

Grupa: FIZIKA

# **DIPLOMSKI RAD**

UTICAJ ELEKTRONSKIH KORELACIJA NA PRESEK  
FOTOJONIZACIJE ATOMA AZOTA U 1.i 2. REDU  
TEORIJA PERTURBACIJA

Kandidat:

MLADIN IMRE

Rukovodilac rada:

Dr VOJISLAV RADOJEVIĆ

N O V I   S A D  
Novembar 1974.

Za svesrdnu pomoć i saradnju, u toku  
izrade ovog rada, zahvaljujem se svom  
profesoru Dr VOJISLAVU RADOJEVIĆU  
i asistentu DARKU KAPORU.



# *Sadržaj*

Uvod .....	2 str.
1.Jednočestični model atoma.....	5
-Hartree-eva jednačina.....	7
-Talasne funkcije atoma.....	8
-Fock-ova jednačina.....	9
2.Fotopobuđenje.....	11
3.Aproksimacija slučajnih faza.....	15
4.Polarizacioni dijagrami 1. i 2. reda .....	19
5.Rezultati.....	22
-Diskusija rezultata.....	28
6.Dodatak .....	29

## *Uvod*

Proučavanje pojava u domenu atoma je moguće samo ako su poznate talasne funkcije osnovnog i pobuđenih stanja atoma.

Kvantna mehanika pruža mogućnosti za pronalaženje ovih talasnih funkcija. Međutim, egzaktni oblik talasnih funkcija se može naći samo za atome vodonikovog tipa, pošto tu postoji samo jednočestični potencijali. Ostali atomi, zbog većeg broja elektrona, predstavljaju složene, više-elektronske sisteme. Kvantna teorija višečestičnih sistema daje nekoliko aproksimacionih metoda, koje, često veoma uspešno, rješavaju ove probleme.

Hartree-Fock-ova aproksimacija (HFA)<sup>ref. 3</sup> je jedna od veoma često korišćenih aproksimacija u atomskoj fizici. Prilikom primene u proučavanju spektara atoma, ovaj metod je davao veoma dobre rezultate. Mogućnost primene ove metode je međutim ograničena samo na osnovno stanje atoma, gde elektronske korelacije ne igraju značajnu ulogu.

Razvitkom eksperimentalne tehnike javili su se zahtevi za preciznije određivanje talasnih funkcija atoma, naročito viših pobuđenih stanja.

U međuvremenu HFA je primenjena u oblasti beskonačnog, homogenog elektronskog gasa. Velike korelacije između elektrona u ovakvoj sredini su iziskivale procenu i uračunavanje istih. Ovo se veoma dobro uspelo metodom Aproksima-



cija Slučajnih Faza (Random Phase Approximation-RPA).

Uspeh RPA u beskonačnom, homogenom elektronском gasu, je predstavljao podstrek atomskim fizičarima. Prvi pokušaji primene RPA na atom, su pokazali da su popravke dobijene ovim metodom zadovoljavajuće.

Fotopobuđenje je pojava u kojoj korelacija igraju značajnu ulogu. U okviru proučavanja procesa fotopobuđenja, dobijaju se i podaci o veličini korelaceione interakcije. Pored ovoga, fotopobuđenje je pojava povezana sa drugim pojavama, od kojih je najznačajnija pojava fotoelektrične provodljivosti, koja se praktično iskorišćava, npr. u fotoćelijama. Znači da teorijsko proučavanje fotopobuđenja, iako indirektno, ima i svoj praktični značaj.

Cilj ovog rada je da se proveri uticaj elektronskih korelacija na presek fotopobuđenja atoma azota u 1. i 2. redu teorije perturbacije i da se proceni doprinos članova viših redova. Odabiranje atoma azota je povezano sa činjenicom, da se u radu koriste rezultati rada iz ref. 2. u kojoj je izvršen proračun preseka fotojonizacije atoma azota u "r" i "v" formi RPA i poređenje dobijenih rezultata, kako sa rezultatima dobijenih HFA tako i sa eksperimentalnim rezultatima.

Rezultati su pokazali da se razlika između preseka u "r" i "v" formi ( $\sigma^r$  i  $\sigma^v$ ), koja se javlja u HFA kao posledica nelokalnosti HF-potencijala, u RPA svodi na razliku manju od greške računa (oko 5%). Ovakvi rezultati, sami po sebi, ukazuju na činjenicu da su izvršene popravke dobre.

Proračunom, u ref. 2., su obuhvaćene samo korelaciјe unutar spoljašnje ljudske, pošto je procenom utvrđeno da je uticaj ostalih ljudski zanemarljiv.

Ovaj rad se sastoji iz dva dela. Prvi deo obuhvata prva tri odeljka i predstavlja sažetu teoriju HFA (jednočestične modele), fotopobuđenja i RPA. Drugi deo predstavlja računski deo i u njemu su dati proračuni vrednosti RPA dijagrama u 1. i 2. redu teorije perturbacije, preseka za fotoionizaciju i jačine oscilatora u HFA i nakon popravke izvršene

## u 1. i 2. redu teorije perturbacija.

U prvom odeljku je razmatran problem više elektronskih atoma. U kratkim crtama su date ideje od kojih se polazi prilikom rešavanja ovih problema. Ovaj odeljak je podeđen u četiri dela. Uopšteni problemi, koje stvaraju višečestični potencijali u jednom realnom atomu izneti su u prvom delu dok se ta problematika konkretno razmatra u drugom delu, u okviru Hartree-Fock-ovog modela atoma. U trećem delu ovog odeljka su date neke važne osobine talasnih funkcija atoma koje su nužne pretpostavke za mogućnost rešavanja ovog problema. Četvrti deo je posvećen Fock-ovoj jednačini samouzglašenog polja koja daje veoma dobre vrednosti karakteristika atoma u osnovnom stanju i u nižim pobuđenim stanjima.

U drugom odeljku je opisana pojava fotopobuđenja. Polazne tačke i principi izvođenja izraza za presek fotopobuđenja su u ovom odeljku takođe date ali sa ciljem da se pokaže poreklo dipolnih matričnih elemenata prelaza. U ovom odeljku je pokazano i poreklo "r" i "v" forme preseka i jačine oscilatora.

Proces fotopobuđenja je u trećem odeljku objašnjen dijagramskom tehnikom. Tu je takođe pokazano kako se dijagramskom tehnikom dolazi do RPA.

Četvrti odeljak predstavlja nastavak trećeg odeljka. U njemu su izneti konkretni izrazi u matričnom obliku za RPA dijagrame u 1. i 2. redu teorije perturbacija. Na osnovu navedenih izraza izvršen je proračun vrednosti ovih dijagrama. Ovaj proračun je vršen na računaru pomoću programa koji je opisan i priložen u dodatku rada.

Rezultati izvršenih proračuna, zajedno sa diskusijom dati su u poslednjem odeljku.

Napomena: Rad je rađen u sistemu jedinice  $\hbar=m=e=1$  (atomski sistem jedinica), pri čemu je za energiju korišćena jedinica Ry (1Ry=0.5 a.j.e.).

## 1. Jednočesticni model atoma

Atom je sistem međusobno interagujućih elektrona, koji se nalaze pod dejstvom centralnog polja, pozitivno nanelektrisanog jezgra. Stanje atoma se određuje talasnom funkcijom, koja se dobija kao rešenje Schrödinger-ove jednačine:

$$\frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H}(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) \quad (1.1)$$

gde je:

$$\vec{r} = (x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N, z_1, \dots, z_N)$$

$\hat{H}(\vec{r}, t)$  -operator energije sistema, hamiltonijan, koji se za atom rednog broja N može napisati u obliku:

$$\hat{H} = \sum_j (\hat{T}_j + \hat{Q}_j) + \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} \quad (1.2)$$

gde je:

- $\hat{T}_j$  -operator kinetičke energije j-tog elektrona
- $\hat{Q}_j$  -operator potencijala Coulomb-ovog polja jezgra kod j-tog elektrona
- $\hat{V}_{ij}$  -operator koji odgovara potencijalnoj energiji nastaloj usled međusobne interakcije i-tog i j-tog elektrona.

Gornja jednačina (1.2) je napisana za izolovan sistem, bez spin-orbitalne interakcije. Za takav sistem hamiltonijan nije funkcija od vremena ( $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ ), što omogućava

da se talasna funkcija  $\psi$  razbije na proizvod:  $\psi(\vec{j}t) = \phi(\vec{j}) \cdot T(t)$

Vremenski deo talasne funkcije se sada direktno dobija u obliku:  $T(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$

pa je dalje potrebno rešavati svojstveni problem hamiltonijana sistema:

$$\hat{H}(\vec{j}) \cdot \phi(\vec{j}) = E \cdot \phi(\vec{j}) \quad \dots \dots \quad (1.3)$$

Jednačina 1.2 ukazuje na činjenicu, da je hamiltonijan sistema sastavljen iz jednog jednočestičnog operatora  $\hat{H}'$  i jednog dvočestičnog  $\hat{H}''$ . Ovaj dvočestični operator  $\hat{H}'' = \sum_{i < j} \hat{V}_{ij}$ , znatno komplikuje problem i onemogućava pronađenje eksplicitnog oblika talasne funkcije  $\phi(\vec{j})$  i energetskih nivoa ( $E$ ). Rešavanje je moguće samo primenom aproksimacionih metoda. Ove metode se, u suštini, sastoje iz usvajanja modela atoma, koji su samo približno tačni. Greška učinjena pri ovakovom proračunu zavisiće od toga, u kojoj meri interakcije između elektrona, model uključuje u sebe.

Prvi korak u pronađenju modela atoma, daje teorija perturbacija. Primena ove teorije, na izneti problem, sastoji se u razbijanju hamiltonijana sistema na:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} \quad \dots \dots \quad (1.4)$$

pri čemu moraju biti zadovoljeni uslovi:

- a) Matrični elementi operadora  $\hat{H}_0$  su mnogo veći od odgovarajućih matričnih elemenata operadora  $\hat{H}_{int}$ ,
- b) Svojstveni problem:

$$\hat{H}_0 \phi = E_0 \phi \quad \dots \dots \quad (1.5)$$

je moguće eksplicitno rešiti.

Polazeći od jednačine 1.2, dodavanjem i oduzimanjem jednočestičnog potencijala  $\sum_j \hat{V}_j$ , hamiltonijan se može prikazati u obliku:

$$\hat{H} = \sum_j (\hat{T}_j + \hat{Q}_j + \hat{V}_j) + \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} - \sum_j \hat{V}_j \quad \dots \dots \quad (1.6)$$

odnosno:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_{int}$$

gde je:

$$\hat{H}_o = \sum_j (\hat{T}_j + \hat{Q}_j + \hat{V}_j) \quad - \text{jednočestični operator}$$

$$\hat{H}_{int} = \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} - \sum_j \hat{V}_j \quad - \text{dvočestični operator}$$

### Hartree-eva jednačina samousaglašenog polja

Drugi korak, u pronalaženju modela, je znatno složeniji. Odabiranjem, najpogodnijeg jednočestičnog potencijala  $\sum \hat{V}_j$ , pored zahteva 1.5 (a i b), mora se zadovoljiti i zahtev za mogućnost realnog fizičkog tumačenja.

Hartree je ovaj problem rešio na sledeći način: Pretpostavio je da je atom sastavljen od jezgra i N međusobno nezavisnih elektrona, pri čemu se svaki elektron kreće u centralnom polju pozitivno nanelektrisanog jezgra i usrednjenoj polju ostalih N-1 elektrona. Modeli, koji se zasnivaju na ovakvoj, relativnoj nezavisnosti čestica, često se nazivaju "modeli nezavisnih čestica".

Na osnovu napred iznetih stavova, zamenom konkretnih veličina u izraz 1.5, se dobijaju Hartree-eve jednačine (1.7), odnosno prilagođena Schrödinger-ova jednačina za ovaj model:

$$\sum_j \left( -\frac{1}{2} \Delta_j + \frac{Z}{r_j} + V_{jHF} \right) \phi_j = E_o \phi_j \quad \dots \dots \dots (1.7)$$

gde je:

$\hat{V}_{jHF}$  -operator potencijalne energije usrednjenoj električnog polja N-1 elektrona kod j-tog elektrona, HF-potencijal.

Rešavanjem jednačina (1.7) se dobijaju jednočestične talasne funkcije i energetski nivoi u Hartree-evoj aproksimaciji. Dobijeni rezultati su samo približno tačni, ali su zadovoljavajući u slučaju proračuna karakteristika osnovnog stanja atoma.

Veći deo interakcije između elektrona, je u ovaj model atoma uključen potencijalom  $\hat{V}_{jHF}$ .

Deo interakcije, koji potencijal  $\hat{V}_{jHF}$  ne uključuje u model, može se opisati operatorom:

$$\hat{H}_{int} = \sum_{i < j} \hat{V}_{ij} - \sum_j V_{jHF}^{\circ} \dots \dots \dots \quad (1.8)$$

Interakcija između dve čestice zavisi od toga, da li su oni izolovan sistem, ili je interakcija nastala u prisustvu drugih čestica. Interakcija, koja je nastala između nekih čestica kao posledica prisustva drugih čestica, se naziva korelaciona, odnosno rezidualna interakcija. Često se, međutim, koristi skraćeni naziv "Korelacija".

Jednačina 1.8 opisuje interakciju, čiji glavni deo čini baš korelaciona interakcija.

### Talasne funkcije atoma

Talasna funkcija sistema međusobno nezavisnih čestica, se prikazuje u obliku proizvoda jednočestičnih talasnih funkcija popunjenih stanja.

$$\Phi = S_a(1) \cdot S_b(2) \cdots \cdots S_p(\pi) \quad (1.9)$$

gde indeksi  $a, b, \dots, p$  označavaju jednočestične talasne funkcije pojedinih popunjenih stanja, dok indeksi  $1, 2, \dots, \pi$  označavaju skupove kvantnih brojeva pojedinih čestica (elektrona).

Atom je sistem elektrona, koji su fermi čestice (fermioni) i kao kvantnomehanički objekti, međusobno se ne mogu razlikovati. To znači da prilikom permutacije, bilo kojeg para elektrona, talasna funkcija atoma mora zadržati antisimetričnost, koju poseduje kao talasna funkcija sistema fermi čestica. Talasna funkcija (1.9) ovaj zahtev ne zadovoljava.

Ako se načini determinanta od svih jednoelektronskih talasnih funkcija popunjenih stanja (izraz 1.10), tada se ona može uzeti kao talasna funkcija atoma i kao takva, zadovoljavaće zahtev za zadržavanje antisimetričnosti. Ova determinanta se može dobiti ako se na talasnu funkciju (1.9) primeni operator permutacije po svim parovima čestica.

$$\phi = \begin{vmatrix} S_a(1) & S_a(2) & \dots & S_a(\pi) \\ S_b(1) & S_b(2) & \dots & S_b(\pi) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ S_p(1) & S_p(2) & \dots & S_p(\pi) \end{vmatrix} \quad (1.10)$$

Determinanta 1.lo se naziva Slater-ova determinanta.

### Fock-ova jednačina samousaglašenog polja sa izmenom

Ako se uvedu dodatne pretpostavke o jednoelektronskim talasnim funkcijama:

1) Sistem jednoelektronskih talasnih funkcija se može Schmit-ovim postupkom ortogonalizacije prevesti u sistem međusobno ortogonalnih bazisnih funkcija.

2) Jednočestične talasne funkcije elektrona su sa separabilnim promenljivima, odnosno one se mogu prikazati u obliku:

$$S_\alpha(j) = \frac{1}{r_j} \cdot P_{n_\alpha, l_\alpha}(r_j) \cdot Y_{l_\alpha, m_\alpha}(Q_j, \varphi_j) \cdot S(j) \quad (1.11)$$

što odgovara slučaju potencijala sfernosimetričnog polja.

tada su ostvareni uslovi pod kojima je Fock, primenom varijacionog računa izveo opštu jednačinu:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \epsilon_i + V_i(r) \right] P_i(r) = X_i(r) + \sum_j \delta_{l_i l_j} \epsilon_{ij} P_j(r) \quad (1.12)$$

gde je:

$$V_i(r) = \frac{2}{r} [Y_i(r) - Z] + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2}$$

$X_i(r)$  -izmenski član

$\epsilon_{ij}$  -nedijagonalni parametri

$\frac{2Z}{r}$  -Coulomb-ov potencijal

$\frac{l_i(l_i+1)}{r^2}$  -centripetalni član

$\frac{2}{r} Y_i(r)$  -potencijalni član

Izmenski član, u gornjoj jednačini, je posledica zahteva antisimetričnosti talasne funkcije. Vandijagonalni parametri su posledica ortogonalnosti talasnih funkcija. Posledica orbitalnog kretanja elektrona je centripetalni član, dok potencijalni član predstavlja direktni HF potencijal.

Jednačina 1.12 (iz ref.3.) se naziva "Fock-ova jednačina samousaglašenog polja sa izmenom".

Gornja jednačina (1.12) na prvi pogled, ima izgled diferencijalne jednačine. Međutim,  $Y_i(r)$  i  $X_i(r)$  su posredne funkcije (integrali) radikalnih funkcija stanja što jednačinu 1.12 čini integro-diferencijalnom.

Naziv "jednačina samousaglašenog polja" potiče od činjenice da talasna funkcija, dobijena kao rešenje jednačine 1.12, mora da dà polje, srednje raspoređenog nanelektrisanja određenog elektrona, koje će odgovarati poljima koja se koriste pri izračunavanju istih talasnih funkcija elektrona. Ovo se postiže iteracionom metodom u proračunima.

Nije teško videti da je jednačina 1.12, za slučaj  $\epsilon_{ij}=0$  i  $X_i(r)=0$  identična sa Hartree-evom jednačinom (1.7).

## *2. Fotopobuđenje*

Fotopobuđenje je pojava pobuđenja atoma kvantom elektromagnetskog polja. Elektron, koji je zahvatio foton, prelazi u diskretno pobuđeno stanje ili u kontinuum (napušta atom). Prelaz atoma (elektrona iz omotača) u diskretno pobuđeno stanje, pod dejstvom kvanta elektromagnetskog polja, je pojava poznata pod nazivom fotoapsorpcija i verovatnoća ovakvog prelaza se često opisuje bezdimenzionalnom veličinom, koja se naziva "jačina oscilatora". Izbijanje fotoelektrona iz atoma je pojava poznata kao fotoionizacija i verovatnoća ovog događaja se opisuje "presekom fotoionizacije". Fotoapsorpcija nastaje pri energijama fotona koje su niže od praga fotoionizacije (energija veze elektrona u atomu je veća od energije fotona). Kada je energija fotona viša, nastaje fotoionizacija.

Verovatnoća fotopobuđenja zavisi od talasnih funkcija početnog i krajnjeg stanja atoma i od energije upadnog fotona.

Polazeći od poznate relacije za verovatnoću prelaza sistema, iz osnovnog u pobuđeno stanje, u jedinici vremena, pod dejstvom vremenski zavisne perturbacije:

$$dW_{on} = \frac{4\pi^2 H_{k\lambda} e^2}{\hbar \cdot V \cdot \omega} \left| \langle \phi_n | \hat{\mathcal{D}} | \phi_o \rangle \right|^2 \delta(\omega - \omega_{on}) \cdot dH \dots \dots (2.1)$$

kvantna elektrodinamika daje izraz za presek za fotojonizaciju u obliku:

$$\delta(\omega) = \frac{4\pi^2 d \cdot f}{\omega} \left| \langle \phi_n | \hat{j}_z(-\vec{k}) | \phi_o \rangle \right|^2 \dots \dots (2.2)$$

gde je:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar \cdot c} \quad \text{-konstanta fine strukture}$$

$\omega$  -energija upadnog fotona

i

$$\hat{j}(\vec{k}) \equiv \int e^{-i\vec{k}\vec{x}} \cdot \hat{j}(\vec{x}, 0) \cdot d^3x$$

$$\hat{\mathcal{D}} \equiv \vec{\epsilon}_{k\lambda} \cdot \hat{j}(-\vec{k})$$

gde je:

$\vec{\epsilon}$  -četvorovektor polarizacije fotona

$\vec{k}$  -impuls fotona

$\lambda$  -polarizacija fotona

$$\hat{j}(\vec{x}) \text{ -četvorovektor gustine struje elektrona}$$

$$H_{k\lambda} \text{ -broj upadnih fotona sa impulsom } \vec{k} \text{ i polarizacijom } \lambda.$$

Na relaciju 2.2 se može primeniti dipolna aproksimacija:

$$\hat{j}_z(-\vec{k}) \cong j_z(0)$$

pošto se, uglavnom radi sa energijama fotona bliskim pragu fotojonizacije. Tada je talasna dužina upadnog fotona mnogo veća od dimenzija atoma.

Ova, dipolna aproksimacija daje mogućnost da se presek za fotojonizaciju i jačina oscilatora, izraze u dve forme. Gustina struje  $j_z(0)$  je funkcija brzine, koja se može prikazati, ili kao izvod vektora položaja ili preko impulsa.

Kada se izvrši zamena:

$$\langle \phi_n | \hat{j}_z(0) | \phi_o \rangle \longrightarrow i \cdot \omega_o \cdot \left( \sum_i \hat{r}_{zi} \right)_{n_o}$$

tada se dobija tzv. "r" ili "length" (dužina) forma za presek.

"v" ili "velociti" (brzina) forma se dobija u slučaju zamene:

$$\langle \phi_n | \hat{j}_z(0) | \phi_o \rangle \longrightarrow \left( \sum_i \hat{v}_{zi} \right)_{n_o}$$

Primenom napred iznetih relacija i sređivanjem se dobija:

presek za fotojonizaciju u "r" formi:

$$\sigma_{n\ell \rightarrow \epsilon\ell'}^r(\omega) = \frac{4\pi^2 \alpha \cdot a_0^2}{3} \cdot \omega \cdot \frac{N_{ne}}{2\ell+1} \left| \langle \epsilon\ell' | dr | n\ell \rangle \right|^2$$

i u "v" formi:

$$\sigma_{n\ell \rightarrow \epsilon\ell'}^v(\omega) = \frac{4\pi^2 \alpha \cdot a_0^2}{3 \cdot \omega} \cdot 4 \cdot \frac{N_{ne}}{2\ell+1} \left| \langle \epsilon\ell' | dv | n\ell \rangle \right|^2$$

gde je:

$a_0$  -Bohr-ov radijus

$N_{ne}$  -broj elektrona u stanju

$\ell$  -orbitalni kvantni broj

$n$  -glavni kvantni broj

Za proračun verovatnoće fotoapsorpcije se uvodi jačina oscilatora :

u "r" formi:

$$f_{n\ell \rightarrow n'\ell'}^r(\omega) = \frac{N_{ne}}{3(2\ell+1)} \cdot \omega \cdot \left| \langle n'\ell' | dr | n\ell \rangle \right|^2$$

i u "v" formi:

$$f_{n\ell \rightarrow n'\ell'}^v(\omega) = \frac{4 \cdot H_{ne}}{3(2l+1) \cdot \omega} \cdot \left| \langle n'\ell' | d_r | n\ell \rangle \right|^2$$

gde su:

$$\langle 1 | d | 2 \rangle \text{ - redukovani dipolni matrični elementi prelaza atoma iz stanja 1. u stanje 2.}$$

Napomena: Relacije 2.3a - 2.4b su uzete iz reference 2.

### 3. Aproksimacija slučajnih faza

Talasne funkcije elektrona, a stim i matrični elementi prelaza u dipolnoj aproksimaciji, se mogu naći u HFA-u. Prilikom izračunavanja preseka (2.3a i b) i jačine oscilatora (2.4a i b), koji zavise od kvadrata dipolnih matričnih elemenata prelaza, neuzimanje elektronski korelacija u obzir, stvaraju znatna odstupanja od eksperimentalnih rezultata.

Razmatranje uticaja elektronskih korelacija je veoma pogodno vršiti dijagramscom tehnikom. Dijagramska tehnika se sastoji iz pridruživanja određenih dijagrama procesima (odnosno matričnim elementima koji ih opisuju) koji se posmatraju.

Posmatrani problem fotopobuđenja je najzgodnije interpretirati tzv. GOLDSTONE-ovim dijagramima, koji su vremenski zavisni preko energije.

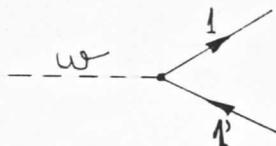
Procesu fotopobuđenja atoma, odnosno matričnom elementu prelaza  $\langle 1 \parallel D \parallel 1' \rangle$ , može se pridružiti dijagram:



Ovaj dijagram se može interpretirati kao: interakciju fotonu energije  $\omega$  i elektrona u stanju  $1(n\ell)$  koja kreira par elektron-šupljina. Realna interakcija, koja se jav-

lja u ovom procesu, je opisana trouglom i oznakom "D" u dijagramu.

Ako se pretpostavi jednočestični model atoma, npr. Hartree-Fock-ov model, tada se istom procesu može pridružiti dijagram:



koji bi odgovarao dipolnom matričnom elementu prelaza u HFA:

$$\langle 1 \parallel d \parallel 1' \rangle$$

Dijagrami 3.1 i 3.2 se međusobno razlikuju u tome što u dijagramu 3.2 nisu uzete u obzir korelacije, pa je stoga moguće pisati:

Korelacioni dijagrami predstavljaju beskonačan skup interakcionih dijagrama, kao što su:

Proračun vrednosti svih ovih dijagrama je praktično neizvodljiv. Činjenica da su mnogi od ovih dijagrama sa malim doprinosom dozvoljava da se izdvoji određena podklasa, za koju se može tvrditi da je sa dominantnim doprinosom.

Metodom RPA se obračunava beskonačan podskup interakcionih dijagrama oblika:

U RPA se uzimaju u obzir samo oni procesi u kojima se atom pobuđuje samo direktnom interakcijom sa fotonom. Dijagrami oblika 3.4 se zovu polarizacioni dija-

grame jer predstavljaju polarizaciju atoma. Usled njihovog oblika su dobili popularan naziv "bubble" ili balon dijagrami.

Ako se pretpostavi da je celokupna korelaciona interakcija u atomu jednaka interakciji obračunatoj u RPA, tada se može pisati da je:

$$\text{Diagram 1} = \text{Diagram 1} + \text{Diagram 2} \quad \dots \quad (3.5)$$

što predstavlja RPA jednačinu za  $\mathcal{D}(\omega)$ ,  
gde je:

$\mathcal{D}(\omega)$  - dipolni matrični element prelaza  
obračunat u RPA-u.

Jednačina 3.5 se može napisati i pomoću matričnih elemenata prelaza u obliku:

$$\langle 1 | \mathcal{D}(\omega) | 1' \rangle = \langle 1 | d | 1' \rangle + \sum_{22'} \langle 12' | U | 12 \rangle \cdot \langle 2 | \mathcal{D}(\omega) | 2' \rangle \cdot G_{22}(\omega) \dots \quad (3.6)$$

gde oznaka  $\sum_{22'}$  znači sumiranje po svim stanjima ispod Fermi-nivoa i integraciju po svim stanjima iznad Fermi-nivoa.

$$\langle 12' | U | 12 \rangle = U_{12} \text{ - redukovani matrični element Coulomb-ove dvočestične interakcije.}$$

$$U_{12} = V_{12} (1 - P_{12})$$

$P_{12}$  - operator permutacije po svim parovima čestica.

i:  $V_{12} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$

odgovarajući dijagramske simbol je:

$$\langle 12' | U | 12 \rangle =$$

$G_{22'}$ -dvočestična Green-ova funkcija, propagator koji opisuje kretanje para elektron-šupljina.

a  $2$  ili  $2'$  -skup kvantnih brojeva određenog stanja (stanje)

Razlikuju se dva slučaja:

1. kada je  $2 \leq F$  i  $2' > F$ . Tada se kaže da je to propagator para "unatrag u vremenu". Green-ova funkcija za ovaj slučaj ima oblik:

$$G_{22'}^- = \frac{1}{2\ell+1} \cdot \frac{2 \cdot \chi_2}{\omega + (\chi_2^2 - E_{2'})} \quad \dots \quad (3.7)$$

a odgovarajući simbol (dijagramski) je:

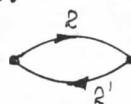


Ova Green-ova funkcija nema pol.

2. kada je  $2 > F$  i  $2' \leq F$ . Tada se kaže da je to propagator para "unapred u vremenu". Green-ova funkcija ima oblik:

$$G_{22'}^+ = \frac{-1}{2\ell+1} \cdot \frac{2 \cdot \chi_2}{\omega - (\chi_2^2 - E_{2'})}$$

a odgovarajući simbol je:



Ova Green-ova funkcija ima pol.

Ako se ovakav propagator nađe pod znakom integrala tada se može primeniti poznata relacija iz kompleksne analize:

$$\int \frac{f(x) dx}{x \pm i\eta} = \Re \int \frac{f(x) dx}{x} \mp i\pi f(0)$$

$$0 < \eta \ll 1$$

Oznaka:

$\Re$  -znači glavnu vrednost integrala

$F$  -označava stanje na Fermi-nivou.

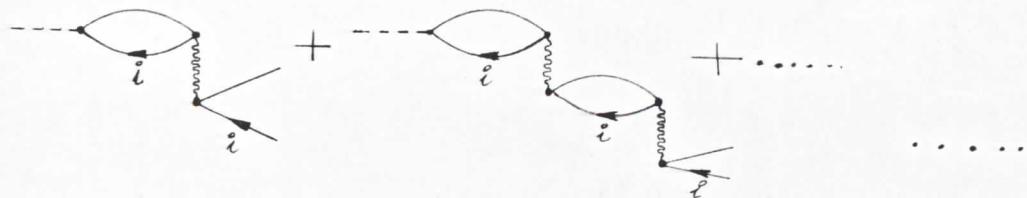
## *4. Polarizacioni dijagrami 1. i 2. reda*

Rešavanjem jednačine 3.6 dobijaju se vrednosti dipolnih matričnih elemenata prelaza u RPA. Rešavanje te jednačine, kao i pronalaženje vrednosti dipolnih matričnih elemenata u HFA, redukovanih matričnih elemenata Coulomb-ove interakcije i drugih karakteristika atoma danas je u mnogoće olakšano korišćenjem računskih mašina. Na programima za rešavanje ovakvih problema se veoma mnogo radi. Program objavljen u referenci 1. je doživeo nekoliko doterivanja pre nego što je iskorišćen u referenci 2.

Problem doprinosa prvi nekoliko članova, odnosno brzine konvergencije izabrane podklase interakcionih dijagrama, je veoma interesantan i od velikog značaja za dalje usavršavanje programa za proračun karakteristika atoma.

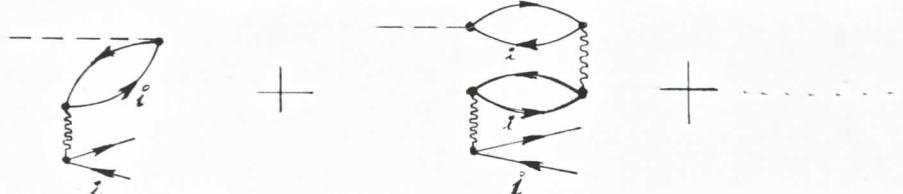
U cilju provere napred iznetog, u slučaju polarizacioni dijagrama, u ovom odeljku će biti izvedeni izrazi za polarizacione dijagrame u prvom i drugom redu teorije perturbacije, na osnovu kojih je izvršen proračun u sledećem odeljku.

Polarizacioni dijagrami se ustvari sastoje iz podklase direktnih polarizacionih dijagrama i iz podklase izmenskih polarizacionih dijagrama. Za direktne polarizacione dijagrame je karakteristično da su dijagonalni po šupljinama, odnosno:



Vrednosti ovih, direktnih polarizacionih dijagrama su obračunati prilikom proračuna talasnih funkcija po buđenih stanja.

Izmenski polarizacioni dijagrami su:



i u ovom radu je izvršen proračun doprinosa ovih dijagrama (prvog i drugog reda).

Vrednost ovih dijagrama je proračunat u "r" i u "v" formi, radi poređenja.

Koristeći pravila korespondencije, ovi dijagrami se mogu napisati pomoću matričnih elemenata kao:

Dijagram prvog reda.

$$\text{Diagram } j \equiv A_j \equiv \sum_j U_{ij} G_j^- d_j \quad \dots \quad (4.1)$$

pošto  $G_j^-$  nema pol, onda dijagram prvog reda ima samo realni deo (imaginarni = 0).

Dijagram drugog reda.

$$\text{Diagram } j \equiv B_j \equiv \sum_j U_{ij} G_j^- \sum_k U_{jk}^+ G_k^+ d_k$$

pošto  $G_k^+$  ima pol onda dijagram drugog reda ima i imaginarni deo pa se može napisati kao:

$$B_i = R_e B_i + i J_m B_i \quad \dots (4.2)$$

gde je:

$$R_e B_i = \sum_j U_{ij} G_j^- \Re \sum_k U_{jk} G_k^+ d_k \quad \dots (4.3a)$$

$$J_m B_i = - \Im \sum_j U_{ij} G_j^- U_{jj} d_j \quad \dots (4.3b)$$

Popravke rezultata, dobijene proračunom dijagrama 1. i 2. reda se mogu uračunati i u presek za fotopobuđenje atoma. Tako se dobija relacija:

$$\zeta_i = K \cdot \langle |d_i + A_i + R_e B_i + i J_m B_i| \rangle \langle |d_i + A_i + R_e B_i - i J_m B_i| \rangle$$

$$\zeta_i(\omega) = K \left\{ \langle |d_i + A_i + R_e B_i| \rangle^2 + \langle |J_m B_i| \rangle^2 \right\}$$

$$\zeta_i(\omega) = \zeta_{iR_e}(\omega) + \zeta_{iJ_m}(\omega) \quad \dots (4.4)$$

## *5. Rezultati*

Na osnovu jednačina 4.1 , 4.3a , 4.3b i 4.4 izvršen je u ovom odeljku proračun vrednosti navedenih polarizacionih dijagrama i preseka odnosno jačine oscilatora za 17 vrednosti energije upadnog fotona.

Neophodni podaci za ove proračune, a to su:

- a)dipolni matrični elementi prelaza u HFA,
  - b)redukovani matrični elementi Coulomb-ove interakcije,
  - c)Green-ove funkcije, propagatori para "napred u vremenu" i "nazad u vremenu",
  - d)Simpson-ovi koeficienti,
  - e)popravke na Simpson-ove koeficiente, i
  - f)odgovarajuće vrednosti upadne energije fotona.
- su dobijeni iz programa koji je proveren i u referenci 2.

Članove suma u pomenutim jednačinama je neophodno pomnožiti sa odgovarajućim Simpsonovim koeficientima, pošto je ovde, ustvari reč o numeričkoj integraciji Simpsonovom metodom. Pošto je ova metoda neprimenljiva za podintegralne funkcije koje imaju pol, onda je neophodno izvršiti popravke u okolini pola. To se radi uvođenjem koeficijenata popravki (ref.1.).

Da bi se proračun mogao izvršiti u razumnom vremenskom periodu napisan je program na FORTRAN IV jeziku i rešavanje je vršeno numerički.

Program je tako napisan da daje vrednosti dijagrama 1. i 2. reda i da uporedi rezultate sa vrednostima odgovarajućih dipolnih matričnih elemenata u HFA. Na strani 24. i 25. su dati rezultati ovih proračuna.

Na stranici 26. su tablično sredjene vrednosti za jačine oscilatora ( $I=1,2,3$ ) i preseka za fotopobuđenje u HFA i nakon izvršene popravke. Proračun je vršen samo za realni deo preseka pošto je procenom utvrđeno da je imaginarni deo mnogo manji od realnog.

Proračuni su vršeni za fotopobuđenje 2p ljudske atoma azota. Ova ljudska ima  $\frac{1}{2} \cdot 3$  elektrona i pošto je  $\ell=1$  tada se relacije 2.3a i b kao i 2.4a i b mogu prikazati u obliku jednačine 4.4 pri čemu je:  
za presek fotopobuđenja

$$K = 2,689 \cdot \omega \quad \text{u "r" formi}$$

$$K = \frac{10,756}{\omega} \quad \text{u "v" formi}$$

za jačinu oscilatora

$$K = \frac{1}{3} \cdot \omega \quad \text{u "r" formi}$$

$$K = \frac{4}{3} \cdot \frac{1}{\omega} \quad \text{u "v" formi}$$

Na osnovu rezultata u tablicama na strani 26. nacrtani su grafici na slicil. (strana 27.).

Energije upadnih fotona su sledeće:

$I=$	$E = [R_Y]$	$I=$	$E = [R_Y]$	$I=$	$E = [R_Y]$
1	1.02112	2	1.07138	3	1.09455
4	1.14517	5	1.22517	6	1.38517
7	1.62517	8	1.94517	9	2.34517
10	2.82517	11	3.38517	12	4.02517
13	4.74517	14	5.51517	15	6.42517
16	7.38517	17	8.42517		

Rezultati iz priloženih tablica treba da omoguće poređenje vrednosti preseka iz tablica i grafika.

Napomena: Vrednosti (konstanti)  $K$  su uzete iz ref.1.

## LENGTH (R)=FORMA

\*\*\*\*\*  
 \* I \* DIPOLNI MATR. EL. \* DIJAGRAM PRVOG REDA \* DOPRINDOS \*  
 \*\*\*\*\*  
 \* 1. \* .45928717E 00 ★ -.27186885E-01 ★ 5.9194 ★  
 \* 2. \* .31869876E 00 ★ -.19878507E-01 ★ 6.2374 ★  
 \* 3. \* .23429030E 00 ★ -.14952984E-01 ★ 6.3822 ★  
 \* 4. \* .18805132E 01 ★ -.12574232E 00 ★ 6.6866 ★  
 \* 5. \* .19084835E 01 ★ -.13734430E 00 ★ 7.1965 ★  
 \* 6. \* .18645511E 01 ★ -.15058810E 00 ★ 8.0764 ★  
 \* 7. \* .16972742E 01 ★ -.16005570E 00 ★ 9.4302 ★  
 \* 8. \* .14494228E 01 ★ -.15729105E 00 ★ 10.8520 ★  
 \* 9. \* .11685734E 01 ★ -.14734358E 00 ★ 12.6088 ★  
 \* 10. \* .90996194E 00 ★ -.12799656E 00 ★ 14.0661 ★  
 \* 11. \* .69672465E 00 ★ -.10931069E 00 ★ 15.6892 ★  
 \* 12. \* .52288365E 00 ★ -.87586790E-01 ★ 16.7507 ★  
 \* 13. \* .39527977E 00 ★ -.70793092E-01 ★ 17.9096 ★  
 \* 14. \* .29834402E 00 ★ -.54869831E-01 ★ 18.3915 ★  
 \* 15. \* .22451788E 00 ★ -.42593151E-01 ★ 18.9709 ★  
 \* 16. \* .17056382E 00 ★ -.32209530E-01 ★ 18.8841 ★  
 \* 17. \* .13193351E 00 ★ -.24973691E-01 ★ 18.9290 ★

\*\*\*\*\*  
 \* I \* DIPOLNI MATR. EL. \* DIJAGRAM DRUGOG REDA \* DOPRINDOS \*  
 \*\*\*\*\*  
 \* 1. \* .45928717E 00 ★ .13635526E-02 ★ .2969 ★  
 \* 2. \* .31869876E 00 ★ .10563741E-02 ★ .3315 ★  
 \* 3. \* .23429030E 00 ★ .81485556E-03 ★ .3478 ★  
 \* 4. \* .18805132E 01 ★ .72293915E-02 ★ .3844 ★  
 \* 5. \* .19084835E 01 ★ .84776506E-02 ★ .4442 ★  
 \* 6. \* .18645511E 01 ★ .10639317E-01 ★ .5706 ★  
 \* 7. \* .16972742E 01 ★ .13130195E-01 ★ .7736 ★  
 \* 8. \* .14494228E 01 ★ .15205424E-01 ★ 1.0491 ★  
 \* 9. \* .11685734E 01 ★ .16557649E-01 ★ 1.4169 ★  
 \* 10. \* .90996194E 00 ★ .16619503E-01 ★ 1.8264 ★  
 \* 11. \* .69672465E 00 ★ .16001470E-01 ★ 2.2967 ★  
 \* 12. \* .52288365E 00 ★ .14341913E-01 ★ 2.7428 ★  
 \* 13. \* .39527977E 00 ★ .12698591E-01 ★ 3.2126 ★  
 \* 14. \* .29834402E 00 ★ .10698643E-01 ★ 3.5860 ★  
 \* 15. \* .22451788E 00 ★ .88821277E-02 ★ 3.9561 ★  
 \* 16. \* .17056382E 00 ★ .71369279E-02 ★ 4.1843 ★  
 \* 17. \* .13193351E 00 ★ .58079772E-02 ★ 4.4022 ★

## VELOCITY (V)-FORMA

\*\*\*\*\*  
 \* I \* DIPOLNI MATR. EL. \* DIJAGRAM PRVOG REDA \* DOPRINDS \*  
 \*\*\*\*\*  
 \* 1. \* .21066552E 00 \* -.26722312E-01 \* 12.6847 \*  
 \* 2. \* .15303808E 00 \* -.19648448E-01 \* 12.8389 \*  
 \* 3. \* .11482561E 00 \* -.14817514E-01 \* 12.9044 \*  
 \* 4. \* .96232581E 00 \* -.12530702E 00 \* 13.0213 \*  
 \* 5. \* .10418077E 01 \* -.13796514E 00 \* 13.2429 \*  
 \* 6. \* .11449885E 01 \* -.15384746E 00 \* 13.4366 \*  
 \* 7. \* .12157998E 01 \* -.16711795E 00 \* 13.7455 \*  
 \* 8. \* .12362046E 01 \* -.16898590E 00 \* 13.6697 \*  
 \* 9. \* .11971917E 01 \* -.16323024E 00 \* 13.6344 \*  
 \* 10. \* .11212630E 01 \* -.14685267E 00 \* 13.0971 \*  
 \* 11. \* .10293660E 01 \* -.12974834E 00 \* 12.6047 \*  
 \* 12. \* .92116355E 00 \* -.10782704E 00 \* 11.7055 \*  
 \* 13. \* .82475781E 00 \* -.90148628E-01 \* 10.9303 \*  
 \* 14. \* .73191977E 00 \* -.72329611E-01 \* 9.8822 \*  
 \* 15. \* .64282560E 00 \* -.57908013E-01 \* 9.0084 \*  
 \* 16. \* .56575508E 00 \* -.45141205E-01 \* 7.9789 \*  
 \* 17. \* .50337195E 00 \* -.35930827E-01 \* 7.1380 \*

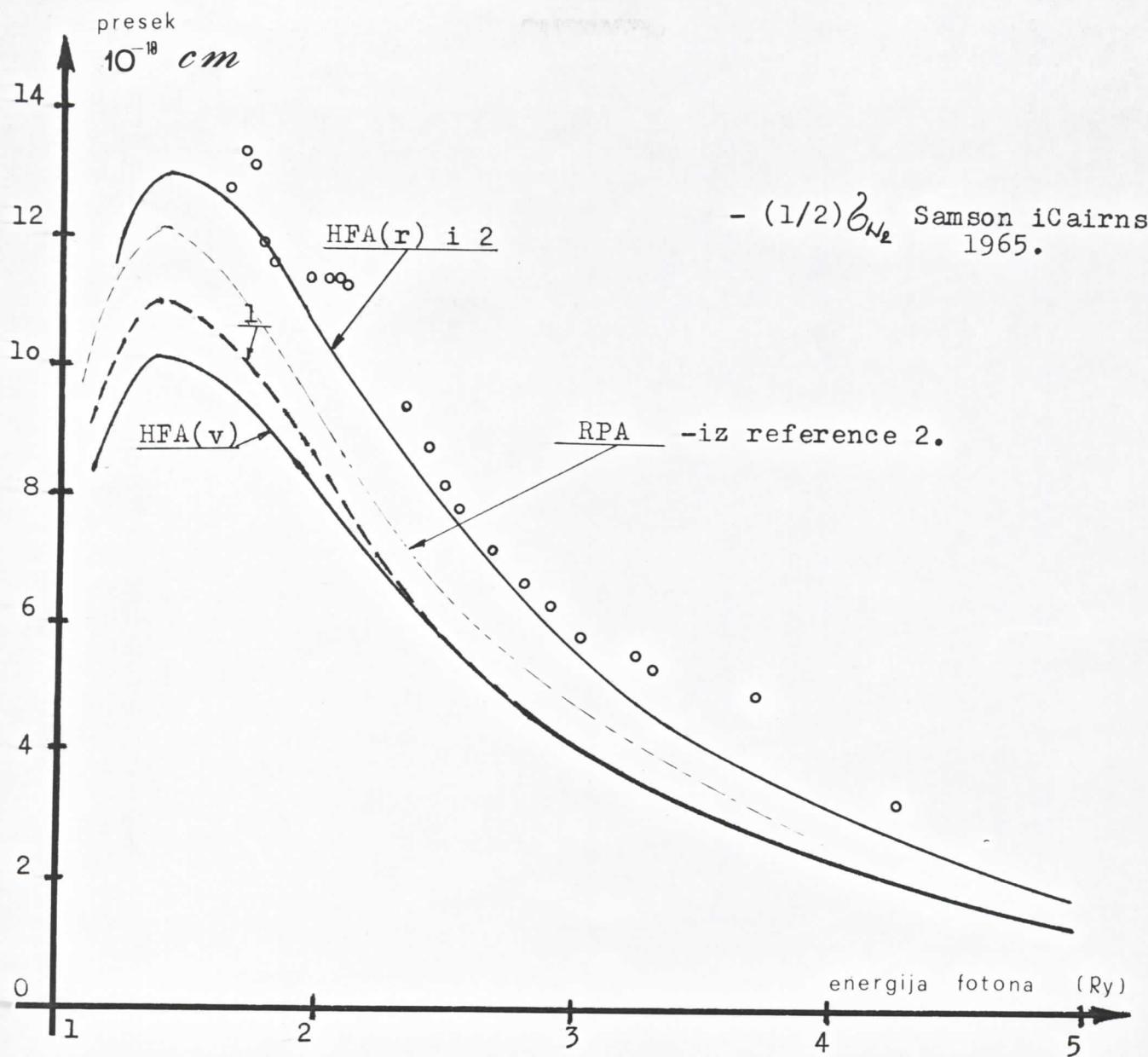
\*\*\*\*\*  
 \* I \* DIPOLNI MATR. EL. \* DIJAGRAM DRUGOG REDA \* DOPRINDS \*  
 \*\*\*\*\*  
 \* 1. \* .21066552E 00 \* -.22333832E-02 \* -1.0602 \*  
 \* 2. \* .15303808E 00 \* -.15842500E-02 \* -1.0352 \*  
 \* 3. \* .11482561E 00 \* -.11749738E-02 \* -1.0233 \*  
 \* 4. \* .96232581E 00 \* -.95668621E-02 \* -.9941 \*  
 \* 5. \* .10418077E 01 \* -.99602826E-02 \* -.9561 \*  
 \* 6. \* .11449885E 01 \* -.97674616E-02 \* -.8531 \*  
 \* 7. \* .12157998E 01 \* -.87674074E-02 \* -.7211 \*  
 \* 8. \* .12362046E 01 \* -.64856485E-02 \* -.5246 \*  
 \* 9. \* .11971917E 01 \* -.38457159E-02 \* -.3212 \*  
 \* 10. \* .11212630E 01 \* -.10625408E-02 \* -.0948 \*  
 \* 11. \* .10293660E 01 \* -.10431539E-02 \* .1013 \*  
 \* 12. \* .92116355E 00 \* -.25700266E-02 \* .2790 \*  
 \* 13. \* .82475781E 00 \* -.34165392E-02 \* .4142 \*  
 \* 14. \* .73191977E 00 \* -.37419442E-02 \* .5113 \*  
 \* 15. \* .64282560E 00 \* -.36849333E-02 \* .5732 \*  
 \* 16. \* .56575508E 00 \* -.33821724E-02 \* .5978 \*  
 \* 17. \* .50337195E 00 \* -.30310368E-02 \* .6021 \*

"r" forma

*	I	PRESEK U HFA	*	PRESEK NAKON POPRAVKE	*
*	1.	* .71800202E-01	*	* .63953280E-01	*
*	2.	* .36273286E-01	*	* .32115266E-01	*
*	3.	* .20027243E-01	*	* .17683111E-01	*
		*****		*****	
*	4.	* .10889683E 02	*	* .95603638E 01	*
*	5.	* .11999569E 02	*	* .10433784E 02	*
*	6.	* .12949230E 02	*	* .11078304E 02	*
*	7.	* .12589108E 02	*	* .10503880E 02	*
*	8.	* .10988529E 02	*	* .89397392E 01	*
*	9.	* .86114845E 01	*	* .67917709E 01	*
*	10.	* .62904625E 01	*	* .48448277E 01	*
*	11.	* .44186974E 01	*	* .33143997E 01	*
*	12.	* .29592781E 01	*	* .21882820E 01	*
*	13.	* .19936643E 01	*	* .14507084E 01	*
*	14.	* .13200331E 01	*	* .95809436E 00	*
*	15.	* .87091875E 00	*	* .62901902E 00	*
*	16.	* .57773066E 00	*	* .42036378E 00	*
*	17.	* .39434838E 00	*	* .28809774E 00	*

"v" forma

*	I	PRESEK U HFA	*	PRESEK NAKON POPRAVKE	*
*	1.	* .57949215E-01	*	* .72204947E-01	*
*	2.	* .29146776E-01	*	* .36433682E-01	*
*	3.	* .16061366E-01	*	* .20104624E-01	*
		*****		*****	
*	4.	* .86980820E 01	*	* .10916157E 02	*
*	5.	* .95285759E 01	*	* .12013939E 02	*
*	6.	* .10180019E 02	*	* .12903229E 02	*
*	7.	* .97830620E 01	*	* .12497387E 02	*
*	8.	* .84503174E 01	*	* .10817936E 02	*
*	9.	* .65735970E 01	*	* .84404221E 01	*
*	10.	* .47865276E 01	*	* .61121655E 01	*
*	11.	* .33667393E 01	*	* .42766514E 01	*
*	12.	* .22674589E 01	*	* .28435144E 01	*
*	13.	* .15418830E 01	*	* .19115672E 01	*
*	14.	* .10447645E 01	*	* .12732239E 01	*
*	15.	* .69175506E 00	*	* .83066821E 00	*
*	16.	* .46617448E 00	*	* .54956889E 00	*
*	17.	* .32348180E 00	*	* .37549603E 00	*



Na gornjem grafiku se nalaze prikazani rezultati izvršenih proračuna u ovom radu, u radu objavljenom u ref. 2. kao i eksperimentalni rezultati.

Vrednosti preseka u HFA "r" forma i nakon popravke u "v" formi (oznaka 2) se poklapaju u okviru tačnosti računa, te je crtan samo jedan grafik. Isto je i sa presekom u RPA "r" i "v" forma.

Kriva sa oznakom 1 predstavlja presek nakon popravke u "r" formi.

## Diskusija rezultata

Diskusiju rezultata je najzgodnije vršiti uz posmatranje grafika na slici 1. (strana 27.).

Očigledno je da popravke, izvršene proračunom polarizacionih dijagrama u 1. i 2. redu teorije perturbacije, predstavljaju glavni deo doprinosa svih RPA dijagrama.

Razlike između vrednosti preseka u "r" i u "v" formi još su prisutne, ali u najbitnijem delu krive, u okolini maksimuma, ta je razlika znatno manja.

Upoređenjem dobijenih rezultata i rezultata koje daje RPA, se može uočiti da svi dijagrami reda višeg od drugog, teže da presek u "v" formi smanje za oko 10% a u "r" formi povećaju za oko 10%. To znači da dijagrami viših redova, koji mogu biti recimo zabranjeni Pauli-jevim izbornim pravilima, ne unose, u proračune po RPA, greške veće od reda procenta što je u okviru greške računa.

Napred izneto znači da je ovim proračunima potvrđena relativno brza konvergencija vrednosti polarizacionih dijagrama a stim i mogućnost primene RPA u proračunima karakteristika atoma.

Relativno neslaganje između dobijenih rezultata i priloženih eksperimentalnih vrednosti preseka se može objasniti činjenicom da je u eksperimentu vršeno merenje preseka fotopobuđenja azota u molekularnom stanju dok su proračunate vrednosti preseka za atom azota.

U cilju još bolje provere napred iznetih stavova izvršen je naknadni proračun doprinosa dijagrama trećeg reda. Rezultati su pokazali da sa zaključci bili tačni jer je vrednost ovih dijagrama za oko 100 puta manja od vrednosti dijagrama drugog reda.

## *Dodatak*

Program je napisan na FORTRAN IV jeziku i može da se koristi za proračun doprinosa dijagrama 1. i 2. reda u "r" i "v" formi kao i preseka fotojonizacije i jačine oscilatora u obe forme.

Radi lakšeg snalaženja u programu napomenimo da je:

SIMP - simpsinovi koeficienti,  
POP - popravke na Simpson-ove koeficiente u okolini pola,  
D1 = -propagator para "unapred u vremenu",  
D2 = -propagator para "unatrag u vremenu",  
OM5 = -dipolni matrični elementi u "r" formi u HFA,  
OM6 = -dipolni matrični elementi u "v" formi u HFA,  
AK = -energija upadnog fotona,  
U = -matrični elementi Coulomb-ove interakcije,  
A = -vrednost polarizacionih dijagrama 1. reda,  
B = -realni deo polarizacionih dijagrama 2. reda,  
T1 = -presek fotojonizacije ili jačina oscilatora u HFA,  
T2 = -presek fotojonizacije ili jačina oscilatora nakon izvršene popravke

Da bi se moglo proveriti, radu je priložen i proračun koji se vrši na početku programa i iz kojeg se vidi da vrednost dijagrama dovoljno brzo konvergira oko 17. tačke.

## PROGRAM ZA PRORACUN DOPRINDOSA ELEKTRONSKIH KORELACIJA

```

DIMENSION U(20,20),PDP(20,20),D1(20,20),D2(20,20),SIMP(20),GR1(20)
*,GR2(20),DM5(20),DM6(20),DM(20),A(20),B(20),C(20),UI(200),C1(20,20)
*),B1(20,20),A1(20,20),AK(20),T1(20),T2(20),T3(20),T4(20)
INTEGER P

```

## ULAZNI PODACI

```

      READ(4,102)(SIMP(I),I=1,17)
102 FORMAT(8F10.8)
      READ(4,101)((POP(I,J),J=1,17),I=1,17)
101 FORMAT(8F10.7)
      READ(4,103)((D1(I,J),J=1,17),I=1,17)
103 FORMAT(8F10.5)
      READ(4,100)(UI(L),L=1,153)
100 FORMAT(8F10.8)
      READ(4,104)((D2(I,J),J=1,17),I=1,17)
104 FORMAT(8F10.7)
      READ(4,455)(DM5(I),DM6(I),I=1,17)
455 FORMAT(8F10.8)
      READ(4,456)(AK(LA),LA=1,17)
456 FORMAT(8F10.8)

```

```

P=1
DO 1001 I=1,17
DO 1002 J=1,I
U(I,J)=U(J,P)
U(J,I)=U(I,J)
P=P+1
CONTINUE
CONTINUE

```

PRODACUN DIIJAGRANA PRVOD REDA ZA TACKU 6. U R-FORMI

```
IM=6  
A(IM)=0.  
WRITE(5,  
FORMAT(1  
WRITE(5,
```

```

      WRITE(5,6010)
6010 FORMAT(1H0,4X,122(1H*),/,5X,1H*,45X,'REALNI DEO DIJAGRAMA PRVOG RE
      *DA!',44X,1H*,/,5X,122(1H*),/,5X,1H*,2X,1HI,2X,1H*,3X,'DIPOLNI MATR.
      * EL.',2X,1H*,2X,'KULONNOVI MATR. EL.',1,2X,1H*,4X,'PROPAGATOR D2',4X
      *,1H*,3X,'SIMPSONOVI KOEF.',3X,1H*,3X,'DIJAGRAM 1. REDA!',3X,1H*,/,5
      **X,122(1H*))
      DD 6 MI=1,17
      A1(IM,MI)=U(IM,MI)*UM5(MI)*D2(IM,MI)*SIMP(MI)/3.
      A(IM)=A(IM)+A1(IM,MI)
      WRITE(5,6020)MI,UM5(MI),U(IM,MI),D2(IM,MI),SIMP(MI),A1(IM,MI)
6020 FORMAT(1H ,4X,1H*,1X,F3.0,1X,1H*,5(4X,E14.8,4X,1H*))
      6 CONTINUE
      GR1(IM)=-A(IM)*100./UM5(IM)
      WRITE(5,501)IM,A(IM),GR1(IM)
501 FORMAT(1H0,5X,F3.0,20X,E15.9,10X,E10.4)

```

```

9      C
0          DO 8 IMA=1,2
1              IF(IMA==2)18,20,18
2      C
3          18 WRITE(5,7100)
4              7100 FORMAT(1H1,10X,' LENGTH (R)=FORMAT')
5              DO 3000 KA=1,17
6                  OM(KA)=OM5(KA)
7              3000 CONTINUE
8                  GO TO 40
9      C
0          20 WRITE(5,7200)
1              7200 FORMAT(1H1,10X,' VELOCITY (V)=FORMAT')
2              DO 3001 KA=1,17
3                  OM(KA)=OM6(KA)
4              3001 CONTINUE
5                  GO TO 40
6      C
7          DIJAGRAM PRVOG REDA
8      C
9          40 WRITE(5,7000)
0              7000 FORMAT(1H0,9X,70(1H*),/,10X,1H*,2X,1HI,2X,1H*,3X,'DIPOLNI MATR. EL
1                  *,',3X,1H*,3X,'DIJAGRAM PRVOG REDA',3X,1H*,2X,'DOPRINOS',2X,1H*,/,1
2                  *0X,70(1H*))
3      C
4          DO 1 IM=1,17
5              A(IM)=0.
6          DO 2 MI=1,17
7              A1(IM,MI)=U(IM,MI)*OM(MI)*D2(IM,MI)*SIMP(MI)/3.
8              A(IM)=A(IM)+A1(IM,MI)
9          2 CONTINUE
0              GR1(IM)=(-A(IM))*100./OM(IM)
1              WRITE(5,7001)IM,OM(IM),A(IM),GR1(IM)
2              7001 FORMAT(1H ,9X,1H*,1X,F3.0,1X,1H*,5X,E14.8,4X,1H*,6X,E14.8,5X,1H*,2
3                  *X,F8.4,2X,1H*)
4          1 CONTINUE
5      C
6          DIJAGRAM DRUGOG REDA
7      C
8          WRITE(5,8000)
9              8000 FORMAT(////////,10X,70(1H*),/,10X,1H*,2X,1HI,2X,1H*,3X,'DIPOLNI MAT
0                  *R. EL.',3X,1H*,2X,'DIJAGRAM DRUGOG REDA',3X,1H*,2X,'DOPRINOS',2X,1
1                  *H*,/,10X,70(1H*))
2      C
3          DO 3 ID=1,17
4              B(ID)=0.
5          DO 4 IB=1,17
6              C(IB)=0.
7          DO 5 IR=1,17
8              C1(IB,IR)=U(IB,IR)*OM(IR)*D1(IB,IR)*(POP(IB,IR)-SIMP(IR))/3.
9              C(IB)=C(IB)+C1(IB,IR)
0          5 CONTINUE
1              B1(ID,IB)=U(ID,IB)*D2(ID,IB)*SIMP(IB)*C(IB)/3.
2              B(ID)=B(ID)+B1(ID,IB)
3          4 CONTINUE
4              GR2(ID)=(-B(ID))*100./OM(ID)
5              WRITE(5,8100)ID,OM(ID),B(ID),GR2(ID)
6              8100 FORMAT(1H ,9X,1H*,1X,F3.0,1X,1H*,5X,E14.8,4X,1H*,6X,E14.8,5X,1H*,2

```

3

MLADIN VORTEX FTN IV

7        \*X,F8,4,2X,1H\*)  
8        3 CONTINUE9        C  
0        C        PRDRACUN PRESEKA NA FOTOJONIZACIJU I JACINE OSCILATORA  
1        C

2        IF(IMA=2)19,21,19

3        C  
4        19 DO 1221 LI=1,3  
5        T1(LI)=1./3. \*AK(LI)\*(OM(LI)\*\*2)  
6        T2(LI)=1./3. \*AK(LI)\*((OM(LI)+A(LI)+B(LI))\*\*2)

7        1221 CONTINUE

8        DO 1111 LI=4,17

9        T1(LI)=2.689 \*AK(LI)\*(OM(LI)\*\*2)

0        T2(LI)=2.689 \*AK(LI)\*((OM(LI)+A(LI)+B(LI))\*\*2)

1        1111 CONTINUE

2        GO TO 50

3        C

4        21 DO 2222 LI=1,3

5        T1(LI)=4./3./AK(LI)\*(OM(LI)\*\*2)

5        T2(LI)=4./3./AK(LI)\*((OM(LI)-A(LI)+B(LI))\*\*2)

7        2222 CONTINUE

8        DO 3333 LI=4,17

9        T1(LI)=10.756/AK(LI)\*(OM(LI)\*\*2)

0        T2(LI)=10.756/AK(LI)\*((OM(LI)-A(LI)+B(LI))\*\*2)

1        3333 CONTINUE

2        GO TO 50

3        C

4        C

5        50 WRITE(5,666)

6        666 FORMAT(1H1,9X,52(1H\*),/,10X,1H\*,2X,1HI,2X,1H\*,3X,'PRESEK U HFA!',3X  
7        \*,1H\*,2X,'PRESEK NAKON POPRAVKE!',2X,1H\*,/,10X,52(1H\*))

8        DO 1112 KA=1,17

9        WRITE(5,667)KA,T1(KA),T2(KA)

0        667 FORMAT(1H ,9X,1H\*,1X,F3.0,1X,1H\*,2X,E14.8,2X,1H\*,6X,E14.8,5X,1H\*)

1        IF(KA=3)1112,1113,1112

2        1113 WRITE(5,1500)

3        1500 FORMAT(1H ,20X,35(1H\*))

4        1112 CONTINUE

5        C

6        C

7        8 CONTINUE

8        STOP

9        END

RRDORS COMPILATION COMPLETE

C

```

***** REALNI DEO DIJAGRAMA PRVOG REDA *****
***** DIPONT MATH. EL. * KULONOVIT KOEF. *****
***** PROPAGATOR D2 * SIMPSONVI KOEF. *****
***** DIJAGRAM 1. REDA *****
***** 1. * 45928717E 00 * 34233794E=01 * 82702804E 00 * 1000000E 01 *
***** 2. * 31859876E 00 * 25288872E=01 * 81018806E 00 * 1000000E 01 *
***** 3. * 23429030E 00 * 19110948E=01 * 80265808E 00 * 1000000E 01 *
***** 4. * 18805132E 01 * 16251672E 00 * 15733498E 00 * 66666663E=01 *
***** 5. * 19084835E 01 * 17954504E 00 * 45760500E 00 * 26666665E 00 *
***** 6. * 18645511E 01 * 20376825E 00 * 71881700E 00 * 13333333E 00 *
***** 7. * 16972742E 01 * 22343063E 00 * 92643189E 00 * 26666665E 00 *
***** 8. * 14494228E 01 * 23225486E 00 * 10770869E 01 * 13333333E 00 *
***** 9. * 11685734E 01 * 22630727E 00 * 11757321E 01 * 26666665E 00 *
***** 10. * 90996194E 00 * 20942575E 00 * 1231521E 01 * 13333333E 00 *
***** 11. * 69672465E 00 * 18663412E 00 * 12546129E 01 * 26666665E 00 *
***** 12. * 52288365E 00 * 15957767E 00 * 12540689E 01 * 13333333E 00 *
***** 13. * 39527977E 00 * 13469702E 00 * 32373118E 01 * 26666665E 00 *
***** 14. * 29634402E 00 * 11147612E 00 * 12099652E 01 * 13333333E 00 *
***** 15. * 22451788E 00 * 9053617E=01 * 11761169E 01 * 26666665E 00 *
***** 16. * 17056392E 00 * 73214650E=01 * 1386471E 01 * 13333333E 00 *
***** 17. * 13193351E 00 * 59578642E=01 * 10995331E 01 * 26666665E 00
***** .1505888095E 00
***** .8076E 01

```

## *Literatura*

1. M.Ya. Amusia, N.A.Cherepkov and L.V. Chernysheva,  
Zh.Eksperim. i Teor. Fiz. 60, 160 (1971)
2. N.A. Cherepkov, L.V. Chernysheva and V. Radojević and  
I. Pavlin, "Many-electron Correlations in the Photoioniza-  
tion of a Nitrogen Atom"  
Can.Jour. of Phy., 52, 349 (1974)
3. D. R. Hartree,"The Calculation of Atomic Structures",  
John Wiley & Sons Inc., 1957.
4. A. Messiah, "Quantum Mechanics" ,  
North-Holland Publishing Co.,Amsterdam, 1969.
5. A.S. Davidiv, Kvantna Mehanika" (ruski)  
Nauka Moskva, 1973.