

**UNIVERZITET U BEOGRADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
ODSEK ZA FIZIČKE NAUKE**

MILAN S. DIMITRIJEVIĆ

**ANALIZA
ŠTARKOVOG ŠIRENJA
SPEKTRALNIH LINIJA
ARGONA**

— MAGISTARSKI RAD —

**INSTITUT ZA FIZIKU
BEOGRAD 1976.**

Ovaj rad je ostvaren u Institutu za fiziku u Beogradu u okviru usavršavanja uz rad delimično finansiranog od strane Republičke zajednice za nauku, tokom postdiplomskih studija na smeru fizika jonizovanog gasa, na Prirodno-matematičkom fakultetu u Beogradu. Rad se odvijao u Odeljenju za spektroskopiju plazme, Laboratorije za plazmu, pod rukovodstvom dr Nikole Konjevića i dr Petra Grujića.

Štampanje rada finansirano je od strane Republičke zajednice za nauku.

Zahvaljujem se dr Petru Grujiću za mnoge korisne savete i diskusije i pomoć pri radu i dr Nikoli Konjeviću na stalnom angažovanju tokom izrade rada, sugestijama i svestranoj pomoći.

Zahvaljujem se svima koji su mi pružanjem podrške i dodeljivanjem materijalnih sredstava omogućili ostvarenje rada.

Milan S. Dimitrijević

S A D R Ž A J

	Strana
UVOD	3
1. OSNOVE TEORIJE ŠIRENJA SPEKTRALNIH LINIJA U PLAZMI	5
1.1 Uzroci širenja linija u plazmi	5
1.1.1 Prirodno širenje	6
1.1.2 Doplerovo širenje	8
1.1.3 Širenje linija pritiskom	11
1.1.3.1 Dve granične aproksimacije	12
1.2 Semiklasična aproksimacija	13
1.2.1 Uslovi važenja semiklasične aproksimacije	18
1.3 Sudarna aproksimacija	23
1.3.1 Uslovi važenja sudarne aproksimacije	28
1.4 GBKO teorija za širenje izolovanih linija neutralnih atoma sa dva i više elektrona	30
1.4.1 Postupak Cooper-a i Oertel-a	35
1.5 Širenje izolovanih linija jona sa dva i više elektrona	37
1.5.1 Postupak Baranger-a	37
1.5.2 Postupak Cooper-a i Oertel-a	39
1.5.3 Postupak Griem-a	39
2. IZRAČUNAVANJE POLUŠIRINE I POMAKA SPEKTRALNIH LINIJA U PLAZMI	41
2.1 Verovatnoće prelaza za električni dipol	42

2.1.1	Metod Racah	44
2.1.2	Faktor linije	46
2.1.3	Faktor multipleta	52
2.1.4	Računanje radijalnih matričnih elemenata u aproksimaciji centralnog polja	55
2.2	Energetski nivoi	58
3.	ANALIZA DOBIJENIH REZULTATA	59
3.1	Upoređivanje eksperimentalnih i teorijskih poluširina linija drugih autora	59
3.1.1	Jednostruko jonizovani atomi	59
3.1.2	Neutralni atomi	63
3.2	Analiza Štarkovog širenja spektralnih linija argona	65
3.3	O uzrocima odstupanja nekih eksperimentalnih poluširina od teorijski predviđenih	70
3.3.1	Odstupanja koja utiču na neslaganje sa teorijski predviđenom temperaturnom zavisnošću	70
3.3.1.1	Zapemareni perturbacioni nivoi	70
3.3.1.2	Povratno dejstvo emitera na perturber	71
3.3.2	Razlike između linija unutar istog multipleta	74
4.	ZAKLJUČAK	76
	PRILOZI	79
	LITERATURA	92

U V O D

Teorijska analiza Štarkovog širenja linija argona, nastavak je sadašnjeg eksperimentalnog rada na ispitivanju Štarkovog širenja spektralnih linija u plazmi, koji se odvija u odeljenju za spektroskopiju plazme, Laboratorije za plazmu, Instituta za fiziku u Beogradu.

Cilj ovih ispitivanja je što tačnije odredjivanje parametara Štarkovog širenja: širine i pomaka spektralnih linija, za niz elemenata. Poznavanje ovih veličina omogućava da se analizom zračenja koje dolazi iz plazme, bez unošenja mernog instrumenta, odrede osnovni parametri stanja plazme: temperatura i koncentracija elektrona.

Postoji relativno veliki broj analitičkih prilaza teoriji Štarkovog širenja spektralnih linija u plazmi, ali su jedino prema teoriji Griem-Baranger-Kolb-Oertel-a izradjene tablice parametara Štarkovog širenja za neutralne i jednostruko jonizovane emitere, čime je ona stekla operativan karakter. U okviru ove teorije vršene su različite modifikacije da bi se bolje uključili razni efekti u procesu interakcije elektrona sa neutralnim ili jonizovanim emiterima.

Cilj ovog rada je da izvrši analizu doprinosa različitih efekata na računane parametre Štarkovog širenja spektralnih linija, kao i mogućnosti analiziranih teorijskih prilaza da ove efekte uzme u obzir.

Rad je podeljen na tri glave i zaključak. U prvoj glavi prikazani su različiti mehanizmi širenja spektralnih linija u plazmi i izložene osnovne teorije za širenje linija neutralnih i jonizovanih emitera. Druga glava posvećena je računanju različitih parametara atomskih sistema potrebnih za dobijanje poluširine i pomaka spektralne linije. Rezultati izračunavanja Štarkovih parametara spektralnih linija za Ar I, Ar III i Ar IV, kao i za

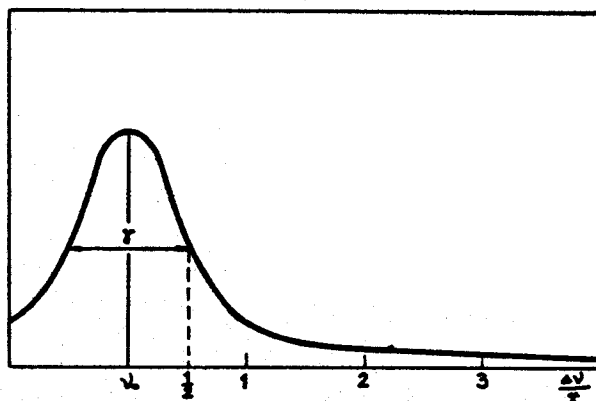
neke linije drugih elemenata i analiza dobijenih rezultata prikazani su u trećoj glavi. Potrebna izračunavanja izvršena su na IBM 360/44 u računskom centru Matematičkog instituta u Beogradu.

Kao model je uzeta nisko temperaturna plazma, čija je elektronska temperatura reda 10^4 K, visoke koncentracije elektrona (N_e reda 10^{17} cm⁻³). Proučavanje ovakve plazme ima veliki praktični interes jer je takva plazma jedan od najsnažnijih svetlosnih izvora veštačkog porekla i ima široku primenu u svakodnevnoj upotrebi, u tehničke i istraživačke svrhe.

1. OSNOVNE TEORIJE ŠIRENJA SPEKTRALNIH LINIJA U PLAZMI

1.1. Uzroci širenja linija u plazmi

Idealno monohromatsko zračenje, odnosno svetlost potpuno određene talasne dužine, nemoguće je dobiti. Spektralna linija, čiji oblik zavisi od stepena monohromatičnosti analiziranog zračenja, uvek je više ili manje proširena i njen profil je neka raspodela intenziteta zračenja u intervalu frekvencije ν , sa centralnom frekvencijom ν_0 . (sl. 1).



Sl. 1

Širenje spektralnih linija može nastati iz više uzroka. Ekscitovana stanja atoma imaju neodređenu energiju. Vreme života atoma u njima je konačno i spektralna linija ima oblik kao na sl. 1. Sudari sa okolnim česticama skraćuju vreme života atoma u nekom energetskom stanju. Prema Hajzenbergovoj relaciji neodređenosti koja povezuje neodređenost energetskog stanja ΔE sa vremenom života atoma u njemu Δt :

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$$

1.1.1.1

gde je $\frac{h}{2\pi}$ redukovana Plankova konstanta:

$$\frac{h}{2\pi} = \frac{h}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \cdot 6.6025 \cdot 10^{-27} \text{ erg. sec}$$

Atom u energetskom stanju veće širine ima kraće vreme života, pa je i spektralna linija šira.

Kretanje atoma koji zrači i različite vrste interakcija sa susednim česticama i poljima koje dovode do pomeranja i cepanja ekscitovanih energetskih nivoa mogu proširiti liniju. Kada ovi uzroci deluju na skup atoma, usrednjavanjem se dobija raspodela intenziteta linije. Spektralna linija u plazmi, praćena je fonom kontinualnog zračenja. Druge linije mogu biti u blizini i delimično je prekrivati. Često je teško reći gde je granica između linije i fona. Kao mera širine linije uzima se njena širina na visini koja odgovara polovini maksimalnog intenziteta linije, γ ili polovina ove vrednosti^w.

1.1.1 Prirodno širenje

Prirodna širina linije je posledica fundamentalnih odnosa u prirodi izraženih Hajzenbergovom relacijom neodređenosti (1.1.1.1). Širina energetskog nivoa zavisi od vremena života atoma u odgovarajućem stanju. Samo je osnovni energetski nivo atoma određen. Vreme života atoma u metastabilnim stanjima može biti i za nekoliko redova veličina duže nego u običnom pobudjenom stanju, tako da je energetski nivo običnog pobudjenog stanja širi. Ako atom prelazi iz višeg stanja i u niže stanje j ($E_i > E_j$), emitovaće kvant energije jednak razlici energija ovih stanja.

$$E_{ij} = E_i - E_j = h\nu_{ij} = \frac{h}{2\pi} \omega_{ij} \quad 1.1.2.1$$

ω je kružna frekvencija.

Za pobudjena stanja vreme života Δt obično je reda 10^{-8} sec. Uz pomoć (1.1.1.1, 1.1.2.1):

$$\Delta \nu_{1,2} \geq \frac{1}{2\pi \Delta t}$$

$$\Delta \nu_{1,2} = \frac{c}{\lambda_1} - \frac{c}{\lambda_2} \approx \frac{c \Delta \lambda}{\lambda^2}$$

$$c = 3 \cdot 10^{10} \text{ cm/sec.}$$

c je brzina svetlosti.

Za vidljivu svetlost ($\lambda = 6000 \text{ \AA}$) se dobija da je prirodna širina linije:

$$\Delta \lambda \approx \frac{\Delta \nu}{c} \lambda^2 = \frac{\lambda^2}{2\pi c \Delta t} = 0.0002 \text{ \AA}$$

Ako bi otklonili sve druge uzroke širenja, to jest ako bi atom udaljili na beskonačno rastojanje od svih atoma i ako on miruje, spektralne linije dobijene analizom zračenja takvog atoma imale bi samo prirodnu širinu. Ona je znatno manja od svih ostalih oblika širenja i u laboratorijskoj plazmi se obično zanemaruje.

Celom problemu se može prići klasično. Tačkasto naelektrisanje koje se kreće sa ubrzanjem zrači. Da bi se održala energija polja zračenja, kinetička energija naelektrisanja opadaće sa vremenom. Nije potpuno korektno opisivati kretanje čestice samo pomoću spoljašnjih sila koje deluju na nju. Korektnije uračunavanje energetskog balansa postiže se razmatranjem reakcije polja stvorenog naelektrisanjem na kretanje toga naelektrisanja. Obično se pretpostavlja da na kretanje naelektrisane čestice ne utiče zračenje koje ona emituje pa se u drugoj aproksimaciji uvodi kao mala popravka zakočna sila koja se određuje iz energetskog balansa.

Najprostiji model za svetlosni izvor je linearni harmonijski oscilator. Takav oscilator bi u toku beskonačno dugog vremena oscilovao sa određenom frekvencom ν_0 , ako bi zanemarili uzroke amortizacije oscilacija. Ako uzmemo u obzir gubitak energije oscilatora tokom oscilovanja usled dejstva zakočne sile, energija oscilatora usrednjena po periodu W , i amplituda oscilovanja E , smanjivaće se tokom vremena.

$$W = W_0 e^{-\gamma t}$$

$$E = E_0 e^{-i\nu_0 t} e^{-\gamma t/2}$$

Recipročna vrednost od γ je vreme života oscilatora, odnosno vreme za koje energija oscilatora opadne e puta. Takvo oscilovanje više nije monohromatsko. Ono se može razložiti u Furijeov red:

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} E(\nu) e^{-i\nu t} d\nu$$

$$E(\nu) = \frac{1}{2\pi} E_0 \int_0^{\infty} e^{-i(\nu-\nu_0)t} e^{-\gamma t/2} dt$$

$$E(\nu) = \frac{1}{2\pi} E_0 \frac{1}{i(\nu-\nu_0) + \gamma/2}$$

Raspodela intenziteta postaje:

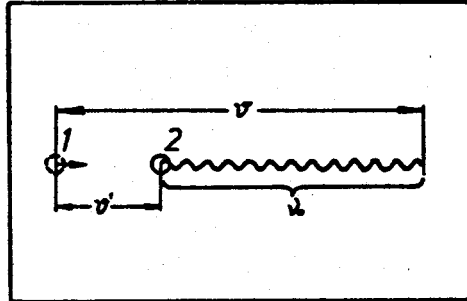
$$I(\nu) \approx |E(\nu)|^2 = I_0 \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\nu-\nu_0)^2 + \gamma^2/4}$$

odnosno, dobijena je spektralna linija Lorencovog oblika (sl. 1).

1.1.2 Doplerovo širenje

Neka se u elastičnoj sredini nalazi izvor oscilacija koji osciluje sa frekvencom ν_0 . Ako je on nepokretan u odnosu na prijemnik, ovaj će registrovati oscilacije iste frekvence ν_0 . U momentu kada izvor završi ν_0 -tu oscilaciju, "greben" prve oscilacije će proći put v , gde je v brzina širenja talasa u datoj sredini. Znači za 1 sec izvor će stvoriti ν_0 "grebena" i "dolja" koji će biti raspoređeni na dužini v . Ako se izvor kreće u odnosu na prijemnik brzinom v' , u trenutku kada izvor završi ν_0 -tu oscilaciju "greben" stvoren prvom oscilacijom biće na daljini $v - v'$ od izvora (sl. 2). Dakle ν_0 oscilacija će stati na dužinu $v - v'$. Talasna dužina koja odgovara ovakvim oscilacijama biće:

$$\lambda = \frac{v - v'}{\nu_0}$$



Sl. 2

- 1 Položaj izvora u momentu početka emisije
2 Položaj izvora posle λ_0 -te oscilacije

Ovo je Doplerov efekat. Ako se emiter kreće prema posmatraču, odnosno ima komponentu brzine u njegovom pravcu, zračenje koje posmatrač prima pome-reno je ka plavom delu spektra.

$$\frac{\omega' - \omega}{\omega} = \frac{v}{c}$$

1.1.3.1

ω je nepomerena kružna frekvencija, ω' pomena, v komponenta brzina u pravcu posmatrača. Kada se atom udaljava od posmatrača pomak je "crveni".

Ako imamo skup atoma koji se kreću u svim pravcima različitim brzinama, rezultujuća spektralna linija je proširena.

U slučaju termalnog kretanja verovatnoća da se komponenta brzine atoma nalazi u intervalu $(v, v + dv)$ data je Maksvelovom raspodelom:

$$f(v)dv = \sqrt{\frac{M}{2\pi kT}} \exp\left\{-\frac{Mv^2}{2kT}\right\} dv$$

1.1.3.2

M je masa emitujućeg atoma, T kinetička temperatura, a k je Bolcmanova konstanta.

$$k = 1.380 \cdot 10^{-16} \text{ erg} \cdot \text{step}^{-1}$$

Kombinujući (1.1.3.1) i (1.1.3.2) dobijamo profil linije proširene Doplerovim efektom.

$$\varphi_0(\omega') = \frac{2\sqrt{T}}{v\omega} \exp\left\{-\left(\frac{\omega' - \omega}{v\omega}\right)^2\right\}$$

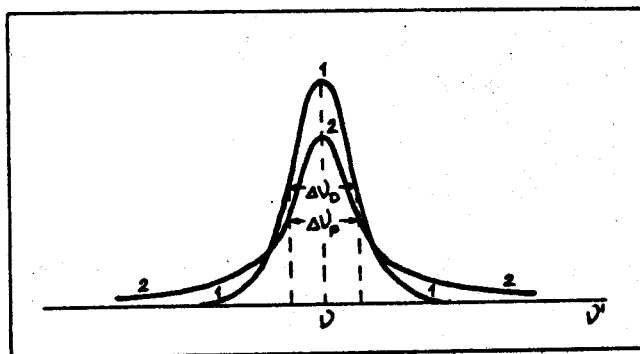
$$v^2 = \frac{2KT}{Mc^2}$$

Ovaj profil ima polupoluširinu:

$$\omega_D = v\omega\sqrt{\ln 2} \propto \sqrt{T}$$

Doplerovo širenje srazmerno je temperaturi u plazmi i to temperaturi emitera, jona ili neutrala.

Profili kod prirodnog i Doplerovog širenja razlikuju se međusobno. Kod prirodnog profila, na krilima linije nastaje blagi pad intenziteta. On se još naziva Lorencov ili disperzioni. Kod Doplerovog profila, koji je ustvari oblik Gausove raspodele, pad intenziteta na krilima je brži.



Sl. 3

1. Doplerov profil
2. Lorencov profil

U laboratorijskoj plazmi Doplerovo širenje se mora uzeti u obzir. Ako su Doplerov efekat koji stvara Gausov profil i efekti koji vode nastanku Lorencovog profila statistički nezavisni, rezultujući profil je konvolucija pomenutih profila:

$$\varphi_V(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_L(\omega - \omega') \varphi_D(\omega') d\omega'$$

1.1.3.3

On se naziva Voigt-ov profil.

1.1.3 Širenje linija pritiskom

Atom koji zrači uvek je okružen različitim česticama koje deluju na njega šireći emitovanu spektralnu liniju. Ovo širenje je srazmerno gustini perturbujućih čestica. Sile kojima deluju neutralni atomi na emitujući atom, jon ili molekul su kratkog dometa. To su Van der Vaalove sile. Sudari sa neutralnim česticama skraćuju vreme života emitera u pojedinim stanjima, ona se zato šire a samim tim širi se i emitovana spektralna linija. Ovakva vrsta širenja poznata je kao Van der Vaalovo širenje i dominira u plazmama veće gustine. Ako su perturbatori atomi iste vrste kao i emiter i ako početno ili krajnje stanje linije ima dozvoljeni prelaz u stanje koje odgovara početnom stanju perturbatora (obično osnovno stanje), može doći do rezonance između stanja emitera i perturbatora, tj. za takav prelaz sistem ne gubi energiju zračenjem. Pri istim uslovima posmatrana linija je šira. U intermedijarnom stanju atom koji emituje je u osnovnom stanju, a perturbator je u pobudjenom stanju koje odgovara početnom ili krajnjem stanju za datu liniju, tako da energija celog sistema ostaje nepromenjena. Širenje u ovakvim uslovima obično se naziva rezonantno širenje.

Naelektrisane čestice, elektroni i joni, deluju na emiter Kulonovim silama, koje su za razliku od Van der Vaalovih dugog dometa. Ove čestice deluju na emiter na celoj dužini slobodnog puta. Naelektrisane čestice obrazuju električno mikropolje, koje se menja u prostoru i vremenu. Kada ne bi bilo tih promena, pod uticajem usrednjenog električnog polja, spektralne linije bi se cepale usled Štarkovog efekta. Pošto se električno polje stalno menja, umesto cepanja javlja se širenje. Štarkovo širenje postaje važno na manjim gustinama nego Van der Vaalovo. Plazma u kojoj je Doplerovo širenje dominantno a prirodna širina je veća od širenja pritiskom, nalazi se naprimer u medjuzvezdanim oblastima sastavljenim uglavnom od neutralnog vodonika. Smatra se da je u ovim oblastima elektronska gustina $10^2 - 10^7 \text{ m}^{-3}$, a temperatura elektrona $20 - 100 \text{ }^\circ\text{K}$.

U daljem izlaganju zadržaćemo se na Štarkovom širenju spektralnih linija u plazmi. Postoji više monografija o ovom problemu [1 - 4] od kojih je najsveobuhvatniji teorijski prilaz dao Griem 1974. [4]. Kritički prikaz svih dosadašnjih eksperimentalnih podataka dali su Konjević N. i Roberts J. R. 1976. [5a] za neutrone, Konjević N. i Wiese W. L. 1976 [5b] za jone. Bibliografiju o problematici širenja spektralnih linija priredili su Fuhr i dr. 1972, 1974. [6, 7].

1.1.3.1 Dve granične aproksimacije

Na oblik spektralne linije utiče veliki broj parametara koji karakterišu stanja i međusobne odnose čestice koja zrači i okolnih čestica. U raznim delovima linije pojedini parametri imaju različiti značaj. Izračunavanja proširenih profila vrše se u okviru dva različita modela.

Širenje u oblastima bliskim centru linije, objasnili su Michelson [8] i Lorentz [9] početkom stoleća. Širenje u ovoj oblasti nastaje usled prekida procesa zračenja sudarom sa perturbom. Sudarne teorije [10 - 15] koje važe u ovoj oblasti predpostavljaju da su u posmatranom vremenskom intervalu elektronski sudari potpuni i da vreme trajanja sudara teži nuli.

Krila linije se opisuju pomoću kvazistatičkih teorija [16 - 19]. Predpostavlja se da se perturbori kreću dovoljno sporo da se može smatrati da atom emituje ili apsorbuje sa frekvencijom koja zavisi samo od pozicije perturbora. Sudar traje veoma dugo. Oblik linije se dobija pomoću pogodnog usrednjavanja preko pozicija perturbora. Perturbori su nepokretni za svaku konfiguraciju u usrednjavajućem procesu.

Oblast između sudarnog i kvazistatičkog dela linije, u kojoj ove teorije ne važe, takodje je podvrgnuta detaljnom ispitivanju. Tako je nastao niz teorija koje važe u ovoj oblasti i njihova oblast važenja se delimično poklapa sa sudarnom i kvazistatičkom oblašću. Većina ovih teorija ima formalni karakter i cilj im je pre da osvetle neke teorijske aspekte nego da služe praktičnom izračunavanju. Takve su teorije Ohno-a [20], Ross-a [21], Bezzrides-a [22], Mead-a [23] i drugih.

U zadnje vreme učinjeno je više pokušaja da se stvori jedna opšta unificirana teorija, koja bi obuhvatala kako sudarnu tako i kvazistatičku oblast i dala gladak prelaz između njih [24 - 26].

1.1.4 Semiklasična aproksimacija

Proučavanje širenja spektralnih linija u plazmi je u osnovi proučavanje spektralne raspodele zračenja, koje posmatrani gas emituje ili apsorbuje. Broj atoma koji emituju obično je mali deo od celokupnog broja čestica koje čine plazmu. Srednje rastojanje između takvih atoma je obično dovoljno veliko da se interakcija između njih može zanemariti. Podelićemo plazmu u veliki broj ćelija od kojih svaka sadrži jedan emiter i veliki broj perturbujućih čestica. Predpostavićemo da su perturbujuće čestice koje se nalaze na granici susednih ćelija efektivno na beskonačnom rastojanju u odnosu na emitere, tako da je njihova interakcija sa emiterom zanemarljivo mala. Zanemarićemo i interakciju između ovakvih ćelija.

Predstavićemo celu plazmu kao skup neinteragujućih ćelija ovakvog tipa.

Predpostavićemo da je unutar takve ćelije emiter nepokretan dok se oko njega kreću perturberi. To je naročito dobra aproksimacija kada su perturberi elektroni koji su mnogo lakši od emitera.

Primenićemo semiklasičnu aproksimaciju ili aproksimaciju klasičnih putanja. U ovoj aproksimaciji se uzima da se perturberi kreću kao klasične čestice. Za njihove putanje uzimaju se prave linije ako je emiter neutralni atom, a hiperbole ako je u pitanju jon. Uticaj perturbera na liniju se računa pomoću Kvantne mehanike. Drugim rečima posmatraćemo perturbere kao talasne pakete, dovoljno malih dimenzija da bi se njihovo kretanje razmatralo kao kretanje klasičnih čestica.

Smatraćemo prema Fano-u [27] da se u posmatranoj ćeliji nalaze dva slabo povezana podsistema. Podsystem a koji čini emiter i podsystem p koji čine perturberi. Ceo sistem se može kvantno mehanički opisati pomoću

Hamiltonijana:

$$H = H_a + H_p + V$$

Hamiltonijani H_a i H_p opisuju emitterski i perturbirski podsistem a V predstavlja interakciju između njih. Predpostavićemo da nema međusobne interakcije perturbirera što nam omogućava da njihove putanje razmatramo kao prave za neutralni emiter odnosno hiperbole za jon. Zanimarićemo povratnu reakciju emitera na perturbirer, to jest smatraćemo da emiter može samo da primi energiju od perturbirera a ne može da mu je preda. Stanje emitera ne zavisi eksplicitno od stanja perturbirera. Predpostavićemo da ni stanje perturbirera ne zavisi eksplicitno od stanja emitera. Matematički je ovu pretpostavku izrazio Fano [27] preko matrice gustine:

$$\rho = \rho^{(a)} \rho^{(p)}$$

gde $\rho^{(a)}$ i $\rho^{(p)}$ zavise samo od atomskih odnosno perturbirskih promenljivih. Predpostavićemo da su u prvoj aproksimaciji podsistemi u termodinamičkoj ravnoteži.

$$\rho^{(a)} = \rho^{(a)}(H_a)$$

$$\rho^{(p)} = \rho^{(p)}(H_p)$$

Za kanonski ansambl:

$$\rho \propto e^{-H/kT}$$

znači gornja pretpostavka zahteva da je:

$$\rho \propto e^{-\frac{H_a + H_p}{kT}}$$

$$e^{-\frac{V}{kT}} \approx 1$$

1.1.5.1

(U relaksacionim teorijama širenja spektralnih linija [29] emitterski podsistem je početnom ekscitacijom izveden iz ravnoteže i asimptotski teži da uspostavi ravnotežu sa toplim kupatilom sastavljenim od perturbirera.)

Funkcije stanja takvog sistema moraju biti rešenja Šredingerove jednačine:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{R}, \vec{x}, t) = (H_a + H_p + V) \Psi(\vec{R}, \vec{x}, t)$$

1.1.5.2

\vec{x} je 3N-vektor ($\vec{x}_1 \dots \vec{x}_N$) koji označava položaje N perturbora a \vec{R} označava unutrašnje koordinate emitera. Ako se radi o atomu to su koordinate optičkog elektrona. Postoji mnogo mogućih konfiguracija perturbora koje bi zadovoljavale naše uslove. Označićemo svaku od ovih verovatnih konfiguracija indeksom (i). Svaku od pomenutih ćelija smatraćemo članom ansambla koji daje razna moguća stanja sistema a svaka $\psi^{(i)}$ će opisivati jedno moguće stanje u jednoj ćeliji, tako da se (i) može upotrebiti za označavanje ćelije odnosno člana ansambla.

Označićemo funkciju stanja perturborskog podsistema sa $\psi^{(i)}(\vec{x}, t)$. Ona mora zadovoljavati Šredingerovu jednačinu oblika:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(i)}(\vec{x}, t) = H_p \psi^{(i)}(\vec{x}, t) \quad 1.1.5.3$$

Za izolovani gas, energija će biti konstanta kretanja ako je svako $\psi^{(i)}$ sopstvena funkcija operatora H_p [30]. Definisaćemo kompletni ortonormirani skup funkcija stanja $\{f_k(\vec{x})\}_p$ operatora H_p

$$H_p f_k(\vec{x}) = E_p^{(k)} f_k(\vec{x})$$

$$\int f_k^*(\vec{x}) f_j(\vec{x}) d\vec{x} = \delta_{kj}$$

Pomoću (1.1.5.3) dobija se:

$$\psi^{(i)}(\vec{x}, t) = f_k(\vec{x}) e^{-it E_p^{(k)}/\hbar}$$

Razvićemo sada talasne funkcije stanja $\psi(\vec{R}, \vec{x}, t)$ preko kompletnog seta bazičnih funkcija sistema. Takav set čine funkcije $f_k(\vec{x})$ za perturborski podsistem. Označićemo sa $g_j(\vec{R})$ kompletan set bazičnih funkcija za emiterski podsistem.

$$\psi(\vec{R}, \vec{x}, t) = \sum_{jk} a_{jk}(t) g_j(\vec{R}) f_k(\vec{x}) \quad 1.1.5.4$$

a $a_{jk}(t)$ se mogu odrediti uz pomoć (1.1.5.2).

Prepisaćemo (1.1.5.4) u obliku:

$$\Psi(\vec{R}, \vec{x}, t) = \sum_{\kappa} \chi^{(\kappa)}(\vec{R}, t) \varphi^{(\kappa)}(\vec{x}, t)$$

Zamenom (1.1.5.4) u (1.1.5.2) dobijamo za $\chi^{(\kappa)}$ sistem spregnutih jednačina:

$$i \hbar \frac{\partial \chi^{(\kappa)}}{\partial t} = [H_0 + V^{(\kappa)}(t)] \chi^{(\kappa)} + \sum_{j \neq \kappa} V^{(\kappa, j)}(t) \chi^{(j)} \quad 1.1.5.5$$

$$V^{(\kappa)}(t) = \langle \varphi^{(\kappa)}; t | V | \varphi^{(\kappa)}; t \rangle$$

$$V^{(i, \kappa)}(t) = \langle \varphi^{(i)}; t | V | \varphi^{(\kappa)}; t \rangle$$

Pošto na stanje perturbatora ne utiče interakcija V , jer smo zanemarili uticaj atoma na perturbator, možemo zanemariti drugi član s desne strane jednačine (1.1.5.5). Konačno, aproksimativna funkcija stanja za posmatrani sistem je:

$$\Psi^{(i)}(\vec{R}, \vec{x}, t) = \chi^{(i)}(\vec{R}, t) \varphi^{(i)}(\vec{x}, t) \quad 1.1.5.6$$

$\chi^{(i)}$ zadovoljava Šredingerovu jednačinu:

$$i \hbar \frac{\partial \chi^{(i)}}{\partial t} = [H_0 + V^{(i)}(t)] \chi^{(i)}$$

Predpostavićemo da se svaka talasna funkcija $\varphi^{(i)}(\vec{x}, t)$ može predstaviti kao proizvod funkcija stanja $\varphi_j^{(i)}(\vec{x}_j, t)$ talasnih paketa, koji su dobro lokalizovani u toku vremena bitnog za proces širenja linija:

$$\varphi^{(i)}(\vec{x}, t) = \prod_j \varphi_j^{(i)}(\vec{x}_j, t)$$

Sada ćemo, sledeći klasičnu sliku, predpostaviti da se uticaj perturbatora koji se implicitno daje preko $V^{(i)}(t)$, može predstaviti dajući koordinate položaja maksimuma raspodele intenziteta u paketima $x_j^{(i)}$ i njihove brzine $v_j^{(i)}$, odnosno opisujući talasne pakete $\varphi_j^{(i)}$ kao klasične čestice pomoću njihovih položaja:

$$\vec{x}^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)} \dots x_N^{(i)})$$

i brzina:

$$\vec{v}^{(i)} = (v_1^{(i)}, v_2^{(i)} \dots v_N^{(i)})$$

Sada možemo zameniti $V^{(i)}$ (1.1.5.5) koji daje uticaj perturbbera na emiter, klasičnim vremenski promenljivim potencijalom:

$$V^{(i)}(\vec{r}, \vec{v}^{(i)}, t) = \int \varphi^{(i)*}(\vec{r}, t) V \varphi^{(i)}(\vec{r}, t) d\vec{r}$$

Dobili smo sistem u kome klasični perturbber stvara vremenski zavisno polje koje deluje na kvantnomehanički atom.

Ako posmatramo izolovani atom koji zrači pod dejstvom okolnih perturbbera, kvant svetlosti energije

$$\hbar \omega_{if} = E_i - E_f \quad 1.1.5.7$$

može biti emitovan sa amplitudom verovatnoće odredjenom dipolnim matričnim elementom d_{α} , koji povezuje početno i i krajnje f stanje. Ako se uzme da atom predstavlja veliki kvantno mehanički objekat sa znatnim brojem energetskih nivoa i stacionarnih stanja, verovatnoća usrednjena po ansamblu početnih stanja i sumirana preko konačnih stanja i koordinata svih perturbbera α , daje funkciju oblika linije $L(\omega)$.

$$L(\omega) = \sum_{i,f,\alpha} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f | d_{\alpha} | i \rangle|^2 P_i \quad 1.1.5.8$$

Ovde je P_i verovatnoća da se sistem nadje u početnom stanju i . δ funkcija u gornjem izrazu, aproksimativno je uzeta kao oblik prirodno proširene linije. U teorijama relaksacionog tipa [29], kao oblik prirodno proširene linije se uzima Lorencov profil veoma male širine.

Sistem se sastoji od jednog atoma koji emituje ili apsorbuje zračenje pod uticajem svih perturbbera. Furijeov transform $C(t)$ oblika linije $L(\omega)$ ili autokorelaciona funkcija, često je pogodniji za teorijsku analizu.

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} L(\omega) d\omega = \sum_{i,f,\alpha} e^{-i\omega t} |\langle f | d_{\alpha} | i \rangle|^2 P_i \quad 1.1.5.9$$

Pošto $C(t)$ zadovoljava relaciju:

$$C(-t) = [C(t)]^*$$

traže se samo vrednosti za $t \geq 0$. Sem toga može se pisati:

$$L(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} C(t) dt \quad 1.1.5.10$$

Vremenska zavisnost proizvoljnog operatora, recimo \tilde{A} , može se opisati pomoću interakcione reprezentacije.

$$\tilde{A}(t) = e^{+\frac{iH}{\hbar}t} \tilde{A}(0) e^{-\frac{iH}{\hbar}t} = U^\dagger(t) \tilde{A}(0) U(t) \quad 1.1.5.11$$

$U(t)$ je ermitski operator vremenske evolucije.

Iz (1.1.5.7, 1.1.5.8, 1.1.5.11) sledi:

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_{i,j,\alpha} \langle i | d_\alpha | j \rangle e^{\frac{i}{\hbar} E_j t} \langle j | d_\alpha | i \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} E_i t} \rho_{ij} = \\ &= \sum_{\alpha} \text{Tr} [d_\alpha U^\dagger(t) d_\alpha U(t) \rho] = \\ &= \sum_{\alpha} \text{Tr} [d_\alpha(0) d_\alpha(t) \rho(0)]. \end{aligned} \quad 1.1.5.12$$

Tr je oznaka za trag matrice a ρ je statistički operator.

1.2.1 Uslovi važenja semiklasične aproksimacije

Semiklasičan prilaz teoriji širenja spektralnih linija u plazmi, sadrži u sebi više različitih aproksimacija, koje se mogu podeliti na tri grupe. Pomoću skupa aproksimacija vrši se zamena posmatrane plazme sistemom neinteragujućih čelija, uprošćava se matrica gustine i uvodi se klasični tretman perturbberskih talasnih funkcija, odnosno semiklasična aproksimacija u užem smislu.

Prvom od ovih pretpostavki zanemarene su sve direktne i indirektno interakcije između emitera. Pod indirektnim interakcijama se podrazumeva uticaj emitera na perturbirer koji istovremeno ili kasnije deluje na drugi emiter. Srednje rastojanje između emitera obično je dovoljno veliko da opravda gornju pretpostavku.

U Hamiltonijanu emitera H_a , zanemarili smo deo koji opisuje translatorno kretanje atoma. Samim tim, zanemareno je Doplerovo širenje koje se računa posebno i aproksimativno uvodi pomoću konvolucionog integrala (1.1.3.3). Ovaj postupak je opravdan ako se u toku vremena koje je bitno za proces širenja, putanja emitera ne izmeni znatno usled sudarnih procesa.

Skup aproksimacija vezanih za matricu gustine, koji je upotrebljen u prethodnom odeljku, poznat je kao aproksimacija "slabe sprege". U ovoj aproksimaciji, emitterski i perturbirerski podsistem su statistički nezavisni i zanemarena je povratna reakcija. U ovoj aproksimaciji zamenili smo jedinicom član $\exp(-V/kT)$ u Bolcmanovom faktoru izraza za matricu gustine. Da bi aproksimacija važila treba da je zadovoljen uslov:

$$V \ll kT$$

Ako su temperature emitera i perturbirera različite, pri čemu su emitterski i perturbirerski podsistem u ravnoteži, aproksimacija slabe sprege će važiti ako u gornji uslov stavimo temperaturu perturbirerskog podsistema [30].

Ako perturbaciju $V \gtrsim kT$, izaziva statički perturbirer, tj. onaj koji se ne kreće primetno u toku vremena bitnog za širenje, a takvi su joni, ona će izazvati cepanje nivoa usled Štarkovog efekta. Pošto je tada:

$$\hbar \Delta\omega > kT$$

greška usled primene ove aproksimacije će uticati samo na daleko krilo linije.

Ako perturbaciju $V \gtrsim kT$ izaziva dinamički perturbirer, elektron na primer, posmatračemo autokorelacionu funkciju $C(t)$ kao sumu članova oblika $d(0) d(t)$ sa raznim statističkim težinama. Definisaćemo sudarnu frekvencu ν_{kT} za sudare za koje je $V \gtrsim kT$. Verovatnoća da se takav sudar desi u vre-

menskom intervalu $[0, \tau]$ je ν_{kT} . Broj članova $d(0)$ $d(t)$ sa netačnim statističkim težinama biće $\nu_{kT} \cdot \tau N_T$, gde je N ukupan broj članova. Broj članova sa tačnom statističkom težinom biće $(1 - \nu_{kT} \tau) N_T$ a greška usled aproksimacije slabe sprege biće reda:

$$\frac{\nu_{kT} \tau}{1 - \nu_{kT} \tau}$$

Pošto je trajanje τ sudara za koji je $V \geq kT$, mnogo manje od vremena između takvih sudara, možemo staviti:

$$1 - \nu_{kT} \tau \approx 1$$

Detaljna analiza [30] daje kao najveće moguće vrednosti za frekvencu ν_{kT} i trajanje τ sudara za koja je $V \geq kT$, $\Delta\omega$ i \hbar/kT respektivno. Maksimalna je greška reda $\hbar \Delta\omega/kT$. Vidmo da je aproksimacija slabe sprege opravdana i u slučaju dinamičkih i u slučaju statičkih perturbacija kada je:

$$\hbar \Delta\omega \ll kT_p$$

1. 2. 1. 1

Treba imati u vidu da je ovo samo procena gornje granice greške i da je u većini slučajeva stvarna greška mnogo manja.

Semiklasičan prilaz perturbiranim talasnim funkcijama omogućava upotrebu klasične potencijalne funkcije $V^{(i)}(\vec{R}, \vec{x}^{(i)}, \vec{v}^{(i)}, t)$ u operatoru vremenskog razvoja. Pretpostavka o klasičnom tretmanu talasnih paketa uvodi se da bi se dobila relacija:

$$V(\vec{R}, \vec{x}) \psi^{(i)}(\vec{x}, t) = V^{(i)}(\vec{R}, \vec{x}^{(i)}, \vec{v}^{(i)}, t) \psi^{(i)}(\vec{x}, t)$$

1. 2. 1. 2

$V^{(i)}$ je funkcija klasičnih koordinata $\vec{x}^{(i)}$ i brzina $\vec{v}^{(i)}$. Messiah [31] je pokazao da ako perturbacije možemo razmatrati kao talasne pakete i ako se duž talasnog paketa potencijalno polje ne menja znatno u odnosu na kinetičku energiju perturbacija, $V(\vec{R}, \vec{x})$ se može predstaviti kao zbir binarnih interakcija $V(\vec{R}, \vec{x}_j)$ između emitera i svakog pojedinog perturbatora. Kada je:

$$V(\vec{R}, \vec{x}_j) \neq 0$$

možemo umesto (1.2.1.2) razmatrati:

$$V(\vec{R}, \vec{x}_j) \varphi^{(i)}(\vec{x}_j, t) = V^{(i)}(\vec{R}, \vec{x}_j^{(i)}, \vec{v}_j^{(i)}, t) \varphi^{(i)}(\vec{x}_j, t) \quad 1.2.1.3$$

Ako sa ΔV označimo promenu potencijala a sa p momenat perturbere,

$$p = \sqrt{2m(E-V)} \quad 1.2.1.4$$

gornji zahtev, da se potencijal duž talasnog paketa ne menja znatno u odnosu na kinetičku energiju perturbere, postaje:

$$\Delta V \ll p^2/2m \quad 1.2.1.5$$

Iz (1.2.1.4) sledi da je

$$\Delta p = m \Delta V / p$$

pa uslov (1.2.1.5) postaje:

$$\Delta p \ll \bar{p} \quad 1.2.1.6$$

\bar{p} je srednja vrednost momenta perturbere.

Da bi jednačina (1.2.1.3) važila, mora se pretpostaviti [31] da se talasni paketi pomoću kojih opisujemo perturbere ne preklapaju sa talasnim funkcijama drugih čestica. Predstavićemo one perturbere koji ne interaguju sa emiterom, kao talasne pakete u kojima funkcija raspodele intenziteta ima Gausov oblik sa poluširinom Δx_g , i neodređenost momenta zadovoljava uslov (1.2.1.6). Da se talasni paketi perturbere ne bi prekrivali Δx_g mora biti mnogo manje od srednjeg rastojanja izmedju perturebera $n^{-1/3}$, gde je n gustina perturbere. Drugim rečima, talasni paket treba da je mali u odnosu na rastojanje izmedju perturbere da bi mogao da se ponaša kao klasična čestica. Koristeći

$$\Delta x_g \Delta p_g \simeq \hbar \quad 1.2.1.7$$

možu se gornji uslov i uslov (1. 2. 1. 6) dati zajedno u obliku:

$$\frac{\hbar}{m} \ll \Delta x_1 \ll \hbar^{-1/3} \quad 1.2.1.8$$

Analizom uticaja perturbacionog potencijala na autokorelacionu funkciju [30], može se pokazati da do preklapanja talasnih funkcija perturbatora i emitera dolazi samo prilikom jakih sudara. To su sudari koji uništavaju korelaciju između $d(0)$ i $d(t)$ i svode autokorelacionu funkciju $C(t)$ na nulu. Za ovakve sudare ne možemo izvršiti razmatranje pomoću talasnih paketa ekvivalentnim klasičnim česticama.

Da bi izraz (1. 2. 1. 3) važio mora se takodje postaviti zahtev za ograničavanje širenja perturbatorskih talasnih paketa za vreme sudara, tj. kada je $V(\vec{R}, \vec{x}_j) \neq 0$. Ako sa x označimo efektivnu širinu talasnog paketa a sa Δx širenje u toku sudara, mora biti zadovoljen uslov:

$$\Delta x \ll x \quad 1.2.1.9$$

Koristeći:

$$p^2/2m = m v_0^2/2 \quad 1.2.1.10$$

$$\tau = \rho_0/v_0 \quad 1.2.1.11$$

$$l = m \rho_0 v_0/\hbar \quad 1.2.1.12$$

(l je ugaoni moment perturbatora a ρ_0 i v_0 su minimalno rastojanje između emitera i perturbatora i brzina u trenutku kada se on nalazi na tom rastojanju). kao i jedinačine (1. 2. 1. 6, 1. 2. 1. 7, 1. 2. 1. 9) dobijamo:

$$m \rho_0 v_0 > \hbar \quad 1.2.1.13$$

Ovde smo upotrebili nejednačinu:

$$\Delta x \ll x < \rho_0$$

Ako bi bilo $x \gg \rho_0$ talasne funkcije emitera i perturbatora bi se prekrivale, sudar bi bio jak, i ceo postupak bi bio neprimenljiv.

Koristeći (1.2.1.12, 1.2.1.13) dobijamo uslov:

$$\ell > 1$$

1.2.1.14

Pošto je za električni dipolni prelaz $\Delta \ell = \pm 1$, iz gornjeg uslova sledi da je $\Delta \ell < \ell$ tj. da se ugaoni moment perturbatora održava za vreme sudara, kao što mora da bude ako perturbatore opisujemo pomoću klasične mehanike.

1.3 Sudarna aproksimacija

Efekti sudara se mogu grubo podeliti na adijabatske i neadijabatske pri čemu pojedini sudar može prouzrokovati oba efekta. Adijabatski sudar će prosto pomeriti energetske nivoe emitera. Takav sudar će prekinuti korelaciju između $d(0)$ i $d(t)$ i redukovati na nulu autokorelacionu funkciju $C(t)$. Medjutim, ako blizu posmatranog energetskeg nivoa postoji energetski nivo (za koji je kružna frekvencija za prelaz na osnovni nivo ω) na koji je moguć prelaz, možemo smatrati da neadijabatski sudar indukuje prelaz bez zračenja na taj nivo i nazad na početni nivo ne svodeći potpuno na nulu verovatnoću prelaza blizu ω [30]. Ako atom posmatramo kao klasični oscilator koji ima više bliskih modova oscilovanja, neadijabatski sudar pobudjuje oscilator u drugi mod i vraća ga nazad ne uništavajući potpuno faznu koherencu talasnog paketa.

Posmatrajmo na primer klasični oscilator koji osciluje u modu ω_0 i nalazi se u fazi $\omega_0 t$ u nekom momentu t . Ako je takav oscilator bio pobudjen neadijabatskim sudarom u mod ω_1 u nekom momentu t i posle $\Delta t = t_0$ se vratio nazad u mod ω_0 , rezultujući fazni pomeraj je:

$$\eta \approx [\omega_0(t+t_0) - (\omega_0 t + \omega_1 t_0)] = (\omega_0 - \omega_1)t_0$$

Napomenimo da se sudar koji istovremeno uzrokuje i adijabatske i neadijabatske efekte, ne može na odgovarajući način tretirati u klasičnoj teoriji.

U daljem izlaganju ćemo zanemariti detalje vremenske zavisnosti perturbovane talasne funkcije emitera i posmatraćemo samo njene promene po završenom sudaru. Zanemarićemo stvarno trajanje sudara i smatrati da su oni trenutni. To je sudarna aproksimacija i za širenje linije sudarima sa elektroni- ma ona se primenjuje za teorijsko opisivanje centralnih delova proširene linije.

Napisaćemo autokorelacionu funkciju $C(t)$ u nešto izmenjenom obliku pomoću stacionarnih stanja i energetskih nivoa kompletnog sistema koji se sastoji od emitera i perturbera. Pošto je ρ dijagonalno za stacionarna stanja:

$$C(t) = \sum_{i, f, i'} \langle i | d_{\alpha} | f \rangle \langle f | U^+(t) | f' \rangle \langle f' | d_{\alpha} | i' \rangle \langle i | U(t) | i' \rangle \langle i' | \rho | i \rangle \quad 1.3.1$$

Uvešćemo sem nivoa između kojih se vrši prelaz i i f i medjustanja i' , f' na koja je moguća ekscitacija i deekscitacija.

Predpostavićemo da operator gustine ostaje dijagonalan u ovoj reprezentaciji i da su sva početna stanja emitera koja doprinose liniji slična. Statistički operator se tada može izostaviti ili zameniti usrednjavanjem preko neperturbovanih stanja perturbera.

Zanemarićemo povratnu reakciju emitera na perturbere, predpostavivši da dipolni operator deluje samo na emiter. Sada se autokorelaciona funkcija može napisati u obliku:

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum \left[\langle i | d_{\alpha} | f \rangle \langle f | U^+(t) | f' \rangle \langle f' | d_{\alpha} | i' \rangle \langle i' | U(t) | i \rangle \right]_{av} = \\ &= \sum \langle i | d_{\alpha} | f \rangle \langle f' | d_{\alpha} | i' \rangle \left[\langle f | U^+(t) | f' \rangle \langle i' | U(t) | i \rangle \right]_{av} = \quad 1.3.2 \\ &= \sum \langle\langle i | f^* | \Delta_d | i' f'^* \rangle\rangle \langle\langle i' f'^* | \Theta_{av}(t) | i f^* \rangle\rangle = \\ &= \text{Tr} [\Delta_d \Theta_{av}(t)] \end{aligned}$$

av označava usrednjavanje preko stanja perturbera. Δ_d i Θ su operatori u takozvanom linijskom prostoru u kome je emiterska talasna funkcija jednog od gornjih stanja linije asocirana u direktnom proizvodu sa kompleksno konjugo-

vanom talasnom funkcijom jednog od donjih stanja.

Ako se perturbacija donjeg energetskog nivoa može zanemariti možemo staviti:

$$\begin{aligned} \langle f | u^+(t, 0) | f' \rangle &= \exp \left[\frac{i E_f t}{\hbar} \right] \int f f' \\ C(t) &= \sum \langle i | d_{\alpha} | f \rangle \langle f | d_{\alpha} | i' \rangle \langle i' | u_{\alpha}(t, 0) | i \rangle = \\ &= T_{\tau} D U_{\alpha}(t, 0) \end{aligned} \quad 1.3.3$$

Formula je analogna izrazu (1.3.2) samo što sada trag uključuje samo gornja stanja i, i' .

Napisaćemo operator vremenske evolucije za interval vremena $(0, t)$ u interakcionoj reprezentaciji.

$$S(t, 0) = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t H_I dt \right] u(t, 0)$$

Ovde je H neperturbovani Hamiltonijan emitera. Naći ćemo njegovu usrednjenu vremensku zavisnost:

$$\begin{aligned} \Delta S_{\alpha\nu}(t, 0) &= S_{\alpha\nu}(t + \Delta t, t) - S_{\alpha\nu}(t, 0) = \\ &= \left\{ [S(t + \Delta t, t) - 1] S(t, 0) \right\}_{\alpha\nu} \end{aligned} \quad 1.3.4$$

Uzećemo da je srednji matični element prvog člana u velikim zagradama mali i primenićemo sudarnu aproksimaciju u kojoj su dva člana u velikim zagradama statistički nezavisna. Na prvi član ćemo primeniti perturbacioni razvoj.

$$S(t + \Delta t, t) - 1 = \frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dx S'(x) + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_t^{t+\Delta t} dx \int_t^{t+\Delta t} dy S'(x) S'(y) + \dots \quad 1.3.5$$

Ovim razvojem ustvari dobijamo iterativno rešenje vremenski zavisne Šredingerove jednačine u interakcionoj reprezentaciji.

$$i\hbar \frac{dS(t, 0)}{dt} = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} V e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} = \tilde{V}(t) S(t, 0) \quad 1.3.6$$

V je Hamiltonijan interakcije. Predpostavili smo da su perturbatori statistički nezavisni tako da je dovoljno da se izračuna $[S(t+\Delta t)-1]$ za jedan perturbator, pa da se rezultat pomnoži sa ukupnim brojem perturbatora. Pošto je u sudarnoj aproksimaciji trajanje sudara mnogo manje od Δt možemo pisati:

$$[S(t+\Delta t, t)-1]_{av} \approx \sum_j f_j \Delta t \exp\left(\frac{iHt}{\hbar}\right) \left[\frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} dx \tilde{V}_j(x) + \right. \\ \left. + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_t^{t+\Delta t} dx \int_t^{t+\Delta t} dy \tilde{V}_j(x) \tilde{V}_j(y) + \dots \right] \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \quad 1.3.7$$

Sumiranje u gornjem izrazu vrši se po raznim tipovima sudara koji se dešavaju sa učestanošću f_j .

Pošto je srednje vreme sudara mnogo manje od Δt , uključićemo u račun sve sudare za koje trenutak njihovog najvećeg približavanja atomu t_0 pada u interval vremena $(t, t + \Delta t)$. Ostale sudare ćemo zanemariti. Za sudar koji je uključen možemo pisati:

$$S(t + \Delta t, t) \approx S(+\infty, -\infty) = e^{\frac{iHt_0}{\hbar}} S e^{-\frac{iHt_0}{\hbar}}$$

a to je S matrica iz teorije rasejanja [31] a razvoj analogan razvoju (1.3.7), njen perturbacioni razvoj.

$$[S(t+\Delta t, t)-1]_{av} \approx e^{\frac{iHt_0}{\hbar}} \sum_j f_j (S-1) e^{-\frac{iHt_0}{\hbar}} \Delta t = \\ = e^{\frac{iHt_0}{\hbar}} \Phi e^{-\frac{iHt_0}{\hbar}} \Delta t = \\ = \frac{1}{i\hbar} e^{\frac{iHt_0}{\hbar}} \mathcal{K} e^{-\frac{iHt_0}{\hbar}} \Delta t \quad 1.3.8$$

Φ je operator sudarnog širenja koji su uveli Kolb i Griem [32] a \mathcal{K} Baranger-ov Hamiltonijan efektivne perturbacije [10-12].

Ako se potsetimo jednačine (1.3.3) i (1.3.7):

$$\Delta S_{av}(t, 0) = \left\{ [S(t+\Delta t, t)-1] \right\}_{av} S_{av}(t, 0) \approx \quad 1.3.9$$

$$\approx \frac{1}{i\hbar} e^{\frac{iHt}{\hbar}} \mathcal{K} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \Delta t S_{av}(t,0)$$

$$i\hbar \frac{\Delta S_{av}(t,0)}{\Delta t} \approx e^{\frac{iHt}{\hbar}} \mathcal{K} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} S_{av}(t,0) \quad 1.3.10$$

$$i\hbar \frac{\Delta U_{av}(t,0)}{\Delta t} \approx (H + \mathcal{K}) U_{av}(t,0) \quad 1.3.11$$

Izraz (1.3.10) je Šredingerova jednačina u Hajzenbergovoj reprezentaciji a (1.3.11) u Šredingerovoj reprezentaciji. Vidimo da smo u stvari perturbacionim razvitkom rešili vremenski zavisnu Šredingerovu jednačinu pri čemu je rešenje:

$$U_{av}(t,0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(H + \mathcal{K})t\right] \quad 1.3.12$$

odnosno, širenje linija u sudarnoj aproksimaciji može se opisati dodavanjem konstantnog Hamiltonijana neperturbovanom Hamiltonijanu emitera.

Ako izvršimo generalizaciju i na donji nivo:

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= i\hbar \phi = -i\hbar \sum_j f_j (1 - S_{ij} S_{ij}^*) \\ &= -i\hbar \sum_j f_j (T_{ij} + T_{ij}^* - T_{ij} T_{ij}^*) \end{aligned} \quad 1.3.13$$

U drugom redu izraza (1.3.13) uvedena je matrica prelaza T.

$$T_{ij} = 1 - S_{ij} \quad 1.3.14$$

Dobijeno rešenje (1.3.12) vremenski zavisne Šredingerove jednačine (1.3.11) stavićemo u izraz (1.3.3) za autokorelacionu funkciju a ovaj izraz u formulu za oblik linije (1.1.5.10). Ako uključimo širenje donjeg nivoa, postupak je isti samo je sada:

$$\begin{aligned} H &= H_i - H_f^* \\ L(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} \text{Tr} \left\{ \Delta_d \left[i\omega - (H_i - H_f + \mathcal{K}) \right]^{-1} \right\} = -\frac{1}{\pi} \text{Re} \text{Tr} \left\{ \Delta_d \left[i\omega - \frac{i}{\hbar}(H_i - H_f) + \phi \right]^{-1} \right\} \end{aligned} \quad 1.3.15$$

Kada su \mathcal{K} ili Φ dijagonalne matrice u linijskom prostoru, oblik linije je Lorencov. Polupoluširina w i pomeraj d su:

$$w = -\frac{1}{\hbar} \text{Im} \langle i\psi^* | \mathcal{K} | i\psi^* \rangle = -R_e \langle i\psi^* | \Phi | i\psi^* \rangle \quad 1.3.16$$

$$d = \frac{1}{\hbar} R_e \langle i\psi^* | \mathcal{K} | i\psi^* \rangle = -\text{Im} \langle i\psi^* | \Phi | i\psi^* \rangle \quad 1.3.17$$

1.3.1 Uslovi važenja sudarne aproksimacije

Iz autokorelacione funkcije $C(t)$ možemo izdvojiti deo koji odgovara neperturbovanoj frekvenci ω_0 i pisati [29]:

$$C(t) = \exp(-i\omega_0 t) C'(t)$$

Koristeći (1.1.5.10) dobija se:

$$L(\omega) \propto \int_0^\infty e^{it\Delta\omega} C'(t) dt \quad 1.3.1.1$$

$$\Delta\omega = \omega - \omega_0$$

Za $t > 1/\Delta\omega$, $\exp(it\Delta\omega)$ brzo osciluje i intenzitet u tački $\Delta\omega$ je određen delom $C'(t)$ za koji je:

$$0 \leq t \leq 1/\Delta\omega \quad 1.3.1.2$$

zato se $1/\Delta\omega$ često naziva, vreme bitno za procenu intenziteta u tački $\Delta\omega$. Ako je trajanje sudara τ mnogo duže od ovog vremena, odnosno:

$$\tau \gg \frac{1}{\Delta\omega} \quad 1.3.1.3$$

oblik linije (1.3.1.1) određen je delom $C'(t)$ koji odgovara vrlo malom delu intervala za koji traje sudar, kada je zadovoljen uslov (1.3.1.2). Opravdano je zanemariti kretanje perturbatora i računati profil linije kao skup profila računatih za fiksirane konfiguracije perturbatora, koji se zatim usrednjava po ovim

konfiguracijama. To je kvazistatička aproksimacija.

Ako je trajanje sudara kratko u odnosu na vreme bitno za procenu intenziteta u tački $\Delta\omega$, prema izrazu (1.3.1.1) odnosno

$$\tau \ll \frac{1}{\Delta\omega} \quad 1.3.1.4$$

možemo zanemariti detalje vremenskog razvoja perturbovane talasne funkcije emitera i stvarno trajanje sudara i posmatrati samo promene u talasnoj funkciji emitera izazvane završenim sudarom. To je sudarna aproksimacija. Za vremena veća od recipročne vrednosti polupoluširine linije w , intengrand u (1.3.1.1) se eksponencijalno smanjuje. Zato se kao uslov primenljivosti sudarne aproksimacije uzima:

$$\tau \ll \max\left(\frac{1}{\Delta\omega}, \frac{1}{w}\right) \quad 1.3.1.5$$

Kada su perturbberi elektroni, sudarna aproksimacija je gotovo uvek dovoljna u centralnim delovima spektralne linije, dok se krila linije opisuju kvazistatičkim teorijama. U centralnim delovima linije obično je za primenljivost sudarne aproksimacije dovoljan uslov:

$$w\tau < 1 \quad 1.3.1.6$$

Za vreme trajanja sudara, srednja energija interakcije je [33]:

$$\langle V(t) \rangle \sim \hbar w$$

pa uslov (1.3.1.6) postaje:

$$\langle V(t) \rangle \tau < \hbar \quad 1.3.1.7$$

Posmatrajmo izolovanu liniju koja nastaje dipolnim prelazom izmedju početnog nivoa i i krajnjeg f . Uz pomoć (1.2.1.11) i

$$\langle V(t)_{if} \rangle = Ze \langle i | \vec{r} | f \rangle \frac{e^{-x}}{x^3}$$

(x_i su koordinate perturbbera) uslov (1.3.1.7) postaje:

$$\frac{Z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{3} |\langle i | \vec{r} | f \rangle|^2 \frac{1}{\rho_0^2 v_0^2} < 1$$

1.3.1.8

Ako su perturbirani elektroni:

$$Z = 1$$

$$m = m_e$$

$$m \rho_0 v_0 = \hbar$$

Ako uvedemo Borov radijus a_0

$$a_0 = \hbar^2 / m_e e^2$$

i jačinu oscilatora u apsorpciji pri čemu je energija izražena u Ridberzima:

$$\frac{\rho}{\rho_0} = \frac{1}{3} \Delta E_{if} \frac{|\langle i | \vec{r} | f \rangle|^2}{\alpha^3}$$

uslov (1.3.1.8) postaje:

$$e^2 \Delta E_{if} / f_{if} > 1$$

Ako uzmemo u obzir da je za elektronske sudare:

$$\rho_0 \sim \frac{N_e}{100}^{-1/3}; \quad \bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m_e}}$$

gde je N_e koncentracija elektrona, izraz (1.3.1.8) postaje:

$$\log \frac{\Delta E_{if}}{f_{if}} + \log T_e - \frac{2}{3} \log N_e + 6.2 > 0$$

U gornjem izrazu, ΔE je u eV, N_e u cm^{-3} , T_e u Kelvinovim stepenima a logaritmi u formuli su dekadni. To je uslov važenja sudarne aproksimacije u funkciji temperature i gustine perturbiranih [34].

1.4. GBKO teorija za širenje izolovanih linija neutralnih atoma sa dva i više elektrona

Najšire primenjivana moderna teorija Štarkovog širenja izolovanih spektralnih linija neutralnih atoma sa dva i više elektrona, bazira se na članku

Griem-a, Baranger-a, Kolb-a i Oertel-a (GBKO) [13]. U daljem izlaganju će biti prikazana njena najnovija verzija [4], po kojoj su izvršeni proračuni polupoluširine i pomaka za niz neutralnih atoma [4, 59].

Osnov za dalja izračunavanja biće izrazi (1.3.13, 1.3.16) i (1.3.17). U aproksimaciji klasičnih putanja, učestanost sudara sa perturbatorom čiji se sudarni parametar ρ i brzina v nalaze u intervalima $\rho, \rho+d\rho$ i $v, v+dv$:

$$df = 2\pi N f(v) \rho v d\rho dv \quad 1.4.1$$

gde je $f(v)$ Maksvelova raspodela:

$$f(v) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad 1.4.2$$

U jednačini (1.3.13) treba još izvršiti usrednjavanje preko uglova povezanih sa vektorima $\vec{\rho}$ i \vec{v} , koji ulaze u klasični izraz za radijus vektor perturbatora u odnosu na emiter, \vec{r} ,

$$\vec{r}(t) = \vec{\rho} + \vec{v}t \quad 1.4.3$$

pri čemu se vreme računa od trenutka kada su perturbator i emiter najbliži. Koristeći (1.3.13, 1.3.16, 1.3.17, 1.4.1, 1.4.2) dobijamo:

$$w + id = 2\pi N_e \int_0^\infty v f(v) dv \int_0^\infty \rho d\rho (1 - S_i S_i^*) av \quad 1.4.4$$

gde av označava usrednjavanje po uglovima.

Sada se na S matricu primenjuje perturbacioni razvoj opisan u izrazima (1.3.7) i (1.3.8). Usrednjavanjem po uglovima gubi se prvi član perturbacionog razvoja usled simetrije i obično se zaustavlja na drugom članu. Drugi član divergira za male sudarne parametre što nema nikakvog opravdanja. Ustvari matrični elementi S matrice mogu se napisati u obliku [2]:

$$\langle i | S | i \rangle = \exp(-\eta_i - i\phi_i)$$

gde je ϕ_i realni fazni pomak prouzrokovan elastičnim sudarima, a η_i realni pozitivni broj povezan sa neelastičnim sudarima. Sada je perturbacioni razvoj

ekvivalentan razvoju:

$$\exp(-\eta_i - i\phi_i) \simeq 1 - \eta_i - i\phi_i + \dots$$

Prva dva člana su očigledno nedovoljna, kada je drugi član razvoja:

$$|\eta_i + i\phi_i| \sim 1$$

Zato, integracija po sudarnom parametru ne počinje od nule nego od ρ_{\min} koje se određuje iz uslova:

$$|(1 - S_i S_f^*)| = 1 \quad 1.4.5$$

Pretpostavlja se da sudari koji se odvijaju unutar sfere poluprečnika ρ_{\min} utiču samo na širinu linije. To su jaki sudari i oni aproksimativno ulaze u izraz za polupoluširinu linije preko člana za jake sudare:

$$w = N_e \int_0^{\infty} f(v) v dv \pi \rho_{\min}^2 \quad 1.4.6$$

Kada primenimo perturbacioni razvitak dobićemo:

$$(1 - S_i S_f^*)_{av} = \hbar^{-2} (F_{ii} + F_{ff} - F_{if})_{av} \quad 1.4.7$$

$$F_{ji} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_{-\infty}^{+\infty} dy \tilde{V}_j(x) \tilde{V}_j(y) \quad (j=i, f)$$

$$F_{if} = - \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}_i(t) dt \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}_f(t) dt \quad 1.4.8$$

Posle usrednjavanja po uglovima [4, 13]:

$$(F_{ii})_{av} = \left(\frac{\pi}{S}\right)^2 \left\{ \frac{2}{3} \sum_j R_{jj}^2 [A(1-z_j) + iB(z_j)] + \frac{1}{10} \left(\frac{a_0}{S}\right)^2 \sum_{j''} R_{j''}^4 [A_2(1-z_{j''}) + i\beta(z_{j''})] \right\} \quad 1.4.9$$

$$(F_{ij})_{av} = \left(\frac{\pi}{S}\right)^2 \frac{4}{15} \frac{a_0^2}{S^2} (-1)^{j_i + j_f - 1} \left\{ \begin{matrix} j_i & 2j_i \\ j_f & 1 \quad j_f \end{matrix} \right\} R_{ii}^2 R_{ff}^2 \quad 1.4.10$$

$J_{i,f}$ je ukupni ugaoni moment za početno i konačno stanje respektivno. $\tilde{\lambda}$ je de Broglie-eva talasna dužina podeljena sa 2π

$$\tilde{\lambda} = \frac{\hbar}{mv}$$

$R_{jj'}^2$ je kvadrat matričnog elementa koordinatnog vektora optičkog elektrona.

$$R_{jj'}^2 = \frac{|\langle j | R | j' \rangle|^2}{2J_j + 1}$$

Metodi za njegovo izračunavanje biće detaljnije izloženi u sledećem odeljku.

Dvostruka integracija sadržana u (1.4.7, 1.4.8) sada se sadrži u funkcijama A i B. Argument ovih funkcija je:

$$z_{i'} = \frac{E_i - E_{i'}}{\hbar v} \rho = \frac{\omega_{ii'} \rho}{v}$$

$$z_{f'} = \frac{E_{f'} - E_f}{\hbar v} \rho = \frac{\omega_{f'f} \rho}{v}$$

A(z) se može izraziti [4, 13] pomoću modifikovanih Beselovih funkcija druge vrste $K_j(z)$.

$$A(z) = z^2 \left[K_1^2(|z|) + K_0^2(|z|) \right] \quad 1.4.11$$

A(z) i B(z) su realni i imaginarni deo jedne iste kompleksne funkcije pa se B(z) može dobiti [13] kao Hilbertov transform.

$$B(z) = \frac{1}{\hbar} P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(z')}{z-z'} dz'$$

gde je sa P označena Košijeva glavna vrednost integrala. Klarsfeld je pomoću konturne integracije dobio pogodniji izraz za B(z) [60]:

$$B(z) = \hbar z^2 \left[K_0(z) I_0(z) - K_1(z) I_1(z) \right] \quad 1.4.12$$

gde su I_j Beselove funkcije. Za velike vrednosti z, za račun su pogodni sledeći asimptotski izrazi:

$$A(|z|) \sim \hbar |z| \exp(-2|z|)$$

$$B(z) \sim \hbar / 4z$$

Parametar z se može posmatrati kao neka mera odstupanja od vodoničnog ponašanja. Za $z=0$,

$$A(z) = 1$$

$$B(z) = 0$$

dobijamo rezultat za vodonikov atom.

Odgovarajući izrazi za kvadrupolni član su [4]:

$$A_q = \frac{z^4}{4} \left[K_2^2(|z|) + 4 K_1^2(|z|) + 3 K_0^2(|z|) \right] \quad 1.4.13$$

$$B_q = z^2 \left[B(z) + b(z) - \tilde{\kappa} K_1(z) I_1(z) \right] \quad 1.4.14$$

Asimptotski izrazi su:

$$A_q(z) \sim \tilde{\kappa} |z|^2 \exp(-2|z|)$$

$$B_q(z) \sim 9\tilde{\kappa} / 16z$$

Prilikom integracije po sudarnom parametru vrlo su korisne funkcije:

$$a(z) = \int_{-\infty}^{\infty} A(z) \frac{dz}{z} = |z| K_0(|z|) K_1(|z|) \quad 1.4.15$$

$$a_q(z) = \int_{-\infty}^{\infty} A_q(z) \frac{dz}{z^3} = \frac{1}{2} K_1(|z|) \left[2|z| K_0(|z|) + K_1(|z|) \right] \quad 1.4.16$$

$$b(z) = \frac{1}{2} \tilde{\kappa} - \tilde{\kappa} z K_0(z) I_1(z) \quad 1.4.17$$

$$b_q(z) = b(z) - \frac{1}{2} \tilde{\kappa} K_1(z) I_1(z) \quad 1.4.18$$

Koristeći (1.4.2, 1.4.4 - 1.4.6, 1.4.9 - 1.4.18) možemo izračunati širinu i pomak spektralne linije u plazmi.

$$\begin{aligned}
 w+id &= \frac{1}{i} \int_0^{\infty} f(v) v dv \left[\pi S_{min}^2 + \frac{4}{3} \pi \lambda^2 \sum_{\substack{j=i, l \\ j'=i, l'}} R_{jj'}^2 (a_{jj'}^{min} (1 \pm \frac{v_{jj'}}{v})) + \right. \\
 &+ i b_{jj'}^{min} (z_{jj'}) + \frac{\pi}{5} \frac{a_0^2 \lambda^2}{v^2} \sum_{\substack{j=i, l \\ j'=i, l'}} R_{jj'}^4 \omega_{jj'}^2 [a_{jj'}^{min} (1 \pm \frac{v_{jj'}}{v}) + \\
 &+ i b_{jj'}^{min} (z_{jj'})] - \frac{4\pi}{15} a_0^2 \lambda^2 R_{ii}^2 R_{ll}^2 (-1)^{j_i + j_l + 1} \left. \begin{matrix} \{ j_i, 2, j_i \} \\ \{ j_l, 1, j_l \} \} \frac{1}{S_{min}^2} \right] \quad 1.4.19
 \end{aligned}$$

1.4.1 Postupak Cooper-a i Oertel-a

Cooper i Oertel su svojim radom iz 1969. [15] doprineli razvoju GBKO teorije. Oni su kvantitativno procenili doprinos kvadrupolnog člana, našavši da je on za helijum mali. Za razliku od Griem-a 1964. [3], uključili su u proračune širenje donjeg nivoa. Oni su izvršili važne korekcije u originalno definisanim [13] funkcijama širenja A , B , a , b , A_q , B_q , a_q , b_q . U odnosu na teoriju izloženu u prethodnom odeljku, postoje male numeričke razlike kod B , b , B_q i b_q funkcija. Sem toga, u prethodno izloženoj teoriji kvadrupolne funkcije su pomnožene sa faktorom $3/4$ da bi se za $z=0$ dobili rezultati za vodonik, tj. da bi se dobilo:

$$A_q(0) = 1$$

funkcije A i a se u prethodno izloženoj teoriji uzimaju u obliku u kome su ih Cooper i Oertel dali 1969. godine [15].

Seaton je pokazao [61] da se kvantni efekti u procesima ekscitacije neutralnih atoma sudarima sa elektronima znatno bolje opisuju teorijom klasičnih trajektorija, ako se svi izrazi koji sadrže brzine elektrona, simetризuju u odnosu na početne v_i i krajnje v_k brzine elektrona. Ovaj postupak je predložen da bi se zadovoljila relacija recipročnosti za preseke direktnih i inverznih neelastičnih procesa ($\mathcal{C}_{i \rightarrow k}$, $\mathcal{C}_{k \rightarrow i}$ u funkciji energije elektrona:

$$\mathcal{C}_{i \rightarrow k}(v_i) = \frac{g_k}{g_i} \left(\frac{v_k}{v_i} \right)^2 \mathcal{C}_{k \rightarrow i}(v_k)$$

gde su $g_{i,k}$ odgovarajuće statističke težine.

Da bi poboljšali semiklasične rezultate za širenje spektralnih linija, Baranger [2], Sahal-Brechot [62] i Cooper i Oertel [15] su uveli simetrizaciju, kao približan metod za računanje povratne reakcije atoma na perturbaciju.

Postupak se sastoji u sledećem. Koristi se relacija koja povezuje energije kod reverzibilnih sudarnih procesa $i \rightarrow k$ i $k \rightarrow i$

$$\frac{1}{2} m v_i^2 + E_i = \frac{1}{2} m v_k^2 + E_k$$

gde su E_i i E_k atomske energije a $v_{i,k}$ brzina perturbera pre procesa $i \rightarrow k$ odnosno posle završene interakcije $k \rightarrow i$. Početna energija elektrona zamenjuje se nekom srednjom vrednošću početne i krajnje energije

$$\frac{1}{2} m v_i^2 = \frac{1}{2} m v_k^2 + E_k - E_i = \frac{1}{2} m v_k^2 + \hbar \omega$$

implicitno pretpostavljajući da se neelastični prelaz stvarno odigrao [62]. Nadjeno je [63] da ova procedura daje dobro slaganje izmedju aproksimacije klasičnih putanja i kompletnog, kvantnomehaničkog proračuna za S matricu. Kada je ω_{ki} pozitivno, integracija po brzini odgovarajućih izraza koji se javljaju prilikom izračunavanja S matrice, počinje na pragu. Cooper i Oertel vrše simetrizaciju samo kod A , a , A_q i a_q funkcija. Simetrizovane funkcije su istog oblika kao i nesimetrizovane samo je argument sada:

$$z_{jj'} = \frac{S \omega_{jj'}}{\omega^2 - \frac{S \omega_{jj'}}{m}}$$

Takodje se stavlja $A = 0$ ako je:

$$v^2 < 2 \hbar \omega_{jj'} / m$$

tj. integracija počinje na pragu. B funkcije, koje odgovaraju članovima za elastične sudare, pri kojima ne dolazi do izmene energije izmedju atoma i perturbera se ne simetrizuju. Postupak je najvažniji blizu praga za ekscitaciju perturbacionih nivoa koji jako utiču na širenje i za niske temperature.

1.5 Širenje izolovanih linija jona sa dva i više elektrona

U slučaju da je emiter jon, između naelektrisanih perturbbera i emitera deluju Kulonove sile dugog dometa. One ne utiču direktno na širinu i pomak linije, pošto su nezavisne od unutrašnjeg stanja emitera. Ipak, u okviru semiklasične slike, ove sile će ubrzavati perturbber - elektron i tako skraćivati trajanje sudara, odnosno povećavati širinu linije (Hajzenbergova relacija neodređenosti). U semiklasičnoj aproksimaciji, elektroni koji perturbuju emiter, kreću se sada po hiperboličnim putanjama. Skup aproksimacija i teorijski prilaz ostaje isti kao i kada je emiter neutral, samo je usled drukčijih putanja perturbbera rezultat integracije u (1.4.7, 1.4.8) različit, tako da umesto funkcija širenja A i B dobijamo druge funkcije.

1.5.1 Postupak Baranger-a

Baranger 1962. [2] je umesto funkcija a i A u izraz za širinu linije uveo funkciju f_{E1} , koju su Alder et al 1956. [63] dali računajući pomoću perturbacione teorije presek za Kulonovu ekscitaciju jonskog ostatka. Ove funkcije ne divergiraju za male sudarne parametre. To se dešava, pošto za jako zakrivljene hiperboličke putanje aksialna komponenta električnog polja perturbbera menja znak, pa dipolni član teži nuli. Za sudare za koje je ugao Kulonovog rasejanja reda 1 radijan ili veći, perturbber ne može da upadne u atom usled ovog "Kulonovog odsecanja" za male sudarne parametre. Ako je ρ_{\min} odsečak za jake sudare prema (1.4.5), manji od poluose hiperbole za koju je ugao Kulonovog rasejanja reda 1 radijan, Baranger predpostavlja da se elastični sudari mogu zanemariti i širina linije se može računati prema izrazu:

$$\int_0^{\infty} f(v) dv \frac{4\pi}{3} N_e v^2 \sum_j R_{jj}^2 \frac{g}{32\pi^2} f_{E1}(\xi) e^{2\pi i \xi} \quad (\xi = i, f) \quad 1.5.1.1$$

$$\xi = \eta_K - \eta_{K'} \quad 1.5.1.2$$

$\eta_{K, K'}$ je Kulonov parametar perturbbera pre i posle neelastičnog sudara respektivno.

$$\eta = \frac{(Z-1)e^2}{\hbar v} \quad 1.5.1.3$$

(Z je stanje jonizacije) η predstavlja meru efektivne jačine interakcije. Za malo η Kulonovo polje izaziva samo slabu distorziju upadnog talasa, dok je za veliko η Kulonova interakcija dovoljno jaka da spreči perturbber da udje u atom. Tada se sudar može približno opisati posmatrajući perturbber kao klasičnu česticu koja se kreće duž hiperbolične putanje, čiji je ekscentricitet δ i poluosa a .

$$a = \frac{(Z-1)e^2}{m_e v^2} = \eta \frac{m_e v}{\hbar} = \frac{\eta}{\kappa} \quad 1.5.1.4$$

$$\mathcal{E} = \sqrt{1 + \frac{\delta^2}{a^2}} = \sqrt{1 + \frac{L^2}{\hbar^2}}$$

$$L = \frac{\mathcal{P}}{\kappa}$$

U našem slučaju ξ je uvek malo u odnosu na η i može se pisati:

$$\xi = \frac{(Z-1)e^2}{\hbar} \left(\frac{1}{v_{K'}} - \frac{1}{v_K} \right) \quad 1.5.1.5$$

$$\frac{1}{2} m v_{K'}^2 = \frac{1}{2} m v_K^2 + \hbar \omega_{ii'}$$

$$v \approx \frac{v_{K'} + v_K}{2}$$

$$\xi = -\eta \frac{\hbar \omega_{ii'}}{m v_K v_{K'}}$$

Funkcije koje su izveli Alder i dr. su sa malim modifikacijama [62, 4] prisutne i u najnovijim teorijama za Štarkovo širenje jona. U računanjima koja su vršena uz njihovu pomoć [14] uzet je njihov aproksimativni oblik koji ćemo ovde dati. Pretpostavljeno je da $\eta \rightarrow \infty$, čime je postignut potpuno klasičan prilaz. U tom prilazu, $\mathcal{E} \rightarrow 1$ što očigledno sledi iz izraza (1.5.1.4) odnosno putanje perturbbera su hiperbole istog ekscentriciteta. Ove funkcije se mogu izraziti pomoću Hankelovih funkcija:

$$K_{1/2}(\xi \mathcal{E}) = \int_0^{\infty} e^{-\xi \mathcal{E} \cosh u} \cosh u \sinh u \, du \quad 1.5.1.6$$

$$K'_{1/2}(\xi \mathcal{E}) = -\int_0^{\infty} e^{-\xi \mathcal{E} \cosh u} \sinh u \cosh u \, du$$

$$f_{E1}(\xi) = -\frac{3i\pi^2}{9} e^{-\pi\xi} \xi K_{i\xi}(\xi) K'_{i\xi}(\xi)$$

1.5.1.7

1.5.2 Postupak Cooper-a i Oertel-a

Cooper i Oertel 1967. [14] su pretpostavili da je u Baranger-ovom postupku precenjena širina linije za one sudare za koje je ρ_{\min} dobijeno iz (1.4.2) veće od "Kulonovog odsečka" ρ_c odnosno od poluose hiperbolične orbite a ($\rho_c = a$). Oni su predložili da se za male energije perturbbera, tj. za brzine perturbbera od 0 do v_{\lim} , perturbbera posmatraju kao da se kreću po klasičnim hiperboličnim putanjama. Poluširina se računa prema teoriji Baranger-a (1.5.1.1, 1.5.1.7). Za velike energije perturbbera, odnosno za brzine veće od v_{\lim} , širina se računa prema teoriji za neutralne emitere. Smatra se da se perturbbera kreću po pravolinijskim putanjama i koristi se izraz (1.4.19). v_{\lim} se određuje kao ona brzina za koju je:

$$\rho_{\min} = \rho_c = a$$

Za računanje pomaka linije, ostaje samo teorija za neutrane sa pravolinijskim putanjama perturbbera.

1.5.3 Postupak Griem-a

Griem je 1974. [4] prikazao postupak po kome su Jones i dr. 1971. [77] izvršili najsveobuhvatnija izračunavanja širina i pomaka spektralnih linija jednostruko jonizovanih atoma sa dva i više elektrona. Njihov postupak je analogan postupku za neutralne emitere [4], samo se usled hiperboličnih putanja perturbbera funkcije A, a, B i b razlikuju.

$$A(\xi, \xi) = (\xi^2 - 1) \xi^2 \exp(\pi\xi) \left\{ |K'_{i\xi}(\xi E)|^2 + \frac{(\xi^2 - 1)}{\xi^2} |K_{i\xi}(\xi E)|^2 \right\}$$

1.5.3.1

$$a(\xi, \varepsilon_{\min}) = \exp(\pi \xi) \xi \varepsilon_{\min} K_{\frac{3}{2}}(\xi \varepsilon_{\min}) |K'_{\frac{3}{2}}(\xi \varepsilon_{\min})| \quad 1.5.3.2$$

Funkcije $B(\xi, \varepsilon)$, $b(\xi, \varepsilon)$ se mogu naći u tabelarnom obliku [4, 77]. ξ u gornjem izrazu, ima različiti znak od onog u (1.5.1.5).

$$\xi = +\eta \frac{w_{ii'}}{mV-2}$$

ε_{\min} je u stvari izraz (1.5.1.4) za ε u koji je ubačeno ϱ_{\min} određeno iz uslova (1.4.5). Širina i pomak linije se dobiju kada se u izraz analogan izrazu (1.4.19) ubace izrazi (1.5.3.1, 1.5.3.2), funkcije $B(\xi, \varepsilon)$, $b(\xi, \varepsilon)$ i odgovarajuće kvadrupole funkcije [4]. Griem 1974. [4] daje tabelarni prikaz funkcija $A(\delta, \xi)$, $a(\delta, \xi)$, $B(4/3\delta, \xi)$, $b(4/3\delta, \xi)$. Nova promenljiva

$$\delta = (\varepsilon - 1)\xi$$

je mnogo pogodnija za interpolaciju. B i b funkcije sadrže parametar $4/3\delta$ da bi se rezultati na adijabatskoj granici ($\varepsilon \rightarrow 0$) i granici jako zakrivljenih hiperboličnih putanja ($\varepsilon \rightarrow 1$), slagali sa rezultatima Roberts-a i Davis-a [121] za ove oblasti.

2. IZRAČUNAVANJE POLUŠIRINE I POMAKA SPEKTRALNIH LINIJA U PLAZMI

Za praktično izračunavanje poluširina i pomaka spektralnih linija u plazmi u sudarnoj aproksimaciji, neophodno je što tačnije poznavanje matričnih elemenata električnog dipolnog operatora. Podaci o računanju i merenju jačina oscilatora, verovatnoća prelaza i jačina linija, iz kojih se lako mogu izračunati traženi matrični elementi su od velike pomoći u praktičnom radu.

Postoje tablice [35, 36] u kojima je kritički sakupljen postojeći eksperimentalni i teorijski materijal o jačinama oscilatora, verovatnoćama prelaza i jačinama linija, za najvažnije prelaze kod 20 najlakših elemenata.

U svojoj knjizi od 1964. [3] Griem je u dodatku dao jačine oscilatora izračunate u Kulonovoj aproksimaciji za niz prelaza kod neutralnih i jednostruko jonizovanih atoma.

Smith i Wiese [37] su pomoću ekstrapolacije duž izoelektronskih nizova izračunali jačine oscilatora za prelaze kod niza elemenata. Podaci su naročito brojni za višestruko jonizovane atome.

Mnogi podaci mogu se naći pomoću bibliografije radova o verovatnoćama prelaza pojedinih atoma od Miles-a i Wiese-a [38], koja obuhvata sve radove iz ove oblasti do juna 1969. i dodatka, koji su sastavili Fuhr i Wiese [39] za period od jula 1969. do juna 1971.

Obično je za sve jonizovane i neutralne elemente sa kojima se srećemo u praktičnim izračunavanjima, zadovoljena pretpostavka o LS vezi. Zadovoljavajuća tačnost se uglavnom postiže pomoću relativno proste Kulonove aproksimacije postupkom Bates-a i Damgaard-ove [40], koji će kasnije biti detaljno opisan.

Pretpostavka o LS vezi, najviše je narušena za neutralne atome teških inertnih gasova, neona i argona. U navedenoj literaturi se mogu naći i matrični elementi izračunati pomoću mnogo realističnijih talasnih funkcija, nego što ih

pruža Kulonova aproksimacija. Kada Kulonova aproksimacija ne pruža potrebnu tačnost, obično je dovoljno uzeti Hartri-Fokove talasne funkcije, pomoću kojih se može uzeti u obzir i konfiguraciona interakcija.

Kvadrupolni doprinos širenja spektralnih linija u plazmi obično je jako mali i retko kad prelazi nekoliko procenata od ukupne širine. Njegovo zanemarivanje obično ne smanjuje bitno tačnost izračunatih poluširina i pomaka. Kvadrupolni matricni elementi se takodje mogu izračunati pomoću Kulonove aproksimacije [41]. Za vodonik i njemu slične sisteme sa jednim optičkim elektronom, nedijagonalni matricni elementi kvadrupolnih prelaza, za koje je $\Delta L = \pm 2$, mogu se zanemariti pošto su energetske nivou međusobno udaljeni, a odgovarajući matricni elementi jako mali.

Dijagonalni kvadrupolni matricni elementi se za vodoniku slične atome mogu približno pretstaviti izrazom:

$$\langle nlm | r^2 (\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}) | nlm \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{na_0}{2} \right)^2 [5m^2 + 1 - 3l(l+1)] \cdot \frac{l(l+1) - 3m^2}{(2l+3)(2l-1)}$$

Za sisteme sa više elektrona, u gornjem izrazu treba kvantni broj n zameniti efektivnim kvantnim brojem (2.1.4.2).

2.1 Verovatnoće prelaza za električni dipol

Neka se u pobudjenom stanju sa ukupnim ugaonim momentom J' i energijom $E_{J'}$, nalazi $N(J')$ atoma/cm³. Neka se u nižem stanju sa ugaonim momentom J i energijom E_J nalaze $N(J)$ atoma/cm³. Statistička težina stanja J' je $g(J')$. Veza između populacije $N(J')$ degenerisanog nivoa J' i populacije $N(M')$ njegovih podnivoa M' je:

$$N(J') = g(J') N(M')$$

Prema Ajnštajnu [42] koji je prvi, 1971. postavio zakone absorpcije i emisije svetlosti, broj prelaza između podnivoa M' i M degenerisanih nivoa J' i J koji se odigraju u sekundi je:

$$\sum_{MM'} N(M') A(M' M) = N(M') g(J') A(J', J)$$

$A(J', J)$ je Ajnštajnov koeficijent emisije ili spontana verovatnoće prelaza. Ova veličina se vrlo često određuje eksperimentalno. Ona je povezana sa matrice elementom operatora električnog dipolnog prelaza P .

$$P = eR$$

$$A(J', J) = \frac{2\tilde{\nu}}{3} \frac{\alpha^3 c}{R_H^2} \frac{1}{g(J') \lambda^3} \sum_{MM'} |\langle \Gamma JM | P | \Gamma' J' M' \rangle|^2$$

α je konstanta fine strukture a R_H Ridbergova konstanta.

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = (137.0373)^{-1} \quad 2.1.1$$

$$R_H = \frac{me^4}{4\pi\hbar^3 c} = 109737.7 \text{ cm}^{-1}$$

Condon i Shortley [43] su uveli pojam jačine linije S

$$S = S(J', J) = S(J, J') = \sum_{MM'} |\langle \Gamma JM | P | \Gamma' J' M' \rangle|^2$$

Matrični elementi i jačina linije obično se daju u atomskim jedinicama u kojima je $e = m_e = \hbar = 1$. Da bi se prešlo u CGS sistem S treba pomnožiti sa:

$$a_0^2 e^2 = 6.4594 \cdot 10^{-36} \text{ cm}^2 \cdot \text{esj}^2$$

Ako je jačina linije izražena u atomskim jedinicama a talasna dužina u angstromima:

$$A(J'J) = \frac{2.026 \cdot 10^{18}}{\lambda^3 g(J')} \text{ S sec}^{-1}$$

Absorpciju zračenja možemo opisati pomoću Ajnštajnovog koeficijenta absorpcije $B(J, J')$ a takodje i pomoću jačine oscilatora $f_{JJ'}$. Neka je k_ν koeficijent absorpcije.

$$\int k_\nu d\nu = N(J) B(J, J') h\nu = N(J) f_{JJ'} \frac{\pi e^2}{mc}$$

$$f_{JJ'} = A(J'J) \frac{g(J')}{g(J)} \frac{mc\lambda^2}{9\pi^2 e^2} = \frac{1}{3g(J)\lambda R_H} S = \frac{3.0374 \cdot 10^2}{\lambda \cdot g(J)} S$$

Negativna absorpcija ili indukovana emisija $J' M' \rightarrow JM$ se opisuje negativnom jačinom oscilatora.

$$g(J') f_{J', J} = -g(J) f_{JJ'} \quad 2.1.2$$

$$g(J) A_{JJ'} = g(J') A_{J', J} \quad 2.1.3$$

$$S(J, J') = S(J' J) \quad 2.1.4$$

Izrazi (2.1.2, 2.1.3, 2.1.4) važe za $E_{J'} < E_J$.

2.1.1. Metod Racah

Racah je 1942. i 1943. [44, 45] postavio osnovu za jedan sistematičniji tretman matricnih elemenata uvodeći pojam nesvodljivog tenzorskog operatora $\hat{T}^{(k)}$ reda k , koji je definisao pomoću komutacionih pravila za operator ukupnog ugaonog momenta J .

$$\left[(J_x \pm i J_y), T_q^{(k)} \right] = \sqrt{k(k+1) - q(q \pm 1)} \cdot T_{q \pm 1}^{(k)}$$

$$\left[J_z, T_q^{(k)} \right] = q T_q^{(k)}$$

Uglastim zagradama su označeni komutatori odgovarajućih veličina.

$$[a, b] = ab - ba$$

Ova definicija znači da se posle rotacije koordinatnog sistema, $2k + 1$ komponente $T_{+k}^{(k)}, \dots, T_{-k}^{(k)}$ transformišu na isti način kao i $2\ell + 1$ sfernih harmonika $Y_{\ell, +\ell}, \dots, Y_{\ell, -\ell}$.

Primer nesvodljivog tenzora prvog reda je električni dipolni operator

$$\hat{P} = e\hat{R} = e \sum_i r^{(1)}(i)$$

Sumiranje u gornjoj jednačini je izvršeno preko pojedinih elektrona. Komponente $r^{(1)}$ su:

$$r_{+1}^{(1)} = -(x+iy)/\sqrt{2} = r \sqrt{4\pi/3} Y_{\ell, +1} \quad 2.1.1.1$$

$$r_0^{(1)} = z = r \sqrt{4\pi/3} Y_{\ell, 0} \quad 2.1.1.2$$

$$r_{-1}^{(1)} = (x-iy)/\sqrt{2} = r \sqrt{4\pi/3} Y_{\ell, -1} \quad 2.1.1.3$$

Na desnim stranama gornjih jednačina r daje veličinu radijalne koordinate a $Y_{\ell, q}$ daje zavisnost od uglova. Tri komponente $r_{+1}^{(1)}, r_0^{(1)}$ i $r_{-1}^{(1)}$ opisuju desno orijentisano kružno polarizovano, ravanski polarizovano i levo orijentisano kružno polarizovano zračenje.

Sam nesvodljivih tenzora Racah [45] je uveo genealoške koeficijente, koje su predložili Goudsmit i Bacher [46]. Pomoću ovih koeficijenata, moguće je predstaviti stanje opisano funkcijom ψ koje se sastoji od n ekvivalentnih elektrona ℓ^n , kao linearnu kombinaciju stanja $(n-1)$ ekvivalentnih elektrona ℓ^{n-1} .

$$\psi(\ell^n \nu SL) = \sum_{\nu' S' L'} \psi(\ell^{n-1}(\nu' S' L') \ell SL) \cdot \langle \ell^{n-1}(\nu' S' L') \ell SL | \ell^n \nu SL \rangle \quad 2.1.1.4$$

Koeficijent v Racah je uveo kao dopunski kvantni broj koji potpunije opisuje šemu veze za ekvivalentne d elektrone. Genealoški koeficijenti se mogu kraće pisati:

$$\begin{aligned} \langle e^{n-1}(v'S'L') \{SL\} \beta e^{m'} SL \rangle &= \langle e^{n-1} v' S' L' \beta e^{m'} SL \rangle = \\ &= \langle e^{n-1} \beta e^{m'} \rangle \\ \langle e^{n-1} \beta e^{m'} \rangle &= \langle e^{m'} \{1 e^{n-1}\} \rangle \end{aligned}$$

Koeficijent v je uveden da bi se razlikovali termovi istog tipa, koji se javljaju kod konfiguracija sa ekvivalentnim d elektronima, kao što je na primer 2D za konfiguracije sa d^3 , d^5 i d^7 , i piše se kao donji levi indeks uz oznaku za term (2_1D , 2_3D , 2_5D). Pravo 2D stanje na primer, sadrži smešu v^2D stanja, čija specifična linearna kombinacija za dati atom zavisi od vrednosti radijalnih integrala Sletjerovog tipa.

2.1.2 Faktor linije

Pomoću Wigner-Ekart-ove teoreme [47], možemo predstaviti dipolni matrični element u obliku proizvoda Clebsh-Gordan-ovih koeficijenata $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle$ i redukovanog matričnog elementa. Clebsh-Gordan-ovi koeficijenti ili koeficijenti vektorskog sparivanja su u stvari integrali preko proizvoda tri sferna harmonika. Ako kao koordinate upotrebimo $x + iy$ i z , komponentama dipolnog momenta odgovaraju sferni harmonici Y_{1q} sa $q = +1, 0$.

$$\langle \Gamma J M | R_q^{(1)} | \Gamma' J' M' \rangle = (2J+1)^{1/2} \langle J' M', 1 q | J M \rangle \langle \Gamma J | R^{(1)} | \Gamma' J' \rangle \quad 2.1.2.1$$

Ovaj izraz može se napisati i pomoću simetričnih 3j simbola:

$$\langle \Gamma J M | R_q^{(1)} | \Gamma' J' M' \rangle = (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \langle \Gamma J | R^{(1)} | \Gamma' J' \rangle \quad 2.1.2.2$$

Na ovaj način odvojen je deo matičnog elementa koji zavisi od prostorne orijentacije tj. od M i M' , od ostatka koji se naziva redukovani matični element.

Koeficijenti Clebsh-Gordan-a i 3j simboli sadrže izborno pravilo $\Delta J = \pm 1$ ili $0 (J=0 \rightarrow J=0)$ je zabranjen prelaz) i pravilo izbora komponente $r_q^{(1)}$ dipolnog operatora odgovorne za zračenje, koje glasi $q = M - M'$.

Iz osobina 3j simbola sledi:

$$\sum_{MM'} (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -Mq & M' \end{pmatrix} = 1 \quad 2.1.2.3$$

Sve veličine koje nas interesuju sadrže samo redukovane matične elemente, pošto je u atomskim jedinicama:

$$S(r_j, r_{j'}) = \sum_{MM'} |\langle \Gamma J M | R_q^{(1)} | \Gamma' J' M' \rangle|^2 = (\Gamma J | R^{(1)} | \Gamma' J')^2$$

Redukovani matični element se može dalje uprostiti uz pomoć Racah koeficijenta $W(abcd; ef)$ [44, 45] i uz pomoć jednačina koje je izveo Racah [44, 45].

$$\begin{aligned} \langle ab_j | \hat{T}^{(k)} | b | ab' j' \rangle &= (2j+1)^{1/2} (2j'+1)^{1/2} \times \\ &\times W(a_j b' k; b j' | \hat{T}^{(k)} | b') \end{aligned} \quad 2.1.2.4$$

$$\langle ab(e) c, j | a, bc(f), j \rangle = (2\ell+1)^{1/2} (2f+1)^{1/2} W(bacj; ef) \quad 2.1.2.5$$

Horie [48] je pokazao da se redukovani matični element može podeliti na tri dela: faktor linije R_{line} , faktor multipleta R_{mult} i radijalni faktor Γ

$$\langle \alpha L S J | \hat{R}^{(1)} | \alpha' L' S' J' \rangle = R_{line} R_{mult} \Gamma \delta_{SS'}$$

Kronekerov δ simbol ima vrednost 1 za $S=S'$ a inače je jednak nuli. Pošto $\hat{R}^{(1)}$ ne deluje na spin, možemo primeniti jednačinu (2.1.2.4)

$$\langle \alpha S L J | \hat{R}^{(1)} | \alpha' S' L' J' \rangle = (2J+1)^{1/2} (2J'+1)^{1/2} W(S J L' 1; L J) \cdot \quad 2.1.2.6$$

$$\cdot (\alpha L | \hat{R}^{(1)} | \alpha' L') \delta_{SS'}$$

Definišimo linijski faktor kao:

$$R_{\text{line}} = (2J+1)^{1/2} (2J'+1)^{1/2} W(SJL'1, LJ')$$

Ovaj faktor sadrži celokupnu zavisnost matričnog elementa od ukupnih ugaonih momenata JJ' i spina. Linijski faktor inverznog prelaza ima istu brojnu vrednost pomnoženu sa fazom:

$$(-1)^P, \quad P = L - L' + J - J' \quad 2.1.2.7$$

Numeričke vrednosti za Racah koeficijente, potrebne za praktična izračunavanja mogu se naći u dodatku 3.1 Griem-ove knjige [3]. U tabeli 1 kod Shore-a i Menzel-a [49] dati su izračunati faktori linija za sve prelaze sa kojima se srećemo u praksi.

Koeficijente Racah možemo izraziti i preko simetričnih 6j simbola.

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \ell_1 & \ell_2 & \ell_3 \end{matrix} \right\} = (-1)^{j_1+j_2+\ell_1+\ell_2} W(j_1 j_2 \ell_2 \ell_1; j_3 \ell_3) \quad 2.1.2.8$$

Sem toga za koeficijente Racah važi sledeći odnos:

$$W(abcd; ef) = (-1)^{e+f-a-d} W(ebcf; ad) \quad 2.1.2.9$$

uz pomoć (2.1.2.8) i (2.1.2.9) lako se dobija:

$$W(SJL'1; LJ') = (-1)^P \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}$$

Za 6j simbole oblika $\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \ell_1 & \ell_2 & 1 \end{matrix} \right\}$ postoje sledeći obrasci u zavisnosti od veze između momenata ℓ_1 i j_2 odnosno ℓ_2 i j_1 .

$$j = j_1 + j_2 + j_3$$

$$A = \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ \ell_1 & \ell_2 & 1 \end{matrix} \right\}$$

$$\ell_1 = j_2 + 1 \quad \ell_2 = j_1 + 1$$

2.1.1.10

$$A = (-1)^j \left[\frac{(j_3 + j_1 + j_2 + 3)(j_3 + j_1 + j_2 + 2)(-j_3 + j_1 + j_2 + 2)(-j_3 + j_1 + j_2 + 1)}{4(2j_1 + 3)(j_1 + 1)(2j_1 + 1)(2j_2 + 3)(j_2 + 1)(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$\ell_1 = j_2 + 1 \quad \ell_2 = j_1 - 1$$

2.1.2.11

$$A = (-1)^j \left[\frac{(j_3 + j_1 - j_2)(j_3 + j_1 - j_2 - 1)(j_3 - j_1 + j_2 + 2)(j_3 - j_1 + j_2 + 1)}{4(2j_1 + 1)(2j_1 - 1)(j_1)(j_2 + 1)(2j_2 + 1)(2j_2 + 3)} \right]^{1/2}$$

$$\ell_1 = j_2 \quad \ell_2 = j_1 + 1$$

2.1.1.12

$$A = (-1)^{j+1} \left[\frac{(j_3 + j_1 + j_2 + 2)(j_3 + j_1 - j_2 + 1)(j_1 + j_2 - j_3 + 1)(j_3 - j_1 + j_2)}{4(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_1 + 3)(j_2)(j_2 + 1)(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$\ell_1 = j_2 \quad \ell_2 = j_1 - 1$$

2.1.2.13

$$A = (-1)^j \left[\frac{(j_3 + j_1 + j_2 + 1)(-j_3 + j_1 + j_2)(j_3 + j_1 - j_2)(j_3 - j_1 + j_2 + 1)}{4(2j_1 + 1)j_1(2j_1 - 1)j_2(2j_2 + 1)(j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$\ell_1 = j_2 - 1 \quad \ell_2 = j_1 + 1$$

2.1.2.14

$$A = (-1)^j \left[\frac{(j_3 - j_1 + j_2)(j_3 - j_1 + j_2 - 1)(j_3 + j_1 - j_2 + 2)(j_3 + j_1 - j_2 + 1)}{4(2j_1 + 1)(j_1 + 1)(2j_1 + 3)(2j_2 - 1)j_2(2j_2 + 1)} \right]^{1/2}$$

$$\ell_1 = j_2 - 1 \quad \ell_2 = j_2 - 1$$

2.1.2.15

$$A = (-1)^j \left[\frac{(j_3 + j_1 + j_2 + 1)(j_3 + j_1 + j_2)(-j_3 + j_1 + j_2)(-j_3 + j_1 + j_2 - 1)}{4(2j_1 + 1)j_1(2j_1 - 1)(2j_2 + 1)j_2(2j_2 - 1)} \right]^{1/2}$$

Uz pomoć uzastopne primene izraza (2.1.2.4, 2.1.2.5, 2.1.1.4) redukovani matrični element $(\Gamma L | \hat{R}^{(n)} | \Gamma' L')$ se može napisati kao proizvod redukovanog matričnog elementa $(n \ell | \hat{r}^{(n)} | n' \ell')$, koji zavisi samo od kvantnih brojeva elektrona koji vrši prelaz i faktora multiplleta.

$$(\alpha L | \hat{R}^{(n)} | \alpha' L') \equiv R_{\text{multiplet}}(n; \ell; | \hat{r}_{(i)}^{(n)} | n'; \ell')$$

Uvedimo oznaku:

$$C_m^{(\ell)} = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_{\ell m}$$

Uz pomoć (2.1.1.1, 2.1.1.2, 2.1.1.3) iz jednoelektronskog redukovanog matričnog elementa se može izdvojiti radijalni deo.

$$(n \ell | \hat{r}^{(n)} | n' \ell') = (\ell | \hat{r}^{(n)} | \ell') \int R_{n\ell} R_{n'\ell'} d\vec{r} = (-1)^{\ell-1} \int R_{n\ell} r R_{n'\ell'} d\vec{r} \quad 2.1.2.16$$

$R_{n\ell}, R_{n'\ell'}$ su normalizovane radijalne talasne funkcije elektrona koji vrši prelaz.

$$\ell > = \max(\ell, \ell')$$

Inverzni prelaz ima suprotni znak jer sadrži faktor $(-1)^{P'}$

$$P' = (\ell - \ell') \quad 2.1.2.17$$

$$\ell' = \ell \pm 1 \quad 2.1.2.18$$

Radijalni faktor se definiše kao

$$(n \ell | \hat{r}^{(n)} | n' \ell') = \Gamma(\ell - \ell')$$

Neki autori [50, 51] umesto da rastave redukovani matrični element $(\Gamma J | \hat{R}^{(n)} | \Gamma' J')$, rastavljaju jačinu linije $S(\Gamma J, \Gamma' J')$ u relativnu jačinu linije $\mathcal{G}(\mathcal{L})$, relativnu jačinu multiplleta $\mathcal{G}(\mathcal{M})$, i radijalni deo s^2 ili δ^2

$$S(\Gamma J, \Gamma' J') = \mathcal{G}(\mathcal{L}) \mathcal{G}(\mathcal{M}) \delta^2$$

U našim oznakama ove veličine bi bile:

$$S(\Gamma J, \Gamma' J') = R_{\text{line}}^2 R_{\text{mult}}^2 \Gamma^2$$

$$G(L) = \frac{R_{\text{line}}^2}{(2S+1)}$$

$$G(M) = (2S+1)(4L^2-1) R_{\text{mult}}^2$$

$$G^2 = \Gamma^2 / (4L^2-1) L^2$$

Ponekad, rastavljanje redukovanog matričnog elementa je pogodnije od rastavljanja jačine linije, pošto se u prvom slučaju zadržava pozitivni ili negativni predznak pojedinih delova dok se u drugom, usled rastavljanja kvadrata matričnog elementa, odnosno jačine linije, ovi predznaci gube. Važnost zadržavanja predznaka dolazi do izražaja ako na primer želimo da jačinu linije izraženu preko talasnih funkcija u LS stanju $\Psi(\Gamma JM)$ napišemo preko energetskih sopstvenih funkcija $\Phi(\alpha JM)$ pomoću unitarne transformacije:

$$S(\alpha J, \alpha' J') = \left| \sum_{JM} U_{JM}(\alpha J, \Gamma J) (\Gamma J, R_{JM} | \alpha' J') (\alpha' J', J') \right|^2$$

Jačina linije sumirana po određenim parametrima ima sledeća svojstva:

1. Suma prelaza koji počinju ili se završavaju na $L' J'$ nivou je:

$$\sum_{J,S} S = \frac{(2J'+1)}{(2L'+1)} R_{\text{mult}}^2 \Gamma^2$$

2. Suma svih linija u multipletu je:

$$\sum_{JJ'} S = (2S+1) R_{\text{mult}}^2 \Gamma^2$$

3. Suma svih linija koje počinju ili se završavaju na termu SL je za prelaze tipa $l^{\ell} - l^{\ell'}$, gde je l fiksirana konfiguracija elektrona:

$$\sum_{L' JJ'} S = \frac{(2S+1)(2L+1)}{(2\ell'+1)} \Gamma^2$$

za $l_0^n - l_0^{n-1} l$

$$\sum_{L' JJ'} S = \frac{(2S+1)(2L+1)}{(2\ell'+1)} n \langle l_0^n \{ l_0^{n-1} \} \rangle^2 \Gamma^2$$

Za praktično izračunavanje širine i pomaka spektralnih linija potreban je kvadrat matričnog elementa:

$$R_{ij}^2 = \frac{S}{g(i)}$$

Za prelaz između dva nivoa LJ:

$$g(i) = 2J_i + 1$$

Za prelaz između dva multiplleta

$$g(i) = (2L_i + 1)(2S_i + 1)$$

Koristeći drugo pravilo sume:

$$R_{ij}^2 = \frac{\sum_{JJ'} S(J, J')}{(2L_i + 1)(2S_i + 1)} = \frac{1}{2L_i + 1} R_{\text{mult}}^2 \Gamma^2$$

Obično se radi sa sumom svih perturbujućih nivoa koji počinju ili se završavaju na termu SL tako da možemo da iskoristimo treće pravilo suma:

$$\sum_j R_{ij}^2 = \frac{1}{(2L_i + 1)} \sum_j \Gamma_{ij}^2 = L_i(L_i + 1) \sum_j G_{ij}^2$$

Vidimo da je dovoljno samo poznavanje radijalnog faktora ako nije neophodno razlikovanje pojedinih linija u multipletu.

2.1.3 Faktor multiplleta

Faktor multiplleta zavisi od elektronskih konfiguracija nivoa između kojih se vrši prelaz. Prilikom izračunavanja spektralnih linija najčešće se javljaju konfiguracije sledećeg tipa:

$$l^l - l^{l'}; l^n - l^{n-1} l'; s^2 - l s p$$

Ovde je I fiksirana elektronska konfiguracija.

U slučaju konfiguracije tipa $I\ell - I\ell'$, faktor multipleta je istog oblika kao R_{line} u izrazu (2.1.2.6), ako izvršimo sledeću smenu:

$$J \rightarrow L, J' \rightarrow L', S \rightarrow L_c, L \rightarrow \ell, L' \rightarrow \ell'$$

$(S_c L_c)$ je roditeljski term date konfiguracije. Ako se roditeljski termini dve konfiguracije razlikuju, za prelaz između njih faktor multipleta je jednak nuli.

$$\begin{aligned} ((S_c L_c) \ell, S L J | \hat{R}^{(1)} | (S_c L_c) \ell', S L' J') &= R_{line} \sqrt{2L+1} \cdot \\ &\cdot \sqrt{2L'+1} W(L_c L \ell'; \ell L') \Gamma(\ell - \ell') R_{mult}(I\ell - I\ell') = \quad 2.1.3.1 \\ &= \sqrt{2L+1} \sqrt{2L'+1} W(L_c L \ell'; \ell L') = \sqrt{2L+1} \sqrt{2L'+1} (-1)^{L-L-\ell-\ell'} \begin{Bmatrix} \ell & L & L_c \\ L' & \ell' & 1 \end{Bmatrix} \end{aligned}$$

Tabele 3, 4 i 5 kod Shore-a i Menzel-a [49] daju numeričke vrednosti R_{mult} ($I\ell - I\ell'$) za s - p, d - p i d - f prelaze respektivno.

Faktor multipleta možemo izračunati i uz pomoć tabeliranih Racah koeficijenata iz dodatka 3.1 Griem-ove knjige [3] ili uz pomoć izraza (2.1.2.10 - 2.1.2.15).

Faktor linije za inverzni prelaz dobija se množenjem sa $(-1)^{P''}$

$$P'' = L - L' + \ell - \ell' \quad 2.1.3.2$$

Pomoću (2.1.2.7, 2.1.2.17, 2.1.2.18, 2.1.3.2) dobija se za redukovani matrični element inverznog prelaza:

$$(\Gamma' J' | \hat{R}^{(1)} | \Gamma J) = (-1)^{P+P'+P''} (\Gamma J | \hat{R}^{(1)} | \Gamma' J') = (-1)^{P-P''} (\Gamma J | \hat{R}^{(1)} | \Gamma' J')$$

Za specijalni slučaj s - p, prelaza, faktor multipleta se svodi na prost oblik:

$$R_{mult} = \sqrt{\frac{2L'+1}{3}} (-1)^{L_c+1-L'}$$

Kada su konfiguracije izmedju kojih se vrši prelaz tipa $l^n - l^{n-1}$, tj. prelaz vrši jedan od ekvivalentnih elektrona, prvo izdvojimo n-ti elektron pomoću izraza (2.1.1.4) pa primenjujemo izraz (2.1.3.1)

$$\begin{aligned} & \langle l^n v SL \rangle | \hat{R}^{(1)} | l^{n-1} (v_c s_c l_c) e' s' l' j' \rangle = \langle l^{n-1} (v_c s_c l_c) e v SL \rangle | \hat{R}^{(1)} | l^{n-1} (v_c s_c l_c) \\ & \cdot e' s' l' j' \rangle \frac{1}{\sqrt{n}} \langle l^n v SL \rangle \{ | l^{n-1} v_c s_c l_c \rangle = \\ & = R_{\text{line}} \sqrt{n} \langle l^n v SL \rangle \{ | l^{n-1} v_c s_c l_c \rangle \sqrt{2L+1} \sqrt{2L'+1} W(L_c L_e l'; l L') \\ & \Gamma(l-l') R_{\text{mult}}(l^n - l^{n-1} e') = \\ & = \sqrt{n} \langle l^n \{ | l^{n-1} \rangle \sqrt{2L+1} \sqrt{2L'+1} W(L_c L_e l'; l L') \end{aligned}$$

Tabele 6 i 7 kod Shore-a i Menzel-a [49] daju genealoške koeficijente pomnožene sa korenom iz broja ekvivalentnih elektrona.

Dakle, ako se jedan od nivoa izmedju kojih se vrši prelaz sastoji od ekvivalentnih elektrona, to se u izračunavanju matričnog elementa u aproksimaciji LS veze odražava samo na faktor multipleta.

Najprostiji primer prelaza sa ekvivalentnim elektronima je prelaz tipa ls^2 - Isp. Koristeći izraz (2.1.2.5) i svojstva Racah koeficijenata:

$$W(Oabc, ab) = W(aOcb, ab) = W(bcOa, ab) = W(cbaO, ab) = (2a+1)^{-1/2} (2b+1)^{-1/2}$$

$$W(abcd, ef) = W(badc, ef) = W(dcba, ef) = (-1)^{e+f-b-c} W(acfd, bc)$$

$$\begin{aligned} S^{1/2} & = ((SL) s^2 SLJ | \hat{R}^{(1)} | (SL) s(S'L) p SL_p) = \\ & = \sum_{S''} ((SL) s(S''L) s SLJ | R^{(1)} | (SL) s(S''L) p SL_p) \sqrt{2} \sqrt{\frac{2S''+1}{2(2S+1)}} (-1)^{S+1/2-S''} \end{aligned}$$

$$R_{\text{mult}}(ls^2 - lsp) = \left(\frac{2S'+1}{2S+1} \right)^{1/2} (-1)^{S+1/2-S'} \sqrt{\frac{2L'+1}{3}} (-1)^{L_p+1-L'}$$

U sumi po S'' samo je član za $S'' = S'$ različit od nule.

2.1.4 Računanje radijalnih matričnih elemenata u aproksimaciji centralnog polja

U aproksimaciji centralnog polja, talasna funkcija proizvoljnog stanja je linearna kombinacija proizvoda jednoelektronskih funkcija Φ_i . Svaka od ovih funkcija može se razdvojiti na deo koji zavisi od uglova $Y_{\ell m}(\theta_i, \varphi_i)$, radijalni deo $R_{n\ell}(r_i)$ i spinski deo $\chi_{m_i}(S_i)$. Funkcije R_i i R_f zadovoljavaju diferencijalnu jednačinu oblika:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left[2V - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E \right] R = 0 \quad 2.1.4.1$$

gde je V potencijal, ℓ orbitalni kvantni broj a E energija, pri čemu su sve veličine izražene u atomskih jedinicama. Često vrednosti integrala oblika (2.1.2.16) bitno doprinosi samo oblast u kojoj vrednost potencijala ne odstupa više od recimo 1% od asimptotskog Kulonovog oblika, kako su numeričkim ispitivanjem ustanovili Bates i Damgard-ova [40]. Aproksimacija centralnog polja ili Kulonova aproksimacija svodi se na zamenu potencijala u (2.1.4.1), njegovom asimptotskom, Kulonovom vrednošću.

$$V \sim \frac{c}{r}$$

gde je c jednako 1 za neutrane, 2 za jednostruko jonizovane atome itd. To je zaostalo naelektrisanje ostatka kada se ukloni optički elektron. Diferencijalna jednačina za R sada postaje:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left(\frac{2c}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - E \right) R = 0$$

Rešenje ove jednačine treba da zadovoljava granični uslov:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} R = 0$$

Oblik rešenja najpogodniji za našu svrhu je:

$$R = W_{n^*, \ell + 1/2} \left(\frac{2cr}{n^*} \right)$$

$W_{n^*, \ell + 1/2}$ je konfluentna hipergeometrijska funkcija koja je po definiciji rešenje diferencijalne jednačine:

$$\frac{d^2 W_{n^*, \ell + 1/2}}{dr^2} + \left[\frac{2c}{r} - \frac{c^2}{(n^*)^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] W_{n^*, \ell + 1/2} = 0$$

Asimptotski razvoj $W_{n^*, \ell + 1/2}$ je:

$$W_{n^*, \ell + 1/2} \left(\frac{2cr}{n^*} \right) = e^{-\frac{rc}{n^*}} \left(\frac{2cr}{n^*} \right)^{n^*} \left\{ 1 + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{a_t}{r^t} \right\}$$

$$a_1 = \frac{n^*}{2c} [\ell(\ell+1) - n^*(n^*-1)]$$

$$a_t = a_{t-1} \left\{ \frac{n^*}{2ct} [\ell(\ell+1) - (n^*-t)(n^*-t+1)] \right\}$$

Konfluentnu hipergeometrijsku funkciju treba pomnožiti normalizacionim faktorom

$$1 / \left[n^{*2} \Gamma(n^* + \ell - 1) \Gamma(n^* - \ell) / c \right]^{1/2}$$

Efektivni glavni kvantni broj n^* je:

$$n^* = c \left(\frac{R_H}{T_{\infty} - T_{n\ell}} \right)^{1/2} \quad 2.1.4.2$$

R_H je Ridbergova konstanta (2.1.1) T_{∞} je talasni broj u cm^{-1} koji odgovara jonizacionoj energiji razmatranog sistema, a $T_{n\ell}$ talasni broj ili vrednost terma u cm^{-1} .

Označimo vrednosti n^* i ℓ pridružene R_i sa $n^{*'} i \ell'$, a one pridružene R_f sa $n^{*''} i \ell''$. Normalizovani razvoj R_i i R_f se može napisati u obliku:

$$\sum_{p=0}^{\infty} c_p(n^{*'}, \ell') c^{1/2} (cr)^{n^{*'} - p'} e^{-\frac{cr}{n^{*'}}}$$

$$\sum_{p=0}^{\infty} c_p(n^{*''}, \ell'') c^{1/2} (cr)^{n^{*''} - p''} e^{-\frac{cr}{n^{*''}}}$$

Koeficijenti $c_{p'}(n^*, \ell')$ i $c_{p''}(n^{**}, \ell'')$ su poznate konstante.

$$\int_0^{\infty} R_{\ell'} R_{\ell''} r dr = \sum_{p'} \sum_{p''} \int_0^{\infty} c_{p'}(n^*, \ell') c_{p''}(n^{**}, \ell'') \cdot$$

$$\cdot (cr)^{n^{*2} + n^{**2} + 1 - p' - p''} \exp\left[-cr \left(\frac{n^{*2} + n^{**2}}{n^* n^{**}}\right)\right] dr = \quad 2.1.4.3$$

$$= \frac{1}{c} \sum_{p'} \sum_{p''} c_{p'}(n^*, \ell') c_{p''}(n^{**}, \ell'') \left(\frac{n^* + n^{**}}{n^* n^{**}}\right)^{n^{*2} + n^{**2} + 2 - p' - p''}$$

$$\cdot \Gamma(n^* + n^{**} + 2 - p' - p'')$$

Za prelaz oblika $(n^*, \ell - 1) \rightarrow (n^*, \ell)$ (2.1.4.3) se može eksplicitno rešiti i dobija se

$$\frac{3}{2} \frac{n^*}{c} \sqrt{n^{*2} - \ell^2} \quad 2.1.4.4$$

Bates i Damgard-ova [40] su radijalni faktor \mathcal{O} za dipolni prelaz s obzirom na (2.1.4.4) pretstavili u obliku:

$$\mathcal{O}(n_{\ell-1}^*, \ell-1; n_{\ell}^*, \ell, c) = \frac{1}{\sqrt{4\ell^2 - 1}} \int_0^{\infty} R_{\ell-1} R_{\ell} r dr =$$

$$= \frac{1}{c} F(n_{\ell}^*, \ell) \mathcal{T}(n_{\ell-1}^*, n_{\ell}^*, \ell)$$

$$F(n_{\ell}^*, \ell) = \left[\frac{3n_{\ell}^*}{2} \left\{ \frac{n_{\ell}^{*2} - \ell^2}{4\ell^2 - 1} \right\}^{1/2} \right]$$

$$\mathcal{T}(n_{\ell-1}^*, n_{\ell}^*, \ell) = \left[\frac{2c}{3n_{\ell}^* (n_{\ell}^{*2} - \ell^2)^{1/2}} \right] \int_0^{\infty} R(n_{\ell-1}^*, \ell-1, c) R(n_{\ell}^*, \ell, c) r dr$$

Funkciju $F(n_{\ell}^*, \ell)$, Bates i Damgard-ova [40] su dali numerički u tabeli 2, a funkciju $\mathcal{T}(n_{\ell-1}^*, n_{\ell}^*, \ell)$ u tabelama 3, 4 i 5 za s-p, p-d i d-f prelaze. Za $\ell \gg 4$ i $n=0$ mogu se upotrebiti gornje jednačine sa $\mathcal{T}(n_{\ell-1}^*, n_{\ell}^*, \ell) = 1$, a za $\Delta n \neq 0$ vrednosti za vodonik [52] podeljene sa Z^2 .

2.2 Energetski nivoi

Izračunavanje širine i pomaka spektralnih linija u plazmi bitno zavisi od poznavanja dovoljnog broja energetskih nivoa i njihove tačne klasifikacije koja omogućava da se odrede dozvoljeni prelazi. Kao polazna tačka u formiranju razumnog skupa energetskih nivoa može poslužiti kritička kompilacija empirijskih vrednosti energije od C. Moore [53]. Novo izdanje od 1972. godine [54] je bez ikakvih izmena tako da su podaci za lakše elemente čije se širine najviše računaju i koji se nalaze u prvom tomu pomenute knjige stariji od 1949. godine. Za pojedine elemente C. Moore je publikovala revidirane tablice multiplleta i atomskih energetskih nivoa [55]. Za ostale elemente noviji materijal o energetskim nivoima mora se potražiti u odgovarajućim bibliografijama. C. Moore [56] iz 1968-1969. godine. Noviji je Edlen-ov bibliografski članak [57] koji je pisan kao dodatak prvom tomu "Atomskih energetskih nivoa" od C. Moore [53]. Članak obuhvata prvih deset jonizacionih stanja za prva 22 elementa zaključno sa vanđijumom, s tim što su izostavljeni vodonikov i njemu slični spektri. Ovaj članak obuhvata materijal objavljen do juna 1970. godine.

Prilikom računanja širine i pomaka linija, potrebno je poznavanje jonizacionih potencijala i jonizacionih granica pojedinih spektralnih serija. Ovi podaci mogu se naći u publikacijama C. Moore [53, 58]. Treba obratiti pažnju na termine koji pripadaju serijama koje konvergiraju ekscitovanom stanju rezultujućeg jona. Prilikom opisa takvog terma stavlja se prim kao gornji desni indeks uz oznaku vrednosti ugaonog momenta optičkog elektrona. Na primer $3p' \ ^3D$. Ako ovakvih serija ima više, sledeća, koja konvergira višem ekscitovanom stanju u spektru rezultujućeg jona, obeležava se sa " itd. Granica ovakve serije se dobija kada se na uobičajenu jonizacionu energiju doda ekscitaciona energija roditeljskog terma serije.

3. ANALIZA DOBIJENIH REZULTATA

3.1 Uporedjivanje eksperimentalnih i teorijskih poluširina linija drugih autora

3.1.1 Jednostruko jonizovani atomi

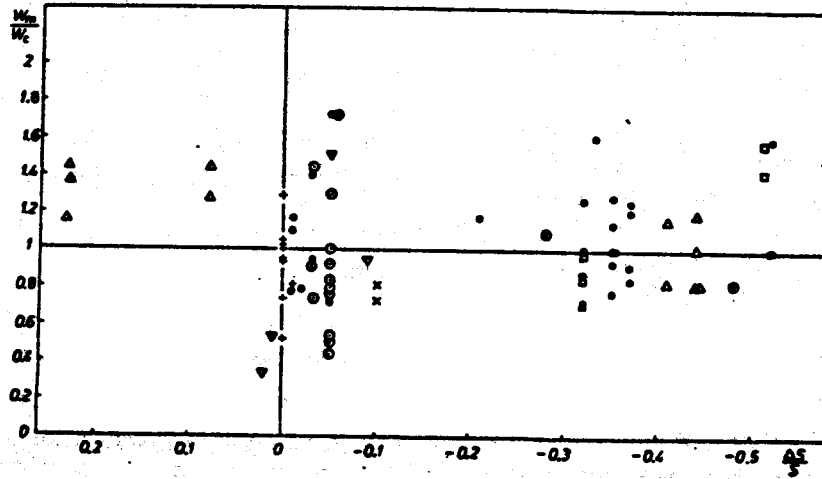
Jones i dr. 1971 [77, 59, 4] su izvršili obimna semiklasična izračunavanja širine i pomaka spektralnih linija u plazmi za niz neutralnih [59, 4] i jednostruko jonizovanih [77, 4] atoma. Ovo je omogućilo uporedjivanje svih dotadašnjih eksperimentalnih rezultata sa teorijski dobijenim vrednostima [78]. Zaključak ovog uporedjivanja je da jedina greška koja znatno utiče na tačnost teorijskih proračuna, nastaje usled nepotpunosti sistema energetskih nivoa koji se uzima u razmatranje.

Izvršili smo uporedjenje teorijskih širina linija [4], sa kritički izabranim eksperimentalnim podacima [5, 78]. Rezultati za širine jednostruko jonizovanih atoma dati su na slikama 4-7. Na prve dve slike odnos W_m/W_c eksperimentalne i teorijske poluširine, nacrtan je u funkciji parametra $\Delta S/S$ (sl. 4) i u funkciji temperature elektrona (sl. 5). Parametar $\Delta S/S$, koji su uveli Jones i dr. [78], daje procenu potpunosti posmatranog sistema energetskih nivoa u odnosu na pravilo suma za dipolne matrične elemente.

$$\frac{\Delta S}{S} = \left(\sum_i R_{ii}^2 + \sum_f R_{ff'}^2 - R^2 \right) / R^2$$

$$R^2 = \frac{n_i^{*2}}{2c^2} [5n_i^{*2} + 1 - 3l_i(l_i + 1)] + \frac{n_f^{*2}}{2c^2} [5n_f^{*2} + 1 - 3l_f(l_f + 1)]$$

Rezultati na sl. 4, sugerišu da se u velikom opsegu vrednosti parametra $\Delta S/S$ ($-0.5 < \Delta S/S \leq 0.23$) ne može zapaziti primetno neslaganje između eksperimenta i teorije koje bi se moglo objasniti promenom ovog parametra, što je u suprotnosti sa Jones-ovim [78] zaključkom. Ipak, kada je nepotpunost sistema



Sl. 4

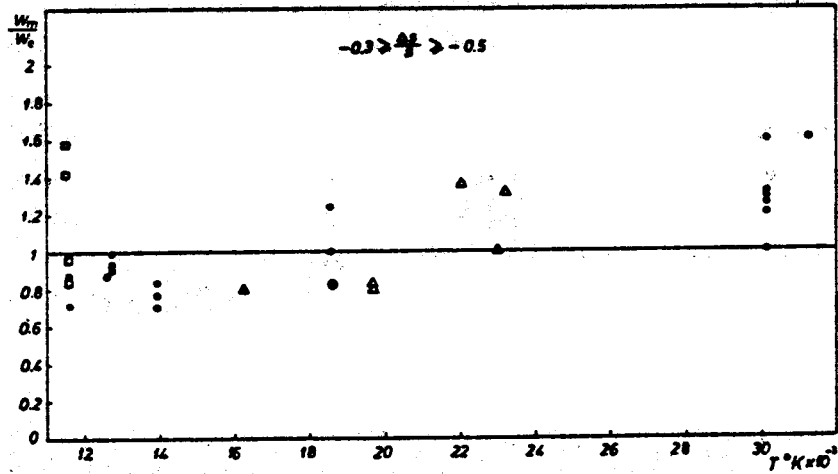


Fig. 2

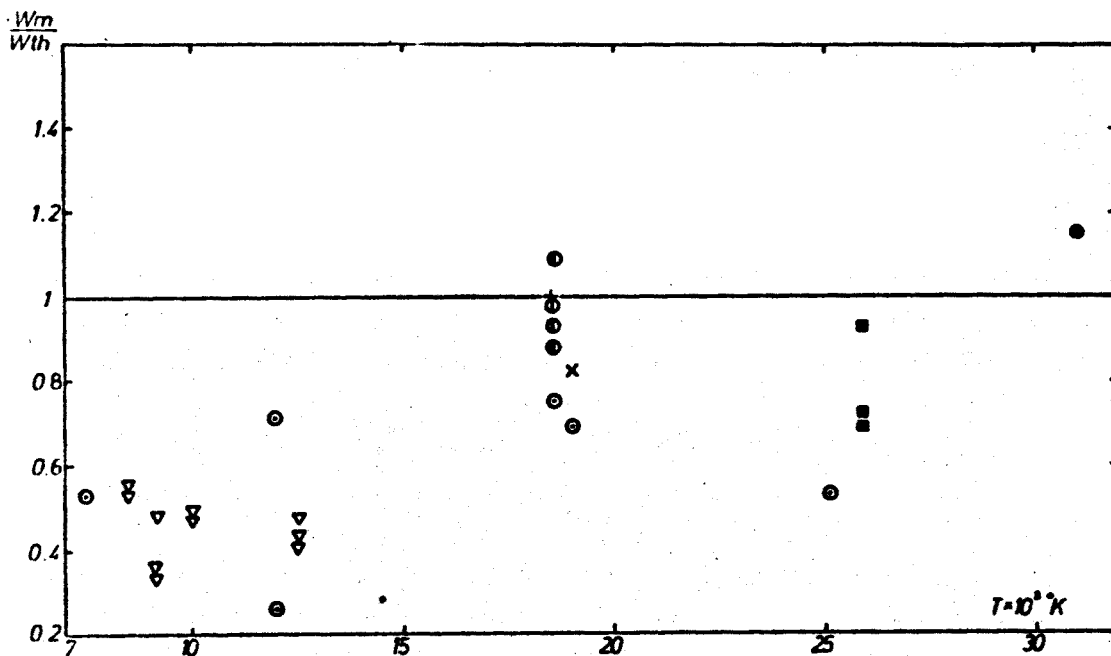
Sl. 5

Eksperimentalni rezultati: x-Be [79, 80] ; o-C [72, 81] .
 Δ -N [82-85] ; +-Mg [80, 86-89]; ∇ -Si [89-91],
 \square -S [74, 90], \odot -Cl [92]; \bullet -Ar [93-99]; \circ -Ca [8, 86-88, 100-104].

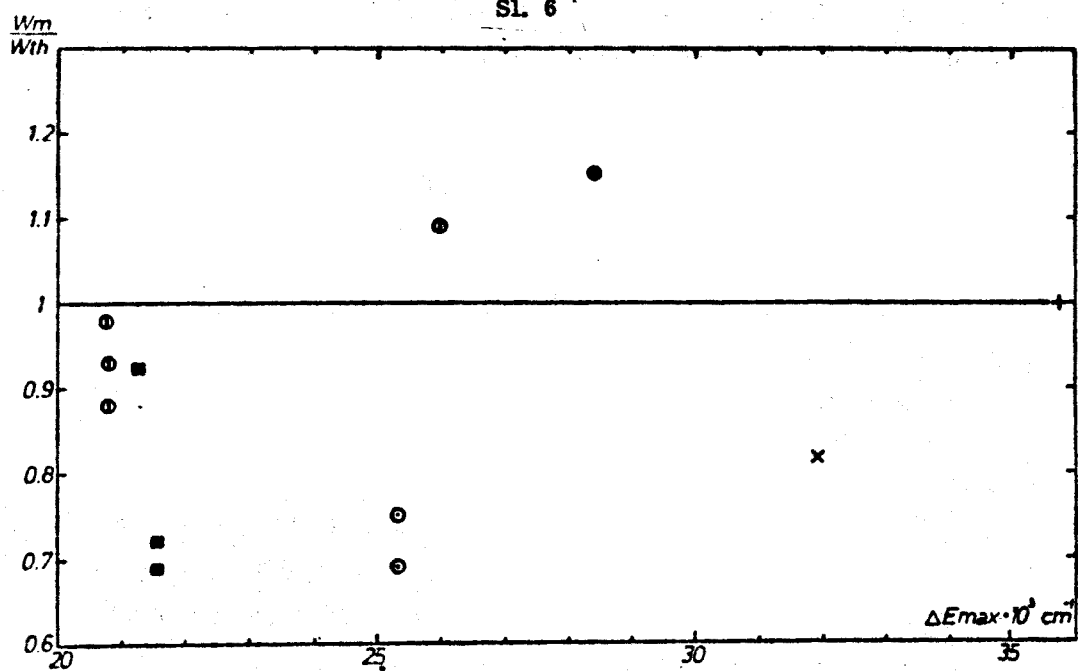
energetskih nivoa izražena ($-0,5 < \Delta S/S \leq -0,30$), sl. 5 pokazuje postojanje korelacije između odnosa W_m/W_c i temperature. Ova vrsta temperature zavisnosti se ne javlja za potpunije sisteme energetskih nivoa ($\Delta S/S > -0,1$). Porast odnosa W_m/W_c sa temperaturom elektrona za nepotpune sisteme energetskih nivoa, može se objasniti porastom uticaja svih nivoa sa temperaturom (što se može videti u prilogu 3) (tabela 7) usled čega je na većim temperaturama izračunata poluširina linije manja od stvarne.

Drugi efekat koji može uticati na tačnost teorijskih vrednosti za širinu linije je efekat povratne reakcije emitera na perturbirer kod neelastičnih sudara, kojisu Cooper i Oertel 1967, 1969 [14,15] probali da uzmu u obzir putem tzv. simetrizacije. Ovaj efekat je najvažniji blizu praga za ekscitaciju i na niskim temperaturama. Sem toga, sudar sa perturbirerom čija je energija manja od energije ekscitacije za neki perturbacioni nivo, ne može indukovati prelaz na taj nivo. Da bi ispitali uticaj ovih efekata na širinu linije, izdvojili smo one linije kod kojih se očekuje najizraženiji efekat. To su one kod kojih je za perturbacioni nivo čiji je uticaj na širinu linije najveći, tj. onaj za koji je odnos $\left| R_{jj}^2 / \Delta \omega_{jj} \right|$ najveći, $\Delta \omega_{jj} > 0$. Izdvojili smo najtačnije eksperimentalne podatke tj. one čija je tačnost kod Konjevića i Wiese-a 1976 [5] ocenjena sa B ili C⁺. Da bi isključili uticaj drugih efekata uzeli smo samo one rezultate za koje je $\Delta S/S > -0,3$.

Rezultati su dati na sl. 6. Vidi se da su u oblasti nižih temperatura ($T < 15000^\circ\text{K}$) veoma tačni eksperimentalni rezultati W_m dvostruko veći od teorijskih W_{th} . Za grupu eksperimentalnih podataka sa slike 6 za $T > 15000^\circ\text{K}$, za koju ne postoji neka izražena korelacija sa temperaturom, nacrtali smo (sl. 7) u funkciji razlike energije između početnog odnosno krajnjeg nivoa linije i onog perturbacionog nivoa koji najviše utiče na širinu linije (ΔE_{max}). Ovako izdvojeni eksperimentalni podaci su oskudni ali sugeriraju da za srednje vrednosti ΔE_{max} ($20-25000 \text{ cm}^{-1}$) tačnost računatih podataka opada sa porastom ΔE_{max} , pošto se energija praga za ekscitaciju posmatranog perturbacionog



Sl. 6



Sl. 6-7

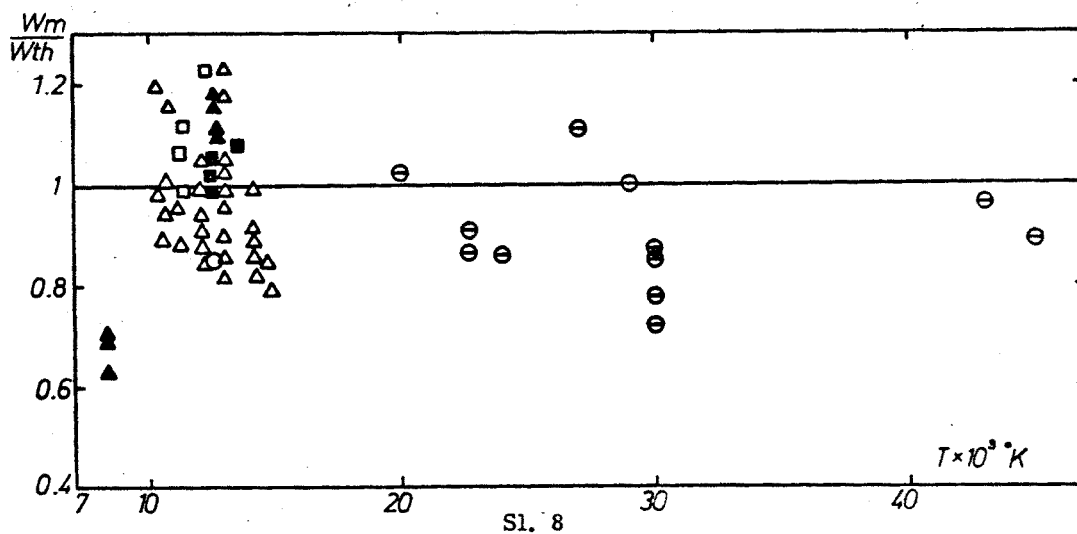
Eksperimentalni rezultati: x-Be [79]; +-Mg [87];
 ▽-Si [89, 91, 105, 106]; ○-Cl [92, 108]; ●-Ar [98];
 ●-Ca [80, 86, 87, 103, 107]

nivoa povećava. Za veće vrednosti ΔE_{\max} vrednosti W_m/W_{th} osciluju oko 1 pošto su za tako velike vrednosti ΔE_{\max} većina sudara elastični a za njih simetrizacija nije potrebna. Bilo bi korisno izvršiti još merenja visoke tačnosti u niskotemperaturnoj oblasti ($T < 15000^\circ K$) koja bi testirala ove zaključke.

3.1.2 Neutralni atomi

Slična analiza je izvršena i za neutralne emitere izuzev argona i neona, koji su posebno analizirani da bi se isključio eventualni uticaj nedovoljnosti pretpostavke o LS sprezi.

Odnos eksperimentalnih vrednosti visoke tačnosti (B prema Konjeviću i Roberts-u 1976 [5]) W_m i teorijskih vrednosti W_{th} [4] dat je u funkciji temperature elektrona na sl. 8. Može se videti da je kod neutralnih emitera slaganje



Eksperimentalni rezultati: O-C [72, 73]; Δ -N [64-66];
 \square -S [74]; \ominus -He [67-70]; \blacksquare -O [71]; \blacktriangle -P [75].

teorijskih i eksperimentalnih vrednosti mnogo bolje i da se odstupanja sa malim izuzecima kreću u granicama od $\pm 20\%$, što je prema Griem-u [4] i granica greške semiklasične aproksimacije. Zapaženo je da su izuzev helijuma svi eksperimentalni rezultati visoke tačnosti skoncentrisani u intervalu tempe-

ratura od 10000 do 15000 °K. Da bi se izvelo pouzdano eksperimentalno testiranje teorije, neophodna su dalja merenja kako na nižim, ($T < 10000^{\circ}\text{K}$) tako i na višim ($T > 15000^{\circ}\text{K}$) temperaturama.

Kod neutralnih emitera energetski razmaci izmedju perturbacionih nivoa su mnogo manji nego kod jonizovanih emitera. Našli smo da su kod linija sa sl. 8 tipične vrednosti za ΔE_{max} oko 500 cm^{-1} za helijum i oko 10000 cm^{-1} za druge elemente. Za ovakve vrednosti ΔE_{max} , pretpostavljamo da je efekat povratnog dejstva emitera na perturber mali. Nacrtali smo za neutrane istu sliku kao što je sl. 7 za jone ali nikakve korelacije nismo našli.

Eksperimentalne vrednosti B tačnosti [5] za Ar I i Ne I analizirali smo posebno, pošto za ove elemente pretpostavka o LS vezi nije zadovoljena. Eksperimentalni rezultati veće tačnosti se nalaze u veoma uskoj oblasti temperatura, ($7800 \leq T \leq 13500^{\circ}\text{K}$) za Ar I i ($11650 \leq T \leq 13600$) za Ne I što znatno otežava donošenje zaključaka upoređivanjem eksperimentalnih i teorijskih vrednosti. Ipak, analizom raspoloživih podataka [5] dobili smo da je za Ar I srednja vrednost ($W_m/W_{\text{th}} = 0.77$) dok je odgovarajuća srednja vrednost za Ne I, 0.75. Probali smo da za Ar I podelimo eksperimentalne vrednosti na one za koje se temperature nalaze u intervalu od 7800 do 9750°K i one za koje se temperature nalaze u intervalu od 10000 do 13500°K . Odgovarajuća srednja vrednost za prvu grupu je 0.78 a za drugu 0.74. Za pomak linije (d_m/d_{th}) srednje za Ar I je 0.92 dok za Ne I ne postoji nijedno pouzdano merenje pomaka [5]. Pošto za Ar I i Ne I nije opravdano koristiti aproksimaciju LS sprege, Jones i dr. [59] su posebno izračunavali linije u okviru jednog multiplleta. Ipak, vidi se da je odnos W_m/W_{th} za Ar I i Ne I u proseku manji nego za ostale neutralne emitere, za koje on ne odstupa mnogo od jedinice. Da bi se potpuno uzeli u obzir efekti fine strukture, potrebno je uključiti efekte povezane sa spinom [4]. Da bi se to učinilo, neophodno je uračunati efekte izmene, koji se ne mogu uključiti u semiklasične proračune [4]. To može biti eventualno objašnjenje zapaženih odstupanja.

3.2 Analiza Štarkovog širenja spektralnih linija argona

Izvršena su izračunavanja širine i pomaka za dve linije Ar I, 4 linije Ar III i 4 linije Ar IV. Računanja za Ar II nisu vršena, jer su Cooper i Oertel 1967 [14] izvršili obimna izračunavanja za Ar II tako da su za analizu korišćeni njihovi rezultati.

Računanja za Ar I vršena su prema teoriji Cooper-a i Oertel-a 1969. [15] za neutrane i prikazana su tabelarno i grafički u prilogu 1, tabela 1 i sl. 16, 17. Na sl. 16 i 17, naša izračunavanja upoređena su sa teorijskim rezultatima Jones-a i dr. [4, 59] i eksperimentalnim rezultatima raznih autora [110-113]. Za ove linije moguće je naći eksperimentalne podatke [35] za sve potrebne matrične elemente. To verovatno objašnjava dobro slaganje eksperimentalnih i teorijskih podataka.

U prilogu 1 sl. 18-21, grafički su prikazana naša računavanja prema Cooper-u i Oertel-u 1969 [15] za F I multiplete 2 i 6 upoređena sa eksperimentalnim podacima Konjevića i dr. 1972 [117] i sa teorijskim proračunima koje su izvršili Griem 1964. [3] i Jones i dr. 1971. [4, 59].

Slike sugerišu nešto bolje slaganje eksperimentalnih podataka sa našim proračunima, što je verovatno posledica uzimanja u obzir povratnog dejstva emitera na perturber putem simetrizacije, ali je moguće da su naše vrednosti za FI nešto manje, usled malog broja uzetih perturbacionih nivoa. (Za FI, energetski nivoi su uzeti samo iz knjige C. Moore [53].)

Da bi se ocenio uticaj jona na širinu linije, izračunat je i dat u tabelama priloga 1 i kvazi statički parametar jonskog širenja

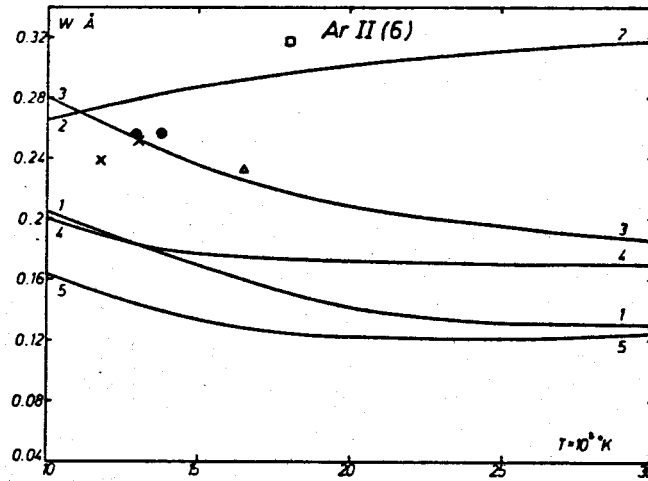
$$\alpha = \frac{4\pi N_e}{3} \left[\frac{1}{3W} \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \left| \sum_i \frac{R_{ii}^2}{\omega_{ii}^2} - \sum_{f'} \frac{R_{ff'}^2}{\omega_{ff'}^2} \right| \right]^{3/4}$$

Procena uticaja jona, može se za neutralne emitere izvršiti pomoću izraza:

$$W_{\text{total}} \approx W + 1.75\alpha(1-0.75R) W$$

$$d_{\text{total}} \approx d + 2.00\alpha(1-0.75R) W$$

$$R = 6^{1/3} \frac{1}{6} (e^2/kT)^{1/2} N^{1/6}$$



Sl. 9

Ar II multiplet 6

Teorijski podaci: 1. Cooper i Oertel 1967 [14]; 2. Jones i dr. 1971 [4, 77]; 3. Roberts 1970 [115]; 4. Brechot 1969 [114]; 5. Davis i Roberts 1968 [116].

Eksperimentalni podaci: x - Popenoe i Shumaker 1965 [93];
 O - Chapelle i dr. 1968 [94]; □ - Jalufka i dr. 1966 [96];
 Δ - Konjević i dr. 1970 [99]

Ovi izrazi važe za $\alpha \leq 0.5$ i $R \leq 0.8$. Znak kod pomaka je jednak onome koji ima d u adijabatskoj aproksimaciji [4].

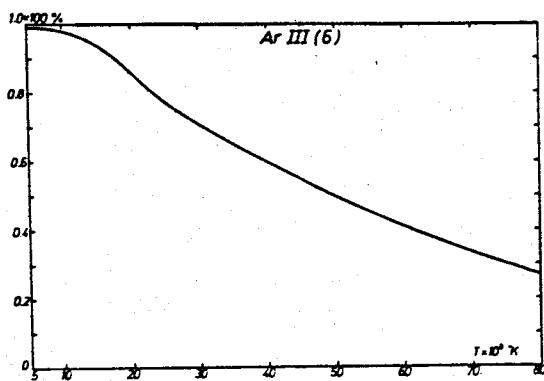
Na slici 9 smo dali grafički prikaz eksperimentalnih [93, 94, 96, 99] i teorijskih [4, 14, 114-116] podataka raznih autora za Ar II multiplet 6. Sa slike se može videti da relativno prosta teorija Cooper-a i Oertel-a 1967 [14] ima isto ponašanje sa temperaturom kao i veoma usavršena Roberts-ova 1970 [115] izračunavanja.

Izračunavanja za Ar III i Ar IV su izvršena prema teoriji Cooper-a i Oertel-a 1967 [14] i prema teoriji Baranger-a 1962 [2]. Radi ilustracije izvršeni su i računi prema teoriji za neutrane sa pravolinijskim putanjama za perturbacije, Cooper-a i Oertel-a 1969 [15]. Po ovoj teoriji izvršeni su proračuni za pomak linije. Rezultati za Ar III i Ar IV prikazani su tabelarno

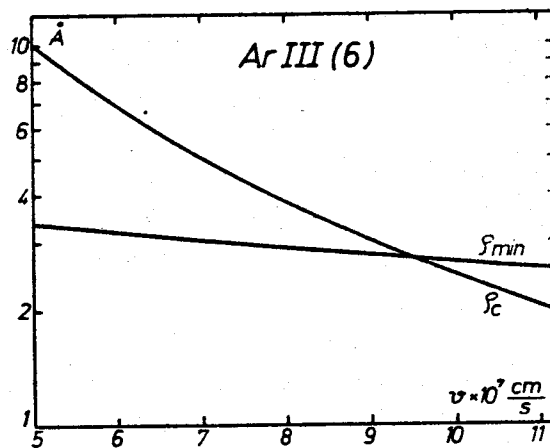
i grafički u prilogu 1, tabela 2 i sl. 22-27 (Ar III) odnosno tabela 3 i sl. 28-32 (Ar IV). Naši teorijski proračuni za polupoluširinu linije prema različitim teorijskim prilazima upoređeni su na sl. 22-25, 28-29 sa eksperimentalnim podacima (M. Platiša, M. Popović, M. Dimitrijević, N Konjević, 1974, 1975, [118, 119]).

Sa slika se vidi da na niskim temperaturama ($T=5000^{\circ}\text{K}$), teorija Cooper-a i Oertel-a 1967 [14] daje rezultate koji teže Baranger-ovim ($\zeta \rightarrow 1$) dok se na visokim temperaturama rezultati približavaju aproksimaciji pravolinijskih putanja ($\zeta \rightarrow \infty$). Doprinos teorijskog prilaza sa hiperboličnim putanjama, postaje sve manji sa porastom temperature, što se može videti sa sl. 10, gde je ovaj doprino u procentima izračunat za veliki interval vrednosti temperature elektrona (5000-80000 $^{\circ}\text{K}$).

Za $T=5000^{\circ}\text{K}$ izračunati su ρ_{\min} i ρ_c u funkciji brzine perturbirera (sl. 11). Vidi se da ρ_c opada sa porastom brzine perturbirera brže od ρ_{\min} . Tačka preseka, koja određuje v_{lim}^* je gotovo ista za sve temperature. Ipak, sa porastom temperature maksimum Maksvelove raspodele se pomera ka većim vrednostima za brzine perturbirera, tako da u teoriji Cooper-a i Oertel-a 1967 [14] opada doprinos teorijskog prilaza sa hiperboličnim putanjama.



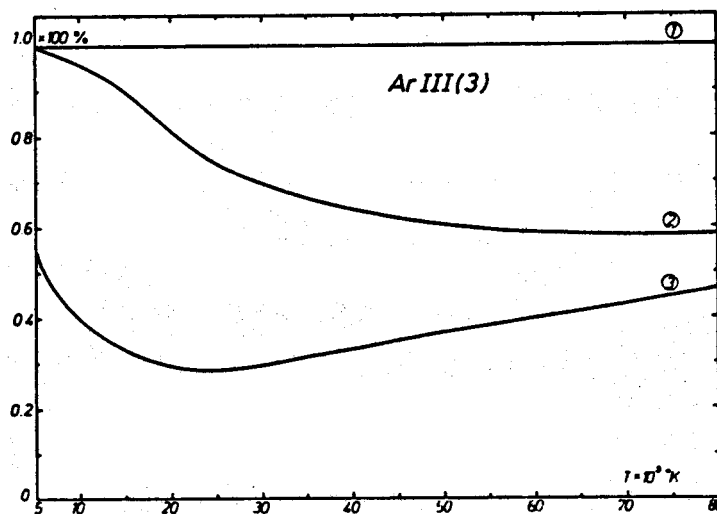
Sl. 10



Sl. 11

Doprinos u procentima teorije sa hiperboličnim putanjama u teoriju Cooper-a i Oertel-a 1967 [14]

Da bi ilustrovali način spajanja teorije sa hiperboličnim putanjama [2] i one sa pravolinijskim putanjama [15], kako su to učinili Cooper i Oertel 1967 [14], izračunali smo doprinos neelastičnih sudara u polupoluširinu (sl. 12) kod svake od ovih teorija. Dok teorija Baranger-a potpuno zanemaruje



Sl. 12

Doprinos-neelastičnih sudara u procentima u polupoluširinu, u funkciji temperature: 1. Teorija Baranger-a [2]; 2. Teorija Cooper-a i Oertel-a 1967 [14]; 3. Teorija Cooper-a i Oertel-a 1969 [15]

elastične sudare, oni učestvuju sa više od 50% u ukupnoj poluširini u teoriji Cooper-Oertel-a 1969 sa pravolinijskim putanjama.

Polupoluširine izračunate prema sve tri teorije za jonizovane emitere uporedili smo sa eksperimentalnim podacima za Ar III i Ar IV (M. Platiša, M. Popović, M. Dimitrijević, N. Konjević 1974, 1975 [118, 119]) i F II i Cl III (M. Platiša, M. Dimitrijević, M. Popović, N. Konjević 1976 [120]) u prilogu 2 Semiklasični rezultati za ukupnu poluširinu linije prema teoriji Baranger-a 1962 [2] sa hiperboličnim putanjama za perturbere uvedeni su u tabele kao W_B . Rezultati dobijeni kombinovanjem Baranger-ovog prilaza sa GBKO teorijom sa pravolinijskim putanjama za perturbere (Cooper i Oertel 1967, 1969

[14, 15]) obeleženi su u tabelama W_{CO} . Za prvi multiplet F II U tabeli 5 pod oznakom W_G , dati su teorijski rezultati dobijeni iz semiklasičnih računanja sa hiperboličnim putanjama za perturbere, koja su izveli Jones i dr. 1971 [77] i koja su kasnije takodje objavljena u Griem-ovoj knjizi [4]. Za Ar III i Ar IV su radi ilustracije, u koloni obeleženoj sa W_G dati rezultati dobijeni teorijskim prilazom sa pravolinijskim putanjama za perturbere. Računanja za Ar III i Ar IV uključuju jonsko širenje koje je reda 1% i izvršena su za one linije za koje postoje eksperimentalni podaci bez objedinjavanja linija u multiplete, tako da su rezultati različiti od onih koji su prikazani na slikama 22-29 u prilogu 1.

Slaganja izmedju eksperimentalnih i teorijskih semiklasičnih proračuna za jednostruko jonizovani fluor, (tabela 5) W_G i W_{CO} sa W_m je u granicama eksperimentalne greške, dok su rezultati Baranger-ovog teorijskog prilaza sistematski viši. Ipak, za Ar III, Ar IV i Cl III, eksperimentalni rezultati se dobro slažu sa teorijskim rezultatima za W_B dobijenim zanemaranjem elastičnih sudara i pretpostavkama da $\eta \rightarrow \infty$ i $\xi \rightarrow 1$, odnosno korišćenjem samo hiperboličnih putanja, dok su W_{CO} sistematski niže. To nagoveštava da je Baranger-ov teorijski prilaz mnogo bolji za viša stanja jonizacije nego što se može očekivati na osnovu uporedjivanja sa rezultatima za jednostruko jonizovane atome. Iz izraza 1.5.1.3, 1.5.1.4 vidimo da pretpostavke $\eta \rightarrow \infty$ i $\xi \rightarrow 1$ postaju sve bolje zadovoljene sa porastom stepena jonizacije. Ovaj zaključak može imati i praktični značaj, pošto Baranger-ov prilaz nudi daleko prostiji metod za procenu širine spektralnih linija.

Na kraju, na bazi uporedjivanja W_{CO} sa eksperimentalnim rezultatima za Ar III, Ar IV i Cl III, može se primetiti da način na koji Cooper i Oertel dele putanje perturbera na hiperbolične za $\xi_c > \xi_{min}$ i pravolinijske za $\xi_c < \xi_{min}$ izgleda nije dobar za viša stanja jonizacije. Cooper i Oertel 1967 [14] zasnivaju svoj teorijski prilaz na pretpostavci da je doprinos sudara sa malim uglovima rasejanja ($\lesssim 1$ radijan) u širinu linije, precenjen u Baranger-ovoj teoriji. Rezultati nagoveštavaju da ova pretpostavka nije potpuno zadovoljena za viša stanja jonizacije.

3.3 O uzrocima odstupanja nekih eksperimentalnih poluširina od teorijski predviđenih

3.3.1 Odstupanja koja utiču na neslaganje sa teorijski predviđenom temperaturnom zavisnošću

Upoređivanjem kritički izabranih eksperimentalnih rezultata za poluširine spektralnih linija u plazmi sa teorijskim vrednostima, koje smo izvršili u odeljku 3.1, došli smo do zaključka da je najvažniji uzrok neslaganja eksperimentalnih i teorijskih temperaturnih zavisnosti poluširina za jednostruko jonizovane emitere, zanemarivanje povratnog dejstva emitera na perturbere i izjednačavanje sa nulom energije praga za ekscitaciju perturbacionih nivoa. Sem toga, na neslaganje pomenutih zavisnosti utiče nepotpunost skupa perturbacionih nivoa. Ove zaključke ćemo u daljem toku izlaganja kvantitativno proveriti uglavnom na spektralnim linijama argona.

3.3.1 Zanemareni perturbacioni nivoi

U prilogu 3 tabela 6, dati su podaci o perturbacionim energetskim nivoima, energijama ovih nivoa i kvadratima matričnih elemenata potrebnim za računanje Štarkovih parametara, za Ar III multiplet 6.

Za pomenuti multiplet, analiziran je uticaj pojedinih perturbacionih nivoa na ukupnu vrednost polupoluširine linije prema tri do sada razmatrana teorijska prilaza. U prilogu 3 tabela 6 prikazani su rezultati ove analize za vrednosti temperature: 5000, 10000, 20000 i 40000^oK.

Od 6 energetskih nivoa, koji su perturbacioni nivoi gornjeg energetskog nivoa linije, na 5000^oK samo 3 doprinose polupoluširinama linije više od 0.005%. Na 40000^oK slika je potpuno drukčija. Sada je doprinos ostala tri nivoa 19.63% u polupoluširini računatoj u aproksimaciji pravolinijskih putanja, 32.53% u računu prema Baranger-ovoj teoriji, i 5.99% u računu prema Cooper-Oertel-ovoj kombinaciji [14] ranije pomenutih teorija.

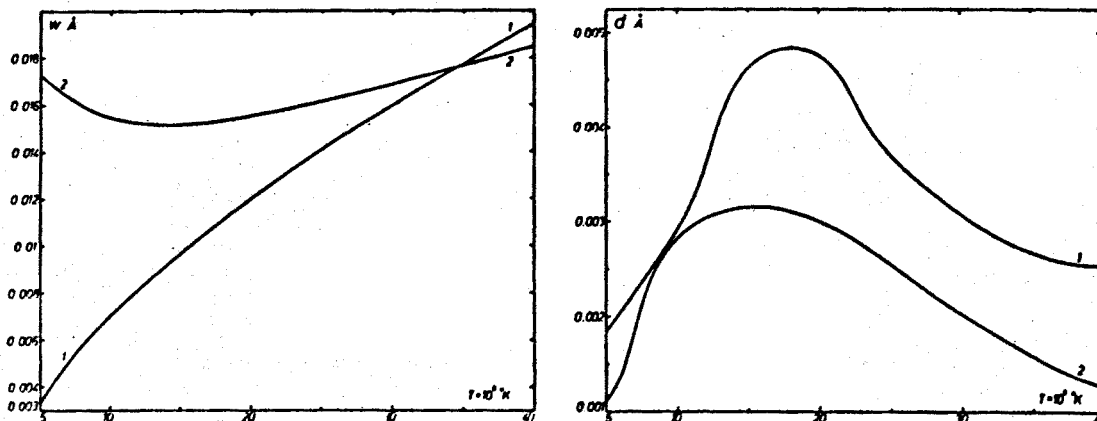
Vidimo da je na višim temperaturama (40000°K) potrebno u posmatranom slučaju uzeti u obzir dvostruko više perturbacionih energetskih nivoa, da bi se dobili rezultati zadovoljavajuće tačnosti. Ako se uzme nedovoljan broj perturbacionih nivoa, može se dobiti drugačija temperaturska zavisnost poluširine linije, što potvrđuje naše zaključke dobijene analizom eksperimentalnih i teorijskih podataka.

3.3.1.2 Povratno dejstvo emitera na perturber

Drugi efekat koji smo izdvojili kao bitan za eventualno objašnjenje neslaganja pojedinih eksperimentalnih i teorijskih podataka na nižim ($T < 15000^{\circ}\text{K}$) temperaturama je efekat povratnog dejstva emitera na perturber. Da bi proverili naše zaključke iznesene u odeljku 3.1.1, učinili smo pokušaj da kvantitativno procenimo uticaj ovog efekta, upoređujući simetrizovane i nesimetrizovane verzije tri do sada analizirana teorijska prilaza.

Analizu smo izvršili za multiplet 6 dvostruko jonizovanog argona. Širina i pomak, izračunati pomoću aproksimacije pravolinijskih putanja za perturbere u simetrizovanoj (1) i nesimetrizovanoj (2) verziji, dati su na sl. 13, 14. Sa sl. 13 se vidi da je uticaj simetrizacije na niskim temperaturama $T < 20000^{\circ}\text{K}$ znatan. Na 5000°K nesimetrizovana vrednost polupoluširine je skoro šest puta veća od simetrizovane. Ako sl. 14 za Ar III uporedimo sa odgovarajućom slikom za Ar I (sl. 15) vidimo da se sa porastom stepena jonizacije, tačka preseka simetrizovane i nesimetrizovane polupoluširine pomerila ka višim temperaturama za oko 20000°K . Takodje vidimo da je najveće odstupanje dve krive, oko 3 puta manje za Ar I nego za Ar III.

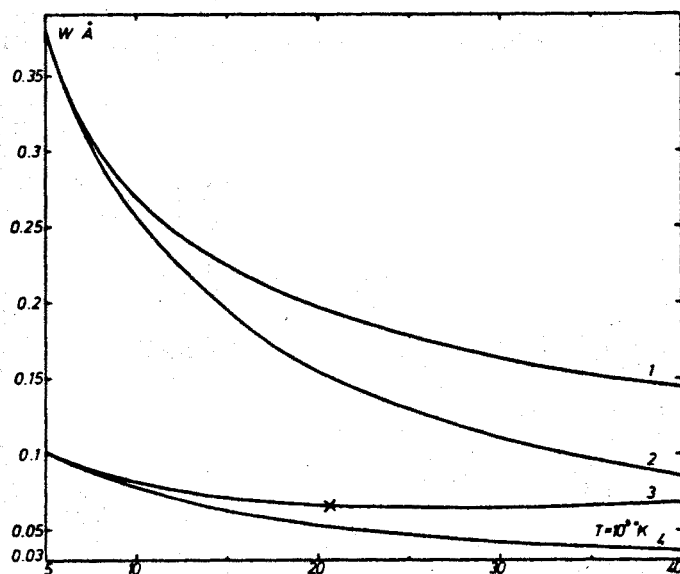
U nesimetrizovanoj verziji, w zavisi samo do $|\omega_{ii'}|$. To nije slučaj u simetrizovanoj verziji, gde perturbacioni energetski nivoi za koje je $\omega_{ii'} > 0$ doprinose samo iznad praga za ekscitaciju. Ipak, treba napomenuti da energetski nivoi za koje je $\omega_{ii'} > 0$ još uvek utiču na w i d , pošto utiču na \mathcal{S}_{\min} preko nesimetrizovanog imaginarnog dela S matrice (B funkcije). Za veće stepene jonizacije, razlike izmedju energetskih nivoa u atomu su veće i uticaj simetrizacije postaje bitan, ne samo na nižim temperaturama (oko 5000°K) nego i na temperaturama



Sl. 13-14

Ar III mult. 6, $3d^{11}3P_2^0 - 4p^{11}3P_2$, $\lambda = 3391.85$

1. Simetrizovana i 2. nesimetrizovana verzija teorije Cooper-a i Oertel-a 1969 [15]



Sl. 15

Ar III mult. 6, $3d^{11}3P_2^0 - 4p^{11}3P_2$, $\lambda = 3391.85$

1. W_B simetrizovano; 2. W_{CO} simetrizovano; 3. W_B nesimetrizovano; 4. W_{CO} nesimetrizovano.

x - eksperimentalni podaci (M. Platiša, M. Popović, M. Dimitrijević, N. Konjević 1974, 1975 [118, 119])

oko 20000-25000°K na kojima je izvršen najveći broj merenja poluširina linija višestruko jonizovanih atoma. Aproksimacija pravolinijskih putanja nije dobra za jonizovane emitere, ali ipak može poslužiti da kvalitativno pokaže porast uticaja efekta povratnog dejstva emitera na perturber kod višestruko jonizovanih atoma.

Simetrizovane i nesimetrizovane verzije polupoluširina izračunatih prema teorijama Baranger-a [2] i Cooper-a i Oertel-a 1967 [14] date su na sl. 15. Vidi se da simetrizovane i nesimetrizovane krive uopšte nemaju dodirnih tačaka. Na 5000°K nesimetrizovana polupoluširina je skoro četiri puta veća od simetrizovane i ta razlika opada na oko dva puta na 40000°K.

U ovom slučaju, nesimetrizovana verzija nije potpuno korektna, jer kada se za $\xi \rightarrow 1$ uvede adijabatska aproksimacija, ($\xi \rightarrow \infty$) uslovi adijabatičnosti nisu zadovoljeni [4].

Tabela I

	F II	Cl III	Ar III
$\lambda(\text{Å})$	3848.9	3394.2	3391.8
T	24200	24200	21100
$N_e(\text{cm}^{-3})$	$5.8 \cdot 10^{16}$	$5.8 \cdot 10^{16}$	$4.4 \cdot 10^{16}$
$2W_G$ nesimet. (Å)	0.0273	0.0215	0.011
$2W_G$ simetriz. (Å)	0.0401	0.0227	0.014
$2W_B$ nesimet. (Å)	0.314	0.312	0.169
$2W_B$ simetriz. (Å)	0.171	0.0972	0.058
$2W_{CO}$ nesimet. (Å)	0.308	0.235	0.133
$2W_{CO}$ simetriz. (Å)	0.0995	0.0572	0.045
$2W$ mereno [120, 118, 119]	0.118	0.085	0.058
	0.117	0.081	

U tabeli I uporedili smo nesimetrizovane i simetrizovane varijante tri razmatrana teorijska prilaza sa eksperimentalnim podacima za F II Cl II (Platiša, Dimitrijević, Popović, Konjević [120]) i Ar III (Platiša, Popović,

Dimitrijević, Konjević [118-119]). Vidi se da se najbolje slaganje između eksperimenta i teorije postiže kada se za F II uzme simetrizovana Cooper-ova i Oertel-ova 1967 [14] teorija a za Cl III i Ar III simetrizovana Baranger-ova [2] teorija što se slaže sa našim zaključcima iz odeljka 3. 2.

3. 3. 2 Razlike između linija unutar istog multipleta

Analizirajući eksperimentalne rezultate, zapazili smo da postoji niz slučajeva da su mereni parametri Šarkovog širenja za više linija u okviru istog multipleta [5]. Mišljenja o teorijski dozvoljenim razlikama između linija u okviru istog multipleta, dosta se razlikuju. Roberts i Davis [116b] tvrde da je "neodređenost preseka prouzrokovana zanemarivanjem fine strukture multipleta u svim slučajevima manja od 2%". Konjević i Wiese 1976 [5] smatraju da "izgleda da razlika između širina linija u okviru istog multipleta nagoveštava nedostatke u eksperimentu". Dalje pomenuti autori kažu: "... pitanje koje još nije diskutovano, tj. koliko su međusobno bliske vrednosti Šarkovih širina kod linija u okviru istog multipleta". Sahal- Brechot je 1969 [114] pretpostavila da se širine i pomaci linija u okviru istog multipleta razlikuju najviše za 10 do 20%. Griem 1974 [4] je pretpostavio da neslaganje između pojedinih linija u multipletu ne prelazi 20%.

Izvršili smo analizu širina i pomaka linija za sve linije unutar multipleta 6 za Ar III prema tri do sada razmatrana teorijska prilaza. Pojedine linije u sastavu analiziranog multipleta dobro su razdvojene. Rastojanje između najudaljenijih linija je 106 Å.

Dobijeni rezultati prikazani su u prilogu 3 tabela 8. Polupoluširine linija u okviru multipleta 6 za Ar III, izračunate prema teoriji Baranger-a [2], odstupaju i do 11% u odnosu na liniju izračunatu za multiplet kao celinu. Kada se na Ar III primeni teorijski prilaz sa pravolinijskim putanjama za perturbacije [15] odstupanja idu do 7% a u Cooper-Oertel-ovoj kombinaciji dva pomenuta prilaza [14] do 13% u odnosu na polupoluširinu računatu za multiplet kao celinu. Ovo se slaže sa pretpostavkama Griem-a [4] i Sahal-Brechot [114]. Polupoluširine linija u okviru analiziranog multipleta kao i polupoluširina za multiplet

posmatran kao celina, imaju isti oblik temperaturske zavisnosti kod sve tri primenjene teorije. Linije su samo pomerene jedna u odnosu na drugu.

Kod pomaka koji je računat u aproksimaciji pravolinijskih putanja stvar je drugačija. Ovde razlika između pomaka za pojedine linije u multi-pletu i pomaka za ceo multiplet ide do 100%. Dok je oblik temperaturske zavisnosti isti za pomake pojedinih linija u okviru multipleta, oblik temperaturske krive je drukčiji za pomak celog multipleta.

Ovako velika odstupanja za pomak, možda su nastala usled neadekvatnosti teorijskog prilaza sa pravolinijskim putanjama za perturbacije, za Ar III. Sem toga, u ovom teorijskom prilazu svaka izmena početnih podataka izaziva i promenu ϕ_{\min} . Na promenu polaznih vrednosti naročito je osetljiv pomak i on je možda dobar indikator opravdanosti eventualno učinjenih izmena na teoriji. Na žalost, prilikom njegovog eksperimentalnog određivanja, teže je postići istu tačnost kao kod poluširine.

Dobijeni rezultati ukazuju, da bi bilo opravdano računati pomake posebno za svaku liniju unutar multipleta, naročito kada su ove linije međusobno znatno razdvojene (106 Å u analiziranom slučaju). Može se pretpostaviti da će kod onih multipleta, kod kojih su linije međusobno razdvojene i po više stotina Angstrema (naprimer rezonantne linije nekih više puta jonizovanih atoma) biti poželjno da se izračunavanja vrše posebno za svaku liniju unutar multipleta.

4. ZAKLJUČAK

U ovom radu je proučavano Štarkovo širenje spektralnih linija u plazmi elektronske koncentracije 10^{16} - 10^{17} cm^{-3} i temperatura od 5000-40000°K za stanja jonizacije argona od Ar I do Ar IV, sa stanovišta odredjivanja uzroka neslaganja pojedinih eksperimentalnih i teorijskih rezultata. Kao teorijski osnov poslužila je Cooper-ova i Oertel-ova modifikacija GBKO teorije za neutrane i Baranger-ova teorija i teorija Cooper-a i Oertel-a za jone.

Prethodno je izvršeno uporedjivanje kritički izabраниh eksperimentalnih podataka sa teorijskim izračunavanjima koja su izvršili Jones i dr. za neutralne i jednostruko jonizovane atome. Utvrđeno je da dva efekta bitno utiču na smanjenje tačnosti teorijskih izračunavanja kod jednostruko jonizovanih emitera.

Sa porastom temperature elektrona odnos W_m/W_c raste za nepotpune sisteme perturbacionih nivoa za koje je $\Delta S/S \leq -0.3$. Ovo se može objasniti porastom uticaja svih nivoa sa temperaturom usled čega je na većim temperaturama ($T > 25000^\circ\text{K}$) izračunata poluširina linije manja od stvarne.

Na tačnost teorijskih vrednosti za širinu linije jednostruko jonizovanih atoma utiče i efekat povratne reakcije emitera na perturbere i postojanje praga za ekscitaciju kod neelastičnih sudara, što nije uzeto u obzir kod Jonesa i dr. Izdvojili smo grupu eksperimentalnih vrednosti kod koje se očekuje veliki uticaj ovog efekta, tj. linije kod kojih je za perturbacioni nivo čiji je uticaj na širinu linije najveći $\Delta \omega_{jj} > 0$. Kod ove grupe, u oblasti nižih temperatura ($T < 15000^\circ\text{K}$) veoma tačni eksperimentalni podaci dvostruko su manji od teorijskih.

Takodje smo zaključili da tačnost računatih podataka opada sa porastom ΔE_{max} (razlike energije između početnog odnosno krajnjeg nivoa linije i onog perturbacionog nivoa koji najviše utiče na širinu linije). Za srednje vrednosti ΔE_{max} (20000-25000 cm^{-1}), pošto se energija praga za ekscitaciju posmatranog perturbacionog nivoa povećava. Za veće vrednosti ΔE_{max} većina sudara su elastični pa vrednost W_m/W_c osciluje oko 1.

Sugerisali smo da postoji potreba za merenjima visoke tačnosti u niskotemperaturnoj oblasti ($T < 15000^{\circ}\text{K}$) za jednostruko jonizovane emitere.

Sličnu analizu izvršili smo i za neutralne emitere izuzev argona i neona. Zapaženo je da su izuzev helijuma svi eksperimentalni rezultati visoke tačnosti, skoncentrisani u intervalu temperatura od 10000 do 15000°K . Eksperimentalne vrednosti se slažu sa teorijom u granicama $\pm 20\%$.

Ar I i Ne I smo analizirali posebno pošto za ove elemente pretpostavka o LS vezi nije zadovoljena. Dobili smo da je za Ar I $(W_m/W_{th})_{sr.} = 0,77$ dok je odgovarajuća vrednost za Ne I, 0.75, što je manje nego kod ostalih neutralnih emitera.

Izvršena su izračunavanja širine i pomaka za dve linije Ar I, četiri linije Ar III i četiri linije Ar IV.

Rezultati za polupoluširine Ar I upoređeni su sa teorijskim rezultatima Jonesa i dr. i eksperimentalnim rezultatima raznih autora i nadjeno je veoma dobro slaganje.

Računavanja Cooper-a i Oertel-a za polupoluširinu Ar II multiplet 6 uporedili smo sa eksperimentalnim i teorijskim podacima raznih autora. Rezultati Cooper-a i Oertel-a imaju isto ponašanje sa temperaturom kao i veoma usavršena Roberts-ova izračunavanja. Dobro slaganje sa eksperimentom (Platiša, Dimitrijević, Popović, Konjević [120]) pokazuju i izračunavanja za F II prema teoriji Cooper-a i Oertel-a.

Polupoluširine za Ar III i Ar IV upoređene su sa eksperimentalnim rezultatima (Platiša, Popović, Dimitrijević, Konjević [118, 119]). Eksperimentalni rezultati se dobro slažu sa teorijskim prilazom Baranger-a, dok su polupoluširine računane prema teoriji Cooper-a i Oertel-a za jone sistematski niže. Teorijski prilaz Baranger-a koji za jednostruko jonizovane emitere daje sistematski više vrednosti za polupoluširinu linije, dobar je za viša stanja jonizacije. Pretpostavke $\eta \rightarrow \infty$ i $\xi \rightarrow 1$ postaju sve bolje zadovoljene sa porastom stepena jonizacije. Ovaj zaključak može imati i praktičan značaj, pošto je Baranger-ova teorija daleko najprostija od tri analizirane teorije.

Zaključili smo da Cooper-ov i Oertel-ov način kombinacije aproksimacije pravolinijskih putanja za perturbere ($\mathcal{E} \rightarrow \infty$) i aproksimacije jako zakrivljenih hiperboličnih putanja ($\mathcal{E} \rightarrow 1$) nije dobar za viša stanja jonizacije. Zaključke potvrđuje upoređivanje izračunatih i eksperimentalnih poluširina za Cl III.

Ranije izvedeni zaključci o uzrocima odstupanja nekih eksperimentalnih polupoluširina od teorijski predviđenih temperaturskih zavisnosti, kvantitativno su provereni na Ar III i nadjena je potvrda izvedenih zaključaka.

Izvršili smo analizu širina i pomaka linija za sve linije unutar multipleta 6 za Ar III prema tri analizirana teorijska prilaza. Polupoluširina za pojedine linije u okviru multipleta odstupaju do 7% u odnosu na polupoluširinu multipleta za aproksimaciju pravolinijskih putanja za perturbere, do 11% u okviru Barangerove teorije i do 13% u okviru Cooper-Oertel-ove teorije za jone. Ovo se slaže sa pretpostavkama Griem-a i Sahal-Brechet. Kod pomaka, koji je računat u aproksimaciji pravolinijskih putanja ovo odstupanje ide i do 100%. I oblik temperaturske zavisnosti pomaka multipleta, drukčiji je od ovog oblika za pomake pojedinih linija u multipletu.

Dobijeni rezultati ukazuju da bi bilo opravdano računati pomake posebno za svaku liniju unutar multipleta, kada su linije međusobno znatno razdvojene (100 Å i više). Pretpostavljeno je da će za linije u okviru istog multipleta, koje su razdvojene više stotina angstrema, biti poželjno izračunavanje Štarkovih parametara za svaku liniju posebno.

Deo rezultata iznetih u radu, objavljen je u toku rada na ovoj problematici [76, 118, 119] ili će biti objavljen [120].

Prilozi 1-3

Računanja su vršena za elektronsku koncentraciju $N = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, izuzev F I koji je računat za $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

$W(\text{Å}) = W_G(\text{Å})$, polupoluširina računata prema Cooper-u i Oertel-u (1969), [15]

$W_B(\text{Å})$, polupoluširina računata prema Baranger-u (1964), [2]

$W_{CO}(\text{Å})$, polupoluširina računata prema Cooper-u i Oertel-u (1967), [14]

$d(\text{Å})$, pomak računat prema Cooper-u i Oertel-u (1969), [15]

α , kvazistatički parametar širenja ionima

g_1, g_2 , statističke težine gornjeg i donjeg nivoa respektivno

Prilog 1

Tabela 1

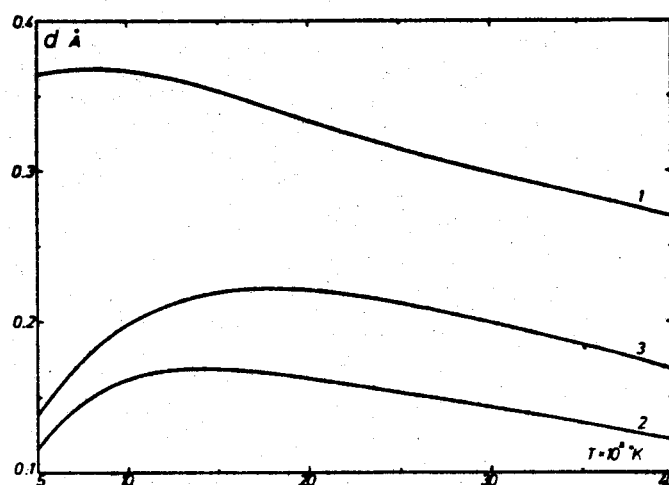
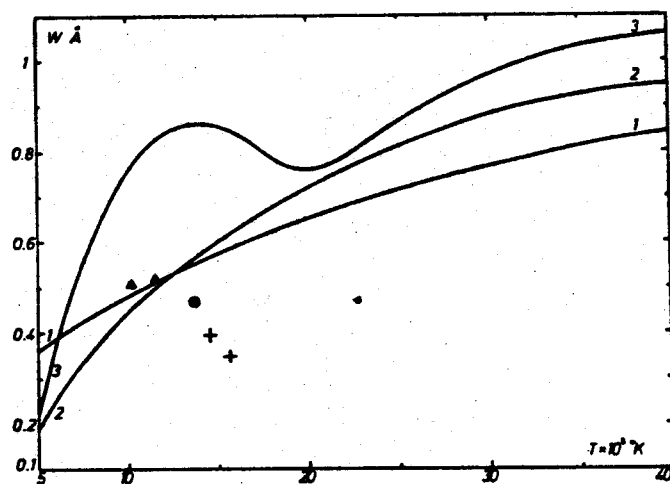
Element	T	W (Å)	d (Å)	α
Ar I $\lambda = 7948.18$ $4s' / 1/2 / ^2 - 4p' / 3/2 /$	5000	0.193	1.115	0.0437
	10000	0.448	0.162	0.0232
	20000	0.715	0.163	0.0164
	40000	0.950	0.123	0.0132
Ar I $\lambda = 8521.44$ $4s' / 1/2 / ^2 - 4p' / 3/2 /$	5000	0.222	0.139	0.0473
	10000	0.752	0.198	0.0256
	20000	0.751	0.220	0.0176
	40000	0.062	0.179	0.0146

Tabela 2

Element	T	W_G (Å)	W_{BA} (Å)	W_{CO} (Å)	d (Å)	α
Ar III mult.1 $\lambda=3296.6$	5000	0.0130	0.0731	0.0731	-0.00511	0.0081
	10000	0.0117	0.0547	0.0525	-0.0111	0.0089
	20000	0.0127	0.0545	0.0382	-0.0122	0.0112
	40000	0.0173	0.0699	0.0317	-0.0078	0.0129
Ar III mult.2 $\lambda=3492.1$	5000	0.0168	0.0981	0.0981	-0.0085	0.0070
	10000	0.0152	0.0731	0.0707	-0.0160	0.0090
	20000	0.0161	0.0691	0.0513	-0.0150	0.0115
	40000	0.0210	0.0832	0.0382	-0.0086	0.0143
Ar III mult.3 $\lambda=3344.8$	5000	0.0143	0.0719	0.0717	-0.0043	0.0042
	10000	0.0147	0.0533	0.0506	-0.0048	0.0054
	20000	0.0166	0.0506	0.0356	-0.0031	0.0071
	40000	0.0201	0.0627	0.0290	-0.0021	0.0082
Ar III mult.6 $\lambda=3432.6$	5000	0.0169	0.1010	0.1001	0.0011	0.0032
	10000	0.0157	0.0737	0.0708	0.0026	0.0041
	20000	0.0163	0.0614	0.0480	0.0030	0.0055
	40000	0.0190	0.0638	0.0343	0.0016	0.0071

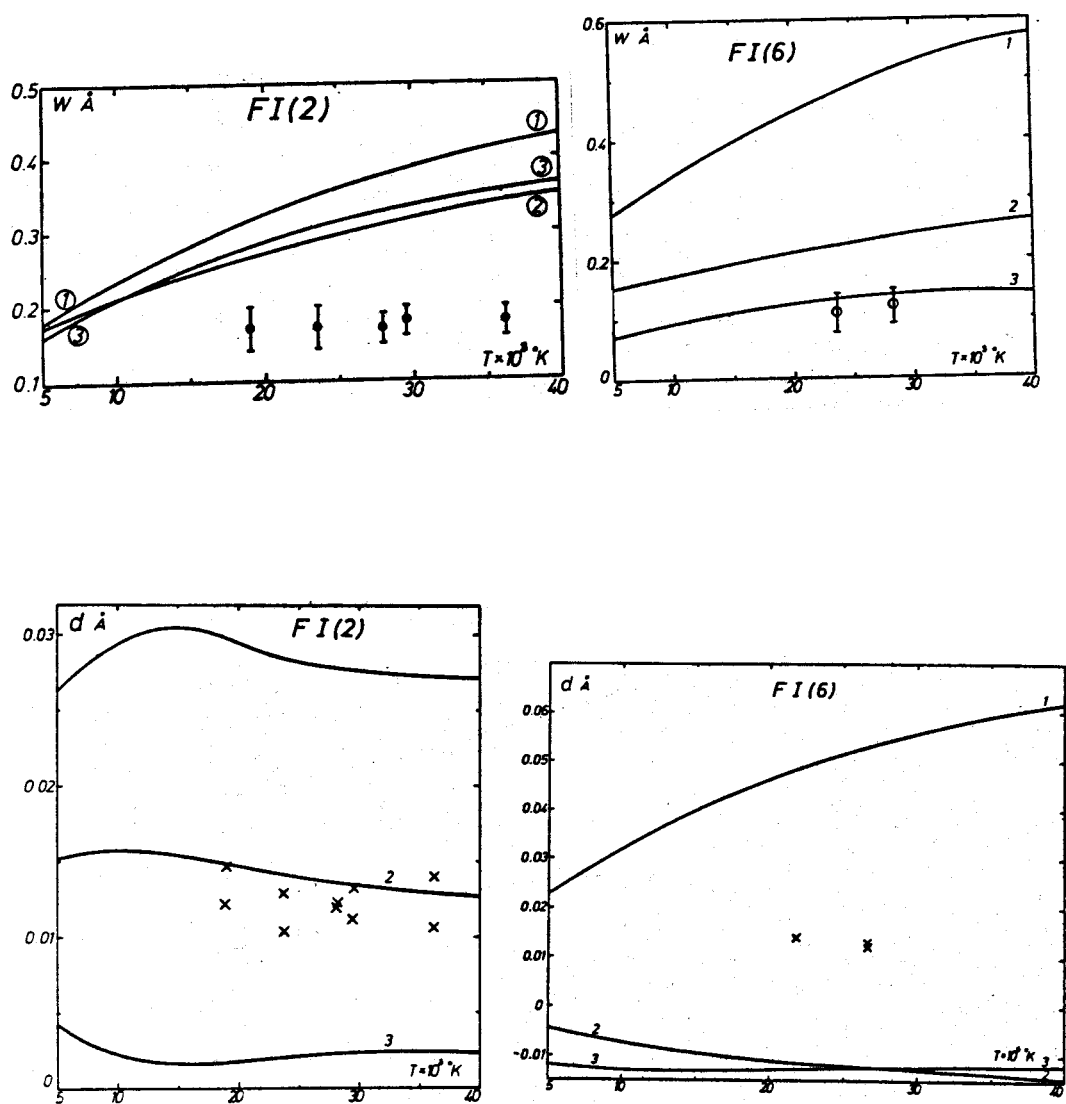
Tabela 3

Element	T	W_G (\AA)	W_{BA} (\AA)	W_{CO} (\AA)	d (\AA)	α
Ar IV mult.4UV $\lambda = 2810.9$	5000	0.00729	0.0366	0.0366	-0.0056	0.0117
	10000	0.00709	0.0267	0.0261	-0.0084	0.0151
	20000	0.00763	0.0230	0.0183	-0.0068	0.0197
	40000	0.00914	0.0249	0.0144	-0.0047	0.0236
Ar IV mult.5UV $\lambda = 2617.5$	5000	0.00618	0.0316	0.0316	-0.0048	0.0116
	10000	0.00597	0.0230	0.0225	-0.0069	0.0149
	20000	0.00644	0.0198	0.0157	-0.0058	0.0195
	40000	0.00774	0.0215	0.0123	-0.0040	0.0235
Ar IV mult.6UV $\lambda = 2769.2$	5000	0.00695	0.0356	0.0356	-0.0046	0.0103
	10000	0.00662	0.0259	0.0254	-0.0078	0.0133
	20000	0.00697	0.0216	0.0178	-0.0062	0.0174
	40000	0.00823	0.0221	0.0137	-0.0047	0.0211
Ar IV mult.2 $\lambda = 2925.4$	5000	0.00834	0.0418	0.0418	-0.0066	0.0119
	10000	0.00814	0.0305	0.0297	-0.0094	0.0153
	20000	0.00876	0.0264	0.0209	-0.0077	0.0199
	40000	0.0105	0.0286	0.0164	-0.0053	0.0239



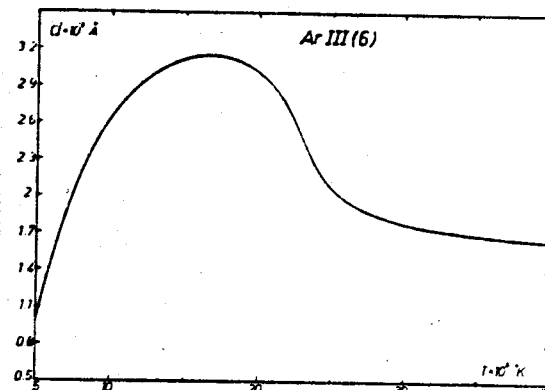
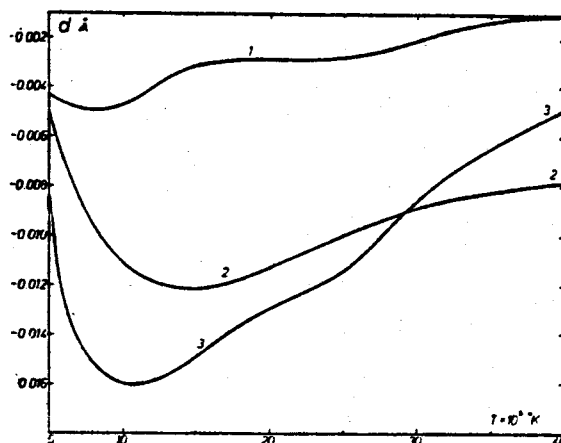
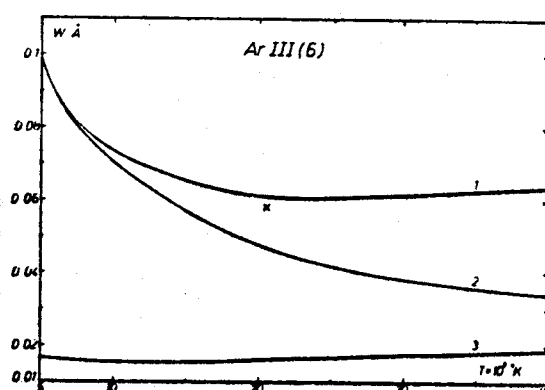
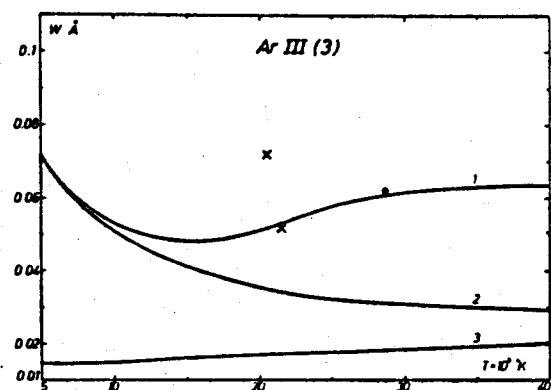
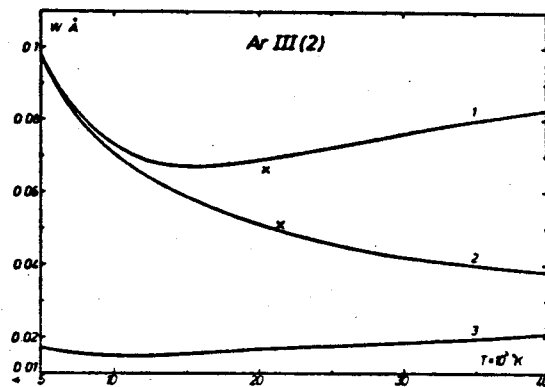
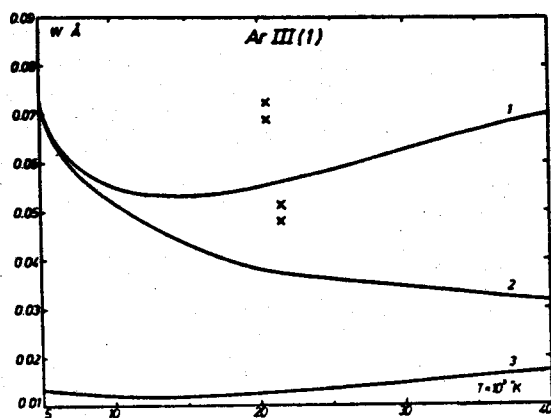
Sl. 16, 17

1. $\lambda=7948.18$, Jones i dr. 1971, [4,59]; 2. $\lambda=7948.18$, $W(\text{\AA})$, $d(\text{\AA})$; 3. $\lambda=8521.44$, $W(\text{\AA})$, $d(\text{\AA})$, eksperimentalne vrednosti: + Murakawa i dr. 1966, [110], • Chapelle i dr. 1967, [111, 112], ▲ Tonjec 1972, [113].



Sl. 18-21

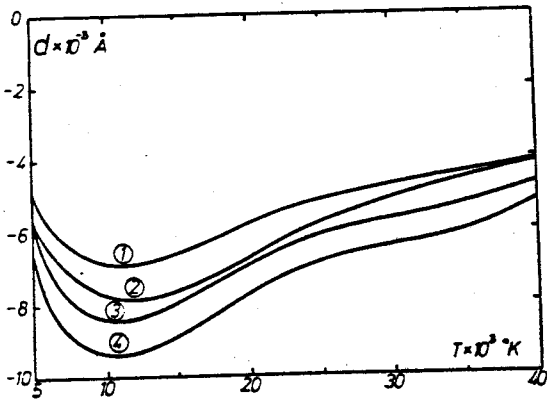
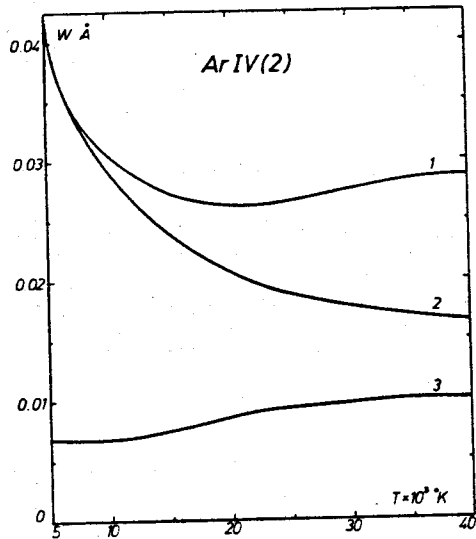
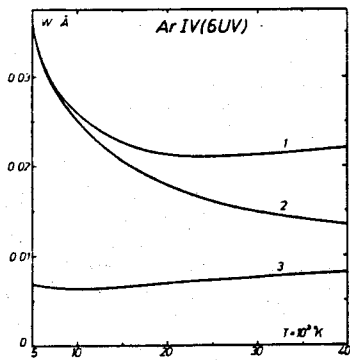
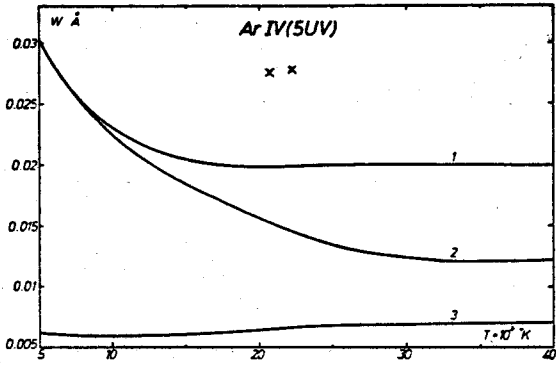
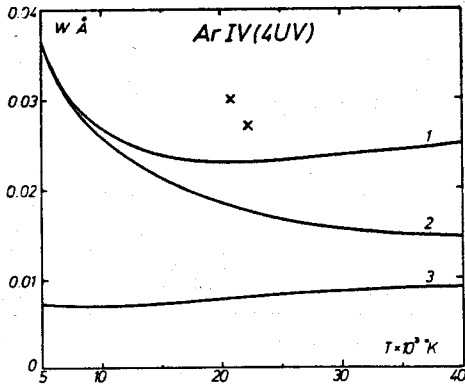
1. Jones i dr. 1971, [4, 59] ; 2. $w(\lambda)$, $d(\lambda)$, u zavisnosti od slike; 3. Griem 1964, [3]
 eksperimentalni podaci: o, x - Konjević i dr. 1972, [17]



Sl. 22-25 i 28-31

1. W_B (Å); 2. W_{CO} (Å); 3. W_G (Å), eksperimentalni podaci: X-Platiša, Popović, Dimitrijević, Konjević 1974, 1975, [118, 119]

Sl. 26



Sl. 32

1. Ar IV mult.5UV; 2. Ar IV mult.6UV; 3. Ar IV mult.4UV; 4. Ar IV mult.2

Tabela 4 - Eksperimentalne poluširine $W(\lambda)$, [118, 119] uporedjene sa teorijskim vrednostima izračunatim u aproksimaciji pravolinijskih putanja (W_G), hiperboličnih putanja (W_B) i njihovoj kombinaciji (W_{CO})

Stanje prelaz ionizacije	talasna dužina (λ)	W_m (\AA)	W_G (\AA)	W_B (\AA)	W_{CO} (\AA)	W_m (\AA)	W_G (\AA)	W_B (\AA)	W_{CO} (\AA)	$\frac{\Delta S}{S}$
Ar III $3^1P^o-4^1P$ $4^5S^o-4^5P$ $4s^3D^o-4p^3D$ $4s^3D^o-4p^3F$	3391.8	0.058	0.014	0.058	0.045	--	--	--	--	-0.46
	3285.8	0.064	0.011	0.048	0.033	0.082	0.021	0.090	0.058	-0.03
	3301.9	0.061	0.011	0.049	0.033	0.077	0.021	0.091	0.058	-0.02
	3480.6	0.058	0.020	0.070	0.046	0.081	0.036	0.139	0.059	-0.22
	3336.1	0.063	0.016	0.050	0.031	0.083	0.030	0.093	0.054	-0.26
eksperimentalni uslovi		$N_e = 4.4 \times 10^{16}$	$T = 21100 \text{ } ^\circ\text{K}$	$N_e = 8.0 \times 10^{16}$	$T = 23080 \text{ } ^\circ\text{K}$					
Ar IV $4^4P-4^4D^o$ $4^4P-4^4P^o$	2809.4	0.023	0.0059	0.018	0.014	0.033	0.007	0.026	0.019	-0.44
	2640.3	0.021	0.0049	0.016	0.012	0.031	0.009	0.023	0.017	-0.44
eksperimentalni uslovi		$N_e = 3.8 \times 10^{16}$	$T = 20750 \text{ } ^\circ\text{K}$	$N_e = 5.6 \times 10^{16}$	$T = 22200 \text{ } ^\circ\text{K}$					

Tabela 5 - eksperimentalne poluširine W_m (Å), [120] uporedjene sa teorijskim vrednostima uzetim iz Griem-a (1974), [4] W_G (Å), i izračunatim po teoriji Baranger-a [2], W_B i Cooper-a i Oertela [14], W_{CO}
 Eksperimentalni uslovi: $N_e = 5.8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $T = 24200 \text{ }^\circ\text{K}$

Stanje jonizacije	prelaz	talasna dužina (Å)	W_m (Å)	W_G (Å)	W_B (Å)	W_{CO} (Å)	$\frac{\Delta S}{S}$
F II	$3s^5S^{\circ} - 3p^5P$	3847.10	0.118	0.113	0.171	0.188	-0.09
		3849.99	0.117	0.113	0.171	0.118	-0.09
	$3s^3D^{\circ} - 3p^3D$	4109.17	0.112	—	0.177	0.090	+0.12
		4119.22	0.110	—	0.177	0.090	+0.12
	$3s^1D^{\circ} - 3p^1F$	4299.17	0.118	—	0.203	0.100	+0.01
Cl III	$4s^4P - 4p^4D^{\circ}$	3602.10	0.106	—	0.097	0.056	-0.06
		3612.85	0.103	—	0.097	0.056	-0.06
		3656.95	0.103	—	0.097	0.056	-0.06
		3705.4	0.099	—	0.097	0.056	-0.06
	$4s^4P - 4p^4P^{\circ}$	3283.41	0.097	—	0.085	0.049	0.00
		3289.80	0.097	—	0.085	0.049	0.00
		3340.420	0.100	—	0.085	0.049	0.00
	$4s^4P - 4p^4P^{\circ}$	3191.45	0.096	—	0.070	0.039	-0.06
	$4s^2P - 4p^2P^{\circ}$	3748.81	0.108	—	0.092	0.053	-0.25
	$3d^4P - 4p^4P^{\circ}$	4018.50	0.111	—	0.098	0.070	-0.26
		4059.07	0.109	—	0.098	0.070	-0.26
		4106.83	0.115	—	0.098	0.070	-0.26
	$4s^2D - 4p^2F^{\circ}$	3530.03	0.105	—	0.089	0.053	-0.23
	$4s^2D - 4p^2D^{\circ}$	3392.89	0.085	—	0.097	0.057	-0.04
		3393.45	0.081	—	0.097	0.057	-0.04

Prilog 3

Tabela 6 - Podaci o perturbacionim nivoima za Ar III multiplet 6
 gornji nivo $4p^3P$ $E_i=243276.23$

br.	pert. nivo	$E \text{ cm}^{-1}$	R_{ij}^2
1	$4s^3P^o$	207381.67	3.4297
2	$3d^3D^o$	210746.77	1.2890
3	$3d^3P^o$	214152.00	0.4900
4	$4d^3P^o$	282049.37	2.5904
5	$4d^3D^o$	284018.35	7.5892
6	$5s^3P^o$	285947.03	1.9919

donji nivo $3d^3P^o$ $E_f=214152.00$

1	$4p^3S$	239193.48	0.7109
2	$4p^3D$	240252.10	0.0348
3	$4p^3P$	243276.23	0.490

Prilog 3

Tabela 7 - Procentualni doprinos širini linije prema različitim teorijama, pojedinih perturbacionih nivoa u funkciji temperature za Ar III multiplet 6

pert. nivoi za gornji nivo	T=5000			10000			20000			40000		
	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}
	4s ³ P ^o	64.75	65.82	65.82	63.92	65.07	65.76	59.79	56.91	65.09	46.70	40.65
3d ³ D ^o	25.23	24.76	24.76	24.45	24.49	24.77	24.21	21.44	24.63	19.36	15.35	23.04
3d ³ P ^o	10.02	9.42	9.42	10.36	9.32	9.44	10.20	8.18	9.44	8.20	5.87	8.96
4d ³ P ^o	0	0	0	0.03	0.17	0	0.93	2.55	0.14	4.79	7.42	1.46
4d ³ D ^o	0	0	0	0.05	0.37	0.01	2.15	6.47	0.32	12.09	20.18	3.69
5s ³ P ^o	0	0	0	0.01	0.07	0	0.45	1.47	0.07	2.75	4.93	0.84

donji nivo	T=5000			10000			20000			40000		
	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}	W _G	W _B	W _{CO}
	4p ³ S	0	0.01	0	0.14	0.35	0.02	1.42	1.92	0.22	3.99	3.43
4p ³ D	0	0	0	0.01	0.01	0	0.06	0.09	0.01	0.18	0.16	0.05
4p ³ P	0	0	0	0.04	0.13	0	0.58	0.98	0.09	1.94	2.02	0.59

Tabela 8 - Ar III multiplet 6 $\lambda = 3432.6$

λ (\AA)	g_1	g_2	τ	W_G (\AA)	W_B (\AA)	W_{CO} (\AA)	d (\AA)
3391.85	5	5	5000	0.0173	0.1093	0.1092	0.0018
			10000	0.0155	0.0796	0.0776	0.0033
			20000	0.0156	0.0663	0.0531	0.0048
			40000	0.0185	0.0688	0.0370	0.0025
3438.00	5	3	5000	0.0178	0.1123	0.1122	0.0019
			10000	0.0159	0.0818	0.0798	0.0034
			20000	0.0161	0.0681	0.0546	0.0049
			40000	0.0190	0.0708	0.0380	0.0026
3424.30	3	5	5000	0.0162	0.0970	0.0970	0.00032
			10000	0.0146	0.0708	0.0690	0.0020
			20000	0.0149	0.0590	0.0476	0.0032
			40000	0.0177	0.0608	0.0337	0.0017
3471.40	3	3	5000	0.0167	0.0997	0.0996	0.00029
			10000	0.0151	0.0728	0.0709	0.0020
			20000	0.0154	0.0607	0.0489	0.0032
			40000	0.0182	0.0627	0.0347	0.0018
3498.10	3	1	5000	0.0170	0.1012	0.1012	0.00028
			10000	0.0153	0.0739	0.0720	0.0020
			20000	0.0156	0.0617	0.0497	0.0032
			40000	0.0185	0.0636	0.0352	0.0018
3498.30	1	3	5000	0.0177	0.1052	0.1050	0.00036
			10000	0.0164	0.0767	0.0738	0.0010
			20000	0.0171	0.0637	0.0500	0.0020
			40000	0.0198	0.0661	0.0358	0.00075

L I T E R A T U R A

- / 1 / R. G. Breene Jr., in "Handbuch der Physik" (S. Flügge ed.)
Vol 27, 1 Springer-Verlag, Berlin and New York, 1964
- / 2 / M. Baranger in "Atomic and Molecular processes" (D. R. Bates ed.)
chap. 13, Academic press, New York, 1964
- / 3 / H. R. Griem, "Plasma Spectroscopy", Mc Graw Hill Inc. New
York, 1964
- / 4 / H. R. Griem, "Spectral Line Broadening by Plasmas", Academic
press, New York and London 1974
- / 5 / N. Konjević, J. R. Roberts, biće štampano u J. Phys. Chem. Ref. Datu
N. Konjević, W. L. Wiese, biće štampano u J. Phys, Chem. Ref. Datu
- / 6 / J. R. Fuhr, W. L. Wiese, L. J. Roszman, NBS. Spec. Publ. 366, U. S.
Government Printing Office, Washington, D. C., 1972
- / 7 / J. R. Fuhr, W. L. Wiese, L. J. Roszman, NBS. Spec. Publ. 366
Suppl 1, U. S. Gov. Print. Office, Washington, D. C., 1974
- / 8 / A. A. Michelson, Ap. J., 2, 251 (1895)
- / 9 / H. A. Lorentz, Proc. Acad. Sci., Amsterdam, 8, 591, (1906)
- /10/ M. Baranger, Phys. Rev., 111, 481, (1958)
- /11/ M. Baranger, Phys. Rev., 111, 494, (1958)
- /12/ M. Baranger, Phys. Rev., 112, 855, (1958)
- /13/ H. R. Griem, M. Baranger, A. C. Kolb, G. K. Oertel, Phys.
Rev., 125, 177 (1962)
- /14/ J. Cooper, G. K. Oertel, Phys. Rev. Lett., 18, 985 (1967)
- /15/ J. Cooper, G. K. Oertel, Phys. Rev., 180, 286, (1969)
- /16/ J. Holtsmark, Z. Physik, 20, 162 (1919)

- /17/ J. Holtzmark, Z. Physik, 25, 73 (1924)
- /18/ G. Kuhn, Phil. Mag., 18, 986, (1934)
- /19/ H. Margenau, Phys. Rev., 48, 755, (1935)
- /20/ A. Ohno, J. Phys. Soc. Japan, 16, 2402, (1961)
- /21/ D. W. Ross, Ann. Phys. (N. Y.), 36, 458, (1966)
- /22/ B. Bezzerdies, Phys. Rev., 186, 239, (1969)
- /23/ C. A. Mead, Int. J. Theor. Phys., 1, 317, (1968)
- /24/ E. W. Smith, J. Cooper, C. R. Vidal, Phys. Rev., 185, 140, (1969)
- /25/ D. Voslamber, Z. Naturforsch., 24 A, 1458, (1969)
- /26/ N. Tran Minh. N. Feautrier H. Van Regemorter, J. Phys, B 8, 1810, (1975)
- /27/ U. Fano, Phys. Rev., 131, 259, (1963)
- /28/ U. Fano, Rev. Mod. Phys., 29, 74, (1967)
- /29/ E. W. Smith, C. F. Hooper, Jr., Phys. Rev., 157, 126, (1967)
- /30/ E. W. Smith, C. R. Vidal, J. Cooper., J. Res. Nat. Bur. Stand., 73 A, 389, (1969)
- /31/ A. Messiah, "Quantum Mechanics", Vol. 1, p. 66, J. Willey & Sons, Inc., New York, 1961
- /32/ A. C. Kolb, H. R. Griem, Phys. Rev., 111, 514, (1958)
- /33/ J. Cooper, Rev. Mod. Phys., 39, 167, (1967)
- /34/ S. Brechot, H. van Regemorter, Ann. d Astroph. 24, 432, 739, (1964)
- /35/ W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Glenon, "Atomic Transition Probabilities", Vol. I, U. S. Govt. Printing Office, Washington D. C. (1966)
- /36/ W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Miles, "Atomic Transition Probabilities", Vol. II, U. S. Govt. Printing Office, Washington D. C. (1969)

- /37/ M. W. Smith, W. L. Wiese, *Astrophys. J. Suppl. Ser.*, 23, 103, (1971)
- /38/ B. M. Miles, W. L. Wiese, *Nat. Bur. Stand. (U. S.) Special Publ.*
No 320, (1970)
- /39/ J. R. Fuhr, W. L. Wiese, *Nat. Bur. Stand. (U. S.) Special Publ.*
(Suppl. 1) No 320, (1971)
- /40/ D. R. Bates, A. Damgaard, *Phil. Trans. Roy. Soc., London, Ser. A* 242,
101, (1949)
- /41/ G. K. Oertel, L. P. Shomo, *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 16, 175, (1968)
- /42/ A. Einstein, *Phys. Zs.*, 18, 121, (1917)
- /43/ E. U. Condon, G. H. Shortley, "The Theory of Atomic Spectra"
University Press, Cambridge, (1935)
- /44/ G. Racah, *Phys. Rev.*, 62, 438, (1942)
- /45/ G. Racah, *Phys. Rev.*, 63, 367, (1943)
- /46/ S. Goudsmith, A. Bacher, *Phys. Rev.*, 46, 948, (1943)
- /47/ M. E. Rose, "Elementary Theory of Angular Momentum", Willey,
New York, (1957)
- /48/ H. Horie, *J. Phys. Soc. Japan*, 7, 58, (1952)
- /49/ B. W. Shore, D. H. Menzel, *Astrophys. J. Suppl.* 12, No 106, (1965)
- /50/ F. Rohrlich, *Astrophys. J.*, 129, 441, (1959)
- /51/ R. W. Nichols, A. L. Stewart, in "Atomic and Molecular Processes"
ed. D. R. Bates, Academic Press, New York, chap. II, (1962)
- /52/ H. A. Bethe, E. E. Salpeter, "Quantum Mechanics of One- and
Two-Electron Atoms", Springer-Verlag, Berlin and New York,
(1957)
- /53/ C. E. Moore, "Atomic Energy Levels", *Nat. Bur. Stand. (U. S.)*
Circ. 467, Vols. I II III, (1949-1958)
- /54/ C. E. Moore, "Atomic Energy Levels", *Nat. Stand. Ref. Data*
Ser. Nat. Bur. Stand., 40, Vols. I II III, (1972)

- /55/ C. E. Moore, "Selected Tables of Atomic Spectra", Nat. Stand. Ref. Data Ser. Nat. Bur. Stand., 3, sects. 1-6, (1967-1972)
- /56/ C. E. Moore, Nat. Bur. Stand., (U. S.) Spec. Publ. No 306, sects. 1-4, (1968-1969)
- /57/ B. Edlen, Nucl. Instrum. Methods, 90, 1, (1970)
- /58/ C. E. Moore, "Ionization Potentials and Ionization Limits derived from the Analysis of Optical Spectra", Nat. Stand. Ref. Data Ser. Nat. Bur. Stand., 34, (1970)
- /59/ W. W. Jones, S. M. Beneth, H. R. Griem, Techn. Rep. No 71-097, Univ. of Maryland, College Park, Maryland, (1971)
- /60/ S. Klarsfeld, Phys. Lett., 32A, 26, (1970)
- /61/ M. J. Seaton, Proc. Phys. Soc., London, 79, 1105, (1962)
- /62/ S. Sahal-Brechot, Astron. Astrophys., 1, 91, (1969)
- /63/ K. Adler, A. Bohr, T. Huus, B. Mottelson, A. Winther, Rev. Mod Phys., 28, 432, (1956)
- /64/ J. C. Morris, R. U. Krey, R. L. Garison, AVCO Corporatin, Space Systems Division, Report AVSD-0049-68-RR, (1968)
- /65/ V. Helbig, D. E. Kelleher, W. L. Wiese, u štampi (uzeto prema: N. Konjević, W. L. Wise, biće štampano u J. Phys. Chem. Ref. Data)
- /66/ H. Nubbemeyer, B. Wende, Z. Agnew. Phys., 27, 214, (1969)
- /67/ W. Botticher, O. Roder, K. H. Wobig, Z. Phys., 175, 48, (1963)
- /68/ R. Lincke, Thesis, University of Maryland, (1964)
- /69/ H. F. Berg, A. W. Ali, R. Lincke, H. R. Griem, Phys. Rev., 125, 199 (1962)
- /70/ H. Wulf, Z. Phys., 150, 614, (1958)
- /71/ W. L. Wiese, P. W. Murphy, Phys. Rev., 131, 2108, (1963)
- /72/ H. J. Kusch, Z. Astrophys., 67, 64, (1967)
- /73/ D. Müller, G. Pichler, Č. Vadle, Phys. Lett., 46A, 247, (1973)

- /74/ J. M. Bridges, W. L. Wiese, Phys. Rev., 159, 31, (1967)
- /75/ J. R. Roberts, P. A. Voigt, u štampi (uzeto prema :N. Konjević, W. L. Wiese, biće štampano u J. Phys. Chem. Ref. Data)
- /76/ M. S. Dimitrijević, P. Grujić, N. Konjević, VII SPIG Rovinj 1974, Contributed Papers, 249
- /77/ W. W. Jones, S. M. Beneth, H. R. Griem Technical Report 71-128, University of Maryland, (1971)
- /78/ W. W. Jones, Phys. Rev., A 7, 1826, (1973)
- /79/ A. Sanchez, M. Blaha, W. Jones, Phys. Rev., A 8, 774, (1973)
- /80/ D. Hadžiomerspahić, M. Platiša, N. Konjević, M. Popović, Z. Physik, 262, 169, (1973)
- /81/ J. R. Roberts, K. L. Eckerle, Phys. Rev., 159, 104, (1967)
- /82/ N. Konjević, V. Mitrović, Lj. Ćirković, J. Labat, Fizika 2, 129, (1970)
- /83/ R. A. Day, H. R. Griem, Phys. Rev., 140, A 1129 (1965)
- /84/ H. F. Berg, W. Ervens, B. Furch, Z. Phys., 206, 309 (1967)
- /85/ N. Jalufka, J. Graig, Phys. Rev., A 1, 221, (1970)
- /86/ J. Chapelle, S. Sahal-Brechot, Astron. Astrophys., 6, 415 (1970)
- /87/ W. Jones, A. Sanchez, J. Greig, H. Griem, Phys. Rev., A 5, 2318, (1972)
- /88/ D. E. Roberts, A. J. Bannard, JQSRT, 12, 1205 (1972)
- /89/ N. Konjević, J. Purić, Lj. Ćirković, J. Labat, J. Phys. B, 3, 999 (1970)
- /90/ M. H. Miller, dissertation, University of Maryland, 1968
- /91/ J. Purić, S. Djeniže, J. Labat, Lj. Ćirković, Phys. Let., A 45, 97 (1973)
- /92/ N. Konjević, M. Platiša, J. Purić, J. Phys., B. 4, 1541 (1971)
- /93/ C. Popenoe, J. Shumaker, J. Res. Natl. Bur. Stand., 69, A 495 (1965)

- /94/ J. Chapelle, A. Cabannes, J. Blandin, C. R. H. Acad. Sci., B 266, 1513 (1968)
- /95/ W. Powell, dissertation, J. Hopkins University, 1966
- /96/ N. Jalufka, G. Oertel, G. Ofelt, Phys. Rev. Let., 16, 1073 (1966)
- /97/ A. Barnard, H. James, C. Neufeld, Can. J. Phys., 46, 1083 (1968)
- /98/ D. E. Roberts, J. Phys., B 1, 53 (1968)
- /99/ N. Konjević, J. Labat, Lj. Ćirković, J. Purić, Z. Phys., 235, 35 (1970)
- /100/ J. Purić, M. Platiša, N. Konjević, Z. Phys., 247, 216, (1971)
- /101/ M. Yamamoto, Phys. Rev., 146, 137, (1966)
- /102/ H. Kusch, H. Pritschow, Astron. Astrophys., 4, 31. (1970)
- /103/ J. Hildam, J. Cooper, Phys. Let., 36 A 153, (1971)
- /104/ R. Huhn, H. Kusch, Astron. Astrophys., 28, 159, (1973)
- /105/ J. Chapelle, A. Czernichowski, Acta Phys. Pol., 41, 753, (1972)
- /106/ J. Purić, S. Djeniže, J. Labat, Lj. Ćirković, Z. Phys., 267, 71, (1974)
- /107/ J. F. Baur, J. Cooper, Phys. Lett. A 54, 457, (1975)
- /108/ J. Purić, N. Konjević, M. Platiša, J. Labat, Phys. Let., A 37, 425 (1971)
- /109/ M. Platiša, M. Popović, N. Konjević, Astron. Astrophys., 45, 325, (1975)
- /110/ K. Murakava, M. Yamamoto, S. Hashimoto, Proc. VII ICPIG, Vol. II 594, Gradjevinska Knjiga, Beograd (1966)
- /111/ J. Chapelle, A. S. F. Cabanne, J. Blandin, JQSRT, 8, 1201, (1967)
- /112/ J. Chapelle, A. S. F. Cabanne, J. Blandin, C. R. H. Acad. Sci. Ser. B 264, 853, (1967)
- /113/ A. Tonjec, JQSRT, 12, 1713, (1972)

- /114/ S. Sahal-Brechot, *Astronomy and Astrophys.*, 2, 322, (1969)
- /115/ D.E. Roberts, *Astron. Astrophys.*, 6, 1, (1970)
- /116/ J. Davis, D.E. Roberts, *J. Phys. B* 1, 317, (1968)
D. Roberts, J. Davis, *J. Phys.*, *B* 1, 48, (1968)
- /117/ N. Konjević, M. Platiša, M. Popović, *Z. Phys.*, 257, 235, (1972)
- /118/ M. Platiša, M. Popović, M. Dimitrijević, N. Konjević, *Proc. VII SPIG*, 245, Rovinj, (1974)
- /119/ M. Platiša, M. Popović, M. Dimitrijević, N. Konjević, *Z. Naturforsch.* 30a, 212, (1975)
- /120/ M. Platiša, M. Dimitrijević, M. Popović, N. Konjević, biće štampano u *Astron. Astrophys.*
- /121/ D.E. Roberts, J. Davis, *Phys. Lett.* 25, 175, (1967)