

УНИВЕРЗИТЕТ У БЕОГРАДУ

МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ИНСТИТУТ ЗА АСТРОНОМИЈУ

ЛУКА Ч. ПОПОВИЋ

**ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА ЈОНА ТЕШКИХ ЕЛЕМЕНАТА
У СПЕКТРИМА ТОПЛИХ ЗВЕЗДА (СТЗ)**

– ДОКТОРСКА ДИСЕРТАЦИЈА –

БЕОГРАД, 1994

Овај рад је урађен на Астрономској опсерваторији у Београду под руководством Др Милана Димитријевића, коме се најискреније захваљујем на помоћи око избора теме и свестраној подршци током рада на тези.

Користим прилику да се захвалим свим колегама који су ми помогли да успешно завршим овај рад. Посебно се захваљујем Проф. Др Винце Иштвану и Проф. Др Ђениже Стеви на стручној и моралној подршци.

Лука Ч. Поповић

САДРЖАЈ

УВОД	5
1. ЗАСТУПЉЕНОСТ ТЕЖИХ ЕЛЕМЕНАТА У АТМОСФЕРАМА ТОПЛИХ ЗВЕЗДА И ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ	9
Звезде са аномалном заступљеношћу тешких елемената (СР звезде).....	10
"Нормалне" А, В, Ве и О звезде	14
1.1 Пример доприноса Штарковог ширења укупној полуширини линије у СТЗ.....	15
2. ШИРЕЊЕ И ОБЛИК СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА У ПЛАЗМИ	19
Енергетски спектар и расподела интензитета по учестаностима	19
ПРИРОДНО ШИРЕЊЕ	21
ДОПЛЕРОВО ШИРЕЊЕ	23
Конволуција Лоренцове и Гаусове расподеле, Фојтов профил	25
ШИРЕЊЕ УСЛЕД ПРИТИСКА	25
Сударна и квазистатичка апроксимација. Неки приступи теорији сударног ширења	26
Класични приступ. Вајскопфова апроксимација	27
Усавшавање Класичне теорије. Линдхолмова апроксимација	29
Резонантно, квадратно Штарково и ван дер Валсово ширење по Линдхолмовој теорији	30
Резонантно ширење ($k = 3$)	30
Квадратни Штарков ефекат ($k = 4$)	31
Ван дер Валсово ширење ($k = 6$)	31
2.1 КВАНТНОМЕХАНИЧКИ ПРИСТУП. БАРАНЖЕРОВА ТЕОРИЈА. ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ	33
Основе Баранжерове теорије	33
Облик спектралне линије. Случај једног пертурбованог нивоа	34
Ширина и померај изоловане линије	37

Теорија Грима, Баранжера, Колба и Ертела (ГВКО)	38
2.2.1 Примена ГВКО теорије. Упрошћене формуле за израчунавање Штарковог ширења неутрала	42
2.3 ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ ИЗОЛОВАНИХ ЈОНСКИХ ЛИНИЈА	45
Ширине изолованих јонских линија услед судара са електронима. Гримов семиемпиријски приступ	45
2.3.1 Модификована семиемпиријска формула	49
3. АТОМСКИ МАТРИЧНИ ЕЛЕМЕНТИ	53
LS и jj веза. Критеријуми примењивости LS везе код спектра комплексних емитера	54
Бејтс Дамгардова апроксимација	56
Случај енергијских нивоа са $n > 20$	58
Фактори линије и мултиплета	60
Фактори линије. Формула и конкретни примери	61
Фактори мултиплета. Формуле и примери	62
Прелази типа $I\ell - I\ell'$	62
Тип прелаза $\ell^k - \ell^{k-1}\ell'$	66
Прелази типа $Is^2 - Isp$	66
Прелази типа $\ell^{k-1}s^2 - \ell^k s$	67
Прелази типа $\ell^k s - \ell^{k-1}\ell' s$	67
Прелази типа $\ell^{k-1}s\ell' - \ell^k s$	68
Прелази типа $\ell^k \ell' \ell'' - \ell^k \ell' \ell''^2$ и $\ell^k \ell'' \ell' - \ell^k \ell' \ell''^2$	68
Правила сумирања	69
3.1 Случај малих одступања од LS везе. Апроксимација мешања конфигурација	69
Ландеово правило интервала	70
Међувеза	71
Процена мешања конфигурација. Конкретни примери	72
Процена мешања конфигурација. Један нови метод процене	73
Апроксимација jj везе	76
Спин—орбитална и електростатичка интеракција у случају jj везе ...	77
$j\ell$ веза	77
4. ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ ЛИНИЈА ТЕШКИХ ЈОНА	79
4.1 Тестирање Гаунт фактора у близини прага за нееластичне сударе	79

4.2 Прорачун матричних елемената код комплексних емитера	81
Урачунавање нивоа са $n \neq n'$	88
Процена ширења услед судара са јонима	88
Урачунавање мешања конфигурација	90
5. РЕЗУЛТАТИ МОДИФИКОВАНОГ СЕМИЕМПИРИЈСКОГ ПРОРАЧУНА ЗА ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА ТЕШКИХ ЈОНА	95
<i>ZnII</i> и <i>CdII</i>	96
<i>Br II</i> и <i>I II</i>	100
<i>AsII</i> , <i>SbII</i> и <i>BiII</i>	104
ЗАКЉУЧАК	115
ЛИТЕРАТУРА	117
ДОДАТАК – Опис програма LFMSE	123

УВОД

У спектрима звезда, поред континуума, могу се уочити емисионе и/или апсорпционе спектралне линије. Спектралне линије настају при прелазу из једног у друго квантно стање емитера, односно апсорбера. Разноврсност атома и јона у звезданим спектрима, и различитост прелаза, доводе до тога да у природи немамо идентичан спектар две звезде (или генерално два објекта). Као пример те разноврсности може послужити, и нама најближа звезда, Сунце (види нпр. Moore *et al.* 1966, Voyer *et al.* 1975). У спектру једне звезде може се уочити да се спектралне линије веома разликују једна од друге по интензитету и по облику профила. Анализа спектралних линија може пружити велики број информација о промени физичких параметар са променом дубине атмосфере, стога спектралне линије представљају важно дијагностичко средство при проучавању звезданих атмосфера (види нпр. Гурзадян 1984).

Облик профила спектралних линија (види поглавље II) може бити веома комплексан, у зависности од карактеристика плазме из које потиче зрачење. Централни део спектралне линије је увек подложен већој апсорпцији него крила, зато што је прозачност у централном делу мања него у крилима. То пружа могућност изучавања дебљег слоја атмосфере. Централни делови линије више говоре о горњим слојевима атмосфере, док крила носе информацију о дубљим слојевима. Често се крила линије из тог разлога стапају са континуумом који потиче из најдубљих делова атмосфере. У атмосфери су присутни и други физички процеси, везани за кретање емитера, његове интеракције са другим конституентима итд., што такође има утицаја на облик профила спектралне линије. С друге стране интензитет апсорпционе или емисионе линије говори о броју апсорбера или емитера у правцу посматрања, а самим тим и о врсти и количини хемијских елемената у атмосфери звезде. Одговарајућом интерпретацијом линијског спектра може се извести хемијска анализа материје која сачињава звезду. Поред осталог, овај податак служи за боље одређивање еволуције звезда, а и целог космоса.

Код проучавања спектралних линија у спектрима звезда задатак теоретичара је да конструишу модел који може интерпретирати облик профила, померај и интензитет спектралне линије, тако да се из посматрања могу добити жељене информације. Теоријски рачун спектралних линија мора садржати четири веома битна елемента (види нпр. Михалас 1982):

1. Рачунање профила линије, што подразумева урачунавање свих ефеката који могу да утичу на профил спектралне линије.

2. Рачун интеракције фотона и материје, који узима у обзир расејање фотона. У општем случају је веома сложен. У рачун се морају узети у обзир брзине радијативних и сударних прелаза између нивоа који учествују у прелазу, а такође и утицај других нивоа.
3. Рачунање функције прерасподеле фотона и утицај процеса расејања на профил линије.
4. Решавање задатка преноса зрачења.

Овај рад представља допринос углавном првом од четири елемента теоријског разматрања профила спектралних линија из спектра звезданих атмосфера, ограничен на испитивање утицаја електронских судара на ширење спектралних линија комплексних јонизованих емитера у спектрима топлих звезда (СТЗ), односно звезда раних спектралних класа. Ефекти електронских судара су посебно интересантни после лансирања сателита (нпр. IUE, EUVE, HST, итд.) у чијим програмима је предвиђено снимање UV, видљивог и IC спектра разних објеката (види нпр. Neap *et al.* 1978, Bowyer & Malina 1990). Тако је астрономима доступна велика база података спектра звезда раних спектралних класа. При идентификацији спектралних линија, у спектрима топлих звезда (Fuhrmann 1989, Danezis & Theodossiou 1990, Danezis *et al.* 1991,) уочава се велики број спектралних линија комплексних јонизованих емитера. Нпр. код неких CP звезда примећена је аномална заступљеност тешких елемената (види нпр. Sadakane *et al.* 1988 (Zn), Jacobs & Dvoretzky 1982 (Bi), итд.).

У спектрима звезда раних спектралних класа (O, B, A0), од свих сударних ефеката, најзначајнији допринос у ширењу спектралних линија дају судари са електронима и протонима. Анализа спектралних линија водоника код O и B звезда (Копылов 1956, Боярчук 1957, Underhill 1966) указују да је Штарков ефекат доминантнији него Доплеров, изузев самог централног дела линије где је, као последице брзе ротације звезде (Боярчук 1957), утицај Доплеровог ефекта већи. Тако је за теоријско проучавање спектралних линија из СТЗ потребно обрачунати утицај електронских судара на померај и ширину спектралне линије (види нпр. Михалас 1982, Underhill 1966). За велики број водоникових и хелијумових линија овај утицај је обрачунат и утабличен (види нпр. Foster & Douglas 1939, Griem 1974, Dimitrijević & Sahal-Bréchet 1990, Stehlé 1990 итд.). За атоме и јоне тешких елемената постоје прорачуни и мерења за одређени број линија (види нпр. Griem 1974, Dimitrijević & Konjević 1983, Dimitrijević 1993, итд.), а често се дешава да за спектралне линије које је у датом моменуту потребно обрадити овај прорачун не постоји. Стога је интересантно испитати могућности једноставнијег модификовано семиемпиријског приступа за случај тешких јонизованих емитера, који не захтева познавање великог броја атомских параметара, а при томе (видећемо у 4. поглављу) даје солидне резултате.

Циљ овог рада је да модификовано семиемпиријски прилаз (Dimitrijević & Konjević 1980) који се увелико примењује за истраживање СТЗ (види нпр. Lennon *et al.* 1981, Adelman & Lanz 1987, Seaton 1987, Iglesias *et al.* 1990, итд.) прошири на случај Штарковог ширења линија јона тешких елемената.

Проучавање спектралних линија тешких јона је од посебног значаја за моделирање атмосфера топлих звезда и звездане унутрашњости као и процеса сегрегације елемената у звездама.

Велики број спектралних линија тешких елемената је примећен у спектрима CP (Chemically Peculiar) звезда. Као што је већ речено судари електрона са емитерима, и њихов утицај на облик спектралне линије је интересантан код топлих звезда (Dimitrijević 1989), стога у првом поглављу више пажње посвећујемо оним типовима топлих звезда код којих је овај ефекат значајан, као што су CP звезде.

У другом поглављу се разматрају различити ефекти који могу утицати на облик спектралне линије, са посебним освртом на теорију Штарковог ширења. Овде је више пажње посвећено семиемпиријском и модификованом семиемпиријском (MSE) прилазу за прорачун Штаркових полуширина и помераја.

У трећем поглављу се разматрају разни типови веза (LS , jj , lk), са посебним освртом на примењивост LS везе код комплексних емитера и могућност израчунавања одступање од LS везе. Разматрају се утицај мешања конфигурација и утицај одступања од Бејтс—Дамгардове апроксимације код израчунавања јачина осцилатора.

У четвртом и петом поглављу се дају резултати истраживања, заједно са резултатима прорачуна за седам једанпут јонизованих тешких елемената (укупно 86 прелаза у мултиплету, односно у линији). Прорачуни Штаркове ширине и помераја су упоређени са експерименталним резултатима (за укупно 31 спектралну линију). У овом поглављу је дат осврт на примењивост MSE прорачуна при рачунању Штарковог ширења спектралних линија јона тешких елемената.

У додатку је дат опис програма који је направљен и коришћен за испитивање могућности MSE приступа за рачунање Штарковог ширења спектралних линија тешких јона.

1. ЗАСТУПЉЕНОСТ ТЕШКИХ ЕЛЕМЕНАТА У ЗВЕЗДАНИМ АТМОСФЕРАМА И ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ

Релативни физички параметри звездане плазме могу се дискутовати на основу положаја звезде на H-R дијаграму. Посматрајући H-R дијаграм, уочавамо звезде различитих спектралних класа. Различитост у ефективnoj температури, односно луминозности, указује и на различите параметре који карактеришу звездану плазму. Наш интерес је да од тих звезда, издвојимо оне у чијим спектрима су приметне линије тешких елемената, а из те групе да издвојимо оне звезде код којих су услови такви да је утицај Штарковог ширења значајан (под тим се подразумева да је у условима под којима настају линије Штаркова ширина већа од природне ширине). У вези са тим треба приметити да:

- постоје звезде са аномалном заступљеношћу тешких елемената (као код неких CP звезде), мисли се на звезде код којих је заступљеност тешких елемената према заступљености водоника много већа него код "обичних" звезда те спектралне класе. Од тих звезда треба одабрати оне код којих Штарков ефекат значајно доприноси ширењу линије,
- у спектрима "нормалних" звезда уочене су спектралне линије тешких елемената. При томе треба одабрати оне код којих се може очекивати, према постојећим моделима (Kugucz 1979), значајан утицај Штарковог ефекта,
- пажњу треба обратити на UV спектралне линије тешких јонизованих емитера, зато што се те линије у највећем броју случајева формирају у топлој плазми са великим степеном јонизације. Велики број UV линија јонизованих емитера је посматран код топлих звезда спектралних класа O, B и A0, и углавном потичу из фотосферског или прелазног слоја.

Имајући то у виду, у даљем тексту осврнућемо се на звезде са аномалном заступљеношћу тешких елемената и "нормалне" O, B, Be и A0 звезде, код којих су уочене линије тешких елемената, а где је Штарков ефекат најзначајнији од свих сударних ефеката (Dimitrijević 1989). Овде треба напоменути да Штарков ефекат може бити доминантан и у неким случајевима код хладнијих звезда, посебно кад се ради о прелазима са великим главним квантним бројем (Vince *et al.* 1985).

Звезде са аномалном заступљеношћу тешких елемената (CP звезде).

Пре него што издвојимо типове звезда у чијим спектрима су регистроване јаке линије комплексних емитера, подсетимо се да звезда зрачи зато што је загрејана енергијом која се производи у језгру. Од могућих процеса стварања енергије у звездама најзанчајнији су термонуклеарни процеси-реакције (TNR) и гравитационо сажимање које у ствари и јесте покретач TNR у средишњим деловима звезде.

С друге стране, водоник је најзаступљенији елемент у васиони, па је стога он примарно гориво у звездама. Термонуклеарним реакцијама (фузијом) у унутрашњости звезде долази до стварања тешких елемената. Сценарио TNR иде тако да се у прво време дешава протон – протон реакција (p – p циклус), тј. гориво је водоник, долази до продукције хелијумовог језгра (α честице). Даље реакције могу тећи нпр. у следећем смеру; фузијом језгра хелијума ($\text{He}^3 + \text{He}^4 \rightarrow \text{Be}^8 + \epsilon$ или $\text{He}^3 + \text{He}^4 \rightarrow \text{Be}^7 + \gamma$) настаје берилијум. Берилијум у реакцији са бета честицом продукује литијум ($\text{Be}^7 + \beta^- \rightarrow \text{Li}^7 + \mu$), итд. (Марџинов 1971). Може се рећи да је највећи број тешких елемента у космосу углавном настао у оваквим TNR.

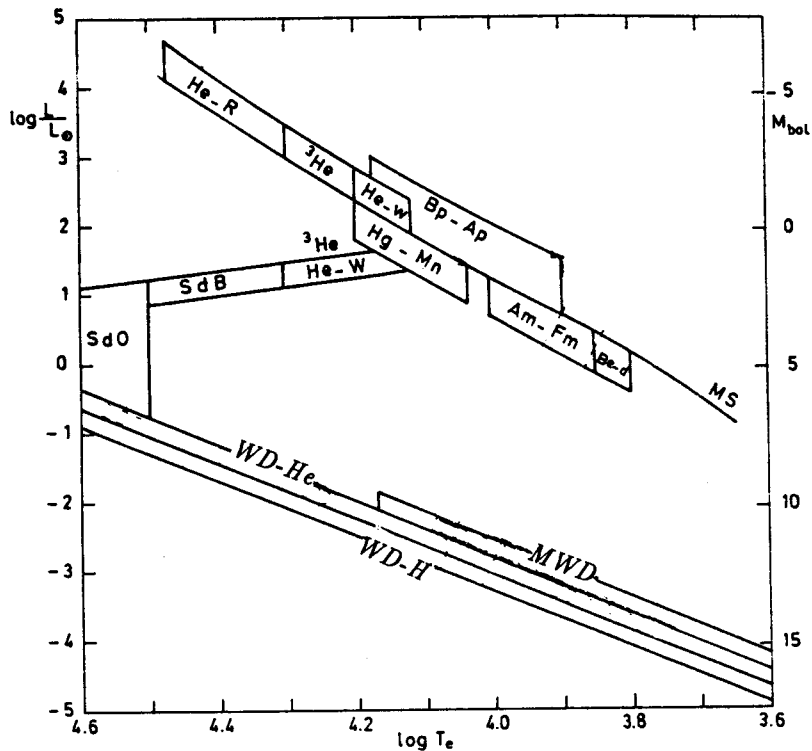
Стога треба разликовати звезде I и звезде II генерације. Звезде II генерације су састављене од материје која је већ једном била у стању звездане плазме. Код њих је присутан велики број линија тешких елемената. Посебно је потребно из ове класе издвојити звезде са особеним спектрима (CP звезде), које имају аномалну заступљеност тешких елемената.

Са H–R дијаграма видимо да већина CP звезда припада класи топлих звезда $T \geq 10000$ K (види сл. 1.1). На главном низу H–R дијаграма с десна на лево налазе се:

- Be-d, ефективне температуре од 6800 K до 7400 K (Boesgaard 1976), припадају спектралној класи F. У њиховим спектрима су приметне јаке линије тешких елемената (Y, Zr, La, Nd, итд., видети нпр. Зач и др. 1991).
- Am-Fm, то су звезде са јаким линијама метала у спектру. Ове звезде би се могле дефинисати као звезде код којих је мала заступљеност калцијума (и/или скандијума), а велика заступљеност гвожђа и тешких елемената. Смештене су на главном низу H–R дијаграма у температурском интервалу 7000 – 10 200 K (Smith 1973, 1974). Ознаке A и F говоре о спектралној класи звезда, док ознаке m говори да су звезде са јаким линијама метала. Негде око 15% свих звезда између класа A5–F6 сјајније од 5^m припада овом типу звезда (Кузнецова 1961).
- Hg-Mn звезде имају ефективну температуру у интервалу 11 000 - 16000 K (Wolff & Wolff 1976, Wolff & Preston 1978)*, при чему звезде са малом

* У литератури се може наћи да се овај тип звезда налази у температурском интервалу 9500–16000 K (Клочкова и Копылов 1986)

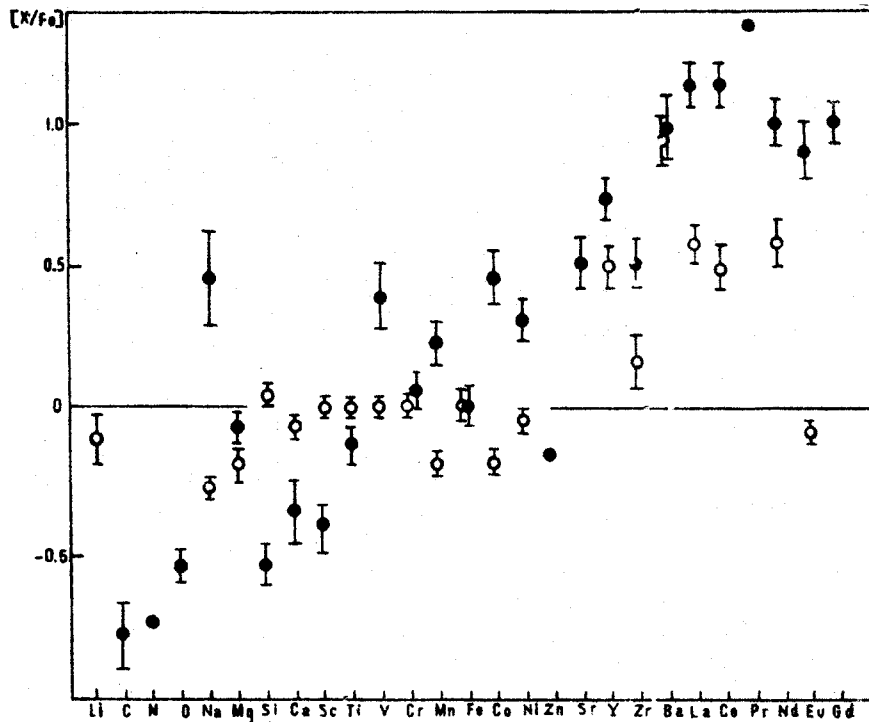
заступљеношћу хелијума (Helium-weak Stars, He-w) преклапају са њима у температурском интервалу 13000 - 16000 K (Hartoog & Cowley 1979). И Hg-Mn звезде су веома сиромашне хелијумом, стога значајних разлика између ова два типа у неким случајевима може бити занемарљива (Vauclair & Vauclair 1982). Код ових звезда увек је присутна веома јака линија јонизоване живе $\lambda = 398.4$ nm. Уочљиве су и друге линије атома и јона живе (Hg) и мангана (Mn), али и линије других тешких елемената. На пример, у UV делу спекта код HR7775 присутне су веома јаке резонантне линије јонизованог бизмута, Bi II, (Jacobs & Dworetzky 1982), или линије Zn II (Sadakane *et al.* 1988), галијума Ga II, Ga III (Takada-Hidai *et al.* 1986, Jacobs & Dworetzky 1981), итд., (види слику 1.3.)



Сл. 1.1. H-R дијаграм CP звезда. На дијаграму је на апсцисној оси нанесен логаритам температуре, а на ординати луминозност и апсолутна болометријска звездана величина. Ознака MS представља главни низ H-R дијаграма, SdO, SdB су субпатуљци, а WD низ патуљастих звезда (види нпр. Popović *et al.* 1993a). Детаљнији опис су дати у тексту.

- Вр-Ар звезде, (понегде у литератури називају их само Ар звездама), карактеришу веома јаке линије Si, Cr, Sr, Eu и других елемената ретких земаља. Код ових звезда је уочљива промена интензитета спектралних линија у зав-

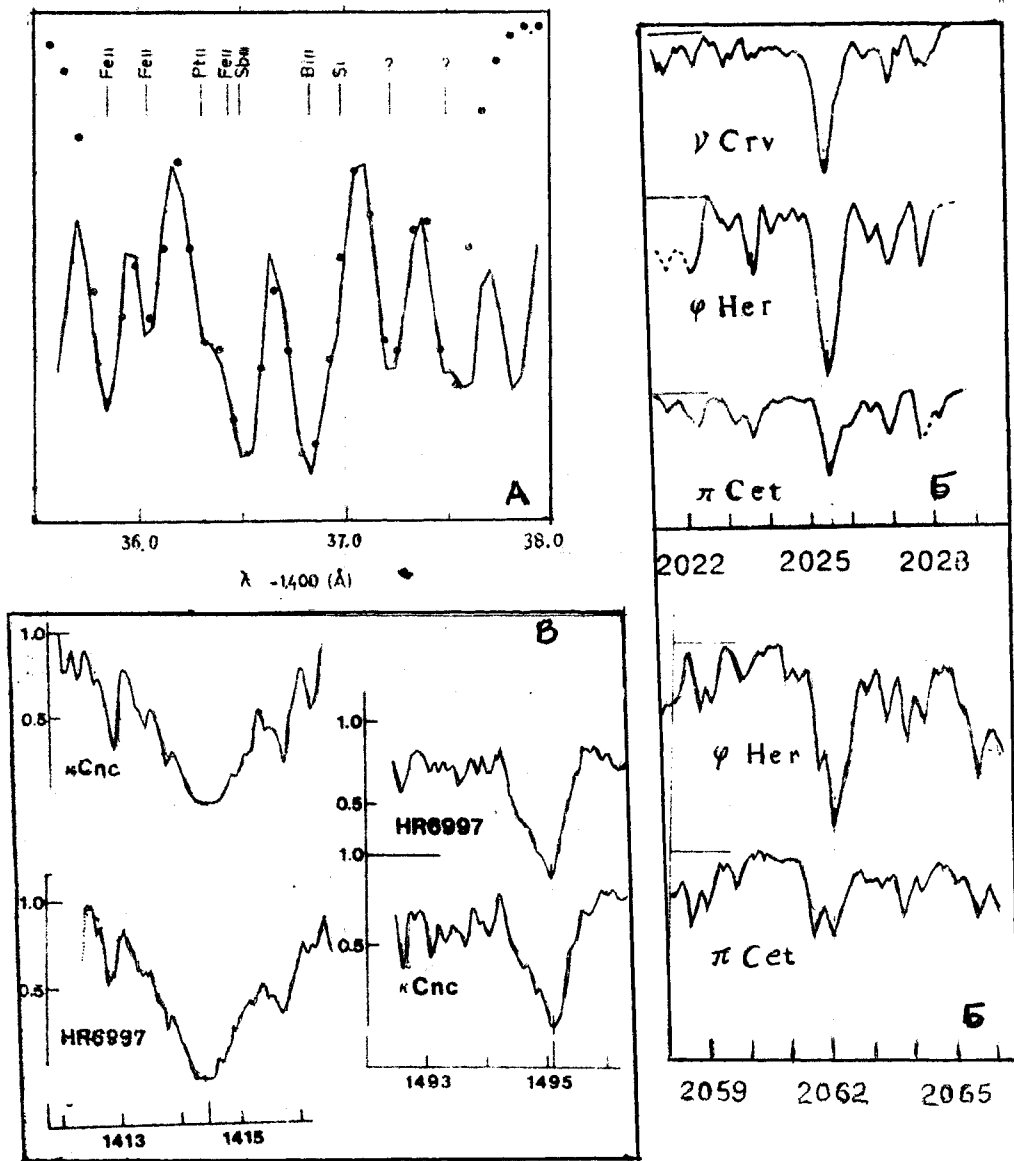
исности од времена. Ова група звезда лежи на главном низу Н-Р дијаграма од касне В до касне А спектралне класе, тј. у температурском интервалу $T_{\text{eff}} = 8000 - 15000$ К. Негде од 5% до 10% свих звезда које су између касне В и ране А спектралне класе припада овом типу звезда (Wolff 1983). Једна од карактеристика је и да су то звезде са јаким магнетним пољима.



Сл. 1.2. Средње одступање хемиског састава Am (●) и баријевих (○) звезда од Сунчевог хемиског састава. Показане су средње грешке (према Зач и др. 1991)

- И на крају, најтоплије звезде са особеним спектрима главног низа Н-Р дијаграма су звезде са slabим линијама хелијума, али са великим односом $^3\text{He}/^4\text{He}$ (^3He). Оне се налазе у температурском интервалу од 16 000 до 20 000 К (Vauclair & Vauclair 1982). Поред њих су и звезде са великом заступљеношћу хелијума (He-R, Helium Rich Stars) које имају температуру од 20 000 до 30 000 К (Osmer & Peterson 1974, Hartoog & Cowley 1979).

Групу звезда са аномалном заступљеношћу тешких елемената чине субпатуљци спектралног типа О (SdO) и В (SdB). Поред спектралне класе, разлика између ова два типа субпатуљака је и у томе што су SdO богати, а SdB сиромашни хелијумом (Greenstein & Sargent 1974). У низу субпатуљака налазе се и групе звезда He - W и ^3He (види Сл. 1.1).



Сл. 1.3. Спектралне линије тешких елемената у спектрима Hg – Mn звезда;
 а) спектар HR7775 у околини спектралне линије Bi II $\lambda = 143.68$ nm ($6p^2 \ ^2P - 7s^2P^0$), видљиве су линије јонизованог гвожђа, антимона (Jacobs & Dworetsky 1982)

б) резонантне спектралне линије Zn II $\lambda = 202.5$ nm ($4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{3/2}$) и $\lambda = 206.2$ nm ($4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2}$) у неколико Hg-Mn звезда (Sadokane et al. 1988).

в) резонантне линије Ga II и Ga III у спектру неколико Hg-Mn звезда (Takada – Hidai et al. 1986).

Трећа група CP звезда су патуљци (WD на Сл. 1.1), коју чини група патуљака WD-He са јаким линијама He II у спектру и WD-H са јаким водоничним линијама ($11000 < T_{\text{eff}} < 40000$ K) и хладнији патуљци MWD ($T_{\text{eff}} < 11000$ K) са линијама метала у спектрима. У овој групи, код хладнијих ($T_{\text{eff}} < 10000$ K) патуљака приметне су линије молекула угљеника (Liebert 1980).

”Нормалне” А, В, Ве и О звезде

Звезде спектралне класе А су масивне звезде (типична маса A_0 је око $2.5 M_{\odot}$) од којих велики број спада у ред звезда са особеним спектрима. Класификација ових звезда је доста проблематична пошто су балмерове линије и калцијумова (*Ca II*, $\lambda = 3933 \text{ \AA}$) или доста јаке или веома слабе. Иначе у спектрима ”нормалних” А звезда присутне су линије тешких једанпут јонизованих емитера, као нпр. у спектру Сиријуса линије *Cd II* (Sadakane 1991) или нпр. *Fe II*, *Ti II* и *Mg II*, али и вишеструко наелектрисаних јона и неутралних емитера (Wolff 1983). Температура у фотосферском и прелазном слоју је таква да је водоник, иначе најзаступљенији елемент, у великом степену јонизован, стога концентрација слободних електрона достиже вредности до 10^{15} cm^{-3} , што доводи до тога да је утицај Штарковог ефекта најзначајнији од свих сударних ефеката.

У спектру звезда спектралне класе В доминирају спектралне линије хелијума, и балмерова серија водоника. То су топле и веома масивне звезде ефективне температуре од 10000 K до 30000 K и масе од 2 до 20 Сунчевих маса. Посебна категорија звезда овог спектралног типа су оне које у спектрима имају јаке емисионе линије.

Звезде класе В са емисионим спектралним линијама (Ве звезде) спадају у ред најинтересантнијих објеката наше Галаксије. Линије у спектрима ових звезда за кратко време (реда десетак година, а понекад и у много краћем времену) веома много мењају интензитет, положај (различити померај) и облик (Underhill 1966). Примећене емисионе линије понекад потпуно исчезну из спектра звезда, да би се након одређеног временског интервала поново појавиле. То све говори о нестационарној природи атмосфера ових звезда.

Упоређујући спектре В и Ве звезда може се доћи до следећих закључака (Боярчук 1957)

1. В и Ве звезде одређене подкласе имају исту температуру и луминозност. По облику линија водоника из спектра ових звезда следује да звезде В и Ве имају приближно исту заступљеност водоника.
2. Основни механизам који утиче на облик профила линија водоника код Ве звезда је Штарков ефекат. Само је централни део водоникових линија у великој мери одређен Доплеровим ефектом услед ротације звезде.
3. Густина електрона у ротирајућем слоју Ве звезда не разликује се много од електронске концентрације у овом слоју В звезда. То произилази из

упоређивања контура водоничних линија, као и упоређивања броја видљивих балмеровских линија.

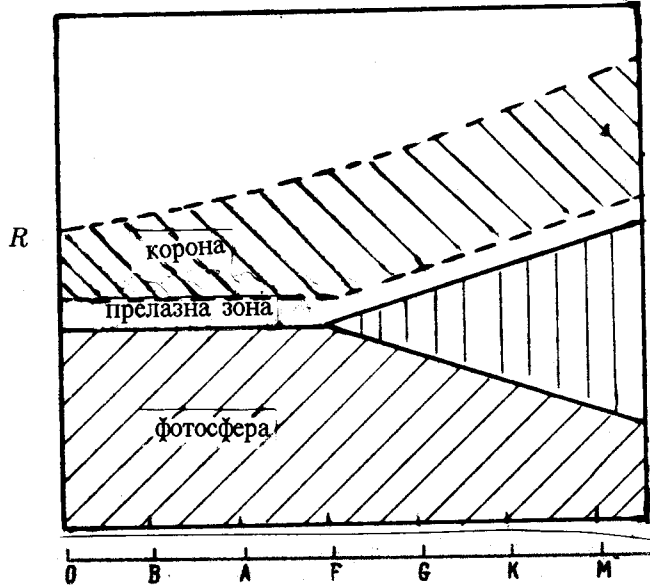
Анализа спектра Ве и В у UV области показују да су у спектрима ових звезда присутне линије тешких јона (Zn II, Fe II, Bi II, ... (Danezis & Theodossiou 1990). У спектрима Ве звезда се могу уочити линије вишеструко јонизованих елемената (N V, C IV, Si IV), али и линије једанпут јонизованих (C II), као и неутралних емитера (C I, N I) (Danezis *et al.* 1991), што указује на различите услове у којим се налазе емитери. У фотосферском и прелазном слоју, код ових звезда, услови су такви да је Штарков ефекат веома изражен.

Звезде спектралне класе О, заједно са Волф-Рајевим звездама су најтоплије и најмасивније звезде. У спектрима ових звезда приметне су јаке линије неутралног и јонизованог хелијума и водоника. Код неких звезда овог типа присутне су и јаке емисионе линије (оне су означене са додатком f или e) двапут јонизованог азота (најинтезивнија: $\lambda = 463.4 \text{ nm}$) и јонизованог хелијума. Анализа UV спектра неких звезда овог типа (види нпр. Laskarides *et al.* 1991) показују присуство јонизованих тешких елемената (Fe II, Cr II, Ni II, итд.) као и веома јаке линије вишеструко јонизованих C, N, O и линије трипут јонизованог силицијума. Линије јонизованих тешких емитера углавном потичу из фотосферског дела (Henrichs 1988, Laskarides *et al.* 1991), где је електронска концентрација таква да судари електрона и емитера имају значајну улогу у ширењу спектралне линије.

2.1. Примери доприноса Штарковог ширења укупној полуширини линије у СТЗ

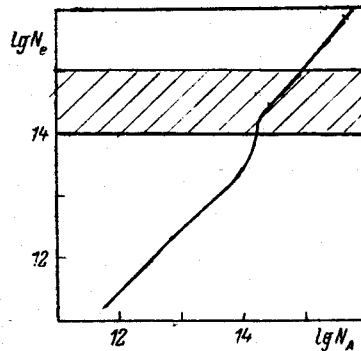
Структура атмосфера топлих звезда може се представити генерално као на сл. 1.4, где се виде три основна дела атмосфере: фотосфера, прелазна зона и корона. Код топлих звезда не постоји хромосфера, која је карактеристична за звезде хладније од F0 спектралне класе (Гурзадян 1984).

Од короне ка фотосфери број слободних електрона расте са дубином, то је илустровано на сл. 1.5, где је представљен однос између броја слободних електрона N_e и свих атома и јона N_A у стубу атмосфере пресека 1 cm^2 за модел звезде са ефективном температуром од 10000 K и гравитационим убрзањем $\log g = 3.5$ са саставом хемијских елемената као код Сунца (Kugucz 1979). Електронска концентрација у фотосферском делу атмосфере расте до вредности $10^{14} - 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ и у подфотосферским слојевима практично постаје једнака укупном броју јона и атома.



Сл 1.4. Квалитативна структура атмосфере звезде у зависности од спектралне класе.

Сл. 1.5. Однос између броја слободних електрона N_e и броја свих атома и јона у стубу атмосфере пресека 1 cm^2 за модел атмосфере с параметрима; $T_e = 10000 \text{ K}$ и $\log g = 3.5$. Хемијски састав је узет као код Сунца. Границе фотосфере означене су хоризонталним линијама.



Допринос Штарковог ширења код звезде са наведеним карактеристикама можемо показати на примеру прелаза из три мултиплета једанпут јонизованог антимоно (Sb II , $6s^3P_1^0 - 6p^3D_2$, $6s^3P_2^0 - 6p^3P_1$, $6s^3P_2^0 - 6p^3S_1$). Штаркове полуширине код ова три прелаза су упоређене са термалним Доплеровим полуширинама које по правилу имају доминантан утицај на укупну полуширину спектралних линија. При томе смо узели прорачун за линију формирану у фотосферском слоју, са електронском температуром од 10000 K и електронским концентрацијама од 10^{15} cm^{-3} . У табели 1.1 су дате вредности прорачуна Штаркове полуширине за електронску концентрације од 10^{15} cm^{-3} и одговарајуће термалне Доплерове полуширине. Са Сл. 1.6 се види да у неким случајевима, као што је код прелаза $6s^3P_2^0 - 6p^3P_1$, Штаркова полуширина може бити већа од Доплерове.

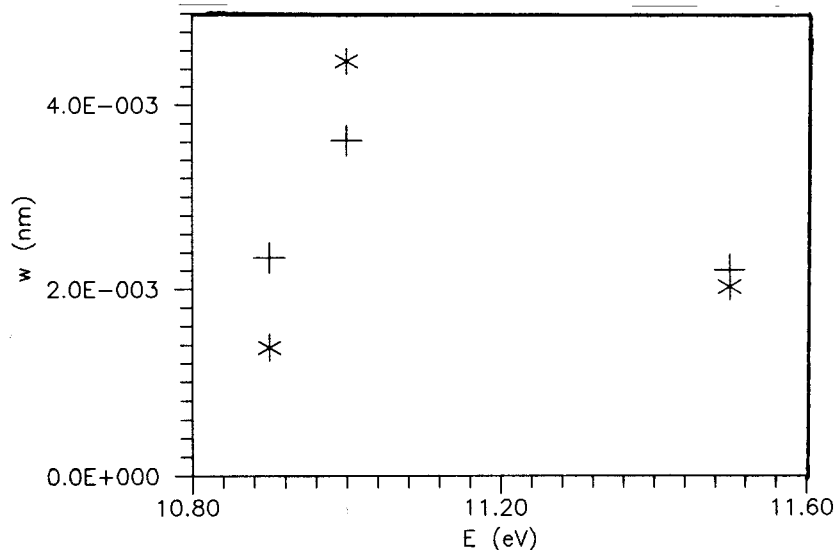
На основу овога и примера датих у Табели 1. 2. примећујемо да код

тешких јона Доплерова полуширина може бити реда величине или чак мање од Штаркове. То се може објаснити следећим:

- о тешки јони су мање покретљиви него атоми водоника. На пример, када би упоредили термално Доплерово ширење неке линије водоника и линије јонизованог антимиона које падају негде у близак интервал таласних дужина и које се формирају у истим условима, видели би да је Доплеров ефекат око десет пута мањи код линије *Sb II*, него код водоника.
- о Штарково ширење је углавном веће код спектралних линија кој настају у прелазима између нивоа чија је ексцитациона енергија већа. При прелазима са већим ефективним главним квантним бројем Штарков ефекат постаје израженији.

Табела 1.1 Поређење Штаркове w_{St} и Доплерове ширине w_{Dopp} за три мултиплета једанпут јонизованог антимиона при електронској концентрацији од 10^{15} cm^{-3} и електронској температури од $10\,000 \text{ K}$. Штаркова полуширина је рачуната по MSE (види поглавље 5.), а Доплерова из јед. (2.25) (види поглавље 2.).

Прелаз	w_{St} (nm)	w_{Dopp} (nm)
$6s^3P_1^0 - 6p^3D_2$ $\lambda = 600.5 \text{ nm}$.137E-02	.234E-02
$6s^3P_2^0 - 6p^3P_1$ $\lambda = 927.8 \text{ nm}$.448E-02	.361E-02
$6s^3P_2^0 - 6p^3S_1$ $\lambda = 564.1 \text{ nm}$.202E-02	.220E-02



Сл. 1.6. Штаркова (***) и Доплерова (+++) полуширина за три мултиплета *Sb II*. На апсциси је енергија горњег нивоа.

- линије тешких јона се углавном формирају у фотосферском или прелазном слоју атмосфере, тј. слојевима са великом електронском концентрацијом (види сл. 1.5), тако да ће Штарково ширење, које је пропорционално броју наелектрисаних пертурбера, бити овде израженије.

Табела 1.2. Исто као у Табели 1.1 само за неке линије ZnII, AsII, I II и BiII (Porović et al. 1993b).

Јон	λ (nm)	w_{St} (nm)	w_{Dopp} (nm)
<i>Zn II</i>			
$4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2}^0$	206.19	.434E-4	.110E-2
$4p^2P^0 - 4s^2^2D$	747.44	516E-3	.398E-2
<i>As II</i>			
$5s^3P_0^0 - 5p^3D_1$	549.92	.575E-3	.274E-2
$5s^3P_1^0 - 5p^3D_1$	562.21	.751E-3	.279E-2
$5s^3P_1^0 - 5p^3D_2$	555.96	.814E-3	.276E-2
<i>I II</i>			
$6s^5S^0 - 6p^5P$	532.63	.654E-3	.203E-2
$6s^3P^0 - 6p^3P$	562.21	.778E-3	.218E-2
<i>Bi II</i>			
$7s^3P_1^0 - 7p^3P_0$	571.9	.121E-2	.170E-2
$7s^3P_1^0 - 7p^3D_2$	520.9	.132E-2	.155E-2

2. ШИРЕЊЕ И ОБЛИК СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА У ПЛАЗМИ

У природи је немогуће добити идеално монохроматско зрачење, тј. ни у једном случају не може се говорити о једној вредности таласне дужине која одговара спектралној линији, већ о профилу спектралне линије са одређеном расподелом зрачења по учестаности (односно таласној дужини).

Облик спектралне линије зависи од тога у каквом се окружењу налази емитер, тј. од услова у плазми која зрачи. Поред тога, на облик и ширину спектралне линије могу утицати и други фактори, невезани за окружење емитера, већ као последица интеракција зрачења са средином кроз коју пролази. Зрачење носи низ информација о средини из које потиче, али и из средине кроз коју пролази.

Узроци који утичу на ширину спектралне линије могу се поделити на оне који зависе од окружења у ком се налази емитер (расподела електромагнетног поља, температура, концентрација итд.), затим ширење условљено самом природом зрачења и на одређене ефекте који су специфични за међузвездани и међугалактички простор као и структуре самих објеката*. У физици се често среће подела која узима прва два узрока ширења спектралних линија и то: *природно ширење* (условљено коначношћу средњег живота атома у побуђеном енергијском стању); *Доплерово ширење* и *ширење услед притиска*, тј. деловања других конституената плазме на емитер (зависи од услова у којем се налази емитер).

Као мера проширења линије услед поменутих ефеката најчешће се узима ширина (или полуширина) профила спектралне линије на половини максималне висине (види сл. 2. 1). Различити ефекти дају различиту расподелу интензитета.

Енергијски спектар и расподела интензитета по учестаности

Фуријеова трансформација $F(\omega)$ временски зависног процеса са учестаношћу ω , амплитуде $f(t)$ је

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(t)e^{-i\omega t} dt, \quad (2.1)$$

где је t време.

* Нпр. код великих структура у облику плазменог облака око активних галактичких језгара, иначе масивних објеката (као што су квазари, блазари, сејфертове галаксије), гравитациони ефекти могу да утичу на облик спектралне линије (Popović & Vince 1993, Popović et al. 1994)

Величина $E(\omega)$ дефинисана као

$$E(\omega) = \frac{1}{2\pi} F^*(\omega) \cdot F(\omega) \quad (2.2)$$

назива се енергијски спектар процеса, где је $F^*(\omega)$ коњуговано комплексна функција $F(\omega)$.

Интензитет у зависности од учестаности је

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \left| \int_{-T/2}^{-T/2} f(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2, \quad (2.3)$$

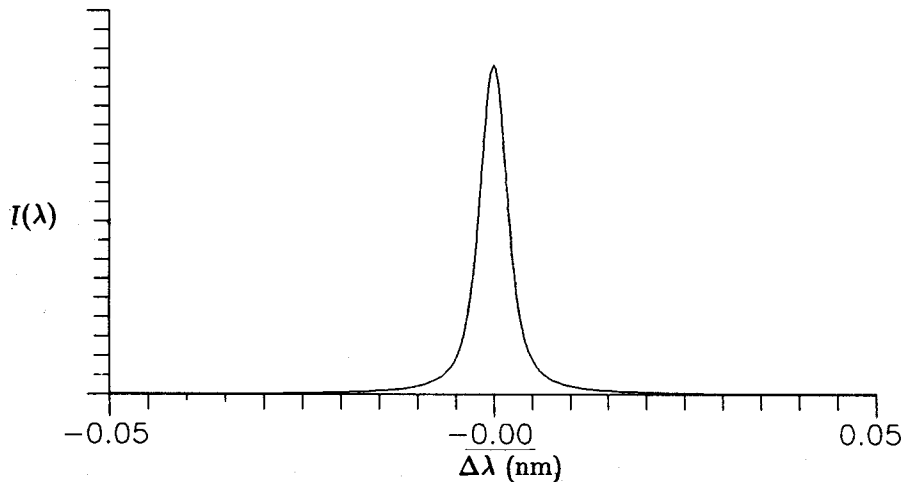
где је T период процеса. За налажење интензитета, у одређеним случајевима, користи се непосредно енергијски спектар, при чему се разматра ансамбл осцилатора са случајним фазама, који се појављују са константним периодом. У том случају се добије интензитет у зависности од ω који је пропорционалан енергијском спектру појединачних осцилатора.

Код неких случајева при налажењу расподеле интензитета у зависности од ω згодније је употребити аутокорелатиону функцију

$$\Phi(s) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f^*(t) \cdot f(t+s) dt, \quad (2.4)$$

где s има димензије времена, а $f^*(t)$ је коњуговано комплексна вредност амплитуде $f(t)$. Тада је

$$I(\omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(s) e^{-i\omega s} ds \quad (2.5)$$



Сл. 2. 1. Облик спектралне линије (Фоигов профил) $\text{Vi II } \lambda = 520.9 \text{ nm}$ ($7s^3P_1^0 - 7p^3D_2$). Прорачун је изведен за прозирну плазму, температуре $T = 10000 \text{ K}$ и електронску концентрацију $N = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ (видети Табелу 1.2).

Аутокорелациона функција представља моћно средство за израчунавање расподеле интензитета зрачења емитера пертурбованих у сударима.

Расподела интензитета у неком интервалу $\omega \pm \Delta\omega$ указује на облик спектралне линије. Контура спектралне линије се углавном може описати Гаусовом (Доплеров ефекат) или/и Лоренцовом расподелом (Природно ширење, ширење услед судара).

ПРИРОДНО ШИРЕЊЕ

Ово ширење се јавља као фундаментална особина емитера. Посматрајући емитер као линеарни хармонијски осцилатор (класични прилаз), претпоставимо да се он може наћи само у два стања: основном и побуђеном, које се од основног разликује за вредност енергије од $\omega_0\hbar$.

Једначина која описује промену амплитуде осциловања $A(t)$ побуђеног осцилатора је

$$\frac{dA(t)}{dt} + (i\omega_0 t + \frac{1}{2\tau})A(t) = 0. \quad (2.6)$$

Непосредно после побуђивања атома долази до пригушених осцилација чија амплитуда зависи од времена као:

$$A(t) = Ae^{-(i\omega_0 t + \frac{t}{2\tau})}. \quad (2.7)$$

Као последица осцилација наелектрисања долази до електромагнетног зрачења, чији интензитет I такође зависи од времена (тј. пропорционалан је квадрату апсолутне вредности амплитуде) као:

$$I(t) = I(0)e^{-\frac{t}{\tau}}. \quad (2.8)$$

Из релације (2.8) може се уочити да за време τ интензитет зрачења опадне e пута. Вредност τ одређује брзину процеса па се може интерпретирати као *средње време живота побуђеног стања*.

Једначина (2.6) описује осцилатор у одсуству спољашњих сила. Ако на осцилатор делује монохроматски светлосни талас фреквенције ω , у рачун се мора узети и хармонијска спољашња сила облика $F(t) = F_0 e^{-i\omega t}$ (F_0 —константа). У овом случају је облик амплитуде

$$A(t) = \frac{iF_0 e^{-i\omega t}}{(\omega - \omega_0) + \frac{i}{2\tau}}, \quad (2.9)$$

а интензитет

$$I(\omega) = I(\omega_0) \frac{(\frac{1}{2\tau})^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\frac{1}{2\tau})^2}. \quad (2.10)$$

Расподела интензитета зрачења по учестаности је Лоренцова.

Ширина на половини висине (полуширина) се добије из услова $I(\omega) = \frac{I(\omega_0)}{2}$, тако је

$$\omega = \omega_0 + \frac{1}{2\tau}. \quad (2.11)$$

Заменујући у (2.11) $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, добија се израз за полуширину

$$\Delta\omega = \frac{1}{2\tau}, \quad (2.12)$$

или у скали таласних дужина, добије се $\Delta\lambda = 1.2 \cdot 10^{-5}$ nm.

Квантномеханички израз за природну полуширину може се добити доста једноставним разматрањем преласка електрона из побуђеног у основно стање. У том случају вероватноћа прелаза је

$$P_k(t) = \psi_k^* \cdot \psi_k e^{-\Gamma_k t}, \quad (2.13)$$

где је $\Gamma_k = A_{kj}$ —вероватноћа спонтаног прелаза са нивоа k на ниво j . Таласна функција (ψ_k) може се представити као производ функције $u_k(\vec{r})$ непертурбованог стања k и еволуционог дела $\exp(-iE_k t/\hbar)$. У том случају временски зависна функција стања k је

$$\psi_k(\vec{r}, t) e^{-\Gamma_k t/2} = u_k(\vec{r}) e^{-(i\omega_k + \Gamma_k/2)t}, \quad (2.14)$$

где је \vec{r} вектор положаја оптичког електрона, а $\omega_k = E_k/\hbar$.

Према принципу неодређености стање k , нема тачно одређену енергију, већ је она неодређена око E_k на $\Delta E_k \approx \hbar/\Delta t$. Према јед. (2.3), расподела интензитета по таласним дужинама је

$$I(\omega) = I(\omega_0) \frac{\Gamma_k/2\pi^2}{(\omega - \omega_0)^2 + (\Gamma_k/2)^2}, \quad (2.15)$$

где је Γ_k једнако збиру вероватноћа прелаза са k — тог ниво на ниже нивое, тј.

$$\Gamma_k = \sum_{j < k} A_{kj}. \quad (2.16)$$

У случају кад и доњи ниво има дозвољен прелаз Γ_{ik} је

$$\Gamma_{ik} = \sum_{j < i} A_{ij} + \sum_{j < k} A_{kj}, \quad (2.17)$$

или уопштено за линију са горњим нивоом i и доњим f , одговарајућа полуширина w (Å) је дата (Peutremann 1972)

$$w = 2.65 \cdot 10^{-20} \lambda^2 \cdot \left\{ \sum_{i' (E_i' < E_i)} A_{ii'} + \sum_{f' (E_f' < E_f)} A_{ff'} \right\}, \quad (2.18)$$

где је λ таласна дужина у ангстремима, а $A_{ii'}$ и $A_{ff'}$ су одговарајуће вероватноће прелаза у s^{-1} .

За $E_j > E_{j'}$, вероватноћа прелаза дата је као (Griem 1974)

$$A_{jj'} = \left| \langle j' | \frac{\vec{r}}{a_0} | j \rangle \right|^2 \cdot \frac{\alpha^3}{3} \cdot \frac{E_H}{\hbar}, \quad (2.19)$$

где је $|\langle j' | \vec{r} | j \rangle|$ – матрични елемент, α – константа фине структуре, a_0 – Боров радијус, E_H – енергија јонизације водоника.

Заменујући јед. (2.19) у (2.18) и узимајући Кулонову апроксимацију за диполне прелазе (Bates & Damgaard 1949, види 3. поглавље), уз сређивање и рачунање константи може се добити једноставнији израз за рачунање природне полуширине

$$w = 6.35 \cdot 10^{-14} \lambda^2 \cdot \left\{ \sum_{E_{j'} < E_{j_i}} \mathfrak{R}_{J_i J_i'} + \sum_{E_{j'} < E_{j_f}} \mathfrak{R}_{J_f J_f'} \right\}, \quad (2.20)$$

где је

$$\mathfrak{R}_{J_k J_k'} = (E_{J_k} - E_{J_k'})^3 \cdot \left(\frac{n_{J_k}^*}{Z} \right)^2 \cdot \frac{\ell_{>}}{2J_k + 1} (n_{J_k}^{*2} - \ell_{>}^2) \varphi^2 R_{\text{line}}^2 R_{\text{mult.}}^2. \quad (2.20a)$$

У горњој једначини λ је таласна дужина у ангстремима, E_{J_k} , $E_{J_k'}$ (за $k = i, f$) – енергија горњег (у eV), односно доњег нивоа и нивоа $E_{J_i, j'} < E_{J_i, j}$ на које је са нивоа $E_{J_i, j}$ прелаз дозвољен, редом; i, f означавају почетни, односно крајњи ниво, J – пројекција угаоног момента, $\ell_{>} = \max(\ell_{J_k}, \ell_{J_k'})$ максимална вредност орбиталног квантног броја, $n_{J_k}^*$ – ефективни главни квантни број

$$n_{J_k}^* = Z \cdot \sqrt{\frac{E_H}{I - E_{J_k}}}, \quad (2.21)$$

Z је 1 за неутрале, 2 за једном јонизоване атоме, итд., I – енергија јонизације енергија посматраног мултиплета, E_{J_k} – енергија нивоа. φ – коефицијент табелисан у раду Бејтс–Дамгардове (Bates & Damgaard 1949), или у таблицама Ертела и Шома (Oertel & Shomo 1968), а R_{line} , $R_{\text{mult.}}$ су фактори линије и мултиплета дати у таблицама Шора и Мензела (Shore & Menzel 1965).

За случај када се емитер налази у пољу зрачења велике густине, на природну полуширину утичу и ефекти фото ексцитације (условљени апсорпцијом фотона $E_\phi = E_i - E_k$) и принудног зрачења. У том случају израз за збир вероватноћа прелаз са i -тог, односно k -тог нивоа постаје компликованији и може се записати у следећем облику (Грей 1980)

$$\Gamma'_{ik} = \Gamma_{ik} + \sum_{m < i} I_{ik} B_{im} + \sum_{n > i} I_{ik} B_{in} + \sum_{m < k} I_{ik} B_{km} + \sum_{n > k} I_{ik} B_{kn},$$

где је Γ_{ik} дато јед. (2.17), I_{ik} интензитет зрачења, B_{im}, B_{km} су Ајнштајнови коефицијенти фото десекцитације i -тог, односно k -тог нивоа, а B_{in}, B_{kn} су Ајнштајнови коефицијенти принудне ексцитације поменутих нивоа, редом.

ДОПЛЕРОВО ШИРЕЊЕ

При посматрању спектралне линије из спектра звезданих атмосфера (или лабораторијске плазме), уочава се њен облик, који представља суму зрачења

целога ансамбла емитера дуж правца посматрања. Сваки емитер се креће неком брзином, ова брзина има компоненту и дуж правца посматрања, тако да је сопствени профил емитера услед Доплеровог ефекта померен. Ово може довести до тога да је спектрална линија проширена (ако је присутно хаотично кретање емитера), асиметрична (ако је у одређеним местима извора зрачења присутно усмерено кретање - ерупције, звездани ветрови) и померена (ако је присутно усмерено кретање целог ансамбла емитера - ротација, удаљавање извора итд.). Према томе, Доплеров ефекат је последица кретања емитера у односу на посматрача, тј. детектор.

Израз за Доплерову ширину спектралне линије која потиче из плазме са LTR (локалном термодинамичком равнотежом) може се једноставно добити из следећег разматрања (Михалас 1982); претпоставимо да плазму посматрамо дуж x -осе, одговарајућа компонента брзине неког емитера врсте α је v_x^α . У случају LTR расподела по брзинама је Максвелова. Вероватноћа да један емитер врсте α има вредност посматране компоненте брзине термалног кретања између v_x и $v_x + dv_x$ је

$$\frac{dn_\alpha}{n_\alpha} = \frac{1}{\left(\frac{2kT_\alpha}{m_\alpha}\right)^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{v_x^2}{2\left(\frac{kT_\alpha}{m_\alpha}\right)}} dv_x, \quad (2.22)$$

где је T_α , m_α и n_α температура, маса и број честица редом, а k је Болцманова константа.

Пошто се емитери крећу ка или од посматрача брзином v_x таласну дужину емитованог зрачења (која би при мировању емитера износила λ_0) уочавамо у интервалу

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{v_x}{c} \lambda_0. \quad (2.23)$$

Ако се овај израз замени у (2.22), узимајући у обзир да је интензитет зрачења пропорционалан броју емитера dn_α , добије се израз за интензитет

$$I(\Delta\lambda) = \frac{1}{\Delta\lambda_D(\pi)^{\frac{1}{2}}} e^{-\left(\frac{\Delta\lambda}{\Delta\lambda_D}\right)^2}. \quad (2.24)$$

Из горње релације може се уочити да је расподела интензитета по таласним дужинама Гаусовог типа, за разлику од (2.15). Уколико се ради о термалном кретању емитера у случају LTR, полуширина спектралне линије проширена услед Доплеровог ефекта износи:

$$\Delta\lambda_D = 4.301 \cdot 10^{-7} \sqrt{\frac{T_\alpha(K)}{m_\alpha(a_j)}} \cdot \lambda_0. \quad (2.25)$$

Поред термалног кретања које доприноси ширењу линије, у звезданим атмосферама су присутна турбулентно и делимично сређена кретања у облику ерупција. Делимично сређено кретање емитера може утицати на симетрију профила спектралне линије. Такође, услед кретања целог ансамбла емитера (приближавању или удаљавању објекта) долази до Доплеровог помераја спектралне линије. У спектрима звезда сва три ефекта су присутна.

Из релације (2.23) се види да је ширење услед термалног Доплеровог ефекта пропорционално таласној дужини и квадратном корену температуре, а обрнуто пропорционално квадратном корену масе емитера, тако да ће код лакших емитера бити израженији него код тешких, ако се они налазе у плазми истих карактеристика.

Конволуција Лоренцове и Гаусове расподеле. Фојтов профил

Из напред изложеног следи да Доплеров ефекат даје Гаусову расподелу (јед. 2.24), а природно ширење даје Лоренцову расподелу зрачења (јед. 2.15). С друге стране сударно ширење у великом броју случајева даје Лоренцов профил. Зрачење у линији, које региструјемо има расподелу која представља конволуцију (ова математичка операција означава се са \oplus) ове две расподеле $I_V = I_L \oplus I_G$ за сваку вредност таласне дужине (учестаности). Конволуцијом ове две функције добијамо расподелу интензитета (Фојтову функцију) (Reichel 1968)

$$I_V(\omega) = I_{V0} \frac{w_L}{w_G \pi \sqrt{\pi}} \int \frac{e^{-x^2/w_D^2}}{w_L^2 + (\omega - x)^2} \cdot dx. \quad (2.26)$$

Као и Гаусова, односно Лоренцова тако је и Фојтова функција нормирана на јединицу, тј.

$$\int_{-\infty}^{\infty} V(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{I_V}{I_{V0}} d\omega = 1. \quad (2.27)$$

Ако уведемо смену $a = w_L/w_G$, $v = (\lambda - \lambda_0)/w_D$, можемо Фојтову функцију написати у следећем облику

$$V(a, v) = \frac{1}{w_D \sqrt{\pi}} H(a, v), \quad (2.28)$$

где је

$$H(a, v) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y^2}}{a^2 + (v - y)^2} dy. \quad (2.29)$$

Интеграл у јед. (2.29) није решив у експлицитном облику, али се може наћи у облику табеле (нпр. Finn and Mugglestone 1965).

ШИРЕЊЕ УСЛЕД ПРИТИСКА

За разлику од предходних ефеката, који доводе до ширења спектралне линије, ширење услед притиска зависи од концентрације пертурбера који интерагују са емитером, као и њихових особина (брзине кретања, наелектрисања, итд). Пертурбери различитих особина, различито утичу на емитер. У зависности од тога да ли су пертурбери ненаелектрисани, наелектрисани и да ли су то неутралне честице исте врсте као емитери, а осим тога постоји могућност за

дозвољени прелаз са горњег енергијског нивоа испитиване линије на основни ниво, разликујемо: *ширење неутрала* (*ван дер Валсово*), *Штарково ширење* и *резонантно ширење*.

Сударна и квазистатичка апроксимација.
Неки приступи теорији сударног ширења

Интеракција емитера са атомима, јонима и електронима утичу на ширину и облик спектралне линије. У различитим деловима линије, различит је допринос појединих врста интеракција. Код Штарковог ширења централном делу линије већи допринос дају судари са "брзим" наелектрисањима, док интеракција емитера са спорим наелектрисањима има већи утицај на крила спектралне линије, стога се израчунавање профила линије често врши у оквиру две апроксимације; *сударне* и *квазистатичке*.

У *сударној* апроксимацији се претпоставља да је време трајања судара пертурбера и емитера мало и тежи нули. Емисија се током судара може занемарити у односу на време значајно за формирање профила линије, тј. морају бити испуњени следећи услови (Sahal-Brechot & Segre 1971):

1. Ефективно време судара τ_s (трајање судара) мора бити много мање од средњег времена између два судара \bar{t} ,

$$\tau_s \ll \bar{t},$$

или другим речима судари су добро раздвојени у времену,

и

2. судари се морају завршити током емисије (апсорпције) фотона

$$\tau_s \cdot \Delta\omega' \ll 1,$$

где је $\Delta\omega'$ фреквентно растојање од разматране тачке у профилу до центра линије.

Као што је речено ова апроксимација важи за ширење линије изазвано сударима брзих честица—електрона, чији је допринос уочљив око центра спектралне линије, док на крила спектралне линије (где је обично већи утицај јона) ова апроксимација у већини случајева није применљива. У изузетним случајевима се може описати контура целе линије, ако је задовољен следећи услов (Griem 1974)

$$\left(\frac{\omega}{\bar{\nu}}\right) > \left(\frac{4\pi N_p}{3}\right)^{1/3},$$

где је ω —полуширина линије (у rad/s), N_p — концентрација пертурбера и $\bar{\nu}$ — средња брзина кретања пертурбера.

Овај услов је веома ретко испуњен за јоне. Стога се за обрачун утицаја Штарковг ширења у интеракцији са јонима узима *квазистатичка апроксимација*. У овој апроксимацији се претпоставља да су пертурбери непокретни (квазистационарни) и она важи ако је задовољен следећи услов:

$$\tau, w \gg 1,$$

где је τ ,—време судара, а w —ширина линије. Другим речима време судара између емитера и пертурбера је велико у односу на време битно за процесе ширења линије.

У квазистатичкој апроксимацији контура линије се јавља као резултат усредњених контура, израчунатих за све могуће расподеле растојања пертурбера. Проблем се своди на решавање три задатка:

- одређивање статистичке расподеле електричног микропоља $W(F)$
- решавање стационарне Шредингерове једначине за све емитере при заданој конфигурацији микропоља, и
- рачунање матричних елемената прелаза у непертурбованом систему.

У зависности на који начин разматрамо емитер и пертурбер (као класичне честице или квантне системе) у сударној апроксимацији су присутна три прилаза; *класични, квазикласични и квантномеханички.*

Класични прилаз, у сударној апроксимацији, се заснива на разматрању емитера као осцилатора, који мења фазу при судару са пертурберима (Greene 1961).

С друге стране у *семикласичној* апроксимацији емитер се разматра као квантни систем, при чему се претпоставља да је пертурбован класичним пертурбером (Griem 1974). У случају судара електрона са неутралним емитерима путања је праволинијска, а ако су емитери јони онда је, при сударима са наелектрисаним честицама, путања хиперболична.

Код *квантномеханичког* приступа и емитер и пертурбер се разматрају као јединствен квантномеханички систем (Baranger 1958abc).

Класични приступ. Вајскопфова апроксимација

Претпоставимо да се емитер судара истовремено само са једним пертурбером. Претпоставимо да је време судара веома кратко (скоро тренутно) и да између два судара нема пертурбована емитера. Нека је време између два суседна судара T и за то време емитер зрачи монохроматски талас $f(t) = \exp(i\omega_0 t)$. Фуријеова трансформација за тај случај је (види јед. 2.1)

$$F(\omega, T) = \int_0^T e^{i(\omega_0 - \omega)t} dt = \frac{\exp(i(\omega - \omega_0)T) - 1}{i(\omega - \omega_0)}. \quad (2.30)$$

Из овог није тешко помоћу релације (2.2) добити енергијски спектар.

Уопштено говорећи не постоји јединични интервал времена између два судара, него се може говорити о средњем времену међу сударима τ . Вероватноћа $W(T)$ да се судар догоди у интервалу времена $T, T + dT$ је

$$W(T)dT = \tau^{-1}e^{-T/\tau} dT, \quad (2.31)$$

Тако да је енергијски спектар усредњен по свим вредностима интервала између два судара

$$E(\omega) = \frac{1/\pi\tau}{(\omega - \omega_0)^2 + (1/\tau)^2}, \quad (2.32)$$

Горе изложена теорија ширења линије услед судара даје Лоренцов профил са параметром ширења $\Gamma = 2/\tau$, кога карактерише τ – средње време између судара.

Ако емитер и пертурбујућа честица имају масе m_E и m_P , при чему је расподела по брзинама Максвелова, онда је њихова међусобна релативна брзина

$$\bar{v} = const \cdot \sqrt{T \cdot \frac{m_E + m_P}{m_E m_P}}. \quad (2.33)$$

Ако је ефективно растојање између емитера и пертурбера ρ , онда је средње време између два судара

$$\tau = \frac{1}{\pi\rho^2 N\bar{v}}, \quad (2.34)$$

односно полуширина w_c

$$w_c = 2\pi\rho^2 N\bar{v}, \quad (2.35)$$

где је N концентрација пертурбера.

Вајскопф (Weisskopf 1932) претпоставља да је пертурбер класична честица, која се креће по праволинијској трајекторији. Он претпоставља да се интеракција између емитера и пертурбера може описати следећим потенцијалом

$$U_k = \frac{C_k}{r^k}, \quad (2.36)$$

где је C_k константа интеракције, а $r(t) = (\rho^2 + v^2 t^2)$ растојање између емитера и пертурбера, при чему време $t = 0$ одговара минималном растојању између емитера и пертурбера. У зависности од вредности коефицијента k , горња формула даје потенцијале за различите врсте интеракција; за $k = 2$ потенцијал линеарног Штарковог ефекта; за $k = 3$ потенцијал резонантног дејства (интеракција са пертурберима исте врсте, који имају дозвољен прелаз са горњег нивоа прелаза посматране линије на основни ниво); за $k = 4$ квадратни Штарков ефекат, а за $k = 6$ Ван дер Валсово дејство (атом А + атом В).

Константа C_k се рачуна или одређује експериментално. Фазни померај, изазван пертурбацијом је

$$\eta(t) = \int_{-\infty}^t \Delta\omega(t') dt' = C_k \int_{-\infty}^t \frac{dt'}{\sqrt{\rho^2 + v^2 t'^2}}. \quad (2.37)$$

Пуни фазни померај $\eta_\rho = \eta(t \rightarrow \infty)$ је

$$\eta_\rho = \frac{C_k \psi_k}{v \rho^{k-1}}, \quad (2.38)$$

где је за $k = 2, 3, 4, 6$ вредност коефицијента $\psi = \pi, 2, \pi/2, 3\pi/8$.

Ако претпоставимо да ширење линије узрокују судари који изазивају већи фазни померај од неког критичног η_0 , тада се добије полуширина као

$$w_c = 2\pi N v \left(\frac{C_k \psi_k}{\eta_0 v} \right)^{2/(k-1)}. \quad (2.39)$$

За критични фазни померај, Вајскопф је узео $\eta_0 = 1$, при томе горња релација даје Вајскопфову полуширину.

Ако је познато C_k , горе изложена теорија даје резултате који се слажу са мереним на до ред величине код неких прелаза у случају лакших елемената. Горе изложена теорија има следеће недостатке; за критични фазни померај узима се произвољна вредност која није изведена ни из каквог физичког разматрања, у обзир се не узимају судари са великим ρ (њихов број расте као ρ^2) и ова теорија не даје померај линије у зависности од судара (који иначе настаје претежно услед слабих судара).

Усавршавање класичне теорије. Линдхолмова апроксимација

Одређено побољшање класичне сударне теорије извели су Линдхолм (Lindholm, 1941;1945) и Фоли (Foley, 1946). У овој верзији класичне теорије полази се од тога да атом зрачи на учестаности $\omega(t)$ која се разликује од вредности ω_0 за $\Delta\omega(t)$. У том случају $f(t)$ је

$$f(t) = \exp[i\omega_0 t + i \int_{-\infty}^t \Delta\omega(t') dt'] = e^{i[\omega_0 t + \mu(t)]}, \quad (2.40)$$

где је $\mu(t)$ — фаза осцилатора. Да би добили профил линије, треба израчунати аутокорељациону функцију $\Phi(s)$. Помоћу јед. (2.4) и користећи помоћну функцију $\phi(s) = e^{-i\omega_0 s} \Phi(s)$, налазимо

$$\phi(s) = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} e^{i[\mu(t+s) - \mu(t)]} dt. \quad (2.41)$$

Из горње релације се види да је $\phi(s)$ допунски фазни померај усредњен по времену, који се дешава у интервалу времена дужине s . Ако је број судара са растојањем ρ , које се налази у интервалу $\rho, \rho + d\rho$ за време ds једнак $2\pi \rho d\rho N \bar{v} ds$, добије се

$$\Phi(s) = \langle e^{i\mu'} - 1 \rangle_T = \langle \dots \rangle_\rho = 2\pi N \bar{v} ds \int_0^\infty [e^{i\mu(\rho)} - 1] \rho d\rho, \quad (2.42)$$

где ознаке $\langle \dots \rangle_x$ значе усредњавање по параметру x , а $\mu' = \mu(t+s) - \mu(t)$. Аутокорељациона функција се једноставно добије из израза $(d\phi/\phi) = \Phi$.

Горњи израз може се написати у следећем облику

$$\Phi(s) = -N\bar{v}ds(\sigma_w - i\sigma_d), \quad (2.43)$$

а из тога израз за интензитет линије (користећи јед. 2.5)

$$I(\omega) = \frac{N\bar{v}\sigma_w/\pi}{(\omega - \omega_0 - N\bar{v}\sigma_d)^2 + (N\bar{v}\sigma_w)^2}, \quad (2.44)$$

где је

$$\sigma_w = 4\pi \int_0^\infty \sin^2[\mu(\rho)/2] \rho d\rho, \quad (2.45)$$

$$\sigma_d = 2\pi \int_0^\infty \sin[\mu(\rho)] \rho d\rho. \quad (2.45a)$$

Из јед. (2.44) следи да теорија Линдхолма даје за полуширину линије

$$w_c = 2N\bar{v}\sigma_w, \quad (2.46)$$

и за померај

$$d = N\bar{v}\sigma_d. \quad (2.47)$$

Резонантно, квадратно Штарково и Ван дер Валсово ширење по Линдхолмовој теорији

За астрофизичке проблеме, често се примењују Линдхолмова теорија за рачун полуширина линије за случај $k = 3, 4, 6$. По овој теорији однос w/d је константан, док по квантномеханичком рачуну добијамо благу зависност од концентрације пертурбера N и температуре T .

Резонантно ширење ($k = 3$)

Ово ширење се јавља код оних емитера чији доњи или горњи ниво посматраног прелаза има дозвољен диполни прелаз на основно стање, уколико је емитер окружен атомима исте врсте. Услед дипол-дипол интеракције долази до дегенерације нивоа, чији је крајњи резултат ширење спектралне линије.

У спектрима звезда ово ширење је интересантно код спектралних линија водоника (у међусобним сударима атома водоника), при томе атмосфера звезде мора бити довољно топла да би се могле посматрати балмеровске линије (побуђивање нивоа $n=2$), но и довољно хладна да водоник не би био у потпуности

јонизован, тј. овај ефекат је уочљив код звезда Сунчевог типа. Константа C_3 по Линдхолмовој теорији је (Breene, 1961)

$$C_3 = \frac{e^2 f_{i0}}{2m_e \omega_{i0}}, \quad (2.48)$$

а полуширина

$$w_3 = \frac{2\pi^2 N e^2 f_{i0}}{2m_e \omega_{i0}}, \quad (2.49)$$

где је f_{i0} јачина осцилатора за прелаз из посматраног нивоа у основно стање, N број пертурбера, m_e , e су маса и наелектрисање електрона, редом; $\omega_{i0} = (E_i - E_0)/\hbar$ учестаност која одговара прелазу са посматраног нивоа на основно стање. Резонантни ефекат је значајан за ниже линије у серији, где је Штарков ефекат доста мали и где је одговарајућа f_{i0} већа него за линије са већим главним квантним бројем. С обзиром на малу заступљеност тешких елемената у stelарној плазми (због мале концентрације пертурбера који испуњавају услов за резонантно ширење) можемо узети да је овај ефекат доста мали у односу на Штарков.

Квадратни Штарков ефекат ($\kappa=4$)

Квадратни Штарков ефекат има значајну улогу код сложенијих атома и јона. О Штарковом ефекту више ће бити речено у даљем тексту, но рецимо да се по Линдхолмовој теорији константа C_4 одређује експериментално из цепања линија у електричном пољу или теоријски. У случају квадратног Штарковог ефекта потенцијал интеракције се може написати као (Allard & Kielkopf 1982)

$$V(\vec{r}) = -\frac{\alpha}{2} \cdot |\vec{E}|^2,$$

где је \vec{E} вектор електричног поља пертурбера, а α ефективна поларизабилност и за i – то стање емитера се може написати као (Damburg & Geltman 1968)

$$\alpha = \frac{2}{3} \cdot \sum_k \frac{|\langle i|\vec{r}|k \rangle|^2}{E_k - E_i},$$

где је $\langle i|\vec{r}|k \rangle$ матрични елемент дозвољених диполних прелаза између i – тог и k – тог стања, а E_i и E_k су енергије тих стања, редом.

Ова теорија даје много мање полуширине спектралних линија него што је то случај у природи. Квантномеханички рачун даје много боље слагање са експериментом. О њему ће бити више речи у поглављу 2.1.

Ван дер Валсово ширење ($\kappa=6$)

Ово ширење се јавља као последица интеракције емитера са неутралима – атомима. Сила којом делује атом на емитер је кратकोдометна (опада у Ван дер Валсовој апроксимацији као r^{-6}). Енергијска разлика између два терма

је различита за различита растојања од пертурбера до емитера, стога емитоване линије имају различиту таласну дужину. Ако се узме средња вероватна вредност растојања између емитера и неутралног пертурбера (усредњавање се врши по вероватноћама свих могућих растојања између емитера и неутралног пертурбера) добија се проширена спектрална линија, док је максимум зрачења померен на ону таласну дужину која одговара највероватнијем растојању између емитера и пертурбера.

Узимајући Ван дер Валсову интеракцију у дипол-дипол апроксимацији (види јед. 2.36) добија се релација која може добро проценити укупну полу-полуширину w_6 у Å (Breene 1961).

$$w_6 = \frac{17\lambda^2}{2\pi c} \cdot C_6^{2/5} \bar{v}^{3/5} N, \quad (2.50)$$

и померај

$$d_6 = \frac{6.16\lambda^2}{2\pi c} C_6^{2/5} \bar{v}^{3/5} N, \quad (2.51)$$

где се ван дер Валсова константа C_6 може израчунати (Al-Saqabi and Peach, 1987)

$$C_6 = \alpha_d \cdot (\bar{R}_i^2 - \bar{R}_f^2) \quad (2.52)$$

где је α_d поларизибилност пертурбера, а \bar{R}^2 квадрат радијуса. У Кулоновој апроксимацији може се проценити по формули

$$\bar{R}_j^2 \approx \frac{n_j^{*2}}{2Z^2} \cdot (5n^{*2} + 1 - 3\ell(\ell + 1)), \quad (2.53)$$

где су n^* и ℓ ефективни главни (јед. 2.21) и орбитални квантни број, редом; \bar{v} —средња релативна брзина атома који се сударају (у m/s), дата изразом (2.33)

Ова релација је примењива на водонику сличне емитере, но кад се узму сложенији емитери долази до великих неслагања између рачунатих и експерименталних вредности. На пример, у случају линија Fe I (Kusch 1958), Mg I и Mg II (Kusch & Schwiecker 1976), ова релација даје много мање вредности полуширине од посматраних (чак до 30 пута код Fe I и до 40 пута код Mg II). За случај да се константа C_6 рачуна квантно-механички, резултат не би био много бољи. То је стога што за теже елементе не важи дипол-дипол апроксимација. Резултат се поправља уколико се узме Ленард-Џонсов потенцијал (види нпр. Винце 1986), међутим и ово је далеко од ширина које се мере у лабораторијама.

Ван дер Валсове силе долазе до изражаја када су средња растојања између емитера и пертурбера мала, а то је испуњено у плазмама са великом концентрацијом неутрала. У хладнијим звездама (К, G, M) овај ефекат је веома значајан.

2.1 КВАНТНОМЕХАНИЧКИ ПРИСТУП. БАРАНЖЕРОВА ТЕОРИЈА. ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ

Тачнији прорачун профила спектралне линије у који се урачунава ширење услед притиска добија се квантномеханичким прилазом. У одређеним случајевима, при рачунању Штарковог ширења, могу се вршити одређене апроксимације (Griem *et al.* 1962, Griem 1968) тако да је прорачун једноставнији.

Хронолошки гледано у сударној теорији Штарковог ширења пионирску улогу одиграли су радови Баранжера 1958 године (Baranger 1958abc), а потом Колба и Грима (Kolb and Griem 1958), где је дат савремени квантномеханички приступ прорачуна ширења спектралних линија услед судара емитера и пертурбера.

Грим, Баранжер, Колб и Ертел (Griem, Baranger, Kolb and Oertel 1962)¹ у апроксимацији класичне путање електрона дају теорију за Штарково ширење спектралних линија неутрала, на основу које је извршено низ прорачуна Штарковог ширења атома (Griem 1974).

На основу квантномеханичког разматрања сударног ширења (Baranger 1958c) и квазикласичног разматрања израза за ефективне сударне пресеке (Seaton 1962a), Грим (Griem 1968) уводи семиемпиријски приступ за прорачун Штарковог ширења изолованих јонских линија. Овај приступ модификују Димитријевић и Коњевић (Dimitrijević & Konjević 1980) проширујући овакав прилаз разрађен за једнострукто наелектрисане, на случај вишеструко наелектрисаних емитера и упрошћавајући начин прорачуна без смањења тачности рачунатих вредности. Утицај судара електрона и јонизованих емитера на померај спектралних линија у модификованом семиемпиријском приступу разматрају Димитријевић и Кршљанин (Dimitrijević & Kršljanin 1986).

У овом поглављу укратко дајемо преглед Баранжерове теорије, семикласичног и семиемпиријског приступа у рачунању Штарковог ширења и помераја.

Основе Баранжерове теорије

Полазећи од тога да је емитер непокретан, а да се пертурбери крећу у пољу емитера (што је добра апроксимација при судару емитера са електронима), Баранжер (Baranger 1958a) поставља таласну функцију оваквог система као производ функције стања емитера и функције која описује пертурбер.

Проблем се решава у два корака; Прво, тражи се решење Шредингерове једначине за емитер, посматрајући да се пертурбер налази на фиксном растојању $\vec{r} = \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n\}$. Узмимо да је $u(\vec{x}_A, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ таласна функција емитера, где \vec{x}_A представља све унутрашње координате атома, а за енергију система узимимо $E + V_T(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n)$, где је E – енергија непертурбованог система. У другом

¹ или GBKO теорија

кораку налази се решење Шредингерове једначине за кретање пертурбера у пољу потенцијала V_T . Ако $\psi(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ описује ово кретање, онда се добије таласна функција која описује укупан систем као

$$\Psi(\vec{x}_A, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n) = u(\vec{x}_A)\psi(\vec{x}_A, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n), \quad (2.1.1)$$

а укупна енергија је

$$E_U = E + \varepsilon_T, \quad (2.1.2)$$

где је ε_T енергија услед сударне пертурбације, а $u(\vec{x}_A)$ представља таласну функцију непетурбованог атома.

За даље разматарање облика спектралне линије уведемо две претпоставке:

Прво, усвојимо да пертурбери међусобно не интерагују, тј. сваки пертурбер интерагује само са атомом, и не утиче на кретање других пертурбера, као и да његово кретање не зависи од других пертурбера. У случају наелектрисаних пертурбера то је задовољено уколико се два пертурбера не нађу на растојању мањем од Дебајевог радијуса.

Друго, претпоставимо да се укупан потенцијал интеракције може представити као сума потенцијала појединачних пертурбера

$$V_T(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = V(\vec{x}_1) + \dots + V(\vec{x}_N).$$

Ова апроксимација "скаларне адитивности" је коректна само у одређеним случајевима (нпр. ван дер Валсова интеракција). Код Штаркове интеракције није баш сасвим коректно узимати скаларну адитивност потенцијала интеракције. У питању су електрична поља где је сабирање векторско. Међутим, с обзиром да проблем разматрамо у оквиру сударне теорије (види услове за сударну апроксимацију), и да усвајамо да нема међусобне интеракције пертурбера, можемо усвојити ову апроксимацију и код Штаркове интеракције.

Облик спектралне линије. Случај једног пертурбованог нивоа

Укупна емисиона снага $P(\omega)$ код спонтаног електричног диполног прелаза између почетног i и крајњег f нивоа дата је следећом једначином (Ландау и Лифшиц 1989)

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4 e^2}{3c^3} |\langle f | \vec{d} | i \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_0), \quad (2.1.3)$$

где је $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$ — учестаност, \vec{d} — диполни момент, e — наелектрисање електрона, c — брзина светлости. Делта функција $\delta(\omega - \omega_0)$ означава очување енергије у складу са Боровим правилом $\hbar\omega_0 = E_i - E_f$, где су E_i , E_f — енергије почетног, односно крајњег нивоа у посматраном прелазу. У овом случају аутокорељациона функција има облик (Baranger 1958a)

$$\Phi(s) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{3c^3}{4\omega^2} P(\omega) e^{-i\omega s} d\omega. \quad (2.1.4)$$

Како $F(\omega)$ мора бити реална функција, функција $\Phi(s)$ задовољава услов

$$\Phi(-s) = \Phi^*(s), \quad (2.1.5)$$

тако да се може аутокорељациона функција разматрати само за позитивне вредности параметра s .

Под условом да је скаларно адитивна, функција која описује кретање емитера (из јед. 2.1.1) може се раставити као

$$\Psi(\vec{x}_1 \dots \vec{x}_N) = \Psi_1(\vec{x}_1) \cdot \Psi_2(\vec{x}_2) \cdot \dots \cdot \Psi_N(\vec{x}_N) \quad (2.1.6)$$

и да се сваком стању (почетном i и крајњем f) може приписати потенцијал V_i , односно V_f . Одговарајуће Шредингерове једначине су (Baranger 1958a):

$$(K_1 + V_i)\Psi_{i1}(\vec{x}_1) = \varepsilon_1 \Psi_{i1}(\vec{x}_1), \quad (2.1.7a)$$

$$(K_1 + V_f)\Psi_{f1}(\vec{x}_1) = \varepsilon'_1 \Psi_{f1}(\vec{x}_1), \quad (2.1.7b)$$

где је K_1 кинетичка енергија пертурбера 1, а ε_1 и ε'_1 су укупне енергије у овом случају.

Тако за почетну ($j = i$) односно крајњу ($j = f$) таласну функцију добијамо

$$\Psi_j(\vec{x}_A, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = u_j(\vec{x}_A) \psi_{jk1}(\vec{x}_1) \cdot \dots \cdot \psi_{jkN}(\vec{x}_N), \quad (2.1.8)$$

са енергијом

$$E_j + \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \dots + \varepsilon_N. \quad (2.1.9)$$

У овом случају јед. (2.1.3) ће бити облика

$$P(\omega) = \frac{4\omega^4}{3c^3} |\langle u_f | \vec{d} | u_i \rangle|^2 \cdot |\langle \psi_{fk1} | \psi_{ik1} \rangle|^2 \cdot \dots \cdot |\langle \psi_{fkN} | \psi_{ikN} \rangle|^2, \quad (2.1.10)$$

учестаност ω је

$$\omega \cdot \hbar = (E_i - E_f) + (\varepsilon_1 - \varepsilon'_1) + \dots + (\varepsilon_N - \varepsilon'_N), \quad (2.1.11)$$

а у случају непертурбованог емитера учестаност је $\omega = (E_i - E_f)/\hbar$. За рачунање функције Φ , није потребно познавати $P(\omega)$ у експлицитном облику. Може се направити измена у изразу (2.1.4) пошто је уместо интеграла по ω боље сумирати по свим крајњим стањима и усредњити по почетним стањима (Baranger 1958a). У том случају долази до смене $\omega \rightarrow [(\varepsilon_1 - \varepsilon'_1) + \dots + (\varepsilon_N - \varepsilon'_N)]$, и ако за јачину зрачења узмемо јед. (2.1.8), добија се

$$\Phi(s) = \sum_{k_1 \dots k_N} \sum_{k'_1 \dots k'_N} \rho_{k_1} \dots \rho_{k_N} |\langle \psi_{fk'_1} | \psi_{ik_1} \rangle|^2 \times \dots$$

$$x | \langle \psi_{jk'_N} | \psi_{ik_N} \rangle |^2 e^{-i(\epsilon_1 - \epsilon'_1 + \dots + \epsilon_N - \epsilon'_N)s} \quad (2.1.12)$$

где је ρ_k Болцманова матрица густине. У горњем облику $\Phi(s)$ је дата за N пертурбера, њу можемо изразити преко функције $\phi(s)$ која описује случај са само једним пертурбером као (Baranger 1958a)

$$\Phi(s) = [\phi(s)]^N, \quad (2.1.13)$$

где је

$$\phi(s) = \sum_{kk'} \rho_k | \langle \psi_{jk'} | \psi_{ik} \rangle |^2 e^{-i(\epsilon - \epsilon')s}, \quad (2.1.14)$$

или функције $g(s)$, где је

$$\Phi(s) = e^{-ng(s)} \quad (2.1.15)$$

и $n = N/\vartheta$ је број пертурбера по јединици запремине (ϑ је јединична запремина). $g(s)$ је у вези са $\phi(s)$ као (види Baranger 1958a)

$$\phi(s) = 1 - \frac{g(s)}{\vartheta}. \quad (2.1.16)$$

Да би се добио облик линије у сударној апроксимацији узмимо поједностављени случај да је пертурбација крајњег нивоа f занемарљива у односу на почетни ниво i . У том случају у јед. (2.1.7a) пертурбациони потенцијал V_f отпада. Трансформацијом јед. (2.1.14) и (2.1.16) добијамо да је

$$g(s) = i \int_0^s e^{-i\epsilon t} \langle \psi_{ik} | e^{iKt} V_i | \psi_{ik} \rangle dt. \quad (2.1.17)$$

$\langle \psi_{ik} | e^{iKt}$ описује понашање функције стања $\langle \psi_{ik} |$, која се шири у времену t са слободним Хамилтонијаном K (види 2.1.7b). Ударни талас одступа од почетног, и нови ударни талас ће се формирати тако да $\langle \psi_{ik} | e^{iKt}$ изгледа као $\langle \psi_{ik} | e^{i\epsilon t}$, тако да у великом временском интервалу t израз $\langle \psi_{ik} | e^{iKt} V_i | \psi_{ik} \rangle \rightarrow e^{i\epsilon t} \langle \psi_{ik} | V_i | \psi_{ik} \rangle$, тако да се интеграл у (2.1.17) може апроксимативно решити, а за $g(s)$ се добија

$$g(s) \approx is \langle \psi_{ik} | V | \psi_{ik} \rangle.$$

Горњу једначину уврстимо у израз за аутокорељациону функцију (јед. 2.1.15) и помоћу јед. (2.5) добићемо облик линије као

$$F(\omega) = \frac{w}{\pi} \cdot \frac{1}{(\omega - d)^2 + w^2}, \quad (2.1.18)$$

где су

$$d = n \cdot \Re \{ \langle \psi_{ik} | V | \psi_{ik} \rangle \}, \quad (2.1.19)$$

$$w = n \cdot \Im \{ \langle \psi_{ik} | V | \psi_{ik} \rangle \}, \quad (2.1.20)$$

и где симболи \Re и \Im означавају реалан и имагинаран део датог израза, редом.

Из јед (2.1.18) види се да је облик спектралне линије Лоренцов, линија је услед пертурбације емитера проширена и померена (јед. 2.1.19. и 2.1.20).

Ширина и померај изоловане линије

Израз за аутокорелатиону функцију (јед. 2.1.4) може бити изражен преко Шредингеровог еволуционог оператора $T(s)$ као (Baranger 1958b)

$$\Phi(s) = \text{Tr}[dT^*(s)dT(s)\rho], \quad (2.1.21)$$

где је Tr означава траг матрице (израза у загради), а $T(s)$ је

$$T(s) = e^{-iHs}.$$

T^* је коњуговано комплексна вредност Шредингеровог оператора, а ρ је Болцман – Гибсова матрица густине дата као

$$\rho = \frac{e^{-\beta Hs}}{Z},$$

где је Z је партициона функција, а H је хамилтонијан укупног система, који представља суму хамилтонијана емитера H_A , кинетичке енергије N пертурбера $\sum_j K_j$ и N интеракција $\sum_j V_j$

$$H = H_A + \sum_j^N K_j + \sum_j^N V_j.$$

Разматрајући проблем квантномеханички и увршћујући нееластичне сударе пертурбера и емитера за облик спектралне линије се добија (Baranger 1958bc)

$$F(\omega) = -\pi\rho\Im\{\text{Tr}[\Delta(\omega - H_{Ai} + H_{Af}^+ - \aleph)^{-1}]\}, \quad (2.1.22)$$

где је ω учестаност, а \aleph ефективни хамилтонијан пертурбација (Baranger 1958bc)

$$\aleph = -i\hbar \sum_j \mu_j (1 - S_{ij} \cdot S_{fj}^*).$$

S_{kj} ($k = if$) су елементи матрице расејања (Baranger 1958b). У овом случају оне описују расејање пертурбера на горњем ($k = i$), односно доњем нивоу емитера ($k = f$), а μ_j је учестаност судара.

Израз (2.1.22) представља уопштени облик (Лоренцов) спектралне линије, где се за полуширину и померај добијају изрази (Baranger 1958c)

$$d = n\Re\{\langle \psi_{ak} | R | \psi_{ak'} \rangle_{Av}\}, \quad (2.1.22a)$$

$$w = n \Im \{ \langle \psi_{ak} | R | \psi_{ak'} \rangle_{Av} \}, \quad (2.1.22b)$$

где $\langle \dots \rangle_{Av}$ означава усредњавање по свим угловима и енергијама пертурбера.

Горње изразе за ширину и померај можемо изразити преко амплитуде расејања. Матрични елементи оператора прелаза T_j ($j = i, f$) су пропорционални амплитуди расејања $f_j(\theta, \alpha)$

$$f(\theta, \alpha) = -\left(\frac{m}{2\pi}\right) \langle \psi_{ak} | T_j | \psi_{ak'} \rangle \quad (2.1.23)$$

где су θ, α углови између импулса пертурбера пре (\vec{k}) и после (\vec{k}') расејања, а m је маса пертурбера. У том случају за померај и полуширину изоловане спектралне линије се добије (Baranger 1958c)

$$d = -(2\pi n/m) \Re \{ [f_i(0) - f_f(0)] + in\nu/2 \int d\Omega [f_f^*(\Omega) f_i(\Omega) - f_f(\Omega) f_i^*(\Omega)] \}_{Av}, \quad (2.1.24)$$

$$w = (2\pi n/m) \Im \{ [f_i(0) + f_f(0)] - in\nu/2 \int d\Omega [f_f^*(\Omega) f_i(\Omega) + f_f(\Omega) f_i^*(\Omega)] \}_{Av}, \quad (2.1.25)$$

где је Ω просторни угао.

Веза између амплитуде расејања и ефективног сударног пресека (σ) по оптичкој теореме је (Ландау и Лифшиц 1989, стр. 594, јед. (125,9))

$$\Im [f_j(0)] = \frac{k}{4\pi} \sigma.$$

σ је укупни ефективни сударни пресек који се може раставити као збир пресека еластичних и нееластичних судара σ_{in}

$$\sigma = \sigma_{in} + \int d\Omega |f(\Omega)|^2$$

тако да израз (2.1.25) можемо записати у следећем облику

$$w = \left\{ \frac{n\nu}{2} [(\sigma_{in})_i + (\sigma_{in})_f] + \int d\Omega |f_i(\Omega) - f_f(\Omega)|^2 \right\}_{Av}. \quad (2.1.25a)$$

За разлику од предходног разматрања овде су узети у обзир и еластични и нееластични судари. Закључак је да нееластични судари не утичу на померај спектралне линије, али зато се морају урачунати у ширину спектралне линије.

2.2 Теорија Грима, Баранжера, Колба и Ертела (ГВКО)

Грим, Баранжер, Колб и Ертел (1962) дају у семикласичној апроксимацији формуле за рачунање ширине и помераја линије настале услед судара емитера и наелектрисаних конституената плазме.

Задатак решавају у три корака:

- о први, обрачун временске флукутације микропоља електрона и јона и његов утицај (у зависности од времена) на таласну функцију која постаје временски зависна. Они обрачунавају пертурбацију таласне функције у апроксимацији класичне путање, користећи временски зависну пертурбациону теорију, тј. посматрају пертурбер као наелектрисану тачку која се креће по класичној путањи. У том случају потенцијал интеракције се може написати као

$$V_i(t) = e\vec{r} \cdot \vec{E}_i(t),$$

где је $-e\vec{r}$ диполни момент атома, а $\vec{E}_i(t)$ електрично поље пертурбера.

- о други, усредњавање по свим могућим конфигурацијама пертурбера. Узимају да су пертурбери статистички распоређени. У случају великих густина пертурбера утицај колективних процеса на микропоље може бити значајан и мора бити узет у обрачун.
- о трећи, посматрани облик спектра добијају Фуријевом трансформацијом дипол — дипол корелационе функције са временски зависном пертурбованом таласном функцијом усредњеном по свим путањама пертурбера.

Фуријевом трансформацијом аутокорелационе функције добија се Лоренцов профил (Griem *et al.* 1962)

$$I_\alpha(\omega) = \frac{w}{\pi} \cdot \frac{1}{(\omega - \omega_0 - d)^2 + w^2},$$

где је ω_0 учестаност која одговара прелазу $i \rightarrow f$, а изрази за полуширину (w) и померај (d) су (Griem *et al.* 1962)

$$w = -\Re\{\langle \alpha | \phi | \alpha \rangle\}, \quad (2.2.1)$$

$$d = -\Im\{\langle \alpha | \phi | \alpha \rangle\}. \quad (2.2.2)$$

Матрични елемент је

$$\langle \alpha | \phi | \alpha \rangle = N \int v f(v) dv \int 2\pi \rho d\rho \langle \alpha | S_\alpha(0) - 1 | \alpha \rangle, \quad (2.2.3)$$

при чему се посматрају пертурбери чија је расподела по брзинама Максвелова, са сударним параметром у интервалу ρ , $\rho + d\rho$ и брзином пертурбера у интервалу v , $v + dv$. У горњој једначини S_α је елемент матрица расејања (Baranger 1958a). Грим и др. (1962) показују да се у случају праволинијске путање чија је трајекторија

$$r(t) = \rho + vt,$$

у случају слабих судара, тј. оних судара који узрокују малу измену функције стања емитера, израз за матрични елемент може се написати као (Griem et al. 1962)

$$\langle \alpha | \phi | \alpha \rangle = -\frac{4\pi N}{3} \left(\frac{e^2}{\hbar}\right)^2 \int v f(v) dv \sum_{\alpha'} |\langle \alpha | \vec{r} | \alpha' \rangle|^2 \cdot [a(z_{\alpha\alpha'}^{\min}) + ib(z_{\alpha\alpha'}^{\min})], \quad (2.2.4)$$

а у случају јаких судара

$$\langle \alpha | \phi | \alpha \rangle \approx -N\pi \int f(v) v dv (\rho^{\min}(v))^2. \quad (2.2.5)$$

У горњим једначинама ρ^{\min} је минималан сударни параметар, који се може израчунати из релације (Griem 1962)

$$\begin{aligned} & \frac{2}{3} \cdot (\hbar m v \rho^{\min})^2 \cdot \left\{ \left[\sum_{\alpha'} |\langle \alpha | \frac{\vec{r}}{a} | \alpha' \rangle|^2 \cdot A(z_{\alpha, \alpha'}^{\min}) \right]^2 + \right. \\ & \left. + \left[\sum_{\alpha'} |\langle \alpha | \frac{\vec{r}}{a_0} | \alpha' \rangle|^2 \cdot B(z_{\alpha, \alpha'}^{\min}) \right]^2 \right\} = \left[\frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{1}{3}\right) \right]^{-3/2}, \end{aligned}$$

$z_{\alpha\alpha'}^{\min} = \omega_{\alpha\alpha'} \rho^{\min} / v$ одговара минималном сударном параметру, $|\langle \alpha | \vec{r} | \alpha' \rangle|^2$ је квадратни матрични елемент дат као (Griem 1962)

$$(\ell + 1)(2\ell + 3) \cdot [\sigma(n_\ell, \ell, n_{\ell+1}, \ell + 1)]^2, \quad \ell \rightarrow \ell + 1$$

$$\ell(2\ell - 1) \cdot [\sigma(n_{\ell-1}, \ell - 1, n_\ell, \ell)]^2, \quad \ell \rightarrow \ell - 1$$

где је σ радијални интеграл (Bates & Damgaard 1949 или поглавље 4. овог рада) дат као

$$\sigma(n_{\ell-1}, \ell - 1, n_\ell, \ell) = \frac{3}{2} n_\ell \sqrt{\frac{n_\ell^2 - \ell^2}{4\ell^2 - 1}} \cdot \varphi.$$

n_ℓ је главни квантни број дат релацијом (2.21), ℓ одговарајући орбитални, а φ је Бејтс-Дамгардов фактор.

$\Gamma(p)$ је Гама функција и $\Gamma(1/3) \approx (3/4)^{3/2}$. Функције $a(x)$ и $b(x)$ су дате следећим изразима

$$\begin{aligned} a(x) &= \int_x^\infty \frac{A(x')}{x'} dx' \\ b(x) &= \int_x^\infty \frac{B(x')}{x'} dx', \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

где се $A(x)$ може изразити као комбинација функција K_0 и K_1

$$A(x) = x^2 [K_0^2(|x|) + K_1^2(|x|)].$$

Функција K_μ је дата као комбинација Беселових функција I_μ (Luke 1980)

$$K_\mu(x) = \frac{\pi}{2} \operatorname{cosec}(\mu\pi) \cdot [I_{-\mu}(x) - I_\mu(x)].$$

За једноставније нумеричко израчунавање функција $A(x)$ се може написати у следећем облику (Griem *et al.* 1962 додатак Y)

$$A(x) = \left\{ \int_0^\infty \frac{\cos(yx)}{\sqrt{(1+x^2)^3}} dy \right\}^2 + \left\{ \int_0^\infty \frac{\sin(yx)}{\sqrt{(1+x^2)^3}} dy \right\}^2.$$

$B(x)$ је пропорционална главној вредност и (P) Кошијевог интеграла функције $A(x)$

$$B(x) = \frac{2xP}{\pi} \int_0^\infty \frac{A(y)}{x^2 - y^2} dy.$$

У случају неутралних емитера израз за Штаркову ширину и померај спектралних линија атома постаје (Griem 1974)

$$\begin{aligned} w + id = & \frac{4\pi}{3} N \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \int \left\{ \frac{dv}{v} f(v) \right\} \cdot \left\{ \frac{3}{4} \left(\frac{mv}{\hbar}\right)^2 (\bar{\rho}^{min})^2 + \right. \\ & \left. + \sum_{j'=i',f'} \bar{R}_{jj'}^2 [a_{jj'} \pm i\varepsilon_{jj'} b_{jj'}] \right\}, \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

где је $\bar{R}_{\alpha,\alpha'}^2 = |\langle \alpha | \vec{r} / a | \alpha' \rangle|^2$ квадрат матричног елемента, а $\varepsilon_{jj'}$ одређује знак за индивидуалне пертурбационе нивое

$$\varepsilon_{jj'} = \frac{E_j - E_{j'}}{|E_j - E_{j'}|}.$$

Минимални сударни параметар је дат (Griem 1974) као

$$(\bar{\rho}^{min})^2 = \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar}{mv}\right)^2 \left| \sum_{j'=i',f'} \bar{R}_{jj'}^2 [A_{jj'} \pm i\varepsilon_{jj'} B_{jj'}] \right|.$$

У горњим једначинама знак + се узима за случај $j, j' = f, f'$, а минус за $j, j' = i, i'$.

Функције $A(x)$, $B(x)$, $a(x)$, и $b(x)$ се могу наћи утабличене у књизи Грима (Griem 1974).

2.2.1 Примена GBKO теорије.

Упрощене формуле за израчунавање Штарковог ширења неутрала

Израз за Штарково ширење неутралних емитера (јед. 2.2.7) је компликован за рачун, па га је стога за астрофизичке потребе корисно упростити и прилагодити. У том смеру су и радови: Фројденштајн — Купера (Freudenstein & Cooper 1978) и Димитријевић — Коњевића (Dimitrijević & Konjević 1986).

Фројденштајн и Купер (Freudenstein & Cooper 1978), инспирисани упрощеном семиемпиријском формулом (Griem 1968, види у даљем тексту) разматрају ширење изолованих спектралних линија неутрала услед судара са електронима, при чему

- разматрају функције $a(x)$, $A(x)$ и $B(x)$ за праволинијску путању пертурбера и обрачунавају њихове вредности за најближи пертурбациони ниво почетном нивоу,
- посматрају само горњи ниво прелаза и сумирају све утицаје других пертурбационих нивоа преко квадрата матричних елемената $R_i^2 = \sum_{i'} \bar{R}_{ii'}^2$.

У том случају за ширину спектралне линије се добије (Freudenstein & Cooper 1978)

$$w = \frac{4\pi}{3} N \left(\frac{\hbar}{m}\right)^2 \frac{1}{\bar{v}} \cdot \left\{ \frac{R_i^2}{2} [A^2(z^{min}) + B^2(z^{min})]^{1/2} + R_i^2 a(z^{min}) \right\}. \quad (2.2.1)$$

Минимални сударни параметар у овом случају је дат као

$$(\rho^{min})^2 = \frac{2}{3} \left(\frac{\hbar}{mv}\right)^2 R_i^2 [A^2(z^{min}) + B^2(z^{min})]^{1/2}, \quad (2.2.1.2)$$

где је

$$z^{min} = \rho^{min} \frac{\Delta E_i}{\hbar \bar{v}}.$$

ΔE_i представља разлику енергије између горњег нивоа и њему најближег пертурбационог нивоа. Утицај на доњи ниво овде није узет у обзир.

У јед. (2.2.1.1) се може апроксимативно ставити $1/\bar{v} \approx \sqrt{m/3kT}$, где је T температура, и дефинишући да је

$$\eta = \frac{\Delta E_i}{3kT}$$

израз (2.2.1.1) постаје

$$w \approx \sqrt{\frac{32}{27}} \cdot N \pi \left(\frac{\hbar a_0}{m}\right)^2 \sqrt{\frac{E_H}{kT}} R_i^2 f(\eta R_i), \quad (2.2.1.3)$$

где је

$$f(\eta R_i) = 0.5 \cdot [A^2(z^{min}) + B^2(z^{min})]^{1/2} + a(z^{min}). \quad (2.2.1.4)$$

Смисао функције $f(x)$ дат је њеном везом са Гаунт фактором (види у даљем тексту или Griem 1968)

$$\bar{g}(x) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \cdot f(x).$$

Фројденштајн и Купер (1978) дају апроксимативан израз функције $f(x)$ ($x = \eta R_i$) који повезује аналитичке изразе за случајеве $\eta R_i \ll 1$ и $\eta R_i \gg 1$

$$f(x) = e^{-1.33x} \cdot \ln\left[1 + \frac{2.27}{x}\right] + \frac{0.487x}{0.153 + x^{5/3}} + \frac{x}{7.93 + x^3}. \quad (2.2.1.5)$$

Разматрајући јед. (2.2.1.3) уочавамо да је узет утицај само на горњи ниво. С друге стране Фројденштајн и Купер не дају поједностављени израз за Штарков померај. Димитријевић и Коњевић (Dimitrijević & Konjević 1986) разматрају утицај судара и на горњи и на доњи ниво посматраног прелаза, урачунавају све пертурбујуће ниво са дозвољеним диполним прелазом на почетни и крајњи ниво и налазе поједностављен израз за Штарково померај спектралних линија неутралних емитера. Уводе апроксимацију (Dimitrijević & Konjević 1986)

$$\left| \sum_{j'} \bar{R}_{jj'}^2 [A_{jj'} + i\epsilon_{jj'} B_{jj'}] \right| \approx \sum_{j'} \bar{R}_{jj'}^2 |A_{jj'} + i\epsilon_{jj'} B_{jj'}|,$$

тј.

$$(\bar{\rho}^{\min})^2 \approx \sum_{j'} \rho_{jj'}^2.$$

За ширину и померај добијају

$$w + id \approx \sqrt{\frac{32}{27}} \cdot N_e \pi \left(\frac{\hbar a_0}{m}\right) \sqrt{\frac{E_H}{kT}} \cdot \left\{ \sum_{i'} \bar{R}_{ii'}^2 [f_w(x_{ii'}) - i\epsilon_{ii'} f_d(x_{ii'})] + \sum_{j'} \bar{R}_{jj'}^2 [f_w(x_j) + i\epsilon_{jj'} f_d(x_{jj'})] \right\}, \quad (2.2.1.6)$$

где је $x_{jj'} = \eta_{jj'} \bar{R}_{jj'}$, а $\eta_{jj'}$ је дефинисано као

$$\eta_{jj'} = \frac{|E_j - E_{j'}|}{3kT}.$$

$\epsilon_{jj'}$ је дато јед. (2.2.8). Функција $f_w(x)$ је дата јед. (2.2.1.4) само за $z^{\min} = z_{jj'}^{\min}$, а $f_d(x_{jj'})$ је

$$f_d(x_{jj'}) = b(z_{jj'}^{\min}).$$

Разматрајући граничне случајеве функције ГВКО теорије Штарковог ширења за $x \ll 1$ и $x \gg 1$ они преузимају аналитички израз функције $f_w(x_{jj'})$ од Фројденштајна и Купера (јед. 2.2.1.5), а за функцију $f_d(x_{jj'})$, која карактерише

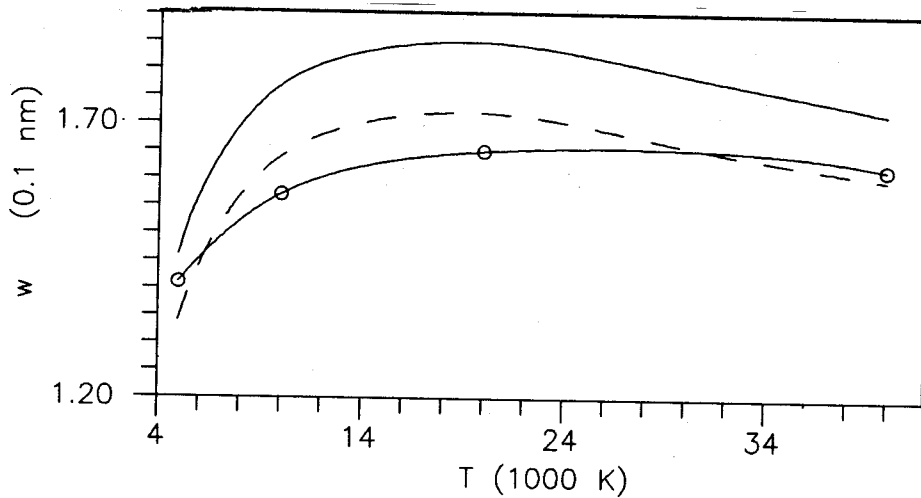
електронски сударни померај налазе функцију која повезује аналитичке изразе за асимптотске случајеве $x \ll 1$ и $x \gg 1$ (Dimitrijević & Konjević 1986)

$$f_d(x) = 1.571 \cdot e^{-2.482x} + \frac{1.295x}{0.415 + x^{5/3}} + \frac{0.713x}{8.139 + x^3}. \quad (2.2.1.7)$$

У горњим једначинама \bar{R}_{jj}^2 је квадратни матрични елемент и у Кулоновој апроксимацији може се израчунати као (Bates & Damgaard 1949)

$$\bar{R}_{jj}^2 \approx \left(\frac{3n_{l>}}{2Z}\right)^2 \cdot \frac{l_{>}}{2l_j + 1} \cdot (n_{l>}^2 - l_{>}^2) \varphi_{jj}^2, \quad (2.2.1.8)$$

где је $n_{l>}$ ефективни квантни број који одговара већој вредности орбиталног квантног броја, дат јед. (2.21). E_H је енергија јонизације водоника, N_e електронска концентрација, а T је електронска температура.



Сл. 2.2.1.1 Штаркова полу-полуширина спектралне линије $\lambda = 443.8$ nm ($2p^1P^0 - 5s^1S$) атома хелијума у зависности од електронске температуре на електронској концентрацији $N_e = 10^{16}$ cm $^{-3}$. Испрекидана линија, означава ширење израчунато помоћу формуле Фројденштајна и Купера (1978) (јед. (2.2.1.3)), пуна линија представља прорачун помоћу формуле Димитријевића и Коњевића (1986), а пуна линија са кружићима је резултат Гримовог прорачуна (Benett & Griem 1971).

Горње једначине су погодне за израчунавање Штарковог ширења. За типичне услове у којима се стварају спектралне линије у стеларној плазми ($N_e \sim 10^{13} - 10^{15}$ cm $^{-3}$) може се рећи да на Штарково ширење утичу само електрони и протони. Прорачун ширења услед судара са протонима и електронима може извести на следећи начин (види Griem 1962, 1974)

$$w_{\text{tot}} \approx 2 \cdot [1 + 1.75 \cdot 10^{-4} N_e^{1/4} \alpha \cdot (1 - 0.068 \cdot \frac{N_e^{1/6}}{T})] \cdot 10^{-6} w N_e, \quad (2.2.1.9)$$

$$d_{\text{tot}} \approx 2 \cdot [d \pm 2.0 \cdot 10^{-4} N_e^{1/4} \alpha w \cdot (1 - 0.068 \cdot \frac{N_e^{1/6}}{T})] \cdot 10^{-6} N_e, \quad (2.2.1.10)$$

где су d и w Штарков померај и пуна ширина на половини висине услед електронског судара, а d_{tot} и w_{tot} су укупни Штарков померај и полуширина (електрони + протони).

У једанчинама (2.2.1.9) и (2.2.1.10) α је дато као (Griem 1962, 1974)

$$\alpha \approx \frac{4\pi N}{3} \cdot \left\{ \frac{1}{3w} \left(\frac{\hbar}{m} \right)^2 \cdot \left| \sum_{i'} \frac{\ell_{>}}{(2\ell_i + 1)\omega_{ii'}} \cdot \bar{R}_{ii'}^2 - \sum_{f'} \frac{\ell_{>}}{(2\ell_f + 1)\omega_{ff'}} \cdot \bar{R}_{ff'}^2 \right| \right\}^{3/4}, \quad (2.2.1.11)$$

где је $\omega_{jj'} = (E_j - E_{j'})/\hbar$.

Горње апроксимативне релације за израчунавање Штарковог ширења лакших елемената сасвим задовољавају потребе (као пример види Сл. 2.2.1.1) код извесног броја астрофизички интересантних линија.

2.3. ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ ИЗОЛОВАНИХ ЈОНСКИХ ЛИНИЈА

Ширење изолованих јонских линија услед судара са електронима.

Гримов семиемпиријски приступ

Полазећи од Баранжеровог (Baranger, 1958с) извођења за сударно ширење спектралне линије, Грим (Griem 1968)) даје семиемпиријску формулу за рачунање електронског сударног ширења.

Као што је речено израз за сударно ширење се може разложити на ширење услед еластичних и ширење услед нееластичних судара (јед. (2.1.25а). Изражено преко нееластичних ефективних пресека $\sigma_{jj'}$, полу-полуширина спектралне линије услед судара може се написати у следећем облику

$$w_{if} = 0.5 \sqrt{N} \left\{ v \left[\sum_{i'} \sigma_{ii'} + \sum_{f'} \sigma_{ff'} + \int |f_i(\theta\alpha) - f_f(\theta\alpha)|^2 d\Omega \right] \right\}_{\text{Av}}, \quad (2.3.1)$$

где је N број пертурбера; i, i', f, f' означавају почетни ниво односно њега пертурбујући ниво и крајњи ниво, односно њега пертурбујући ниво, редом. Амплитуде еластичних судара означене су са f_i, f_f за два нивоа пертурбованог система, а $d\Omega$ је просторни угао.

У првој апроксимацији (посматрајући дејство електрона са класичном путањом на енергијске нивое јона) Грим прихвата Бетеов израз за нееластични ефективни пресек (Bethe 1930)

$$\sigma_{jj'} = \frac{8\pi^2 E_H}{3^{3/2} E} \cdot |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 \cdot g, \quad (2.3.2)$$

где је E_H енергија јонизације атома водоника, $E = mv^2/2$ почетна енергија слободног електрона, g Гаунт фактор (вероватноћа да пертурбујући електрон промени брзину са вредности пре, на вредност после судара) и \vec{r} је позициони оператор слободног електрона.

С друге стране Ситон (Seaton 1962b) даје израз за нееластични ефективни пресек као

$$\sigma_{jj'} \approx \int P_{jj'} \rho \, d\rho, \quad (2.3.3)$$

где је ρ сударни параметар, а $P_{jj'}$ је вероватноћа да се прелаз догоди за време судара са пертурбером чији је сударни параметар ρ .

За случај ($|\Delta E_{jj'}| \ll \hbar v/\rho$), вероватноћа прелаза се може написати у следећем облику

$$\begin{aligned} P_{jj'} &\approx \frac{1}{\hbar^2} |\langle j' | \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^2 \vec{r} \cdot \vec{r}(t)}{|\vec{r}(t)|^3} dt | j \rangle|^2 = \\ &= \frac{4}{3} \left(\frac{mv}{Z\hbar} \right)^2 \sin^2 \frac{\alpha}{2} \cdot |\langle j' | \vec{r} | j \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.3.3a)$$

У горњој јед. подинтегрални израз представља Кулонову силу између јона и електрона, а α је сударни угао. Класична веза између сударног угла α , брзине пертурбера v и сударног параметра ρ је дато као:

$$\rho = \frac{Z E_H a_0}{E} \cdot \frac{\sin(\frac{\alpha}{2})}{\cos(\frac{\alpha}{2})}. \quad (2.3.4)$$

Заменујући израз (2.3.3a) у (2.3.3) и узимајући смене из (2.3.4) није тешко добити израз за нееластични ефективни пресек

$$\sigma_{jj'} \approx \frac{8\pi}{3} \frac{E_H}{E} \cdot |\langle j' | \vec{r} | j \rangle|^2 \cdot \log\left(\frac{\sin \frac{\alpha_{\max}}{2}}{\sin \frac{\alpha_{\min}}{2}}\right). \quad (2.3.5)$$

Упоређујући јед. (2.3.2) и (2.3.5) уочава се да је ефективни квазикласични Гаунт фактор

$$g \approx \frac{\sqrt{3}}{\pi} \cdot \log\left(\frac{\sin \frac{\alpha_{\max}}{2}}{\sin \frac{\alpha_{\min}}{2}}\right), \quad (2.3.6)$$

где су α_{\min} и α_{\max} граничне вредности сударног угла α .

С друге стране, на основу експерименталних резултата пресека за нееластични прелаз код једноструко наелектрисаних јона, Ситон (Seaton 1962b) налази да средња вредност емпиријског ефективног Гаунт фактора на прагу за нееластични процес износи 0.20.

На основу квазикласичног разматрања Гаунт фактора (анализирајући јед. (2.3.6)), Ситонових резултата и Ван Режемортеровог (1962) рада у коме он даје понашање Гаунт фактора $g(x)$ за енергије изнад прага ($x > 1$), Грим (Griem 1968) уводи емпиријски ефективни Гаунт фактор у теорију Штарковог ширења. Узима да је за високе температуре допринос еластичних судара у укупној ширини занемарљив. За ниже температуре Грим узима у обзир допринос еластичних судара дајући екстраполисани Гаунт фактор испод прага за нееластичан процес као константу $g = 0.2$.

На основу горњих релација (2.3.1) и (2.3.2) и узимајући да је расподела електрона по брзинама Максвелова, Грим (Griem 1968) даје семиемпиријску формулу за рачунање Штарковог ширења изолованих јонских спектралних линија:

$$w_{se} = 8 \left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/2} \left(\frac{E_H}{kT}\right)^{1/2} N \cdot \left\{ \sum_{i'} \tilde{R}_{ii'}^2 g_{se}(x) + \sum_{j'} \tilde{R}_{jj'}^2 g_{se}(x) \right\}, \quad (2.3.7)$$

где је

$$x_{(j=if)} = \frac{E}{\Delta E_{jj'}}.$$

$\tilde{R}_{jj'}^2$ је квадратни матрични елемент (јед. (2.2.1.8)), $E = \frac{3kT}{2}$ — енергија пертурбујућег електрона, E_H — енергија јонизације атома водоника, $\Delta E = |E_i - E_{i'}|$ — енергијска разлика између нивоа $j = i, f$ и најближег пертурбационог нивоа (за пертурбационе нивое i', f' се узимају најближи нивои на које је дозвољен диполни прелаз са посматраног нивоа). Гаунт фактор $g_{se}(x)$ узима следеће вредности:

$$g_{se}(x) = 0.2, \text{ за } x \leq 2, \text{ и}$$

$$g_{se}(x) = 0.24, 0.33, 0.56, 0.98 \text{ и } 1.33$$

$$\text{за } x = 3, 5, 10, 30 \text{ и } 100$$

Уколико је најближи пертурбациони ниво толико далеко да је испуњен услов $\frac{E}{\Delta E_{jj'}} \leq 2$, релацију (2.3.7) можемо упростити узимајући да је Гаунт фактор константан ($g \approx 0.2$) и сумирајући матричне елементе у Кулоновој апроксимацији (Ландау и Лифшиц 1989)

$$\sum_{j'} \tilde{R}_{jj'}^2 = R_j^2 \approx \frac{1}{2} \left(\frac{n_j^*}{z}\right)^2 [5n_j^{*2} + 1 - 3\ell_j(\ell_j + 1)]. \quad (2.3.8)$$

Изрчунавањем константи добија се упрошћена семиемпиријска формула за полу—полуширину w_{use} у Å (Griem 1968)

$$w_{use} = 4.43 \cdot 10^{-30} \frac{\lambda^2(\text{Å}) N(m^{-3})}{\sqrt{T(K)}} \{R_i^2 + R_j^2\}. \quad (2.3.9)$$

У јед. (2.3.7) и (2.3.8) ℓ_j је орбитални квантни број, $Z-1$ је наелектрисање емитера ($Z = 1, 2, 3, \dots$, за неутрале, једанпут, двапут, ...јонизоване атоме, редом), а n_j^{*2} је ефективни главни квантни број дат јед. (2.21).

Што се тиче Гаунт фактора (g_{sh}) за померај, Грим (Griem 1968) полази од тога да су ширина и померај реални и имагинарни део једне комплексне функције (види јед. (2.2.7) за семикласични прилаз у случају неутралних пертурбера). Стога семиемпиријски Гаунт фактор за Штарков померај (g_{sh}) се налази решавајући Кошијеву дисперзиону једначину (Griem 1968)

$$g_{sh}(x) = \frac{x}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{g_{se}(y')}{y'(y' - y)} dy', \quad (2.3.10)$$

где је g_{se} семиемпиријски Гаунт фактор за Штарково ширење, а P означава главну вредност интеграла. За случај $x' \leq 2$ главна вредност интеграла се може израчунати као семиконвергентни ред (Griem 1968)

$$g_{sh}(x) = g_{sh}(0) + \frac{1}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} x^n \int_2^{\infty} \frac{g_{se}(x') - g_{se}(0)}{x'^{n+1}} dx' =$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n x^n = A_0 + 0.332 \left(\frac{x}{10}\right)^2 + 0.305 \left(\frac{x}{10}\right)^3 + 1.36 \left(\frac{x}{10}\right)^4 + \dots \quad (2.3.11)$$

За процену $g_{sh}(0)$ Грим користи функцију $b(x)$ за праволинијску путању пертурбера у семикласичном прилазу (Griem *et al.* 1962 или види 2.2 део овог поглавља) и помоћу ње разматра Гаунт фактор

$$g_{sh}(x) \approx \frac{\sqrt{3}}{\pi} \int_{\rho_{min}}^{\infty} B(y) \frac{d\rho}{\rho} = \frac{\sqrt{3}}{\pi} b(y^{min}) \quad (2.3.12)$$

где је $y = m\rho v / (2\hbar x)$.

Полазећи од јед. (2.3.12) Грим разматра област малих и великих брзина електрона и у поређењу са квазикласичним прорачуном Гаунт фактора процењује да је на граници $x = 1$ вредност Гаунт фактора за померај једнака Гаунт фактору за ширину, тј. $g_{sh}(1) = g_{se}(1) = 0.2$. На основу тога налазе вредност коефицијента $A_0 = 0.163$.

За остале вредности x , Гаунт фактор је редом:

$$\begin{cases} x = 2, 4, 6, 10, 20, 40, 100 \\ g_{sh} = 0.25, 0.41, 0.51, 0.61, 0.78, 0.84, 0.87 \end{cases}$$

При чему је семиемпиријска формула за померај изоловане спектралне линије дата као (Griem 1968)

$$d_{se} = N \frac{h^2}{3\pi m^2} \left(\frac{2m}{\pi kT}\right)^{1/2} \frac{\pi}{\sqrt{3}} \sum_{i', j'} \left\{ \frac{\Delta E_{i' i'}}{|\Delta E_{ii'}|} R_{ii'}^2 g_{sh}(x) - \frac{\Delta E_{i' i'}}{|\Delta E_{ii'}|} R_{ii'}^2 g_{sh}(x) \right\}. \quad (2.3.13)$$

У јед. (2.3.7) и (2.3.13) \bar{R}_{jj}^2 , је квадрат матричног елемента дат јед. (2.2.1.8).

Дискутујући семиемпиријски прилаз за рачунање Штарковог ефекта код једанпут јонизованих емитера (при упоређивању са експерименталним подацима) Грим (Griem 1974) коментарише да одступање рачунатих и експерименталних резултата иду до $\pm 50\%$. Он такође сугерише да би због овако уведеног Гаунт фактора за вишеструко јонизоване емитера могла да се појаве одступања и до $\pm 100\%$.

Такође, у поређењу експерименталних вредности Штарковог ширења са семиемпиријским прорачуном за двапут и трипут јонизованим емитерима (Heu 1976ab, Dimitrijević & Konjević 1978) уочљиво је да су теоријске вредности систематски мање за емитере са већим степеном јонизације. То је условило да се изврши модификовање Гримове семиемпиријске формуле.

2.3.1 Модификована семиемпиријска формула

Димитријевић и Коњевић (Dimitrijević & Konjević, 1980) су анализирали Гримову семиемпиријску формулу и уочили њене недостатке

- Исти Гаунт фактор за све врсте прелаза, а и сва стања јонизације.
- За њену примену потребан је исти број атомских података као и за нај-компликованији семикласични прорачун, а тачност је знатно мања.

Да би отклонили ове недостатке они

- Мењају Гаунт фактор, при чему усвајају његову вредност коју је предложио Кобзев (Кобзев 1971) за прелазе са $\Delta n = 0$, анализирајући експерименталне пресеке расејања за различито јонизовне емитере. Предложена вредност је

$$g = 0.9 - \frac{1}{Z},$$

где је Z резидуално наелектрисање јона. При томе узимају за Гаунт фактор следећи израз (Dimitrijević & Konjević 1980)

$$\bar{g}(x) = 0.7 - \frac{1.1}{Z} + g_{se}(x). \quad (2.3.1.1)$$

Тиме је укључен степен јонизације у семиемпиријски Гаунт фактор. За прелазе при којим се мења главни квантни број ($\Delta n \neq 0$) задржавају Гримов семиемпиријски Гаунт фактор. Оправданост овога потврђује разматрање Гаунт фактора за $\Delta n \neq 0$ од стране Бели – Петрини (Bely & Petrini 1970), који закључују да у зависности од типа прелаза за граничну вредност ($x \leq 2$) Гаунт фактор може бити већи или мањи од 0.2. С обзиром да су те разлике мале, а средња вредност је приближно 0.2, закључују да се за $\Delta n \neq 0$ може задржати семиемпиријски Гаунт фактор који је предложио Ван Режемортер (Van Regemorter 1962), а преузео Грим (Griem 1968).

- Групишу прелазе са $\Delta n \neq 0$ и сабирају њихове доприносе. Чиме се смањује број потребних атомских података. За прелазе $\Delta n = 0$ посебно су рачунали матричне елементе $\ell \rightarrow \ell + 1$ и $\ell \rightarrow \ell - 1$.

При овим модификацијама јед. (2.3.7) има следећи облик

$$w_{MSE} = N \frac{4}{3} \frac{h^2}{m^2} \left(\frac{2m}{\pi kT} \right)^{1/2} \frac{\pi}{\sqrt{3}} \{ R_{\ell_i, \ell_i+1}^2 \tilde{g}(x) + R_{\ell_i, \ell_i-1}^2 \tilde{g}(x) + R_{\ell_j, \ell_j+1}^2 \tilde{g}(x) + R_{\ell_j, \ell_j-1}^2 \tilde{g}(x) + \sum_{i'} (R_{ii'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{se}(x) + \sum_{j'} (R_{jj'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{se}(x) \}, \quad (2.3.1.2)$$

где је $R_{jj'}$, квадрат матричног елемента дат јед. (2.2.1.8), а

$$\sum_{j'} (R_{jj'})^2_{\Delta n \neq 0} = \left(\frac{3n_j}{2Z} \right)^2 \frac{1}{9} (n_j^2 + 3\ell_j^2 + 3\ell_j + 11). \quad (2.3.1.3)$$

У еластичном делу ($\Delta n \neq 0$) најближи пертурбациони ниво се оцењује помоћу израза

$$\Delta E_{n, n+1} \approx 2Z^2 \frac{E_H}{n^3}. \quad (2.3.1.4)$$

У случају виших температура (на пример за $x > 50$), Гаунт фактор се може рачунати употребљавајући израз за високотемпературску границу (Griem 1974)

$$\tilde{g}_{jj'} = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \left\{ \frac{1}{2} + \log \left(\frac{2ZkT}{n_j^2 \Delta E_{jj'}} \right) \right\}. \quad (2.3.1.5)$$

Јед. (2.3.1.2) се може упростити под претпоставком да је $\frac{E}{\Delta E} \leq 2$ (Dimitrijević & Konjević 1987). За Гаунт фактор се може узети $g_{se} = 0.2$ и $\tilde{g} = 0.9 - \frac{1.1}{Z}$. Због мале промене φ^2 , може се ставити $\varphi^2 \approx 1$. Занемарујући нееластични део ($\Delta n \neq 0$, чије учешће не доприноси више од 25%, а то компензује повећање полуширине због претпоставке да је $\varphi \approx 1$) уз горе уведене апроксимације добија се упрошћена модификована семиемпиријска формула доста погодна за процену полуширине (Dimitrijević & Konjević 1987)

$$w_{UMSE}(\text{Å}) = 2.2151 \cdot 10^{-8} \frac{\lambda^2(\text{cm}) N(\text{cm}^{-3})}{\sqrt{T(K)}} \left(0.9 - \frac{1.1}{Z} \right) \times \sum_{j=i, f} \left(\frac{3n_j}{2Z} \right)^2 (n_j^2 - \ell_j^2 - \ell_j - 1) \quad 2.3.1.6$$

где је λ – таласна дужина, а n_j – ефективни квантни број дат изразом (2.21).

У случају модификованог семиемпиријског поступка за рачунање Штарковог помераја, Димитријевић и Кршљанин (Dimitrijević & Kršljanin 1986) узимају Гаунт фактор дат јед. (2.3.1.1) и са том вредношћу траже решење интеграла (2.3.10). У случају за $x \leq 2$ добијају решење у виду семиконвергентог реда (Dimitrijević & Kršljanin 1986, дато такође у Кршљанин 1989)

$$\tilde{g}_{sh} = \tilde{A}_0 + 0.332\left(\frac{x}{10}\right) + 0.305\left(\frac{x}{10}\right)^2 + 0.550\left(\frac{x}{10}\right)^3 + 1.36\left(\frac{x}{10}\right)^4 \dots \quad (2.3.1.7)$$

За вредност коефицијента добијају $\tilde{A}_0 = 0.313, 0.493$ за једанпут и двапут наелектрисане јоне, редом.

За вредности $x > 2$ добијају следеће вредности (Dimitrijević & Kršljanin 1986)

за $x = 3, 5, 10, 20, 40, 80, 100$

$$\tilde{g}_{sh}(x) = \begin{cases} 0.47, 0.58, 0.70, 0.78, 0.86 & \text{за } Z = 2, \\ 0.57, 0.62, 0.70, 0.78, 0.86 & \text{за } Z = 3, \\ 0.62, 0.65, 0.70, 0.78, 0.86 & \text{за } Z = 3, \end{cases}$$

За $Z > 4$ дају приближну релацију

$$\tilde{g}_{sh}(x) \approx \begin{cases} 0.88 - 1.1/Z + 0.01x/Z, & x < 100 \\ 3/2, & x \geq 100. \end{cases}$$

Користећи наведене апроксимације у модификованом семиемпиријском прилазу и горе разматрану вредност Гаунт фактора, Димитријевић и Кршљанин дају модификовану семиемпиријску формулу за померај спектралне линије (Dimitrijević & Kršljanin 1986)

$$d_{MSE} = N \frac{2h^2}{3m\pi} \left(\frac{2m}{kT\pi}\right)^{1/2} \frac{\pi}{\sqrt{3}} \{ R_{\ell_i, \ell_i+1}^2 \tilde{g}_{sh}(x_{\ell_i, \ell_i+1}) - R_{\ell_i, \ell_i-1}^2 \tilde{g}_{sh}(x_{\ell_i, \ell_i-1}) - \\ - R_{\ell_f, \ell_f+1}^2 \tilde{g}_{sh}(x_{\ell_f, \ell_f+1}) + R_{\ell_f, \ell_f-1}^2 \tilde{g}_{sh}(x_{\ell_f, \ell_f-1}) + \quad (2.3.1.8)$$

$$+ \sum_{i'} (\tilde{R}_{ii'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{sh}(x_{n_i, n_{i+1}}) - 2 \sum_{i' (\Delta E_{ii'} < 0)} [(\tilde{R}_{ii'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{sh}(x_{i, i'})] -$$

$$- \sum_{f'} (\tilde{R}_{ff'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{sh}(x_{n_f, n_{f+1}}) + 2 \sum_{f' (\Delta E_{ff'} < 0)} [(\tilde{R}_{ff'}^2)_{\Delta n \neq 0} g_{sh}(x_{f, f'})] + \sum_k \delta_k \}.$$

$\sum \delta_k$ није једнака нули само ако је задовољен услов $|\Delta E_{jj'}| \ll |\Delta E_{n, n+1}|$. У том случају

$$\delta_{j'} = \pm \varepsilon_j (R_{jj'}^2) \left\{ g_{sh}\left(\frac{E}{\Delta E_{jj'}}\right) \mp g_{sh}\left(\frac{E}{\Delta E_{n_j, n_{j+1}}}\right) \right\} \quad (2.3.1.9)$$

где горњи знак одговара $\Delta E_{jj'} < 0$, а ε_j је

$$\varepsilon_j = \begin{cases} 1, & \text{за } j = i, \\ -1, & \text{за } j = f. \end{cases}$$

У случају $\frac{E}{\Delta E} \leq 2$ јед. (2.3.1.8) се може упростити узимајући да је $g_{sh} = (0.9 - \frac{1.1}{Z})$ и занемарујући прелазе са $\Delta n = 0$. Сумирањем квадрата матричних елемената свих дозвољених прелаза добија се упрошћена модификована семиемпиријска формула за Штарков померај (Dimitrijević & Konjević 1987)

$$d_{UMSE1}(\text{Å}) \approx 1.1076 \cdot 10^{-8} \frac{\lambda^2(\text{cm})N(\text{cm}^{-3})}{\sqrt{T(K)}} \left(0.9 - \frac{1.1}{Z}\right) \frac{9}{4Z^2} \times \\ \times \sum_{j=i,f} \frac{n_j^2 \varepsilon_j}{2\ell_j + 1} (n_j^2 - 3\ell_j^2 - 3\ell_j - 1). \quad 2.2.1.10$$

Релација (2.3.1.10) се може применити за прелазе код којих је испуњен следећи услов

$$\begin{aligned} \ell &\rightarrow \ell + 1, \text{ или} \\ \ell &\rightarrow \ell - 1, \end{aligned} \quad 2.3.1.11$$

изузимајући прелазе са $\ell = 0$.

За прелазе који не испуњавају услов (2.3.1.11) користи се следећа формула

$$d_{USEM2}(\text{Å}) \approx 1.1076 \cdot 10^{-8} \frac{\lambda^2(\text{cm})N(\text{cm}^{-3})}{\sqrt{T(K)}} \left(0.9 - \frac{1.1}{Z}\right) \frac{9}{4Z^2} \times \\ \times \sum_{j=i,f} \frac{n_j^2 \varepsilon_j}{2\ell_j + 1} \{(\ell_j + 1)[n_j^2 - (\ell_j + 1)^2] - \ell_j(n_j^2 - \ell_j^2)\}. \quad 2.3.1.12$$

У јед. (2.3.1.8), (2.3.1.10) и (2.3.1.12) \vec{R}_{jj}^2 , и $\sum_j (\vec{R}_j)_{\Delta n \neq 0}$ означавају квадратне матричне елементе. У Кулоновој апроксимацији они су дати јед. (2.3.14) и (2.3.1.3), редом. Остале ознаке су у складу са јед. (2.20).

Код семиемпиријског и модификованог семиемпиријског прилаза можемо уочити да у релације за прорачун Штарковог ширења (види јед. (2.3.7), (2.3.13), 2.3.1.2) и (2.3.1.8)) улази семиемпиријски Гаунт фактор и квадрати матричних елемената. Према томе, за испитивање семиемпиријског прилаза код комплексних јонизованих емитера требало би обратити пажњу на Гаунт фактор и на начин обрачуна матричних елемената. Другим речима, треба тестирати Гаунт фактор на граници за нееластичне сударе код тежих елемената и обратити пажњу на тип везе код комплексних емитера. О томе ће више речи бити у наредним поглављима.

3. АТОМСКИ МАТРИЧНИ ЕЛЕМЕНТИ

Из јед. (2.2.7), (2.2.13), (2.2.1.3), (2.2.1.8), може се уочити да је за рачунање Штарковог помераја и полуширине у семиемпиријском и модификованом семиемпиријском прилазу потребно познавати функције стања непертурбованих нивоа емитера. Другим речима, потребно је израчунати матричне елемента диполног момента. У том контексту за рачунање ширења потребно је располагати са мереним или рачунатим јачинама осцилатора или Ајнштајновим коефицијентима за електрични диполни прелаз, или их у одређеној апроксимацији рачунати. Код одређеног броја емитера, при рачунању матричних елемената, обично се користи шема LS везе или шема jj везе. За велики број комплекснијих емитера не важи ни LS ни jj шема веза, већ се проблем може описати међувезом.

Квадрат апсолутног матричног елемента (не диполног момента), сумиран по компонентама вектора r и по пројекцији угаоног момента J' , може се изразити преко јачине осцилатора ($f_{j'j}$) или вероватноће спонтаног прелаза ($A_{jj'}$) следећом релацијом (Griem 1974)

$$\begin{aligned} \sum | \langle J' | r | J \rangle |^2 &= \frac{3E_H}{E_{J'} - E_J} a_0^2 \cdot f_{J'J} \\ &= \left(\frac{3E_H}{E_{J'} - E_J} \right)^3 \frac{3}{\alpha^3} a_0^2 \frac{2J' + 1}{2J + 1} \frac{\hbar}{E_H} \cdot A_{JJ'}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

где је $\alpha \approx 1/137$ константа фине структуре, a_0 Боров радијус, E_H енергија јонизације водоника, \hbar Планкова константа, E_J и $E_{J'}$ енергије посматраних нивоа, J и J' угаони моменти.

Овај израз одређује вредност квадрата апсолутног матричног елемента, усредњеног по пројекцији угаоних момената J , што је у већини случајева и најпотребније. Релација (3.1) важи само у случају $E_{J'} > E_J$, у супротном користи се следећи израз

$$\begin{aligned} \sum | \langle J' | r | J \rangle |^2 &= \frac{3E_H}{E_J - E_{J'}} a_0^2 \frac{2J' + 1}{2J + 1} \cdot f_{JJ'} \\ &= \left(\frac{3E_H}{E_J - E_{J'}} \right)^3 \frac{3}{\alpha^3} a_0^2 \frac{\hbar}{E_H} \cdot A_{J'J}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

За оба случаја квадрат матричног елемента може се изразити преко јачине линије ($S_{JJ'}$)

$$\sum | \langle J' | r | J \rangle |^2 = \frac{a_0^2}{2J + 1} \cdot S_{JJ'}. \quad (3.3)$$

За двадесет најлакших елемената, код великог броја прелаза, постоје критички процењене и утабличене (рачунате и мерене) вредности јачина осцилатора (Wiese *et al.* 1966, Wiese *et al.* 1969). У литератури се могу наћи мерене и рачунате вредности јачине осцилатора за поједине прелазе тежих елемената (нпр. Груздев 1969, Kunisz *et al.* 1975, Miller & Bengston 1980, итд.). На основу мерења и прорачуна изведених до поткрај седамдесетих година Визе и Мартин (Wiese & Martin 1980) врше одабир вероватноћа прелаза, при томе дају вероватноће прелаза за значајан број прелаза комплексних емитера. Иначе у већини случајева, вероватноће прелаза, односно јачину осцилатора, је потребно посебно рачунати. Због једноставности прорачуна, код оних емитера код којих важи шема LS везе најчешће се за прорачун јачине осцилатора користи Бејтс Дамгардова апроксимација (Bates & Damgaard 1949). Зато ћемо нешто прво рећи о LS вези и Бејтс Дамгардовој апроксимацији и о ограничењима оваквог прорачуна, посебно на Штарково ширење у Модификовано семиемпиријском прилазу.

LS и jj веза. Критеријуми применљивости LS везе код спектра комплексних емитера

При малим релативистичким ефектима, другим речима када су интервали fine структуре мали у поређењу са разликом интервала нивоа са различитим L и S , можемо говорити о LS типу везе. Код овог типа везе орбитални моменти електрона сабирају се у укупни орбитални момент ($\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i$) емитера, а спин електрона сумира се у укупни спин ($\vec{S} = \sum \vec{s}_i$) емитера.

Област применљивости овог типа везе је ограничена углавном на лакше емитере, а са већим редним бројем атома (јона) релативистички ефекти у атому постају јачи и применљивање LS везе или не важи, или се може применити на најниже нивое (Ландау и Лифшиц 1989). Такође и код неких лакших елемената, за више енергијске нивое овај тип везе не важи.

У случају када су релативистичке интеракције упоредљиве са електростатичким, не може се говорити о одвојеном орбиталном моменту и спину електрона, већ се они слажу у укупни момент електрона j , који се затим слажу у укупни момент атома J . Овакав тип везе назива се jj тип везе. У суштини код сложенијих атома овакав тип везе никада није присутан у чистом облику; код тежих елемената срећу се различите комбинације између LS и jj типа везе.

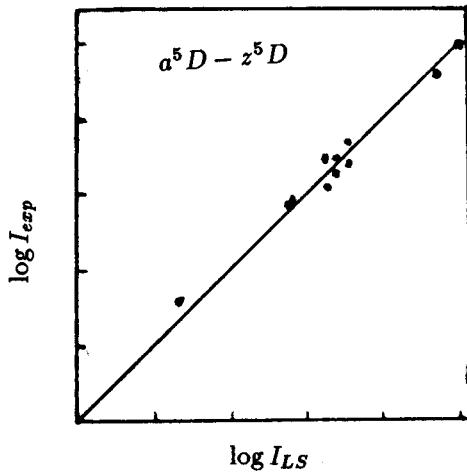
Важење LS типа енергијске везе за одређене термове комплексних емитера може се испитати помоћу Ланде фактора g (Moore 1971a) и правила интервала (Груздев и Старцев 1959). Одступање рачунатих од експерименталних вредности g фактора указују на одступање од LS везе. У случају важења LS везе, Ланде фактор се веома лако може израчунати (види нпр. Шпольский 1984)

$$g_{LS} = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (3.3.3)$$

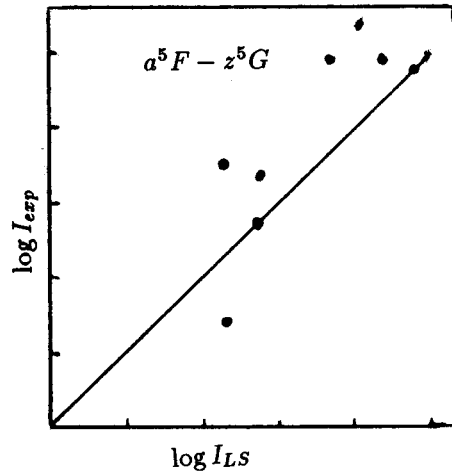
где су L , S , J квантни бројеви орбиталног, спинског и укупног момента импулса који одговара терму $^{2S+1}L_J$.

На основу експерименталних и рачунатих (по LS вези) релативних интензитета линија Груздев и Старцев (1959) дају услове за примењивост LS везе код комплекснијих спектра. Разматрају вредност разлике између експерименталног (g_{exp}) и рачуног (g_{cal}^{LS}) Ланде фактора ($\Delta g = g_{\text{exp}} - g_{\text{cal}}^{LS}$). При томе се могу разликовати три случаја (Груздев и Старцев 1959)

- $\Delta g \leq 0.010$, за посматрани ниво (осим нивоа са најмањим J) експерименталне вредности интензитета се добро слажу са рачунатим вредностима по LS вези.
- $\Delta g = 0.010 - 0.030$, при овој разлици Ланде фактора јављају се одступања која у првој апроксимацији могу бити толерисана.
- Случај када је $\Delta g > 0.030$ је онај код којих се рачунате и експерименталне вредности релативних интензитета веома много разликују.



Сл. 3.1



Сл. 3.2

Ови услови важе за све нивое осим оне са најмањим J , за те нивое при $\Delta g \leq 0.02$ вредности рачунатих и експерименталних података за интензитет се добро слажу. У првој апроксимацији можемо рећи да се тип LS везе може користити и до $\Delta g = 0.05$, већ за вредности $\Delta g > 0.05$ долази до великих разлика између рачунатих и експерименталних вредности интензитета линије.

Као илустративни пример могу послужити два мултиплета Fe I приказани на слици 3.1 и 3.2. На апсцису је нанесен $\log I_{LS}$, а на ординату $\log I_{\text{exp}}$ (I је релативни интензитет мултиплета). Положај тачака на правој под углом од 45° указује на слагање експерименталних и рачунатих вредности. Код мултиплета $a^5D - z^5D$ је $\Delta g < 0.01$ и уочава се добро слагање мереног и рачуног релативног интензитета. Код мултиплета $a^5F - z^5G$ је $\Delta g > 0.03$. Наиме, код мултиплета z^5G за термове са $J = 5, 4, 3$ разлика фактора g је $\Delta g = 0.049, 0.047, 0.030$,

редом. Са Сл. 2. се види да је одступање рачунатих и мерених релативних интензитета велико.

Код већег броја термова не постоје мерени Ланде фактори, зато је згодније, мада са мањом тачношћу, проценити одступање од LS везе на основу одступања од правила интервала.

Груздев и Старцев (1959), на основу упоређивања мерених и рачунатих релативних интензитета и одступања од правила интервала дају следећа ограничења

- Ако за термове који образују мултиплет постоји одступање од правила интервала око $\sim 20\%$ онда се добија добро слагање између рачунатих и мерених релативних интензитета,
- уколико је то одступање од $\sim 20\%$ до $\sim 100\%$ у првој апроксимацији могу се рачунати релативни интензитети у LS вези,
- и за одступања преко $\sim 100\%$ када се експериментални резултати веома много разликују од рачунатих.

Бејтс Дамгардова апроксимација

У случају LS везе јачина линије се може изразити као (Bates & Damgaard 1949)

$$S_{JJ'} = S(\text{line}) \cdot S(\text{mult.}) \cdot \sigma^2 \quad (3.3)$$

где су $S(\text{line})$, $S(\text{mult.})$ релативни фактори линије и мултиплета, редом. За диполни прелаз они се могу изразити преко фактора линије ($\mathfrak{R}_{\text{line}}$) и фактора мултиплета ($\mathfrak{R}_{\text{mult.}}$) као

$$S(\text{line}) = \frac{\mathfrak{R}_{\text{line}}^2}{2S + 1}$$

$$S(\text{mult.}) = (2S + 1)(4\ell_{>}^2 - 1)\mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2, \quad (3.4)$$

где је S укупни спин. О овим факторима нешто више ће бити речено касније. У јед. (3.3) радијални фактор σ дат је следећом релацијом (Bates & Damgaard 1949)

$$\sigma = \frac{\ell_{>}}{\sqrt{4\ell_{>}^2 - 1}} \cdot \int_0^{\infty} R(n, \ell)R(n', \ell')r \, dr, \quad (3.5)$$

где је r растојање валентног електрона, а $R(n, \ell)$ су таласне функције валентног електрона у доњем и горњем стању радијативног прелаза. Бејтс и Дамгардова су предложили апроксиматвни метод за њихово налажење са којим се у добром мери могу задовољити потребе спектроскопије код одређеног типа прелаза. У Кулоновом централном пољу функције $R(n, \ell)$ налазе се решавајући диференцијалну једначину

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \left(\frac{2Z}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \epsilon \right) R = 0, \quad (3.6)$$

где је Z/r потенцијал електростатичког поља, а ϵ сопствена вредност енергије. Уводећи смену

$$R = W_{n,\ell+1} \left(\frac{2Zr}{n} \right),$$

Бејтс и Дамгардова (1949) добијају асимптотско ($R(n, \ell) \rightarrow 0$ за $r \rightarrow \infty$) решење функције Витекера (Whittaker) $W_{n,\ell+1}$

$$W_{n,\ell+1} \left(\frac{2Zr}{n} \right) = \exp(-rZ/n) \cdot \left(\frac{2rZ}{n} \right)^n \cdot \left\{ 1 + \sum_{t=1}^{\infty} \frac{a_t}{r^t} \right\}, \quad (3.7)$$

где је

$$a_1 = \frac{n}{2Z} [\ell(\ell+1) - n(n+1)], \quad (3.8)$$

и

$$a_t = a_{t-1} \left[\frac{n}{2tZ} \cdot [\ell(\ell+1) - (n-t)(n-t+1)] \right]. \quad (3.9)$$

На основу јед. (3.7) и (3.8) може се добити решење радијалног интеграла σ (Bates & Damgaard 1949, Oertel & Shomo 1968)

$$\sqrt{4\ell_{>}^2 - 1} \cdot \sigma(n\ell, n'\ell') = \frac{2^{n-n'} Z^{n+n'+1}}{n^{n+1} n'^{n'+1}} \times$$

$$\times \sqrt{\Gamma(n+\ell+1)\Gamma(n-\ell)\Gamma(n'+\ell'+1)\Gamma(n'-\ell')} \cdot \sum_{k=0} \sum_{k'=0} a_k a_{k'} \gamma_{kk'}, \quad (3.10)$$

где је $\gamma_{kk'}$

$$\gamma_{kk'} = \left[\frac{nn'}{Z(n+n')} \right]^{n+n'+2-k-k'} \Gamma(n+n'+2-k-k'). \quad (3.11)$$

У горњим јед. n и n' су ефективни главни квантни бројеви, а ℓ и ℓ' орбитални квантни бројеви разматаног прелаза $n\ell \rightarrow n'\ell'$, $\Gamma(x)$ је Гама функција. У јед. (3.10) a_k , односно $a_{k'}$ је дат јед. (3.8) и (3.9).

Радијални интеграл се често израчунава помоћу утабличеног коефицијента φ (Bates & Damgaard 1949, Oertel & Shomo 1968)

$$\sigma^2 = \left(\frac{3n_{l_{>}}}{2Z} \right)^2 \cdot (n_{l_{>}}^2 - l_{>}^2)^{1/2} \cdot \varphi^2, \quad (3.12)$$

где је φ табелисани фактор (Bates & Damgaard 1949, Oertel & Shomo 1967), овде је $l_{>} = \max(\ell, \ell')$, а $n_{l_{>}}$ ефективни главни квантни број који одговара већем орбиталном квантном броју.

Из јед. (3.2-3.12) није тешко добити изразе за вероватноћу прелаза у Бејтс Дамгардовој апроксимацији.

$$A_{JJ'} = \frac{2.0261 \cdot 10^{18}}{(2J+1)\lambda^3(\text{Å})} \mathfrak{R}_{\text{line}}^2 \mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2 \cdot \left(\frac{3n^*}{2Z}\right)^2 (n_{>}^{*2} - l_{>}) l_{>} \varphi_{JJ'}^2. \quad (3.13.)$$

Табела 3.1. У табели су упоређене јачине осцилатора за спектралне линије Cd II: f_{WM} – мерене вредности (Wiese & Martin 1980), f_{KMR} – теоријске вредности са урачунатим релативистичким ефектима (Kunisz *et al.* 1975), f_C – рачунате вредности по Бејтс Дамгардовој (1949) апроксимацији (Кулонова апроксимација).

Прелаз	λ [nm]	f_{WM}	f_{KMR}	f_C
$5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{1/2}^0$	226.50	0.23	0.321	0.291
$5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{3/2}^0$	214.44	0.39	0.674	0.612
$5p^2P_{1/2}^0 - 6s^2S_{1/2}$	257.29	0.17	0.148	0.119
$5p^2P_{3/2}^0 - 6s^2S_{1/2}$	274.85	0.16	0.136	0.135
$5p^2P_{3/2}^0 - 5s^2D_{5/2}$	441.56	0.006	—	—

Бејтс Дамгардов метод, тамо где важи LS веза, је примењив за мање вредности ефективног главног квантног броја $n \leq 20$ (Regemorter *et al.* 1979). За веће вредности ефективног главног квантног броја грешка се акумулира, тако да су одступања велика, стога се у тим случајевима примењују друга решења једначине (3.6) (van Regemorter *et al.* 1979, Hoang Binh *et al.* 1979, Fonck & Tracy 1980).

Случај енергијских нивоа са $n > 20$

За веће вредности главног ефективног квантног броја најчешће се користи метод који су предложили Режемортер и други (van Regemorter *et al.* 1979, Hoang Binh *et al.* 1979). Узимајући асимптотско решење Витекерове функције они налазе решење радијалног интеграла

$$\sigma'_{n,\ell,n'\ell'} = \int_0^\infty R_{n,\ell} R_{n',\ell'} r dr = (-1)^{n+\ell+1} \left(\frac{1}{zn'n}\right) \frac{1}{(2\ell+1)!} \times$$

$$\times \left(\frac{\Gamma(n'+\ell'+1)}{\Gamma(n+\ell+1)\Gamma(n-\ell)\Gamma(n'-\ell')}\right)^{1/2} \cdot \left(\frac{2}{n'}\right)^{\ell'+1} \left(\frac{2}{n}\right)^n \sum_{t=0}^{t_0} a_t(n,\ell) I_t \quad (3.14)$$

где t_0 испуњава следећи услов

$$n - \ell - 1 \leq t_0 < n - 1.$$

Низови a_t и I_t су дати следећим изразима

$$a_t = \left(\frac{n' + n}{2n'}\right) \left[\frac{\ell(\ell + 1) - (n - t)(n - t + 1)}{(n + \ell' + 3 - t)t}\right] \cdot a_{t-1},$$

где је $a_0 = 1$, и

$$I_t = \Gamma(n + \ell' + 3 - t) \left(\frac{nn'}{n + n'}\right)^{n + \ell' + 3 - t} \times {}_2F_1(-n' + \ell' + 1, n + \ell' + 3 - t, 2\ell' + 2; \frac{2n}{n' + n}) \quad (3.15)$$

где је ${}_2F_1$ Гаусова хипергеометријска функција (Luke 1975, Ландау и Лифшиц 1989, итд.).

За велике вредности ефективног квантног броја n' коефицијент $\alpha = -n' + \ell' + 1$ има негативну вредност, стога је погодно за рачунање ове функције користити хипергеометријски полином

$$F(\alpha, \beta; \gamma; x) = 1 + \frac{\alpha\beta x}{\gamma 1!} + \frac{\alpha(\alpha + 1)\beta(\beta + 1)x^2}{\gamma(\gamma + 1)2!} + \dots \quad (3.16)$$

За $-\alpha \geq 15$ директно рачунање $F(\alpha, \beta; \gamma; x)$ по јед. (3.16) је доста компликовано, стога се могу употребљавати следеће рекурентне везе (Hoang Binh *et al.* 1979)

$$\begin{aligned} (\alpha - \gamma)F(\alpha - 1, \beta; \gamma; x) + [\gamma - \alpha - \beta + (\beta - \alpha)(1 - x)]F(\alpha, \beta; \gamma; x) + \\ + \alpha(1 - x)F(\alpha + 1, \beta; \gamma; x) = 0 \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$F(0, \beta; \gamma; x) = 1 \quad (3.18)$$

$$F(-1, \beta; \gamma; x) = 1 - \frac{\beta}{\gamma}x \quad (3.19)$$

При сумирању Гаусове хипергеометријске функције (јед. (3.14)) за $t = 0$ и $t = 1$, функција се рачуна помоћу релације (3.16) или јед. (3.17-3.19), а за $1 < t \leq t_0$ може се користити следећа релација

$$\begin{aligned} (\gamma - \beta)F(\alpha, \beta - 1; \gamma; x) + (2\beta - \gamma - \beta x + \alpha x)F(\alpha, \beta; \gamma; x) + \\ + \beta(x - 1)F(\alpha, \beta + 1; \gamma; x) = 0. \end{aligned} \quad (3.20)$$

На основу јед. (3.14-3.20) може се израчунати Бејтс-Дамгардови коефицијент φ за веће вредности ефективног квантног броја

$$\varphi = \frac{\sigma'}{F},$$

где је F у случају диполног прелаза дато у следећем облику (Bates & Damgaard 1949, Oertel & Shomo 1968, Hoang Binh *et al.* 1979)

$$F = \frac{3n_{l>}}{2Z} \cdot (n_{l>}^2 - \ell_{>}^2)^{1/2},$$

где је $\ell_{>} = \max(\ell, \ell')$ већа вредност орбиталног квантног броја, а $n_{l>}$ њему одговарајући ефективни квантни број.

Фактори линије и мултиплета

Као што се види из јед. (3.3), за рачунање јачине линије ($S_{JJ'}$) потребно је познавати фактор линије ($\mathfrak{R}_{\text{line}}$) и фактор мултиплета ($\mathfrak{R}_{\text{mult.}}$). Формуле за израчунавање ових фактора изведене су почетком овог века (Krönig 1925, Russell 1925 итд.), а за одређене типова прелаза од астрофизичког интереса су утабличене у радовима Голдберга (Goldberg 1935) и Мензел – Голдберга (Menzel & Goldberg 1936). Детаљније таблице фактора линије и мултиплета дају Шор и Мензел (Shore & Menzel 1965). Често се за рачунање матричних елемената користе утабличене вредности $\mathfrak{R}_{\text{line}}$ и $\mathfrak{R}_{\text{mult.}}$. Међутим, њих није тешко ни рачунати. Овде, ослањајући се на радове Рохрлича (Rohrlich 1959) и Шор – Мензела (Shore & Menzel 1965), дајемо формуле за рачунање ових фактора.

Пођимо од израза за јачину линије у условима LS везе у диполној апроксимацији. Јед. (3.3) може се написати у следећем облику (Rohrlich 1959)

$$S_{JJ'} = |\langle \alpha LSJ | R^{(1)} | \alpha' L' S' J' \rangle|^2 = \mathfrak{R}_{\text{line}}^2 \mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2 \cdot \mathfrak{Z}^2 \delta_{SS'}, \quad (3.21)$$

где је \mathfrak{Z} радијални фактор који се на основу јед. (3.3) и (3.21) може изразити преко радијалног интеграла као

$$\mathfrak{Z}^2 = \ell_{>} (4\ell_{>}^2 - 1) \cdot \sigma^2. \quad (3.22)$$

Фактор $\delta_{SS'}$ у јед. (3.21) узима следеће вредности:

$$\delta_{SS'} = \begin{cases} 1 & \text{за } S = S' \\ 0 & \text{за } S \neq S' \end{cases}. \quad (3.23)$$

Примењујући следећу трансформацију (Racah 1942)

$$\langle abc | T^{(k)} | ab'c' \rangle = \sqrt{2c+1} \cdot \sqrt{2c'+1} \cdot W(acb'k; bc') \langle b | T^{(k)} | b' \rangle$$

на матрични елемент с леве стране јед. (3.21) добијамо:

$$\langle \alpha SLJ | R^{(1)} | \alpha' S' L' J' \rangle = \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} W(SJL'1; LJ') \times$$

$$\langle \alpha L | R^{(1)} | \alpha' L' \rangle > \delta_{SS'} \quad (3.24)$$

где су $W(SJL'1; LJ')$ Ракахови коефицијенти или 6j симболи (види нпр. Ландау и Лиџиц 1989)

$$W(SJL'1; LJ') = (-1)^{S+J+L'+1} \begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L' & J' \end{Bmatrix}. \quad (3.25)$$

Фактор линије. Формула и конкретни примери

Упоредњујући јед. (3.21) и (3.24) за фактор линије добијемо (Shore & Menzel 1965)

$$\mathfrak{R}_{\text{line}} = \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} \cdot W(SJL'1; LJ'). \quad (3.26)$$

6j симболи у општем случају могу се израчунати помоћу следеће суме (види нпр. Јуцис и Бандзайтис 1965, Јуцис и др. 1960, Ландау и Лиџиц 1989, итд.)

$$\begin{Bmatrix} S & J & L \\ 1 & L' & J' \end{Bmatrix} = f(SJL) \cdot f(SL'J') \cdot f(1JJ') \cdot f(1L'L) \cdot \sum_k g_k h_k, \quad (3.27)$$

где је

$$f(abc) = \left[\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(-a+b+c)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{1/2}, \quad (3.27a)$$

$$g_k = \frac{(-1)^k (k+1)!}{(k-S-J-L)!(k-S-L'-J')!(k-1-J-J')!(k-L'-1-L)!}, \quad (3.27b)$$

$$h_k = \frac{1}{(S+J+L'+1-k)!(J+L+L'+J'-k)!(L+S+J'+1-k)!}, \quad (3.27c)$$

где се сумирање врши по свим позитивним вредностима k , при чему ниједан подфакторијелни израз нема негативну вредност, тј. ако уведемо следећу ознаку за сумирање коефицијената x :

$$\Xi_{x_1 x_2 x_3 \dots x_N} = x_1 + x_2 + x_3 + \dots + x_N$$

горњи услов за вредност целог природног броја k можемо изразити на следећи начин

$$\max(\Xi_{SJL}, \Xi_{SL'J'}, \Xi_{1JJ'}, \Xi_{L'1L}) \leq k \leq \min(\Xi_{SJL'1}, \Xi_{JLL'J'}, \Xi_{LSJ'1}) \quad (3.28)$$

где ознаке $\min(\dots)$ и $\max(\dots)$ означавају минималну и максималну вредност од аргумената у загради, редом.

- **ПРИМЕР.** за прелаз $ns^3S_1 - np^3P_1$, горњи коефицијенти су $S' = S = 1$ (из $2S + 1 = 3$), $L = 0$, $L' = 1$, $J = 1$, $J' = 1$. Рачунамо $W(1111; 01)$ помоћу израза (3.27). Из услова (3.28) добијамо да је

$$3 \leq k \leq 3$$

што је испуњено за $k = 3$. Из јед. (3.27-3.27c) није тешко добити да је $W(1111; 01) = 1/3$, а из јед. (3.26) $\mathfrak{R}_{\text{line}} = 1$.

У случају прелаза $np^3P_1 - (n+1)^3S_1$ добићемо да је $\mathfrak{R}_{\text{line}} = 1$, тј. само је супротног предзнака.

За прелаз $np^2P_{1/2} - nd^2D_{3/2}$, добијемо да је $k = 4$, $W(\frac{1}{2}\frac{1}{2}21; 1\frac{3}{2}) = 0.288675$, а $\mathfrak{R}_{\text{line}} = 0.81650$.

Фактор мултиплета. Формуле и примери.

Фактори мултиплета зависе од конфигурација родитељских нивоа између којих се врши прелаз. У диполној апроксимацији најчешће се срећу следећи типови прелаза

$$\begin{array}{ccc} I\ell - I\ell' & Isp - Is^2 & \ell^k s - \ell^{k-1} s\ell \\ \ell^k - \ell^{k-1}\ell' & p^k s - p^{k-1}s^2 & \ell^k s - \ell^{k-1}\ell s \end{array}$$

и прелази типа

$$\ell^k \ell' \ell'' - \ell^k \ell'^2, \ell^k \ell'' \ell' - \ell^k \ell'^2.$$

Овде је са I означена конфигурација фиксног електронског омотача.

Даље ћемо дати формуле за сваки горе наведени тип прелаза понаособ. Уопштено узмимо да за све типове прелаза израз $\langle \alpha L | R^{(1)} | \alpha' L' \rangle$ из јед. (3.24) можемо написати у следећем облику (Shore & Menzel 1965)

$$\langle \alpha L | R^{(1)} | \alpha' L' \rangle = \mathfrak{R}_{\text{mult}} \times \mathfrak{F}, \quad (3.29)$$

где α означава $L_c \ell$, а L_c је укупни орбитални момент омотача.

Прелази типа $I\ell - I\ell'$

У случају овог типа прелаза јед. (3.24) можемо написати у следећем облику (Krönig 1925)

$$\sqrt{S} = \mathfrak{R}_{\text{line}} \cdot \sqrt{2L+1}\sqrt{2L'+1} W(L_c L \ell' 1; \ell L') \cdot \mathfrak{F} \quad (3.30)$$

Из јед. (3.29) и (3.30) следује да је фактор мултиплета

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = \sqrt{2L+1}\sqrt{2L'+1} W(L_c L \ell' 1; \ell L') \quad (3.31)$$

За израчунавање $W(L_c L \ell' 1; \ell L')$ могу се користити једначине (3.27-3.28а). У овом случају треба направити следеће смене у јед (3.25)

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

Због једноставнијег означавања у даљем тексту узмимо да је

$$W_{\ell, \ell'}(L_c L L') = \sqrt{2L+1} \sqrt{2L'+1} W(L_c L \ell' 1; \ell L'),$$

тј. у овом случају је $\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = W_{\ell, \ell'}(L_c L L')$

У случају $s-p$ прелаза факторе мултиплета можемо израчунати по једноставној формули (Shore & Menzel 1965)

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = (-1)^{L_c+1-L'} \left(\frac{2L'+1}{3} \right)^{1/2}, \quad (3.32)$$

док за остале типове прелаза морамо рачунати Ракахове коефицијенте.

- ПРИМЕР: Прелаз код $Br II$ $4p^3(2D^0)5s^3D^0 - 4p^3(2D^0)5p^3F$. Имамо да је

$$L_c = D = 2, L = D = 2, \ell' = p = 1, \ell = s = 0, L' = F = 3,$$

према томе вредност k за израчунавање $W(2211; 03)$ добијамо из услова (3.28 и 3.28а)

$$6 \leq k \leq 6,$$

затим за $k = 6$ није тешко добити $W(2211; 03) = \sqrt{1/3} \cdot \sqrt{1/5}$, а за $\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = 1.5275252$.

Фактор мултиплета код овог типа прелаза за $s-p$, $p-d$ и $d-f$ прелазе утабличени су у раду Шора и Мензела (Shore & Menzel 1965). У табели 3.2 дати су фактори мултиплета за $f-g$ и $g-h$ прелазе, као допуна табела из наведеног рада Шора и Мензела.

Табела 3.2. $W_{ll}(L_c L L')$ за $f - g$ прелазе.

L_c	L_f	L_g	$W_{fg}(L_c L L')$	$W_{fg}^2(L_c L L')$
<i>S</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	1.000000	1.000000
<i>P</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	.845154	.714286
		<i>F</i>	.250000	.062500
		<i>G</i>	-.968246	.937500
		<i>F</i>	.031497	.000992
		<i>G</i>	-.250000	.062500
<i>D</i>	<i>P</i>	<i>D</i>	.654654	.428571
		<i>D</i>	.345033	.119048
		<i>F</i>	-.771517	.595238
		<i>D</i>	.089087	.007937
		<i>F</i>	-.416667	.173611
	<i>G</i>	<i>F</i>	.904684	.818452
		<i>F</i>	-.094491	.008929
		<i>G</i>	.420459	.176786
		<i>H</i>	-1.048888	1.100000
		<i>G</i>	.069007	.004762
<i>D</i>	<i>H</i>	<i>H</i>	-.349603	.122222
		<i>I</i>	1.201850	1.444444
<i>F</i>	<i>C</i>	<i>P</i>	.377964	.142857
		<i>P</i>	.400892	.160714
		<i>D</i>	-.517549	.267857
	<i>D</i>	<i>P</i>	.172516	.029762
		<i>D</i>	-.498012	.248016
		<i>F</i>	.660687	.436508
		<i>D</i>	-.199205	.039683
	<i>F</i>	<i>F</i>	.552771	.305556
		<i>G</i>	-.809174	.654762
		<i>F</i>	.188982	.035714
		<i>G</i>	-.566947	.321429
		<i>H</i>	.963624	.928571
	<i>H</i>	<i>G</i>	-.154303	.023810
		<i>H</i>	.532663	.283730
		<i>I</i>	-1.124228	1.263889
		<i>H</i>	.099602	.009921
	<i>I</i>	<i>I</i>	-.424918	.180556
		<i>I</i>	1.290994	1.666667
		<i>K</i>		

Табела 3.3. $W_{ll'}(L_cLL')$ за $g - h$ прелазе.

L_c	L_g	L_h	$W_{gh}(L_cLL')$	$W_{gh}^2(L_cLL')$
<i>S</i>	<i>G</i>	<i>H</i>	1.000000	1.000000
<i>P</i>	<i>F</i>	<i>G</i>	.881917	.777778
		<i>G</i>	.200000	.040000
	<i>H</i>	<i>H</i>	-.979796	.960000
		<i>G</i>	.020101	.000404
		<i>H</i>	-.200000	.040000
		<i>I</i>	1.087115	1.181818
<i>D</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	.745356	.555556
		<i>F</i>	.278887	.077778
	<i>G</i>	<i>G</i>	-.836660	.700000
		<i>F</i>	.055048	.003030
		<i>G</i>	-.338446	.114545
	<i>H</i>	<i>H</i>	.939374	.882424
		<i>G</i>	-.060302	.003636
		<i>H</i>	.339935	.115556
		<i>I</i>	-1.050252	1.103030
	<i>I</i>	<i>H</i>	.044947	.002020
		<i>I</i>	-.280692	.078788
<i>K</i>		1.167748	1.363636	
<i>F</i>	<i>P</i>	<i>D</i>	.577350	.333333
		<i>D</i>	.333333	.111111
	<i>F</i>	<i>F</i>	-.666667	.444444
		<i>D</i>	.100504	.010101
		<i>F</i>	-.420437	.176768
	<i>G</i>	<i>G</i>	.768706	.590909
		<i>F</i>	-.123091	.015152
		<i>G</i>	.461224	.212727
		<i>H</i>	-.878704	.772121
	<i>H</i>	<i>G</i>	.120605	.014545
		<i>H</i>	-.466667	.217778
		<i>I</i>	.994937	.989899
	<i>I</i>	<i>H</i>	-.100504	.010101
		<i>I</i>	.433117	.187590
		<i>K</i>	-1.116581	1.246753
		<i>I</i>	.065795	.004329
	<i>K</i>	<i>K</i>	-.341882	.116883
<i>M</i>		1.243163	1.545455	

Тип прелаза $\ell^k - \ell^{k-1}\ell'$

У случају прелаза са еквивалентним електроном, долази до редукције матричних елемената за рачунање јачине линије. Јед. (3.24) можемо писати на следећи начин (Rohrlich 1948)

$$S^{1/2} = \langle \ell^k vSLJ | R^{(1)} | \ell^{k-1} (v_c S_c L_c) \ell' SL' J' \rangle = \mathfrak{R}_{\text{line}} \times \\ \times \sqrt{k} \langle \ell^k vSL \{ | \ell^{k-1} v_c S_c L_c \rangle W_{\ell\ell'}(L_c LL') \rangle \times \mathfrak{S} \quad (3.33)$$

Одавде следује да је у овом случају фактор мултиплета

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = \sqrt{k} \langle \ell^k vSL \{ | \ell^{k-1} v_c S_c L_c \rangle W_{\ell\ell'}(L_c LL') \rangle \quad (3.34)$$

где је $\langle \ell^k vSL \{ | \ell^{k-1} v_c S_c L_c \rangle = \langle \ell^k \{ | \ell^{k-1} \rangle$ коефицијент родитељског нивоа или cfp (coefficient of fractional parentage)• коефицијент (види нпр. Sobelman 1979). Ови коефицијенти се могу наћи утабличени (види нпр. Goldberg 1935, Shore & Menzel 1965, Sobelman 1979 итд.)

- ПРИМЕР. У случају прелаза $p^3 \ ^4S_{3/2}^0 - p^2 d \ ^4P_{1/2}$, имамо да је $\langle p^3 \{ | p^2 \cdot \sqrt{3} = 1.73205$. Није тешко наћи да је $W_{pd}(P, PS) = 0.57735$, стога добијамо да је фактор мултиплета $\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = 1$

Прелази типа $Is^2 - Isp$

Код овог типа прелаза можемо увести следећу смену $I' = Is$. У том случају разматрамо прелаз типа $I's - I'p$. Имајући у виду да је (види нпр. Ландау и Лифшиц 1989)

$$W(0abc; ab) = W(a0cb; ab) = W(bc0a; ab) = W(cba0; ab) = \\ = (2a + 1)^{-1/2} (2b + 1)^{-1/2}$$

и пермутационе везе између бј коефицијената

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

израз за корен из јачине линије можемо записати у следећем облику (Shore & Menzel 1965)

$$S^{1/2} = \sum_{S_c} \langle (SL)s(S_c L_c) sSLJ | R^{(1)} | (SL)s(S_c L_c) pSL' J' \rangle \times \\ \times (-1)^{S+1/2-S_c} \sqrt{2} \left[\frac{(2S_c + 1)}{2(2S + 1)} \right]^{1/2} \quad (3.35)$$

из чега није тешко добити израз за фактор мултиплета

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = (-1)^{S+1/2-S_c} W_{sp}(L_c LL') \left[\frac{2S_c + 1}{2S + 1} \right]^{1/2}. \quad (3.36)$$

У горњим једначинама S_c је укупни спин који одговара родитељској конфигурацији.

- **ПРИМЕР.** У случају прелаза $6s^2 \ ^1S_0 - 6s(2S)6p^1 P_1^0$ имамо да је $S_c = 1/2$, $S = 0$, $W_{sp}(SSP) = 1$, па је фактор мултиплета $\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = 1 \cdot \sqrt{2} = 1.41421$.

Прелази типа $\ell^{k-1}s^2 - \ell^k s$

Код овог типа прелаза можемо добити израз за фактор мултиплета разматрајући прелаз типа $p^{k-1}ss - p^{k-1}ps$, тако да можемо извршити следећу трансформацију (Rohrlich 1959)

$$\begin{aligned} \langle p^{k-1}(SL)s(S_c L_c)sSLJ | R^{(1)} | p^k(S_c L')sSL'J' \rangle &= \mathfrak{R}_{\text{line}} W_{sp}(L_c LL') \times \\ &\times (-1)^{S+1/2-S_c} \left[\frac{2S_c + 1}{2S + 1} \right]^{1/2} \sqrt{k} \langle p^k \{ |p^{k-1} \rangle \cdot \mathfrak{S}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Из јед. (3.35) није тешко добити израз за фактор мултиплета

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = W_{sp}(L_c LL') (-1)^{S+1/2-S_c} \left[\frac{2S_c + 1}{2S + 1} \right]^{1/2} \sqrt{k} \langle p^k \{ |p^{k-1} \rangle \quad (3.38)$$

Прелази типа $\ell^k s - \ell^{k-1} \ell' s$

У овом случају можемо написати (види нпр. Rohrlich 1959, Shore & Menzel 1965)

$$S^{1/2} = \mathfrak{R}_{\text{line}} W_{\ell\ell'} \sqrt{k} \langle \ell^k \{ | \ell^{k-1} \rangle \cdot \mathfrak{S}, \quad (3.39)$$

из чега није тешко добити да је фактор мултиплета у овом случају

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = W_{\ell\ell'} \cdot \sqrt{k} \cdot \langle \ell^k \{ | \ell^{k-1} \rangle \quad (3.40)$$

Прелази типа $\ell^{k-1}s\ell' - \ell^k s$

Код овог типа прелаза добијамо (Shore & Menzel 1965)

$$S^{1/2} = \sqrt{(2S+1)(2S_c+1)}W(S\frac{1}{2}\frac{1}{2}S'_c; SS_c) \cdot \mathfrak{R}_{\text{line}} \cdot \sqrt{k} < \ell^k \{|\ell^{k-1}\rangle \times \\ \times W_{\ell'\ell}(L_c LL')\mathfrak{F}, \quad (3.41)$$

из чега добијемо да је у овом случају фактор мултиплета

$$\mathfrak{R}_{\text{mult}} = \sqrt{(2S+1)(2S_c+1)}W(S\frac{1}{2}\frac{1}{2}S'_c; SS_c)\sqrt{k} < \ell^k \{|\ell^{k-1}\rangle W_{\ell'\ell}(L_c LL') \quad (3.42)$$

Прелази типа $\ell^k \ell' \ell'' - \ell^k \ell'^2$ и $\ell^k \ell'' \ell' - \ell^k \ell'^2$

Напред изложени типови прелаза $Isp - Is^2$, $p^k s - p^{k-1}s^2$, $\ell^k s - \ell^{k-1}s\ell'$ и $\ell^k s - \ell^{k-1}\ell s$ само су специјални случајеви ова два типа прелаза, они су издвојени због тога што се нешто чешће срећу. Уопштено за ова два типа прелаза фактор линије можемо изразити преко Вигнерових $9j$ симбола (Rohrlich 1959)

$$\mathfrak{R}_{\text{mult.}}(< \ell^k (\alpha'_1 S'_1 L'_1) \ell'' S_1 L_1, \ell' S L | R^{(1)} | \ell^k (\alpha'_1 S'_1 L'_1) (\ell'^2) (S'_2 L'_2) S L' >) =$$

$$\sqrt{2L+1}\sqrt{2L'+1}\sqrt{2S'_2+1}\sqrt{2L'_2+1} \cdot W(S'_1 \frac{1}{2} S \frac{1}{2}; S_1 S'_2) X(l'_1 L_1 \ell''; L' L_1; L'_2 \ell' \ell'), \quad (3.43)$$

где је $X(abc; def; ghk)$ ознака за $9j$ симболе, које можемо рачунати преко $6j$ симбола (види Јуцис и др. 1960, Јуцис и Бандзайтис 1965)

$$X(abc; def; ghk) = \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & k \end{matrix} \right\} = \\ = \sum_x (-1)^{2x} \cdot W(abkf; cx)W(dexb; fh)W(ghax; kf). \quad (3.44)$$

Рачунање $6j$ симбола се може урадити користећи јед. (3.25- 3.27с), само замењујући одговарајуће вредности коефицијента у матрицу (јед. (3.25)).

- **ПРИМЕР.** За прелаз код $SbII$, $4d^{10}5s^2(^1S)5pP_{1/2}^0 - 4d^{10}5s5p^2\ ^2P_{3/2}$, имамо да је $k = 10$, $\ell' = s$, $\ell'' = p$, $L'_1 = S$, $S'_1 = 0$, $S_1 = S = 1/2$, $L = P$, $L' = D$, из чега није тешко добити $\mathfrak{R}_{\text{mult.}} = 1.41421$.

Правила сумирања

У одређеним случајевима потребно је уместо јачине линије користити суму по укупном угаоном моменту JJ' и по мултиплетима. Тада важе следећа правила

- Сума прелаза по крајњим $L'J'$ нивоима је

$$\sum_{J'} S_{JJ'} = \frac{2J' + 1}{2L' + 1} \cdot \mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2 \cdot \mathfrak{S}^2 \quad (3.45)$$

и сума свих линија у мултиплету је

$$\sum_{JJ'} S_{JJ'} = (2S + 1) \mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2 \cdot \mathfrak{S}^2 \quad (3.46)$$

- Сума линија почетних или завршних у терму S , L је:
за $I\ell - I\ell'$ тип прелаза

$$\sum_{L'JJ'} S = \frac{(2S + 1)2L + 1}{(2\ell' + 1)} \mathfrak{S}^2, \quad (3.47)$$

за $\ell^k - \ell^{k-1}\ell$

$$\sum_{L'JJ'} S = \frac{(2S + 1)2L + 1}{(2\ell' + 1)} k < \ell^k \{|\ell^{k-1} >^2 \mathfrak{S}^2 \quad (3.48)$$

и за $I s^2 - I s p$

$$\sum_{L'JJ'} S = (2S_c + 1)(2L + 1) \mathfrak{S}^2.$$

Друга правила сумирања детаљније су дата у радовима Shortly 1935, Menzel & Goldberg 1936, Menzel 1947, Rohrllich 1959.

3.1 Случај малих одступања од LS везеАпроксимација мешања конфигурација (међувеза)

Пре него што пређемо на излагање рачунања матричних елемената у случају jj везе, размотримо случај који је присутан код великог броја емитера — када је тип везе између LS и jj везе, тј међувеза. Тада је погодно узети у обзир релативистичке ефекте под претпоставком о мешању термова различите мултиплетности (нпр. 1S и 3P). Пре него што нешто кажемо о самом поступку рачунања мешања нивоа, рецимо нешто о Ландеовом правилу интервала које смо навели као услов примењивости LS везе.

Ландеово правило интервала

Енергијски интервал између термова у оквиру фине структуре мултиплета, у случају важења LS везе можемо изразити као (Sobelman 1979)

$$\Delta E_J = \frac{1}{2} A(\alpha SL) \cdot \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}, \quad (3.1.1)$$

где је $A(\alpha SL)$ константа цепања фине структуре и зависи од конфигурације (α) и S , L .

Користећи јед. (3.1.1), није тешко добити разлику између суседних компоненти мултиплета

$$\Delta E_J - \Delta E_{J-1} = \Delta E_{J,J-1} = A(\alpha SL) \cdot J. \quad (3.1.2)$$

Горњи израз представља Ландеово правило интервала. Из горњих једначина није тешко добити да је

$$\sum_J (2J+1) \Delta E_J = 0,$$

тј. да је средња вредност енергије у оквиру мултиплета

$$E_{SLJ} = \frac{\sum_J (2J+1) E_{SLJ}}{\sum_J (2J+1)}. \quad (3.1.3)$$

У случају једноелектронског омотача проблем се редукује на рачунање спин-орбиталног растојања нивоа електрона у централном симетричном пољу. У случају водоника, нивои са датом вредношћу ℓ цепају се на $j = \ell \pm 1$. У том случају растојање између компоненти је

$$\Delta E_{j,j-1} = \zeta_{n\ell} \left(\ell + \frac{1}{2} \right), \quad (3.1.4)$$

где константу цепања можемо проценити помоћу поједностављене семиемпиријске формуле. У случају водониковог атома она износи Z^2/n^3 , а код сложенијих елемената се користи семиемпиријска релација (Sobelman 1979)

$$\zeta_{n\ell} = \alpha^2 \frac{Z^2 Z_i^2}{n^3 (\ell+1) (\ell+1/2) \ell} \cdot R_y, \quad (3.1.5)$$

где је $\alpha \approx (137.0373)^{-1}$ константа фине структуре, $R_y = 109737.3 \text{ cm}^{-1}$ је Ридбергова константа, Z је резидуално наелектрисање елемента, а Z_i је вредност која се приближно може добити за p електроне као $Z_i \approx Z' - 4$, за d електроне $Z_i \approx Z' - 11$, где је Z' редни број елемента. У случају тежих елемената треба извести корекцију израза (3.1.5) множећи га са коефицијентом релативистичке поправке $H_r(\ell Z_i)$, који се за вредности $Z' \leq 50$ веома мало разликује од јединице.

Међувеза

У случају када су електростатичка U и спин–орбитална $W = A\vec{\ell} \cdot \vec{s}$ интеракције приближно исте, апроксимација LS , односно апроксимација jj везе није прихватљива. У том случају се употребљава случај међувезе између LS и jj . Тада треба да се тражи решење секуларне једначине (Sobelman 1979)

$$\begin{vmatrix} \langle L_1 S_1 J M | U + W | L_1 S_1 J M \rangle - \epsilon & \langle L_1 S_1 J M | W | L_2 S_2 J M \rangle & \dots \\ \langle L_2 S_2 J M | W | L_1 S_1 J M \rangle & \langle L_2 S_2 J M | U + W | L_2 S_2 J M \rangle - \epsilon & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0,$$

где је ϵ корекција енергије. Решење горње једначине нпр. у случају p^2 конфигурације можемо писати као (Sobelman 1979)

$$\Psi(^1 S'_0) = c_{11} \Psi(^1 S_0) + c_{12} \Psi(^3 P_0)$$

$$\Psi(^3 P'_0) = c_{21} \Psi(^1 S_0) + c_{22} \Psi(^3 P_0)$$

$$\Psi(^3 P'_1) = \Psi(^3 P_1) \quad (3.1.6)$$

$$\Psi(^3 P'_2) = b_{11} \Psi(^3 P_2) + b_{12} \Psi(^1 D_2)$$

$$\Psi(^1 D'_2) = b_{21} \Psi(^3 P_2) + b_{22} \Psi(^1 D_2),$$

где је $\Psi(^{2S+1} L_J) = \Psi_{SLJM}$ таласна функција датог стања под претпоставком о LS вези.

Ако уведемо параметар

$$\chi = \frac{1}{5} \frac{\zeta_{np}}{F_2},$$

где је F_2 радијални интеграл, за мала одступања од LS везе, овај параметар је много мањи од јединице ($\chi \ll 1$). Уколико је $\chi \gg 1$ приближно се може узети шема jj везе.

У случају малог одступања од LS везе коефицијенти мешања у изразу (3.1.6) се рачунају помоћу фактора χ , следећим формулама (Sobelman 1979)

$$c_{11} = c_{22} = 1 - \frac{1}{9} \chi^2 + \frac{2}{27} \chi^3 + \dots, \quad (3.1.7a)$$

$$c_{12} = c_{21} = \frac{1}{3} \sqrt{2} \chi \cdot \left(1 - \frac{1}{3} \chi - \frac{2}{9} \chi^2 + \dots\right), \quad (3.1.7b)$$

$$b_{11} = b_{22} = 1 - \frac{25}{144} \chi^2 + \frac{125}{864} \chi^3 + \dots, \quad (3.1.7c)$$

$$b_{12} = b_{21} = \frac{5}{12}\sqrt{2}\chi \cdot \left(1 - \frac{5}{12}\chi - \frac{25}{72}\chi^2 + \dots\right). \quad (3.1.7d)$$

Процене мешања конфигурација. Конкретан пример

Примена једначина (3.1.7abcd) може се демонстрирати на спектру *Ge I*. Овде долази до мешања синглета и триплета код конфигурације p^2 . Код атома германијума имамо следећи енергијски спектар (према Moore 1971b)

<i>Konf.</i>	<i>J</i>	<i>Nivo</i>	<i>Interval</i>
$5p^2 \ ^3P$	0	0.0	
	1	557.10	557.10
	3	1409.90	852.80
$5p^2 \ ^1D$	2	7125.260	
$5p^2 \ ^1S$	0	16367.14	

Узимајући да у електростатичком пољу при LS вези можемо енергију нивоа раставити као (види нпр. Sobelman 1979, јед. (5.86-5.96))

$$(\ell_1 \ell_2^{2S+1} L_J) = \sum_k (f_k F^k \pm g_k G^k), \quad (3.1.8)$$

где знак плус одговара за случај $S = 0$, а минус $S = 1$, а функције F^k и G^k су интегрални Кулонове електростатичке интеракције и интегрални спин-орбиталне интеракције, f_k и g_k су дати следећим релацијама

$$f_k = (-1)^{\ell_1 + \ell_2 + L} (\ell_1 \| C^k \| \ell_2) (\ell_2 \| C^k \| \ell_1) \begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_2 & \ell_1 & k \end{Bmatrix}, \quad (3.1.8a)$$

$$g_k = (\ell_1 \| C^k \| \ell_2)^2 \begin{Bmatrix} \ell_1 & \ell_2 & L \\ \ell_1 & \ell_2 & k \end{Bmatrix}. \quad (3.1.8b)$$

Овде су матрични елементи $(\ell \| C^k \| \ell')$ у нашем случају (за целе вредности бр. k)

$$(\ell \| C^k \| \ell') = (-1)^\ell \sqrt{2\ell + 1} \sqrt{2\ell' + 1} \begin{pmatrix} \ell & k & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.1.8c)$$

Матрица с десне стране једначине (3.1.8c) је ознака за $3j$ симболе.

За случај нивоа са конфигурацијом p^2 није тешко извести да је за три могућа терма

$$\begin{aligned} E(^1S) &= F^0 + \frac{10}{25} F^2, \\ E(^1D) &= F^0 + \frac{1}{25} F^2, \\ E(^3P) &= F^0 - \frac{5}{25} F^2, \end{aligned} \quad (3.1.9)$$

при чему ће се триплетни терм цепати на

$$np^2 \ ^3P \rightarrow \left\{ \begin{array}{l} np_{1/2}p_{1/2} \ ^3P_0 \\ np_{1/2}p_{3/2} \ ^3P_1 \\ np_{1/2}p_{3/2} \ ^3P_2 \end{array} \right\}.$$

Из јед. (3.1.4) можемо за конкретни случај проценити константу цепања $\zeta = 852.8 \cdot 2/3 = 568.5$. Ако уведемо смену

$$F_2 = \frac{F^2}{25}$$

добићемо из једначине (3.1.9) да је

$$F_2 \approx \frac{E(^1S) - E(^3P)}{15} \approx \frac{E(^1D) - E(^3P)}{6} \approx 1026.$$

За χ добијамо, $\chi = 0.1108$, па са овом вредношћу из јед. (3.1.7abcd) није тешко добити вредност $c_{11} = 0.9986$. Груздев (1968) је прецизнијим прорачуном добио вредност од $c_{11} = 0.997$. За коефицијенте мешања добићемо $c_{12} = c_{21} = 0.0501$, док је Груздев добио $c_{12} = 0.077$. Веза између константи мешања је $c_{11}^2 + c_{12}^2 = 1$. У случају коефицијената b_{ii} имамо следеће вредности:

- рачун по јед. (3.1.7cd) $b_{11} = .997$, $b_{12} = 0.077$
- према Груздеву (1968) $b_{11} = .994$, $b_{12} = 0.109$

Код овог примера треба имати у виду да су јед. (3.1.7abcd) примењене на граници важења.

Процена мешања конфигурација. Један нови метод процене мешања нивоа

Да би смо извели једноставнији начин за процену мешања нивоа различите мултиплетности, предпоставимо да се енергија посматраног нивоа, код кога постоји мало одступање од шеме LS везе, може представити комбинацијом енергија нивоа различитих мултиплета у LS вези. Нпр. у случају конфигурације p^2 имаћемо

$$E'(^1S_0) = x_1 E_{LS}(^1S_0) + x_2 E_{LS}(^3P_0)$$

$$E'(^3P_0) = x_1 E_{LS}(^3P_0) + x_2 E_{LS}(^1S_0)$$

или ако уведемо следеће ознаке $E'(X) = E'_1$, $E_{LS}(X) = E_1$ и $E'(Y) = E'_2$, $E_{LS}(Y) = E_2$, где X , Y представљају ознаку за терм, горње једначине се могу, код p^2 конфигурације на пример, писати као

$$E'_1 = x_1 E_1 + x_2 E_2$$

$$E'_2 = x_1 E_2 + x_2 E_1. \quad (3.1.10)$$

У случају важења LS везе имаћемо да је $x_1 = 1$, $x_2 = 0$. Одатле следује да је

$$x_1 + x_2 = 1. \quad (3.1.11)$$

Узмимо да је $E_1/E_2 = k$ и $E'_1/E'_2 = k'$, где је $E_1 < E_2$ и $E'_1 < E'_2$. У том случају из јед. (3.1.10) и (3.1.11) није тешко добити изразе за коефицијенте мешања

$$x_1 = \frac{1 - kk'}{1 + k' - k - kk'}$$

$$x_2 = \frac{k' - k}{1 + k' - k - kk'}. \quad (3.1.12)$$

На примеру *Ge I* можемо за мешање (1S_0) и (3P_0) добити за $x_1 = 0.991$, где је $k' = 0.0095713$, $k = 0$. Пошто је $c_1 = \sqrt{x_1}$, можемо ову вредност за коефицијенте мешања поредити са резултатима Груздева и предходног прорачуна на основу јед. (3.1.7abcd):

Груздев (1968)	$x_1 = 0.994$
Јед. (3.1.7а)	$x_1 = 0.997$
Јед. (3.1.12)	$x_1 = 0.991.$

У случају мешања најнижих нивоа из спектра можемо узети да је $E_1 = 0$ из чега следи $k = 0$. Добра процена се добије помоћу релације

$$x_1 = \frac{1}{1 + k'}, \quad (3.1.12a)$$

где за E'_1 можемо узети енергију

$$E'_1 = \frac{\Delta E'}{\sum_J (2J + 1)},$$

где је $\Delta E'$ укупна ширина енергијског интервала терма. Такав је случај и код конфигурације p^2 при мешању мултиплета (1S_0) и (3P_0). У табели 3.4 су дате рачунате вредности коефицијената мешања овом методом код *As II*, *Sn I*, *Sb II*, *Pb I* и *Bi II* и поређење ових коефицијената са резултатима Груздева (1968). Из табеле се види да су већа одступања код *Pb I* и *Bi II*, што је и за очекивати због саме претпоставке малог одступања од *LS* везе.

Табела 3.4 У табели су дати квадрати коефицијента мешања нивоа 1S_0 и 3P_0 рачунати помоћу јед. (3.1.12) (у табели означени као x_1) и вредности које је добио Груздев (1968) (у табели означени као x_1^G), као и њихов однос (у табели означени као x_1/x_1^G), при томе важи $(X') = x_1(X) + x_2(Y)$. За рачунање k' коришћени су енергијски нивои дати у таблицама Шарлоте Мур (Moore 1971 ab).

Елемент	x_1	x_1^G	x_1/x_1^G
As II	0.9877	0.9883	0.9994
Sn I	0.9782	0.9621	1.0167
Sb II	0.9743	0.9471	1.0288
Pb I	0.7345	0.8561	0.8580
Bi II	0.7217	0.8321	0.8674

Овај метод се може користити и код других родитељских конфигурација где долази до мешања два терма различите мултиплетности, ако је у питању случај малог одступања од шеме LS везе. То је показано на примеру јонизованог јода и брома (Табела 3.5).

У Табели 3.5 су дате вредности мешања нивоа код конфигурације p^4 , рачунате апроксимативном формулом (3.11) за мешање термова (3P_2) и (1D_2) код јонизованог брома и јода. Као својеврсна провера могу послужити и упоређивање рачунатих и мерених Ланде фактора, што је и урађено. У Табели 3.5 су дати Ланде фактори за поменуће нивое (трећа колона) рачунати по формули која важи за случај LS везе. У четвртој колони дат је Ланде фактор у који су урачунати ефекти мешања конфигурација X и Y као

$$g(X) = x_1 g_{LS}(X) + x_2 g_{LS}(Y),$$

при чему је процена коефицијената мешања изведена помоћу јед. (3.1.12a). У петој колони дати су прорачуни Груздева (1969), а у шестој експерименталне вредности узетих из табела Шарлоте Мур (Moore 1971a).

Табела 3.5 У табели су дати коефицијенти мешања нивоа $^3P_2 = x_1 ^3P_2 + x_2 ^1D_2$ код конфигурације np^4 јона брома, јода и атома телуријума, рачунати помоћу поједностављене формуле. Под претпоставком о мешању нивоа рачунати су Ланде фактори g и поређени са рачунатим за случај LS везе g_{LS} , са вредностима које је дао (Груздев 1969) (g_G) и са експерименталним вредностима (g_{exp}) (Moore 1971bc). Атомски подаци су узети из Мурових таблица.

Елемент (X)	$x_1 \cdot X$	g_{LS}	g	g_G	g_{exp}
I II (3P_2)	0.9489	1.501	1.4744	1.452	—
I II (1D_2)	—	1.000	1.0255	1.048	—
Br II (3P_2)	0.9640	1.501	1.4820	1.486	—
Br II (1D_2)	—	1.000	1.0180	1.014	—
Te I (3P_2)	0.9524	1.501	1.4471	1.462	1.474
Te I (1D_2)	—	1.000	1.024	1.038	1.040

3.2 Апроксимација jj везе

У случају jj везе, електрон у централном пољу описује функција $\psi_{n\ell jm}$. Систем од N електрона је описан таласном функцијом Ψ

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \cdot \begin{vmatrix} \psi_{a_1}(\zeta_1) & \psi_{a_1}(\zeta_2) & \dots & \psi_{a_1}(\zeta_N) \\ \psi_{a_2}(\zeta_1) & \psi_{a_2}(\zeta_2) & \dots & \psi_{a_2}(\zeta_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{a_N}(\zeta_1) & \psi_{a_N}(\zeta_2) & \dots & \psi_{a_N}(\zeta_N) \end{vmatrix},$$

где је $a = n\ell jm$, а ζ је ознака за три просторне координате.

У случају система са два електрона таласна функција је

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{n\ell jm}(\zeta_1) \psi_{n'\ell'j'm'}(\zeta_2) - \psi_{n\ell jm}(\zeta_2) \psi_{n'\ell'j'm'}(\zeta_1) \} \quad (3.2.1)$$

Таласна функција Ψ_{JM} описује систем са укупним моментом J и његовом пројекцијом на z осу M , где је

$$\Psi_{JM}(j_1 j_2) = \sum_{mm'} C_{mm'}^J \psi_{jm}(\zeta_1) \psi_{j'm'}(\zeta_2),$$

$$\Psi_{JM}(j_1' j_2) = \sum_{mm'} C_{mm'}^J \psi_{jm}(\zeta_2) \psi_{j'm'}(\zeta_1),$$

где су $C_{mm'}^J$ Клебш – Гордонови коефицијенти. Функција система се у овом случају може написати као

$$\Psi_{JM} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_{JM}(j_1 j_2') - \Psi_{JM}(j_1' j_2) \}. \quad (3.2.2)$$

Имајући у виду особину Клебш – Гордонових коефицијената, и за случај еквивалентних електрона ($n = n'$, $\ell = \ell'$, $j = j'$), није тешко израз (3.2.2) свести на

$$\Psi_{JM} = \frac{1 - (-1)^{2j-J}}{2} \Psi_{JM}(j_1 j_2), \quad (3.2.3)$$

где је $\Psi(j_1 j_2) = \Psi(j_1 j_2') = \Psi(j_2 j_1')$.

Из једанчине (3.2.3) није тешко закључити да је у случају еквивалентних електрона

$$\Psi_{JM} = \begin{cases} \Psi_{JM}(j_1 j_2), & \text{ако је } J \text{ непарно} \\ 0, & \text{ако је } J \text{ парно.} \end{cases} \quad (3.2.4)$$

Релација (3.2.4) је у сагласности са мереним вредностима термова код важења jj везе.

Спин-орбитална и електростатичка интеракција у случају jj везе

У случају jj везе потребно је прво третирати спин-орбиталну, а затим електростатичку интеракцију. У случају ове апроксимације корекција енергије нивоа $n_1\ell_1$, $n_2\ell_2$ је сума појединих електронских термова

$$\Delta E_{j_1 j_2 \dots} = \sum_k \Delta E_{n_k \ell_k j_k}, \quad (3.2.5)$$

где је

$$\Delta E_{n_k \ell_k j_k} = \frac{1}{2} \eta_{n_k \ell_k} [j_k(j_k + 1) - \ell_k(\ell_k + 1) - \frac{3}{4}]. \quad (3.2.6)$$

Спин – орбитално цепање у jj вези је одређено директно са $\eta_{n\ell}$.

Дегенерација са одговарајућим J је прекривена електростатичком интеракцијом између електрона. У суштини за рачунање матричног елемента

$$R_{jj'JM} = \langle jj'JM | \frac{e^2}{r_{12}} | jj'JM \rangle$$

потребно је познавати таласне функцију стања (јед. (3.2.3)), тако да можемо писати

$$R_{jj'JM} = \langle j_1 j_2' JM | \frac{e^2}{r_{12}} | j_1 j_2' JM \rangle - (-1)^{j+j'-J} \langle j_1 j_2' JM | \frac{e^2}{r_{12}} | j_2 j_1' JM \rangle,$$

или (види нпр. Sobelman 1979)

$$R_{jj'JM} = \sum_k (f_k F^k - g_k G^k),$$

где је

$$f_k = (-1)^{j+j'+J} (s\ell j || C^k || s\ell j) (s\ell' j' || C^k || s\ell' j') \cdot \left\{ \begin{matrix} j & j' & J \\ j' & j & k \end{matrix} \right\}, \quad (3.2.7)$$

$$g_k = (-1)^{2J} (s\ell j || C^k || s\ell' j') \cdot \left\{ \begin{matrix} j & j' & J \\ j' & j & k \end{matrix} \right\}, \quad (3.2.7)$$

где су C^k редуковани матрични елементи (види нпр. Sobelman 1979 јед. (4.183,184)).

 $j\ell$ веза

Тип $j\ell$ везе је присутан у оним случајевима када је усредњено растојање оптичког електрона довољно удаљено од електрона у омотачу емитера. У том случају електростатичка интеракција оптичког електрона са електронима из омотача је мања у поређењу са спин-орбиталном интеракцијом електрона омотача.

У овом случају нивои су описани квантним бројевима $\gamma S_1 L_1 j, \ell [K] J$, где је K квантни број који одговара угаоном моменту $\vec{K} = \vec{j} + \vec{\ell}$ и узима вредности $K = j + \ell, j + \ell - 1, \dots, |j - \ell|$. Овај тип везе је присутан код нпр. $Ne, Ar, Kr, Xe, Rn \dots$ (види Sobelman 1979). За ознаку термина употребљава се следећа нотација

$${}^{2S+1}L_J n \ell [K] J.$$

Код $j \ell$ везе, за случај двоелектронске конфигурације $\ell \ell'$ имамо да је

$$\langle slj, \ell' K | \frac{e^2}{r_{12}} | slj, \ell' K \rangle \approx \sum_i f_i F^i,$$

где је

$$f_i = (-1)^{j+\ell'+K} (slj || C^k || slj) (\ell' || C^k || \ell') \begin{Bmatrix} j & \ell' & K \\ \ell' & j & i \end{Bmatrix}.$$

4. ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ ЛИНИЈА ЈОНА ТЕШКИХ ЕЛЕМЕНАТА

При прорачуну Штарковог ширења спектралних линија код јона тешких елемената модификованом семиемпиријском формулом треба водити рачуна о комплексној структури енергијског спектра, тј. о начину рачунања матричних елемената. С друге стране у модификовану семиемпиријску формулу (види поглавље 2.3.1) за прорачун Штарковог ширења улази и вредност семиемпиријског Гаунт фактора у који на одређен начин улази комплексност емитера. Релевантни закључци могу се извући на основу разматрања Гаунт фактора у близини прага за нееластичне сударе. Стога је истраживање могућности примене модификоване семиемпиријске формуле за прорачун Штарковог ширења спектралних линија тешких јонизованих емитера обухватило следеће:

- За теже јоне ($Z \geq 30$) извршено је тестирање модификованог семиемпиријског (Dimitrijević & Konjević 1980) Гаунт фактора (g_{mse}) за тешке елементе у близини прага за нееластичне сударе, при чему су узимане расположиве експерименталне вредности оних прелаза код којих је испуњен услов

$$\frac{3kT}{2\Delta E} \leq 2. \quad (4)$$

- Разматран је утицај прорачуна матричних елемената на прорачун Штарковог ширења MSE формулом. При томе су коришћене мерене и рачунате јачине осцилатора, тј. разни типови веза. Узимане су у прорачун и мешања конфигурација. При томе је коришћена, нпр. у случају *I II*, *Br II*, *As II* процена мешања конфигурација дата јед. (3.1.12a).
- Извршено је упоређивање рачунатих и мерених резултата и на основу тога (статистички) изведен је закључак о примењивости *MSE* прорачуна у случају линија тешких јона.

4.1 Тестирање Гаунт фактора у близини прага за нееластичне сударе

Модификована семиемпиријска формула је веома погодна за коришћење при рачунању Штарковог ширења великог броја спектралних линија, а за оне јоне код којих у довољној мери није позната структура спектра представља уз Гримову семиемпиријску формулу једини механизам за прорачун Штарковог ширења. При томе се прорачун поједностављује, а тачност добијених резултата је задовољавајућа, бар за случај лакших јона (Dimitrijević & Konjević 1980).

На граници за нееластичне сударе најудобније је применити поједностављену МСЕ формулу (Dimitrijević & Konjević 1987). Зато тестирање Гаунт фактора код Штарковог ширења на граници за нееластичне сударе, представља уједино и разматрање применљивости упрошћене модификоване семиемпиријске формуле, али може нам генерално указати на исправност узимања израза за Гаунт фактор датог у поглављу 2.3.1.

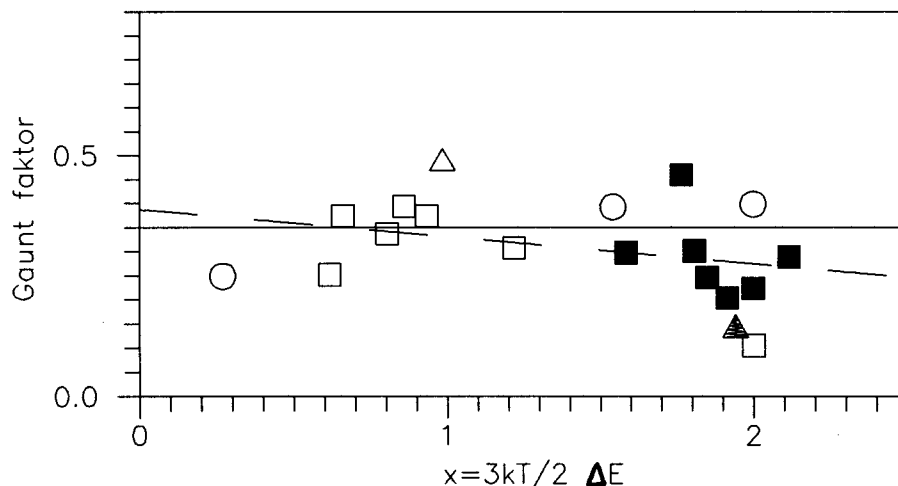
На основу експерименталних резултата за Штаркову полуширину вршено је тестирање Гаунт фактора на граници за нееластичне сударе за јоне са $Z \geq 30$. На граници за нееластичне сударе за прорачун Штаркове полуширине може се користити јед. (2.3.1.6). На основу мерених Штаркових полуширина, за Гаунт фактор можемо добити

$$g_{Exp} \approx \text{const.} \cdot \frac{w_{Exp} \cdot \sqrt{T_{Exp}}}{N_{Exp} \cdot \lambda^2 \cdot \sum_{j=i,j} (3n_j/2Z)^2 (n_j^2 - \ell_j^2 - \ell_j - 1)} \quad (4.1.1)$$

где су горње ознаке исте као и у јед. (2.3.1.6).

Из релације (4.1.1) користећи експерименталне вредности Штаркових полуширина није тешко добити вредност Гаунт фактора. При употреби ове једначине треба водити рачуна о услову датом у јед. (4). За Штаркову полуширину употребљена су мерења полуширина јонизованог цинка и кадмијума (Djeniže *et al.* 1991a), живе (Murakava 1966, Djeniže *et al.* 1990), *Br II* (Labat *et al.* 1991) и *PbII* (Djeniže *et al.* 1992a).

На слици 4.1.1 су упоређене експерименталне вредности Гаунт фактора и предложена вредност од стране Димитријевића и Коњевића (Dimitrijević & Konjević 1980, пуна линија на слици).



Сл. 4.1.1 Гаунт фактор добијен јед. (4.1.1) у зависности од $x = 3kT/2\Delta E$. Пуна линија представља модификовани семиемпиријски Гаунт фактор ($g = 0.9 - 1.1/Z$) на прагу за нееластичне сударе $x \leq 2$. Испрекидана линија представља експерименталну средњу вредност. Друге ознаке: Δ су означене вредности за *ZnII*, \circ – *HgII*, \square – *CdII*, \blacksquare – *BrII* и \blacktriangle – *PbII*.

Са слике се може видети да је слагање експерименталних вредности и теоријског Гаунт фактора на прагу за нееластичне сударе задовољавајуће за $x < 2$. Посебно је интересантно обратити пажњу на оне вредности које се налазе на самој граници, тј. $x \approx 2$. Код њих су у просеку мање вредности Гаунт фактора (рецимо за две линије *CdII* и *PbII* чак око 3 пута) него теоријске. Велико расипање тачака око $x \approx 2$ може указивати на то да треба бити строжији при примени јед. (2.3.1.6). Свакако треба напоменути да је збир утицаја свих пертурбационих нивоа узет у рачун под претпоставком о важењу *LS* везе (у јед. (4.1.1)). У сваком случају из овог се може извући закључак да је процена Штаркове полуширине помоћу јед. (2.3.1.6) задовољавајућа и за случај тешких јона код којих важи услов $x < 2$.

Модификовано семиемпиријски Гаунт фактор код Штарковог помераја (g_{sn}) на граници за нееластичне прелазе код тешких елемената није испитиван због недовољног броја експерименталних вредности. Тамо где постоје експерименти и где је $x \leq 3kT/2\Delta E$ у већини случајева мерени померај је веома мали ($d \approx 0$), тако да израчунати померај пада у границе експерименталне грешке (види нпр. код *ZnII* и *CdII*, Табела 5.4, поглавље 5.), па се некакав закључак из таквог испитивања и не може поуздано извести. Проблеми везани за израчунавање Штарковог помераја помоћу MSE биће дискутовани у наредном поглављу.

4.2 Прорачун матричних елемента код комплексних емитера

Комплексност енергијског спектра тешких јонизованих емитера захтева одређене специфичности у прорачуну Штарковог ширења са MSE. Често се код нивоа са већим главним квантним бројем (као нпр. код нивоа $5p^3D$, P и $4d^3D$ код јонизованог арсена, види сл. 4.2.1) срећу случајеви да мултиплети нису добро енергијски раздвојени. Тако је за прелаз $n\ell^{2s+1}L_J - n\ell'^{2s+1}L'_J$,

$$\Delta E_{JJ'} \approx \Delta E_{LL'},$$

где је $\Delta E_{JJ'} = E_J - E_{J-1}$ енергијска разлика између термова унутар мултиплета, а $\Delta E_{LL'} = E_L - E_{L'}$ енергијска разлика између мултиплета. У том случају прорачун Штарковог ширења се мора вршити за сваку спектралну линију понаособ и не може се употребити прорачун за средњу вредност за све прелазе између два мултиплета.

Тада уместо $\tilde{R}_{L,L'}^2$ из јед. (2.2.1.8) узимамо $\sum_{J',L'} \tilde{R}_{J,J'}^2$ (види нпр. Popović *et al.* 1993c, Djeniže *et al.* 1993b) где је

$$\tilde{R}_{J,J'}^2 \approx \left(\frac{3n^*}{2Z}\right)^2 \frac{\ell_{>}}{2J+1} [n^{*2} - \ell_{>}^2] \mathfrak{R}_{\text{line}}^2 \mathfrak{R}_{\text{mult.}}^2 \varphi_{J,J'}^2. \quad (4.2.1)$$

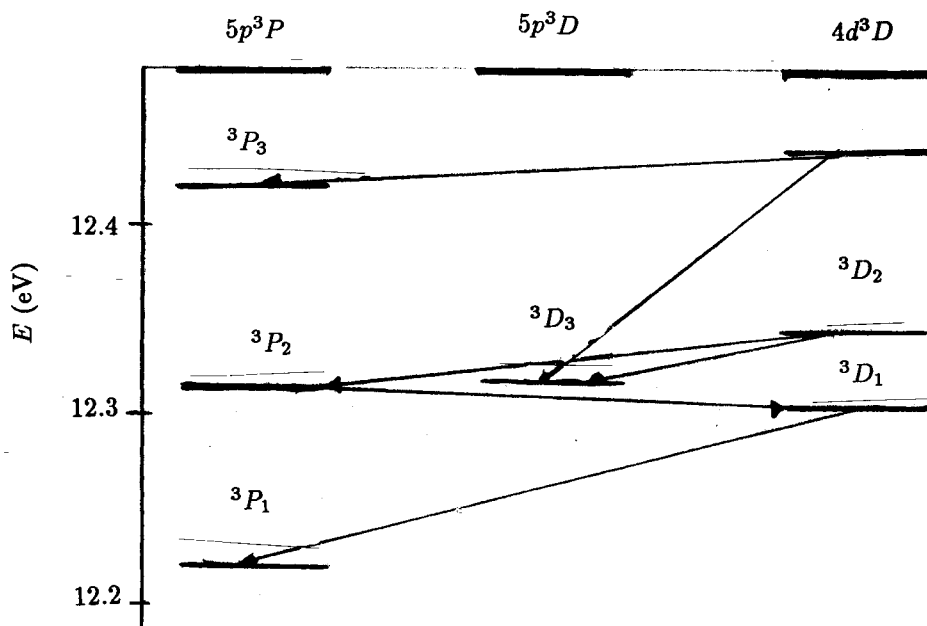
Поредећи јед. (4.2.1) и (2.20a) видимо да матричне елементе можемо изразити помоћу јачине осцилатора (Griem 1974)

$$\tilde{R}_{J,J'}^2 \approx 3 \frac{E_H}{E_{J'} - E_J} \cdot f_{J,J'} \quad (E_{J'} > E_J),$$

или

$$\bar{R}_{J,J'}^2 \approx 3 \frac{E_H}{E_J - E_{J'}} \frac{2J' + 1}{2J + 1} \cdot f_{JJ'} \quad (E_{J'} < E_J), \quad (4.2.2)$$

где је сумирање извршено по одговарајућим L' и J' квантним бројевима (за прелаз $n\ell SLJ \rightarrow n'\ell' SL'J'$); $\mathfrak{R}_{\text{line}}$, $\mathfrak{R}_{\text{mult.}}$ су фактори линије и фактор мултиплета (Shore & Menzel 1965), а $f_{J'J}$ (за $E_{J'} > E_J$) и $f_{JJ'}$ (за $E_{J'} < E_J$) су јачине осцилатора.



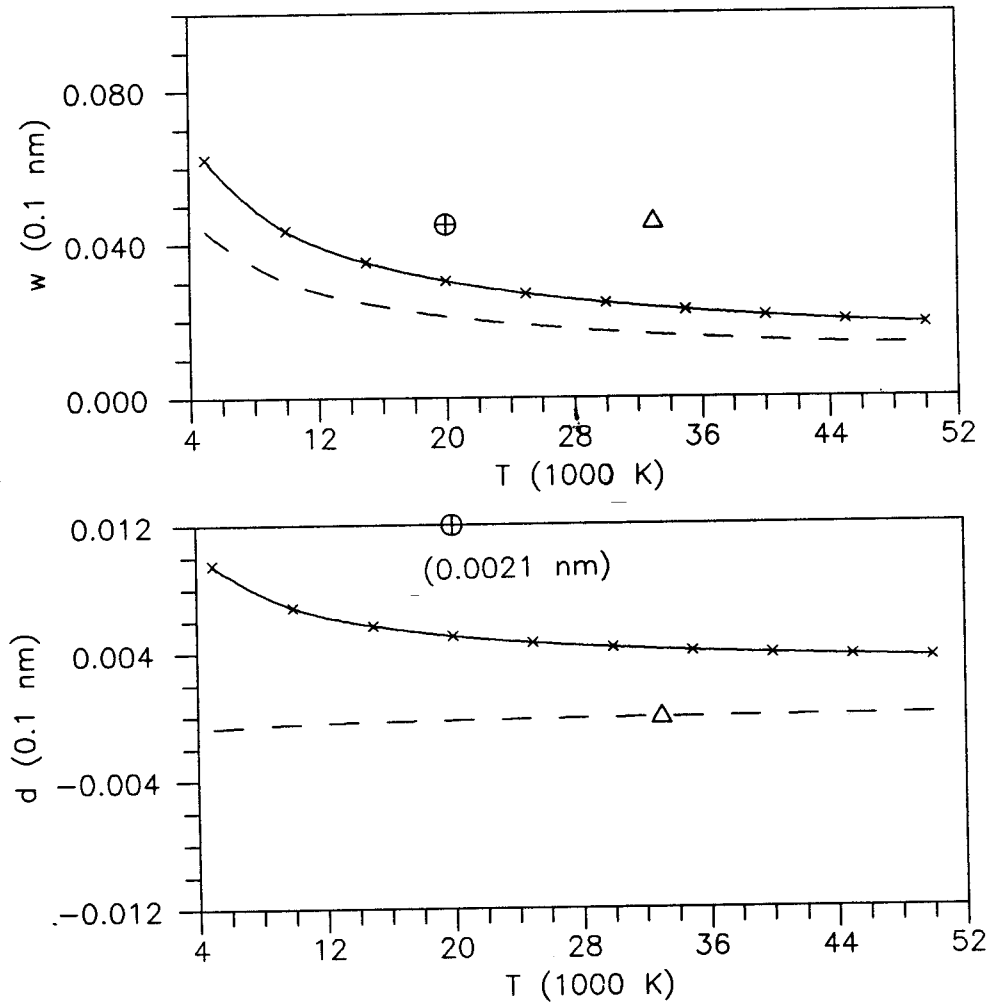
Сл. 4.2.1. Шема дела спектра AsII, према Li & Andrew (1971).

У случају да користимо јачине осцилатора за прелазе појединих прелаза унутар два мултиплета ($J \rightarrow J'$), а да при томе није потребно рачунати за сваку линију, тј. испуњен је услов $\Delta E_{JJ'} \ll \Delta E_{LL'}$ може се узети средња вредност јачине осцилатора као

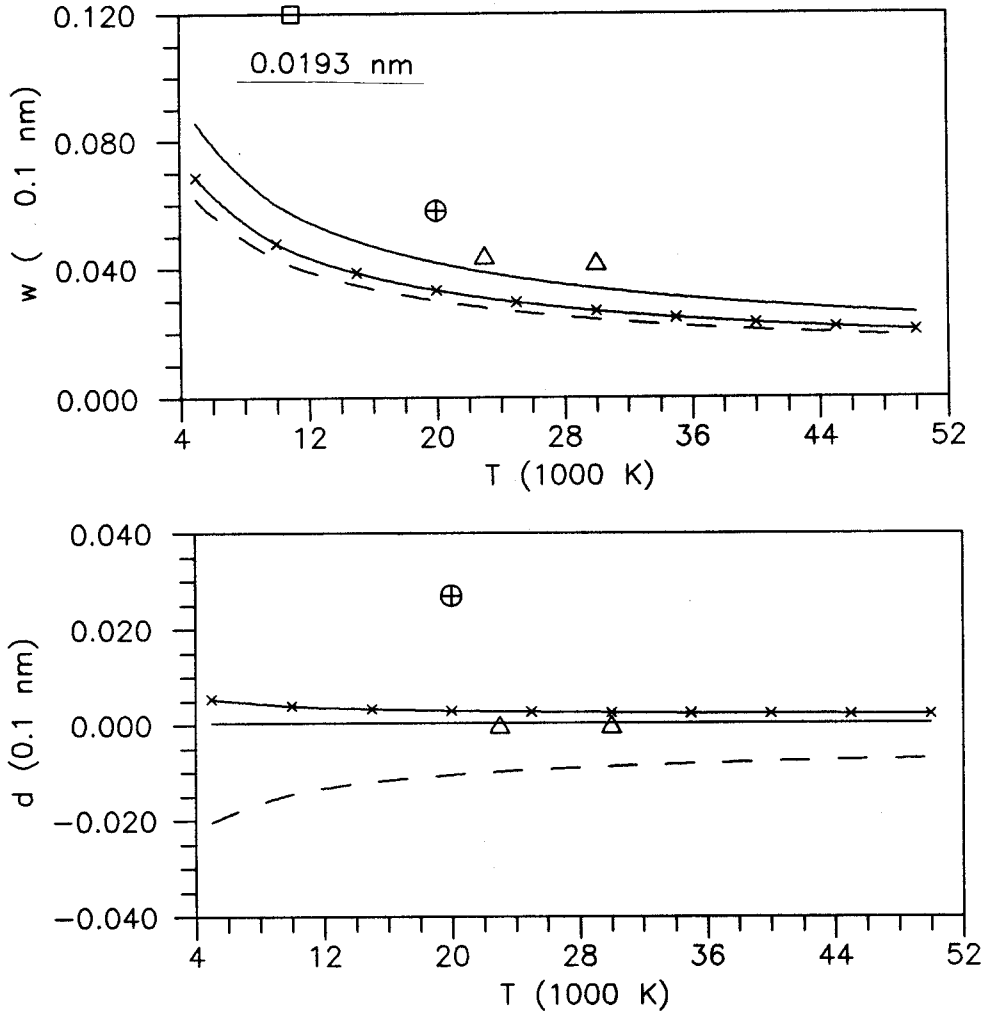
$$\frac{\sum_{J'J'L'} (2J + 1) \bar{R}_{JJ'}^2}{\sum_J (2J + 1)} = \frac{\sum_{J'J'L'} (2J + 1) \bar{R}_{JJ'}^2}{(2L + 1)(2S + 1)}. \quad (4.2.3)$$

где се подразумева да матрични елементи $\bar{R}_{JJ'}$ повезани са јачинама осцилатора као у једначини (4.2.2).

У јед. од 4.2.1 до 4.2.3 су коришћене ознаке као у јед. (2.20а).



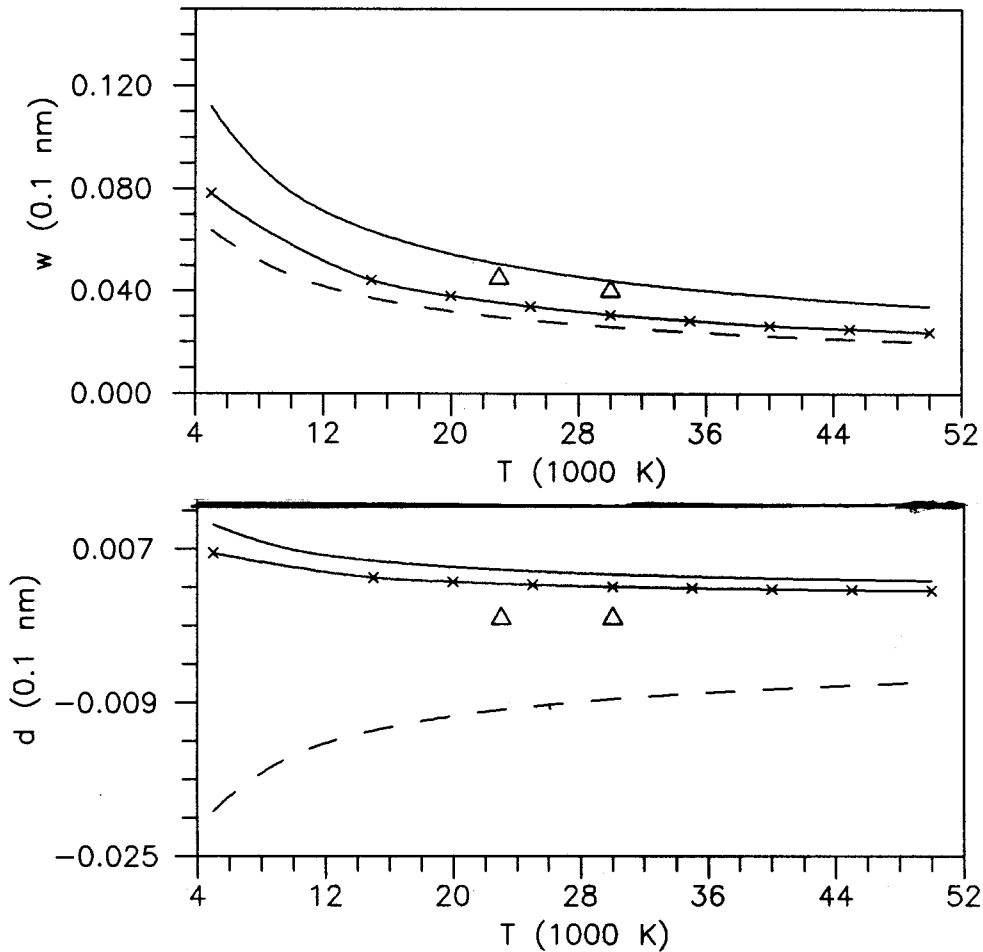
Сл. 4.2.2 а) Штаркова полуширина (w) и б) померај (d) за спектралну линију 206.2 nm ($4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2}$) једанпут јонизованог цинка у функцији електронске температуре (T). Електронска концентрација је $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. На слици су коришћене следеће ознаке: (x - x - x) представља резултате прорачуна добијених при рачунању матричних елемената са јачинама осцилатора датих од стране Визеа и Мартина (Wiese & Martin 1980), (---) матрични елементи су прорачунати у Кулоновој апроксимацији. Експериментални резултати су: Δ - Djeniže et al. (1991a); \oplus процена дата у раду Lakićević (1983).



Сл. 4.2.3 Штаркова полуширина и померај за спектралну линију 226.5 nm ($5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{1/2}$) једанпут јонизованог кадмијума у зависности од електронске температуре. Електронска концентрација је $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. На слици су коришћене следеће ознаке: Пуна линија представља прорачун са јачинама осцилатора датих од стране Kunisz *et al.* (1975), (x-x-x) представља резултате прорачуна добијених при рачунању матричних елемената са јачинама осцилатора датих од стране Визеа и Мартина (Wiese & Martin 1980), (- - -) матрични елементи су прорачунати у Кулоновој апроксимацији. Експериментални резултати су: Δ - Djeniže *et al.* (1991ab), \square - Kusch & Oberschelp (1967a); \oplus процена дата у раду Lakićević (1983).

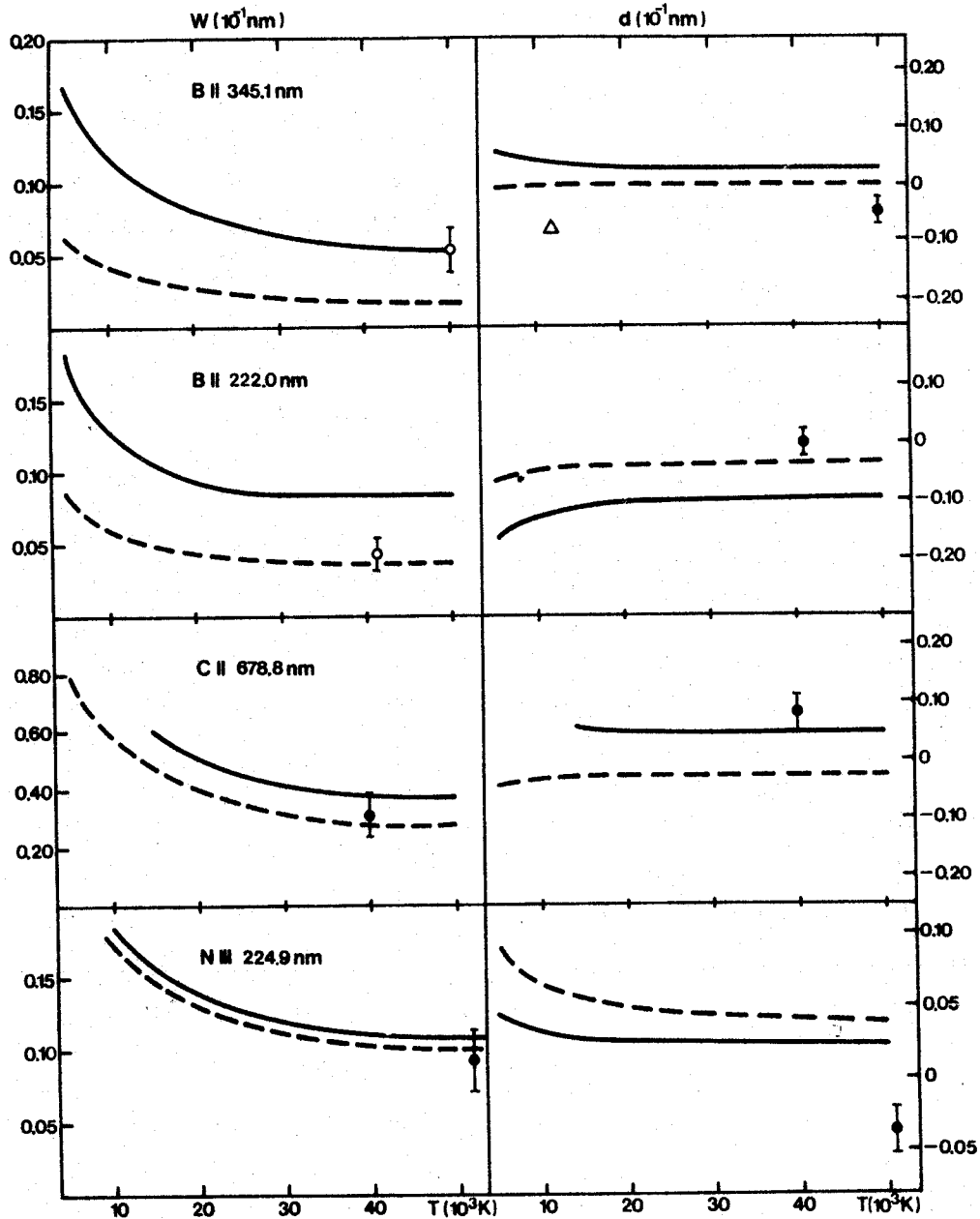
При узимању експерименталних вредности јачина осцилатора у прорачун матричних елемената уноси се апроксимативно тип везе који важи код емитера. С друге стране при употреби експерименталних или теоријских јачина осцилатора за прорачун матричних елемената треба бити опрезан, јер при чисто

теоријском прорачуну матричних елемената ми имамо јединствени скуп атомских података, а у овом случају у један део збира матричних елемената уносе се експерименталне вредности, а у други део узимају се одређене апроксимације везе које следе из теорије. То може довести до грешке.



Сл. 4.2.4 Као на слици 4.2.3, али за спектралну линију $Cd II$ ($\lambda = 214.4$ nm, $5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{3/2}$).

Као илустрације могу нам послужити сл. 4.2.2-4.2.5 на којима су упоређени експериментални резултати и резултати прорачуна модификованом семиемпиријском формулом. За прорачун матричних елемената коришћене су јачине осцилатора из различитих извора. Генерално се може приметити да се рачунате вредности Штаркових полуширина нешто мање мењају при узимању јачина осцилатора из различитих извора него Штаркови помераји. То посебно можемо приметити на сл. 4.2.3, у случају резонантне линије $Cd II$. Некада та промена може бити таква да рачунате вредности Штарковог помераја (види сл. 4.2.3-5) мењају предзнак.

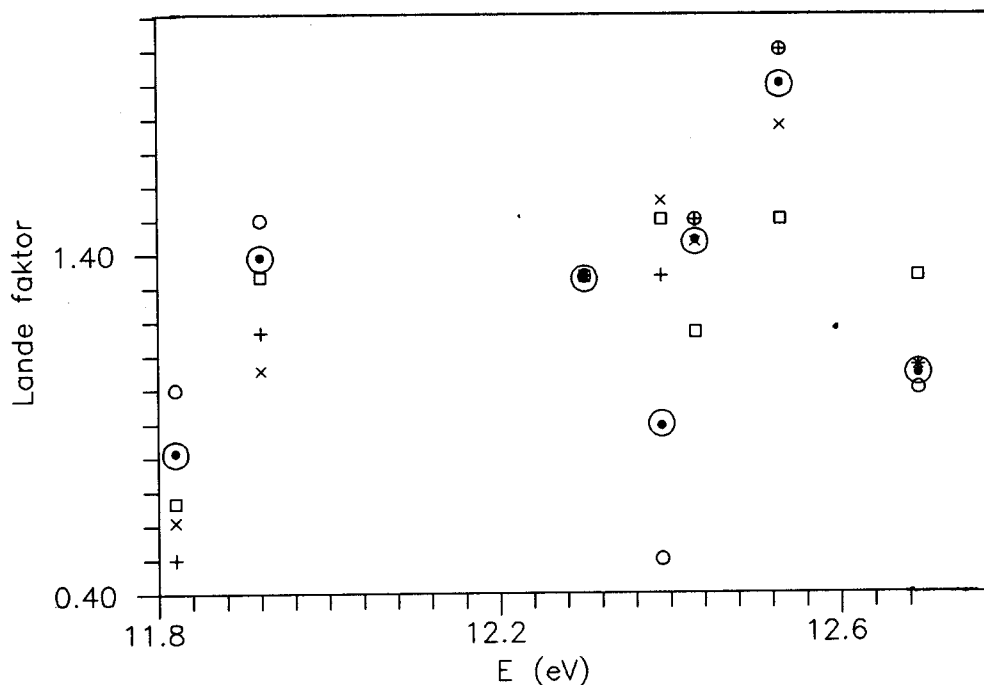


Сл. 4.2.5 Штаркова полуширина w и померај d у зависности од електронске температуре при електронској концентрацији од 10^{23} m^{-3} . Пуна линија представља прорачун при чему су коришћене јачине осцилатора (Wiese & Martin 1980), испрекидана линија представља прорачуне са Бејтс Дамгардовом апроксимацијом. Експериментални резултати: ● – Djeniže et al. (1993b), ○ – Djeniže et al. (1992b), Δ – Miller et al. (1977).

Код неких лакших јона (нпр. у случају $B II$, $C II$, и $N III$) такође су вршени прорачуни Штарковог ширења помоћу MSE, при чему су матрични елементи рачунати у Кулоновој апроксимацији (испрекидана линија на слици 4.2.5) и уз употребу јачине осцилатора Wiese & Martin (1980) (пуна линија на слици 4.2.5)

Код разматраних линија $B II$, $C II$ и $N III$ такође се може приметити већа осетљивост Штарковог помераја на начин обрачуна матричних елемената, тако да при различитим вредностима јачина осцилатора који се узимају за прорачун матричних елемената, теоријска вредност помераја може бити и позитивна и негативна (види слику 4.2.5).

Интересантан је прорачун који се добија за случај сепктралних линија 345.1 и 222.0 nm једанпут јонизованог бора. При укључивању у рачун неких нивоа који у LS вези не пертурбују нивое између којих се врши прелаз добијамо доста веће вредности за Штаркову полуширину. У случају спектралне линије 345.1 nm добро је слагање експеримента и рачуна којим се узима у обзир одступање од LS везе, док је у случају линије 222.0 nm обрнуто. С друге стране мерени помераји се такође много боље слажу са рачунатим вредностима по Бејтс Дамгардовој апроксимацији.



Сл. 4.2.6 Рачунате и мерене вредности Ланде фактора за нивое $4p5p$ једанпут јонизованог арсена. Рачунате вредности: \circ – LS веза, $+$ – LK веза, \times – jK веза, \square – jj веза. Мерене вредности: \bigcirc – Green & Barrows (1935), \bullet – Li & Andrew (1972a).

Ово указује да при узимању јачина осцилатора за неке прелазе и рачунајући по Бејтс Дамгардовој апроксимацији за остале прелазе, можемо направити грешку зато што користимо у истом рачуну неконзистентне податке. Искуство показује да је добро користити мерене јачине осцилатора у прорачуну ако су они дати за најближе нивое тј. за нивое са $n = n'$, који у принципу и највише утичу на посматрани ниво. Иначе у суштини обично се не може тврдити код спектра тешких јона да имамо само један тип везе. То добро илуструју вредности Ланде фактора за нивое $4p5p(^1P, ^3P, ^1D, ^3D)$ јонизованог арсена (види Сл. 4.2.6). Са сл. 4.2.6 се може видети да у зависности од нивоа за интерпретацију могу бити коришћени различити типови веза.

Урачунавање нивоа са $n \neq n'$

Као што се види из јед. (2.3.1.2) за рачун Штаркове полуширине путем MSE утицаји нивоа са $n \neq n'$ се узимају збирно, док се овај збир коригује код Штарковог помераја (јед. (2.3.1.8)) за случај ближих пертурбационих нивоа. Међутим, код тешких јона често (види Сл. 4.2.1) имамо да је читав низ нивоа са $n \neq n'$ ближи него први ниво са $n = n'$.

У том случају морају се Штарковој ширини дотати члан w_c (Dimitrijević 1988):

$$w_c = N \frac{h^2}{3m^2} \left(\frac{2m}{3\pi kT} \right)^{1/2} \cdot \sum_{m'} \bar{R}_{jj'}^2 [g(x_{jj'}) - g(x_j)] \quad (4.2.4)$$

односно померају

$$d_c = \pm N \frac{h^2}{3m^2} \left(\frac{2m}{3\pi kT} \right)^{1/2} \cdot \sum_{m'} \bar{R}_{jj'}^2 \cdot \epsilon_j [g_{sh}(x_{jj'}) \pm g_{sh}(x_j)]. \quad (4.2.5)$$

где је m' број пертурбационих нивоа са $n \neq n'$ ближих од $n = n'$.

Као пример оваквог утицаја могу нам послужити рачунате Штаркове полуширине за једанпут јонизовани антимоон (види сл. 4.2.7/8). Кад идемо ка горњим нивоима све је већи број нивоа са $n \neq n'$ које треба уврстити у рачун. Значај урачунавања ових нивоа се може видети са сл. 4.2.7 за прелаз $^3P - ^3S$ код *Sb II*.

Процена ширења услед судара са јонима

Утицај судара емитера и јона понекад може значајно допринети укупној Штарковој ширини и померају, посебно кад је плазма богата вишеструко наелектрисаним јонима (Kršljanin & Dimitrijević 1993). Утицај судара емитера са јонима код овде испитиваних линија био је углавном занемарљив (видети Сл. 4.2.7). Међутим, када посматрамо прелазе са већим ефективним квантним бројем овај утицај повећава укупну полуширину (упоредити слике 4.2.7 и 4.2.8). Код прорачуна Штарковог ширења тешких јона помоћу MSE, посебно када се

ради о вишим серијама, потребно је проценити и сагласно томе урачунати допринос јонског ширења.

При урачунавању јонског ширења за укупну полуширину добијамо (видети Griem 1964, или нпр. Kusch & Schwiecker 1976)

$$w_{tot} = [w_e + \alpha(1 - 0.11 \frac{N_e^{1/6}}{\sqrt{T}}) \cdot w_e] \cdot 10^{-22} N_e$$

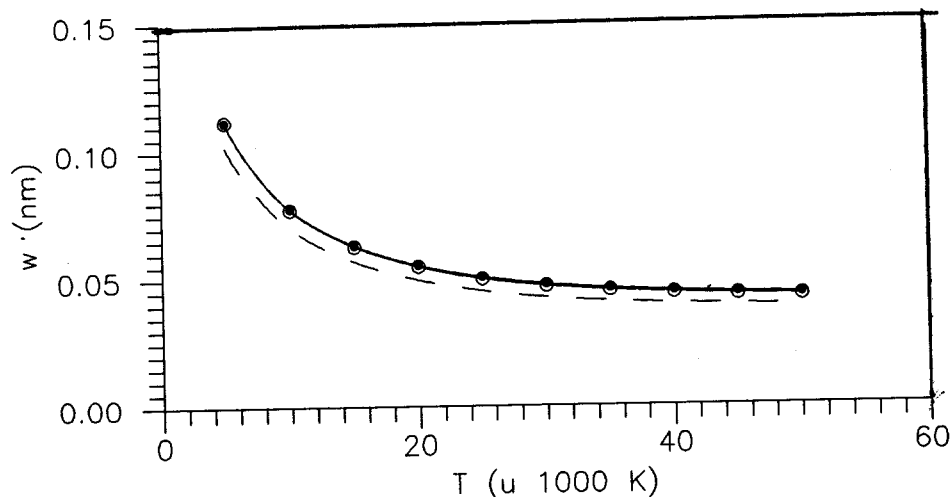
и померај

$$d_{tot} = [d_e \pm 1.14 \cdot \alpha(1 - 0.11 \frac{N_e^{1/6}}{\sqrt{T}}) \cdot w_e] \cdot 10^{-22} N_e,$$

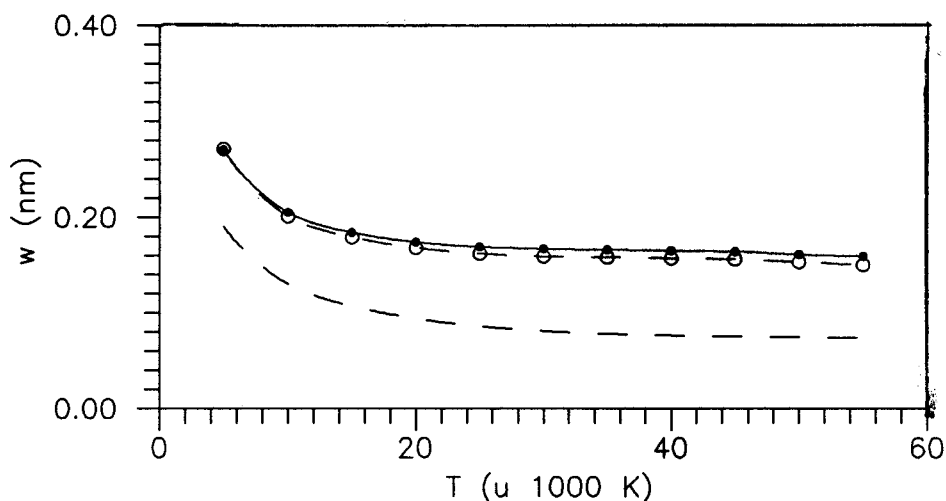
где је N_e електронска концентрација, T – електронска температура, w_e и d_e су Штаркова полуширина и померај услед судара са електронима, а α је

$$\alpha = \frac{4\pi N_e}{3} \cdot \left\{ \frac{\lambda^2}{6\pi c w_e} \cdot \left(\frac{\hbar}{m_e}\right)^2 \cdot \left| \sum_{i'} \frac{R_{ii'} \lambda_{ii'}}{2\pi c} - \frac{R_{ff'} \lambda_{ff'}}{2\pi c} \right| \right\}^{3/4},$$

где је m_e маса електрона, \hbar и c су Планкова константа и брзина светлости, редом. $R_{jj'}$ – матрични елементи ($j = i, f$), а $\lambda_{jj'}$ је таласна дужина прелаза између разматраног и одговарајућег пертурбационог нивоа.



Сл. 4.2.7 Штаркова полуширина за прелаз $6s^3P_0^0 - 6p^3D_1$ Sb II у функцији електронске температуре, за електронску концентрацију $N_e = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Испрекидана линија означава прорачун по јед. (2.3.1.2), непрекидана линија са кружићима са урачунатим нивоима $n \neq n'$ ближим од $n = n'$ и пуна линија са попуњеним кружићима са урачунатим пертурбацијама јона.



Сл. 4.2.8 Исто као на Сл. 4.2.7. само за прелаз $6s^3P_2^0 - 6p^3S_1$
Утицај јонског ширења се илустративно види са слика 4.2.7 и 4.2.8.

Урачунавање мешања конфигурација

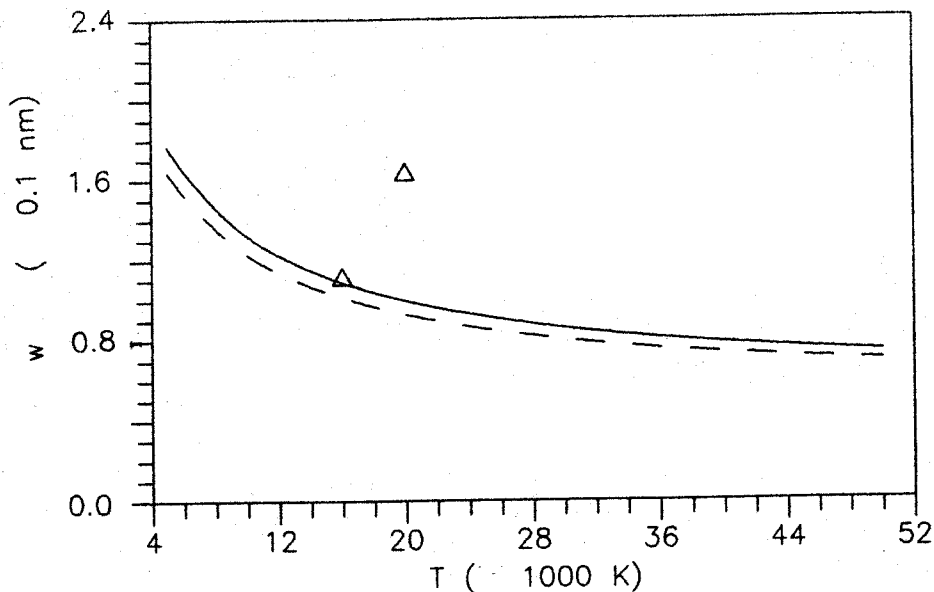
Обрачун утицаја мешања конфигурација у оним случајевима где је изражено (нпр. код $BiII$, види Табелу 4.2.1), такође се мора уврстити при обрачуну матричних елемената. У случају да користимо мерене јачине осцилатора за прорачун матричних елемената (јед. (4.2.2)) мешање конфигурација улази у рачун. Међутим проблем је у томе што често за оне нивое који највише утичу на посматрани ниво немамо мерене вредности јачина осцилатора. Стога ако можемо израчунати мешање конфигурација онда их треба узимати на следећи начин:

— ако долази до цепања нивоа nY_J на ${}^nY_J(x\%)$ и ${}^mZ_J(y\%)$, који пертурбује посматрани ниво ${}^nX_{J'}$, онда ће матрични елемент који описује ту пертурбацију изгледати као

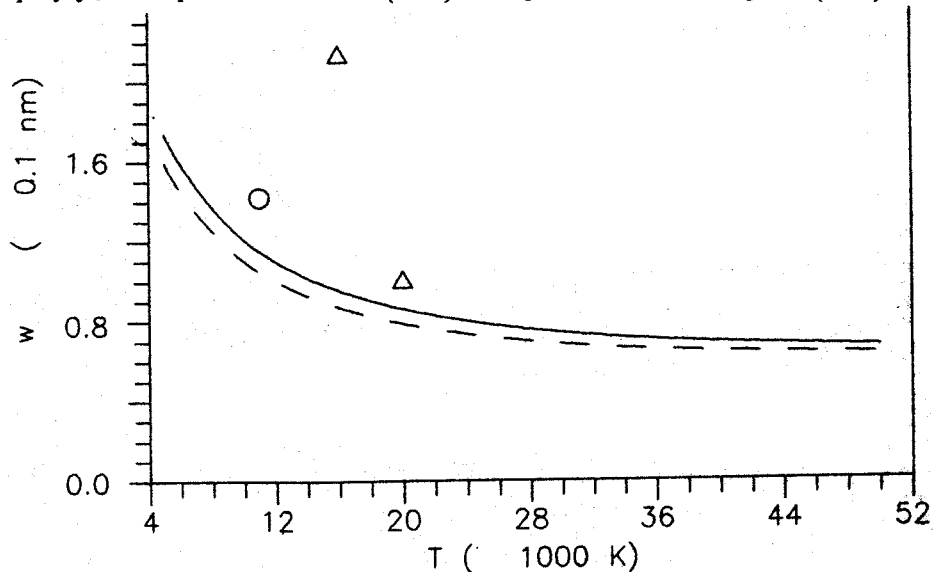
$$\vec{R}_{XY}^2 = x \cdot \vec{R}_{XY}^2 + y \cdot \vec{R}_{XZ}^2, \quad (4.2.6)$$

где је $x = x'/100$ и $y = y'/100$.

Са слика 4.2.9 – 4.2.12 се може видети да укључивање мешања нивоа поправља резултате прорачуна, и с обзиром на комплексност спектра $SbII$ и $BiII$ резултати прорачуна се добро слажу са мереним вредностима Штаркове полуширине и помераја.



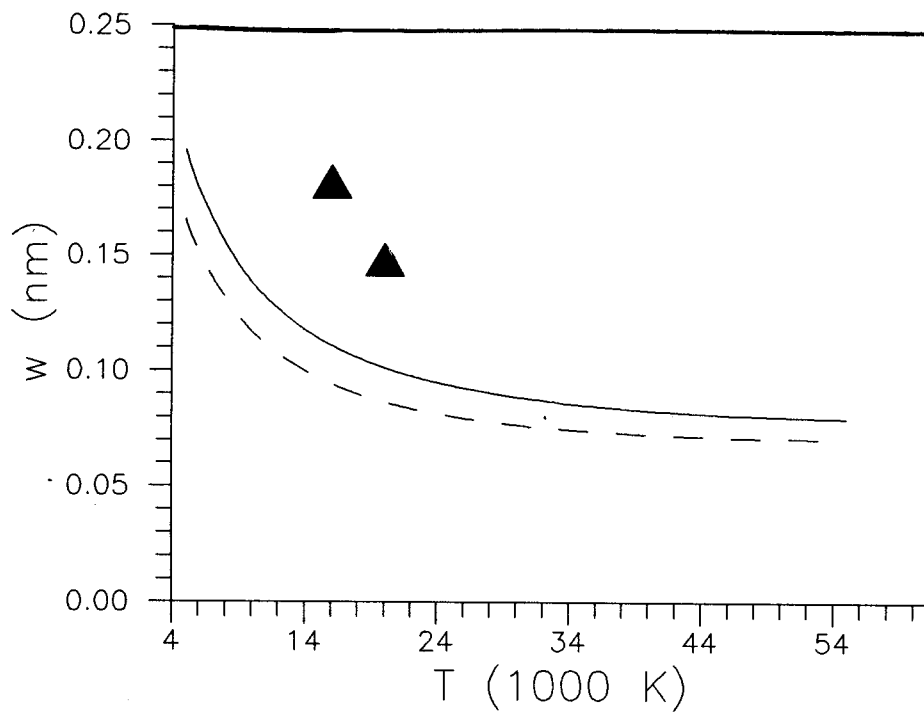
Сл. 4.2.9 Штаркова ширина спектралне линије Bi II ($\lambda = 520.9\text{nm}$, $7s^3P_1^0 - 7p^3D_2$: испрекидана линија су прорачуни узети без ефекта мешања конфигурација, Δ мерење Purić *et al.* (1985), \circ мерење Miller & Bengston (1980).



Сл. 4.2.10 Као на слици 4.2.9 само за линију $\lambda = 571.9\text{ nm}$ ($7s^3P_1^0 - 7p^3P_0$)

Табела 4.2.1 Шема мешања конфигурација код $Vi II$

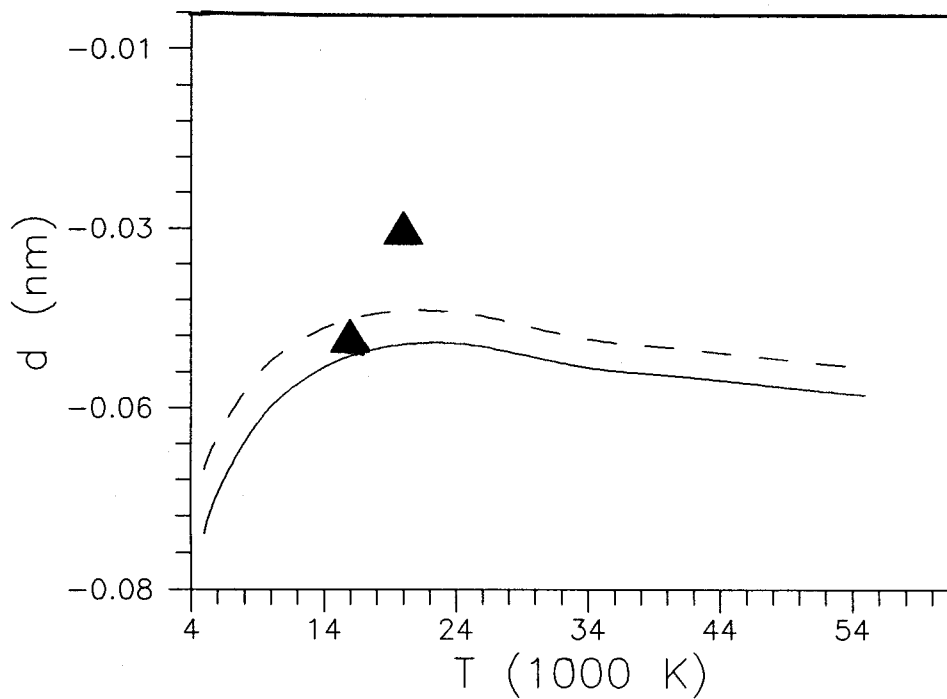
Конфиг.	ниво	K_1 L_1	K_2 L_2
np^2	1D_2	0.535 1D_2	0.465 3P_2
	3P_2	0.535 3P_2	0.465 1D_2
	3P_0	0.832 3P_0	0.168 1S_0
	1S_0	0.832 1S_0	0.168 3P_0
$npms$	$^3P_1^0$	0.701 $^3P_1^0$	0.299 $^1P_1^0$
	$^1P_1^0$	0.701 $^1P_1^0$	0.299 $^3P_1^0$



Сл. 4.2.11 Штаркова ширина спектралне линије $SbII$ ($\lambda = 600.5$ nm, $6s^3P_1^0 - 6p^3D_2$): испрекидана линија је прорачун без ефекта мешања конфигурација, \blacktriangle мерене вредности од стране Purić et al. 1985.

Табела 4.2.2 Коefицијенти мешања конфигурација код SbII

Конфиг.	ниво	K_1	L_1	K_2	L_2
np ²	¹ D ₂	0.845	¹ D ₂	0.155	³ P ₂
	³ P ₂	0.845	³ P ₂	0.155	¹ D ₂
	³ P ₀	0.947	³ P ₀	0.053	¹ S ₀
	¹ S ₀	0.947	¹ S ₀	0.053	³ P ₀
npms	³ P ₁ ⁰	0.733	³ P ₁ ⁰	0.267	¹ P ₁ ⁰
	¹ P ₁ ⁰	0.733	¹ P ₁ ⁰	0.267	³ P ₁ ⁰



Сл. 4.2.12 Исто као на слици 4.2.11, само за Штарков померај.

5. РЕЗУЛТАТИ МОДИФИКОВАНОГ СЕМИЕМПИРИЈСКОГ ПРОРАЧУНА ЗА ШТАРКОВО ШИРЕЊЕ СПЕКТРАЛНИХ ЛИНИЈА ТЕШКИХ ЈОНА

Тестирање применљивости модификоване семиемпиријске формуле извршено је за неколико спектралних линија седам тешких јона датих у табели 5. 1. Одабир тешких елемената био је условљен следећим критеријумима:

- да се ради о тешким елементима чије су спектралне линије астрофизички значајне. За то је коришћена обимна литература, циркулари, каталози и монографије (види нпр. Moore 1952 (sec. 1 and 2), Moore 1962 (sec 3, 4, and 5), Moore *et al.* 1966, итд.); радови (вид нпр. Sadakane *et al.* 1988, Sadakane 1991, Danazis *et al.* 1990, 1991, Laskarides *et al.* 1991, итд.),

Табела 5.1. Јони тешких елемената за које је вршен прорачун Штарковог ширења модификованом семиемпиријском формулом. У колони означеном са I је дат елемент, II – редни број атома, III – атомска маса, IV – број линија за које је изведен прорачун, V и VI – релативна заступљеност ових елемената у Сунчевом систему ($\log(A_x/A_H)$) по подацима датим од стране Cameron (1982) и Anders & Greevese (1989), редом и колона VII радови у којима су проучавани ефекти Штарковог ширења за дати елемент и то: [1] – Kush & Oberschelp 1967a, [2] – Lakićević 1983, [3] – Djeniže *et al.* 1991a, [4] – Popović *et al.* 1993c, [5] – Поповић 1991, [6] – Djeniže *et al.* 1993a, [7] – Labat *et al.* 1991, [8] – Kusch & Oberschelp 1967b, [9] – Djeniže *et al.* 1991b, [10] – Purić *et al.* 1985, [11] – Labat *et al.* 1990, [12] – Miller & Bengston 1980, [13] – Purić *et al.* 1985, [14] – Dimitrijević & Popović 1993a, [15] – Dimitrijević & Popović 1993b.

I	II	III	IV	V	VI	VII
ZnII	30	65.37	12	-7.32	-7.34	[1],[2],[3],[4],[5]
AsII	33	74.92	18	-9.63	-9.63	[2],[6]
BrII	35	79.90	9	-9.46	-9.35	[2],[7]
Cd II	48	112.40	8	-10.23	-10.24	[2],[4],[8],[9]
Sb II	51	121.75	17	-10.93	-10.96	[2],[6],[10]
I II	53	126.90	9	-10.32	-10.49	[2],[11]
Bi II	83	208.98	26	-11.28	-11.29	[2],[12],[13],[14],[15]

- да се ради о оним јонима код којих се због малог познавања атомских параметара Штарково ширење не може израчунати тачнијим прорачуном (семикласични или квантномеханички приступ),
- да у конкретном прорачуну обухватимо што више јона са различитом спектралном структуром како би се могли извући уопштени закључци,

- да код изабраних линија постоје експериментални подаци о Штарковом ширењу како би се могле упоређивати рачунате и мерене вредности.

Имајући то у виду изабрано је седам елемената и то: Zn II, Cd II, As II, I II, Sb II, Br II и Bi II. У табели 5.1. наведени су јони за које су рачунати параметри Штарковог ширења, са редним бројем, атомском масом, бројем линија за које је извршен прорачун, њиховом релативном заступљеношћу на Сунцу и списак радова у којима је извршено испитивање Штарковог ширења за неке линије наведених елемената.

Zn II и Cd II

На астрофизички значај спектралних линија Zn II и Cd II, посебно резонантних, указује Шарлота Мур (Moore 1952, 1962 (Sec. 2 and 3)). Посебно у UV спектру "нормалних" топлих звезда приметне су јаке линије ових елемената (Danezis *et al.* 1990, 1991, Sadakane 1991). Разматрање UV спектра неколико Hg-Mn звезда (Sadakane *et al.* 1988) указују на присуство веома јаких линије јонизованог цинка.

Мерење параметара Штаркових ширења неколико спектралних линија јонизованог цинка и кадмијума су рађена још шездесетих година од старне Куша и Обершелпа (Kusch & Oberschelp 1967ab), а у скорије време од стране Ђенижеа и других (Djeniže *et al.* 1991ab). Релативно велики број мерених вредности Штаркове полуширине и помака омогућило је анализу MSE приступа код ових елемената.

За прорачун потребни атомски подаци су узети из Мурових таблица (Moore 1971b, Back *et al.* 1981), а јачине осцилатора из Baumann & Smith 1970, Kunisz *et al.* 1975, Fischer 1977, Shaw *et al.* 1978, Wiese & Martin 1980.). Рачунате вредности Штаркове полуширине и помераја дате су у табелици 5.2 (за ZnII) и 5.3 (за CdII). Рачунате вредности су упоређиване са мереним (табела 5.4). Из табеле 5.4 се види доста добро слагање рачунатих са мереним резултатима из радова Djeniže *et al.* (1991ab) у Штарковим полуширинама, док је велика разлика у односу на експерименталне вредности које су дали Kusch & Oberschelp (1967ab). Статистика показује да у случају Штаркових полуширина, када се узму сви експерименти, однос мерених и рачунатих Штаркових полуширина је

$$w_{exp}/w_{MSE} = \begin{cases} 2.06 & \text{за јон цинка} \\ 3.19 & \text{за јон кадмијума} \end{cases}$$

Међутим ако из разматрања искључимо експерименте Куша и Обершелпа, овај однос постаје

$$w_{exp}/w_{MSE} = \begin{cases} 1.15 & \text{за јон цинка} \\ 0.79 & \text{за јон кадмијума} \end{cases}$$

Ми смо прихватили ову другу вредност као реалнију због тога што неки индикатори указују да су Куш и Обершелп изводили експеримент са плазмом

која је била богата цинком и кадмијумом. За радни гас код мерења Штаркових полуширина код $ZnII$ користили су $Zn(C_2H_5)_2$ (Kusch & Oberschelp 1967a), а код $CdII$ $Cd(C_2H_5)_2$ (Kusch & Oberschelp 1967b), тако да су вероватно имали помешане разне друге ефекте (ширење неутралима, самоапсорпција, итд.) који су утицали на ширину линије (Ђениже 1993), а који су приписани Штарковом. Уосталом овако велико неслагање (нпр. код резонантне линије $Cd II$ мерена вредност Штаркове полуширине од стране ових аутора је око 32 пута већа него што дају прорачуни СЕ и МСЕ формулом) није примећено ни код емитера са комплекснијим сепктром него што је то код $ZnII$ (види у даљем тексту). Поред тога, као што се види из табеле 5.4, велико је одступање ових резултата од семиемпириског прорачуна. У даљем разматрању, при сумирању односа експерименталних вредности и теоријских прорачуна узимаћемо овај однос без резултата Куша и Обершелпа (1967аб).

Што се тиче Штарковог помераја, закључак је да се резултати прорачуна лошије слажу са експерименталним него код полуширина. Код неких линија се може приметити да се рачун слаже у оквирима грешке мерења (код укупно 7 линија), док је код осталих однос експерименталних и рачунатих резултата око 0.4. С друге стране са слика 4.2.2, 4.2.3 и 4.2.4 види се да је Штарков померај много осетљивији на тип везе него Штаркова полуширина. Стога код тешких елемената је за очекивати (имајући у виду нпр. сл. 4.2.6 и текст у вези са њом) да прорачун Штарковог помераја помоћу MSE даје много мање поуздане резултате него што је то у случају полуширина. Слагања рачунатог Штарковог помераја са мереним за резонантне линије код $ZnII$ и $CdII$ може указивати на већу поузданост за прорачун Штарковог помераја овом методом у случају нижих серије. У том случају број пертурбационих нивоа који улазе у рачун је мањи, па је и сама грешка апроксимације мања.

Табела 5.2 Рачунате вредности Штаркове (пуне) ширине и помераја спектралних линија $Zn II$ у функцији температуре. Електронска концентрација је $N = 10^{23} m^{-3}$. Позитивна вредност помераја одговара црвеном померају.

Преџаз	T (K)	w [nm]	d [nm]	Преџаз	w [nm]	d [nm]
$4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{1/2}^0$ $\lambda = 206.19 \text{ nm}$ $X = 0.258$ $Zn II$	5000.	.622E-02	.950E-03	$4s^2S_{1/2} - 4p^2P_{3/2}^0$ $\lambda = 202.55 \text{ nm}$ $X = 0.269$ $Zn II$.668E-02	.123E-02
	10000.	.434E-02	.685E-03		.466E-02	.882E-03
	20000.	.302E-02	.504E-03		.324E-02	.646E-03
	30000.	.244E-02	.428E-03		.262E-02	.548E-03
	40000.	.210E-02	.386E-03		.226E-02	.493E-03
50000.	.187E-02	.360E-03	.202E-02	.457E-03		
$4s^2S - 5p^2P^0$ $\bar{\lambda} = 98.49 \text{ nm}$ $X = 2.256$ $Zn II$	5000.	.328E-02	.390E-03	$4p^2P^0 - 4s^2^2D$ $\bar{\lambda} = 678.13 \text{ nm}$ $X = 0.269$ $Zn II$.738E-01	.306E-01
	10000.	.228E-02	.298E-03		.516E-01	.218E-01
	20000.	.164E-02	.244E-03		.358E-01	.157E-01
	30000.	.144E-02	.232E-03		.288E-01	.130E-01
	40000.	.135E-02	.258E-03		.248E-01	.114E-01
50000.	.122E-02	.291E-03	.222E-01	.104E-01		

Табела 5.2 наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]	Прелаз	w [nm]	d [nm]
$4p^2P^0 - 5s^2S$ $\bar{\lambda} = 253.98\text{nm}$ $X = 0.791$ Zn II	5000.	.244E-01	.814E-02	$4p^2P^0 - 6s^2S$ $\bar{\lambda} = 152.82\text{ nm}$ $X = 1.904$ Zn II	.272E-01	.108E-01
	10000.	.170E-01	.606E-02		.197E-01	.870E-02
	20000.	.120E-01	.476E-02		.156E-01	.819E-02
	30000.	.116E-01	.449E-02		.147E-01	.776E-02
	40000.	.922E-02	.442E-02		.144E-01	.704E-02
50000.	.866E-02	.439E-02	.142E-01	.645E-02		
$4p^2P^0 - 4d^2D$ $\bar{\lambda} = 208.87\text{ nm}$ $X = 2.256$ Zn II	5000.	.928E-02	.112E-02	$4p^2P^0 - 5d^2D$ $\bar{\lambda} = 145.10\text{ nm}$ $X = 14.374$ Zn II	.137E-01	.180E-02
	10000.	.642E-02	.899E-03		.964E-02	.153E-02
	20000.	.452E-02	.814E-03		.726E-02	.150E-02
	30000.	.386E-02	.851E-03		.656E-02	.156E-02
	40000.	.360E-02	.921E-03		.632E-02	.173E-02
50000.	.348E-02	.111E-02	.622E-02	.161E-02		
$4s^2\ ^2D - 5p^2P^0$ $\bar{\lambda} = 265.12\text{ nm}$ $X = 2.256$ Zn II	5000.	.278E-01	-.159E-02	$4s^2\ ^2D - 4f^2F^0$ $\bar{\lambda} = 187.08\text{ nm}$ $X = 14.374$ Zn II	.188E-01	.324E-02
	10000.	.193E-01	-.997E-03		.133E-01	.304E-02
	20000.	.139E-01	-.515E-03		.109E-01	.374E-02
	30000.	.120E-01	-.226E-03		.106E-01	.450E-02
	40000.	.112E-01	.183E-03		.105E-01	.486E-02
50000.	.108E-01	.565E-03	.105E-01	.510E-02		
$5s^2S - 5p^2P^0$ $\bar{\lambda} = 763.82\text{ nm}$ $X = 2.256$ Zn II	5000.	.324	-.469E-01	$4d^2D - 4f^2F^0$ $\bar{\lambda} = 492.03\text{ nm}$ $X = 14.374$ Zn II	.128	.323E-01
	10000.	.224	-.346E-01		.912E-01	.275E-01
	20000.	.162	-.269E-01		.768E-01	.296E-01
	30000.	.142	-.255E-01		.764E-01	.332E-01
	40000.	.134	-.235E-01		.762E-01	.346E-01
50000.	.132	-.214E-01	.760E-01	.346E-01		

Напомена: Овде је $x = 3kT/2\Delta E$ Табела 5.3 Рачунате вредности Штаркове (пуне) ширине и помераја спектралних линија Cd II у функцији температуре. Електронска концентрација је $N = 10^{23}\text{m}^{-3}$.

Prelaz	T (K)	w [nm]	d [nm]	Prelaz	w [nm]	d [nm]
$5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{1/2}^0$ $\lambda = 226.50\text{nm}$ $X = 0.235$ Cd II	5000.	.874E-02	.391E-04	$5s^2S_{1/2} - 5p^2P_{3/2}^0$ $\lambda = 214.44\text{nm}$ $X = 0.285$ Cd II	.112E-01	.154E-02
	10000.	.610E-02	.354E-04		.786E-02	.111E-02
	20000.	.424E-02	.365E-04		.546E-02	.817E-03
	30000.	.342E-02	.400E-04		.440E-02	.693E-03
	40000.	.294E-02	.443E-04		.380E-02	.625E-03
50000.	.264E-02	.489E-04	.340E-02	.581E-03		

Табела 5.3 наставак

Prelaz	T (K)	w [nm]	d [nm]	Prelaz	w [nm]	d [nm]
5s ² S – 6p ² P ⁰ $\bar{\lambda} = 105.09\text{nm}$ X = 1.928 Cd II	5000.	.322E-02	-.296E-02	5p ² P ⁰ – 5s ² ² D $\bar{\lambda} = 388.78\text{nm}$ X = 0.278 Cd II	.292E-01	.129E-01
	10000.	.226E-02	-.220E-03		.204E-01	.921E-02
	20000.	.150E-02	-.181E-03		.141E-01	.663E-02
	30000.	.139E-02	-.191E-03		.114E-01	.551E-02
	40000.	.128E-02	-.226E-03		.982E-02	.486E-02
50000.	.122E-02	-.240E-03	.880E-02	.443E-02		
5p ² P ⁰ – 6s ² S $\bar{\lambda} = 268.82\text{ nm}$ X = 0.851 Cd II	5000.	.302E-01	.907E-02	5p ² P ⁰ – 5d ² D $\bar{\lambda} = 227.32\text{ nm}$ X = 1.928 Cd II	.186E-01	.106E-03
	10000.	.210E-01	.678E-02		.131E-01	.580E-04
	20000.	.150E-01	.541E-02		.914E-02	.842E-04
	30000.	.127E-01	.517E-02		.744E-02	-.359E-03
	40000.	.166E-01	.511E-02		.644E-02	-.849E-04
50000.	.109E-01	.512E-02	.584E-02	-.180E-03		
5d ² D – 4f ² F ⁰ $\bar{\lambda} = 536.34\text{ nm}$ X = 5.779 Cd II	5000.	.176	-.166	6p ² P ⁰ – 6d ² D $\bar{\lambda} = 664.05\text{nm}$ X = 5.779 Cd II	.428	.142E-01
	10000.	.125	-.548E-02		.300	.135E-01
	20000.	.998E-01	.939E-01		.218	.141E-01
	30000.	.990E-01	.211E-01		.194	.154E-01
	40000.	.984E-01	.283E-01		.184	.167E-01
50000.	.982E-01	.361E-01	.181	.131E-01		

Табела 5.4. Упореджане експерименталне и мерене вредности при електронској концентрацији $N = 10^{23}\text{ m}^{-3}$. Упореджавање је урађено са експерименталним вредностима узетим из: а – Djeniže *et al.* 1991a, б – Kusch & Oberschelp 1967a, с – Kusch & Oberschelp 1967b, d – Djeniže *et al.* 1991b.

Prelaz	λ	T [10 ³ K]	w_{exp}/w_{MSE}	w_{exp}/w_{SE}	d_{exp}/d_{MSE}	Ref.
Zn II						
4s ² S – 4p ² P ⁰	206.19	33.0	1.95	2.80	*	a
4p ² P ⁰ – 4s ² ² D	589.44	33.0	1.69	1.43		a
	747.44	33.0	1.64	0.87	0.39	a
4p ² P ⁰ – 5s ² S	255.80	11.1	5.17	6.5		b
		33.0	0.94	0.85	0.45	a
	250.20	11.1	3.74			b
5s ² S – 5p ² P ⁰	758.85	33.0	0.32	0.16	-0.24	a
4d ² D – 4f ² F	491.17	11.1	2.68	1.33		b
		33.0	0.45	0.20	-0.20	a
	492.4	11.1	1.99			b

Табела 5.4, наставак

Prelaz	λ	T [10^3 K]	$w_{\text{exp}}/w_{\text{MSE}}$	$w_{\text{exp}}/w_{\text{SE}}$	$d_{\text{exp}}/d_{\text{MSE}}$	Ref.
Cd II 5s ² S – 5p ² P ⁰	214.41	23.0	0.92	1.65	*	a
		30.0	0.95	1.74	*	a
	226.50	11.1	31.63	43.4		c
		23.0	1.06	1.09	*	a
		30.0	1.16	1.50	*	a
5p ² P ⁰ – 5s ² 2D	441.56	23.0	1.47	0.82	0.35	a
		30.0	1.21	0.63	0.36	a
	325.03	11.1	2.61			c
5p ² P ⁰ – 6s ² S	274.86	23.0	0.67	0.55	0.38	a
	257.29	11.1	2.31			c
5p ² P ⁰ – 5d ² D	231.28	11.1	4.03			c
		11.1	3.82	4.06		c
	219.46	23.0	1.02	0.81	*	a
		11.1	4.32			c
		23.0	1.02	0.92	*	a
5d ² D – 4f ² F ⁰	537.81	11.1	4.62			c
		23.0	0.20		0.85	d
		30.0	0.21		0.46	d
	533.75	11.1	3.52			c
		23.0	0.15		0.39	d
	30.0	0.19		0.26	d	

* Рачунате и мерене вредности Штарковог помераја су у границама грешке $-0.002 \text{ nm} < d < +0.002 \text{ nm}$.

Br II и I II

За прорачун Штарковог ширења спектралних линија једанпут јонизованог брома и јода помоћу MSE коришћени су атомски подаци дати у Муровим табелама (Moore 1971) и јачине осцилатора

за Br II – Груздев (1969), Bengston & Miller (1976) и Wiese & Martin (1980)
за I II – Груздев (1969) и Wiese & Martin (1980)

Мешање нивоа за најниже серије је израчунато по формули (3.1.12a), иначе дато у табели 3.5.

Штаркове полуширине су код три линије јонизованог јода мерене и дате у раду Labat *et al.* (1990), а за седам линија једанпут јонизованог брома у раду Labat *et al.* (1991). За резонантне прелазе код ових елемената процена Штарковог помераја и полуширине дата је у раду Lakićević (1983). Нажалост експерименталне вредности Штарковог помераја за линије ових емитера не постоје у литератури.

У табелама 5.5 и 5.6 су дате рачунате вредности Штаркових полуширина. Упоредене су мерене и рачунате вредности Штаркових полуширина. Средња вредност односа мерених и рачунати за BrII је 1.67, а за I II је 1.6. Укупан средњи однос мерених и рачунатих вредности за BrII и I II је око 1.6.

Средњи однос мерених и рачунатих вредности код ZnII, CdII, BrII и I II (збирно) је 1.30.

Табела 5.5 Штарково ширење спектралних линија BrII (пуна ширина) у зависности од електронске температуре при електронској концентрацији $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

Прелаз	T(K)	w (nm)	d (nm)
$5s^3D^0 - 5p^3D$ $\bar{\lambda} = 498.19 \text{ nm}$	5000.	.705E-01	-.180E-01
	10000.	.518E-01	-.127E-01
	20000.	.366E-01	-.895E-02
	30000.	.312E-01	-.716E-02
	40000.	.290E-01	-.595E-02
Br II $5s^3D^0 - 5p^3F$ $\bar{\lambda} = 467.87 \text{ nm}$	5000.	.682E-01	-.153E-01
	10000.	.472E-01	-.107E-01
	20000.	.334E-01	-.744E-02
	30000.	.286E-01	-.583E-02
	40000.	.266E-01	-.455E-02
$5s^3D^0 - 5p^3P$ $\bar{\lambda} = 426.21 \text{ nm}$	5000.	.560E-01	-.913E-02
	10000.	.388E-01	-.626E-02
	20000.	.276E-01	-.403E-02
	30000.	.238E-01	-.281E-02
	40000.	.224E-01	-.153E-02
50000.	.218E-01	-.112E-02	

Табела 5.5 наставак

Прелаз	T(K)	w (nm)	d (nm)
$5s^5S^0 - 5p^5P$ $\bar{\lambda} = 475.49 \text{ nm}$	5000.	.636E-01	.744E-03
	10000.	.440E-01	.628E-03
	20000.	.306E-01	.604E-03
	30000.	.254E-01	.651E-03
	40000.	.228E-01	.718E-03
	50000.	.214E-01	.750E-03
$5s^3S^0 - 5p^3P$ $\bar{\lambda} = 520.02 \text{ nm}$	5000.	.866E-01	.302E-01
	10000.	.600E-01	.327E-01
	20000.	.420E-01	.301E-01
	30000.	.350E-01	.275E-01
	40000.	.316E-01	.255E-01
	50000.	.300E-01	.232E-01
$5s^1D^0 - 5p^1P$ $\bar{\lambda} = 559.15 \text{ nm}$	5000.	.956E-01	-.208E-01
	10000.	.660E-01	-.147E-01
	20000.	.468E-01	-.103E-01
	30000.	.404E-01	-.834E-02
	40000.	.378E-01	-.690E-02
	50000.	.370E-01	-.565E-02
$5s^1D^0 - 5p^1F$ $\bar{\lambda} = 533.35 \text{ nm}$	5000.	.888E-01	-.182E-01
	10000.	.614E-01	-.128E-01
	20000.	.436E-01	-.886E-02
	30000.	.376E-01	-.702E-02
	40000.	.354E-01	-.550E-02
	50000.	.346E-01	-.448E-02
$5s^1D^0 - 5p^1D$ $\bar{\lambda} = 422.51 \text{ nm}$	5000.	.538E-01	-.670E-02
	10000.	.374E-01	-.438E-02
	20000.	.270E-01	-.238E-02
	30000.	.240E-01	-.106E-02
	40000.	.230E-01	.297E-03
	50000.	.228E-01	.345E-03

Табела 5.6. Штаркове полуширине и померај линија јонизованог јода у зависности од електронске температуре. Електронска концентрација је 10^{23} m^{-3} .

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]	Прелаз	w [nm]	d [nm]
$5p^4 \ ^3P - 5d^3 D^0$ $\bar{\lambda} = 111.78 \text{ nm}$	5000.	.157E-02	.206E-03	$5p^4 \ ^3P - 6s^3 S^0$ $\bar{\lambda} = 122.29 \text{ nm}$.312E-02	.122E-02
	10000.	.108E-02	.161E-03		.216E-02	.901E-03
	20000.	.742E-03	.139E-03		.152E-02	.695E-03
	30000.	.620E-03	.136E-03		.126E-02	.632E-03
	40000.	.556E-03	.142E-03		.113E-02	.623E-03
	70000.	.506E-03	.186E-03		.976E-03	.626E-03
$6s^5 S^0 - 6p^5 P$ $\bar{\lambda} = 532.63 \text{ nm}$	5000.	.942E-01	-.193E-01	$6s^5 S^0 - 7p^5 P$ $\bar{\lambda} = 247.52 \text{ nm}$.500E-01	-.669E-02
	10000.	.654E-01	-.140E-01		.354E-01	-.511E-02
	20000.	.456E-01	-.104E-01		.320E-01	-.524E-02
	30000.	.382E-01	-.898E-02		.280E-01	-.451E-02
	40000.	.348E-01	-.855E-02		.260E-01	-.411E-02
	70000.	.318E-01	-.723E-02		.238E-01	-.397E-02
$5d^5 D^0 - 6p^5 P$ $\bar{\lambda} = 743.31 \text{ nm}$	5000.	.154	-.413E-02	$5d^5 D^0 - 7p^5 P$ $\bar{\lambda} = 257.14 \text{ nm}$.610E-01	-.464E-02
	10000.	.107	-.277E-02		.432E-01	-.368E-02
	20000.	.742E-01	-.168E-02		.322E-01	-.328E-02
	30000.	.618E-01	-.117E-02		.283E-01	-.265E-02
	40000.	.516E-01	-.840E-02		.262E-01	-.223E-02
	70000.	.516E-01	.133E-02		.236E-01	-.211E-02
$6p^5 P - 7s^5 S^0$ $\bar{\lambda} = 531.91 \text{ nm}$	5000.	.268	.859E-01	$7s^5 S^0 - 7p^5 P$ $\bar{\lambda} = 1506.83 \text{ nm}$	3.30	-.796
	10000.	.190	.671E-01		2.36	-.628
	20000.	.145	.627E-01		1.83	-.590
	30000.	.131	.612E-01		.168	-.561
	40000.	.126	.559E-01		1.63	-.505
	70000.	.122	.365E-01		1.56	-.358
Прелаз	T (K)	w [nm]	d [Å]	T (K)	w [Å]	d [nm]
$6s^3 S^0 - 6p^3 P$ $\bar{\lambda} = 571.73 \text{ nm}$	5000.	.112	-.286E-01	30000.	.462E-01	-.139E-01
	10000.	.778E-01	-.208E-01	40000.	.426E-01	-.135E-01
	20000.	.548E-01	-.156E-01	70000.	.398E-01	-.120E-01

Табела 5.7 Упоредене вредности мерених и рачунатих Штаркових полуширина за електронску концентрацију $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Експерименталне вредности су узете из: а – Labat *et al.* 1991, б – Labat *et al.* 1990

Prelaz	λ [nm]	T (K)	w_{exp}/w_{mse}	Ref.
<i>Br II</i>				
$5s^5 S_2^0 - 5p^5 P_3$	470.48	36 000	2.0	a
$5s^5 S_2^0 - 5p^5 P_1$	481.67	—	1.4	a
$5s' ^1 D_2^0 - 5p' ^1 D_2$	422.39	—	2.1	a
$5s' ^1 D_2^0 - 5p' ^1 F_3$	533.20	—	1.4	a
$5s' ^3 D_2^0 - 5p' ^3 P_0$	417.96	—	1.9	a
$5s' ^3 D_2^0 - 5p' ^3 D_2$	492.88	—	1.5	a
$5s' ^3 D_2^0 - 5p' ^3 D_3$	493.88	—	1.3	a
<i>I II</i>				
$6s^5 S_2^0 - 6p^5 P_3$	516.12	64 000	1.3	b
$6s^3 S_1^0 - 6p^3 P_2$	562.57	—	1.9	b

Однос мерених и рачунатих вредности за *Br II* и *I II* у просеку су 1.6.

As II, Sb II и Bi II

Код ова три емитера је заједничко да имају основни ниво $np^2 \ 3P^0$, и да се интерпретација нивоа може посматрати у међувези. Потребни атомски подаци су узимани из Мурових таблица (1971bc) и радова Li & Andrew (1971, 1972a). Одступање од *LS* везе код ових елемената је узимано на основу радова Груздева (1968) и Li & Andrew (1972b). У оба рада се констатује одступање од *LS* везе код ова три емитера. Мешање синглета и триплета су узети на основу прорачуна Груздева (1968) дато у табелама 4.2.1 (*BiII*), 4. 2. 2 (*SbII*) и 5. 12 (*AsII*). Јачине осцилатора (или вероватноће прелаза) су узимани из Warner & Kirkpatrick (1969), Ошерович и Тезиков (1978) и Wiese & Martin (1980).

Због процентуално великог мешања синглетних и триплетних нивоа (посебно код јонизованог бизмута) овде је посебно испитиван утицај овог мешања (види слике 4.2.9 и 4.2.10). Рачунате вредности Штаркових полуширина и помераја су упоређиване са експерименталним

за *SbII* – Purić *et al.* (1985)

за *BiII* – Miller & Bengston (1980) и Purić *et al.* (1985).

за *As II* – процена дата у раду Djeniže *et al.* (1993a) [види Додатак].

За $As II$ нема мерених вредности, осим што је (као и за све рачунате елементе у овом раду) Лакићевић (1983) проценио вредности Штаркових полуширина и помераја за резонантне прелазе.

Прорачун Штаркових полуширина и помераја за $As II$ дајемо као изазов експериментаторима и могућност накнадног суда о закључцима које смо делимично изнели и које ћемо на крају дати.

Табела 5.8 Штаркова (пуна) ширина и померај за једанпут јонизовани арсен у функцији од електронске температуре. Електронска концентрација је $N = 10^{23} \text{m}^{-3}$.

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$5s^3 P_0^0 - 5p^3 D_1$ $\lambda = 549.92 \text{ nm}$	5000.	.822E-01	-.851E-02
	10000.	.575E-01	-.462E-02
	20000.	.412E-01	-.117E-03
	30000.	.352E-01	.157E-02
	40000.	.327E-01	.223E-02
	50000.	.315E-01	.275E-02
$5s^3 P_0^0 - 5p^3 P_1$ $\lambda = 488.99 \text{ nm}$	5000.	.111	.102E-03
	10000.	.905E-01	.325E-02
	20000.	.874E-01	.534E-02
	30000.	.778E-01	.532E-02
	40000.	.721E-01	.468E-02
	50000.	.683E-01	.462E-02
$5s^3 P_0^0 - 5p^3 S_1$ $\lambda = 447.25 \text{ nm}$	5000.	.121	-.16E-01
	10000.	.848E-01	-.103E-01
	20000.	.613E-01	-.466E-02
	30000.	.531E-01	-.137E-02
	40000.	.491E-01	.178E-02
	50000.	.471E-01	.149E-02
$5s^3 P_1^0 - 5p^3 D_1$ $\lambda = 562.21 \text{ nm}$	5000.	.108	-.250E-01
	10000.	.751E-01	-.178E-01
	20000.	.537E-01	-.130E-01
	30000.	.456E-01	-.114E-01
	40000.	.422E-01	-.110E-01
	50000.	.406E-01	-.107E-01
$5s^3 P_1^0 - 5p^3 D_2$ $\lambda = 555.96 \text{ nm}$	5000.	.117	-.264E-01
	10000.	.814E-01	-.189E-01
	20000.	.582E-01	-.138E-01
	30000.	.496E-01	-.121E-01
	40000.	.459E-01	-.117E-01
	50000.	.441E-01	-.113E-01

Табела 5.8, наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$5s^3P_1^0 - 5p^3P_0$ $\lambda = 523.28 \text{ nm}$	5000.	.862E-01	-.110E-01
	10000.	.649E-01	-.624E-02
	20000.	.454E-01	-.461E-02
	30000.	.450E-01	-.323E-02
	40000.	.449E-01	-.370E-02
	50000.	.427E-01	-.329E-02
$5s^3P_1^0 - 5p^3P_1$ $\lambda = 498.68 \text{ nm}$	5000.	.132	-.125E-01
	10000.	.106	-.679E-02
	20000.	.992E-01	-.451E-02
	30000.	.878E-01	-.467E-02
	40000.	.813E-01	-.524E-02
	50000.	.770E-01	-.575E-02
$5s^3P_1^0 - 5p^3P_2$ $\lambda = 473.20 \text{ nm}$	5000.	.747E-01	-.177E-01
	10000.	.228	.115E-01
	20000.	.198	.725E-02
	30000.	.183	.504E-02
	40000.	.174	.339E-02
	50000.	.167	.179E-02
$5s^3P_1^0 - 5p^3S_1$ $\lambda = 455.34 \text{ nm}$	5000.	.140	-.271E-01
	10000.	.978E-01	-.192E-01
	20000.	.704E-01	-.133E-01
	30000.	.609E-01	-.998E-02
	40000.	.562E-01	-.690E-02
	50000.	.538E-01	-.733E-02
$5s^3P_2^0 - 5p^3D_1$ $\lambda = 649.09 \text{ nm}$	5000.	.153	-.374E-01
	10000.	.107	-.268E-01
	20000.	.764E-01	-.197E-01
	30000.	.650E-01	-.175E-01
	40000.	.602E-01	-.171E-01
	50000.	.580E-01	-.162E-01
$5s^3P_3^0 - 5p^3D_2$ $\lambda = 640.77 \text{ nm}$	5000.	.164	-.392E-01
	10000.	.115	-.281E-01
	20000.	.820E-01	-.207E-01
	30000.	.699E-01	-.183E-01
	40000.	.647E-01	-.179E-01
	50000.	.623E-01	-.174E-01

Табела 5.8, наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$5s^3P_2^0 - 5p^3D_3$ $\lambda = 565.29 \text{ nm}$	5000.	.167	-.354E-02
	10000.	.145	.674E-02
	20000.	.111	.930E-02
	30000.	.933E-01	.788E-02
	40000.	.887E-01	.579E-02
	50000.	.865E-01	.366E-02
$5s^3P_2^0 - 5p^3P_1$ $\lambda = 565.86 \text{ nm}$	5000.	.178	-.192E-01
	10000.	.141	-.111E-01
	20000.	.131	-.764E-02
	30000.	.116	-.777E-02
	40000.	.108	-.858E-02
	50000.	.102	-.926E-02
$5s^3P_2^0 - 5p^3P_2$ $\lambda = 533.27 \text{ nm}$	5000.	.102	-.252E-01
	10000.	.268	.126E-01
	20000.	.216	.758E-02
	30000.	.191	.484E-02
	40000.	.175	.268E-02
	50000.	.163	.634E-03
$5s^3P_2^0 - 5p^3S_1$ $\lambda = 510.70 \text{ nm}$	5000.	.182	-.367E-01
	10000.	.127	-.261E-01
	20000.	.916E-01	-.182E-01
	30000.	.791E-01	-.140E-01
	40000.	.731E-01	-.101E-01
	50000.	.700E-01	-.107E-01
$5s^1P_1^0 - 5p^1D_2$ $\lambda = 510.75 \text{ nm}$	5000.	.656	.635E-01
	10000.	.554	.429E-01
	20000.	.457	.274E-01
	30000.	.404	.198E-01
	40000.	.368	.139E-01
	50000.	.343	.801E-02
$5s^1P_1^0 - 5p^1S_0$ $\lambda = 435.21 \text{ nm}$	5000.	.769E-01	-.252E-01
	10000.	.534E-01	-.182E-01
	20000.	.379E-01	-.135E-01
	30000.	.323E-01	-.117E-01
	40000.	.297E-01	-.104E-01
	50000.	.284E-01	-.101E-01

Табела 5.9 Штаркове (пуне) полуширине и помаци спектралних линија једанпут јонизованог антимоно у зависности од електронске температуре, за електронску концентрацију од $N = 10^{23} \text{m}^{-3}$.

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$6s^3P_0^o - 6p^3D_1$ $\lambda = 680.7$	5000.	.112	-.179E-01
	10000.	.774E-01	-.128E-01
	20000.	.548E-01	-.928E-02
	30000.	.470E-01	-.790E-02
	40000.	.441E-01	-.714E-02
	50000.	.429E-01	-.591E-02
$6s^3P_0^o - 6p^3P_1$ $\lambda = 591.1 \text{ nm}$	5000.	.184	-.634E-01
	10000.	.129	-.492E-01
	20000.	.982E-01	-.433E-01
	30000.	.894E-01	-.483E-01
	40000.	.858E-01	-.512E-01
	50000.	.847E-01	-.546E-01
$6s^3P_0^o - 6p^3S_1$ $\lambda = 419.0 \text{ nm}$	5000.	.112	-.141E-01
	10000.	.849E-01	-.738E-02
	20000.	.737E-01	.268E-02
	30000.	.718E-01	.721E-02
	40000.	.714E-01	.748E-02
	50000.	.694E-01	.712E-02
$6s^3P_1^o - 6p^3D_1$ $\lambda = 699.7 \text{ nm}$	5000.	.198	-.557E-01
	10000.	.137	-.404E-01
	20000.	.970E-01	-.300E-01
	30000.	.820E-01	-.261E-01
	40000.	.753E-01	-.247E-01
	50000.	.720E-01	-.232E-01
$6s^3P_1^o - 6p^3D_2$ $\lambda = 600.5 \text{ nm}$	5000.	.196	-.724E-01
	10000.	.137	-.549E-01
	20000.	.996E-01	-.462E-01
	30000.	.868E-01	-.480E-01
	40000.	.810E-01	-.505E-01
	50000.	.782E-01	-.524E-01
$6s^3P_1^o - 6p^3P_0$ $\lambda = 589.6 \text{ nm}$	5000.	.157	-.488E-01
	10000.	.110	-.362E-01
	20000.	.797E-01	-.288E-01
	30000.	.693E-01	-.281E-01
	40000.	.647E-01	-.283E-01
	50000.	.624E-01	-.287E-01

Табела 5.9 наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$6s^3P_1^0 - 6p^3P_1$ $\lambda = 605.4 \text{ nm}$	5000.	.233	-.941E-01
	10000.	.163	-.715E-01
	20000.	.122	-.605E-01
	30000.	.110	-.640E-01
	40000.	.105	-.666E-01
	50000.	.103	-.700E-01
$6s^3P_1^0 - 6p^3P_2$ $\lambda = 450.7 \text{ nm}$	5000.	.163	-.599E-01
	10000.	.115	-.440E-01
	20000.	.862E-01	-.322E-01
	30000.	.753E-01	-.294E-01
	40000.	.708E-01	-.305E-01
	50000.	.682E-01	-.338E-01
$6s^3P_1^0 - 6p^3S_1$ $\lambda = 426.1 \text{ nm}$	5000.	.145	-.282E-01
	10000.	.108	-.175E-01
	20000.	.907E-01	-.472E-02
	30000.	.861E-01	.863E-04
	40000.	.845E-01	.138E-02
	50000.	.817E-01	.105E-02
$6s^3P_2^0 - 6p^3D_1$ $\lambda = 1169.4 \text{ nm}$	5000.	.625	-.342
	10000.	.433	-.251
	20000.	.308	-.193
	30000.	.266	-.176
	40000.	.249	-.172
	50000.	.242	-.167
$6s^3P_0^0 - 6p^3D_2$ $\lambda = 916.6 \text{ nm}$	5000.	.510	-.260
	10000.	.354	-.192
	20000.	.257	-.151
	30000.	.227	-.140
	40000.	.216	-.137
	50000.	.212	-.132
$6s^3P_2^0 - 6p^3D_3$ $\lambda = 613.1 \text{ nm}$	5000.	.294	-.982E-01
	10000.	.204	-.727E-01
	20000.	.146	-.565E-01
	30000.	.125	-.536E-01
	40000.	.116	-.526E-01
	50000.	.112	-.542E-01

Табела 5.9, наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]
$6s^3P_2^0 - 6p^3P_1$ $\lambda = 927.8 \text{ nm}$	5000.	.638	-.338
	10000.	.448	-.256
	20000.	.334	-.211
	30000.	.300	-.215
	40000.	.286	-.221
	50000.	.281	-.229
$6s^3P_2^0 - 6p^3P_2$ $\lambda = 608.1 \text{ nm}$	5000.	.337	-.159
	10000.	.238	-.118
	20000.	.177	-.881E-01
	30000.	.155	-.813E-01
	40000.	.146	-.833E-01
	50000.	.141	-.892E-01
$6s^3P_2^0 - 6p^3S_1$ $\lambda = 564.1 \text{ nm}$	5000.	.271	-.929E-01
	10000.	.202	-.631E-01
	20000.	.168	-.336E-01
	30000.	.160	-.224E-01
	40000.	.157	-.214E-01
	50000.	.153	-.219E-01
$6s^3P_2^0 - 6p^3S_1$ $\lambda = 564.1 \text{ nm}$	5000.	.271	-.929E-01
	10000.	.202	-.631E-01
	20000.	.168	-.336E-01
	30000.	.160	-.224E-01
	40000.	.157	-.214E-01
	50000.	.153	-.219E-01
$5p^2\ ^3P - 5p^3\ ^3D^0$ $\bar{\lambda} = 158.9 \text{ nm}$	5000.	.478E-02	.102E-02
	10000.	.323E-02	.828E-03
	20000.	.249E-02	.751E-03
	30000.	.190E-02	.764E-03
	40000.	.108E-02	.817E-03
	50000.	.961E-02	.897E-03
$6p^2\ ^3P - 6s^3P^0$ $\bar{\lambda} = 145.9 \text{ nm}$	5000.	.551E-02	.194E-02
	10000.	.414E-02	.143E-02
	20000.	.321E-02	.111E-02
	30000.	.285E-02	.100E-02
	40000.	.267E-02	.983E-03
	50000.	.258E-02	.986E-03

Табела 5.10 Штаркове (пуна) ширине и помераји спектралних линија једанпут јонизованог бизмута у функцији од електронске температуре. Електронска концентрација је $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$.

Prelaz	T (K)	w [nm]	d [nm]	Прелаз	w [nm]	d [nm]
$6p^2 \ ^3P_0 - 7s^3P_1^0$ $\lambda = 143.68 \text{ nm}$ $X = 0.71$	5000.	.386E-02	.101E-02	$6p^2 \ ^3P_1 - 7s^3P_0^0$ $\lambda = 179.18 \text{ nm}$ $X = 0.68$.546E-02	.426E-03
	10000.	.270E-02	.759E-03		.380E-02	.321E-03
	20000.	.189E-02	.577E-03		.266E-02	.258E-03
	30000.	.155E-02	.512E-03		.222E-02	.244E-03
	40000.	.136E-02	.491E-03		.198E-02	.246E-03
	50000.	.125E-02	.485E-03		.184E-02	.251E-03
$6p^2 \ ^3P_1 - 7s^3P_1^0$ $\lambda = 177.70 \text{ nm}$ $X = 0.71$	5000.	.600E-02	.156E-02	$6p^2 \ ^3P_1 - 7s^3P_2^0$ $\lambda = 132.55 \text{ nm}$ $X = 517.70$.790E-02	.164E-02
	10000.	.418E-02	.114E-02		.610E-02	.119E-02
	20000.	.292E-02	.870E-03		.470E-02	.904E-03
	30000.	.240E-02	.771E-03		.408E-02	.801E-03
	40000.	.210E-02	.740E-03		.374E-02	.767E-03
	50000.	.183E-02	.731E-03		.350E-02	.781E-03
$6p^2 \ ^3P_2 - 7s^3P_1^0$ $\lambda = 190.23 \text{ nm}$ $X = 0.71$	5000.	.686E-02	.178E-02	$6p^2 \ ^3P_2 - 7s^3P_2^0$ $\lambda = 139.39 \text{ nm}$ $X = 517.70$.874E-02	.181E-02
	10000.	.480E-02	.131E-02		.674E-02	.132E-02
	20000.	.334E-02	.993E-03		.520E-02	.997E-03
	30000.	.274E-02	.879E-03		.452E-02	.883E-03
	40000.	.242E-02	.845E-03		.139E-02	.540E-03
	50000.	.222E-02	.834E-03		.388E-02	.861E-03
$6p^2 \ ^3P_0 - 6d^3D_1^0$ $\lambda = 124.11 \text{ nm}$ $X = 2.79$	5000.	.236E-02	.627E-03	$6p^2 \ ^3P_1 - 6d^3D_2^0$ $\lambda = 152.06 \text{ nm}$ $X = 1.99$.342E-02	.885E-03
	10000.	.163E-02	.471E-03		.236E-02	.665E-03
	20000.	.113E-02	.377E-03		.164E-02	.531E-03
	30000.	.948E-03	.350E-03		.136E-02	.492E-03
	40000.	.868E-03	.343E-03		.124E-02	.484E-03
	50000.	.834E-03	.353E-03		.119E-02	.494E-03
$6p^2 \ ^3P_1 - 6d^3D_1^0$ $\lambda = 148.69 \text{ nm}$ $X = 2.79$	5000.	.344E-02	.886E-03	$6p^2 \ ^3P_2 - 6d^3D_2^0$ $\lambda = 161.14 \text{ nm}$ $X = 1.99$.384E-02	.989E-03
	10000.	.236E-02	.665E-03		.264E-02	.743E-03
	20000.	.165E-02	.532E-03		.183E-02	.593E-03
	30000.	.138E-02	.494E-03		.153E-02	.549E-03
	40000.	.126E-02	.484E-03		.134E-02	.552E-03
	50000.	.121E-02	.498E-03		.414E-02	.847E-03

Табела 5.10, наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]	Прелаз	w [nm]	d [nm]
$6p^2 \ ^3P_2 - 6d^3D_1^0$ $\lambda = 157.37 \text{ nm}$ $X = 2.79$	5000.	.384E-02	.987E-03	$6p^2 \ ^3P_1 - 6d^3F_2^0$ $\lambda = 145.51 \text{ nm}$ $X = 4.63$.394E-02	.832E-03
	10000.	.266E-02	.742E-03		.272E-02	.623E-03
	20000.	.184E-02	.593E-03		.190E-02	.493E-03
	30000.	.154E-02	.551E-03		.157E-02	.451E-03
	40000.	.141E-02	.540E-03		.142E-02	.437E-03
	50000.	.135E-02	.556E-03		.134E-02	.441E-03
$6p^2 \ ^3P_2 - 6d^3F_2^0$ $\lambda = 153.81 \text{ nm}$ $X = 4.63$	5000.	.438E-02	.924E-03	$6p^2 \ ^3P_2 - 6d^3F_3^0$ $\lambda = 153.32 \text{ nm}$ $X = 1.58$.394E-02	.926E-03
	10000.	.304E-02	.692E-03		.272E-02	.697E-03
	20000.	.212E-02	.548E-03		.190E-02	.559E-03
	30000.	.176E-02	.502E-03		.159E-02	.519E-03
	40000.	.159E-02	.486E-03		.145E-02	.508E-03
	50000.	.150E-02	.490E-03		.139E-02	.522E-03
$6p^2 \ ^3P_2 - 7s^1P_1^0$ $\lambda = 137.26 \text{ nm}$ $X = 9.46$	5000.	.756E-02	-.214E-02	$6p^2 \ ^1D_2 - 7s^3P_1^0$ $\lambda = 280.41 \text{ nm}$ $X = 0.71$.154E-01	.366E-02
	10000.	.680E-02	-.191E-02		.107E-01	.268E-02
	20000.	.610E-02	-.155E-02		.750E-02	.204E-02
	30000.	.584E-02	-.131E-02		.614E-02	.181E-02
	40000.	.536E-02	-.112E-02		.540E-02	.174E-02
	50000.	.492E-02	-.939E-03		.496E-02	.172E-02
$6p^2 \ ^1D_2 - 6d^3D_2^0$ $\lambda = 221.47 \text{ nm}$ $X = 1.99$	5000.	.756E-02	.174E-02	$6p^2 \ ^1D_2 - 6d^3D_1^0$ $\lambda = 214.41 \text{ nm}$ $X = 2.79$.742E-02	.171E-02
	10000.	.520E-02	.131E-02		.512E-02	.129E-02
	20000.	.362E-02	.105E-02		.356E-02	.103E-02
	30000.	.300E-02	.972E-03		.298E-02	.960E-03
	40000.	.274E-02	.958E-03		.273E-02	.944E-03
	50000.	.262E-02	.982E-03		.260E-02	.975E-03
$6p^2 \ ^1D_2 - 6d^3D_3^0$ $\lambda = 144.79 \text{ nm}$ $X = 4.98$	5000.	.784E-02	.207E-02	$6p^2 \ ^1D_2 - 6d^3F_3$ $\lambda = 206.96 \text{ nm}$ $X = 1.58$.744E-02	.157E-02
	10000.	.632E-02	.168E-02		.514E-02	.118E-02
	20000.	.590E-02	.159E-02		.358E-02	.953E-03
	30000.	.580E-02	.187E-02		.300E-02	.887E-03
	40000.	.568E-02	.186E-02		.274E-02	.871E-03
	50000.	.566E-02	.194E-02		.262E-02	.899E-03

Табела 5.10, наставак

Прелаз	T (K)	w [nm]	d [nm]	Прелаз	w [nm]	d [nm]
6p ² ¹ D ₂ – 7s ³ P ₂ ⁰ λ = 182.37 nm X = 517.70	5000.	.151E-01	.300E-02	6p ² ¹ D ₂ – 7s ¹ P ₁ ⁰ λ = 178.74 nm X = 9.46	.130E-01	-.371E-02
	10000.	.116E-01	.219E-02		.116E-01	-.330E-02
	20000.	.900E-02	.166E-02		.104E-01	-.267E-02
	30000.	.780E-02	.147E-02		.996E-02	-.227E-02
	40000.	.714E-02	.141E-02		.916E-02	-.194E-02
50000.	.670E-02	.143E-02	.840E-02	-.163E-02		
6p ² ¹ S ₀ – 7s ¹ P ₁ ⁰ λ = 218.77 nm X = 9.46	5000.	.198E-01	-.628E-02	6p ² ¹ S ₀ – 8s ³ P ₁ ⁰ λ = 174.92 nm X = 2.62	.220E-01	.583E-02
	10000.	.177E-01	-.547E-02		.158E-01	.457E-02
	20000.	.157E-01	-.439E-02		.124E-01	.422E-02
	30000.	.150E-01	-.372E-02		.114E-01	.415E-02
	40000.	.133E-01	-.320E-02		.110E-01	.374E-02
50000.	.127E-01	-.271E-02	.107E-02	.336E-02		
7s ³ P ₁ ⁰ – 7p ³ D ₂ λ = 520.9 nm X = 517.67	5000.	.177	-.194E-01	7s ³ P ₁ ⁰ – 7p ³ P ₀ λ = 571.9 nm X = 0.71	.174	-.266E-01
	10000.	.132	-.136E-01		.121	-.189E-01
	20000.	.998E-01	-.955E-02		.862E-01	-.135E-01
	30000.	.860E-01	-.772E-02		.740E-01	-.112E-01
	40000.	.786E-01	-.646E-02		.688E-01	-.928E-02
50000.	.740E-01	-.521E-02	.664E-01	-.853E-02		

* У табели $X = \frac{3kT}{2|\Delta E|}$ је дат за T=10000 K

Слагање рачунатих вредности са експерименталним за ова три елемента дато је у табели 5.11. Ако узмемо средње вредности добићемо да је однос експерименталних Штаркових полуширина и рачунатих вредности помоћу MSE за Sb II једнак 1.73, а код јонизованог бизмута је 1.46. Средња вредност односа мерене и рачунате Штаркове полуширине за свих седам испитиваних јона износи 1.4. Из овога се види да је у већини случајева рачуната Штаркова ширина мања од мерене. То се може објаснити јаким утицајем ближих пертурбационих нивоа, који су због недовољног познавања спектра (из литературе) узети као даљи, а с друге стране често се дешава да енергија јонизације одређене серије није добро позната, што у одређеним случајевима може знатно утицати на крајњи резултат (Dimitrijević & Popović 1993a).

Табела 5.11. Односи експерименталних и мерених вредности Штаркових полуширина и помераја при електронској концентрацији $N = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Упоређивање је са проценом датом од стране а – Djeniže *et al.* (1993a), и експерименталним подацима: b – Purić *et al.* (1985), c – Miller & Bengston (1980).

Prelaz	λ nm	T [10^3 K]	$w_{\text{exp}}/w_{\text{MSE}}$	$d_{\text{exp}}/d_{\text{MSE}}$	Ref.
<i>AsII</i> $5s^1P_1^0 - 5p^1P_1$	799.0	20	1.25	-	a
<i>SbII</i> $6s^3P_1^0 - 6p^3D_2$	600.5	16	1.62	0.96	b
		20	1.48	0.65	b
$6s^3P_2^0 - 6p^3D_3$	613.0	20	2.61	-	a
<i>BiII</i> $7s^3P_1^0 - 7p^3P_0$	571.9	11	1.26	-	c
		16	2.24	7.30	b
		20	1.13	5.68	b
<i>BiII</i> $7s^3P_1^0 - 7p^3D_2$	520.9	16	1.02	6.31	b
		20	1.63	4.82	b

Табела 5.12 Коefицијенти мешања конфигурација код *AsII*.

Konfig.	nivo	$K_1 L_1$	$K_2 L_2$
np ²	¹ D ₂	0.975 ¹ D ₂	0.025 ³ P ₂
	³ P ₂	0.975 ³ P ₂	0.025 ¹ D ₂
	³ P ₀	0.988 ³ P ₀	0.012 ¹ S ₀
	¹ S ₀	0.988 ¹ S ₀	0.012 ³ P ₀
npms	³ P ₁ ⁰	0.856 ³ P ₁ ⁰	0.144 ¹ P ₁ ⁰
	¹ P ₁ ⁰	0.856 ¹ P ₁ ⁰	0.144 ³ P ₁ ⁰

ЗАКЉУЧАК

У раду је извршена анализа могућности модификованог семиемпиријског прилаза за рачунање Штарковог ширења за спектралне линије јона тешких елемената. Анализиран је значај Штарковог доприноса у укупној полуширини спектралних линија тешких јона у условима где се оне формирају у атмосферама топлих звезда.

У вези доприноса судара наелектрисаних честица ширењу линија у спектрима топлих звезда може се закључити:

- Допринос Штарковог ширења укупној полуширини спектралне линије из СТЗ код тешких јонизованих емитера може бити већи од Доплеровог. То је израженије када посматрамо прелазе са већом енергијом ексцитације. Зато се Штарков ефекат код анализе спектралних линија тешких елемената у СТЗ мора неизоставно разматрати.

Испитиван је утицај комплексности структуре емитера (разни типови веза) на резултате MSE прорачуна Штаркових полуширина и помераја. Из резултата овог истраживања следује закључак:

- Утицај комплексности енергијског спектра емитера на тачност MSE прорачуна је много већа у случају Штарковог помераја него код полуширине. То се може објаснити тиме што се код Штаркове полуширне утицај пертурбујућих нивоа узима збирно, док се за Штаркове помераје узима разлика доприноса.

Код Штаркових полуширина разматран је Гаунт фактор у близини прага за нееластичне сударе. Из тог разматрања се може закључити:

- За случај тешких јонизованих емитера исправно је узети модификовани семиемпиријски Гаунт фактор предложен у раду Dimitrijević & Konjević (1980).
- Упрошћени MSE прорачун се може применити када је $3kT/2\Delta E < 2$ и код тешких емитера. На самој граници $3kT/2\Delta E \approx 2$ долази до већег одступања предложеног и експерименталног Гаунт фактора.

Нажалост, због недовољног броја експерименталних вредности Штарковог помераја код тешких јона, овакво испитивање није извршено за Штарков померај.

Испитивање могућности MSE приступа изведено је за случај седам тешких елемената (датих у табели 5.1). Израчунате су Штаркове ширине и помераји за укупно 99 прелаза (у мултиплету, односно у линији). Добијени резултати су упоређени са експерименталним вредностима код 31 спектралне линије наведених елемената. Из тога следује:

- С обзиром на комплексност спектра тешких емитера, рачунате вредности (MSE приступ) се добро слажу са експерименталним вредностима Штаркових полуширина.
- Код Штарковог помераја, за јоне тешких елемената, однос мерених и рачунатих вредности, од случаја до случаја, варира (нпр. види Табелу 5.11, за *SbII* и *BiII*).

На основу истраживања (видети поглавља 4 и 5) може се генерално извести закључак да MSE приступ за израчунавање Штаркових полуширина код спектралних линија тешких јона задовољава, са својом поузданошћу, астрофизичке потребе. С друге стране прорачуне за померај морамо узети са резервом. Наравно треба нагласити да је и поуздност експерименталних резултата помераја мања.*

Резултати добијени у овом раду могу се применити при урачунавању Штарковог ефекта на облик и ширину спектралних линије тешких елеменат из СТЗ.

За 99 прелаза код укупно седам тешких једанпут јонизованих емитера дати су прорачуни Штаркове полуширине и помераја.

Дата су упутства за рачунање Штарковог ширења за случај тешких јона, која се могу користити при прорачуну других линија у случају наведених или других тешких јонизованих емитера. У поглављу 3. је дата једна проста метода за процену мешања конфигурација код најнижих мултиплета, која може послужити за рачунање Ланде фактора и јачина осцилатора (односно вероватноћа прелаза). У истом поглављу дата су упутства и формуле за рачунање фактора линије и мултиплета, а за прелазе $f - g$ и $g - h$ израчунати су фактори мултиплета (табеле 3.2 и 3.3).

У будућем раду на овој проблематици требало би испитати Гаунт фактор код Штарковог помераја на граници за нееластичне сударе, као и могућности извесног побољшања прорачуна Штарковог помераја помоћу MSE.

* Још увек се трага за експерименталним методама које би биле поузданије за одређивање Штарковог помераја, или побољшање већ постојећих. Такав један покушај побољшања методе изложене у раду Purić & Konjević (1971), изведен у раду Popović *et al.* (1992).

Л И Т Е Р А Т У Р А

- Adelman S. J. & Lanz T., 1987, *Elemental Abundance Analyses*, Inst. d'Astronomie de l'universite de Lausanne, Lausanne.
- Allard N. & Kielkopf J., 1982, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 1103.
- Al - Saqabi B. N. I. & Peach G., 1987, *J. Phys.* **B20**, 1175.
- Anders E. & Grevesse N., 1989, *Geochimica et Cosmochimica* **53**, 197. (види такође у Lang 1991).
- Back C. G., White M. D., Pejcev V. & Ross K. J., 1981, *J. Phys.* **B14**, 1497.
- Baranger M., 1958a, *Phys. Rev.*, **111**, 481.
- Baranger M., 1958b, *Phys. Rev.*, **111**, 494.
- Baranger M., 1958c, *Phys. Rev.*, **112**, 855.
- Bates R. D. & Daamgard A., 1949, *Phyl. Trans. Roy. Soc., Ser. A* **242**, 101.
- Baumann S. R. & Smith W. H., 1970, *J. Opt. Soc. America* **60**, 345.
- Bely O & Petrini D., 1970, *A&A* **6**, 318.
- Benett S. M. & Griem H. R., 1971, *Calculated Stark Broadening Parameters for Isolated Spectral Lines from the Atoms Helium through Calcium and Cesium*, Techn. Rep. No 71-097, Univ. Merland.
- Bengtson R. D. & Miller M. H., 1976, *Phys. Rev.* **A14**, 1915.
- Bethe H. A., 1930, *Ann. Physik* **5**, 325.
- Boesgaard A. M., 1976, *ApJ* **210**, 466.
- Боярчук А. А., 1957, *Иза. Крым. Астроф. Обс.*, **XVII**, 89.
- Boyer R., Sotirovski P. & Harvey J. W., 1975, *A&A S*, **19**, 359.
- Bowier S. & Malina R. F., 1990, *Proc. Int. Symp. 'Evolution in Astrophysics'*, France ESA SP-310, 189.
- Breene R., 1961, *The Shift & Shape of Spectral Lines*, Oxford, Pergamon Press.
- Cameron A. G. W., 1982, *Essays in nuclear astrophysics*, (eds. C. A. Barnes, D. D. Clayton & D. N. Schramm), New York, Cambridge University Press.
- Damburg B. & Geetman S., 1968, *Phys. Rev. Lett.* **A20**, 485.
- Danezis E., Theodossiou E. & Laskarides P. G., 1991, *Astrophys. & Space Sci.*, **179**, 111.
- Danezis E. & Theodossiou E., 1990, *Astrophys. & Space Sci.*, **174**, 49.
- Dimitrijević M. S.: 1989, *Bull. Obs. Astron. Belgrade* **140**, 111.
- Dimitrijević M. S., 1993, *A&AS* **100**, 237.

- Dimitrijević M. S. & Konjević N., 1978, *JQSRT* **20**, 223.
- Dimitrijević M. S. & Konjević N., 1980, *JQSRT* **24**, 451.
- Dimitrijević M. S. & Konjević N., 1983, *JQSRT* **30**, 45.
- Dimitrijević M. S. & Konjević N., 1986, *A&A* **165**, 269.
- Dimitrijević M. S. & Kršljanin V., 1986, *A&A* **165**, 269.
- Dimitrijević M. S. & Konjević N., 1987, *A&A* **173**, 345.
- Dimitrijević M. S., 1988, *A&AS* **76**, 53.
- Dimitrijević M. S. & Popović L. Č., 1993a, *IAU Coloq. 138*, Trieste. ASP Conference Series **44**, 165, (eds. M. M. Dworetzky, F. Castelli & R. Faraggiana).
- Dimitrijević M. S. & Popović L. Č., 1993b, *A&AS* in pres.
- Dimitrijević M. S. & Sahal-Bréshot S., 1990, *A&AS* **82**, 519.
- Ђениже С., 1993, Приватно саопштење.
- Ђениже С., Labat M. J., Purić J., 1993a, *Proc. XXI ICPIG*, Bochum, 227.
- Ђениже С., Popović L. Č., Labat J., Srećković A. & Platiša M., 1993b, *Contrib. Plasma Phys.* **33**, 193.
- Ђениже С., Srećković A., Platiš M., Labat J., Konjević R. & Purić J., 1990, *JQSRT* **44**, 405.
- Ђениже С., Srećković A., Labat J., Konjević R. & Brnović M., 1992a, *Z. Phys.* **D24**, 1.
- Ђениже С., Srećković A., Labat J. & Platiša M., 1992b, *Phys. Scr.* **45**, 320.
- Ђениже С., Srećković A., Labat J., Konjević R. i Popović L., 1991a, *Phys. Rev. A* **44**, 410.
- Ђениже, С., Srećković, А., Labat, J. & Nikolić, B., 1991b, *Proceedings of the XX ICPIG*, Pisa, p. 1410.
- Finn G. & Mugglestone 1965, *MNRAS*, **129**, 221.
- Fischer C. F., 1977, *J. Phys* **B10**, 1241.
- Foley H., 1946, *Phys. Rev.* **69**, 616.
- Fonck R. J. & Tracy D. H., 1980, *J. Phys.* **B13**, L101.
- Foster J. S. & Douglas A. V., 1939, *MNRAS* **99**, 150.
- Freudenstein S. A. & Cooper J., 1987, *ApJ* **224**, 1079.
- Fuhrmann K., 1989, *A&AS*, **80**, 399.
- Goldberg L., 1935, *ApJ* **82**, 1.
- Greenstein J. L. & Sargent A. I., 1974, *ApJ* **SS 28**, 157.
- Green J. B. & Barows W. M., 1935, *Phys. Rev.* **47**, 133.
- Грей Ф. Г., 1980, *Наблюдения и анализ звездных фотосфер*, Мир, Москва.
- Griem H. R., 1962, *Phys. Rev.* **128**, 515.
- Griem R. H., 1964, *Plasma Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York.
- Griem R. H., 1968, *Phys. Rev.*, **165**, 258.

- Griem H. R., 1974, *Spectral Line Broadening by Plasmas*, Academic Press, New York.
- Griem R. H., Baranger M., Kolb C. A., Oertel G., 1962, *Phys. Rev.*, **125**, 177.
- Груздев П. Ф., 1968, *Опт. Спект.* **25**, 3.
- Груздев П. Ф., 1969, *Опт. Спект.* **27**, 877.
- Груздев П. Ф. и Старцев Г. П., 1959, *Опт. Спект.* **8**, 879.
- Гурздян Г. А., 1984, *Звезданные хромосферы*, Наука, Москва.
- Hartoog M. R. & Cowley C. R., 1979, *ApJ* **228**, 229.
- Heap S. R., Boggess A., Holm A., Klinglesmith D. A., Sparks W. West D., Wu C. C., Boksenberg A., Willis A., Wilson R., Macchetto F., Selvelli P. L., Stickland D., Greenstein J. L., Hutchings J. B., Underhill A. B., Viotti R. & Whelan J. A. J., 1978, *Nature* **275**, 385.
- Henrichs H., 1988, *O Stars and Wol-Rayet Stars*, Monograph series on nonthermal phenomena in stellar atmospheres, (eds P. S. Count & A. B. Underhill), NASA, Washington, D. C.
- Hey J. D., 1976a, *JQSRT* **16**, 575.
- Hey J. D., 1976b, *JQSRT* **17**, 729.
- Hoang Binh D., Prud'homme & Van Regemorter H., 1979, *ApJ* **230**, L127.
- Iglesias C. A., Rogers F. J. & Wilson B. G., 1990, *ApJ* **360**, 221.
- Jacobs J. M. & Dworetzky M. M., 1981, in *Proc. 23d Liège Ap. Colloquium*, Upper Main Sequence CP Stars, Liège, p. 153.
- Jacobs J. M. & Dworetzky M. M., 1982, *Nature*, **299**, 535.
- Юцис А. П. и Бандзайтис А. А., 1965, *Теория момента количества движения в квантовой механике*, Вильнюс.
- Юцис А. П., Левинсон И. Б. и Вангас В. В., 1960, *Математический аппарат теории момента количества движения*, Вильнюс.
- Ключкова В. Г. и Копылов И. М., 1986, *Астрон. журн.* **63**, 240.
- Kolb A. C., Griem H. R., 1958, *Phys. Rev.*, **111**, 514.
- Кобзев А. Г., 1971, *Опт. Спектроск.* **30**, 106.
- Копылов, И. М., 1956, *Изв. Крым. Астроф. Обс.*, **XVI**, 129.
- Кршљанин В. М., 1989, *Штарков помак јонских линија код топлих звезда*, *Publ. Obs. Astron. Belgrade* **37**, 1–114
- Kršljanin V. & Dimitrijević M. S., 1993, *Publ. Obs. Astron. Belgrade* **44**, 45.
- Kröning R. de L., 1925, *Z. Phys.* **33**, 261.
- Kunisz M. D., Migdalek J. & Rutkowski J., 1975, *Acta Phys. Pol.* **A47**, 227.
- Kurucz R. L., 1979, *ApJ SS* **40**, pp. 1- 340.
- Kush H. J., 1958, *Z. Astrophys.* **45**, 1.
- Kusch, H. J. & Oberschelp, E., 1967a, *Z. Astrophys.* **67**, 77.
- Kusch, H. J. & Oberschelp, E., 1967b, *Z. Astrophys.* **67**, 85.

- Kusch H. & Schwiecker H., 1976, *A&A* **53**, 59.
- Кузнецова Т. Н., 1961, *Изв. гл. астр. обс. Пулково* **167**, 139.
- Labat O., Djeniže S., Labat J., Purić J. & Srećković A., 1990, *Phys. Lett.*, **143**, 9.
- Labat O., Djeniže S., Purić J., Labat J. M. & Srećković A., 1991, *J. Phys.*, **B24**, 1251.
- Lakićević, S. I., 1983, *A&A*, **127**, 37.
- Ландау Л. Д. и Лифшиц Е. М., 1989, *Теоретическая физика*, Квантовая механика, Том III, Наука, Москва.
- Lang K. R., 1991, *Astrophysical data: Planets and Stars*, Springer-Verlag, New York - Berlin - Heidelberg - London - Paris - Tokyo - Hong Kong - Barcelona - Budapest.
- Laskarides P. G., Theodosiou & Danezis E., 1991, *Astrophys. Space Sci.* **179**, 13.
- Lennon D. J., Lynas-Bray A. E., Brown P. J. F., Dufton P. L., 1981, *MNRAS*, **222**, 719.
- Li H. & Andrew K. L., 1971, *J. Opt. Soc. Am.* **61**, 96.
- Li H. & Andrew K. L., 1972a, *J. Opt. Soc. Am.* **62**, 255.
- Li H. & Andrew K. L., 1972b, *J. Opt. Soc. Am.* **62**, 1476.
- Liebert J., 1980, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **18**, 363.
- Lindholm E., 1941, *Arkiv f. Math. Astron. och Fysik* **28B** (No. 3)
- Lindholm E., 1945, *Arkiv f. Math. Astron. och Fysik* **32A** (No. 17)
- Luke Y. L., 1975, *Mathematical function and their approximation*, Academic Press, New York-San Francisco-London.
- Мартынов Д. Я., 1971, *Курс общей астрофизики*, Наука, Москва.
- Menzel D. H., 1947, *ApJ* **105**, 126.
- Menzel D. H. & Goldberg L., 1936, *ApJ* **84**, 1.
- Михалас Д., 1982 *Звездные атмосферы*, Мир, Москва.
- Miller M. H. & Bengston R. D., 1980, *JQSRT* **23**, 411.
- Miller M. H., Bengston R. D. & Roig R. A., 1977, *Phys. Rev.* **A15**, 675.
- Moore, C., E., 1952, *An Ultraviolet Multiplet table*, Section 2, US Department of Commerce, Washington D.C.
- Moore, C., E., 1962, *An Ultraviolet Multiplet table*, Section 3, US Department of Commerce, Washington D.C.
- Moore S. E., 1971a, *Atomic Energy Levels*, Vol. I, NSRDS-NBS 35, U.S. Government Printing Office, Washington, D. C.
- Moore S. E., 1971b, *Atomic Energy Levels*, Vol. II, NSRDS-NBS 35, U.S. Government Printing Office, Washington, D. C.
- Moore S. E., 1971c, *Atomic Energy Levels*, Vol. III, NSRDS-NBS 35, U.S. Government Printing Office, Washington, D. C.

- Moore S. E., Minnaert M. G. J. & Houtgast J., 1966, *The Solar Spectrum 2935 Å to 8770 Å*, National Bureau of Standards Monograph 61. U. S., Washington, D. C.
- Murakava K., 1966, *Phys. Rev.* **146**, 135.
- Oertel, G. K. & Shomo, L. P., 1968, *ApJ SS* **16**, 175.
- Osmer P. S. & Peterson D. M., 1974, *ApJ* **187**, 117.
- Ошерович А. Ј. и Тезиков В. В., 1978, *Опт. Спектр.* **44**, 711.
- Peutremann E., 1972, *A&A* **17**, 76.
- Поповић Ј. Ч., 1991, *Штарково ширење и померај спектралних линија Zn II*, Магистарски рад, Физички факултет. Београд.
- Popović L. Č., Srećković A. & Djeniže S., 1992, *Proceeding of the 11th ICSLS A25*, Carry Le Rouet, France.
- Popović L. Č., Dimitrijević M. S. & Vince I., 1993a, *Publ. Obs. Astron. Belgrade* **44**, 55.
- Popović L. Č., Dimitrijević M. S. & Vince I., 1993b, *Proceeding of 25th Meeting and Workshop of the European Working Group on CP Stars*, Szombathely, Hungary. (in press)
- Popović L. Č., Vince I. & Dimitrijević M. S., 1993c, *A&A S* **102**, 17 – 23.
- Popović L. Č. & Vince I., 1993, *AGN across the Electromagnetic Spectrum*, IAU Symposium No 159, Abstracts p.55, Geneva.
- Popović L. Č., Vince I. & Kubičela A., 1994, *Proc. IAU Symposium 159*, in press.
- Purić J., Čuk M. & Lakićević I. S., 1985, *Phys. Rev.* **A32**, 1106.
- Purić J. & Konjević N., 1972, *Z. Phys.* **249**, 440.
- Racah G., 1942, *Phys. Rev.* **62**, 438.
- Reichel A., 1968, *JQSRT*, **8**, 1601.
- Rohrlich F., 1948, *Phys. Rev.* **74**, 1372.
- Rohrlich F., 1959, *ApJ* **129**, 441.
- Russell H. N., 1925, *Nature* **115**, 735.
- Sadakane K., Jugaky J. & Takada-Hidai M., 1988, *ApJ* **325**, 776.
- Sadakane K., 1991, *Publ. Astron. Soc. Pac.* **103**, 355.
- Sahal – Brechot S., Segre E. R. A., 1971, *A&A* **13**, 161.
- Shaw D. A., King G. C. & Adams A., 1978, *J. Phys.* **B11**, 239.
- Seaton M. J.: 1962a, *Atomic and Molecular Processes*, Academic Press Inc., New York, Chap. 11.
- Seaton J. M., 1962b, *Phys. Soc.*, **79**, 1105.
- Seaton J. M., 1987, *J. Phys.* **B 20**, 6431.
- Shore B. W. & Menzel D. H., 1965, *ApJ* **12**, 187.
- Shortly G. W., 1935, *Phys. Rev.* **47**, 295.
- Smith M. A., 1973, *ApJ S* **25**, 277.

- Smith M. A., 1974, *ApJ* **189**, 101.
- Sobelman I. I., 1979, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York - London - Paris - Tokyo - Hong Kong - Barcelona - Budapest.
- Stehlé C., 1990, *AIP Conf. Proc.* No 216, p. 607.
- Takada-Hidai M, Sadakane K. & Jugaky J., 1986, *ApJ* **304**, 425.
- Underhill A. B., 1966, *The early type stars*, D. Reidel publishing company Dordrecht-Holland.
- Underhill A., 1982, *B Stars with and without Emission Lines*, Monograph series on nonthermal phenomena in stellar atmospheres, NASA, Washington, D. C.
- Van Regemorter H., 1962, *ApJ* **136**, 906.
- Van Regemorter H., Hoang Binh D. & Prud'homme M., 1979, *J. Phys.* **B12**, 1053.
- Vauclair S. & Vauclair G., 1982, *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **20**, 37.
- Винце И. И., 1986, *Утицај сударних процеса на лимб-ефекат*, ПМФ, Београд (докторска дисертација).
- Vince I., Dimitrijević M. S., Kršljanin V.: 1985, in *Progress in Stellar Spectral Line Formation Theory*, eds. J. Beckman, L. Crivellari, and D. Reidel, Dordrecht, Boston, Lancaster, 373.
- Warner B. & Kirkpatrick R. C., 1969, *MNRAS* **142**, 265.
- Weisskopf V., 1932, *Z. für Phys.*, **75**, 287.
- Wiese W. L., Smith M. W. & Glennon B. M., 1966, *Atomic Transition Probabilities*, Vol. I, U.S. Government Printing Office, Washington, D. C.
- Wiese W. L., Smith M. W. & Glennon B. M., 1969, *Atomic Transition Probabilities*, Vol. II, U.S. Government Printing Office, Washington, D. C.
- Wiese W. L. & Martin G. A., 1980, *Wavelength and Transition Probabilities for Atoms and Atomic Ions, Part II*, U.S. Department of commerce, Washington, D. C.
- Wolff S. C. & Preston G. W., 1978, *ApJ* **S 37**, 371.
- Wolff S. C., 1983, *The A-Stars: Problems and perspectives*, Monograph series on nonthermal phenomena in stellar atmospheres, NASA, Washington D. C.
- Wolff S. C. & Wolff R. J., 1976, *Physics of Ap Stars*, IAU Colloq. No 32, ed. W. W. Weiss, H. Jenker, H. J. Wood, Vienna.
- Зач Л. А., Клучкова В. Г. и Панчук В. Е., 1991, *Астрофиз. исслед.* **33**, 29.
- Шпольский Е. В.: 1984, *Атомная физика I и II*, Наука, Москва

ОПИС ПРОГРАМА – LFMSE

За рачунање Штаркових полуширина и помераје у MSE апроксимацији направљен је програм под називом LFMSE. Програм користи укупно три улазне датотеке: MPNIVOI, MPNIVOF и PPODACI. У датотеку MPNIVOI се уносе подаци за нивое који пертурбују горњи ниво у прелазу, а у датотеку MPNIVOF подаци оних нивоа који пертурбују доњи ниво у прелазу. Обадве датотеке су организоване као што је показано на примеру *AsII*, прелаз $5s^1P^0 - 5p^1P^*$

*Садржај датотеке MPNIVOI за AsII, *прелаз $5s^1P^0 - 5p^1P$: први податак је број пертурбационих нивоа, затим у I колони је главни квантни број n, II колона орбитални квантни број l, III колона је енергија ексцитације E_i , IV колона фактор мултиплета $\mathfrak{R}_{mult.}$, V колона фактор линије \mathfrak{R}_{line} , VI колона коефицијент родитељског терма (ако имамо мешање нивоа онда се множи коефицијент мешања за тај ниво са коефицијентом родитељског терма), VII колона се означава са; 0 – ако не користимо јачине осцилатора и 1 – ако користимо јачине осцилатора, у VIII колону се уносе јачине осцилатора, ако их нема онда овде уносимо нулту вредност. И на крају је назначен елемент и ниво у прелазу који је пертурбован од датих нивоа.*

```

7
4,0,82818,1,1,1,0,0
4,0,83099,1,1,3,0,0
4,2,101486,.25,1,1,0,0
4,2,102486,.75,1,1,0,0
6,0,117745.35,.25,1,1,0,0
5,2,123788.5,.75,1,1,0,0
5,2,126608.2,.25,1,1,0,0
(As II, sing P1, E=95330.583 cm)

```

Организација датотеке MPNIVOF. Подаци су исти као и код датотеке MPNIVOI само за доњи ниво у прелазу.

```

3
5,1,95327,1,1,1,0,0
5,1,102388,1.6667,1,1,0,0
5,1,105786,.33331,1,1,0,0
(As II, 5s sing. P1, E=82819.214 cm)

```

* Рачунате вредности Штарковог ширинења за овај прелаз се не налазе у табели (5.8) у којој су дати прорачуни Штаркових полуширина и помераја за *AsII*.

Организација датотеке PPODACI, редом су дате: енергија јонизације горњег нивоа, енергија јонизације доњег нивоа, $z + 1$ (где је z наелектрисање емитера), почетна температура у рачуну, температурски интервал после кога се добија други податак, крајња температура, главни квантни број горњег нивоа у прелазу, l_i, L_i, J_i, E_i у cm^{-1} , n_f, l_f, L_f, J_f и E_f у cm^{-1} (величине са индексима i одговарају горњем, а са f доњем нивоу у прелазу).

```

149932
149932
2
5000
5000
55000
5
1
1
1
1
95330.583
5
0
1
1
82819.214

```

Резултати прорачуна се налазе у две датотеке (MODSEM, ZATEX). У датотеци ZATEX се "пакују" вредности Штаркових полуширина и помераја заједно са командама у ТрХ—у тако да је после једноставно оформити табеле у ТрХ—у.

Друга излазна датотека користи као провера улазних података и добијених вредности. Подаци у датотеци MODSEM изгледају овако (за $AsII$, прелаз $5s^1 P^0 - 5p^1 P$):

```

Starkove (pune) polusirine i pomeraji As II za prelaz
5s (sing.)P - 5p(sing)P

```

```

jon.energ (1,2)=.1499E+06.1499E+06

```

```

ni, li, Li, Ei
5 1 1 .9533E+05

```

```

nf, lf, Lf, Ef 5 0 1 .8282E+05

```

```

Emiter As Transition 5s P -- 5 p
talasna duzina= 7992.729

```

```

gl. ef. brojevi ni(ef)=2.825 nf(ef)=2.548

```

```

Bejts Damgardovi faktori (fi), pert. faktori za gornji nivo
n= 5 l=0fi= .863 fi*fi= .745 xy= 2.8246 -.2769

```

```

n= 4l= 0fi= .860 fi*fi= .740 xy= 2.8246 -.2715
n= 4l= 2fi= .955 fi*fi= .911 xy= 2.9987 -.1741
n= 4l= 2fi= .862 fi*fi= .744 xy= 3.0302 -.2055
n= 6l= 0fi= .481 fi*fi= .232 xy= 2.8246 .8543
n= 5l= 2fi=-.212E-01fi*fi= .450E-03xy= 4.0821 -1.2575
n= 5l= 2fi=-.821E-01fi*fi= .675E-02xy= 4.3218 -1.4972

```

```

Bejts Damgardovi faktori (pert. nivoi za donji nivo)
n= 5l= 1nj(ef)=2.825 fi= .863 fi*fi= .745 2.82 -.277
n= 5l= 1nj(ef)=3.027 fi= .702 fi*fi= .493 3.03 -.479
n= 5l= 1nj(ef)=3.141 fi= .617 fi*fi= .381 3.14 -.594

```

Rezultati racuna

```

T(1000K) w1(nm) w2(nm) w3(nm) w4(nm) w5(nm) d(nm)
5.0000 .20456 .25552 .25511 .29694 .24793 -.10168230
10.000 .14165 .17924 .18080 .59388E-01 .49585E-01 -.07481261
15.000 .11496 .14882 .15113 .11878E-01 .99170E-02 -.06322913
20.000 .10031 .13310 .13583 .23755E-02 .19834E-02 -.05647936
25.000 .91465E-01 .12411 .12711 .47510E-03 .39668E-03 -.05235853
30.000 .85944E-01 .11874 .12194 .95021E-04 .79336E-04 -.05105613
35.000 .82253E-01 .11531 .11866 .19004E-04 .15867E-04 -.05072788
40.000 .79931E-01 .11327 .11675 .38008E-05 .31734E-05 -.05118925
45.000 .78434E-01 .11193 .11552 .76017E-06 .63469E-06 -.05152019
50.000 .77427E-01 .11105 .11474 .15203E-06 .12694E-06 -.05166656
55.000 .76816E-01 .11054 .11431 .30407E-07 .25388E-07 -.05181068

```

kriticna temp.= 5945 K

У горњој табели су коришћене следеће ознаке:

- w_1 – прорачун са MSE (Dimitrijević & Konjević 1980)
- w_2 – MSE са узетим пертурбационим нивоима који немају исти глани квантни број али су ближи од оних са $n = n'$ (види поглавље 4.2, стр. 88).
- w_3 – w_2 + јонско ширење (види поглавље 4.2, стр. 89)
- w_4 – упрошћена MSE формула (Dimitrijević & Konjević 1987)
- w_5 – упрошћена семиемпријска формула (SE, Griem 1968)
- d – Модификовани семиемпиријски прорачун за Штарков померај (Dimitrijević & Kršljanin 1986, Dimitrijević 1988)

Све вредности су дате за електронску концентрацију од $N = 10^{23} \text{m}^{-3}$

Критична температура означава ону температуру до које важе упрошћена MSE и SE

Процену полуширине код горе израчунатог прелаза су дали Djenize *et al.* (1993a). По њиховој процени полуширина износи $w_p = .106$ за електронску концентрацију од $N = 10^{23} \text{m}^{-3}$ и електронској температури $T = 20\ 000 \text{K}$. Као што се види из датотеке MODSEM рачунате вредности су $w_1 = .100$, $w_2 = .133$

и $w_3 = .136$, тј. однос израчунатих и процењених вредности редом је 0.94, 1.25, 1.28.

Осим овог, направљени су помоћни програми за рачунање јачина осцилатора у Кулоновој апроксимацији (програм F) и за рачунање фактора линије и мултиплета (програм 6J).