

W8-skat

Wróćmy do elastycznego rozpraszania na wodorze z uwzględnieniem spinu.

Podobnie jak w (H2) rozważmy tylko niskoenergetyczne elektrony i tylko jeden kanał oparty na stanie podstawowym 1s wodoru H (całkowity L=0),

możemy mieć natomiast dwa stany spinowe dwóch elektronów : singlet i tryplet, i zatem funkcja będzie wyglądała tak:

(H6)

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \chi_{M_S}^S(1,2)[1 + (-1)^S P_{12}]\psi_0(\mathbf{r}_1)F_0^S(\mathbf{r}_2)$$

gdzie  $\psi_0(\mathbf{r}_1) = \psi_{at,1s}(\mathbf{r}_1)$ ,  $\mathbf{x} = (\mathbf{r}, \sigma)$ , a  $\mathbf{r}_2$  to przestrzenna współrzędna rozpraszanego elektronu;

pamiętamy, że

(H6b)

$$\chi_{M_S}^S(1,2) = \sum_{m_1, m_2} C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, M_S\right) \chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m_2}^{\frac{1}{2}}(2)$$

gdzie  $C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, M_S\right)$  to współczynniki Clebsaha-Gordana wynikające ze składania momentów, czyli z przejścia od bazy iloczynowej  $\chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m_2}^{\frac{1}{2}}(2)$  (dla  $m_1, m_2 = \pm \frac{1}{2}$ ) do bazy  $S, M_S$  ( $S=1,3; M_S = -S, \dots, S$ ),  $\chi_{M_S}^S$ ;

w szczególności dla trypletu ( $S=1$ )  $\chi_1^1 = \alpha(1)\alpha(2)$ ,  $\chi_{-1}^1 = \beta(1)\beta(2)$ ,

$\chi_0^1 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)]$ , a dla singletu ( $S=0$ )  $\chi_0^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]$ .

Funkcja (H6) jest funkcją własną hamiltonianu

(H7)

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} - E\right]\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 0$$

Działając podobnie jak dla (H1) i (H2), tzn. mnożąc (H7) z lewej przez  $\chi_{M_S}^{S' *} (1,2)\psi_0^*(\mathbf{r}_1)$  i całkując po  $\mathbf{r}_1$  oraz sumując po spinach otrzymamy

(H8)

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{00} - W_{00} - (E - E_{1s})\right]F_0^S(\mathbf{r}) = 0$$

(nie musimy już numerować współrzędnej),

i ponownie biorąc pod uwagę równanie (3):  $F(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \sum_{l=0}^{\infty} A_l(k^2) u_l(r) P_l(\cos\theta)$ , lub

(H8a)

$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{kr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l R_l(r) P_l(\cos\theta)$  oraz  $\psi_0(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} R_{1s}(r) Y_0^0(\hat{\mathbf{r}})$  dostaniemy ponownie

(H9)

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - U(r) + 2W_{00} + k^2 \right] u_l^S(r) = 0$$

gdzie  $U(r) = -2 \left( 1 + \frac{1}{r} \right) e^{-2r}$  (to już znamy),  $k^2 = 2(E - E_{1s})$ , a  $2W_{00}$  jest potencjałem wymiennym (który w działaniu na  $u_l^S(r)$  wciąga ją pod całkę a „wyrzuca”  $R_{1s}(r)$ );

asymptotyczne postaci  $u_l^S(r)$  są  $u_l^S(r) \sim \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l^S)$ ;

$-U(r) + 2W_{00}$  nazywamy „potencjałem statyczno-wymiennym”.

Różnica dla  $S=0$  i  $S=1$  jest taka, że  $W_{00}$  ma w sobie zaszyty znak  $(-1)^S$ .

Przejście do obliczenia amplitud rozpraszania nie już takie *straightforward* ... gdyż zakładając, że przed zderzeniem (elektron rozpraszany w  $-\infty$ ) elektron rozpraszany jest w stanie spinowym  $\chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1)$ , a elektron w atomie  $\chi_{m_2}^{\frac{1}{2}}(2)$  i biorąc pod uwagę (H4) możemy dla  $r_2 \rightarrow \infty$  zapisać

(H10)

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sim \psi_0(\mathbf{r}_1) \chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m_2}^{\frac{1}{2}}(2) e^{ikz_2} + \sum_{m_1' m_2'} \psi_0(\mathbf{r}_1) \chi_{m_1'}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m_2'}^{\frac{1}{2}}(2) M_{m_1' m_2', m_1, m_2}(\theta) \frac{e^{ikr_2}}{r_2}$$

a zapisując składnikami oznaczymy jako  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \sim \text{„A”} + \text{„B”}$ .

Ponieważ (H10a)

$\chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m_2}^{\frac{1}{2}}(2) = \sum_S C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, m_1 + m_2\right) \chi_{m_1+m_2}^S(1,2)$  jako transformacja odwrotna do (H6b) [dla różnych, ale ustalonych wartości  $M_S = m_1 + m_2 = 0, 1$  lub  $-1$ ] i rozwijając  $e^{ikz_2}$  jak w (6b)  $\{ e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \}$  pierwszy składnik „A” w (H10) będzie

$$\sum_{lS} C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, m_1 + m_2\right) \chi_{m_1+m_2}^S(1,2) (2l+1) i^l P_l(\cos(\theta_2)) j_l(kr_2)$$

który, korzystając z rozkładu (H6B – teraz pojawią się  $m_1'$  i  $m_2'$  primowane jako indeksy przebiegające sumę) będzie miał postać (H10b)

$$\sum_{lS} \sum_{m'_1 m'_2} C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, m_1 + m_2\right) C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m'_1, m'_2, S, m_1 + m_2\right) \times \\ \times \chi_{m'_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m'_2}^{\frac{1}{2}}(2) (2l+1) i^l P_l(\cos(\theta_2)) j_l(kr_2)$$

Oznaczając całą naszą funkcję  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  jako „C” możemy zapisać asymptotycznie

$$„C” = „A” + „B”, \text{ czyli } „B” = „C” - „A”$$

Funkcja  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  musi jednocześnie

- (a) być zapisana w postaci rozkładu na stany własne tarczy (H3) [ tu  $\psi_0(\mathbf{r}_1) \chi_{m_1}^{\frac{1}{2}}(1)$  ], mnożonych przez funkcje opisującą rozpraszony elektron  $F(\mathbf{r}_2)$  o postaci (H8a),
- (b) być kombinacją stanów własnych układu „tarcza-elektron” (H5), tzn. kombinacją stanów własnych całkowitego  $S$ ,

To zadanie jest niełatwe, ale w zasadzie już mamy je wykonane w (H10b) - jest suma po  $S$ , jest suma po stanach tarczy  $m'_1$ , ( a suma po  $m'_2$  wynika ze sprzężania do  $S$  ), tylko  $j_l(kr_2)$  trzeba zastąpić przez  $R_l(r)$ , czyli człon „C” przyjmie postać:

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{1}{kr} \sum_{lS} \sum_{m'_1 m'_2} C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, m_1 + m_2\right) C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m'_1, m'_2, S, m_1 + m_2\right) \times \\ \times \chi_{m'_1}^{\frac{1}{2}}(1) \chi_{m'_2}^{\frac{1}{2}}(2) (2l+1) i^l P_l(\cos(\theta_2)) R_l(r_2)$$

Znając asymptotyczną postać  $j_l(kr_2)$  (6b) oraz  $R_l(r_2)$  [które teraz zależy od spinu  $S$  -  $R_l^S(r_2)$ ] i porównując w „B” = „C” - „A” wyrazy przy tym samym  $(m_1, m_2)$  dostaniemy:

$$M_{m'_1 m'_2, m_1, m_2}(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{lS}^{\infty} (2l+1) (e^{2i\delta_l^S} - 1) P_l(\cos\theta) \\ \times C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m_1, m_2, S, m_1 + m_2\right) C\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, m'_1, m'_2, S, m_1 + m_2\right)$$

to jest amplituda rozpraszania ze stanu (e+H) określonego przez  $(m_1, m_2)$  do stanu określonego przez  $(m'_1, m'_2)$ ;

możemy w zasadzie mówić o „kanałach spinowych”  $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)$ , ta amplituda  $M_{m'_1 m'_2, m_1, m_2}(\theta)$  jest macierzą 4x4;

wartości współczynników Clebscha-Gordana są: 1, 0,  $\pm \sqrt{\frac{1}{2}}$ , możemy zatem *explicite* napisać macierz  $M_{m'_1 m'_2, m_1, m_2}(\theta)$

$$\begin{bmatrix} F(\theta) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}[F(\theta) + G(\theta)] & \frac{1}{2}[F(\theta) - G(\theta)] & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}[F(\theta) - G(\theta)] & \frac{1}{2}[F(\theta) + G(\theta)] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G(\theta) \end{bmatrix}$$

gdzie

$$F(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l^1} - 1)P_l(\cos\theta)$$

amplituda rozpraszania w stanie trypletowym układu (e+H)

$$G(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l^0} - 1)P_l(\cos\theta)$$

Uwaga: wiersze macierzy  $M$  to pary  $(m'_1, m'_2)$  a kolumny to pary  $(m_1, m_2)$ .

Jeśli nie włączymy wymiany, tzn. przyjmiemy  $W_{00} = 0$ , to  $\delta_l^1 = \delta_l^0$ ,  $F(\theta) = G(\theta)$  i  $M$  jest diagonalna z elementami diagonalnymi równymi  $F(\theta)$  - nie następuje wymiana spinów między elektronem tarczy a elektronem rozpraszonym ;

#### Procedura obliczeniowa w praktyce:

- rozwiązujemy (H9), tzn. „całkujemy” równanie od  $r=0$  do granicy asymptotycznej,
- asymptotycznie przyrównujemy  $u_l^S(r) \sim \sin(kr - \frac{1}{2}l\pi + \delta_l^S)$  i znajdujemy  $\delta_l^S$ ,
- budujemy macierz amplitudy rozpraszania  $M$ .

Teraz możemy obliczać różne różniczkowe i całkowite przekroje czynne, np. dla procesu rozpraszania niespolaryzowanej wiązki elektronów na spolaryzowanych atomach tarczy ( tarcza w stanie  $m_1$  ), należy uśrednić po obu rzutach spinu elektronu rozpraszanego (1/2 sumy po  $m_2$  ) oraz wysumować po wszystkich możliwych stanach końcowych układu  $m'_1, m'_2$  , co daje ( zgodnie z (2c) ):

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2} \sum_{m_2} \sum_{m'_1, m'_2} |M_{m'_1 m'_2, m_1, m_2}(\theta)|^2$$

co daje

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{3}{4} |F(\theta)|^2 + \frac{1}{4} |G(\theta)|^2$$

rezultat zgodny z oczekiwaniem, gdyż tryplet jest trzykrotnie zdegenerowany a singlet jednokrotnie...