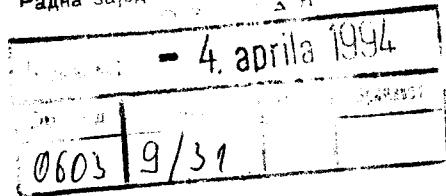


UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Природно-математички факултет
Радна заједница заједничких послова'



Nikolić Dragan

APROKSIMATIVNI METOD ZA DEKONVOLUCIJU
GAUSSOVOG I $j_{A,R}(x)$ PROFILA SPEKTRALNIH LINIJA
NEUTRALNIH ELEMENATA EMITOVAJUĆIH IZ PLAZME

- Diplomski rad -

Novi Sad 1994.

Iskreno se zahvaljujem svom mentoru, doc. dr. R. Kobilarov-u, kao i doc. dr. S. Đuroviću, van. prof. dr. B. Vujičiću i mr. Z. Mijatoviću, na izboru teme diplomskog rada i pomoći koju su mi pružili tokom njegove realizacije. Posebno bih htio da se zahvalim van. prof. dr. Agneš Kapor i S. Rakiću, koji su mi omogućili da ovaj rad napišem u tekst procesoru LaTex. Takođe se zahvaljujem prof. dr. Darku Kaporu na sugestijama vezanim za kvantno-mehanički formalizam koji je izložen u ovom radu.

Nikolić Dragan

U v o d

Ovaj rad je zamišljen kao sažet pregled obimnog materijala posvećenog uzrocima širenja spektralnih linija, kao i testiranju postojećih i novih teorijskih proračuna širenja spektralnih linija. Analizom emitovanog ili apsorbovanog zračenja mogu se dobiti razne informacije o parametrima plazmenog stanja, kao što su npr. koncentracija nanelektrisanih i neutralnih čestica i njihova temperatura ili podaci o pojedinim atomskim procesima u plazmi. Starkovo širenje igra važnu ulogu u spektroskopiji plazme, te se šezdesetih godina otpočelo sa poboljšavanjem postojećih teorija Starkovog širenja spektralnih linija. Prve proračune Starkovog širenja dao je Griem [1,2], a nakon toga slede mnogobrojni radovi [3,4] u kojima su mereni Starkovi parametri za spektralne linije različitih elemenata. Korišćenje eksperimentalnih vrednosti Starkovih parametara u dijagnostičke svrhe zahteva dobro razrađene teorijske modele, ali za testiranje tih modela potrebni su ne samo pouzdani već i sistematizovani eksperimentalni podaci. Na osnovu asimetrije profila spektralne linije, njene širine i pomaka moguće je suditi o fizičkim uslovima u kojima se vršila emisija elektromagnetskog zračenja. Otuda se velika pažnja poklanja određivanju širina i eventualnih pomaka spektralnih linija emitovanih iz gasne plazme. Observirani eksperimentalni profil je proširen kombinovanim uticajem Dopplerovog i Starkovog efekta, te se može predstaviti kao konvolucija normiranog Gaussovog i Starkovog profila. Starkov profil je za neutralne emitere konvolucija disperzionog Lorentzovog profila i funkcije raspodele jona oko emitera izračunate u kvazistatičkoj aproksimaciji, što odgovara simultanom uticaju elektrona i jona na procese emisije elektromagnetskog zračenja. Kada se jonski uticaj može zanemariti, Starkov profil je disperzionog tipa te je observirani profil Voigtova funkcija čija se dekonvolucija vrši standardnim metodama dekonvolucije simetričnih funkcija. Međutim, u slučaju kada je doprinos jona širenju spektralnih linija toliko evidentan, da se ne može zanemariti, Starkov profil je funkcija $j_{A,R}(x)$, koja je zbog uticaja nanelektrisanih jona asimetrična. Do sada se dekonvolucija Gaussovog i $j_{A,R}(x)$ profila vršila metodama dekonvolucije simetričnih funkcija, tako što je $j_{A,R}(x)$, zbog svoje složenosti, zamjenjivana pogodnim disperzionim profilom iako je $j_{A,R}(x)$ asimetrična funkcija. U ovom radu biće aproksimativno izvršena konvolucija $G(x)$ i $j_{A,R}(x)$ profila za različite vrednosti parametara A i R a potom izložen jednostavan postupak dekonvolucije ta dva profila. Ovim postupkom se očekuje smanjenje greške u proceni Starkovih parametara, u odnosu na greške koje bi nastale dekonvolucijom asimetričnih profila primenom standardne metode dekonvolucije simetričnih funkcija. Ovaj rad osim uvoda sadrži i dva poglavlja, zaključak i spisak literature. Prvo poglavlje obrađuje u kratkim crtama najbitnije elemente teorije širenja spektralnih linija prezentovane sa aspekta klasične fizike i sa aspekta kvantomehaničkih izračunavanja. U drugoj glavi je opisan aproksimativan metod dekonvolucije Gaussovog i $j_{A,R}(x)$ profila, kao i slaganje ovako dobijenih rezultata sa eksperimentalnim podacima za neutralni helijum.

Sadržaj

GLAVĂ I

Uzroci širenja spektralnih linija

1.1 Prirodno širenje.....	2
Aspekt klasične elektrodinamike.....	2
Kvantno-mehanički aspekt	5
1.2 Širenje usled Dopplerovog efekta	6
1.2.1 Metod funkcija raspodela	7
1.2.2 Metod autokorelace funkcije	9
1.3 Širenje usled pritiska	12
Autokoreaciona funkcija $\Phi(s)$	14
Reprezentacija interakcije i atom sa jednim nivoom	16
Teorija udarnog širenja	18
Aspekt klasične fizike.....	18
Kvantno-mehanički aspekt	21
Kvazistatička teorija širenja	25
1.3.1 Van der Waalsovo širenje	26
1.3.2 Rezonantno širenje.....	28
1.3.3 Starkovo širenje	28
Uticaj elektrona na širenje spektralnih linija	36
Uticaj jona na širenje izolovanih linija	37
1.4 Instrumentalno širenje	39
Disperzija i moć razlaganja spektralnog uređaja	40
Svetlosna moć i efikasnost spektralnog uređaja	41
Disperzionalni elementi	41
Rasuta svetlost i lažne linije	41
Astigmatizam	42
Uticaj širine upotrebljenog razreza	42
Uticaj osvetljavanja	43

GLAVĂ II

Rasprostranjenost plazmenog stanja i parametri gasne plazme

Rasprostranjenost plazmenog stanja.....	45
Aproximativna konvolucija i dekonvolucija observiranih profila spektralnih linija	46

1 Uzroci širenja spektralnih linija

Primenom spektralnih uređaja odgovarajuće moći razlaganja, uočeno je da spektralna linija nije strogo monohromatska, već ima odgovarajuću širinu, tj. u nekom intervalu učestanosti $\Delta\omega$ oko ω_0^* ima fotona svih učestanosti u manjoj ili većoj meri (vidi sliku 1). Profil nije nužno simetričan, već je spektralna

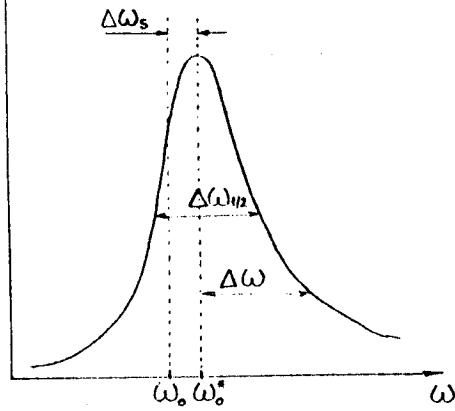
raspodela energije zračenja $\epsilon(\omega^*)$ najveća u centru profila ($\omega = \omega_0^*$) i nejednako opada na krilima profila, što je posledica kvadrupolnih interakcija ili povratnog dejstva emitera na perturber. Poluširina profila ($\Delta\omega_{1/2}$), forma kriла, eventualna asimetrija i pomak su osnovne karakteristike profila koje govore o posebnim fizičkim uslovima pod kojima se emituju fotoni. Učestanost ω_0^* , na kojoj se registruje maksimum spektralne raspodele energije zračenja $\epsilon(\omega^*)$, ne mora da odgovara učestanosti fotona $\omega_0 = (E_i - E_f)/\hbar$ koja odgovara prelasku sa višeg (*i*) na niži (*f*) energetski nivo, i koja bi se registrovala ako je atom-emiter izolovan i nepokretan. Pomak profila se definiše kao $\Delta\omega_s = \omega_0 - \omega_0^*$. Atomski apsorbcijski koeficijent spektralne linije je dat izrazom:

$$k(\Delta\omega) = \left(\frac{\pi e^2 f N_i}{m_e c} \right) \cdot \left(\frac{P(\Delta\omega)}{2\pi} \right) \quad (1)$$

gde su: f -jačina oscilatora, N_i -broj oscilatora u stanju sa energijom E_i , $\Delta\omega$ -rastojanje od centra linije u skali učestanosti, $P(\Delta\omega)$ -profil spektralne linije koji je normiran na jedinicu.

U navedenim razmatranjima, ograničavamo se na izračunavanje $P(\Delta\omega)$. Sama činjenica da $P(\Delta\omega)$ predstavlja funkciju konačne širine a ne Diracovu δ -funkciju, posledica je četiri glavna uzroka širenja:

- *) Interakcija atoma-emitera sa poljem sopstvenog zračenja, koja je okarakterisana silom zračenja, izaziva *prirodno širenje*. Prirodno širenje spektralne linije je posledica fundamentalnih osobina materije okarakterisanih Heisenbergovim relacijama neodredenosti.
- *) Termalno kretanje skupa emitera uzrokuje gubitak monohromatičnosti zračenja koje se u tom skupu emituje, usled prividnog pomeranja učestanosti prouzrokovanoj Dopplerovim efektom. Rezultat toga je *Dopplerovo širenje*.
- *) Interakcija atoma-emitera sa okolnim česticama, što rezultuje *širenjem usled privreda*. Prema vrsti interakcije između emitera i perturbera postoji:
 - Van der Waalsovo širenje usled interakcije sa neutralnim perturberima
 - Rezonantno širenje, ako struktura energetske nivoa emitera i perturbera pruža mogućnost rezonantnog skraćenja vremena života ekscitovanog emitera usled efekta izmene.



slika 1

- Starkovo širenje električnim mikropoljem nanelektrisanog perturbera
- *) Interakcija emitovanog zračenja sa mernim uređajem, što rezultuje u *instrumentalnom širenju*, koje egzistira i u slučaju monohromatskog zračenja. Spektralna linija je difrakciona slika ulazne pukotine spektralnog uređaja.

Pomeranje i cepanje energijskih nivoa može biti izazvano i magnetnim poljem usled Zemanovog efekta, te je logično očekivati i postojanje *Zemanovog širenja*. Međutim, laboratorijske plazme nemaju takvo statistički fluktuirajuće magnetno polje koje bi izazvalo Zemanovo širenje. Stelarne plazme se karakterišu dovoljno velikim gradijentom magnetnog polja za prouzrokovanje Zemanovog širenja.

1.1 Prirodno širenje

Prirodna širina linije egzistira i onda kada su emiteri izolovani i bez termičkog kretanja. Ona će se detaljno razraditi sa stanična klasične elektrodinamike i sa aspekta kvantne mehanike.

Aspekt klasične elektrodinamike

Po ovom aspektu, prirodno širenje je posledica činjenice da ubrzana nanelektrisana čestica gubi energiju na radijaciju i to brzinom:

$$I = -\frac{dE}{dt} = \frac{q^2(\ddot{\vec{r}})^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (2)$$

gde su: q -nanelektrisanje čestice, $\ddot{\vec{r}}$ -ubrzanje čestice, ϵ_0 -dielektrična permeabilnost vakuuma, c -brzina svetlosti u vakuumu.

Najjednostavniji klasični izvor elektromagnetskog zračenja je LHO, te se za uzrok emisije svetlosti iz atoma uzima harmonijsko oscilovanje atomskih elektrona. Oscilovanje elektrona duž nekog pravca opisuje se funkcijom:

$$\vec{r}(t) = a \cos(\omega_0 t) \quad (3)$$

gde je : a -amplituda oscilovanja, ω_0 -učestanost oscilovanja. Elektron poseduje kinetičku i potencijalnu energiju :

$$T = \frac{m(\dot{r})^2}{2} \quad U = \frac{1}{2} \cdot m\omega_0^2 \cdot r^2 \quad (4)$$

tako da je srednja vrednost totalne energije elektrona :

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle \quad (5)$$

Sa obzirom da je $\langle \sin^2(\omega_0 t) \rangle = \langle \cos^2(\omega_0 t) \rangle = 1/2$ dobija se:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2}m\omega_0^2 a^2 \quad (6)$$

Energija elektrona je proporcionalna kvadratu amplitude oscilovanja. Da bi se opravdalo uvođenje harmonijskog oscilovanja, neophodno je uporediti veličinu gubitka energije elektrona u toku jednog perioda oscilovanja sa njegovom ukupnom energijom. Energija koju elektron u jedinici vremena izrači je data sa (2), tako da je njen srednji vrednost, korišćenjem (3) data sa:

$$\langle I \rangle = \frac{e^2 \langle \ddot{r}^2 \rangle}{6\pi\epsilon_0 c^3} = \gamma \langle E \rangle \quad (7)$$

gde je konstanta prigušenja (γ) data sa:

$$\gamma = \frac{e^2 \omega_0^2}{6\pi\epsilon_0 c^3 m} \quad (8)$$

Brzina promene energije elektrona je:

$$\frac{dE}{dt} = -\langle I \rangle = -\gamma \langle E \rangle \quad (9)$$

odakle se dobija:

$$\langle E \rangle = E_0 \exp\{-\gamma t\} \quad (10)$$

Vidi se da energija elektrona eksponencijalno opada sa vremenom i ona opadne $e = 2.718\dots$ puta od početne vrednosti E_0 za vreme relaksacije ($\tau_r = 1/\gamma$). Ilustracije radi, za vidljivi deo spektra oko talasne dužine $\lambda_0 = 500\text{nm}$ za τ_r se dobija oko 10^{-6}s . To je veoma kratko vreme sa aspekta eksperimenta, te elektron praktično izrači svu svoju energiju. Međutim, predpostavka o harmoničnosti ipak ostaje na snazi, jer je period oscilovanja $\tau_o = \lambda_0/c \sim 10^{-15}\text{s}$, tako da elektron izvrši preko 10^6 oscilacija pre no što osetno izgubi energiju. Elektron emituje sferni elektromagnetski talas sa učestanostu ω_0 , a uticaj emisije energije se ogleda u vrlo sporoj promeni amplitute oscilovanja, jer je energija proporcionalna kvadratu amplitute. Ovi energijski gubici usled emisije se mogu smatrati kao da su uzrokovani silom zračenja koja je disipativna i predstavlja silu kojom polje emitovanog zračenja deluje na izvor tog zračenja. Problem se svodi na oscilovanje u otpornoj sredini sa silom trenja:

$$f = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \frac{d}{dt}(\ddot{r}) = -\frac{e^2 \omega_0^2 \dot{r}}{6\pi\epsilon_0 c^3} \quad (11)$$

Srednja vrednost rada učinjenog silom f je:

$$\langle A_f \rangle = \langle f \dot{r} \rangle = -\frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \langle \ddot{r}^2 \rangle \quad (12)$$

što je adekvatno srednjem elektromagnetskom gubitku energije. Jednačina kretanja prigušenog oscilatora je stoga :

$$\ddot{r} - \frac{f}{m} + \omega_0^2 r = \ddot{r} + \gamma \dot{r} + \omega_0^2 r = 0 \quad (13)$$

Rešenje ove diferencijalne jednačine je oblika :

$$r(t) = a \exp\{-\frac{\gamma}{2}t\} \cos(\omega_0 t) \quad (14)$$

Evidentno je da ovo oscilovanje nije strogo harmonijsko, te emitovani talas neima strogo određenu učestanost. Na osnovu Fourierove teoreme, svako neperiodično kretanje se može prikazati kao beskonačna suma harmonijskih oscilovanja svih učestanosti. Zato se kretanje elektrona može prikazati kao:

$$r(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} a(\omega) \exp\{i\omega t\} d\omega \quad (15)$$

gde su amplitude $a(\omega)$ određene integralom:

$$a(\omega) = \int_0^{+\infty} r(t) \exp\{-i\omega t\} dt \quad a^*(\omega) = \int_0^{+\infty} r(t) \exp\{i\omega t\} dt \quad (16)$$

Pošto se oscilovanje elektrona jako brzo uguši, eksperiment opaža samo ukupnu izračenu energiju:

$$E = \int_0^{\infty} I dt = \frac{e^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\infty} (\ddot{r})^2 dt \quad (17)$$

a sa obzirom da je $\ddot{r} = -\omega_0^2 r$, dobija se:

$$E = \frac{e^2 \omega_0^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} \int_0^{\infty} r^2 dt \quad (18)$$

Gornji integral se prikazuje pomoću Fourierovog integrala :

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} r^2 dt &= \int_0^{\infty} r(t) \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} a(\omega) \exp\{i\omega t\} d\omega \right] dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} a(\omega) \left[\int_0^{\infty} r(t) \exp\{i\omega t\} dt \right] d\omega \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} a(\omega) a^*(\omega) d\omega \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} |a(\omega)|^2 d\omega \end{aligned} \quad (19)$$

Dakle :

$$E = \frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \epsilon(\omega) d\omega \quad \epsilon(\omega) = \frac{e^2 \omega_0^4}{6\pi\epsilon_0 c^3} |a(\omega)|^2 \quad (20)$$

gde je $\epsilon(\omega)$ izraz za spektralnu raspodelu zračenja. Na osnovu izraza za amplitude, dobija se :

$$\begin{aligned} a(\omega) &= \int_0^{+\infty} a \exp\left\{-\left(\frac{\gamma}{2} + i\omega\right) \cdot t\right\} \cdot \cos(\omega_0 t) dt \\ &= \frac{a}{2i} \left[\frac{1}{i(\omega + \omega_0) + \frac{\gamma}{2}} - \frac{1}{i(\omega - \omega_0) - \frac{\gamma}{2}} \right] \end{aligned} \quad (21)$$

Sa obzirom da je $\gamma \ll \omega_0$, prvi član u gornjem izrazu uvek ostaje mali, pa se zanemaruje. Zato je :

$$|a(\omega)|^2 = a(\omega) a^*(\omega) \approx \frac{\left(\frac{\alpha}{2}\right)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} \quad (22)$$

Spektralna raspodela energije zračenja sada postaje :

$$\epsilon(\omega) = \frac{\epsilon(\omega_0) \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2}{(\omega - \omega_0)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} \quad (23)$$

gde je $\epsilon(\omega_0) = \frac{2\langle E \rangle}{\gamma}$. Dobijena spektralna raspodela energije $\epsilon(\omega)$ je simetrična u odnosu na učestanost ω_0 , a ako se uvede oznaka $\Delta\omega = \omega - \omega_0$, prethodni izraz postaje:

$$\epsilon(\Delta\omega) = \pi\langle E \rangle P(\Delta\omega) \quad (24)$$

Izraz $P(\Delta\omega)$ predstavlja Lorentzov (disperzionalni) profil :

$$P(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\left(\frac{\gamma}{2}\right)}{(\Delta\omega)^2 + \left(\frac{\gamma}{2}\right)^2} \quad (25)$$

Na osnovu gornjeg izraza, dobija se prirodna širina $\Delta\omega_{1/2}$:

$$\Delta\omega_{1/2} = \gamma \quad (26)$$

Izraz za prirodnu širinu dat u skali talasnih dužina je:

$$\Delta\lambda_{1/2} = \frac{e^2}{3\epsilon_0 c^2 m_e} = \frac{4\pi}{3} r_e = 1.18 \cdot 10^{-5} \text{ nm} \quad (27)$$

gde je r_e klasični radius elektrona. Iz priloženog se vidi da po klasičnoj elektrodinamici, prirodna širina spektralne linije ne zavisi od osobina samog emitera niti od talasne dužine emitovanog zračenja.

Kvantno-mehanički aspekt

Sa stanovišta kvantne mehanike, prirodno širenje je posledica činjenice da usled interakcije sa poljem zračenja vreme života energijskih nivoa biva konačno, te obzirom na relaciju neodređenosti postoji i neodređenost energije za dato stanje. Konstanta prigušenja γ_i za neki posmatrani inicijalni nivo, zavisi od srednjeg vremena života τ_i za taj nivo i to kao: $\gamma_i = \frac{1}{\tau_i}$. Sa druge strane, $\frac{1}{\tau_i}$ je proporcionalno sumi svih verovatnoća prelaza, za one prelaze koji napuštaju nivo i :

$$\gamma_i = \sum_f A_{if} + \sum_{f'} B_{f'i} u_\nu + \sum_f B_{if} u_\nu \quad (28)$$

Prvi član potiče usled spontane emisije, drugi usled spontane absorpcije a treći usled stimulisane emisije pod dejstvom spektralne gustine energije polja zračenja u_ν , date Planckovom formulom:

$$u_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp\left\{\frac{h\nu}{k_B T}\right\} - 1} \quad (29)$$

$A_{if}, B_{f'i}, B_{if}$ su Einsteinovi koeficijenti dati izrazima:

$$\frac{A_{if}}{B_{if}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad \frac{B_{if}}{B_{f'i}} = \frac{g_f}{g_i} \quad (30)$$

gde su g_f, g_i statističke težine (Landéovi koeficijenti) inicijalnog i finalnog stanja. Ako se pretpostavi da u finalnom stanju elektron takođe vrši harmoničko oscilovanje sa energijom E_f i konstantom prigušenja γ_f , onda se profil linije dobija jednostavnom superpozicijom disperzionalnih profila inicijalnog i finalnog stanja, što je adekvatno množenju eksponencijalnih faktora:

$$\exp\{-\gamma_i t\} \exp\{-\gamma_f t\} = \exp\{-(\gamma_i + \gamma_f)t\}$$

Rezultat je eksponencijalni faktor iste forme, tako da profil linije takođe predstavlja disperzionalni profil sa konstantom prigušenja $\gamma = \gamma_i + \gamma_f$. U optičkom delu spektra, eksitovana atomska stanja imaju vreme života reda $10^{-9} \sim 10^{-6}$ s, pa ako se prelazi vrše na osnovni nivo ($\gamma_f = 0$), za prirodnu širinu se dobija:

$$\Delta\lambda_{1/2} \in (1.3, 13) 10^{-5} \text{ nm} \quad (31)$$

Odavde se vidi da kvantna teorija daje deset ili više puta veće vrednosti za prirodnu širinu, nego što daje klasična fizika, naročito ako postoje učestali prelazi na niže energetske nivo. Sa aspekta kvantne mehanike, prirodna poluširina zavisi od same prirode prelaza i atomskih osobina emitera, ali ne zavisi od sredine u kojoj atom emituje. Suština kvantnomehaničkih efekata koji dovode do ovog širenja, je da se elektron u Coulombovom polju atomskog jezgra može nalaziti u stacionarnim stanjima sa energijama E_n koje obrazuju diskretan niz vrednosti. Pri emisiji fotona, stacionarnost se narušava jer elektronu treba neko vreme $\Delta\tau_n$ da pređe sa jedne „stacionarne“ orbite na drugu. Kao posledica ovoga, energija stacionarnog stanja se menja za iznos ΔE_n koji je kompleksna veličina. $\Re\{\Delta E_n\}$ odgovara pomeranju energetskog nivoa, dok $\Im\{\Delta E_n\}$ odgovara širenju energetskog nivoa usled energetskih transfera pri neelastičnim sudarima. Energetski nivoi usled toga postaju „razmazani“ (sem osnovnog) što je što je direktna manifestacija relacije neodređenosti

$$\Delta E \cdot \Delta\tau_n \simeq \hbar$$

Širina energetskog nivoa je grubo uvezši $\alpha^3 E_n$, gde je α konstanta fine strukture. Prirodna širina profila se najčešće zanemaruje i formalno se uzima da je to Diracova δ -funkcija.

1.2 Širenje usled Dopplerovog efekta

U analizi Dopplerovog širenja neophodno je razmatranja posebno vršiti za male gustine plazme (do 10^{24} čestica/ m^3) i za velike gustine plazme (preko 10^{24} čestica/ m^3). Ako gustina plazme nije veća od 10^{24} čestica/ m^3 , funkcije raspodele $f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t)$ pružaju najcelovitiju sliku o statističkim procesima u plazmi. Za gustine plazme veće od 10^{24} čestica/ m^3 neophodno je operisati sa korelacionim funkcijama. Stoga treba u kratkim crtama reći nešto o autokorelacionoj funkciji i njenim osobinama. U dalnjem izlaganju, atom emiter je predstavljen kao oscilator koji emituje elektromagnetske talase sa učestanostu ω_0 u sopstvenom sistemu reference. Termalno kretanje atoma, kao i vremenski zavisna perturbacija, uzrokuju poremećaje emitovane učestanosti $\Delta\omega(t)$ koju registruje posmatrač u sopstvenom sistemu reference. U vremenskom intervalu $[0, t]$ imamo sledeće dodatno pomeranje faze emitovanog talasa, usled navedenih efekata:

$$\eta(t, 0) = \int_0^t \Delta\omega(t') dt' \quad (32)$$

Observirano oscilatorno kretanje u ovom slučaju postaje:

$$r(t) = \exp\{i(\omega_0 t + \eta(t, 0))\} \quad (33)$$

Ako je:

$$a(\omega) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi\tau} \int_{-\tau/2}^{\tau/2} r(t) \exp\{-i\omega t\} dt \quad (34)$$

spektar amplituda, tada je energetska distribucija u spektru zračenja data sa:

$$P(\omega) = a(\omega)a^*(\omega) \quad (35)$$

Ova dobro znana relacija nije korisna za izračunavanje profila linije u našem slučaju, jer je veličina $\Delta\omega(t)$ slučajna promenjiva, te su poznate samo njene statističke osobine. WIENER [5] i CHINTCHINE [6] su nezavisno jedan od drugog pokazali da $P(\Delta\omega)$ i autokorelaciona funkcija $\Phi(s)$, definisana kao:

$$\begin{aligned} \Phi(s) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\int_{-\tau/2}^{\tau/2} r^*(t)r(t+s)dt}{\int_{-\tau/2}^{\tau/2} r^*(t)r(t)dt} \exp\{-i\omega_0 s\} \\ &= \langle \exp\{i\eta(t+s, t)\} \rangle \end{aligned} \quad (36)$$

obrazuju Fourierov par tako da je spektralna snaga

$$P(\Delta\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi(s) \exp\{-i\Delta\omega s\} \quad (37)$$

Faktor $\exp\{-i\omega_0 s\}$ u izrazu (36) se uvodi samo radi pogodnosti, jer vrši translaciju ishodišta skale učestanosti do vrednosti ω_0 . Kvalitativan opis osobina $\Phi(s)$ može se dobiti diskusijom definicione jednačine (36) : $\Phi(0) = 1, \Phi(-s) = \Phi^*(s)$ jer je $P(\Delta\omega)$ realna veličina. Stoga se za spektralnu snagu može uzeti izraz

$$P(\Delta\omega) = \Re \left\{ \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \Phi(s) \exp\{-i\Delta\omega s\} ds \right\} \quad (38)$$

U narednom delu primeniće se metod funkcija raspodela i metod autokorelace funkcije u analizi Dopplerovog širenja profila.

1.2.1 Metod funkcija raspodela

Ako gustina plazme nije veća od 10^{24} čestica / m^3 , statističke procese u plazmi najpogodnije je opisivati funkcijama raspodele, koje se za sistem od N vrsta čestica u plazmi ($\alpha = 1, 2, \dots, N$) definišu sa

$$\langle d^6 N_\alpha \rangle_a = f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{r} d^3 \vec{v} \quad (39)$$

Ovaj izraz predstavlja broj čestica vrste α usrednjjen po ansamblu, čije fazne tačke leže u elementu faznog prostora $d\tau = d^3 \vec{r} d^3 \vec{v}$ u okolini tačke (x, y, z, v_x, v_y, v_z) u momentu t . Makroskopska koncentracija čestica vrste α usrednjena po ansamblu, u tački \vec{r} u momentu t , dobija se integracijom (39) po svim brzinama:

$$\langle n_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a = \left\langle \frac{d^3 N_\alpha}{d^3 \vec{r}} \right\rangle_a = \int_{(v)} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v} \quad (40)$$

Makroskopska brzina čestica vrste α usrednjena po ansamblu, u tački \vec{r} u momentu t je

$$\langle \vec{v}_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a = \frac{1}{\langle n_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a} \int_{(v)} \vec{v} f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v} \quad (41)$$

Srednja kinetička energija čestica vrste α , usrednjena po ansamblu, u tački \vec{r} u momentu t je

$$\begin{aligned}\langle \epsilon_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a &= \frac{3}{2} \langle n_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a k_B T_\alpha(\vec{r}, t) \\ &= \int_{(v)} \frac{m_\alpha}{2} [\vec{v} - \vec{v}_\alpha(\vec{r}, t)]^2 f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v}\end{aligned}\quad (42)$$

Odavde se direktno može dobiti izraz za kinetičku temperaturu čestica vrste α usrednjenu po ansamblu, u tački \vec{r} u momentu t :

$$T_\alpha(\vec{r}, t) = \frac{m_\alpha}{3k_B \langle n_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a} \int_{(v)} [\vec{v} - \vec{v}_\alpha(\vec{r}, t)]^2 f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) d^3 \vec{v} \quad (43)$$

$T_\alpha(\vec{r}, t)$ bi bila termodinamička temperatura kada bi f_α bila Maxwellova funkcija raspodele, koja u opštem slučaju ima oblik:

$$f_\alpha(\vec{r}, \vec{v}, t) = \langle n_\alpha(\vec{r}, t) \rangle_a \left[\frac{m_\alpha}{2\pi k_B T_\alpha(\vec{r}, t)} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha [\vec{v} - \vec{v}_\alpha(\vec{r}, t)]^2}{2k_B T_\alpha(\vec{r}, t)} \right\} \quad (44)$$

Ako fizički sistem mnoštva čestica ima raspodelu čestica po svim vrstama oblika (44), tada postoji *lokalna termodinamička ravnoteža*. Ovo stanje nije termodinamički ravnotežno, jer postoje makroskopske brzine kretanja pojedinih vrsta čestica kao i transportni procesi (difuzija, termodifuzija, provodenje toplote) koji su rezultat promenljivosti koncentracije i temperature svake vrste čestica. Ako sve vrste čestica imaju funkcije raspodele

$$f_\alpha(\vec{v}) = n_\alpha \left[\frac{m_\alpha}{2\pi k_B T} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha v^2}{2k_B T} \right\} \quad (45)$$

pri čemu je temperatura T ista za sve vrste čestica i nezavisna od (\vec{r}, t) , a koncentracija svake vrste čestica konstantna, bez makroskopskih brzina komponenti plazme, onda govorimo da je nastupila *potpuna termodinamička ravnoteža*. Svaki sistem čestica, bez obzira na početne funkcije raspodela čestica, teži ka Maxwellizaciji funkcija raspodela putem sudara, što je veoma brz proces jer svako usmereno kretanje putem sudara prelazi u haotično. Pošto elektroni imaju masu mnogo manju od mase teških čestica, prenos energije sudarima je otežan, te se brzo uspostavlja stanje *delimične termodinamičke ravnoteže*, gde su funkcije raspodele:

$$f_\alpha(\vec{v}) = n_\alpha \left[\frac{m_\alpha}{2\pi k_B T_\alpha} \right]^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m_\alpha v^2}{2k_B T_\alpha} \right\} \quad (46)$$

Ovakva plazma je neizotermna, jer različite vrste čestica imaju različite temperature, a vreme potrebno da plazma postane izotermna je

$$\tau \sim \frac{1}{\delta} \quad \delta \approx 2 \frac{m_e}{m_{ion}} \quad (47)$$

Ako je raspodela emitera Maxwellovska i oni se nalaze u TDR, onda je broj emitera u jedinici zapremine sa komponentom brzine v_x u intervalu $(v_x, v_x + dv_x)$ i koji se nalaze u pobuđenom stanju sa kvantnim brojem n :

$$dn_\alpha^{(n)} = dv_x n_\alpha^{(n)} \left[\frac{m_\alpha}{2\pi k_B T_\alpha} \right]^{3/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dv_y \int_{-\infty}^{+\infty} dv_z \exp \left\{ -\frac{m_\alpha v^2}{2k_B T_\alpha} \right\} \quad (48)$$

Pošto je termalna brzina $v_{T_\alpha} = \sqrt{\frac{2k_B T_\alpha}{m_\alpha}}$ dobija se :

$$dn_\alpha^{(n)} = dv_x n_\alpha^{(n)} [\pi v_{T_\alpha}^2]^{-1/2} \exp\left\{-\left(\frac{v_x}{v_{T_\alpha}}\right)^2\right\} \quad (49)$$

gde je $n_\alpha^{(n)}$ ukupan broj emitera vrste α po $1m^3$ koji su u pobudenom stanju sa kvantnim brojem n . Ako se za pravac detekcije emitovanog zračenja uzme x -osa, onda se svih $dn_\alpha^{(n)}$ emitera kreće prema ili od detektora, pa će sa obzirom na nerelativistički Dopplerov efekat biti:

$$dn_\alpha^{(n)} = \sqrt{\frac{1}{\pi} \frac{d(\Delta\omega)}{\Delta\omega_{T_\alpha}}} n_\alpha^{(n)} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_{T_\alpha}}\right)^2\right\} \quad (50)$$

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{v_x}{c} \quad (51)$$

$$\Delta\omega_{T_\alpha} = \frac{\omega}{c} v_{T_\alpha} \quad (52)$$

Zato se za profil emitovanog zračenja dobija:

$$P_\alpha(\Delta\omega) = \frac{1}{n_\alpha^{(n)}} \frac{dn_\alpha^{(n)}}{d\Delta\omega} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta\omega_{T_\alpha}} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_{T_\alpha}}\right)^2\right\} \quad (53)$$

Ovo je simetrični Gaussov profil sa poluširinom:

$$\Delta\omega_{1/2}^{(\alpha)} = 2\sqrt{\ln 2} \Delta\omega_{T_\alpha} \quad (54)$$

odnosno u skali talasnih dužina :

$$\Delta\lambda_{1/2}^{(\alpha)} = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{c} v_{T_\alpha} \lambda \quad (55)$$

Vidi se da je Dopplerovo širenje znatno kod spektara lakih atoma u plazmama visoke temperature i da svaka vrsta čestica doprinosi širenju emitovane linije. Moguće mikroturbulencije se uvode u približni račun dodavanjem kvadrata termičke brzine i srednje vrednosti kvadrata turbulentne brzine.

1.2.2 Metod autokorelace funkcije

Ovaj metod je razrađen u DICKE [7], SOBEL'MAN [8] i polazna tačka je izraz za autokoreacionu funkciju:

$$\Phi(s) = \langle \exp\{i\eta(t+s, t)\} \rangle = \langle \exp\left\{i\frac{\omega}{c} \sum_j v_j s_j\right\} \rangle \quad (56)$$

Osnovne predpostavke ovog modela su:

- * Unutar vremenskog intervala s_j (koji predstavlja vreme trajanja perturbacije od strane j -tog perturbera koji se slobodno kreće), brzina perturbera v_j ostaje konstantna
- * Brzine čestice pre i posle sudara su statistički nezavisne

* Sudari ne dovode do pomeranja faze emitovanog zračenja

Problem šista faze zračenja usled sudara atoma u gasu obraden je u radu GALATRY [9]. Gornji izraz za $\Phi(s)$ može se razviti za dva granična slučaja:

1) Ako je $s \ll \tau$ gde je τ srednje vreme slobodnog puta, onda je verovatnoća za sudar unutar vremenskog intervala s zanemarivo mala, te je otuda:

$$\begin{aligned}\Phi(s) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}v_T} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\left(\frac{v}{v_T}\right)^2 + i\frac{\omega v}{c}s\right\} dv \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_T} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_T}\right)^2 + i\Delta\omega s\right\} d(\Delta\omega) \\ &= \frac{\exp\left\{-\frac{1}{4}(\Delta\omega_T s)^2\right\}}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_T} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_T} - \frac{\Delta\omega_T s}{2}\right)^2\right\} d(\Delta\omega) \\ &= \exp\left\{-\frac{1}{4}(\Delta\omega_T s)^2\right\}\end{aligned}\quad (57)$$

Profil ima oblik:

$$\begin{aligned}\mathbf{P}(\Delta\omega) &= \Re\left\{\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega_T s}{2}\right)^2 - i\Delta\omega s\right\} ds\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}\Delta\omega_T} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega}{\Delta\omega_T}\right)^2\right\}\end{aligned}\quad (58)$$

Dobija se Gaussov simetrični profil ekvivalentan izrazu (53). Uslov važenja ove teorije je $s \ll \tau$ ili $\Delta\omega \gg \frac{1}{\tau}$, pa sa obzirom na Dopplerovu relaciju, ovaj uslov postaje:

$$2\pi\bar{l} \gg \lambda \quad (59)$$

što znači da talasna dužina emitovane linije mora biti manja od srednjeg slobodnog puta $\bar{l} = v\tau$ između dva sudara atoma emitera, pod uslovom da koncentracija atoma unutar gasa nije ekstremno visoka (do 10^{24} čestica/ m^3). U mikrotalasnem području se javlja sasvim suprotna situacija.

2) Ako je $s \gg \tau$, onda se za slučaj mnogobrojnih sudara unutar vremenskog intervala s , može naći pomeranje emitera (koji daju posmatranu liniju) koje je dato kao rezultat difuzione teorije:

$$\Delta x(s) = \sum_j v_j s_j \quad (60)$$

Shodno ovom teorijskom pristupu, verovatnoća za pomeranje Δx unutar vremenskog intervala s je

$$W(\Delta x, s) = \frac{1}{\sqrt{4\pi D s}} \exp\left\{-\frac{(\Delta x)^2}{4Ds}\right\} \quad (61)$$

gde je D difuziona konstanta. Tada je:

$$\begin{aligned}\Phi(s) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi D s}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left\{-\frac{(\Delta x)^2}{4Ds} - i\frac{2\pi}{\lambda} \Delta x\right\} d(\Delta x) \\ &= \exp\left\{-\frac{4\pi D s}{\lambda^2}\right\} \\ &= \exp\left\{-\frac{\omega^2 D s}{c^2}\right\}\end{aligned}\quad (62)$$

pa se za profil linije dobija

$$P(\Delta\omega) = \frac{\frac{\omega^2 D}{c^2}}{\pi[(\Delta\omega)^2 + (\frac{\omega^2 D}{c^2})^2]} \quad (63)$$

Zaključak je da za $\lambda \gg 2\pi\bar{l}$, brzina difuzije utiče na širenje linije čiji je profil disperzionog oblika. Poluširina $\Delta\omega_{1/2} = \sqrt{D} \cdot \frac{\omega}{c}$ je ovde mnogo manja nego poluširina Gaussovog profila za slučaj $\lambda \ll 2\pi\bar{l}$. Ovaj efekat smanjenja poluširine profila se zove „sudarno smanjenje“ i proporcionalno je odnosu termalne i difuzione brzine. Interesantno je pokazati kako iz modela autokorelacione funkcije možemo dobiti do sada analizirane Gaussov i Lorentzov profil. Autokorelaciona funkcija se u opštem slučaju može napisati u obliku :

$$\Phi(s) = \exp\{-R(s) - iJ(S)\} \quad (64)$$

Razvijanjem obe funkcije $R(s), J(s)$ u potencijalni red

$$R(s) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i s^i \quad J(s) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i s^i \quad (65)$$

Sa obzirom da je $\Phi(0) = 1$ dobija se ($a_0 + ib_0 = 0, a = 0, b = 0$):

$$\Phi(s) = \exp\left\{\sum_{k=1}^{\infty}(a_k + ib_k)s^k\right\} \quad (66)$$

Ako se zadržimo na prvom stepenu ovog razvoja, dobijamo:

$$\begin{aligned} P(\Delta\omega) &= \Re\left\{\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp\{-(a_1 + i(b_1 + \Delta\omega))s\} ds\right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{a_1}{(b_1 + \Delta\omega)^2 + a_1^2} \end{aligned} \quad (67)$$

što je zapravo disperzionalni profil sa centrom linije pomerenim za $-b_1$. Pomeranje linije ili uopštenije, svi asimetrični efekti su uvek uzrokovani imaginarnim delom od $\Phi(s)$.

Ako se uzme samo kvadratni član uz a_2 , dobija se :

$$\begin{aligned} P(\Delta\omega) &= \Re\left\{\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp\{-(a_2 s^2 + i\Delta\omega s)\} ds\right\} \\ &= \frac{1}{\sqrt{4\pi a_2}} \exp\left\{\frac{\Delta\omega^2}{4a_2}\right\} \end{aligned} \quad (68)$$

što je zapravo Gaussov profil.

Ako zadržimo a_1 i a_2 dobijamo:

$$\begin{aligned} P(\Delta\omega) &= \Re\left\{\frac{1}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp\{-(a_2 s^2 + (a_1 + i\Delta\omega)s)\} ds\right\} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \exp\{-(a_1 s + a_2 s^2)\} \cos(\Delta\omega s) ds \\ &= \frac{1}{2\pi\sqrt{a_2}} \int_0^{+\infty} \exp\{-\alpha x - x^2/4\} \cos(vx) dx \\ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi a_2}} H(\alpha, v) \end{aligned} \quad (69)$$

gde su $\alpha = \frac{a_1}{2\sqrt{a_2}}$ i $v = \frac{\Delta\omega}{2\sqrt{a_2}}$. Na ovaj način smo dobili Voigtovu funkciju

$$H(\alpha, v) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \exp\{-\alpha x - x^2/4\} \cos(vx) dx \quad (70)$$

koja ima glavnu ulogu u opisivanju profila spektralnih linija i koja se može prikazati kao konvolucija Gaussovog i Lorentzovog profila. Numeričke vrednosti za $H(\alpha, v)$ se mogu dobiti sa tačnošću od 10% sa konturne mape za $\log H(\alpha, v)$ koju je konstruisao HUNGER [10]. Za veće tačnosti neophodno je koristiti pogodne razvoje u red, pa tako za $0 \leq \alpha \leq 1$ je MUGGLESTONE [11] direktnom integracijom dobio vrednosti za $H(\alpha, v)$. HUMMER [12] daje vrednosti za opseg $0 \leq \alpha \leq 0.5$ dobijene razvojem u Harrisov red. Procena $H(\alpha, v)$ je komplikovana zbog činjenice da razvoji u redove konvergiraju zadovoljavajuće samo na delovima površine $0 \leq \alpha \leq \infty, 0 \leq v \leq \infty$. Greška manja od 1% dobijena je u radovima HARRIS III [13], ABRAMOWITZ & STEGUN [14], DAVIES & VAUGHAN [15].

1.3 Širenje usled pritiska

Teorija širenja spektralnih linija usled pritiska, nastala je 1905. godine, kada je H.A.Lorentz analizirao profile emitovane od strane oscilatora čija se amplituda potčinjava naglim promenama usled neelastičnih sudara sa perturbujućim česticama. Već se iz ovog prostog modela vidi da širina profila mora biti određena učestanošću sudaranja, a otuda i koncentracijom čestica u izvoru svetlosti. Stoga, kako je ranije napomenuto, emitovana energija u vidu spektralne linije, sadrži informaciju o fizičkim uslovima u oblastima gde emisija nastaje, te se tokom nekoliko decenija teorija širenja usled pritiska primenjivala u spremi sa astrofizičkim problemima vezanim za kvantitativne analize stelarnih spektara. Pre dubljeg upuštanja u detalje ove teorije, bilo bi korisno ukazati na par činjenica koje se tiču ključnih stvari vezanih za istorijski razvoj teorije. Gore pomenutu sudarnu teoriju H.A.Lorentza, u okvirima klasične fizike reanalizirali su LENTZ [16] i WEISSKOPF [17] i pokazali da neelastični sudari (energetski transferi) nisu jedini uzroci širenja linije, već su to i elastični sudari koji utiču na promene faze u emitovanom elektromagnetskom talasu. Statistički pristup ovim sudarima, nezavisno jedan od drugog, učinili su LINDHOLM [18] i FOLEY [19]. Ovaj pristup (udarna teorija) nije i jedini mogući način za opisivanje procesa koji dovode do širenja. STARK [20], DEBYE [21] i naročito HOLTSMARK [22] izložili su sasvim drugačije viđenje ovog problema. Oni su predpostavili da perturbujuća čestica ostaje u miru u blizini atoma koji emituje zračenje perturbovane učestanosti $\omega_0 + \Delta\omega$. Usrednjavanjem po ansamblu ovakve konfiguracije, dobija se rezultujući profil spektralne linije. Ova kvazistatička teorija, koja dobro opisuje jake, sporopromenjive perturbacije bila je primenjena u radu MARGENAU [23] za slučaj Van der Waalsove interakcije. Teorija sudara kao i statička teorija, mogu se posmatrati kao granični slučajevi jednog mnogo opštijeg koncepta, čiji je formalizam dat u radu ANDERSON & TALMAN [24]. Ovaj rad je finesa svih dotadašnjih teorijskih pristupa, zasnovanih na uprošćenom modelu:

Učestanost harmonijskog oscilatora (karakteristična za atom koji emituje) biva poremećena tako da je perturbacija $\Delta\omega$ obrnuto proporcionalna određenom stepenu rastojanja od emitera do perturbera.

Od približno 1940. godine fizičari počinju da koriste metode kvantne mehanike u svrhu izračunavanja interakcija između atoma koji emituje i perturbera. Postaje evidentno, da

u izučavanju neelastičnih sudara sa transferom energije moraju biti primenjene metode kvantne mehanike. Generalno uzeto, najglavniji uzrok širenja linije je interakcija atoma emitera sa okolnim česticama koje uzrokuju perturbacije emitovane učestanosti, a time i dodatni pomeraj faze $\eta(t+s, t)$ u vremenskom intervalu $[t, t+s]$. Ovaj pomeraj faze je uglavnom realna veličina, što je tačno samo ako u toku sudara nema energetskog transfера sa emitera na perturbere. U slučaju neelastičnih interakcija koje uzrokuju promenu amplitudu oscilatora, $\eta(t+s, t)$ je kompleksna veličina. U dalnjem izlaganju predpostavlja se da je $\eta(t+s, t)$ realna veličina. Drugi problem je interakcija atoma emitera sa mnoštvom perturbera, što usložnjava situaciju, naročito kada različiti perturberi deluju istovremeno, jer raste uzajamna interferencija njihovih perturbacija. Ova interferencija je različita za različite tipove interakcije, te se moraju odvojeno analizirati. Sa ovog staništa veoma je jednostavna interakcija Van der Waalsovog tipa, kada je emiter okružen neutralnim atomima druge vrste koji prouzrokuju perturbacije, te se otuda pomeranja faze usled pojedinih perturbera sabiraju kao skalari. U drugim slučajevima perturbujuća polja se sabiraju kao vektori, kao na primer kod linearog Starkovog efekta gde perturbacije zavise linearno od jačine električnog polja. Na kraju, postoje i interakcije za koje nema prostih šema superpozicije, kao za rezonantnu interakciju između istih atoma. U svim statičkim teorijama širenja usled pritiska, u kojima se kretanje perturbera može zanemariti, nastaje problem superpozicije perturbacija, koji se može izbeći jedino u tzv. *aproksimaciji najbližeg suseda*, u kojoj se u obzir uzima samo interakcija sa najbližim perturberom. Problem superpozicije se takođe može izbeći ako pokretni perturberi deluju na atom emiter jedan nakon drugoga, u toku vremenskog intervala kada su najbliži emiteru. Ovo vodi ka *udarnom konceptu*. LINDHOLM [25] i nezavisno od njega FOLEY [19] uvode ovakav koncept u izračunavanje $P(\Delta\omega)$. Njihovi radovi su potvrđeni od strane MARGENAU & LANDWEHR [26] i SOBEL'MAN [8], koji su na ovu problematiku primenili metod autokorelacione funkcije. Teoriju neinteragujućih perturbacija koje se sabiraju kao skalari nije teško izgraditi. Tada su pomeraji faze usled nezavisnih perturbera (označenih sa indeksom j) u vremenskom intervalu $(t, t+s)$ uzajamno nezavisni, te je autokorelaciona funkcija oblika:

$$\Phi(s) = \langle \exp\left\{i \sum_{j=1}^{nV} \eta_j(t+s, t)\right\} \rangle = \langle \prod_{j=1}^{nV} \exp\{i\eta_j(t+s, t)\} \rangle \quad (71)$$

gde je nV ukupan broj čestica u zapremini V . Ako su, šta više, perturberi bez uzajamnih interakcija, onda je srednja vrednost za česticu j nezavisna od svih ostalih i imamo :

$$\Phi(s) = \langle \exp\{i\eta_j(t+s, t)\} \rangle^{nV} \quad (72)$$

što se može zapisati kao $\Phi(s) = \exp\{-nV_p(s)\}$ gde je $V_p(s)$ perturbaciona zapremina definisana izrazom :

$$V_p(s) = -V \ln\{\langle \exp\{i\eta_j(t+s, t)\} \rangle\} \quad (73)$$

Sa obzirom da je

$$\langle \exp\{i\eta_j(t+s, t)\} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \exp\left\{i \int_t^{t+s} \Delta\omega(r_j(t')) dt'\right\} dV \approx 1 \quad (74)$$

to je jako verovatno da će uočeni j -ti perturber biti blizu atoma emitera u vremenu $(t, t+s)$, pa možemo zanemariti članove višeg reda i pisati

$$V_p(s) \approx V(1 - \exp\{i\eta_j(t+s, t)\}) \quad (75)$$

Ovaj izraz je polazna tačka za generalisanu teoriju širenja usled pritiska, koju su razradio ANDERSON & TALMAN [24]. Gornja razmatranja pokazuju da je korelaciona f-ja eksponencijalna funkcija broja perturbera u perturbacionoj zapremini $V_p(s)$ koja raste sa vremenom perturbacije s , počevši od $V_p(0) = 0$.

Neophodno je, radi potpunije analize navesti i neke osnovne pojmove kvantne mehanike koji se koriste u opisivanju profila spektralnih linija.

Autokorelaciona funkcija $\Phi(s)$

Polazna tačka svih kvantno-mehaničkih izračunavanja profila spektralnih linija je izraz za snagu koju izrači električni dipol pri spontanom prelazu iz početnog (i) u krajnje (f) stanje:

$$\frac{4\omega_{if}^4}{3c^3} |\langle f|\hat{D}|i\rangle|^2 \quad (76)$$

gde je $\omega_{if} = \frac{1}{\hbar}|E_i - E_f|$ učestanost elektromagnetskog talasa u vidu kojeg se zrači elektromagnetna energija, $\hat{D} = e\hat{\vec{r}}$ električni dipolni momenat emitera.

Emitovana linija će biti uzana ako je sprega atoma sa radijacionim poljem zanemarivo mala i ako emiter ne interaguje sa okolnim česticama. Sa stanovišta kvantne mehanike, emiter sa perturberima čini kvantnomehanički sistem. Izraz (76) adekvatno opisuje prošireni profil samo ako se sprovede sumiranje po svim početnim i krajnjim podstanjima jednog takvog složenog sistema:

$$P(\omega) = \frac{4\omega_{if}^4}{3c^3} \sum_{i,f} \delta(\omega - \omega_{if}) |\langle f|\hat{D}|i\rangle|^2 \rho_i \quad (77)$$

gde je : c - brzina svetlosti u vakuumu, ρ_i - verovatnoća nalaženja sistema u početnom stanju (i), $\langle f|\hat{D}|i\rangle$ matrični element električnog dipolnog momenta emitera, $\delta(\omega - \omega_{if})$ - Diracova δ -funkcija koja obezbeđuje zakon održanja energije u skladu sa Bohrovom relacijom za učestanosti, tj. vodi računa da samo oni prelazi za koje je $\omega = \omega_{if}$ doprinose profilu $P(\omega)$.

Elementi matrice ρ_i su proporcionalni okupacionim brojevima početnih stanja određenih vrednošću indeksa (i).

Na osnovu rezultata klasične fizike, srednje promene radijacionog polja u vremenskom intervalu s , opisane su autokorelacionom funkcijom $\Phi(s)$ koja određuje profil $P(\omega)$ i sa kojim obrazuje Fourierov par, tako da je oblik profila za perturbaciju $\Delta\omega$ određen uglavnom sa $\Phi(s)$ pri $s = \frac{1}{\Delta\omega}$. Veoma sličan pristup problemu važi i u kvantnoj mehanici. U tom cilju se uvodi autokorelaciona funkcija u obliku:

$$\Phi(s) = \int_{-\infty}^{+\infty} P(\omega) \exp\{-i\omega s\} d\omega = \sum_{if} |\langle f|\hat{D}|i\rangle|^2 \rho_i \exp\{-i\omega_{if}s\} \quad (78)$$

Veza $\Phi(s)$ sa prosečnim vremenom razvoja kvantnomehaničkog sistema, postaje očiglednija ako se iskoristi poznati operator vremenskog razvoja:

$$\hat{T}(s) = \hat{T}(s, 0) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} s\right\} \quad (79)$$

koji ima osobinu da transformiše ket vektor $|\psi(t_o)\rangle$ u vektor u trenutku $t_o + s$:

$$\hat{T}(t_o + s, t_o)|\psi(t_o)\rangle = |\psi(t_o + s)\rangle \quad (80)$$

Ako je ψ svojstvena funkcija Hamiltonijana \hat{H} , gornja transformacija je ekvivalentna množenju sa $\exp\{-\frac{iE}{\hbar}s\}$. Uvezši ovo u obzir na osnovu Bohrove relacije za ω_{if} i izraza (78), dobija se oblik za $\Phi(s)$ napisan u vidu traga, bez eksplisitno naglašenog početnog i krajnjeg stanja:

$$\Phi(s) = \text{Tr}[\hat{D}\hat{T}^*(s)\hat{D}\hat{T}(s)\rho] \quad (81)$$

Postavlja se pitanje pod kojim uslovima je moguće izučavanje širenja spektralnih linija uz pretpostavku da su perturberi klasične čestice. U tom cilju se Hamiltonijan sistema razlaže na Hamiltonijan atoma emitera (\hat{H}_a), perturbera (\hat{K}) i na interakciju (\hat{V}):

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{K} + \hat{V} \quad (82)$$

Talasna funkcija sistema se prikazuje kao:

$$\psi(t) = \chi(t)\varphi(t) \quad (83)$$

gde je $\varphi(t)$ zavisna samo od koordinata perturbera i opisuje njihovo kretanje, dok $\chi(t)$ predstavlja talasnu funkciju emitera koja zavisi samo od koordinata atomskih elektrona i odredena je atomskim poljem, kao i perturbacijom. Ako se uticaj atoma na kretanje perturbera zanemari, $\varphi(t)$ se određuje kao rešenje svojstvenog problema operatora perturbacije \hat{K} :

$$i\hbar \frac{d\varphi(t)}{dt} = \hat{K}\varphi(t) \quad (84)$$

Koristeći relaciju:

$$\chi(t) = \int \varphi^*(t)\psi(t)dx_p \quad (85)$$

gde se integracija vrši po svim koordinatama perturbera, moguće je iz Schroedingerove jednačine za ceo sistem

$$i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}\psi(t) \quad (86)$$

dobiti jednačinu kretanja za $\chi(t)$:

$$i\hbar \frac{d\chi(t)}{dt} = [\hat{H}_a + \int \varphi^*\hat{V}\varphi dx_p] \cdot \chi(t) = [\hat{H}_a + \hat{V}_{cl}] \cdot \chi(t) \quad (87)$$

gde \hat{V}_{cl} predstavlja potencijal interakcije emitera sa talasnim paketima okolnih perturbera. Ovim korakom, ne samo da je promenjena formulacija problema, već su izmenjene ranije uvedene fizičke pretpostavke. Razmatrajući (87), više se ne rešavaju stacionarna stanja složenog sistema (uključujući i perturbere), već je neophodno rešiti Schroedingerovu jednačinu za emiter na koga deluje vremenski zavistan perturbujući potencijal \hat{V}_{cl} usled interakcije sa pokretnim česticama. Rešavanje se izvodi standardnim metodama vremenski zavisne perturbacione teorije.

Navedeni model nije komzistentan, jer je u proračun uzet energetski transfer sa perturbera na emiter, dok je povratna reakcija zanemarena, što govori relacija (84). Ovo neće praviti poteškoće sve dok je vremenski interval s , tokom kojeg pratimo razvoj sistema,

toliko kratak da je energetski transfer unutar njega mali u poređenju sa $k_B T$. Sada je moguće pisati autokorelacionu funkciju u obliku:

$$\Phi(s) = \text{Tr}[\hat{D}\hat{t}^*(s)\hat{D}\hat{t}(s)\rho]_{av} \quad (88)$$

$$\hat{t}(s) = \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{V}_{cl})s\right\} \quad (89)$$

U ovoj formi samo stanja emitera ulaze u sumiranje pri računanju traga. Usrednjavanje (indeks „av“) se vrši po svim mogućim konfiguracijama i kretanjima perturbera. Ovakva formulacija problema je od koristi samo ako je širina talasnih paketa perturbera (Δq) mala u poređenju sa tipičnom distancom (d) između emitera i perturbera; čak što više, Δq mora ostati malo u vremenskom intervalu s . Ova dva uslova:

$$\frac{\Delta q}{d} \ll 1 \quad \frac{\Delta v}{v} = \frac{\Delta p}{p} \ll 1 \quad (90)$$

se mogu kombinovati, i daju :

$$(\Delta q) \cdot (\Delta p) \simeq \hbar \ll p \cdot d \simeq \hbar \cdot l \quad (91)$$

gde l predstavlja kvantni broj momenta impulsa atoma usled termičkog kretanja čestica. Ako se za komparativnu distancu (d) uzme srednje rastojanje (što je razuman izbor za statičku teoriju) tada relacija (91) jednostavno tvrdi da gas perturbera nije degenerisan, tj. da su kvantomehanička stanja, dostupna perturberima, praktično neokupirana. Uslov (91) postaje rigorozniji ako se primeni udarna teorija, te se tipično rastojanje zamjenjuje Weiskopfovim udarnim parametrom ρ_w , za koji je po klasičnoj teoriji pomak faze $\eta(\rho_w) = 1$. Praktično, interagujući atomi ili joni mogu uvek biti tretirani kao klasične čestice.

Reprezentacija interakcije i atom sa jednim nivoom

Korisno je uvesti još jedan unitarni operator relacijom:

$$\hat{U}(s) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_a s\right\}\hat{t}(s) \quad (92)$$

Ovaj operator reprezentacije interakcije $\hat{U}(s)$ kao i $\hat{t}(s)$ su jednak jediničnom operatoru za $s = 0$, ali nasuprot $\hat{t}(s)$, promena $\hat{U}(s)$ zavisi samo od interakcije sa perturberima, tako da $\hat{U}(s)$ ostaje konstanta ako je ta interakcija zanemariva. $\hat{U}(s)$ se može definisati i preko integralne jednačine :

$$\hat{U}(s) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^s \hat{V}_I(s) \hat{U}(s) ds \quad (93)$$

gde je $\hat{V}_I(s)$ interakcioni potencijal:

$$\hat{V}_I(s) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_a s\right\} \hat{V}_{cl}(s) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_a s\right\} \quad (94)$$

Jednačina (93) je ekvivalentna Schroedingerovoj jednačini

$$i\hbar \frac{d\hat{U}(s)}{ds} = \hat{V}_{cl}(s)\hat{U}(s) \quad \hat{U}(0) = 1 \quad (95)$$

Ovaj operator se može izraziti i u vidu perturbacionog razvoja :

$$\hat{U}(s) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^s ds_1 \hat{V}_I(s_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^s ds_1 \hat{V}_I(s_1) \int_0^{s_1} ds_2 \hat{V}_I(s_2) + \dots \quad (96)$$

što predstavlja Neumannovo rešenje integralne jednačine (93) u vidu razvoja. U uslovima kada se primjenjuje udarna aproksimacija, za vreme s se desi samo jedan jak sudar (nekoliko slabih sudara koji se dogode za isto vreme mogu se zanemariti) i tada je u izrazu (96) dovoljno zadržati nekoliko prvih članova reda. U tom slučaju su uticaji (statistički nezavisnih) perturbera pri usrednjavanju praktično aditivni, što znači da se veličina $\hat{U}(s) - 1$ može izračunati posebno za svaki perturber, a zatim sabrati. Ako se uzme u obzir i elektron-elektron korelacija, tada drugi član izraza (96) daje popravku usled ekraniranja. Izraz (96) se može napisati kao:

$$\hat{U}(s) = \hat{\tau} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_0^s \hat{V}_I(s_1) ds_1\right\} \quad (97)$$

gde je $\hat{\tau}$ Dyssonov operator vremenske hronologizacije, koji obezbeđuje dejstvo operadora u pogodnom vremenskom intervalu. Pogodnosti radi, problem uprošćavamo predpostavkom da samo atomska stanja (α) višeg nivoa (a) interaguju sa perturberima, dok se interakcija atomskih stanja (β) nižeg nivoa (b) zanemaruje. Sa ovom predpostavkom $t^*(s) = \exp\{i\omega_f s\}$ se može zameniti sa 1, ako se za ishodište skale učestanosti uzme vrednost ω_f . Konačno uvođenjem operadora \hat{D} pomoću relacije:

$$\langle \alpha | \hat{D} | \alpha' \rangle = \sum_{\beta} \langle \alpha | \hat{D} | \beta \rangle \langle \beta | \hat{D} | \alpha' \rangle \quad (98)$$

i uzimajući da je $\rho = 1$ (cepanje stanja je malo u poređenju sa termalnom energijom) dobija se za autokorelacionu funkciju:

$$\Phi(s) = Tr[\hat{D} \hat{t}_{av}(s)] \quad (99)$$

Sada će se obraditi dva granična koncepta teorije širenja profila usled pritiska, *udarni* i *kvazistatički* koncept. U okvirima svakog od njih, biće dato klasično i kvantno-mehaničko stanovište, i posebno obrađeni efekti širenja u zavisnosti od tipa interakcije emiter-perturber.

Teorija udarnog širenja

Aspekt klasične fizike

Zasniva se na dve prepostavke vezane za sudare :

- a) Samo oni perturberi (sa indeksom „j”) koji promiču kraj atoma emitera na distanci jednakoj sudarnom parametru ρ u vremenskom intervalu $[t, t+s]$ doprinose faznom pomeraju $\eta(t+s, t)$. Stoga perturberi, koji se od emitera nalaze na distanci većoj od $(v \cdot s)$, neće se uzeti u razmatranje.
- b) Vrednost $\eta_j(t+s, t)$ je zamenjena faznim pomakom $\eta(\rho)$ nastalim usled sveukupnog sudaranja čestica (sa sudarnim parametrom ρ) sa emiterom. Naravno, $\eta(\rho)$ zavisi takođe i od brzine perturbera v .

Zanemarujući raspodelu brzina, pod gornjim prepostavkama, za perturbacionu zapreminu se dobija izraz:

$$V_p(s) = sv \int_0^{+\infty} [1 - \exp\{i\eta(\rho)\}] 2\pi \rho d\rho = v \cdot s \cdot [\sigma_r - i\sigma_i] \quad (100)$$

Dakle, $V_p(s)$ je cilindar dužine vs i kompleksnog poprečnog preseka $\sigma_r - i\sigma_i$. Za ovu udarnu teoriju je tipična linearna zavisnost $V_p(s)$ od vremena perturbacije s . Korelaciona funkcija je:

$$\Phi(s) = \exp\{-nv(\sigma_r - i\sigma_i)s\} \quad (101)$$

te se dobija disperzionalni profil:

$$P(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{nv\sigma_r}{(\Delta\omega - nv\sigma_i)^2 + (nv\sigma_r)^2} \quad (102)$$

sa poluširinom (konstanta prigušenja γ) :

$$\Delta\omega_{1/2} = \gamma = 2nv\sigma_r \quad (103)$$

i pomeranjem (shift) spektralne linije:

$$\Delta\omega_s = nv\sigma_i \quad (104)$$

U cilju izračunavanja preseka, neizbežne su prepostavke o tipu interakcije i putanjama perturbera. Koristeći recipročni zakon :

$$\Delta\omega(r) = \frac{C_p}{r^p} \quad C_p = \text{const.} \quad (105)$$

uz prepostavku o pravolinijskom kretanju perturbera, dobija se:

$$\eta(\rho) = \frac{\alpha_p C_p}{v \rho^{p-1}} \quad \alpha_p = \sqrt{\pi} \frac{\Gamma(\frac{p-1}{2})}{\Gamma(\frac{p}{2})} \quad (106)$$

Najvažniji tipovi interakcije su:

- Linearni Starkov efekat: $p = 2, \alpha_2 = \pi$
- Rezonantna interakcija između identičnih čestica ili interakcija između nanelektrisanih perturbera i kvadrupola: $p = 3, \alpha_3 = 2$
- Kvadratični Starkov efekat: $p = 4, \alpha_4 = \frac{\pi}{2}$
- Van der Waalsova interakcija: $p = 6, \alpha_6 = \frac{3\pi}{8}$

Procena preska za $p = 3, 4, 6$ se može prikazati analitički i data je sa:

$$\sigma_r = 2\pi \int_0^{+\infty} [1 - \cos(\eta(\rho))] \rho d\rho \quad (107)$$

$$\sigma_i = 2\pi \int_0^{+\infty} [\sin(\eta(\rho))] \rho d\rho \quad (108)$$

Integracija gornjih izraza je data za $p = 3$ u LINDHOLM [25] dok za $p = 4, 6$ JENSEN [27] dobija rezultat:

$$\sigma_r - i\sigma_i = \pi(i\alpha_p)^{\frac{2}{p-1}} \Gamma\left(\frac{p-3}{p-1}\right) \left(\frac{C_p}{v}\right)^{\frac{2}{p-1}} \quad (109)$$

Slučaj $p = 2$ odgovara interakciji atoma (degenerisanog momenta impulsa) sa nanelektrisanim česticama i zahteva modifikaciju udarne teorije, jer ova dipol-monopol interakcija nije više sfersosimetrična. KOLB [28] je u svojoj tezi pokazao da samo snažni sudari (koji uzrokuju velike fazne pomake emitovanog elektromagnetskog talasa) imaju sposobnost da promene orijentacije dipola (emitera), dok slabi sudari nemaju tu sposobnost u jonskom polju koje se ne menja u toku trajanja sudara. Uz pretpostavku o pravolinijskoj putanji i konstantnoj brzini perturbera, za fazni pomak slabe (indeks „w“) interakcije se dobija:

$$\eta_w(\rho, \theta) = \frac{2C_2}{\rho v} \cos \theta \quad (110)$$

C_2 je konstanta interakcije za slučaj dipola orijentisanog ka perturberu, a θ je ugao između pravca dipola i pravca koji prolazi kroz emiter, a normalan je na putanju perturbera. Pomak faze usled slabe interakcije η_w je već ranije uveden u izrazu (100) za $V_p(s)$, ali kao usrednjena funkcija po svim orijentacijama dipola. Zato se sada za kompleksni presek dobija:

$$\sigma_r - i\sigma_i = \int_0^{\rho_{max}} 2\pi \rho d\rho \int_{\Omega} \frac{d\Omega}{4\pi} [1 - \exp\{i\eta_w(\rho, \theta)\}] \quad (111)$$

Prvo što se da zaključiti, jeste $\sigma_i = 0$, a otuda i $\Delta\omega_s = 0$, što znači da nema pomeranja spektralne linije. Ovo je posledica činjenice da ne postoji doprinos slabe interakcije za σ_i jer su pozitivne i negativne vrednosti $\cos \theta$ podjednako verovatne. Sasecanje integrala na nekom maksimalnom udarnom parametru ρ_{max} je neophodno jer u protivnom integral divergira usled dugog dometa Coulombovih sila. Prirodno, postoji proizvoljnost u izboru ove maksimalne distance. Najčešće se uzima da je $\rho_{max} = r_D$, gde je r_D -Debyev radius na kojem Coulombovo polje nanelektrisanog perturbera postaje ekranirano zbog povećane verovatnoće naleta istog, u blizini perturbera suprotnog nanelektrisanja. Ako

se po Kolbu, u integralu (111) umesto donje granice $\rho = 0$ uzme $\rho = \rho_{min}$ za koje je $\eta(\rho_{min}) = 1$, onda se za doprinos slabog sudara dobija:

$$\sigma_{r,w} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{C_2}{v} \right)^2 \left[-\frac{1}{40} - \ln(\eta(\rho_{max})) + \frac{1}{40} (\eta(\rho_{max}))^2 + \dots \right] \quad (112)$$

Predpostavljajući da su svi sudari unutar ρ_{min} odgovorni za širenje linije usled snažne (indeks „s“) interakcije, dobijamo:

$$\sigma_{r,s} = \pi \rho_{min}^2 = 4\pi \left(\frac{C_2}{v} \right)^2 \quad (113)$$

Sumarno uzeto, realni deo kompleksnog preseka perturbacionog cilindra je:

$$\sigma_r = \sigma_{r,w} + \sigma_{r,s} \quad (114)$$

Konkretno za Maxwellovu raspodelu brzina, uz zanemarivanje člana proporcionalnog sa $(\eta(\rho_{max}))^2$, za poluširinu profila se dobija:

$$\Delta\omega_{1/2} = \langle 2nv\sigma_r \rangle \approx \frac{32}{3} n \frac{C_2^2}{\langle v \rangle} [2.566 - \ln(\frac{2C_2}{\langle v \rangle \rho_{max}})] \quad (115)$$

Ovaj izraz se dobija na osnovu činjenice da za Maxwellovu raspodelu po brzinama važi:

$$\langle v^n \rangle = \frac{(n+2)!}{2^{n+1} \left(\frac{n+2}{2} \right)!} \left(\frac{2k_B T}{m} \right)^{n/2} \quad \text{za } n > -3 \quad (116)$$

$$\langle \frac{\ln v}{v} \rangle = [\ln \langle v \rangle - 0.409] \frac{1.273}{\langle v \rangle} \quad (117)$$

Definisanjem tkzv. Weisskopfovog radiusa ρ_w za koji je $\eta(\rho_w) = 1$, tj. :

$$\rho_w = \left(\frac{\alpha_p C_p}{v} \right)^{\frac{1}{p-1}} \quad (118)$$

može se diskusijom izraza (107) i (108) uvideti da za $\rho \leq \rho_w$ postoji uglavnom širenje linije, dok za $\rho \geq \rho_w$ postaje dominantno pomeranje linije usled mnoštva slabih sudara. Domet primene ove teorije može se odrediti analizom predpostavki učinjenih na početku:

a) Po predpostavci sudari se završavaju u vremenskom intervalu s , što znači da su rezultati važeći samo ako je s veće od srednjeg trajanja sudara, tj. :

$$s > \frac{\rho_w}{v} \quad (119)$$

Značaj ovoga je da udarna teorija određuje samo centralni deo profila. Po Holsteinu [29] granica je odredena sa :

$$\Delta\omega_H = \frac{v}{\rho_w} \quad (120)$$

Krilna profila ($\Delta\omega \gg \Delta\omega_H$) mogu se aproksimativno opisati kvazistatičkom teorijom.

b) Promene faze usled sudara sa pojedinim perturberima u toku vremena $(t, t+s)$ su uzajamno nezavisne. Ovo znači (sem skalarno aditivnih perturbacija) da je veoma verovatno da će se dva ili više sudara desiti u isto vreme. Ovim se nameće gornja granica za koncentraciju perturbera:

$$n\rho_w^3 \ll 1 \quad (121)$$

Može se pokazati da je pri ispunjenju ovog uslova, $\mathbf{P}(\Delta\omega)$ praktično nula za $\Delta\omega > \Delta\omega_H$.

Kvantnomehanički aspekt

Pomoću par rezultata koje daje generalisana kvantna mehanika udarnih teorija (uključujući i perturbere u kvantno-mehanički sistem) moguće je pojasniti ulogu adijabatskih i dijabatskih sudara u širenju i pomeranju spektralnih linija, kao i njihovu vezu sa elastičnim i neelastičnim rasejanjima sudarajućih perturbera. Radi jednostavnosti, razmatra se samo slučaj atoma u višem stanju i koji interaguje sa perturberima i čak što više, uzećemo učestanost ω_f (koja odgovara energiji nižeg nivoa E_f) za ishodište skale učestanosti. Pod ovim uslovima, operator vremenskog razvoja u reprezentaciji interakcije je definisan sa:

$$\hat{U}(t) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{K})t\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t\right\} \quad (122)$$

pri čemu je promena $\hat{H}(t)$ u vremenskom intervalu s data sa:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t+s, t) &= \hat{U}(t+s)\hat{U}^{-1}(t) \\ &= \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{K})(t+s)\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}s\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{K})t\right\} \end{aligned} \quad (123)$$

Pod predpostavkom da atom nezavisno interaguje u vremenskom intervalu s sa uzajamno nezavisnim talasnim paketima, za $\hat{U}(t+s, t)$ se dobija suma po doprinosima svih talasnih paketa, pri čemu je doprinos jednog dat sa:

$$\langle \alpha | \varphi(0) | \hat{U}(t+s, t) | \varphi(0) | \alpha' \rangle \quad (124)$$

gde su α, α' dva atomska stanja i $\varphi(0)$ talasna funkcija perturbera pre sudara sa emitom. Sa obzirom na (123) gornji matrični element postaje:

$$\exp\{i\omega_\alpha t\} \langle \alpha' | \varphi(t) | \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{K})s\right\} \cdot \exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}s\right\} | \varphi(t) | \alpha \rangle \exp\{-i\omega_\alpha t\} \quad (125)$$

Razmatranjem talasnih funkcija perturbera, vidi se da izraz:

$$\langle \alpha' | \varphi(t) | \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{K})s\right\} \quad (126)$$

predstavlja talasnu funkciju (u momentu $t+s$) slobodnog perturbera, pri čemu je odsustvo interakcije perturbera sa emitom uključeno preko Hamiltonijana $\hat{H}_a + \hat{K}$. Sa druge strane izraz:

$$\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}s\right\} | \varphi(t) | \alpha \quad (127)$$

predstavlja talasnu funkciju perturbera rasejanog na atomskom potencijalu, što je predstavljeno totalnim Hamiltonijanom \hat{H} . Zanemarujući promene energije perturbera tokom neelastičnog sudara ($\alpha \neq \alpha'$), izraz (125) se može preformulisati korišćenjem amplitude u napred rasejanog talasa (korespondiranog perturberu), pri čemu se dobija (uključivši sve perturbere koji interaguju sa emitером u intervalu s):

$$\delta_{\alpha\alpha'} + \frac{i\hbar ns}{m} \exp\{i\omega_{\alpha'} t\} \langle \alpha' | f(0) | \alpha \rangle \exp\{-i\omega_\alpha t\} \quad (128)$$

gde su n - koncentracija perturbera, m - masa perturbera, \hbar - Planckova konstanta. Prema tome nadena je veza između usrednjjenog operatora vremenskog razvoja i u napred rasejanih amplituda perturbera. Egzistenciju relacije (128) dokazao je BARANGER [30]. Ako je atotski potencijal sfenosimetričan, $f(0)$ može biti izraženo preko pomeraja faza δ_ℓ usled rasejanja za individualni moment impulsa $\ell\hbar$ perturbujuće čestice sa talasnim brojem $k = \frac{mv}{\hbar}$:

$$f(0) = (2ik)^{-1} \sum_\ell (2\ell + 1) [\exp\{2i\delta_\ell\} - 1] \quad (129)$$

Fazni pomeraji δ_ℓ su realni ako su sudari perturbera sa emitером elastični (adijabatski), odnosno kompleksni ako postoje neelastični (dijabatski) doprinosi pomerajima faze. Neophodno je bliže razmotriti razliku između izolovane linije i preklapajućih linija, kao i njihovu vezu sa udarnim konceptom. Prema BARANGER [30] razmatramo dva uzastopna neadijabatska sudara koji prouzrokuju prelaz sa stanja α na α' , a potom sa α' nazad na α . Ako je energetska razlika između stanja α i α' pomnožena sa srednjim vremenom boravka emitera u stanju α' dovoljno velika ($|E_\alpha - E_{\alpha'}| \tau_{\alpha'} \gg \hbar$), tako da ne postoji nikakav fazni odnos optičkih talasa emitovanih od strane emitera u toku tog vremena, onda prvi neelastični sudar potpuno prekida proces emisije zračenja. Posledica toga je da postoji doprinos širenju spektralne linije, ali ne i njenom pomeraju. Uslov:

$$\omega_{\alpha\alpha'} \tau_{\alpha\alpha'} = \omega_{\alpha\alpha'} (nv\sigma_{\alpha\alpha'})^{-1} \simeq \frac{\omega_{\alpha\alpha'}}{\gamma} \gg 1 \quad (130)$$

govori da za jednu izolovanu liniju, komponente koje potiču od stanja α i α' mogu biti dobro odvojene, dok se za preklapajuće linije ove komponente međusobno stapaaju. U ovom poslednjem slučaju, dijabatski sudari ne gase koherentnost emitovanog talasa, te ovi sudari vrše doprinos kako širenju tako i pomeranju linije. Iz ovog razloga je teorija preklapajućih spektralnih linija u mnogome komplikovana od teorije izolovanih linija. Predpostavljajući da su linije izolovane, udarna teorija daje jednostavan disperzioni tip profila sa sledećim parametrima:

$$\Delta\omega_{1/2} = \frac{\hbar n}{m} \Im\{f(0)\}_{av} \quad (131)$$

$$\Delta\omega_s = -\frac{\hbar n}{m} \Re\{f(0)\}_{av} \quad (132)$$

Koristeći optičku teoremu koja povezuje imaginarni deo u napred rasejane amplitude $f(0)$ sa totalnim presekom σ :

$$\Im\{f(0)\} = \frac{k}{4\pi} \sigma = \frac{mv}{4\pi\hbar} \sigma \quad (133)$$

poluširina linije se može izraziti preko totalnog preseka:

$$\Delta\omega_{1/2} = [\frac{1}{2}nv\sigma]_{av} \quad (134)$$

Na osnovu izraza (129), ako sa ograničimo na sfernu simetriju rasejavajućeg emiterskog potencijala, uočava se veza sa klasičnom teorijom udara (Lindholm, Foley) :

$$\Delta\omega_s = -[\frac{\pi n}{mk} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \Gamma_{\ell} \sin(2\delta'_{\ell})]_{av} \quad (135)$$

$$\Delta\omega_{1/2} = [\frac{\pi n}{mk} \sum_{\ell} (2\ell + 1) [1 - \Gamma_{\ell} \cos(2\delta'_{\ell})]]_{av} \quad (136)$$

Pogodnosti radi, izvršena je zamena $\exp\{i\delta_{\ell}\}$ sa $\Gamma \exp\{i\delta'_{\ell}\}$, gde je $\delta'_{\ell} = \Re\{\delta_{\ell}\}$. Za elastične sudare (jedini tip sudara koji se i razmatra u teoriji Lindholm - Foleyja) je $\Gamma_{\ell} = 1$. Formule (135), (136) se mogu transformisati u klasične sledećim redosledom :

- izračunavanjem δ'_{ℓ} pomoću WKB-metoda
- izjednačavanjem $2\delta'_{\ell}$ sa $\eta(\rho)$
- zamenom $\frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1)$ sa $\int 2\pi\rho d\rho$

Izračunavanjem po datom redosledu, teorija emitera kod kojeg i krajnje (niže) stanje f interaguje sa perturberima, daje za poluširinu izolovane spektralne linije sledeći izraz:

$$\Delta\omega_{1/2} = [\frac{1}{2}nv\{\sigma_{i,in} + \sigma_{f,in} + \int \int d\theta d\varphi \sin \theta |f_i(\theta, \varphi) - f_f(\theta, \varphi)|^2\}]_{av} \quad (137)$$

Ovaj rezultat govori da se neelastični doprinosi početnog (i) i krajnjeg (f) stanja (izraženi preko $\sigma_{i,in}$ i $\sigma_{f,in}$) sabiraju nekoherenntno, dok se elastični (adijabatski) doprinosi početnog i krajnjeg stanja (izraženi preko f_i i f_f) oduzimaju koherenntno, što je u skladu sa Frank-Condonovim principom. Osnovni zadatak kvantno-mehaničkog aspekta je nalaženje usrednjениh operatora $\hat{t}_{av}(s)$ i $\hat{U}_{av}(s)$ u udarnoj aproksimaciji. Od perturbera se zahteva da nezavisno jedan od drugog interaguju sa emiterom putem sudara, shodno predpostavci o skalarnom sabiranju faznih pomaka. Tada je:

$$\hat{U}_{av}(t+s, t) = [\prod_{j=1}^{nV} \hat{U}_j(t+s, t)]_{av} \quad (138)$$

Predpostavka da perturberi uzajamno ne interaguju, omogućuje nam da pišemo:

$$\hat{U}_{av}(t+s, t) = [\hat{U}_{j,av}(t+s, t)]^{nV} = \exp\{-n\hat{V}_p(s)\} \quad (139)$$

Primenjujući koncept potpunog sudara, koji zahteva da je vremenski interval s duži od trajanja jednog slabog sudara, tj. :

$$s > \frac{\rho_{weak}}{v} \quad (140)$$

Za operator perturbacione zapremine se dobija:

$$\hat{V}_p(s) = s \int_0^{+\infty} W(v) v dv \int_0^{+\infty} [1 - \hat{\tau} \exp\{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+infity} \hat{V}_I(t) dt\}] 2\pi\rho d\rho \quad (141)$$

Eksponencijalnu formu operatora u reprezentaciji interakcije koristili su VAINSHTEIN & SOBEL'MAN [31], dok GRIEM [32] radije koristi perturbacioni razvoj i dobija:

$$\begin{aligned}\hat{V}_p(s) = & s \int_0^{+\infty} W(v) v dv \int_0^{+\infty} 2\pi \rho d\rho \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \hat{V}_I(t_1) + \right. \\ & \left. + (\frac{i}{\hbar})^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \hat{V}_I(t_1) \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_2) + \dots \right]\end{aligned}\quad (142)$$

Uslovi važenja udarne teorije koji su izneti u klasičnom aspektu, zahtevaju dodatna razmatranja. Za rasčlanjivanje perturbacija neophodno je, da usrednjena totalna perturbacija unutar $\frac{\rho_{weak}}{v}$ bude mala, tako da $\hat{U}_{av}(t + \frac{\rho_{weak}}{v}, t)$ bude $\simeq 1$. U ovom slučaju svaki sudarajući perturber praktično interaguje sa emitom i perturbacija usled ovih slabih sudara je prirodno rasčlanjena. Ako slučajno, u vremenu $\frac{\rho_{weak}}{v}$ nastupi jak sudar, verovatnoća da se tako nešto i dogodi, mora biti tako mala da $\hat{U}_{av}(t + \frac{\rho_{weak}}{v}, t)$ ne odstupi značajno od 1. Tek u ovom slučaju se mogu zanemariti svi ostali sudari u intervalu vremena $(t, t + \frac{\rho_{weak}}{v})$, čime problem rasčlanjivanja perturbacija nestaje. Sve dok je operator $\hat{V}_p(s)$ (koji je linearan po s) određiv, može se uvesti vremenski nezavistan perturbacioni Hamiltonijan \hat{H} pomoću izraza:

$$n\hat{V}_p(s) = \frac{i}{\hbar} \hat{H} s \quad (143)$$

Tako da je:

$$\hat{t}_{av}(s) = \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(\hat{H}_a + \hat{H})s\right\} \quad (144)$$

Formiranjem autokorelace funkcije pomoću izraza (99) i nalaženjem njenog Fourier transforma, za profil spektralne linije se dobija:

$$P(\omega) = -\Im\left\{Tr\left[\frac{1}{\pi} \frac{\hat{D}}{\omega - \frac{(\hat{H}_a + \hat{H})}{\hbar}}\right]\right\} \quad (145)$$

Za preklapajuće vodonikove linije razvoj gornjeg izraza daje sumu po proizvodima dva tipa matričnih elemenata:

$$\frac{\frac{\gamma}{2}}{(\Delta\omega + \Delta\omega')^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \quad ; \quad \frac{(\Delta\omega + \Delta\omega')}{(\Delta\omega + \Delta\omega')^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \quad (146)$$

gde su $\Delta\omega$ i $\Delta\omega'$ perturbacije učestanosti za emitera stanja α i α' respektivno. Posledica ovoga je da rezultujuća raspodela intenziteta nije samo suma disperzionih profila sa različitim γ (zavisnim od različitih vremena života emiterских stanja), već takođe sadrži asimetrične članove usled nedijagonalnih elemenata operatora autokorelace funkcije. Ako su ovi članovi nule, rezultat je Lorentzov profil, što je prikazano u ANDERSON [33]. Naravno, i za izolovanu liniju je oblik profila istog tipa:

$$P(\Delta\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\gamma}{2}}{(\Delta\omega - \Delta\omega_s)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2} \quad (147)$$

$$\Delta\omega_s = \Re\{\langle i|\hat{H}|i\rangle\} \quad (148)$$

$$\Delta\omega_{1/2} = \gamma = -\Im\{2\langle i|\hat{H}|i\rangle\} \quad (149)$$

Kvazistatička teorija širenja

Sa udarnog aspekta, atom-emiter je većinu vremena neperturbovan, a samo u toku kratkog vremena trajanja sudara on interaguje sa sudarajućom česticom. Ova aproksimacija je dobra sve dok koncentracija perturbera zadovoljava relaciju (121). Za veće koncentracije perturbera, problem se drugačije sagledava, što obuhvata uključivanje simultanih interakcija emitera sa mnoštvom perturbera. Međutim veoma često se kretanje perturbera može zanemariti.

Najjednostavnija teorija izbegava sve superpozicione probleme, time što predpostavlja da perturbacija učestanosti $\Delta\omega$ potiče samo usled interakcije emitera sa najbližim perturberom, te se ovaj pristup i zove *aproksimacija najbližeg suseda*. Ovo je logična aproksimacija, jer samo nekoliko, veoma bliskih perturbera imaju neki uticaj na emiter i vredno je razmatrati interakciju sa samo najbližim od njih.

Ako se sa n označi koncentracija čestica, onda izraz:

$$W_+(dV) = n \cdot dV \quad (150)$$

predstavlja verovatnoću da se bar jedna čestica nalazi unutar zapremine dV , te shodno tome, izraz:

$$W_-(dV) = 1 - n \cdot dV \quad (151)$$

predstavlja verovatnoću da se niti jedna čestica ne nađe unutar dV . Za konačnu zapreminu V , odgovarajuća verovatnoća je:

$$W_-(dV) = \prod_{\frac{V}{dV}} W_-(dV) = [1 - n \cdot dV]^{\frac{V}{dV}} = \exp\{-n \cdot V\} \quad (152)$$

Stoga je verovatnoča da se bar jedna čestica nalazi unutar sferne ljske debljine dr , na rastojanju r od atoma emitera i da nema niti jedne druge na rastojanju manjem od r , data izrazom:

$$W(r)dr = W_-\left(\frac{4\pi}{3}r^3\right) \cdot W_+(4\pi r^2 dr) = \exp\left\{-\frac{4\pi}{3}nr^3\right\} \cdot n \cdot 4\pi r^2 dr \quad (153)$$

Ako se uzme da je perturbacija emitovane učestanosti data sa relacijom (105), te da je normalna perturbacija emitovane učestanosti (odgovara distanci perturbera jednakoj srednjem rastojanju među česticama) data sa:

$$\Delta\omega_0 = \frac{C_p}{r_0^p} = C_p \left[\frac{4\pi}{3}n\right]^{\frac{p}{3}} \quad (154)$$

za profil linije dobijamo:

$$P(\Delta\omega) = \frac{3}{p\Delta\omega_0} \left[\frac{\Delta\omega_0}{\Delta\omega} \right]^{\frac{p+3}{p}} \exp\left\{-\left(\frac{\Delta\omega_0}{\Delta\omega}\right)^{\frac{3}{p}}\right\} \quad (155)$$

koji je iako jednostavan, često dovoljno tačan.

Sada se prelazi na analizu tipova širenja pritiskom, koji se međusobno razlikuju prema vrsti interakcije između emitera i perturbera. To su, kako je već bilo rečeno, Van der Waalsovo, rezonantno i Starkovo širenje.

1.3.1 Van der Waalsovo širenje

Najjednostavniji slučaj skalarno aditivnih interakcija je Van der Waalsova interakcija, za koju je $p = 6$ i koju je izučavao MARGENAU [23]. Analitički oblik potencijala interakcije nije poznat, ali se on razvija u red po stepenima $\frac{1}{r}$, gde je r - rastojanje između emitera i perturbera, te se zaustavlja na prvom članu različitom od nule :

$$U(r) = -\frac{a_6}{r^6} \quad (156)$$

Ova interakcija je zasnovana na tri efekta, od kojih su dva (Kessonov i Debyev) vezana za međusobno delovanje kako permanentnih tako i statistički fluktuirajućih električnih dipola neutralnih čestica koji su posledica razdvajanja centara pozitivnog i negativnog nanelektrisanja u atomima i molekulima, dok je treći efekat (Londonova disperzija) vezan za međusobne dinamičke deformacije elektronskih oblaka atoma ili molekula. Sva tri efekta su privlačnog karaktera, dok odbojnu komponentu čine spinske interakcije između elektronskih oblaka, koja se dobija ako se u razvoju potencijala ide do sledećeg nenultog člana koji je proporcionalan sa $\frac{1}{r^9}$. Sa ovim potencijalom bavili su se VALEE, RANSON & CHAPELLE [34], HINDMARSH & FARR [35]. Na osnovu jednačina (74), (75) može se naći perturbaciona zapremina $V_p(s)$ u kvazistatičkoj aproksimaciji, tj. predpostavljajući da perturberi miruju. Tada je perturbacija učestanosti $\Delta\omega_j$ nastala od j -tog perturbera ista za sve perturbujuće čestice i zavisi od rastojanja između emitera i perturbera. Uvođenjem sfernih koordinata (koje su u ovom slučaju najpogodnije) dobijamo :

$$V_p(s) = 4\pi \int_0^{+\infty} [1 - \exp\{i\frac{C_p s}{r^p}\}] r^2 dr \quad (157)$$

Procena ovog izraza za $p = 6$ iznosi:

$$V_p(s) \simeq \frac{1}{3} (2\pi)^{\frac{3}{2}} (C_6 \cdot s)^{\frac{1}{2}} (1 - i) \quad (158)$$

Sa obzirom da je

$$\Phi(s) = \exp\{-n \cdot V_p(s)\} \quad (159)$$

za profil linije prouzrokovani Van der Waalsovom interakcijom dobijamo :

$$P(\Delta\omega) = \frac{1}{2\Delta\omega_0} \left[\frac{\Delta\omega_0}{\Delta\omega} \right]^{\frac{3}{2}} \exp\left\{ -\frac{\pi}{4} \frac{\Delta\omega_0}{\Delta\omega} \right\} \quad (160)$$

Asimptotsko ponašanje za $\Delta\omega \gg \Delta\omega_0$ oba rezultata (155) i (160) je identično, i oblika je :

$$P(\Delta\omega) \propto \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta\omega_0}{\Delta\omega} \right)^{\frac{3}{2}}$$

što ukazuje na to da snažne perturbacije uvek potiču od jednog perturbera koji je dovoljno blizu emiteru, jer je (155) dobiveno u aproksimaciji najbližeg suseda. Prema Margenau odnos pune poluširine:

$$\Delta\omega_{1/2} = 0.822\pi^3 C_6 n^2 \quad (161)$$

prema pomeranju maksimuma linije u odnosu na neperturbovanu liniju (shift) :

$$\Delta\omega_{1/2} = \frac{8}{27} \pi^3 C_6 n^2 \quad (162)$$

iznosi 2.78, što je u slaganju sa rezultatom 2.75 koji daje udarna teorija.

Postoji i drugačiji pristup problemu. Sile kojima neutralan atom deluje na emiter su kratkodometne. Dejstvo ovih sila je takvo da je razlika između dva energijska nivoa emitera zavisna od medusobnog rastojanja emiter-perturber, pa će i emitovane učestanosti biti različite. Usrednjavanjem po verovatnoćama svih mogućih rastojanja između neutralnih perturbera i emitera, dobiće se proširena spektralna linija. Maksimalni intenzitet linije biće pomeren u odnosu na zračenje neperturbovanog emitera, i taj pomak $\Delta\omega_s$ odgovara najverovatnijem rastojanju između emitera i perturbera. GRIEM [2] se bavio kvantomehaničkom analizom Van der Waalsovog širenja i dao je procenu za poluširinu koja se može napisati u obliku [36] :

$$\Delta\omega_{1/2} = 2\pi \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{5}} a^{\frac{2}{5}} \langle v \rangle^{\frac{3}{5}} n \quad (163)$$

Brojni faktor u ovom izrazu je 19.76 i on se razlikuje od brojnog faktora 17 koji je dobio UNSÖLD [37]. $\langle v \rangle$ je srednja relativna brzina atoma koji se sudaraju, n -koncentracija perturbera, dok je a , razlika Van der Waalsovih konstanti za gornji i i donji f nivo:

$$a = a_6^i - a_6^f \quad (164)$$

$$a_6^i = \frac{e^2 a_0 \langle \alpha \rangle}{h} \langle r_i^2 \rangle \quad (165)$$

gde je $\langle r_i^2 \rangle$ srednja vrednost kvadrata vektora položaja eksitovanog elektrona datog u jedinicama Bohrovog radiusa a_0 . U Coulombovoj aproksimaciji je:

$$\langle r_i^2 \rangle = \frac{(n_i^*)^2}{2} [5(n_i^*)^2 + 1 - 3\ell_i(\ell_i + 1)] \quad (166)$$

gde su : ℓ_i odgovarajući orbitalni kvantni broj, n_i^* efektivni kvantni broj:

$$n_i^* = \left[\frac{E_H}{E_J - E_i} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (167)$$

sa E_H energijom jonizacije atoma vodonika, E_J energijom jonizacije atoma emitera, E_i energijom posmatranog nivoa atoma emitera. Veličina $\langle \alpha \rangle$ u izrazu (165) je srednja polarizabilnost neutralnih perturbera i data je tabelarno za različite elemente u radu ALLEN [38], a ukoliko je potrebno, procena je data na osnovu izraza datog u radu ALLEN [38] ili GRIEM [2] :

$$\langle \alpha \rangle \simeq \frac{9}{2} a_0^2 \left[\frac{3E_H}{4E_{2p}} \right]^2 \quad (168)$$

gde je E_{2p} energija prvog eksitacionog nivoa perturbera. U skali talasnih dužina, Van der Waalsova poluširina se može napisati kao [36] :

$$\Delta\lambda_{1/2} = 8.18 \cdot 10^{-14} [\langle \alpha \rangle \cdot \langle r^2 \rangle]^{\frac{2}{5}} \cdot \left[\frac{T}{\mu} \right]^{\frac{3}{10}} \cdot n \cdot \lambda \quad (169)$$

gde je μ redukovana masa sistema emiter-perturber, $\langle r^2 \rangle = \langle r_i^2 \rangle - \langle r_f^2 \rangle$. Van der Waalsovo širenje je značajno samo za plazme sa visokom koncentracijom neutrala, kada je srednje rastojanje među česticama malo.

1.3.2 Rezonantno širenje

Ono nastaje kada gornji ili donji energijski nivo posmatranog prelaza ima dozvoljeni dipolni prelaz na osnovno stanje, a emiter je okružen sličnim atomima u osnovnom stanju. Neka je A^* atom-emiter u pobuđenom stanju sa koga je dozvoljen prelaz na osnovni nivo (rezonantni prelaz) i neka je B identični atom u osnovnom stanju. Pored deekscitacije emitera u osnovno stanje ($A^* \rightarrow A + h\nu$) moguć je proces u kome se jedan atom deekscitira i predaje energiju drugom koji se pobuduje ($A^* + B \leftrightarrow A + B^*$). Ova mogućnost znatno povećava verovatnoću deekscitacije, tako da je vreme života emitera u pobuđenom stanju bitno skraćeno, što na osnovu relacije neodređenosti povećava neodređenost energetskog nivoa, a time i širinu spektralne linije. Rezonantni prelazi se, primera radi, javljaju kod He-Ne lasera. Ne može se ustanoviti da li se takav proces odigrao, a i nije ni bitno da li je pobuden atom A ili atom B , tako da je sistem $A^* + B \leftrightarrow A + B^*$ degenerisan i smatra se da su oba atoma delom pobuđeni a delom u osnovnom stanju. Zato atomi deluju jedan na drugog kao dva dipola, silom koja opada sa rastojanjem kao r^{-3} ($p = 3$) i koja pomera energetske nivoe atoma-emitera. GRIEM [2] je polazeći od teorije GBKO (GRIEM, BARANGER, KOLB & OERTEL [32]) i teorije koju je dao BARANGER [39], za širenje spektralnih linija u udarnoj aproksimaciji usled dipol-dipol interakcije sa osnovnim stanjem atoma iste vrste dobio:

$$\Delta\omega_{1/2} = 2\pi \left[\frac{g_o}{g_R} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{n\epsilon^2 f_R}{m\omega_R} \quad (170)$$

gde su g_o i g_R statističke težine osnovnog i pobuđenog stanja, n koncentracija perturbujućih čestica, f_R jačina oscilatora za posmatrani prelaz i ω_R odgovarajuća učestanost posmatranog rezonantnog prelaza. ALI & GRIEM [40, 41] su kasnije izvršili procene uticaja članova višeg reda u razvoju Hamiltonijana interakcije, na osnovu čega su korigovali izraz (170) i dobili:

$$\Delta\omega_{1/2} = 3.84\pi \left[\frac{g_o}{g_R} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{n\epsilon^2 f_R}{m\omega_R} \quad (171)$$

Rezonantno širenje je najčešće izazvano neutralnim atomima iste vrste, ali za nastajanje neradijativnog rezonantnog transfera energije nije neophodno da atomi budu isti, već je dovoljno da im odgovarajući energijski nivoi budu približni, tako da perturberi mogu biti i atomi i joni različitih vrsta. Prelaženjem na skalu talasnih dužina, izraz za poluširinu postaje:

$$\Delta\lambda_{1/2} = 8.60 \cdot 10^{-14} \left[\frac{g_o}{g_R} \right]^{\frac{1}{2}} n f_R \lambda_R \lambda^2 \quad (172)$$

gde je: λ talasna dužina u cm posmatranog zračenja, λ_R talasna dužina rezonantnog prelaza. Rezonantno širenje je za date eksperimentalne uslove zanemarivo. Ako se pomoću izraza (172) izračuna $\Delta\lambda_{1/2}$ u najnepovoljnijem slučaju se dobija $\Delta\lambda_{1/2} = 7 \cdot 10^{-5} \text{ nm}$ pri čemu je koncentracija perturbujućih čestica n procenjena iz sastava plazme.

1.3.3 Starkovo širenje

Uticaj električnog polja (naročito mikropolja u plazmi) na atomske nivoe i verovatnoće prelaza je veoma bitan za razne aplikacije atomske spektroskopije. Starkov efekat predstavlja promenu energijskih stanja atoma pod dejstvom električnog polja, u našem slučaju električnog mikropolja kreiranog od strane nanelektrisanih čestica, elektrona i jona.

Spektralna raspodela emitovane energije pojedinih atoma, sastoji se od spektralnih linija pomerenih i rascepljenih na komponente. Nasuprot statičkom električnom polju, električno mikropolje u plazmi je prostorno-vremenski promenljivo, te su pomeranja energijskih nivoa različita za različite atome, te je sumarni efekat dobijanje proširenih i pomerenih spektralnih linija. Kod vodonika i njemu sličnih jona, karakterističan je linearni Starkov efekat, tj. iznos dodatne energije za koji se pomera određeni energetski nivo, kada se atom nađe u spoljnjem električnom polju, proporcionalan je jačini tog polja. Kod „nevodoničnih“ atoma specifičan je kvadratični Starkov efekat, kod koga je primetno kako širenje tako i pomeranje linija, za razliku od linearног efekta gde je pomeranje veoma malo. Sama spektralna linija može biti asimetrična, može imati zabranjene komponente (usled narušavanja izbornih pravila u električnom mikropolju) ili imati satelite (usled dvokvantnih prelaza). Starkov efekat je teorijski ispitivan u dva pravca.

Prvi pravac čine takozvane *unificirane teorije* koje profil linije opisuju kao celinu. Ovaj metod daje dobre rezultate za linije koje se ne mogu prikazati jednostavnim Lorentzovim profilom. Ove teorije se mogu izvesti metodama klasične fizike (VOSLAMBER [42, 43], DUFFY [44], SMITH, COOPER & VIDAL [45], VIDAL, COOPER & SMITH [46], BARNARD, COOPER & SMITH [47]) i metodama kvantne mehanike (npr. TRAN MINH & VAN REGEMORTER [48], TRAN MINH, FEAUTRIER & VAN REGEMORTER [49]). U ove poslednje spada i metod električnog mikropolja (BRISSAUD & FRISCH [50, 51], BRISSAUD, GOLDBACH, LEORAT, MAZURE & NOLLEZ [52,53]) za koji je SEIDEL [54] pokazao da je ekvivalentan unificiranim teorijama sve dok se širenje jonima posmatra u kvazistatičkoj aproksimaciji. Kada efekti dinamike jona postanu značajni, ovaj metod je najpogodniji (SEIDEL [55]) jer pruža istovremeno ravnopravno tretiranje i elektronskih i jonskih efekata. Drugi pravac čine teorije kao što su GBKO [32], izračunavanja BENETT & GRIEM [56] za neutrale, JONS, BENETT & GRIEM [57] za jednostruko ionizovane atome. Ove teorije posebno ispituju centar linije a posebno krila linije. Ako se linija posmatra kao celina, profil se konstruiše kao funkcija koja se u centru i na krilima poklapa sa odgovarajućim izrazima koje daju udarna i kvazistatička teorija respektivno. Ove teorije, za razliku od unificiranih, mnogo bolje opisuju one delove profila za koje važe. Pre no što se prede na analizu širenja usled elektrona i jona neophodno je nešto reći o linearном i kvadratičnom Starkovom efektu.

Energija atoma u homogenom električnom polju je jednaka skalarnom proizvodu između jačine električnog polja $\vec{\epsilon}$ i električnog dipolnog momenta \vec{D} uzetog sa negativnim predznakom:

$$\hat{H}' = -\vec{\epsilon} \cdot \vec{D} = c\vec{\epsilon} \sum_i \vec{r}_i \quad (173)$$

Matrični elementi od \vec{D} povezuju stanja iste parnosti i oni su uključujući i djagonalne matrične elemente, jednaki nuli. Zato interakcija (173) ne dovodi do promene energije atoma u prvom redu teorije perturbacije. Cepanje nivoa je određeno korekcijama drugog reda. Izborom z ose duž pravca polja $\vec{\epsilon}$, imamo da je $\hat{H}' = -\epsilon \cdot D_z$, te za korekciju energije stanja $|\gamma JM\rangle$ se dobija

$$\Delta E_{\gamma JM} = \epsilon^2 \sum_{\gamma' J'} \frac{|\langle \gamma JM | D_z | \gamma' J' M \rangle|^2}{E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}} \quad (174)$$

gde se pod γ podrazumeva set kvantnih brojeva koji opisuju term, J kvantni broj totalnog momenta impulsa atoma, M -vrednost projekcije totalnog momenta impulsa na

pravac polja $\vec{\epsilon}$. Zavisnost matričnih elemenata operatora D_z od M može se izračunati u eksplicitnoj formi kao:

$$\langle \gamma JM | D_z | \gamma' J' M' \rangle \propto \begin{cases} \sqrt{J^2 - M^2} & \text{za } J' = J - 1 \\ M & \text{za } J' = J \\ \sqrt{J^2 - M^2} & \text{za } J' = J + 1 \end{cases} \quad (175)$$

Odavde sledi da je

$$\Delta E_{\gamma JM} = \epsilon^2 [A_{\gamma J} + B_{\gamma J} \cdot M^2] \quad (176)$$

gde će se konstante $A_{\gamma J}$ i $B_{\gamma J}$ naknadno razmatrati. Dakle homogeno električno polje ϵ cepta nivo $|\gamma J\rangle$ na $2J + 1$ komponentu:

$$M = J, J - 1, \dots, -J \quad (177)$$

Veličina cepanja je proporcionalna ϵ^2 , te imamo kvadratični Starkov efekat; svi nivoi sa izuzetkom nivoa $M = 0$ su dvostruko degenerisani sa obzirom na znak projekcije momenta impulsa. Nivoi $J = 0$ i $J = 1/2$ se očigledno ne cepaju i podležu samo pomeranju. Asimetrija cepanja je posebna odlika izraza (176). Dublje analize izraza (174) zahtevaju dodatna razmatranja. Slučaj (\vec{L}, \vec{S}) -sprege je od najvećeg značaja za praksu. Ako se multipletna struktura perturbovanih termova zanemari (što znači da se predpostavlja da je $E_{\gamma' J'} \approx E_{\gamma'}$) tada je moguće izračunati zavisnost koeficijenata $A_{\gamma J}$ i $B_{\gamma J}$ od J u eksplicitnom obliku:

$$A_{\gamma J} = \alpha_{\gamma} + \frac{1}{2} \cdot \beta_{\gamma} C_2 \quad B_{\gamma J} = \beta_{\gamma} C_1 \quad (178)$$

$$C_1 = \frac{3\langle \vec{L} \cdot \vec{J} \rangle [2\langle \vec{L} \cdot \vec{J} \rangle - 1] - 2J(J+1)L(L+1)}{J(J+1)(2J-1)(2J+3)} \quad (179)$$

$$C_2 = 2 \frac{L(L+1)[2J(J+1)-1] - \langle \vec{L} \cdot \vec{J} \rangle [2\langle \vec{L} \cdot \vec{J} \rangle - 1]}{(2J-1)(2J+3)} \quad (180)$$

Ovde su α_{γ} i β_{γ} nove konstante. Izraz (174) se može uprostiti u slučaju osnovnog stanja i u slučaju jake interakcije sa najbližim nivoom, kada glavni doprinos daje samo jedan od članova u sumi. U slučaju osnovnog stanja, energijske razlike $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$ u (174) za nivoe diskretnog spektra su veće od E_r (energija rezonantnog prelaza) ali manje od E_i (energija ionizacije). Dokle god je $E_i - E_r \leq E_i, E_r$ (za vodonik je $E_r = \frac{3}{4}E_i$) suma (174) se može aproksimativno pisati u formi :

$$\begin{aligned} \Delta E_{\gamma JM} &= \epsilon^2 I^{-1} \sum_{\gamma' J'} |\langle \gamma JM | D_z | \gamma' J' M' \rangle|^2 \\ &= \epsilon^2 I^{-1} \langle \gamma JM | D_z^2 | \gamma JM \rangle \end{aligned} \quad (181)$$

gde I ima red veličine E_i, E_r . Uzimajući da je $I = E_i$ ili $I = E_r$ moguće je dati procenu sume (174). Za eksitovana stanja takve procene nisu moguće jer energetska razlika $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$ može biti kako pozitivna tako i negativna. U slučaju jake interakcije sa najbližim nivoom, koja se često dešava ako je jedna od energijskih razlika $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$ mnogo manja od ostalih, može se aproksimativno uzeti da je:

$$\Delta E_{\gamma JM} \approx \epsilon^2 [E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}]^{-1} |\langle \gamma JM | D_z | \gamma' J' M' \rangle|^2 \quad (182)$$

$$\Delta E_{\gamma' J' M} \approx \epsilon^2 [E_{\gamma' J'} - E_{\gamma J}]^{-1} |\langle \gamma' J' M | D_z | \gamma JM \rangle|^2 = -\Delta E_{\gamma JM} \quad (183)$$

U ovim izrazima kvadrat modula matričnog elementa operatora D_z se može zameniti jačinom oscilatora datog prelaza $\gamma J \longleftrightarrow \gamma' J'$, $f(\gamma J; \gamma' J')$:

$$\Delta E_{\gamma JM} = -\Delta E_{\gamma' J'M} = \frac{3e^2}{2m\omega^2} (2J+1) f(\gamma J; \gamma' J') \begin{bmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 0 & M \end{bmatrix}^2 \varepsilon^2 \quad (184)$$

Ova formula je pogodna samo za grube procene, jer doprinos velikog broja malih članova koji su izostavljeni, može biti istog reda veličine kao i (184). U mnogim slučajevima blisko interagujućih nivoa, eksperiment pokazuje simetriju cepanja $\Delta E_{\gamma JM} = -\Delta E_{\gamma' J'M}$ koja je karakteristična za aproksimaciju „dvaju nivoa“. Relacije (182) i (184) su važeće sve dok je popravka energije mala u poređenju sa razlikom $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$. U opštem slučaju je neophodno razmatrati istovremeno interakciju sa spolnjim električnim poljem \hat{H}' i unutar-atomsku interakciju \hat{H}'' odgovornu za cepanje nivoa γJ i $\gamma' J'$. Interakcija \hat{H}'' je suma tri člana: centralnog potencijala, elektrostatičke interakcije između elektrona i spin-orbitalna interakcija. Matrice svih ovih interakcija su dijagonalne po kvantnim brojevima J i M . \hat{H}'' se definiše tako da njegova matrica bude takođe dijagonalna po kvantnim brojevima γ , odakle je:

$$E_{\gamma J} = E_0 + \langle \gamma J M | \hat{H}'' | \gamma J M \rangle = E_0 + \frac{\Delta}{2} \quad (185)$$

$$E_{\gamma' J'} = E_0 + \langle \gamma' J' M | \hat{H}'' | \gamma' J' M \rangle = E_0 - \frac{\Delta}{2} \quad (186)$$

$$E_0 = \frac{1}{2}(E_{\gamma J} + E_{\gamma' J'}) \quad \Delta = E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'} \quad (187)$$

Lako je uočiti da je ovakav izbor \hat{H}'' realno moguć, jer u odsustvu polja, popravka prvog reda za perturbaciju \hat{H}'' daje dobre vrednosti za energije stanja γJ i $\gamma' J'$. Uzimanjem u obzir interakcije \hat{H}' i \hat{H}'' , energijski nivoi se mogu naći iz sekularne jednačine:

$$\begin{vmatrix} \frac{\Delta}{2} - \Delta E & \langle \gamma J M | \hat{H}' | \gamma' J' M \rangle \\ \langle \gamma' J' M | \hat{H}' | \gamma J M \rangle & -\frac{\Delta}{2} - \Delta E \end{vmatrix} = 0 \quad (188)$$

Smenom $\hat{H}' = -\varepsilon D_z$ se dobija:

$$\Delta E_{1/2} = \pm \sqrt{\left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 + |\langle \gamma J M | D_z | \gamma' J' M \rangle|^2 \varepsilon^2} \quad (189)$$

U odsustvu polja se dobija :

$$\Delta E_{1/2} = \pm \frac{\Delta}{2} \quad (190)$$

Ako je prvi član pod korenom u (189) mnogo veći od drugog, razvojem korena u (189) po stepenima od ε^2 dobijamo formule za kvadratični Starkov efekat (182), (183) :

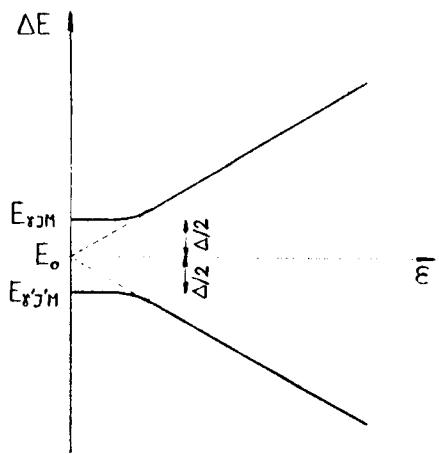
$$\Delta E_1 = -\Delta E_2 = \frac{\Delta}{2} + \frac{|\langle \gamma J M | D_z | \gamma' J' M \rangle|^2}{\Delta} \varepsilon^2 \quad (191)$$

Međutim, ako je interakcija sa poljem tako jaka da je drugi član pod korenom u (189) mnogo veći od prvog, može se pisati:

$$\Delta E_{1/2} = \pm |\langle \gamma J M | D_z | \gamma' J' M \rangle| \varepsilon \quad (192)$$

Prema tome, sa porastom jačine polja ε dolazi do prelaza kvadratičnih u linearne efekte.

Zavisnost cepanja od jačine polja je data na sledećem grafiku: Naravno, ovakva zavisnost je tipična samo za aproksimaciju „dva nivoa“. Sa porastom ϵ , članovi izostavljeni iz sume (174), a koji zavise kvadratično od ϵ postaju sve značajniji. Kao rezultat ovoga, linearna zavisnost od ϵ biva zamjenjena mnogo složenijom. Važenje opšte formule (174) za kvadratični Starkov efekat je takođe ograničeno i uslovom $\Delta E_{\gamma JM} < E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$. Ako je pomeranje energetskog nivoa $E_{\gamma JM}$ (dato sa $\Delta E_{\gamma JM}$) uporedivo sa bilo kojom od razlika $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$, kvadratična zavisnost cepanja od ϵ je narušena.



slika 2

Cepanje spektralnih linija a takođe i polarizacija emitovanog zračenja zavisi od pravca posmatranja. Ako se posmatra duž z -ose (u pravcu polja $\vec{\epsilon}$) zračenje je polarizovano u xy -ravni i povezano sa prelazima $M \rightarrow M + 1$. Odgovarajuće komponente se zovu σ -komponente. U pravcu normalnom na z -osu, pored σ -komponenti, uočavaju se takođe i π -komponente, polarizovane duž z -ose i nastale usled prelaza $M \rightarrow M$. Učestanosti π - i σ - komponenti su date relacijama:

$$\omega_\pi(M) = \omega_0 + [(A - A') + (B - B') \cdot M^2] \cdot \epsilon^2 \quad (193)$$

$$\omega_\sigma(M) = \omega_0 + [(A - A') + B \cdot M^2 - B'(M \pm 1)^2] \cdot \epsilon^2 \quad (194)$$

Jačine električnih polja koje se koriste koriste u eksperimentu ne prelaze značajno vrednosti $\epsilon = 10^5 V/cm$. Zajmenom ove vrednosti u izraz (184), vidi se da kada je $f \simeq 1$ i $\frac{E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}}{hc} \sim 10^3 cm^{-1}$, cepanje je reda veličine $1 cm^{-1}$. Veličina cepanja naglo opada sa porastom $E_{\gamma J} - E_{\gamma' J'}$, pa kao zakonitost važi da je cepanje spektralne linije potpuno određeno cepanjem gornjeg nivoa γJ . U tom slučaju je :

$$\omega_\pi(M) = \omega_0 + (A + B \cdot M^2) \cdot \epsilon^2 \quad (195)$$

$$\omega_\sigma(M) = \omega_0 + (A + B \cdot M^2) \cdot \epsilon^2 \quad (196)$$

Sada će se, potpunosti izlaganja radi, analizirati linearni Starkov efekat sa aspekta klasične fizike.

Linearni Starkov efekat

To je slučaj $p = 2$, kod kojeg je pomeraj faze rezultat vektorskog slaganja električnih polja prouzrokovanih pojedinim perturberima (joni ili elektroni). Ako se iz pogodnosti uzme C_2 , fazni pomak je :

$$\eta(t+s, t) = \int_t^{t+s} \left| \sum_j \frac{\vec{r}_j}{r_j^3} \right| dt \quad (197)$$

Ovaj izraz je nemoguće eksplisitno izraziti u slučaju pokretnih nanelektrisanih perturbera, ali ako se uzme da oni miruju, rezultujuće polje je vremenski nepromenljiv vektor, pravca okarakterisanim ortom \vec{s}_0 . Ako se vremenski vektor uvede kao :

$$\vec{s} = s \cdot \vec{s}_0 \quad (198)$$

dobija se mnogo jednostavniji izraz za fazni pomak:

$$\eta(t+s, t) = \sum_j \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{s}}{r_j^3} \quad (199)$$

Ovim je omogućeno razmatranje problema na isti način kao kod slučaja skalarne superpozicije polja uzrokovanih statičkim perturbacijama, sa tim da se izraz za perturbacionu zapreminu (157) zamjenjuje sa:

$$V_p(s) = 2\pi \int_0^{+\infty} \int_0^\pi [1 - \exp\{i \frac{s \cdot \cos \theta}{r^p}\}] r^2 \sin \theta dr d\theta \quad (200)$$

Neophodno je u dalnjem računu uzeti u obzir da više ne preovladuje sferna simetrija, te da je ugao θ između pravca rezultujućeg polja (određenog ortom \vec{s}_o) i polja uzrokovanih česticom j od velikog uticaja. Dvostruki integral u (200) se da rešiti, što ima za rezultat:

$$V_p(s) = (\gamma \cdot s)^{\frac{3}{p}} \quad (201)$$

$$\gamma = \left[\frac{2\pi^2 p}{3(p+3)\Gamma(\frac{3}{p})\sin(\frac{3\pi}{2p})} \right]^{\frac{p}{3}} \quad (202)$$

Za $p = 2$, dobija se $\gamma = 2.6031$, tako da je korelaciona funkcija za širenje linije usled polja sa pravcem \vec{s}_o , određena sa:

$$\Phi(s) = \exp\{-n(\gamma \cdot s)^{\frac{3}{2}}\} \quad (203)$$

Sa obzirom da je mikropolje izotropno, verovatnoća da perturbacija učestanosti iznosi $\Delta\omega$ je (ako je $C_2 = 1$) jednak verovatnoći da intenzitet jačine polja bude F , koja je opet u vezi sa verovatnoćom da jačina polja bude \vec{F} preko relacije:

$$W(F) = 4\pi \cdot F^2 \cdot W(\vec{F}) \quad (204)$$

Tada je :

$$\begin{aligned} W(F) &= 4\pi \cdot F^2 \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \int_s \int_\Omega \Phi(s) \exp\{i \cdot s \cdot F \cos \theta\} ds d\Omega \\ &= \frac{F^2}{\pi} \int_s \int_\Omega \exp\{-n(\gamma \cdot s)^{\frac{3}{2}} + i \cdot s \cdot F \cos \theta\} s^2 \cdot \sin \theta ds d\theta \end{aligned} \quad (205)$$

Integracijom po θ i uvodenjem normalne jačine polja F_o kao:

$$F = \beta \cdot F_o = \beta c \gamma n^{\frac{2}{3}} \quad (206)$$

dobija se poznata Holsmarkova raspodela:

$$W(\beta) = \frac{2}{\pi \cdot \beta} \cdot \int_0^{+\infty} v \sin v \exp\{-\left(\frac{v}{\beta}\right)^{\frac{3}{2}}\} dv \quad (207)$$

Za $1 < \beta < 5$ direktna numerička integracija je neizbežna, pa je $W(\beta)$ u vidu tablčnih vrednosti data u radovima: SCHMALJOHANN [58], VERVEY [59], CHANDRASEKHAR [60], BARANGER & MOZER [61, 62]. U praksi često srećemo dva razvoja:

$$W(\beta) = \begin{cases} \frac{4}{3\pi} \beta^2 [1 - 0.4628\beta^2 + 0.1227\beta^4 \dots] & \text{za } \beta \ll 1 \\ 1.496\beta^{-5/2} [1 + 5.107\beta^{-3/2} + 14.43\beta^{-3} \dots] & \text{za } \beta \gg 1 \end{cases} \quad (208)$$

do sada je, prečutno, uzeto da nema interakcije između perturbera koji stvaraju mikropolje. Ovo je ekvivalentno predpostavci da je srednji potencijal interakcije mali u poređenju sa kinetičkom energijom perturbera, što je nesumnjivo korektan stav za niske koncentracije i visoke temperature. Međutim pri visokim koncentracijama neophodne su modifikacije iznesenih rezultata, i to na osnovu modela grupnog razvoja opisanog i korišćenog u radovima MOZER & BARANGER [61, 62]. Polazi se od izraza za autokorelacionu funkciju:

$$\Phi(s) = \left\langle \prod_{j=1}^{nV} \exp\left\{-i \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{s}}{r_j^3}\right\} \right\rangle \quad (209)$$

koji se uvedenjem verovatnoće $P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{nV})$ za datu konfiguraciju sistema, može napisati u eksplisitnom obliku:

$$\Phi(s) = \frac{1}{V^{nV}} \int \dots \int \left[\prod_{j=1}^{nV} \exp\left\{-i \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{s}}{r_j^3}\right\} \right] P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{nV}) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_{nV} \quad (210)$$

Neka je

$$\varphi_j = \exp\left\{-i \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{s}}{r_j^3}\right\} - 1 \quad (211)$$

malo odstupanje eksponencijalnog izraza od 1, tako da je:

$$\prod_{j=1}^{nV} \exp\left\{-i \frac{\vec{r}_j \cdot \vec{s}}{r_j^3}\right\} = \prod_{j=1}^{nV} (1 + \varphi_j) = 1 + \sum_j \varphi_j + \sum_{j,k} \varphi_j \cdot \varphi_k + \dots \quad (212)$$

Ako se uvedu ortonormirani koeficijenti verovatnoće kao

$$g_i(\underbrace{\vec{r}_\alpha, \vec{r}_\beta, \vec{r}_\gamma, \dots}_{i-\text{članova}}) = \frac{1}{V^{nV-1}} \cdot \underbrace{\int \dots \int}_{i-\text{puta}} P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_{nV}) \cdot \prod_{\nu=1, \nu \neq \alpha, \beta, \gamma, \dots}^{nV} d\vec{r}_\nu \quad (213)$$

izraz (210) postaje:

$$\Phi(s) = 1 + \sum_j \frac{1}{V} \int \varphi_j g_1(\vec{r}_j) d\vec{r}_j + \sum_{j,k} \frac{1}{V^2} \int \int \varphi_j \varphi_k g_2(\vec{r}_j, \vec{r}_k) d\vec{r}_j d\vec{r}_k + \dots \quad (214)$$

U ovom razvoju drugi član opisuje odstupanje $\Phi(s)$ od 1 usled interakcije emitera sa pojedinim perturberima, dok treći član daje popravku usled parne interakcije (j, k) . Daljnja grupna ekspanzija nije od interesa, te se ne ulazi u glomazan račun. Navedena procedura nije podesna samo za uračunavanje interakcije među perturberima već i za izračunavanje interakcije emiter-perturberi, tako da raspodela polja za jon kao emiter takođe može biti nađena. Koeficijenti $g_1(\vec{r}_j)$ i $g_2(\vec{r}_j, \vec{r}_k)$ su dati izrazima:

$$g_1(\vec{r}_j) = \begin{cases} 1 & \text{za neutralni emiter} \\ \exp\left\{-\frac{e^2 \exp\left\{-\frac{r_D}{4\pi\varepsilon_0 r_{jk} k_B T}\right\}}{4\pi\varepsilon_0 r_{jk} k_B T}\right\} & \text{za nanelektrisani emiter} \end{cases} \quad (215)$$

$$g_2(\vec{r}_j, \vec{r}_k) = \exp\left\{-\frac{e^2 \exp\left\{-\frac{r_D}{4\pi\varepsilon_0 r_{jk} k_B T}\right\}}{4\pi\varepsilon_0 r_{jk} k_B T}\right\} - 1 \quad (216)$$

Vidi se da za neutralni emiter $g_1(\vec{r}_j)$ i ne zavisi od položaja perturbera, što vodi ka Holtsmarkovoj distribuciji. Pretpostavka o jednakoj verovatnoći nalaženja bilo kog perturbera na određenoj distanci ne važi za nanelektrisanu emitujuću česticu čiju raspodelu polja tek treba izračunati. U ovom slučaju verovatnoća je odredena sa $\exp\{-\frac{U}{k_B T}\}$ gde je U -potencijal ekraniranog Coulombovog polja, dok je r_D Debye-Hückelova ekranirajuća dužina, data sa:

$$r_D = \sqrt{\frac{k_B T}{4\pi e^2(n_e + \sum_i n_i Z_i^2)}} \quad (217)$$

Pošto se razmatra niskofrekventna komponenta polja, nije potrebno uzeti u obzir specijalan slučaj ekraniranja koje potiče samo od elektrona. Debyeva teorija takođe opisuje i uzajamnu interakciju između perturbera, tako da odstupanje veličine $\exp\{-\frac{U}{k_B T}\}$ od 1 daje korekciju usled parne interakcije. Ako je broj čestica u Debyevu sferi mali, tj. ako je plazma gusta:

$$\frac{r_o}{D} = 0.127 \cdot n^{1/6} T^{1/2} \geq 1 \quad r_o = n^{-1/3} \quad (218)$$

onda prethodna izlaganja više ne važe jer srednja energija elektronske interakcije $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_o}$ postaje uporediva sa srednjom kinetičkom energijom $k_B T$ i Debyeva teorija zakazuje. Prve radove na nalaženju distribucije polja u gustoj plazmi izvršio je 1947. MAYER [63], gde je pokušano da se supergusta plazma opiše veoma jednostavnim modelom. Po tom modelu su joni nanelektrisanja $+Z \cdot e$ veoma blizu centra sfere radiusa r_o u kojoj je elektronski oblak nanelektrisanja $-Z \cdot e$ homogeno raspoređen. Ovi joni su elastično vezani za centar te je potencijal proporcionalan kvadratu bezdimenzionog otklona $\rho = \frac{r}{r_o}$:

$$U(\rho) = \frac{Z^2 e^2}{8\pi\epsilon_0 r_o} (\rho^2 - 3) \quad (219)$$

BROYLES [64] je istraživao funkciju raspodele polja u takvoj konfiguraciji i našao:

$$W(\beta) = 3 \cdot (2\rho^{-5} + \rho^{-2})^{-1} \quad (220)$$

pri čemu je normalna jačina polja data sa

$$F_o = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r_o} \quad (221)$$

a samim tim, parametar β je :

$$\beta = \frac{F}{F_o} = \rho^{-2} - \rho \quad (222)$$

Vidi se da je $W(\beta)$ implicitna funkcija po β . Za velike jačine polja ($\beta \gg 1$) $W(\beta)$ veoma liči na Holtsmarkovu distribuciju jer obe raspodele za $\beta \rightarrow \infty$ imaju isto ponašanje:

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} W(\beta) \longrightarrow \frac{3}{2} \beta^{-\frac{5}{2}} \quad (223)$$

Međutim, vidi se da je u tom slučaju najverovatnije polje sa nultim intenzitetom što je u suprotnosti sa $\beta \rightarrow \infty$. Stoga je Broyles, u cilju izračunavanja distribucije jačine polja

oko tačke sa nanelektrisanjem Z_2e , predpostavio da je to nanelektrisanje sferno raspoređeno oko nanelektrisanja Z_1e , tako da je potencijal interakcije dat sa :

$$U_{1,2}(\rho) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{2}{\rho} + \rho^2 - 3 \right) \quad (224)$$

te zbog modifikovane verovatnoće da se nanelektrisana čestica nađe u navedenom položaju, dobijamo za distribucionu funkciju :

$$W(\beta) = 3 \cdot (2\rho^{-5} + \rho^{-2})^{-1} \cdot \exp\left\{-\frac{U_{1,2}(\rho)}{k_B T}\right\} \quad (225)$$

Kvantno-mehanička izračunavanja teorijom perturbacije, u kvazistatičkoj aproksimaciji, opisana su u radovima [65, 66, 67], te na osnovu njih Starkovo cepanje nivoa iznosi:

$$\Delta\omega(F) = \frac{3}{2}(n_1 - n_2)n \frac{ea_0}{\hbar Z} F - n^6 \frac{a_0^3}{\hbar Z^4} F^2 + \dots \quad (226)$$

gde je n -glavni kvantni broj ($n = 1 + n_1 + n_2 + |m_\ell|$), n_1 i n_2 parabolični kvantni brojevi (celi i pozitivni i imaju vrednosti $0, 1, \dots, (n-1)$), m_ℓ -magnetni orbitalni kvantni broj. Drugi član u (226) proporcionalan sa F^2 unosi popravku na kvadratičan Starkov efekat i ako je ta popravka znatna, mora se uzeti u obzir i kvadrupolno uzajamno dejstvo, koje razmatrano nezavisno od drugih daje:

$$\Delta\omega(r_p) = -\frac{e^2 Z_p}{4\pi\epsilon_0 \hbar r_p^3} \left\{ \frac{a_0^2 n^2}{2 Z_p^2} (5n^2 + 1 - 3\ell(\ell+1)) \right\} \frac{\ell(\ell+1) - 3m_\ell^2}{(2\ell+3)(2\ell-1)} \quad (227)$$

gde je ℓ -kvantni broj orbitalnog momenta impulsa, m_ℓ -kvantni broj njegove projekcije na pravac vektora \vec{r}_p (radius vektor perturbera).

Uticaj elektrona na širenje izolovanih linija

Kvantno-mehanička teorija udarnog širenja elektronima je razrađena u GRIEM [32]. Ako samo gornji (i -inicijalni) nivo interaguje, dobija se disperzionalni profil sa poluširinom $\Delta\omega_{1/2}$ i pomeranjem (shift) $\Delta\omega_s$, koji su prema Griemu dati sa:

$$\Delta\omega_{1/2} + i \cdot \Delta\omega_s = n \cdot \int_0^\infty W(v) v dv \int_0^\infty 2\pi\rho d\rho \frac{2\hbar^2}{3m^2 v^2 \rho^2} \sum_{\nu_k, l_k} \sum_{\alpha, m_k} \frac{|\langle i | r_{\alpha_k} | k \rangle|^2}{a_0^2} C(Z_{ik}) \quad (228)$$

gde su r_{α_k} ($\alpha_k = 1, 2, 3$) koordinate atomskog elektrona u stanju k , a_0 -Bohrov radius. Sumiranje se vrši po α i po svim dozvoljenim prelazima na stanje k okarakterisano kvantnim brojevima $m_k, l_k = l_i \pm 1, \nu_k$ (glavni kvantni broj). Ovo je rezultat perturbacionog razvoja u kojem perturbacija prvog reda izčezava, dok član drugog reda vodi do integrala:

$$C(Z_{ik}) = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int_{-\infty}^{x_1} dx_2 \frac{(1 + x_1 x_2) \exp\{iZ_{ik}(x_1 - x_2)\}}{(1 + x_1^2)^{3/2} \cdot (1 + x_2^2)^{3/2}} \quad (229)$$

sa bezdimenzionim varijablama :

$$x = \frac{v \cdot t}{\rho} \quad Z_{ik} = \omega_{ik} \frac{\rho}{v} \quad (230)$$

gde su ρ, v udarni parametar i brzina elektrona respektivno, a ω_{ik} učestanost prelaza atomskog elektrona iz stanja i u stanje k . Razdvajanjem $C(Z_{ik})$ na realan deo A , koji uzima u obzir prelaze uzrokovane elektronskim udarima i koji je nula ako su svi sudari elastični, i u imaginaran deo B , koji opisuje efekte elastičnih sudara, može se naći zavisnost $A = A(Z_{ik})$ i $B = B(Z_{ik})$, kao što je dano na slici br. 3:

Može se utvrditi, shodno (228) da je pomak linije $\Delta\omega_s$ u potpunosti određen sa $B(Z_{ik})$, što znači da nastaje usled elastičnih sudara, tako da $\frac{B(Z_{ik})}{\rho}$ predstavlja doprinos elastičnog sudara sa parametrom udara ρ pomaku linije. Širenje linije je isključivo rezultat neelastičnih efekata, određenih sa $A(Z_{ik})$ tako da $\frac{A(Z_{ik})}{\rho}$ predstavlja doprinos neelastičnog sudara sa udarnim parametrom ρ širenju linije. Vidi se da postoji uska povezanost ove teorije sa klasičnom teorijom Lindholm-Foleya prema kojoj pomak i širenje linije, kao

rezultat faznih pomeraja usled elastičnih sudara, u potpunosti odsustvuju i mogu se pojaviti samo ako se u razvoju (142) viši redovi perturbacija uzmu u obzir. Koristeći formalizam dat u VAINSHTEIN & SOBEL'MAN [31] dobija se:

$$\Delta\omega_{1/2} + i \cdot \Delta\omega_s = n \cdot \int_0^\infty W(v) v dv \int_0^\infty 2\pi\rho d\rho [1 - \exp\{-(\eta + i\varphi)\}] \quad (231)$$

gde je kompleksni fazni pomak $\eta + i\varphi$ ekvivalentnog oscilatora dat sa :

$$\eta + i\varphi = \frac{2}{3} \cdot \left(\frac{\hbar}{mv\rho}\right)^2 \sum_{\nu_k, l_k} \sum_{\alpha, m_k} \frac{|\langle i | r_{\alpha_k} | k \rangle|^2}{a_o^2} C(Z_{ik}) \quad (232)$$

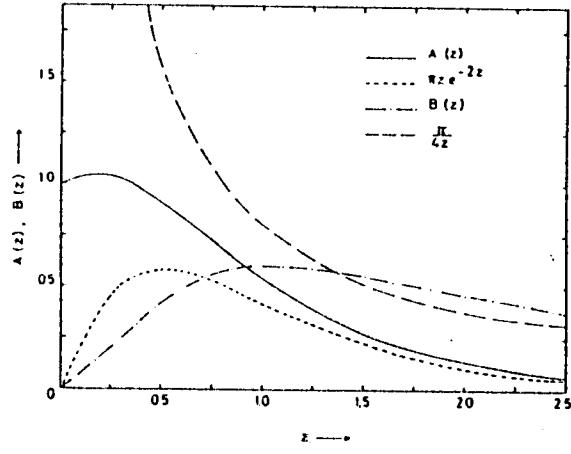
Ovaj rezultat je ekvivalentan izrazu (228) za doprinos slabih sudara. Međutim, izraz (231) ima sledeće prednosti:

- *) Integrali nisu divergentni, te nema proizvoljnih odsečanja
- *) Poluširina i pomak linije zadovoljavaju disperzionalne relacije kao što se i zahteva.

Uticaj jona na širenje izolovanih linija

Joni kao perturberi, obično imaju mnogo manji uticaj na širenje spektralnih linija no elektroni. Izuzetak su linije kod jednoelektronskih sistema i linija sa zabranjenim komponentama, međutim ni tada jonsko širenje nije dominantno. Stoga se pri izučavanju profila izolovanih linija, širenje usled jonskog uticaja uračunava kao mala popravka na udarno širenje elektronima. To je i razlog zašto se profil predstavlja konvolcijom elektronskog udarnog profila i kvazistatičkog jonskog profila [3] :

$$P(\omega) = \frac{\Delta\omega_{1/2}}{\pi} \int W(F) \cdot dF [\Delta\omega_{1/2}^2 + (\Delta\omega - \Delta\omega_s + C \cdot F^2)^2]^{-1} \quad (233)$$



slika 3

gde je $C = \frac{C_4}{e}$ veličina usrednjena po magnetnim kvantnim brojevima (C_4 je konstanta kvadratičnog Starkovog efekta), $\Delta\omega_{1/2}$ i $\Delta\omega_s$ su poluširina i pomeraj profila. Izračunavanje profila ovakvog tipa dato je u radu GBKO [32], GRIEM [2] kao :

$$j(x) = \mathbf{P}(\omega) \left| \frac{d\omega}{dx} \right| = \omega \cdot \mathbf{P}(\omega) \quad (234)$$

gde je x -redukovana učestanost odnosno redukovana talasna dužina

$$x = \frac{\omega - \omega_o - \Delta\omega_s^e}{\Delta\omega_{1/2}^e} = \frac{\lambda - \lambda_o - \Delta\lambda_s^e}{\Delta\lambda_{1/2}^e} \quad (235)$$

Ovde je ω_o -neperturbovana učestanost, a $\Delta\omega_s^e, \Delta\omega_{1/2}^e, \Delta\lambda_s^e, \Delta\lambda_{1/2}^e$ elektronski udarni pomeraj i poluširina izraženi u odgovarajućim jedinicama. Na osnovu izraza (233) i (234) profil $j(x)$ se može napisati kao

$$j_{A,R}(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \frac{W_R(\beta) d\beta}{1 + (x - A^{4/3} \cdot \beta^2)^2} \quad (236)$$

gde je $W_R(\beta)$ definisano izrazom [2] :

$$W_R(F) = \frac{1}{F_o} W_R(\beta) \quad (237)$$

Profil definisan sa (236) zavisi od dva bezdimenziona parametra:

$$A = \left[\frac{CF_o^2}{\Delta\omega_{1/2}} \right]^{3/4} \approx \frac{4\pi}{3} \cdot n_e \left\{ \frac{\hbar}{3m\omega} \left| \sum_{l_i} \Omega(l_i; l_{i'}) - \sum_{l_f} \Omega(l_f; l_{f'}) \right| \right\}^{\frac{3}{4}} \quad (238)$$

$$R = (36\pi)^{\frac{1}{6}} \cdot \left[\frac{e^2}{k_B T_e} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot n_e^{\frac{1}{6}} \quad (239)$$

gde su $l_i, l_{i'}, l_f, l_{f'}$ odgovarajući orbitalni kvantni brojevi, e -naelektrisanje elektrona, n_e -koncentracija elektrona, k_B -Boltzmanova konstanta, T_e -elektronska temperatura, dok je:

$$\Omega(l_\alpha; l_\beta) = \frac{\max\{l_\alpha; l_\beta\}}{(2l_\alpha + 1) \cdot \omega_{\alpha,\beta}} \cdot [l_\alpha \cdot l_\beta \left| \frac{r}{a_o} \right|^2] \quad (240)$$

gde su r i a_o prostorna koordinata i Bohrov radius respektivno. Parametar A daje doprinos jonskog širenja, a parametar R karakteriše Debyev ekraniranje i jonsko-jonske korelacije. Profil spektralne linije, dobijen udarnom teorijom je, kao što smo videli, disperzionog tipa, ali uticaj jona uračunat u profil $j_{A,R}(x)$ daje dodatni pomeraj i asimetriju linije. Asimptotsko ponašanje $j_{A,R}(x)$ na krilima je (GRIEM [3]) :

$$j_{A,R}(x) = \begin{cases} \frac{1}{\pi} x^{-2} \left[1 + \left(\frac{3\pi}{4} \right) \cdot A \cdot x^{1/4} \right] & \text{za } x \gg 1 \\ \frac{1}{\pi} x^{-2} & \text{za } x \ll -1 \end{cases} \quad (241)$$

U skali talasnih dužina, profil se može izračunati kao:

$$\mathbf{P}(\lambda) = j(x) \cdot \frac{dx}{d\lambda} = \frac{1}{\Delta\lambda_{1/2}} \cdot j(x) \quad (242)$$

dok su ukupna teorijska poluširina i pomeraj dati sa

$$(\Delta\omega_{1/2})_{th} \approx [1 + 1.75 \cdot A \cdot (1 - 0.75 \cdot R)] \cdot \Delta\omega_{1/2}^e \quad (243)$$

$$(\Delta\omega_s^{max})_{th} \approx \Delta\omega_s^e \pm 2.00 \cdot A \cdot (1 - 0.75 \cdot R) \cdot \Delta\omega_{1/2}^e \quad (244)$$

Teorijski pomeraj $(\Delta\omega_s^{max})_{th}$ je računat u odnosu na maksimum linije, dok znak \pm u istom izrazu ispred drugog člana zavisi od znaka elektronskog udarnog pomeraja $\Delta\omega_s^e$ u oblastima niskih elektronskih temperatura. Primena izraza (243) i (244), koji važe za neutralne atome emitere, ograničeno je uslovima :

$$R \leq 0.8 \quad 0.05 \leq A \leq 0.5 \quad (245)$$

Pri $A \leq 0.05$ u razmatranje interakcije emiter - perturberi treba uzeti i kvadrupolne efekte, dok vrednosti $A \geq 0.5$ odgovaraju uslovima kada je dominantan linearni Starkov efekat. Parametar jonskog širenja A je tu proporcionalan sa $n_e^{1/4}$. Korišćenjem izraza (239), (243), (244) mogu se dobiti poluširina linije i pomeraj u odnosu na maksimum linije u obliku [4]:

$$(\Delta\omega_{1/2})_{th} \simeq 2[1 + 1.75 \cdot 10^{-4}n_e^{1/4} \cdot A \cdot (1 - 0.068n_e^{1/6}T^{-1/2})] \cdot 10^{-16}n_e \Delta\omega_{1/2}^e \quad (246)$$

$$(\Delta\omega_s^{max})_{th} \simeq [\Delta\omega_s^e \pm 2.00 \cdot 10^{-4}n_e^{1/4}\Delta\omega_{1/2}^e A \cdot (1 - 0.068n_e^{1/6}T^{-1/2})] \cdot 10^{-16}n_e \quad (247)$$

gde se vrednosti za $\Delta\omega_{1/2}^e$, $\Delta\omega_s^e$ i A uzimaju za elektronske koncentracije $n_e = 10^{16} cm^{-3}$, kao što je na primer dato u tabelama u referenci [3]. Asimetrija profila linije uzrokuje da pomeraj na polovini visine nije isti kao pomeraj na maksimumu linije, pa je [36] :

$$(\Delta\omega_s^{1/2})_{th} \simeq [\Delta\omega_s^e \pm 3.2 \cdot 10^{-4}n_e^{1/4}\Delta\omega_{1/2}^e A \cdot (1 - 0.068n_e^{1/6}T^{-1/2})] \cdot 10^{-16}n_e \quad (248)$$

Pri proceni uticaja na poluširinu linije u slučaju kada je $A \leq 0.05$, popravka se može učiniti na način kao u formuli (246) ili jednostavnim dodavanjem izraza za jonsko širenje datog u radu [3]:

$$\Delta\omega_{1/2}^{ion} \simeq 2\pi n_e \frac{n_i^2 - n_f^2}{Z^2 \cdot m_e} \hbar a_0 Z_p \quad (249)$$

(uslovjenog uzajamnim kvadrupolnim dejstvom emitera sa jonima kao perturberima) na elektronsku poluširinu $\Delta\omega_{1/2}^e$ u zavisnosti od toga koja je od tih popravki veća. U izrazu (249) n_i i n_f su efektivni kvantni brojevi višeg i nižeg energijskog stanja emitera, Z -za neutralne emitere ima vrednost 1, za jednostruko ionizovane 2 itd. Z_p je stepen ionizovanosti perturbera, m_e - masa elektrona.

1.4 Instrumentalno širenje

Raspodela intenziteta u spektralnoj liniji zavisi od dva faktora:

- 1) Raspodele energije u liniji, koja je funkcija talasne dužine i koja zavisi od izvora koji emituje tu energiju.
- 2) Raspodele monohromatskog zračenja duž spektra, koja zavisi od spektroskopskog aparata.

Prvi faktor je bio do sada analiziran, te se ovde zadržavamo na analizi drugog faktora. Svaki deo stvarnog oblika spektralne linije koji je približno monohromatski, podleže tzv. instrumentalnom (aparativnom) širenju, tako da je dobijena spektralna linija zbir svih tih delova. Oblik linije u mnogome zavisi od širine upotrebljenog razreza i načina na koji je on osvetljen. Ne postoji opšti obrazac za nalaženje instrumentalnog širenja, već se ono menja od uređaja do uređaja zavisno od njegovih spektralnih osobina, tj. načina na koje analizirano zračenje interaguje sa elementima uređaja. Stoga treba prvo definisati osnovne pojmove koji opisuju tu interakciju, a to su [68]:

- Disperzija i moć razlaganja (zavise od upotrebljenog disperzionog elementa - prizma ili rešetka)
- Svetlosna moć i efikasnost spektralnog uređaja
- Rasuta svetlost i lažne linije
- Astigmatizam

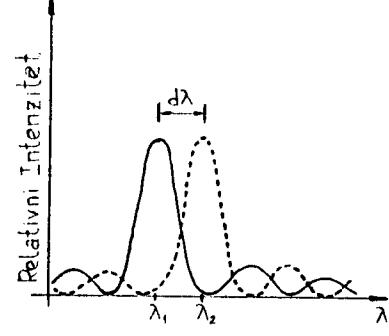
Disperzija spektralnog uređaja govori u kojoj meri aparat razlaže svetlost u prostoru, na osnovu talasne dužine. Ona se izražava kao ugaona ili linearna disperzija. Osnovna je ugaona disperzija $\frac{d\theta}{d\lambda}$ i zavisi od disperzionog sistema, a meri promenu ugla skretanja θ upadnog zraka svetlosti (nakon interakcije sa disperzionim elementom) sa promenom talasne dužine λ . U praksi češće, linearna disperzija $\frac{dl}{d\lambda}$ daje stvarnu razliku dl između dve bliske linije u spektru čija je razlika talasnih dužina $d\lambda$. Međutim, u praksi je merilo disperzije tzv. recipročna disperzija $\frac{d\lambda}{dl}$, te je $30[\text{\AA}/\text{mm}]$ mala disperzija, a $1[\text{\AA}/\text{mm}]$ relativno velika disperzija. Linearna disperzija može da se kontroliše jer ne zavisi samo od ugaone disperzije već i od rastojanja između disperzionog elementa i žižne ravni, čiji nagib prema optičkoj osi izlazećeg snopa svetlosti takođe utiče na linearu disperziju.

Moć razlaganja se definiše odnosom $\frac{\lambda}{d\lambda}$ gde je $d\lambda$ razlika talasnih dužina između dve bliske linije sličnih intenziteta, koje dati instrument još može da razdvoji pri talasnoj dužini λ .

Spektralna linija je slika razreza, pa i kada je on sasvim uzan, njegova slika je dovoljno široka da se može registrirati u obliku difrakcione slike, koja se sastoji (vidi sl. 4) od glavnog jasnog maksimuma u sredini i dva slaba maksimuma sa obe strane glavnog. Definisanje granice razlaganja između dve bliske spektralne linije λ_1 , λ_2 koje se delimično prekrivaju je proizvoljno. Najčešće se koristi Rayleighev kriterijum po kome su dve slike beskonačno uskog ili tačkastog izvora razložene, ako centralni difrakcioni maksimum jedne pada na prvi difrakcioni minimum druge. Ako su maksimumi istih intenziteta ($I(\lambda_1) = I(\lambda_2)$) onda će biti:

$$I(\lambda) = 0.82 \cdot I(\lambda_1) + 0.82 \cdot I(\lambda_2) \quad (250)$$

Stvarno razdvajanje dva maksimuma je takav njihov položaj pri kojem ih je moguće videti kao odvojene. Ovako definisano razdvajanje zavisi od osetljivosti prijemnika zračenja (ljudsko oko, fotografска ploča, fotoelektrični detektor) na promene intenziteta,



slika 4

od oblika intenzitetskih krivih u difrakcionim slikama, od relativnih intenziteta difrakcionih maksimuma, od nepravilnosti u formiranju optičke slike usled mehaničkih vibracija, optičkih aberacija i oštećenja u optičkom sistemu.

Svetlosna moć i efikasnost spektralnog uređaja. Glavna svrha spektralnog uređaja je razlaganje spektra po talasnim dužinama, pa što je veća moć razlaganja, to je veća čistoća spektra. Čistoća spektra zavisi i od širine razreza, žižnih daljina kolimatorskih i kamerišnih sočiva i od odsustva rasute svetlosti i lažnih linija. Spektralna čistoća za određenu širinu razreza, može se povećati povećanjem žižne daljine kamernog sočiva, ali se time smanjuje intenzitet svetlosti. Za jedan određeni disperzionalni element, za datu talasnu dužinu, intenzitet svetlosti i spektralna čistoća se mogu menjati samo jedan na račun drugoga. Efikasnost spektralnog uređaja se definiše kao proizvod intenziteta svetlosti i spektralne čistoće, dok je svetlosna moć merilo intenziteta svetlosti koja se propusti kroz spektralni aparat pri bilo kojoj talasnoj dužini. Svetlosna moć za bilo koju talasnu dužinu se menja sa faktorom transparencije instrumenta, a opada сразмерно porastu aperturnog odnosa uređaja (to je odnos žižne daljine i linearne aperture). Standardni spektrograf sa konkavnom rešetkom, dužine 7m, ima odnos 42 po horizontali i 120 po vertikali.

Disperzionalni elementi. To mogu biti prizme i difrakcione rešetke. Rešetke imaju zнатне prednosti nad prizmama sa stanovišta raspodele energije po talasnim dužinama. Ova prednost je ranije bila kompenzovana malim faktorom refleksije rešetke, jer je materijal ogledala rešetke imao malu moć refleksije, te je rešetka imala veće gubitke svetlosti nego prizma. Kod prizme gubici svetlosti nastaju usled apsorbacije i refleksije. Međutim izradom rešetki narezanih na staklene površine, prekrivene aluminijumom, faktor transparencije spektrografa sa rešetkom postaje veći od odgovarajućeg sa prizmom. Ranije su rešetke narezivane na metalnim ogledalima od speculum-legure i u ultraljubičastoj oblasti su imale moć refleksije manju od 10%. Današnje rešetke imaju u istoj spektralnoj oblasti moć refleksije preko 65%. Takođe je ranije slabo iskoriščavana svetlost jer je 40% svetlosti odpadalo na nedifraktovani centralni lik a 60% u neiskorišćene spektralne redove. Ovo je otklonjeno upotrebom dijamantskih šiljaka naoštrenih da narezuju tako da nastali zarezi odbiju najveći deo svetlosti u jednom glavnom pravcu. Npr. rešetka R.W.Wooda ima koeficijent refleksije 80% i usmerava 80% reflektovane zelene svetlosti u prvi spektralni red, tako da više od 50% zelene svetlosti koja uđe u spektrograf biva usmerena u prvi spektralni red. Ovako visok faktor transparencije nije karakterističan za spektralne uređaje sa prizmom jer je povećan udeo gubitaka svetlosti usled refleksije i rasipanja na velikom broju graničnih površina kvarc-vazduh tj. staklo-vazduh, te se maksimalno 30% upadne svetlosti propusti kroz aparat.

Rasuta svetlost i lažne (fantomске) linije. Uredaji sa konkavnom rešetkom (originalom a ne replikom) rasipaju manje svetlosti nego uređaji sa prizmom, upravo zbog manjeg broja optičkih površina. Rešetka od speculum-legure više rasipa od aluminijumske zbog svoje zrnaste površine. Ako se želi povećati moć refleksije takve jedne rešetke, ona se može prevući slojem aluminijuma, čime je povećana svetlosna jačina uređaja ali nije smanjeno rasipanje svetlosti koje raste сразмерno porastu intenziteta spektra. Sve rešetke daju fantomske linije koje nose naziv Rowlandove i Lymanove. Rowlandove nastaju od periodične greške rada zavrtnja koji translira dijamant za određeno rastojanje između zareza u procesu narezivanja rešetke. One su nepoželjne naročito ako su velikog intenziteta ali

su uglavnom manje neugodne od Lymanovih fantomskih linija koje nastaju usled nesavršenosti motora mašine za narezivanje. Ove linije su obično daleko od linija koje ih daju i imaju istu boju te se lako detektuju. Nalaze se obično na talasnim dužinama $\frac{\lambda}{a}, \frac{2\lambda}{a}, \dots, \frac{n\lambda}{a}$ gde je a ceo broj. Rešetka koja daje Lymanove fantomske linije intenziteta većeg od 0.01% od intenziteta linija koje ih daju nije pogodna za rad. Rowlandove fantomske linije se detektuju na osnovu činjenice da sa obe strane svake intenzivne linije ima simetrično raspoređenih jedan ili više parova fantomskih satelita istog intenziteta. Dobre rešetke daju fantomske satelite intenziteta manjeg od 0.1% intenziteta linije od koje potiču.

Astigmatizam. Sočivo (ukoliko nije anastigmatično) daje pravilan lik predmeta samo kada se sočivo i predmet nalaze u neposrednoj blizini optičke ose, te astigmatizam raste ukoliko se zrak svetlosti udaljava od optičke ose. Tada se zraci sakupljaju u fokusu prvo po jednoj ravni na određenoj udaljenosti od sočiva, a nakon toga po drugoj ravni (normalnoj na prvu) koja se nalazi na većoj distanci od sočiva. Astigmatizam se svodi na najmanju meru pomoću kamernog sočiva jer se zraci koji prođu kroz njega nezнатно udaljuju od optičke ose. Spektralne linije dobivene običnom konkavnom rešetkom predstavljaju astigmatične slike razreza. Svaka osvetljena tačka na razrezu u spektru izgleda kao vertikalna linija, a ne kao tačka; čistoća spektra se ne menja sve dok je razrez strog paralelan sa narezima rešetke. Ako razrez nije iskrivljen, to nisu ni njegove astigmatične slike. Astigmatizam smanjuje svetlosnu jačinu, naročito pri velikim upadnim i velikim izlaznim uglovima, jer je tada astigmatični lik razreza duži od samog razreza, te kod viših spektralnih redova rešetke i pri upotrebi kratkog razreza astigmatizam izaziva smanjenje intenziteta i do 20 puta. Najveći nedostatak astigmatizma je što spektralne linije imaju ravnomernu sjajnost po celoj svojoj dužini, te kao takve prekrivaju neravnomernosti osvetljenja duž razreza koje daju važne podatke o izvoru svetlosti.

Uticaj širine upotrebljenog razreza. Neka je razrez osvetljen svetlošću iz izvora koji emitiše dve monohromatske spektralne linije istog intenziteta i dovoljne razlike talasnih dužina $d\lambda$ da bi se pomoću spektralnog sistema moglo razdvojiti po Rayleighovom kriterijumu. Neka je razrez toliko uzak, da mu je optička slika u ravni spektra dvadeseti deo od širine njegove posmatrane difrakcione slike. U spektru će se videti dve difrakcione slike, jedna pored druge, koje odgovaraju dvema spektralnim linijama (vidi sliku 4). Posmatrajmo samo jednu difrakcionu sliku i analizirajmo kako na nju utiče povećanje širine razreza. Ako se razrez simetrično otvori do širine tri puta veće od prethodne, onda će njegova optička slika biti $\frac{3}{20}$ -ti deo širine prvobitne difrakcione slike. Ako se razrez osvetljava nekoherenntim zračenjem (nema određenih i kontinualnih faznih odnosa između zračenja koje dolazi sa različitih delova razreza) efekat će biti isti kao da smo sa obe strane prvobitnog razreza postavili mnoštvo razreza iste širine. Svaki od novih razreza daje svoju difrakcionu sliku, pomerenu levo ili desno od prvobitne slike za $\frac{1}{20}$ -ti deo rastojanja između minimuma. Nova raspodela intenziteta nastaje sumiranjem tri krive raspodele, te se dobija da povećanje širine razreza za 3 puta dovodi do povećanja intenziteta centralnog maksimuma takođe približno tri puta bez širenja krive raspodele intenziteta, tj. nema uticaja na rastojanje između traka neophodnog za razlaganje.

Dalnjim širenjem razreza raste intenzitet centralnog maksimuma ali manjom brzinom, te za dovoljno širok razrez koji daje optičku sliku veličine oko pola širine prvobitne difrakcione slike (kada se ista meri između dva minimuma sa obe strane centralnog maksimuma) intenzitet centralnog maksimuma prestaje da raste. Daljnje širenje prouzrokuje rast efektivne širine difrakcione slike, a time i porast razlike talasnih dužina $d\lambda$ neophodne za razdvajanje dve bliske spektralne linije. Slika 5 Ref. [65] daje promenu intenziteta I centralnog difrakcionog maksimuma i polointenzitetske širine linije L sa promenom širine razreza (faktor β).

Krive su date za slučajeve kada je razrez osvetljen koherentnim (indeks c) i nekoherentnim (indeks nc) zračenjem, a krive za realne slučajeve ležaće između krivih ova dva slučaja. Faktor β dat je izrazom:

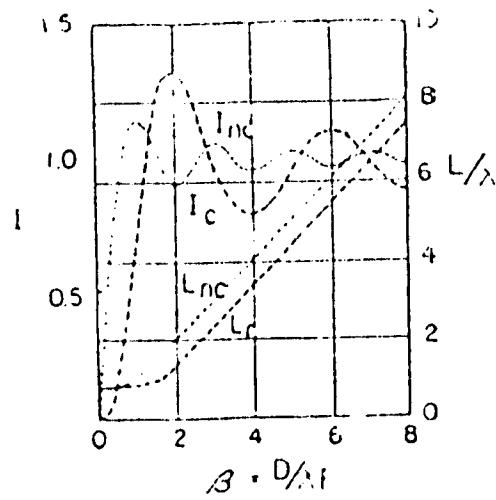
$$\beta = \frac{D}{\lambda \cdot f} \quad (251)$$

gde je D -širina razreza, λ -talasna dužina, f -aperturni odnos kolimatorskog sočiva. Kritična širina razreza se računa iz obrazca:

$$D_{kr} = \beta \cdot \lambda \cdot f \quad (252)$$

gde je λ -talasna dužina, f -numerička apertura sistema, koja se dobija deljenjem žižne daljine kolimatorskog sočiva sa njegovim prečnikom, β -faktor čija vrednost najčešće leži između 1 i 2, gde je $\beta \approx 2$ za koherentno a $\beta \approx 1$ za nekoherentno zračenje. Pošto se radi u širokoj spektralnoj oblasti i zračenje predstavlja smešu koherentnog i nekoherentnog zračenja, mora se približno izračunati D_{kr} i uzeti razrez nešto uži od ovog, te ga postepeno širiti uz posmatranje osvetljenja na belom zaklonu. Kada je $D = D_{kr}$ sjajnost naglo raste i posle toga raste vrlo sporo. Za dobijanje maksimalne moći razlaganja, prvo se nalazi širina razreza D za koju je optička slika od $\frac{1}{4}$ do $\frac{1}{2}$ širine difrakcione trake. Sa teorijskog aspekta ova širina je kompromisno rešenje između maksimalnog intenziteta linije i najboljeg mogućeg razlaganja. Nakon ovog se polako menja D dok se ne dobiju najbolji rezultati.

Uticaj osvetljavanja. Da bi optički sistem imao teorijsku moć razlaganja, neophodno je da su disperzionalni elementi potpuno ispunjeni svetlošću, sem onih delova koji moraju biti maskirani zbog optičkih defekata. Za tačna spektrofotometrijska merenja i kvantitativnu emisionu analizu neophodno je da razrez čitavom svojom dužinom bude ravnomerno osvetljen. Pri osvetljavanju spektralnih uređaja treba voditi računa o koherentnom i nekoherentnom zračenju. U koherentnom zračenju postoji određeni fazni odnos između zračenja u raznim položajima preseka svetlosnog snopa, dok su u nekoherentnom zračenju ovi odnosi proizvoljni. Razrez je ispunjen približno koherentnim zračenjem samo ako prima zračenje od izvora na malom rastojanju, jer tada svaki deo razreza dobija svetlost od svakog emitera iz izvora. Razrez je ispunjen približno nekoherentnim zračenjem



slika 5

kada se na njega preslikava slika izvora, jer tada svaka tačka razreza prima svetlost iz jedne jedine tačke izvora. Praktično osvetljenje nije nikada u potpunosti koherentno tj. nekoherentno, ali je moguće doći vrlo približno ovim slučajevima. Osvetljavanje apertura i površina približno koherentnim zračenjem neminovno dovodi do interferencionalih pojava, dok to nije slučaj sa nekoherentnim zračenjem. Za izračunavanje teorijske moći razlaganja disperzionih elemenata, neophodno je predpostaviti da su oni duž cele svoje disperzionale površine osvetljeni koherentnim zračenjem. Ova predpostavka je opravdana jedino za osvetljavanje disperzionog elementa zračenjem iz tačkastog izvora ili beskonačno uskog razreza, ali on ima uvek konačnu širinu. Kada je osvetljavanje razreza nekoherentno, osvetljavanje disperzionog elementa biće skoro koherentno ako se optički putevi od dve ivice razreza do disperzionog elementa ne razlikuju više od $\frac{1}{4}$ talasne dužine upotrebljenog zračenja. Kada je osvetljavanje razreza koherentno, disperzionalni element biće takođe koherentno osvetljen ako je gore pomenuta razlika optičkih puteva oko $\frac{\lambda}{2}$. Zato koherentno osvetljen razrez može biti približno dva puta širi od nekoherentno osvetljenog, pri jednakoj maksimalnoj moći razlaganja disperzionog elementa osvetljenog razrezom. Ravnomerno osvetljavanje razreza se izvodi trima metodama [68]:

- 1° Mali izvor, bez kondenzorskog sočiva se postavi na većem rastojanju od razreza (izvor od 0.5cm na 25cm od razreza). U ovom rasporedu svaka tačka izvora osvetljava sve tačke razreza, pri čemu ima neznatnih promena u intenzitetu koje potiču od promene ugla pod kojim različiti zraci izlaze iz izvora, ili usled razlike u dužini puta za različite zrake. Međutim ovaj metod ne daje maksimalnu moć razlaganja ako razrez nije dovoljno uzan da ispunji kolimatorsku cev difraktovanom svetlošću.
- 2° Upotrebom kondenzorskog sočiva neposredno ispred razreza, svetlost iz izvora obasjava u potpunosti sočivo, a time i razrez. Izvor od kondenzora stoji na rastojanju koje daje njegovu sliku na kolimatorskom sočivu. Ovako osvetljavanje nije sasvim ravnomerno zbog toga što optički putevi i uglovi nagiba za različite zrake nisu isti u različitim tačkama sočiva, ali se ovaj efekat potpuno eliminiše pri sumarnom osvetljavanju iz svih delova izvora.
- 3° Ovaj metod koristi cilindrično kondenzorsko sočivo čija je osa paralelna razrezu. Pri tome se zraci iz izvora u horizontalnoj ravni fokusiraju na razrez a u vertikalnoj ravni prolaze kroz sočivo skoro neskrenuti. Za dovoljno veliki prečnik cilindričnog sočiva, širina kolimatora biva ispunjena zračenjem i time je postignuto optimalno razlaganje. Metoda G. Hansena sa dva cilindrična sočiva omogućava ravnomerno osvetljavanje razreza i ispunjenje kolimatora svetlošću. Pri tome su dva cilindrična sočiva zaokrenuta duž ose za 90° tako da jedno fokusira u horizontalnoj a drugo u vertikalnoj ravni.

2 Rasprostranjenost plazmenog stanja i parametri gasne plazme

Rasprostranjenost plazmenog stanja

Procenjuje se, da se celokupna materija vasiione, u velikoj meri nalazi u plazmenom stanju, kao stelarna plazma i interstelarni gas. Sami fizički uslovi u zvezdama i međuzvezdanom gasu su veoma složeni i različiti.

Međuzvezdani gas se odlikuje veoma malom gustinom reda do jedne čestice po cm^3 i sa srazmerno niskom temperaturom ($T_e \in (0, 10^4)K$ $r_{De} \in (0.8, 80)m$). Otuda je logično očekivati da spektralne linije emitovane iz ovih oblasti imaju relativno dosta malo širenje usled pritiska i slab uticaj Dopplerovog efekta. Ponašanje međuzvezdanog gasa je bitno uslovljeno prisustvom jakih magnetnih polja.

Stelarna plazma se odlikuje velikom gustom ($n_e > 10^{28} \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$), kao posledicom dejstva snažnih gravitacionih polja i visokom temperaturom u unutrašnjosti zvezde; temperatura može dostići vrednosti od nekoliko desetina do nekoliko stotina miliona stepeni Kelvina. Zato je prirodno iz stelarne plazme očekivati prisustvo svih izloženih efekata širenja sa dominantnim Dopplerovim i Starkovim širenjem.

Sunčeva korona se odlikuje elektronskim koncentracijama $n_e \in (10^{11}, 10^{15}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, elektronskom temperaturom $T_e \in (10^5, 10^6) K$ i elektronskim Debyevim radiusom $r_{De} \in (10^{-2}, 1)m$.

Interplanetarni prostor se odlikuje elektronskim koncentracijama $n_e \in (10^7, 10^{11}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, elektronskom temperaturom $T_e \in (10^3, 10^5) K$ i elektronskim Debyevim radiusom $r_{De} \in (0.9, 50)m$.

Sama okolina Zemlje takođe je okarakterisana oblastima ispunjenim plazmom. To je prevashodno jonasfera, nastala fotoionizacijom razređenih gasova gornje atmosfere ultravioletnim zračenjem sa Sunca. U jonasferi postoji nekoliko Heavysideovih slojeva različitog sastava i stepena ionizacije, koji nisu u fiksnom uzajamnom položaju, čiji broj i međusobna udaljenost varira tokom dana u ritmu promena intenziteta ultravioletnog zračenja pri rotaciji Zemlje. Jonasfera se odlikuje elektronskim koncentracijama $n_e \in (10^{10}, 10^{14}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, elektronskom temperaturom $T_e \in (10^2, 10^3)K$ i elektronskim Debyevim radiusom $r_{De} \in (10^{-3}, 10^{-1})m$. Na većim udaljenostima od Zemlje, nalaze se Van Allenovi radijacioni slojevi Zemlje, sastavljeni od nanelektrisanih čestica kosmičkog porekla trapirovanih nehomogenim magnetskim poljem Zemlje. Logično je iz ovih oblasti očekivati spektralne linije dominantno proširenenih Starkovim efektom. Van Allenovi radijacioni pojasevi Zemlje i jonasfera su veoma značajni po pitanju kosmičkih letova i poboljšanja radiokomunikacija.

Laboratorijske plazme se odlikuju mogućnošću menjanja i kontrolisanja njenih parametara. Ubrzani razvoj fizike plazme je otpočeo pokušajima izvođenja termonuklearnih reakcija, sličnih stelarnim, na kontrolisan način u visokotemperaturnoj laboratorijskoj gasnoj plazmi. Po današnjim verovanjima isplativost nuklearne fuzije u D-D reakciji je moguća samo podizanjem temperature deuterijuma na desetak miliona stepeni Kelvina, čime bi srednja energija termalnog kretanja deuterona bila dovoljna za savladavanje Coulombovske barijere, i to od strane deuterona iz visokoenergetskog „repa” Maxwellove raspodele. Ovde se direktno nameće problem materijala i konfiniranja deuterijumske plazme. Problem materijala je nerešiv, ali se iznalazi, teorijski moguć, način održa-

vanja plazme pomoću podobne geometrije magnetnog polja koje bi primoravalo svaku nanelektrisanu komponentu plazme da se kreće unutar neke zatvorene oblasti, bez obzira na njihove početne uslove kretanja. Ceni se na osnovu Lawsonovog kriterijuma, da bi konfiranje od $1s$ bilo dovoljno za energetsku isplativost termouklearne sinteze. U laboratorijskim uslovima, dobijanje gasne plazme se svodi na obezbeđivanje kolektivnih fenomena zasnovanih na Coulombovim silama sa srednjom energijom po čestici reda 10eV . Najupadljivija karakteristika gasne plazme je nalazeње jednog dela njenih komponenti u ionizovanom stanju i osnovna razlika između neutralnog gasa i gasne plazme je što u drugom slučaju postoji znatno elektromagnetsko mikroskopsko polje. Ovo polje je određeno položajima i brzinama svih komponenti plazme te ono veoma brzo fluktuiraju u vremenu i prostoru. Kolektivna interakcija se upravo i ogleda u činjenici da svaka pojedinačna komponenta istovremeno interaguje Coulombovom silom sa svim ostalim komponentama. U laboratorijskim uslovima plazmeno stanje je moguće dobiti na više načina [69]:

- U plamenu : $n_e \in (10^{14}, 10^{16}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, T_e oko 10^3K , $r_{De} \in (10^{-4}, 10^{-3})\text{m}$
- Slabostrujnim pražnjenjem : $n_e \in (10^{15}, 10^{19}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^3, 10^4)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-5}, 10^{-3})\text{m}$
- Jakostrujnim pražnjenjem : $n_e \in (10^{18}, 10^{22}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^4, 10^5)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-6}, 10^{-4})\text{m}$
- Termojouska konverzija : $n_e \in (10^{18}, 10^{22}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^2, 10^3)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-7}, 10^{-5})\text{m}$
- U udarnim cevima : $n_e \in (10^{22}, 10^{26}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^4, 10^5)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-8}, 10^{-6})\text{m}$
- U poluprovodnicima : $n_e \in (10^{23}, 10^{27}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^2, 10^3)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-10}, 10^{-8})\text{m}$
- U metalima : $n_e \in (10^{28}, 10^{29}) \frac{\text{el.}}{\text{m}^3}$, $T_e \in (10^2, 10^3)\text{K}$, $r_{De} \in (10^{-11}, 10^{-10})\text{m}$

Ovi parametri su procenjeni upravo na osnovu širine i oblika spektralnih linija koje se zrače iz odgovarajućih plazmenih oblasti, koje se međusobno bitno razlikuju po stepenu ionizovanosti.

Aproksimativna konvolucija i dekonvolucija observiranih profila spektralnih linija

Već je istaknuto da profil spektralne linije dobijen pomoću spektralnih aparata nije pravi profil. Spektralna linija infinitezimalne širine se proširuje usled difrakcije na razrezima spektralnog aparata i mnogih grešaka i nesavršenosti optičkog sistema. Ovakav profil, proširen interakcijom sa spektralnim uređajem, nosi naziv aparativni profil, i mora se odrediti eksperimentalno. U tu svrhu, profil ekstremno uske linije se skenira fotoelektrično ili meri fotografски. Za ovu liniju bi trebalo da su zanemarivi uticaji Dopplerovog efekta i širenja usled pritiska. Linije emitovane iz Geisslerove cevi pri pražnjenju gasa na niskom pritisku pri malim strujama, ili emitovane iz šuplje katode, a naročito laserske

linije su pogodne za tu svrhu. U opštem slučaju, stvarni profil linije $\mathbf{P}_{real}(\omega)$ može se dobiti iz [70]:

$$\mathbf{P}_{real}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{P}_{inst}(\omega - \omega') \cdot \mathbf{P}_{obs}(\omega') d\omega' = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{P}_{inst}(\omega') \cdot \mathbf{P}_{obs}(\omega - \omega') d\omega' \quad (253)$$

gde su $\mathbf{P}_{inst}(\omega)$ instrumentalni profil i koji je najčešće Gaussovog tipa, $\mathbf{P}_{obs}(\omega)$ profil koji se zapravo observira. Taj profil zavisi od vrste plazme i fizičkih uslova u kojima se plazmene komponente nalaze. Dogovorno se uzima da sve tri funkcije zadovoljavaju normu 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{P}_{real}(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{P}_{inst}(\omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{P}_{obs}(\omega) d\omega = 1 \quad (254)$$

Za rešavanje integralne jednačine (253) koriste se sledeći matematički metodi:

- 1) Aproximacija sa Neumannovim razvojem [71]
- 2) Proba - greška [72]
- 3) Fourierov transform

Od navedenih metoda, metod Fourierovog transforma je najjednostavniji i zasniva se na teoremi da se konvolucija dve funkcije f_1 i f_2 :

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(s) \cdot f_2(x - s) ds \quad (255)$$

može prikazati kao proizvod $\varphi = \varphi_1 \cdot \varphi_2$ gde su

$$\varphi(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \cdot \exp\{i\xi x\} dx \quad (256)$$

$$\varphi_j(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f_j(x) \cdot \exp\{i\xi x\} dx \quad j = 1, 2 \quad (257)$$

Fourierovi transformi odgovarajućih funkcija. Uvek se jedna od funkcija f, f_1, f_2 meri eksperimentom, druga se predpostavlja a treća na osnovu te predpostavke pronalazi, čime se dobija traženi nepoznati profil linije.

Glavni cilj je dobijanje $\mathbf{P}_{obs}(\omega)$ koji nosi važne podatke o fizičkim uslovima pod kojima se odvija emisija elektromagnetskog zračenja iz plazme. To se čini eliminacijom uticaja instrumentalnog širenja iz realno merenog profila upoređivanjem eksperimentalnog instrumentalnog profila linije nastale zračenjem izvora sa šupljom katodom ili izvora na niskom pritisku (Geisslerova cev) sa teorijskim Gaussovim profilom. Talasna dužina ove linije mora biti približno jednaka talasnoj dužini observirane linije. Upoređivanje se vrši tako što se parametri Gaussovog profila (intenzitet i poluširina) menjaju u širokom opsegu sve dok se površine eksperimentalnog instrumentalnog profila i Gaussovog profila ne izjednače. Zadati parametar poluširine za taj slučaj (uz poklapanje maksimalnog intenziteta) je ujedno i poluširina eksperimentalnog instrumentalnog profila. Kad god je moguće, treba za referentne linije koristiti laserske linije.

Iako se kod svakog emitera može govoriti o Dopplerovom pomaku učestanosti zračenja koje on emituje, sumarni efekat, kao što je pokazano, predstavlja superpoziciju pojedinačnih pomaka, tj. dovešće do Dopplerovog širenja profila spektralne linije.

Analogno važi i za Starkov efekat gde je zračenje pojedinačnih emitera sačinjeno od linija, pomerenih i rascepljenih na komponente dejstvom fluktuirajućeg mikroskopskog polja u plazmi, biva superponirano, pa se sumarni efekat ispoljava kao Starkovo širenje profila spektralne linije. Bitno je naglasiti da su oba efekta aktuelni i da istovremeno deluju, što se matematički izražava kao konvolucija Gaussovog profila i Starkovog profila.

Zato kad god ideo Gaussovog profila u rezultujućem proširenom plazmenom profilu nije zanemariv, neophodno je koristiti proceduru dekonvolucije da bi se odredila Starkova širina. Kada je dominantni mehanizam širenja linije u plazmi elektronski udar, tj. kada se doprinos jona profilu linije može zanemariti, rezultujući profil $\mathbf{P}_{obs}(\omega)$ je Voigtov i predstavlja konvoluciju Gaussovog profila i Starkovog profila Lorentzovog tipa.

Dekonvolucija Lorentzovog profila od Gaussovog je dobro poznat i razrađen metod u mnogim publikacijama. Ovaj metod se zasniva na gore opisanom metodu Fourierovog transforma, i čija je suština u tome da se simetrični profili f, f_1, f_2 mogu analitički aproksimirati pomoću Voigtovih funkcija.

Za Voigtove funkcije [66] postoji teorema da je konvolucija dve Voigtove funkcije takođe Voigtova funkcija. Ako je β_L koeficijent koji govori o učešću disperzionog profila u posmatranom profilu, a β_G koeficijent Gaussovog profila, tada dobijamo parametre za svaki od profila:

$$\mathbf{P}_{real}(\omega) : \beta_L^r \quad \beta_G^r \quad (258)$$

$$\mathbf{P}_{inst}(\omega) : \beta_L^{inst} \quad \beta_G^{inst} \quad (259)$$

$$\mathbf{P}_{obs}(\omega) : \beta_L^{obs} \quad \beta_G^{obs} \quad (260)$$

i među ovim parametrima postoje veze:

$$\beta_L^r = \beta_L^{obs} + \beta_L^{inst} \quad (261)$$

$$(\beta_G^r)^2 = (\beta_G^{obs})^2 + (\beta_G^{inst})^2 \quad (262)$$

U slučaju da se observirani profil $\mathbf{P}_{obs}(\omega)$ i instrumentalni profil $\mathbf{P}_{inst}(\omega)$ mogu aproksimirati Voigtovim profilima (sa parametrima (259) i (260)), moguće je dobiti parametre (258) koji su takođe parametri Voigtove funkcije na osnovu navedene teoreme [66] i ta funkcija predstavlja stvaran profil $\mathbf{P}_{real}(\omega)$.

Međutim u slučaju plazme „nevodoničnih” atoma, uticaj jonskog širenja nije zanemariv, te su Starkovi profili opisani asimetričnom $j_{A,R}(x)$ funkcijom datom sa (236). Uprkos asimetriji profila linije, mnogi autori su koristili standardne postupke dekonvolucije simetričnih Voigtovih profila [15] za određivanje Starkovih širina iz eksperimentalnih profila i na ovaj način činili sistematsku grešku. Ovdje se neće razmatrati funkcija $j_{A,R}(x)$ jer je to učinjeno u poglavlju širenja usled jonskog uticaja u kvazistatičkoj aproksimaciji, već će biti opisana numerička procedura i rezultati. Korišćenjem izraza (255), za raspodelu intenziteta u spektralnoj liniji koja nastaje kao superpozicija dve nezavisne raspodele $j_{A,R}(x)$ i $G(x)$, dobijamo konvolucioni integral:

$$\mathbf{P}_{obs}(\omega) = K(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} j_{A,R}(s) \cdot G(x-s) ds \quad (263)$$

gde je $G(x)$ normirani Gaussov profil

$$G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \cdot \sigma^2}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (264)$$

Ovde je σ -disperzija profila koja je u vezi sa punom poluširinom profila $\sigma_{1/2}$ preko relacije

$$\sigma_{1/2} = 2\sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma \quad (265)$$

Usled komplikovane forme funkcije $j_{A,R}(x)$, nemoguće je konvoluciju (263) predstaviti analitički, te je neophodno primeniti aproksimativni metod. U tu svrhu su korišćeni prirodni kubni splajnovi za interpolaciju $j_{A,R}(x)$ koju je WOLTZ [73] tabelirao u intervalu $-20 \leq x \leq +20$, a tablične vrednosti x su uzete za čvorove interpolacije x_i , $i = 1[1]51$. Splajnovi su oblika [74]:

$$S_{A,R}^{(i)}(x) = a_i \cdot x^3 + b_i \cdot x^2 + c_i \cdot x + d_i \quad \text{za } x_i \leq x \leq x_{i+1} \quad (266)$$

Čak šta više, granice integracije konvolucionog integrala su odsečene, te umesto $(-\infty, \infty)$ integracioni interval je $[-20, +20]$. Ovo odsecanje je dozvoljeno jer je puna širina profila $j_{A,R}(x)$ manja od 2.85 a granica integracije je sedam poluširina udaljena od centra profila, gde je intenzitet krila profila takoreći nula. Zato se aproksimativno može uzeti:

$$K(x) \approx \sum_{i=1}^{50} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(x-s-m)^2}{2\sigma^2}\right\} \cdot S_{A,R}^{(i)}(s) ds \quad (267)$$

gde je $x_1 = -20$, $x_{51} = +20$, a m vrednost x za koju $j_{A,R}(x)$ ima maksimum. Za svaku kombinaciju parametara A i R iz Woltzovih tabela [73], izračunata je $K(x)$ za $\sigma = 0.2[0.2]3$ na personalnom računaru. Posle svakog izračunavanja $K(x)$, određivan je odnos $\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$ i formirani su koeficijenti K_j i K_G :

$$K_j = \frac{\delta_{1/2}}{\Delta x_{1/2}} \quad K_G = \frac{\sigma_{1/2}}{\Delta x_{1/2}} \quad (268)$$

$\Delta x_{1/2}$ i $\Delta x_{1/10}$ su širine $K(x)$ na 1/10 i 1/2 maksimalnog intenziteta respektivno, dok je $\delta_{1/2}$ poluširina korespondentnog $j_{A,R}(x)$ profila (Starkova poluširina). Rezultati ovih izračunavanja za R u opsegu od 0 do 0.8 su dati u sledećim tabelama:

tabela 1 $R = 0.0$

$R = 0.0$																	
$A = 0.05$			$A = 0.1$			$A = 0.2$			$A = 0.3$			$A = 0.4$			$A = 0.5$		
$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G															
2.028	.292	.830	2.035	.309	.819	2.072	.345	.793	2.135	.386	.766	2.082	.430	.738	2.245	.467	.708
2.060	.339	.801	2.067	.356	.788	2.143	.396	.760	2.205	.441	.728	2.207	.430	.738	2.319	.526	.664
2.115	.402	.760	2.145	.421	.745	2.233	.465	.713	2.300	.513	.679	2.282	.488	.697	2.449	.598	.605
2.243	.492	.698	2.293	.510	.676	2.351	.560	.644	2.362	.557	.645	2.376	.561	.641	2.505	.610	.566
2.321	.549	.649	2.373	.574	.635	2.446	.618	.593	2.443	.608	.603	2.443	.607	.607	2.589	.694	.526
2.430	.628	.594	2.472	.649	.574	2.567	.694	.532	2.523	.667	.551	2.515	.659	.564	2.656	.746	.471
2.538	.701	.531	2.587	.721	.511	2.671	.761	.467	2.635	.738	.488	2.606	.715	.513	2.750	.805	.407
2.607	.743	.492	2.650	.762	.472	2.720	.795	.427	2.730	.800	.423	2.698	.783	.447	2.813	.853	.345
2.684	.789	.448	2.719	.804	.427	2.779	.833	.383	2.780	.831	.385	2.780	.836	.382	2.858	.880	.311
2.748	.833	.394	2.804	.852	.377	2.838	.869	.333	2.835	.862	.342	2.820	.860	.344	2.883	.899	.273
2.825	.880	.333	2.863	.891	.315	2.896	.904	.277	2.876	.893	.295	2.914	.916	.262	2.927	.923	.233
2.881	.918	.261	2.936	.932	.247	2.954	.938	.216	2.933	.926	.245	2.951	.916	.216	2.953	.941	.190
2.956	.966	.183	2.983	.967	.171	3.002	.966	.148	2.975	.953	.189	2.998	.967	.166	3.058	.968	.098
3.005	1	0	3.040	1	0	3.040	1	0	3.040	1	0	3.040	1	0	3.040	1	0
1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1

tabela 2 $R = 0.2$

R=0.2																	
A=0.05			A=0.1			A=0.2			A=0.3			A=0.4			A=0.5		
$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G															
2.015	.292	.831	2.025	.306	.819	2.060	.334	.797	2.114	.364	.773	2.170	.396	.750	2.257	.425	.726
2.057	.338	.802	2.073	.355	.790	2.131	.384	.764	2.187	.418	.739	2.260	.451	.712	2.335	.481	.686
2.127	.401	.761	2.155	.419	.747	2.213	.452	.718	2.293	.487	.689	2.370	.525	.661	2.451	.554	.632
2.245	.487	.694	2.285	.511	.683	2.268	.494	.688	2.361	.531	.658	2.431	.567	.626	2.524	.598	.596
2.331	.550	.652	2.370	.572	.637	2.351	.545	.650	2.430	.582	.618	2.523	.623	.590	2.595	.650	.556
2.426	.627	.595	2.475	.642	.572	2.450	.607	.603	2.530	.642	.568	2.620	.680	.537	2.689	.707	.503
2.539	.700	.532	2.592	.719	.513	2.570	.681	.541	2.619	.714	.505	2.713	.742	.479	2.778	.768	.438
2.606	.741	.492	2.646	.756	.471	2.679	.750	.477	2.762	.778	.441	2.817	.805	.407	2.868	.823	.375
2.676	.785	.447	2.721	.802	.428	2.726	.782	.435	2.813	.813	.403	2.858	.833	.368	2.913	.851	.339
2.751	.832	.395	2.796	.846	.377	2.818	.826	.394	2.870	.848	.360	2.920	.866	.328	2.964	.880	.301
2.829	.879	.334	2.874	.890	.317	2.869	.865	.344	2.929	.883	.313	2.968	.890	.281	3.020	.906	.258
2.899	.923	.263	2.927	.930	.248	2.932	.903	.284	2.984	.916	.259	3.025	.923	.233	3.080	.931	.212
2.965	.962	.183	2.985	.965	.172	2.990	.937	.223	3.034	.945	.201	3.081	.948	.180	3.112	.952	.163
3.028	1	0	3.057	1	0	3.104	1	0	3.115	1	0	3.132	1	0	3.139	1	0
1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1

tabela 3 $R = 0.4$

R=0.4																	
A=0.05			A=0.1			A=0.2			A=0.3			A=0.4			A=0.5		
$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G															
2.029	.291	.831	2.045	.302	.821	2.081	.326	.800	2.127	.353	.780	2.165	.371	.755	2.245	.398	.740
2.071	.337	.802	2.085	.349	.790	2.136	.375	.769	2.197	.405	.746	2.271	.427	.724	2.330	.454	.702
2.133	.400	.761	2.157	.413	.749	2.220	.438	.718	2.294	.471	.694	2.360	.495	.671	2.431	.523	.651
2.250	.488	.697	2.223	.455	.721	2.275	.483	.692	2.356	.518	.667	2.438	.541	.642	2.507	.569	.617
2.322	.550	.655	2.285	.504	.685	2.353	.534	.656	2.436	.569	.629	2.517	.593	.602	2.578	.616	.572
2.426	.625	.596	2.369	.566	.640	2.439	.591	.608	2.514	.629	.580	2.635	.655	.555	2.694	.681	.527
2.537	.699	.532	2.471	.640	.579	2.576	.668	.547	2.655	.703	.518	2.726	.722	.480	2.795	.745	.461
2.606	.740	.493	2.592	.713	.516	2.679	.739	.484	2.760	.770	.454	2.823	.782	.424	2.897	.806	.399
2.676	.784	.448	2.654	.753	.477	2.744	.777	.446	2.824	.806	.415	2.884	.818	.388	2.945	.835	.362
2.752	.831	.396	2.718	.795	.431	2.797	.817	.402	2.886	.843	.373	2.947	.853	.347	3.000	.865	.322
2.832	.877	.334	2.795	.839	.360	2.878	.857	.351	2.934	.877	.333	2.992	.887	.300	3.043	.892	.276
2.922	.929	.266	2.868	.884	.320	2.945	.898	.294	3.010	.918	.270	3.064	.919	.249	3.100	.924	.229
2.973	.961	.183	2.939	.927	.252	3.005	.935	.230	3.048	.946	.209	3.110	.947	.193	3.115	.950	.160
3.024	1	0	3.063	1	0	3.120	1	0	3.159	1	0	3.189	1	0	3.214	1	0
1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1

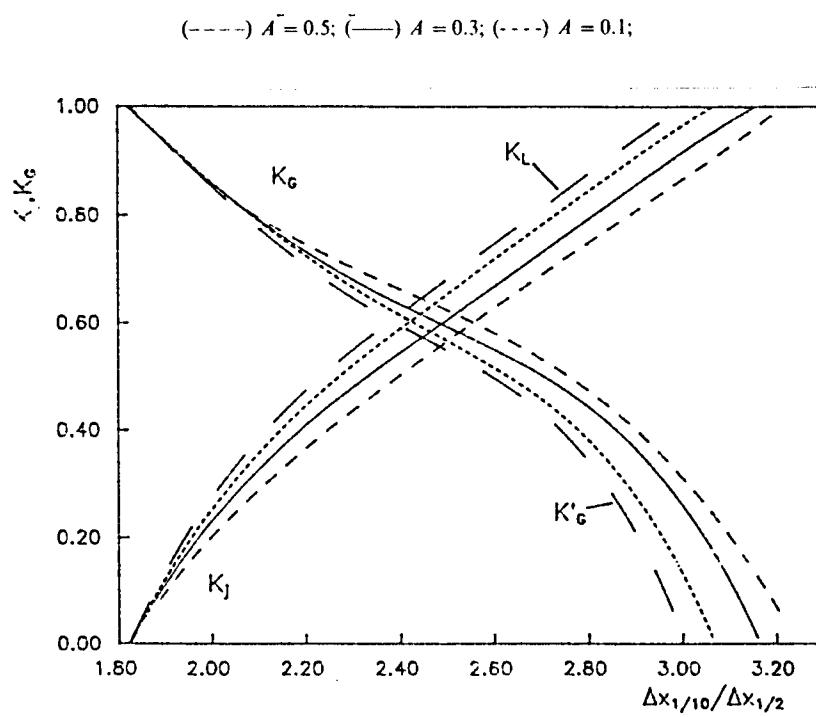
tabela 4 $R = 0.6$

R=0.6																	
A=0.05			A=0.1			A=0.2			A=0.3			A=0.4			A=0.5		
$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G															
2.030	.289	.832	2.044	.300	.822	2.077	.320	.804	2.123	.338	.786	2.192	.358	.768	2.246	.377	.751
2.069	.336	.803	2.082	.347	.792	2.137	.368	.772	2.196	.391	.758	2.249	.410	.733	2.330	.430	.715
2.115	.399	.762	2.141	.411	.750	2.205	.434	.727	2.285	.455	.706	2.357	.479	.685	2.434	.498	.662
2.175	.439	.734	2.208	.453	.722	2.276	.476	.698	2.335	.497	.675	2.422	.522	.654	2.491	.544	.633
2.237	.488	.699	2.270	.502	.687	2.340	.526	.661	2.410	.548	.637	2.495	.573	.615	2.575	.595	.594
2.324	.543	.655	2.362	.563	.642	2.442	.587	.615	2.526	.608	.590	2.610	.634	.567	2.669	.654	.544
2.426	.624	.596	2.474	.638	.582	2.568	.662	.555	2.640	.682	.529	2.723	.705	.504	2.795	.723	.481
2.537	.697	.533	2.592	.711	.519	2.676	.732	.491	2.746	.751	.466	2.835	.770	.441	2.892	.784	.417
2.606	.738	.494	2.654	.751	.479	2.740	.771	.452	2.812	.784	.425	2.889	.803	.402	2.950	.819	.381
2.678	.782	.449	2.722	.794													

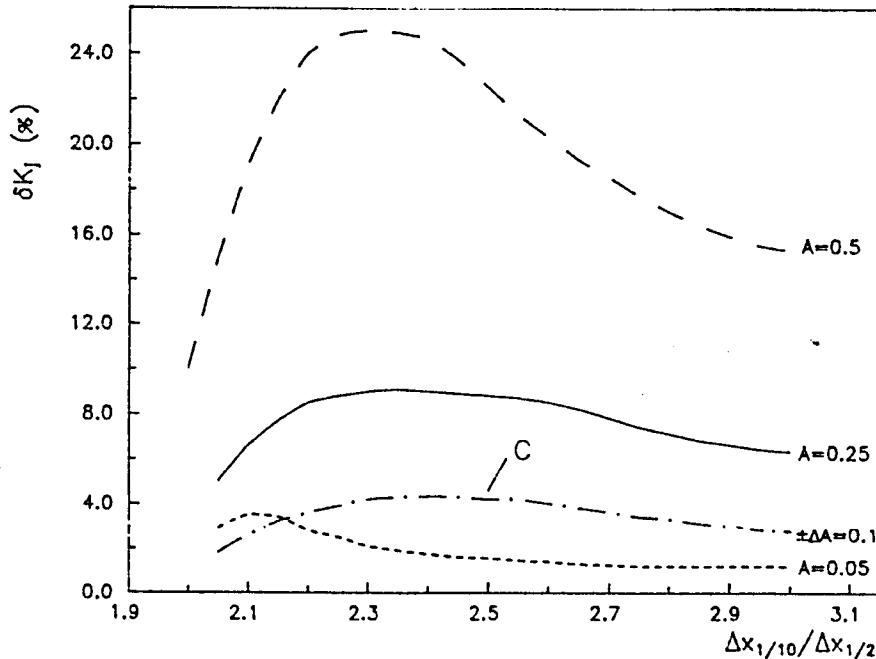
tabela 5 $R = 0.8$

R=0.8																							
$\Lambda=0.05$				$\Lambda=0.1$				$\Lambda=0.2$				$\Lambda=0.3$				$\Lambda=0.4$				$\Lambda=0.5$			
$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G	$\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$	K_j	K_G			
2.026	.269	.832	2.029	.297	.819	2.065	.315	.806	2.085	.329	.787	2.112	.345	.775	2.154	.360	.760	2.192	.375	.742	2.261	.412	.724
2.059	.335	.803	2.070	.344	.791	2.114	.364	.775	2.145	.380	.758	2.196	.396	.742	2.230	.461	.695	2.374	.481	.677	2.472	.524	.645
2.113	.398	.762	2.142	.409	.751	2.192	.430	.731	2.255	.450	.717	2.320	.464	.695	2.472	.524	.645	2.574	.553	.575	.607	.635	.559
2.157	.438	.735	2.188	.450	.723	2.247	.471	.701	2.318	.488	.680	2.385	.507	.663	2.472	.524	.645	2.574	.553	.575	.607	.635	.559
2.211	.488	.701	2.265	.500	.689	2.322	.518	.661	2.413	.540	.646	2.484	.557	.625	2.553	.575	.607	2.665	.635	.559	2.779	.706	.497
2.316	.548	.656	2.359	.560	.643	2.410	.582	.610	2.518	.600	.598	2.599	.617	.577	2.665	.635	.559	2.779	.706	.497	2.889	.770	.434
2.426	.624	.596	2.461	.634	.582	2.562	.657	.559	2.630	.672	.536	2.719	.691	.517	2.779	.706	.497	2.950	.805	.396	2.900	.933	.197
2.537	.697	.533	2.585	.708	.520	2.679	.728	.496	2.750	.743	.474	2.831	.757	.453	2.889	.770	.434	2.950	.805	.396	2.900	.933	.197
2.604	.737	.494	2.652	.748	.481	2.737	.768	.458	2.814	.780	.435	2.901	.798	.418	2.950	.805	.396	3.014	.810	.355	2.678	.782	.450
2.751	.829	.397	2.795	.838	.385	2.874	.852	.363	2.949	.859	.342	3.018	.868	.325	3.065	.869	.306	3.135	.906	.255	2.829	.877	.336
2.829	.877	.336	2.870	.884	.325	2.961	.901	.307	3.017	.899	.286	3.068	.904	.271	3.135	.906	.255	3.178	.933	.197	3.034	1	0
2.900	.922	.256	2.930	.920	.254	3.016	.934	.238	3.083	.936	.224	3.141	.938	.210	3.178	.933	.197	3.279	1	0	1.823	0	1
3.034	1	0	3.065	1	0	3.140	1	0	3.186	1	0	3.241	1	0	3.279	1	0	3.279	1	0	1.823	0	1
1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1	1.823	0	1

slika 6. Ilustracija zavisnosti koeficijenata K_j i K_G od odnosa $\Delta x_{1/10}/\Delta x_{1/2}$ na osnovu podataka iz tabele br. 3 za $R = 0.4$ i $0.05 \leq A \leq 0.5$. K_L i K'_G su koeficijenti dobijeni konvolucijom Gaussovog i Lorentzovog profila na osnovu Ref. [15].



slika 7 Procena greški za koeficijente K_j i K_G u funkciji od odnosa $\Delta x_{1/10}/\Delta x_{1/2}$. Krive (osim C) ilustruju greške dobijene primenom dekonvolucione procedure za Voigtovе profile na asimetrične profile koji se dobijaju kao konvolucije Gaussovinih i $j_{A,R}(x)$ profila. Prikazane su greške za vrednosti $A = 0.05; 0.25$ i 0.5 . Kriva C predstavlja grešku koju stvara neodređenost $\Delta A = \pm 0.1$ pri proceni vrednosti parametra A .

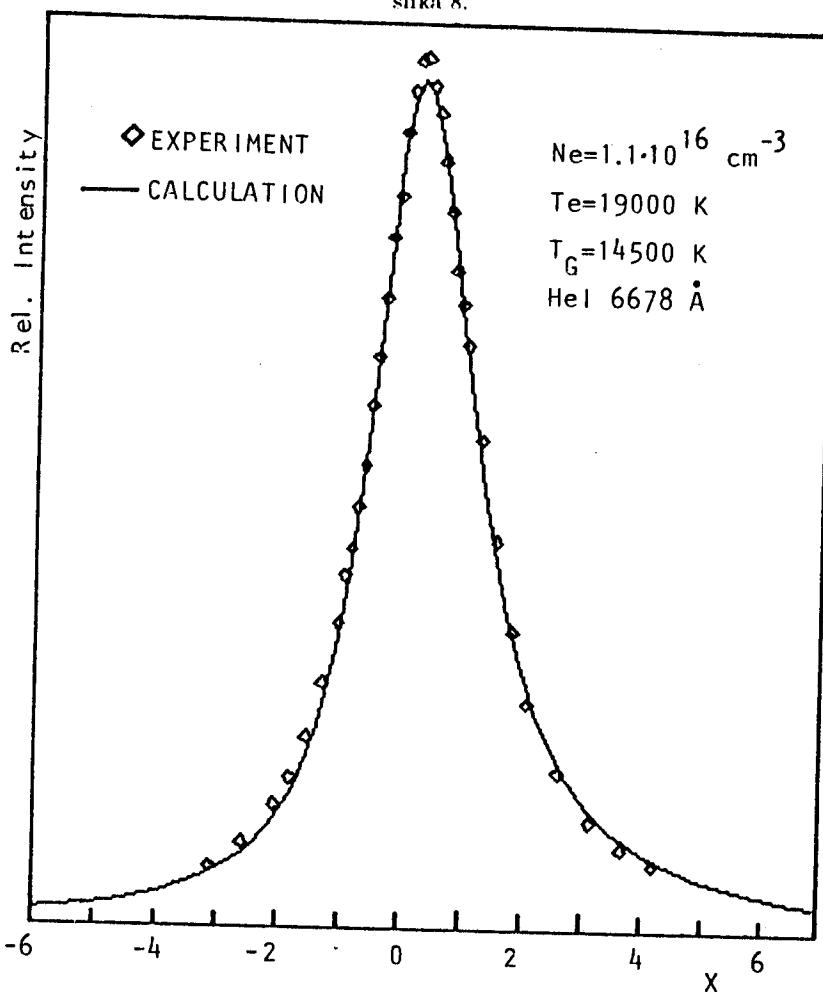


Za svaku vrednost parametra R koefficijenti K_j i K_G su izračunati za šest vrednosti parametra A od 0.05 do 0.5 . Jeden primer zavisnosti K_j i K_G od odnosa $\frac{\delta_{1/2}}{\Delta x_{1/2}}$ za $R = 0.4$ i $A = 0.1; 0.3; 0.5$ je dat na slici 6, zajedno sa odgovarajućim vrednostima K_L i K'_G za konvoluciju Gaussovog i Lorentzovog profila (Voigtov profil) uzetih iz tabele 1 Ref.[15]. Za određivanje K_j i K_G neophodno je meriti odnos širina eksperimentalnog profila na $1/10$ i $1/2$ maksimalnog intenziteta profila linije. Zatim sa grafika sličnom onom na slici 6 konstruisanog iz tabele 3 i nacrtanog za procenjene vrednosti parametara A i R eksperimentalne linije, moguće je odrediti K_j i K_G koji pomnoženi sa eksperimentalnim poluširinama daju Gaussovnu ($\sigma_{1/2}$) i Starkovu ($\delta_{1/2}$) širinu respektivno. Važno je uočiti da iako su procene za A i R grube, one omogućavaju tačno određivanje obe širine. Debyeov parametar ekraniranja R zavisi slabo od n_e i T_e što je dato relacijom (239) tako da greška od 20% za određivanje obe promenljive unosi grešku u procenu $\delta_{1/2}$ ne veću od $2 - 3\%$. Čak šta više, greška u određivanju A , datog izrazom (238) ne unosi veliku neodređenost u procenu $\delta_{1/2}$. Na primer ako se napravi greška od $\Delta A = \pm 0.1$ za $0.1 \leq A \leq 0.5$, greška u određivanju $\delta_{1/2}$ ne prelazi 4% (kriva C na slici 7). Međutim, ako se nepravilno upotrebni procedura dekonvolucije Voigtovog profila za asimetrični profil, nastaje velika sistematska greška koja raste sa A (krive za $A = 0.05; 0.25; 0.5$ na slici 7). Prema tome, za $A = 0.5$ nastaje sistematska greška od 25% za poluširinu. Za procenu parametra A može se koristiti formula data u [3] broj (224). Zapravo [3] daje izračunate vrednosti za A pri $n_e = 10^{16} cm^{-3}$ za veliki broj neutralnih atoma. Zavisnost A od elektronske koncentracije n_e je data sa [3]:

$$A_{n_e} = A; n_e^{1/4} \cdot 10^{-4} \quad (269)$$

Jednostavan metod za određivanje A opisan je u [75]. Slaganje navedenog aproksimativnog metoda dekonvolucije sa eksperimentalnim podacima [36] je dano na slici 8.

slika 8.



Na osnovu datih parametara plazme (n_e, T_e, T_G) neutralnog Helijuma ($\text{HeI } \lambda = 6678\text{\AA}$) određeni su parametri A i R . Na osnovu tih parametara, iz Woltzovih tabela [71] okarakterisani su čvorovi interpolacije x_i $i = 1[1]50$ u kojima je tabelirana $j_{A,R}(x)$ te po formuli (267) intervalno analitički dobijen konvolucioni profil $K(x)$. Slaganje sa eksperimentalnim profilom je vrlo dobro.

Z a k l j u č a k

Cilj ovog rada je iznalaženje aproksimativnog metoda za određivanje Starkovih parametara spektralnih linija neutralnih elemenata emitovanih iz gasne plazme. Za unapred zadate parametre Gaussovog profila σ i m kao i A i R za $j_{A,R}(x)$ profil, izvršena je aproksimativna konvolucija $G(x)$ i $j_{A,R}(x)$ profila, pri čemu su određivani odnosi $\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$ kod dobijene konvolucione funkcije $K(x)$. Dobijeni rezultati važe samo za neutralne emitere, i dati su u tabelarnoj formi. Dobijeni su koeficijenti K_j i K_G koji govore u kojoj meri profili $j_{A,R}(x)$ i $G(x)$ učestvuju u rezultujućem profilu $K(x)$. Prikazana je zavisnost tih koeficijenata od odnosa $\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$ u vidu grafika, koji omogućava dekonvoluciju eksperimentalno dobijenih profila korigovanih na instrumentalno širenje. Ispravnost aproksimativnog metoda je potvrđena na osnovu ponašanja odnosa $\frac{\Delta x_{1/10}}{\Delta x_{1/2}}$ konvolucionog integrala $K(x)$ u zavisnosti od parametra jonskog širenja A i parimetra R koji karakteriše Debyevo ekraniranje, kao i na osnovu slaganja za eksperimentalnim podacima uzetih, za neutralni helijum, iz Ref. [36].

L i t e r a t u r a

- [1] H. R. GRIEM, Phys. Rev. 128 (1962) 515.
- [2] H. R. GRIEM, Plasma Spectroscopy, McGraw Hill, New York (1964).
- [3] H. R. GRIEM, Spectral line Broadening by plasmas, Academic Press, New York (1974)
- [4] N. KONJEVIĆ, J. R. ROBERTS, J. Phys. Chem. Ref. Data, 5 (1976) 209.
- [5] WIENER, N. , Acta Math. 55 (1930) 117.
- [6] CHINTCHINE, A. , Math. Ann 109 (1934) 604.
- [7] DICKE, R. H. , Phys. Rev. 25 (1924) 299.
- [8] SOBEL'MAN, I. I. , Fortschr. Physik 5 (1957) 175.
- [9] GALATRY, L. , Phys. Rev. 122 (1961) 1218.
- [10] HUNGER, K. , Z. Astrophys. 39 (1956) 36.
- [11] MUGGLESTONE, D. and FINN, G. D. M. N. RAS London 129 (1964) 221.
- [12] HUMMER, D. G. , Mem. RAS 70 (1965) 1.
- [13] HARRIS III, D. L. , Astrophys. J. 108 (1948) 112.
- [14] ABRAMOWITZ, M. and I. A. STEGUN, Handbook of Mathematical Functions (National Bureau of Standards, 1964).
- [15] J. T. DAVIES and J. M. VAUGHAN, Astrophys. J. 137 (1963) 1302.
- [16] LENZ, W. Z. , Physik 25 (1924) 299.
- [17] WEISSKOPF, V. Z. , Physik 75 (1932) 287.
- [18] LINDHOLM, E. , Thesis Uppsala (1942).
- [19] FOLEY, H. M. , Phys. Rev. 69 (1946) 616.
- [20] STARK, J. , Elektrische Spektralanalyse chemischer Atome (Leipzig, 1924).
- [21] DEBYE, P. , Physik. Z. 20 (1919) 160.
- [22] HOLTSMARK, J. , Ann. Physik 58 (1919) 577.
- [23] MARGENAU, H. , Phys. Rev. 48 (1935) 755.
- [24] ANDERSON, P. W. and J. D. TALMAN, Conf. Broadening of Spectral Lines, University of Pittsburgh (1955).

- [25] LINDHOLM, E., Arkiv Math. Astronom. och Fysik 28B (1941) nr. 3.
- [26] MARGENAU, H. and G. W. LANDWEHR (New Haven, Yale University, 1958).
- [27] JENSEN, H. LENZ, W., Z. Physik 80 (1933) 448.
- [28] KOLB, A. C., Thesis, University of Michigan (1957).
- [29] HOLSTEIN, T., Phys. Rev. 79 (1950) 744.
- [30] BARANGER, M., Phys. Rev. 112 (1958) 855.
- [31] VAINSHTEIN, L. A. and I. I. SOBEL'MAN, Opt. Spectry. 6 (1959) 279.
- [32] GRIEM, H. R. M. BARANGER, A. C. KOLB and G. K. OERTEL, Phys. Rev. 125 (1962) 177.
- [33] ANDERSON, P. W., Phys. Rev. 76 (1949) 647.
- [34] O. VALLEE, P. RANSON, J. CHAPELLE, J. Phys. 112B (1977) 1201.
- [35] W. R. HINDMARSH, J. M. FARR, Prog. Quantum Electron. 2 (1972) 143.
- [36] D. E. KELLEHER, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 25 (1981) 191.
- [37] A. ÜNSOLD, Physik der Sternatmosphären, 2nd Edn. Springer-Verlag, Berlin (1955)
- [38] C. W. ALLEN, Astrophysical Quantities, 3rd Edn. Athlone Press, New York (1973)
- [39] BARANGER, M., in: Atomic and Molecular Processes, ed. D. R. Bates (New York, Academic Press, 1962).
- [40] A. W. ALI, H. R. GRIEM, Phys. Rev. 140A (1965) 1044.
- [41] A. W. ALI, H. R. GRIEM, Phys. Rev. 144 (1966) 366.
- [42] D. VOSLAMBER, Z. Naturforsch, 24A (1969) 1458.
- [43] D. VOSLAMBER, Z. Naturforsch, 27A (1972) 1733.
- [44] J. W. DUFTY, Phys. Rev. 187 (1969) 305.
- [45] E. W. SMITH, J. COOPER, C. R. VIDAL, Phys. Rev. 185 (1969) 140.
- [46] C. R. VIDAL, J. COOPER, E. W. SMITH, Astrophys. J. Suppl. Ser. No. 214 (1973) 25,37.
- [47] J. BARNARD, J. COOPER, E. W. SMITH, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 14 (1974) 1025.
- [48] TRAN MINH, H. VAN REGEMORTER, J. Phys. 5B (1972) 903.

- [49] TRAN MINH, N. FEAUTRIER, H. VAN REGEMORTER, J. Phys. 8B (1975) 1810.
- [50] A. BRISSAUD, U. FRISCH, J. Q. S. R. T. 11 (1971) 1767.
- [51] A. BRISSAUD, U. FRISCH, J. Math. Phys. 15 (1974) 524.
- [52] A. BRISSAUD, C. GOLDBACH, J. LEORAT, A. MAZURE, G. NOLLEZ, J. Phys. 9B (1976) 1129.
- [53] A. BRISSAUD, C. GOLDBACH, J. LEORAT, A. MAZURE, G. NOLLEZ, J. Phys. 9B (1976) 1147.
- [54] J. SEIDEL, Z. Naturforsch, 32a (1977) 1195.
- [55] J. SEIDEL, Z. Naturforsch, 32a (1977) 1207.
- [56] S. M. BENETT, H. R. GRIEM, Technical Report No 71 - 097, University of Maryland (1971).
- [57] W. W. JONS, S. M. BENETT, H. R. GRIEM, Technical Report No 71 - 128, University of Maryland (1971)
- [58] SCHMALJOHANN, P., Kiel (1936) unpubl.
- [59] VERWEY, S., Thesis, Amsterdam (1936).
- [60] CHANDRASEKHAR, S., Rev. Mod. Phys. 15 (1943).
- [61] BARANGER, M. and B. MOZER, Phys. Rev. 115 (1959) 521.
- [62] MOZER, B. and M. BARANGER, Phys. Rev. 118 (1960) 626.
- [63] MAYER, H., Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-647 153 (1947) unpubl.
- [64] BROYLES, A. A., Phys. Rev. 100 (1955) 1181.
- [65] G. WENTZEL, Zs. Phys. 38 (1927) 518.
- [66] I. WALLER, Zs. Phys. 38 (1927) 635.
- [67] H. A. BETHE, E. E. SALPETER, Quantum Mechanics of One- and Two- Electron Atoms, Springer-Verlag, Berlin and New York (1957).
- [68] G. R. HARRISON, R. C. LORD, J. R. LOOFBOUROW, Praktična Spektroskopija, Naučna Knjiga, Beograd (1962).
- [69] B. S. MILIĆ, Osnove fizike gasne plazme, Građevinska knjiga, Beograd (1989).
- [70] S. ĐUROVIĆ, Doktorska Teza, Univerzitet u Beogradu (1989).
- [71] C. F. HOOPER JR., Phys. Rev. 149 (1966) 77.
- [72] C. F. HOOPER JR., Phys. Rev. 165 (1968) 165.

- [73] L. A. WOLTZ, J. Q. S. R. T, 36 (1986) 547.
- [74] Z. MIJATOVIĆ, R. KOBILAROV, B. T. VUJIČIĆ, D. NIKOLIĆ and N. KONJEVIĆ , J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer Vol. 50 No. 3, pp. 329 – 335, (1993).
- [75] S. A. FREUDENSTEIN and J. COOPER, Astrophys. J. 224 (1978) 1079.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

- Redni broj:** RBR
- Identifikacioni broj:** IBR
- Tip dokumentacije:** *Monografska dokumentacija* TD
- Tip zapisa:** *Tekstualni štampani materijal* TZ
- Vrsta rada:** *Diplomski rad* VR
- Autor:** Nikolić Dragan br. dos. 110/87 AU
- Mentor:** dr. Radomir Kobilarov, docent, PMF Novi Sad MN
- Naslov rada:** APROKSIMATIVNI METOD ZA DEKONVOLUCIJU GAUSSOVOG I $j_{A,R}(x)$ PROFILA SPEKTRALNIH LINIJA NEUTRALNIH ELEMENATA EMITOVAНИH IZ PLAZME NR
- Jezik publikacije:** srpski (latinica) JP
- Jezik izvoda:** srpski JI
- Zemlja publikovanja:** Jugoslavija ZP
- Uže geografsko područje:** Vojvodina UGP
- Godina:** 1994. GO
- Izdavač:** Autorski reprint IZ

- Mesto i adresa:** *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
MA
- Fizički opis rada:** *(2/53/75/5/0/8/0)*
(broj poglavlja / strana / lit. citata / tabela / slika / grafika / priloga)
FO
- Naučna oblast:** *Fizika*
NO
- Naučna disciplina:** *Fizika plazme*
ND
- Predmetna odrednica / Ključne reči:** *Fizika, Plazma, Spektroskopija*
PO
- UDK:**
- Čuva se:**
ČU
- Važna napomena:** *nema*
VN
- Izvod:** *U plazmi neutralnih elemenata, nakelektrisani joni imaju veliki uticaj u širenju krila profila spektralnih linija, čime prouzrokuju asimetriju Starkovih profila. Starkovi profili neutralnih elemenata su asimetrične $j_{A,R}(x)$ funkcije. Observirani profil je konvolucija Gaussovog i $j_{A,R}(x)$ profila. Izračunavanje konvolucije je do sada vršeno zamenom asimetričnog $j_{A,R}(x)$ profila pogodnim simetričnim disperzionim profilom, čime je u račun uvedena sistematska greška u određivanju Starkovih parametara. Aproksimativni metod, izložen u ovom radu, omogućuje približno izračunavanje parametara asimetrične konvolucije u zavisnosti od vrednosti parametara jonskog širenja A i ekranirajućeg parametra R . U radu je opisan i jednostavan metod dekonvolucije observiranih profila neutralnih elemenata, ako su unapred procenjene vrednosti parametara A i R . Ispravnost izloženog aproksimativnog metoda je potvrđena na spektralnoj liniji neutralnog Helijima (HeI 6678Å) čiji su eksperimentalni podaci dati u Ref. [36].*
- IZ**
- Datum prihvatanja teme od strane NN veća:** 07. 03. 1994.
DP
- Datum odbrane:** . 04 . 1994 .
DO

Članovi komisije:
(Naučni stepen / ime i prezime / zvanje / fakultet)
KO

• **Predsednik:** *dr. Stevica Đurović, docent, PMF Novi Sad*

• **Član:** *dr. Radomir Kobilarov, docent, PMF Novi Sad*

• **Član:** *dr. Božidar Vujičić, van. prof. PMF Novi Sad*