

92 7348

UNIVERZITET U BEOGRADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
ODSEK ZA FIZIČKE I METEOROLOŠKE NAUKE

MILAN S. DIMITRIJEVIĆ

UTICAJ POTENCIJALA DUGOG DOMETA
NA ŠTARKOVО ŠIRENJE
SPEKTRALNIH LINIJA PLAZME

- DOKTORSKA DISERTACIJA -

INSTITUT ZA PRIMENJENU FIZIKU
BEOGRAD, 1978.

УНИВЕРЗИТЕТСКА БИБЛИОТЕКА
„СВЕТОЗАР МАРКОВИЋ“ - БЕСГРАД

5 И. Бр. 71681

ДОДЕЛКА О ТЕХНИЧКИМ
И ПРОИЗВОДСТВЕННИМ
ПРОБЛЕМАМА КОМПЛЕКСНОГО
И СПЕЦИЈАЛИСТИЧКОГ РЕШЕЊА
ДОБРОДОБРОВОЛНИХ АСOCIЈАЦИЈА
И УДАРЦА

САНДЖАКСКА АКАДЕМИЈА

АТАНДОС ОБУДА ДА СВЕДИЧИ
ДОБРОДОБРОВОЛНИХ АСOCIЈАЦИЈА
И УДАРЦА КОМПЛЕКСНОМ РЕШЕЊУ
САНДЖАКСКИХ ПРОБЛЕМА



АКАДЕМИЈА ДОБРОДОБРОВОЛНИХ
АСOCIЈАЦИЈА И УДАРЦА

САНДЖАКСКА АКАДЕМИЈА
ДОБРОДОБРОВОЛНИХ АСOCIЈАЦИЈА
И УДАРЦА

Ovaj rad posvećujem

supruzi LJILJANI i sinu VLADIMIRU

Ovaj rad je započet u Laboratoriji za spektroskopiju plazme Instituta za fiziku a završen u Laboratoriji za fiziku i tehniku lasera Instituta za primenjenu fiziku u Beogradu, kao rezultat višegodišnjeg rada na problematiči Štarkovog širenja spektralnih linija iz plazme.

Pre nego što pristupim izlaganju rezultata osećam potrebu da izrazim zahvalnost onima od kojih sam u toku svoga rada učio.

Imam zadovoljstvo da izrazim posebnu zahvalnost Dr Petru Grujiću, koji je u rukovodjenje mojim radom na Tezi uložio izuzetan trud i strpljenje, na korisnim savetima i diskusijama u vezi njene realizacije iz kojih su proizašle neke od ideja izloženih u ovoj disertaciji.

Raduje me da na ovaj način mogu da izrazim svoju zahvalnost Dr Nikoli Konjeviću, rukovodiocu rada na Tezi, koji me je primio u svoju grupu, omogućio povoljne uslove za rad i davao stalnu podršku u tom radu. Zahvaljujem mu se na pokazanom interesu i permanentnim diskusijama tokom rada.

Želim da na ovaj način izrazim zahvalnost Mariji Radosavljević na besprekorno izvedenoj tehničkoj pomoći tokom pripreme rada za štampu.

Zahvalan sam drugovima iz Instituta za primenjenu fiziku koji su mi omogućili rad na Tezi.

Posebno želim da izrazim zahvalnost drugovima iz Laboratorije za fiziku i tehniku lasera, Djuri, Vukosavu, Sonji, Vladu, Branku, Bati i Zoranu koji su mi pružili podršku i imali razumevanje za moj rad.

Zahvalnost dugujem i Republičkoj zajednici za nauku SR Srbije koja je delimično finansirala moj rad na ovoj disertaciji.

S A D R Ž A J

UTICAJ POTENCIJALA DUGOG DOMETA NA ŠTARKOVО ŠIRENJE SPEKTRALNIH LINIJA PLAZME

	Strana
U V O D	I
I.	
Osnove teorije širenja spektralnih linija plazme	1
1. Uzroci širenja spektralnih linija plazme ...	1
1.1. Prirodno širenje	3
1.2. Doplerovo širenje	5
1.3. Van der Vaalsovo širenje	6
1.4. Rezonantno širenje	8
1.5. Štarkovo širenje	10
2. Osnovne aproksimacije u teorijama širenja linija	12
2.1. Semiklasična aproksimacija	12
2.1.1. Uslovi važenja semiklasične aproksimacije	18
2.2. Adijabatska aproksimacija	20
2.2.1. Uslovi važenja adijabatske aproksimacije	23
2.3. Kvazistatička aproksimacija	25
2.3.1. Uslovi važenja kvazistatičke aproksimacije	31
2.4. Sudarna aproksimacija	35
2.4.1. Uslovi važenja sudsarne aproksimacije	38
II.	
Elektron u polju ekscitovanog atoma	41
1. Interakcija dugog dometa izmedju elektrona i ekscitovanog atoma.....	41
1.1. Kulonov potencijal	43
1.2. Polarizacioni potencijal	45
1.3. Kvadrupolni potencijal	46

2.	Kretanje elektrona pod uticajem potencijala dugog dometa	48
2.1.	Kretanje elektrona u pola- rizacionom potencijalu	49
2.2.	Kretanje elektrona u polarizacionom i kvadrupolnom potencijalu	53
2.3.	Kretanje elektrona u Kulonovom potenci- jalu	61
2.4.	Kretanje elektrona u polarizacio- nom i Kulonovom potencijalu	64
2.5.	Kretanje elektrona u Kulonovom, polarizacionom i kvadrupolnom potencijalu	65
3.	Rasejanje elektrona na ekscitovanom atomu	67
3.1.	Teorija Vogt-a i Wannier-a	69
III	Širenje spektralnih linija na adijabatskoj granici	74
1.	Teorija Lindholma i Foley-a	78
2.	Uticaj potencijala dugog dometa na širinu spektralne linije na adija- batskoj granici	81
2.1.	Slučaj neutralnog emitera	81
2.1.1.	Uticaj polarizacionog potencijala	81
2.1.2.	Uticaj polarizacionog i kvadrupolnog potencijala	89
2.2.	Slučaj jonizovanog emitera	90
2.2.1.	Uticaj Kulonovog potencijala	90
2.2.2.	Uticaj Kulonovog i polarizacio- nog potencijala	92
2.2.3.	Uticaj Kulonovog, polarizacionog i kvadrupolnog potencijala	95
IV	Širenje spektralnih linija na kvazista- tičkoj granici	97
1.	Unificirana teorija Green-a, Cooper-a i Smith-a	97
2.	Primena na krila linije u slučaju vodonika i vodoniku sličnih jona	98
3.	Uticaj polarizacionog i kvadrupol- nog potencijala	101

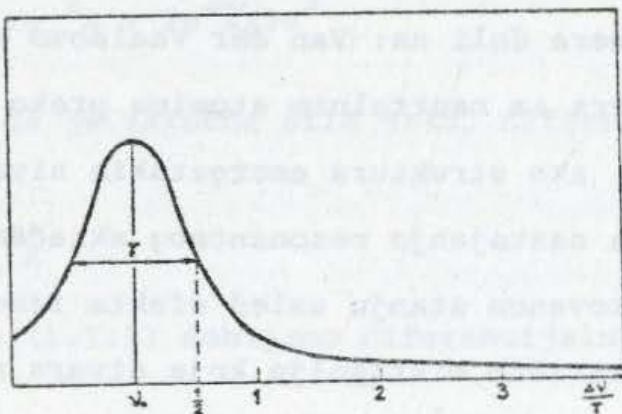
4.	Numerički primeri	107
V	Širenje spektralnih linija u oblasti važenja sudarne aproksimacije	111
	1. Slučaj neutralnih atoma	111
	1.1. Potencijal dugog dometa i minimalni sudarni parametar ..	114
	1.2. Potencijal dugog dometa i funkcije Šarkovog širenja	117
	1.3. Numerička izračunavanja	121
	2. Uticaj Kulonovog potencijala na širenje spektralnih linija (slučaj jonizovanih emitera)	126
	2.1. Grimova semiempirijska formula	127
	2.1.1. Vrednost Gaunt faktora na pragu za neelastičnorasejaju- će i semiempirijska formula..	129
	2.2. Aproksimativna semiklasična teorija za višestruko jonizo- vane emiterе	131
	2.2.1. Numerička izračunavanja	134
Z A K L J U Č A K	140
L I T E R A T U R A	143

Rad je podeljen u Pet ■■■ poglavlja. U prvoj, uvodnoj glavi prikazani su različiti fizički procesi koji učestvuju u širenju spektralnih linija i izložene osnove teorije Štarkovog širenja. Druga glava je posvećena analizi kretanja nanelektrisane čestice u polju eksitiranog neutralnog i ionizovanog atoma. Rezultati dobijeni u prethodnoj glavi, primenjeni su u trećoj glavi na analizu širenja spektralnih linija na adijabatskoj granici, koja je niskotemperaturna granica teorije Štarkovog širenja. U glavama IV i V razmatran je uticaj potencijala dugog doleta na kvazistatičkoj odnosno udarnoj granici čime su teorijski proučeni praktično svi delovi spektralne linije. Sva potrebna izračunavanja izvršena su na IBM 360/44 u računskom centru Matematičkog instituta u Beogradu.

I. OSNOVE TEORIJE ŠIRENJA SPEKTRALNIH LINIJA PLAZME

1. Uzroci širenja spektralnih linija plazme

Idealno monohromatsko zračenje, odnosno svetlost potpuno odredjene talasne dužine nemoguće je dobiti. Profil spektralne linije je uvek neka raspodela intenziteta zračenja u intervalu frekvencije ν (sl.1) i ima konačnu širinu koja zavisi od stepena monohromatičnosti analiziranog zračenja. Često je teško reći gde je granica izmedju spektralne linije i fona usled kontinualnog zračenja. Kao mera širine spektralne linije uzima se njena širina na visini koja odgovara polovini maksimalnog intenziteta linije γ ili polovina ove vrednosti w .



Sl. 1. Oblik spektralne linije

Širenje spektralnih linija može da nastane iz više uzroka:

- a) Iz Hajzenbergove relacije neodredjenosti napisane u obliku koji povezuje neodredjenost energetskog stanja ΔE

sa vremenom koje atom provede u njemu Δt

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq h \quad (1.1)$$

može se videti da ekscitovana stanja atoma imaju neodredjenu energiju. Atom boravi u njima kratko vreme i deeksitira se emitujući foton frekvencije v čija je najmanja moguća neodredjenost obrnuto сразмерna vremenu života atoma u eksitiranom stanju.

b) Kretanje izvora zračenja dovodi do prividnog pomeranja frekvence zračenja usled Doplerovog efekta. Kombinovani efekat usled raznolikog kretanja mnogih emitera daje proširenu spektralnu liniju.

c) Različite vrste interakcija atoma koji zrači sa okolnim česticama, koje dovode do pomeranja i cepljanja energetskih nivoa kao i do skraćenja vremena života atoma u pojedinim pobudjnim energetskim stanjima, posmatrane statistički, dovode do širenja linija pritiskom. Ovo širenje se prema vrsti interakcije izmedju emitera i perturbera deli na: Van der Vaalsovo ako je u pitanju interakcija emitera sa neutralnim atomima preko Van der Vaalsove sile; rezonantno, ako struktura energetskih nivoa emitera i perturbera omogućava nastajanje rezonantnog skraćenja vremena života atoma u eksitovanom stanju usled efekta izmene i Starkovo, u slučaju kada električno mikropolje koje stvara nanelektrisani perturber, pomera i ceplja energetske nivoje emitera.

Ako pretpostavimo da su efekti usled kojih se linija širi međusobno statistički nezavisni, rezultujući profil spektralne linije se može dobiti kao konvolucija profila usled različitih uzroka širenja.

1.1. Prirodno širenje

Prirodno širenje linija iz plazme je posledica fundamentalnih odnosa u prirodi i idealno monohromatsko zračenje se ne može dobiti ni pod kakvim uslovima. Najprostiji model za svetlosni izvor je linearни harmonijski oscilator. U klasičnom priazu emitujući gas je predstavljen skupom oscilatora koji udruženi stvaraju polje zračenja. Slobodne oscilacije emitujućeg sistema se prigušuju pošto sistem zračenjem gubi energiju. Na oscilator utiče polje koje stvara emitujući gas kao zakočna sila koja se određuje iz energetskog balansa. Uključivši ovu силу, naš sistem se sveo na linearni harmonijski oscilator koji pobudjen sudarom osciluje u elastičnoj sredini. Ako su e i m nanelektrisanje i masa elektrona a c brzina svetlosti, jednačina kretanja linearog harmonijskog oscilatora frekvence v_0 na koji deluje zakočna sila je:

$$m\ddot{x} = -mv_0^2x + 2e\ddot{x}/3c^3 \quad (1.1.1)$$

Predpostavljajući da je zakočna sila mala, diferencirajući gornji izraz

$$\ddot{x} = -v_0^2\dot{x} \quad (1.1.2)$$

i stavljajući ga u (1.1.1) dobijamo diferencijalnu jednačinu čije je rešenje:

$$x = x_0 e^{-wt/2} e^{-iv_0 t}$$

$$w = 2e^2 v_0^2 / 3mc^3$$

Vidimo da se oscilacije sistema prigušuju sa konstantom prigušenja w . Ali prigušene oscilacije nisu monohromatske nego se sastoje od čitavog niza frekvenci. Raspodela intenziteta $I(\omega)$ u spektaru zračenja oscilatora data je disperzionom formulom:

$$I(\omega) d\omega = I \frac{\gamma d\omega}{2\pi \left[(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 \right]} \quad (1.1.3)$$

Ova raspodela je predstavljena na sl.1 i naziva se Lorencova, pri čemu je polu-poluširina linije u jedinicama s^{-1} jednaka konstanti prigušenja oscilacija. Izražena u angstromima, prirodna poluširina linije u klasičnom modelu, nezavisna je od atomskih karakteristika emitera i talasne dužine emitovanog zračenja i iznosi:

$$\gamma = 1.18 \times 10^{-4} \text{ Å}^0$$

Vidimo da slabljenje oscilacija koje je svojstveno svakom sistemu koji emituje, dovodi do širenja spektralne linije.

U kvantno mehaničkoj slici, nemogućnost dobijanja idealno monohromatskog zračenja očigledno sledi iz Hajzenbergove relacije neodredjenosti (1.1). Emisija fotona, može se opisati vremenski zavisnom Šredingerovom jednačinom:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = H\psi(t)$$

Hamiltonian H u gornjoj jednačini, predstavlja sumu Hamiltoniana neperturbovanog atoma, polja zračenja i interakcije između atoma i polja zračenja. Prema teoriji vremenski zavisne perturbacije (HEITLER 1954) $\psi(t)$ se može predstaviti u obliku sume

$$\psi(t) = \sum_n c_n(t) \varphi_n$$

Ovde svojstvene funkcije φ_n čine ortonormiranu bazu sistema (neperturbovani atom - polje zračenja) u slučaju kada je interakcija jednaka nuli, a $|c_n(t)|^2$ predstavlja verovatnoću da će sistem biti u stanju n u trenutku t . Evolucija sistema je opisana pomoću sistema spregnutih jednačina oblika:

$$\dot{c}_n(t) = \sum_n^{\text{int}} H_{n,m} \exp \left[i(E_n - E_m)t/\hbar \right] c_m(t)$$

$H_{n,m}^{\text{int}}$ je matrični element Hamiltonijana interakcije uzet izmedju stanja n i m. Ovaj sistem se može rešiti samo u nekim slučajevima uz dopunske aproksimacije. Ako posmatramo sistem od dva stanja plus polje zračenja i uvedemo pretpostavku da verovatnoća zauzimanja jednog nivoa varira prema zakonu $\exp(-wt/2)$ dobićemo (BREENE 1964) da je oblik spektralne raspodele zračenja Lorencov kao i u klasičnom slučaju (1.1.3). Polje zračenja deluje na atom. Verovatnoća da će atom ostati u početnom stanju opada sa vremenom i širina linije je posledica smanjenja ove verovatnoće.

1.2 Doplerovo širenje

Čestice u plazmi koje zrače, nalaze se u kretanju. Bilo da je to termalno kretanje, kretanje usled turbulencije ili kretanje plazme kao celine ili dela plazme u odnosu na posmatrača javlja se Doplerov efekat.

Talasna dužina zračenja od izvora koji se kreće prema posmatraču pomerena je ka "plavom" delu spektra:

$$\frac{\omega - \omega^1}{\omega} = \frac{v}{c}$$

gde je ω nepomerena kružna frekvencija, ω^1 pomerena, a v komponenta brzine u pravcu posmatrača. Ako se emiter udaljava od posmatrača, pomak je "crven".

U slučaju Doplerovog širenja, intenzitet zračenja emitovanog u intervalu $(\Delta\lambda, \Delta\lambda + d\lambda)$ proporcionalan je broju emitera koji u datom pravcu imaju komponentu brzine u intervalu $(v, v+dv)$. U okviru hipoteze o Maksvelovoj raspodeli brzina,

raspodela intenziteta zračenja ima oblik Gausove raspodele:

$$I(\Delta\lambda) = (\Delta\lambda_D \sqrt{\pi})^{-1} \exp\left[-(\Delta\lambda/\Delta\lambda_D)^2\right]$$

$$\Delta\lambda_D = \left(\frac{\lambda_0}{c}\right) (2kT/M)^{1/2}$$

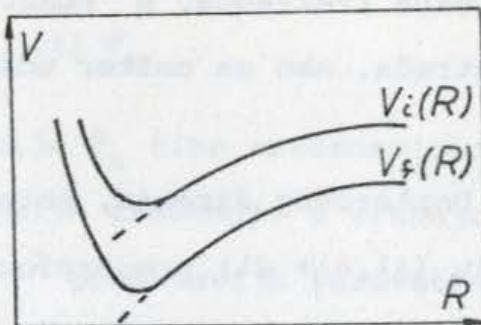
$$2w(\text{Å}) = 1.665\Delta\lambda_D = 7.16 \times 10^{-7} \lambda(\text{Å}) \sqrt{T(K)/M(\text{a.j.m.})}$$

Dvde je k Boltzmanova konstanta, M masa a T temperatura emitera.

U laboratorijskoj plazmi Doplerovo širenje se mora uzeti u obzir. Ono je proporcionalno korenu iz temperature emitera i sa porastom temperature, naročito na većim talasnim dužinama postaje sve važniji uzrok širenja.

1.3. Van der Vaalsovo širenje

Za razliku od prirodnog i Doplerovog širenja, širenje spektralnih linija iz plazme izazvano interakcijom sa okolinim česticama zavisi od koncentracije perturbera. Zato se ova grupa uzroka širenja često naziva zajedničkim imenom, širenje pritiskom. Sile kojima deluju neutralni atomi na emitujući atom, jon ili molekul su kratkog dometa. Na sl. 2 je prikazan tipičan izgled potencijalnih krivih za početni, V_i i konačni V_f term atoma koji zrači, u funkciji rastojanja (R) od neutralnog perturbera.



Sl.2. Tipične potencijalne krive dva energetska nivoa (i,f) atoma, u funkciji rastojanja R od neutralnog perturbera.

Sa slike vidimo da je energetska razlika izmedju dva terma (koja odgovara potencijalnoj razlici na gornjoj slici), razlicita za razlicita rastojanja perturbera i emitera, pa i emitovane linije imaju razlicitu talasnu duzinu. Usrednjavanjem po verovatnoćama svih mogućih rastojanja izmedju emitera i neutralnog perturbera, dobijamo proširenu spektralnu liniju. Maksimalni intenzitet linije će biti pomeren u odnosu na neperturbовani atom i biće na talasnoj dužini koja odgovara najverovatnijem rastojanju izmedju emitera i perturbera.

Tačan analitički oblik potencijalnih krivih je uglavnom nepoznat. Potencijal se razvija u red po stepenima R^{-1} pri čemu se obično zaustavlja na prvom članu (razlicitom od nule) koji je proporcionalan R^{-6} . To je potencijal Van der Vaalsa po kome je ovaj uzrok širenja dobio ime.

$$V(R) = - C_6 R^{-6}$$

C_6 je Van der Vaalsov koeficijenat (na pr. BREENE 1964). Na sl.2 ovom članu odgovara isprekidani produžetak krive. U okviru adijabatske teorije LINDHOLM-a (1945) i FOLEY-a (1946) poluširina linije je data izrazom (na pr. VALLEE, RANSON i CHAPELLE 1977):

$$\gamma = 8.16 \left(\frac{C_6}{\hbar}\right)^{2/5} \bar{v}^{-3/5} N_O$$

gde je \bar{v} srednja relativna brzina atoma koji se sudaraju a N_O koncentracija perturbera.

Ako uzmemo i drugi član u razvoju potencijala, odnosno razmatramo Lennard-Jones-ov potencijal

$$V(R) = C_{12} R^{-12} - C_6 R^{-6}$$



koji uzima u obzir i sile odbijanja, možemo u adijabatskoj aproksimaciji dobiti (HINDMARSH i FARR 1972):

$$\gamma = 8\pi \left(\frac{3\pi}{8}\right)^{2/5} N_o^{-3/5} \left(\frac{C_6}{\pi}\right)^{2/5} B(\alpha)$$

$$\alpha = 0.54 (\hbar v)^{6/5} (C_{12}/C_6)^{11/5}$$

Ova formula se od slučaja kada se uzima u obzir samo Van der Valsov potencijal razlikuje za korekcioni faktor $B(\alpha)$, koji su uveli HINDMARSH i FARR 1972.

Van der Vaalsovo širenje je značajno samo za plazme velike gustine, kada su srednja rastojanja izmedju atoma mala pa sile Van der Valsa mogu da dodju do izražaja.

1.4. Rezonantno širenje

Rezonantno širenje nastaje kada gornji ili donji nivo prelaza za posmatranu spektralnu liniju ima dozvoljeni dipolni prelaz na osnovno stanje i kada je emiter okružen sličnim atomima u osnovnom stanju. Ako imamo dva ista atoma, svejedno je koji je atom eksitiran a koji je u osnovnom stanju. Javlja se degeneracija nivoa sistema i krajnji rezultat je širenje spektralne linije. Proces možemo da posmatramo i kao skraćenje života eksitiranog stanja usled izmene energije zbog čega je i širina linije veća.

Rezonantno širenje možemo da posmatramo i klasično na primeru dva linearna harmonijska oscilatora spregnuta dipolnom interakcijom. Ako je u početku jedan od njih eksitiran, usled sprege amplituda početno eksitiranog oscilatora opada, a početno neeksitiranog raste od nule. Dakle izmedju njih postoji neradijacioni energetski transfer. Pošto su oscilacije početno eksitiranog oscilatora prigušene, nastaje širenje kao i kod klasične

slike prirodnog širenja.

Polazeći od BARANGER-ove (1962) i teorije GRIEM-a, KOLB-a, i OERTEL-a (1962) (u daljem tekstu GBKO) za širenje spektralnih linija u sudarnoj aproksimaciji, GRIEM (1964) je za širinu spektralne linije usled dipol-dipol interakcije sa osnovnim stanjem atoma iste vrste dobio:

$$w = 2\pi \left(\frac{g_a}{g_e}\right)^{1/2} N e^2 f_a / m\omega$$

gde su g_a i g_e statističke težine "apsorbujućeg" i "emitujućeg" stanja respektivno, ω ugaona frekvenca rezonantne linije a f_a jačina oscilatora za prelaz koji dovodi do emisije.

U okviru sudsarne aproksimacije mogu se uvesti dva poboljšanja. Može se proceniti uticaj članova višeg reda u Dajsonovom razvitu i uticaj viših članova u multipolnom razvoju. Za članove više od dipolnog, ALI i GRIEM 1965 su pokazali da se mogu zanemariti. Oni su korigovali izraz (1.4.1) uključivši uticaj članova četvrtog reda u Dajsonovom razvitu i dobili:

$$w = 1.92\pi \left(\frac{g_a}{g_e}\right)^{1/2} N e^2 f_a / m\omega$$

Iz gornjeg izraza se vidi da rezonantno širenje ne zavisi od temperature već samo od koncentracije perturbujućih čestica. Rezonantno širenje je obično izazvano neutralnim atomima iste vrste, ali treba imati u vidu da za nastajanje neradijativnog rezonantnog transfera energije nije neophodno da atomi budu identični. Dovoljno je da im odgovarajući energetski nivoi budu približni, odnosno perturberi mogu biti i joni i atomi različite vrste. Treba imati na umu da rezonantno i Van der vaalsovo širenje nisu prosto aditivni (OMONT, 1965) što komplikuje račun kada su oba značajna.

1.5. Štarkovo širenje

Električno mikropolje koje obrazuju mikročestice, menjaju se u prostoru i vremenu. Kad ne bi bilo tih promena, pod uticajem usrednjjenog električnog polja, spektralne linije bi se cepeale usled Štarkovog efekta. Pošto se električno polje stalno menja, umesto cepanja javlja se širenje. U radovima mnogih istraživača u ovom veku, koncept širine linije prouzrokovane statističkom raspodelom Štarkovih pomeraja, postao je detaljno razrađena teorija koja u generalisanom obliku obuhvata gotovo sve efekte koji imaju uticaj na oblik linije. Uopšte, linija može biti asimetrična (na primer usled kvadrupolne interakcije ili usled povratnog dejstva emitera na perturber), imati zabranjene komponente (ucled narušavanja izbornog pravila parnosti u električnim poljima) ili imati satelite (usled dvokvantnih prelaza). Jonske linije mogu biti eventualno pomjerene i usled polarizacije plazme koja okružuje emiter (monopolna interakcija).

U zadnjih desetak godina, teorijska ispitivanja Štarkovog širenja su se polarizovala u dva pravca. S jedne strane, ispituje se profil linije kao celine (VOSLAMBER, 1969., 1972; BEZZERIDES, 1969; DUFFY, 1969; SMITH, COOPER i VIDAL, 1969). Ovaj, takozvani unificirani metod daje naročito dobre rezultate za linije koje se ne mogu aproksimirati prostim, Lorencovim oblikom. Unificiranim teorijama, koje su zadnjih godina izvedene i kvantno mehanički (naprimjer TRAN MINH i VAN REGEMORTER, 1972; TRAN MINH, FEAUTRIER i VAN REGEMORTER, 1975) pripada i metod modelnog električnog mikropolja (BRISSAUD i FRISCH, 1971, 1974; BRISSAUD, GOLDBACH, LEORAT, MAZURE i NOLLEZ, 1976a, 1976b) za koji je SEIDEL (1977) pokazao da je ekvivalentan unificiranim

teorijama dokle god se širenje jona posmatra u statičkoj aproksimaciji. U uslovima kada efekti dinamike jona postaju značajni, ovaj metod bi trebalo da je najpogodniji (SEIDEL, 1977b), pošto omogućuje istovremeno ravnopravno tretiranje elektronskih i jon-skih efekata.

Druga grupa teorija, od kojih je najveću praktičnu primenu našla GBKO (1962) (postoje obimna izračunavanja za neutrale BENETT i GRIEM, 1971) i jednostruko jonizovane atome (JONES, BENETT i GRIEM, 1971) koja je takođe dao i GRIEM, (1974)) posebno ispituju centar linije a posebno njena krila. Kada se linija posmatra kao celina, profil se gradi kao funkcija koja se u centru i na krilima poklapa sa odgovarajućim izrazima koje daju sudarna i kvazistatička teorija. Pomoću ovih teorija, delovi linija za koje važe mogu se u principu opisati tačnije nego pomoću unificiranih teorija. One su mnogo praktičnije od unificiranih teorija za razmatranje linija koje nemaju komplikovane profile.

Još MICHELSON (1895) i LORENTZ (1906) su pretpostavili da širenje u oblastima bliskim centru linije nastaje usled prekida procesa zračenja sudarom sa perturberom. U ovoj oblasti važe tako-zvane sudarne teorije (BARANGER, 1958a; 1958b; 1958c; GEKO, 1962; SAHAL i VAN REGEMORTER 1964a; 1964b; SAHAL-BRECHOT, 1969a; 1969b; COOPER I OERTEL, 1967, 1969) u kojima se pretpostavlja da su u posmatranom vremenskom intervalu elektronski sudari kompletni i da vreme trajanja sudara teži nuli.

Krila linije se opisuju pomoću kvazistatičkih teorija (HOLTSMARK, 1919, 1924; KUHN, 1934; MARGENAU, 1935; GRIEM, 1965). U osnovi ovih teorija nalazi se pretpostavka da se perturberi kreću dovoljno sporo da se može smatrati da atom emituje ili apsor-



buje sa frekvencom koja zavisi samo od položaja perturbera. Sudar traje veoma dugo, tako da se smatra da su perturberi nepokretni. Profil se dobija pogodnim usrednjavanjem preko položaja perturbera.

Pre pojave unificiranih teorija, nastao je niz teorija za oblast izmedju sudarnog i kvazistatičkog dela linije (OHNO, (1961); ROSS, (1966); MEAD, (1968); BEZZERIDES, (1969)). Većina ovih teorija ima formalan karakter i cilj im je pre da osvetle neke teorijske aspekte nego da služe praktičnom izračunavanju.

Postoji više monografija i revijskih članaka posvećenih Šarkovom širenju spektralnih linija iz plazme (BREENE, 1964; BARANGER, 1964; GRIEM, 1964; 1974, 1975; SOBEL'MAN, 1972; PEACH, 1975; LISICA, 1977). Kritički prikaz dosadašnjih eksperimentalnih podataka dali su KONJEVIĆ i ROBERTS, 1976 za neutrale i KONJEVIĆ i WIESE, 1976 za jone. Bibliografiju članaka vezanih za problematiku širenja spektralnih linija priredili su FUHR i dr. 1972, 1974, 1977.

2. Osnovne aproksimacije u teorijama širenja linija

2.1 Semiklasična aproksimacija

Smatraćemo da je srednje rastojanje izmedju atoma plazme koji emituju, dovoljno veliko da bi se interakcija izmedju njih mogla zanemariti. Podelićemo plazmu u ćelije od kojih svaka sadrži jedan emiter i veliki broj perturbujućih čestica, elektrona i jona. Takođe ćemo pretpostaviti da su perturbujuće čestice koje se nalaze na granici susednih ćelija efektivno na beskonačnom rastojanju

u odnosu na emitere tako da je njihova interakcija sa emiterom zanemarljivo mala. Zanemarićemo interakciju izmedju susednih ćelija.

Predpostavljamo da su joni u ćeliji nepokretni u toku vremena od interesa ($\approx 1/\Delta\omega$) i da stvaraju kvazistatičko električno polje E_j . Kompletan profil linije $I(\omega)$ dat je (SMITH, VIDAL i COOPER, 1969b) pomoću izraza:

$$I(\omega) = \int_0^{\infty} P(E_j) I(\omega, E_j) dE_j \quad (2.1.1)$$

gde je $P(E_j)$ funkcija raspodele niskofrekventne komponente fluktuirajućeg električnog mikropolja. Na taj način, problem je sveden na izračunavanje širenja linije usled dejstva elektrona u statičkom polju E_j . Rezultujući profil $I(\omega, E_j)$ se zatim usrednji preko svih mogućih jonskih polja.

Smatraćemo da je jonsko električno polje upravljenko duž Z ose koordinatnog sistema i da je interakcija izmedju emitera i jona dipolnog tipa. Kompletan Hamiltonijan za jednu od posmatranih ćelija može se napisati u obliku:

$$H = H_a + ezE_j + V_e \quad (2.1.2)$$

H_a je Hamiltonijan neperturbovanog atoma, ez , Z komponenta dipolnog momenta emitera a V_e predstavlja interakciju slobodnih elektrona izmedju sebe i sa emiterom. Smatraćemo da je V_e jednak sumi binernih interakcija V_1 i uvešćemo semiklasičnu aproksimaciju ili aproksimaciju klasičnih putanja. U njenim okvirima perturbacijski se posmatraju kao klasične čestice koje deluju klasičnim vremenski promenljivim potencijalom na kvantno mehanički atom.

$$V_e(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t) = \sum_{j=1}^N V_1(\vec{R}, \vec{x}_j, \vec{v}_j, t) \quad (2.1.3)$$

$$\vec{x} = \vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N; \vec{v} = \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N$$

Ovde je V_1 interakcija izmedju emitera i jednog elektrona j sa koordinatama \vec{x}_j i brzinom \vec{v}_j . \vec{r} označava unutrašnje koordinate emitera. Za atome sa jednim "optičkim" elektronom to je vektor položaja elektrona u odnosu na jezgro.

Profil linije kao funkcija Furijeove transformacije $C(t)$ odnosno autokorelacione funkcije

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\Delta\omega t} I(\omega, E_i) d\omega \quad (2.1.4)$$

je dat pomoću izraza:

$$I(\omega, E_j) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} e^{i\omega t} C(t) dt \quad (2.1.5)$$

Lakše je prvo izračunati autokorelacionu funkciju $C(t)$ jer na taj način privremeno isključujemo iz razmatranja statistički problem.

Autokorelaciona funkcija u slučaju zračenja električnog dipola i u okvirima semiklasične aproksimacije može se napisati kao (na pr. GRIEM, 1974; SMITH, VIDAL i COOPER, 1969a, 1969b)

$$C(t) = \operatorname{Tr}_a \left[d \langle T_a^+(t) d T_a(t) \rangle_{sr} \rho_a \right] \quad (2.1.6)$$

Tr je trag matrice, d dipolni momenat a ρ_a matrica gustine emitera. U ovom izrazu zanemarena je povratna reakcija emitera na perturber, odnosno pretpostavlja se da emiter može samo da primi energiju od perturbera a ne i da mu je preda. Stanje perturbera ne zavisi eksplicitno od stanja emitera. Ovo je matematički izrazio FANO (1967) razdvajajući matricu gustine na proizvod delova koji zavise samo od atomskih (a) odnosno perturberskih (p) promenljivih, ($\rho = \rho_a \rho_p$) što je moguće ako su emiterski i perturberski podsistem statistički nezavisni. U slučaju kanonskog ansambla:

$$\rho_a = e^{-H_a/kT} \quad (2.1.7.)$$

S obzirom na pretpostavku o statičkoj nezavisnosti emiterskog i perturberskog podsistema, operator gustine ρ_p vrši usrednjavanje po ansamblu ($\langle \dots \rangle_{sr}$) preko perturberskog podsistema.

$T_a(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t)$ je operator vremenskog razvoja sistema, koji se u interakcionoj reprezentaciji može napisati kao:

$$T_a = e^{-i(H_a + ezE_j)t/\hbar} U(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t) \quad (2.1.8)$$

Operator U zadovoljava dinamičku jednačinu

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = \tilde{V}(t) U(t) \quad (2.1.9)$$

gde je

$$\tilde{V}(t) = e^{i/\hbar(H_a + ezE_j)t} V_e(t) e^{-i/\hbar(H_a + ezE_j)t} \quad (2.1.10)$$

Ako sa O označimo operator hronološkog poretka jednačinu (2.1.9) zadovoljava:

$$U(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t) = O \exp \left\{ -i/\hbar \int_0^t \tilde{V}(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t') dt' \right\} \quad (2.1.11)$$

Autokorelacionu funkciju (videti 2.1.6) je pogodno izraziti pomoću svojstvenih stanja operatora $H_a + ezE_j$. Ako i i f označavaju početna i konačna stanja sistema respektivno dok su i' i f' odgovarajuća medjustanja, $C(t)$ se može napisati kao:

$$C(t) = \sum_{ifif'} \langle i | d | f \rangle \langle f' | d | i' \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} (E_i - E_{f'}) t} \cdot \left[\langle f | U^+(t) | f' \rangle \langle i' | U(t) | i \rangle \right]_{sr} \langle i | \rho_a | i \rangle \quad (2.1.12)$$

Razmatranje autokorelace funkcije može se uprostiti uvodjenjem tetradske notacije. Pomoću ove notacije, koju su u teoriju Štarkovog širenja uveli VIDAL, COOPER i SMITH (1970), uprošćava se uključivanje doprinosa donjeg stanja u širinu linije. Tetradski operatori su operatori u takozvanom linijskom prostoru u kome je emitterska talasna funkcija jednog od gornjih stanja linije asocirana u direktnom proizvodu sa kompleksno konjugovanom funkcijom jednog od džnjih stanja.

Tetradski operator binerne jednoelektronske interakcije je:

$$\tilde{v}_1(t) = \tilde{v}_1^i(t) - \tilde{v}_1^f(t) \quad (2.1.13)$$

dok je tetradski operator vremenskog razvoja sistema dat pomoću izraza:

$$u_1 = U_1^{i*} U_1^f = \exp\left\{-i/\hbar \int_0^t \tilde{v}_1(\vec{R}, \vec{x}, \vec{v}, t') dt'\right\} \quad (2.1.14)$$

pričemu u_1 zadovoljava analogno operatoru U_1 dinamičku jednačinu:

$$i\hbar \frac{\partial u_1(t)}{\partial t} = \tilde{v}_1(t) u_1(t) \quad (2.1.15)$$

Pomoću ovakvih oznaka:

$$\left[\langle f | U^+(t) | f' \rangle \langle i' | U(t) | i \rangle \right]_{sr} = \langle f' i' | u_{sr}(t) | fi \rangle \quad (2.1.16)$$

Usrednjavanjem tetradskog operatora $u(t)$ po početnim koordinatama i brzinama perturbera (na pr. GRIEM, 1974; VIDAL, COOPER i SMITH, 1970; VOSLAMBER, 1969) i nalaženjem njegove Furijeove transformacije

$$\langle f' i' | t_{sr}(\omega) | f i \rangle = \int_0^{\infty} e^{i\omega t} e^{-i/\hbar(E_i - E_f')t} \cdot \langle f' i' | u_{sr}(t) | f i \rangle dt \quad (2.1.17)$$

dobijamo:

$$t_{sr}(\omega) = i \left[\Delta\omega_{op} - L(\Delta\omega_{op}) \right]^{-1} \quad (2.1.18)$$

$$\Delta\omega_{op} = \omega - (H_a^i - H_a^f)/\hbar - \frac{e}{\hbar} (z^i - z^f) E_j \quad (2.1.19)$$

$$L(\Delta\omega_{op}) = -iN \int_0^{\infty} e^{it\Delta\omega_{op}} \{ \tilde{v}_1(t) u_1(t) \tilde{v}_1(0) \}_{sr} dt \quad (2.1.20)$$

gde N označava koncentraciju elektrona. Početak skale za računanje ugaone frekvence je ugaona frekvenca neperturbirane linije.

Oblik linije za dano jonsko polje E_j , dat je izrazom:

$$I(\omega, E_j) = \frac{1}{\pi} I_m \sum_{i \neq f} \langle i | d | f \rangle \langle f' | d | i \rangle \langle i | \rho_a | i \rangle \cdot \langle f' i' | \left[\Delta\omega_{op} - L(\Delta\omega_{op}) \right]^{-1} | f i \rangle \quad (2.1.21)$$

Pomoću jednačina (2.1.1), (2.1.10), (2.1.11), (2.1.13), (2.1.14), (2.1.15), (2.1.19), (2.1.20) i (2.1.21) se može dobiti profil linije. Nabrojani izvori daju generalisani unificirani oblik linije u semiklasičnoj aproksimaciji i pomoću njih se mogu

dobiti kako postojeće unificirane teorije, tako i sudsarne i kvazistatičke teorije koje važe za pojedine delove linije. Profil opisan jednačinom (2.1.21) u opštem slučaju nije Lorensov. U gornje jednačine nije uvedena pretpostavka o izolovanosti linije ali je zanemarena dinamika jona i interakcije izmedju elektrona i emitera su binernog tipa.

2.1.1. Uslovi važenja semiklasične aproksimacije

U okviru semiklasične aproksimacije, perturberi se posmatraju kao čestice kojima se mogu pripisati klasične koordinate \vec{x} i brzine \vec{v} . Njihovo dejstvo na atom može se opisati vremenski promenljivim klasičnim potencijalom (2.1.3).

Da bi se perturber mogao predstaviti pomoću klasične čestice, mora se pretpostaviti da se talasni paket pomoću koga ga opisujemo ne preklapa sa talasnim funkcijama drugih čestica. Predstavićemo perturbere kao talasne pakete u kojima funkcija raspodele intenziteta ima Gausov oblik sa poluširinom Δx_g , a neodredjenost momenta Δp zadovoljava uslov:

$$\Delta p \ll \bar{p} \quad (2.1.1.1)$$

Ovde je \bar{p} srednja vrednost momenta perturbera. Da se talasni paketi perturbera ne bi prekrivali, mora biti mnogo manje od srednjeg rastojanja izmedju perturbera $n^{-1/3}$, gde je n gustoća perturbera. Koristeći Hajzenbergovu relaciju neodredjenosti u obliku

$$\Delta x_g \Delta p_g \sim \hbar \quad (2.1.1.2.)$$

kao i relaciju (2.1.1.1.) dobijamo da se perturber može posmatrati kao klasična čestica ako je

$$\hbar / p \ll \Delta x_g \ll n^{-1/3} \quad (2.1.1.3.)$$

Analizom uticaja perturbacionog potencijala na autokorelacionu funkciju (SMITH, VIDAL i COOPER, 1969a) može se pokazati da do preklapanja talasnih funkcija perturbera i emitera dolazi samo prilikom jakih sudara. Kod takvih sudara nema korelacija izmedju vremenskog razvoja sistema pre i posle sudara, odnosno autokorelaciona funkcija $C(t)$ teži nuli. U tom slučaju zamena talasnog paketa perturbera ekvivalentnom klasičnom česticom nije opravdana.

Ako sa x označimo efektivnu širinu talasnog paketa, njegovo širenje Δx u toku sudara ne sme biti veliko.

$$\Delta x \ll x \quad (2.1.1.4.)$$

Koristeći:

$$p^2 / 2m = mv^2 / 2 \quad (2.1.1.5.)$$

$$\tau = p / v \quad (2.1.1.6.)$$

$$\ell = mp v / \hbar \quad (2.1.1.7.)$$

$$\Delta x \ll x \ll \rho_0 \quad (2.1.1.8.)$$

gde je ℓ ugaoni momenat perturbera a p i v su minimalno rastojanje izmedju emitera i perturbera i brzina u trenutku kada se on nalazi na tom rastojanju, dobijamo:

$$m \rho v > \hbar \quad (2.1.1.9.)$$

U slučaju da je $x \gg p$ talasne funkcije emitera i perturbera se preklapaju, sudar je jak i semiklasični postupak je neprimenljiv.

Koristeći (2.1.1.7.) i (2.1.1.9.) dobijamo uslov $\ell > 1$. Pošto je za električni dipolni prelaz $\Delta \ell = \pm 1$, iz gornjeg uslova sledi da je $\Delta \ell < \ell$ odnosno da se ugaoni momenat perturbera održava u toku sudara.

Da bi se dejstvo perturbera na emiter moglo opisati klasičnim vremenski promenljivim potencijalom, potencijalno polje duž elektronskog talasnog paketa ne sme da se menja znatno u odnosu na kinetičku energiju elektrona (MESSIAH, 1961), odnosno:

$$\Delta V \ll p^2 / 2m \quad (2.1.1.9.)$$

gde je sa ΔV označena promena potencijala duž talasnog paketa.

2.2. Adijabatska aproksimacija

U daljem izlaganju zanemarićemo cepanje energetskih nivoa prouzrokovano poljem jona. To je dobra aproksimacija za vodonik (VIDAL, COOPER i SMITH, 1970; SMITH, VIDAL i COOPER, 1969b; GRIEM, KOLB i SHEN, 1959; GREEN, COOPER 1975). Za vodo-

nične jone ova aproksimacija je još bolja pošto su jonska polja manja usled medjusobnog odbijanja jona (HOOPER, 1968). Sem toga, matrični elementi dipolnog momenta atoma su manji za jone pošto sadrže faktor z^{-1} (Z je nanelektrisanje koje "vidi" optički elektron). Uticaj jona na dinamiku elektrona može se zanemariti u svim slučajevima kada je u toku sudara, pomeraj energetskog nivoa E izazvan jonskim poljem mnogo manji od širine nivoa.

$$\tau_e^{\Delta E \ll 1} \quad (2.2.1.)$$

Ovde je τ_e vreme trajanja sudara izmedju elektrona i emitera.

Sada se može pisati:

$$e \frac{i}{\hbar} e z E_j t \approx 1$$

$$e^{it\Delta\omega_{op}} \approx e^{it\Delta\omega}$$

$$L(\Delta\omega_{op}) \approx L(\Delta\omega)$$

$$\Delta\omega = \omega - (H_a^i - H_a^f)/\hbar \quad (2.2.2.)$$

Kada se uticaj jona na kretanje elektrona može potpuno zanemariti, širenje jonima i širenje elektronima su statistički nezavisni procesi, pa se profil linije može dobiti kao konvolucija elektronskog I_e i jonskog I_i profila.

$$I(\omega) = \sum_{i,f} \int_{-\infty}^{+\infty} I_j(\omega') I_e(\omega - \omega') d\omega' \quad (2.2.3.)$$

Na tetradski operator vremenskog razvoja (2.1.14) i njegovu dinamičku jednačinu (2.1.15) joni ne utiču. Sada se operator vremenskog razvoja može napisati u obliku proizvoda elektronskog i jonskog dela:

$$u(t) = u_i(t) u_e(t)$$

S obzirom na (2.2.2):

$$i\hbar \frac{\partial u_e(t)}{\partial t} = \tilde{v}_e(t) u_e(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial u_i(t)}{\partial t} = \left[H_a^i - H_a^f + e(\omega^i - \omega^f) E_j \right] u_i(t)$$

Uzevši u obzir (2.1.1), (2.1.5), (2.1.12), (2.1.16), (2.1.17) i (2.2.2) i gornje jednačine može se napisati:

$$I_j(\omega) = \frac{Re}{\pi} \sum_{i,f} \int_0^\infty e^{i\omega t} \int_0^\infty P(E_j) e^{-i\omega} i' f' t \\ \cdot \langle i | d | f \rangle \langle f' | d | i' \rangle \langle i | \rho_a | i \rangle \langle f' i' | u_{sr}^i(t) | f i \rangle dE_j dt \quad (2.2.4)$$

Na elektrone ćemo primeniti adijabatski model. U okviru ovoga modela smatra se da interakcija izmedju atoma i perturbujućeg promenljivog polja dovodi samo do promene faze $\eta(t)$ funkcije stanja atoma, odnosno, adijabatski sudar dovodi samo do posmeranja energetskih nivoa emitera a ne može da izazove neelastični prelaz na neki od susednih nivoa. Profil linije usled širenja elektronima dat je izrazom:

$$I_e(\Delta\omega) = \frac{Re}{\pi} \int_0^\infty e^{i\Delta\omega t} \langle f i | u_{sr}^e(t) | f i \rangle dt \quad (2.2.5)$$

Na tetradski operator u_{sr}^e utiču samo elektroni. Gornji rezultat se može dobiti i bez uvodjenja adijabatske aproksimacije kada se mogu zanemariti nedijagonalni elementi u matrici operatora vremenskog razvoja. Na primer u slučaju elektronskog doprinosa kod izolovanih linija atoma i jona koji nisu slični vodoniku, matrica operatora vremenskog razvoja je dijagonalna u odnosu na kvantne brojeve J i M a nedijagonalni elementi za stanja sa različitim glavnim kvantnim brojem se mogu zanemariti (BARANGER, 1958b) tako da jednačina (2.2.5) važi.

Ako se upotrebi teorija sudara (teorija sudara se razlikuje od sudarne aproksimacije u okviru unificiranih teorija) (GBKO, 1962) i zanemari interferencijski član izmedju gornjeg i donjeg nivoa, matrica u (2.2.5) se može napisati u obliku (GBKO, 1962):

$$\langle fi | u_{sr}^e(t) | fi \rangle = e^{-(w_e + d_e)t} \quad (2.2.6)$$

$$I_e(\Delta\omega) = \frac{w_e/\pi}{(\omega - d_e)^2 + w_e^2} \quad (2.2.7)$$

a dobijeni oblik linije je Lorencov.

U opštem slučaju, ako se upotrebi unificirani prilaz i uvede adijabatska aproksimacija, oblik linije se može takodje predstaviti pomoću izraza (2.2.7) ali sa frekventno zavisnim parametrima širenja $w(\omega)$ i $d(\omega)$.

2.2.1. Uslovi važenja adijabatske aproksimacije

U adijabatskom modelu nema izmene energije izmedju emitera i perturbera, koja dovodi do neelastičnog procesa. Iz

Hajzenbergovog principa neodredjenosti sledi da je neodredjenost energije perturbera posle sudara:

$$\Delta E \cdot \tau \sim \hbar \quad (2.2.1.1)$$

Ako uzmemo u obzir da neelastični prelaz sa nivoa i na nivo j može nastati samo ako je promena energije perturbera ΔE veća ili jednaka ΔE_{ij} , s obzirom na (2.1.1.6) uslov da je sudar adijabatski biće:

$$\frac{\rho}{v} \gg \frac{\hbar}{\Delta E_{ij}} = \frac{1}{\omega_{ij}} \quad (2.2.1.2)$$

Vreme sudara može se izraziti i preko ugaonog momenta perturbera (SAHAL i VAN REGEMORTER, 1964b).

$$\tau = \ell \hbar / mv^2$$

$$\ell > \frac{2mv^2}{\Delta E_{ij}} \quad (2.2.1.3)$$

U slučaju da se perturber kreće po hiperboličnoj orbiti minimalni sudarni parametar i trenutno rastojanje elektron-atom (ρ') će biti manji a brzina v' veća od odgovarajućih vrednosti za pravolinijsku putanju (ρ, v). Koristeći zakon o održanju energije

$$\frac{1}{2} mv^2 = \frac{1}{2} mv'^2 - \ell^2 / \rho'$$

i zakon o održanju ugaonog momenta

$$v' \rho' = v \rho$$

kao i (2.2.1.2), dobijamo da za hiperbolične putanje perturbera, minimalni sudarni parametar u slučaju adijabatskog sudara zadovoljava jednačinu (DAVIS i ROBERTS, 1967):

$$\rho_{\min}^3 - 2 \frac{v}{\omega_{ij}} \rho_{\min}^2 + \left(\frac{v}{\omega_{ij}}\right) \rho_{\min} - \frac{4 e^4}{m^2 \omega_{ij} v^3} = 0 \quad (2.2.1.4)$$

Ovde je ω_{ij} ugaona frekvenca za neelastičnu ekscitaciju na najbliži gornji nivo.

Za velike brzine rešenje jednačine (2.2.1.4) je izraz (2.2.1.2) ali sa znakom jednakosti. Na malim brzinama rešenje je:

$$\rho_{\min} \sim \left(\frac{4e^4}{m^2 \omega_{ij}}\right)^{1/3} \frac{1}{v} \quad (2.2.1.5)$$

Uporedjujući (2.2.1.2) (sa znakom jednakosti) i (2.2.1.5) vidimo da je na malim brzinama Kulonova interakcija mnogo efektivnija

2.3. Kvazistatička aproksimacija

Ako je vreme sudara izmedju emitera i perturbera veliko u odnosu na vreme bitno za proces širenja, $\Delta\omega^{-1}$, t.j.:

$$\tau \gg \Delta\omega^{-1} \quad (2.3.1)$$

opravdano je prepostaviti da se perturber ne kreće. Iz uslova (2.3.1) vidimo da je ova aproksimacija sve više opravdana kako se duž krila linije udaljavamo od centra, i na krilima linije možemo smatrati da je Štarkovo širenje izazvano kvazistatičkim perturbatorima.

Na dalekim krilima linije u izraz (2.1.2A) se može staviti:

$$\left[\Delta\omega_{op} - L(\Delta\omega_{op})\right]^{-1} \xrightarrow{\Delta\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta\omega_{op}} + \frac{L(\Delta\omega_{op})}{(\Delta\omega_{op})^2} \quad (2.3.2)$$

Sada ćemo pretpostaviti da nema neradijativnih prelaza izmedju stanja sa različitim kvantnim brojevima što znači da su ~~samo~~ matrični elementi od $V_1(t)$ izmedju stanja sa istim glavnim kvantnim brojem različiti od nule. Uvodjenje ove (tzv. no quenching) aproksimacije, predstavlja prelomnu tačku na kojoj počinje razlika izmedju unificiranih (VOSLAMBER, 1969; GREEN, COOPER i SMITH, 1975) i sudarnih (na pr. GBKO, 1962) teorija. Usled prime- ne ove aproksimacije, mora se u izraz za operator vremenskog raz- voja U (2.1.11) uvesti operator hronološkog poretku O koji je neophodan pošto delovi od V_e koji su dijagonalni po n i po n' ne komutiraju sami sa sobom u različitim trenucima vremena.

Operator vremenskog razvoja U (2.1.11), zahvaljujući svom eksponencijalnom obliku može neprekidno da se menja od su- darne granice (kada je gornja granica t u integralu na desnoj strani (2.1.11) jako velika, odnosno kada možemo zanemariti de- talje vremenskog razvoja perturbovane talasne funkcije emitera i stvarno trajanje sudara pošto su sudari kratkog trajanja u odno- su na vremenski interval značajan za proces širenja i završeni u ovom intervalu pa do kvazistatičke granice. Na ovoj granici, gornja granica integrala (t) na desnoj strani izraza (2.1.11) teži nuli, odnosno vreme bitno za procenu oblika linije samo je mali deo vremenskog intervala u kome traje sudar.

Pomoću "no quenching" aproksimacije izrazi (2.1.15) i (2.1.20) se mogu napisati u obliku (uzevši u obzir (2.2.2)):

$$L(\Delta\omega) = -iN \int_0^{\infty} e^{it\Delta\omega} \{v_1(t) u_1(t) v_1(0)\}_{sr} dt \quad (2.3.3)$$

$$i\hbar \frac{\partial u_1(t)}{\partial t} = v_1(t) u_1(t) \quad (2.3.4)$$

Pomoću dve parcijalne integracije iz gornjih izraza se može dobiti (SMITH, COOPER i VIDAL, 1969):

$$L(\Delta\omega) = -iN(\Delta\omega)^2 \int_0^\infty e^{it\Delta\omega} \{u_1(t) - 1\}_{sr} dt \quad (2.3.5)$$

Kada ovaj izraz stavimo u (2.3.2) i uzmememo u obzir (2.2.2) dobijamo:

$$\left[\Delta\omega_{op} - L(\Delta\omega) \right]^{-1} \xrightarrow{\Delta\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\Delta\omega_{op}} - iN \int_0^\infty e^{it\Delta\omega} \{u_1(t) - 1\}_{sr} dt \quad (2.3.6)$$

Prvi član na desnoj strani gornje jednačine predstavlja jonski doprinos širenju. Iz (2.1.1) i (2.1.2) se može videti da se izračunavanje jonskog doprinosa svodi na izračunavanje funkcije raspodele jonskog polja $P(E_j)$. Drugi član predstavlja elektronski doprinos širenju na krilima linije.

Izračunavajući funkciju raspodele jonskog polja (HOLCMARK (1919)) je zanemario uzajamnu korelaciju položaja jona tako da je verovatnoća konfiguracije $\vec{x}_1, \vec{x}_1 + d\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N + d\vec{x}_N$ proporcionalna elementu zapremine konfiguracionog prostora:

$$d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N (V)^{-N}$$

U takvom modelu, verovatnoća da se vektor kvazistatičkog jonskog polja \vec{E}_j nadje u intervalu $\vec{E}_j, \vec{E}_j + d\vec{E}_j$ zavisi samo od modula polja E_j , tako da se funkcija raspodele može napisati (na pr. LISICA, 1977):

$$P(E_j) dE_j = 4\pi E_j^2 P(E_j) dE_j = H(\beta) dE_j / E_j$$

$$\beta = E_j / E_0$$

U gornjim jednačinama E_0 je Holcmarkova normalna jačina polja

$$\begin{aligned} E_0 &= 2\pi \left(\frac{4}{15}\right)^{2/3} |z_p e| N_p^{2/3} \\ &\approx 2.603 |z_p e| N_p^{2/3} = \\ &= 1.25 \cdot 10^{-9} z_p N_p^{2/3} \text{ e.s.j.} \end{aligned} \quad (2.3.7)$$

(U jednačini (2.3.7) za elektrone kao perturbere je $z_p = 1$. Izraz za E_0 , vrlo malo (umesto 2.603 stajalo bi 2.599) se razlikuje od jačine polja koju stvara perturber na srednjem rastojanju između jona u posmatranoj plazmi (r_p) definisanim izrazom: $\frac{4\pi}{3} r_p^3 N_p = 1$), a $H(\beta)$ je Holcmarkova funkcija raspodele:

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \beta \int_0^\infty \exp(-x^{3/2}) \sin(\beta x) x dx \quad (2.3.8)$$

$$\int_0^\infty H(\beta) d\beta = 1 \quad (2.3.9)$$

$$x = k E_0 \quad (2.3.10)$$

Ovde je k transformisana promenljiva polja definisana Furijevom transformacijom:

$$A(\vec{k}) = \int e^{i\vec{k} \cdot \vec{E}_j} P(E_j) dE_j \quad (2.3.11)$$

Funkcija $H(\beta)$ ima maksimalnu vrednost za $\beta = 1.607$ a njene asimptotske vrednosti su:

$$H(\beta) \approx \begin{cases} 1.496 \beta^{-5/2} (1 + 5.107 \beta^{3/2}), & \beta \gg 1 \\ -\frac{4}{3\pi} \beta^2 (1 - 0.463 \beta^2), & \beta \ll 1 \end{cases} \quad (2.3.12)$$

Holcmarkova funkcija raspodele postaje za male vrednosti β po obliku slična Gausovoj raspodeli, što se i može očekivati, pošto male vrednosti β odgovaraju slabim poljima stvorenim velikim brojem jona. Zbirno polje, kao i svaki zbir slučajnih veličina, teži ka Gausovoj raspodeli (MOZER i BARANGER, 1960). Sa porastom β , datoj vrednosti jonskog polja doprinosi sve manji broj perturbera i na kraju samo jedna, najbliža čestica određuje raspodelu jakih polja. Na ovoj granici dobijamo aproksimaciju najbližeg suseda. Sada se može pisati:

$$\Delta\omega_{op} = \Delta\omega_{op}(r)$$

$$P(\vec{E}_j) d\vec{E}_j = 4\pi N_p r^2 dr \exp[-z_p(z-1)e^2/rkT] \quad (2.3.13)$$

Odnosno funkcija raspodele verovatnoće se svodi na verovatnoću da se jedan perturber nadje na rastojanju r , $r + dr$, pomnoženu sa Boltzmanovim faktorom.

Vidimo da Holcmarkova raspodela u grubim crtama opisuje prelaz od Gausove raspodele slabih polja do binerne raspodele jakih polja.

Holcmarkova raspodela je najprostiji model raspodele električnog mikropolja koje stvaraju joni i elektroni u plazmi. Realniji modeli uzimaju u obzir efekte korelacije jona, kao i ekraniranje njihovih električnih polja usled interakcije sa elektronima. Funkciju raspodele jonskog mikropolja koja uključuje gore pomenute efekte, izračunao je HOOPER, 1968.

U kvazistatičkoj aproksimaciji možemo staviti:

$$\langle f' i' | u_{sr}^j(t) | f i \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} e(z^i - z^f) E_j t}$$

Kada ovaj izraz stavimo u (2.2.4) i izvršimo integraciju po t , dobijemo:

$$\begin{aligned}
 I_j(\omega) &= \int_0^\infty P(E_j) dE_j \sum_{i,f} \delta(\Delta\omega - \frac{e}{\hbar}(z^i - z^f) E_j) \cdot \\
 &\cdot \langle i | d | f \rangle \langle f' | d | i' \rangle \langle i | \rho_a | i \rangle = \\
 &= \int_0^\infty P(E_j) dE_j \delta(\Delta\omega - \frac{e}{\hbar}(z^i - z^f) E_j) I_j^{if} \quad (2.3.14)
 \end{aligned}$$

Vidimo da spektar zračenja pojedine Štarkove komponente atoma I_j^{if} , ima oblik delta funkcije. Odnosno, gornji i donji energetski nivo su kvazistatičkim električnim poljem jona rasčepljeni na komponente, usled linearog Štarkovog efekta. Ove komponente su pomerene za veličinu Štarkovog cepanja $\frac{e}{\hbar}(z^i - z^f) E_j$ i imaju oblik δ funkcije. Sada $\langle i | \rho_a | i \rangle$ predstavlja statističku težinu i -te komponente. Pošto su joni u plazmi rasporedjeni na slučajan način, svaki atom "vidi" svoju vrednost polja E_j . Kada se Štarkova komponenta linije usrednji po raspodeli jonskog mikropolja ona postaje proširena.

Uvešćemo Štarkovu konstantu za linearni efekat, C_{if} .

$$C_{if} = \frac{e}{\hbar}(z^i - z^f) \quad (2.3.15)$$

Kada u (2.3.14) izvršimo usrednjavanje po raspodeli električnog polja, ubacimo Holcmarkovu funkciju raspodele jonskog mikropolja, sumiramo po svim Štarkovim komponentama i, f i normiramo delefci dobijeni izraz sa ukupnim intenzitetom linije

$$I_o = \sum_{i,f} I_j^{if} \quad (2.3.16)$$

dobićemo :

$$I_j(\omega) = \frac{1}{I_o} \sum_{i,f} \frac{I_j^{if}}{C_{if} E_o} H\left(\frac{\Delta\omega}{C_{if} E_o}\right) \quad (2.3.17)$$

Po gornjem izrazu, UNDERHILL i WADDELL (1959) su izvršili proračun profila za niz vodonikovih linija.

Na dalekim krilima linije, kada se može uzeti asimptotski izraz za Holcmarkovu funkciju raspodele ($\beta \gg 1$, 2.3.12)

$$I_j(\omega) \sim \frac{2\pi N}{\Delta\omega^{5/2}} \frac{1}{I_o} \sum_{i,f} C_{if} I_j^{if} \quad (2.3.18)$$

U gornji izraz možemo uvesti efektivnu Štarkovu konstantu za liniju kao celinu, koja je približno data izrazom (GRIEM, 1960) :

$$C = \left(\frac{3}{8}\right)^{2/3} \frac{\hbar}{m} (n_i^2 - n_f^2) \quad (2.3.19)$$

Sada je:

$$I_j(\omega) \sim \frac{2\pi N C^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \quad (2.3.20)$$

Pomoću gornje formule može se izvršiti procena jonskog širenja na dalekim krilima linije.

2.3.1. Uslovi važenja kvazistatičke aproksimacije

Efektivnost sudara se može okarakterisati promenom faze $\Delta\eta$. Ako je usled sudara nastala promena faze

$$\Delta\eta = 1 \quad (2.3.1.1)$$

atom posle takvog sudara "zaboravlja" početnu vrednost faze.

Sudarni parametar za koji je $\Delta\eta = 1$ naziva se Vajskopfov radius (ρ_V). U teoriji Štarkovog širenja značajnu ulogu ima i Vajskopfova frekvencija:

$$\Delta\omega_V = \frac{v}{\rho_V} \quad (2.3.1.2)$$

Pomoću Vajskopfovog radijusa može se definisati efektivna zapremina interakcije reda ρ_V^3 , unutar koje se nalazi

$$N\rho_V^3 = g \quad (2.3.1.3)$$

čestica. Parametar g je mera parnosti (binernosti) sudara. Ako je

$$g \gg 1 \quad (2.3.1.4)$$

na atom istovremeno dejstvuje veliki broj čestica i kolektivni procesi su značajni. Ako je

$$g \ll 1 \quad (2.3.1.5)$$

sudari su binerni i na atom praktično deluje samo najbliži perturber.

Frekvencija koja karakteriše vreme izmedju sudara γ takođe se može izraziti pomoću Vajskopfovog radijusa

$$\gamma = Nv\sigma_V = Nv\pi\rho_V^2 \quad (2.3.1.6)$$

gde je σ_V Vajskopfov presek. Zgodno je uočiti da je:

$$g \sim \frac{\gamma}{\Delta\omega_V} \quad (2.3.1.7)$$

Kada je

$$\Delta\omega \ll \Delta\omega_V \quad (2.3.1.8)$$

evolucija zapremine interakcije je povezana sa Vajskopfovim presekom σ_V koji se određuje integralom po ukupnom vremenu suda-
ra od $t = -\infty$ do $t = +\infty$, odnosno završenim sudarima. Ova ob-
last odgovara brzim sudarima i naziva se sudarna.

U oblasti

$$\Delta\omega \gg \Delta\omega_V \quad (2.3.1.9)$$

rezultat (2.3.14) ne zavisi od brzine i u potpunosti je povezan
sa raspodelom statičkog potencijala interakcije. Ova oblast se
naziva kvazistatička.

Na statičkoj granici:

$$\begin{aligned} \Delta\omega &= \frac{V(r)}{\hbar} = \frac{e^2 |z_i^i - z_f^f|}{\hbar r^2} \approx \\ &\approx \frac{3(n_i^2 - n_f^2)e^2 a_0}{2\hbar z r^2} \end{aligned} \quad (2.3.1.10)$$

Ovaj izraz važi u slučaju linearog Štarkovog efekta kod vodonika i njemu sličnih jona. Zakon konzervacije energije daje:

$$\frac{1}{2} mv^2 \approx kT + (Z-1)e^2/r_V \quad (2.3.1.11)$$

Kada je Kulonova interakcija dominantna, možemo da zanemarimo prvi član sa desne strane gornje jednačine i iz (2.3.1.2), (2.3.1.10) (sa $r = r_V$) i (2.3.1.11) može se dobiti (GREENE i COOPER, 1975)

$$\Delta\omega_V \approx \frac{64(Z-1)^2 Z^3 E_H}{27 \hbar (n_i^2 - n_f^2)^3} \quad (2.3.1.12)$$

$$E_H = \frac{e^2}{2a_0} = 13,6 \text{ eV} \quad (2.3.1.13)$$

Za neutralni vodonik ili za slabu Kulonovu interakciju, dobija se (GREEN i COOPER, 1975)

$$\Delta\omega_V \sim \frac{3 \pi kT}{4\hbar(n_i^2 - n_f^2)} \quad (2.3.1.14)$$

U kvazistatičkoj aproksimaciji se pretpostavlja da je vremenska zavisnost mikropolja zanemarljiva. Polje se može smatrati staticnim ako atom gubi koherentnost brže nego što jonsko polje uspeva da se primetno promeni. Uslov (LISICA, 1977):

$$n^2 a_0 / N^{-1/3} \ll 1$$

zahteva da je promena jonskog polja u granicama razmera atoma mala. Za vodonikove linije sa $n = 3, 4, 5$ gornja jednačina je ekivalentna uslovu (LISICA, 1977):

$$N \gg 10^{14} \text{ cm}^{-3}$$

Efekti toplotnog kretanja jona, (usled čega se javljaju fluktuacije jonskog polja) ograničavaju primenu Holcmarkove teorije na visokim temperaturama. Na niskim temperaturama primenu Holcmarkove teorije ograničava zahtev da je srednje rastojanje izmedju jona mnogo manje od Debajevog radijusa plazme pošto će inače postati značajne korelacije izmedju jona. Broj čestica N_D u Debajevoj sferi, jednak je α^{-3} gde je parametar α jednak odnosu srednjeg rastojanja izmedju jona i Debajevog radijusa

$$\alpha = 0,0898 N^{1/6} T^{-1/2}$$

Uslov primene Holcmarkove teorije je $N_D \gg 1$.

2.4. Sudarna aproksimacija

Sada ćemo razmotriti sudarnu aproksimaciju, koja važi za širenje linija izazvano sudarima sa brzim česticama. To su obično elektroni za koje je praktično uvek (izuzev dalekih krila linije) parametar binernosti $g \gg 1$.

U teorijama sudara se od početka uzimaju u obzir neadijabatski prelazi, tako da "no quenching" aproksimacija nije potrebna. Usled toga, nije neophodan ni operator hronološkog poretku 0 u (2.1.14). Tetradski operator u_1 (2.1.14) se sada može uprostiti koristeći aproksimacije teorije sudara. Zanemaruju se detalji vremenske zavisnosti perturbovane talasne funkcije emitera i posmatraju se samo njene promene po završenom sudaru. Pošto su perturbujuće čestice po pretpostavci brze, može se zanemariti stvarno trajanje sudara i smatrati da su oni trenutni. Odnosno, nas interesuju vremenski intervali Δt koji su veliki u odnosu na trajanje sudara (ρ/v) a mali u odnosu na vreme izmedju sudara (2.3.1.4):

$$\rho/v \ll \Delta t \ll \gamma^{-1} \quad (2.4.1)$$

Stavlјajući u (2.4.1) izraz (2.3.1.4) i uvezši u obzir (2.3.1.3), vidimo da su uslovi (2.4.1) zadovoljeni ako je:

$$g \gg 1$$

Razmotrimo promenu tetradskog operatora vremenske evolucije u_1 za vreme Δt uvezši za početak vremenske skale momenat kada je perturber najbliži atomu:

$$\begin{aligned}\Delta u_1(t,0) &= u_1(t+\Delta t,0) - u_1(t,0) = \\ &= [u_1(t+\Delta t,t) - 1] u_1(t,0)\end{aligned}\quad (2.4.2)$$

Pošto je $\Delta t \gg \rho/v$, priraštaj operatora u_1 u vremenskom intervalu $(t, t + \Delta t)$ ne zavisi od vrednosti $u_1(t,0)$ i dva množitelja na desnoj strani (2.4.2) su međusobno statistički nezavisna i mogu se usrednjiti posebno po parametrima sudara. Pošto je srednje vreme sudara mnogo manje od Δt , uzećemo u obzir sve sudare za koje trenutak kada su najbliži atomu, t_0 , pada u interval vremena $(t, t + \Delta t)$. Ostale sudare ćemo zanemariti. Za sudar koji je uzet u obzir može se pisati:

$$\begin{aligned}u_1(t+\Delta t,t) &= S_i^{(+\infty, -\infty)} S_f^{*(+\infty, -\infty)} = \\ &= e^{iH_a^i t/\hbar} S_i e^{-iH_a^i t/\hbar} e^{-iH_a^f t/\hbar} S_f^* e^{iH_a^f t/\hbar}\end{aligned}\quad (2.4.3)$$

Ovde je $S(+\infty, -\infty)$ matrica rasejanja ili S matrica (MESSIAH, 1961). Ako sa f_j označimo učestanost sudara tipa j prvi član na desnoj strani izraza (2.4.2) se može usrednjiti na sledeći način:

$$\begin{aligned}[u_1(t+\Delta t,t)-1]_{sr} &= e^{i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} \sum_j f_j (S_i S_f^* - 1) e^{-i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} \Delta t = \\ &= e^{i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} \phi e^{-i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} \Delta t \\ &= \frac{1}{i\hbar} e^{i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} K e^{-i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} \Delta t\end{aligned}\quad (2.4.4)$$

U gornjim jednačinama ϕ je operator sudarnog širenja koji su uveli KOLB i GRIEM (1958), a K BARANGER-ov (1958a, 1958b, 1958c) Hamiltonijan efektivne perturbacije.

Uzevši u obzir (2.4.4), rešenje dinamičke jednačine (2.4.2) usrednjeno po parametrima sudara je:

$$\frac{ih\Delta u_{sr}(t,0)}{\Delta t} = e^{i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} K e^{-i(H_a^i - H_a^f)t/\hbar} u_1 sr(t,0) \quad (2.4.5)$$

Koristeći izraz (2.1.8) i (2.4.5) vidimo da je:

$$[T_a(t) T_a^*(t)]_{sr} = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (H_a^i - H_a^f + K)t\right] \quad (2.4.6)$$

odnosno, širenje linija u sudarnoj aproksimaciji se može opisati dodavanjem Hamiltonijana efektivne perturbacije neperturbovanom Hamiltonijanu emitera. Na taj način, zadatak o tačnom računanju tetradskog operatora vremenske evolucije $u_1(t)$, svodi se u suđarnim teorijama na račun prostijeg operatora sudarnog širenja ϕ :

$$\phi = \sum_j f_j (S_i S_f^* - 1) \quad (2.4.7)$$

Učestanost sudara sa perturberom čiji se sudarni parametar ρ i brzina v nalaze u intervalima $\rho, \rho + d\rho$, i $v, v + dv$ je:

$$df = 2\pi N f(v) \rho v d\rho dv \quad (2.4.8)$$

gde je $f(v)$ funkcija raspodele po brzinama. Mi ćemo pretpostaviti da je to Maksvelova funkcija raspodele

$$f(v) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2kT} \quad (2.4.9)$$

tako da se operator sudarnog širenja može napisati u obliku:

$$\phi = N \int_0^\infty v f(v) dv \int_0^\infty 2\pi \rho d\rho \{S_i S_f^* - 1\} \quad (2.4.10)$$

Takozvana generalisana sudarna aproksimacija u unificiranom prilazu dobija se ako u (2.1.24) stavimo $L(0)$ umesto $L(\Delta\omega_{op})$. U okviru teorije sudara, oblik linije se može dobiti takodje pomoću izraza (2.1.24), ali kada se umesto $L(\Delta\omega_{op})$ stavi frekventno nezavisan operator sudarnog širenja ϕ (2.4.10). Kada su ϕ i K dijagonalne matrice u linijskom prostoru, odnosno kada je oblik linije Lorencov to jest važi jednačina (2.2.7) polupoluširina w i pomeraj d linije su

$$w = - \frac{1}{\hbar} \text{Im} \langle if | K | if \rangle = - \text{Re} \langle if | \phi | if \rangle \quad (2.4.11)$$

$$d = \frac{1}{\hbar} \text{Re} \langle if | K | if \rangle = - \text{Im} \langle if | \phi | if \rangle \quad (2.3.12)$$

što se lako dobija iz (2.1.22) i (2.2.7). Jednačine (2.4.11) i (2.4.12) pretstavljaju osnovne rezultate sudarne aproksimacije pomoću kojih se raznim teorijskim prilazima (na primer GBKO, 1962; COOPER i OERTEL, 1967, 1969) mogu dobiti parametri w i d koji određuju Lorencov oblik linije.

2.4.1. Uslovi važenja sudarne aproksimacije

Sudarna aproksimacija pretstavlja u osnovi visokotemperaturnu granicu i granicu malih gustina opšte teorije, dok je kvazistatička aproksimacija granica visokih gustina i niskim temperaturama. Osnovni zahtevi koji moraju biti ispunjeni kod svake teorije u oblasti važenja sudarne aproksimacije je da je tipičan sudar slab i da se jaki sudari ne preklapaju u vremenu. Takodje je slab sudar zanemarljiv u odnosu na jaki sa kojim se preklapa u vremenu. Perturberi se mogu smatrati statistički nezavisnim

kvazičesticama i trajanje sudara je dovoljno kratko da detalji njegovog vremenskog razvoja nemaju značaja za širenje linije. Kada su perturberi elektroni, sudarna aproksimacija je, u gotovo svim slučajevima od praktičnog značaja, opravdana u centralnim delovima spektralne linije.

U centralnim delovima linije, obično je za primenljivost sudarne aproksimacije dovoljno ispitati zahtev da je:

$$\Delta\omega = \frac{V(r)}{\hbar} \ll \tau = \frac{\rho}{v} \quad (2.4.1.1)$$

Za atome koji nisu slični vodoniku, srednja energija interakcije u toku sudara, V , može se naći pomoću izraza (SAHAL i VAN REGEMORTER, 1964b)

$$V_{if} = Ze\langle i|\vec{r}|f\rangle \frac{e\vec{x}}{x^3} \quad (2.4.1.2)$$

gde su \vec{x} koordinate perturbera. Koristeći (2.4.1.2) i nalazeći srednju kvadratnu vrednost uslova (2.4.1.1), dobija se:

$$\frac{z^2 e^4}{\hbar^2} \frac{1}{3} \left| \langle i|\vec{r}|f\rangle \right|^2 \frac{1}{\rho^2 v^2} \ll 1 \quad (2.4.1.3)$$

Ako su perturberi elektroni, uvezši u obzir (2.1.1.7) i ako uvedemo Borov radijus a_0

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e^2} \quad (2.4.1.4)$$

i jačinu oscilatora u apsorpciji

$$f_{fi} = \frac{1}{3} \Delta E_{if} \frac{\left| \langle i|\vec{r}|f\rangle \right|^2}{a_0^2} \quad (2.4.1.5)$$

pri čemu je energija izražena u Ridberzima, uslov (2.4.1.3) postaje:

$$\frac{\varepsilon^2 \Delta E_{if}}{f_{fi}} \gg 1 \quad (2.4.1.6)$$

SAHAL i VAN REGEMORTER (1964b) su procenili da je za sudare sa elektronima red veličine tipičnog sudarnog parametra:

$$\rho \sim \frac{N_e^{-1/3}}{100}$$

Uzevši u obzir

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8 kT}{\pi m}}$$

izraz (2.4.1.3) postaje (SAHAL i VAN REGEMORTER, 1964b):

$$\log \frac{\Delta E_{if}}{f_{if}} + \log T_e - \frac{2}{3} \log N_e + 6.2 > 0 \quad (2.4.1.8)$$

U gornjem izrazu E_{if} je u eV, N_e u cm^{-3} , a logaritmi u formuli su dekadni.

II ELEKTRON U POLJU EKSCITOVAROG ATOMA

1. Interakcija dugog dometa izmedju elektrona i ekscitovanog atoma

Pretpostavimo da se elektron čija je brzina u beskonačnosti k , kreće u blizini atoma sa nanelektrisanjem jezgra Z . Uzećemo da se atomsko jezgro (za koje predpostavljamo da je beskonačno teško) nalazi u početku koordinatnog sistema. Atom ima N elektrona čiji su položaji \vec{r}_i , $i = 1, 2, \dots, N$, a položaj elektrona koji se kreće u oblasti uticaja atomskog sistema, \vec{R} . U atomskim jedinicama trenutni potencijal interakcije će biti:

$$V(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -Z/R + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{R}-\vec{r}_i|} \quad (1.1)$$

U slučaju da elektron ne prilazi isuviše blizu atomu ($R > r_i$), izraz (1.1) se može razviti u red po Ležandrovim polinomima. Ako označimo sa θ_i ugao izmedju \vec{R} i \vec{r}_i ,

$$|\vec{R}-\vec{r}_i|^{-1} = \left[R^2 - 2r_i R \cos \theta_i + r_i^2 \right]^{-1/2} \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \frac{r_i^\lambda}{R^{\lambda+1}} P_\lambda(\cos \theta_i) \quad (1.2)$$

$$R > r_i$$

gde su P_λ Ležandrovci polinomi reda λ .

$$P_0(\cos \theta) = 1$$

$$P_1(\cos \theta) = \cos \theta$$

$$P_2(\cos \theta) = (3\cos^2 \theta - 1)/2$$

.....

$$V(\vec{R}, \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = -\frac{Z-N}{R} + \sum_{j=1}^N \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{r_j^{-\lambda}}{R^{\lambda+1}} P_{\lambda}(\cos\theta) \quad (1.3)$$

Približno se može napisati:

$$(r/R)^{\lambda} \approx (n^{*2}/R)^{\lambda} \approx (n^{*2} N^{1/3})^{\lambda} \quad (1.4)$$

gde je n^{*} efektivni glavni kvantni broj razmatranog stanja. Za $N \leq 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, važenje razvoja (1.2) i relativni značaj pojedinih članova reda (1.3) može se pomoću (1.4) grubo proceniti iz nejednačine:

$$(r/R)^{\lambda} \leq (0.005 n^{*2})^{\lambda}$$

Usrednjeni atomski potencijal koji elektron "oseća" na malim brzinama je:

$$\langle V(\vec{R}, \vec{r}) \rangle_{\vec{r}} = V(\vec{R}) = -\frac{Z-N}{R} + \sum_{\lambda=1}^{\infty} \frac{1}{R^{\lambda+1}} \langle r^{\lambda} P_{\lambda}(\cos\theta) \rangle \quad (1.5)$$

gde se \vec{r} odnosi na valentni elektron.

U slučaju da energetski nivoi nisu degenerisani, srednja vrednost dipolnog člana ($\lambda = 1$) je nula, usled simetrije atomskih talasnih funkcija. Vodonik i njemu slični atomski sistemi, u spojlašnjem električnom polju imaju permanentni dipolni momenat P .

$$P = 3n(n_1 - n_2) \quad (1.6)$$

gde su n_1 i n_2 parabolični kvantni brojevi. Kod ovakvih atomskih sistema, dipolni član je različit od nule i usrednjeni dipolni potencijal interakcije je:

$$V_d(R) = 3n(n_1 - n_2)/2R \quad (1.7)$$

Ako je J , kvantni broj ukupnog ugaonog momenta atoma, 0 ili $1/2$, $\lambda = 2$ (kvadrupolni) član je nula, pa se potencijal dugog dometa ponaša u asimptotskoj oblasti kao r^{-5} pošto su članovi sa neparnim λ identički jednaki nuli za neperturbovanu stanju atoma sa nedegenerisanim energetskim nivoima. Dakle neperturbovani potencijal dugog dometa u najboljem slučaju se asimptotski ponaša kao R^{-3} , odnosno R^{-1} za vodoniku slične atome.

1.1. Kulonov potencijal

Ako kretanje u Kulonovom polju, to jest u potencijalu oblika $-Z/R$ opisujemo pomoću talasnih funkcija $\psi_{n,\ell,m}$ u sfernim koordinatama (n, ℓ, m su glavni ugaoni i magnetni kvantni brojevi respektivno), ove funkcije će odgovarati stanjima u kojima uporedno sa ukupnom energijom E imaju zadate vrednosti kvadrat ukupnog ugaonog momenta L^2 i njegova z komponenta L_z .

Za razmatranje kretanja u Kulonovom polju često je pogodnije koristiti paraboličke koordinate ξ, η, φ :

$$x = \sqrt{\xi\eta} \cos\varphi$$

$$y = \sqrt{\xi\eta} \sin\varphi$$

$$z = \frac{1}{2} (\xi - \eta)$$

Svako stacionarno stanje diskretnog spektra određuje se u paraboličkim koordinatama sa tri cela broja, paraboličkim kvantnim brojevima n_1 i n_2 i magnetnim kvantnim brojem m .

$$n_1 = -\frac{|m|+1}{2} + n\beta_1$$

$$n_2 = -\frac{|m|+1}{2} + n\beta_2$$

$$n = n_1 + n_2 + |m| + 1$$

$$\beta_1 + \beta_2 = 1$$

za dato $n, |m|$ ide od 0 do $n - 1$ a za dato n i $|m|$, n_1 ili n_2 ide od 0 do $n - |m| - 1$ a n_2 ili n_1 se onda odredjuje iz gornjih relacija kao ceo nenegativan broj.

Talasne funkcije u paraboličkim koordinatama, za razliku od onih u sfernim, nisu simetrične u odnosu na ravan $z = 0$. Za $n_1 > n_2$ verovatnoća nalaženja čestice na strani $z > 0$ veća je od one na strani $z < 0$ a za $n_1 < n_2$ obrnuto. Ovo je pogodno za proučavanje atoma u spoljašnjem električnom polju, koje unosi asimetriju u posmatrani problem.

Pri klasičnom kretanju čestice u Kulonovom polju, važi specifični za ovo polje zakon održanja:

$$[\vec{p}x\vec{L} - \vec{L}x\vec{p}] - \vec{r}/r = \text{const} = \vec{A} \quad (1.1.1.)$$

\vec{A} je vektor Runge-Lenca pri čemu je \vec{p} vektor impulsa čestice koja se kreće u polju atoma. Tri komponente ovog vektora ne mogu istovremeno imati odredjene vrednosti jer su \hat{A}_x, \hat{A}_y , i \hat{A}_z ne-komutativni. Operator \hat{A}_z komutira (kao i z komponenta svakog vektora) sa \hat{L}_z ali ne komutira sa \hat{L}^2 . Postojanje zakona održanja za novu veličinu, koja ne komutira sa drugim veličinama koje se održavaju dovodi do dopunske degeneracije nivoa (LANDAU i LIFSHITZ, 1965).

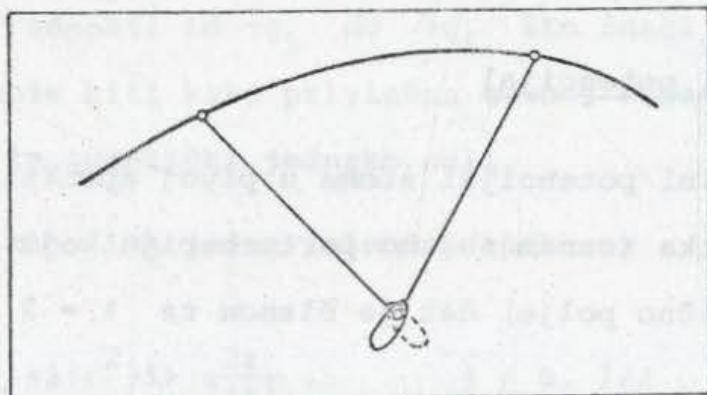
Talasne funkcije $\psi_{n_1, n_2, m}$ u paraboličkim koordinatama opisuju stacionarna stanja u kojima odredjene vrednosti imaju L_z

i A_z . Može se pokazati (LANDAU i LIFSHITZ, 1965), da je A_z odredjeno kvantnim brojevima n_1 , n_2 i n .

$$A_z = (n_2 - n_1)/n \quad (1.1.2)$$

1.2. Polarizacioni potencijal

Prethodno razmatranje važi kada se zanemari distorzija atoma pod uticajem spoljašnjeg električnog polja. U našem slučaju, na atom deluje Kulonovo polje (po pretpostavci slabo) udarnog elektrona. Ako ovo polje shvatimo kao perturbaciju i upotrebimo standardnu metodu perturbacionog razvitička (LANDAU i LIFSHITZ, 1965), potencijal (1.5) predstavlja prvu aproksimaciju (neperturbovan slučaj). U drugoj aproksimaciji možemo da smatramo da se atom polarizuje u pravcu perturbujućeg elektrona i da stvoreni dipol "prati" njegovo kretanje (sl. 3). Polarizacija atoma se kvantomehanički može posmatrati kao niz virtuelnih prelaza sa pojedinog nivoa (osnovnog ili eksitovanog) u druga eksitovana stanja. Možemo uvesti efektivnu polarizabilnost α koja je na



Sl. 3. Polarizacija atoma pod uticajem perturbera.

primer za i-to stanje (DAMBURG i GELTMAN, 1968):

$$\alpha = \frac{2}{3} \sum_n \frac{|\langle i | r | n \rangle|^2}{E_n - E_i} \quad (1.2.1)$$

Uzeti su u obzir virtuelni prelazi na više i na niže energetske nivoe, tako da α može biti kako pozitivna tako i negativna veličina.

Polje ovog dipola deluje na perturbujući elektron takozvanim polarizacionim potencijalom koji se asymptotski ponaša kao:

$$V_p(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{\alpha}{2r^4} \quad (1.2.2)$$

U slučaju vodonikovog atoma efektivna polarizabilnost se dobija u obliku prostor izraza (LANDAU i LIFSHITZ, 1965):

$$\alpha = n^4/8 \left[17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19 \right] \quad (1.2.3)$$

Ova formula može poslužiti kao dobra aproksimacija za vodoniku slične jone ako se umesto n stavi efektivni glavni kvantni broj.

1.3. Kvadrupolni potencijal

Kvadrupolni potencijal atoma u prvoj aproksimaciji perturbacionog razvjeta (zanemarujemo perturbaciju koju unosi slabo spoljašnje električno polje) dat je članom za $\lambda = 2$ jednačine (1.5)

$$V_{q_i}(R) = -\frac{Q_i}{2R^3} \quad (1.3.1)$$

$$Q_i = -\langle i | r^2 | i \rangle \langle i | 3 \cos^2 \theta - 1 | i \rangle \quad (1.3.2)$$

Ako je kvantni broj ukupnog ugaonog momenta atoma J a kvantni broj njegove projekcije na z osu (koju uzimamo tako da prolazi kroz sudarni elektron koji se sporo kreće) M , imamo (LANDAU i LIFSHITZ, 1965):

$$v_{q_i} = \frac{q_i}{2R^3} \frac{J(J+1)-3M^2}{J(2J-1)}$$

$$q_i = \langle i | r^2 | i \rangle \frac{2J-1}{2J+2} \quad (1.3.3)$$

Kvadrupolni momenat atoma q_i je pozitivan broj. Za jedan elektron, $J = \ell \pm 1/2$ i M može imati $\ell + 1$ različitih vrednosti (ako je q_i različito od nule) za pozitivni, odnosno ℓ vrednosti za negativni znak. Znači, za jedno R , v_{q_i} može da ima $(J - 1/2)$ različitih vrednosti u zavisnosti od različitih orijentacija J .

Kvadrupolni koeficijent Q_M^J

$$Q_M^J = q_i \frac{J(J+1)-3M^2}{J(2J-1)} \quad (1.3.4)$$

može da ima vrednosti od $-q_i$ do $+q_i$ što znači da kvadrupolna interakcija može biti kako privlačna tako i odbojna. Ako je $J = 0$ ili $1/2$, Q_M^J je identički jednak nuli.

Ako atom ima jedan valentni elektron

$$Q_\ell = \langle i | r^2 | i \rangle \frac{2\ell}{2\ell+3}, \quad j \neq 0, 1/2 \quad (1.3.5)$$

gde su j i ℓ , odgovarajući kvantni brojevi optičkog elektrona.

Matrični element kvadrata vektora položaja optičkog elektrona dat je približnim izrazom (GRIEM, 1974):

$$\langle i | r^2 | i \rangle = \frac{n^{*2}}{2z^2} [5n^{*2} + l - 3l(l+1)] \quad (1.3.6)$$

U slučaju vodonikovog atoma (LANDAU i LIFSHITZ, 1965):

$$Q = -n^2 [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1] \quad (1.3.7)$$

kao i (1.2.3) i ovaj izraz se može upotrebiti za vodoniku slične jone ako n zamenimo njegovom efektivnom vrednošću.

2. Kretanje elektrona pod uticajem potencijala dugog dometa

Sada ćemo ispitati kretanje elektrona u polju ekscitiranog neutralnog atoma i neeksitiranog i eksitiranog jona. Prilikom razmatranja kretanja u polju eksitirane mete, smatraćemo da važe sledeće pretpostavke:

a) Sudarni parametar elektrona je mnogo veći od srednjeg radijusa eksitirane mete:

$$r_a \approx (n_i^*)^2$$

gde je n_i^* efektivni kvantni broj i-tog eksitovanog stanja.

$$(n_i^*)^2 = C^2 \frac{R_H}{T_{ion} - T_i}$$

$$R_H = 109737.7 \text{ cm}^{-1}$$

C je stanje jonizacije, t.j. nanelektrisanje koje "vidi" optički

elektron, R_H je Ridbergova konstanta, T_{ion} je talasni broj u cm^{-1} koji odgovara ionizacionoj energiji razmatranog sistema, a T_i talasni broj za i-to ekscitovano stanje.

- b) Brzina elektrona je dovoljno mala, da bi, uvezši u obzir a) sudar mogli smatrati adijabatskim.

Ove pretpostavke nam omogućuju, prvo, da upotrebimo asimptotski oblik za potencijal eksitiranog atoma i drugo, da zanemarimo dinamičke efekte (vidi na pr. LABAHN, CALLAWAY 1966) smatrajući da je relativna promena položaja elektrona koji učestvuje u sudaru $|\Delta \vec{R}|/R$ tako spora da joj se atom može prilagoditi adijabatski. To znači, da ako upotrebimo klasičnu sliku, osa polarizacije eksitiranog atoma ostaje u celom toku suda na liniji koja spaja atom i perturbujući elektron.

2.1. Kretanje elektrona u polarizacionom potencijalu

Problem kretanja elektrona u potencijalu oblika

$$V = -\alpha / 2r^4 \quad (2.1.1)$$

može se rešiti klasično i metodama kvantne mehanike (VOGT i WANNIER, 1954). Za razliku od rada VOGT-a i WANNIER-a (1954)) ovde je u analizi obuhvaćen slučaj kada je pored efektivne polarizabilnosti α i srednji dipolni momenat P različit od nule

$$V = -\alpha / 2r^4 + P / 2r^2 \quad (2.1.2)$$

U polarnim koordinatama, Lagranževe jednačine kretanja su:

$$\frac{d^2 r}{dt^2} - r \left(\frac{d\phi}{dt} \right)^2 - \frac{P}{r^3} + \frac{2\alpha}{r^5} = 0 \quad (2.1.3)$$

$$\frac{d}{dt} \left(r^2 \frac{d\phi}{dt} \right) = 0 \quad (2.1.4)$$

U gornjim jednačinama, ϕ je ugaona koordinata. Odmah se iz (2.1.3) može videti da je ukupna energija $E=T+V$ očuvana. Druga jednačina predstavlja zakon održanja ugaonog momenta. Jednačina trajektorije može se dobiti u obliku eliptičkog integrala (GOLDSTEIN 1950).

$$\phi = \rho \int_R^\infty \frac{dr}{\sqrt{r^4 - (\rho^2 + \frac{P}{k^2})r^2 + \frac{\alpha}{k^2}}}, \quad E \equiv \frac{1}{2} k^2 \quad (2.1.5)$$

Tačka u kojoj se elektron najviše približava atomu, r_{min} , određena je najvećim korenom jednačine:

$$\rho \frac{dR}{d\phi} = - \sqrt{r^4 - (\rho^2 + \frac{P}{k^2})r^2 + \frac{\alpha}{k^2}} = 0 \quad (2.1.6)$$

Koreni ove jednačine su:

$$r_{1,2}^2 = \frac{1}{2} (\rho^2 + \frac{P}{k^2}) \pm \sqrt{(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^2 - \frac{4\alpha}{k^2}} \quad (2.1.7)$$

tako da je minimalno rastojanje elektron-atom:

$$r_{min} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\rho^2 + \frac{P}{k^2} + \sqrt{(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^2 - \frac{4\alpha}{k^2}} \right)^{1/2} \quad (2.1.8)$$

Ako u oblasti $r > 0$ postoje oba korena, oblast $r < r_2$ je formalno takodje dozvoljena za elektron u klasičnom tretmanu, ali je nedostupna za česticu koja dolazi iz beskonačnosti pošto ova ne može da prodje kroz oblast $r_2 < r < r_1$ koja je zabranjena u klasičnom postupku.

Iz jednačine (2.1.8) vidimo da postoji jedna kritična

vrednost (ρ_c) sudarnog parametra (ρ) na kojoj je $r_1 = r_2$. Za sudarne parametre manje od ove vrednosti, r_1 i r_2 postaju kompleksni brojevi i ne postoji minimalno rastojanje od centra. Čestica koja dolazi iz beskonačnosti na kraju završava svjeće kretanje u centru.

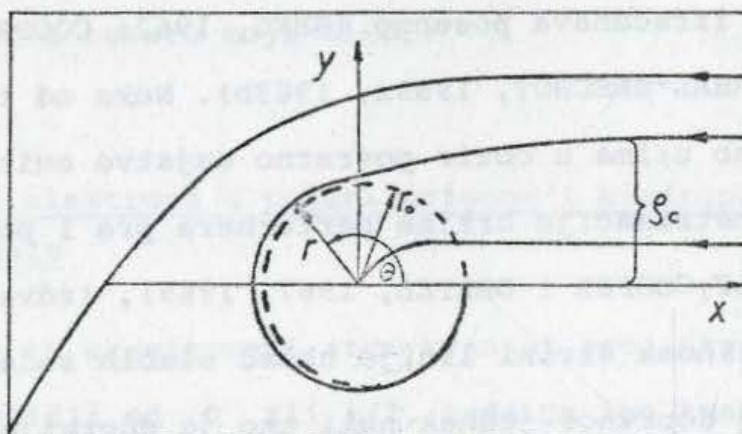
Kritična vrednost sudarnog parametra na kojoj je $r_1=r_2$ je:

$$\rho_c = \sqrt{\frac{2\alpha^{1/2}}{k} - \frac{P}{k^2}} \quad (2.1.9)$$

Za razliku od VOGT, WANNIER-ovog (1954) slučaja ($P = 0$), kada za $\alpha > 0$ uvek postoji ρ_c , kada je $P \neq 0$ ρ_c postoji samo ako brzina dolazećeg elektrona zadovoljava uslov:

$$k > P/2 \sqrt{\alpha}, \quad \alpha > 0 \quad (2.1.10)$$

U slučaju da ovaj uslov nije zadovoljen, dolazeći elektron pada u centar odnosno ~~odigrava~~ ~~zahvat~~ elektrona.



Sl. 4. Kretanje elektrona u polarizacionom potencijalu.

Ako je uslov (2.1.10) zadovoljen i ako je $\rho = \rho_c$, dolazeći elektron završava krećući se asimptotski po "krugu simetrije"

čiji je radijus:

$$r_o = \frac{\alpha^{1/4}}{\sqrt{k}}$$

Rešenja integrala (2.1.5) izražena pomoću eliptičkih integrala prve vrste (ABRAMOVITZ i STEGUN 1964) su:

$$\phi = \frac{1}{r_1} F(\Delta/m), \sin\Delta = \frac{r_1}{r}, m = \frac{r_2^2}{r_1^2}, \rho > \rho_c \text{ ili } k < \frac{P}{2\sqrt{\alpha}}, \alpha > 0 \\ \text{ili } \alpha < 0 \quad (2.1.11)$$

$$\phi = \sqrt{2} \operatorname{arccoth} \frac{r\sqrt{2}}{\rho}, \rho = \rho_c, k > \frac{P}{2\sqrt{\alpha}}, \alpha > 0 \quad (2.1.12)$$

$$\phi = \frac{\rho}{\sqrt{2} \rho_c} F(\Delta/m), \cos\Delta = \frac{2r^2 - \rho_c^2}{2r^2 + \rho_c^2}, m = \frac{1}{2} \left[1 + \left(\frac{\rho}{\rho_c} \right)^2 \right], (\rho < \rho_c) \\ \text{---, } \alpha > 0 \quad (2.1.13)$$

U semiklasičnim teorijama Šarkovog širenja doprinos slabih i jaka-
kih sudara se izračunava posebno (GBKO, 1962; COOPER i OERTEL,
1967, 1969; SAHAL-BRECHOT, 1969a, 1969b). Neke od teorija u koji-
ma se približno uzima u obzir povratno dejstvo emitera na pertur-
ber pomoću simetrizacije brzine perturbera pre i posle sudara
(BARANGER, 1962; COOPER i OERTEL, 1967, 1969), izdvajaju elastične
sudare iz doprinosa širini linije usled slabih sudara uvodeći zah-
tev da je ovaj doprinos jednak nuli ako je energija perturbera
nedovoljna da izazove ekscitaciju na perturbujući nivo.

Efektivna polarizabilnost potrebna za razmatranje dopri-
nosa usled elastičnih sudara dobija se ako u sumi u (1.2.1) zadr-
žimo samo one perturbacione nivoe na koje nije moguć neelastičan

ili superelastičan prelaz, to jest perturbacione nivoe koji zadovoljavaju uslov (SAHAL i VAN REGEMORTER, 1964a):

$$\frac{1}{2} k^2 < E_n - E_i , \quad E_n > E_i \quad (2.1.14)$$

Na taj način, smatra se da je uticaj na efektivnu polarizabilnost perturbacionih nivoa na koje je za datu energiju udarnog elektro-moguć neelastičan ili superelastičan prelaz zanemarljiv, pošto je usled takve mogućnosti verovatnoća elastičnog procesa bitno smanjena.

Efektivna polarizabilnost izračunata prema jednačini (1.2.1) uz uslov (2.1.14) daje dobru procenu polarizabilnosti atoma (DALGARNO, 1962). Ovako dobijeno α je uvek pozitivno i u daljem izlaganju ograničimo se samo na $\alpha > 0$, pošto su samo pozitivne vrednosti efektivne polarizabilnosti od značaja za ovaj rad. Ukoliko je $\alpha < 0$ kritični sudarni parametar ρ_c ne postoji, što se može videti iz izraza (2.1.9) kao i pomoću slika analognih slikama 6 i 8-10 u tekstu koji sledi:

2.2. Kretanje elektrona u polarizacionom i kvadrupolnom potencijalu

Ako je za eksitovani atom kvantni broj ukupnog ugaonog momenta J različit od 0 ili $1/2$, tada on ima kvadrupolni momenat različit od nule. Kvadrupolna interakcija, ako postoji, dominira u asimptotskoj oblasti r . Ali, pošto je α obično mnogo veće od Q , polarizacioni potencijal je značajan i na većim rastojanjima elektrona.

U opštem slučaju, elektron koji se približava neutralnom

ekscitiranom atomu kretaće se u polju potencijala dugog dometa oblika:

$$V(r) = P/2r^2 + Q/2r^3 - \alpha/2r^4$$

gde je sa Q označena projekcija kvadrupolnog momenta atoma na liniju koja spaja njegovo jezgro sa dolazećim elektronom, P srednji dipolni momenat atoma ako je u pitanju vodonik, a α efektivna polarizabilnost atoma ($\alpha > 0$).

Jednačina putanje elektrona se opet svodi na eliptički integral (GOLDSTEIN 1950)

$$\phi = k\rho \int_R^\infty \frac{dr}{\sqrt{k^2 r^4 - (k^2 \rho^2 + P)r^2 - Qr + \alpha}} \quad (2.2.1)$$

Sada je uslov za minimalno rastojanje elektrona od atoma

$$k^2 r^4 - (k^2 \rho^2 + P)r^2 - Qr + \alpha = 0 \quad (2.2.2)$$

Da bi utvrdili da li postoji minimalno rastojanje, ne mora se rešavati gornja jednačina već se može postupiti na sledeći način (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ 1978a).

Prvo ćemo ispitati ponašanje funkcija:

$$f(r) = k^2 r^4 - (k^2 \rho^2 + P)r^2 - Qr + \alpha$$
$$\frac{df}{dr} \equiv g(r) = 4k^2 r^3 - 2(k^2 \rho^2 + P)r - Q \quad (2.2.3)$$

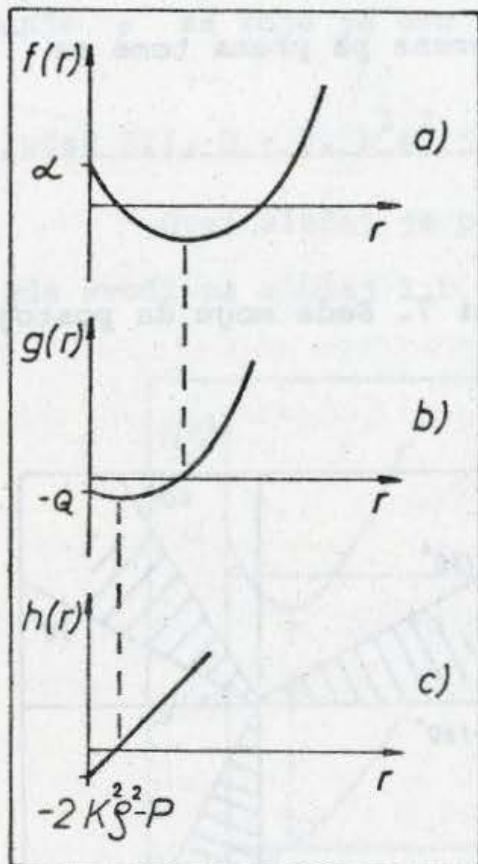
$$\frac{dg}{dr} \equiv h(r) = 12k^2 r^2 - 2(k^2 \rho^2 + P)$$

Sada ćemo razmotriti četiri slučaja koja mogu nastupiti.

Slučaj I: $Q > 0, k^2 \rho^2 > -P$

Na slici 5. su nacrtane funkcije $f(r)$, $g(r)$ i $h(r)$. Rešenje jednačine $g(r) = 0$ zavisi od znaka izraza:

$$\gamma \equiv \frac{Q^2}{64k^4} - (\rho^2 + P/k^2)^3/216 \quad (2.2.4)$$

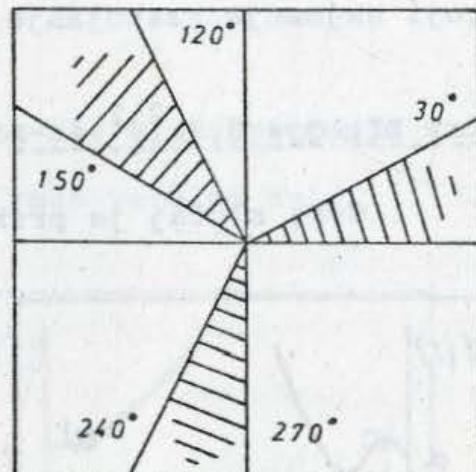


Sl. 5. Ponašanje funkcija f , g i h . Slučaj: $Q > 0$; $k^2 \rho^2 > -P$.

Slučaj a): $\gamma \leq 0$

U tom slučaju $g(r)$ ima tri realna korena (sl. 5b) ali se samo jedan od njih nalazi u pozitivnoj oblasti r (sl. 6).

$$R_0 = \frac{2(\rho^2 + P/k^2)^{1/2}}{\sqrt{6}} \cos \left[\frac{1}{3} \arccos \left[\left(\frac{3}{2} \right)^{3/2} \frac{Q}{k^2 (\rho^2 + P/k^2)^{3/2}} \right] \right] \quad (2.2.5)$$



Sl. 6. Oblasti u kompleksnoj ravni u kojima se mogu nalaziti rešenja R_n u slučaju: $Q > 0$.

Slučaj b): $\gamma > 0$

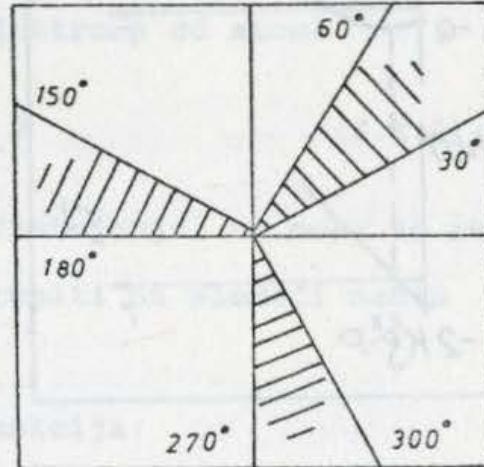
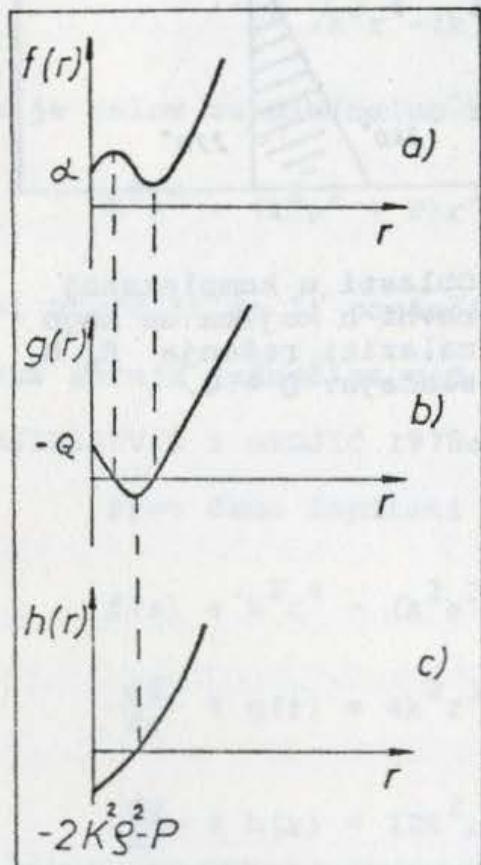
Postoji samo jedan realan koren.

$$R_1 = \left[\frac{Q}{8k^2} + \gamma \right]^{1/3} + \left[\frac{Q}{8k^2} - \gamma \right]^{1/3} \quad (2.2.6)$$

Položaj korena određuje minimum funkcije $f(r)$. Ako je $f(R)$ pozitivna (sl. 5a), ona nema pozitivnih korena pa prema tome ne postoji najmanje rastojanje R .

Slučaj II: $Q < 0$, $k^2 \rho^2 > -P$

Ovaj slučaj je prikazan na slici 7. Sada mogu da postoje



Sl. 8. Oblasti u kompleksnoj ravni u kojima se mogu nalaziti rešenja R_n u slučaju $Q < 0$.

Sl. 7. Ponašanje funkcija f , g i h . Slučaj: $Q > 0$; $k^2 \rho^2 > -P$.

dve pozitivne nule od $g(r)$.

$$R_n = \frac{2(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^{1/2}}{\sqrt{6}} \cos\left\{\frac{1}{3} \operatorname{arc} \cos \left[\frac{(\frac{3}{2})^{3/2}}{k^2(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^{3/2}} \right] + \frac{2n\pi}{3}\right\}$$

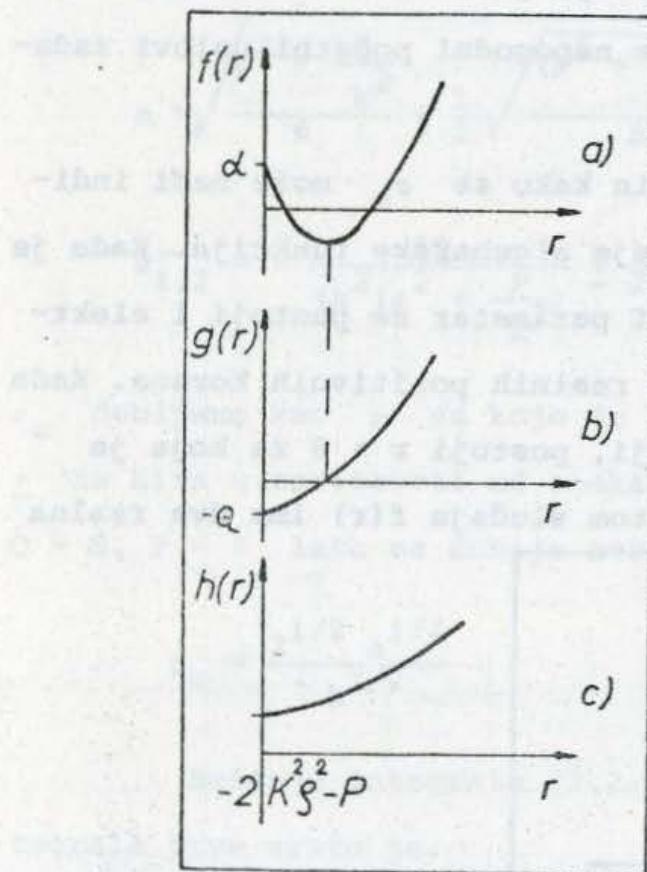
$m = 0, 2$

(2.2.7)

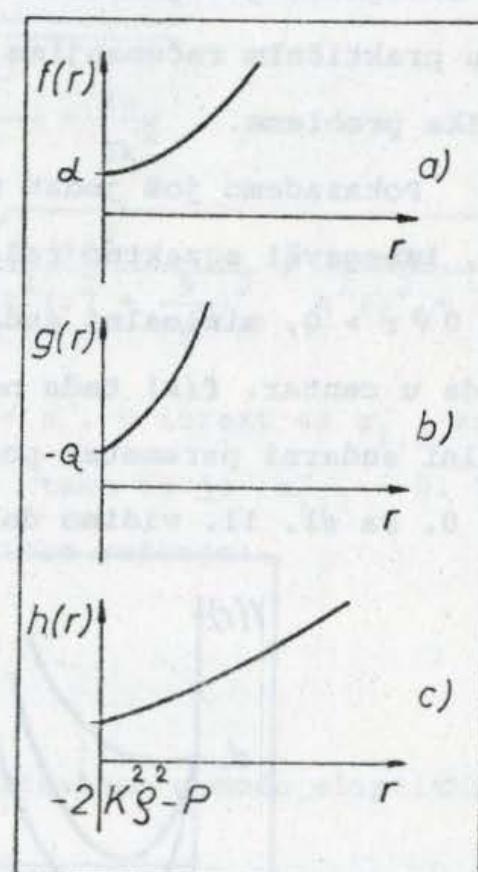
Ali, kako se može videti sa sl. 8 R_0 je uvek veće od R_2 . Sada opet ispitujemo da li je $f(R_0)$ pozitivno i uzimamo kao ρ_c najmanje ρ za koje je ovo zadovoljeno.

Slučaj III, $Q > 0, k^2 \rho^2 < -P$

Ovaj slučaj je pretstavljen na sl. 9. Razmatranje se sada svodi na slučaj I,b pošto je γ sada veće od nule.



Sl. 9. Ponašanje funkcija f ,
g i h. Slučaj: $Q > 0$;
 $k^2 \rho^2 < -P$.



Sl. 10. Slučaj: $Q < 0$;
 $k^2 \rho^2 < -P$.

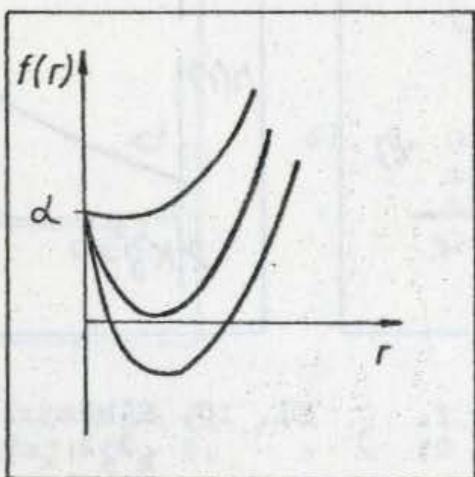
Slučaj IV: $\Omega < 0, k^2 \rho^2 < -P$

U ovom slučaju, kao što se može zaključiti posmatranjem sl. 10. minimalno rastojanje izmedju elektrona i atoma ne postoji. Elektron upada u atom i pod tim uslovima uvek nastaje zahvat elektrona. U ostalim slučajevima, ako postoji ρ_c , čestica za svako $\rho < \rho_c$ na kraju upada u atom. Kritični parametar ρ_c je definisan uslovom:

$$f(R) = F(\rho_c) = 0$$

Lako je ustanoviti, crtajući slike analogne slikama 8 i 10-12, da za $\alpha < 0$, kritični sudarni parametar ne postoji. Gornjim postupkom izbegnuto je egzaktno rešavanje jednačine (2.2.2), što je važno u praktičnim računanjima gde nepogodni početni uslovi zadaju velike probleme.

Pokazaćemo još jedan način kako se ρ_c može naći indirektno, izbegavši egzaktno rešavanje algebarske funkcije. Kada je $f(r) > 0 \forall r > 0$, minimalni sudarni parametar ne postoji i elektron pada u centar. $f(r)$ tada nema realnih pozitivnih korena. Kada minimalni sudarni parametar postoji, postoji $r > 0$ za koje je $f(r) < 0$. Sa sl. 11. vidimo da u tom slučaju $f(r)$ ima dva realna



Sl. 11. Ponašanje funkcije $f(r)$.

pozitivna korena. U graničnom slučaju, $f(r)$ ima dvostruku nulu, odnosno može se predstaviti u obliku:

$$f(r) = (r - a)^2(r^2 + br + c), \quad a > 0 \quad (2.2.8)$$

Uporedjujući koeficijente uz stepene od r u jednačinama (2.2.3) i (2.2.8) dobijamo sistem jednačina iz koga, eliminacijom, dobijamo dve jednačine za jedan od koeficijenata, naprimjer a :

$$a^4 - \frac{\rho^2 + \frac{P}{k^2}}{3} a^2 - \frac{a}{3k^2} = 0$$

$$a^4 + \frac{Q}{2k^2} a - \frac{a}{k^2} = 0$$

Rešenja ovih jednačina su:

$$a = \sqrt{\frac{\rho^2 + \frac{P}{k^2}}{6} + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^2}{9} + \frac{4a}{3k^2}}}$$

$$a'_{1,2} = -\frac{\frac{3Q}{4k^2(\rho^2 + \frac{P}{k^2})}}{k} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{9Q^2}{4k^4(\rho^2 + \frac{P}{k^2})^2} + \frac{8a}{k^2(\rho^2 + \frac{P}{k^2})}}$$

ρ_c dobijamo kao ρ za koje je $a = a'$. U izrazu za $a'_{1,2}$ znak \pm se bira u zavisnosti od znaka Q tako da je $a'_{1,2} > 0$. Za $Q = 0, P = 0$ lako se dobija analitičko rešenje:

$$\rho_c = \frac{2^{1/2} a^{1/4}}{k^{1/2}}$$

Rešenje integrala (2.2.1) izraženo pomoću eliptičkih integrala prve vrste je:

$$\phi(R) = \frac{2k\rho}{\sqrt{(a - b)(b - d)}} [F(v_1, q) - F(v_2, q)]$$

$$v_1 = \arcsin \sqrt{\frac{b-d}{a-d}} \quad (2.2.9)$$

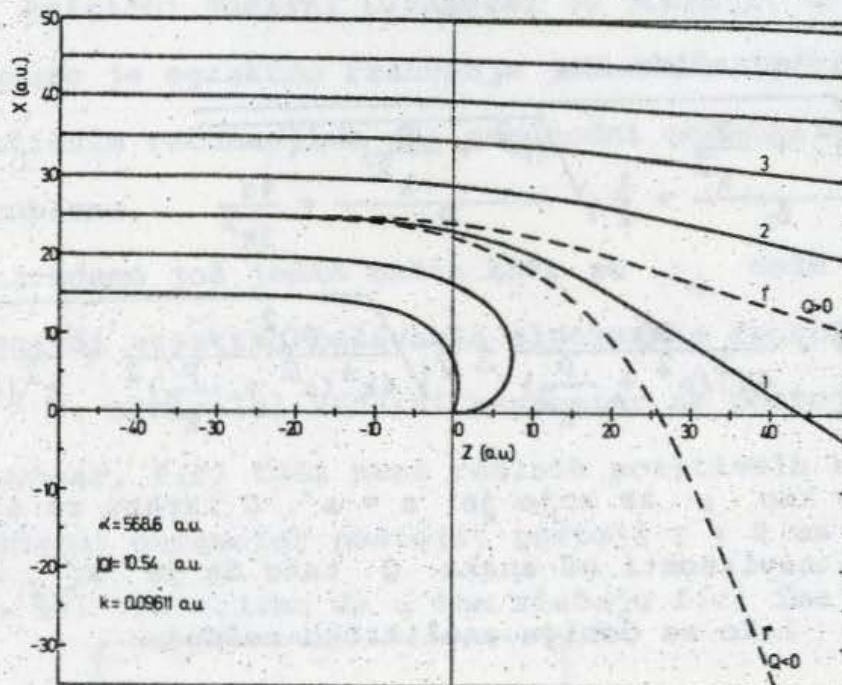
$$v_2 = \arcsin \sqrt{\frac{(b-d)(R-a)}{(a-d)(R-b)}}$$

$$q = \sqrt{\frac{(b-c)(a-d)}{(a-c)(b-d)}}$$

$$R \geq a$$

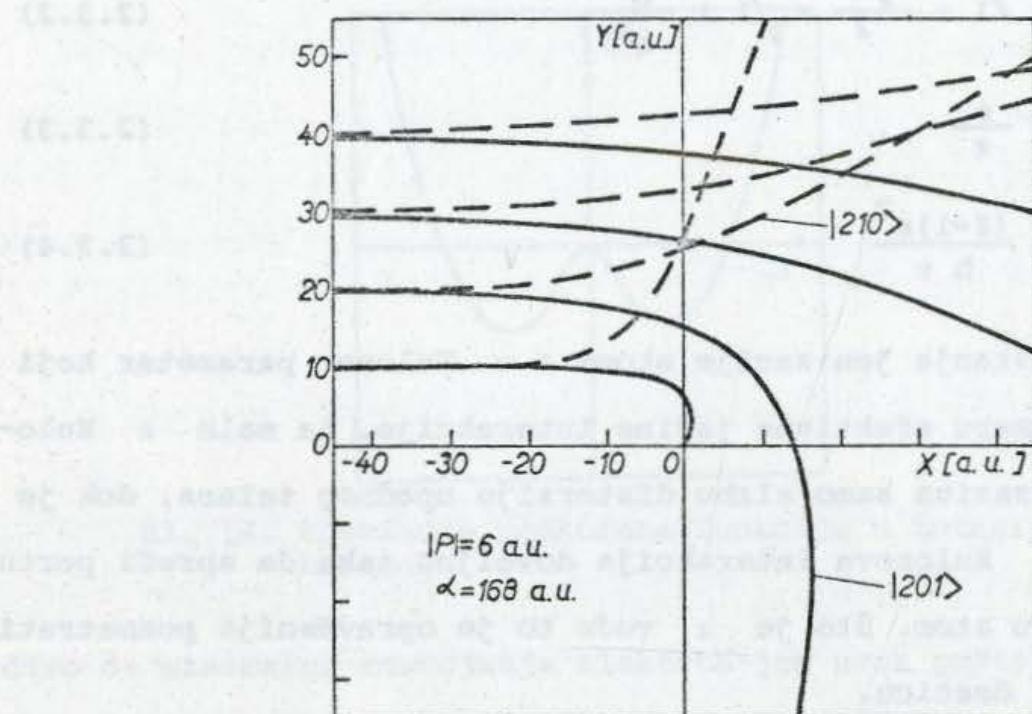
gde su $a > b > c > d$ koreni od $f(r)$.

Kao primer izračunali smo putanje elektrona koji se suda-
ra sa neutralnim atomom azota eksitiranim u stanje $3p^4D^0$
(DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ 1978). Ove putanje date su na sl. 12.



Sl. 12. Putanje elektrona: — u polarizacionom potencijalu; ----- u polarizacionom plus kvadrupolnom. Sve veličine na slici date su u atomskim jedinicama (a.u.)

Na sl. 13. dat je naš proračun (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1977) putanja elektrona u polju atoma vodonika eksitovanog u stanje sa glavnim kvantnim brojem $n = 2$.



Sl. 13. Elektronske putanje u potencijalu dugog dometa koji stvara atom vodonika; — : $P < 0$; - - - : $P > 0$. Brzina elektrona u beskonačnosti je $k = 0.187$ a.u.; $Q = 0$.

Kao što se vidi sa slika 12. i 13. odstupanje od pravolinijske putanje je znatno za male sudarne parametre. Svakako, u realnosti, pravi potencijali postaju odbojni na malim rastojanjima, tako da u prirodi singularnosti na malim rastojanjima od atoma nema.

2.3. Kretanje elektrona u Kulonovom potencijalu

Ako posmatramo elektron kao klasičnu česticu, njegova se putanja u problemima vezanim za širenje linija aproksimira hiperbolom. Ekscentricitet ϵ i velika poluosa a ove hiperbole su:

$$a = \frac{(Z-1)e^2}{\frac{m_e v^2}{2}} = \eta \frac{\frac{m_e v}{\hbar}}{\epsilon} = \frac{\eta}{\epsilon} \quad (2.3.1)$$

$$\epsilon = \sqrt{1 + \frac{\rho^2}{2}} = \sqrt{1 + \frac{L^2}{n^2}} \quad (2.3.2)$$

$$L = \frac{\rho}{\chi} \quad (2.3.3)$$

$$n = \frac{(Z-1)e^2}{\hbar v} \quad (2.3.4)$$

Ovde je Z stanje ionizacije atoma a n Kulonov parametar koji predstavlja meru efektivne jačine interakcije. Za malo n Kulonovo polje izaziva samo slabu distorziju upadnog talasa, dok je za veliko n Kulonova interakcija dovoljno jaka da spreči perturber da udje u atom. Što je n veće to je opravdanije posmatrati elektron kao česticu.

Mi smo ovde izveli egzaktnu klasičnu putanju za kretanje elektrona u potencijalu dugog dometa Kulonovog tipa uvezši u obzir i mogućnost postojanja permanentnog dipola P .

Za kretanje elektrona u potencijalu oblika

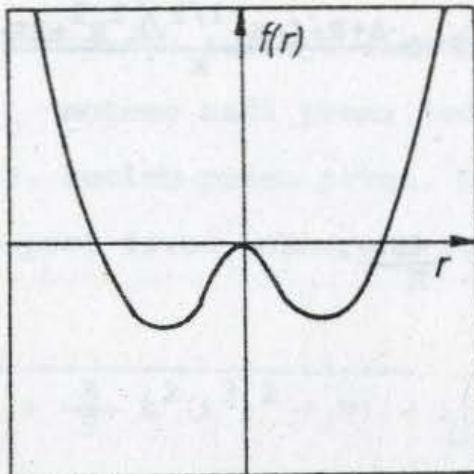
$$V = -1/r + P/2r^2 \quad (2.3.5)$$

jednačina trajektorije u obliku eliptičkog integrala (GOLDSTEIN 1950) je:

$$\phi = k\rho \int_R^\infty \frac{dr}{\sqrt{k^2 r^4 + 2r^3 - (k^2 \rho^2 + P)r^2}} \quad (2.3.6)$$

Podkorena funkcija je prikazana na slici 14. Ona ima dvostruki koren u nuli i još dva korena od kojih je jedan u oblasti pozitivnih r .

$$R_{1,2} = -\frac{1}{k^2} \pm \frac{1}{k^2} \sqrt{1 + k^2(k^2 \rho^2 + P)}$$



Sl. 14. Ponašanje podkorene funkcije u integralu kretanja ϕ .

Vidimo da minimalno rastojanje elektron-jon uvek postoji za $P \geq 0$.

$$R_{\min} = \frac{1}{k^2} \left[\sqrt{1 + k^2 (k^2 \rho_0^2 + P)} - 1 \right]$$

Ako je $P < 0$, za:

$$P \leq -k^2 \rho_0^2$$

elektron će na kraju upasti u atom. Ovo se svakako u prirodi neće desiti, jer kada elektron pridje bliže atomu, postaju značajne sile odbijanja i kvantni efekti. Kritični parametar koji razdvaja putanje elektrona koje završavaju u atomu od ostalih je:

$$\rho_c = \sqrt{-\frac{P}{k^2}}$$

Tačno rešenje integrala (2.3.6) biće za $\beta = k^2 \rho_0^2 + P > 0$

$$\phi(R) = \frac{k_0}{\sqrt{\beta}} \left[\operatorname{arctg} \frac{1}{k\sqrt{\beta}} - \operatorname{arctg} \frac{(R - \beta)}{\sqrt{\beta}, \sqrt{k^2 R^2 + 2R - \beta}} \right]$$

U slučaju da postoji permanentni dipol, i ako je $\beta < 0$

$$\phi(R) = \frac{1}{\sqrt{-\beta}} \left[\ln 2 \left(\frac{-\beta + R + (-\beta)}{k} \right)^{1/2} \sqrt{k^2 R^2 + 2R - \beta} \right] - \ln 2 (1 + k\sqrt{-\beta})$$

Kada $R \rightarrow 0$,

$$\phi(R) \sim \frac{1}{\sqrt{-\beta}} \ln - \frac{4\beta}{R}$$

$$\lim_{R \rightarrow 0} \phi(R) = \infty,$$

odnosno elektron se spiralno približava atomu da bi posle beskonačno mnogo obrtaja upao u njega. To je svakako u prirodi neostvarljiv dogadjaj koji nam ukazuje da za takve vrednosti parametra, posmatrati elektron kao klasičnu česticu u ovoj aproksimaciji nema smisla.

Za $\rho = \rho_c$:

$$\phi(R) = k \left[\sqrt{1 + \frac{2}{k^2 R}} - 1 \right]$$

$$\text{Kada } R \rightarrow 0, \quad \phi(R) \sim \sqrt{\frac{2}{R}} \rightarrow \infty.$$

2.4. Kretanje elektrona u polarizacionom i Kulonovom potencijalu

Mada je u slučaju kretanja čestice u polju jona Kulonov potencijal dominantan na većim rastojanjima od atoma, polarizacioni potencijal, naročito kod jona ekscitiranih u stanje sa visokom efektivnom polarizabilnošću može biti značajan.

Jednačina putanje elektrona je:

$$\phi = k\rho \int_R^\infty \frac{dr}{\sqrt{k^2 r^4 + 2r^3 - (k^2 \rho^2 + P)r^2 + \alpha}} \quad k\rho \int_R^\infty \frac{dr}{R \sqrt{f(r)}} \quad (2.4.1)$$

Minimalno rastojanje izmedju elektrona i jona i kritični sudarni parametar ρ_c možemo naći prema jednom od postupaka izloženih u odeljku 2.2, recimo prema prvom. U slučaju da je $P > 0$, lako se nalazi da je prvi izvod podkorene funkcije $f(r)$ jednak nuli za:

$$R = \frac{3}{4k^2} \left[\sqrt{1 + \frac{8}{9} k^2 (\rho_c^2 + P)} - 1 \right] \quad (2.4.2)$$

R oredjuje položaj minimuma $f(r)$ (videti sl. 5-10). Ako je $f(R)$ pozitivno, $f(r)$ nema korene za $r > 0$ pa ne postoji minimalno rastojanje elektron-atom. Elektron na kraju pada u centar. Kritični parametar je definisan uslovom:

$$f(R) = F(\rho_c) = 0 \quad (2.4.3)$$

U slučaju da je $P < 0$, može se desiti da je $R < 0$ ili čak da R nije realan broj. Iz (2.4.2) sledi da u ovom slučaju ako nije ispunjen uslov:

$$\rho_c^2 > -P/k^2$$

jon na kraju vrši zahvat elektrona.

Rešenje integrala (2.4.1) je dato sa (2.2.9)

2.5. Kretanje elektrona u Kulonovom, polarizacionom i kvadrupolnom potencijalu

U najopštijem slučaju, ako se elektron kreće u polju jo-n na eksitiranog u stanje u kome mu je kvadrupolni momenat različit

od nule, može se desiti da postoje oblasti (naročito na bližim rastojanjima) gde su svi razmatrani potencijali dugog dometa značajni. Elektron se kreće u potencijalu oblika:

$$V = -\frac{1}{r} + \frac{P}{2r^2} + \frac{Q}{2r^3} - \frac{\alpha}{2r^4} \quad (2.5.1)$$

Trajektorija elektrona je data jednačinom (2.4.1), samo je funkcija $f(r)$ sada:

$$f(r) = k^2 r^4 + 2r^3 - (k^2 \rho^2 + P)r^2 - Qr + \alpha \quad (2.5.2)$$

Za utvrđivanje egzistencije i vrednosti ρ_c može nam poslužiti jedan od metoda izloženih u 2.2. Ako se opredelimo za prvi, javiće nam se četiri slučaja u zavisnosti od znakova pojedinih parametara. Slučajevi su detaljno analizirani u odeljku 2.2. i na slikama 5-11, zato ćemo ovde samo generalisati izraz (2.2.4) za γ i izraze (2.2.6) i (2.2.7) za R_n , korene jednačine trećeg stepena koja se dobija kada se izvod funkcije $f(r)$ izjednači sa nulom. Ako označimo

$$p = -\frac{\rho^2}{2} - \frac{P}{2k^2} - \frac{9}{8k^6}$$

$$q = -\frac{Q}{4k^2} - \frac{\rho^2}{4k^2} - \frac{P}{4k^4} + \frac{1}{4k^6}$$

$$\gamma = \frac{3}{27} + \frac{q^2}{4}$$

Minimalno rastojanje elektron - atom (pomoću koga se, koristeći (2.4.3.) može naći ρ_c ako postoji) će biti:

$$R = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \gamma^2} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \gamma^2}, \quad \gamma > 0$$

$$R = 2 \sqrt[2]{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\varphi}{3}, \quad \gamma < 0$$

$$\cos \varphi = -\frac{q}{2} \left(-\frac{p}{3}\right)^{-3/2}$$

Jednačina trajektorije elektrona izražena pomoću eliptičkih integrala prve vrste data je izrazom (2.2.9).

3. Rasejanje elektrona na ekscitovanom atomu

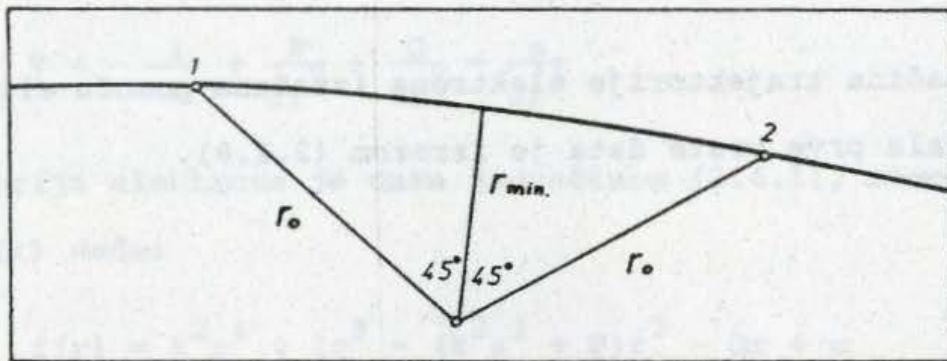
Pretpostavimo da elektron utiče na atom sa kojim se sudara, dok je on poštedjen bilo kakvog uticaja centra rasejanja i kreće se po pravoj putanji. Dobili smo aproksimaciju koja često važi za rasejanje elektrona na neutralnom atomu, naročito ako je ovaj u stanju sa relativno malim kvantnim brojem (videti 1.4). To je dobra aproksimacija i ako je elektron na velikim rastojanjima kada je uticaj multipolnih potencijala mali.

U slučaju kada se elektron rasejava na jonu ova aproksimacija daje veoma slabe rezultate. Povratna sprega jona sa perturbujućim elektronom se uzima u obzir (GRIEM, 1974) modelom u kome se pravolinijske putanje perturbera zamenjuju hiperboličnim. Za veliko n^* i za mala rastojanje izmedju atoma i elektrona, interakcije povezane sa multipolnim momentima počinju da vrše uticaj na putanju perturbera i u slučaju neutralnog emitera.

Kao primer, analizirali smo vreme sudara τ za rasejanje elektrona. Uzeli smo u obzir samo polarizacioni potencijal i vreme sudara definisali kao:

$$\tau = s_{12}/v$$

gde je s_{12} put izmedju tačaka 1 i 2 sa slike 15. Pretpostavimo



Slika 15. Putanja elektrona u polju atoma.

da je $\rho > \rho_c$ i da sudar počinje u tački 1 a završava se u tački 2, posle koje se može zanemariti uticaj perturbera na atom.

Vreme sudara je:

$$\tau = 2 \int_{r_{\min}}^{r_o} \frac{dr}{\sqrt{k^2 - k^2 \rho^2 / r^2 - V(r)}}$$

Ovaj integral smo rešili za slučaj polarizacionog potencijala.

$$r_o = \rho \sqrt{2}$$

$$\beta = \rho_c / \rho$$

$$r_{\min} = \frac{\rho}{\sqrt{2}} \left[1 + \sqrt{1 - \beta^4} \right]^{1/2}$$

$$\tau = \frac{2}{k} r_{\min} \{ F(v, t) - E(v, t) \} + \frac{2}{k} r_o \sqrt{\frac{r_o^2 - r_1^2}{r_o^2 - q^2}}$$

$$v = \arcsin \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 - \beta^4} \right]^{1/2}$$

$$t^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - \beta^4}}{1 + \sqrt{1 - \beta^4}}$$

U slučaju neutralnog azota eksitovanog u stanje $3p^4D^0$, za $k = 0.09611$ a.j. ρ_c je 22.276 a.j.. U blizini ρ_c , recimo za $\rho = 25$ a.j., $\tau = 1.48 \times 10^{-14}$ s dok je za pravolinijske putanje $\tau = 1.26 \times 10^{-14}$ s. Odnosno, vreme sudara je duže ako se uzme u obzir uticaj polarizacionog potencijala.

3.1. Teorija Vogt-a i Wannier-a

VOGT i WANNIER (1954) su izvršili analizu rasejanja nanelektrisane čestice na neutralnom atomu uzimajući u obzir polarizacioni potencijal interakcije oblika (1.2.2). (slučaj kada je srednji dipolni momenat atoma $P = 0$) i to klasično i kvantno mehanički. U klasičnom slučaju, VOGT i WANNIER (1959) su definisali presek za zahvat, odnosno verovatnoću da se nanelektrisana čestica kreće putanjom koja se završava u atomu.

$$\sigma_0 = \pi \rho_c^2 = 2\pi \left(\frac{a}{mv}\right)^{1/2} \quad (3.1.1)$$

Ovde je m masa nanelektrisane čestice.

Talasna jednačina za česticu koja se kreće u potencijalu oblika (1.1.2) je:

$$\nabla^2 \psi + \frac{A^2}{r^4} \psi + \frac{q^2}{A^2} \psi = 0 \quad (3.1.2)$$

gde je

$$A = \sqrt{am}, \quad q = Amv$$

Jednačina za nultu energiju, odnosno kada $q \rightarrow 0$ ima dva rešenja:

$$\begin{aligned}\psi_{0,+} &= e^{iA/r} \\ \psi_{0,-} &= e^{-iA/r}\end{aligned}\quad (3.1.3)$$

koja predstavljaju talase koji idu ka atomu i one koji se udaljavaju od njega. Vrednost A je različita kod elektrona i jona zbog velike razlike u masi usled čega je njihovo ponašanje na veoma malim brzinama različito. U slučaju jona faza talasne funkcije menja se brže nego kod elektrona, odlazeći talas će biti superponiran nekoherentno i rasejavajući centar se može posmatrati kao "ponor". Ako to kod elektrona nije slučaj, trebalo bi uzeti u obzir činjenicu da se privlačni potencijal u stvarnosti uvek završava odbojnim potencijalnim zidom (CASE, 1950).

Ako se centar rasejanja definiše kao "ponor", u blizini centra talasna funkcija se sastoji samo od dolazećih talasa i poнаша se kao:

$$[\psi]_{r \rightarrow 0} \sim e^{iA/r} g(\theta) \quad (3.1.4)$$

Ova činjenica, zajedno sa aproksimacijom talasne funkcije za velika rastojanja od centra rasejanja:

$$[\psi]_{r \rightarrow \infty} \sim e^{iqz/A} + f(\theta) \frac{1}{r} e^{iqr/A} \quad (3.1.5)$$

potpuno određuje talasnu funkciju.

Presek za zahvat, σ_c se dobija izračunavanjem fluksa koji ulazi u ponor i deljenjem rezultata sa gustinom fluksa za ravne talase. Dobijeni rezultat je dva puta veći od klasičnog rezultata.

Za male energije, kada je $q \ll 1$:

$$\psi = e^{i(A/r+qz/A)} \quad (3.1.6)$$

"Strujnice" talasne funkcije za ekstremni kvantni slučaj ($v \rightarrow 0$), prikazan jednačinom (3.1.6), imaju zajedničke osobine sa putanjama elektrona u polarizacionom potencijalu (sl. 14). U oba slučaja su VOGT i WANNIER (1954) našli dve familije putanja odnosno strujnica, one koje se završavaju u atomu i one koje odlaže u beskonačnost, što su činjenice koje ukazuju na mogućnost primene klasičnog postupka u ovoj oblasti. Sem toga, VOGT i WANNIER (1954) su pokazali da kvantno mehanički presek za zahvat osciluje sa malom amplitudom oko klasičnog. Ovaj rezultat pokazuje, da se, izuzev slučaja nulte energije, klasične putanje mogu primeniti u razmatranju nisko energetskih jon-atom sudara.

Na prvi pogled, teorija VOGT-a i WANNIER-a ne izgleda primenljiva u teoriji Štarkovog širenja izazvanog elektronima. Ipak, razmotrimo sledeće činjenice (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a).

1. Ekscitovani atom ima veoma nestabilnu konfiguraciju koja se može znatno poremetiti jakim sudarom. Sem toga, kada je meta u ekscitovanom stanju, superelastični sudar se može desiti čak i kada je energija upadnog elektrona nula. Ma kakva da je suzbina upadnog elektrona, ako je $\rho < \rho_c$ ekscitovana meta će biti jako perturbovana. Svi sudari sa $\rho < \rho_c$ stoga se mogu posmatrati kao jaki.

2. Veličina A u jednačini (3.1.3) ne zavisi samo od mase nanelektrisane čestice nego i od efektivne polarizabilnosti α . Posmatrajmo atom ekscitiran u stanje sa efektivnim glavnim kvantnim brojem n^* . Neka je r_a srednji radijus atomskog sistema.

$$A \sim (n^*)^3 - r_a^{3/2}$$

Na rastojanju $r = r_a$ "period" τ talasne funkcije ψ je:

$$\tau(r_a) = 2\pi r_a^2 / (A - 2\pi r_a)$$

Relativna promena faze talasne funkcije ψ za $r = r_a$ je:

$$\tau(r_a)/r_a = 1/(br_a^{1/2} - 1) \sim 1/n^* b$$

$$b = 1/2\pi$$

Ako je $bn^* \gg 1$, što se može dogoditi za visoko eksitovana stanja, Talasi koji odlaze od centra rasejanja superponiraju se nekoherentno i nema kvalitativne razlike izmedju rasejanja jona i elektrona (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978).

VOGT i WANNIER (1954) su, da bi ilustrovali mogućnost primene postavljene teorije na rasejanje jona i elektrona, izračunali da u slučaju rasejanja helijumovih jona na helijumu parametar A ima vrednost 2×10^{-7} cm, dok je za elektrone koji se kreću u helijumovom gasu $A \approx 6 \times 10^{-9}$ cm. Međutim, ako se posmatra rasejanje elektrona na neutralnom azotu eksitiranom u stanje $3p^4 D^0$, konstanta A ima vrednost 1.26×10^{-7} cm, odnosno bliska je vrednosti A za rasejanje helijumovog jona na helijumu. Ma da se na ovaj slučaj ne mogu u potpunosti primeniti argumenti VOGT-a i WANNIER-a (1954), kao u slučaju helijumovih jona, kada se na rastojanju reda prečnika helijumovog atoma faza talasnih funkcija (3.1.3) menja za nekoliko perioda, ipak ovde promena faze iznosi 4.86. Analogno sa , u teoriji širenja spektralnih linija, prihvaćenim gledištem da je promena faze talasne funkcije emitera

veća od 1 dovoljna da atom prestane da se "seća" svog stanja pre sudara, možemo pretpostaviti da je promena faze talasne funkcije perturbera od 4.86 dovoljna da se talasi koji odlaze od centra rasejanja superponiraju nekoherenčno.

Dakle možemo očekivati da se, u okviru teorije VOGT-a i WANNIER-a (1954), mogu razmatrati sudari elektrona sa atomima.

III ŠIRENJE SPEKTRALNIH LINIJA NA ADIJABATSKOJ GRANICI

Na niskotemperaturnoj granici doprinos sudara koji izazivaju ekscitaciju opada sa opadanjem srednje temperature i na adijabatskoj granici odvijaju se samo elastični, superelastični i jaki sudari.

U praksi se retko ostvaruju uslovi kada je doprinos širenju linije usled adijabatskih sudara jedino bitan, ali bi trebalo istaći nekoliko činjenica zbog kojih je ovaj doprinos možda najinteresantniji i svakako najmanje proučeni deo teorije Šarkovog širenja.

a) Jaki sudari i njihova procena predstavljaju najkritičniji deo teorije širenja usled sudara sa elektronima. Da bi ova činjenica bila ilustrovana, izračunali smo na osnovu tabele II iz rada LESAGE-a, SAHAL BRECHOT i MILLER-a (1977), doprinos slabih i jaka sudara u poluširinu dva multipleta Si II prema teoriji SAHAL BRECHOT (1969a, 1969b) ($2W_{SB}$) u kojoj su uzete u obzir FESHBACH-ove rezonance (LESAGE, SAHAL BRECHOT i MILLER, 1977) i prema postupku JONES-a, BENETT-a i GRIEM-a (1971) ($2W_{JBG}$).

Iz tabele se mogu uočiti dve stvari. Pre svega jaki sudari, koji su, grubo rečeno, adijabatski (CABY-EYRAUD, COULAUD, NGUYEN HOE, 1975) ne samo što se ne mogu zanemariti nego su jednaki doprinosu slabih sudara ili čak dominantni. S druge strane, dok su doprinosi od slabih sudara uporedivi, doprinosi od jaka

sudara se u slučaju multipleta 3 razlikuju za 100% a u slučaju multipleta 1 čak za 200%.

TABELA 1.

Doprinos slabih i jakih sudara u poluširine dva multipleta Si II na $T = 10^4$ K i $N_e = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ u okviru modifikovane teorije SAHAL BRECHOT (1969a, 1969b) (LESAGE, SAHAL - BRECHOT, MILLER, 1977) ($2W_{SB}$) i prema JONES-u, BENETT-u i GRIEM-u (1971) ($2W_{JBG}$)

Mult.	$2W_{SB}$		$2W_{JBG}$	
	slabi	jaki	slabi	jaki
$3p^{22}D - 4p^2P^0$	0.25	0.36	0.36	0.80
(1)				
$3d^2D - 4f^2F^0$	0.50	0.50	0.45	0.92
(3)				

b) Adijabatska aproksimacija je vrlo važna u formiranju GBKO (1962) teorije, u kojoj se rezultat na adijabatskoj granici uzima kao tačan i cela teorija podešava da se na niskim temperaturama poklapa sa adijabatskim rezultatom.

c) U teoriji SAHAL BRECHOT (1969a, 1969b), rezultati adijabatske teorije su inkorporirani i oni daju doprinos usled elastičnih sudara.

d) Kada su efekti dinamike jona važni, i ne mogu se primeniti kvazistatičke teorije, unificirane teorije često razmatraju jone u adijabatskoj aproksimaciji (na pr. BARNARD, COOPER i SMITH, 1974).

e) Sudarna aproksimacija se u retkim slučajevima može

primeniti i na jone. Kada su perturberi protoni, ona se može primeniti na gustinama nižim od 10^{14} cm^{-3} za prve članove serije linija vodonika i vodoniku-sličnih atoma, ako je $T = 10^4 \text{ K}$ (za tačnije granice oblasti primene videti sl.1. str. 11, GRIEM, 1974). Na tim gustinama i temperaturama u pomenutom slučaju su dominantni i međusobno uporedivi Doplerovo i jonsko Štarkovo širenje.

Interesantno je napomenuti da su niske elektronske gustine ($3 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$) mnogo važnije sa astrofizičke tačke gledišta (LECKRONE, 1971). Nedavno je izvršeno posmatranje proširenih rekombinacionih radio-linija jednom jonizovanog ugljenika (OMONT i ENCRENAZ, 1974) u međuzvezdanom oblaku neutralnog vodonika, na $T = 10 \text{ K}$. U radu je zaključeno da je širenje linija izazvano Doplerovim efektom i jonskim sudarnim širenjem, čiji uticaj ide do 20%.

Za višestruko jonizovane emiterne, usled ubrzavanja jonskih perturbera u Kulonovom polju, može se očekivati (GRIEM, 1974, str. 256) da će sudarna aproksimacija važiti i za jone.

U svim slučajevima kada se sudarna aproksimacija može primeniti na jone, može se očekivati da i adijabatska aproksimacija važi. (GRIEM, 1974, str. 95 i 256) pošto su joni usled daleko manje pokretljivosti, manje sposobni da izazovu ekscitacione prelaze.

Treba istaći dve činjenice koje su inherentne u našem adijabatskom pristupu.

a) Pretpostavljen je da je interakcija izmedju emitera i perturbera elastična.

b) Potencijal izmedju perturbera i emitera je lokalan i ne zavisi od brzine.

a) Ova aproksimacija pretstavlja deo usvojenog fizičkog modela. Striktno govoreći, ona važi samo ako ispod gornjeg nivoa izuzev udaljenog donjeg nivoa prelaza, nema perturbujućih nivoa i ako je srednja energija perturbera manja od praga za ekscitaciju najbližeg gornjeg perturbacionog nivoa. Drugim rečima, realan energetski nivo atoma, aproksimiramo strogo izolovanim i nedegegenerisanim nivoom. Kod atoma koji nisu slični vodoniku, M - degeneracija energetskog nivoa se uklanja usrednjavanjem po M stajima (GBKO, 1962). Ova aproksimacija je diskutovana i testirana od strane više autora (STACEY i COOPER, 1971; SMITH, COOPER i ROSZMAN, 1973; BRUECKNER, 1971) ali još nema konkretnih kriterijuma važenja. Ipak, numerička izračunavanja neadijabatskih efekata usled M-degeneracije pokazuju da su oni mali.

U slučaju vodonika, CABY-EYRAUD, COULAUD i HGUYEN HOE (1975) su izračunali verovatnoću za neadijabatski proces usled degenerisanosti vodonikovih energetskih nivoa i našli da je ona zanemarljiva u odnosu na verovatnoću za adijabatski proces na temperaturama i koncentracijama značajnim za laboratorijsku spektroskopiju.

b. Kao što su pokazali mnogi autori (na primer HAYASHI i KUCHITSU, 1977), za opisivanje interakcije izmedju perturbera i emitera može se upotrebiti kvaziadijabatski potencijal koji se za elektrone kao perturbere može dati u obliku (HAYASHI i KUCHITSU, 1977):

$$V(r) = \frac{1}{2r^4} \alpha \left(\frac{v}{r} \right) \left[1 - e^{-(r/c)^6} \right]$$

gde je α takozvana funkcija polarizabilnosti a minimalni su-
darni parametar ξ_c je reda $\langle i | \vec{r} | i \rangle \approx \bar{r}_a$

$$\bar{r}_a = \frac{1}{2} [3n^*{}^2 - \ell(\ell+1)] \quad (1)$$

Uobičajena statička polarizabilnost je $\alpha(0)$ i ona je dobra ap-
roksimacija za $v \ll r$. Pošto je za slabe sudare $r \gg \bar{r}_a$, statička
polarizabilnost se može upotrebiti za

$$v \ll r_a \ll r$$

to jest

$$v \ll \frac{1}{2} [3(n^*)^2 - \ell(\ell+1)] \quad (2)$$

Na primer u slučaju da je $He(1s3s)^1S$ početno stanje linije, ko-
risteći $E = kT$ dobija se $T \ll 10^9 K$. Vidimo da je pod laborato-
rijskim uslovima upotreba statičke polarizabilnosti opravdana. U
slučaju jonskih perturbera uslovi primene statičke polarizabilnos-
ti se još lakše zadovoljavaju.

Pre nego što predjemo na analizu uticaja potencijala du-
gog dometa na Štarkove parametre na adijabatskoj granici, biće
ukratko izložena teorija koja se dobija kada se u opšte jednačine
(I.2.4.10-I.2.4.13) uvede adijabatska aproksimacija.

1. Teorija Lindholm-a i Foley-a

Na adijabatskoj granici, S matrica se može pretstaviti
u obliku

$$\langle i | S | i \rangle = e^{-i\eta_i(p, v)} \quad (1.1)$$

Ovde je fazni pomeraj η funkcija klasične brzine perturbujuće čestice i sudarnog parametra. Ako ovaj izraz stavimo u jednačine (I.2.4.10 - I.2.4.13) i napišemo ih zajedno u obliku:

$$w + id = 2\pi N_e \int v f(v) dv \int \rho d\rho (1 - e^{-in(\rho, v)}) \quad (1.2)$$

dobićemo opšti izraz za širinu i pomeraj linije na adijabatskoj granici. Oblik linije je Lorencov i može se dobiti stavljanjem izraza 1.2. u (I.2.2.7).

Kada bi se doprinos neelastičnih sudara uzeo u obzir imali bismo sa klasične tačke gledišta prigušeni oscilator čija se amplituda ponaša kao (VAN REGEMORTER, 1972):

$$f(t) = e^{i\omega_0 t - in(t-\Gamma/2)t} \quad (1.3)$$

gde je Γ povezano sa opadanjem broja atoma ekscitiranih u dati nivo usled neelastičnih prelaza.

Fazni pomeraj η dat je izrazom:

$$\eta_i = \frac{1}{m} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} V_{ij}(t) dt + \sum_j \frac{|V_{ij}|^2}{\omega_{ij}} \right] \quad (1.4)$$

Zanemarivši povratnu spregu emitera na perturber i ograničivši se na polarizacioni potencijal, to jest na drugi član jednačine (1.4) u koji stavimo prvi član razvoja (II.1.5), za slučaj neutralnog emitera se može staviti:

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{\frac{2}{m} \frac{\ell^2}{r^2}} \quad (1.5)$$

$$\alpha_i = \frac{2}{3} \sum_j \frac{|\langle i | \vec{r} | i \rangle|^2}{\omega_{ij}} \quad (1.6)$$

$$l = mv\rho \quad (1.7)$$

$$C_4 = z_p^2 \frac{\alpha_i}{2} \quad (1.8)$$

$$\eta = \frac{2 C_4}{v} \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{dr}{r^3 \sqrt{r^2 - \rho^2}} \quad (1.9)$$

Integracijom izraza (1.9) se dobija:

$$\eta(\rho) = \frac{2 C_4}{v} \left[\frac{\sqrt{2-\rho^2}}{2\rho^2 r^2} + \frac{1}{2\rho^3} \arccos \frac{\rho}{r} \right] \Big|_{r_{\min}}^{r_{\max}} \quad (1.10)$$

Rezultat LINDHOLM-a (1945) se dobija ako zanemarimo Debajevo ekraniranje i stavimo $r_{\max} \approx \infty$ za r_{\min} uzmemo ρ , što sledi iz pretpostavke o pravolinijskim putanjama perturbera.

$$\eta = \frac{\pi C_4}{2\rho^3 v} \quad (1.11)$$

Razmotrivši (1.8) i (1.11) vidimo da u ovom slučaju nema kvalitativne razlike ako su perturberi elektroni ili jednostruko jonizovani atomi.

Kada izraz (1.11) stavimo u (1.2), parametri Šarkovog širenja linije se lako mogu dobiti pomoću integrala:

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x^{1+\alpha}} (1 - e^{-ix}) = \frac{\pi}{\sin(\alpha\pi)} \frac{e^{i\pi\alpha/2}}{\Gamma(1+\alpha)} \quad (1.12)$$

$$\frac{\pi}{\sin(\alpha\pi)} = \Gamma(1 - \alpha) \Gamma(\alpha) \quad (1.13)$$

Širina i pomeraj u adijabatskoj aproksimaciji, ako prepostavimo da su putanje perturbera (elektrona ili jona) pravolinijske,

odnosno zanemarimo povratnu reakciju emitera na perturber, su:

$$w+id = N_e \left(\frac{\pi}{2}\right)^{5/3} \Gamma(1/3) v_{sr}^{1/3} c_4^{2/3} (1-i\sqrt{3}) \quad (1.14)$$

$$\frac{|d|}{w} = \sqrt{3} \quad (1.15)$$

Prilikom primene gornjih formula, treba proveriti važenje semiklasične i sudarne aproksimacije. Vidimo da je prema izloženoj teoriji odnos pomeraja i širine linije konstantan na adijabatskoj granici. Ideničnost na adijabatskoj granici sa izrazom (1.15) je inherentna GBKO (1962) teoriji.

2. Uticaj potencijala dugog dometa na širinu linije na adijabatskoj granici

2.1. Slučaj neutralnog emitera

2.1.1. Uticaj polarizacionog potencijala

Uticaj povratne reakcije neutralnog emitera na perturber, usled potencijala dugog dometa, zaslužuje posebnu pažnju na nisko-temperaturnoj granici kada sudar traje dovoljno dugo da bi rezultati ove sprege došli do izražaja. Kada ekscitirani neutralni atom nema kvadrupolni momenat različit od nule, u asimptotskoj oblasti je dominantan polarizacioni potencijal. U daljem toku izlaganja ćemo predpostaviti da efektivna dipolna polarizabilnost može uzimati kako pozitivne tako i negativne vrednosti u zavisnosti od raspodele perturbacionih nivoa u (1.6) (DAMBURG, 1969). Na ovaj način nismo izdvojili čisto elastični doprinos u Šarkovu širinu

linije kao na primer SAHAL i VAN REGEMORTER (1964a, 1964b), nego radi kompletnosti izlaganja, formalno dopuštamo mogućnost postojanja virtuelnih deekscitacija. Svakako, ako je na neki nivo istovremeno moguć realan i virtuelan prelaz, verovatnoća virtuelnog je smanjena.

Iz referentnog sistema u kome je centar stvorenog dipola u miru možemo smatrati da dipol deluje privlačnom odnosno odbojnom silom na perturber u zavisnosti od znaka α .

Slučaj a) $\alpha > 0$

U ovom slučaju imamo:

$$n(\rho) = \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{C_4}{r^4} dt \quad (2.1.1.1)$$

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{v^2 - \frac{l^2}{m_p^2 r^2} + \frac{\alpha'}{r^4}} \quad (2.1.1.2)$$

$$\alpha' = \frac{z_p^2}{m_p} \alpha \quad (2.1.1.3)$$

gde je m_p masa perturbera. Minimalno rastojanje izmedju perturbera i atoma je (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978b):

$$r_{\min}^2 = \frac{1}{2} \left[\rho^2 + \sqrt{\rho^4 - \frac{4\alpha'}{v^2}} \right] \quad (2.1.1.4)$$

Tako da je fazni pomeraj:

$$n(\rho) = \frac{2C_4}{v} \frac{1}{ab^2} \{K(t) - E(t)\} \quad (2.1.1.5)$$

U gornjoj jednačini:

$$a = r_{\min}$$

$$b = \{\rho^2/2 \left[1 - \sqrt{1 - \frac{4\alpha'}{v^2\rho^4}} \right]\}^{1/2} \quad (2.1.1.7)$$

$$t = b/a$$

(2.1.1.8)

a $K(t)$ i $E(t)$ su kompletne eliptičke funkcije prve i druge vrste.

Kao što smo videli u odeljku II.2, u ovom slučaju postoje dve familije trajektorija perturbera koje razdvaja kritični sudarni parametar;

$$\rho_C = \frac{(4\alpha')^{1/4}}{\sqrt{v}} \quad (2.1.1.9)$$

Da bi izvršili integraciju po ρ u (1.2) potrebnu za nalaženje Štarkovih parametara, razgraničićemo tri oblasti u kojima može biti vrednost sudarnog parametra.

TRAJEKTORIJE KOJE ZAVRŠAVAJU U CENTRU	TRAJEKTORIJE KOJE SU JAKO ZAKRIVLJENE	PRAVOLINIJSKE TRAJEKTORIJE
0	ρ_C	ρ_1

Sl. 16. Oblasti za sudarni parametar

Za sudarne parametre manje od ρ_C sudari su jaki i perturbacije emitera su takve da naš postupak ne važi. Ove sudare ćemo isključiti iz razmatranja. Njihov uticaj se može proceniti potpuno klasično, zanemarujući u (1.2) član u zagradi.

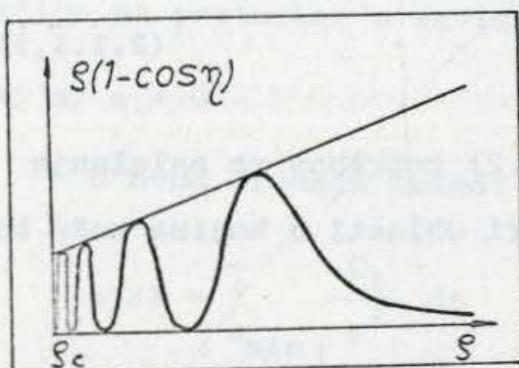
U oblasti $\rho_C < \rho < \rho_1$ putanje perturbera su toliko zakrivljene da su bliske kretanju po orbiti oko emitera. Kada $\rho \rightarrow \rho_C$ fazni pomeraj i ugao rasejanja neograničeno rastu i za $\rho = \rho_C$, η ima logaritamski singularitet (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978b):

$$\eta = -\frac{2\sqrt{2}}{\pi} \eta^{(0)} \ln(\rho^4 - 1) \quad (2.1.1.10)$$

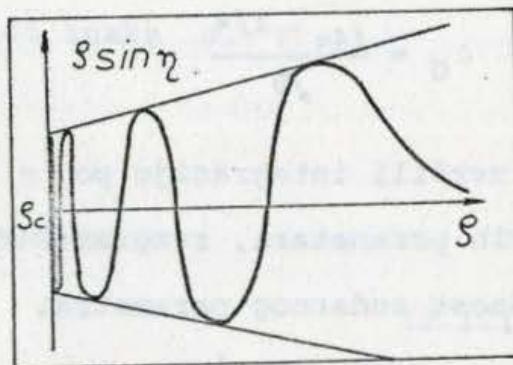
$$\tilde{\rho} = \frac{\rho}{\rho_C}$$

Sa $\eta^{(0)}$ je označen fazni pomeraj za pravolinijske putanje.

Kada η neograničeno raste ($\rho \rightarrow \rho_C$), podintegralna funkcija u (1.2) brzo osciluje (sl. 17,18). Ove oscilacije se mogu usrednjiti i krajnji rezultat je konačna vrednost.



Sl. 17. Oblik podintegralne funkcije u integralu za širinu linije.



Sl. 18. Oblik podintegralne funkcije u integralu za pomak linije.

Pošto se obično može smatrati da je $a_0 \ll \rho_C \leq \rho_1$ (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a), predpostavićemo da je u jednačini (1.2) $\rho_{\min} = \rho_C$. Na osnovu analize u odeljku II.2.1. vidimo da se putanje za $\rho > \rho_1$ neznatno razlikuju od pravolinijskih, odnosno da je $\eta \approx \eta^{(0)}$. Ako stavimo $\rho_{\max} \rightarrow \infty$ dobijemo:

$$w - id = \frac{\pi^{5/3} 2^{1/3}}{3} N_e C_4^{2/3} v^{1/3} \int_0^{\eta_C} (1-e^{in})^{-5/3} dn \quad (2.1.1.12)$$

$$\eta_C = \frac{\pi (4a')^{1/4} \sqrt{v} m_p}{16 \hbar}$$

Kada $v \rightarrow 0$, ρ_C neograničeno raste, pošto za niskoenergetske perturbere sudar traje duže i sa opadanjem brzine raste verovatnoća da i perturberi sa velikim sudarnim parametrima izazovu jak

sudar za koji izloženi postupak ne važi.

Kada $\rho_{\min} \rightarrow \infty$, $n_C \rightarrow 0$ pa se eksponencijalna funkcija pod integralom (2.1.1.12) može razviti u red. Ako se zanemare svi članovi reda osim vodećeg, dobija se (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978b):

$$w - id \approx A \left(\frac{1}{8} n_C - i \right) n_C^{1/3} \quad (2.1.1.14)$$

$$A = \frac{\pi^{5/3} 2^{1/3}}{3} N_p C_4^{2/3} v^{1/3} \quad (2.1.1.15)$$

Kada temperatuta teži nuli, odnos

$$\frac{|d|}{w} \approx \frac{8}{n_C} \quad (2.1.1.16)$$

teži beskonačnosti za razliku od vrednosti $\sqrt{3}$ za pravolinijske putanje perturbera. Ako prilikom integracije u (2.1.1.12) upotrebimo Vajskopfovou donju granicu $n_C = 1$, dobićemo $|d|/w \approx 8$ što se poklapa sa poznatim rezultatom (na pr. UNSOLD, 1955).

Slučaj b) $\alpha_i < 0$

U slučaju negativne efektivne polarizabilnosti, usled odbojnog tipa interakcije, kritični sudarni parametar ne postoji. Integral (2.1.1.1) se može, kao i u slučaju pozitivne efektivne polarizabilnosti, rešiti pomoću eliptičkih integrala prve i druge vrste. Ako, radi lakšeg poređenja rezultata, opet označimo veličinu $(-4\alpha_i)^{1/4} v^{-1/2}$ sa ρ_C , rezultat će biti (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978c):

$$n = \frac{16}{\pi} \tilde{\rho}^4 \sqrt{\beta} \left[E(k) - \frac{\beta+1}{2\beta} K(k) \right] n^{(0)} \quad (2.1.1.17)$$

$$\beta^2 \approx 1 + \tilde{\rho}^{-4} \quad (2.1.1.18)$$

$$k^2 = \frac{\beta-1}{2\beta} \quad (2.1.1.19)$$

Uzevši u obzir da nema potrebe smatrati da maksimalna vrednost ρ u integralu (1.2) teži beskonačnosti (pošto nas interesuje plazma konačne gustine), približavajući se adijabatskoj granici doći ćemo u oblast gde je $\rho_C \gg \rho_{max}$. U ovoj oblasti putanje će se znatno razlikovati od pravolinijskih zbog izraženog defokusirajućeg efekta. Uslov $\rho_C \gg \rho_{max}$ je zadovoljen kada je:

$$v \ll \sqrt{-4\alpha_i'/\rho_{max}^2}$$

Sada se jednačine (2.1.1.17) - (2.1.1.19) svode na (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978c):

$$\beta \rightarrow \rho_C^2 / \rho^2$$

$$k^2 \rightarrow 1/2$$

$$\begin{aligned} \eta &\rightarrow (-4\alpha_i')^{1/4} \sqrt{v} \left[E\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) - \frac{1}{2} K\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right) \right] \frac{m_p}{\hbar} = \\ &= 0.42 (-4\alpha_i')^{1/4} \sqrt{v} \frac{m_p}{\hbar} \end{aligned} \quad (2.1.1.20)$$

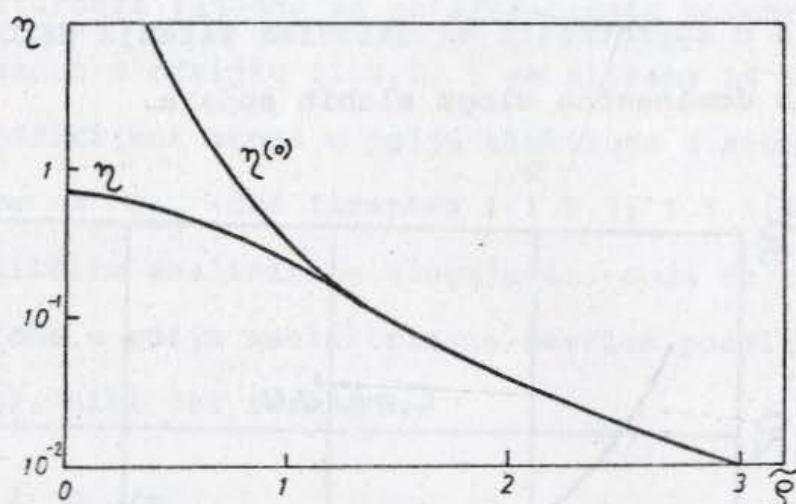
Zamenom izraza (2.1.1.20) u (1.2) dobija se:

$$\frac{|d|}{w} \sim (-\alpha_i')^{-1/4} v^{-1/2} \frac{\hbar}{m_p}, \quad v \rightarrow 0 \quad (2.1.1.21)$$

Gornji rezultat teži beskonačnosti kada $v \rightarrow 0$ kao i u slučaju $\alpha_i > 0$.

Razmotrimo kao primer spektralnu liniju za koju je efektivna polarizabilnost gornjeg nivoa 500 a.j. a koncentracija elektrona 10 cm^{-3} . Na temperaturi od 100 K, zavisnost faznog pomeraja od ρ se drastično menja ako se uzme u obzir uticaj emitera na

putanju perturbera. Kao što se vidi sa sl. 19 fazni pomak za pravolinijske putanje perturbera divergira za $\tilde{\rho} \rightarrow 0$, a kada se uzme u obzir deformacija putanje usled dejstva polarizacionog potencijala teži konačnoj vrednosti.



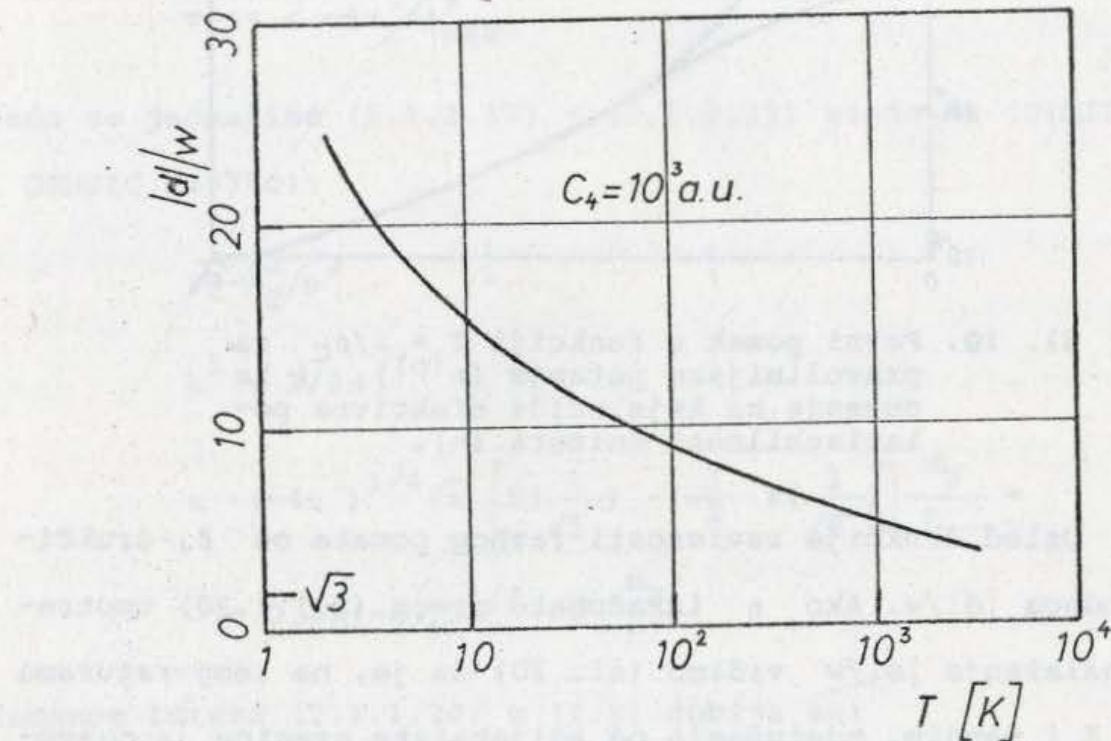
Sl. 19. Fazni pomak u funkciji $\tilde{\rho} = \rho/\rho_C$ za pravolinijske putanje ($\eta^{(0)}$); i za putanje na koje utiče efektivna polarizabilnost emitera (η).

Usled drukčije zavisnosti faznog pomaka od $\tilde{\rho}$, drukčiji je i odnos $|d|/w$. Ako η izračunato prema (2.1.1.20) upotrebimo za nalaženje $|d|/w$ vidimo (sl. 20) da je, na temperaturama reda 10^3 K i manjim, odstupanje od adijabatske granice za pravolinijske putanje perturbera, znatno.

Treba imati na umu da u okviru adijabatskog postupka nisu uzeti u obzir superelastični procesi, koji su za pobudjene atome mogući na svakoj temperaturi, kao ni sudari za koje izloženi postupak ne važi (kada se putanje perturbera završavaju u meti). Ako bi, na primer, poluširini w u (2.1.1.14) dodali "član za jake sudare" $\sim \rho_{\min}^2$ (na pr. GBKO, 1962), dobili bismo suprotan rezultat. Sada se dobija:

$$\frac{|d|}{w} = \frac{\frac{8n_C}{64+n_C}}{2} + \frac{n_C}{8}; v \neq 0 \quad (2.1.1.22)$$

Kada v teži nuli gornji izraz takodje teži nuli kao \sqrt{v} . Ipak, ovakvo uključivanje neelastičnih procesa nije u duhu adijabatskog prilaza. U izrazu (2.1.1.22) važan je jedino član za jake sudare što je u suprotnosti sa uslovima važenja GBKO teorije koja pretpostavlja dominantnu ulogu slabih sudara.



Sl. 20. Odnos pomaka i poluširine linije na adijabatskoj granici.

Uključivanje donjeg nivoa lako je izvršiti zamenom C_4 sa $C_{4i} - C_{4f}$. Međutim doprinos donjeg nivoa širenju linije je manji od doprinsa gornjeg. Sem toga, u toku trajanja elastičnog sudara, ne dolazi do neelastičnog prelaza na donji nivo tako da na putanju perturbera esencijalno utiče samo efektivna polarizabilnost gornjeg nivoa. Zato će uključivanjem donjeg nivoa u razmatranje, a ostati nepromenjeno.

2.1.2. Uticaj polarizacionog i kvadrupolnog potencijala

Kad je kvadrupolni momenat atoma različit od nule, kvadrupolni potencijal neutralnog atoma (II.1.3.1) može da utiče na putanje perturbera zajedno sa polarizacionim potencijalom, kao što je to pokazano u odeljku II.2.2. i na slikama 14 i 15. Ako kvadrupolni koeficijent atoma u polju elektrona u atomskim jedinicama označimo sa Q_{el} (dat izrazima I.1.3.2; I.1.3.4; I.1.3.5; I.1.3.7 za različite analizirane slučajeve), onda će kvadrupolni koeficijent atoma u polju nanelektrisane čestice podeljen sa masom perturbera, (Q), biti dat izrazom:

$$Q = z_p Q_{el} / m_p \quad (2.1.2.1)$$

Kada kritični sudarni parametar postoji (videti analizu u odeljku II.2.2), za izračunavanje parametara Šarkovog širenja na adijabatskoj granici može se upotrebiti postupak prikazan u prethodnom odeljku (izraz 2.1.1.14). Kritični sudarni parametar ρ_C potreban za izračunavanje može se naći jednom od metoda razvijenih u odeljku II.2.2.

Ako kao primer razmotrimo neutralni azot ekscentiran u stanje $3p^4 D^0$ sa najvećim privlačnim kvadrupolnim potencijalom ($Q_{el} = 10.54$ a.j.), možemo uporediti uticaj kvadrupolnog i polarizacionog potencijala na fazni pomak i odnos $|d|/w$. U datom primjeru, uzimanje u obzir kvadrupolnog potencijala povećava odnos $|d|/w$ za faktor 1.32 na $T = 37$ K, dok se odgovarajući kritični sudarni parametri odnose kao 1.1. Uprkos ograničenjima upotrebljenog metoda, ovo ukazuje da se na niskim temperaturama, Šarkovi parametri linija sa različitim ukupnim ugaonim momentom J (i samim

tim različitim Q) mogu razlikovati u okviru istog multipleta. Na temperaturi 2800 K uračunavanje kvadrupolnog potencijala povećava odnos $|d|/w$ za faktor 1.07, dok se odgovarajući kritični sudarni parametri odnose kao 1.02. Dakle na većim temperaturama, razlika Štarkovih parametara spektralnih linija u okviru istog multipleta usled uticaja kvadrupolnog potencijala je zanemarljiva u optičkom delu spektra.

U slučaju kada je $\alpha' > 0$, mogu se koristiti formule (2.1.1.17 - 2.1.1.19) s tim što se ρ_C izračuna jednom od metoda izloženih u odeljku II.2.2.

Izložene metode je moguće primeniti samo ako je uticaj kvadrupolnog potencijala na kritični sudarni parametar dovoljno mali da se može smatrati kao popravka. U suprotnom slučaju bolje je integral (2.1.1.1) računati numerički.

2.2. Slučaj jonizovanog emitera

2.2.1. Uticaj Kulonovog potencijala

U slučaju jonizovanog emitera, zanemarivanje uticaja Kulonovog potencijala na kretanje perturbera dovodi do rezultata za Štarkove parametre, koji za red veličine i više odstupaju od eksperimentalnih vrednosti. Zato je uticaj potencijala dugog dometa Kulonovog tipa u okviru adijabatskog modela detaljno ispitana (SAHAL-BRECHOT i VAN REGEMORTER 1964; ROBERTS i DAVIS, 1967; DAVIS i ROBERTS, 1967). Ovde će se u kratkim crtama izložiti osnovni rezultati pomenutih autora, potrebni za dalje izlaganje.

Ako se uzme u obzir samo uticaj Kulonovog potencijala na

putanju nanelektrisane čestice može se pretpostaviti da se perturber kreće po hiperboli. Označićemo sa ρ_0 sudarni parametar za koji je fazni pomak jednak $\pi/2$

$$\rho_0^3 = C_4/v \quad (2.2.1.1)$$

a sa Z meru odnosa potencijalne i kinetičke energije perburbera

$$Z = z_j/m\rho_0 v^2 \quad (2.2.1.2)$$

gde je z_j nanelektrisanje jona. Rešenje integrala (2.1.1.1) je:

$$\eta(Z, K) = \frac{\pi}{2K^3} \left\{ \left(1 + \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg}(Z/K) \right) \left(\frac{3Z^2}{K^2} + 1 \right) + \frac{6Z}{\pi K} \right\} \quad (2.2.1.3)$$

$$K = \rho/\rho_0$$

Kada $v \rightarrow \infty$ jednačina (2.2.1.3) se svodi na rezultat LINDHOLMA i FOLIJA; kada $v \rightarrow 0$:

$$\eta(Z, K) \rightarrow \frac{3\pi Z^2}{K^3} \equiv \frac{\delta}{\rho^{5/5}} \equiv \frac{\beta}{\rho} \quad (2.2.1.4)$$

Ako jednačinu (2.2.1.4) stavimo u integral (1.2), koristeći (1.12) i (1.13) dobija se:

$$\begin{aligned} w + i|\delta| &= 4\pi N v_{sr} \beta^{2/5} \frac{\pi i^{2/5}}{2 \sin(\frac{2\pi}{5}) \Gamma(\frac{2}{5})} \\ &\approx 4\pi N v_{sr} \beta^{2/5} (0.60 + i 0.44) \end{aligned} \quad (2.2.1.5)$$

pri čemu je

$$\beta \equiv \frac{3\pi z_j^2 C_4}{m^2 v^5}$$

Odnos $|\delta|/w$ opada od brojne vrednosti $\sqrt{3}$ na visokotemperaturnoj

granici (što je rezultat LINDHOLM-FOLIJEVE teorije za pravolinijske putanje) do vrednosti 0.73 na adijabatskoj granici.

2.2.2. Uticaj Kulonovog i polarizacionog potencijala

Uticaj Kulonovog potencijala na putanju nanelektrisane čestice je dominantan u odnosu na druge potencijale dugog dometa, ali na nižim temperaturama raste i uticaj polarizacionog potencijala. Ako u razmatranje uključimo i ovaj potencijal, može se, u zavisnosti od znaka α , javiti kritični sudarni parametar ρ_C . Procenićemo veličinu ρ_C na jednom primeru, metodom razvijenom u odeljku II.2.4. Prvi izvod podkorene funkcije u jednačini putanje elektrona (II.2.4.1) je jednak nuli za:

$$R = \frac{3}{4v^2} \left[\sqrt{1 + \frac{8}{9} v^4 \rho^2} - 1 \right]$$

Ako je:

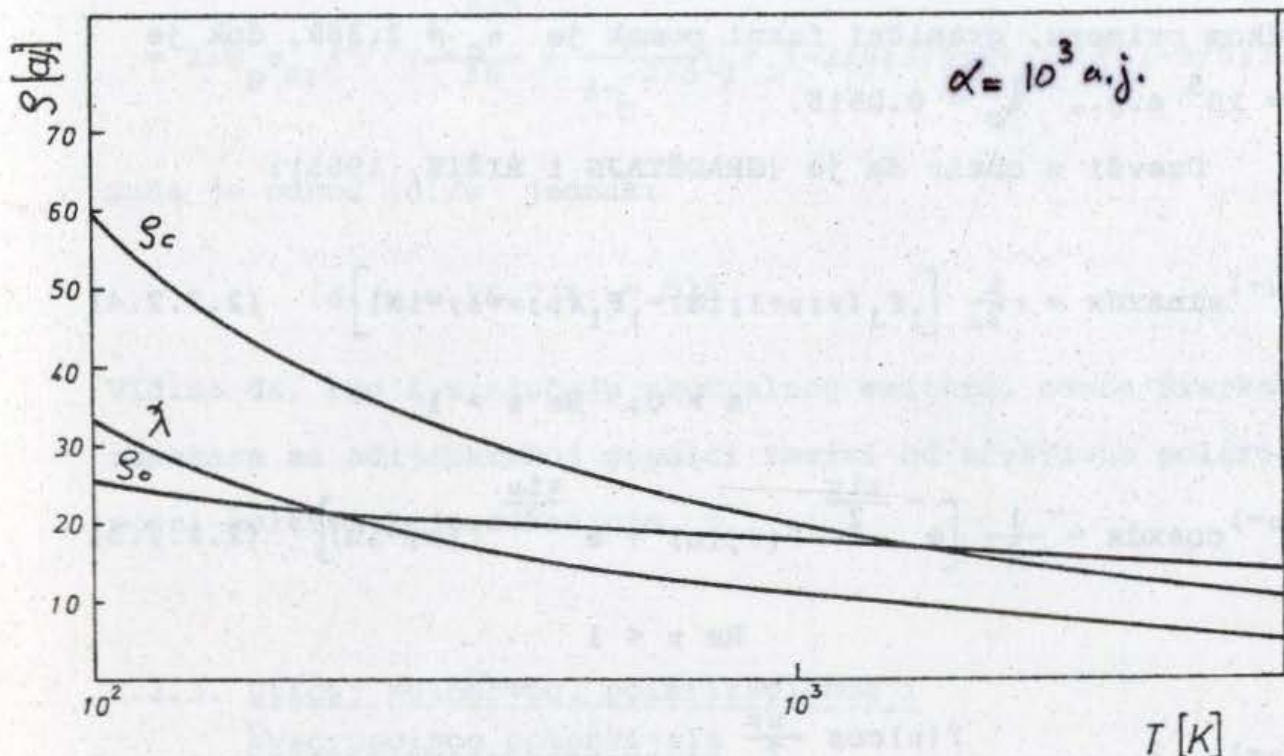
$$T[K] \ll \frac{1.13 \cdot 10^5}{\rho [a.j.]} \quad (2.2.2.1)$$

može se staviti:

$$\begin{aligned} R &\approx \rho^2 v^2 / 3 \\ \rho_C &\approx \frac{3^{1/3} \alpha^{1/6}}{v} \end{aligned} \quad (2.2.2.2)$$

Sa slike 21 i iz (2.2.2.2) vidimo da je ρ_C proporcionalno redukovanoj De Broglijevoj talasnoj dužini elektrona, odnosno da su za $\rho < \rho_C$ sudari jaki i treba pribegi kvantno-mehaničkim procenama. Prilikom integracije po sudarnom parametru u izrazu za w i d (1.2), na temperaturama većim od 5000 K, ρ_C odseca deo za koji je $n > \pi/2$. Doprinos ovog dela je zanemarljiv usled brzih oscila-

cija eksponencijalne funkcije, tako da se može reći da je u razmatranom primeru za $T > 5000 \text{ K}$ uticaj polarizacionog potencijala zanemarljiv



Sl. 21. Redukovana De Broglijeva talasna dužina elektrona λ , kritični sudarni parametar ρ_C i ρ_0 u funkciji temperature.

Da bi procenili ponašanje Štarkovih parametara širenja na adijabatskoj granici, primenićemo postupak razvijen u odeljku 2.2.1. Rešićemo integral (1.2) predpostavljajući da se za $\rho > \rho_C$ putanje neznatno razlikuju od hiperboličnih odnosno da je η dato izrazom (2.2.1.3). Integral (1.2) za poluširinu i pomak linije sada postaje:

$$w - id = \frac{2\pi N}{5} P \frac{\delta^{2/5}}{v} \int_0^{\eta_C} (1 - e^{in}) \eta^{-7/5} d\eta \quad (2.2.2.3)$$

$$\eta_C = \frac{\delta}{\rho_C^{5/5}} = \frac{\delta}{3^{5/3} \alpha^{5/6}}$$

U ovakovom modelu, kada $T \rightarrow 0$ granični fazni pomak η_c ne zavisi od brzine i konačan je za razliku od rezultata ROBERTS-a i DAVIS-a (1967) prema kojima fazni pomak neograničeno raste na niskim temperaturama što nema fizičkog opravdanja. U razmatranom numeričkom primeru, granični fazni pomak je $\eta_c = 2.389$, dok je za $a = 10^5$ a.j., $\eta_c = 0.0515$.

Uvezši u obzir da je (GRADŠTAJN i RIŽIK, 1965):

$$\int_0^1 x^{\mu-1} \sin ax dx = -\frac{i}{2\mu} \left[{}_1F_1(\mu; \mu+1; ia) - {}_1F_1(\mu; \mu+1; -ia) \right] \quad (2.2.2.4)$$

$$a > 0; \quad \operatorname{Re} \mu > 1$$

$$\int_u^\infty x^{\mu-1} \cos ax dx = \frac{1}{2} \left[e^{-\frac{\pi i \mu}{2}} \Gamma(\mu, iu) + e^{\frac{\pi i \mu}{2}} \Gamma(\mu, -iu) \right] \quad (2.2.2.5)$$

$$\operatorname{Re} \mu < 1$$

$$\int_0^\infty x^{\mu-1} \sin^2 ax dx = -\frac{\Gamma(\mu) \cos \frac{\mu \pi}{2}}{2^{\mu+1} a^\mu}, \quad a > 0, -2 < \operatorname{Re} \mu < 0 \quad (2.2.2.6)$$

gde je ${}_1F_1(\alpha, \gamma, z)$ konfluentna hipergeometrijska funkcija a $\Gamma(\alpha, z)$ nepotpuna gama funkcija, rešenje integrala (2.2.3.5) je:

$$w - id = \frac{2\pi}{5} N_p \beta^{2/5} v_{sr} \left\{ \frac{1}{2} e^{i\pi/5} \Gamma(-2/5, i\eta_c) + \frac{1}{2} e^{-i\pi/5} \Gamma(-4/5, -i\eta_c) - \right. \\ \left. - \frac{5}{2\eta_c^{2/5}} + \frac{5}{4\eta_c^{2/5}} \left[{}_1F_1(-2/5; 3/5; i\eta_c) - {}_1F_1(-2/5; 3/5; -i\eta_c) \right] \right\} \quad (2.2.2.7)$$

Numeričke vrednosti nepotpune gama funkcije sa kompleksnim argumentom, potrebne za izračunavanje Štarkovih parametara prema izrazu (2.2.2.7), dobijaju se numeričkim rešavanjem definicionih integrala, što otežava rad pomoću dobijene formule. Za slučaj kada je $a=10^5$ a.j.

$i \eta_C = 0.0515$, integral (2.2.2:3) se može napisati u obliku:

$$w - id = 2\pi N_p v_{sr} \beta^{2/5} \frac{1}{5} \int_0^{\eta_C} \left(\frac{n^{3/5}}{2} - i n^{-7/5} \sin n \right) dn$$

$$= 2\pi N_p v_{sr} \beta^{2/5} \left\{ \frac{\eta_C^{8/5}}{16} + \frac{i}{4\eta_C^{2/5}} [{}_1F_1(-2/5; 3/5; in_C) - {}_1F_1(-2/5; 3/5, -in_C)] \right\}$$

Sada je odnos $|d|/w$ jednak:

$$|d|/w = 26.7/\eta_C = 518$$

Vidimo da, kao i u slučaju neutralnog emitera, odnos Štarkovih parametara na adijabatskoj granici zavisi od efektivne polarizabilnosti emitera koja određuje η_C .

2.2.3. Uticaj Kulonovog, polarizacionog i kvadrupolnog potencijala

U slučaju kada, pored Kulonovog i polarizacionog potencijala, postoji i kvadrupolni potencijal koji se ne može zanemariti, fazni pomak se dobija rešavanjem integrala:

$$\eta(\rho) = \frac{2C_4}{v} \int_{r_{min}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{r^4 - \rho^2 r^2 + \frac{2}{v^2} r^3 - \frac{Q}{v^2} r + \frac{\alpha}{v^2}}}$$

(2.2.3.1)

Ako sa $a > b > c > d$ označimo korene polinoma četvrtog stepena u podintegralnoj funkciji, rešenje integrala (2.2.3.1) je:

$$\begin{aligned}
 \eta(\rho) = & \frac{2C_4}{v} \frac{g}{b^2} \{ F(\varphi, k) + 2 \frac{(b-a)}{a} \Pi(\varphi, \frac{\alpha^2 b}{a}, k) + \\
 & + \frac{(b-a)^2}{2(\alpha^2 b - a)(ak^2 - \alpha^2 b)} \left[\frac{\alpha^2 b}{a} E(\varphi, k) + (k^2 - \frac{\alpha^2 b}{a}) F(\varphi, k) + \right. \\
 & + (2\alpha^2 k^2 \frac{b}{a} + 2 \frac{\alpha^2 b}{a} - \frac{\alpha^4 b^2}{a^2} - 3k^2) \Pi(\varphi, \frac{\alpha^2 b}{a}, k) - \\
 & \left. - \frac{\alpha^4 b^2}{a^2} sn u cn u dn u \right] \} \quad (2.2.3.2)
 \end{aligned}$$

U gornjoj jednačini je:

$$\varphi = \arcsin \sqrt{\frac{b-d}{a-d}}$$

$$g = \frac{2}{\sqrt{(a-c)(b-d)}}$$

$$\alpha^2 = \frac{a-d}{b-d}$$

$$k^2 = \frac{(b-c)(a-d)}{(a-c)(b-d)}$$

$$sn^2 u = (b-d)/(a-d)$$

$F(\varphi, k)$, $E(\varphi, k)$ i $\Pi(\varphi, \alpha, k)$ su eliptički integrali prve, druge i treće vrste a $sn u$, $cn u$ i $dn u$ su Jakobijeve eliptičke funkcije.

Stavljanjem rešenja (2.2.3.2) u integral (1.2) dobijaju se Štarkovi parametri širenja na adijabatskoj granici.

IV ŠIRENJE SPEKTRALNIH LINIJA NA KVAZISTATIČKOJ GRANICI

1. Unificirana teorija Green-a, Cooper-a i Smith-a

Radi lakše analize uticaja potencijala dugog dometa na širinu i pomak linije na kvazistatičkoj granici, koristićemo rotirajući koordinatni sistem u kome se Hamiltonian sprege emitera i perturbera dijagonalizuje (LISICA i ŠOLIN, 1971). U ovakovom koordinatnom sistemu, X osa je stalno upravljena prema elektronu, a Z osa je normalna na ravan u kojoj leži putanja elektrona. Operator vremenskog razvoja u pokretnom koordinatnom sistemu, $U_r(t)$, može se dobiti pomoću operadora vremenski zavisne rotacije $D(\theta(t))$ (EDMONDS, 1960) i operadora vremenskog razvoja u nepokretnom koordinatnom sistemu, $U(t)$ (GREEN, COOPER i SMITH, 1975):

$$U_r(t) = D(\theta(t))U(t) D^{-1}(\theta(t)) \quad (1.1)$$

Ugao $\theta(t)$ je ugao za koji se, u toku vremena t , pomeri osa koja spaja emiter i perturber, pri čemu se kao početak vremenske skale uzima trenutak kada su emiter i perturber najbliži (ovome odgovara ugao θ_0).

Polazeći od izraza (1.1) i dinamičke jednačine za operador U (I.2.1.9), GREEN, COOPER i SMITH (1975) su dobili vremenski uredjeni operator vremenskog razvoja sistema emiter perturber za slučaj vodoniku sličnih jona:

$$U_r(t) = \exp \left[i(L_z - \delta M_x)(\theta(t) - \theta_0) \right] \exp \left[-i L_z (\theta(t) - \theta_0) \right] \quad (1.2)$$

Ovde je L_z , z-komponenta operatora ugaonog momenta atoma a M_x x-komponenta ~~vektora~~ vektora Runge-Lenca normalizovanog na n-ti energetski nivo emitera:

$$M = \left(-\frac{m}{2E_n} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{2m} [\vec{p} \cdot \vec{L}] - \frac{\dot{\vec{r}}}{r} \right] \quad (1.3)$$

Parametar δ je dat izrazom:

$$\delta = \frac{3n}{2Z\ell} \quad (1.4)$$

Ugao $\theta(t) - \theta_0$ se može dobiti iz zakona o očuvanju ugaonog momenta:

$$\ell \equiv m_0 k = mr^2 \dot{\theta} \quad (1.5)$$

(gde je k brzina elektrona u beskonačnosti) tako da je:

$$\theta(t) - \theta_0 = k_p \int_0^t \frac{dt'}{r(t')^2} \quad (1.6)$$

Kada se izraz (1.2) za vremenski uredjen operator vremenskog razvoja zajedno sa izrazima (1.3 - 1.6) unese u opšte jednačine unificirane teorije (I.2.1.1, I.2.1.19, I.2.1.21), dobija se unificirana teorija Šarkovog širenja za vodoniku slične jone GREEN-a, COOPER-a i SMITH-a (1975). Ova teorija je pogodna za razmatranje uticaja emitera na kretanje perturbujuće čestice, pošto eksplicitno uključuje jednačinu putanje perturbera (1.6).

2. Primena na krila linije u slučaju vodonika i vodoniku sličnih jona

Na krilima linije, oblik linije je proporcionalan izrazu

(I.2.3.6) u kome su jonski i elektronski doprinos širenju linije razdvojeni. Medjusobno dejstvo emitera i jona koji ga perturbuje uzima se u obzir prilikom računanja funkcije raspodele jonskog polja $P(E_j)$. U daljem izlaganju, ograničićemo se na razmatranje uticaja potencijala dugog dometa na elektronski doprinos širenju, odnosno na drugi član jednačine (I.2.3.6) koji je jednak:

$-iN \int_0^{\infty} \exp\{u_1(t) - 1\} s_r dt$, pri čemu je:

$$\{u_1(t)-1\}_{sr} = 2\pi \int_0^{\infty} kf(k) dk \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_0^{+2\pi} \frac{d\Omega}{8\pi^2} [u_1(t)-1] \quad (2.1)$$

Integraciju po prostornom uglu Ω tetradskog operatora vremenskog razvoja u nepokretnom koordinatnom sistemu, $u_1(t)$ su analitički izveli GREEN, COOPER i SMITH (1975), kao i jednačine za prelaz iz nepokretnog u pokretni koordinatni sistem. Označimo veličinu koju treba proceniti sa $F(t)$:

$$F(t) = 2\pi N \int_0^{\infty} kf(k) dk \int_0^{\infty} \rho d\rho \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_0^{+2\pi} [u_r(t)-1] \quad (2.2)$$

Operator vremenskog razvoja se može na kvazistatičkoj granici uprostiti (GREEN i COOPER, 1975) koristeći graničnu vrednost izraza (1.6):

$$\theta(t) - \theta_0 \xrightarrow[t \rightarrow 0]{} \frac{\rho k}{r_0^2} t \quad (2.3)$$

gde je $r_0 = r(t=0)$. Uvezši u obzir izraz (2.3), operator vremenskog razvoja (1.2) se, za kratka vremena od interesa, ponaša na sledeći način:

$$u_r(t) \xrightarrow[t \rightarrow 0]{} \exp\left(-\frac{i\delta M_x \rho k t}{r_0^2}\right) \quad (2.4)$$

Ako sa γ označimo:

$$\gamma = -\frac{3}{2Z} (M_x^i - M_x^f) \quad (2.5)$$

dobiće se (GREEN i COOPER, 1975):

$$F(t) \underset{t \rightarrow 0}{\rightarrow} 2\pi N \int_0^\infty k f(k) dk \int_0^\infty \rho dr \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 [\exp\left(\frac{i\gamma t}{r_0}\right) - 1] \quad (2.6)$$

Dobijeni izraz važi na kvazistatičkoj granici i za neutralne i za jonizovane emitere, odnosno i za pravolinijske i za hiperbolične putanje. Ipak, uvodjenje vektora Runge-Lenca u jednačinu (1.2) za operator vremenskog razvoja je ostvareno uz ograničavanje na sistem sopstvenih talasnih funkcija sa fiksiranim značenjem glavnog kvantnog broja (GREEN i COOPER, 1975), tako da izraz (2.6) važi samo za vodonik i vodoniku slične emitere.

U izrazu (2.6) ćemo izvršiti zamenu promenljive t_0 promenljivom r_0 koristeći jednačinu (GOLDSTEIN, 1950):

$$\frac{dr}{dt} = \sqrt{k^2 - \frac{\rho^2 k^2}{r^2} - 2V(r)} \quad (2.7)$$

Gde je $V(r)$ potencijal dugog dometa koji deluje na perturber. Pošto je $r(t)$ ustvari funkcija od $t - t_0$, može se napisati (GREEN i COOPER, 1975):

$$\frac{dr}{dt_0} = -\frac{dr}{dt} \quad (2.8)$$

a za $t = 0$:

$$dt_0 = -\frac{dr_0}{\left[k^2 - \frac{\rho^2 k^2}{r_0^2} - 2V(r_0)\right]^{1/2}} \quad (2.9)$$

Ovde se pretpostavlja da je orbita perturbera simetrična u odnosu na tačku u kojoj su emiter i perturber najbliži, usled čega se prelaskom na nove promenljive javlja faktor 2 u jednačini analognoj jednačini (2.6):

$$F(t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} 4\pi N \int_0^{\infty} kf(k) dk \int_{r_0}^{\rho_{\max}} \frac{\rho d\rho [e^{i\gamma t/r_0^2} - 1]}{\left[k^2 - \frac{\rho^2 k^2}{r_0^2} - 2V(r_0) \right]^{1/2}} \quad (2.10)$$

GREEN i COOPER (1975) su rešili integral (2.10) za slučaj pravolinijskih i hiperboličnih putanja perturbera. U daljem izlaganju uključićemo i ostale razmatrane potencijale dugog dometa, polarizacioni i kvadrupolni.

3. Uticaj polarizacionog i kvadrupolnog potencijala

Razmotrićemo slučaj kada na perturber deluju svi razmatrani potencijali dugog dometa, odnosno ako se kreće u potencijalu oblika (II.2.5.1), i rešićemo integral (2.10) metodom koji su, za slučaj Kulonovog potencijala, razradili GREEN i COOPER (1975).

Prvo ćemo u integralu (2.10) izvršiti integraciju po sudarnom parametru ρ za fiksirano r_0 . Maksimalni sudarni parametar ρ_{\max} definisan je uslovom:

$$\frac{1}{2} k^2 - \frac{\rho^2 k^2}{2r_0^2} - V(r_0) = 0 \quad (3.1)$$

tako da je:

$$\rho_{\max} = \frac{r_0}{k} \sqrt{k^2 - 2V(r_0)} \quad (3.2)$$

Za dato r_o i k integracija se vrši od 0 do ρ_{\max} . Iz izraza (3.2) vidimo da mora biti zadovoljen uslov:

$$k^2 - 2V(r_o) \geq 0 \quad (3.3)$$

Pošto je za slobodna stanja:

$$k^2/2 = v_o^2/2 + V(r_o) \quad (3.4)$$

gde je v_o brzina nanelektrisane čestice u tačci r_o , vidimo da je uslov (3.3) posledica zakona o održanju energije za slobodno-slobodne prelaze. Iz daljeg razmatranja isključujemo vezana stanja, pošto je uslov (3.3) ekvivalentan zahtevu da je:

$$v_o^2/2 = k^2/2 - V(r_o) \geq 0 \quad (3.5)$$

Integracija po sudarnom parametru daje:

$$F(t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} 4\pi N \int_{k_{\min}}^{\infty} 1/k f(k) dk \int_0^{\infty} dr_o r_o^2 \sqrt{k^2 - 2V(r_o)} \left[e^{i\gamma t / r_o^2} - 1 \right] \quad (3.7)$$

gde je k_{\min} definisano uslovom (3.3).

Da bi se izvršila integracija izraza (3.7) po brzini, uvešćemo smenu:

$$u \equiv \left[\frac{k^2 - 2V(r_o)}{2T} \right]^{1/2} \quad (3.8)$$

kojom se integral (3.7) svodi na:

$$F(t) \xrightarrow{t \rightarrow 0} 16\sqrt{\pi} N \int_0^{\infty} r_o^2 dr_o e^{-\frac{V(r_o)}{T}} \left[e^{i\gamma t / r_o^2} - 1 \right] \int_{\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T}}^{\infty} du u^2 e^{-u^2} \quad (3.9)$$

Parcijalnom integracijom izraza (3.9) se dobija:

$$F(t) = 8\sqrt{\pi}N \int_0^\infty \sqrt{\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T}} e^{-\frac{k_{\min}^2}{2T}r_o^2} \left[e^{i\gamma t/r_o^2} - 1 \right] dr_o + \\ + 4\pi N \int_0^\infty e^{-\frac{V(r_o)}{T}} \operatorname{erfc} \left[\sqrt{\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T}} \right] \left[e^{i\gamma t/r_o^2} - 1 \right] dr_o \quad (3.10)$$

gde je erfc komplement funkcije greške, t.j.:

$$\operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-u^2} du \quad (3.11)$$

Za nalaženje profila potrebno je izvršiti Furijeovu transformaciju izraza (3.11). Pošto ovaj izraz važi za $t \gg 0$, njegov Furijeov transformat će važiti za veliko $\Delta\omega$.

$$f(\Delta\omega) \underset{\Delta\omega \rightarrow \infty}{\rightarrow} \int_0^\infty e^{i\Delta\omega t} F(t) dt \\ \underset{\Delta\omega \rightarrow \infty}{\rightarrow} 8\sqrt{\pi}N \int_0^\infty \sqrt{\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T}} e^{-\frac{k_{\min}^2}{2T}r_o^2} dr_o \int_0^\infty dt \{ e^{i[\Delta\omega + \frac{\gamma}{r_o^2}]t} - e^{i\Delta\omega t} \} + \\ + 4\pi N \int_0^\infty r_o^2 e^{-\frac{V(r_o)}{T}} \operatorname{erfc} \left(\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T} \right)^{1/2} dr_o \\ \cdot \int_0^\infty dt \{ e^{i[\Delta\omega + \gamma/r_o^2]t} - e^{i\Delta\omega t} \} \quad (3.12)$$

S obzirom da je:

$$\int_0^\infty e^{iat} dt = \pi\delta(a)$$

i da $\delta(\Delta\omega)$ ne doprinosi konačnom rezultatu, kada $\Delta\omega \rightarrow \infty$, dobiće se:

$$f(\Delta\omega) \underset{\Delta\omega \rightarrow \infty}{\rightarrow} 8\pi^{3/2} N \int_0^\infty \sqrt{\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T}} e^{-\frac{k_{\min}^2}{2T}r_o^2} r_o^2 \delta(\Delta\omega + \frac{\gamma}{r_o^2}) dr_o + \\ + 4\pi^2 N \int_0^\infty r_o^2 e^{-\frac{V(r_o)}{T}} \operatorname{erfc} \left(\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T} \right)^{1/2} \delta(\Delta\omega + \frac{\gamma}{r_o^2}) dr_o \quad (3.13)$$

Ako pretpostavimo da je $\Delta\omega > 0$ biće (GREEN, COOPER, 1975):

$$\delta(\Delta\omega + \frac{\gamma}{r_o^2}) = \frac{r_o^2}{\Delta\omega} \frac{1}{r_o + \sqrt{\frac{|\gamma|}{\Delta\omega}}} \delta(r_o - \sqrt{\frac{|\gamma|}{\Delta\omega}}) \quad (3.14)$$

U slučaju da je $\Delta\omega < 0$ mogli bi da definišemo $\Delta\omega' = -\Delta\omega$ pa bi gornji rezultat opet važio. Ako definišemo parametar x kao:

$$x = \left(\frac{k_{\min}^2 - 2V(r_o)}{2T} \right)^{1/2} \quad r_o = \sqrt{\frac{|\gamma|}{\Delta\omega}} \quad (3.15)$$

izraz (3.13) se može napisati kao:

$$f(\Delta\omega) \underset{\Delta\omega \rightarrow \infty}{\rightarrow} 2\pi^2 N \frac{|\gamma|^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \left[e^{x^2} \operatorname{erfc}(x) t \frac{2}{\sqrt{\pi}} x \right] e^{-\frac{k_{\min}^2}{2T}} \quad (3.16)$$

Analiziraćemo izraz (3.16) za slučajeve kada na perturbujuću česticu emiter ne deluje (pravolinijske putanje) kao i za slučaj Kumanovog, polarizacionog i kvadrupolnog potencijala.

Slučaj I: pravolinijske putanje

U ovom slučaju je:

$$V(r_o) = 0$$

$$k_{\min}^2 = 0$$

$$x = 0$$

$$f(\Delta\omega) = 2\pi^2 N \frac{|\gamma|^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \quad (3.17)$$

Odnosno krila linije podležu $\Delta\omega^{-5/2}$ zavisnosti koju na dalekim krilima predviđa kvazistatička teorija sa pravolinijskim putanjama za perturbere (I.2.3.20).

Slučaj II: hiperbolične putanje

Kada se u obzir uzme samo Kulonov potencijal, onda je:

$$v(r_0) = -1/r_0$$

$$k_{\min}^2 = 0$$

$$x = \left(\frac{\Delta\omega}{T^2 |\gamma|} \right)^{1/4}$$

$$f(\Delta\omega) = 2\pi^2 N \frac{|\gamma|^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \left[e^{-x^2} \operatorname{erfc}(x) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} x \right] \quad (3.18)$$

Kada $x \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$) izraz (3.18) se svodi na jednačinu (3.17) za slučaj pravolinijskih putanja. Međutim kada $x \rightarrow \infty$, $f(\Delta\omega)$ se poнаша kao $\Delta\omega^{-9/4}$ t.j. odstupa od zavisnosti $\Delta\omega^{-5/2}$.

Slučaj III: putanje perturbera pod uticajem razmatranih potencijala dugog dometa.

Kada se svi razmatrani potencijali uzmu u obzir, onda je:

$$v(r_0) = -1/r_0 + P/2r_0^2 + Q/2r_0^3 - \alpha/2r_0^4 \quad (3.19)$$

Razlikovaćemo dva slučaja u zavisnosti od toga da li je k_{\min} različito od nule ili nije.

a. $k_{\min} \neq 0$

Ovaj slučaj je malo verovatan i analiziraće se radi potpunosti. k_{\min}^2 je različito od nule ako dominiraju kvadrupolni član i član sa usrednjениm dipolom ili ako je $\alpha < 0$. U tom slučaju bi, prema izloženoj teoriji atom izvršio zahvat sporog elektrona ($k < k_{\min}$), odnosno elektron bi u položaju kada je najbliži atomu imao negativnu energiju. Sada je:

$$k_{\min}^2 = -2 \sqrt{\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}} + P \frac{\Delta\omega}{|\gamma|} + Q \left(\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}\right)^{3/2} - \alpha \left(\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}\right)^2 \quad (3.20)$$

Za $k > k_{\min}$:

$$f(\Delta\omega) \sim 2\pi^2 N \frac{|\gamma|^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \exp\left(-\frac{k_{\min}^2}{2T}\right) \quad (3.21)$$

Za $\Delta\omega \rightarrow 0$, ($T \rightarrow \infty$), $f(\Delta\omega)$ se svodi na izraz (3.17) za pravolinijske putanje. Kada $\Delta\omega$ neograničeno raste, $f(\Delta\omega)$ se asimptotski ponaša kao:

$$f(\Delta\omega) \sim \Delta\omega^{-5/2} e^{-\alpha/2T \left(\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}\right)^2} \quad (3.22)$$

što odstupa od zakonitosti koju predviđa kvazistatička teorija.

b. $k_{\min} = 0$

Sada je:

$$x^2 = \frac{1}{2T} \left[2 \sqrt{\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}} - P \frac{\Delta\omega}{|\gamma|} - Q \left(\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}\right)^{3/2} + \alpha \left(\frac{\Delta\omega}{|\gamma|}\right)^2 \right] \quad (3.23)$$

$$f(\Delta\omega) = 2\pi^2 N \frac{|\gamma|^{3/2}}{\Delta\omega^{5/2}} \left[e^{x^2} \operatorname{erfc}(x) + \frac{2}{\sqrt{\pi}} x \right] \quad (3.24)$$

Vidimo da usled povratne sprege emitera i perturbera spektralne linije odstupaju od zavisnosti $\Delta\omega^{-5/2}$. Kada $x \rightarrow 0$ ($T \rightarrow \infty$), izraz (3.23) prelazi u izraz (3.17) za pravolinijske putanje dok se za $x \rightarrow \infty$, $f(\Delta\omega)$ ponaša kao $\Delta\omega^{-3/2}$.

Iz izraza (3.14) i (3.23) vidimo da kada $\Delta\omega$ neograničeno raste postaje dominantan uticaj niskoenergetskih bliskih suda-ra ($x \sim \frac{\Delta\omega}{|\gamma|}$, $r_0 \sim \Delta\omega^{-1}$) kod kojih uticaj polarizacionog potencijala postaje značajan.

4. Numerički primeri

Izložena teorija zahteva da važi aproksimacija slabe sprege odnosno zahteva da je (GREEN, COOPER, 1975):

$$\Delta\omega < T \quad (4.1)$$

(Naprimjer za H_{γ} , na $T = 5000$ K, $\Delta\lambda$ može da ide do 2000 \AA)

što ograničava veličinu parametra x . Za jednostruko jonizovane emitere uslov (4.1) postaje (GREEN, COOPER, 1975):

$$x \leq 2.06/\sqrt{n^*} \quad (4.2)$$

A u slučaju neutralnog emitera pomoću (3.23) se može dobiti:

$$x \leq 2nT^{1/2}/3 = 0.1278 nT^{1/2} \quad (4.3)$$

gde je T u eV.

Veličina parametra x je ograničena uslovom statičnosti perturbera (I.2.3.1.9). Pomoću pomenutog uslova i jednačine (I.2.3.1.14), dobija se za jonizovane emitere uslov (GREEN i COOPER, 1975):

$$x \geq 13.9/(n^*)^2 T^{1/2} \quad (4.4)$$

dok se za neutralne emitere pomoću jednačina (3.23), (I.2.3.1.9) i (I.2.3.1.14) može dobiti:

$$x \geq T^{1/2}/2n = 0.0959 T^{1/2}/n \quad (4.5)$$

pri čemu je u jednačinama (4.4) i (4.5) T u eV.

Uporedimo veličine parametra x za koje se izložena teorija može upotrebiti sa potpunim poverenjem, za L_{α} i L_{11} linije

H I i He II. Razmatrane su temperature kojima odgovaraju energije od 0.5 i 2 eV. Iz tabele 2. vidimo da je uslove važenja izložene

TABELA 2.

Oblast važenja kvazistatičke teorije za L_α i L_{11} linije H I i He II

		E = 0.5 eV		E = 2 eV	
		x \geq	x \leq	x \geq	x \leq
H I	L_α	0.068	0.090	0.136	0.181
	L_{11}	0.00616	0.994	0.0123	1.988
He II	L_α	19.7	2.06	9.83	2.06
	L_{11}	0.162	0.30	0.081	0.30

teorije teže ispuniti za ionizovane emitere. Ipak, i kada ovi uslovi nisu strogo ispunjeni, $f(\Delta\omega)$ ostaje vodeći član koji uz dinamičke korekcije (GRIEM, 1974) može dati procenu krila linije. Energiye od 0.5 i 2 eV su uzete radi numeričkog uporedjivanja neutralnih i ionizovanih emitera. Vidimo da je za neutralne emitere parametar x , koji je mera uticaja potencijala dugog dometa na putanju perturbera, u oblasti važenja izložene teorije ≤ 1 . Uticaj potencijala dugog dometa i oblast važenja teorije, rastu sa porastom glavnog kvantnog broja gornjeg nivoa.

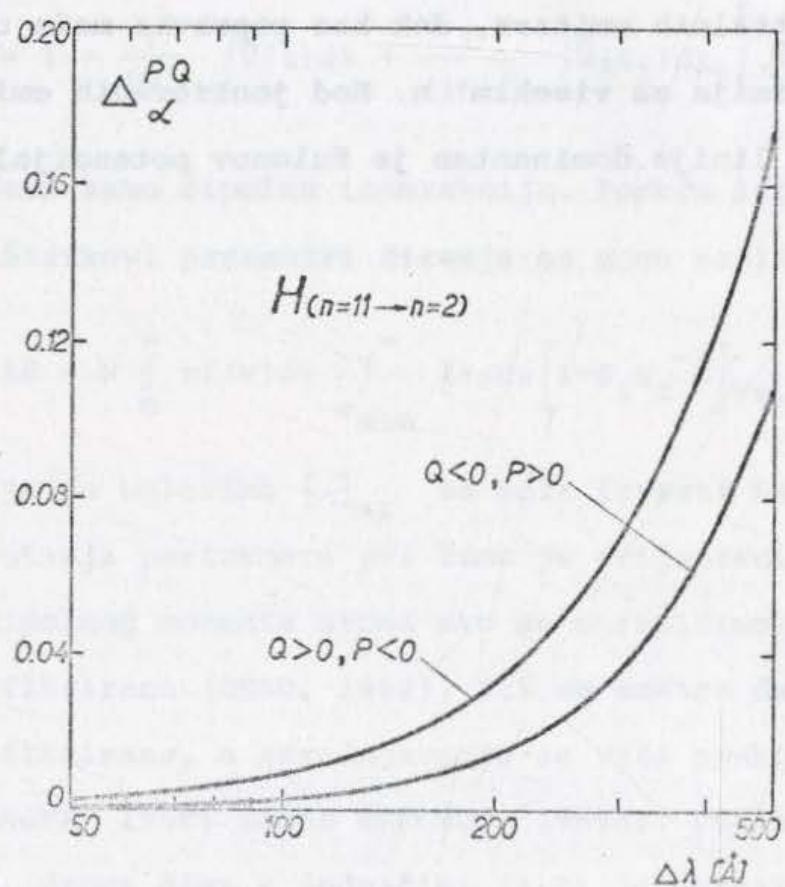
Za ionizovane emitere Kulonov potencijal je dominantan i putanje elektrona se ne mogu aproksimirati pravim. Medjutim, uslove važenja teorije je mnogo teže zadovoljiti, naročito za malo n .

Da bi se procenio uticaj potencijala dugog dometa na dalekim krilima linija neutralnog vodonika, izračunata je relativna

devijacija (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1977)

$$\Delta_{\alpha}^{PQ} = \frac{f(\Delta\omega)_A - f(\Delta\omega)}{f(\Delta\omega)_A}$$

gde je $f(\Delta\omega)_A$ asimptotska vrednost Furijeovog transforma $F(t)$ (3.17). Na sl. 22 su dati numerički rezultati za H_{11} (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1977). Nacrtani su Δ_{α}^{PQ} za komponente spektralne linije sa $Q = \pm 10.54$ dok se druga dva za koje P ima različiti znak, praktično poklapaju sa prvima. Kao što se vidi sa slike, u posmatranom slučaju na $\Delta\lambda = 500 \text{ \AA}$ relativno odstupanje ide do 17%.



Sl. 22. Relativno odstupanje od asimptotske kvazistatičke vrednosti za pravolinijske putanje za dve komponente linije H_{11} .

Izvršen je proračun i za nekoliko drugih linija (DIMITRIJEVIĆ, GRUJIĆ, 1977):

$$L_\alpha : \Delta\lambda = 50 \text{ \AA}, |210\rangle - |100\rangle, \Delta_\alpha^{PQ} = 0.0013$$

$$L_\delta : \Delta\lambda = 30 \text{ \AA}, |510\rangle - |100\rangle, \Delta_\alpha^{PQ} = 0.0052$$

$$L_{11} : \Delta\lambda = 25 \text{ \AA}, |1110\rangle - |100\rangle, \Delta_\alpha^{PQ} = 0.069$$

$$H_\delta : \Delta\lambda = 300 \text{ \AA}, |501\rangle - |210\rangle, \Delta_\alpha^{PQ} = 0.0021$$

$$|510\rangle - |210\rangle, \Delta_\alpha^{PQ} = 0.0042$$

gde je $\Delta\lambda$ rastojanje od centra linije a $|nn_1n_2\rangle$ oznaka atomske stanja.

Iz izloženog se može zaključiti da je na kvazistatičkoj granici uticaj potencijala dugog dometa zanemarljiv kod intenzivnih linija neutralnih emitera, dok kao popravka može uticati na daleka krila linije sa visokim n . Kod jonizovanih emitera u određivanju krila linije dominantan je Kulonov potencijal.

V ŠIRENJE SPEKTRALNIH LINIJA U OBLASTI VAŽENJA SUDARNE APROKSIMACIJE

1. Slučaj neutralnih atoma

Sudarna aproksimacija je pogodna za opisivanje doprinos-a širenja elektrona centralnom delu spektralne linije. Ograniči-ćemo se na prva tri člana perturbacionog razvoja matrice raseja-nja (Dajsonov razvoj):

$$S = 1 - \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(t) dt + \frac{1}{(i\hbar)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{V}(t_1) dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} \tilde{V}(t_2) dt_2 \quad (1.1)$$

i razmatraćemo samo dipolnu interakciju. Pomoću izraza (I.2.4.10-I.2.4.12), Štarkovi parametri širenja se mogu napisati kao:

$$w+id = N \int_0^{\infty} v f(v) dv \int_{\rho_{\min}}^{\infty} 2\pi\rho d\rho \left[1 - S_i S_f^{-1} \right]_{sr.} \quad (1.2)$$

Usrednjavanje po uglovima $\left[\cdot \right]_{sr.}$ se može izvesti na dva načina, ili preko putanja perturbera pri čemu je orijentacija atoma (ori-jentacija dipolnog momenta atoma ako se ograničimo na dipolnu in-terakciju) fiksirana (GBKO, 1962), ili se smatra da je putanja perturbera fiksirana, a usrednjavanje se vrši preko orijentacija atoma (BARANGER, 1958; SAHAL BRECHOT, 1969a). Posle usrednjavanja po uglovima, drugi član u jednačini (1.1) je jednak nuli tako da se dobija (na pr. COOPER i OERTEL, 1969):

$$w + id = N \int_0^\infty f(v) dv \{ \pi (\rho_{\min}^2 - \chi^2) + \frac{4}{3} \pi \chi^2 \sum_i \vec{R}_{ii}^2 \cdot \\ \cdot [a_2(|z_{ii}^{\min}|, \theta) + ib_2(z_{ii}^{\min}, \theta)] + \\ + \frac{4}{3} \pi \chi^2 \sum_f R_{ff}^2 [a_2(|z_{ff}^{\min}|, \theta) - ib_2(z_{ff}^{\min}, \theta)] \} \quad (1.3)$$

Ovde je \vec{R}_{jj}^2 kvadrat matričnog elementa vektora položaja optičkog elektrona:

$$\vec{R}_{jj}^2 = \sum_{m,m'} \frac{|\langle j | \vec{r} | j' \rangle|^2}{2J_i + 1} \quad (1.4)$$

Modifikovane funkcije Štarkovog širenja biće definisane u odeljku 1.2. One nastaju rešavanjem integrala u izrazu za S matricu (1.1), koji implicitno sadrže oblik putanja perturbera. Argument z_{jj} , a i b funkcija je dat sa:

$$z_{jj} = \frac{\rho \omega_{jj}}{v} \quad (1.5)$$

pri čemu z_{jj}^{\min} označava da je kao ρ na desnoj strani izraza (1.5) uzeto $\rho_{\min} \omega_{jj}$, je ugaoni razmak izmedju odgovarajućih energetskih nivoa j i j' a θ je ugao izmedju pravaca brzina elektrona u $t \rightarrow \pm \infty$, podeljen sa 2π .

$$\theta = \pi - \rho \int_{r_{\min}}^{\infty} \frac{dr}{\sqrt{r^4 - \rho^2 r^2 - \frac{Qr}{k^2} + \frac{\alpha}{k^2}}} =$$

$$= \pi - \frac{2\rho}{\sqrt{(r_{\min} - c)(b-d)}} K(q)$$

$$q^2 = \frac{(b-c)(r_{\min} - d)}{(r_{\min} - c)(b-d)}$$

gde su $r_{\min} > b > c > d$ koreni polinoma pod kvadratnim korenom. Ako se zanemari kvadrupolni član, može se pisati:

$$\theta = \pi - \frac{K(q)}{\sqrt{2(1 + \sqrt{1 - \beta^4})}}, \quad \beta \equiv \rho_c / \rho$$

$$q^2 = \frac{1 - \sqrt{1 - \beta^4}}{1 + \sqrt{1 - \beta^4}}$$

U slučaju pravolinijskih putanja perturbera, kao minimalni sudarni parametar se uzima rešenje jednačine (GBKO, 1962):

$$\{|1 - S_i S_f^{-1}| \} = 1 \quad (1.6)$$

pri čemu je:

$$\tilde{\rho}_{\min} = \max(\rho_{\min}, *)$$

U analizi u odeljku (III.2.1.1) smo pokazali da su sudari za koje je $\rho < \rho_c$ jaki, pa bi o tome trebalo voditi računa prilikom određivanja ρ_{\min} .

Pretpostavimo da se uticaj povratne sprege emitera na perturber može predstaviti odstupanjem putanje perturbera od pravolinijske usled uticaja potencijala dugog dometa. Ova pretpostavka se sa uspehom primenjuje na proračun Štarkovih parametara ionizovanih emitera (hiperbolične putanje) (GRIEM: , 1974). Sada se analiza uticaja potencijala dugog dometa na Štarkove parametre širenja može izvršiti pomoću rezultata analize kretanja elektrona pod uticajem razmatranih potencijala (odeljak II.2). Zakrivljenošć putanja će uticati na minimalni sudarni parametar i na funkcije Štarkovog širenja. U daljem izlaganju biće analizirana

veličina ovog uticaja i njegovo uključivanje u teoriju Štarkovog širenja.

1.1. Potencijal dugog dometa i minimalni sudarni parametar

Da bi ispitali uticaj potencijala dugog dometa na minimalni sudarni parametar, razmotrićemo liniju neutralnog azota $3s^4P - 3p^4D^0 \lambda = 8692 \text{ Å}$ (mult. 1) (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a).

Ova linija je izabrana iz više razloga:

1. Efektivna polarizabilnost gornjeg nivoa prelaza je $\alpha = 564 \text{ a.j.}$, što je dovoljno veliko da uticaj polarizacionog potencijala bude primetan.

2. Emiter ima kvadrupolni momenat gornjeg nivoa različit od nule tako da se može ispitati uticaj kvadrupolnog potencijala. Ukupni ugaoni momenat gornjeg nivoa može u okviru posmatranog multipleta imati vrednosti $1/2$, $3/2$, $5/2$ i $7/2$. Kod linija za koje je $J_i = 1/2$ imamo $Q = 0$, pa samo polarizacioni potencijal utiče na putanju elektrona, dok linije sa $J_i = 3/2$, $5/2$ i $7/2$ imaju prema izrazu (II.1.3.3) 2, 3 odnosno 4 projekcije kvadrupolnog momenta. Detaljnije ćemo se pozabaviti stanjem sa dve projekcije kvadrupolnog momenta ($J_i = 3/2$). Kvadrupolni momenat stanja $1s^2 2s^2 2p^2 (^3P) 3p (^4D^0)$ $3/2$ može se izračunati prema izrazu (II.1.3.3). Ipak, pošto je kvadrupolni potencijal obično samo popravka u odnosu na polarizacioni, mi smo uzeli u obzir samo kvadrupolni momenat ekscitiranog $3p$ elektrona. Kvadrat matričnog elementa vektora položaja optičkog elektrona, izračunat je prema

izrazu (GRIEM, 1974):

$$\langle i | r^2 | i \rangle = \frac{n^{*2}}{2Z^2} \left[5n^{*2} + 1 - 3\ell(\ell+1) \right]$$

Rezultat koji smo dobili (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978) je
 $Q = \pm 10.54$ a.j..

3. Za ovu liniju postoje eksperimentalni podaci sa kojima se teorijski proračuni mogu uporediti.

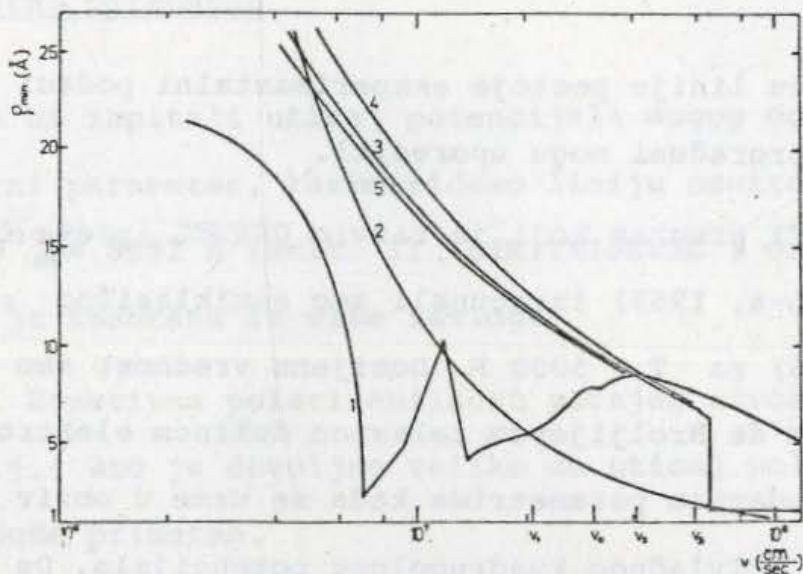
Koristeći program koji je razvio OERTEL (prema članku COOPER-a i OERTEL-a, 1969) izračunali smo semiklasično ρ_{min} prema izrazu (1.6) za $T = 5000$ K. Dobijenu vrednost smo uporedili sa redukovanim de Brolijevom talasnom dužinom elektrona λ i sa kritičnim sudarnim parametrima kada se uzme u obzir uticaj polarizacionog i privlačnog kvadrupolnog potencijala. Da bi uzeли u obzir uticaj kompletne interakcije dugog dometa (polarizaciona + kvadrupolna) u okviru multipleta, uzeli smo srednji kritični sudarni parametar:

$$\rho_c = \frac{1}{2} [\rho_c(Q^+) + \rho_c(Q^-)] \quad (1.1.1)$$

Ustvari bi trebalo izvršiti usrednjavanje preko $\rho_c(Q)$, ali aproksimacija (1.1.1) je opravdana kada se podintegralna funkcija u integralima za w i d (1.2) ne menja mnogo u okolini donje grane integracije.

Na sl. 23 se može videti da je u razmatranom slučaju uticaj kvadrupolne interakcije zanemarljiv. S obzirom da je razmatrana veličina kvadrupolnog momenta tipična za neutralne atome koji zrače u optičkom delu spektra a imaju $Q \neq 0$, ovaj zaključak

se može uzeti kao opšti. Svакако, u slučaju da je α dovoljno malo, relativan doprinos kvadrupolne interakcije može biti uporediv sa doprinosom polarizacione interakcije, ali se tada oba mogu zanemariti.



Sl. 23. Semiklasični minimalni sudarni parametar (1) uporedjen sa: χ (2); ρ_C u slučaju polarizacionog potencijala (3); ρ_C u slučaju polarizacionog i privlačnog kvadrupolnog potencijala (4); usrednjениm kritičnim sudarnim parametrom (izraz 1.1.1). v_0 - najverovatnija brzina; $v_1 = 0.09611$ a.j., brzina za koju je $\rho_{\min} = \chi$; v_2 - brzina za koju je $\rho_{\min} = \rho_C$; $v_3 = 0.274$ a.j..

Kritični sudarni parametar ρ_C kao funkcija brzine elektrona ima skokove usled skokova u efektivnoj polarizabilnosti α (uslov II.2.1.14). Sa sl. 23. takodje vidimo da se u oblasti malih brzina ($v < v_1$) ρ_{\min} ne dobija kao monotona funkcija usled numeričkih teškoća u rešavanju jednačine (1.6). Ipak, ova oblast brzina ($v < v_1$) ne doprinosi vrednostima Štarkovih parametara pošto je na takvim energijama $\rho_{\min} < \chi$. U skladu sa izloženom analizom kretanja elektrona pod uticajem polarizacionog potencijala dugog dometa (odeljak II.2), kao minimalni sudarni parametar

trebalo bi uzeti (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a):

$$\rho_{\min} = \max(\rho_{\min}, \chi, \rho_c) \quad (1.1.2)$$

Na ovaj način, isključili bi se iz neelastičnog doprinosa kako sudari za koje ne važi Dajsonov razvoj i semiklasična teorija, tako i sudari u toku kojih usled privlačne sile polarizovanog emitera udarni elektron pridje toliko blizu atoma da semiklasičan prilaz prestaje da bude adekvatan. Sem toga, ako se za $v < v_2$ (brzina na kojoj je $\rho_{\min} = \rho_c$) računa samo ρ_c , uštedeće se u kompjuterskom vremenu i izbeći će se numeričke teškoće prilikom rešavanja jednačine (1.6) u oblasti niskih energija (viđeti sl.23).

1.2; Potencijal dugog dometa i funkcije

Šarkovog širenja

Funkcije Šarkovog širenja, a_2 i b_2 , implicitno sadrže oblik putanje elektrona, tako da se i preko njih može ispitivati uticaj potencijala dugog dometa. Prema definiciji (GBKO, 1962), GBKO funkcije Šarkovog širenja za pravolinijske putanje elektro- na su:

$$a_2(z) = \int_z^{\infty} dz' A_2(z')/z' \quad (1.2.1)$$

$$b_2(z) = \int_z^{\infty} dz' B_2(z')/z' \quad (1.2.2)$$

$$B_2(z) = (2z/\pi) \oint_0^{\infty} dz' A_2(z')/(z^2 - z'^2) \quad (1.2.3)$$

Ovde \oint označava Košijevu glavnu vrednost integrala.

Upotrebljeni koordinatni sistem je isti kao u radu

SAHAL-BRECHOT (1969a). Putanja elektrona je u Y-X ravni. U slučaju jonizovanog emitera, X osa se poklapa sa osom simetrije hiperbolične putanje dok je u našem slučaju to bisekrisa ugla izmedju pravaca brzina elektrona $\vec{v}(+\infty)$ i $\vec{v}(-\infty)$. Kada se zanemari uticaj emitera na perturber (pravolinijske putanje), putanja elektrona je paralelna Y osi. Emiter se nalazi u centru koordinatnog sistema.

U opisanom koordinatnom sistemu, A_2 funkcija se dobija pomoću integrala (SAHAL-BRECHOT, 1969a):

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \exp(i\omega_{ij}(t-t')) (xx' + yy') / R^3 R'^3 \quad (1.2.4)$$

gde su x, y, R i x', y', R' koordinate slobodnog elektrona u t i t' respektivno.

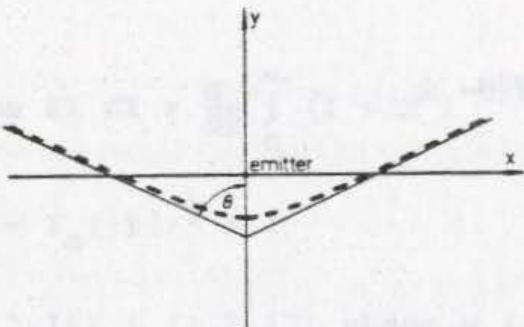
Realni deo dvostrukog integrala tipa:

$$I(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{i\omega z} f_1(z) \int_{-\infty}^{+\infty} dz' e^{-i\omega z'} f_2(z') \quad (1.2.5)$$

gde su f_1 i f_2 ili obe parne ili obe neparne funkcije od z , može se izraziti kao proizvod jednostrukih integrala (FROST, 1976):

$$\text{Re } I(\omega) = (1/2) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega z} f_1(z) dz \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega z} f_2(z) dz \quad (1.2.6)$$

U radu (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) je rotiran prethodno opisani koordinatni sistem za ugao $\pi/2$ i stvarna putanja elektrona aproksimirana sa dve prave linije koje se sekut. Ugao izmedju ovih linija (2θ) je ugao izmedju pravaca brzina elektrona pri $t \rightarrow \pm \infty$ (sl. 24).



Sl. 24. Upotrebljeni koordinatni sistem: ---- prava putanja elektrona; — naša aproksimacija (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) putanje elektrona.

Jednačine za dve prave koje se sekut dobijene su rotacionom koordinatnog sistema za $\pm(\pi/2 - \theta)$. U parametarskom obliku (u je parametar) jednačine glase:

$$x = \rho \sinh u \sin \theta \mp \rho \cosh u \cos \theta$$

$$y = \mp \rho \sinh u \cos \theta - \rho \sinh u \sin \theta$$

$$r = \rho \cosh u$$

$$t = \rho \sinh u / v$$

gde je v brzina elektrona. Kada se zanemari uticaj potencijala dugog dometa; koordinate slobodnog elektrona su:

$$x = \rho \sinh u$$

$$y = -\rho \sinh u$$

$$r = \rho \cosh u$$

$$t = \rho \sinh u / v$$

Pomoću (1.2.5) i (1.2.6) se dobija:

$$A_2 = \rho^2 v^2 (|J_{11}|^2 + |J_{1-1}|^2) \quad (1.2.7)$$

$$J_{1\pm 1} = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} (x \pm iy) / R^3 \quad (1.2.8)$$

Ako se stavi:

$$z = \rho \omega_{ij} / v$$

$$x = sh u$$

dobija se (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a):

$$A_2(|z|, \theta) = [(A^2 + B^2) \cos^2 \theta + (C^2 + D^2) \sin^2 \theta + \\ + (2BC - 2AD) \sin \theta \cos \theta] \quad (1.2.9)$$

$$A = \int_0^\infty (1 + x^2)^{-3/2} x \cos zx dx \quad (1.2.10)$$

$$B = \int_0^\infty (1 + x^2)^{-3/2} \sin zx dx \quad (1.2.11)$$

$$C = \int_0^\infty (1 + x^2)^{-3/2} x \sin zx dx \quad (1.2.12)$$

$$D = \int_0^\infty (1 + x^2)^{-3/2} \cos zx dx \quad (1.2.13)$$

Integrali C i D su izračunati ranije (GBKO, 1962):

$$C = -|z| K_0(|z|) \quad (1.2.14)$$

$$D = |z| K_1(|z|) \quad (1.2.15)$$

pri čemu su K_v modifikovane Beselove funkcije druge vrste. Integrali A i B se mogu rešiti (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) pomoću modifikovanih Beselovih funkcija prve vrste I_v i modifikovanih Struveovih funkcija L_v (ABRAMOVITZ i STEGUN, 1964):

$$B = \int_0^\infty (1+x^2)^{-3/2} \sin zx dx = (\pi/2) |z| [L_1(|z|) - I_1(|z|)] + \\ + |z| \quad (1.2.16)$$

$$\begin{aligned} A &= \int_0^{\infty} (1+x^2)^{-3/2} x \cos zx dx = \frac{d}{dx} \int_0^{\infty} (1+x^2)^{-3/2} \sin zx dx = \\ &= (\pi/2) |z| \left[L_0(|z|) - I_0(|z|) \right] + 1 \end{aligned} \quad (1.2.17)$$

Kada se jednačine (1.2.16) i (1.2.17) ubace u (1.2.9) a ova u (1.2.1 - 1.2.3), dobijaju se dipolne funkcije Štarkovog širenja.

Za liniju $\lambda = 8692 \text{ \AA}$ neutralnog azota, izračunate su $A_2(|z|, \theta)$ funkcije za pojedine vrednosti argumenata (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) i rezultati su dati u tabeli 3. Iz tabele se može videti da uključivanje polarizacionog i kvadrupolnog potencijala u teoriju povećava za nekoliko redova veličine vrednost funkcije A_2 . Ipak, za $v = v_1$ i u blizini ρ_c , A_2 funkcije su toliko male da ne utiču na konačni rezultat. Izračunavanja su izvršena i na brzini $v_3 = 0.274 \text{ a.j.}$. Vidi se da sa porastom energije udarnog elektrona uticaj potencijala jonizacije na funkcije Štarkovog širenja opada.

Iz izloženog sledi da je uticaj potencijala dugog dometa na funkcije Štarkovog širenja najveći u blizini ρ_c . Promena u veličini A_2 će najviše uticati na parametre Štarkovog širenja kod linija za koje je pri najverovatnijoj brzini uticaj neelastičnog doprinosa dominantan, a efektivna polarizabilnost velika.

1.3. Numerička izračunavanja

Da bi razmotrili uticaj odstupanja putanje elektrona od pravolinijske, na parametre Štarkovog širenja, analiziran je uticaj potencijala dugog dometa na liniju $\lambda = 8692 \text{ \AA}$ N I. Korišćen je kompjuterski program koji je razvio OERTEL (prema članku

TABELA 3.
 A_2 funkcije Štarkovog širenja

$\alpha = 568.6 \text{ a.u.}$					
$v_1 = 0.09611 \text{ a.u. } (= 2.102 \cdot 10^7 \frac{\text{cm}}{\text{sec}})$			$v_3 = 0.274 \text{ a.u. } (= 6 \cdot 10^7 \text{ cm/sec})$		
$\rho \text{ [a.u.]}$	35	30	25		15.71
Z	19.084	16.36	13.63		3
$A_2(z)$	$1.59 \cdot 10^{-15}$	$3.168 \cdot 10^{-13}$	$6.206 \cdot 10^{-11}$		0.02537
$Q \text{ [a.u.]}$	0	0	+10.54	0	-10.54
$\theta \text{ [rad]}$	1.517	1.462	1.422	1.265	0.976
$A_2(z, \theta)$	$8.120 \cdot 10^{-6}$	$4.474 \cdot 10^{-5}$	$1.236 \cdot 10^{-4}$	$5.121 \cdot 10^{-4}$	$1.771 \cdot 10^{-3}$
					0.01942

COOPER-a i OERTEL-a, 1969) a računanja su izvedena na računaru IBM 360/44 u Matematičkom institutu u Beogradu. Kao perturbacioni nivoi smatrani su samo oni nivoi sa kojih je dozvoljen dipolni prelaz. Gornja granica integracije u (1.2) je $\rho = \infty$ pošto se Debajevi ekraniranje može zanemariti (JONES, 1973). Račun je izведен u opsegu temperatura 5000 - 40000 K. Program pruža mogućnosti za dobijanje kako simetrizovane tako i nesimetrizovane verzije. U razmatranom postupku (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) uzeta je nesimetrizovana verzija, pošto je povratna reakcija emitera na perturber već uzeta u obzir pomoću neuniformnog kretanja elektrona. Pošto su eksperimentalni i teorijski podaci pouzdaniji za širinu nego za pomak linije, razmatrana je samo poluširina.

Rezultati proračuna su dati u tabeli 4. Vrednosti polu-poluširina linija su dobijene sa uračunavanjem polarizacione interakcije (W^P), i polarizacione i kvadrupolne (W^{LR}). Naše teorijske vrednosti su uporedjene sa proračunima BENETT-a i GRIEM-a (1971) (W^G), i sa teorijskim rezultatima koje smo dobili prema radu COOPER-a i OERTEL-a (1969) (W^{CO}).

Za neke linije u okviru multipleta 1, postoje eksperimentalni rezultati MORRIS-a KREY-a i GARRISON-a, dobijeni na $T = 13000$ K i normalizovani na $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ i navedeni su u tabeli 5. zajedno sa strukturon posmatranog multipleta. Eksperimentalna vrednost W^H koju su HELBIG, KELLEHER i WIESE (1976) dobili za multiplet kao celinu, takodje je data u tabeli 5. zajedno sa našim teorijskim rezultatima.

TABELA 4.

Polu-poluširine linije neutralnog azota:
 $3s^4P - 3p^4D^0$, $\lambda = 8692 \text{ Å}$, $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$.

T K	$W^{CO} \text{\AA} $	$W^G \text{\AA} $	$W^P \text{\AA} $	$W^{LR} \text{\AA} $
5000	0.0339	0.0334	0.0375	0.0371
10000	0.0420	0.0448	0.0437	0.0435
20000	0.0566	0.0613	0.0572	0.0571
30000	0.0721	-	0.0724	0.0724
40000	0.0866	0.0805	0.0869	0.0868

MORRIS, KREY i GARRISON (1968) dobijaju razne vrednosti za polu-poluširine linija u okviru istog multipleta, za razliku od HELBIG-a, KELLEHER-a i WIESE-a koji dobijaju jedinstvenu vrednost za ceo multiplet. Pošto u razmatranom slučaju naša (DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ, 1978a) analiza pokazuje da je uticaj kvadrupolne interakcije zanemarljiv, nema teorijskog opravdanja za postojanje razlike u širini pojedinih komponenti multipleta. Ovaj zaključak ne bi trebalo da se promeni ni ako bi u proračunu upotrebili odgovarajuće matrične elemente $R_{j,j}^2$, za svaku pojedinačnu liniju u multipletu, umesto usrednjениh vrednosti.

Iz izloženih činjenica sledi da uticaj potencijala dugog dometa na poluširinu spektralne linije, u oblasti važenja semiklasične aproksimacije zavisi od veličine efektivne polarizabilnosti α gornjeg nivoa prelaza i od eventualnog kvadrupolnog momenta istog nivoa. Najpovoljniji slučaj bi bio ako bi α bilo veliko i

TABELA 5.

Polu-poluširine za N I, mult 1 na $T = 13000 \text{ K}$ i $N_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, eksperimentalne vrednosti: w^M - MORRIS et al. (1968); w^H - HELBIG et al. (1976); teorijske vrednosti: w^G GRIEM (1974); w^{CO} - COOPER i OERTEL (1969); w^P - DIMITRIJEVIĆ i GRUJIĆ (1978a) (kada se uzme u obzir polarizacioni potencijal)

No	J_f	J_i	$\lambda(\text{\AA})$	$w^M(\text{\AA})$
1	5/2	5/2	8718.8	0.0495
2	3/2	3/2	8711.7	0.0495
3	1/2	1/2	8703.3	0.0515
4	1/2	3/2	8686.2	0.0515
5	3/2	5/2	8683.4	0.0615
6	5/2	7/2	8680.3	0.0590
7	5/2	3/2	8747,4	-
8	3/2	1/2	8728.9	-

$$w^H = 0.0450$$

$$\text{multiplet 1} \quad w^G = 0.0500$$

$$3s^4P - 3p^4D^0 \quad 8692 \quad w^{CO} = 0.0462$$

$$w^P = 0.0478$$

gornji nivo imao dovoljno udaljen dominantni gornji perturbačioni nivo tako da se usled porasta verovatnoće za neelastičan sudar, a skokovito menja tek na većim temperaturama ($T > 10000 \text{ K}$). Na niskim temperaturama ($T \leq 5000 \text{ K}$) što je bliži gornji perturbacioni nivo veća je efektivna polarizabilnost, ali je veći i se-miklasični minimalni súdarni parametar, što smanjuje uticaj potencijala dugog dometa na poluširinu linije. Zato često nije jednostavno predvideti konačni rezultat. Na primer, ispitana je linija

$\lambda = 4713.2 \text{ \AA}$ He I, za koju efektivna polarizabilnost gornjeg nivoa ima maksimalnu vrednost $\alpha = 6.92 \cdot 10^4 \text{ a.j.}$. Ipak, na $T = 5000 \text{ K}$ nema značajne razlike izmedju rezultata sa i bez uticaja interakcije dugog dometa.

2. Uticaj Kulonovog potencijala na širinu spektralnih linija (Slučaj jonizovanih emitera)

U slučaju jonizovanih emitera, od razmatranih potencijala dugog dometa, Kulonov ima najveći uticaj na putanju perturbera. Ako se ograničimo na spektralne linije u optičkom delu spektra i na temperature $20000 - 60000 \text{ K}$, uslov važenja sudsarne aproksimacije (I.2.4.1.1) ne dozvoljava da tipični sudarni parametar bude toliko mali da bi neki od ostalih potencijala dugog dometa sem Kulonovog mogao da bude značajan. Opseg temperatura od $20000 - 60000 \text{ K}$ izabran je zato što se u njemu nalaze gotovo svi pouzdani eksperimentalni rezultati za ~~jonizovane~~ ^{vlastne} emitera (KONJEVIĆ i WIESE, 1976), od kojih su, sa izuzetkom C III i C IV (BOGEN, 1972), svi dobijeni u Institutu za fiziku u Beogradu.

U razmatranom opsegu temperatura, dominantno je širenje elektronima usled čega ćemo se u daljem izlaganju ograničiti na elektrone kao perturbere.

Na temperaturama $20000 - 60000 \text{ K}$ kretanje udarnog elektrona pod uticajem Kulonovog potencijala emitera, dobro se aproksimira hiperboličkim ~~putanjama~~. U daljem toku izlaganja ograničićemo se na probleme povezane sa uticajem emitera na perturber, koji se javljaju kod aproksimativnog prilaza teoriji Šarkovog širenja jonizovanih atoma.

2.1. Grimova semiempirijska formula

Ako uzmemo u obzir samo uticaj Kulonovog potencijala na udarni elektron, neelastičan prelaz se može opisati na sledeći način (SEATON, 1962): pod uticajem Kulonovog polja, udarni elektron emituje foton koji onda apsorbuje optički elektron. Ako sa \vec{k}_i , \vec{k}_j označimo brzinu elektrona pre i posle prelaza $i \rightarrow j$, onda će $(\vec{k}_j | \vec{r}/r^3 | \vec{k}_i)$ biti matrični element dipolne akceleracije za emisiju fotona u slobodno - slobodnom prelazu. Gaunt faktor g je po definiciji dat sa (SEATON, 1962):

$$32 \pi^4 g(k_j, k_i) / k_i k_j \sqrt{3} = \int |(\vec{k}_j | \vec{r}/r^3 | \vec{k}_i)|^2 d\vec{k}_j \quad (2.1.1.1)$$

Presek za neelastični prelaz σ_{ij} se pomoću (2.1.1.1) može napisati (SEATON, 1962):

$$\sigma_{ij} = 4\pi^2 f_{ji} g(k_j, k_i) / k_i^2 \sqrt{3} (E_j - E_i) \quad (2.1.1.2)$$

gde je f_{ji} jačina oscilatora u apsorpciji.

Usrednjavajući eksperimentalne rezultate za preseke SEATON (1962) je pomoću relacije (2.1.1.2) uveo empirijski efektivni Gaunt faktor g. Pretpostavljeno je, da na pragu za neelastični proces, empirijski Gaunt faktor ima vrednost 0.2 bez obzira na vrstu elementa ili prelaza.

GRIEM (1968) je koristeći kvantno-mehaničku vezu izmedju poluširine linije i preseka za neelastični sudar (BARANGER, 1958a):

$$w = N \{ v [\sum_i \sigma_{ii} + \sum_f \sigma_{ff}] \} \text{ sr} \quad (2.1.1.3)$$

i relaciju (2.1.1.2), uveo empirijski efektivni Gaunt faktor u teoriju Štarkovog širenja. Da bi na neki način uzeo u obzir doprinos elastičnih sudara, on je ekstrapolirao Gaunt faktor ispod praga za neelastičan proces kao konstantu sa vrednošću $g = 0.2$. Pomoću (2.1.1.2) i (2.1.1.3) se dobija:

$$w = \frac{8}{\pi} \left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/2} \left(\frac{E_H}{kT}\right)^{1/2} N_e \left[\sum_i |\langle i' | \vec{r} | i \rangle|^2 g\left(\frac{E}{|E_i - E_{i'}|}\right) + \sum_f |\langle f' | \vec{r} | f \rangle|^2 g\left(\frac{E}{|E_f - E_{f'}|}\right) \right] \quad (2.1.1.4)$$

gde je E energija udarnog elektrona. Ako je E približno jednako ili manje od razlike $|E_j - E_{j'}|$, odnosno blizu ili ispod praga za odgovarajuće neelastično rasejanje, izraz (2.1.1.4) se može uprositi (GRIEM, 1968) tako da se dobija:

$$w = 0.5576 \cdot 10^{-10} \lambda^2 N_e \left[\langle i | r^2 | i \rangle g\left(\frac{3kT}{2\Delta E_i}\right) + \langle f | r^2 | f \rangle g\left(\frac{3kT}{2\Delta E_f}\right) \right] \left(\frac{E_H}{kT}\right)^{3/2} \quad (2.1.1.5)$$

gde je $\Delta E_{i,f}$ energetska razlika izmedju nivoa i , odnosno f , i najbližeg perturbacionog nivoa respektivno. U izrazu (2.1.1.5) puna širina w je izražena u Å a λ u cm.

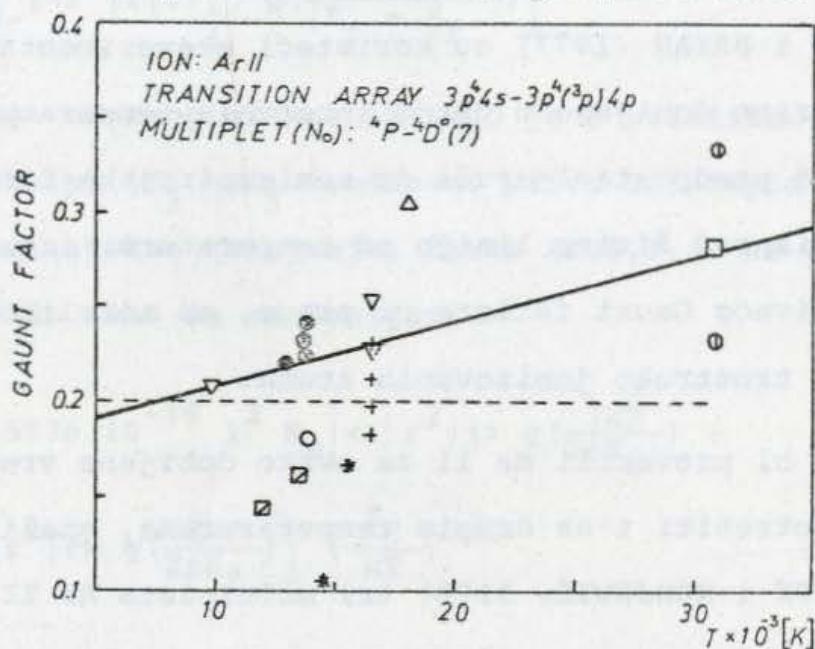
Na osnovu eksperimentalnih indikacija GRIEM (1974) je zaključio da se za $kT/\Delta E \leq 3$ može upotrebiti prostiji izraz (2.1.1.5) dok za $3 < kT/\Delta E < 50$ treba koristiti izraz (2.1.1.4). Za $kT/\Delta E \geq 50$ treba upotrebiti visokotemperaturnu aproksimaciju (GRIEM, 1974).

2.1.1. Vrednost Gaunt faktora na pragu za neelastično rasejanje i semiempirijska formula

Kada je zadovoljen uslov $kT/\Delta E \leq 3$ za nalaženje Štarkove poluširine dovoljno je poznavanje karakteristika samo za najbliži perturbacioni nivo (izraz 2.1.1.5). U ovim slučajevima mogao bi se iz eksperimentalno odredjene polu-poluširine spektralne linije izvesti presek za rasejanje elektrona na atomu, koji je proporcionalan Gaunt faktoru (2.1.1.2). HEY (1976a,b, 1977) i HEY i BRYAN (1977) su koristeći eksperimentalno merene Štarkove širine dobijene u uskom intervalu temperatura (21000 - 26000 K) i predpostavljajući da semiempirijska formula tačno opisuje zavisnost širine linije od temperature, izračunali vrednosti efektivnog Gaunt faktora na pragu, za nekoliko jednostruko, dvostruko i trostruko ionizovanih atoma.

Da bi proverili da li se ovako dobijene vrednosti mogu pouzdano upotrebiti i na drugim temperaturama, analizirali smo (DIMITRIJEVIĆ i KONJEVIĆ, 1978) tri multipleta Ar II i jedan multiplet Ca II. Razmatrane multiplete smo izabrali prema sledećim kriterijumima: a) Postoji veliki broj pouzdanih eksperimentalnih podataka u širokom opsegu temperatura. b) Najbliži perturbacioni nivo je dovoljno udaljen da bi se mogla primeniti aproksimativna formula (2.1.1.2). Pomoću izraza (2.1.1.2) i eksperimentalnih rezultata, izveli smo (DIMITRIJEVIĆ i KONJEVIĆ, 1978) efektivne Gaunt faktore za multiplete 6, 7 i 14 Ar II i multiplet 1, Ca II u opsegu temperatura od 8000 - 30000 K. Na sl. 25 dat je kao primer dobijeni rezultat za Ar II mult.7, zajedno sa vrednošću efektivnog Gaunt faktora koja je potrebna da se pomoću izraza (2.1.1.2)

dobije rezultat identičan semiklasičnim proračunima JONES-a, BENETT-a i GRIEM-a (1971). Na sl. 25 se vidi da se pomoću izraza (2.1.1.2) ne dobija temperaturski nezavisna vrednost efektivnog Gaunt faktora na pragu za ekscitaciju. To znači da u oblasti energija $kT/\Delta E \leq 3$, semiempirijska formula ne opisuje korektno zavisnost Štarkove poluširine od temperature. Rezultati za ostale pomenute multiple (DIMITRIJEVIĆ i KONJEVIĆ, 1978) takođe ukazuju da se vrednosti efektivnog Gaunt faktora na pragu za ekscitaciju,



Sl. 25. Efektivni Gaunt faktori za Ar II mult 7:
teorijske vrednosti: — JONES et al. (1971);,
--- $g = 0.2$; eksperimentalne vrednosti:
O POPENOE i SHUMAKER (1965); △ JALUFKA et al.
(1966); □ ROBERTS (1966); ◎ CHAPELLE et al.
(1968); ○ ROBERTS (1968); ▽ KONJEVIĆ et al.
(1970); + LABAT et al. (1974); * MURAKAVA et al.
(1965); ✖ KLEIN (1973).

izvedene na osnovu eksperimentalnih podataka prema izrazu (2.1.1.2) mogu pouzdano koristiti samo u ograničenoj oblasti temperatura.

Eksperimentalne vrednosti se bolje slažu sa efektivnim

Gaunt faktorom izvedenim iz semiklasične teorije. Ova teorija (GRIEM, 1974) bolje opisuje temperatursku zavisnost Štarkovih parametara u oblasti $kT/\Delta E \leq 3$, pošto se kretanje elektrona u Kulonovom polju opisuje pomoću hiperboličnih putanja.

2.2. Aproksimativna semiklasična teorija za višestruko jonizovane emitere

Pouzdani eksperimentalni podaci o Štarkovom širenju spektralnih linija višestruko jonizovanih atoma, dobijeni su tek zadnjih godina (videti KONJEVIĆ i WIESE, 1976). Izmerene su najintenzivnije linije C III i C IV (BOGEN, 1972), Ar III i Ar IV (PLATIŠA, POPOVIĆ, DIMITRIJEVIĆ i KONJEVIĆ, 1975), N III (POPOVIĆ, PLATIŠA i KONJEVIĆ, 1975), O III (PLATIŠA, POPOVIĆ i KONJEVIĆ, 1975), Si III (PURIĆ, DJENIŽE, LABAT i ĆIRKOVIC, 1974; PLATIŠA, DIMITRIJEVIĆ, POPOVIĆ, i KONJEVIĆ, 1977a), Si IV (PLATIŠA, DIMITRIJEVIĆ, POPOVIĆ i KONJEVIĆ, 1977a), Cl III (PLATIŠA, DIMITRIJEVIĆ, POPOVIĆ i KONJEVIĆ, 1977b), S III i S IV (PLATIŠA, POPOVIĆ, DIMITRIJEVIĆ i KONJEVIĆ, 1978). Pomenuti eksperimentalni rezultati su dobijeni u opsegu temperatura od 2000- 60000 K. Na ovakvim temperaturama jedino je značajan uticaj Kulonovog potencijala na upadni elektron, tako da putanju elektrona pod uticajem potencijala dugog dometa možemo aproksimirati hiperbolom.

Ako razdvojimo doprinos širini linije usled srušara koji uzrokuju prelaze sa $\Delta n \neq 0$ od doprinosa usled prelaza sa $\Delta n = 0$, a prelaze sa $\Delta n = 0$ razdvojimo na prelaze tipa $l \rightarrow l + 1$ i $l \rightarrow l - 1$, poluširina linije se može napisati kao:

$$w = (w_{l,l+1}^i + w_{l,l-1}^i + w_{l,l+1}^f + w_{l,l-1}^f)_{\Delta n=0} + \\ + (w_i + w_f)_{\Delta n \neq 0} + w_c \quad (2.1.3.1)$$

gde je, ako se ograničimo na dipolnu aproksimaciju, w_c korekcionii član za jake sudare i interakcije višeg reda (GRIEM, 1974):

$$w_c = N_e \bar{v} \frac{8\pi}{3} \kappa^2 \left[\frac{3n_i^4}{4Z^2} + \frac{3n_i^2 kT}{4Z^2 E_H} \left(1 + \frac{kT}{E_H} + \frac{z^2}{n_i^4} \right)^{-1} \right] \quad (2.1.3.2)$$

U svakom od članova u prvoj zagradi na desnoj strani izraza (2.1.3.1) ograničimo se samo na najbliži perturbacioni nivo. Posle integracije izraza (I.2.4.10) dobija se (GRIEM, 1974):

$$w_{l,l}^j |_{\Delta n=0} = (N_e \bar{v} \frac{8\pi}{3} \kappa^2 R_{l,l}^2 \ln \frac{\epsilon_{\max}}{\epsilon_{\min}})_{\text{sr}}$$

gde su ϵ_{\max} i ϵ_{\min} maksimalni i minimalni ekscentricitet hiperbolične putanje, a usrednjavanje se vrši po Maksvelovoj raspodeli.

Ekscentricitet ϵ je ograničen uslovom unitarnosti (1.6) kao i zahtevom da elektron ne pridje atomu bliže od $n^2 a_0/Z$, jer na bližim rastojanjima ne važi dipolna aproksimacija (GRIEM, 1974). Zahtev $\rho \geq n^2 a_0/Z$ je jači od zahteva za unitarnošću (GRIEM, 1974), tako da se za ϵ_{\min} pomoću njega i izraza (II.2.3.2) dobija (GRIEM, 1974):

$$\epsilon_{\min} = 1 + \frac{mv^2}{2(Z-1)ZE_H} n^{*2} \quad (2.1.3.4)$$

Kod procene ϵ_{\max} , može se staviti $\epsilon \gg 1$ i $\epsilon_{\max} = v/\omega_c$, gde je (GRIEM, 1974):

$$\omega_c = \max \{ |\omega_{l,l'}|, \omega_p = \sqrt{\frac{4\pi Ne^2}{m}}, \Delta\omega_F = \frac{2Z^2 \alpha^2 \omega_0}{3n} \},$$

$$\Delta\omega_i \approx 4n^2 \left(\frac{4\pi}{mZ} \right) (\Sigma Z^2 N_p)^{2/5} \quad (2.1.3.5)$$

ω_p je karakteristična plazmena frekvenca, $\Delta\omega_F$ frekventni razmak izmedju komponenata fine strukture, ω_0 nepomerena ugaona frekvenca a $\Delta\omega_i$ frekventni pomak u jonskom polju. Sada se za ϵ_{\max} dobija (GRIEM, 1974):

$$\epsilon_{\max} = \xi_{l,l'}^{-1} = \frac{mv^3}{(Z-1)e^2 \omega_c} \quad (2.1.3.6)$$

GRIEM (1974) predlaže da se za niske energije elektrona (ispod ili oko praga za neelastičan prelaz $l+l+1$: odnosno $l-1 \rightarrow l$) zameni $\ln(\epsilon_{\max}/\epsilon_{\min})$ sa $\pi g/\sqrt{3}$. Predpostavljajući da je za članove sa $\Delta n = 0$, vrednost efektivnog Gaunt faktora na pragu veća od 0.2 i da iznosi (KOBZEV, 1971) $g = 0.9 - 1.1/Z$, GRIEM (1974) je koristeći istu vrednost za g ispod praga i jednačine (2.1.3.3. -

2.1.3.6) dobio:

$$w_{l,l',\Delta n=0}^j = N_e \bar{v} \frac{8\pi}{3} \times^2 R_{l,l'}^2 \ln \left[5 - 4.5/\sqrt{Z} + \xi_{l,l'}^{-1} \left[1 + \frac{kTn_j^2}{E_H(Z-1)Z} \right]^{-1} \right] \quad (2.1.3.7)$$

$R_{l,l'}^2$ se dobija pomoću jednačine:

$$R_{l,l'}^2 = (3n/2Z)^2 \frac{\max(l,l')}{2l+1} [n^2 - \max(l,l')] \varphi^2 \quad (2.1.3.8)$$

gde je φ faktor BATES-a i DAMGAARD-ove (1949).

Članovi $w_{j,\Delta n \neq 0}$ se mogu dobiti analogno članovima za $\Delta n = 0$, ako se uzme: 1) ω_c odgovara razlici energija izmedju nivoa n i $n+1$ t.j.:

$$\omega_c \approx \frac{2z^2 E_H}{n^3} \quad (2.1.3.9)$$

pošto $n \rightarrow n + 1$ prelaz dominira u doprinosu od članova sa $\Delta n = 0$.

$$2) (\sum_j R_{jj}^2)_{\Delta n \neq 0} \approx (n_j^2 + 3\ell^2 + 3\ell + 11)/4 \quad (2.3.10)$$

3) Vrednost efektivnog Gaunt faktora na pragu je 0.2. Sada je (GRIEM, 1974):

$$w_{j, \Delta n=0} = N_e \bar{v} \frac{2\pi}{3} \chi^2 (n_j^2 + 3\ell^2 + 3\ell + 11) \ln \{ 1.4 + \\ + (kT/E_H)^{3/2} \frac{n_j^3}{(Z-1)Z^2} \left[1 + \frac{kTn_j^2}{E_H(Z-1)Z^2} \right]^{-1} \} \quad (2.1.3.11)$$

Pomoću izraza (2.1.3.1), (2.1.3.2), (2.1.3.7) i (2.1.3.11) može se izračunati Štarkova širina spektralne linije iz plazme.

2.2.1. Numerička izračunavanja

Prema teoriji izloženoj u prethodnom odeljku, izračunate su Štarkove poluširine za linije višestruko jonizovanih elemenata za koje postoje pouzdani eksperimentalni podaci. Dobijeni rezultati (W^A) dati su u tabeli 6. i uporedjeni sa eksperimentalnim rezultatima (W_{exp}) i sa vrednostima izračunatim pomoću semiempirijske formule (W_{se}). GRIEM (1974) je predpostavio da je za prelaze sa $\Delta n = 0$, $g = 0.9 - 1.1/Z$, što za $Z = 2$ (jednostruko ionizovani atomi) daje $g = 0.45$. Izvršena je analiza semiklasičnih rezultata (JONES, BENETT i GRIEM, 1971) za linije za koje važe uslovi za primenu prostije verzije semiempirijske formule (2.1.1.5).

Izračunat je Gaunt faktor potreban da se semiempirijski rezultat poklapa sa semiklasičnim na 5000 K. Kada se dobijeni rezultati za pojedine tipove prelaza sa $\Delta n = 0$ usrednje, dobija se:

tip prelaza	Gaunt faktor
2s - 2p	$g = 0.40$
3s - 3p	$g = 0.25$
3p - 3d	$g = 0.20$
4s - 4p	$g = 0.18$
4p - 4d	$g = 0.24$
5s - 5p	$g = 0.18$

Za uporedjenje je uzeta najniža temperatura za koju su računati Štarkovi parametri (JONES, BENETT i GRIEM, 1971) pošto su na njoj uslovi za važenje prostije verzije semiempirijske formule zadovoljeni za najveći broj linija. Iz dobijenih rezultata se vidi da će za $n > 2$ SEATON-ova (1962) vrednost $g = 0.2$ dati bolji rezultat. Zato je stavljeno 1.4 umesto $5 - 4.5/\sqrt{Z}$ na desnoj strani jednačine (2.1.3.7). Ovako dobijeni rezultati dati su takođe u tabeli 6. i označeni su sa W^B .

Iz tabele 6. se vidi da modifikovani semiklasični rezultati (W^B) daju dobro slaganje sa eksperimentalnim podacima u širokom opsegu temperatura (20000 - 60000 K) i za različite atome. Kao što se može videti iz podataka za C III i C IV, na $T = 60000$ K vrednost Gaunt faktora na pragu za ekscitaciju nije tako kritična kao na temperaturama od 25000 K na kojima do sada računanja po nemodifikovanoj teoriji (W^A) nisu vršena.

U daljem ispitivanju razmatranih teorija, usrednjen je

TABELA 6.

Teorijske i eksperimentalne vrednosti za Štarkove poluširine višestruko ionizovanih atoma. Eksperimentalne vrednosti za polu širine: Ar III i Ar IV - PLATIŠA, POPOVIĆ, DIMITRIJEVIĆ, KONJEVIĆ, 1975; O III - PLATIŠA, POPOVIĆ, KONJEVIĆ, 1975; N III - POPOVIĆ, PLATIŠA, KONJEVIĆ, 1975; C III i C IV - BOGEN, 1972; Si III - PURIĆ, DJENIŽE, LABAT, ĆIRKOVIĆ, 1974, Si III i Si IV - PLATIŠA, DIMITRIJEVIĆ, POPOVIĆ, KONJEVIĆ, 1977a; Cl III - PLATIŠA, DIMITRIJEVIĆ, POPOVIĆ, KONJEVIĆ, 1977b; S III i S IV - PLATIŠA, POPOVIĆ, DIMITRIJEVIĆ, KONJEVIĆ, 1978.

Teorijske vrednosti: W_{se} - izračunato prema semiempirijskoj formuli (GRIEM, 1968); W^A - izračunato prema GRIEM, 1974 jednačina 526; W^B modifikovani prethodni proračun (videti tekst).

element	prelaz	λ (Å)	$N \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	T (K)	W_{exp} (Å)	W_{se} (Å)	W^A (Å)	W^B (Å)
Ar III	$4s^5S^0-4p^5P$	3301.9	4.4	21100	0.062	0.0389	0.0945	0.0616
Ar III	"	"	8.0	23080	0.077	0.0677	0.165	0.109
Ar III	$4s^3D^0-4p^3F$	3336.1	4.4	21100	0.063	0.0404	0.0985	0.0641
Ar III	"	"	8.0	23080	0.083	0.0702	0.172	0.113
Ar III	$4s^3D^0-4p^3D$	3480.5	4.4	21100	0.058	0.0434	0.106	0.0688
Ar III	"	"	8.0	23080	0.081	0.0754	0.185	0.121
Ar III	$4s^5S^0-4p^5P$	3285.8	4.4	21100	0.064	0.0386	0.0938	0.0611
Ar III	"	"	8.0	23080	0.082	0.0671	0.164	0.108
Ar III	$3d^3P^0-4p^3P$	3391.8	4.4	21100	0.058	0.0336	0.0582	0.0506
Ar IV	$4s^4P-4p^4D^0$	2809.4	3.8	20750	0.023	0.019	0.0435	0.0260
Ar IV	"	"	5.6	22200	0.033	0.0271	0.0622	0.0373
Ar IV	$4s^4P-4p^4P^0$	2640.3	3.8	20750	0.021	0.0170	0.0389	0.0233
Ar IV	"	"	5.6	22200	0.031	0.0242	0.0555	0.0334

element	prelaz	λ (Å)	N_e 10^{16} cm^{-3}	T (K)	W_{exp} (Å)	W_{se} (Å)	W^A (Å)	W^B (Å)
C III	$3p^1P^0-3d^1D$	5696.0	40	60000	1.9	1.05	2.0	1.67
C III	$3s^1P^0-3p^1D$	4326	40	60000	2.1	0.774	1.3	1.03
C IV	$3s^2S-3p^2P^0$	5801.5	40	60000	1.6	1.18	1.76	1.26
Si III	$4s^3S-4p^3P^0$	4552.6	10	8700	0.48	0.469	1.12	0.679
Si III	"	"	10	10600	0.42	0.424	1.023	0.625
Si III	"	"	10	12800	0.40	0.386	0.939	0.580
Si III	"	"	10	16400	0.38	0.341	0.842	0.529
Si III	$4d^3D-5f^3F^0$	3486.9	10	12800	0.52	7.0	1.9	1.7
Si III	$4s^3S-4p^3P^0$	4552.6	5.8	25600	0.180	0.158	0.405	0.266
Si III	$4p^3P^0-5s^3S$	3241.6	5.8	25600	0.186	0.183	0.385	0.276
Si III	$4p^3P^0-4d^3D$	3791.4	5.8	25600	0.204	0.196	0.472	0.332
Si IV	$4s^2S-4p^2P^0$	4088.8	5.8	25600	0.125	0.101	0.288	0.162
Si IV	$4p^2P^0-4d^2D$	3165.7	5.8	25600	0.138	0.129	0.243	0.153
O III	$3p^3P-3d^3D^0$	3715.1	5.2	25900	0.074	0.0465	0.119	0.0902
O III	$3p^3D-3d^3F^0$	3261	5.2	25900	0.066	0.0331	0.0864	0.0660
O III	$3s^3P^0-3p^3D$	3754.7	5.2	25900	0.076	0.039	0.102	0.0675
O III	$3s^3P^0-3p^3P$	3047.1	5.2	25900	0.056	0.0272	0.0719	0.0476
Cl III	$4s^2P-4p^2D^0$	3748.8	5.8	24200	0.108	0.0582	0.146	0.0960
Cl III	$3d^4P-4p^4P^0$	4018.5	5.8	24200	0.111	0.0644	0.112	0.0964
Cl III	$4s^2D-4p^2F^0$	3530	5.8	24200	0.105	0.0611	0.151	0.0991
Cl III	$4s^4P-4p^4S^0$	3191.4	5.8	24200	0.096	0.0515	0.130	0.0851
Cl III	$4s^2D-4p^2D^0$	3392.9	5.8	24200	0.085	0.0572	0.142	0.0931
Cl III	$4s^4P-4p^4D^0$	3602.1	5.8	24200	0.106	0.0632	0.157	0.103
Cl III	$4s^4P-4p^4P^0$	3283.4	5.8	24200	0.097	0.0536	0.134	0.0881

element	prelaz	λ (Å)	N_e 10^{16} cm^{-3}	T (K)	W_{exp} (Å)	W_{se} (Å)	W^A (Å)	W^B (Å)
N III	$3s^2S-3p^2P^O$	4097.3	5.5	24300	0.096	0.0653	0.162	0.106
N III	$3p^2P^O-3d^2D$	4640.6	5.5	24300	0.112	0.0832	0.211	0.159
N III	$3s^4P-3p^4P$	3367.3	5.5	24300	0.098	0.0425	0.115	0.0765
S III	$4s^3P^O-4p^3S$	3717.78	2.1	23700	0.074	0.029	0.073	0.048
S III	$4p^3P-4d^3D^O$	2964.80	2.1	23700	0.081	0.029	0.069	0.050
S IV	$4s^2S-4p^2P^O$	3097.46	2.1	23700	0.045	0.016	0.045	0.025

odnos teorijskih i eksperimentalnih vrednosti za svaku vrstu jona posebno kao i po svim vrstama jona. Rezultati su dati u tabeli 7.

TABELA 7.

Usrednjeni odnos eksperimentalnih i teorijskih rezultata za pojedine elemente

	$(\frac{W_{\text{se}}}{W_{\text{exp}}})_{\text{sr}}$	$(\frac{W_A}{W_{\text{exp}}})_{\text{sr}}$	$(\frac{W_B}{W_{\text{exp}}})_{\text{sr}}$
Ar III	0.74	1.76	1.18
Ar IV	0.81	1.86	1.11
C III	0.46	0.84	0.68
C IV	0.74	1.10	0.79
Si III*	0.95	2.28	1.48
Si IV	0.87	2.03	1.20

* Linija $\lambda = 3486.9$ nije uzeta, jer ne zadovoljava kriterijume izolovanosti.

	$(\frac{W_{se}}{W_{exp}})_{sr}$	$(\frac{W_A}{W_{exp}})_{sr}$	$(\frac{W_B}{W_{exp}})_{sr}$
O III	0.53	1.39	0.99
Cl III	0.58	1.38	0.94
N III	0.62	1.58	1.10
S III	0.38	0.92	0.63
S IV	0.36	1.00	0.56
Usrednjeno po vrstama jona	0.75	1.47	1.04

Iz tabele se vidi da semiempirijska formula sistematski daje manje vrednosti od eksperimentalnih za sve razmatrane višestruko jonizovane atome, sa najvećim odstupanjem kod S IV gde je $(W_{se}/W_{exp})_{sr} = 0.36$. Slaganje sa eksperimentom kod nemodifikovane semiklasične teorije, varira za različite vrste jona i kreće se od 0.84 za C III do 2.03 za Si IV. U najvećem broju slučajeva, eksperimentalne vrednosti su manje od teorijskih što pokazuje i odnos W_A/W_{exp} usrednjen po vrstama jona (=1.47). Odnos $(W_B/W_{exp})_{sr}$ za modifikovanu semiklasičnu teoriju, kreće se od 0.56 za S IV do 1.48 za Si III, a kada se razmatrani odnos usredjeni po vrstama jona dobija se vrednost 1.04. Vidimo da se ovakav teorijski prilaz dobro slaže sa eksperimentom i da je naročito pogodan za probleme kod kojih je neophodno računanje većeg broja Štarkovih parametara (npr. prenos zračenja kroz zvezdane atmosfere) pošto tada tačnost celog postupka raste.

Z A K L J U Č A K

U radu je izvršena detaljna analiza kretanja nanelektrisane čestice pod uticajem Kulonovog, polarizacionog i kvadru-polnog potencijala i dobijeni su analitički izrazi za parametre putanje čestice. Takođe su ispitani uslovi za egzistenciju kritičnog sudarnog parametra ρ_C koji razdvaja putanje koje završavaju u atomu od onih koje odlaze u beskonačnost i razradjene metode za njegovo nalaženje. Na osnovu izvršenih proračuna izveden je zaključak da je:

- odstupanje od pravolinijske putanje znatno za male sudarne parametre.

Rezultati ovog ispitivanja su primjenjeni na teoriju Štarkovog širenja, pri čemu je posebna pažnja posvećena adijabatskoj granici i kvazistatičkoj i sudarnoj aproksimaciji. Izvedeni zaključci su:

- jaki sudari i njihova procena predstavljaju najkritičniji deo semiklasične teorije,
- odnos $|d|/w$ na adijabatskoj granici koji direktno ulazi u GBKO teoriju drastično se menja kada se u razmatranje uključi uticaj potencijala dugog dometa,
- kada Δw neograničeno raste postaje dominantan uticaj niskoenergetskih bliskih sudara kod kojih uticaj potencijala dugog dometa postaje značajan,

- uticaj potencijala dugog dometa na Štarkovu širinu linija na kvazistatičkoj granici zanemarljiv je u optičkom delu spektra kod intenzivnih linija neutralnih emitera, dok kao popravka može uticati na daleka krila linija sa velikim glavnim kvantnim brojem gornjeg nivoa,
- kod jonizovanih emitera, u određivanju krila linije dominantan je Kulonov potencijal,
- uključivanjem uticaja potencijala dugog dometa na širinu mete u udarnoj aproksimaciji menja se minimalni sudarni parametar ρ_{\min} i funkcija Štarkovog širenja.

U radu je izvedena modifikacija funkcija Štarkovog širenja i pokazano je da je najveći uticaj zakrivljenosti putanja na njih, u blizini ρ_C . Promena u veličini A_2 će najviše uticati na parametre Štarkovog širenja kod linija za koje je pri najverovatnijoj brzini uticaj neelastičnog doprinosa dominantan a efektivna polarizabilnost velika. Izvedeni su i sledeći zaključci:

- Uticaj potencijala dugog dometa kod neutralnih emitera u oblasti semiklasične aproksimacije najveći je kada je efektivna polarizabilnost velika a ρ_{SC} mala.
- U oblasti energija $KT/\Delta E \leq 3$ gde je uticaj potencijala dugog dometa značajan semiempirijska formula ne opisuje korektno zavisnost Štarkove polusirine od temperature.

Takodje je analizirana primena semiempirijskog aproksimativnog semiklasičnog prilaza za višestruko ionizovane emitere,

pri čemu je izvršena modifikacija semiklasične teorije. Usrednjeni odnos eksperimentalnih i teorijskih rezultata je 0.75 za semiempirijski, 1.47 za semiklasični a 1.04 za modifikovani semiklasični prilaz.

Rad na ovoj tezi obuhvatio je neke probleme teorije rasejanja i njihovo uključivanje u teoriju Šarkovog širenja spektralnih linija plazme. Ove dve problematike su usko povezane i dalji napredak teorije Šarkovog širenja uslovjen je izmedju ostalog i boljim poznavanjem sudarnih procesa koji učestvuju u mehanizmu širenja linije.

Rezultati dobijeni tokom rada na doktorskoj disertaciji mogu se primeniti i na razvoj teorije širenja radiolinija kao i na izvesne probleme astrofizike plazme. Modifikovana teorija za Šarkovo širenja višestruko jonizovanih atoma pogodna je za proučavanje prenosa zračenja u zvezdanim atmosferama, dok adiabatska teorija može doprineti poznavanju procesa širenja linija iz medjuvezdanih oblaka vodonika. Za dalje proučavanje je takođe interesantan i dalji razvoj teorije širenja linija visoko ionizovanih atoma, pošto razvoj eksperimentalne tehnike omogućava dobijanje eksperimentalnih rezultata pogodnih za poređenje sa teorijom.



L I T E R A T U R A

1. Abramovitz, M., Stegun, I.A., 1964, Handbook of Mathematical Functions, Eds. M. Abramovitz, I.A. Stegun, NBS Appl. Math. Ser., 55
2. Ali, A.W., Griem, H.R., 1965, Phys. Rev., 140, A1044, Phys. Rev., 144, 366
3. Baranger, M., 1958a, Phys. Rev., 111, 481
4. Baranger, M., 1958b, Phys. Rev., 111, 494
5. Baranger, M., 1958c, Phys. Rev., 112, 855
6. Baranger, M., 1962, in Atomic and Molecular Processes, ed by D.R. Bates (Academic Press Inc., New York) chap. 13
7. Barnard, A.J., Cooper, J., Smith, E.W., 1974, JQSRT, 14, 1025
8. Bassalo J.M., Cattani, M., 1975, Can. J. Phys., 53, 2285
9. Bates, D.R., Damgaard, A., 1949, Phil. Trans. Roy. Soc., London, Ser. A 242, 101
10. Bennett, S.M., Griem, H.R., 1971, Technical Report 71-097, University of Maryland
11. Bezzerides, B., 1969, Phys. Rev., 186, 239
12. Brechot, S., Van Regemorter, H., 1964b, 24, 739
13. Breene, R.G., 1964, in Handbuch der Physik (S. Flügge ed.), Vol. 27, 1, Springer-Verlag, Berlin and New-York
14. Brissaud, A., Frisch, U., 1971, JQSRT, 11, 1767
15. Brissaud, A., Frisch, U., 1974, J.Math.Phys., 15, 524
16. Brissaud, A., Goldbach, C., Leorat, J., Mazure, A., Nollez, G., 1976a, J. Phys. B, 9, 1129
17. Brissaud, A., Goldbach, C., Leorat, J., Mazure, A., Nollez, G., 1976b, J. Phys. B, 9, 1147
18. Brueckner, K.A.: 1971, Astrophys. J., 169, 621
19. Caby - Eyraud, M., Coulaud, G., Ngyuen Hoe, 1975, JQSRT, 15, 593

20. Chapelle, J., Sy, A., Cabannes, F., Blandin, J., 1968,
C.R.H. Acad. Sci., Ser. B, 166, 1513
21. Cooper, J., Oertel, G.K., 1967, Phys. Rev. Lett., 18, 985
22. Cooper, J. Oertel, G.K., 1969, Phys.Rev., 180, 286.
23. Damburg, R.J.: 1969, J.Phys. B, 2, L 145
24. Damburg, R., Geltman, S., 1968, Phys. Rev. Lett., 20A, 485
25. Davis, J., Roberts, D.E., 1967, Proc. Phys. Soc., 92, 889
26. Dimitrijević S.Milan, 1976, Analiza Štarkovog širenja
spektralnih linija argona, magistarski rad, Institut za
fiziku, Beograd
27. Dimitrijević, M.S., Grujić, P., 1977, XIII-th Int. Conf. on
Phys. Ioniz. Gases, Berlin, 131
28. Dimitrijević, M.S., Grujić, P. 1978a, JQSRT, 19, 407
29. Dimitrijević, M.S., Grujić, P.V.; 1978b, IX SPIG
Dubrovnik, 261
30. Dimitrijević, M.S., Grujić, P.V.: 1978c, poslato na IV E~~SCAMPIC~~
Essen
31. Dimitrijević, M., Konjević, N., 1978, JQSRT, prihvaćeno za
štampu
32. Dufty, J.W., 1969, Phys. Rev., 187, 305
33. Edmonds, A.R.: 1960, Angular Momentum in Quantum Mechanics,
Princeton University Press, Princeton, New Jersey
34. Fano, U., 1967, Rev. Mod. Phys., 29, 74
35. Foley, H.M., 1946, Phys. Rev., 69, 616
36. Frost, B., 1976, J.Phys.B, 9, 1001
37. Fuhr, J.R., Wiese, W.L., Roszman, L.J., 1972, NBS. Spec. Publ.
366, U.S. Gov. Print. Office, Washington, D.C.
38. Fuhr, J.R., Roszman, L.J., Wiese, W.L., 1974, NBS. Spec.Publ.
366 Suppl. 1, U.S. Gov. Print. Office, Washington D.C.
39. Fuhr, J.R., Martin, G.A., Specht, B.J., 1975, NBS Spec. Publ.
366, Suppl. 2, U.S. Gov. Print. Office, Washington D.C.

40. Goldstein, H., 1950, Classical Mechanics, Addison-Wesley, London
41. Gradstein, I.S., i Ryzhik, I.M.: 1965, Tables of Series Products and Integrals, New York, Academic Press
42. Green, R.L. i Cooper, J.: 1975, JQSRT, 15, 1037
43. Green, R.L., Cooper, J., Smith, E.W., 1975, JQSRT, 15, 1025
44. Griem, H.R., 1960, Astrophys. J., 132, 883
45. Griem, H.R., 1964, Plasma Spectroscopy, Mc Graw Hill Inc., New York
46. Griem, H.R., 1965, Phys. Rev., 140, A1140, Phys. Rev., A 144, 366
47. Griem, H.R., 1968, 165, 258
48. Griem, H.R., 1974, Spectral Line Broadening by Plasmas, Academic Press, New York and London
49. Griem, H.R., 1975, in Advances in Atomic and Molecular Physics, Vol. 11 (ed. Bates D.R., Bederson Benjamin), Academic Press, New York i London
50. Griem, H.R., Baranger, M., Kolb, A.C., Oertel, G.K., 1962, Phys. Rev., 125, 177
51. Griem, H.R., Kolb, A.C., Shen, K.Y., 1959, Phys. Rev., 116, 4
52. Hayashi i Kuchitsu: 1977, J. Phys. Soc. Japan, 42, 621
53. Heitler, W., 1954, The quantum theory of radiation, Oxford University Press, London
54. Helbig, V., Kelleher, D.E., Wiese, W.L., 1976, Phys. Rev., A14, 1082
55. Hey, J.D., 1976a, JQSRT, 16, 575
56. Hey, J.D., 1976b, JQSRT, 17, 729
57. Hey, J.D., 1977, JQSRT, 18, 649
58. Hey, J.D., Bryan, R.J., 1977, JQSRT, 17, 221

59. Hindmarsh, W.R., Farr, J.M., 1972, Prog. Quantum Electron., 2, 143
60. Holtsmark, J., Z.Physik, 20, 162
61. Holtsmark, J., 1924, Z. Physik, 85, 73
62. Hooper, C.F., 1968, Phys.Rev., 165, 215
63. Jalufka, H.W., Oertel, G.K., Ofelt, G.S., 1966, Phys.Rev. Lett. 16, 1073
64. Jones, W.W., 1973, Phys. Rev., A 7, 1826
65. Jones, W.W., Bennett, S.M., Griem, H.R., 1971, Technical Report 71-128, University of Maryland
66. Kobzev, G.A., 1971, Opt. Spectrosc. (USSR), 30, 100
67. Klein, L., 1973, JQSRT, 13, 567
68. Konjević, N., Labat, J., Ćirković, Lj., Purić J., 1970, Z.Phys., 235, 35
69. Konjević, N., Roberts, J.R., 1976, J. Phys. Chem. Ref. Data, 5, 209
70. Kuhn, G., 1934, Phil. Mag., 18, 986
71. Labahn, R.B., Callaway, J., 1966, Phys. Rev., 147, 2870
72. Labat, J., Djeniže, S., Ćirković, Lj., Purić, J., 1974, J.Phys. B, 7, 1174
73. Landau, L.D., Lifshitz, E.M., 1965, Quantum Mechanics, Pergamon Press, London
74. Leckrone, D.S., 1971, ASTRONOMY ASTROPHYS., 11, 387
75. Lesage, A., Sahal Brechot, S., Miller, M.H., 1977, Phys. Rev., A 16, 1617
76. Lindholm, E., 1945, Arkiv Mat. Astron. Fys., 32A, No 17, 1
77. Lisica, V.S., 1977, UFN, 122, 449
78. Lisica V.S., i Šolin, G.V., 1971, ŽETF, 61, 912
79. Lorentz, H.A., 1906, Proc. Acad. Sci., Amsterdam, 8, 591
80. Margenau, H., 1935, Phys. Rev., 48, 755
81. Mead, C.A., 1968, Int. J. Theor. Phys., 1, 317

82. Messiah, A., 1961, "Quantum Mechanics", Vol. 1, p. 66,
J. Willey & Sons, Inc., New York
83. Michelson, A.A., 1895, *Astrophys. J.*, 2, 25
84. Morris, J.C., Krey, U.R., Garrison, R.L., 1968 Radiation
Studies of Arc Heated Nitrogen, Oxygen and Argon Plasmas,
AVCO Corporation Space Systems Division, Report AVVSSD-0049-
-68-RR
85. Mozer, B., Baranger, M., 1960, *Phys. Rev.*, 118, 626
86. Murakava, K., Yamamoto, M., Hashimoto, S., 1965, Proc. of
the 7 th Int. Conf. Ioniz. Phen. Gases, Vol II, 594,
Gradjevinska knjiga, Beograd
87. Ohno, A., 1961, *J. Phys. Soc. Jap.*, 16, 2402
88. Omont, A., 1965, *J. Phys.*, 26, 26
89. Omont, A., Encrenaz, P., 1974, *Astronomy Astrophys.*, 56, 447
90. Platiša, M., Dimitrijević, M., Popović, M., Konjević, N.,
1977a, *J.Phys.B*, 10, 2997
91. Platiša, M., Dimitrijević, M., Popović, M., Konjević, N.,
1977b, *Astron. Astrophys.*, 54, 837
92. Popenoe, C.H., Shumaker, J.B.Jr., 1965, *J.Res. Nat. Bur.
Stand.*, Sect. A 69, 495
93. Roberts, D.E., 1966, *Phys. Lett.*, 22, 417
94. Roberts, D.E., 1968, *J.Phys. B.*, 1, 53
95. Roberts, D.E. i Davis, J., 1967, *Phys. Lett.*, 25A, 175
96. Ross, D.W., 1966, *Ann. Phys. (N.Y.)*, 36, 458
97. Sahal, S., Van Regemorter, H., 1964a, *Ann. D'Astrophys.*,
24, 432
98. Sahal-Brechot, S., 1969, *Astronomy and Astrophys.*, 1, 91
99. Seaton, M.J., 1962, *Phys. Soc. (London)*, 79, 1105
100. Seidel, J., 1977a, *Z. Naturforsch.*, 32a, 1195

101. Seidel, J., 1977b, Z. Naturforsch., 32a, 1207
102. Smith, E.W., Cooper, J., Roszman, L., 1973, JQSRT, 13, 1523
103. Smith, E.W., Cooper, J., Vidal, C.R., 1969, Phys. Rev., 185, 140
104. Smith, E.W., Vidal, C.R., Cooper, J., 1969a, 73A, 389
105. Smith, E.W., Vidal, C.R., Cooper, J., 1969b, J. Res. Natl. Bur. Stand., 73A, 405
106. Sobel'man, I.I., Broadening of Spectral Lines in "An Introduction to the Theory of Atomic Spectra" ch. 10, 377 (ed. Woodgate, G.K.), Pergamon Press, New York
107. Stacey, D.N., Cooper, J., 1971, JQSRT, 11, 1271
108. Tran Minh, van Regemorter, H., 1972, J.Phys. B, 5, 903
109. Tran Minh, N., Feautrier, N., Van Regemorter, H., 1975, J. Phys. B, 8, 1810
110. Underhill, A.B., Waddell, J., 1959, NBS circ. No 603
111. Unsöld, A.: 1955, "Physik der Sternatmosphären", Springer Verlag
112. Vallee, O., Ranson, P., Chapelle, J., 1977, J. Phys. B38, 1201
113. Van Regemorter, H., 1972, in "Atoms and Molecules in Astrophysics", ed. by T.R. Carson and M.J. Roberts, Academic Press, London and New York
114. Vidal, C.R., Cooper, J., Smith, E.W., 1970, JQSRT, 10, 1011
115. Vogt, E., Wannier, G.H., 1954, Phys. Rev., 95, 1190
116. Voslamber, D., 1969, Z.Naturforsch., 24A, 1458
117. Voslamber, D., 1972, Z. Naturforsch., 27A, 1733



Прилог 1.

Изјава о ауторству

Потписани-а Милан Димитријевић

број индекса _____

Изјављујем

да је докторска дисертација под насловом

Утицај потенцијала дугог дometа на Штарково ширење спектралних линија
плазме

результат сопственог истраживачког рада,

да предложена дисертација у целини ни у деловима није била
предложена за добијање било које дипломе према студијским
програмима других високошколских установа,

да су резултати коректно наведени и

да нисам кршио ауторска права и користио интелектуалну својину
других лица.

Потпис докторанда



У Паризу, 28.11.2013

—

Прилог 3.

Изјава о коришћењу

Овлашћујем Универзитетску библиотеку „Светозар Марковић“ да у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду унесе моју докторску дисертацију под насловом:

Утицај потенцијала дугог дometa на Штарково ширење спектралних линија плазме

која је моје ауторско дело.

Дисертацију са свим прилозима предао/ла сам у електронском формату погодном за трајно архивирање.

Моју докторску дисертацију похрањену у Дигитални репозиторијум Универзитета у Београду могу да користе сви који поштују одредбе садржане у одабраном типу лиценце Креативне заједнице (Creative Commons) за коју сам се одлучио/ла.

X1. Ауторство

2. Ауторство - некомерцијално
3. Ауторство – некомерцијално – без прераде
4. Ауторство – некомерцијално – делити под истим условима
5. Ауторство – без прераде
6. Ауторство – делити под истим условима

(Молимо да заокружите само једну од шест понуђених лиценци, кратак опис лиценци дат је на полеђини листа).

Потпис докторанда



У Паризу, 28.11.2013 _____

-
1. Ауторство - Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце, чак и у комерцијалне сврхе. Ово је најслободнија од свих лиценци.
 2. Ауторство - некомерцијално. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела.
 3. Ауторство - некомерцијално - без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела. У односу на све остале лиценце, овом лиценцом се ограничава највећи обим права коришћења дела.
 4. Ауторство - некомерцијално - делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца не дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада.
 5. Ауторство - без прераде. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, без промена, преобликовања или употребе дела у свом делу, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела.
 6. Ауторство - делити под истим условима. Дозвољавате умножавање, дистрибуцију и јавно саопштавање дела, и прераде, ако се наведе име аутора на начин одређен од стране аутора или даваоца лиценце и ако се прерада дистрибуира под истом или сличном лиценцом. Ова лиценца дозвољава комерцијалну употребу дела и прерада. Слична је софтверским лиценцама, односно лиценцама отвореног кода.