

Mott 散射和电子极化术*

孙霞[†] 丁泽军 肖沛 吴自勤

(中国科学技术大学结构分析重点实验室 物理系 合肥 230026)

摘要 文章回顾了 Mott 散射过程及其物理图像,介绍了 Sherman 函数的定义、计算和测量,简述了探测自旋极化电子的仪器——Mott 电子极化仪的一般设计,列举了获得自由极化电子的几种方法和原理。

关键词 Mott 散射,极化电子

Mott scattering and electron spin polarization

SUN Xia[†] DING Ze-Jun XIAO Pei WU Zi-Qin

(Structure Research Laboratory and Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract The Mott scattering process and its physical principles are reviewed. The definition, calculation and measurement of the Sherman function are introduced, and the design of the Mott polarimeter, an instrument to detect spin polarized electrons, is briefly outlined. Several methods of producing free polarized electrons and their principles are described.

Key words Mott scattering, spin polarization

1 引言

电子具有自旋角动量和自旋磁矩的概念是 1925 年由 Goudsmit 和 Uhlenbeck^[1]为解释原子光谱特征的精细结构时首先提出的。1927 年,Pauli^[1]在非相对论量子理论中发展了处理自旋的方法,1928 年,Dirac^[1]把电子的自旋包括进相对论量子力学成为它的组成部分,1929 年,莫特在相对论量子力学狄拉克方程基础上提出了与自旋有关的电子弹性散射理论^[1]。莫特从实验上指出,根据测不准原理,不可能直接用磁强计或由 Stern - Gerlach 实验直接测定自由电子磁矩,或用它们区分不同自旋的电子^[1,2]。他建议可以用如图 1 所示的双散射实验测量电子的自旋磁矩或者制备极化电子束。图中以高能的非极化电子束入射在靶 B 上,与靶 B 碰撞发生第一次散射,由于自旋 - 轨道相互作用,大角散射 ($\theta_1 > 90^\circ$)产生的电子其自旋极化垂直于散射平面。经过靶 B 散射后的沿 BC 方向的电子又入射在另一个靶 C 上,与靶 C 碰撞发生第二次散射。同样由于

自旋 - 轨道相互作用,一次散射后的极化电子被靶 C 二次散射,导致了电子左右散射数目的不对称,这种不对称正比于第一次散射引起的自旋极化。他提出的这种双散射后来被称为“莫特散射”。这个实验难度大,因为它要求电子能量达 100keV 量级,散射角大于 90° ,因此直到 1942 年经过对仪器的仔细校正,Shull 等^[3]才从实验上证明了散射不对称的存在,并与 Mott 的计算结果一致。1957 年,吴健雄等证实宇称不守恒的实验也包含用莫特散射对 β 射线(电子)的自旋极化进行分析。

现在对于 Mott 散射的研究已经从原来的对探测基本原理的验证转移到对极化电子的制备和测量上,发展成一个分支学科——“莫特电子极化术”^[4,5],设计制造了一系列仪器,在显微学、原子分子物理、固体物理、核物理、高能物理中得到广泛的

* 国家自然科学基金(批准号:60306006,10025420,90206009)资助项目

2004 - 07 - 28 收到初稿,2004 - 10 - 14 修回

[†] 通讯联系人,Email: sunx@ustc.edu.cn

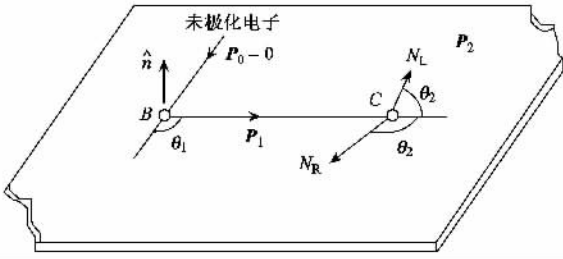


图1 双散射实验原理示意图

应用. 最常用的方法是将 Mott 探测器与其他电子分析仪器组合, 使之具有分辨电子自旋的能力, 例如 Mott 探测器与扫描电镜组合, 利用自旋取向衬度进行成像的方法被称为自旋极化扫描电子显微术 (SPSEM), 进一步将自旋极化电子显微术和近期发展起来的低能电子显微术结合起来, 形成自旋极化低能电子显微术 (SPLEEM) [6-8]. 这些组合仪器为研究自旋相关效应提供了实验技术, 可测量自旋极化的二次电子电子能谱^[6]、自旋极化的俄歇电子能谱^[9]、自旋极化的内壳层电子能谱^[10]和光致发射产生的自旋极化电子^[11]等. 自旋极化电子可用于固体中表面磁化的分析^[12]、磁性材料中磁畴结构的观察和半导体中能带结构的研究等. 电子的自旋性质的开发利用还有可能制备出基于微电子学和自旋相关效应的自旋电子器件, 导致半导体“自旋电子学”这个研究领域的兴起. 本文回顾了 Mott 极化仪的基本物理过程及获得自旋极化电子的几种方法.

2 Mott 散射的经典物理图像

经典物理图像更易于理解 Mott 散射的物理基础^[4]. 考虑经典电子坐标系中一高能电子被一电荷为 Ze 的裸核散射. 电子在核的电场 E 中运动导致磁场 B :

$$B = \frac{E \times v}{c} = \frac{Ze}{cr^3} r \times v = \frac{Ze}{mcr^3} L, \quad (1)$$

其中 v 为电子速度, r 为电子与核间的距离, $L = mr \times v$ 是电子轨道角动量. 磁场与电子自旋磁矩 μ_s 的作用在散射势中引入与自旋 S 成正比的自旋轨道项 :

$$V_{so} = \frac{Ze^2}{2m^2c^2r^3} L \times S. \quad (2)$$

自旋轨道项 V_{so} 的出现使在散射截面 $\sigma(\theta)$ 中引入了自旋相关项 :

$$\sigma_{\uparrow\downarrow}(\theta) = K(\theta) [1 \pm S(\theta)], \quad (3)$$

其中 θ 是散射角, $S(\theta)$ 是不对称函数, $K(\theta)$ 是未极

化电子的散射截面.

现在来看图 1 的双散射实验, 以未极化电子 (可视为包含有相等数量的自旋向上和向下的电子) 入射到靶 B 上, 从 (4) 式可以得出, 散射后散射角度为 θ_1 的自旋向上的电子数为 $N_{1\uparrow} \propto \sigma_{1\uparrow}(\theta_1) \propto 1 + S_1(\theta)$, 而自旋向下的电子数为 $N_{1\downarrow} \propto \sigma_{1\downarrow}(\theta_1) \propto 1 - S_1(\theta)$. 于是第一次散射后散射角度为 θ_1 的电子有一个净极化 $P_1(\theta_1)$:

$$P_1(\theta_1) = \frac{N_{1\uparrow} - N_{1\downarrow}}{N_{1\uparrow} + N_{1\downarrow}} = \frac{[1 + S_1(\theta_1)] - [1 - S_1(\theta_1)]}{[1 + S_1(\theta_1)] + [1 - S_1(\theta_1)]} = S_1(\theta_1). \quad (4)$$

这些极化电子入射到靶 C 上发生二次散射, 将导致一个左右散射数目的不对称 :

$$A(\theta_2) = \frac{N_L - N_R}{N_L + N_R}, \quad (5)$$

其中 N_L 和 N_R 是散射角度为 θ_2 的电子在左和右两个方向上的电子数. 如果第一次和第二次散射事件是共面的, N_L 会正比于 $N_{1\uparrow}[1 + S_2(\theta_2)] + N_{1\downarrow}[1 - S_2(\theta_2)]$, 而 N_R 会正比于 $N_{1\uparrow}[1 - S_2(\theta_2)] + N_{1\downarrow}[1 + S_2(\theta_2)]$, 代入到 (8) 式得到 :

$$A(\theta_2) = \frac{N_{1\uparrow} - N_{1\downarrow}}{N_{1\uparrow} + N_{1\downarrow}} S_2(\theta_2) = P_1(\theta_1) S_2(\theta_2). \quad (6)$$

因此, 如果要测量一电子束的自旋极化率, 只要将此电子束入射在一已知不对称函数为 S 的靶上, 在其垂直于散射平面上, 测量散射不对称性 A , 就可得出该入射束的极化率 :

$$P = A/S. \quad (7)$$

Mott 电子极化仪就是基于以上原理进行电子极化的测量.

3 Sherman 函数

对高能电子散射的不对称函数 $S(\theta)$ 的计算最早由 Mott^[11] 开始进行, 后来 Sherman^[13] 从库仑场观点对相对论电子散射作了一个复杂的计算, 由于这个原因, $S(\theta)$ 常称为 Sherman 函数, Sherman 函数的理论表达式是

$$S(\theta) = \frac{[\mathcal{K}(\theta)g(\theta)^* - \mathcal{K}(\theta)^*g(\theta)]}{|\mathcal{K}(\theta)|^2 + |g(\theta)|^2}, \quad (8)$$

式中的 * 号表示复数共轭. $\mathcal{K}(\theta)$ 和 $g(\theta)$ 是用量子力学分波法得到的复散射振幅. 图 2 是在库仑势散射近似下, 计算得到的 Au 的 Sherman 函数^[6]. 可以看

出,在适当的能量和大散射角下,未极化入射电子束被 Au 散射将发生 40%—50% 的极化,大的 $S(\theta)$ 还表明,极化电子散射的左右不对称性是可以探测到的. 大的 $S(\theta)$ 仅在高原子序数的元素中才可得到,这可由前面(2)式解释,原子序数高的元素自旋轨道耦合大,从而可以激发重要的自旋效应.

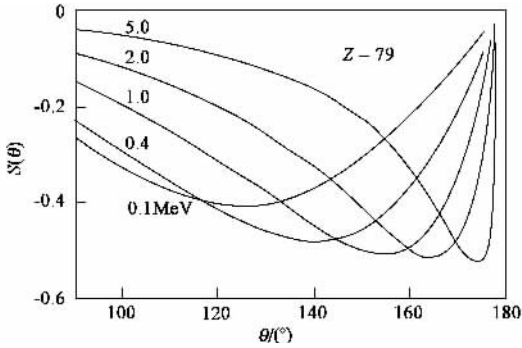


图2 库仑势散射近似下,计算得到的 Au 的 Sherman 函数

尽管在低能($< 1\text{keV}$)下电子与核的自旋相关散射小,但原子的低能散射不对称仍可以估计^[14]. 由于能量低,电子的德布罗意波长变得与原子尺寸可比,散射过程可视为衍射. 于是微分散射截面随散射角 θ 震荡,且由于在散射哈密顿量中 V_{SO} 的出现,微分散射截面是自旋敏感的. 图 3 是 300eV 电子入射在水银上自旋向上和自旋向下电子的微分散射截面^[6]. 对某些 θ 值,不同自旋取向的电子的截面显著不同,导致大的 Sherman 函数值 $S(\theta)$. 但 $S(\theta)$ 的最大值出现在微分散射截面的最小值附近,那儿的散射效率很低. 关于低能电子散射的 $S(\theta)$ 的计算可参阅文献 [15, 16].

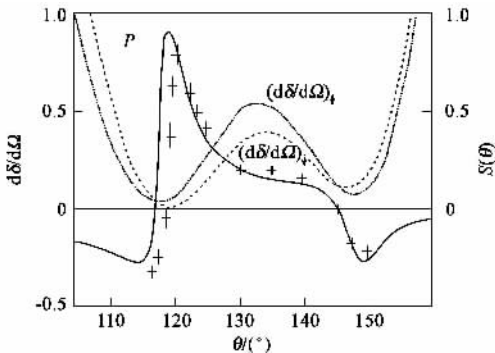


图3 300eV 时水银的自旋向上和自旋向下电子的微分散射截面及 Sherman 函数

Sherman 函数可直接由双散射实验测量,此时需要使用两个相同的靶,并且使 $\theta_1 = \theta_2 = \theta$, 这样从(4)式和(6)式可以推导得到 $S(\theta) = \sqrt{A(\theta)}$. Sher-

man 函数还可用一已知极化率的电子束观察电子散射数目的不对称性,并由 $S(\theta) = P/A(\theta)$ 进行测量.

4 Mott 极化仪的设计

场发射研究中用的高能常规 Mott 极化仪示意图如图 4. 它包括自旋旋转体、静电加速柱和维持在高势能的散射腔. 将需要探测的电子收集并传送到 Mott 探测器,进入 Mott 探测器中的电子先经过一个 Wein 过滤器,然后电子经加速柱被加速到 100keV,再经瞄准仪后撞击在一个靶上被散射. 大部分 Mott 极化仪常用 Au 靶散射,选择 Au 是因为它的原子序数高,有大的 Sherman 函数,不易与其他物质发生反应,不会形成厚的氧化层,易于制作得很薄,多次散射少. 常规 Mott 极化仪中用的电子散射能量约为 100keV. 尽管更高的电子能量会导致更高的 Mott 散射不对称性,但 $E > 150\text{keV}$ 时,实验困难增加,散射截面减小,信噪比降低. $E < 50\text{keV}$, Sherman 函数的值低,多次散射增加. 为减少多次散射效应,常将 Au 蒸发到低分子量的碳氢化合物载体上形成很薄的膜. 穿过 Au 箔的电子被 Faraday 杯收集, $\pm 120^\circ$ 散射的电子(此处 Sherman 函数有一个宽的极大值)被两个对称放置的 Si 表面势垒(SSB)探测器探测,从而测量了电子散射数目的不对称性. 由上面的(7)式可以从测得的电子散射数目的不对称性得到垂直于散射平面的自旋极化分量.

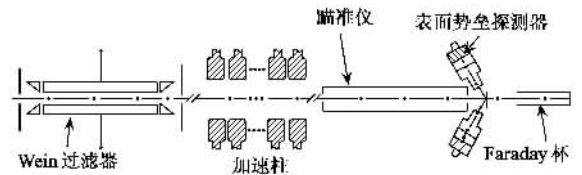


图4 常规 Mott 极化仪示意图

5 极化自由电子的获得

如果通过对未极化电子的散射得到极化自由电子,则需要大的不对称函数 $S(\theta)$, 而大的 $S(\theta)$ 仅在高原子序数的元素中并且要在适当的能量和大散射角下才可得到,实验条件苛刻,得到的电子的极化率也不够高. 实际上极化电子可以从直接材料中发射出来.

5.1 磁性材料中发射的极化自由电子

我们知道磁性材料中电子具有择优取向,例如铁磁材料 Fe, Co, Ni 等,它们的磁性来自于 3d 电子,交换作用使得 3d 能带劈裂,图 5(a)画出了 3d 能带

劈裂的示意图 E_F 是费米能级, ϕ 是功函数, $N_{\uparrow}(E)$ 和 $N_{\downarrow}(E)$ 分别是自旋向上和自旋向下电子的态密度. 由图可见, 自旋向上的子能带比自旋向下的子能带低, 自旋向上的子能带几乎填满, 自旋向下的子能带在 E_F 以上还有较多空的能态. 在费米面以下, 自旋向上的 3d 电子比自旋向下的 3d 电子数目多, 3d 电子是自旋极化的. 稀土元素及其化合物的磁性主要来自于 4f 电子, 例如 Eu 元素, 有 7 个电子位于局域的 4f 态. 根据 Pauli 原理, 电子具有相同的自旋取向, 自旋量子数为 7/2. 很明显, 将这些极化电子从材料中提取出来就可以得到极化的自由电子. 从磁性材料中获得极化自由电子的方法有光致发射、场发射和二次电子发射.

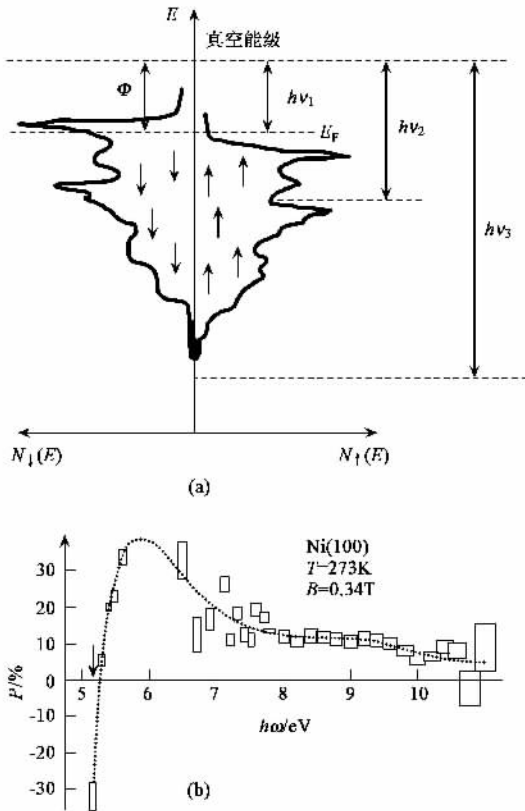


图 5 (a) 3d 能带劈裂的示意图 (b) Ni(100) 的光致电子的极化率随光子能量 $h\omega$ 变化的曲线^[10]

5.1.1 光致发射

光致发射是指将材料暴露在波长足够短(高光子能量)的电磁波下, 可以观察到有电子发射的现象. 这是由于材料内电子是被束缚在不同的量子化了的能级上, 当用一定波长的光子照射样品时, 原子中的价电子或芯电子吸收一个光子后, 从初态作偶极跃迁到高激发态而离开原子.

由于磁性材料的内部具有极化电子, 因此光致

发射的电子也是自旋极化的, 其极化率由光子能量、材料态密度曲线的形状、自旋向上和自旋向下能带的移动大小和费米面的位置决定. 图 5(b) 是在 Ni(100) 上测量得到的光致电子的极化率随光子能量 $h\omega$ 变化的曲线^[6], 图中用箭头标出了阈值光子能量. 可以看出光子能量在阈值 5.2eV 附近有一个大的负极化率, 这是由于 Ni 的费米能刚好定位在自旋向上的 d 带上方, 如图 5(a) 所示, 只有自旋向下的带被费米面插入. 如果用频率约为 ν_1 的小频率的光辐照时, 只有费米能级附近的电子能发射, 而在 E_F 附近自旋向下的电子数比自旋向上的电子数多, 因此有负的极化率, 而且极化率绝对值很大. 当光子能量增加到如图中的 $h\nu_2$ 时, 越来越多的自旋向上的电子被释放出来, 极化率改变符号可达 30%, 再增加光子能量时, 由于电子从更深的 d 带区域激发, 平均极化率降低, 频率为图中 ν_3 时, 所有的 d 电子都能被激发, 此时 $P \approx 5\%$, 与理论计算结果一致.

5.1.2 场发射

场致电子发射是由于作用于表面的提拉电场将样品表面的势垒降低并减薄后, 使费米海中的大量电子可以隧穿过或者越过势垒顶部发射到真空中而形成. 在磁性材料(如 EuS)中, 一方面由于其内部具有极化电子, 另一方面交换作用引起自旋向上和自旋向下电子能带移动, 导致两种自旋方向的势垒形状不一样, 从而使自旋向上和自旋向下电子有不同的隧穿几率, 因此磁性材料场发射的电子是自旋极化的. 图 6 是 W-EuS 场发射得到的电子自旋极化率和发射电流随温度的变化^[6]. 可以看出, 极化率随温度的降低急剧增加, 在 $T = 10\text{ K}$ 左右达 90% 的极化率. 极化率随温度的降低而增加的现象可解释如下: 由于交换劈裂是正比于 Eu 的 4f 态的自发磁化, 而 Eu 的 4f 态的自发磁化随温度下降而上升, 于是当温度下降时, 自旋向上的电子的隧穿宽度下降, 自旋向下的电子的隧穿宽度增加. 因此自旋向上的电子的隧穿电流增加, 自旋向下的隧穿电流减小, 极化率增大.

5.1.3 二次电子发射

磁性材料中发射的二次电子也有很大的自旋极化率. 图 7 是用能量为 400eV 的未极化电子, 以与晶面法线成 30° 的入射角, 撞击磁化的 Ni 单晶的 (110) 面, 得到的二次电子的极化率随二次电子能量的变化^[6]. 可以看出, 在最低能量处, P 达到最大值 $(17 \pm 2)\%$, 远大于 Ni 的平均导带极化率 5.5%. 这种现象在其他材料如 Fe, Co, EuO, Fe81.5 B14.5, Si4 等中也观察到. 二次电子的产生是电子与固体

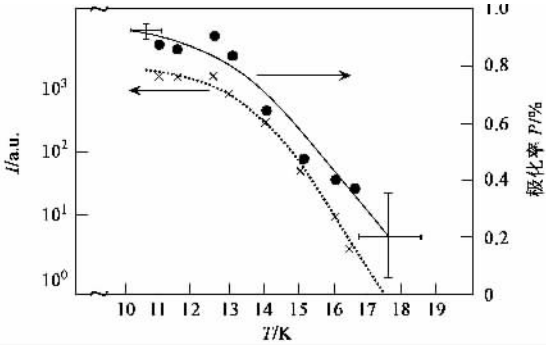


图6 W - EuS 场发射得到的电子自旋极化率和发射电流随温度的变化

的非弹性碰撞引起的,因此理论上提出的各种模型都是围绕非弹性散射过程的自旋相关性,如 Stoner 激发引起的自旋翻转散射、自旋波的发射等导致非弹性散射平均自由程是与自旋取向相关,自旋向上的电子的非弹性散射平均自由程比自旋向下的大,固体中自旋向上的电子受到的非弹性散射少,易于从表面逃逸,因此表面发射的二次电子的极化率比导带的平均极化率大。

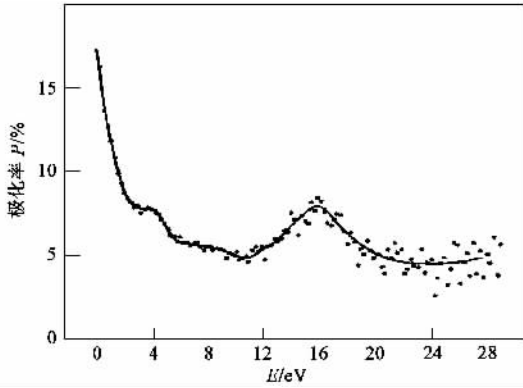


图7 Ni (110)面上的二次电子的极化率随二次电子能量的变化

5.2 非磁性材料中发射的自由电子

极化电子也可以从非磁性材料如碱金属、钨、铂、GaAs 等中得到。图 8 (a)是在温度小于 10K 时由 σ^+ 光辐照 GaAs + CsOCs 得到的电子的极化率随光子能量的变化曲线^[6]。这里电子的极化是自旋轨道相互作用导致能带劈裂的结果。GaAs 能带劈裂示意图如图 8 (b)所示,在倒空间的原点位置 Γ 点,简并的 P 带劈裂成四重简并的 $P_{3/2}(m_j = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2)$ 和二重简并的 $P_{1/2}(m_j = -1/2, 1/2)$ 能级,两者之间能量差为 0.34eV。若以能量为 $\hbar\omega \approx E_g$ 的 σ^+ 圆偏振光照射时, E_g 是导带底和价带顶间的能量差 $E_g \approx 1.52\text{eV}$,由于选择定则 $\Delta m_j = +1$,可发生两种跃迁 (a) $P_{3/2}(m_j = -3/2) \rightarrow S_{1/2}(m_j = -1/2)$

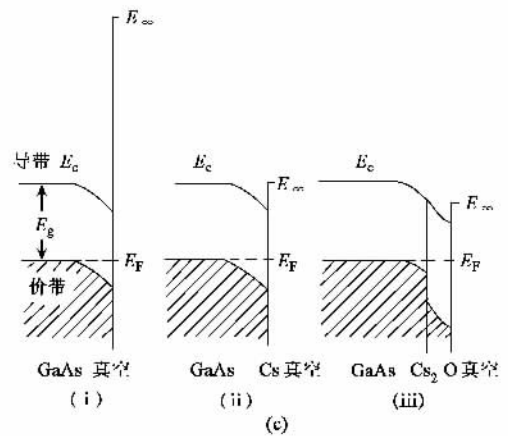
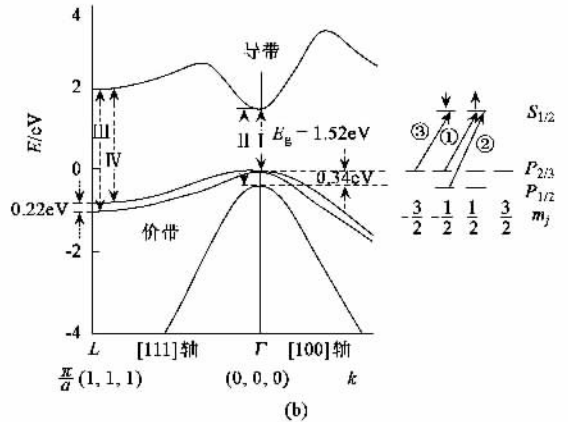
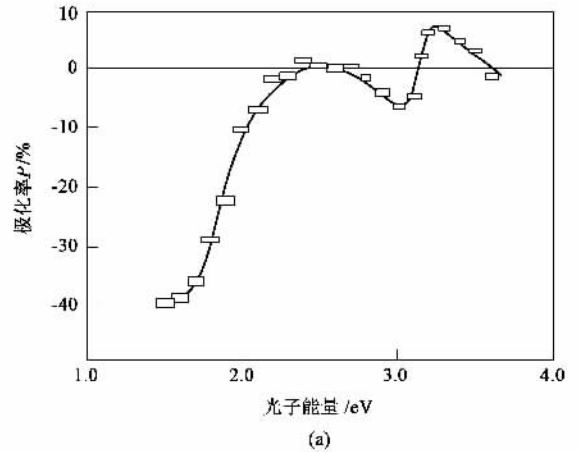


图8 (a) σ^+ 光辐照 GaAs + CsOCs 得到的电子的极化率随光子能量的变化曲线 (b) GaAs 能带劈裂示意图 (c) 不同表面处理的 p 型 GaAs 表面附近能带示意图

2) 得到自旋向下的电子 (b) $P_{3/2}(m_j = -1/2) \rightarrow S_{1/2}(m_j = +1/2)$, 得到自旋向上的电子,图中以 I 表示这两种跃迁。计算表明,前两态间电子跃迁几率是后两态间跃迁几率的 3 倍,即 $N_{\uparrow} = 3N_{\downarrow}$,图中以带圆圈的数字①②③表示相对几率,于是极化率 $P = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}} = \frac{N_{\uparrow} - 3N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + 3N_{\downarrow}} = \frac{1 - 3}{1 + 3} = -50\%$, 实验中如图 8 (a) 所示,能激发电子的最小光子能量处的

极化率是 -40% ,与理论计算的 -50% 相差不大. 当光子能量增加超过 $E_g + 0.34\text{ eV}$ 时, $P_{1/2}(m_j = -1/2) \rightarrow S_{1/2}(m_j = 1/2)$ 的跃迁变得可能, 得到自旋向上的电子, 图中以 II 表示, 它的跃迁几率是 $P_{3/2}(m_j = -1/2) \rightarrow S_{1/2}(m_j = +1/2)$ 态间跃迁几率的 2 倍. 随着能量的增加, 由于跃迁 II 得到了更多的自旋向上的电子, 原先由跃迁 I 引起的电子的负极化逐渐被跃迁 II 消除, P 增加直至接近 0; 当光子能量再增加时, 又可发生其他更多的跃迁, 如图中 L 点处的跃迁 III, 引起自旋向下的电子数目急剧增加, 极化率下降, 光子能量再增加 0.2 eV , 由于跃迁 IV, 自旋向上的电子被激发, 极化率出现正值. 实验室中 GaAs 常被用作极化电子源.

值得注意的是, 在以上的说明中, 光将电子激发到了 GaAs 的导带, 但由于真空能级 E_∞ 比导带底能级 E_c 高, 电子并不能从 GaAs 中被发射出来, 为了使激发到导带底的电子能从 GaAs 中逃逸, 实验上常使用各种表面处理降低其真空能级, 例如在 p 型 GaAs 表面覆盖一层 Cs, 可使真空能级与导带底能级一样高, GaAs 表面用 CsO 处理, 甚至可使真空能级比导带底能级低 [如图 8(c) 所示]. 图 8(a) 中的曲线就是在 GaAs 表面加上 CsOCs 得到的.

以上固体中发射的极化电子都可用 Mott 探测

器进行探测.

参 考 文 献

- [1] 莫特, 马塞 著. 赵恒忠, 赵鸿 译. 原子碰撞理论. 北京: 科学出版社, 1960 [Mott N F, Massey H S W. Zhao H Z, Zhao H trans. The Theory of Atomic Collisions. Beijing Science Press, 1960 (in Chinese)]
- [2] Dehmelt H, Science, 1990, 247 : 539
- [3] Shull C G, Chase C T, Myers F E, Phys. Rev., 1943, 63 : 29
- [4] Gay T J, Dunning F B, Rev. Sci. Instrum., 1992, 63 : 1635
- [5] Kotera M, Tamura K, Jpn. J. Appl. Phys., 1996, 35 : 6614
- [6] Allenspach R, IBM J. Res. Develop., 2000, 44 : 553
- [7] 孙霞, 丁泽军, 吴自动. 物理, 2002, 31 : 799 [Sun X, Ding Z J, Wu Z Q. Wuli (Physics), 2002, 31 : 799 (in Chinese)]
- [8] 孙霞, 王兵, 王丽娟等. 物理, 2002, 31 : 572 [Sun X, Wang B, Wang L J et al. Wuli (Physics), 2002, 31 : 572 (in Chinese)]
- [9] Petrov V N, Kamochkin A S. Rev. Sci. Instrum., 2004, 75 : 1274
- [10] Huang D J, Wu W P, Chen J et al. Rev. Sci. Instrum., 2002, 73 : 3778
- [11] Kimura A, Sawada M, Qiao S et al. Jpn. J. Appl. Phys., 1999, 38 : 369
- [12] Sokolov O B, Kuznetsov V L, Gribov I V et al. Physics of Metals and Metallography, 2001, 92 : S271
- [13] Sherman N. Phys. Rev., 1956, 103 : 1601
- [14] Massey H S W, Mohr C B O. Proc. Roy. Soc. A, 1941, 177 : 341
- [15] Haberland R, Fritsche L. J. Phys. B, 1987, 20 : 121
- [16] Ross A W, Fink M. Phys. Rev. A, 1988, 38 : 6055

· 信息服务 ·



Rensselaer

美国伦斯勒理工学院招生信息

Troy, New York, U. S. A.

May, 2005

JOIN OUR GRADUATE SCHOOL IN PHYSICS

Ph. D. in Department of Physics, Applied Physics, and Astronomy

Areas of research : Terahertz Imaging and spectroscopy, Terascale Electronics and photonics, Nano-Particles Physics, Bio-physics, Origins of Life, Astronomy, Elementary Particles Physics. Teaching, research assistantships, and fellowships are available.

Application : <http://www.rpi.edu/dept/grad-services/>

Information : <http://www.rpi.edu/dept/phys/>

Email : gradphysics@rpi.edu