев Г. Ф., Объедков В. Д.— ЖЭТФ, 1971, т. 61, с. 534.
29. Campbell D. M., Brash H. M., Farago P. S.— Phys. Lett. Ser. A, 1971, v. 36, p. 449.
30. Jennings P. J., Sim B. K.— Surface Sci., 1972, v. 33, p. 1.
31. Feder R.— Phys. Stat. Sol., 1974, v. 62, p. 135.
32. O'Neill R., Kalisvaart M., Dunning F. B., Walters G. K.— Phys. Rev. Lett., 1975, v. 34, p. 1167.
33. Lambropoulos P.— Ibid., 1973, v. 30, p. 413.
34. Farago P. S., Walker D. W.— J. Phys. Ser. B, 1973, v. 6, p. 2260.
35. Farago P. S., Walker D. W., Wykes J. S.— Ibid., 1974, v. 7, p. 59.
36. Lambropoulos P., Lambropoulos M.— In: Electron and Photon Interactions with Atoms.— N. Y.: Plenum Press, 1976.— P. 525.
37. Zeman H. D.— Ibid.—P. 581.
38. Busch G., Campagna M., Siegmann H. C.— Phys. Rev. Ser. B, 1971, v. 4, p. 746.
39. Siegmann H. S.— Phys. Rept., 1975, v. 17C, p. 37.
40. Burke P. G., Mitchell J. F. B.— J. Phys. Ser. B, 1974, v. 7, p. 214.
41. Farago P. S.— Ibid., p. L28.
42. Ob'edkov V. D., Van der Wiel M. J.— Ibid., 1978, v. 11, p. L329.
43. Walker D. W.— Ibid., 1974, v. 7, p. L489.
44. Объедков В. Д.— ЖЭТФ, 1976, т. 70, с. 822.
45. Drukarev G. F., Ob'edkov V. D. In: Abstracts of the 7th Inter. Conference on Physics of Atomic and Electron Collisions.— Amsterdam: 1971.—P. 357.
46. Blum K., Kleinpoppen H.— Phys., Rev. Ser. A, 1974, v. 9, p. 1902.
47. Друкарев Г. Ф., Объедков В. Д.— Вестн. Ленингр. ун-та, 1974, № 10, с. 20.
48. Объедков В. Д., Моссалами И. Х.— Ibid., 1972, № 10, с. 29.
49. Объедков В. Д., Самохин А. Н.— ЖЭТФ, 1978, т. 74, с. 1999.
50. Друкарев Г. Ф., Объедков В. Д.— ЖЭТФ, 1977, т. 72, с. 1306.
51. Hanne H. F., Kessler J.— J. Phys. Ser. B, 1976, v. 9, p. 791.
52. Moiseiwitsch B. L.— Ibid., p. L245.
53. Объедков В. Д.— Вестн. Ленингр. ун-та, 1978, № 4, с. 14.
54. Hanne G. F.— J. Phys. Ser. B, 1976, v. 9, p. 805.