

Część I

MARIA BASTER

Metody obliczania przekroju czynnego na rozpraszanie niespolaryzowanych neutronów przez substancje paramagnetyczne

WSTĘP

Na przełomie lat sześćdziesiątych i siedemdziesiątych zaczęły pojawiać się prace doświadczalne wykorzystujące termiczne neutrony (1-100 meV) do badania rozszczepień poziomów energetycznych jonu paramagnetycznego w polu krystalicznym. Metoda ta ma w pewnych przypadkach przewagę nad innymi dotąd stosowanymi metodami (optyczna spektroskopia, fluorescencja, spektroskopia podczerwieni, metody makroskopowe). Szczególnie użyteczne okazuje się nieelastyczne rozpraszanie neutronów przy badaniu metali, gdzie silne oddziaływania fotonów ze swobodnymi elektronami uniemożliwiają stosowanie metod spektroskopii optycznej. Dla półprzewodników i izolatorów badania neutronowe mogą być uzupełnieniem metod optycznych.

Pierwsze prace teoretyczne dotyczące nieelastycznego rozpraszania neutronów przez elektrony atomu pochodzą z lat trzydziestych ([1], [2], [3]). Najobszerniejsza z nich, praca Halperna i Johnsona korzystała z silnego założenia o wygaszaniu w polu krystalicznym momentów orbitalnych. Założenie to, jak wykazują dane doświadczalne (pomiaru podatności magnetycznej), jest słuszne dla atomów grupy żelaza, nie można go jednak stosować w szczególności dla związków ziem rzadkich, gdzie wygaszanie w polu krystalicznym momentów orbitalnych jest małe. (Przyczyną tego faktu jest ekranowanie w ziemiach rzadkich powłoki niezapełnionej 4f przez powłoki zewnętrzne). Dla tych związków stosowano często w szacunkowych obliczeniach przekroju czynnego tzw. "przybliżenie małego χ " podane w 1937 roku przez J. Schwingera [2] (patrz § 2). W roku 1953 G.T. Trammell [5] podjął próbę rozpracowania pełnej formuły przekroju czynnego dla rozpraszania neu-

tronów (patrz § 3). Inną metodą rachunków opartą na tensorowej algebrze Racah podał w 1966 roku D.F. Johnson [9] (patrz § 4). Jego myśl dokładnie rozpracował S.W. Lovesey i D.E. Rimmer [12]. W roku 1975 C. Stassis i H.W. Deckman [16], [17] zaproponowali jeszcze inne rozwiązanie problemu rozpraszania neutronów wykorzystując jego podobieństwo do problemu promieniowania w spektroskopii (patrz § 5). Te cztery ostatnie metody, to znaczy: "przybliżenie małego \mathcal{K} ", metoda Trammella, metoda Loveseya i metoda Stassisa będą przedmiotem mojego zainteresowania w następnych rozdziałach. Przedstawiając w nich ideę powyższych metod nie stosuję jednak rygorystycznie ani toku rozumowania ani oznaczeń z prac oryginalnych. Dlatego, dla ułatwienia czytania, zestawiałam używane przeze mnie ujednolicone oznaczenia oraz oznaczenia innych autorów w aneksie I, a także obok niektórych wzorów podaję w nawiasie klamrowym numer analogicznego wzoru pracy źródłowej.

Już na wstępie warto wyróżnić w rachunkach prowadzonych każdą z omawianych metod następujące wspólne cechy:

1. Jako podstawowy wzór na przekrój czynny przyjmujemy pierwsze przybliżenie Borna

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \left(\frac{M}{4\pi\hbar^2}\right)^2 \sum_{\lambda\chi}^{k'} p_{\lambda} p_{\chi} \sum_{\lambda'\chi'} \langle \lambda\chi \vec{k}' | V | \lambda'\chi' \vec{k} \rangle^2 \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \quad (1.1)$$

gdzie

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2}{2M} (k^2 - k'^2) = E - E'$$

$$| \vec{k} \rangle = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_N)$$

$$| \vec{k}' \rangle = \exp(i\vec{k}' \cdot \vec{r}_N)$$

M masa neutronu, \vec{k} , \vec{k}' wektor falowy padającego i rozproszonego neutronu, E, E' energia początkowa i końcowa neutronu, λ , λ' stan początkowy i końcowy jonu, χ , χ' stan spinowy początkowy i końcowy neutronu, p_{λ} , p_{χ}

prawdopodobieństwo stanu λ i stanu χ , \vec{r}_N promień wodzący neutronu, V potencjał oddziaływania magnetycznego neutronu z elektronami jonu.

2. Jako funkcję falową targetu $|\lambda\rangle$ przyjmujemy zlokalizowaną funkcję falową niesparowanych elektronów jonu

$$|\lambda\rangle = \sum_M a_M |\psi_{JM}\rangle = \sum_{M,i} a_M c_i |SLJM\rangle$$

W dalszym ciągu, dla skrócenia zapisu funkcję $|SLJM\rangle$ będą często oznaczana przez $|JM\rangle$. Wtedy

$$|\lambda\rangle = \sum_{M,i} a_M c_i |JM\rangle \quad (1.2)$$

gdzie

a_M - współczynniki pola krystalicznego

c_i - współczynniki sprzężenia pośredniego

$|SLJM\rangle$ - funkcja falowa elektronów o liczbach kwantowych $SLJM$.

3. Jako potencjał oddziaływania V przyjmujemy zgodnie z równaniem Pauliego potencjał postaci: (Wyjątek stanowi metoda Stassisa, patrz wzór (1.6))

$$V = \vec{\mu} \cdot \vec{H} \quad (1.3)$$

gdzie

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}$$

$$\vec{\mu} = -\gamma \vec{\mu} \vec{\sigma}$$

$$\gamma = -1.91$$

$\vec{\mu}$ - moment magnetyczny cząstki o spinie $1/2$

$\vec{\sigma}$ - wektorowa macierz Pauliego

\vec{A} - potencjał wektorowy pola, w którym znajduje się cząstka.

Możliwe przy tym są dwa równoważne podejścia do tematu:

a. $\vec{\mu} = \vec{\mu}_N$ jest momentem magnetycznym neutronu a $\vec{A} = \vec{A}_e$ jest potencjałem wektorowym pola wytworzonego przez elektrony jonu (przybliżenie małego χ , metoda Loveseya).

W przybliżeniu quasiklasycznym

$$\vec{H} = \text{rot } \vec{A}_e = \sum_j \left[\text{rot } \frac{\vec{\mu}_e \times \vec{R}}{R^3} + \frac{(-e)}{mc} \frac{\vec{p}_j \times \vec{R}}{R^3} \right] \quad (1.4)$$

gdzie

$$\vec{R} = \vec{r}_N - \vec{r}_j$$

$$\vec{\mu}_e = -2\mu_B \vec{s}$$

- \vec{s} - spin elektronu,
- \vec{r}_N, \vec{r}_j - położenie neutronu i j -tego elektronu,
- $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ - magneton Bohra,
- \vec{p}_j - pęd elektronu,
- m - masa elektronu.

Wtedy możemy policzyć:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | \vec{H} | \vec{k} \rangle &= \int \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_N) \vec{H} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_N) d\vec{r}_N = \\ &= \sum_j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \hat{\chi}_x(\vec{s}_j, x \hat{\chi}) + \\ &+ \sum_j \frac{i}{2\hbar\vec{k}} \left\{ \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \hat{\chi} x p_j + \hat{\chi} x p_j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_j) \right\} \end{aligned} \quad (1.5)$$

gdzie

$$\vec{\chi} = \vec{k} - \vec{k}'$$

$$\hat{\chi} = \frac{\partial}{\partial \vec{k}}$$

b. $\vec{\mu}_e = -2\mu_B \vec{s}$ jest momentem magnetycznym elektronu a $\vec{A} = \vec{A}_N$ jest potencjałem wektorowym pola wytworzonego przez neutron (metoda Trammella, metoda Stassisa), przy czym:

$$\vec{A}_N(\vec{r}) = \frac{e_N \vec{x}(\vec{r} - \vec{r}_N)}{|\vec{r} - \vec{r}_N|^3}$$

Stassis jako potencjał oddziaływania V przyjmuje wzór (1.6), (W granicy nierelatywistycznej można pokazać jego równoważność z wzorem (1.3) - patrz § 6)

$$V = -\frac{1}{c} \int \vec{v}(\vec{r}) \cdot \vec{A}_N(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.6)$$

gdzie

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{v}_c(\vec{r}) + \vec{v}_m(\vec{r})$$

$$\vec{v}_c(\vec{r}) = \sum_j \frac{1}{2} e_j [\vec{v}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{v}_j] \quad (1.7)$$

{11, [17]}

$$\vec{v}_m(\vec{r}) = \sum_j \frac{\hbar e_j}{m_j} \nabla \times [\vec{a}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)]$$

$$\vec{v}_j = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, \vec{r}_j] = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \vec{p}_j}$$

\mathcal{H} - hamiltonian elektronów jonu.

Jeżeli zapiszemy

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_j \mathcal{H}_j \quad j = 1, 2, \dots \quad (1.8)$$

gdzie \mathcal{H}_0 zawiera energię kinetyczną elektronów, \mathcal{H}_1 inne człony jedno-cząstkowe, \mathcal{H}_2 oddziaływania dwucząstkowe itd., otrzymamy:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_j \frac{p_j^2}{2m} \quad \mathcal{H}_1 = \sum_j f(r_j) \vec{1}_j \cdot \vec{a}_j - \frac{p_j^4}{8m^3 c^2}$$

$$f(r_j) = \frac{\hbar^2}{2m^2 c^2} \frac{dU}{dr_j}$$

U - centralnie symetryczne pole wytworzone przez jądro i wypełnione po-włoki

a stąd

$$\vec{v}_{0j} = \frac{\vec{p}_j}{m} \quad \vec{v}_{1j} = \frac{\partial \chi_j}{\partial \vec{p}_j} = \frac{1}{\hbar} \mathcal{E}(r_j) (\vec{e}_j \times \vec{r}_j) - \frac{p_j^2}{2m^2 c^2} \vec{p}_j \quad (1.9)$$

We wszystkich wspomnianych metodach element macierzowy magnetycznego oddziaływania jest zapisywany w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \langle \lambda' \vec{k}' \chi' | \mathbf{V} | \lambda \vec{k} \chi \rangle &= \langle \lambda' \chi' | \frac{2\hbar \hbar^2}{M} \vec{\omega} \cdot \vec{Q} | \lambda \chi \rangle = \\ &= \langle \lambda' \chi' | \frac{2\hbar \hbar^2}{M} W \sum_{q=\pm 1, 0} (-1)^q \sigma_{-q} Q_q | \lambda \chi \rangle \end{aligned} \quad (1.10)$$

gdzie

$$W = \frac{\hbar c^2}{m c^2}$$

$\vec{\sigma}$ - wektorowa macierz Pauliego,

Q_q - współrzędna sferyczna.

Łatwo zauważyć na podstawie (1.10), że jeśli przyjąć potencjał oddziaływania w postaci (1.3) to:

$$\vec{Q} = \langle \vec{k}' | \vec{H} | \vec{k} \rangle \quad (1.10a)$$

Jawna postać \vec{Q} będzie w następnych rozdziałach podana oddzielnie dla każdej z metod.

Wzór (1.1) przyjmuje więc na podstawie (1.10) postać

$$\frac{d^2 \bar{\sigma}}{d\Omega^2 dE'} = \frac{k'}{k} W^2 \sum_{\lambda \chi} P_{\lambda} P_{\chi} \sum_{\lambda' \chi'} \left| \sum_q (-1)^q \langle \chi' | \sigma_{-q} | \chi \rangle \langle \lambda' Q_q | \lambda \rangle \right|^2 \delta(E_{\lambda'} - E_{\lambda} + \hbar \omega) \quad (1.11)$$

Rozpisując wektorową macierz Pauliego we współrzędnych sferycznych i wykonując odpowiednie sumowania otrzymujemy następujący wzór na przekrój czynny dla niespolaryzowanych neutronów

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} W^2 \sum_{\lambda\lambda'} P_{\lambda} \sum_{\lambda'} \sum_{q'} |K_{\lambda'\lambda} | q_q | \lambda \rangle|^2 \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \quad (1.12)$$

a po wstawieniu funkcji falowej $|\lambda\rangle$ z wzoru (1.2):

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} W^2 \sum_{\lambda} P_{\lambda} \sum_{\lambda'} \sum_{q'} \left| \sum_{M,i} \sum_{M',i'} a_{M'i}^* c_{M'i} a_{M'i} c_{M'i} \langle J'M' | Q_q | JM \rangle \right|^2 \times \delta(E_{\lambda} - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \quad (1.13)$$

Tak więc rozważania następnych rozdziałów będą dotyczyły przede wszystkim postaci elementu macierzowego $\langle J' M' | Q_q | JM \rangle$.

PRZYBLIŻENIE MAŁEGO κ

Zgodnie z wzorem (1.3) i (1.4) potencjał V można zapisać w postaci sumy części spinowej V_1 i części orbitalnej V_2 ,

gdzie

$$V_1 = \sum_j \text{rot} \left(\frac{\vec{\mu}_e \times \vec{R}}{R^3} \right) \cdot \vec{\mu}_N \quad (2.1)$$

$$V_2 = \sum_j \vec{\mu}_N \cdot \left[\frac{(-e)}{mc} \frac{\vec{p}_j \times \vec{R}}{R^3} \right] \quad (2.2)$$

Po scałkowaniu otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | V_1 | \vec{k} \rangle &= \int d\vec{r}_N \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_N) V_1 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_N) = \\ &= \sum_j -4\pi \vec{\mu}_N \cdot \vec{\mu}_{e1} = 4\pi \vec{\mu}_N \cdot 2\vec{s}_1 \mu_B \end{aligned} \quad (2.3)$$

gdzie

$$\vec{\mu}_{e1} = \hat{\alpha} \times \vec{\mu}_e$$

$$\vec{s} = \sum_j \vec{s}_j$$

Analogicznie element macierzowy $\langle \vec{k}' | V_2 | \vec{k} \rangle$ przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}' | V_2 | \vec{k} \rangle &= \int d\vec{r}_N \exp(-i\vec{k}' \cdot \vec{r}_N) V_2 \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}_N) = \\ &= \sum_j -4\pi \frac{e}{mc} \exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}_j) \left(\vec{p}_j \times \frac{i\vec{\alpha}}{\alpha^2} \right) \cdot \vec{L}_N \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dla małych α , dla których $\alpha r_j \ll 1$ (jeżeli początek układu ustalimy jako położenie jądra jonu \vec{r}_j będzie operatorem położenia n -tego elektronu) zastosujemy następujące przybliżenie:

$$\exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}_j) \approx 1 + i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}_j \quad (2.5)$$

Wykorzystując tożsamości

$$\begin{aligned} m \frac{d}{dt} (\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) \vec{r} &= (\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) \vec{p} + (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \vec{r} \\ (\vec{r} \times \vec{p}) \times \vec{\alpha} &= (\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) \vec{p} - \vec{r} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \\ [(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \vec{r} - \vec{r} (\vec{\alpha} \cdot \vec{p})] \times \vec{\alpha} &= 0 \end{aligned} \quad (2.6)$$

zapiszmy

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) \vec{p}_j \times \vec{\alpha} = \frac{1}{2} \left\{ (\vec{r}_j \times \vec{p}_j) \times \vec{\alpha} + m \frac{d}{dt} [(\vec{\alpha} \cdot \vec{r}_j) \vec{r}_j] \right\} \times \vec{\alpha} \quad (2.7)$$

Jeżeli zaniedbamy drugi składnik powyższej sumy, otrzymamy

$$\langle \vec{k}' | V_2 | \vec{k} \rangle = -4\pi \frac{e\hbar}{2mc} \left[\frac{(\vec{L} \times \vec{\alpha})}{\alpha^2} \times \vec{\alpha} \right] \cdot \vec{L}_N = 4\pi \mu_B \vec{L}_\perp \cdot \vec{L}_N \quad (2.8)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \vec{L} &= \sum_j \vec{L}_j \\ \hbar \vec{L} &= \vec{r} \times \vec{p} \\ \vec{L}_\perp &= \frac{(\vec{L} \times \vec{\alpha})}{\alpha^2} \times \vec{\alpha} \end{aligned}$$

Wtedy

$$\langle \vec{k}' | v | \vec{k} \rangle = \langle \vec{k}' | v_1 + v_2 | \vec{k} \rangle = 4\chi_{LB} (\vec{L}_1 + 2\vec{S}_1) \cdot \vec{u}_N \quad (2.9)$$

Przyjmując dla ziem rzadkich

$$\vec{L} + 2\vec{S} = g\vec{J} \quad (2.10)$$

możemy zapisać

$$\langle \vec{k}' | v | \vec{k} \rangle = 4\chi_{LB} g \vec{J}_1 \cdot \vec{u}_N \quad (2.11)$$

Tak więc operator \vec{Q} ze wzoru (1.5) w przybliżeniu małego \vec{x} ma postać

$$\vec{Q} = \frac{1}{2} g \vec{J}_1 \quad (2.12)$$

a tym samym wzór na przekrój czynny (1.12) przyjmuje formę

$$\begin{aligned} \sigma_A &= \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} = \frac{k'}{k} w^2 g^2 \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda |\langle \lambda' | \vec{J}_1 | \lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega) = \\ &= \frac{k'}{k} w^2 g^2 \frac{1}{4} \sum_{\lambda\lambda'} p_\lambda \sum_q |\langle \lambda' | J_{1q} | \lambda \rangle|^2 \delta(E_\lambda - E_{\lambda'} + \hbar\omega) \end{aligned} \quad (2.13)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \vec{J}_1 &= (\vec{J} \times \hat{x}) \times \hat{x} \\ J_{1q} &= -J_q + \frac{x_q}{x^2} \sum_{q_1} (-1)^{q_1} x_{-q_1} J_{q_1} \end{aligned}$$

METODA TRAMMELLA

Zapiszmy

$$\vec{p}(\vec{x} \cdot \vec{r})^n + (\vec{x} \cdot \vec{r})^n \vec{p} = \frac{2ni}{\hbar} [\mathcal{H}, \vec{r}(\vec{x} \cdot \vec{r})^n] - n[(\vec{p} \cdot \vec{x})(\vec{x} \cdot \vec{r})\vec{r} +$$

$$+ (\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^{n-1} \vec{r} (\vec{p} \cdot \vec{\alpha})] = \frac{2(n+1)m_i}{\hbar} [\mathcal{H}, \vec{r} (\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^n] - \left(\frac{n}{n+1}\right) \vec{\alpha}_x [\vec{1} (\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^{n-1} + (\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^{n-1} \vec{1}] \quad (3.1)$$

gdzie

\mathcal{H} - hamiltonian elektronów w jonie

$$\vec{1} = \vec{r} \times \vec{p}$$

\vec{r} , \vec{p} - operator położenia i pędu elektronu

Wtedy

$$\begin{aligned} & [\exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) \vec{p} + \vec{p} \exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r})] = \\ & = \frac{2m_i}{\hbar} [\mathcal{H}, \vec{r} (i\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^{-1} (\exp(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}) - 1)] - i\vec{\alpha}_x \left[\frac{1}{2} \vec{1} h(\vec{\alpha} \vec{r}) + h(\vec{\alpha} \vec{r}) \frac{1}{2} \vec{1} \right] \end{aligned} \quad (3.2)$$

gdzie

$$h(\vec{\alpha} \vec{r}) = 2 \sum \frac{(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^n}{(n+2)n!} = \frac{2}{(i\vec{\alpha} \cdot \vec{r})^2} \int_0^{i\vec{\alpha} \vec{r}} x e^x dx$$

Wstawiając (1.5) i (3.2) do wzoru (1.10a)

$$\begin{aligned} \langle \lambda' | \vec{Q} | \lambda \rangle &= \langle \lambda' | \hat{\alpha} \cdot \mathbf{x} \left\{ -\sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) (\vec{\alpha}_{\vec{q}} \cdot \mathbf{x} \hat{\alpha}) + \frac{1}{2\hbar} \hat{\alpha}_x \left[\frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) + h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) \frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{m}{\alpha} (\vec{E}_{\lambda'} - \vec{E}_{\lambda}) \sum_{\vec{q}} \vec{r}_{\vec{q}} (i\vec{\alpha} \cdot \vec{r}_{\vec{q}})^{-1} (\exp(i\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) - 1) \right\} | \lambda \rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

Jeżeli zaniedbamy ostatni składnik tego wyrażenia (patrz (7), [5]) otrzymamy

$$\begin{aligned} \langle \lambda' | \vec{Q} | \lambda \rangle &= \langle \lambda' | \hat{\alpha} \cdot \mathbf{x} \left\{ -\sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) (\vec{\alpha}_{\vec{q}} \cdot \mathbf{x} \hat{\alpha}) + \frac{1}{2\hbar} \hat{\alpha}_x \left[\frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) + h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) \frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} \right] \right\} | \lambda \rangle \\ &= \langle \lambda' | \hat{\alpha}_x \hat{\alpha} \cdot \mathbf{x} \left\{ \sum_{\vec{q}} \exp(i\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) \vec{s}_{\vec{q}} + \frac{1}{2\hbar} \left[\frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) + h(\vec{\alpha} \vec{r}_{\vec{q}}) \frac{1}{2} \vec{1}_{\vec{q}} \right] \right\} | \lambda \rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

Wybierzmy oś w kierunku \vec{x} . Wtedy

$$\langle \lambda' | \vec{Q} | \lambda \rangle = \langle \lambda' | Q_+ \hat{e}_- + Q_- \hat{e}_+ | \lambda \rangle \quad (3.5)$$

gdzie

$$Q_{\pm} = \sum_j \frac{1}{2} l_{j\pm} \hbar(\vec{x}\vec{r}_j) + \frac{1}{2} \hbar(\vec{x}\vec{r}_j) l_{j\pm} + 2s_{j\pm} \exp(i\vec{x}\vec{r}_j)$$

$$A_{\pm} = A_x \pm iA_y \quad \text{dla dowolnego wektora } \vec{A}$$

$$\left. \begin{array}{l} \hat{e}_+ \\ \hat{e}_- \end{array} \right\} \text{wektory jednostkowe.}$$

A stąd

$$\sigma_T = \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = W^2 \frac{k'}{k} \sum_{\lambda\lambda'} p_{\lambda} [|\langle \lambda' | Q_- | \lambda \rangle|^2 + |\langle \lambda' | Q_+ | \lambda \rangle|^2] \delta(E_{\lambda'} - E_{\lambda} + \hbar\omega) \quad (3.6)$$

W celu wyliczenia elementów macierzowych $\langle \lambda' | Q_{\pm} | \lambda \rangle$ Trammell wprowadził tensory pomocnicze $y_{k,q}(\vec{J})$ oraz $p_k(M_J)$

$$\langle J' M' | y_{k,q} | JM \rangle = (-1)^M \delta_{JJ'} \langle J J' M' -M | J J' k q \rangle \quad (3.7)$$

$$p_k(M_J) = \langle JM | p_k(J_z) | JM \rangle = \langle JM | y_{k,0} | JM \rangle = \quad \{12, [5]\}$$

$$= \left[\frac{(2k)(2J+1+k)}{k(2k+1)} \right]^{-\frac{1}{2}} \sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k+j}{k} \binom{2J-j}{k-j} \binom{J-M}{j} \quad (3.8)$$

\{13', [5]\}

Wtedy w oparciu o teorię Wignera-Eckarta nieprzywiedlnych operatorów tensorowych otrzymał następującą postać elementów macierzowych:

$$\begin{aligned} \langle \lambda' | Q_{\pm} | \lambda \rangle = & \pm \langle JM' | \sum_{j=0}^L (-1)^j \{ \langle j_{2j} \rangle [G_{2j,2j-1}^L y_{2j-1,\pm 1}(\vec{J}) + \\ & + G_{2j,2j+1}^L y_{2j+1,\pm 1}(\vec{J}) + 2 \langle j_{2j} \rangle [G_{2j,2j-1}^S y_{2j-1,\pm 1}(\vec{J}) + \\ & + G_{2j,2j+1}^S y_{2j+1,\pm 1}(\vec{J})] \} | JM \rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

\{22, [5]\}

gdzie

$$\langle j_k \rangle = \int_0^{\infty} dr r^2 j_k(xr) |f(r)|^2 \quad (3.10)$$

$$\langle g_k \rangle = \int_0^{\infty} dr r^2 g_k(xr) |f(r)|^2 \quad \{23, [5]\}$$

$j_k(x)$ - funkcja sferyczna Bessela

$$g_k(x) = 2x^{-2} \int_0^x y j_k(y) dy$$

$f(r)$ - funkcja radialna elektronu

oraz

$$G_{j, j_{\pm 1}}^L = \frac{2j+1}{2} G(1; Y_j(\theta, \varphi); 1) \alpha_{j, j_{\pm 1}}(1) G(1, \dots, 1_n, L; \sum_n Y_{j_{\pm 1}}(\bar{L}_n) 1_{-1, -1_n}; \bar{L}) x \\ \times G(L, S, J; Y_{j_{\pm 1}}(\bar{L}); L, S, J)$$

$$G_{j, j_{\pm 1}}^S = (2j+1) G(1; Y_j(\theta, \varphi); 1) G(1, \dots, 1_n, L; Y_j(\bar{L}_n); 1, \dots, 1_n, \bar{L}) x \\ \times [\alpha_{j, j_{\pm 1}}(j) G(L, S, J; Y_j(\bar{L}); L, S, J) - \alpha_{j, j_{\pm 1}}(L) G(L, S, J; Y_{j_{\pm 1}}(\bar{L}); L, S, J)]$$

$$G(1; Y_n(\theta, \varphi); 1) = (-1)^{n/2} \frac{(2j+1)}{(2n+1) 2^{1/2}} \frac{n!}{(2^n n!)^2} \frac{(1 + \frac{1}{2}n)!}{(1 - \frac{1}{2}n)!} \left[\frac{(2j-1)!}{(2j+n+1)!} \right]^{1/2} \quad (n - \text{parzyste})$$

= 0

(n - nieparzyste)

$G(1; Y_n(\theta, \varphi); 1)$ - funkcja Racah W

$$G(1, \dots, 1_n, L; Y_j(\bar{L}_n); 1, \dots, 1_n, L) = \left[p_j(1) + p_j(1-1) + \dots + p_j(1-n+1) \right] / \binom{n}{j} p_j(L) \\ \{27, [5]\}$$

$$\alpha_{k,k+1}(J) = -2[(k+1)(k+2)]^{\frac{1}{2}} / c_{k+1,k}(J)$$

$$\alpha_{k,k-1}(J) = [k^{\frac{1}{2}}(k+1)^{\frac{1}{2}} / c_{k-1,k-2}(J)] [2c_{k+1,k-2}(J) / c_{k+1,k}(J) - c_{k,k-2}]$$

{20, [5]}

$$c_{nr}(J) = p_n(J+1) p_r(J) + (-1)^{r+n+1} p_n(J) p_r(J+1)$$

METODA LOVESEYA

Zapiszmy wzór (1.5) w postaci

$$\bar{Q} = \bar{Q}_1 + \bar{Q}_2 \quad (4.1)$$

gdzie

$$\bar{Q}_1 = \sum_j [\exp(i\vec{x} \cdot \vec{r}_j) \hat{x}_x (\hat{s}_j x \hat{v})] \quad (4.2)$$

część spinowa

$$\bar{Q}_2 = \sum_j \frac{1}{2\hbar^2 x} [\exp(i\vec{x} \cdot \vec{r}_j) \hat{x}_x \hat{p}_j + \hat{x}_x \hat{p}_j \exp(i\vec{x} \cdot \vec{r}_j)] \quad (4.3)$$

część orbitalna

Rozpisując:

$$\exp(i\vec{x} \cdot \vec{r}_j) = \sum_{KQ} i^k j_k(x r_j) Y_{KQ}(\hat{r}) Y_{KQ}^*(\hat{x}) \quad (4.4)$$

oraz wyrażając wszystkie operatory w postaci tensorów nieprzywiedlnych Lovesey liczył oddzielnie elementy macierzowe części spinowej i orbitalnej. Wykorzystując własności funkcji sferycznych oraz posługując się technikami algebry Racah można wtedy otrzymać następujący wzór na przekrój czynny

$$\sigma_L = \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \frac{k'}{k} w^2 \sum_{\lambda} P_{\lambda} \sum_{\lambda'} \sum_Q \left| \sum_{\substack{n \\ M M'}} c_i c_n^* a_M a_{M'}^* [A(K K') + B(K K')] \right| x \sum_{Q Q'} (4\pi)^{\frac{1}{2}} Y_{KQ}(\hat{x}) \langle K' Q' J M | J' M' \rangle \langle K Q K' Q' | 1 Q \rangle |^2 \delta(\hbar\omega + E_{\lambda} - E_{\lambda'}) \quad (4.5)$$

Gdzie wyrażenia $A(K, K')$ oraz $B(K, K')$ wyrażają się poprzez symbole n -j oraz całki $\langle j_k \rangle$ (patrz (3.10)):

$$\begin{aligned}
 A(K, K') &= (2l+1)^2 \sqrt{\{2(2L+1)(2L'+1)(2J'+1)\}} \delta_{SS'} (-1)^{S+1+J'+L+L'} \times \\
 &\times i^{K'+1} (2K'+1)(2K+1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & K & K' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ K' & K & K' \end{Bmatrix} \times \\
 &\times A(K', K', 1) \{ \langle j_{K'-1} \rangle + \langle j_{K'+1} \rangle \} \begin{Bmatrix} J' & K' & J \\ L & S & L' \end{Bmatrix} \times \\
 &\times n \sum_{\bar{Q}} (-1)^{\bar{L}} (\theta\{1\bar{\theta}\}) (\theta'\{1\bar{\theta}'\}) \begin{Bmatrix} L' & K' & L \\ 1 & \bar{L} & 1 \end{Bmatrix} \quad \{6, 55, [15]\}
 \end{aligned}
 \tag{4.6}$$

$$\theta = vSL \quad \theta' = v'S'L' \quad \bar{\theta} = \bar{v}\bar{S}\bar{L}$$

$$\begin{aligned}
 A(K', K', 1) &= (-1)^{\frac{1}{2}(K'-1)} \frac{1}{2(2l+1)} \times \\
 &\times \frac{\left\{ \frac{1}{2}(2l+1+K') \right\}!}{\left\{ \frac{1}{2}(K'-1) \right\}! \left\{ \frac{1}{2}(K'+1) \right\}! \left\{ \frac{1}{2}(2l+1-K') \right\}!} \times \\
 &\times \left\{ \frac{(K'-1)! (K'+1)! (2l+1-K')!}{(2l+1+K')!} \right\}^{\frac{1}{2}}
 \end{aligned}
 \tag{4.7}$$

$$\begin{aligned}
 B(K, K') &= \left(\frac{2K'+1}{3} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{2}{3} i^{K_C} C(K, K') - (-1)^{K'} \left\{ \frac{10}{3} (2K+1) \right\}^{\frac{1}{2}} \right] \times \\
 &\times \sum_{\bar{K}} i^{\bar{K}} (2\bar{K}+1)^{\frac{1}{2}} C(\bar{K}, K') \begin{pmatrix} 2 & K & K \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} K' & \bar{K} & 1 \\ 2 & 1 & K \end{Bmatrix} \quad \{6, 79, [15]\}
 \end{aligned}
 \tag{4.8}$$

$$\begin{aligned}
 C(K, K') &= (-1)^{L'+S'} \left\{ \frac{3}{2} (2K+1)(2K'+1)(2S'+1)(2S+1)(2L+1)(2L'+1)(2J'+1) \right\}^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\times (2l+1) \begin{pmatrix} 1 & K & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & K & K' \\ S' & L' & J' \\ S & L & J \end{Bmatrix} \langle j_K(\mathcal{K}) \rangle \times \\
 &\times n \sum_{\bar{\theta}} (-1)^{\frac{1}{2} + \bar{S} + \bar{L}} (\theta\{1\bar{\theta}\}) (\theta'\{1\bar{\theta}'\}) \begin{Bmatrix} S & 1 & S' \\ \frac{1}{2} & \bar{S} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & K & L' \\ 1 & \bar{L} & 1 \end{Bmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{4.9}$$

Korzystając z wzorów (1.5) i (1.10) możemy zapisać

$$\langle \lambda' | \chi' | \vec{\sigma} \cdot \vec{q} | \lambda \rangle = w \langle \lambda' | \vec{\sigma} | \lambda \rangle \vec{b}_\perp \quad (5.1)$$

gdzie

$$\vec{b}_\perp = -i \left(\frac{m}{e k \lambda} \right) \hat{x} \vec{J} \quad (5.2)$$

$$\vec{J} = \langle \lambda' | \int \vec{j}(\vec{r}) \exp(i \vec{\lambda} \vec{r}) d\vec{r} | \lambda \rangle \quad (5.3)$$

$$\vec{j}(\vec{r}) - \text{patrz} \quad (1.7) \\ \{32, [16]\}$$

A więc wtedy

$$\langle \lambda' | e_q | \lambda \rangle = b_{\perp q} \quad (5.4)$$

Zapiszmy

$$J_q = \vec{J} \cdot \vec{e}_q = \langle \lambda' | \int \vec{j}(\vec{r}) \vec{e}_q \exp(i \vec{\lambda} \vec{r}) d\vec{r} | \lambda \rangle \quad (5.5)$$

Wiadomo (patrz [18]), że jeżeli \vec{k}' jest wektorem falowym płaskiej spolaryzowanej fali elektromagnetycznej o kierunku polaryzacji \vec{e}_q' , to falę tę można rozłożyć na multipole w następujący sposób:

$$\vec{e}_q' \exp(i \vec{k}' \cdot \vec{r}) = - \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{LM} (q A_{LM}^{(m)} + A_{LM}^{(e)}) D_{Mq}^L(\alpha \beta \gamma) \quad (5.6) \\ q = \pm 1$$

gdzie

$$A_{LM}^{(e)} = \left\{ k [L(L+1)]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-1} \nabla \times \vec{L} \phi_{LM} \\ A_{LM}^{(m)} = \left\{ [L(L+1)]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-1} \vec{L} \phi_{LM} \quad (5.7)$$

możemy zapisać

$$J_q = \left(\frac{e\hbar x}{m}\right) \sum_{\substack{km \\ \uparrow j}} (-1)^q [1 - (-1)^{k+j+\pi}] [4\pi(2j+1)]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k & 1 & j \\ m & -q & q-m \end{pmatrix} x \begin{pmatrix} k & 1 & j \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} Y_j(\hat{x}) Y_{j, q-m} < \lambda' | T_{km}^{(\pi)} | \lambda > \quad q=0, \pm 1 \quad (5.11)$$

gdzie

$$T_{km}^{(e)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m}{e\hbar x}\right) \int \vec{A}_{km}^{(e)} \cdot \vec{j} \, d\vec{r} \quad (5.12)$$

$$T_{km}^{(m)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m}{e\hbar x}\right) \int \vec{A}_{km}^{(m)} \vec{j} \cdot d\vec{r}$$

a stąd

$$\vec{j} = \left(\frac{e\hbar x}{m}\right) \sum_{km} \left(\frac{\partial \vec{A}}{\partial k+1}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \vec{X}_{km}^* (\hat{x}) < \lambda' | T_{km}^{(m)} | \lambda > - i [\hat{x} \times \vec{X}_{km}^* (\hat{x}) < \lambda' | T_{km}^{(e)} | \lambda > \right\} \quad (5.13)$$

gdzie $\vec{X}_{km}(\hat{x})$ jest wektorową sferyczną harmoniką [19]:

$$\vec{X}_{km}(\hat{x}) = \vec{Y}_{km}(\hat{x}) = \sum_{k' l} \sum_{q=-1}^1 < k' l q | km > Y_{k' l}(\hat{x}) \chi_{q} \quad (5.14)$$

$$\chi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_x + i\hat{e}_y)$$

$$\chi_0 = \hat{e}_z$$

$$\chi_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{e}_x - i\hat{e}_y)$$

$$\hat{x} \times \vec{X}_{km} = \frac{i}{(2k+1)^{\frac{1}{2}}} \left[\sqrt{k} \vec{Y}_{k, k+1, 1}^m + (k+1)^{\frac{1}{2}} \vec{Y}_{k, k-1, 1}^m \right]$$

Wtedy

$$\vec{j}_1 = \sum_{km} \left(\frac{e\hbar x}{m}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \vec{X}_{km}^* (\hat{x}) < \lambda' | T_{km}^{(e)} | \lambda > - i [\hat{x} \times \vec{X}_{km}^* (\hat{x}) < \lambda' | T_{km}^{(m)} | \lambda > \right\} \quad (5.15) \quad \{23, [16]\}$$

Wyrażenia $\langle \lambda' | T_{km}^{(X)} | \lambda \rangle$ we wzorze (5.15) można zgodnie z (5.12) i (1.7) zapisać w postaci następującej sumy:

$$\langle \lambda' | T_{km}^{(X)} | \lambda \rangle = \langle \lambda' | T_{km}^{(I)}(0) | \lambda \rangle + \sum_j \langle \lambda' | T_{km}^{(X)}(j) | \lambda \rangle \quad (5.16)$$

= 1, 2, \dots

Pierwszy składnik $\langle \lambda' | T_{km}^{(I)}(0) | \lambda \rangle$ tej sumy odpowiada przybliżeniu nie-relatywistycznemu, tzn. gdy $\vec{v}_0 = \frac{\vec{p}_0}{m}$, a następne są przyczynkami relatywistycznymi wynikającymi z uwzględnienia we wzorze (1.8) następnych członów hamiltonianu (1.9)

$$\vec{v}_0 = \frac{\vec{p}_0}{m} + \sum_j \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j}$$

Wtedy wzór (5.15) przyjmuje postać

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 = & \sum_{km} \left(\frac{8\mathcal{H}}{2k+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \vec{X}_{km}^*(\hat{x}) \langle \lambda' | T_{km}^{(e)}(0) | \lambda \rangle - i [\hat{x}_x \vec{X}_{km}^*(\hat{x})] \langle \lambda' | T_{km}^{(m)}(0) | \lambda \rangle \right\} + \\ & + \sum_j \sum_{km} \left(\frac{8\mathcal{H}}{2k+1} \right)^{\frac{1}{2}} \left\{ \vec{X}_{km}^*(\hat{x}) \langle \lambda' | T_{km}^{(e)}(j) | \lambda \rangle - i [\hat{x}_x \vec{X}_{km}^*(\hat{x})] \langle \lambda' | T_{km}^{(m)}(j) | \lambda \rangle \right\} \end{aligned} \quad (5.17)$$

Tak więc również \vec{b}_1 , a co za tym idzie całe wyrażenie na przekrój czynny (1.12) możemy rozpatrywać jako sumę części nierelatywistycznej i relatywistycznych poprawek. Postępując w ten sposób Stassis liczył oddzielnie wyrażenie na przekrój czynny w granicy nierelatywistycznej, tzn. gdy $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0$, a następnie poprawkę relatywistyczną przyjmując \mathcal{H}_1 zgodnie z wzorem (1.9).

Rachunek (sprowadza się do wyliczenia elementów $\langle \lambda' | T_{km}^{(X)} | \lambda \rangle$) wykonany podobnie jak u Loveseya technikami algebry Racah operatorów tensorowych nieprzywiedlnych, prowadzi do następujących wyrażeń:

a. Przybliżenie nierelatywistyczne

$$\begin{aligned} \langle \lambda' | Q | \lambda \rangle = & \vec{b}_{1q} = \sum_{km} i^{k+1} \left(\frac{8}{2k+1} \right)^{\frac{1}{2}} \vec{X}_{km}^*(\hat{x}) [R_2(k) \langle \Theta JM | W_m^{(0,k)k} | \Theta' J' M' \rangle + \\ & + R_1(k,k) \langle \Theta JM | W_m^{(1,k)k} | \Theta' J' M' \rangle - i [\hat{x}_x \vec{X}_{km}^*(\hat{x})] [R_0(k) \langle \Theta JM | W_m^{(0,k)k} | \Theta' J' M' \rangle + \end{aligned}$$

$$\sum_{k=k^1} R_1(k^1, k) \langle \Theta JM | W_m^{(1, k^1)k} | \Theta' J' M' \rangle \quad (5.20)$$

58, [16]

gdzie

$$\langle \Theta JM | W_m^{(k^1, k^2)k} | \Theta' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} [J, K, J']^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M & n & M' \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} S & S' & k^1 \\ L & L' & k^2 \\ J & J' & k \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \langle \Theta || W^{(k^1, k^2)} || \Theta' \rangle$$

$$\langle \Theta || W^{(k^1, k^2)} || \Theta \rangle = n[S, S', L, L', k^1, k^2]^{\frac{1}{2}} \sum_{\bar{\Theta}} (\Theta || \bar{\Theta}) (\bar{\Theta}' || \bar{\Theta}) (-1)^{\bar{S} + \frac{1}{2} + S + k^1 + \bar{L} + 1 + L + k^2} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} S & k^1 & S' \\ \frac{1}{2} & \bar{S} & \frac{1}{2} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & k^2 & L' \\ 1 & \bar{L} & 1 \end{Bmatrix}$$

$$R_0(k) = (-1)^{k+1(2l+1)} \left[\frac{1(1+1)(2l+1)(2k+3)}{k} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & k+1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} k+1 & 1 & k \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times (\langle j_{k+1} \rangle + \langle j_{k-1} \rangle)$$

$$R_1(k^1, k) = (-1)^{l_1 k - k^1 - 1(2l+1)} \left[\frac{(2k+1)(2k^1+1)}{2} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k^1 & 1 & k \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} 1 & k^1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} \langle j_{k^1} \rangle$$

$$\langle j_k \rangle = \int_0^{\infty} r^2 f(r) f'(r) j_k(\alpha r) dr$$

$$\Theta = \nu SL$$

ν - pozostałe nie wyszczególnione liczby kwantowe potrzebne do określenia stanu

$f(r), f'(r)$ - jednoelektronowe radialne funkcje falowe stanów $|\Theta_{JM}\rangle$ i $|\Theta'_{J'M'}\rangle$

$$R_2(k) = \frac{(-1)^1 (21+1) \left[\frac{2k+1}{k(k+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & k & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \bar{R}_2$$

$$\bar{R}_2 = \frac{(E_\lambda - E_{\lambda'}) 2m}{\hbar^2 \alpha^2} \int_0^\infty r^2 f(r) f'(r) \frac{d}{dr} [r j_k(\alpha r)] dr + \int_0^\infty r^3 j_k(\alpha r) \left(r \frac{df}{dr} - f \frac{dr}{dr} \right) dr$$

b. Poprawka relatywistyczna. Wyliczenie poprawki relatywistycznej w wyrażeniu \bar{b}_1 sprowadza się zgodnie z wzorem (5.17) do wyliczenia wyrażenia $\langle \lambda | T_{km}^{(\pi)}(1) | \lambda \rangle$

Otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \lambda | T_{km}^{(\pi)}(1) | \lambda \rangle &= i^{k+1} (R_4(k) \langle \Theta_{JM} | W_m^{(0,k)k} | \Theta'_{J'M'} \rangle + \quad (5.21) \\ &+ \sum_{k'=k+1} R_3(k',k) \langle \Theta_{JM} | W_m^{(1,k')k} | \Theta'_{J'M'} \rangle) \quad \{63, [16]\} \quad k=1,3,\dots,2l+1 \end{aligned}$$

$$\langle \lambda | T_{km}^{(\theta)}(1) | \lambda \rangle = i^{k+1} R_5(k) \langle \Theta_{JM} | W_m^{(0,k)k} | \Theta'_{J'M'} \rangle \quad k=2,4,\dots,2l \quad \{64, [16]\} \quad \begin{matrix} (5.22) \\ \end{matrix}$$

gdzie

$$R_3(k',k) = (-1)^1 (2l+1) \left[\frac{2k'+1}{2(2k'+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} k' & 1 & k \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & k' & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \bar{R}_3(k)$$

$$\bar{R}_3(k) = \frac{m}{\hbar^2} \int r^4 (j_{k+1} + j_{k-1}) \xi(r) f(r) f'(r) dr$$

$$R_4(k) = (-1)^{k+1} (2l+1) \left[\frac{1(1+1)(2l+1)(2k+1)}{k} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & k+1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} k+1 & 1 & k \\ 1 & 1 & 1 \end{Bmatrix} \bar{R}_4(k)$$

$$\bar{R}_4(k) = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \int r^2 dr (j_{k+1} + j_{k-1}) \left[r (\nabla^2 f' - \frac{1(1+1)}{r^2} f') + r (\nabla^2 f - \frac{1(1+1)}{r^2} f) \right]$$

$$R_5(k) = \frac{(-1)^1}{1} (2l+1) \left[\frac{2k+1}{k(k+1)} \right]^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 1 & k & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \bar{R}_5(k)$$

$$\bar{R}_5(k) = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \int r^3 dr j_k(\alpha r) \left[r \frac{d}{dr} (\nabla^2 f' - f' \frac{d}{dr} (\nabla^2 f) - \frac{1(1+1)}{r^2} (r \frac{df'}{dr} - f \frac{dr}{dr})) \right]$$

Porównanie i dyskusja użyteczności
omówionych metod

Spróbujmy przeanalizować metody omówione w poprzednich rozdziałach. Wszystkie one z wyjątkiem metody Stassisa dotyczą przybliżenia nierelatywistycznego. Wynika to z faktu przyjęcia za podstawę obliczeń we wzorze (1.10) operatora \vec{Q} w postaci (1.10a). (Porównaj wzór (1.1) i (1.5) z wzorami (2.1), (2.2) - aproksymacja małego α , (3.2) i (3.3) - metoda Trammella, (4.2) i (4.3) - metoda Loveseya). Tylko Lovesey (oprócz Stassisa) rozpracowuje pełną postać (1.5) operatora \vec{Q} . Trammell pomija w niej (patrz (3.3)) składnik postaci:

$$\frac{m}{\alpha} (E_{\lambda'} - E_{\lambda}) \sum_j \vec{r}_j (i\vec{\alpha}\vec{r}_j)^{-1} [\exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) - 1]$$

Metoda Trammella jest więc równoważna metodzie Loveseya [11] tylko dla rozpraszania elastycznego, gdy $E_{\lambda'} = E_{\lambda}$, czyli gdy powyższe wyrażenie jest dokładnie równe zero. Pod względem rachunkowym metoda Trammella jest bardziej kłopotliwa. W końcowym wzorze występują w niej bowiem dwa typy całek: $\langle j_k \rangle$ i $\langle g_k \rangle$ (patrz (3.10)) a u Loveseya tylko całki $\langle j_k \rangle$. Najmniej dokładną z wymienionych metod jest szacunkowa metoda przybliżenia małego α . Głównym jej założeniem jest warunek $\alpha r_j \ll 1$ a stąd

$$\exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) \approx 1 + i\vec{\alpha}\vec{r}_j \quad (2.5)$$

Następne przybliżenie to

$$m \frac{d}{dt} [(\vec{\alpha}\vec{r}_j)\vec{r}_j] \times \vec{\alpha} = 0 \quad \text{patrz (2.7)}$$

oraz

$$\vec{L} + 2\vec{S} = g\vec{J} \quad (2.10)$$

Metoda ta nadaje się szczególnie dobrze dla jonów ziem rzadkich, dla których promień r_j orbity elektronowej 4f jest mały.

W metodzie Stassisa element macierzowy $\langle \lambda' | \hat{Q} | \lambda \rangle$ ma postać (patrz (5.4) i (5.2)):

$$\langle \lambda' | \hat{Q} | \lambda \rangle = \hat{J} = -i \frac{\hbar}{2m\alpha} \hat{\alpha} \times \hat{J} \quad (6.1)$$

gdzie

$$\hat{J} = \langle \lambda' | \int \hat{J}(\vec{r}) \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}) d\vec{r} | \lambda \rangle \quad (5.3)$$

$$\hat{J}(\vec{r}) = \hat{J}_c(\vec{r}) + \hat{J}_m(\vec{r}) \quad (1.7)$$

$$\hat{J}_c(\vec{r}) = \sum_j \frac{1}{2} e_j [\vec{v}_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) + \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) \vec{v}_j]$$

$$\hat{J}_m(\vec{r}) = \sum_j \frac{\hbar e_j}{m_j} \nabla \times [\vec{s}_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j)]$$

Zapiszmy

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}) \sum_j \vec{s}_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) &= \sum_j \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) \vec{s}_j \\ \int d\vec{r} \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}) \left[\sum_j \vec{v}_j \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) + \delta(\vec{r}-\vec{r}_j) \vec{v}_j \right] &= \\ &= \sum_j \vec{v}_j \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) + \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) \vec{v}_j \end{aligned} \quad (6.2)$$

Wstawiając (6.2) do (6.1) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \langle \lambda' | \hat{Q} | \lambda \rangle = \hat{J} &= \langle \lambda' | \sum_j [\exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) \hat{\alpha} \times (\vec{s}_j \times \hat{\alpha})] + \\ &+ \frac{i\hbar}{2m\alpha} \sum_j [\exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j) \hat{\alpha} \times \vec{v}_j + \vec{v}_j \times \hat{\alpha} \exp(i\vec{\alpha}\vec{r}_j)] | \lambda \rangle \end{aligned} \quad (6.3)$$

Jeżeli ograniczymy się do przybliżenia nierelatywistycznego tzn. przyjmiemy (patrz (1.8)):

$$\vec{v}_j = \frac{\vec{p}_j}{m} \quad (6.4)$$

wzór (6.3) będzie miał postać:

$$\langle \lambda | \hat{Q} | \lambda \rangle = \bar{Q}_1 = \langle \lambda | \sum_q [\exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}_q) \hat{\alpha}_x(\vec{a}_q, x\vec{\lambda})] + \\ + \frac{i}{2\pi\vec{\lambda}} \sum_q [\exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}_q) \hat{\alpha}_x p_q + \hat{\alpha}_x p_q \exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}_q)] | \lambda \rangle \quad (6.5)$$

Łatwo zauważyć równoważność na powyższym etapie metody Stassisa i metody Loveseya porównując operator \bar{Q} ze wzoru (6.5) z analogicznym operatorem (4.1) w metodzie Loveseya. W dalszej części obie metody różnią się znacznie od siebie sposobem grupowania wyrazów. Lovesey rozkłada operator \bar{Q} na część spinową i orbitalną (patrz (4.2), (4.3)), pozostawiając w każdej z nich czynnik $\exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}_q)$. Stassis natomiast rozkłada $\bar{e}_q \exp(i\vec{\lambda} \cdot \vec{r}_q)$ w szereg (5.8) uzyskując w ten sposób szereg elektrycznych i magnetycznych multipolowych operatorów. Dalsze obliczenia obu metod, prowadzone na bazie algebry Racah, nie wprowadzają jednak żadnych dodatkowych przybliżeń. Tak więc nie widać powodu, aby w granicy nierelatywistycznej wyniki rachunków numerycznych wykonanych na ich podstawie mogły różnić się od siebie. Metoda Loveseya jest natomiast dla tych rachunków wygodniejsza. (W metodzie Stassisa obok całek $\langle j_k \rangle$ występują dodatkowo całki R_2).

Reasumując, w granicy nierelatywistycznej wydaje się najkorzystniejszym zastosowanie do konkretnych obliczeń metody Loveseya. Okazuje się przy tym (patrz następny rozdział), że wyniki otrzymane tą metodą mogą znacznie odbiegać od wyników uzyskanych przy użyciu szacunkowej metody przybliżenia małego λ .

WYNIKI PRZEKROJU CZYNNEGO

NA ROZPRASZANIE NEUTRONÓW W PrF_3

Dla ilustracji powyższych rozważań przedstawiam tytułem przykładu wyniki przekroju czynnego na rozpraszanie neutronów w PrF_3 uzyskane metodą przybliżenia małego λ i metodą Loveseya. Szczegóły dotyczące tych obli-

czeń będą przedmiotem osobnej publikacji). Do obliczeń użyte funkcje fa-
lowych ze sprzężeniem pośrednim a funkcje radialne wykorzystano z pracy
[20]. Parametry zewnętrzne przyjęto zgodne z parametrami spektrometru
w Dubnej.

kąt rozpraszania neutronów $\theta = \frac{\pi}{2}$

temperatura $T = 80K$

Ze względu na polikrystaliczność próbek zastosowano średniowanie:

$$\sigma' = \frac{1}{4\pi} \int \sigma d\hat{\alpha}$$

gdzie

$$\hat{\alpha} = \vec{\alpha}$$

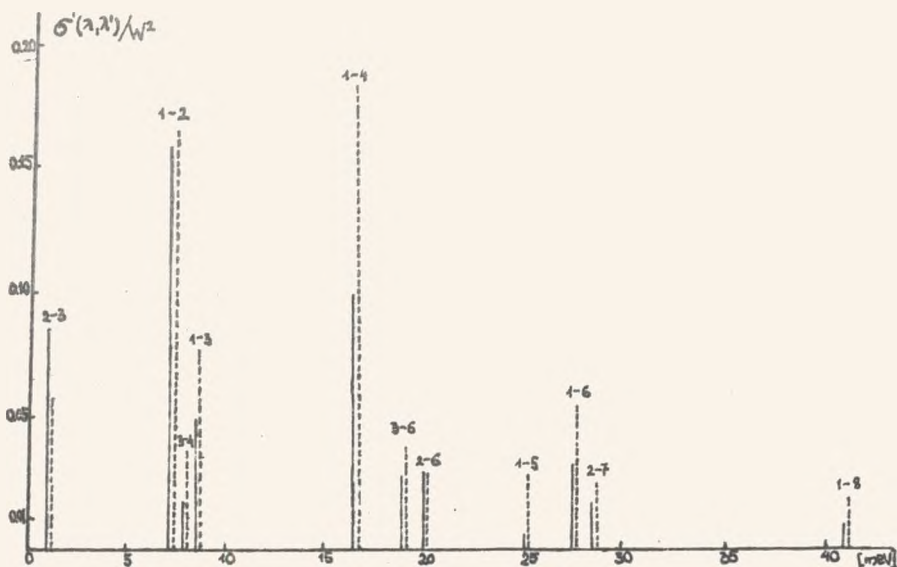
$$\vec{\alpha} = \vec{k} - \vec{k}'$$

$$\sigma = \sigma_A, \sigma_L$$

Tabela 1

Przekrój czynny na rozpraszanie neutronów w PrF_3
dla metody Loveseya i przybliżenia małego α
(przejścia między poziomami w kolejności
wzrastającej zmiany energii ΔE)

$\lambda - \lambda'$	ΔE [meV]	$\sigma'_L(\lambda, \lambda')/W^2$	$\sigma'_A(\lambda, \lambda')/W^2$
2 - 3	1.15	0.086	0.058
1 - 2	7.40	0.163	0.166
3 - 4	8.15	0.018	0.038
1 - 3	8.55	0.051	0.079
2 - 4	9.30	0.003	0.004
1 - 4	16.70	0.100	0.184
3 - 6	19.05	0.028	0.043
2 - 6	20.20	0.031	0.030
1 - 5	25.10	0.007	0.037
1 - 6	27.60	0.032	0.058
2 - 7	28.60	0.021	0.025
1 - 8	41.00	0.013	0.020



Rys. 1. Przejścia energetyczne (według tab. 1). Linia przerywaną zaznaczono przybliżenie małego λ

ZAKOŃCZENIE

Na podstawie tab. 1 i rys. 1 można stwierdzić, że przybliżenie małego λ w porównaniu z metodą Loveseya w wielu wypadkach zmienia wzajemne relacje pików (Stosunki natężeń pików są często używane w pracach doświadczalnych do opracowywania wyników eksperymentu). Metoda przybliżenia małego λ , chociaż szybka i wygodna w rachunkach, wydaje się więc być nieprzydatna w wielu sytuacjach ze względu na małą dokładność, a jej stosowanie może prowadzić do dużych błędów. Potwierdza to mój wniosek końcowy rozdziału 6 o użyteczności metody Loveseya.

LITERATURA

1. Bloch F., Phys. Rev. 50, 259 (1936).
2. De Gennes P.G., Magnetism III, p. 115, T. Rado, H. Suhl editors, Academic Press, 1963.
3. Halpern O., Johnson M.H., Phys. Rev. 55, 898 (1939).
4. Schwinger J., Phys. Rev. 51, 544 (1937).
5. Trammell G.T., Phys. Rev. 92, 1387 (1953).
6. Koehler W.C., Wollan E.O., Phys. Rev. 92, 1380 (1953).
7. Koehler W.C., Wollan E.O., Phys. Rev. 110, 37 (1958).
8. Odier S., Saint-James D., J. Phys. Chem. Solids 17, 117 (1960).
9. Johnston D.F., Proc. Phys. Soc. 88, 37 (1966).
10. Johnston D.F., Rimmer D.E., J. Phys. C2, 1151 (1969).
11. Lovesey S.W., J. Phys. C2, 470 (1969).
12. Lovesey S.W., Rimmer D.E., Rep. Prog. Phys. 32, 333 (1969).
13. Balcar E., Lovesey S.W., Phys. Lett. A31, 67 (1970).
14. Balcar E., Lovesey S.W., J. Phys. C3, 1292 (1970).
15. Marshall W., Lovesey S.W., Theory of Thermal Neutron Scattering (Oxford U.P., London, 1970).
16. Stassis C., Deckman H.W., Phys. Rev. B, 12, 1885 (1975).
17. Stassis C., Deckman H.W., J. Phys. C, 9, 2241 (1976).
18. Rose H.J., Brink D.M., Rev. Mod. Phys. 39, 306 (1967).
19. Blatt J.M., Weisskopf V.F., Theoretical Nuclear Physics (Wiley New York, 1952).
20. Freeman A.J., Watson, Phys. Rev. 127, 2058 (1962).

SUMMARY

This article contains analysis and comparison of different methods of the cross section calculation for the magnetic scattering of thermal neutrons by paramagnetic ion (Trammell method, Lovesey method, Stassis method, small- λ -approximation). Also a discussion of the applied assumptions is given. It is shown that the Lovesey method is the most convenient. Finally, results for PrF_3 are presented, obtained by adopting Lovesey and small- λ -approximation methods.

РЕЗЮМЕ

Статья содержит анализ и сравнение разных методов вычисления сечения рассеяния тепловых нейтронов на парамагнитном ионе /метод Трамелла (Trammell), метод Лёвесея (Lovesey), метод Стассиса (Stassis) и малого μ приближение, а также обсуждение использованных оснований. Показано, что самый удобный метод Лёвесея. Представлены также результаты, полученные методом Лёвесея и малого μ приближения для PrF_3 .

ANEKS I
ZESTAW WAŻNIEJSZYCH OZNACZEŃ

Oznaczenia innych prac

Oznaczenia stosowane przez autora	Wzór	Przybliżenie małego χ	Metoda Trammella	Metoda Loveseya	Metoda Stassisa
		[2]	[5]	[12]	[16]
M	1.1	M	M	m	M
\vec{k}	1.1	\vec{k}_0	\vec{p}_0	\vec{k}	\vec{k}
\vec{k}'	1.1	\vec{k}_1	\vec{p}_f	\vec{k}'	\vec{k}'
$ \lambda\rangle$	1.1	$ n\rangle$	$ \psi_0\rangle$	$ \lambda\rangle$	$ i\rangle$
$ \lambda'\rangle$	1.1	$ n'\rangle$	$ \psi_f\rangle$	$ \lambda'\rangle$	$ f\rangle$
$ \chi\rangle$	1.1	$ \sigma\rangle$	$ \chi_0\rangle$	$ \sigma\rangle$	
$ \chi'\rangle$	1.1	$ \sigma'\rangle$	$ \chi_f\rangle$	$ \sigma'\rangle$	
P_λ	1.1	P_n		P_λ	
P_χ	1.1	P_σ		P_σ	
E_λ	1.1	E_n	E_0		E_i
$E_{\lambda'}$	1.1	$E_{n'}$	E_f		E_f
V	1.1	\mathcal{K}	H_{int}	$V(\vec{r})$	
H	1.3			H	
\mathcal{K}	1.7		H		H
$\vec{\mu}_e$	1.4	$\vec{\mu}_e$		$\vec{\mu}$	
$\vec{\mu}_N$	1.6	$\vec{\mu}_n$		$\vec{\mu}_N$	$\vec{\mu}_n$
m	1.4	m		m_e	m

Oznaczenia innych prac

Oznaczenia stosowane przez autora	Wzór	Przybliżenie małego $\bar{\alpha}$	Metoda Trammella	Metoda Loveseya	Metoda Stassisa
		[2]	[5]	[12]	[16]
\vec{r}_e vel \vec{r}	1.4	\vec{R}_e vel \vec{R}	\vec{r}_i	\vec{r}_j	\vec{r}_i vel \vec{r}
\vec{r}_N	1.4	\vec{R}_n	\vec{r}_N		\vec{r}_n
$\vec{R} = \vec{r}_N - \vec{r}$	1.4	\vec{F} vel \vec{Q}		\vec{X}	
\vec{p}_e vel \vec{p}	1.4	\vec{p}		\vec{p}_e vel \vec{p}	\vec{p}_i
$\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}'$	1.5	$\vec{q} = \vec{k}_0 - \vec{k}_1$	$= p_0 - p_f$	$\vec{\alpha} = \vec{k} - \vec{k}'$	\vec{q}
\vec{A}_e	1.4				
q	1.10			$D^{(L)}$	
$\langle \lambda' \vec{Q} \lambda \rangle$	1.10				\vec{b}
\vec{A}_N	1.6	\vec{A}_n			$\vec{A}_n(\vec{r})$
$\vec{J}(\vec{r})$	1.7				$\vec{J}(\vec{r})$
$\vec{J}_c(\vec{r})$	1.7				$\vec{J}_c(\vec{r})$
$\vec{J}_m(\vec{r})$	1.7				$\vec{J}_m(\vec{r})$
\vec{v}_e	1.7				\vec{v}_i
\vec{s}_e	1.5		\vec{s}_i	\vec{s}_e	\vec{s}_i
\vec{l}_e vel \vec{l}	3.1	\vec{l}	\vec{l}_i		\vec{l}_i
$\xi(r_e)$	1.8				$\xi(r_i)$
$w = \gamma e^2 / mc^2$	1.10			D	
$q = 0, \pm 1$	1.10			$q = 0, \pm 1$	$p = 0, \pm 1$

Oznaczenia innych prac

Oznaczenia stosowane przez autora	Wzór	Przybliżenie	Metoda	Metoda	Metoda
		małego κ	Trammella	Loveseya	Stassisa
		[2]	[5]	[12]	[16]
$\vec{L} = \sum_j \vec{L}_j$	2.8	\vec{L}		\vec{L}	
$\vec{S} = \sum_j \vec{S}_j$	2.3	\vec{S}		\vec{S}	
\vec{J}	2.10	\vec{J}			
\vec{J}	5.3				\vec{J}
\vec{J}	5.2				\vec{J}
$n(\vec{x}, \vec{r}_j)$	3.2		$r(\vec{k}, \vec{r}_j)$		
Q_{\pm}	3.5		P_{\pm}		
$\langle j_k \rangle$	3.10		$F_k^S(k)$	$\langle j_k(x) \rangle$	\vec{j}_k
$\langle g_k \rangle$	3.10		$F_k^L(k)$		
$j_k(x)$	3.10		$g_k(x)$		
$g_k(x)$	3.10		$r_k(x)$		