arXiv:2601.05944v1 [physics.atom-ph] 9 Jan 2026

取向靶的电子能量损失谱学与磁跃迁

Ioannis Iatrakis

ThermoFisher Scientific，*Achtseweg Noord 5*，埃因霍温，*5651 GG*，荷兰 *ds*

Valerii Brudanin

代尔夫特理工大学，*Mekelweg 5*，代尔夫特，*2628 CD*，荷兰

摘要

透射电子显微镜（TEM）中的电子束能量达到相对论范围，因此量子电动力学（QED）是研究透射电子显微镜中电子-物质相互作用的恰当理论框架。我们重点研究相对论性电子与一般取向靶之间的非弹性散射。非弹性微分截面可分解为两部分：通过解析方法计算的快电子部分，以及靶的动态形状因子，后者描述介质对电子束相互作用的响应。我们分析取向靶的动态形状因子的性质。随后，我们推导了磁性靶引发自旋翻转跃迁时电子的散射截面。我们讨论了横向磁相互作用的系数相较于库仑矩阵元得到增强的运动学区域。

关键词：电子能量损失谱，量子电动力学（QED），取向原子，自旋翻转

1. 引言

TEM 中电子动力学的相对论性质对电子能量损失谱（EELS）有着显著影响。除了散射中的运动学效应外，虚光子交换介导的相互作用也在塑造非弹性微分截面方面发挥着核心作用Schattschneider 等 （2005年）；Sorini 等 （2008年）； Iatrakis 和 Brudanin（2025）。尤其是，横向光子交换还负责实现磁性材料中的自旋翻转激发。

我们在量子电动力学（QED）的框架下，充分推导了电子束从一般靶出射的微分截面，其中该靶与电子束发生电磁相互作用。微分截面以相对论动力学形状因子的形式表示。形状因子写成电磁二点函数的傅里叶变换，并通过著名的色散关系与推迟格林函数相关联，Weinberg （1995年），Lourenço-Martins 等 （2021）。因此，电导率和磁化率等输运系数，可以利用涨落耗散定理与测得的电流二点函数建立联系。

我们进一步研究来自取向靶的电子非弹性散射。众所周知，对于各向异性材料，电子能量损失谱的结果取决于样品的取向，Nelhiebel 等（1999年）。我们以一般方式研究相互作用的纵向和横向部分如何取决于靶的取向。过去的研究已证明，半相对论修正对于解释电子能量损失谱实验中的魔角十分重要，Schattschneider 等（2005年）；Lourenço-Martins 等（2021）。

量子电动力学的框架被应用于对电子束探测的样品中磁振子激发的详细分析。自旋翻转跃迁已在共振 X 射线光谱学的背景下得到研究，de Groot 等（1998）。近年来，电子能量损失谱已被用于直接探测磁振子激发，Kepaptsoglou 等（2025）。来自靶的电子非弹性微分截面包含与不同相互作用通道相对应的纵向（库仑）、横向电和磁矩阵元的贡献。导致靶发生自旋翻转的相互作用由具有所有可能角动量的磁虚光子诱导，其中在低动量转移下，磁偶极跃迁占主导地位。我们推导了磁跃迁的一般结果，并取对应于低动量转移的长波长极限，以求得磁偶极跃迁矩阵元。我们研究了实验条件如何影响纵向与横向矩阵元的相对振幅，这可为未来实验提供一种方案。具体而言，我们提出在保持动量转移恒定的同时改变散射角，测量电子能量损失谱激发。微分截面随散射角变化的形状可以确定该激发的横向或纵向性质。

2. 量子电动力学

在量子力学背景下对电子及其相互作用的描述推动了量子场论的发展。无质量光子作为电磁相互作用的媒介，以及其在洛伦兹群下的变换性质，导致了规范不变性 Weinberg （1995年）。量子电动力学拉格朗日量包含光子和狄拉克旋量的动能项及其耦合

$$\mathcal{L}_{QED} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x) - \overline{\Psi}(x)\left([\not{\partial} + ie\not{A}(x)] + m\right)\Psi(x) \tag{1}$$

我们采用闵可夫斯基度规的「大部分为正」号差，$\eta_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(-1,1,1,1)$。伽马矩阵采用外尔记法，参见附录 C。用电磁势表示的光子场强为 $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_n A_\mu$，而 Ψ 是电子旋量场。采用标准记法，$\not{S} = \gamma^\mu S_\mu$ 且 $\partial_\mu = \frac{\partial}{\partial x_\mu}$。我们采用自然单位制，其中$\hbar = c = 1$。

上述拉格朗日量在以下规范变换下保持不变

$$\delta\Psi(x) = i\epsilon(x)\, e\, \Psi(x)$$
$$\delta A_\mu(x) = \partial_\mu \epsilon(x)$$

意味着流守恒 $\partial_\mu J^\mu_e(x) = -ie\partial_\mu\left(\Psi(x)\gamma^\mu\Psi(x)\right) = 0$。

在透射电子显微镜中，研究快速电子束与重靶的散射。两者之间的相互作用由光子 $A_\mu(x)$ 传递，光子通过标准的最小耦合与靶的电磁流相耦合

$$\mathcal{L}_{\mathcal{J}} = \mathcal{J}_\mu(x)A^\mu(x) \tag{2}$$

其中 $\mathcal{J}^\mu(x) = (\rho(x), \boldsymbol{\mathcal{J}}(x))$ 是守恒的 $\partial_\mu\mathcal{J}^\mu = 0$。外部流算符表示重源的电磁流，例如材料、原子或原子核内部的电荷和电流分布，其动力学可以独立描述。

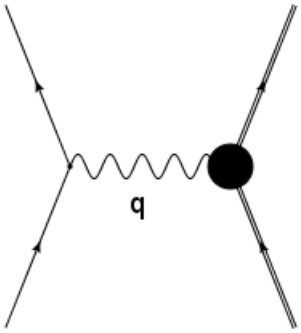


图 1：高能电子与重靶发生散射的费曼图。

2.1. 非弹性电子散射

我们考虑一个四动量为 $p_i = (E_i,\ \mathbf{p}_i)$的相对论性电子，从初始多体态为 $|\alpha\rangle$ 的靶上发生非弹性散射，电子的末态动量为 $p_f = (E_f,\ \boldsymbol{p}_f)$，靶的末态为 $|\beta\rangle$。电磁耦合常数 $\alpha = \frac{e^2}{4\pi} \simeq 1/137$较小，因此可以在玻恩近似下计算微分截面。这对应于图（1）中的树级图。

微分截面用 S 矩阵表示。Gell-Mann 和 Goldberger (1953)介绍了涉及束缚态系统的形式体系。电离截面已由 Iatrakis 和 Brudanin (2025)计算得出

$$d\sigma(p_f, \beta; p_i, \alpha) = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{|\mathbf{p}_f|}{|\mathbf{p}_i|} \frac{dE_f d\Omega_f}{q^4} L_{\mu\nu} W^{\mu\nu}, \tag{3}$$

其中 $q^2 = -E^2 + \mathbf{q}^2$。 $L_{\mu\nu}$ 和 $W_{\mu\nu}$ 是洛伦兹变换下的二阶张量，显然微分截面在洛伦兹变换下是不变的。

$$L_{\mu\nu} = p_{i\,\mu}\, p_{f\,\nu} + p_{i\,\nu}\ p_{f\,\mu} - (p_i \cdot p_f + m^2)\eta_{\mu\nu} \tag{4}$$

$$W_{\mu\nu} = \sum_{\beta} \int d\beta\ \delta(E_i - E_f - E) \langle \alpha | \mathcal{J}_\nu^\dagger(\mathbf{q}) | \beta \rangle \langle \beta | \mathcal{J}_\mu(\mathbf{q}) | \alpha \rangle\,. \tag{5}$$

自由电子张量 $L_{\mu\nu}$由非偏振狄拉克平面波解计算得出，用于描述相对论性电子束对

靶相互作用的响应。对于不同类型的渐近态或偏振束流，可以很容易地计算 $L_{\mu\nu}$ ，因为它们是非相互作用哈密顿量的解。

$W_{\mu\nu}$ 更有趣，因为它描述了靶对入射束流电子的电磁相互作用所产生的响应。这是对动态结构或形状因子的相对论推广，Van Hove(1954年)。在标量量子电动力学的背景下，Lourenço-Martins 等人(2021也为电子能量损失谱分析推导出了类似的表达式。在附录 A.2中展示了标量量子电动力学框架下截面的详细计算，并将其与包含自旋自由度的完整结果进行了比较。

在海森堡绘景中取 $\mathcal{J}(\mathbf{q})$，并利用末态 $|\beta\rangle$ 的完备性，我们可以将动态结构张量写为

$$W_{\mu\nu} = \int \frac{dt}{2\pi} e^{iEt} \langle \alpha | \mathcal{J}_\nu^\dagger(\mathbf{q}, t)\, \mathcal{J}_\mu(\mathbf{q}, 0) | \alpha \rangle \,. \tag{6}$$

电流二点函数也与推迟格林函数的虚部有关，后者定义为系统的谱函数。在正能量损失的情况下

$$W_{\mu\nu} = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} W^R_{\mu\nu} = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \sum_\beta \frac{\langle \alpha | \mathcal{J}_\mu^\dagger(\mathbf{q}) | \beta \rangle \langle \beta | \mathcal{J}_\nu(\mathbf{q}) | \alpha \rangle}{E - E_\beta + E_\alpha + i\epsilon} \,, \tag{7}$$

其中，谱函数的莱曼表示适用于正频率。其极点及其留数揭示了谱中激发态的能量和强度，从而反映材料的电子结构信息，de Groot 等人(2021)。

电流算符的二点函数是通过电子在重靶上的包容非弹性散射实验得到的核心物理量。量子场论中针对不同类型靶的电流二点函数已有大量分析，Weinberg (1995年）。在电子-原子核散射中，$W_{\mu\nu}$ 是众所周知的强子张量。方程（3）给出了电子能量损失谱非弹性微分截面的一般表达式，适用于广泛的能量损失和动量转移值。

2.2. 经典电子束

一种常见的理论方法，尤其适用于分析低能量损失实验，是根据

电子能量损失谱Garcíade Abajo（2010年）。这一极限尤其值得关注，因为材料的输运性质通常通过测量材料对外部经典扰动的响应来研究，而这种响应由谱函数控制，Lourenço-Martins 等人（2021）。

在将入射电子束视为经典流的极限下，可以研究靶在外场作用下的跃迁率。对于计算非弹性微分截面而言，这并非最合适的图像，因为该截面对应于测得的出射束电子谱。不过，截面可以用靶的电流算符的谱函数来表示，而该谱函数也出现在线性响应理论中。因此，电子能量损失谱可以与材料电导率的测量联系起来，这些电导率反映了材料对外部电磁场的响应。

经典电子的假设实质上意味着拉格朗日量（1）中的费米子场不是动力学的，因此

$$\mathcal{L}_{cl} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x) + J^{\mu}_{(cl)}A_{\mu}(x) + \mathcal{L}_{\mathcal{J}}\,. \tag{8}$$

在忽略量子效应的小动量转移极限下，经典束流电子的四维流为

$$J^{\mu}_{(cl)}(x) = -ie\langle \boldsymbol{p}|\overline{\Psi}(x)\gamma^{\mu}\Psi(x)|\boldsymbol{p}\rangle = -\frac{e}{(2\pi)^3}e^{-iq\cdot x}\frac{p^{\mu}}{p^0}\,, \tag{9}$$

显然，这与自旋无关。初态和末态动量远大于动量转移 $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}_i \sim \boldsymbol{p}_f \gg \mathbf{q}$以及 $p^0 = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}$。方程（9）中的最后一项是光子场与原子靶的耦合，由方程（2）给出。从本质上说，该描述中的动力学场是光子场，它由两个外部算符作为源：经典电子束电流，$J^{\mu}{}_{(cl)}$，以及靶的跃迁电流，$\mathcal{J}^{\mu}$。

上述拉格朗日量的基态构型可通过求解电磁场的运动方程得到，而这些方程正是非齐次麦克斯韦方程。满足因果边界条件的解为

$$A^{(cl)}_{\mu}(q) = \langle A_{\mu}(q)\rangle = \Delta^{(R)}_{\mu\nu}(q)J^{\nu}_{(cl)}(q) \tag{10}$$

其中 $\Delta_{(R)}$ 是推迟光子传播子，而 $q = (E, \mathbf{q})$。在 $A_\mu^{(cl)}$作用下靶电流的真空期望值可通过微扰计算得出，从而得到久保公式

$$\langle \mathcal{J}_\mu(\mathbf{q}, E) \rangle = -W_{\mu\nu}^{(R)}(\mathbf{q}, E) A^{\mu\,(cl)}(\mathbf{q}, E)\,, \tag{11}$$

其中施加因果边界条件，因此采用推迟格林函数；在低动量转移极限下，它等价于费曼格林函数。推迟格林函数的低能极限与电导率张量有关，并由材料动力学决定。流的期望值包含靶的感生电荷、电流密度和磁化强度的信息。

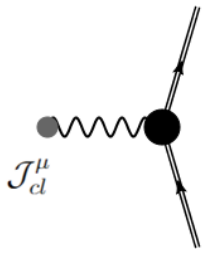


图 2：外部电磁场激发重靶的费曼图。

在经典电子束极限下，非弹性散射过程可简化为图（2）所示的费曼图。相应的坐标空间中的 S矩阵元为

$$S^{(cl)}_{p_f,\beta\,;p_i,\alpha} = \int d^4x_1 \int d^4x_2\, \langle \boldsymbol{p}_f | J^\mu_{(cl)}(x_1) | \boldsymbol{p}_i \rangle\, i\Delta_{\mu\nu}(x_1 - x_2) \langle \beta | \mathcal{J}^\nu(x_2) | \alpha \rangle \ . \tag{12}$$

代入光子传播子（A.10）和方程（9）中的经典电流，我们计算截面

$$d\sigma(p_f, \beta; p_i, \alpha) = \frac{\alpha}{2\pi} \frac{|\mathbf{p}_f| E_f}{|\mathbf{p}_i| E_i} \frac{dE_f d\Omega_f}{q^4} L^{(\mathrm{cl})}_{\mu\nu} W^{\mu\nu}\,. \tag{13}$$

E_f/E_i 之比的出现，是因为经典束流流遗漏了高阶 q 修正，且仅依赖于 E_i。另一方面，

在截面的定义中，最终渐近态被认为具有动量 p_f。经典电子束张量为

$$L^{(\mathrm{cl})}_{\mu\nu} = 2p_{i\,\mu}p_{i\,\nu}\,, \tag{14}$$

这与附录附录 A.2中推导出的标量量子电动力学结果基本一致。这是意料之中的，因为这两种近似都忽略了自旋自由度。动态形状张量仍由公式（5）给出。

3. 取向靶

芯损失电子能量损失谱主要探测原子激发。原子态可以用角动量本征态很好地近似。因此，适合将流二点函数 $W_{\mu\nu}$展开为多极展开级数。最近，Iatrakis 和 Brudanin （2025）详细介绍了非极化靶的多极展开推导。在该工作中，我们将量子化轴与$\mathbf{q}$的方向视为相同，而不会失去一般性，因为初态是在各向同性分布下取平均的。对于极化靶，情况不再如此。不过，我们可以在由动量转移定义的坐标系中计算跃迁矩阵元，然后将靶的取向轴旋转至任意方向。为此，需要用适当的不可约张量算符来表示电流算符。

将流守恒应用于方程（3）

$$\frac{d^2\sigma}{dE\,d\Omega_f} = \frac{\alpha}{2\pi}\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|}\frac{1}{q^4}\left(2\mathcal{J}^{\mu}_{\beta\alpha}P_{\mu}\mathcal{J}^{\nu\,\dagger}_{\beta\alpha}P_{\nu} + \frac{q^2}{2}\mathcal{J}^{\mu}_{\beta\alpha}\mathcal{J}^{\dagger}_{\beta\alpha\,\mu}\right) \tag{15}$$

其中 $P_{\mu} = \frac{p_i+p_f}{2}$和 $\mathcal{J}^{\mu}_{\beta\alpha} = \langle\beta|\mathcal{J}^{\mu}|\alpha\rangle$。以动量转移表示的电荷和电流密度算符为

$$\rho(\mathbf{q}) = \int d^3x\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\rho(\mathbf{x})\,,\ \boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{q}) = \int d^3x\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x})\,. \tag{16}$$

自然的做法是在 z 轴与动量转移 $\mathbf{q}$ 对齐的坐标系中展开矢量流

$$\hat{\boldsymbol{e}}_0 = \hat{\boldsymbol{e}}_z = \frac{\mathbf{q}}{|\mathbf{q}|}\ ,\ \hat{\boldsymbol{e}}_{\pm1} = \mp\left(\hat{\boldsymbol{e}}_x \pm i\hat{\boldsymbol{e}}_y\right) \tag{17}$$

流的守恒条件 $q_\mu \mathcal{J}^\mu(\mathbf{q}) = 0$ 将四维流的纵向分量约束为 $|\mathbf{q}|\,\hat{\boldsymbol{e}}_0 \cdot \boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{q}) = q_0\,\rho(\mathbf{q})$。横向分量

$$\boldsymbol{\mathcal{J}}_\perp(\mathbf{q}) = \sum_{M=\pm 1} \mathcal{J}_M(\mathbf{q})\,\hat{\boldsymbol{e}}^\dagger_M\,, \tag{18}$$

其中，$\mathcal{J}_M$ 是矢量流的球分量。对电荷密度矩阵元应用维格纳–埃卡特定理，并选取一个坐标系，使$\mathbf{x}$ 与$\mathbf{q}$共线

$$\langle\beta|\rho(\mathbf{q})|\alpha\rangle = \sqrt{4\pi}\sum_J (-i)^J\sqrt{2J+1}(-1)^{J_\beta - M_\beta}\begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & 0 & M_\alpha\end{pmatrix}\langle J_\beta||T^{(coul)}_J||J_\alpha\rangle \tag{19}$$

横向流的各分量同样为

$$\langle\beta|\mathcal{J}_M(\mathbf{q})|\alpha\rangle = -\sqrt{2\pi}\sum_{J=1}^{\infty}(-i)^J\sqrt{2J+1}(-1)^{J_\beta - M_\beta}\begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & M & M_\alpha\end{pmatrix} \left(\langle J_\beta||T^{(el)}_J||J_\alpha\rangle + M\langle J_\beta||T^{(mag)}_J||J_\alpha\rangle\right), \tag{20}$$

其中

$$\begin{aligned} T^{M\,(coul)}_J &= \int d^3\mathbf{x}\, j_J\left(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|\right) Y^M_J(\hat{\mathbf{x}})\rho(\mathbf{x}) \\ T^{M\,(mag)}_J &= \int d^3\mathbf{x}\, j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\mathbf{Y}^M_{JJ}(\hat{\mathbf{x}})\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x}) \\ T^{M\,(el)}_J &= \int d^3\mathbf{x}\,\left[\sqrt{\frac{J+1}{2J+1}}j_{J-1}\left(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|\right)\mathbf{Y}^M_{J\,J-1}(\hat{\mathbf{x}})\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x})\right. \\ &\qquad \left. -\sqrt{\frac{J}{2J+1}}j_{J+1}\left(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|\right)\mathbf{Y}^M_{J\,J+1}(\hat{\mathbf{x}})\cdot\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x})\right]. \end{aligned} \tag{21}$$

式中不可约球张量算符的详细推导 (21) 见 Iatrakis 和 Brudanin (2025)。我们明确推导了约化

附录中给出了由狄拉克方程解描述的相对论靶的磁矩阵元附录 B。第 4 节进一步探讨了磁矩阵元的自旋翻转部分。

现在可以将矩阵元旋转到靶原子的固定坐标系中， $O'(x',\ y',\ z')$。相对于 O'，动量转移为 $\hat{\mathbf{q}} = \cos\phi'\cos\theta'\hat{\boldsymbol{e}}_{x'} + \cos\phi'\sin\theta'\hat{\boldsymbol{e}}_{y'} + \cos\theta'\hat{\boldsymbol{e}}_{z'}$。靶波函数可以通过旋转算符旋转到 O' 坐标系中

$$D(R') = D_{\hat{\boldsymbol{e}}_z}(\phi')D_{\hat{\boldsymbol{e}}_y}(\theta')D_{\hat{\boldsymbol{e}}_z}(-\phi')\,. \tag{22}$$

其中 $D_{\hat{\boldsymbol{e}}}(\phi) = exp(-i\boldsymbol{J}\cdot\hat{\boldsymbol{e}}\,\phi)$，且 $\mathbf{J}$ 是角动量算符。旋转由欧拉角参数化， $R' = \{\phi', \theta', -\phi'\}$ 众所周知，通过对系统态或算符本身施加变换，矩阵元可以转换到不同的坐标系中。由于我们将电流算符写成具有确定角动量的不可约张量算符的形式，因此自然要根据其定义性质，将算符从坐标系（17）适当地旋转到 O' 中

$$D^{\dagger}(R')T^{M}_{J}D(R') = \sum_{M'=-J}^{J} D^{J}_{MM'}(R')^{*}T^{M'}_{J}\,. \tag{23}$$

方程（19）和（20）变为

$$\begin{aligned}\langle\beta|\rho(\mathbf{q})|\alpha\rangle = 4\pi\sum_{J=0}^{\infty}(-i)^{J}(-1)^{J_\beta-M_\beta}\begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & M' & M_\alpha\end{pmatrix} \\ \times D^{J}_{0M'}(R')^{*}\langle J_\beta||T^{(coul)}_{J}||J_\alpha\rangle\end{aligned} \tag{24}$$

横向流的分量为

$$\begin{aligned}\langle\beta|\mathcal{J}_M(\mathbf{q})|\alpha\rangle = -\sqrt{2\pi}\sum_{J=1}^{\infty}(-i)^{J}\sqrt{2J+1}(-1)^{J_\beta-M_\beta}\begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & M' & M_\alpha\end{pmatrix} \\ \times D^{J}_{MM'}(R')^{*}\left(\langle J_\beta||T^{(el)}_{J}||J_\alpha\rangle + M\langle J_\beta||T^{(mag)}_{J}||J_\alpha\rangle\right)\,.\end{aligned} \tag{25}$$

这些是量子电动力学中针对取向确定的靶以及任意角动量时，跃迁矩阵元最一般的表达式。

跃迁算符显然包含所有多极贡献，并不限于偶极项。电子能量损失谱由非弹性微分截面给出，而该截面取决于跃迁矩阵元的范数。对于取向原子，不同的矩阵元，即库仑、电横向和磁矩阵元，会相互混合。用一般密度矩阵 $\langle M'_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle$ 描述初态系综时，这类矩阵元的通用混合乘积为:

$$\begin{aligned}\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_1)}_{M_1}|\alpha\rangle^*\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_2)}_{M_2}|\alpha\rangle = \sum_{M_\alpha,M'_\alpha}\sum_{J,J'} C_J C_{J'}\langle M'_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle D^J_{M_1M}(R')D^{J'}_{M_2M'}(R')^* \\ \begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & M & M'_\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_\beta & J' & J_\alpha \\ -M_\beta & M' & M_\alpha\end{pmatrix} \\ \langle J_\beta||T^{(i_1)}_J||J_\alpha\rangle^*\langle J_\beta||T^{(i_2)}_{J'}||J_\alpha\rangle \end{aligned} \tag{26}$$

其中 $\mathrm{i}_1,\mathrm{i}_2 =$ coul、el、mag 分别表示上述任一矩阵元。 $\langle M'_a|\rho_i|M_a\rangle$是初始靶态的密度算符。两个旋转算符的乘积为

$$\begin{aligned}D^J_{M_1M}(R')D^{J'}_{M_2M'}(R')^* = \sum_{j,m,m'}(2j+1)(-1)^{M_2-M'}\begin{pmatrix} J & J' & j \\ M_1 & -M_2 & m'\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} J & J' & j \\ M & -M' & m\end{pmatrix} D^j_{m'm}(R')^* \end{aligned} \tag{27}$$

由此得到

$$\begin{aligned}\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_1)}_{M_1}|\alpha\rangle^*\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_2)}_{M_2}|\alpha\rangle = \sum_{M_\alpha,M'_\alpha}\sum_{J,J'}\tilde{C}_J\tilde{C}_{J'}(-1)^{M'_\alpha}\langle M'_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle(-1)^{-M_\beta-M'-M} \\ \sum_{j,m,m'} D^j_{m'm}(R')^*\begin{pmatrix} J & J' & j \\ M_1 & -M_2 & m'\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J & J' & j \\ M & -M' & m\end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} J_\beta & J & J_\alpha \\ -M_\beta & M & M'_\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix} J_\beta & J' & J_\alpha \\ -M_\beta & M' & M_\alpha\end{pmatrix} \\ \langle J_\beta||T^{(i_1)}_J||J_\alpha\rangle^*\langle J_\beta||T^{(i_2)}_{J'}||J_\alpha\rangle \end{aligned} \tag{28}$$

对维格纳3j符号求和，可根据 6j 符号的定义性质进行简化，Edmonds (1996),

$$\sum_{M_\beta,M',M}(-1)^{-M_\beta-M'-M}\begin{pmatrix}J_\beta & J & J_\alpha\\ -M_\beta & M & M'_\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J_\beta & J' & J_\alpha\\ -M_\beta & M' & M_\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J & J' & j\\ M & -M' & m\end{pmatrix}$$
$$=(-1)^{2J'+J_\beta+2J_\alpha+j}\begin{pmatrix}J_\alpha & j & J_\alpha\\ M'_\alpha & -m & -M_\alpha\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}J_\alpha & j & J_\alpha\\ J' & J_\beta & J\end{Bmatrix}. \quad (29)$$

因此，任意一对矩阵元（纵向、电或磁）的乘积为

$$\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_1)}_{M_1}|\alpha\rangle^*\langle\beta|\mathcal{O}^{(i_2)}_{M_2}|\alpha\rangle=\sum_{M_\alpha,M'_\alpha}\sum_{J,J'}\tilde{C}_J\tilde{C}_{J'}(-1)^{M'_\alpha}\langle M'_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle$$
$$\sum_{j,m,m'}D^j_{m'm}(R')^*\begin{pmatrix}J & J' & j\\ M_1 & -M_2 & m'\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J_\alpha & j & J_\beta\\ M'_\alpha & -m & -M_\alpha\end{pmatrix}$$
$$\begin{Bmatrix}J_\alpha & j & J_\alpha\\ J' & J_\beta & J\end{Bmatrix}\langle J_\beta||T^{(i_1)}_J||J_\alpha\rangle^*\langle J_\beta||T^{(i_2)}_{J'}||J_\alpha\rangle \quad (30)$$

˜前因子 C 取决于 J，其具体形式取决于算符的类型，且很容易求得。本节稍后将展示一个具体示例，对这些前因子进行推导。这是所有混合项的通用表达式，这些混合项出现在库仑部分与横向部分相混合的跃迁矩阵元范数中。角积分可用 6j 符号解析计算，而 6j 符号很容易求得。约化矩阵元仅包含取决于初态和末态靶态的径向积分。因此，这是一个通用结果，可用于材料的任何类型模型，以及具有任意角动量的低损或芯损激发。

在低动量转移极限下，截面主要由库仑矩阵元和电偶极矩阵元决定。对于低 $\mathbf{q}$，De Forest 和 Walecka（1966），横向电部分与库仑矩阵元成正比。

$$\langle\beta||T^{(e)}_J||\alpha\rangle\simeq\frac{E}{|\mathbf{q}|}\sqrt{\frac{J+1}{J}}\langle\beta||T^{(coul)}_J||\alpha\rangle \quad (31)$$

因此，展示某一态 $|J_\alpha M_\alpha\rangle$ 的取向靶在低 $\mathbf{q}$ 极限下的电离截面的具体示例是很有用的。在这种

情况下，密度矩阵为 $\langle M'_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle = \delta_{M'_\alpha M_\alpha}$，对所有可能末态求和后的电荷密度算符范数 $|J_\beta M_\beta\rangle$ 为

$$\begin{aligned}\sum_{M_\beta}|\langle\beta|\rho(\mathbf{q})|\alpha\rangle|^2 = 4\pi\sum_{J\,J'\,l}(-i)^{J-J'}\langle\alpha||T^{(coul)\,\dagger}_{J'}||\beta\rangle\langle\beta||T^{(coul)}_{J}||\alpha\rangle \\ \times[J,J']^{1/2}[l](-1)^{J'-J+J_\beta+2J_\alpha}(-1)^{M_\alpha} \\ P_l\left(\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{e}_\mathbf{z}}\right)\begin{pmatrix}J_\alpha & J_\alpha & l\\ -M_\alpha & M_\alpha & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}J & J' & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{Bmatrix}J_\alpha & l & J_\alpha\\ J' & J_\beta & J\end{Bmatrix}\end{aligned} \tag{32}$$

其中 $[x,y,\ldots] = (2x+1)(2y+1)\ldots$。电离截面随后表示为

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_f dE} = \frac{e^2}{2(2\pi)^2}\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|}\frac{1}{q^4}C_L(q)\sum_{M_\beta}|\langle\beta|\rho(\mathbf{q})|\alpha\rangle|^2\,. \tag{33}$$

对于完全各向同性靶，我们对所有初态进行平均，其密度矩阵为对角矩阵（$\langle M_\alpha|\rho_i|M_\alpha\rangle = {}^{1}_{2J_\alpha+1}$），且电荷密度矩阵算符的范数等于 $T^{(coul)}_J$ 的约化矩阵的范数，二者相差一个常数因子。横向矩阵元也同样如此，因此总截面可化简为

$$\begin{aligned}\frac{d^2\sigma}{d\Omega_f dE} = \frac{e^2}{2\pi}\frac{p_f}{p_i}\frac{1}{q^4}\frac{1}{2J_\alpha+1}\Bigg[C_L(q)\sum_{J=0}^{\infty}\left|\langle\beta||T^{(coul)}_J||\alpha\rangle\right|^2 \\ +C_T(q)\sum_{J=1}^{\infty}\left(\left|\langle\beta||T^{(el)}_J||\alpha\rangle\right|^2+\left|\langle\beta||T^{(mag)}_J||\alpha\rangle\right|^2\right)\Bigg]\,.\end{aligned} \tag{34}$$

无取向靶的详细推导见 Iatrakis 和 Brudanin (2025)。系数 C_L 和 C_T 定义于公式（47）中。

4. 磁跃迁

在电子能量损失谱中寻找磁振子的实验探索一直是透射电子显微镜领域的活跃研究方向，Kepaptsoglou 等 (2025年）。电子束激发磁振子的过程已在低能

极限下得到理论研究，Mendis（2022年）；do Nascimento 等（2024年）。这种触发自旋翻转跃迁的相互作用源于入射电子与材料之间横向光子的交换。借助量子电动力学理论，可以很好地描述这一过程。该相互作用已包含在结果（21）的磁矩阵元中。我们将在此展示其如何渐近趋近于已知的低能相互作用，并推导出由电磁流的磁矩部分产生的截面。我们还将探讨电贡献和磁贡献如何取决于实验的运动学条件，并提出通过电子束直接相互作用来增强磁振子激发的可能途径。

利用矢量球谐函数的性质

$$\mathbf{Y}^{M}_{JJ}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{\sqrt{J(J+1)}}\boldsymbol{L}Y^{M}_{J}(\hat{\mathbf{x}}) \tag{35}$$

跃迁矩阵的磁部分，式（21），为

$$\langle\beta|T^{M\,(mag)}_{J}|\alpha\rangle = -\frac{i}{\sqrt{J(J+1)}}\int d^3\mathbf{x}\,(\mathbf{x}\times\boldsymbol{\mathcal{J}}_{\beta\alpha}(\mathbf{x}))\cdot\boldsymbol{\nabla}\left(j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)Y^{M}_{J}(\hat{\mathbf{x}})\right) \tag{36}$$

这是通过磁光子从 $|\alpha\rangle$ 跃迁到 $|\beta\rangle$ 的相对论表达式。

电荷分布的流定义为对流流加上该分布磁矩的旋度 $\langle\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x})\rangle = \langle\boldsymbol{J}(\mathbf{x})\rangle + \boldsymbol{\nabla}\times\langle\boldsymbol{\mu}(\mathbf{x})\rangle$。对于粒子系统，这两项可如式（A.7）映射到单粒子态。于是矩阵元为

$$\langle\beta|T^{M\,(mag)}_{J}|\alpha\rangle = -\frac{i}{\sqrt{J(J+1)}}\int d^3\mathbf{x}\,\left(f^{\dagger}_{\beta}(\mathbf{x})\boldsymbol{L}f_{\alpha}(\mathbf{x}) + \mathbf{x}\times\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{\mu}_{\beta\alpha}(\mathbf{x})\right) \cdot\boldsymbol{\nabla}\left(j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)Y^{M}_{J}(\hat{\mathbf{x}})\right) \tag{37}$$

在低动量转移极限下，上述表达式化简为非相对论量子力学所预期的表达式。贝塞尔函数展开为

$$j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|) \simeq \frac{(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)^J}{(2J+1)!!} \tag{38}$$

而电磁流算符由式（A.6）给出。于是

$$\langle\beta|T_{J=1}^{M\,(mag)}|\alpha\rangle = \frac{e}{2m}\frac{1}{3}\frac{|\mathbf{q}|}{\sqrt{2}}\int d^3\mathbf{x}\, f_\beta^\dagger(\mathbf{x})\left(L^M + \sigma^M\right) f_\alpha(\mathbf{x}) \tag{39}$$

来自磁矩算符的自旋项可引发自旋翻转跃迁，从而在样品中产生磁振子。

现在，我们用靶态的径向积分，显式推导任意角动量态的自旋翻转微分截面。显然，靶波函数适合用 LS 耦合方案表示，因为自旋必须是态的好量子数。电磁流算符的磁矩将作用于靶波函数的自旋部分。相关矩阵元为

$$\langle\beta|T_{J}^{M\,(spin)}|\alpha\rangle = \int d^3\mathbf{x}\,\boldsymbol{\nabla}\times\left(j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\boldsymbol{Y}_{JJ}^M(\hat{\mathbf{x}})\right)\cdot\boldsymbol{\mu}_{\beta\alpha}(\mathbf{x}) \tag{40}$$

恒等式Edmonds （1996）

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}\times\left(j_J(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\boldsymbol{Y}_{JJ}^M(\hat{\mathbf{x}})\right) = i|\mathbf{q}|\Bigg(&\sqrt{\frac{J}{2J+1}}j_{J-1}(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\boldsymbol{Y}_{JJ-1}^M(\hat{\mathbf{x}})\\ &-\sqrt{\frac{J+1}{2J+1}}j_{J+1}(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\boldsymbol{Y}_{JJ+1}^M(\hat{\mathbf{x}})\Bigg)\end{aligned} \tag{41}$$

可得

$$\begin{aligned}\langle\beta|T_{J}^{M\,(spin)}|\alpha\rangle &= i|\mathbf{q}|\sum_{L=J\pm1}\sqrt{\frac{L}{2J+1}}\int d^3\mathbf{x}\, j_L(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|)\boldsymbol{Y}_{JL}^M(\hat{\mathbf{x}})\cdot\boldsymbol{\mu}_{\beta\alpha}(\mathbf{x})\\ &= i|\mathbf{q}|\sum_{L=J\pm1}\sqrt{\frac{L}{2J+1}}\int d^3\mathbf{x}\, j_L\left(|\mathbf{q}||\mathbf{x}|\right) f_\beta^\dagger(\mathbf{x})\boldsymbol{Y}_{JL}^M\cdot\boldsymbol{\sigma} f_\alpha(\mathbf{x})\end{aligned} \tag{42}$$

Us利用维格纳-埃卡特定理，约化矩阵元可表示为

靶的角向和径向波函数的形式

$$\langle\beta||T_J^{M\,(spin)}||\alpha\rangle = i|\mathbf{q}|\sum_{L=J\pm1}\sqrt{\frac{L}{2J+1}}\langle J_\beta; L_\beta\frac{1}{2}||\boldsymbol{Y}_{JL}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}||J_\alpha; L_\alpha\frac{1}{2}\rangle \times\int dr\, r^2 j_L\left(|\mathbf{q}|r\right)F_\beta^\dagger(r)F_\alpha(r) \tag{43}$$

其中，角积分通过解耦球张量来计算 rs

$$\langle J_\beta; L_\beta\frac{1}{2}||\boldsymbol{Y}_{JL}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}||J_\alpha; L_\alpha\frac{1}{2}\rangle = (-1)^{L_\beta}\sqrt{6}\sqrt{\frac{[L_\beta, L_\alpha, L, J_\beta, J_\alpha, J]}{4\pi}} \begin{Bmatrix} L_\beta & L_\alpha & L \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 1 \\ J_\beta & J_\alpha & J \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} L_\beta & L & L_\alpha \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{44}$$

由自旋算符引起的磁跃迁微分截面为

$$\left(\frac{d^2\sigma}{dE\, d\Omega_f}\right)^{(spin)} = \frac{e^2}{2\pi}\frac{|\mathbf{p}_f|}{|\mathbf{p}_i|}\frac{1}{q^4}C_T(q)\sum_\beta|\langle\beta|T_J^{M\,(spin)}|\alpha\rangle|^2 \tag{45}$$

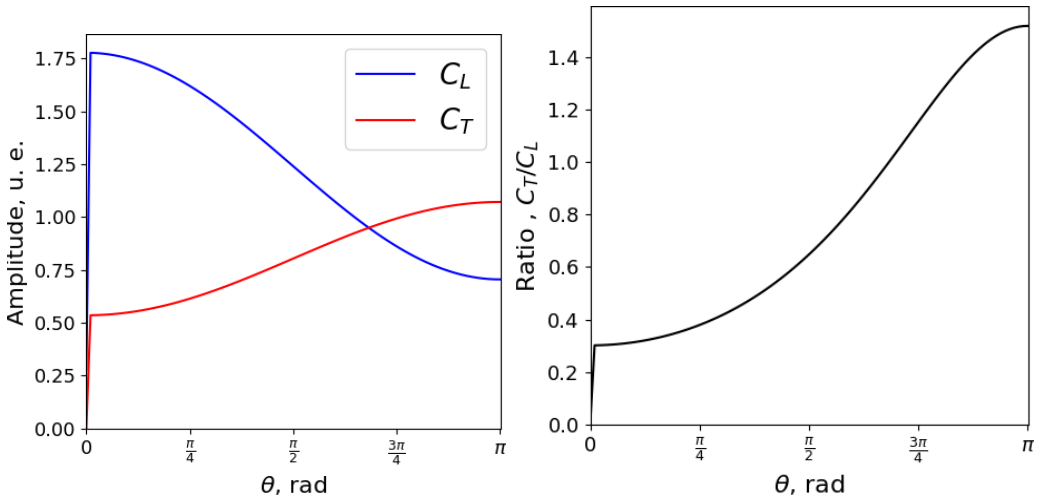
其中 $q^2 = -E^2 + |\mathbf{q}|^2$。

4.1. 磁跃迁的运动学及其探测

至少在长波极限下，磁性部分的截面相对于库仑和电矩阵元受到抑制，抑制因子与精细结构常数的平方成正比 $\sim \mathcal{O}(Z^2\alpha^2)$。此外，电横向跃迁和磁横向跃迁具有不同的宇称。我们关于束流经磁激发发生非弹性散射，尤其是自旋翻转跃迁的结果表明，可根据散射过程的运动学几何构型对其进行增强。纵向系数和横向系数为

$$C_L(q) = \frac{1}{2}\left(1-\frac{E^2}{|\mathbf{q}|^2}\right)^2\left(4E_i^2 - 4E_i\,E + E^2 - |\mathbf{q}|^2\right) \tag{46}$$

$$C_T(q) = \frac{2|\boldsymbol{p}_i||\boldsymbol{p}_f|\,\sin^2\frac{\theta}{2}}{|\mathbf{q}|^2}\left[\left(|\boldsymbol{p}_i| + |\boldsymbol{p}_f|\right)^2 - 2|\boldsymbol{p}_i||\boldsymbol{p}_f|\,\cos^2\frac{\theta}{2}\right] + \frac{(|\boldsymbol{p}_i| - |\boldsymbol{p}_f|)^2 - E^2}{2} \tag{47}$$



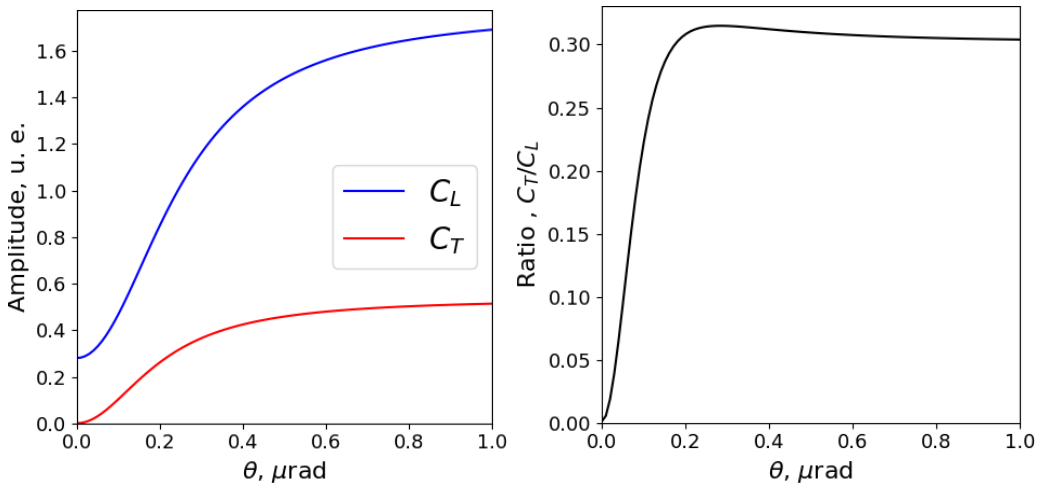
(a) (b)

图3：对于 $V_{beam} = 300kV$ and$E_{loss} = 0.1eV$，散射系数随角度的变化。a) C_L and C_T。c) 比值 C_T/C_L。这些曲线的形状对能量损失的数值不太敏感。

散射角较小时，读者会注意到 C_T 远小于 C_L，图(4、5)。然而， C_T 在散射角较大时变得显著，并且在散射角极大时大于 C_L 。这表明，仅由横向矩阵元探测到的激发在极大的散射角下更占优势。图(3)显示， C_T在约 C_L 处与 2.15 rad 相交；在后向散射时，横向系数与纵向系数之比接近 1.5。这是预期之中的，因为以核靶为对象的散射实验会在大散射角下研究横向跃迁。

图（6）展示了在低能量损失区域，比值 C_T/C_L 随加速电压的变化。随着束流电压升高，该比值增大，并可能超过 1。这一行为符合预期：在超相对论极限下，反向散射电子中可以观测到磁跃迁。

磁跃迁振幅相对于电跃迁振幅受到抑制，这表明在前向散射实验中直接探测磁振子颇具挑战。与纵向通道相比，跃迁振幅和运动学因子都显著受到抑制，而纵向通道主导着散射截面。我们的研究结果提出了两种



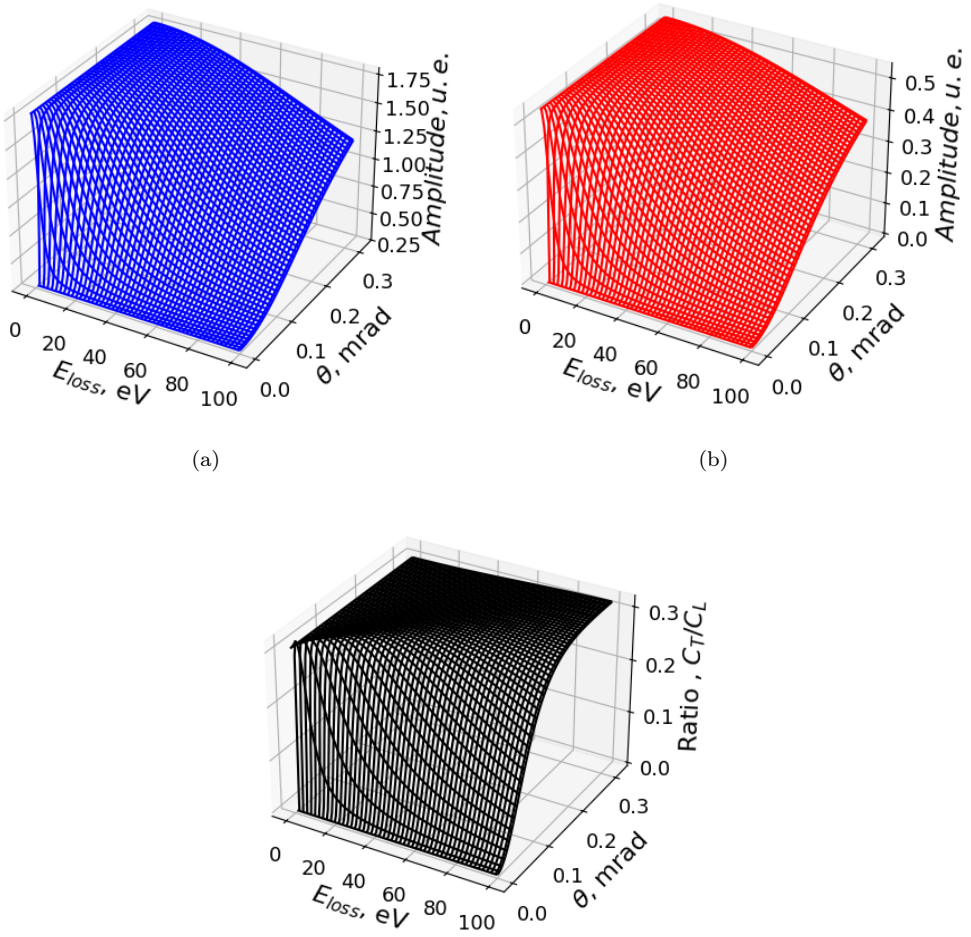
(a) (b)

图4：最陡斜率区域内散射系数随角度的变化（小角度 $\sim \mu rads$）。能量损失较高时，陡峭曲线会延伸至几毫弧度。a) C_L 和 C_T。c) 比值 C_T/C_L。 $V_{beam} = 300kV$。 $E_{loss} = 0.1eV$。

探测此类信号的替代方案。在高束流电压下，背散射事件中的相对论效应变得显著，因此可增强对磁性能量损失信号的直接探测。由此，反射电子能量损失谱等技术可能有效，不过在高束流电压下，能谱中的整体信号会较弱，Werner 等人（2010年）。

由于 C_L 和 C_T 都会对电跃迁有所贡献，而磁跃迁只涉及 C_T，因此与模型无关的策略是在调节束流电压以保持动量转移不变的同时，测量谱随散射角的变化，Weigert and Rose （1964年）。在这种情况下，靶材电流矩阵元的贡献（$T_{\text{库仑}}$，T^{el}和 T^{mag}）将保持恒定，因为它们取决于 $|\mathbf{q}|$。测得的电子能量损失谱强度随角度的变化将由系数 C_L 和 C_T决定。除去 C_L 后，当动量转移保持不变时，横向跃迁相对强度随散射角变化的形状将由 C_T/C_L 决定。

探测自旋翻转跃迁的另一种方法包括在过渡金属的核壳层边进行共振非弹性X射线散射deGroot 等人（1998）。该技术能够高精度地探测中间态，在共振过程中会诱导自旋翻转。在一



(a)

(b)

(c)

图 5：散射系数随能量损失和角度的变化。a) $C_{L\circ}$ b) $C_{T\circ}$ c) 比值 $C_T/C_{L\circ}$
$E_{beam} = 300keV$

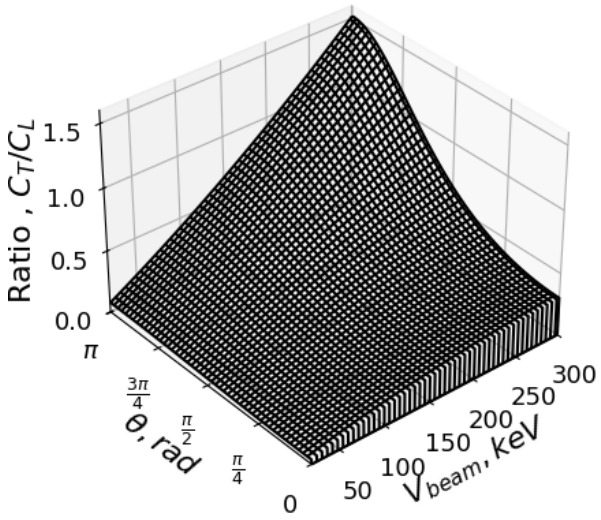
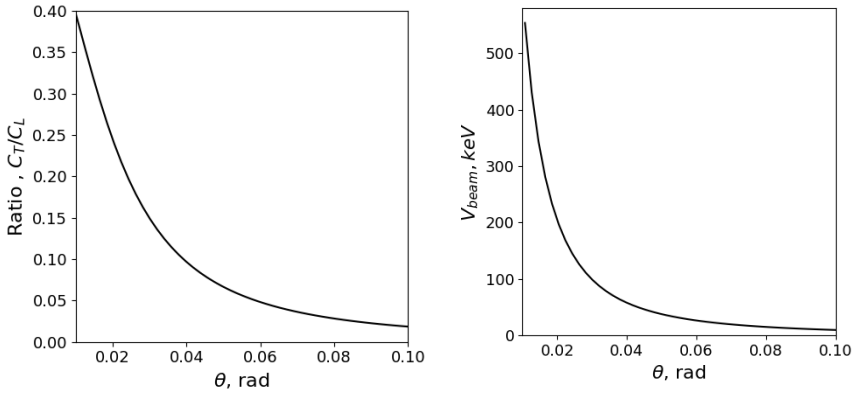


图6：散射系数之比 C_T/C_L 随入射电子能量的变化。 $E_{loss} = 0.1eV$



(a) (b)

图7：(a) 动量转移保持恒定时，散射系数之比随角度的变化， $|\mathbf{q}| = 2.6$ 以原子单位表示。(b) 动量转移保持恒定时，束流电压随角度的变化， $|\mathbf{q}| = 2.6$以原子单位表示。

透射电子显微镜中，可以通过测量共振电子束激发的波长色散 X 射线谱来实现类似的策略，从而有望获得类似的见解。

透射电子显微镜中涡旋电子束的发展，促使研究人员开始利用电子磁圆二色性（电子磁圆二色性）研究磁效应。在这种技Edström 等人 (2016) 研究了相对论电子束在铁磁材料和反铁磁材料中的弹性散射。分析比较了角动量投影相反的束流，并表明电子束经晶体衍射后，其信号会因与材料感应磁场的相互作用而产生差异。我们预计纵向部分的贡献已大幅抵消。值得注意的是，最终的磁信号集中在小散射角处——这与相对论弹性散射截面随角度增大而增大的趋势相反。这种现象可能是晶体几何结构与初始涡旋束制备方式共同作用的结果。此外，采用轨道角动量更大的束流可以进一步增强磁信号。在电子能量损失谱中，电子磁圆二色性的概念由Hébert 和 Schattschneider(2003) 提出。

5. 总结与展望

电子能量损失谱数据由电子束与材料发生非弹性散射产生。本文在量子场论深度非弹性散射的框架下，分析了一般类型的靶与完全相对论性电子束的这一过程，De Forest 和 Walecka (1966）；Drell 和 Walecka(1964）；Weinberg(1995）。我们着重说明了相对论形状因子如何自然地出现在量子电动力学非弹性截面的计算中，并讨论了它与线性响应理论的关系，以及如何根据电磁流二点函数计算输运性质。我们的结果具有普适性，不依赖于用于计算靶矩阵元的模型。Lourenço-Martins 等人(2021）采用略有不同的技术和标量量子电动力学模型，给出了类似的构造。

接下来，我们将关注对具有特定角动量方向的极化靶进行非弹性微分截面的显式计算。在Iatrakis 和 Brudanin(2025)中，已计算非极化原子靶的电离和激发截面。现将这一构造推广至不再以相同权重对靶角动量的所有可能初始投影求和的情形。

在这种情况下，截面还取决于靶原子的量子化轴方向。文中以任意角动量的原子态为例，展示库仑矩阵元的具体形式，并用相应的耦合系数显式计算角积分。

最后，我们在当前理论框架下研究了电子能量损失谱中的磁振子激发。当前计算同时纳入了库仑、电和磁贡献，并可在同一基准下量化各自的贡献。我们明确表明，对磁跃迁矩阵元取长波长极限，可以重现已知的靶偶极磁矩矩阵元。随后，我们计算了由电磁跃迁流的磁矩部分引起的自旋翻转跃迁的微分截面。众所周知，磁偶极跃迁的强度远低于库仑跃迁和电偶极跃迁。然而，我们发现横向跃迁的系数会随着散射角增大而增加。我们的结果表明，与小散射角下的数值相比，高散射角下的高能束流实验可以增强横向跃迁相对于纵向跃迁的信号。此外，系数 C_L 和 C_T，式（47，对散射角的依赖方式不同；过去曾利用这一特点研究核靶中的磁激发，Weigert and Rose （1964年）。因此，可以通过改变散射角的电子能量损失谱实验，测量能量损失和动量转移恒定时横向跃迁对角度的依赖性。这需要针对不同散射角调整束流电压。随后，谱形随散射角的变化便可揭示不同类型的跃迁。当前工作的一个有趣拓展方向，是对真实材料的磁化强度、电荷和电流密度进行建模，并利用当前形式体系计算其电子能量损失谱。另一项未来研究是运用当前形式体系，在量子电动力学框架下计算电子磁圆二色性电子能量损失谱信号。

6. 致谢

我们感谢“电子产生增强数据（EDGE）2024年电子能量损失

光谱学及相关技术国际研讨会”的组织者为我们提供展示研究成果的机会。我们还感谢 M. Kociak 的宝贵讨论，尤其感谢 F. de Groot 就共振非弹性 X 射线散射及其采用入射电子束的潜在类似过程进行的深刻交流。V.B. 感谢欧洲研究理事会高级资助的支持，资助协议编号为 101055013。

附录A. 非相对论极限

附录 *A.1.* 靶标跃迁电流

在电子能量损失谱实验中，相对论束流电子传递给样品的动量转移通常很小。在这种情况下，探测的是非相对论靶标激发。对于非极化靶，完整量子电动力学非弹性截面的非相对论极限已由 Iatrakis 和 Brudanin(2025) 推导得到。

这里展示如何将与外场相互作用的非相对论跃迁流表达式作为量子电动力学跃迁流的极限推导出来。

电子波函数由旋量场 $\Psi(x)$ 在（1）中定义为$\psi_n(x) = \langle 0|\Psi(x)|n\rangle$，其中 n 是相应希尔伯特空间的量子数集合。波函数的运动方程为

$$\left(\not{\partial} + m + ie\not{A}(x)\right)\psi_n(x) = 0 \tag{A.1}$$

引入二分量旋量波函数

$$\psi_n(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} f_n(\mathbf{x}) + i\, g_n(\mathbf{x}) \\ f_n(\mathbf{x}) - i\, g_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} e^{-iE_n t} \tag{A.2}$$

W我们遵循伽马矩阵的定义（C.3）。运动方程为

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A})\, f_n(\mathbf{x}) = (E_n + eA^0 + m)g_n(\mathbf{x}) \tag{A.3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla} + e\boldsymbol{A})\, g_n(\mathbf{x}) = -(E_n + eA^0 - m)f_n(\mathbf{x}) \tag{A.4}$$

在非相对论极限下 $E_n \simeq m + \epsilon_n$ 其中 $\epsilon_n \ll m$。我们还假设静电场相对于电子的静止质量而言较小。对于电子能量损失谱实验所探测的大多数激发而言，这是一个合理的假设。式（A.3）给出

$$g_n(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\boldsymbol{\nabla}+e\boldsymbol{A})\,f_n(\mathbf{x}) \tag{A.5}$$

推导了非相对论极限下跃迁流算符的矩阵元

$$\begin{aligned}\langle m|\boldsymbol{\mathcal{J}}(\mathbf{x})|n\rangle =& -ie\overline{\psi}_m(\mathbf{x})\gamma^\mu\psi_n(\mathbf{x})\\ =& ie\,\left(f_m^\dagger(\mathbf{x})\boldsymbol{\sigma}g_n(\mathbf{x})+g_m^\dagger(\mathbf{x})\boldsymbol{\sigma}f_n(\mathbf{x})\right)\\ =& \frac{i\,e}{2m}\,\left(f_m(\mathbf{x})\boldsymbol{\nabla}f_n^\dagger(\mathbf{x})-f_m^\dagger(\mathbf{x})\boldsymbol{\nabla}f_n(\mathbf{x})+i\boldsymbol{A}f_m^\dagger(\mathbf{x})f_n(\mathbf{x})\right.\\ & \left.-i\boldsymbol{\nabla}\times(f_m(\mathbf{x})\boldsymbol{\sigma}f_n(\mathbf{x}))\right)\end{aligned} \tag{A.6}$$

这是单粒子态的表达式，可推广至多粒子费米子态；后者通常是斯莱特行列式的线性叠加。我们注意到，自旋贡献与对流电流处于同一阶。该表达式可以与按对流电流和磁矩进行的分解相匹配

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{J}_{mn}(\mathbf{x})\rangle &= \frac{i\,e}{2m}\,\left(f_m(\mathbf{x})\boldsymbol{\nabla}f_n^\dagger(\mathbf{x})-f_m^\dagger(\mathbf{x})\boldsymbol{\nabla}f_n(\mathbf{x})+i\boldsymbol{A}f_m^\dagger(\mathbf{x})f_n(\mathbf{x})\right)\\ \langle\boldsymbol{\mu}_{mn}(\mathbf{x})\rangle &= \frac{e}{2m}\,f_m(\mathbf{x})\boldsymbol{\sigma}f_n(\mathbf{x})\end{aligned} \tag{A.7}$$

附录 *A.2.* 半相对论束流与标量量子电动力学情形

对于低能量损失和小动量转移下的散射事件，文献中常采用其他一些近似。在此条件下，探测电子自旋自由度的贡献受到抑制。作为一个玩具模型，有时会采用标量量子电动力学来描述无自旋束流与靶之间的相对论相互作用。不过需要强调的是，标量量子电动力学并非对现实中的旋量量子电动力学进行一致约减后的理论。只有在忽略自旋自由度的前提下，这两种理论才在非相对论极限下相一致。泡利近似是从旋量量子电动力学一致导出的受控低能展开，如附录A.1所示。

我们在此计算标量束流从外部靶上发生散射的截面。标量量子电动力学拉格朗日量为

$$\mathcal{L}_{SQED} = -\frac{1}{4}F^{\mu\nu}(x)F_{\mu\nu}(x) \; - D^{\mu}\Phi(x)^{\dagger}D_{\mu}\Phi(x) \; - m^2\Phi^{\dagger}\Phi + \mathcal{J}^{\mu}A_{\mu}\,. \tag{A.8}$$

四动量从 p_i 到 p_f 的标量电子被重靶散射，其散射过程由以下微分截面描述:

$$\frac{d^2\sigma}{dE_f\, d\Omega_f} = (2\pi)^4 \frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|} E_i E_f \, |T_{p_f,\beta\,;p_i,\alpha}|^2 \delta(E_i - E_f - E_\beta - E_\alpha) d\beta\,. \tag{A.9}$$

跃迁矩阵元由图（1）中的费曼图计算，其中左侧顶角的外线现在对应于标量电子。入射/出射标量电子平面波为散射振幅贡献一个因子 $\frac{e^{\pm ipx}}{(2\pi)^{3/2}\sqrt{2p^0}}$，其中$p^0 = \sqrt{\boldsymbol{p}^2 + m^2}$。光子-费米子顶角为 $-e(p_f^{\mu} + p_i^{\mu})$，而与外部电流的耦合产生一个顶角 $-\mathcal{J}_{\mu}(x)$。光子传播子为

$$\Delta_{\mu\nu}(x_1, x_2) = \int \frac{d^4q}{(2\pi)^4} \frac{\eta_{\mu\nu}}{q^2 - i\varepsilon} e^{iq(x_1 - x_2)}\,. \tag{A.10}$$

费曼图振幅于是写为

$$T_{p_f,\beta\,;p_i,\alpha} = -\frac{e}{(2\pi)^3} \frac{p_f^{\mu} + p_i^{\mu}}{\sqrt{4E_f E_i}} \frac{1}{q^2 - i\varepsilon} \int d^3x e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \langle\beta|\mathcal{J}_{\mu}(\mathbf{x})|\alpha\rangle \;. \tag{A.11}$$

截面由 $T_{p_f,\beta;\,p_i,\alpha}$的范数计算，结果由方程（3）给出，此时

$$L_{\mu\nu}^{SQED} = \frac{1}{2}(p_i + p_f)_{\mu}(p_i + \, p_f)_{\nu} \tag{A.12}$$

其与量子电动力学情形的差别在于以下项：$(p_i \cdot p_f + m^2)\eta_{\mu\nu}$。动态形状张量仍由式（5）给出。由于 $L_{\mu\nu}$ 与守恒流收缩， $q_{\mu}\mathcal{J}^{\mu}(\mathbf{q}) = 0$，与 q_{μ} 成正比的项不会对振幅产生贡献，因此标量量子电动力学的表达式与式（ $L_{\mu\nu}^{\mathrm{cl}}$ （14）中的表达式相同。

考虑到流守恒，我们可以得到以靶的跃迁电流表示的微分截面

$$\frac{d^2\sigma}{dE\, d\Omega_f} = \frac{\alpha}{\pi}\frac{|\boldsymbol{p}_f|}{|\boldsymbol{p}_i|}\frac{1}{q^4}\mathcal{J}^{\mu}_{\beta\alpha}P_{\mu}\mathcal{J}^{\nu\,\dagger}_{\beta\alpha}P_{\nu}\,, \tag{A.13}$$

其形式与式（15）相同，区别在于最后一项$\mathbf{q}_2^{\ 2}|\mathcal{J}|^2$。

—

很容易计算靶的角动量本征态的微分截面，从而求得系数 C_L 和 C_T

$$C_L^{SQED}(q) = \frac{1}{2}\left(1-\frac{E^2}{|\mathbf{q}|^2}\right)^2\left(4E_i^2 - 4E_i\,E + E^2\right) \tag{A.14}$$

$$C_T^{SQED}(q) = \frac{2|\boldsymbol{p}_i||\boldsymbol{p}_f|\,\sin^2\frac{\theta}{2}}{|\mathbf{q}|^2}\left[\left(|\boldsymbol{p}_i|+|\boldsymbol{p}_f|\right)^2 - 2|\boldsymbol{p}_i||\boldsymbol{p}_f|\,\cos^2\frac{\theta}{2}\right] \tag{A.15}$$

这里我们确实验证了，SQED 的结果与较低阶项的截面一致，其中 $|\mathbf{q}|$。图（A.8）显示，在更大的散射角下，标量量子电动力学与量子电动力学之间的差异更加明显。

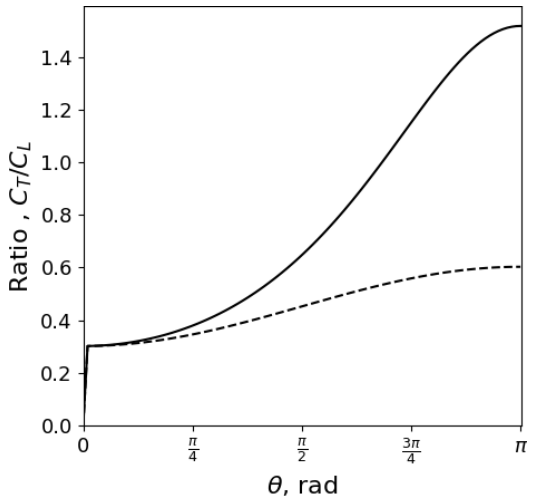


图 A.8：散射系数 C_T/C_L 随散射角变化的比值。实线：量子电动力学；虚线：标量量子电动力学 $E_{loss} = 0.1eV$

电离截面也在单粒子量子力学框架内进行了计算，其中束流

电子在靶的电磁场中发生散射。相应的有效单粒子势可由相关费曼图的傅里叶变换得到。主要贡献来自库仑相互作用，而首阶相对论修正，其阶数为 $1/c$，由布赖特项给出。详细推导见Berestetskii 等人 (1982)。

附录 B. 磁矩阵元的多极展开

动态形状张量的多极展开由Iatrakis 和 Brudanin(2025) 通过在球坐标中耦合适当的张量算符进行了分析。这里我们给出另一种推导方法，见 Johnson 等人 (1988)，其依据是矢量球谐函数的一般性质，参见 Edmonds (1996)

$$\begin{aligned} \mathbf{Y}^{M}_{J\,J}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{1}{J(J+1)}\mathbf{L}Y^{M}_{J}(\hat{\mathbf{x}}) \\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L}\Omega_{\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}}) &= -(1+\kappa)\Omega_{\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}}) \end{aligned} \tag{B.1}$$

磁跃迁矩阵可以用靶的狄拉克波函数的径向积分来计算。这些积分由式 (A.2) 定义为 $f_n(\mathbf{x}) = \Omega_{\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}})F_n(r)$ 以及 $g_n(\mathbf{x}) = \Omega_{-\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}})G_n(r)$，其中旋量球谐函数为

$$\Omega_{\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}}) = \begin{pmatrix} C_{j\mp\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(j, m\ m-\frac{1}{2}, \frac{1}{2})Y^{m-\frac{1}{2}}_{j\mp\frac{1}{2}} \\ C_{j\mp\frac{1}{2},\frac{1}{2}}(j, m\ m+\frac{1}{2}, \frac{1}{2})Y^{m+\frac{1}{2}}_{j\mp\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \tag{B.2}$$

以及 $\Omega_{-\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}}) = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{x})\,\Omega_{\kappa\,m}(\hat{\mathbf{x}})$。

磁矩阵元可表示为

$$\begin{aligned}\langle\beta||T_J^{M\,(m)}||\alpha\rangle &= i\,e\int d^3x j_J\left(|\mathbf{q}|r\right)\left[f_\beta^\dagger(\mathbf{x})\mathbf{Y}_{JJ}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}g_\alpha(\mathbf{x})-g_\beta^\dagger(\mathbf{x})\mathbf{Y}_{JJ}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}f_\alpha(\mathbf{x})\right]\\ &= i\,e\left[\langle\kappa_\beta||\left[\mathbf{Y}_{JJ}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]||-\kappa_\alpha\rangle\int dr\,r^2\,j_J\left(|\mathbf{q}|r\right)F_\beta^\dagger(r)G_\alpha(r)\right.\\ &\left.-\,\langle-\kappa_\beta||\left[\mathbf{Y}_{JJ}^M\cdot\boldsymbol{\sigma}\right]||\kappa_\alpha\rangle\int dr\,r^2\,j_J\left(|\mathbf{q}|r\right)G_\beta^\dagger(r)F_\alpha(r)\right]\\ &= -i\,e\frac{(\kappa_\alpha+\kappa_\beta)}{\sqrt{J(J+1)}}\langle\kappa_\beta||Y_J||-\kappa_\alpha\rangle\int dr\,r^2\,j_J\left(|\mathbf{q}|r\right)\\ &\times\left(F_\beta^\dagger(r)G_\alpha(r)+G_\beta^\dagger(r)F_\alpha(r)\right)\end{aligned}\tag{B.3}$$

其中我们定义

$$\langle\kappa_m||Y_J||\kappa_n\rangle=\frac{(-1)^{j_m-\frac{1}{2}}}{\sqrt{4\pi}}\,[j_m,\,J,\,j_n]^{\frac{1}{2}}\begin{pmatrix}j_m & J & j_n\\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2}\,.\end{pmatrix}\tag{B.4}$$

附录 C. γ 矩阵表示

伽马矩阵满足狄拉克代数

$$\{\gamma^\mu,\gamma^\nu\}=2\eta^{\mu\nu}\,.\tag{C.1}$$

狄拉克表示特别适合研究非相对论极限。其形式为

$$\gamma_D^0=-i\begin{pmatrix}\mathbb{I} & 0\\ 0 & -\mathbb{I}\end{pmatrix}\;,\quad\gamma_D^i=-i\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}\tag{C.2}$$

外尔表示中，左手和右手旋量可以更方便地表示为

$$\gamma_C^0=-i\begin{pmatrix}0 & \mathbb{I}\\ \mathbb{I} & 0\end{pmatrix}\;,\quad\gamma_C^i=-i\begin{pmatrix}0 & \sigma^i\\ -\sigma^i & 0\end{pmatrix}\;,\quad\beta=i\gamma^0\tag{C.3}$$

相似变换将这两种表示联系起来

$$U=U^{-1}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}\mathbb{I} & \mathbb{I}\\ \mathbb{I} & -\mathbb{I}\end{pmatrix}\,.\tag{C.4}$$

Then

$$\gamma_C^\mu = U\,\gamma^\mu U^{-1}\,, \Psi_C = U\Psi_D \tag{C.5}$$

在这两种情况下，我们都可以定义

$$\beta = i\gamma^0\,. \tag{C.6}$$

最初，狄拉克方程是用如下定义的 α 矩阵表示的

$$\alpha_4 = \beta = i\gamma^0\ ,\ \ \alpha^i = i\alpha_4\gamma^i\,. \tag{C.7}$$

参考文献

García de Abajo, F.J.，2010年。电子显微镜中的光学激发。《现代物理评论》82，209–275。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.209，doi：10.1103/RevModPhys.82.209。

Berestetskii, V.、Lifshitz, E.、Pitaevskii, L.，1982年。《量子电动力学：第4卷》。理论物理教程，爱思唯尔科学。网址：https://books.google.nl/books?id=URL5NKX8vbAC。

De Forest, Jr., T.、Walecka, J.D.，1966年。电子散射与核结构。《先进物理》15，1–109。doi：10.1080/00018736600101254。

deGroot, F.M., Elnaggar, H., Frati, F., pan Wang, R., Delgado-Jaime, M.U., van Veenendaal, M., Fernandez-Rodriguez, J., Haverkort, M.W., Green, R.J., van der Laan, G., Kvashnin, Y., Hariki, A., Ikeno, H., Ramanan-toanina, H., Daul, C., 等，2021. 3d 过渡金属体系的 2p X射线吸收光谱。《电子能谱学及相关现象》249, 147061. URL：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0368204821000190, doi：https://doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147061。

Drell, S.D., Walecka, J.D., 1964年. 与核靶相互作用的电动力学过程。《物理年鉴》28, 18–33. doi：10.1016/0003-4916(64)90141-1。

Edmonds, A., 1996.《量子力学中的角动量》。物理学研究丛书，普林斯顿大学出版社。网址：https://books.google.nl/books?id=0BSOg0oHhZ0C。

Edström, A., Lubk, A., Rusz, J., 2016. 弹性电子散射近轴区间中的磁效应。《物理评论B》94, 174414。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.94.174414，doi：10.1103/PhysRevB.94.174414。Gell-Mann, M., Goldberger, M.L., 1953. 散射形式理论。《物理评论》91, 398–408。doi：10.1103/PhysRev.91.398。de Groot, F.M.F., Kuiper, P., Sawatzky, G.A., 1998. 通过共振X射线拉曼散射获得的局域自旋翻转光谱分布。《物理评论B》57, 14584–14587。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.57.14584，doi：10.1103/PhysRevB.57.14584。Hébert, C., Schattschneider, P., 2003. 关于在电子显微镜中开展二色性实验的提案。Ultramicroscopy 96, 463–468。网址：
h
t
tps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304399103001086，doi：https://doi.org/10.1016/S0304-3991(03)00108-6。原子级光谱学与分析策略及进展国际研讨会论文集。Iatrakis, I., Brudanin, V., 2025. 电子能量损失谱中电子-原子非弹性散射的多体效应和量子电动力学效应。网址：https://arxiv.org/abs/2502.12254，arXiv:2502.12254。Johnson, W.R., Blundell, S.A., Sapirstein, J., 1988. 用B样条构造的狄拉克方程有限基组。《物理评论A》37, 307–315。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.37.307，doi：10.1103/PhysRevA.37.307。Kepaptsoglou, D., Ángel Castellanos-Reyes, J., Kerrigan, A., Nascimento, J.A.D., Zeiger, P.M., Hajraoui, K.E., Idrobo, J.C., Mendis, B.G., Bergman, A., Lazarov, V.K., Rusz, J., Ramasse, Q.M., 2025. 电子显微镜中的磁振子光谱学。网址：https://arxiv.org/abs/2410.02908，arXiv:2410.02908。Lourenço-Martins, H., Lubk, A., Kociak, M., 2021. 在统一描述相对论电子束非弹性散射的框架中衔接纳米光学与凝聚态物理形式体系。《SciPost物理》10, 031。网址：https://scipost.org/10.21468/SciPostPhys.10.2.031，doi：10.21468/SciPostPhys.10.2.031。

Mendis, B., 2022年。高能电子束激发磁振子的量子理论。《Ultramicroscopy》239，113548。网址：h
t
tps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304399122000808，doi：https://doi.org/10.1016/j.ultramic.2022.113548。do Nascimento, J.A., Hasnip, P.J., Cavill, S.A., Cossu, F., Kepaptsoglou, D., Ramasse, Q.M., Kerrigan, A., Lazarov, V.K., 2024年。动量分辨磁振子电子能量损失谱理论：钇铁石榴石的案例。网址：https://arxiv.org/abs/2401.12302，arXiv:2401.12302。Nelhiebel, M., Louf, P.H., Schattschneider, P., Blaha, P., Schwarz, K., Jouffrey, B., 1999年。取向敏感的近边精细结构芯能级谱学理论。《物理评论B》59，12807–12814。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.12807，doi：10.1103/PhysRevB.59.12807。Schattschneider, P., Hébert, C., Franco, H., Jouffrey, B., 2005年。非弹性电子散射的各向异性相对论截面及魔角。《物理评论B》72，045142。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.045142，doi：10.1103/PhysRevB.72.045142。Sorini, A.P., Rehr, J.J., Levine, Z.H., 2008年。电子能量损失谱中的魔角：相对论和介电修正。《物理评论B》77，115126。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.115126，doi：10.1103/PhysRevB.77.115126。Van Hove, L., 1954年。相互作用粒子系统中的时空关联与玻恩近似散射。《物理评论》95，249–262。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.95.249，doi：10.1103/PhysRev.95.249。Weigert, L., Rose, M., 1964年。核取向和电子极化对原子核电激发的影响。《核物理》51，529–552。网址：h
ttps://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0029558264902925，doi：https://doi.org/10.1016/0029-5582(64)90292-5。Weinberg, S., 1995年。《场的量子理论》。剑桥大学出版社。

Werner, W.S.M., Zemek, J., Jiricek, P., 2010年。区分反射式电子能量损失谱中的弹性散射和非弹性散射效应。《物理评论B》82, 155422。网址：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.155422，doi：10.1103/PhysRevB.82.155422。