UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	25 СЕП 2000
ОРГАНИЗ.ЈЕД.	БРОЈ
060 3	9/236

Marijana Kirćan

PRORAČUN OBLIKA SPEKTRALNIH LINIJA NEUTRALNOG VODONIKA U APROKSIMACIJI NAJBLIŽEG SUSEDA

- Diplomski rad -

Novi Sad, 2000.

Ovaj diplomski rad je urađen zahvaljujući saradnji dve katedre: katedre za teorijsku fiziku i katedre za fizičku elektroniku.

Želela bih da se na ovom mestu zahvalim onima koji su mi pomogli u izradi diplomskog rada i omogućili da on bude završen i dobije svoju sadašnju formu. Iskrenu zahvalnost upućujem mr Nikolić Draganu koji je predložio temu za rad, osmislio ga u potpunosti i prikupio teško dostupnu literaturu. Takođe mu se zahvaljujem na ukazanom poverenju i vremenu, kao i na pružanju nesebične pomoći i podrške.

Posebno bih htela da se zahvalim i svom mentoru prof. dr Kapor Darku na ukazanim nepravilnostima i korisnim sugestijama u organizovanju samog rada. Takođe se zahvaljujem drugaru (kolegi) Jokić Vladimiru na rešavanju svih problema koje je LaTeX pred mene postavljao, čime je doprineo poboljšanju izgleda ovog rada.

Uvod

Ovaj diplomski rad je napisan na osnovu dva rada [1] i [2], u kojima su razmatrani uzroci za asimetriju spektralnih linija atoma vodonika. Osnovni cilj je bio da se provere rezultati ove teorije i da se izvedu ključne formule koje se u radovima pojavljuju. Teorija vezana za izračunavanje štarkovskih profila spektralnih linija atoma vodonika je veoma značajna, jer se poređenje eksperimentalnih i teorijskih štarkovskih profila vodonikovih spektralnih linija koristi kao važan metod u dijagnostici plazme. Pod oblikom spektralne linije odnosno profilom, podrazumeva se spektralna raspodela intenziteta svake pojedine štarkovske komponente multipleta, uz uračunavanje mnoštva različitih efekata (dinamika jona, pomeraj i asimetrija spektralne linije itd.).

Rad se sastoji iz dva dela od kojih je prvi kvantno-mehanički i u njemu je rešeno kvantovanje atoma vodonika u spoljašnjem električnom polju koje potiče od najbližeg suseda, odnosno pozitivnog jona. Ceo račun je sproveden u paraboličkom koordinatnom sistemu. Prednost paraboličkih koordinata u odnosu na sferne koordinate se ogleda u tome što Štarkov efekat kod atoma vodonika zbog degeneracije njegovih nivoa po orbitalnom kvantnom broju l, već u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije delimično otklanja degeneraciju energijskog nivoa. Zbog toga se mora dosledno primeniti teorija perturbacije degenerisanog energijskog nivoa, što dodatno komplikuje račun. S druge strane, u paraboličkom koordinatnom sistemu prva aproksimacija dovodi do dijagonalizacije matrice operatora perturbacije, što u mnogome olakšava dalji rad. Naime, na dijagonalne elemente ove matrice se može primeniti perturbacioni račun nedegenerisanog energijskog nivoa koji je mnogo jednostavniji za analizu i račun. Osnovu kvantno-mehaničkog dela ovog rada čini teorijski rad [1] koji je prvi ukazao na moguće uzorke asimetrije vodonikovih linija. Složena struktura štarkovskih profila i brojni efekti interakcije emitujuće čestice sa svojim okruženjem, praktično onemogućavaju identifikaciju porekla uočene asimetrije spektralne raspodele intenziteta. Do pojave rada [1] svi teorijski proračuni su za rezultat imali simetrične profile vodonikovih linija, što je naročito otstupalo u slučaju linije H-β iz Balmerove serije, kao najčešće korišćene linije za dijagnostiku plazme.

Druga polovina ovog rada je zasnovana na rezultatima statističke fizike i u njemu se određuje oblik profila spektralne linije atoma vodonika kada se on nalazi u plazmi. Kao osnova za ovaj statistički deo, poslužio je rad [2]. U ovom radu je po prvi put na konzistentan način izvedena opšta formula za asimetrične profile vodonikovih spektralnih linija i po prvi put je pokazano da je uzrok asimetrije profila upravo nehomogenost jonskog mikropolja u plazmi. Pri tome su korišćeni i neki drugi radovi vezani za efekte širenja spektralnih linija u plazmi pod dejstvom elastičnih sudara emitera sa elektronima. Vodeći se tim rezultatima, u ovom diplomskom radu su detaljno navedeni proračuni oblika spektralnih linija vodonika. Pri tome se širenje spektralnih linija pod uticajem jona i elektrona opisuje u okvirima kvazistatičke aproksimacije za jone i udarne za elektrone. Plazma se smatra makroskopski homogenom i stacionarnom, dok se sve turbulencije zanemaruju. Pokazano je da osnovnu ulogu u asimetriji igraju kvadrupolna interakcija, kvadratičan Štarkov efekat, oktupolna interakcija kao i linearna popravka (po jačini jonskog električnog polja) na dipolni moment štarkovskih komponenti odgovarajućih multipleta. Pri tome su popravke koje unosi kvadrupolna interakcija važne kako za energiju štarkovskih komponenti, tako i za njihove intenzitete.

Proračuni u ovom radu su prilično detaljni, a to je učinjeno zbog toga što su u radovima [1] i [2] primećene neke nedoslednosti i greške. Naime, da bi se ovi rezultati mogli koristiti za upoređivanje teorijskih i eksperimentalnih rezultata, moraju se korigovati i jedino u tom slučaju ima smisla govoriti o poređenju eksperimenta i teorije. Sve uočene greške navedene su u dodatku H ovog diplomskog rada.

S druge strane, jedan od ciljeva ovog rada je da pokaže koliko se značajnih rezultata može izvesti korišćenjem znanja iz specijalnih teorijskih kurseva na redovnim studijama. Kada je u radu bilo neophodno koristiti rezultate za čija bi izvođenja bilo potrebno dodatno proučavanje, ti rezultati se jednostavno citirani iz literature.

ФИЗИЧКИ ФАКУЛТЕТ
БИБЛИОТЕКА
НОВИ САД

Sadržaj

I Šredingerova jednačina za izolovan atom vodonikovog tipa 5

1 Rešavanje Šredingerove jednačine u paraboličkim koordinatama 7
1.1 Laplasov operator u paraboličkim koordinatama 8
1.2 Šredingerova jednačina u paraboličkim koordinatama 9
1.3 Normiranje paraboličke talasne funkcije 17

II Proučavanje Štarkovog efekta atoma vodonika u aproksimaciji najbližeg suseda 23

2 Elektrostatički potencijal u aproksimaciji najbližeg suseda 25

3 Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^2 29
3.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^2 29
3.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(2)}|n\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ 30
3.3 Vrednost energije u aproksimaciji do λ^2 34

4 Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^3 35
4.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^3 35
4.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ 36
4.2.1 Dijagonalni matrični elementi $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$ 38
4.2.2 Nedijagonalni matrični elementi $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ 43
4.3 Vrednost energije u aproksimaciji do λ^3 46

5 Talasna funkcija u aproksimaciji do λ 47
5.1 Izraz za talasnu funkciju u aproksimaciji do λ 47

6 Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^4 49
6.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^4 50
6.1.1 Izračunavanje člana koji potiče od kvadratičnog Štarkovog efekta 50
6.1.2 Izračunavanje člana koji potiče od kvadrupolne interakcije 50
6.1.3 Izračunavanje člana koji potiče od oktupolne interakcije 52
6.2 Vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^4 58

III Pomeraji i intenziteti pojedinih Štarkovih komponenti – poreklo asimetrije vodonikovih spektralnih linija 59

7 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti 61
7.0.1 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u skali frekvencija 61
7.0.2 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u skali talasnih dužina 63
7.0.3 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u bezdimenzionoj skali 63

8 Nalaženje matričnih elemenata električnog dipolnog momenta 65
8.1 Određivanje izbornih pravila za kvantni broj m 66
8.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1, n_2, m\}|z|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ 67
8.3 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1, n_2, m\}|x|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ 70

9 Određivanje intenziteta Štarkovih komponenti **73**
9.1 Intenzitet spektralne linije u dipolnoj aproksimaciji 73
9.2 Određivanje intenziteta Štarkovih komponenti u aproksimaciji do λ 75

IV Teorija asimetrije Štarkovih profila vodonikovih linija u gustoj plazmi **81**

10 Konture Štarkovih komponenti **83**
10.1 Konture Štarkovih komponenti pri stalnoj jačini električnog polja jona i tenzora nehomogenosti jonskog polja 83

11 Potpuni profili vodonikovih spektralnih linija **87**
11.1 Potpuni profili vodonikovih spektralnih linija sa uračunavanjem uticaja nehomogenosti jonskog polja 87
11.2 Određivanje operatora transformacije $\hat{R}$ 88
11.3 Transformisan oblik ukupnog profila vodonikovih spektralnih linija 91

12 Profil bočnih komponenti **95**
12.1 Profil bočnih komponenti sa uračunavanjem nehomogenosti jonskog polja 95
12.2 Transformacija matričnih elemenata operatora $\hat{U}$ 97

13 Određivanje funkcije raspodele jačine jonskog polja W **99**
13.1 Slučaj homogenog jonskog polja 100
13.2 Slučaj nehomogenog jonskog polja 105

14 Izračunavanje profila bočnih spektralnih linija **107**
14.1 Profil centralnih komponenti sa uračunavanjem nehomogenosti jonskog polja 126

V Dodaci **131**

A Određivanje izraza za svojstvene talasne funkcije i svojstvene energije u teoriji perturbacije **133**
A.1 Svojstvene talasne funkcije i svojstvene energije degenerisanog energijskog nivoa na koji deluje perturbacija oblika $\hat{V} = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \ldots$ 133

B Određivanje popravke na energiju usled kvadratičnog Štarkovog efekta **141**
B.1 Izvođenje popravke na energiju za atom u konstantnom spoljašnjem električnom polju 141

C Izračunavanje matričnih elemenata koordinata z i x **159**
C.1 Primer izračunavanja matričnog elementa z koordinate 159
C.2 Primer izračunavanja matričnog elementa x koordinate 162

D Izračunavanje intenziteta štarkovskih komponenti u aproksimaciji do λ **163**
D.1 Primeri izračunavanja prve popravke na intenzitet štarkovskih komponenti 163
D.2 Primer izračunavanja neperturbovanog intenziteta štarkovske komponente 164

E Dokazivanje relacije koju zadovoljavaju prvi momenti funkcije raspodele W **167**

F Određivanje koeficijenata koji figurišu u izrazu za $C_\alpha(\vec{\rho})$ **173**
F.1 Izračunavenje $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$ 173

G Određivanje prvih momenata funkcije raspodele jačine jonskog polja W **183**

H Posebne napomene **193**

Bibliografija **195**

Deo I

Šredingerova jednačina za izolovan atom vodonikovog tipa

Poglavlje 1

Rešavanje Šredingerove jednačine u paraboličkim koordinatama

U ovom poglavlju biće rešen svojstveni problem hamiltonijana izolovanog atoma vodonikovog tipa u paraboličkim koordinatama [3]. Ovaj problem podrazumeva rešavanje Šredingerove[1] jednačine za Kulonov[2] oblik potencijala koji potiče od jezgra atoma vodonikovog tipa čije je naelektrisanje $+Ze$. Smatra se da jezgro atoma vodonikovog tipa ima beskonačno veću masu od elektrona, pa se umesto problema dva tela praktično rešava problem kretanja elektrona oko nepomičnog jezgra. Takođe se naelektrisanje jezgra mora smatrati tačkastim. Parabolički koordinatni sistem sa promenljivama ξ, η i φ je veoma pogodan ne samo za rešavanje ovog problema nego i za slučaj kada se atom nalazi u spoljašnjem električnom polju. Laplasov[3] operator u paraboličkim koordinatama ima sledeći oblik:

$$\Delta = \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Pokazuje se da ovaj oblik Laplasovog operatora omogućuje da se svojstvena talasna funkcija $\psi(\xi,\eta,\varphi)$ traži u obliku proizvoda tri funkcije od kojih svaka zavisi samo od jedne promenljive. Pošto je omogućeno razdvajanje promenljivih, Šredingerova jednačina se raspada na tri diferencijalne jednačine od kojih su diferencijalne jednačine po promenljivama ξ i η istog oblika. Rešavanje ovih diferencijalnih jednačina daje sledeći oblik za talasnu funkciju $\psi(\xi,\eta,\varphi)$:

$$\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) \equiv |n\{n_1,n_2,m\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi n}}\frac{\sqrt{n_1!\cdot n_2!}\cdot\varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_2+m)!]^3}}\cdot(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}\cdot\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot\exp(\pm im\varphi),$$

gde su n_1, n_2 i m parabolički kvantni brojevi koji u potpunosti definišu glavni kvantni broj n i to kao $n = n_1+n_2+m+1$. Funkcije $L^\gamma_\beta(\rho)$ predstavljaju asocirane Lagerove[4] polinome, a veličina ε_n je bezdimenziona veličina koja je direktno povezana sa energijom stanja sa glavnim kvantnim brojem n i ima oblik:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{m_e e^2}{\hbar^2}\cdot\frac{Z}{n}.$$

Vrednost energije atoma vodonikovog tipa koja odgovara stanju sa glavnim kvantnim brojem n jednaka je:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}, \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

Takođe se pokazuje da je energijski nivo sa glavnim kvantnim brojem n, degenerisano n^2 puta.

[1] Erwin Schrödinger (1887-1961)
[2] Charles Augustin de Coulomb (1736-1806)
[3] Pierre-Simon Laplace (1749-1827)
[4] Edmond Laguerre (1834-1886)

1.1 Laplasov operator u paraboličkim koordinatama

Poznato je iz matematičke analize [4], da se Laplasov operator može predstaviti u sledećem obliku, koristeći pri tom generalisane koordinate q_i i odgovarajuće Lameove[5] koeficijente h_{q_i} kao:

$$\Delta \equiv \frac{1}{h_{q_1} \cdot h_{q_2} \cdot h_{q_3}} \cdot \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\frac{h_{q_1} \cdot h_{q_2} \cdot h_{q_3}}{h_{q_i}^2} \cdot \frac{\partial}{\partial q_i} \right],$$

pri čemu važi

$$h_{q_i}^2 = \sum_{s=1}^{3} \left(\frac{\partial x_s}{\partial q_i} \right)^2.$$

Koordinate x_s predstavljaju koordinate Dekartovog[6] koordinatnog sistema. Element zapremine izražen u koordinatnom sistemu kojeg karakterišu generalisane koordinate q_i, dat je relacijom:

$$\mathrm{d}\tau \equiv h_{q_1} h_{q_2} h_{q_3} \mathrm{d}^3 q.$$

Uvodimo nove koordinate ξ, η, φ koje su sa koordinatama Dekartovog koordinatnog sistema x_1, x_2, x_3 povezane relacijama:

$$x_1 = x = \sqrt{\xi\eta} \cos\varphi, \tag{1.1}$$

$$x_2 = y = \sqrt{\xi\eta} \sin\varphi, \tag{1.2}$$

$$x_3 = z = \frac{1}{2}(\xi - \eta), \tag{1.3}$$

a nazivaju se paraboličkim koordinatama. Inverzijom prethodnih jednačina, mogu se dobiti relacije koje predstavljaju zavisnost Dekartovih koordinata od paraboličkih:

$$q_1 = \xi = 2x_3 + \eta = \frac{1}{2}(\xi - \eta) + x_3 + \eta = \frac{1}{2}(\xi + \eta) + x_3 = r + x_3,$$

$$q_2 = \eta = \xi - 2x_3 = \xi - \frac{1}{2}(\xi - \eta) - x_3 = \frac{1}{2}(\xi + \eta) - x_3 = r - x_3,$$

$$q_3 = \varphi = \frac{x_2}{x_1},$$

gde je $r = (\xi + \eta)/2$. Da bismo odredili oblik Laplasijana u paraboličkim koordinatama, najpre moramo odrediti parcijalne izvode Dekartovih koordinata po novouvedenim paraboličkim:

$$\frac{\partial x_1}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \cos\varphi, \qquad \frac{\partial x_2}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\eta}{\xi}} \sin\varphi, \qquad \frac{\partial x_3}{\partial \xi} = \frac{1}{2},$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial \eta} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \cos\varphi, \qquad \frac{\partial x_2}{\partial \eta} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\xi}{\eta}} \sin\varphi, \qquad \frac{\partial x_3}{\partial \eta} = -\frac{1}{2},$$

$$\frac{\partial x_1}{\partial \varphi} = -\sqrt{\xi\eta} \sin\varphi, \qquad \frac{\partial x_2}{\partial \varphi} = \sqrt{\xi\eta} \cos\varphi, \qquad \frac{\partial x_3}{\partial \varphi} = 0.$$

Pomoću izračunatih parcijalnih izvoda, određujemo Lameove koeficijente paraboličkih koordinata:

$$h_\xi^2 = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_3}{\partial \xi}\right)^2,$$

$$h_\eta^2 = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_3}{\partial \eta}\right)^2,$$

$$h_\varphi^2 = \left(\frac{\partial x_1}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_2}{\partial \varphi}\right)^2 + \left(\frac{\partial x_3}{\partial \varphi}\right)^2,$$

odnosno,

$$h_\xi^2 = \frac{1}{4}\frac{\eta}{\xi} \cos^2\varphi + \frac{1}{4}\frac{\eta}{\xi} \sin^2\varphi + \frac{1}{4} = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{\eta}{\xi}\right), \qquad h_\xi = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{\eta}{\xi}},$$

$$h_\eta^2 = \frac{1}{4}\frac{\xi}{\eta} \cos^2\varphi + \frac{1}{4}\frac{\xi}{\eta} \sin^2\varphi + \frac{1}{4} = \frac{1}{4}\left(1 + \frac{\xi}{\eta}\right), \qquad h_\eta = \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{\xi}{\eta}},$$

$$h_\varphi^2 = \xi\eta \sin^2\varphi + \xi\eta \cos^2\varphi = \xi\eta, \qquad h_\varphi = \sqrt{\xi\eta}.$$

[5] Gabriel Lamé (1795-1870)
[6] René Descartes (1596-1650)

Element zapremine se dobija na osnovu relacija za Lameove koeficijente:

$$d\tau = h_\xi h_\eta h_\varphi \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot d\varphi,$$

$$d\tau = \frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{\eta}{\xi}} \cdot \frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{\xi}{\eta}} \cdot \sqrt{\xi\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot d\varphi,$$

$$d\tau = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{\xi+\eta}{\xi}} \cdot \sqrt{\frac{\eta+\xi}{\eta}} \cdot \sqrt{\xi\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot d\varphi.$$

Konačno se dobija izraz za element zapremine $d\tau$ kao:

$$d\tau = \frac{1}{4}(\xi+\eta) \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot d\varphi. \tag{1.4}$$

Uvrštavanjem dobijenih relacija u izraz za Laplasov operator, imamo:

$$\Delta = \frac{1}{h_\xi h_\eta h_\varphi}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{h_\xi h_\eta h_\varphi}{h_\xi^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\frac{h_\xi h_\eta h_\varphi}{h_\eta^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{h_\xi h_\eta h_\varphi}{h_\varphi^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right],$$

$$\Delta = \frac{1}{\frac{1}{4}(\xi+\eta)}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\frac{\frac{1}{4}(\xi+\eta)}{\frac{1}{4}(1+\frac{\eta}{\xi})}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\frac{\frac{1}{4}(\xi+\eta)}{\frac{1}{4}(1+\frac{\xi}{\eta})}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{\frac{1}{4}(\xi+\eta)}{\eta\xi}\cdot\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right].$$

Konačno, izraz za Laplasov operator u paraboličkim koordinatama je:

$$\Delta = \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{1.5}$$

Može se uočiti da je ovaj operator simetričan u odnosu na koordinate ξ i η, pa će i rešavanje Šredingerove jednačine biti simetrično u odnosu na ove koordinate.

1.2 Šredingerova jednačina u paraboličkim koordinatama

Razdvajanje promenljivih

Oblik Laplasovog operatora nalaže da se talasna funkcija traži u obliku proizvoda dve funkcije u i v, gde prva zavisi od koordinata ξ i η, a druga samo od φ:

$$\psi = u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)$$

Šredingerova jednačina za atom vodonika ima sledeći oblik:

$$\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{r}\right) = 0.$$

S obzirom da je oblik Laplasovog operatora u paraboličkim koordinatama određen, preostaje samo da se izrazi koordinata r preko paraboličkih koordinata:

$$r = \sqrt{x^2+y^2+z^2} = \sqrt{\xi\eta\cos^2\varphi + \xi\eta\sin^2\varphi + \frac{1}{4}(\xi-\eta)^2} = \sqrt{\xi\eta + \frac{1}{4}(\xi-\eta)^2},$$

$$r = \sqrt{\xi\eta + \frac{1}{4}(\xi^2 - 2\xi\eta + \eta^2)} = \frac{1}{2}\sqrt{4\xi\eta + \xi^2 - 2\xi\eta + \eta^2},$$

$$r = \frac{1}{2}\sqrt{\xi^2 + 2\xi\eta + \eta^2} = \frac{1}{2}(\xi+\eta), \tag{1.6}$$

jer je $\xi > 0$ i $\eta > 0$. Da bi se pojednostavilo rešavanje Šredingerove jednačine, potrebno je Laplasijan predstaviti kao zbir dva Laplasova operatora:

$$\Delta = \Delta_{(\xi,\eta)} + \Delta_{(\varphi)},$$

gde su

$$\Delta_{(\xi,\eta)} = \frac{4}{\xi+\eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right] = \frac{4}{\xi+\eta}(\Delta_{(\xi)} + \Delta_{(\eta)}), \tag{1.7}$$

$$\Delta_{(\varphi)} = \frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}. \tag{1.8}$$

Oznaka u indeksu ukazuje na promenljive koje figurišu u operatoru u vidu parcijalnih izvoda. Uvrštavanjem izraza za svojstvenu funkciju i Laplasovog operatora u Šredingerovu jednačinu, dobijamo:

$$[\Delta_{(\xi,\eta)} + \Delta_{(\varphi)}]u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi) = 0.$$

Operator $\Delta_{(\xi,\eta)}$ deluje na funkciju $u(\xi,\eta)$, a $\Delta_{(\varphi)}$ na $v(\varphi)$:

$$v(\varphi)\cdot\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + v(\varphi)\cdot\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta) + u(\xi,\eta)\cdot\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) = 0,$$

$$v(\varphi)\left[\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\right] + u(\xi,\eta)\cdot\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) = 0.$$

Poslednju jednačinu je neophodno pomnožiti članom:

$$\frac{\xi\eta}{u(\xi,\eta)v(\varphi)},$$

da bi se funkcije $u(\xi,\eta)$ i $v(\varphi)$ mogle razdvojiti na različitim stranama jednačine,

$$\frac{\xi\eta}{u(\xi,\eta)}\left[\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\right] = -\frac{\xi\eta}{v(\varphi)}\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) \equiv m^2, \tag{1.9}$$

gde je $m \geq 0$. Pošto leva strana jednačine zavisi samo od promenljivih ξ i η, a desna od promenljive φ, obe strane moraju biti jednake konstanti koja je u ovom slučaju označena sa m^2. Na ovaj način su razdvojene promenljive u Šredingerovoj jednačini, što znači da se posebno rešava zavisnost od promenljivih ξ i η, a posebno od φ.

Rešavanje dela jednačine zavisnog od promenljive φ

Prvo ćemo posmatrati desnu stranu jednačine (1.9), koja zavisi samo od promenljive φ i ima oblik:

$$-\frac{\xi\eta}{v(\varphi)}\cdot\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) = m^2,$$

$$\xi\eta\cdot\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) = -v(\varphi)m^2.$$

Uzimajući u obzir izraz za Laplasov operator dat jednačinom (1.8), dobija se homogena diferencijalna jednačina drugog reda sa konstantnim koeficijentima:

$$\xi\eta\cdot\Delta_{(\varphi)}v(\varphi) = -m^2v(\varphi),$$

$$\xi\eta\frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2 v(\varphi)}{\partial\varphi^2} = -m^2v(\varphi).$$

Pošto funkcija $v(\varphi)$ zavisi samo od jedne promenljive, parcijalni izvodi se zamenjuju totalnim:

$$\frac{\mathrm{d}^2v(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} = -m^2v(\varphi),$$

$$\frac{\mathrm{d}^2v(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} + m^2v(\varphi) = 0.$$

Rešenje ove diferencijalne jednačine je:

$$v(\varphi) = \exp(\pm im\varphi), \qquad m \geq 0. \tag{1.10}$$

Na ovaj način je određena zavisnost funkcije $v(\varphi)$ od promenljive φ.

Rešavanje dela jednačine zavisnog od promenljivih ξ i η

Preostalo je da posmatramo levu stranu jednačine (1.9), koja zavisi od promenljivih ξ i η i ima oblik:

$$\frac{\xi\eta}{u(\xi,\eta)}\left[\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\right] = m^2,$$

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\right] = m^2u(\xi,\eta),$$

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi,\eta)}u(\xi,\eta) + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + 2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)u(\xi,\eta)\right] - m^2u(\xi,\eta) = 0.$$

Mogu se grupisati svi članovi koji množe funkciju $u(\xi,\eta)$:

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi,\eta)}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)-\frac{m^2}{\xi\eta}\right]u(\xi,\eta)=0.$$

Uzimajući u obzir izraz za Laplasov operator dat jednačinom (1.7), jednačina dobija oblik:

$$\xi\eta\left[\frac{4}{\xi+\eta}(\Delta_{(\xi)}+\Delta_{(\eta)})+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)-\frac{m^2}{\xi\eta}\right]u(\xi,\eta)=0.$$

Obe strane jednačine se množe članom:

$$\frac{1}{4}(\xi+\eta),$$

da bi se dobio pogodan izraz za rešavanje diferencijalne jednačine. Nakon sređivanja, imamo:

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi)}+\Delta_{(\eta)}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{\xi+\eta}{4}\left(E+2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)-\frac{m^2}{\xi\eta}\frac{\xi+\eta}{4}\right]u(\xi,\eta)=0,$$

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi)}+\Delta_{(\eta)}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\frac{\xi+\eta}{4}\left(E+2\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Ze^2}{\xi+\eta}\right)-\frac{m^2}{4}\left(\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\xi}\right)\right]u(\xi,\eta)=0. \tag{1.11}$$

Dobijena diferencijalna jednačina (1.11) zavisi od obe promenljive ξ i η, pa je pogodno izvršiti transformaciju koja će razdvojiti promenljive i time olakšati rešavanje diferencijalne jednačine. U tom cilju ćemo naelektrisanje jezgra Z predstaviti kao zbir dva cela broja:

$$Z=Z_1+Z_2, \tag{1.12}$$

gde Z_1 i Z_2 ne moraju biti međusobno jednaki. Zamenom (1.12) u (1.11) dobijamo:

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi)}+\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}(\xi+\eta)E+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}e^2(Z_1+Z_2)-\frac{m^2}{4}\left(\frac{1}{\eta}+\frac{1}{\xi}\right)\right]u(\xi,\eta)=0,$$

$$\xi\eta\left[\Delta_{(\xi)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\xi+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\xi}+\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\eta+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\eta}\right]u(\xi,\eta)=0. \tag{1.13}$$

Ako pretpostavimo da je $\xi\eta\neq 0$, jednačinu (1.13) možemo podeliti sa $\xi\eta$:

$$\left[\Delta_{(\xi)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\xi+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\xi}+\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\eta+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\eta}\right]u(\xi,\eta)=0. \tag{1.14}$$

S obzirom da Laplasijan čine dva člana od kojih prvi $\Delta_{(\xi)}$ deluje samo na funkcije zavisne od promenljive ξ, a drugi $\Delta_{(\eta)}$ samo na funkcije zavisne od promenljive η, opravdano je predstaviti funkciju $u(\xi,\eta)$ kao proizvod dve funkcije:

$$u(\xi,\eta)=u_1(\xi)u_2(\eta). \tag{1.15}$$

Zamenom (1.15) u jednačinu (1.14), dobijamo:

$$\left[\Delta_{(\xi)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\xi+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\xi}+\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\eta+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\eta}\right]u_1(\xi)u_2(\eta)=0,$$

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\left[\Delta_{(\xi)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\xi+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\xi}\right]u_1(\xi)+\frac{1}{u_2(\eta)}\left[\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{2\hbar^2}E\eta+\frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2}{4\eta}\right]u_2(\eta)=0.$$

Gornja relacija je zadovoljena samo ako su oba člana jednaka nuli:

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\left[\Delta_{(\xi)}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi+\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2\hbar^2}{4m_e\xi}\right)\right]u_1(\xi)=0,$$

$$\frac{1}{u_2(\eta)}\left[\Delta_{(\eta)}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta+\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2\hbar^2}{4m_e\eta}\right)\right]u_2(\eta)=0,$$

odnosno,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi+\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2\hbar^2}{4m_e\xi}\right)u_1(\xi)=0, \tag{1.16}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right)+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta+\frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{m^2\hbar^2}{4m_e\eta}\right)u_2(\eta)=0. \tag{1.17}$$

Na ovaj način su dobijene dve diferencijalne jednačine sa totalnim, a ne parcijalnim izvodima, jer funkcije $u_1(\xi)$ i $u_2(\eta)$ zavise samo od jedne promenljive. Pored toga, ove jednačine su potpuno istog oblika pa je neophodno rešavati samo jednu od njih, dok će druga imati rešenje istog oblika. Dakle, jednačina koju bi trebalo rešiti je:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2\hbar^2}{4m_\mathrm{e}\xi}\right)u_1(\xi) = 0. \tag{1.18}$$

Da bi se pojednostavilo rešavanje homogene diferencijalne jednačine drugog reda (1.18), neophodno je posmatrati njeno asimptotsko ponašanje za $\xi \to +\infty$ i za $\xi \to 0$. I u jednom i u drugom slučaju funkcija $u_1(\xi)$ mora težiti nuli, jer to zahtevaju granični uslovi vezani za svojstvenu funkciju $\psi(\xi, \eta, \varphi)$. Naime, kvadrat modula talasne funkcije mora biti konačan, da bi ona mogla da se normira. Diferencijalna jednačina za $u_1(\xi)$, (1.18), može se razvijanjem prvog člana prikazati kao:

$$\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + \xi\frac{\mathrm{d}^2u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2\hbar^2}{4m_\mathrm{e}\xi}\right)u_1(\xi) = 0.$$

Asimptotsko rešenje za $\xi \to +\infty$: U poslednjoj diferencijalnoj jednačini se mogu zanemariti svi članovi koji nisu proporcionalni ξ, kao i oni koji su obrnuto proporcionalni ξ, odnosno zadržavamo samo dovoljno velike članove:

$$\begin{aligned} &\xi\frac{\mathrm{d}^2u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\frac{1}{2}E\xi u_1(\xi) \approx 0, \\ &\frac{\mathrm{d}^2u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\frac{1}{2}Eu_1(\xi) \approx 0. \end{aligned} \tag{1.19}$$

Dobijena je homogena diferencijalna jednačina drugog reda sa konstantnim koeficijentima. Ako sa a označimo veličinu:

$$a = \sqrt{-\frac{m_\mathrm{e}E}{2\hbar^2}},$$

jednačina (1.19) postaje

$$\frac{\mathrm{d}^2u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2} - a^2u_1(\xi) = 0. \tag{1.20}$$

Znak "$-$" ispod korena je uzet u obzir, jer tražimo vezana stanja, a energija E vezanih stanja u atomu vodonikovog atoma je uvek negativna ($E < 0$), pa je tako određena veličina a realan broj. Rešenje jednačine (1.20) ima oblik:

$$u_1(\xi) = \exp(\pm a\xi).$$

Preostaje još da se razmotri problem određivanja znaka u ovom rešenju. Da bi se to postiglo neophodno je posmatrati funkciju za $\xi \to +\infty$ i zahteveti da ona teži nuli:

$$\lim_{\xi\to+\infty} u_1(\xi) = 0.$$

Ovaj uslov je zadovoljen samo ako je u eksponentu znak $-$, pa je asimptotsko rešenje za $\xi \to +\infty$ dato izrazom:

$$\lim_{\xi\to+\infty} u_1(\xi) = \exp(-a\xi).$$

Pogodno je zbog daljeg izvođenja uvesti veličinu ε:

$$\varepsilon = +\sqrt{-\frac{2m_\mathrm{e}E}{\hbar^2}} \equiv 2a. \tag{1.21}$$

Imajući u vidu izraz za veličinu ε, asimptotsko rešenje je dato sledećom relacijom:

$$\lim_{\xi\to+\infty} u_1(\xi) = \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi). \tag{1.22}$$

Asimptotsko rešenje za $\xi \to 0$: Ako posmatramo asimptotsko ponašanje diferencijalne jednačine (1.18) za $\xi \to 0$, možemo zanemariti sve članove koji su proporcionalni ili ne sadrže ξ, a zadržati one koji su obrnuto proporcionalni ξ, dok prvi član moramo zadržati, jer u protivnom ne možemo odrediti ponašanje prvog izvoda:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) - \frac{m_e}{\hbar^2}\frac{m^2\hbar^2}{4m_e\xi}u_1(\xi) \approx 0,\\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) - \frac{m^2}{4\xi}u_1(\xi) \approx 0.
\end{aligned} \tag{1.23}$$

Rešenje dobijene diferencijalne jednačine se traži u obliku stepene funkcije $u_1(\xi) = \xi^n$, gde se n bira tako da obezbeđuje uslov:

$$\lim_{\xi\to 0} u_1(\xi) = 0. \tag{1.24}$$

Uvrštavanjem $u_1(\xi) = \xi^n$ u (1.23), imamo:

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}\xi^n}{\mathrm{d}\xi}\right) - \frac{m^2}{4\xi}\xi^n = 0,\\
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}(n\xi^n) - \frac{m^2}{4}\xi^{n-1} = 0,\\
&n^2\xi^{n-1} - \frac{m^2}{4}\xi^{n-1} = 0,\\
&\left(n^2 - \frac{m^2}{4}\right)\xi^{n-1} = 0.
\end{aligned}$$

Poslednja relacija je zadovoljena samo ako je ispunjen uslov:

$$\begin{aligned}
&n^2 - \frac{m^2}{4} = 0,\\
&n^2 = \frac{m^2}{4},\\
&n = \pm\sqrt{\frac{m^2}{4}} = \pm\frac{m}{2}.
\end{aligned}$$

Preostaje još da se razmotri problem određivanja znaka u ovom rešenju, slično kao i u prethodnom slučaju za $\xi \to +\infty$. Iz zahteva da funkcija $u_1(\xi)$ teži nuli za $\xi \to 0$, zaključujemo da je $n > 0$, odnosno:

$$n = +\frac{m}{2}.$$

Na ovaj način smo pronašli i drugo asimptotsko rešenje koje ima sledeći oblik:

$$\lim_{\xi\to 0} u_1(\xi) = \xi^{\frac{m}{2}}. \tag{1.25}$$

Nalaženje asimptotskih rešenja za $\xi \to +\infty$ i $\xi \to 0$, omogućuje da funkciju $u_1(\xi)$ tražimo u sledećem obliku:

$$u_1(\xi) = \xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)f_1(\xi).$$

Činioci $\xi^{\frac{m}{2}}$ i $\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)$ obezbeđuju konvergenciju funkcije $u_1(\xi)$, a funkcija $f_1(\xi)$ se određuje tako da bude zadovoljena diferencijalna jednačina (1.18).

Određivanje funkcije $f_1(\xi)$: Da bismo odredili oblik funkcije $f_1(\xi)$, prvo ćemo izračunati sve članove koji figurišu u diferencijalnoj jednačini (1.18). Najpre određujemo prvi izvod funkcije $u_1(\xi)$:

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)f_1(\xi)\right),\\
\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} &= \frac{m}{2}\xi^{\frac{m}{2}-1}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)f_1(\xi) - \xi^{\frac{m}{2}}\frac{1}{2}\varepsilon\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)f_1(\xi) + \xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi},\\
\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} &= \xi^{\frac{m}{2}-1}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left(\frac{m}{2}f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) + \xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right).
\end{aligned}$$

Sledeći član nalazimo tako što prethodni izraz pomnožimo sa ξ, a potom diferenciramo:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[\xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left(\frac{m}{2}f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) + \xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)\right] = \frac{m}{2}\xi^{\frac{m}{2}-1}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left[\frac{m}{2}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) + \xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right] - \frac{1}{2}\varepsilon\xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left[\frac{m}{2}f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) + \xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right] +$$
$$+\xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left[\frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} - \frac{1}{2}\varepsilon f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + \frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + \xi\frac{\mathrm{d}^2f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}\right].$$

Potrebno je grupisati sve članove koji stoje uz funkciju $f_1(\xi)$ i njene izvode:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left[\frac{m}{2}\frac{1}{\xi}\left(\frac{m}{2}f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) + \xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) - \frac{1}{2}\varepsilon\left(\frac{m}{2}f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi f_1(\xi) +\right.\right.$$
$$\left.\left.+\xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m}{2}\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} - \frac{1}{2}\varepsilon f_1(\xi) - \frac{1}{2}\varepsilon\xi\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + \frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} + \xi\frac{\mathrm{d}^2f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}\right].$$

Sređivanjem se dobija:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \xi^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi)\left[\left(\frac{m^2}{4\xi} - \frac{m\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon^2\xi}{4} - \frac{\varepsilon}{2}\right)f_1(\xi) + (m - \varepsilon\xi + 1)\frac{\mathrm{d}f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi} +\right.$$
$$\left.+\xi\frac{\mathrm{d}^2f_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi^2}\right]. \tag{1.26}$$

Pogodno je na ovom mestu uvesti smenu za promenljivu ξ, kao:

$$x = \varepsilon\xi,$$

gde je x nova bezdimenziona promenljiva. U skladu sa ovom smenom, dolazi i do promene same funkcije $u_1(\xi)$:

$$u_1(x) = \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{x}{2})f_1(x). \tag{1.27}$$

Naravno, transformišu se i izvodi po promenljivoj ξ i to prema relacijama:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\xi} = \varepsilon\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x},$$
$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\varepsilon\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\varepsilon\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\xi} = \varepsilon^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}.$$

Uzimajući u obzir navedene transformacije za izvode, relacija (1.26) postaje:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \left(\frac{x}{\varepsilon}\right)^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{x}{2})\left[\left(\frac{m^2\varepsilon}{4x} - \frac{m\varepsilon}{2} + \frac{\varepsilon x}{4} - \frac{\varepsilon}{2}\right)f_1(x) + (m - x + 1)\varepsilon\frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + \varepsilon x\frac{\mathrm{d}^2f_1(x)}{\mathrm{d}x^2}\right]$$

odnosno,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) = \varepsilon^{1-\frac{m}{2}}x^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{x}{2})\left[\left(\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2}\right)f_1(x) + (m - x + 1)\frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} +\right.$$
$$\left.+x\frac{\mathrm{d}^2f_1(x)}{\mathrm{d}x^2}\right]. \tag{1.28}$$

Na ovaj način smo odredili sve članove koji figurišu u jednačini (1.18), pa je moguće da tu diferencijalnu jednačinu koja služi za nalaženje $u_1(\xi)$, transformišemo u jednačinu po $f_1(x)$:

$$\varepsilon^{1-\frac{m}{2}}x^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{x}{2})\left[\left(\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2}\right)f_1(x) + (m - x + 1)\frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x\frac{\mathrm{d}^2f_1(x)}{\mathrm{d}x^2}\right] + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\frac{x}{\varepsilon} +\right.$$
$$\left.+\frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2\hbar^2\varepsilon}{4m_e x}\right)\varepsilon^{-\frac{m}{2}}x^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{x}{2})f_1(x) = 0.$$

Grupisanjem odgovarajućih članova i nakon jednostavnijeg sređivanja, dobija se sledeći izraz:

$$\varepsilon^{1-\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{x}{2}) \left[\left(\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2} \right) f_1(x) + (m - x + 1) \frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x \frac{\mathrm{d}^2 f_1(x)}{\mathrm{d}x^2} \right] + \varepsilon^{-\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{x}{2}) \cdot$$
$$\cdot \left(\frac{1}{2} \frac{m_e}{\hbar^2} E \frac{x}{\varepsilon} + \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2 \varepsilon}{4x} \right) f_1(x) = 0,$$

odnosno,

$$\varepsilon^{1-\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{x}{2}) \left[\left(\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2} \right) f_1(x) + (m - x + 1) \frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x \frac{\mathrm{d}^2 f_1(x)}{\mathrm{d}x^2} \right] + \varepsilon^{1-\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \cdot$$
$$\cdot \exp(-\frac{x}{2}) \left(\frac{1}{2} \frac{m_e}{\hbar^2} E \frac{x}{\varepsilon^2} + \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m^2}{4x} \right) f_1(x) = 0.$$

Trebalo bi da se uoči da u prethodnoj jednačini figuriše energija E, ali je poznato da je ona sa veličinom ε povezana relacijom (1.21), pa važi:

$$\frac{m_e E}{\hbar^2 \varepsilon^2} = -\frac{1}{2}.$$

Uzimajući prethodnu napomenu u obzir, imamo:

$$\varepsilon^{1-\frac{m}{2}} x^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{x}{2}) \left[\left(\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2} \right) f_1(x) + (m + 1 - x) \frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x \frac{\mathrm{d}^2 f_1(x)}{\mathrm{d}x^2} + \left(-\frac{x}{4} + \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \right.\right.$$
$$\left.\left. \cdot \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m^2}{4x} \right) f_1(x) \right] = 0.$$

Diferencijlna jednačina zapisana u ovakvom obliku, uvek će biti zadovoljena ako je:

$$\left[\frac{m^2}{4x} - \frac{m}{2} + \frac{x}{4} - \frac{1}{2} \right] f_1(x) + (m + 1 - x) \frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x \frac{\mathrm{d}^2 f_1(x)}{\mathrm{d}x^2} + \left[-\frac{x}{4} + \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m^2}{4x} \right] f_1(x) = 0,$$

odnosno,

$$\left(\frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m+1}{2} \right) f_1(x) + (m + 1 - x) \frac{\mathrm{d}f_1(x)}{\mathrm{d}x} + x \frac{\mathrm{d}^2 f_1(x)}{\mathrm{d}x^2} = 0. \tag{1.29}$$

Jednačina (1.29) predstavlja diferencijalnu jednačinu za funkciju $f_1(x)$. Rešavanje ove jednačine ne predstavlja veći problem, s obzirom da je to diferencijalna jednačina asociranih Lagerovih polinoma. Ako sa $L_\beta^\gamma(\rho)$ obeležimo asocirane Lagerove polinome, tada je diferencijalana jednačina za asocirane Lagerove polinome oblika:

$$\rho \frac{\mathrm{d}^2 L_\beta^\gamma(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2} + (\gamma + 1 - \rho) \frac{\mathrm{d}L_\beta^\gamma(\rho)}{\mathrm{d}\rho} + (\beta - \gamma) L_\beta^\gamma(\rho) = 0. \tag{1.30}$$

Upoređujući relacije (1.29) i (1.30), možemo utvrditi sledeće veze među parametrima:

$$\gamma = m,$$
$$\beta - \gamma = \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m+1}{2},$$
$$\beta = \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m+1}{2} + m.$$

Asocirani Lagerovi polinomi su oblika:

$$L_\beta^\gamma(\rho) = \rho^{-\gamma} \exp(\rho) \frac{\mathrm{d}^\beta}{\mathrm{d}\rho^\beta} (\rho^{\beta+\gamma} \exp(-\rho)),$$

i neophodno je po definiciji da važi $\beta \geq \gamma$. Kada posmatramo vezana stanja elektrona u atomu vodonika, odnosno kada je ε realna veličina, uslov $\beta \geq \gamma$ se svodi na:

$$n_1 \equiv \beta - \gamma = \frac{m_e}{\hbar^2} \frac{e^2 Z_1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{\varepsilon} - \frac{m+1}{2} \geq 0.$$

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ БИБЛИОТЕКА НОВИ САД

Uvedena veličina n_1 mora biti nenegativan broj, a ovaj uslov definiše energiju elektrona E koja ulazi u izraz za ε. Ovim postupkom je određena funkcija $f_1(x)$, a samim tim i izraz za funkciju $u_1(\xi)$, što je i bio cilj:

$$\begin{aligned} f_1(x) &= L^m_{n_1+m}(x) \equiv L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi), \\ u_1(\xi) &= \xi^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi) L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi). \end{aligned} \tag{1.31}$$

Uzimajući u obzir da su diferencijalne jednačine za $u_1(\xi)$ i $u_2(\eta)$ istog oblika (1.16) i (1.17), dobijamo sledeći izraz za $u_2(\eta)$:

$$u_2(\eta) = \eta^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\eta) L^m_{n_2+m}(\varepsilon\eta), \qquad \text{gde je} \qquad n_2 = \frac{m_e}{\hbar^2}\frac{e^2 Z_2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\varepsilon} - \frac{m+1}{2}. \tag{1.32}$$

Oblik talasne funkcije u paraboličkim koordinatama

Izrazi za $u_1(\xi)$ (1.31) i $u_2(\eta)$ (1.32) u potpunosti određuju funkciju $u(\xi,\eta)$:

$$\begin{aligned} u(\xi,\eta) &= u_1(\xi)u_2(\eta) = \xi^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\xi) L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi) \cdot \eta^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon\eta) L^m_{n_2+m}(\varepsilon\eta), \\ u(\xi,\eta) &= (\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon(\xi+\eta)) L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi) L^m_{n_2+m}(\varepsilon\eta). \end{aligned} \tag{1.33}$$

Jednačina (1.33) određuje zavisnost talasne funkcije od promenljivih ξ i η, a zajedno sa jednačinom (1.10) koja definiše zavisnost od promenljive φ, daje oblik talasne funkcije za atom vodonika $\psi(\xi,\eta,\varphi)$:

$$\begin{aligned} \psi(\xi,\eta,\varphi) &= u(\xi,\eta) \cdot v(\varphi), \\ \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) &= C(\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon(\xi+\eta)) L^m_{n_1+m}(\varepsilon\xi) L^m_{n_2+m}(\varepsilon\eta) \cdot \exp(\pm im\varphi). \end{aligned} \tag{1.34}$$

Poslednja jednačina predstavlja talasnu funkciju atoma vodonika u paraboličkim koordinatama sa promenljivama ξ, η i φ. Koordinate ξ i η figurišu u talasnoj funciji kako preko stepenog i eksponencijalnog člana, tako i kao argument u asociranim Lagerovim polinomima. Varijabla φ je prisutna samo preko eksponencijalnog člana. U relaciji (1.34) figurišu i parametri (kvantni brojevi) koji su posledica rešavanja same Šredingerove jednačine, a to su n_1, n_2 i m i navedeni su kao indeks uz samu funkciju $\psi(\xi,\eta,\varphi)$. Veličina C predstavlja konstantu normiranja. Pored izraza za talasnu funkciju veoma važnu ulogu ima i izraz za energiju E, koji se pronalazi na osnovu veze sa veličinom ε. Kako je $Z = Z_1 + Z_2$, dobija se sledeća relacija za Z:

$$\begin{aligned} Z = Z_1 + Z_2 &= 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2\varepsilon}{e^2 m_e}\left(n_1 + \frac{m+1}{2}\right) + 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2\varepsilon}{e^2 m_e}\left(n_2 + \frac{m+1}{2}\right), \\ Z &= 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2\varepsilon}{e^2 m_e}(n_1 + n_2 + m + 1). \end{aligned} \tag{1.35}$$

Jednostavnim transformacijama se može izraziti veličina ε iz poslednje jednačine:

$$\varepsilon = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\frac{Z}{(n_1 + n_2 + m + 1)}.$$

Lako se uočava da ε zavisi od zbira $n_1 + n_2 + m + 1$, a pošto su svi navedeni parametri celi brojevi, sledi da je ε kvantovana veličina, pa ćemo je nadalje obeležavati sa ε_n. Pogodno je zbir $n_1 + n_2 + m + 1$ označiti kao nov kvantni broj n:

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

Kvantni broj n se naziva glavnim kvantnim brojem i figuriše u izrazu za energiju atoma vodonikovog tipa:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\frac{Z}{n} \equiv \sqrt{-\frac{2m_e E_n}{\hbar^2}}, \\ \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\frac{Z}{n} &= \sqrt{-\frac{2m_e E_n}{\hbar^2}}, \\ \left(\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2 m_e}{\hbar^2}\right)^2 \frac{Z^2}{n^2} &= -\frac{2m_e E_n}{\hbar^2}, \\ E_n &= -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2}\frac{Z^2}{n^2}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \end{aligned} \tag{1.36}$$

Dobijen je oblik za energiju E_n koji je identičan sa onim koji je izračunat u sfernim koordinatama, što je i očekivano s obzirom da je energija funkcija fundamentalnih konstanti (dielektrične permeabilnosti vakuuma ε_0, naelektrisanja elektrona e, mase elektrona m_e i Plankove konstante $\hbar$), naelektrisanja jezgra Z i glavnog kvantnog broja n, a nije funkcija koordinata. U slučaju atoma vodonika energija kvantnog stanja sa glavnim kvntnim brojem n je jednaka:

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}. \tag{1.37}$$

Energijski nivo sa glavnim kvantnim brojem n, mora kao i kod rezultata u sfernom koordinatnom sistemu, da ima stepen degeneracije $g_n = n^2$. Ovo tvrđenje ćemo lako dokazati na sledeći način. Glavni kvantni broj n se dobija kao zbir:

$$n = n_1 + n_2 + m + 1, \quad \text{pri čemu je} \quad n_1 \geq 0, \quad n_2 \geq 0 \quad m \geq 0. \tag{1.38}$$

Dakle, za n važi da je $n \geq 1$. Za fiksiranu vrednost m, n_1 može da uzme ukupno $n - m$ vrednosti:

$$n_1 \in \{0, 1, 2, \ldots, n - m - 1\}.$$

Magnetni kvantni broj m na osnovu relacije (1.38) može da uzima vrednosti u intervalu:

$$m \in \{0, 1, 2, \ldots, n - 1\}.$$

Pri tome za $m \neq 0$ postoje dve različite talasne funkcije, jer je azimutalni deo srazmeran članu $\exp(\pm im\varphi)$. Dakle, ukupan broj različitih talasnih funkcija koje odgovaraju jednom glavnom kvantnom broju n, odnosno istoj vrednosti energije E_n, iznosi:

$$g_n = \sum_{(m)}(n - m).$$

Iz sume se može izdvojiti član za $m = 0$, pošto samo on daje jednu talasnu funkciju, dok ostali članovi daju dve različite talasne funkcije:

$$g_n = n + 2\sum_{m=1}^{n-1}(n - m) = n + 2n\sum_{m=1}^{n-1} 1 - 2\sum_{m=1}^{n-1} m = n + 2n(n-1) - 2\frac{n(n-1)}{2},$$
$$g_n = n + 2n(n-1) - n(n-1) = n + n(n-1) = n^2.$$

Na ovaj način je pokazano da je stepen degeneracije jednak onom koji je određen pri rešavanju problema atoma vodonikovog tipa u sfernom koordinatnom sistemu.

1.3 Normiranje paraboličke talasne funkcije

U izrazu za talasnu funkciju u paraboličkim koordinatama:

$$\begin{aligned} \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) &= Cu_1(\xi)u_2(\eta)v(\varphi), \\ \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) &= C(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta) \cdot \exp(\pm im\varphi), \end{aligned} \tag{1.39}$$

figuriše konstanta normiranja C. Da bi se ona odredila, potrebno je moduo talasne funkcije prointegraliti po čitavom prostoru i taj integral izjednačiti sa jedinicom:

$$\int_\tau \psi^*_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)\mathrm{d}\tau = 1.$$

Znak $*$ označava konjugovan oblik talasne funkcije. Uvrštavanjem relacije koja daje oblik talasne funkcije (1.39) i elementa zapremine $\mathrm{d}\tau$ u paraboličkom koordinatnom sistemu (1.4), dobija se sledeće:

$$\frac{1}{4}C^*C\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\int_0^\infty \mathrm{d}\eta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi \cdot u_1^*(\xi)u_2^*(\eta)v^*(\varphi)u_1(\xi)u_2(\eta)v(\varphi)(\xi+\eta) = 1.$$

Funkcije $u_1(\xi)$ i $u_2(\eta)$ su realne funkcije, pa su njihovi konjugovani oblici $u_1^*(\xi)$ i $u_2^*(\eta)$ identički jednaki samim funkcijama:

$$\frac{1}{4}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot u_1(\xi)u_2(\eta)v^*(\varphi)u_1(\xi)u_2(\eta)v(\varphi)(\xi+\eta) = 1,$$

$$\frac{1}{4}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_1^2(\xi)u_2^2(\eta)(\xi+\eta) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot v^*(\varphi)v(\varphi) = 1.$$

Funkcija $v(\varphi)$ je kompleksna funkcija, pa se njenim uvrštavanjem u integral dobija:

$$\frac{1}{4}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_2^2(\eta)(\xi+\eta) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm im\varphi)\exp(\mp im\varphi) = 1.$$

Integracija po promenljivoj φ je elementarna, pošto je moduo funkcije $v(\varphi)$ jednak jedinici:

$$\frac{1}{4}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_2^2(\eta)(\xi+\eta) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi = 1,$$

$$\frac{1}{4}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_2^2(\eta)(\xi+\eta)2\pi = 1,$$

$$\frac{\pi}{2}|C|^2 \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_2^2(\eta)(\xi+\eta) = 1.$$

Međutim, integracija po promenljivama ξ i η je nešto složenija. Da bi se ona izvršila, neophodno je poslednju relaciju predstaviti kao zbir dva člana koji su simetrični u odnosu na ξ i η:

$$\frac{\pi}{2}|C|^2 \left[\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot \xi u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot u_2^2(\eta) + \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \cdot u_1^2(\xi) \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot \eta u_2^2(\eta) \right] = 1. \tag{1.40}$$

U svakom od integrala figuriše proizvod dva Lagerova polinoma, pa se za rešavanje istih koriste već gotovi rezultati matematičke analize. Navodimo rezultat S. B. Prešića [5] (rešenje problema 3.2.24.), koji ćemo nadalje koristiti za rešavanje navedenih integrala:

$$J_{n,m}^k(\sigma) = \int_0^\infty x^{k+\sigma} \exp(-x) \cdot L_n^k(x) \cdot L_m^k(x) \cdot \mathrm{d}x, \tag{1.41}$$

$$J_{n,m}^k(\sigma) = (-1)^{n+m} \cdot n! \cdot m! \cdot \sum_{\nu=0}^{\mathrm{M}} \binom{\sigma}{m-k-\nu}\binom{\sigma}{n-k-\nu}\frac{(k+\sigma+\nu)!}{\nu!}, \tag{1.42}$$

za celobrojno σ i $\sigma \geq 0$. Veličina M je određena relacijom: $\mathrm{M} = \min\{n-k, m-k\}$. U literaturi se često sreću i specijalni oblici ove relacije. U [6] su date relacije za slučaj $n = m$:

$$J_{n,n}^k(\sigma) = \frac{(-1)^\sigma n!^3 \sigma!}{(n-k)!} \sum_{\beta=0}^{\sigma} (-1)^\beta \binom{\sigma}{\beta}\binom{n+\beta}{\sigma}\binom{n+\beta-k}{\sigma},$$

za celobrojno σ i $\sigma \geq 0$, i

$$J_{n,n}^k(\sigma) = \frac{n!^3}{(n-k)!(s+1)!} \sum_{\gamma=0}^{s} (-1)^{s-\gamma} \binom{s}{\gamma}\binom{n-k+\gamma}{s}\left[\binom{k+s-\gamma}{s+1}\right]^{-1},$$

za celobrojno σ i $\sigma = -(1+s) \leq -1$. Sada možemo pristupiti rešavanju jednačine (1.40), tako što ćemo članove razmatrati posebno. Može se uvideti da su članovi simetrični po ξ i η, pa je dovoljno rešavati samo jedan od njih. Dakle, za prvi član imamo:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_0^\infty \xi\xi^m \exp(-\varepsilon_n\xi) \cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi)L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi) \cdot \mathrm{d}\xi,$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_0^\infty \xi^{m+1} \exp(-\varepsilon_n\xi) \cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi)L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi) \cdot \mathrm{d}\xi.$$

Radi lakšeg računa uvodimo smenu promenljive $x = \varepsilon_n \xi$:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_0^\infty \left(\frac{x}{\varepsilon_n}\right)^{m+1} \exp(-x) \cdot L_{n_1+m}^m(x) L_{n_1+m}^m(x) \cdot \frac{1}{\varepsilon_n} \cdot \mathrm{d}x,$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} \int_0^\infty x^{m+1} \exp(-x) \cdot L_{n_1+m}^m(x) L_{n_1+m}^m(x) \cdot \mathrm{d}x.$$

Upoređujući članove u prethodnoj jednačini sa (1.41), nalazimo da je $\sigma = 1$, $k = m$, $n = m = n_1 + m$, odnosno:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} J_{n_1+m,n_1+m}^m(1),$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} [(n_1+m)!]^2 \sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1\}} \binom{1}{n_1-\nu}\binom{1}{n_1-\nu} \frac{(m+1+\nu)!}{\nu!}. \tag{1.43}$$

Pošto je po definiciji:

$$\binom{a}{b} \equiv 0, \qquad \text{za} \qquad b \geq a,$$

u gornjoj sumi ostaju samo članovi za koje je $n_1 - \nu = 0$ ili $n_1 - \nu = 1$, odnosno $\nu = n_1$ ili $\nu = n_1 - 1$. Uzimajući ovaj uslov u obzir jednačina (1.43) postaje:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} [(n_1+m)!]^2 \left[\binom{1}{0}\binom{1}{0}\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} + \binom{1}{1}\binom{1}{1}\frac{(n_1+m)!}{(n_1-1)!}\right],$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} [(n_1+m)!]^2 \left[\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} + \frac{(n_1+m)!}{(n_1-1)!}\right].$$

Izraz u zagradi se jednostavnim transformacijama može uprostiti:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} [(n_1+m)!]^2 \left[\frac{(n_1+m+1)(n_1+m)!}{n_1!} + \frac{n_1(n_1+m)!}{n_1(n_1-1)!}\right],$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} [(n_1+m)!]^3 \left[\frac{(n_1+m+1)}{n_1!} + \frac{n_1}{n_1!}\right],$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}(n_1+m+1+n_1),$$

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+2)} \frac{(2n_1+m+1)[(n_1+m)!]^3}{n_1!}.$$

Ovim postupkom smo odredili prvi član u jednačini (1.40), odnosno:

$$\int_0^\infty \xi u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \frac{(2n_1+m+1)[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+2} \cdot n_1!}. \tag{1.44}$$

Na analogan način se nalazi i njemu simetričan član:

$$\int_0^\infty \eta u_2^2(\eta)\mathrm{d}\eta = \frac{(2n_2+m+1)[(n_2+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+2} \cdot n_2!}. \tag{1.45}$$

Preostalo je još da odredimo druga dva člana u jednačini (1.40). S obzirom da su simetrični po promenljivima ξ i η, određujemo samo jedan:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_0^\infty \xi^m \exp(-\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot \mathrm{d}\xi.$$

Uvođenjem smene $x = \varepsilon_n\xi$, dobijamo:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \int_0^\infty \left(\frac{x}{\varepsilon_n}\right)^m \exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1+m}(x)\cdot\frac{1}{\varepsilon_n}\cdot \mathrm{d}x,$$

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+1)}\int_0^\infty x^m \exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1+m}(x)\cdot \mathrm{d}x.$$

Upoređujući članove u prethodnoj jednačini sa (1.41), nalazimo da je $\sigma = 0$, $k = m$, $n = m = n_1 + m$, odnosno:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+1)}J^m_{n_1+m,n_1+m}(0),$$

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+1)}[(n_1+m)!]^2\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1\}}\binom{0}{n_1-\nu}\binom{0}{n_1-\nu}\frac{(m+\nu)!}{\nu!}.$$

U gornjoj sumi ostaju samo članovi za koje je $n_1 - \nu = 0$, odnosno $\nu = n_1$. Uzimajući ovaj uslov u obzir jednačina postaje:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+1)}[(n_1+m)!]^2\left[\binom{0}{0}\binom{0}{0}\frac{(n_1+m)!}{n_1!}\right],$$

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \varepsilon_n^{-(m+1)}[(n_1+m)!]^2\frac{(n_1+m)!}{n_1!}.$$

Ovim postupkom smo odredili drugi član u jednačini (1.40), odnosno:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi)\mathrm{d}\xi = \frac{[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1}\cdot n_1!}. \tag{1.46}$$

Na analogan način se nalazi i njemu simetričan član:

$$\int_0^\infty u_2^2(\eta)\mathrm{d}\eta = \frac{[(n_2+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1}\cdot n_2!}. \tag{1.47}$$

Dobijene relacije (1.44), (1.45), (1.46) i (1.47) omogućuju da se jednačina za određivanje konstante normiranja C (1.40), zapiše kao:

$$\frac{\pi}{2}|C|^2\left[\frac{(2n_1+m+1)[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+2}\cdot n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1}\cdot n_2!}+\frac{(2n_2+m+1)[(n_2+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+2}\cdot n_2!}\frac{[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1}\cdot n_1!}\right] = 1,$$

odnosno,

$$\frac{\pi}{2}|C|^2\cdot[(n_1+m)!]^3[(n_2+m)!]^3\cdot\frac{2n_1+m+1+2n_2+m+1}{\varepsilon_n^{2m+3}\cdot n_1!\cdot n_2!} = 1,$$

$$2\cdot\frac{\pi}{2}|C|^2\cdot[(n_1+m)!]^3[(n_2+m)!]^3\cdot\frac{n_1+n_2+m+1}{\varepsilon_n^{2m+3}\cdot n_1!\cdot n_2!} = 1,$$

$$\pi|C|^2\cdot[(n_1+m)!]^3[(n_2+m)!]^3\cdot\frac{n_1+n_2+m+1}{\varepsilon_n^{2m+3}\cdot n_1!\cdot n_2!} = 1.$$

U gornji izraz se može uvesti i glavni kvantni broj, tako da je:

$$\pi|C|^2 \cdot [(n_1+m)!]^3[(n_2+m)!]^3 \cdot \frac{n}{\varepsilon_n^{2m+3} \cdot n_1! \cdot n_2!} = 1.$$

Odavde sledi izraz za konstantu normiranja C:

$$C = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3}}.$$

Konačno se može napisati normirana talasna funkcija atoma vodonikovog tipa u paraboličkim koordinatama, kao:

$$\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) \equiv |n\{n_1,n_2,m\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3}} \cdot (\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta)) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta) \cdot \exp(\pm im\varphi), \tag{1.48}$$

gde je,

$$\varepsilon_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{m_e e^2}{\hbar^2} \cdot Z \cdot \frac{1}{n}, \qquad n \in \{1,2,3,\dots\},$$
$$n = n_1 + n_2 + m + 1, \qquad m \in \{0,1,2,\dots,n-1\},$$
$$n_1 \in \{0,1,2,\dots,n-m-1\}, \qquad n_2 \in \{0,1,2,\dots,n-m-1\}.$$

Ovim je završen postupak rešavanja Šredingerove jednačine za atom vodonikovog tipa u paraboličkim koordinatama van spoljašnjeg električnog polja i u nerelativističkom slučaju. Vrednosti svojstvenih energija su definisane relacijom (1.36), a oblik svojstvene talasne funkcije (1.48). Prelazak na slučaj atoma vodonika je jednostavan, a neophodno je samo za vrednost rednog broja Z uzeti jednicu.

Deo II

Proučavanje Štarkovog efekta atoma vodonika u aproksimaciji najbližeg suseda

Poglavlje 2

Elektrostatički potencijal u aproksimaciji najbližeg suseda

U ovom delu biće razmatran Štarkov[1] efekat kod atoma vodonika kada spoljašnje električno polje potiče od okolnih jona plazme. Pri tome će se od svih jona koji okružuju atom vodonika, posmatrati samo onaj koji je u trenutku radijativnog prelaza najbliži atomu. Ova aproksimacija se naziva aproksimacijom najbližeg suseda. Pored toga biće uvedena i kvazistatička aproksimacija za jone, po kojoj u toku trajanja radijativnog prelaza u atomu vodonika, perturbujući jon efektivno miruje zbog svoje velike mase. Ova činjenica omogućuje da se u sistemu atomsko jezgro-perturbujući jon definiše vremenski nepromenljiv pravac aksijalno-simetričnog polja u kojem se kreće atomski elektron. Potencijal perturbacije u kojem se kreće elektron atoma vodonikovog tipa jednak je:

$$V(\vec{r}) = \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R} - \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{R} - \vec{r}|},$$

gde je $\vec{r}$ radijus vektor elektrona, a $\vec{R}$ radijus vektor jona-perturbera. Pošto se ovaj problem može rešavati samo nekom približnom metodom (teorija perturbacije), neophodno je potencijal razviti u red po malom parametru λ. Parametar λ je u ovom slučaju definisan kao:

$$\lambda = n^2 \cdot \frac{a_0}{R},$$

gde je a_0 prvi Borov[2] radijus. Oblik potencijala V ukazuje da će u razvoju po parametru λ odsustvovati linearan član, odnosno potencijal će se moći prikazati kao:

$$V = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \dots .$$

U ovom poglavlju izračunati su članovi potencijalnog reda $V^{(2)}$, $V^{(3)}$ i $V^{(4)}$ i to u paraboličkim koordinatama. Njihovi izrazi jednaki su:

$$V^{(2)} = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2} \cdot \frac{1}{2} \cdot (\xi - \eta),$$

$$V^{(3)} = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{1}{4} \cdot (\xi^2 + \eta^2 - 4\xi\eta),$$

$$V^{(4)} = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot \frac{1}{8} \cdot (\xi^3 - \eta^3 - 9\xi^2\eta + 9\xi\eta^2).$$

Pojam Štarkovog efekta

Kada se atom nađe u homogenom spoljašnjem električnom polju, njegovi elektroni otpočinju kretanje u novom aksijalno-simetričnom polju koje je nastalo superpozicijom polja atomskog jezgra i spoljašnjeg polja. Štarkov efekat predstavlja pojavu promene energijskih nivoa atoma, usled interakcije atoma sa spoljašnjim električnim poljem. Pod promenama energijskog nivoa smatra se njegovo pomeranje ili cepanje na više energetskih nivoa. Ova pojava je za atom vodonika kvantno-mehanički dobro razrađena u većini klasičnih udžbenika iz kvantne mehanike ([7], [8], [9], [10]) i to rešavanjem stacionarne Šredingerove jednačine za atom

[1] Johannes Stark (1874-1957)
[2] Niels Henrik David Bohr (1885-1962)

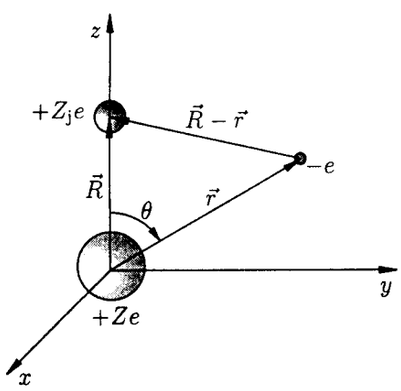
u sistemu sfernih koordinata sa konstantnim homogenim električnim poljem kao perturbacijom. Osnovna pretpostavka je da je električno polje dovoljno slabo pa je dopunska energija koja je njime uslovljena mala u poređenju sa energetskim razmacima među susednim energetskim nivoima atoma.

Kako je potencijal te perturbacije srazmeran skalarnom proizvodu ukupnog dipolnog momenta atoma i jačine spoljašnjeg električnog polja, dijagonalni matrični elementi te perturbacije (koji određuju pomeranje energetskih nivoa) identički su jednaki nuli zbog izbornih pravila parnosti. Zato je cepanje nivoa u homogenom električnom polju efekat drugog reda, proporcionalan je kvadratu jačine električnog polja i nosi naziv kvadratičan Štarkov efekat. Međutim, ako se atom nalazi u nehomogenom spoljašnjem električnom polju koje se u okviru dimenzija atoma slabo menja, uočava se efekat cepanja energijskih nivoa koji je proporcionalan jačini električnog polja. Tada je cepanje energijskih nivoa povezano sa ukupnim kvadrupolnim momentom atoma i nosi naziv linearan Štarkov efekat. Izuzetak čini atom vodonika i atomi čiji visoko pobuđeni nivoi ispoljavaju sličnosti sa vodonikovim nivoima. Kod atoma vodonika u homogenom spoljnjem električnom polju, se uz dipolnu perturbaciju već u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije za degenerisane energijske nivoe, dobijaju iz sekularne jednačine cepanja nivoa različita od nule. Rascepljenost nivoa vodonika je tada proporcionalna prvom stepenu jačine spoljašnjeg polja što je posledica degeneracije nivoa, jer stanja sa različitim orbitalnim kvantnim brojem l (za dat glavni kvantni broj n) imaju iste energije.

Sa stanovišta izračunavanja poželjno je odabrati takve neperturbovane talasne funkcije da matrica perturbacije bude dijagonalna u odnosu na svaku grupu međusobno degenerisanih stanja. Ispostavlja se da je to ostvarljivo kvantovanjem atoma vodonika u paraboličkim koordinatama. Naime, paraboličke talasne funkcije stanja sa glavnim kvantnim brojem n, dijagonalizuju matricu dipolne perturbacije po sva tri kvantna broja n_1, n_2 i m, tako da se za slučaj jednog određenog kvantnog stanja $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$ može primeniti nedegenerisana teorija perturbacije.

Aproksimacija najbližeg suseda

Kada se atom vodonikovog tipa nalazi u plazmi on je okružen velikim brojem pozitivnih jona koji na njega deluju u manjoj ili većoj meri. Ako se problem pojednostavi na taj način, da se smatra da samo najbliži pozitivan jon interaguje sa atomom, kažemo da problem rešavamo u aproksimaciji najbližeg suseda.



Slika 2.1 Položaj atoma vodonika i jona perturbera u aproksimaciji najbližeg suseda

Ako je naelektrisanje najbližeg pozitivnog jona $+Z_je$, a koordinatni sistem se veže za jezgro atoma vodonikovog tipa naelektrisanja $+Ze$ (slika 2.1), onda je potencijalna energija atoma u polju najbližeg jona, data izrazom:

$$V(\vec{r}) = \frac{Z_j \cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R} - \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{R}-\vec{r}|}, \tag{2.1}$$

gde je R rastojanje jezgra atoma vodonikovog tipa od najbližeg jona, a $\vec{r}$ vektor položaja elektrona atoma vodonikovog tipa. Dakle, prvi član karakteriše interakciju jezgra atoma vodonikovog tipa i jona, a drugi elektrona i jona. Interakcija između elektrona i jezgra u okviru atoma vodonikovog tipa ovde nije uzeta u obzir, jer je ona sadržana u hamiltonijanu koji opisuje izolovan atom vodonikovog tipa.

Vektor $\vec{R}-\vec{r}$ opisuje položaj elekrona u odnosu na jon, a $|\vec{R}-\vec{r}|$ predstavlja rastojanje između elektrona i jona. Smatraćemo da je z-osa paralelna vektoru $\vec{R}$, pa je intenzitet vektora $\vec{R}-\vec{r}$ dat relacijom:

$$|\vec{R}-\vec{r}| = \sqrt{(\vec{R}-\vec{r})^2} = \sqrt{R^2 - 2\vec{R}\vec{r} + r^2} = \sqrt{R^2 - 2Rr\cos\theta + r^2},$$

$$|\vec{R}-\vec{r}| = R\sqrt{1 - 2\frac{r}{R}\cos\theta + \frac{r^2}{R^2}}.$$

Uzimajući ovu relaciju u obzir, potencijal aksijalno-simetričnog Kulonovog polja se može predstaviti kao:

$$V(\vec{r}) \equiv V(r,\theta) = \frac{Z_j \cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R} - \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{r}{R}\cos\theta + \left(\frac{r}{R}\right)^2}}, \tag{2.2}$$

$$V(\vec{r}) \equiv V(r,\theta) = \frac{Z_j \cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\left[1 - \frac{1}{Z}\frac{1}{\sqrt{1 - 2\frac{r}{R}\cos\theta + \left(\frac{r}{R}\right)^2}}\right]. \tag{2.3}$$

Smatrajući da se elektron ne nalazi na visoko pobuđenim kvantnim stanjima, odnosno da je $r < R$, sfernosimetričan potencijal se može napisati i pomoću Ležandrovih[3] polinoma. Uvođenje Ležandrovih polinoma je potpuno opravdano, jer korišćenjem osobina ovih polinoma račun u mnogome može biti skraćen i pojednostavljen. Funkcija generatrisa Ležandrovih polinoma $P_l(w)$ je data izrazom [11]:

$$T(w,s) = \frac{1}{\sqrt{1-2ws+s^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(w)\cdot s^l \quad \text{gde je} \quad s<1. \tag{2.4}$$

Ležandrovom polinomu se može pridružiti i sažetija forma, tzv. Rodrigova formula:

$$P_n(w) = \frac{1}{n!\cdot 2^n}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}w^n}(w^2-1)^n. \tag{2.5}$$

Nekoliko prvih Ležandrovih polinoma su:

$$\begin{aligned}
P_0(w) &= 1,\\
P_1(w) &= w,\\
P_2(w) &= \frac{1}{2}(3w^2-1),\\
P_3(w) &= \frac{1}{2}(5w^3-3w),\\
P_4(w) &= \frac{1}{8}(35w^4-30w^2+3),\ldots
\end{aligned}$$

Veza između Ležandrovih polinoma i potencijala datog relacijom (2.2) se jednostavno ostvaruje, ako se za parametar s odabere veličina:

$$s = \frac{r}{R} < 1,$$

a za varijablu w veličina

$$w = \cos\theta.$$

Kombinacijom jednačina (2.2) i (2.4) dobija se izraz za potencijal, kao:

$$V(r,\theta) = \frac{Z_\mathrm{j}\cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\left[1-\frac{1}{Z}\sum_{l=0}^{\infty}P_l(\cos\theta)\cdot\left(\frac{r}{R}\right)^l\right].$$

Izdvojićemo prvi član iz sume ($l=0$) u cilju uprošćavanja izraza:

$$V(r,\theta) = \frac{Z_\mathrm{j}\cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\left[1-\frac{1}{Z}P_0(\cos\theta)\left(\frac{r}{R}\right)^0-\frac{1}{Z}\sum_{l=1}^{\infty}P_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{R}\right)^l\right],$$

$$V(r,\theta) = \frac{Z_\mathrm{j}\cdot Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\left[1-\frac{1}{Z}-\frac{1}{Z}\sum_{l=1}^{\infty}P_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{R}\right)^l\right].$$

Za atom vodonika je $Z=1$, pa se potiru neki članovi u zagradi:

$$V(r,\theta) = \frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\left[1-1-\sum_{l=1}^{\infty}P_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{R}\right)^l\right], \tag{2.6}$$

$$V(r,\theta) = -\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 R}\cdot\sum_{l=1}^{\infty}P_l(\cos\theta)\left(\frac{r}{R}\right)^l. \tag{2.7}$$

Da bi se sproveo perturbacioni račun, neophodno je uvesti mali perturbacioni parametar. Neka za kvantno stanje okarakterisano glavnim kvantnim brojem n, perturbacioni parametar λ, bude dat izrazom:

$$\lambda = n^2\cdot\frac{a_0}{R},$$

gde je,

$$a_0 = 4\pi\varepsilon_0\frac{\hbar^2}{m_\mathrm{e}e^2} = 5.29\cdot 10^{-11}\ \mathrm{m}. \tag{2.8}$$

[3] Adrien-Marie Legendre (1752-1833)

Borov radijus, odnosno poluprečnik orbite elektrona u osnovnom stanju atoma vodonika. Ako rastojanje R izrazimo preko parametra λ:

$$R = n^2 \frac{a_0}{\lambda},$$

tada potencijal $V(r)$ takođe možemo izraziti preko λ. Uvrštavanjem gornjeg izraza u jednačinu (2.6), dobijamo:

$$V(r,\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\lambda}{n^2 a_0} \sum_{l=1}^{\infty} P_l(\cos\theta) \left(\frac{r\lambda}{n^2 a_0}\right)^l,$$

odnosno,

$$V(r,\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{\lambda}{n^2 a_0} \left[\frac{r\lambda}{n^2 a_0} P_1(\cos\theta) + \left(\frac{r\lambda}{n^2 a_0}\right)^2 P_2(\cos\theta) + \left(\frac{r\lambda}{n^2 a_0}\right)^3 P_3(\cos\theta) + \left(\frac{r\lambda}{n^2 a_0}\right)^4 \cdot \right.$$
$$\left. \cdot P_4(\cos\theta) + \left(\frac{r\lambda}{n^2 a_0}\right)^5 P_5(\cos\theta) + \ldots\right].$$

Gornja relacija se može zapisati i na drugačiji način, kao stepena funkcija parametra λ i članova potencijala drugog $V^{(2)}$, trećeg $V^{(3)}$, četvrtog $V^{(4)}$, ... reda koji stoje uz odgovarajuće stepene:

$$V(r,\theta) = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \ldots, \tag{2.9}$$

gde su

$$V^{(2)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{n^2 a_0} \frac{r}{n^2 a_0} P_1(\cos\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2} \cdot r P_1(\cos\theta),$$
$$V^{(3)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{n^2 a_0} \frac{r^2}{(n^2 a_0)^2} P_2(\cos\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot r^2 P_2(\cos\theta),$$
$$V^{(4)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{n^2 a_0} \frac{r^3}{(n^2 a_0)^3} P_3(\cos\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot r^3 P_3(\cos\theta) \ldots$$

Prethodni rezultati se mogu prikazati i na sledeći način, kada se Ležandrovi polinomi zamene odgovarajućim izrazima:

$$V^{(2)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2} \cdot r\cos\theta = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2} \cdot z, \tag{2.10}$$
$$V^{(3)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot r^2 \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{1}{2}(3z^2 - r^2), \tag{2.11}$$
$$V^{(4)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot r^3 \frac{1}{2}(5\cos^3\theta - 3\cos\theta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot \frac{1}{2}(5z^3 - 3r^2 z) \ldots$$

Poslednje relacije su izražene preko sfernih koordinata, ali ako uzmemo u obzir relacije između sfernih i paraboličkih koordinata (1.1), (1.2) i (1.3), možemo pisati:

$$V^{(2)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2} \frac{1}{2}(\xi - \eta), \tag{2.12}$$
$$V^{(3)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{2}(3\frac{1}{4}(\xi - \eta)^2 - \frac{1}{4}(\xi + \eta)^2) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{8}(2\xi^2 + 2\eta^2 - 8\xi\eta),$$
$$V^{(3)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{4}(\xi^2 + \eta^2 - 4\xi\eta), \tag{2.13}$$
$$V^{(4)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{1}{2}(\frac{5}{8}(\xi - \eta)^3 - \frac{3}{8}(\xi + \eta)^2(\xi - \eta)) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{(\xi - \eta)}{16}(5(\xi - \eta)^2 - 3(\xi + \eta)^2)$$
$$V^{(4)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{(\xi - \eta)}{16}(2\xi^2 + 2\eta^2 - 16\xi\eta) = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{(\xi - \eta)}{8}(\xi^2 + \eta^2 - 8\xi\eta),$$
$$V^{(4)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{1}{8}(\xi^3 - \eta^3 - 9\xi^2\eta + 9\xi\eta^2) \ldots \tag{2.14}$$

Poznavanje izraza za $V^{(2)}$, $V^{(3)}$, $V^{(4)}$, ..., jako je važno zbog toga što matrični elementi ovih operatora određuju popravke na energiju izolovanog atoma. Popravke za energiju, nalaze se prema obrascima koje daje teorija perturbacije. Detaljno izvođenje ovih formula u slučaju kada je potencijal dat redom koji ne sadrži linearan član po malom parametru λ (2.9) dato je u dodatku A.

Poglavlje 3

Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^2

U ovom poglavlju će biti određena vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^2. Ova popravka $\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m}$ zavisi samo od matričnih elemenata operatora interakcije $V^{(2)}$ koji je odgovoran za dipolnu interakciju, i to na sledeći način:

$$\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^2 \langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle.$$

Pronalaženjem matričnih elemenata operatora $V^{(2)}$ dolazi se do zaključka da su samo dijagonalni matrični elementi različiti od nule i iznose:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{3}{2}\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^2}\frac{a_0 n}{Z}\cdot(n_1-n_2).$$

Upravo dijagonalnost matričnih elemenata omogućuje da se Štarkov efekat kod atoma vodonika u parabolićkim koordinatama razmatra pomoću teorije nedegenerisanog energijskog nivoa, jer se praktično problem svodi na proučavanje svakog dijagonalnog matričnog elementa zasebno. Svaki od tih elemenata okarakterisan je skupom kvantnih brojeva $\{n_1,n_2,m\}$, a ovaj skup kvantnih brojeva karakteriše jedno od mogućih podstanja sa glavnim kvantnim brojem n.

Vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^2 koja je izračunata u ovom odeljku iznosi:

$$\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{3}{2}\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 R^2}\cdot a_0 n(n_1-n_2),$$

dok je ukupna energija stanja sa glavnim kvantnim brojem n i skupom paraboličkih kvantnih brojeva $\{n_1,n_2,m\}$ data izrazom

$$E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_n + \lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot n(n_1-n_2)\right].$$

Zbog zavisnosti energije od razlike kvantnih brojeva n_1 i n_2, dolazi do smanjenja stepena degeneracije, odnosno do delimičnog otklanjanja degeneracije energetskih nivoa. Nivo sa glavnim kvantnim brojem n se cepa na $2n-1$ podnivoa, a stepen degeneracije se smanjuje na vrednost $(n-1)^2$.

3.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^2

Dejstvo dipolne interakcije $\lambda^2 V^{(2)}$ uvodi popravke na energiju neperturbovanog stanja, koje je neophodno tražiti u okviru teorije perturbacije za degenerisan nivo s obzirom da stanje sa glavnim kvantnim brojem n ima stepen degeneracije n^2. U tu svrhu bi trebalo naći matrične elemente dipolne interakcije i formirati sekularnu jednačinu.

U ovom poglavlju biće pokazano da dipolni član operatora perturbacije ima samo dijagonalne matrične elemente, što uzrokuje cepanje energetskog nivoa sa glavnim kvantnim brojem n na $2n-1$ podnivoa. Time se stepen degeneracije nivoa snižava na $(n-1)^2$. Odsustvo nedijagonalnih matričnih elemenata dipolne interakcije isključuje njen doprinos popravci na neperturbovane talasne funkcije. Zbog toga se podnivoi $\{n_1,n_2,m\}$ koji odgovaraju stanju n, uzajamno ponašaju kao nezavisni pri primeni teorije perturbacije za degenerisani nivo. Kao posledica se javlja mogućnost da se sledeća popravka na energiju ($\sim \lambda^3$) i talasna funkcija ($\sim \lambda$) traži u okviru teorije perturbacije nedegenerisanog nivoa.

Oblik člana $\lambda^4 V^{(4)}$ operatora perturbacije je takav da u potpunosti otklanja degeneraciju kvantnog stanja sa glavnim kvantnim brojem n. U dodatku A su dati detaljni proračuni svojstvenih talasnih funkcija i svojstvenih vrednosti energije degenerisanog nivoa, na koji deluje perturbacija bez linearnog člana po malom parametru λ, ali takva da član $\lambda^4 V^{(4)}$ u potpunosti otklanja degeneraciju.

Prema relaciji (A.8) koja je dobijena u dodatku A, popravka na energiju izolovanog atoma u aproksimaciji do λ^2, nalazi se kao:

$$\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^2 \langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle.$$

Energija atoma u stanju $|n\rangle$ sa tačnošću do na faktor λ^2 se prema (A.1) dobija na sledeći način:

$$E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_n + \lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m}, \tag{3.1}$$

gde je $E^{(0)}_n$ energija izolovanog atoma u stanju $|n\rangle$, a $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ energija atoma u stanju $|n\rangle$ u aproksimaciji do λ^2. Dakle, za određivanje popravke na energiju potrebo je izračunati vrednosti matričnih elemenata $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle$.

3.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle$

Prilikom određivanja matričnih elemenata $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle$, mora se voditi računa o tome da se traži popravka na energiju stanja sa glavnim kvantnim brojem n, odnosno uvek važi sledeće:

$$n = n_1 + n_2 + m + 1 = n_1' + n_2' + m' + 1.$$

Uvrštavanjem izraza za $V^{(2)}$ iz jednačine (2.12), dobijamo:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \langle n\{n_1,n_2,m\}| - \frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{1}{2}(\xi-\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle,$$

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\langle n\{n_1,n_2,m\}|(\xi-\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle.$$

U matričnom elementu figurišu paraboličke koordinate, pa se i integrali po paraboličkim koordinatama. Radi lakšeg računa uvode se izvesne skraćenice u zapisivanju. Posmatramo matrični element funkcije $\zeta(\xi,\eta)$, jer su upravo tog oblika svi operatori koje ćemo kasnije posmatrati:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \int_\tau \psi^*_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)\cdot\zeta(\xi,\eta)\cdot\psi_{n_1',n_2',m'}(\xi,\eta,\varphi)\cdot \mathrm{d}\tau,$$

gde je ζ bilo koja fizička veličina. Integraljenje se vrši po celom prostoru, pa gornja relacija prelazi u:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \frac{\xi+\eta}{4}\psi^*_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)\cdot\zeta(\xi,\eta)\cdot\psi_{n_1',n_2',m'}(\xi,\eta,\varphi)$$

pri čemu je uvršten i element zapremine za paraboličke koordinate $\mathrm{d}\tau$. Prema jednačini (1.48), talasna funkcija je jednaka:

$$\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) \equiv |n\{n_1,n_2,m\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi n}}\frac{\sqrt{n_1!\cdot n_2!}\cdot\varepsilon^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_2+m)!]^3}}\cdot(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}\cdot\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot\exp(\pm im\varphi).$$

Ova relacija se kraće može zapisati kao:

$$\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) = C^n_{n_1,n_2,m}\cdot(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}\cdot\exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot\exp(\pm im\varphi),$$

gde je

$$C^n_{n_1,n_2,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi n}}\frac{\sqrt{n_1!\cdot n_2!}\cdot\varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_2+m)!]^3}}, \quad \text{i} \quad \varepsilon_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_e e^2}{\hbar^2}Z\frac{1}{n} = \frac{1}{n}\frac{Z}{a_0}. \tag{3.2}$$

Konačno je matrični element funkcije $\zeta(\xi,\eta)$ jednak:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{1}{4}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi(\xi+\eta)\cdot C^n_{n_1,n_2,m}(\xi\eta)^{\frac{m}{2}}\cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot \exp(\mp im\varphi)\cdot \zeta(\xi,\eta)\cdot C^n_{n_1',n_2',m'}\cdot(\xi\eta)^{\frac{m'}{2}}\cdot$$
$$\cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_n\eta)\cdot \exp(\pm im'\varphi).$$

S obzirom da funkcija $\zeta(\xi,\eta)$ ne zavisi od promenljive φ, integracija po toj promenljivoj je nezavisna:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{1}{4}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m'}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\int_0^\infty \mathrm{d}\eta(\xi+\eta)\cdot\zeta(\xi,\eta)\cdot(\xi\eta)^{\frac{1}{2}(m+m')}\cdot$$
$$\cdot\exp(-\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_n\eta)\cdot$$
$$\cdot\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\exp(\pm i(m'-m)\varphi).$$

Trebalo bi da se uoči da integracija po promenljivoj φ neminovno dovodi do dijagonalizacije matrice po kvantnom broju m:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\exp(\pm i(m'-m)\varphi) = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot[\cos(m'-m)\varphi\pm i\sin(m'-m)\varphi],$$
$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\exp(\pm i(m'-m)\varphi) = \frac{1}{m'-m}\cdot[\sin 2\pi(m'-m)\mp i(\cos 2\pi(m'-m)-1)],$$
$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\exp(\pm i(m'-m)\varphi) = 2\pi\cdot\delta_{m,m'}. \tag{3.3}$$

Koristeći ovaj rezultat, matrični element možemo napisati kao:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta)|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\int_0^\infty\mathrm{d}\xi\int_0^\infty\mathrm{d}\eta(\xi+\eta)\cdot\zeta(\xi,\eta)\cdot(\xi\eta)^m\cdot$$
$$\cdot\exp(-\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2'+m}(\varepsilon_n\eta). \tag{3.4}$$

Poslednja relacija nam omogućuje da izračunamo matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle$, ako je $\zeta(\xi,\eta)=V^{(2)}$:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\int_0^\infty\mathrm{d}\xi\int_0^\infty\mathrm{d}\eta\cdot(\xi+\eta)\cdot$$
$$\cdot(\xi-\eta)(\xi\eta)^m\cdot\exp(-\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2'+m}(\varepsilon_n\eta).$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\int_0^\infty\mathrm{d}\xi\int_0^\infty\mathrm{d}\eta\cdot(\xi\eta)^m\cdot$$
$$\cdot(\xi^2-\eta^2)\cdot\exp(-\varepsilon_n(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2'+m}(\varepsilon_n\eta).$$

Nakon smene promenljivih $x=\varepsilon_n\xi$ i $y=\varepsilon_n\eta$, dobijamo:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot\int_0^\infty\mathrm{d}x\frac{1}{\varepsilon_n}\int_0^\infty\mathrm{d}y\frac{1}{\varepsilon_n}\cdot$$
$$\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot(x^2-y^2)\cdot(xy)^m\cdot\varepsilon_n^{-2m}\cdot\exp(-(x+y))\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot L^m_{n_1'+m}(x)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2'+m}(y).$$

Integrale transformišemo da bismo dobili oblike čiji su nam rezultati poznati:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+4)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot$$
$$\cdot\left[\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot x^{m+2}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^m\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot\right.$$
$$\cdot L^m_{n_2'+m}(y)-\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot x^m\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^{m+2}\cdot\exp(-y)\cdot$$
$$\left.\cdot L^m_{n_2+m}(y)L^m_{n_2'+m}(y)\right].$$

Upoređujući integrale u prethodnoj relaciji sa integralom koji je dat jednačinom (1.41), nalazimo da je:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{1}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+4)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot$$
$$\cdot\left[J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0)-J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2)\right]. \tag{3.5}$$

Prvo ćemo odrediti vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)$:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0) = (-1)^{n_1+n_1'+2m}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{0}{n_1-\nu}\binom{0}{n_1'-\nu}\frac{(m+\nu)!}{\nu!},$$
$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0) = (-1)^{n_1+n_1'}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{0}{n_1-\nu}\binom{0}{n_1'-\nu}\frac{(m+\nu)!}{\nu!}.$$

Binomni koeficijenti su različiti od nule samo ako je $n_1-\nu=n_1'-\nu=0$, odnosno ako je $\nu=n_1=n_1'$:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0) = (-1)^{2n_1}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1+m)!\cdot\binom{0}{0}\binom{0}{0}\frac{(n_1+m)!}{n_1!}\cdot\delta_{n_1,n_1'},$$
$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\delta_{n_1,n_1'}. \tag{3.6}$$

Prisustvo Kronekerovog[1] simbola $\delta_{n_1,n_1'}$ ukazuje na to da su kvantni brojevi n_1 i n_1' jednaki. Na analogan način nalazimo i $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\delta_{n_2,n_2'}. \tag{3.7}$$

Preostalo je još da se odredi integral $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)$. Prilikom izračunavanja ovog integrala uzimamo u obzir da n_1 mora biti jednako sa n_1', jer je za $n_1\neq n_2$ integral koji množi $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)$, a to je $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)$, identički jednak nuli. Prema relaciji (1.41) $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)$ iznosi:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2) = (-1)^{n_1+n_1'+2m}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1'-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},$$
$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = (-1)^{2n_1}\cdot[(n_1+m)!]^2\cdot\sum_{\nu=0}^{n_1}\binom{2}{n_1-\nu}^2\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!}.$$

Binomni koeficijenti su različiti od nule samo ako je $(n_1-\nu)\in\{0,1,2\}$, odnosno ako je $\nu\in\{n_1,n_1-1,n_1-2\}$:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = [(n_1+m)!]^2\cdot\left[\binom{2}{0}^2\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}+\binom{2}{1}^2\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-1)!}+\binom{2}{2}^2\frac{(n_1+m)!}{(n_1-2)!}\right].$$

[1] Leopold Kronecker (1823-1891)

Svaki od članova u zagradi se transformiše da bi se dobio zajednički sadržalac $n_1!$:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!} + 4\frac{n_1(n_1+m+1)!}{n_1(n_1-1)!} + \frac{n_1(n_1-1)(n_1+m)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)!}\right],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!} + 4\frac{n_1(n_1+m+1)!}{n_1!} + \frac{n_1(n_1-1)(n_1+m)!}{n_1!}\right],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(n_1+m+2)(n_1+m+1) + 4n_1(n_1+m+1) + n_1(n_1-1)].$$

Članovi u zagradi se mogu dalje transformisati, što daje:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [6n_1^2 + 6n_1(m+1) + (m+1)(m+2)] \cdot \delta_{n_1,n_1'}. \tag{3.8}$$

Na analogan način se dobija i integral $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [6n_2^2 + 6n_2(m+1) + (m+1)(m+2)] \cdot \delta_{n_2,n_2'}. \tag{3.9}$$

Kronekerovi simboli ukazuju da ove relacije važe samo u slučaju kada je $n_1 = n_1'$ i $n_2 = n_2'$. Konačno su određene vrednosti svih integrala koji figurišu u matričnom elementu, pa njihovim uvrštavanjem u jednačinu (3.5), dobijamo:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{1}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{\pi}{2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+4)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot\\ &\cdot\left[\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)]\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\delta_{n_2,n_2'}-\right.\\ &\left.-\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot[6n_2^2+6n_2(m+1)+(m+1)(m+2)]\cdot\delta_{n_2,n_2'}\right],\end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{\pi}{4}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\varepsilon_n^{-2(m+2)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\\ &\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\big[[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)]-\\ &-[6n_2^2+6n_2(m+1)+(m+1)(m+2)]\big].\end{aligned}$$

Daljim sređivanjem izraza, može se pokazati da član u zagradi sadrži glavni kvantni broj n kao činilac:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{\pi}{4}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\varepsilon_n^{-2(m+2)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\\ &\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot[6(n_1^2-n_2^2)+6(n_1-n_2)(m+1)],\end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{\pi}{4}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\varepsilon_n^{-2(m+2)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\\ &\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot(n_1-n_2)\cdot 6\cdot[n_1+n_2+m+1].\end{aligned}$$

Upravo izraz u poslednjoj zagradi predstavlja glavni kvantni broj n:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{\pi}{4}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\varepsilon_n^{-2(m+2)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\\ &\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot(n_1-n_2)\cdot 6n.\end{aligned}$$

Da bismo dobili konačan izraz za ovaj matrični element, neophodno je uvrstiti i konstantu $C^m_{n_1,n_2,m}$ koristeći jednačinu (3.2):

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = &-\frac{3\pi}{2}\frac{Z_j\cdot e^2 n}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\varepsilon_n^{-2(m+2)}\cdot\frac{1}{\pi n}\cdot\\ &\cdot\frac{n_1!\cdot n_2!\cdot\varepsilon_n^{2m+3}}{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_2+m)!]^3}\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot(n_1-n_2).\end{aligned}$$

Vidimo da je izraz moguće još više pojednostaviti, skraćivanjem pojedinih članova:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n}\cdot(n_1-n_2).$$

Uvrštavanjem izraza za veličinu ε_n iz jednačine (3.2), konačno dobijamo:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{a_0n}{Z}\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'}\cdot(n_1-n_2),$$

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{a_0n}{Z}\cdot(n_1-n_2). \tag{3.10}$$

Možemo zaključiti da su matrični elementi dijagonalni po svim kvantnim brojevima, odnosno da su svi nedijagonalni matrični elementi operatora perturbacije $V^{(2)}$ identički jednaki nuli. Od nule se razlikuju samo dijagonalni elementi, a njihova vrednost je data relacijom (3.10)

3.3 Vrednost energije u aproksimaciji do λ^2

Dakle, popravka na energiju u aproksimaciji do λ^2, koja odgovara linearnom Štarkovom efektu, odnosno koja je proporcionalna jačini jonskog polja, jednaka je:

$$\lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^2\cdot\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle,$$

$$\lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\lambda^2\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{a_0n}{Z}\cdot(n_1-n_2).$$

Ako uvrstimo izraz za λ, gornja relacija postaje:

$$\lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{n^4a_0^2}{R^2}\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2}\frac{a_0n}{Z}\cdot(n_1-n_2),$$

$$\lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0R^2}\frac{a_0n}{Z}\cdot(n_1-n_2),$$

$$\lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0R^2}\cdot a_0n(n_1-n_2), \qquad \text{za atom vodonika.} \tag{3.11}$$

Ovim postupkom smo pronašli izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^2. Lako se nalazi i ukupna energija u aproksimaciji do λ^2, prema jednačini (3.1):

$$E^{(II)}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_n + \lambda^2E^{(2)}_{n_1,n_2,m}.$$

Energija atoma vodonika $E^{(0)}_n$ u odsustvu polja, data je relacijom (1.37):

$$E^{(0)}_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}.$$

Konačno je izraz za energiju u aproksimaciji do λ^2 teorije perturbacije, dat kao:

$$E^{(II)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2} - \frac{3}{2}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0R^2}\cdot a_0n(n_1-n_2),$$

$$E^{(II)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot n(n_1-n_2)\right]. \tag{3.12}$$

Iz prethodne relacije se može izvesti nekoliko važnih zaključaka. Kao prvo energija je negativna, pa je stanje u kojem se nalazi atomski elektron vezano. Takođe, ona zavisi od naelektrisanja pozitivnog jona $+Z_j\cdot e$ i od kvantnih brojeva n_1, n_2 i n. Zbog zavisnosti energije od razlike kvantnih brojeva n_1 i n_2, dolazi do smanjenja stepena degeneracije, odnosno do delimičnog otklanjanja degeneracije energetskih nivoa. Razlika kvantnih brojeva n_1-n_2 može imati sledeće različite vrednosti:

$$(n_1-n_2)\in\{-(n-1),-(n-2),\ldots,0,\ldots,(n-2),(n-1)\}, \tag{3.13}$$

čiji je ukupan broj $2(n-1)+1=2n-1$. Dakle, stepen degeneracije u ovom slučaju je:

$$g^{(II)}_n = n^2-(2n-1) = n^2-2n+1 = (n-1)^2,$$

jer je stepen degeneracije atoma vodonika u odsustvu polja jednak n^2. Možemo zaključiti da linearan Štarkov efekat (dipolna interakcija) snižava stepen degeneracije sa n^2 na $(n-1)^2$, odnosno dolazi do cepanja energetskog nivoa sa glavnim kvantnim brojem n na $2n-1$ podnivoa. Ovim je završen postupak određivanja vrednosti za popravku na energiju neperturbovanog kvantnog stanja, a u aproksimaciji do λ^2.

Poglavlje 4

Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^3

U ovom poglavlju će biti određena vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^3, a ona se svodi na prvu popravku teorije perturbacije. Ova popravka $\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m}$ zavisi samo od matričnih elemenata operatora interakcije $V^{(3)}$ koji je odgovoran za kvadrupolnu interakciju, i to na sledeći način:

$$\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^3 \langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle.$$

Pronalaženjem matričnih elemenata operatora $V^{(3)}$ dolazi se do zaključka da su oni različiti od nule samo u tri slučaja. Prvi slučaj se odnosi na dijagonalne matrične elemente i njihova vrednost je:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{2n^4 a_0} \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1].$$

Druga dva slučaja se odnose na nedijagonalne matrične elemente kada je zadovoljena određena veza između kvantnih brojeva n_1 i n_1' kao i n_2 i n_2'. Izračunate vrednosti za ove matrične elemente su sledeće:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{n^4 a_0} \cdot \sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)},$$

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1-1,n_2+1,m\}\rangle = \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{n^4 a_0} \cdot \sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}.$$

Nedijagonalni matrični elementi nisu neophodni za izračunavanje popravke na energiju, ali se kasnije koriste za određivanje talasne funkcije u aproksimaciji do λ. Zbog toga su u ovom poglavlju i izračunate. Vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^3 koja je izračunata u ovom odeljku ima vrednost:

$$\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{a_0^2}{2R^3} \cdot n^2 \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1],$$

dok je ukupna energija stanja sa glavnim kvantnim brojem n i skupom paraboličkih kvantnih brojeva $\{n_1,n_2,m\}$ data izrazom

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m},$$

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2} \cdot n(n_1-n_2) + \frac{Z_j \cdot a_0}{2R^3} \cdot n^2 \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1]\right].$$

Ova popravka koja karakteriše kvadrupolnu interakciju vrši samo pomeranje energetskih nivoa, ali ne i dodatno cepanje, jer zavisi od n_1 i n_2 na isti način kao i popravka $\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m}$ koja je odgovorna za dipolnu interakciju. Dakle, i u ovom slučaju stepen degeneracije nivoa sa glavnim kvantnim brojem n iznosi $(n-1)^2$.

4.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^3

Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^3 se dobija na jednostavan način, jer se koriste već gotovi rezultati izvedeni u dodatku A. Naime, prema relaciji (A.12) izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^3 ima sledeći oblik:

$$\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^3 \langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle. \tag{4.1}$$

Ova relacija ukazuje na to, da su za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^3 odgovorni dijagonalni matrični elementi operatora perturbacije $V^{(3)}$. Ukupna energija stanja sa glavnim kvantnim brojem n i skupom paraboličkih kvantnih brojeva $\{n_1, n_2, m\}$ koji karakterišu podstanje, određuje se prema relaciji (A.1). Ova energija je određena sa tačnošću λ^3 i iznosi:

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_n + \lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m},$$
$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m}.$$

S obzirom da je poznata vrednost za popravku $\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m}$ koja je izražena dijagonalnim matričnim elementima operatora $V^{(3)}$, dobija se sledeće:

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 \langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle.$$

Pošto je izraz za energiju $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ određen u prethodnom poglavlju, ostaje da se izračunaju dijagonalni matrični elementi $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$ i na taj način odredi energija $E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m}$.

4.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle$

Matrične elemente $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle$, ćemo odrediti na sličan način kao što je to urađeno u prethodnom odeljku. Uvrštavanjem izraza za $V^{(3)}$ iz jednačine (2.13), dobijamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle = \langle n\{n_1, n_2, m\}| - \frac{Z_\mathrm{j} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{4}(\xi^2 + \eta^2 - 4\xi\eta)|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle,$$
$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{4}\langle n\{n_1, n_2, m\}|(\xi^2 + \eta^2 - 4\xi\eta)|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle.$$

S obzirom da funkcija $V^{(3)}$ ne zavisi od promenljive φ, integracija po toj promenljivoj je nezavisna i kao u slučaju $V^{(2)}$ dovodi do dijagonalizacije matrice po kvantnom broju m. Za određivanje matričnog elementa $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle$ upotrebićemo ralaciju (3.4). Na osnovu nje za $\zeta(\xi, \eta) = V^{(3)}$, imamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \frac{1}{4} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n'_1,n'_2,m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot$$
$$\cdot (\xi + \eta)(\xi^2 + \eta^2 - 4\xi\eta) \cdot (\xi\eta)^m \cdot \exp(-\varepsilon_n(\xi + \eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n \eta) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n'_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n'_2+m}(\varepsilon_n \eta),$$

a nakon neznatnog sređivanja članova ispod integrala može se dobiti i sledeća relacija

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{\pi}{8} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n'_1,n'_2,m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot$$
$$\cdot (\xi\eta)^m \cdot (\xi^3 + \eta^3 - 3\xi^2\eta - 3\xi\eta^2) \cdot \exp(-\varepsilon_n(\xi + \eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n \eta) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n'_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n'_2+m}(\varepsilon_n \eta).$$

Nakon smene promenljivih $x = \varepsilon_n \xi$ i $y = \varepsilon_n \eta$, dobijamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{\pi}{8} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n'_1,n'_2,m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{1}{\varepsilon_n} \int_0^\infty \mathrm{d}y \frac{1}{\varepsilon_n} \cdot$$
$$\cdot (x^3 + y^3 - 3x^2 y - 3xy^2) \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^3} \cdot (xy)^m \cdot \varepsilon_n^{-2m} \cdot \exp(-(x + y)) \cdot L^m_{n_1+m}(x) \cdot L^m_{n_2+m}(y) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n'_1+m}(x) \cdot L^m_{n'_2+m}(y).$$

Integrale transformišemo da bismo dobili oblike čiji su nam rezultati poznati:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{Z_{\rm j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{\pi}{8}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot$$
$$\cdot\Bigg[\int_0^\infty {\rm d}x\cdot x^{m+3}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\int_0^\infty {\rm d}y\cdot y^m\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2'+m}(y)+\int_0^\infty {\rm d}x\cdot x^m\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\int_0^\infty {\rm d}y\cdot y^{m+3}\cdot\exp(-y)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2+m}(y)L^m_{n_2'+m}(y)-3\int_0^\infty {\rm d}x\cdot x^{m+2}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\int_0^\infty {\rm d}y\cdot y^{m+1}\cdot$$
$$\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)L^m_{n_2'+m}(y)-3\int_0^\infty {\rm d}x\cdot x^{m+1}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)L^m_{n_1'+m}(x)\cdot$$
$$\cdot\int_0^\infty {\rm d}y\cdot y^{m+2}\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)L^m_{n_2'+m}(y)\Bigg].$$

Upoređujući integrale u prethodnoj relaciji sa integralom koji je dat jednačinom (1.41), nalazimo da je:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{Z_{\rm j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{\pi}{8}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1',n_2',m}\cdot$$
$$\cdot\left[J^m_{n_1+m,n_1'+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0)+J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(3)-\right.$$
$$\left.-3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1)-3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2)\right]. \tag{4.2}$$

Kao i u prethodnom slučaju, moramo voditi računa da postoji veza između kvantnih brojeva:

$$\begin{aligned} &n=n_1+n_2+m+1=n_1'+n_2'+m'+1,\\ &n_1+n_2+m=n_1'+n_2'+m,\\ &n_1+n_2=n_1'+n_2'. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)$ i $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0)$ su određene relacijama (3.6) i (3.7):

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)=\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\delta_{n_1,n_1'}, \tag{4.4}$$

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0)=\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\delta_{n_2,n_2'}. \tag{4.5}$$

Za određivanje vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)$ i $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1)$, koristimo relaciju (1.42):

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)=(-1)^{n_1+n_1'+2m}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{1}{n_1-\nu}\binom{1}{n_1'-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)=(-1)^{n_1+n_1'}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{1}{n_1-\nu}\binom{1}{n_1'-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!}.$$

Da bi proizvod binomnih koeficijenata bio različit od nule, istovremeno moraju da budu zadovoljeni uslovi:

$$(n_1-\nu)\in\{0,1\}\quad\text{i}\quad(n_1'-\nu)\in\{0,1\},$$

odnosno,

$$\nu\in\{n_1,n_1-1\}\quad\text{i}\quad\nu\in\{n_1',n_1'-1\}.$$

Ove uslove je moguće zadovoljiti samo u tri različita slučaja, odnosno kada su odnosi između kvantnih brojeva n_1 i n_1' sledeći:

$$\begin{aligned} &n_1=n_1',\\ &n_1=n_1'-1,\\ &n_1=n_1'+1. \end{aligned}$$

Sličan zaključak važi i za $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1) = (-1)^{n_2+n_2'+2m} \cdot (n_2+m)! \cdot (n_2'+m)! \sum_{\nu=0}^{\min\{n_2,n_2'\}} \binom{1}{n_2-\nu}\binom{1}{n_2'-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1) = (-1)^{n_2+n_2'} \cdot (n_2+m)! \cdot (n_2'+m)! \sum_{\nu=0}^{\min\{n_2,n_2'\}} \binom{1}{n_2-\nu}\binom{1}{n_2'-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!}.$$

Uslove su zadovoljeni samo u tri različita slučaja, odnosno kada su odnosi između kvantnih brojeva n_2 i n_2' sledeći:

$$n_2 = n_2',$$
$$n_2 = n_2' - 1,$$
$$n_2 = n_2' + 1.$$

S obzirom da postoji veza između kvantnih brojeva data jednačinom (4.3), potrebno je posmatrati samo tri sledeća slučaja:

1. $n_1 = n_1'$ i $n_2 = n_2'$,
2. $n_1 = n_1' - 1$ i $n_2 = n_2' + 1$,
3. $n_1 = n_1' + 1$ i $n_2 = n_2' - 1$.

Ovo su tri različita slučaja za koja su matrični elementi $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle$ različiti od nule. Prvi slučaj se odnosi na dijagonalne elemente i važan je za određivanje popravki na energiju u aproksimaciji do λ^3, dok se druga dva slučaja odnose na nedijagonalne elemente koji su važni pri određivanju talasne funkcije u aproksimaciji do λ.

4.2.1 Dijagonalni matrični elementi $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle$

1. slučaj: $n_1 = n_1'$ i $n_2 = n_2'$

Dijagonalni matrični elementi operatora $V^{(3)}$ se javljaju samo u prvom slučaju kada je $n_1 = n_1'$ i $n_2 = n_2'$. Da bi se oni izračunali prvo se određuju vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)$. Na osnovu relacije (4.4) sledi:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}, \tag{4.6}$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}. \tag{4.7}$$

Vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)$ se izračunava na sledeći način:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = (-1)^{2n_1} \cdot [(n_1+m)!]^2 \cdot \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{1}{n_1-\nu}\binom{1}{n_1-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\binom{1}{0}\binom{1}{0}\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} + \binom{1}{1}\binom{1}{1}\frac{(n_1+m)!}{(n_1-1)!}\right].$$

Izrazi u zagradi se transformišu u cilju dobijanja pogodnijeg izraza:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} + \frac{(n_1+m)!}{(n_1-1)!}\right],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} + \frac{n_1(n_1+m)!}{n_1(n_1-1)!}\right],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(n_1+m+1)+n_1].$$

Konačan izraz je:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [2n_1+m+1]. \tag{4.8}$$

Po analogiji sa prethodnim, dobija se i vrednost integrala $J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [2n_2+m+1]. \tag{4.9}$$

Za određivanje $J^m_{n_1+m,n_1+m}(2)$ iskoristićemo već dobijenu relaciju (3.8):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)], \tag{4.10}$$

a za integral $J^m_{n_2+m,n_2+m}(2)$, relaciju (3.9)

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(2) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [6n_2^2+6n_2(m+1)+(m+1)(m+2)]. \tag{4.11}$$

Određivanje vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)$ je složenije u tom smislu što zahteva proračune sa više članova. Na osnovu relacije (1.42), vrednost integrala se može izraziti kao:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = (-1)^{n_1+n_1+2m} \cdot (n_1+m)! \cdot (n_1+m)! \sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1\}} \binom{3}{n_1-\nu}\binom{3}{n_1-\nu}\frac{(m+3+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = (-1)^{2n_1} \cdot [(n_1+m)!]^2 \cdot \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{3}{n_1-\nu}\binom{3}{n_1-\nu}\frac{(m+3+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{3}{n_1-\nu}\binom{3}{n_1-\nu}\frac{(m+3+\nu)!}{\nu!}.$$

U obzir uzimamo samo članove koji su različiti od nule, a to su oni članovi kod kojih ν uzima vrednosti iz skupa $\{n_1, n_1-1, n_1-2, n_1-3\}$:

$$\begin{aligned} J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) =& [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\binom{3}{0}\binom{3}{0}\frac{(n_1+m+3)!}{n_1!} + \binom{3}{1}\binom{3}{1}\frac{(n_1+m+2)!}{(n_1-1)!} + \binom{3}{2}\binom{3}{2} \cdot \right. \\ & \left. \cdot \frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-2)!} + \binom{3}{3}\binom{3}{3}\frac{(n_1+m)!}{(n_1-3)!}\right]. \end{aligned}$$

Transformacijom članova unutar zagrade, dobija se pogodniji oblik prethodnog izraza:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+3)!}{n_1!} + 9\frac{(n_1+m+2)!}{(n_1-1)!} + 9\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-2)!} + \frac{(n_1+m)!}{(n_1-3)!}\right],$$

$$\begin{aligned} J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) =& [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+3)!}{n_1!} + 9\frac{n_1(n_1+m+2)!}{n_1(n_1-1)!} + 9\frac{n_1(n_1-1)(n_1+m+1)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)!} + \right. \\ & \left. + \frac{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1+m)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)!}\right], \end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned} J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) =& [(n_1+m)!]^3 \cdot \left[\frac{(n_1+m+3)(n_1+m+2)(n_1+m+1)}{n_1!} + 9\frac{n_1(n_1+m+2)}{n_1!} \cdot \right. \\ & \left. \cdot (n_1+m+1) + 9\frac{n_1(n_1-1)(n_1+m+1)}{n_1!} + \frac{n_1(n_1-1)(n_1-2)}{n_1!}\right]. \end{aligned}$$

Da bi se lakše sprovelo množenje članova unutar zagrade, prvo je izvršena faktorizacija:

$$\begin{aligned} J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) =& \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(10n_1+m+3)(n_1+m+2)(n_1+m+1) + (n_1-1)(9n_1^2+9n_1m + \\ & + 9n_1) + (n_1-1)(n_1^2-2n_1)] = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(10n_1+m+3)(n_1+m+2) \cdot \\ & \cdot (n_1+m+1) + (n_1-1)(10n_1^2+9n_1m+7n_1)]. \end{aligned}$$

Dobijena jednačina je prikladnija za dalje razvijanje, koje podrazumeva množenje svih članova, a potom i njihovo grupisanje:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \big[(10n_1+m+3)(n_1^2+2n_1m+3n_1+m^2+3m+2)+10n_1^3+9n_1^2m+ \\ +7n_1^2-10n_1^2-9n_1m-7n_1\big] = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \big[10n_1^3+20n_1^2m+30n_1^2+10n_1m^2+ \\ +30n_1m+20n_1+n_1^2m+2n_1m^2+3n_1m+m^3+3m^2+2m+3n_1^2+6n_1m+ \\ +9n_1+3m^2+9m+6+10n_1^3+9n_1^2m-3n_1^2-9n_1m-7n_1\big].$$

Konačno, dobijena vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)$ iznosi:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [20n_1^3+30n_1^2m+30n_1^2+12n_1m^2+30n_1m+22n_1+m^3+6m^2+ \\ +11m+6]. \tag{4.12}$$

Analogno se pronalazi i vrednost $J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)$, koja iznosi:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [20n_2^3+30n_2^2m+30n_2^2+12n_2m^2+30n_2m+22n_2+m^3+6m^2+ \\ +11m+6]. \tag{4.13}$$

Ovim postupkom su određene sve veličine koje figurišu u relaciji za matrični element (4.2). S obzirom da svaka veličina sadrži veći broj članova, bilo bi prilično komplikovano uvrstiti ih sve u relaciju (4.2), pa se zbog toga pribegava jednostavnijem postupku. On podrazumeva množenje svih članova pojedinačno, a zatim njihovo uvrštavanje u navedenu relaciju. Prvo određujemo član $J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)$, pozivajući se na rezultate (4.12) i (4.7):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [20n_1^3+30n_1^2+22n_1+30n_1^2m+30n_1m+ \\ +12n_1m^2+m^3+6m^2+11m+6].$$

Relacije (4.6) i (4.13) određuju integral $J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)$:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [20n_2^3+30n_2^2+22n_2+30n_2^2m+30n_2m+ \\ +12n_2m^2+m^3+6m^2+11m+6].$$

Proizvod integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)$ nalazimo korišćenjem relacija (4.10) i (4.9):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)] \cdot \\ \cdot [2n_2+m+1] = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [6n_1^2+6n_1+6n_1m+m^2+3m+2] \cdot \\ \cdot [2n_2+m+1] = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [12n_1^2n_2+12n_1n_2+12n_1n_2m+ \\ +2n_2m^2+6n_2m+4n_2+6n_1^2m+6n_1m+6n_1m^2+m^3+3m^2+2m+ \\ +6n_1^2+6n_1+6n_1m+m^2+3m+2].$$

Grupisanjem odgovarajućih članova u zagradi, dobija se sledeće:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [12n_1^2n_2+12n_1n_2+12n_1n_2m+2n_2m^2+ \\ +6n_2m+4n_2+6n_1^2m+12n_1m+6n_1m^2+m^3+4m^2+5m+6n_1^2+6n_1+2].$$

Proizvod integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(2)$ nalazimo korišćenjem relacija (4.8) i (4.11). Naravno rezultat je analogan prethodnom:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [12n_1n_2^2+12n_1n_2+12n_1n_2m+2n_1m^2+ \\ +6n_1m+4n_1+6n_2^2m+12n_2m+6n_2m^2+m^3+4m^2+5m+6n_2^2+6n_2+2].$$

Pošto su određeni svi neophodni članovi, preostalo je da se izračuna vrednost izraza unutar zagrade u relaciji (4.2):

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0) + J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(3) - 3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1) -$$
$$- 3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\Big[[20n_1^3 + 30n_1^2 +$$
$$+ 22n_1 + 30n_1^2m + 30n_1m + 12n_1m^2 + m^3 + 6m^2 + 11m + 6] + [20n_2^3 + 30n_2^2 +$$
$$+ 22n_2 + 30n_2^2m + 30n_2m + 12n_2m^2 + m^3 + 6m^2 + 11m + 6] - 3[12n_1^2n_2 + 12n_1n_2 +$$
$$+ 12n_1n_2m + 2n_2m^2 + 6n_2m + 4n_2 + 6n_1^2m + 12n_1m + 6n_1m^2 + m^3 + 4m^2 + 5m +$$
$$+ 6n_1^2 + 6n_1 + 2] - 3[12n_1n_2^2 + 12n_1n_2 + 12n_1n_2m + 2n_1m^2 + 6n_1m + 4n_1 + 6n_2^2m +$$
$$+ 12n_2m + 6n_2m^2 + m^3 + 4m^2 + 5m + 6n_2^2 + 6n_2 + 2]\Big],$$

odnosno,

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0) + J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(3) - 3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(1) -$$
$$- 3J^m_{n_1+m,n_1'+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot I_1. \tag{4.14}$$

Uvedena veličina I_1 predstavlja izraz u srednjoj zagradi, a uvodi se zbog jednostavnijeg zapisa i razmatra se posebno. Osnovna ideja je da se veličina I_1 faktoriše i odredi njena zavisnost od glavnog kvantnog broja n. Prvo se grupišu slični članovi:

$$I_1 = 20(n_1^3 + n_2^3) + 30(n_1^2 + n_2^2) + 22(n_1 + n_2) + 30m(n_1^2 + n_2^2) + 30m(n_1 + n_2) + 12m^2(n_1 + n_2) +$$
$$+ 2m^3 + 12m^2 + 22m + 12 - 3[12n_1n_2(n_1 + n_2) + 24n_1n_2 + 24n_1n_2m + 2m^2(n_1 + n_2) +$$
$$+ 6m(n_1 + n_2) + 4(n_1 + n_2) + 6m(n_1^2 + n_2^2) + 12m(n_1 + n_2) + 6m^2(n_1 + n_2) + 2m^3 +$$
$$+ 8m^2 + 10m + 6(n_1^2 + n_2^2) + 6(n_1 + n_2) + 4].$$

Nakon toga se izdvoje sabirci sa istim stepenom po n_1 i n_2:

$$I_1 = 20(n_1^3 + n_2^3) + (30 + 30m - 18m - 18)(n_1^2 + n_2^2) + (22 + 30m + 12m^2 - 6m^2 - 18m - 12 - 36m -$$
$$- 18m^2 - 18)(n_1 + n_2) + 2m^3 + 12m^2 + 22m + 12 - 6m^3 - 24m^2 - 30m - 12 -$$
$$- 3n_1n_2[12(n_1 + n_2) + 24 + 24m].$$

Daljim sređivanjem, dobijamo:

$$I_1 = 20(n_1^3 + n_2^3) + (12 + 12m)(n_1^2 + n_2^2) + (-12m^2 - 24m - 8)(n_1 + n_2) - 4m^3 - 12m^2 - 8m -$$
$$- 36n_1n_2(n_1 + n_2 + 2 + 2m) = 20(n_1^3 + n_2^3) + 12(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) - 4(3m^2 + 6m + 2)(n_1 + n_2) -$$
$$- 4m(m^2 + 3m + 2) - 36n_1n_2(n_1 + n_2 + 2 + 2m) = 4\cdot[5(n_1^3 + n_2^3) + 3(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) -$$
$$- (3m^2 + 6m + 2)(n_1 + n_2) - m(m^2 + 3m + 2) - 9n_1n_2(n_1 + n_2 + 2 + 2m)].$$

Kod nekih članova u prethodnoj relaciji je moguće direktno izvršiti faktorisanje bez prethodne transformacije, pa se dobija:

$$I_1 = 4\cdot[5(n_1^3 + n_2^3) + 3(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) - (3m^2 + 6m + 2)(n_1 + n_2) - m(m + 1)(m + 2) -$$
$$- 9n_1n_2(n_1 + n_2) - 18n_1n_2(m + 1)].$$

U drugim slučajevima je neopodno prvo transformisati izraze, a potom ih faktorisati. Cilj svake transformacije je dobijanje člana koji sadrži glavni kvanti broj $n = n_1 + n_2 + m + 1$. Na ovom mestu, izrazu dodajemo i oduzimamo član $(n_1 + n_2)$:

$$I_1 = 4\cdot[5(n_1^3 + n_2^3) + 3(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) - (3m^2 + 6m + 2)(n_1 + n_2) \pm (n_1 + n_2) - m(m + 1)(m + 2) -$$
$$- 9n_1n_2(n_1 + n_2) - 9n_1n_2(m + 1) - 9n_1n_2(m + 1)] = 4\cdot[5(n_1^3 + n_2^3) + 3(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) -$$
$$- 3(m^2 + 2m + 1)(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m + 1)(m + 2) - 9n_1n_2(n_1 + n_2 + m + 1) -$$
$$- 9n_1n_2(m + 1)] = 4\cdot[5(n_1^3 + n_2^3) + 3(m + 1)(n_1^2 + n_2^2) - 3(m + 1)^2(n_1 + n_2) +$$
$$+ (n_1 + n_2) - m(m + 1)(m + 2) - 9n_1n_2n - 9n_1n_2(m + 1)].$$

Binom $n_1^3 + n_2^3$ razvijamo prema poznatoj formuli:

$$n_1^3 + n_2^3 = (n_1 + n_2)(n_1^2 - n_1 n_2 + n_2^2),$$

pa dalje imamo

$$\begin{aligned} I_1 =& 4 \cdot [5(n_1 + n_2)(n_1^2 - n_1 n_2 + n_2^2) + 3(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m \cdot \\ & \cdot (m+1)(m+2) - 9n_1 n_2 n - 9n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [5(n_1 + n_2)(n_1^2 + n_2^2) - 5n_1 n_2 (n_1 + n_2) + \\ & + 3(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2) - 9n_1 n_2 n - \\ & - 9n_1 n_2 (m+1)]. \end{aligned}$$

Sledeća transformacija se ogleda u dodavanju i oduzimanju člana $5n_1 n_2 (m+1)$, što daje:

$$\begin{aligned} I_1 =& 4 \cdot [5(n_1 + n_2)(n_1^2 + n_2^2) - 5n_1 n_2 (n_1 + n_2) \pm 5n_1 n_2 (m+1) + 3(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 3(m+1)^2 \cdot \\ & \cdot (n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2) - 9n_1 n_2 n - 9n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [(5(n_1 + n_2) + \\ & + 3(m+1))(n_1^2 + n_2^2) - 5n_1 n_2 (n_1 + n_2 + m + 1) - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - \\ & - m(m+1)(m+2) - 9n_1 n_2 n - 4n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [5(n_1 + n_2 + m + 1)(n_1^2 + n_2^2) - \\ & - 2(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 5n_1 n_2 n - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2) - \\ & - 9n_1 n_2 n - 4n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1^2 + n_2^2) - 2(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 14n_1 n_2 n - \\ & - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2) - 4n_1 n_2 (m+1)]. \end{aligned}$$

U daljim transformacijama koristimo sledeću relaciju:

$$n_1^2 + n_2^2 = n_1^2 + n_2^2 \pm 2n_1 n_2 = (n_1 - n_2)^2 + 2n_1 n_2.$$

S obzirom na prethodnu relaciju, veličina I_1 dobija oblik:

$$\begin{aligned} I_1 =& 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 + 10n_1 n_2 n - 2(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - 14n_1 n_2 n - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - \\ & - m(m+1)(m+2) - 4n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2(m+1)(n_1^2 + n_2^2) - \\ & - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2) - 4n_1 n_2 (m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - \\ & - 4n_1 n_2 n - 2(m+1)(n_1^2 + n_2^2 + 2n_1 n_2) - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - m(m+1)(m+2)], \end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned} I_1 =& 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2(m+1)(n_1 + n_2)^2 - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2) - \\ & - m(m+1)(m+2)]. \end{aligned}$$

Poslednjem izrazu dodajemo i oduzimamo član $(m+1)$ i dobijamo:

$$\begin{aligned} I_1 =& 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2(m+1)(n_1 + n_2)^2 - 3(m+1)^2(n_1 + n_2) + (n_1 + n_2 + m + 1) - \\ & - m(m+1)(m+2) - (m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - (m+1)(n_1 + n_2)(2n_1 + 2n_2 + \\ & + 3m + 3) + n - (m(m+2) + 1)(m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2n(m+1)(n_1 + n_2) - \\ & - (n_1 + n_2)(m+1)^2 + n - (m^2 + 2m + 1)(m+1)] = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - \\ & - 2n(m+1)(n_1 + n_2) - (n_1 + n_2)(m+1)^2 + n - (m+1)^3]. \end{aligned}$$

Preostalo je još da transformišemo članove u kojima ne figuriše n. U poslednjoj jednačini to činimo grupisanjem:

$$I_1 = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2n(m+1)(n_1 + n_2) - (n_1 + n_2 + m + 1)(m+1)^2 + n],$$

odnosno,

$$I_1 = 4 \cdot [5n(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 n - 2n(m+1)(n_1 + n_2) - n(m+1)^2 + n].$$

Konačno smo dobili izraz u kojem svaki član sadrži glavni kvantni broj n, pa ga možemo izvući ispred zagrade.

$$I_1 = 4n \cdot [5(n_1 - n_2)^2 - 4n_1 n_2 - 2(m+1)(n_1 + n_2) - (m+1)^2 + 1].$$

Sledeći članovi koje dodajemo i oduzimamo su $(n_1 - n_2)^2$ i $(m+1)^2$, pa imamo:

$$\begin{aligned} I_1 =& 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - (n_1 - n_2)^2 - 4n_1n_2 - 2(m+1)(n_1 + n_2) - (m+1)^2 + 1] = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - \\ & - n_1^2 - n_2^2 + 2n_1n_2 - 4n_1n_2 - 2(m+1)(n_1 + n_2) - 2(m+1)^2 + (m+1)^2 + 1] = 4n \cdot \\ & \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n_1^2 - n_2^2 - 2n_1n_2 - 2(m+1)(n_1 + n_2 + m + 1) + (m+1)^2 + 1] = 4n \cdot \\ & \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - (n_1 + n_2)^2 - 2(m+1)n + (m+1)^2 + 1] = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - (n_1 + n_2 + m + 1) \cdot \\ & \cdot (n_1 + n_2 - m - 1) - 2(m+1)n + 1] = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n(n_1 + n_2 - m - 1) - \\ & - 2(m+1)n + 1] = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n(n_1 + n_2 - m - 1 + 2m + 2) + 1]. \end{aligned}$$

Sređivanjem poslednje relacije, imamo da je:

$$I_1 = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n(n_1 + n_2 + m + 1) + 1] = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - nn + 1].$$

Ovim postupkom smo konačno odredili izraz za veličinu I_1, kao:

$$I_1 = 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1]. \tag{4.15}$$

Vrednost veličine I_1 omogućuje izračunavanje relacije (4.14):

$$\begin{aligned} & J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) + J^m_{n_1+m,n_1+m}(0) J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) - 3J^m_{n_1+m,n_1+m}(2) J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) - \\ & - 3J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) J^m_{n_2+m,n_2+m}(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot 4n \cdot \\ & \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1], \end{aligned}$$

odnosno, relacije (4.2)

$$\begin{aligned} \langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle =& -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{\pi}{8} \cdot \varepsilon_n^{-(2m+5)} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n_1,n_2,m} \cdot \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \\ & \cdot \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1]. \end{aligned}$$

Naravno, u oba slučaja se vodi računa o tome da važi $n_1 = n_1'$ i $n_2 = n_2'$. Ako se uvedu još i relacije za koeficijent $C^m_{n_1,n_2,m}$ i ε_n (3.2), prethodna jednakost se može pojednostaviti:

$$\begin{aligned} \langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle =& -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{\pi}{8} \cdot \varepsilon_n^{-(2m+5)} \cdot \frac{1}{\pi n} \cdot \frac{n_1! \cdot n_2! \cdot \varepsilon_n^{2m+3}}{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3} \cdot \\ & \cdot \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot 4n \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1] = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^3} \cdot \frac{1}{2} \cdot \varepsilon_n^{-2} \cdot \\ & \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1]. \end{aligned}$$

Konačno se za matrični element $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$, dobija:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{2n^4 a_0} \cdot [6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1]. \tag{4.16}$$

Ovaj matrični element će biti iskorišćen za izračunavanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^3.

4.2.2 Nedijagonalni matrični elementi $\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$

Da bi se odredila talasna funkcija atoma vodonika do članova koji su proporcionalni malom parametru λ, neophodno je odrediti nedijagonalne elemente operatora perturbacije $V^{(3)}$ definisane slučajevima 2. i 3.

2. slučaj: $n_1 = n_1' - 1$ **i** $n_2 = n_2' + 1$

Prvo se određuju vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(0)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(0)$. Na osnovu relacije (4.4) sledi:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot \delta_{n_1,n_1+1} \equiv 0,$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(0) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot \delta_{n_2,n_2-1} \equiv 0.$$

Dakle, proračun za integrale $J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(3)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(3)$ je nepotreban, s obzirom da se oba ova integrala množe prethodnim, odnosno nulom. Vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(1)$ se izračunava na sledeći način:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(1) = (-1)^{2n_1+2m+1}\cdot(n_1+m)!(n_1+m+1)!\sum_{\nu=0}^{n_1}\binom{1}{n_1-\nu}\binom{1}{n_1+1-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(1) = -(n_1+m)!\cdot(n_1+m+1)!\binom{1}{0}\binom{1}{1}\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(1) = -\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2}{n_1!}.$$

Vrednost integrala $J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(1)$ iznosi:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(1) = (-1)^{2n_1+2m-1}\cdot(n_2+m)!(n_2+m-1)!\sum_{\nu=0}^{n_2-1}\binom{1}{n_2-\nu}\binom{1}{n_2-1-\nu}\frac{(m+1+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(1) = -(n_2+m)!\cdot(n_2+m-1)!\binom{1}{1}\binom{1}{0}\frac{(n_2+m)!}{(n_2-1)!},$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(1) = -\frac{[(n_2+m)!]^2\cdot(n_2+m-1)!}{(n_2-1)!}.$$

Sličnim postupkom nalazimo i $J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2)$:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2) = (-1)^{2n_1+2m+1}\cdot(n_1+m)!(n_1+m+1)!\sum_{\nu=0}^{n_1}\binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1+1-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2) = -(n_1+m)!(n_1+m+1)!\cdot\left[\binom{2}{0}\binom{2}{1}\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}+\binom{2}{1}\binom{2}{0}\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-1)!}\right].$$

Transformacijom članova u zagradi, dobija se sledeći izraz:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2) = -(n_1+m)!(n_1+m+1)!\cdot\left[2\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}+2\frac{n_1(n_1+m+1)!}{n_1(n_1-1)!}\right],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2) = -2\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2}{n_1!}\cdot[(n_1+m+2)+n_1],$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2) = -2\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2}{n_1!}\cdot[2n_1+m+2].$$

Vrednost integrala $J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2)$ iznosi:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2) = (-1)^{2n_1+2m-1}\cdot(n_2+m)!(n_2+m-1)!\sum_{\nu=0}^{n_2-1}\binom{2}{n_2-\nu}\binom{2}{n_2-1-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2) = -(n_2+m)!(n_2+m-1)!\cdot\left[\binom{2}{1}\binom{2}{0}\frac{(n_2+m+1)!}{(n_2-1)!}+\binom{2}{2}\binom{2}{1}\frac{(n_2+m)!}{(n_2-2)!}\right].$$

Transformacijom članova u zagradi, dobija se sledeći izraz:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2) = -(n_2+m)!(n_2+m-1)!\cdot\left[2\frac{(n_2+m+1)!}{(n_2-1)!}+2\frac{(n_2-1)(n_2+m)!}{(n_2-1)(n_2-2)!}\right],$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2) = -2\frac{(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{(n_2-1)!}\cdot[(n_2+m+1)+(n_2-1)],$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2) = -2\frac{(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{(n_2-1)!}\cdot[2n_2+m)].$$

Ovim postupkom su određene sve veličine koje figurišu u relaciji za matrični element (4.2). Vodeći računa da je $n_1 = n_1' - 1$ i $n_2 = n_2' + 1$, dobijamo:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = &-\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{\pi}{8}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1+1,n_2-1,m}\cdot\\ &\cdot\left[J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(0)+J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(3)-\right.\\ &\left.-3J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(2)J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(1)-3J^m_{n_1+m,n_1+m+1}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m-1}(2)\right],\end{aligned}$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{\pi}{8}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1+1,n_2-1,m}\cdot$$
$$\cdot\left[-6\cdot\frac{[(n_2+m)!]^2\cdot(n_2+m-1)!}{(n_2-1)!}\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2}{n_1!}\cdot[2n_1+m+2]-\right.$$
$$\left.-6\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2}{n_1!}\frac{(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{(n_2-1)!}\cdot[2n_2+m)]\right].$$

Da bi se izraz uprostio, članovi koji su zajednički za oba sabirka izvlače se van zagrade:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{3\pi}{4}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1+1,n_2-1,m}\cdot$$
$$\cdot\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2\cdot(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{n_1!\cdot(n_2-1)!}\cdot[2n_1+2n_2+2m+2].$$

Pošto je $n=n_1+n_2+m+1$, sledi:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{3\pi}{4}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1+1,n_2-1,m}\cdot$$
$$\cdot\frac{(n_1+m)!\cdot[(n_1+m+1)!]^2\cdot(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{n_1!\cdot(n_2-1)!}\cdot 2n.$$

Ako se uvedu i izrazi za konstante $C^m_{n_1,n_2,m}$ i $C^m_{n_1+1,n_2-1,m}$ prema relaciji (3.2), prethodna jednačina postaje:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{3\pi}{2}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+5)}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi n}}\frac{\sqrt{n_1!\cdot n_2!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}}\cdot$$
$$\cdot\frac{\varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_2+m)!]^3}}\cdot\frac{1}{\sqrt{\pi n}}\frac{\sqrt{(n_1+1)!\cdot(n_2-1)!}\cdot\varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m+1)!]^3\cdot[(n_2+m-1)!]^3}}\cdot\frac{(n_1+m)!}{n_1!}\cdot$$
$$\cdot\frac{[(n_1+m+1)!]^2\cdot(n_2+m-1)!\cdot[(n_2+m)!]^2}{(n_2-1)!}\cdot n = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{3}{2}\cdot\varepsilon_n^{-2}\cdot\frac{\sqrt{n_2!}}{\sqrt{n_1!}}\cdot$$
$$\cdot\frac{\sqrt{(n_2+m)!}}{\sqrt{(n_1+m)!}}\cdot\frac{\sqrt{(n_1+1)!\cdot(n_1+m+1)!}}{\sqrt{(n_2-1)!\cdot(n_2+m-1)!}}.$$

Prema relaciji (3.2) se uvodi i izraz za ε_n, pa dobijamo sledeće:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{3}{2}\cdot n^2a_0^2\cdot\sqrt{(n_1+1)(n_2+m)n_2}\cdot$$
$$\cdot\sqrt{(n_1+m+1)} = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{n^4a_0}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}.$$

Konačno smo dobili izraz za matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle$, koji je zapisan tako da u njemu ne figuriše kvantni broj m:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{1}{n^4a_0}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}.$$

Na osnovu poslednje relacije izračunavamo i izraz koji figuriše u talasnoj funkciji:

$$\lambda^3\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{n^6a_0^3}{R^3}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{2}\frac{1}{n^4a_0}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)},$$

odnosno,

$$\lambda^3\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}.$$

3. slučaj: $n_1 = n_1' + 1$ **i** $n_2 = n_2' - 1$

Pošto je talasna funkcija invarijantna u odnosu na izmenu kvantnih brojeva $n_1 \leftrightarrow n_2$, matrični element u slučaju $n_1 = n_1' + 1$ i $n_2 = n_2' - 1$, moguće je direktno izračunati na osnovu prethodnog slučaja uz odgovarajuću smenu kvantnih brojeva $n_1 \to n_2$ i $n_2 \to n_1$. Ovim postupkom dobijamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1 - 1, n_2 + 1, m\}\rangle = \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{1}{n^4 a_0} \cdot \sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)},$$

kao i relaciju

$$\lambda^3\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1 - 1, n_2 + 1, m\}\rangle = \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{n^2 a_0^2}{R^3} \cdot \sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}.$$

4.3 Vrednost energije u aproksimaciji do λ^3

Iz relacije (4.1) se direktno dobija popravka za energiju u aproksimaciji do λ^3. Matrični element operatora $V^{(3)}$ se uzima prema izrazu (4.16), pa dobijamo:

$$\begin{aligned}
\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} &= \lambda^3\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(3)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle,\\
\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} &= -\lambda^3 \cdot \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{2n^4 a_0} \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1],\\
\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} &= -\frac{n^6 a_0^3}{R^3} \cdot \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{1}{2n^4 a_0} \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1],\\
\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} &= -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{a_0^2}{2R^3} \cdot n^2 \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1].
\end{aligned}$$

Ova popravka vrši samo pomeranje energetskih nivoa, a ne i dodatno cepanje u odnosu na energiju $E^{\mathrm{II}}_{n_1,n_2,m}$. Ovo na prvi pogled može zvučati besmisleno, ali mora se uočiti da ova popravka zavisi od n_1 i n_2 kao $n_1 - n_2$. Ova razlika figuriše i kod popravke $\lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m}$ (3.11), tako da $\lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m}$ ne donosi ništa novo u pogledu otklanjanja degenaracije. Uzimajući u obzir izraz za $\lambda^2 E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ (3.12), energija atoma vodonika u aproksimaciji do λ^3, iznosi:

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m},$$

odnosno,

$$\begin{aligned}
E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} &= -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2} \cdot n(n_1-n_2)\right] - \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{a_0^2}{2R^3} \cdot n^2 \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1],\\
E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} &= -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2} \cdot n(n_1-n_2) + \frac{Z_j \cdot a_0}{2R^3} \cdot n^2 \cdot [6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1]\right]. \qquad (4.17)
\end{aligned}$$

Poslednja relacija predstavlja izraz za ukupnu energiju perturbovanog atoma vodonika, a određena je sa tačnošću do članova koji su proporcionalni λ^3. Popravka na energiju u aproksimaciji do λ^3 karakteriše kvadrupolnu interakciju, ne prouzrokuje cepanje nivoa, ali dovodi do njihovog pomeranja. Stepen degeneracije nivoa sa glavnim kvantnim brojem n se ne menja u odnosu na prethodnu popravku (dipolna interakcija) i iznosi $(n-1)^2$.

Poglavlje 5

Talasna funkcija u aproksimaciji do λ

U ovom poglavlju će biti izračunata talasna funkcija perturbovanog atoma vodonika sa tačnošću do na mali parametar λ, jer će se ona posle koristiti u izračunavanju štarkovskih spektralnih komponenti. Izraz koji se dobija za ovu talasnu funkciju je:

$$\begin{aligned}\Psi^{(1)}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) =& \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) + \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot\psi_{n_1+1,n_2-1,m}(\xi,\eta,\varphi) - \\ &- \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\psi_{n_1-1,n_2+1,m}(\xi,\eta,\varphi).\end{aligned}$$

Talasne funkcije $\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)$ predstavljaju svojstvene talasne funkcije neperturbovanog atoma vodonika, odnosno u odsustvu spoljašnjeg električnog polja.

5.1 Izraz za talasnu funkciju u aproksimaciji do λ

Talasna funkcija koja je određena u aproksimaciji do λ, važna je zbog toga što se pomoću nje u ovom radu izračunavaju intenziteti štarkovskih komponenti. Ova talasna funkcija data je relacijom (A.14) u dodatku A, a glasi:

$$\Psi^{(1)}_{n\nu} = \psi_{n\nu} + \lambda\sum_{\mu\neq\nu}\frac{\langle n\nu|V^{(3)}|n\mu\rangle}{\langle n\nu|V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|V^{(2)}|n\mu\rangle}\cdot\psi_{n\mu}. \tag{5.1}$$

Indeks ν označava posmatrano podstanje kvantnog stanja $|n\rangle$ koje je okarakterisano skupom kvantnih brojeva $\nu \equiv \{n_1, n_2, m\}$, talasna funkcija $\psi_{n\nu} \equiv \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)$ predstavlja svojstvenu talasnu funkciju u paraboličkim koordinatama za slučaj atoma vodonika van spoljašnjeg električnog polja. Indeks μ prebrojava podstanja degenerisanog nivoa sa glavnim kvantnim brojem $n = n_1+n_2+m+1$, a konkretno u ovom slučaju može imati sledeće vrednosti:

$$\mu \in \{\{n_1+1, n_2-1, m\}, \{n_1-1, n_2+1, m\}\}.$$

Indeks μ ima samo ove dve različite vrednosti, jer jedino za te kombinacije paraboličkih kvantnih brojeva matrični elementi operatora $V^{(3)}$ nisu jednaki nuli. Množenjem i delenjem drugog sabirka u jednačini (5.1) sa λ^2, ona se transformiše u :

$$\Psi^{(1)}_{n\nu} = \psi_{n\nu} + \sum_{\mu\neq\nu}\frac{\langle n\nu|\lambda^3V^{(3)}|n\mu\rangle}{\langle n\nu|\lambda^2V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|\lambda^2V^{(2)}|n\mu\rangle}\cdot\psi_{n\mu}. \tag{5.2}$$

Ova transformacija je izvršena s ciljem da se dobiju članovi koji su u prethodnim poglavljima već izračunati. Dakle koristimo sledeće relacije:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\lambda^2V^{(2)}|n\{n_1',n_2',m'\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2)\cdot\delta_{m,m'}\cdot\delta_{n_1,n_1'}\cdot\delta_{n_2,n_2'},$$

kao i

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\lambda^3V^{(3)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)},$$

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\lambda^3V^{(3)}|n\{n_1-1,n_2+1,m\}\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}.$$

Nedijagonalni matrični elementi operatora $\lambda^2 V^{(2)}$ su identički jednaki nuli zbog prisustva Kronekerovih simbola. Samo su dijagonalni elementi matrice ovog operatora različiti od nule:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|\lambda^2 V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2),$$

$$\langle n\{n_1+1,n_2-1,m\}|\lambda^2 V^{(2)}|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2+2),$$

$$\langle n\{n_1-1,n_2+1,m\}|\lambda^2 V^{(2)}|n\{n_1-1,n_2+1,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2-2).$$

Ove matrične elemente možemo zapisati i na sledeći način:

$$\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2), \tag{5.3}$$

$$\langle n\mu_1|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_1\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2+2), \tag{5.4}$$

$$\langle n\mu_2|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_2\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2-2), \tag{5.5}$$

$$\langle n\nu|\lambda^3 V^{(3)}|n\mu_1\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}, \tag{5.6}$$

$$\langle n\nu|\lambda^3 V^{(3)}|n\mu_2\rangle = \frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}, \tag{5.7}$$

gde je $\nu\equiv\{n_1,n_2,m\}$, $\mu_1\equiv\{n_1+1,n_2-1,m\}$ i $\mu_2\equiv\{n_1-1,n_2+1,m\}$. U ovom zapisu talasna funkcija $\Psi^{(\mathrm{I})}_{n\nu}$ data jednačinom (5.2), postaje:

$$\begin{aligned}\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) =&\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) + \frac{\langle n\nu|\lambda^3 V^{(3)}|n\mu_1\rangle}{\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu_1|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_1\rangle}\cdot\psi_{n_1+1,n_2-1,m}(\xi,\eta,\varphi) + \\ &+\frac{\langle n\nu|\lambda^3 V^{(3)}|n\mu_2\rangle}{\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu_2|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_2\rangle}\cdot\psi_{n_1-1,n_2+1,m}(\xi,\eta,\varphi).\end{aligned}$$

Uvrštavanjem relacija za matrične elemente, dalje dobijamo:

$$\begin{aligned}\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) =&\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) + \frac{na_0}{R}\frac{\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}}{-(n_1-n_2)+(n_1-n_2+2)}\cdot\psi_{n_1+1,n_2-1,m}(\xi,\eta,\varphi) + \\ &+\frac{na_0}{R}\frac{\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}}{-(n_1-n_2)+(n_1-n_2-2)}\cdot\psi_{n_1-1,n_2+1,m}(\xi,\eta,\varphi),\end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned}\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) =&\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) + \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot\psi_{n_1+1,n_2-1,m}(\xi,\eta,\varphi) - \\ &-\frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\psi_{n_1-1,n_2+1,m}(\xi,\eta,\varphi).\end{aligned} \tag{5.8}$$

Ova talasna funkcija će se kasnije koristiti za izračunavanje korekcija na intenzitete štarkovskih komponenti, tako što će se pomoću nje nalaziti kvadrati modula matričnih elemenata dipolnog momenta za posmatrane radijativne prelaze kod atoma vodonika.

Poglavlje 6

Određivanje popravke na energiju u aproksimaciji do λ^4

U ovom poglavlju će biti određena vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^4. Ova popravka $\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m}$ ima sledeći oblik:

$$\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^4 \sum_{l\neq n} \frac{\left|\langle n\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_l} + \lambda^4 \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle n\mu|V^{(3)}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|V^{(2)}|n\mu\rangle} + \lambda^4 \langle n\nu|V^{(4)}|n\nu\rangle,$$

Formalno, prva dva člana su druge popravke teorije perturbacije, dok je treći član prva popravka teorije perturbacije. Prvi član opisuje kvadratičan Štarkov efekat, drugi opisuje kvadrupolnu interakciju, a treći oktupolnu interakciju. Zbog toga se ova popravka može prikazati i na sledeći način:

$$\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = E_{\mathrm{QSE}} + E_{\mathrm{QUAD}} + E_{\mathrm{OKTUP}}.$$

Svaki od ovih članova se razmatra i proračunava zasebno. Popravka usled kvadratičnog Štarkovog efekta iznosi:

$$E_{\mathrm{QSE}} = -\frac{1}{16} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}}^2 \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{n^4 a_0^3}{R^4} \cdot [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19].$$

Popravka na energiju usled kvadrupolne interakcije iznosi:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{3}{8} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{a_0^3}{R^4} \cdot n^3 \cdot (n_1 - n_2) \cdot \left[n^2 - (n_1 - n_2)^2 + m^2 - 1\right],$$

dok je popravka na energiju odgovorna za oktupolnu interakciju jednaka

$$E_{\mathrm{OKTUP}} = -\frac{5}{16} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot n^3 a_0^3 \cdot (n_1 - n_2) \cdot [23(n_1 - n_2)^2 - 9n^2 - 3m^2 + 13].$$

Svi ovi doprinosi se mogu objediniti u popravku na energiju koja je određena u aproksimaciji do λ^4, a ona iznosi:

$$\begin{aligned}\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = &-\frac{1}{16} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}}^2 \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{n^4 a_0^3}{R^4} \cdot [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] - \frac{3}{8} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{n^3 a_0^3}{R^4} \cdot (n_1 - n_2) \cdot \\ &\cdot \left[n^2 - (n_1 - n_2)^2 + m^2 - 1\right] - \frac{5}{16} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot n^3 a_0^3 \cdot (n_1 - n_2) \cdot [23(n_1 - n_2)^2 - 9n^2 - \\ &- 3m^2 + 13].\end{aligned}$$

Ova relacija ukazuje na to da popravka $\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m}$ pored kvantnih brojeva n_1 i n_2 zavisi i od kvantnog broja m, što uslovljava dodatno otklanjanje degeneracije u okviru stanja sa glavnim kvantnim brojem n. Degeneracija po kvantnom broju m uvek ostaje, jer za fiksnu vrednost m imamo dve svojstvene talasne funkcije.

6.1 Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^4

Izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^4 dobija se korišćenjem gotovog rezultata izvedenog u dodatku A. Naime, prema relaciji (A.16) izraz za popravku na energiju u aproksimaciji do λ^4 ima sledeći oblik:

$$\lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = \lambda^4 \sum_{l\neq n} \frac{\left|\langle n\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_l} + \lambda^4 \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle n\mu|V^{(3)}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|V^{(2)}|n\mu\rangle} + \lambda^4 \langle n\nu|V^{(4)}|n\nu\rangle. \tag{6.1}$$

Prvi sabirak potiče od kvadratičnog Štarkovog efekta, drugi od kvadrupolne interakcije između jona i atoma vodonika, a treći od oktupolne interakcije. Svaki od ovih članova će biti posebno izračunat.

Ukupna energija stanja sa glavnim kvantnim brojem n i skupom paraboličkih kvantnih brojeva $\{n_1, n_2, m\}$ u aproksimaciji do λ^4 određuje se prema relaciji (A.1) i iznosi:

$$E^{(\mathrm{IV})}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_n + \lambda^2 E^{(2)}_{n_1,n_2,m} + \lambda^3 E^{(3)}_{n_1,n_2,m} + \lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m},$$
$$E^{(\mathrm{IV})}_{n_1,n_2,m} = E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} + \lambda^4 E^{(4)}_{n_1,n_2,m}.$$

Pošto je izraz za energiju $E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m}$ određen, ostaje da se izračunaju svi članovi u relaciji (6.1) i na taj način odredi energija $E^{(\mathrm{IV})}_{n_1,n_2,m}$.

6.1.1 Izračunavanje člana koji potiče od kvadratičnog Štarkovog efekta

Prvi sabirak u relaciji (6.1) potiče od kvadratičnog Štarkovog efekta i rigorozno računanje zahteva mnoštvo suma koje na prvi pogled nije moguće generalizovati:

$$E_{\mathrm{QSE}} = \lambda^4 \sum_{l\neq n} \frac{\left|\langle n\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2}{E^{(0)}_n - E^{(0)}_l}.$$

Zbog toga koristimo rezultat Švarcšild[1]-Epštajn[2]-Średingerovog izvođenja popravke na energiju za atom u konstantnom spoljašnjem električnom polju, koji je u potpunosti objašnjen u dodatku B. Prema relaciji (B.28) ovog dodatka, popravka usled kvadratičnog Štarkovog efekta E_{QSE}[3] iznosi:

$$E_{\mathrm{QSE}} = -\frac{1}{16} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}}^2 \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{n^4 a_0^3}{R^4} \cdot [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19]. \tag{6.2}$$

Uvođenjem parametra λ u poslednji izraz, lako se može pokazati da popravka kvadratičnog Štarkovog efekta zavisi od parametra λ preko četvrtog stepena:

$$E_{\mathrm{QSE}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{16}\frac{Z_{\mathrm{j}}^2}{n^4 a_0} \cdot [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] \cdot \frac{n^8 a_0^4}{R^4},$$
$$E_{\mathrm{QSE}} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{16}\frac{Z_{\mathrm{j}}^2}{n^4 a_0} \cdot [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] \cdot \lambda^4.$$

6.1.2 Izračunavanje člana koji potiče od kvadrupolne interakcije

Drugi sabirak u relaciji (6.1) potiče od kvadrupolne interakcije između jona i atoma vodonika. Može se uočiti da u ovom članu figurišu nedijagonalni matrični elementi operatora $V^{(3)}$ i dijagonalni matrični elementi operatora $V^{(2)}$. Ako se parametar λ uključi u matrične elemente, dobijaju se forme koje su već izračunate u prethodnim poglavljima ovog rada:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \lambda^4 \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle n\mu|V^{(3)}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|V^{(2)}|n\mu\rangle} = \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle n\mu|\lambda^3 V^{(3}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu\rangle}.$$

Pokazano je da su nedijagonalni matrični elementi operatora $\langle n\mu|V^{(3)}|n\nu\rangle$ različiti od nule samo u dva slučaja i to kada je $\mu = \mu_1 \equiv \{n_1 + 1, n_2 - 1, m\}$, odnosno $\mu = \mu_2 \equiv \{n_1 - 1, n_2 + 1, m\}$, pri čemu je $\nu \equiv \{n_1, n_2, m\}$. Dakle, za kvadrupolnu popravku imamo:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \frac{\left|\langle n\mu_1|\lambda^3 V^{(3}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu_1|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_1\rangle} + \frac{\left|\langle n\mu_2|\lambda^3 V^{(3}|n\nu\rangle\right|^2}{\langle n\nu|\lambda^2 V^{(2)}|n\nu\rangle - \langle n\mu_2|\lambda^2 V^{(2)}|n\mu_2\rangle}.$$

[1] Karl Schwarzschild (1873-1916)
[2] Paul Epstein (1871-1939)
[3] QSE=Quadratic Stark Efect

Uzimajući u obzir vrednosti matričnih elemenata date relacijama od (5.3) do (5.7), dobijamo sledeći izraz za kvadrupolnu popravku:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \left[-\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2)+\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2+2)\right]^{-1}\left[\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\right]^2+\left[-\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot(n_1-n_2)+\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{na_0}{R^2}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot(n_1-n_2-2)\right]^{-1}\left[\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^2a_0^2}{R^3}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\right]^2.$$

Većina članova u gornjem izrazu se može skratiti, pa se dobija nešto jednostavnija forma:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot[-(n_1-n_2)+(n_1-n_2+2)]^{-1}\cdot(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)+$$
$$+\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot[-(n_1-n_2)+(n_1-n_2-2)]^{-1}\cdot(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1),$$

odnosno,

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot\left[\frac{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}{-(n_1-n_2)+(n_1-n_2+2)}+\frac{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}{-(n_1-n_2)+(n_1-n_2-2)}\right].$$

Izrazi u imeniocima oba člana u zagradi se mogu dalje srediti, pa sledi:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = \frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot\left[\frac{1}{2}(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)-\frac{1}{2}(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)\right],$$
$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{4}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot\left[(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)-(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)\right].$$

S obzirom da važi $n = n_1 + n_2 + m + 1$, prethodna relacija postaje:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{4}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot\left[(n_2+1)(n_1+m)n_1(n_2+m+1)-(n_1+1)(n_2+m)n_2(n_1+m+1)\right],$$
$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{4}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot I_4. \tag{6.3}$$

Radi jednostavnijeg zapisa uvedena je veličina I_4 koja predstavlja izraz u zagradi. Da bi se dobio jednostavniji izraz za kvadrupolnu energiju, veličina I_4 se dalje transformiše:

$$I_4 = (n_2+1)(n_1+m)n_1(n_2+m+1)-(n_1+1)(n_2+m)n_2(n_1+m+1) = (n_2+1)(n_1+m)n_1n_2+$$
$$+(n_2+1)(n_1+m)n_1(m+1)-(n_1+1)(n_2+m)n_1n_2-(n_1+1)(n_2+m)n_2(m+1) = (n_2+1)\cdot$$
$$\cdot n_1^2n_2+(n_2+1)n_1n_2m+(n_2+1)n_1^2(m+1)+(n_2+1)n_1m(m+1)-(n_1+1)n_1n_2^2-(n_1+1)\cdot$$
$$\cdot n_1n_2m-(n_1+1)n_2^2(m+1)-(n_1+1)n_2m(m+1).$$

Izvršena transformacija je omogućila grupisanje pojedinih članova, tako da dobijamo sledeće:

$$I_4 = n_1^2n_2^2+n_1^2n_2-(n_1-n_2)n_1n_2m+n_1^2n_2(m+1)+n_1^2(m+1)+n_1n_2m(m+1)+n_1m(m+1)-$$
$$-n_1^2n_2^2-n_1n_2^2-n_1n_2^2(m+1)-n_2^2(m+1)-n_1n_2m(m+1)-n_2m(m+1) = (n_1-n_2)n_1n_2-$$
$$-(n_1-n_2)n_1n_2m+(n_1-n_2)n_1n_2(m+1)+(n_1^2-n_2^2)(m+1)+(n_1-n_2)m(m+1).$$

Može se lako uočiti da u svakom sabirku figuriše član $(n_1 - n_2)$, pa se on kao zajednički činilac može izvući ispred zagrade:

$$I_4 = (n_1-n_2)\left[n_1n_2-n_1n_2m+n_1n_2(m+1)+(n_1+n_2)(m+1)+m(m+1)\right] = (n_1-n_2)\left[2n_1n_2+\right.$$
$$\left.+(n_1+n_2+m)(m+1)\right]. \tag{6.4}$$

Dobijena relacija za I_4 je prilično jednostavna, ali je u češćoj upotrebi nešto drugačija forma, koja će ovde i biti izvedena. Da bismo dobili tu formu, moramo drugi sabirak transformisati tako da sadrži glavni kvantni broj n:

$$I_4 = \frac{1}{2}(n_1-n_2)\left[4n_1n_2+2(n_1+n_2+m)(m+1)\right] = \frac{1}{2}(n_1-n_2)\left[4n_1n_2+(n_1+n_2+m+1)(m+1)-\right.$$
$$\left.-(m+1)+(n_1+n_2+m)(m+1)\right] = \frac{1}{2}(n_1-n_2)\left[4n_1n_2+(n_1+n_2+m+1)(n_1+n_2+m+\right.$$
$$\left.+1)-(n_1+n_2+m+1)(n_1+n_2)-(m+1)+(n_1+n_2+m)(m+1)\right].$$

S obzirom da je $n = n_1 + n_2 + m + 1$, dobijamo sledeće:

$$I_4 = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)\left[n^2 + 4n_1n_2 - (n_1+n_2)^2 - (m+1)(n_1+n_2) - (m+1) + (n_1+n_2)(m+1) + m \cdot \right.$$
$$\left. \cdot (m+1)\right] = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)\left[n^2 - (n_1-n_2)^2 - (m+1) + m(m+1)\right].$$

Konačno smo za veličinu I_4 dobili sledeću relaciju:

$$I_4 = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)\left[n^2 - (n_1-n_2)^2 + (m+1)(m-1)\right],$$
$$I_4 = \frac{1}{2}(n_1 - n_2)\left[n^2 - (n_1-n_2)^2 + m^2 - 1\right].$$

Uvrštavajući izraz za I_4 u relaciju za E_{QUAD} (6.3), imamo sledeće:

$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{3}{4} \cdot \frac{n^3 a_0^3}{R^4} \cdot \frac{1}{2} \cdot (n_1 - n_2) \cdot \left[n^2 - (n_1-n_2)^2 + m^2 - 1\right],$$
$$E_{\mathrm{QUAD}} = -\frac{3}{8} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{a_0^3}{R^4} \cdot n^3 \cdot (n_1 - n_2) \cdot \left[n^2 - (n_1-n_2)^2 + m^2 - 1\right]. \tag{6.5}$$

Ovim postupkom smo odredili vrednost popravke na energiju koja potiče od kvadrupolne interakcije.

6.1.3 Izračunavanje člana koji potiče od oktupolne interakcije

Pošto je kvadrupolna popravka na energiju atoma vodonika određena, trebalo bi pristupiti pronalaženju oktupolne popravke na energiju koja je predstavljena trećim sabirkom u jednačini (6.1), odnosno:

$$E_{\mathrm{OKTUP}} = \lambda^4 \langle n\nu | V^{(4)} | n\nu \rangle \equiv \lambda^4 \langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1, n_2, m\} \rangle. \tag{6.6}$$

Dakle, neophodno je odrediti matrične elemente $\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1, n_2, m\} \rangle$ koje ćemo izračunati na sličan način kao što je to urađeno u prethodnim odeljcima ovog rada. Izraz za operator $V^{(4)}$ dat je jednačinom (2.14) i glasi:

$$V^{(4)} = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{1}{8} (\xi^3 - \eta^3 - 9\xi^2\eta + 9\xi\eta^2).$$

S obzirom da operator $V^{(4)}$ ne zavisi od promenljive φ, integracija po toj promenljivoj je nezavisna i kao u slučajevima za $V^{(2)}$ i $V^{(3)}$ dovodi do dijagonalizacije matrice po kvantnom broju m. Za određivanje matričnog elementa $\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1', n_2', m'\} \rangle$ upotrebićemo relaciju (3.4). Na osnovu nje za $\zeta(\xi, \eta) = V^{(4)}$, dobijamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1', n_2', m'\} \rangle = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \frac{1}{8} \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n_1',n_2',m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot$$
$$\cdot (\xi + \eta)(\xi^3 - \eta^3 - 9\xi^2\eta + 9\xi\eta^2) \cdot (\xi\eta)^m \cdot \exp(-\varepsilon_n(\xi + \eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n \eta) \cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n_2'+m}(\varepsilon_n \eta),$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1', n_2', m'\} \rangle = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot \frac{\pi}{16} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n_1',n_2',m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot$$
$$\cdot (\xi + \eta) \cdot (\xi^4 - \eta^4 + 8\xi\eta^3 - 8\xi^3\eta) \cdot (\xi\eta)^m \cdot \exp(-\varepsilon_n(\xi + \eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n \eta) \cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n_2'+m}(\varepsilon_n \eta),$$

Nakon smene promenljivih $x = \varepsilon_n \xi$ i $y = \varepsilon_n \eta$, dobijamo:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(4)} | n\{n_1', n_2', m'\} \rangle = -\frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0 (n^2 a_0)^4} \cdot \frac{\pi}{16} \cdot \delta_{m,m'} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^n_{n_1',n_2',m} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{1}{\varepsilon_n} \int_0^\infty \mathrm{d}y \frac{1}{\varepsilon_n} \cdot$$
$$\cdot (x^4 - y^4 + 8xy^3 - 8x^3y) \frac{1}{\varepsilon_n^4} \cdot (xy)^m \cdot \varepsilon_n^{-2m} \cdot \exp(-(x+y)) \cdot L^m_{n_1+m}(x) \cdot L^m_{n_2+m}(y) \cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1'+m}(x) \cdot L^m_{n_2'+m}(y).$$

Prethodna relacija se može u mnogome pojednostaviti, ako se uzme u obzir da su nama potrebni samo dijagonalni elementi, odnosno slučaj kada su zadovoljene sledeće relacije između kvantnih brojeva:

$$n_1 = n_1', \quad n_2 = n_2', \quad m = m'.$$

Dakle, dijagonalni matrični element operatora $V^{(4)}$ ima sledeći oblik:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{\pi}{16}\cdot\varepsilon^{-(2m+6)}\cdot C^n_{n_1,n_2,m}C^n_{n_1,n_2,m}\cdot\int_0^\infty \mathrm{d}x\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot$$
$$\cdot(x^4-y^4+8xy^3-8x^3y)\cdot(xy)^m\cdot\exp(-(x+y))\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_2+m}(y).$$

Integrale transformišemo da bismo dobili oblike čiji su nam rezultati poznati:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{\pi}{16}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+6)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\left[\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot x^{m+4}\cdot\right.$$
$$\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^m\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)-\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot$$
$$\cdot x^m\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^{m+4}\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)+$$
$$+8\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot x^{m+1}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^{m+3}\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_2+m}(y)-8\int_0^\infty \mathrm{d}x\cdot x^{m+3}\cdot\exp(-x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot L^m_{n_1+m}(x)\cdot\int_0^\infty \mathrm{d}y\cdot y^{m+1}\cdot$$
$$\left.\cdot\exp(-y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\cdot L^m_{n_2+m}(y)\right].$$

Upoređujući integrale u prethodnoj relaciji sa integralom koji je dat jednačinom (1.41), nalazimo da je:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{\pi}{16}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+6)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\left[J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)\cdot\right.$$
$$\cdot J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)-J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4)+8J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)-$$
$$\left.-8J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)\right]. \tag{6.7}$$

Većina integrala u poslednjoj relaciji je već izračunata u prethodnim poglavljima ovog rada, pa se račun neznatno skraćuje. Vrednosti integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)$ su date jednačinama (4.6) i (4.7) i iznose:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}, \tag{6.8}$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}. \tag{6.9}$$

Relacije (4.8) i (4.9) daju izraze za integrale $J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)$, a glase:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot[2n_1+m+1], \tag{6.10}$$

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot[2n_2+m+1]. \tag{6.11}$$

Takođe su poznate i vrednosti za integrale $J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)$ i $J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)$, a date su relacijama (4.12) i (4.13):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot[20n_1^3+30n_1^2m+30n_1^2+12n_1m^2+30n_1m+22n_1+m^3+$$
$$+6m^2+11m+6], \tag{6.12}$$

odnosno,

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [20n_2^3 + 30n_2^2 m + 30n_2^2 + 12n_2 m^2 + 30n_2 m + 22n_2 + m^3 + \\ + 6m^2 + 11m + 6]. \tag{6.13}$$

Preostalo je još da se odredi vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)$. Da bi se ona dobila koristi se jednačina (1.42), prema kojoj je:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = (-1)^{n_1+n_1+2m} \cdot (n_1+m)! \cdot (n_1+m)! \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{4}{n_1-\nu}\binom{4}{n_1-\nu} \frac{(m+4+\nu)!}{\nu!},$$

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = (-1)^{2n_1}[(n_1+m)!]^2 \cdot \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{4}{n_1-\nu}\binom{4}{n_1-\nu} \frac{(m+4+\nu)!}{\nu!}.$$

Binomni koeficijenti su različiti od nule samo ako je zadovoljeno sledeće:

$$(n_1-\nu) \in \{0,1,2,3,4\}, \qquad \text{odnosno} \qquad \nu \in \{n_1, n_1-1, n_1-2, n_1-3, n_1-4\}.$$

Uzimajući prethodni uslov u obzir, izraz za integral $J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)$ postaje:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\binom{4}{0}\binom{4}{0}\frac{(n_1+m+4)!}{n_1!} + \binom{4}{1}\binom{4}{1}\frac{(n_1+m+3)!}{(n_1-1)!} + \binom{4}{2}\binom{4}{2} \cdot \right. \\ \left. \cdot \frac{(n_1+m+2)!}{(n_1-2)!} + \binom{4}{3}\binom{4}{3}\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-3)!} + \binom{4}{4}\binom{4}{4}\frac{(n_1+m)!}{(n_1-4)!}\right].$$

Izračunavanjem binomnih koeficijenata, prethodna relacija postaje:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+4)!}{n_1!} + 16\frac{(n_1+m+3)!}{(n_1-1)!} + 36\frac{(n_1+m+2)!}{(n_1-2)!} + \right. \\ \left. + 16\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-3)!} + \frac{(n_1+m)!}{(n_1-4)!}\right].$$

Članove u zagradi je neophodno transformisati da bi se dobio pogodniji oblik prethodnog izraza, pa imamo:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = [(n_1+m)!]^2 \cdot \left[\frac{(n_1+m+4)!}{n_1!} + 16\frac{n_1(n_1+m+3)!}{n_1(n_1-1)!} + 36\frac{n_1(n_1-1)(n_1+m+2)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)!} + \right. \\ \left. + 16\frac{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1+m+1)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)!} + \frac{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)(n_1+m)!}{n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1-3)(n_1-4)!}\right],$$

odnosno,

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(n_1+m+4)(n_1+m+3)(n_1+m+2)(n_1+m+1) + 16n_1 \cdot \\ \cdot (n_1+m+3)(n_1+m+2)(n_1+m+1) + 36n_1(n_1-1)(n_1+m+2) \cdot \\ \cdot (n_1+m+1) + 16n_1(n_1-1)(n_1-2)(n_1+m+1) + n_1(n_1-1) \cdot \\ \cdot (n_1-2)(n_1-3)].$$

Na ovaj način je dobijena vrednost za integral $J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)$, koja je zapisana u neodgovarajućoj formi, pa će zbog toga izraz u zagradi biti dalje transformisan. Naime, potrebno je izmnožiti sve članove i potom ih grupisati po različitim stepenima kvantnog broja n_1:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(n_1^2 + 2n_1 m + 7n_1 + m^2 + 7m + 12)(n_1+m+2)(n_1+m+1) + \\ + (16n_1^2 + 16n_1 m + 48n_1)(n_1+m+2)(n_1+m+1) + (36n_1^2 - 36n_1)(n_1+m+2) \cdot \\ \cdot (n_1+m+1) + 16(n_1^2 - n_1)(n_1^2 + n_1 m - n_1 - m - 2) + (n_1^2 - n_1)(n_1^2 - 5n_1 + \\ + 6)] = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [(53n_1^2 + 18n_1 m + 19n_1 + m^2 + 7m + 12)(n_1^2 + 2n_1 m + \\ + 3n_1 + m^2 + 3m + 2) + (n_1^2 - n_1)(17n_1^2 + 16n_1 m - 21n_1 - 32m - 26)].$$

Daljim sređivanjem prethodnog izraza se dobija sledeće:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [53n_1^4 + 124n_1^3m + 178n_1^3 + 90n_1^2m^2 + 258n_1^2m + 175n_1^2 + 20n_1m^3 + \\ + 90n_1m^2 + 138n_1m + 74n_1 + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24 + 17n_1^4 + 16n_1^3m - \\ - 38n_1^3 - 48n_1^2m - 5n_1^2 + 32n_1m + 26n_1],$$

odnosno,

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [70n_1^4 + 140n_1^3m + 140n_1^3 + 90n_1^2m^2 + 210n_1^2m + 170n_1^2 + 20n_1m^3 + \\ + 90n_1m^2 + 170n_1m + 100n_1 + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24].$$

Dobijena relacija se može konciznije zapisati na sledeći način:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!} \cdot [70n_1^4 + 140n_1^3(m+1) + 10n_1^2(9m^2 + 21m + 17) + 10n_1 \cdot \\ \cdot (2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24]. \tag{6.14}$$

Analogno se dobija i vrednost integrala $J^m_{n_2+m,n_2+m}(4)$, samo se kvantni broj n_1 zameni sa n_2:

$$J^m_{n_2+m,n_2+m}(4) = \frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [70n_2^4 + 140n_2^3(m+1) + 10n_2^2(9m^2 + 21m + 17) + 10n_2 \cdot \\ \cdot (2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24]. \tag{6.15}$$

Ovim postupkom su određene sve veličine koje figurišu u relaciji za matrični element (6.7). S obzirom da svaka veličina sadrži veći broj članova, bilo bi prilično komplikovano uvrstiti ih sve u relaciju (6.7), pa se zbog toga pribegava jednostavnijem postupku. On podrazumeva množenje svih članova pojedinačno, a zatim njihovo uvrštavanje u navedenu relaciju. Prvo određujemo član $J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)$, pozivajući se na rezultate (6.14) i (6.9):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [70n_1^4 + 140n_1^3(m+1) + 10n_1^2(9m^2 + 21 \cdot \\ \cdot m + 17) + 10n_1(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24].$$

Član $J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4)$ se određuje na osnovu rezultata datih jednačinama (6.15) i (6.8):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [70n_2^4 + 140n_2^3(m+1) + 10n_2^2(9m^2 + 21 \cdot \\ \cdot m + 17) + 10n_2(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24].$$

Proizvod integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)$ nalazimo korišćenjem relacija (6.10) i (6.13):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [2n_1 + m + 1] \cdot [20n_2^3 + 30n_2^2m + 30n_2^2 + \\ + 12n_2m^2 + 30n_2m + 22n_2 + m^3 + 6m^2 + 11m + 6].$$

Nakon množenja svih članova, dobijamo:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [40n_1n_2^3 + 60n_1n_2^2m + 60n_1n_2^2 + 24n_1n_2 \cdot \\ \cdot m^2 + 60n_1n_2m + 44n_1n_2 + 2n_1(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_2^3m + 30n_2^2m^2 + 30n_2^2 \cdot \\ \cdot m + 12n_2m^3 + 30n_2m^2 + 22n_2m + m(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_2^3 + 30n_2^2m + \\ + 30n_2^2 + 12n_2m^2 + 30n_2m + 22n_2 + m^3 + 6m^2 + 11m + 6].$$

Prethodni izraz se može pojednostaviti, ako se grupišu članovi uz iste stepene po n_2:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!} \cdot [40n_1n_2^3 + 60n_1n_2^2(m+1) + 4n_1n_2(6m^2 + \\ + 15m + 11) + 2n_1(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_2^3(m+1) + 30n_2^2m(m+1) + 30n_2^2 \cdot \\ \cdot (m+1) + 12n_2m^2(m+1) + 30n_2m(m+1) + (m+1)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + \\ + 22n_2(m+1)],$$

odnosno,

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot[40n_1n_2^3 + 60n_1n_2^2(m+1) + 4n_1n_2(6m^2 + 15m + 11) + 2n_1(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_2^3(m+1) + 30n_2^2(m+1)^2 + 2n_2\cdot(6m^2 + 15m + 11)(m+1) + (m+1)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6)].$$

Analognim postupkom se nalazi i proizvod integrala $J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)$, samo se u ovom slučaju koriste relacije (6.12) (6.11):

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot[40n_1^3n_2 + 60n_1^2n_2(m+1) + 4n_1n_2(6m^2 + 15m + 11) + 2n_2(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_1^3(m+1) + 30n_1^2(m+1)^2 + 2n_1\cdot(6m^2 + 15m + 11)(m+1) + (m+1)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6)].$$

Konačno su određene vrednosti svih proizvoda integrala koji figurišu u jednačini (6.7), pa je preostalo da se odredi vrednost izraza u zagradi navedene jednačine:

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) - J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4) + 8J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) - 8J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot\Big[70n_1^4 + 140n_1^3(m+1) + 10n_1^2(9m^2 + 21m + 17) + 10n_1(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35\cdot m^2 + 50m + 24 - [70n_2^4 + 140n_2^3(m+1) + 10n_2^2(9m^2 + 21m + 17) + 10n_2(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + m^4 + 10m^3 + 35m^2 + 50m + 24] + 8[40n_1n_2^3 + 60n_1n_2^2(m+1) + 4n_1n_2(6m^2 + 15m + 11) + 2n_1(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_2^3(m+1) + 30n_2^2\cdot(m+1)^2 + 2n_2(6m^2 + 15m + 11)(m+1) + (m+1)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6)] - 8[40\cdot n_1^3n_2 + 60n_1^2n_2(m+1) + 4n_1n_2(6m^2 + 15m + 11) + 2n_2(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) + 20n_1^3(m+1) + 30n_1^2(m+1)^2 + 2n_1(6m^2 + 15m + 11)(m+1) + (m+1)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6)]\Big],$$

odnosno,

$$J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0) - J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4) + 8J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3) - 8J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot I_5. \tag{6.16}$$

Veličina I_5 je uvedena zbog jednostavnijeg zapisa, a i zbog toga što je upravo nju potrebno transformisati da bi se dobio konačan oblik matričnog elementa $\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle$. Prvo se izraz transformiše tako, da svi članovi sadrže faktor $(n_1 - n_2)$, pa se on kao zajednički može izvući ispred zagrade:

$$I_5 = 70(n_1^4 - n_2^4) + 140(n_1^3 - n_2^3)(m+1) + 10(n_1^2 - n_2^2)(9m^2 + 21m + 17) + 10(n_1 - n_2)(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) + 8[-40(n_1^2 - n_2^2)n_1n_2 - 60n_1n_2(n_1 - n_2)(m+1) + 2(n_1 - n_2)(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) - 20(n_1^3 - n_2^3)(m+1) - 30(n_1^2 - n_2^2)(m+1)^2 - 2(n_1 - n_2)(6m^2 + 15m + 11)(m+1)] = 70\cdot(n_1^4 - n_2^4) - 20(n_1^3 - n_2^3)(m+1) + (n_1^2 - n_2^2)[10(9m^2 + 21m + 17) - 320n_1n_2 - 240(m+1)^2] + (n_1 - n_2)[10(2m^3 + 9m^2 + 17m + 10) - 480n_1n_2(m+1) + 16(m^3 + 6m^2 + 11m + 6) - 16\cdot(6m^2 + 15m + 11)(m+1)].$$

Nakon izvlačenja faktora $(n_1 - n_2)$ ispred zagrade, prethodni izraz dobija sledeći oblik:

$$I_5 = (n_1 - n_2)\big[70(n_1^2 + n_2^2)(n_1 + n_2) - 20(n_1^2 + n_1n_2 + n_2^2)(m+1) + (n_1 + n_2)[90m^2 + 210m + 170 - 320n_1n_2 - 240(m^2 + 2m + 1)] + 20m^3 + 90m^2 + 170m + 100 - 480n_1n_2(m+1) + 16m^3 + 96m^2 + 176m + 96 - 96m^3 - 96m^2 - 240m^2 - 240m - 176m - 176\big].$$

Transformacija izraza se dalje vrši tako da se u svim članovima pojavi glavni kvantni broj $n = n_1+n_2+m+1$. Prvo se transformacija vrši na članovima koji sadrže više stepene po n_1 i n_2:

$$\begin{aligned}I_5 =&(n_1-n_2)\big[70(n_1^2+n_2^2)(n_1+n_2)-20(n_1^2+n_1n_2+n_2^2)(m+1)-(n_1+n_2)(150m^2+270m+70)-\\&-320n_1n_2(n_1+n_2)-480n_1n_2(m+1)-60m^3-150m^2-70m+20\big]=(n_1-n_2)\big[70(n_1^2+n_2^2)\cdot\\&\cdot(n_1+n_2+m+1)-70(n_1^2+n_2^2)(m+1)-20(n_1^2+n_2^2)(m+1)-20n_1n_2(m+1)-(n_1+n_2+\\&+m+1)(150m^2+270m+70)-(m+1)(-150m^2-270m-70)-320n_1n_2(n_1+n_2+m+1)-\\&-160n_1n_2(m+1)-60m^3-150m^2-70m+20\big]=(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-90(n_1^2+n_2^2)\cdot\\&\cdot(m+1)-180n_1n_2(m+1)-n(150m^2+270m+70)+150m^3+270m^2+70m+150m^2+\\&+270m+70-60m^3-150m^2-70m+20-320nn_1n_2\big].\end{aligned}$$

Adekvatnim grupisanjem preostalih članova, može se postići da se glavni kvantni broj n sadrži u svakom sabirku u zagradi:

$$\begin{aligned}I_5 =&(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-n(150m^2+270m+70)-320nn_1n_2-90(n_1^2+n_2^2)(m+1)-180n_1n_2\cdot\\&\cdot(m+1)+90m^3+270m^2+270m+90\big]=(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-n(150m^2+270m+70)-\\&-320nn_1n_2-90(n_1+n_2)^2(m+1)+90(m^3+3m^2+3m+1)\big]=(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-\\&-n(150m^2+270m+70)-320nn_1n_2-90(n_1+n_2)(n_1+n_2+m+1)(m+1)+90(n_1+n_2)\cdot\\&\cdot(m+1)^2+90(m+1)^3\big]=(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-n(150m^2+270m+70)-320nn_1n_2-\\&-90(n_1+n_2)n(m+1)+90(n_1+n_2+m+1)(m+1)^2\big]=(n_1-n_2)\big[70n(n_1^2+n_2^2)-n\cdot\\&\cdot(150m^2+270m+70)-320nn_1n_2-90(n_1+n_2)n(m+1)+90n(m+1)^2\big].\end{aligned}$$

Naravno, i kvantni broj n se kao zajednički faktor izvlači ispred zagrade, pa izraz postaje:

$$I_5 = n(n_1-n_2)\big[70(n_1^2+n_2^2)-10(15m^2+27m+7)-320n_1n_2-90(n_1+n_2)(m+1)+90(m+1)^2\big].$$

Sledeća transformacija podrazumeva da se umesto zbira kvadrata $n_1^2+n_2^2$ u izraz uvede kvadrat razlike ovih kvantnih brojeva, odnosno $(n_1-n_2)^2$:

$$\begin{aligned}I_5 =&n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-180n_1n_2-10(15m^2+27m+7)-45(n_1+n_2)(m+1)-45(n_1+n_2)\cdot\\&\cdot(m+1)+90(m+1)^2\big]=n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-180n_1n_2-10(15m^2+27m+7)-45(n_1+\\&+n_2+m+1)(m+1)-45(n_1+n_2)(m+1)+135(m+1)^2\big]=n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-180\cdot\\&\cdot n_1n_2-10(15m^2+27m+7)-45n(n_1+n_2+m+1)+45n(n_1+n_2)-45(n_1+n_2)(m+1)+\\&+135(m+1)^2\big]=n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-180n_1n_2-10(15m^2+27m+7)-45n^2+45\cdot\\&\cdot(n-m-1)(n_1+n_2)+135(m+1)^2\big].\end{aligned}$$

Lako se može uočiti da se pojavio član koji sadrži kvadrat glavnog kvantnog broja n. Dodatnim grupisanjem članova može se dobiti sledeća jednostavna forma za veličinu I_5:

$$\begin{aligned}I_5 =&n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-180n_1n_2-45n^2+45(n_1+n_2)^2-150m^2-270m-70+135m^2+270\cdot\\&\cdot m+135\big]=n(n_1-n_2)\big[70(n_1-n_2)^2-45n^2+45(n_1-n_2)^2-15m^2+65\big]=n(n_1-n_2)\big[115\cdot\\&\cdot(n_1-n_2)^2-45n^2-15m^2+65\big].\end{aligned}$$

Konačno smo odredili vrednost I_5, koja je data relacijom:

$$I_5 = 5n\cdot(n_1-n_2)\cdot\big[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13\big].$$

Veličina I_5 nam omogućuje da odredimo vrednost relacije (6.16):

$$\begin{aligned}&J^m_{n_1+m,n_1+m}(4)J^m_{n_2+m,n_2+m}(0)-J^m_{n_1+m,n_1+m}(0)J^m_{n_2+m,n_2+m}(4)+8J^m_{n_1+m,n_1+m}(1)J^m_{n_2+m,n_2+m}(3)-\\&-8J^m_{n_1+m,n_1+m}(3)J^m_{n_2+m,n_2+m}(1)=\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot 5n\cdot(n_1-n_2)\cdot\\&\cdot\big[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13\big].\end{aligned}$$

Uvrštavanjem prethodne relacije u jednačinu (6.7) koja daje vrednost dijagonalnog matričnog elementa operatora $V^{(4)}$, dobijamo:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle =&-\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{\pi}{16}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+6)}\cdot\left(C^n_{n_1,n_2,m}\right)^2\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\\&\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot 5n\cdot(n_1-n_2)\cdot\big[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13\big].\end{aligned}$$

Zamenom izraza za konstantu $C^n_{n_1,n_2,m}$ iz jednačine (3.2), prethodna relacija postaje:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{\pi}{16}\cdot\varepsilon_n^{-(2m+6)}\cdot\frac{1}{\pi n}\cdot\frac{n_1!\cdot n_2!\cdot\varepsilon_n^{2m+3}}{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_2+m)!]^3}\cdot$$
$$\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot\frac{[(n_2+m)!]^3}{n_2!}\cdot 5n\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13],$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|V^{(4)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = -\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{5}{16}\cdot\varepsilon_n^{-3}\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-$$
$$-3m^2+13].$$

Uvrštavanjem prethodnog izraza u relaciju za oktupolnu popravku energije datu jednačinom (6.6), dobijamo sledeće:

$$E_{\text{OKTUP}} = -\lambda^4\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{5}{16}\cdot\varepsilon_n^{-3}\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13].$$

Preostalo je još da se u izraz za oktupolnu popravku energije uvrste izrazi za parametar λ i veličinu ε_n:

$$E_{\text{OKTUP}} = -\frac{n^8a_0^4}{R^4}\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^4}\cdot\frac{5}{16}\cdot\frac{n^3a_0^3}{Z^3}\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13],$$
$$E_{\text{OKTUP}} = -\frac{5}{16}\cdot\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{n^3a_0^3}{Z^3}\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13].$$

Za atom vodonika ($Z=1$) ova popravka je jednaka:

$$E_{\text{OKTUP}} = -\frac{5}{16}\cdot\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot n^3a_0^3\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-3m^2+13]. \tag{6.17}$$

Ovim postupkom smo konačno odredili izraz za popravku koja karakteriše oktupolnu interakciju.

6.2 Vrednost popravke na energiju u aproksimaciji do λ^4

Pošto su pronađeni izrazi za sve popravke energije koje su proporcionalne četvrtom stepenu parametra λ, moguće je prikazati i njihov sumarni efekat izražen kroz popravku na energiju $\lambda^4E^{(4)}_{n_1,n_2,m}$. Popravka usled kvadratičnog Štarkovog efekta je data relacijom (6.2), usled kvadrupolne interakcije relacijom (6.5), a usled oktupolne interakcije relacijom (6.17). Uvrštavanjem ovih izraza u jednačinu (6.1) koja određuje popravku $\lambda^4E^{(4)}_{n_1,n_2,m}$, dobijamo:

$$\lambda^4E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = E_{\text{QSE}} + E_{\text{QUAD}} + E_{\text{OKTUP}},$$

odnosno,

$$\lambda^4E^{(4)}_{n_1,n_2,m} = -\frac{1}{16}\cdot\frac{Z_j^2\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{n^4a_0^3}{R^4}\cdot[17n^2-3(n_1-n_2)^2-9m^2+19]-\frac{3}{8}\cdot\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{n^3a_0^3}{R^4}\cdot(n_1-n_2)\cdot$$
$$\cdot[n^2-(n_1-n_2)^2+m^2-1]-\frac{5}{16}\cdot\frac{Z_j\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot n^3a_0^3\cdot(n_1-n_2)\cdot[23(n_1-n_2)^2-9n^2-$$
$$-3m^2+13]. \tag{6.18}$$

Dakle, poslednja relacija daje izraz za treću popravku na energiju u aproksimaciji do λ^4. Može se uočiti da ova popravka pored kvantnih brojeva n_1 i n_2 zavisi i od kvantnog broja m, što uslovljava potpuno cepanje nivoa, odnosno otklanjanje degeneracije u okviru stanja sa glavnim kvantnim brojem n.

Ovim je završena analiza Štarkovog efekta atoma vodonika u aproksimaciji najbližeg suseda. Određen je izraz za elektrostatički potencijal, a potom su izračunate sve popravke na energiju zaključno sa popravkom u aproksimaciji do λ^4. Vrednosti energija koje su izračunate u ovom delu, poslužiće u izračunavanju intenziteta štarkovskih komponenti u dipolnoj aproksimaciji. Takođe će se ove relacije koristiti u izračunavanju pomeraja pojedinih štarkovskih komponenti.

Deo III

Pomeraji i intenziteti pojedinih Štarkovih komponenti – poreklo asimetrije vodonikovih spektralnih linija

Poglavlje 7

Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti

U ovom poglavlju će biti određeni pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti, u aproksimaciji dipolne i kvadrupolne interakcije koje su sadržane u izrazu za energiju $E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m}$. Promena energijskog nivoa sa glavnim kvantnim brojem n koja se odvija pod uticajem dipolne i kvadrupolne interakcije, dovodi do promene energije emitovanog fotona koji nastaje pri prelazu sa početnog stanja $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle$ na krajnje stanje $|n'\{n'_1,n'_2,m'\}\rangle$. Promena u energiji emitovanog fotona zavisi kako od početnog tako i od krajnjeg stanja, a u skali frekvencija iznosi:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\left[\Delta^{\mathrm{d}}_{n\to n'} + \frac{a_0}{R}\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'}\right],$$

gde je R rastojanje između atoma vodonika i najbližeg suseda-perturbera (pozitivnog jona), a veličine $\Delta^{\mathrm{d}}_{n\to n'}$ i $\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'}$ su definisane na sledeći način

$$\Delta^{\mathrm{d}}_{n\to n'} = n'(n'_1 - n'_2) - n(n_1 - n_2),$$

$$\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'} = \frac{1}{3}\cdot\left[n^4 - n^2 - 6(n_1-n_2)^2\cdot n^2 - n'^4 + n'^2 + 6(n'_1-n'_2)^2\cdot n'^2\right].$$

Prelaz na skalu talasnih dužina odvija se prema relaciji:

$$\Delta\omega_{n\to n'} \approx -\frac{2\pi c}{\left(\lambda^{(0)}_{n\to n'}\right)^2}\cdot\Delta\lambda_{n\to n'},$$

gde je $\lambda^{(0)}_{n\to n'}$ talasna dužina koja odgovara centralnoj komponenti, odnosno prelazu između neperturbovanog početnog i krajnjeg stanja.

7.0.1 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u skali frekvencija

Pri određivanju energije kvantnog stanja $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle$ zadržaćemo se na članovima do trećeg stepena parametra λ, odnosno na vrednosti za energiju $E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m}$. Ova energija je data relacijom (4.17) i iznosi:

$$E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} = -\frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot n(n_1-n_2) + \frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{2R^3}\cdot n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2 - n^2 + 1]\right].$$

Uzimajući ovu relaciju u obzir, odnosno popravku energetskog stanja do na kvadrupolnu interakciju, možemo izračunati frekvenciju kvanta elektromagnetnog zračenja pri prelazu $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle \to |n'\{n'_1,n'_2,m'\}\rangle$:

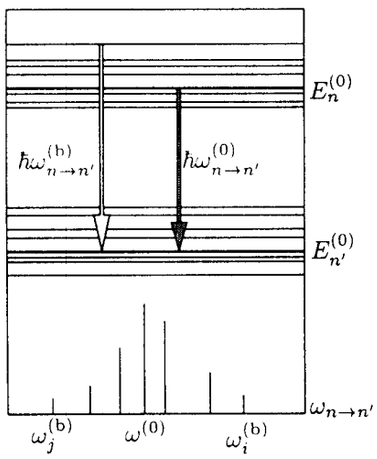
$$\hbar\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} = E^{(\mathrm{III})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{III})}_{n'_1,n'_2,m'} = -\frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot n(n_1-n_2) + \frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{2R^3}\cdot n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2 - n^2+1]\right] + \frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2a_0^2}\frac{1}{n'^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot n'(n'_1-n'_2) + \frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{2R^3}\cdot n'^2\cdot[6(n'_1-n'_2)^2 - n'^2+1]\right],$$

gde oznaka (b) ukazuje da se radi o bočnoj, odnosno perturbovanoj komponenti. Grupisanjem odgovarajćih članova u prethodnoj relaciji može se dobiti pogodniji oblik za energiju kvanta elektromagnetnog zračenja:

$$\hbar\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} = -\frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0^2}\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right] - \frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot\left[n(n_1-n_2) - n'(n'_1-n'_2)\right] - \frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{2R^3}\cdot\Big[n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2 - n^2+1] - n'^2\cdot[6(n'_1-n'_2)^2 - n'^2+1]\Big],$$

odnosno,

$$\hbar\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0}\left[\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right] + \frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot\left[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)\right] + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0^2}{2R^3}\cdot\Big[n'^2\cdot$$
$$\cdot\left[6(n_1'-n_2')^2-n'^2+1\right]-n^2\cdot\left[6(n_1-n_2)^2-n^2+1\right]\Big].$$



Slika 7.1 Bočne ($\Delta^\mathrm{d}\neq 0$) i centralne ($\Delta^\mathrm{d}=0$) štarkovske komponente u dipolnoj aproksimaciji

Prvi član u izrazu za $\hbar\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}$ predstavlja neperturbovanu komponentu (slika 7.1), koja nastaje prelazom sa neperturbovanog energetskog stanja $E_n^{(0)}$ na neperturbovano stanje $E_{n'}^{(0)}$ i iznosi:

$$\hbar\omega^{(0)}_{n\to n'} = E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)},$$
$$\hbar\omega^{(0)}_{n\to n'} = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0^2}\left[\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right],$$
$$\hbar\omega^{(0)}_{n\to n'} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2a_0}\left[\frac{1}{n'^2}-\frac{1}{n^2}\right].$$

Uzimajući u obzir prethodnu relaciju, izraz za energiju kvanta elektromagnetnog zračenja postaje:

$$\hbar\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} = \hbar\omega^{(0)}_{n\to n'} + \frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-$$
$$-n(n_1-n_2)\Big] + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0^2}{2R^3}\cdot\Big[n'^2[6(n_1'-n_2')^2-$$
$$-n'^2+1]-n^2[6(n_1-n_2)^2-n^2+1]\Big].$$

Pogodno je na ovom mestu uvesti pomeraj odgovarajuće štarkovske komponente od centralne, odnosno neperturbovane:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} - \omega^{(0)}_{n\to n'}. \tag{7.1}$$

U slučaju kada je energija određena sa tačnošću do na λ^3, ovi pomeraji iznose:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{1}{\hbar}(\omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} - \omega^{(0)}_{n\to n'}) = \frac{1}{\hbar}\cdot\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{3}{2}\frac{Z_\mathrm{j}}{R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)\Big] + \frac{1}{\hbar}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0^2}{2R^3}\cdot$$
$$\Big[n'^2\cdot[6(n_1'-n_2')^2-n'^2+1]-n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2-n^2+1]\Big].$$

Prethodna relacija se može transformisati tako da se dobije faktor koji množi oba člana, pa se kao zajednički može izvući ispred zagrade. Na taj način dobijamo sledeću relaciju:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)\Big] + \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\frac{a_0}{R}\cdot\frac{1}{3}\cdot$$
$$\cdot\Big[n'^2\cdot[6(n_1'-n_2')^2-n'^2+1]-n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2-n^2+1]\Big],$$

odnosno,

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)+\frac{a_0}{R}\cdot\frac{1}{3}\cdot\Big[n'^2\cdot[6(n_1'-n_2')^2-n'^2+1]-$$
$$-n^2\cdot[6(n_1-n_2)^2-n^2+1]\Big]\Big] = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)+\frac{a_0}{R}\cdot$$
$$\cdot\frac{1}{3}\cdot\Big[6(n_1'-n_2')^2\cdot n'^2-n'^4+n'^2-6(n_1-n_2)^2\cdot n^2+n^4-n^2\Big]\Big].$$

Konačno je dobijen izraz za frekvenciju pomeraja štarkovske komponente atoma vodonika koja odgovara prelazu $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle \to |n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$. Ova frekvencija zavisi kako od kvantnih brojeva početnog i krajnjeg stanja tako i od međusobnog rastojanja R atoma vodonika i najbližeg suseda (pozitivnog jona):

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\Big[n'(n_1'-n_2')-n(n_1-n_2)+\frac{a_0}{R}\cdot\frac{1}{3}\cdot\Big[n^4-n^2-6(n_1-n_2)^2\cdot n^2-$$
$$-n'^4+n'^2+6(n_1'-n_2')^2\cdot n'^2\Big]\Big].$$

Pošto prvi član u prethodnoj relaciji potiče od dipolne interakcije, a drugi od kvadrupolne, mogu se uvesti nove veličine koje opisuju dipolnu i kvadrupolnu interakciju nezavisno i date su sledećim izrazima:

$$\Delta^{\mathrm{d}}_{n\to n'} = n'(n'_1 - n'_2) - n(n_1 - n_2), \tag{7.2}$$

$$\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'} = \frac{1}{3}\cdot\left[n^4 - n^2 - 6(n_1 - n_2)^2\cdot n^2 - n'^4 + n'^2 + 6(n'_1 - n'_2)^2\cdot n'^2\right]. \tag{7.3}$$

Uzimajući u obzir poslednju relaciju, izraz za $\Delta\omega_{n\to n'}(R)$ postaje:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) = \frac{3}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot a_0}{\hbar R^2}\cdot\left[\Delta^{\mathrm{d}}_{n\to n'} + \frac{a_0}{R}\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'}\right]. \tag{7.4}$$

7.0.2 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u skali talasnih dužina

Da bi se dobili pomeraji odgovarajućih štarkovskih komponenti u skali talasnih dužina, moramo krenuti od relacije koja daje vezu između frekvencije i talasne dužine:

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda}.$$

Uzimajući prethodnu relaciju u obzir, jednačina (7.1) postaje:

$$\Delta\omega_{n\to n'} = \omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} - \omega^{(0)}_{n\to n'} = 2\pi c\left[\frac{1}{\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}} - \frac{1}{\lambda^{(0)}_{n\to n'}}\right]. \tag{7.5}$$

Uvođenjem razlike talasnih dužina bočne i neperturbovane štarkovske komponente:

$$\Delta\lambda_{n\to n'} = \lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} - \lambda^{(0)}_{n\to n'},$$

relacija (7.5) postaje

$$\Delta\omega_{n\to n'} = \omega^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} - \omega^{(0)}_{n\to n'} = 2\pi c\cdot\frac{\lambda^{(0)}_{n\to n'} - \lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}}{\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}\cdot\lambda^{(0)}_{n\to n'}} = -2\pi c\cdot\frac{\Delta\lambda_{n\to n'}}{\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}\cdot\lambda^{(0)}_{n\to n'}}.$$

U poslednjoj relaciji figurišu veličine $\Delta\lambda_{n\to n'}$, $\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}$ i $\lambda^{(0)}_{n\to n'}$, a pošto su one međusobno zavisne, jedna od njih se može eliminisati. Pošto je veličina $\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'}$ data relacijom:

$$\lambda^{(\mathrm{b})}_{n\to n'} = \Delta\lambda_{n\to n'} + \lambda^{(0)}_{n\to n'},$$

pomeraj štarkovske komponente iznosi

$$\Delta\omega_{n\to n'} = -2\pi c\cdot\frac{\Delta\lambda_{n\to n'}}{\left(\Delta\lambda_{n\to n'} + \lambda^{(0)}_{n\to n'}\right)\cdot\lambda^{(0)}_{n\to n'}} = -\frac{2\pi c}{\left(\lambda^{(0)}_{n\to n'}\right)^2}\cdot\Delta\lambda_{n\to n'}\left[\frac{\Delta\lambda_{n\to n'}}{\lambda^{(0)}_{n\to n'}} + 1\right]^{-1}.$$

Za spektralne linije od interesa u realnim fizičkim uslovima, pomeraj spektralne linije je mnogo manji od vrednosti talasne dužine neperturbovane spektralne linije:

$$\Delta\lambda_{n\to n'} \ll \lambda^{(0)}_{n\to n'}.$$

Zbog toga se pomeraj štarkovske linije izražen preko talasnih dužina, može jednostavnije predstaviti kao:

$$\Delta\omega_{n\to n'} \approx -\frac{2\pi c}{\left(\lambda^{(0)}_{n\to n'}\right)^2}\cdot\Delta\lambda_{n\to n'}. \tag{7.6}$$

Relacija (7.6) predstavlja pomeraj štarkovske komponente izražen u skali talasnih dužina.

7.0.3 Pomeraji pojedinih Štarkovih komponenti u bezdimenzionoj skali

Interesantno je predstaviti pomeraj štarkovskih komponenti i u bezdimenzionoj skali. Da bismo to uradili, uvodimo normalnu jačinu električnog polja $\vec{K}_0$ kao:

$$\vec{K}_0 = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_{\mathrm{j}}\cdot e}{R_0^2}\cdot\vec{e}_R,$$

gde je R_0 srednje rastojanje među teškim naelektrisanim česticama koje čine mikropolje u plazmi. U slučaju vodonikove plazme, koncentracija jona $\mathcal{N}_{\mathrm{H}^+}$ je jednaka koncentaciji elektrona $\mathcal{N}_{\mathrm{e}}$ i iznosi:

$$\mathcal{N}_{\mathrm{H}^+} = \frac{N_{\mathrm{H}^+}}{V} = \frac{N_{\mathrm{H}^+}}{N_{\mathrm{H}^+}} \cdot \frac{3}{4\pi R_0^3} = \frac{3}{4\pi R_0^3},$$

ali samo u slučaju da se joni smatraju sferama radijusa R_0. Takođe se može izraziti i veličina R_0 preko koncentracije jona kao:

$$R_0 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_{\mathrm{H}^+}^{-\frac{1}{3}} = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_e^{-\frac{1}{3}}. \tag{7.7}$$

Na osnovu relacija (7.4), (7.6) uz neznatne transformacije dobijamo sledeće:

$$\Delta\omega_{n\to n'}(R) \equiv -\frac{2\pi c}{\left(\lambda_{n\to n'}^{(0)}\right)^2} \cdot \Delta\lambda_{n\to n'} = \frac{3}{2} \cdot \frac{Z_{\mathrm{j}} \cdot e}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{R_0^2} \cdot eR_0^2 \cdot \frac{a_0}{\hbar R^2} \cdot \left[\Delta_{n\to n'}^{\mathrm{d}} + \frac{a_0}{R}\frac{R_0}{R_0} \cdot \Delta_{n\to n'}^{\mathrm{q}}\right].$$

U poslednju relaciju se može uvesti jačina normalnog električnog polja K_0:

$$-\frac{2\pi c}{\left(\lambda_{n\to n'}^{(0)}\right)^2} \cdot \Delta\lambda_{n\to n'} = -\frac{3}{2} \cdot K_0 \cdot \frac{R_0^2}{R^2} \cdot \frac{a_0 e}{\hbar} \cdot \left[\Delta_{n\to n'}^{\mathrm{d}} + \frac{a_0}{R_0}\frac{R_0}{R} \cdot \Delta_{n\to n'}^{\mathrm{q}}\right].$$

Sledeće transformacije se sprovode da bi se dobio pogodan oblik prethodne relacije koji će omogućiti uvođenje novih promenljivih:

$$-\frac{\Delta\lambda_{n\to n'}}{K_0} = -\frac{\left(\lambda_{n\to n'}^{(0)}\right)^2}{2\pi c} \cdot \frac{3}{2} \cdot \frac{R_0^2}{R^2} \cdot \frac{a_0 e}{\hbar} \cdot \left[\Delta_{n\to n'}^{\mathrm{d}} + \frac{a_0}{R_0}\frac{R_0}{R} \cdot \Delta_{n\to n'}^{\mathrm{q}}\right]. \tag{7.8}$$

Sada možemo uvesti nove promenljive koje su date relacijama:

$$\begin{aligned}
\alpha_{n\to n'} &= -\frac{\Delta\lambda_{n\to n'}}{K_0}, \\
a_{n\to n'} &= -\frac{3}{4\pi} \cdot \frac{a_0 e}{\hbar c} \cdot \left(\lambda_{n\to n'}^{(0)}\right)^2 \cdot \Delta_{n\to n'}^{\mathrm{d}}, \\
b_{n\to n'} &= -\frac{3}{4\pi} \cdot \frac{a_0 e}{\hbar c} \cdot \frac{a_0}{R_0} \cdot \left(\lambda_{n\to n'}^{(0)}\right)^2 \cdot \Delta_{n\to n'}^{\mathrm{q}}, \\
t &= \frac{R_0}{R}.
\end{aligned} \tag{7.9}$$

Uvrštavajući ove promenljive u relaciju (7.8), ona dobija mnogo jednostavniji oblik:

$$\alpha_{n\to n'} = a_{n\to n'} \cdot t^2 + b_{n\to n'} \cdot t^3.$$

Važno je uočiti da je $|b_{n\to n'}| < |a_{n\to n'}|$, odnosno važi:

$$\frac{|b_{n\to n'}|}{|a_{n\to n'}|} \approx \frac{a_0}{R_0} \sim 10^{-4}.$$

Vrednosti veličina $a_{n\to n'}$ i $b_{n\to n'}$ mogu biti i pozitivne i negativne, pa i $\alpha_{n\to n'}$ može imati dvojaki predznak. Pozitivna vrednost $\alpha_{n\to n'}$ se odnosi na "plave" komponente, a negativna vrednost na "crvene". Pomeraji pojedinih štarkovskih komponenti nisu simetrični u odnosu na neperturbovanu komponentu, što je glavni doprinos asimetriji vodonikovih spektralnih linija. Tablice za ove komponente se mogu naći u [12].

Poglavlje 8

Nalaženje matričnih elemenata električnog dipolnog momenta

U ovom poglavlju će biti pokazano na koji način se vrši izračunavanje matričnih elemenata koordinata, jer su ti matrični elementi srazmerni matričnim elementima električnog dipolnog momenta. Ovi poslednji se pak javljaju u izrazima za intenzitete štarkovskih komponenti pa je njihovo izračunavanje neizbežno. Pod pretpostavkom da se z-osa poklapa sa pravcem spoljašnjeg polja, emitovano zračenje pri prelazu $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle \rightarrow |n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ se može razložiti prema polarizaciji na dve komponente i to na komponentu koja je polarizovana paralelno polju (π-polarizacija) i komponentu polarizovanu u ravni normalnoj na pravac polja (σ-polarizacija). Iz izraza za matrične elemente direktno se dobijaju izborna pravila za magnetni kvantni broj m:

$$\Delta m = m' - m = 0 \qquad \pi - \text{polarizacija},$$
$$\Delta m = m' - m = \pm 1 \qquad \sigma - \text{polarizacija}.$$

Opšti izraz za matrične elemente operatora oblika $\zeta(\xi, \eta, \varphi)$

Za izračunavanje intenziteta Štarkovih komponenti neophodno je poznavati izraze za matrične elemente električnog dipolnog momenta, jer oni figurišu i relaciji za intenzitet neke spektralne linije. S obzirom da je električni dipolni moment $\vec{d}$ definisan kao proizvod $e \cdot \vec{r}$, pronalaženje matričnih elemenata dipolnog momenta se svodi na izračunavanje matričnih elemenata koordinata.

Dakle, pri računanju očekivane vrednosti dipolnog momenta atoma vodonika u aproksimaciji najbližeg suseda za jonsko mikroelektrično polje pri emisionom prelazu $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle \rightarrow |n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ $(n \neq n')$, neophodno je naći matrične elemente operatora koordinata. Ako se koordinatni sistem postavi tako da se z-osa poklapa sa pravcem spoljašnjeg polja, tada se emitovano dipolno zračenje može podeliti na deo koji je polarizovan paralelno polju (duž z-ose) što daje π-komponente i na deo koji je polarizovan u ravni normalnoj na pravac polja (xy-ravan) što daje σ-komponente. Da bi se odredili matrični elementi koordinata u paraboličkom koordinatnom sistemu, moramo prvo razmotriti opšti oblik matričnih elemenata za operator koji je proizvoljna funkcija paraboličkih koordinata.

Matrični element neke funkcije $\zeta(\xi, \eta, \varphi)$ u paraboličkim koordinatama dat je sledećom relacijom:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|\zeta(\xi, \eta, \varphi)|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle = \int_\tau \psi^*_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) \cdot \zeta(\xi, \eta, \varphi) \cdot \psi_{n_1', n_2', m'}(\xi, \eta, \varphi) \cdot \mathrm{d}\tau,$$

gde je $\zeta(\xi, \eta, \varphi)$ bilo koja fizička veličina. Pošto se integracija vrši po celom prostoru, prethodna relacija postaje:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|\zeta(\xi, \eta, \varphi)|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \frac{1}{4} \cdot (\xi + \eta) \cdot \psi^*_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) \cdot \zeta(\xi, \eta, \varphi) \cdot$$
$$\cdot\, \psi_{n_1', n_2', m'}(\xi, \eta, \varphi),$$

pri čemu je uzet u obzir i izraz za element zapremine u paraboličkom koordinatnom sistemu $\mathrm{d}\tau$. Prema jednačini (1.48), talasna funkcija je jednaka:

$$\psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) \equiv |n\{n_1, n_2, m\}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon^{m + \frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1 + m)!]^3 \cdot [(n_2 + m)!]^3}} \cdot (\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi + \eta)) \cdot$$
$$\cdot\, L^m_{n_1 + m}(\varepsilon_n \xi) \cdot L^m_{n_2 + m}(\varepsilon_n \eta) \cdot \exp(\pm i m \varphi).$$

Ova relacija se kraće može zapisati kao:

$$\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) = C^n_{n_1,n_2,m} \cdot (\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n(\xi+\eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta) \cdot \exp(\pm im\varphi),$$

gde su konstanta $C^n_{n_1,n_2,m}$ i ε_n dati relacijom (3.2) i iznose

$$C^n_{n_1,n_2,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3}}, \quad \text{i} \quad \varepsilon_n = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{m_e e^2}{\hbar^2} Z \frac{1}{n} = \frac{1}{n}\frac{Z}{a_0}.$$

Konačno je matrični element funkcije $\zeta(\xi,\eta,\varphi)$ jednak:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta,\varphi)|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{1}{4}\int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot (\xi+\eta) \cdot C^n_{n_1,n_2,m} \cdot (\xi\eta)^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n \cdot \\ \cdot (\xi+\eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta) \cdot \exp(\mp im\varphi) \cdot \zeta(\xi,\eta,\varphi) \cdot C^{n'}_{n_1',n_2',m'} \cdot (\xi\eta)^{\frac{m'}{2}} \cdot \\ \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_{n'}(\xi+\eta)) \cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_{n'}\xi) \cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_{n'}\eta) \cdot \exp(\pm im'\varphi).\end{aligned}$$

Ako se funkcija $\zeta(\xi,\eta)$ može predstaviti kao proizvod dve funkcije od kojih jedna zavisi samo od promenljivih ξ i η, a druga samo od promenljive φ, odnosno:

$$\zeta(\xi,\eta,\varphi) = \zeta_1(\xi,\eta) \cdot \zeta_2(\varphi),$$

matrični element postaje $\zeta(\xi,\eta,\varphi)$

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta,\varphi)|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{1}{4} \cdot C^n_{n_1,n_2,m} C^{n'}_{n_1',n_2',m'} \int_0^\infty d\xi \int_0^\infty d\eta \cdot (\xi+\eta) \cdot \zeta_1(\xi,\eta) \cdot \\ \cdot (\xi\eta)^{\frac{1}{2}(m+m')} \cdot \exp(-\frac{1}{2}(\varepsilon_n+\varepsilon_{n'})(\xi+\eta)) \cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi) \cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta) \cdot \\ \cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_{n'}\xi) \cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_{n'}\eta) \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \zeta_2(\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi).\end{aligned} \tag{8.1}$$

Predstavljanje funkcije $\zeta(\xi,\eta,\varphi)$ kao proizvoda dve funkcije $\zeta_1(\xi,\eta)$ i $\zeta_2(\varphi)$ je opravdano zbog toga što koordinate x, y i z imaju istu takvu zavisnost od paraboličkih promenljivih ξ, η i φ. Pored toga, funkcionalna zavisnost Dekartovih koordinata od paraboličkih direktno daje izborna pravila po magnetnom kvantnom broju m.

8.1 Određivanje izbornih pravila za kvantni broj m

Za određivanje izbornih pravila za kvantni broj m odgovoran je integral po promenljivoj φ koji figuriše u izrazu za matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|\zeta(\xi,\eta,\varphi)|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$, a ima oblik:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \zeta_2(\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi). \tag{8.2}$$

Prvo ćemo pronaći izborna pravila za magnetni parabolički kvantni broj m i to u slučaju π-polarizovanih komponenti. Ovo znači da je neophodno pronaći uslov za kvantni broj m, koji mora biti zadovoljen da bi matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$ bio različit od nule. Prema relaciji (1.3) komponenta z se u paraboličkim koordinatama može prikazati kao:

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

To znači da je funkcija $\zeta_2(\varphi)$ koja figuriše u integralu (8.2) identički jednaka jedinici, pa integral postaje:

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \zeta_2(\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi) = \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi).$$

Ovaj integral je već izračunat, a njegova vrednost je data relacijom (3.3) i iznosi:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi) = 2\pi \cdot \delta_{m,m'}. \tag{8.3}$$

Kronekerov simbol ukazuje na to da se od nule razlikuju samo oni matrični elementi kod kojih je zadovoljena relacija:

$$m = m', \qquad \text{odnosno} \qquad \Delta m = m' - m = 0. \tag{8.4}$$

Poslednja relacija upravo predstavlja izborno pravilo za kvantni broj m u slučaju π-polarizovanih komponenti. Preostalo je još da se odrede izborna pravila za m u slučaju σ-polarizovanih komponenti dipolnog zračenja. To podrazumeva nalaženje uslova za kvantni broj m, koji mora biti zadovoljen da bi matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|x \pm iy|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$ bio različit od nule. Veličina $x \pm iy$ opisuje kružno polarizovanu svetlost u xy-ravni. Prema relaciji (1.1) i (1.2) veličina $x \pm iy$ se u paraboličkim koordinatama može prikazati kao:

$$x \pm iy = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi \pm i\sqrt{\xi\eta}\sin\varphi = \sqrt{\xi\eta}(\cos\varphi \pm i\sin\varphi).$$

Korišćenjem Moavrovog[1] obrasca:

$$\cos\varphi \pm i\sin\varphi = \exp(\pm i\varphi),$$

dobijamo da je funkcija $\zeta_2(\varphi)$ koja figuriše u integralu (8.2) jednaka $\exp(\pm i\varphi)$, pa integral postaje:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \zeta_2(\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi) = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm i\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi),$$

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \zeta_2(\varphi) \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi) = \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm i(m'-m\pm 1)\varphi).$$

Ovaj integral ima isti oblik kao (3.3), pa je njegovo rešenje:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm i(m'-m\pm 1)\varphi) = 2\pi \cdot \delta_{m\pm 1,m'}.$$

Kronekerov simbol ukazuje na to da se od nule razlikuju samo oni matrični elementi kod kojih je zadovoljena relacija:

$$m = m' \pm 1, \qquad \text{odnosno} \qquad \Delta m = m' - m = \pm 1.$$

Poslednja relacija predstavlja izborno pravilo za kvantni broj m u slučaju σ-polarizovanih komponenti. Pošto smo odredili izborna pravila za m, možemo preći na izračunavanje matričnih elemenata koordinata.

8.2 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$

Pošto se z-osa poklapa sa pravcem spoljašnjeg polja, koordinata z je odgovorna za π-komponentu zračenja. Da bi se odredio matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$ neophodno je iskoristiti relaciju (8.1), koja u ovom slučaju postaje:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{1}{4}\cdot C^{n}_{n_1,n_2,m}C^{n'}_{n_1',n_2',m'} \int_0^\infty \mathrm{d}\xi \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \cdot (\xi+\eta)\cdot\frac{1}{2}(\xi-\eta)\cdot(\xi\eta)^{\frac{1}{2}(m+m')}\cdot \\ \cdot \exp(-\frac{1}{2}(\varepsilon_n+\varepsilon_{n'})(\xi+\eta))\cdot L^{m}_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^{m}_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_{n'}\xi)\cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_{n'}\eta)\cdot \\ \cdot \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \exp(\pm i(m'-m)\varphi),\end{aligned}$$

[1] Abraham de Moivre (1667-1754)

jer je $\zeta_1(\xi,\eta) = z$ i $\zeta_2(\varphi) = 1$. Integracija po promenljivoj φ je već izvršena i data izrazom (8.3), a prethodna relacija se dalje može izraziti kao:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{4}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^{n}_{n_1,n_2,m}C^{n'}_{n_1',n_2',m'}\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\int_0^\infty \mathrm{d}\eta\cdot(\xi^2-\eta^2)\cdot(\xi\eta)^{\frac{1}{2}(m+m')}\cdot$$
$$\cdot\exp(-\frac{1}{2}(\varepsilon_n+\varepsilon_{n'})(\xi+\eta))\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_2+m}(\varepsilon_n\eta)\cdot L^{m'}_{n_1'+m'}(\varepsilon_{n'}\xi)\cdot L^{m'}_{n_2'+m'}(\varepsilon_{n'}\eta).$$

Pogodno je uvesti nove oznake za parametre koje će u mnogome pojednostaviti zapis, a date su relacijama:

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\varepsilon_n+\varepsilon_{n'}) = \frac{Z}{2a_0}\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n'}\right) = \frac{Z}{2a_0}\frac{n+n'}{nn'},$$
$$a = \frac{\varepsilon_n}{\bar{\varepsilon}} = \frac{Z}{a_0 n}\frac{2a_0}{Z}\frac{nn'}{n+n'} = \frac{2n'}{n+n'},$$
$$b = \frac{\varepsilon_{n'}}{\bar{\varepsilon}} = \frac{Z}{a_0 n'}\frac{2a_0}{Z}\frac{nn'}{n+n'} = \frac{2n}{n+n'}.$$

Takođe se iz istog razloga uvode i nove promenljive $u = \bar{\varepsilon}\cdot\xi$ i $v = \bar{\varepsilon}\cdot\eta$, pa izraz za matrični element postaje:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{4}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^{n}_{n_1,n_2,m}C^{n'}_{n_1',n_2',m}\int_0^\infty \mathrm{d}u\cdot\frac{1}{\bar{\varepsilon}}\int_0^\infty \mathrm{d}v\cdot\frac{1}{\bar{\varepsilon}}\cdot\frac{u^2-v^2}{\bar{\varepsilon}^2}\cdot(uv)^m\cdot$$
$$\cdot\bar{\varepsilon}^{-2m}\cdot\exp(-(u+v))\cdot L^m_{n_1+m}(au)\cdot L^m_{n_2+m}(bu)\cdot L^m_{n_1'+m}(av)\cdot L^m_{n_2'+m}(bv),$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{4}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^{n}_{n_1,n_2,m}C^{n'}_{n_1',n_2',m}\cdot\bar{\varepsilon}^{-2(m+2)}\cdot\left[\int_0^\infty \mathrm{d}u\int_0^\infty \mathrm{d}v\cdot(u^2-v^2)\cdot\right.$$
$$\left.\cdot(uv)^m\cdot\exp(-(u+v))\cdot L^m_{n_1+m}(au)\cdot L^m_{n_2+m}(bu)\cdot L^m_{n_1'+m}(av)\cdot L^m_{n_2'+m}(bv)\right].$$

Razdvajanjem integrala po promenljivama, dobija se sledeća relacija:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{4}\cdot\delta_{m,m'}\cdot C^{n}_{n_1,n_2,m}C^{n'}_{n_1',n_2',m}\cdot\bar{\varepsilon}^{-2(m+2)}\cdot\left[\int_0^\infty \mathrm{d}u\cdot u^{m+2}\cdot\exp(-u)\cdot\right.$$
$$\cdot L^m_{n_1+m}(au)\cdot L^m_{n_2+m}(bu)\int_0^\infty \mathrm{d}v\cdot v^m\cdot\exp(-v)\cdot L^m_{n_1'+m}(av)\cdot L^m_{n_2'+m}(bv) - \int_0^\infty \mathrm{d}u\cdot u^m\cdot$$
$$\left.\cdot\exp(-u)\cdot L^m_{n_1+m}(au)\cdot L^m_{n_2+m}(bu)\int_0^\infty \mathrm{d}v\cdot v^{m+2}\cdot\exp(-v)\cdot L^m_{n_1'+m}(av)\cdot L^m_{n_2'+m}(bv)\right].$$

Prethodna relacija je dovedena na oblik u kom figurišu integrali čije smo vrednosti u mogućnosti da odredimo. Naime, integrali u relaciji za matrični element $\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$ imaju sledeći oblik:

$$J^k_{n,m}(p,a,b) = \int_0^\infty \mathrm{d}u\cdot\exp(-u)\cdot u^{k+p}\cdot L^k_n(au)\cdot L^k_m(bu). \tag{8.5}$$

Rešenje ovog integrala se može odrediti korišćenjem relacija (1.41) i (1.42):

$$J^k_{n,m}(\sigma) = \int_0^\infty x^{k+\sigma}\exp(-x)\cdot L^k_n(x)\cdot L^k_m(x)\cdot\mathrm{d}x, \tag{8.6}$$

$$J^k_{n,m}(\sigma) = (-1)^{n+m}\cdot n!\cdot m!\cdot\sum_{\nu=0}^{\mathrm{M}}\binom{\sigma}{m-k-\nu}\binom{\sigma}{n-k-\nu}\frac{(k+\sigma+\nu)!}{\nu!}, \tag{8.7}$$

gde je $M = \min\{n-k, m-k\}$. Takođe se koristi i osobina asociranih Lagerovih polinoma data sledećom formulom:

$$L_n^k(au) = n! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \binom{n}{\beta} (1-a)^{n-\beta} \cdot a^\beta \cdot \frac{L_\beta^k(u)}{\beta!}.$$

Dakle, da bismo odredili vrednost integrala (8.5) moramo ga svesti na oblik (8.6). To postižemo korišćenjem navedene osobine asociranih Lagerovih polinoma primenjene na $L_n^k(au)$ i $L_m^k(bu)$:

$$J_{n,m}^k(p,a,b) = \int_0^\infty du \cdot \exp(-u) \cdot u^{k+p} \cdot n! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \binom{n}{\beta} (1-a)^{n-\beta} \cdot a^\beta \cdot \frac{L_\beta^k(u)}{\beta!} \cdot m! \cdot \sum_{\gamma=0}^{m} \binom{m}{\gamma} (1-b)^{m-\gamma} \cdot$$
$$\cdot\, b^\gamma \cdot \frac{L_\gamma^k(u)}{\gamma!} = n! \cdot m! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \sum_{\gamma=0}^{m} \binom{n}{\beta} \binom{m}{\gamma} (1-a)^{n-\beta} \cdot (1-b)^{m-\gamma} \cdot a^\beta \cdot b^\gamma \cdot \frac{1}{\beta!} \cdot \frac{1}{\gamma!} \cdot$$
$$\cdot \int_0^\infty du \cdot \exp(-u) \cdot u^{k+p} \cdot L_\beta^k(u) \cdot L_\gamma^k(u).$$

Integral u poslednjem izrazu se svodi na oblik integrala dat relacijom (8.6), pa dalje imamo:

$$J_{n,m}^k(p,a,b) = n! \cdot m! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \sum_{\gamma=0}^{m} \binom{n}{\beta} \binom{m}{\gamma} (1-a)^{n-\beta} \cdot (1-b)^{m-\gamma} \cdot a^\beta \cdot b^\gamma \cdot \frac{1}{\beta!} \cdot \frac{1}{\gamma!} \cdot J_{\beta,\gamma}^k(p).$$

Vrednost integrala $J_{\beta,\gamma}^k(p)$ se može odrediti na osnovu relacije (8.6), pa rešenje integrala $J_{n,m}^k(p,a,b)$ dobija sledeći oblik:

$$J_{n,m}^k(p,a,b) = n! \cdot m! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \sum_{\gamma=0}^{m} \binom{n}{\beta} \binom{m}{\gamma} (1-a)^{n-\beta} \cdot (1-b)^{m-\gamma} \cdot a^\beta \cdot b^\gamma \cdot \frac{1}{\beta!} \cdot \frac{1}{\gamma!} \cdot (-1)^{\beta+\gamma} \cdot \beta! \cdot \gamma! \cdot$$
$$\cdot \sum_{\nu=0}^{M} \binom{p}{\beta-k-\nu} \binom{p}{\gamma-k-\nu} \frac{(k+p+\nu)!}{\nu!},$$

gde je $M = \min\{\beta-k, \gamma-k\}$. Ovim postupkom smo konačno odredili vrednost integrala $J_{n,m}^k(p,a,b)$, a data je sledećom relacijom:

$$J_{n,m}^k(p,a,b) = n! \cdot m! \cdot \sum_{\beta=0}^{n} \sum_{\gamma=0}^{m} \binom{n}{\beta} \binom{m}{\gamma} (1-a)^{n-\beta} \cdot (1-b)^{m-\gamma} \cdot a^\beta \cdot b^\gamma \cdot (-1)^{\beta+\gamma} \cdot \sum_{\nu=0}^{M} \binom{p}{\beta-k-\nu} \cdot$$
$$\cdot \binom{p}{\gamma-k-\nu} \frac{(k+p+\nu)!}{\nu!}, \tag{8.8}$$

gde je $M = \min\{\beta-k, \gamma-k\}$. S obzirom da je vrednost integrala $J_{n,m}^k(p,a,b)$ poznata, možemo relaciju za matrični element z koordinate zapisati kao:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle = \frac{\pi}{4} \cdot C_{n_1,n_2,m}^n C_{n_1',n_2',m}^{n'} \cdot \bar{\varepsilon}^{-2(m+2)} \cdot \Big[J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2,a,b) \cdot$$
$$\cdot\, J_{n_2+m,n_2'+m}^m(0,a,b) - J_{n_1+m,n_1'+m}^m(0,a,b) J_{n_2+m,n_2'+m}^m(2,a,b)\Big] \cdot \delta_{m,m'}. \tag{8.9}$$

Rešavanje prethodne relacije nije problem s obzirom da su poznata rešenja integrala tipa $J_{n,m}^k(p,a,b)$. Međutim, prilično je komplikovano uopštiti ovaj izraz, pa ćemo u tu svrhu koristiti rezultat dobijen u [13] i [14]. Za matrični element z koordinate atoma vodonikovog tipa, dobija se:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|n'\{n_1',n_2',m\}\rangle = \frac{(-1)^{n_1'+n_2'} \cdot a_0}{4(m!)^2 \cdot Z} \cdot \sqrt{\frac{(n_1+m)!}{n_1!} \cdot \frac{(n_2+m)!}{n_2!} \cdot \frac{(n_1'+m)!}{n_1'!} \cdot \frac{(n_2'+m)!}{n_2'!}} \cdot$$
$$\cdot \frac{(4nn')^{m+2}}{(n-n')^{2(m+2)}} \cdot \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'} \cdot \left[\left(2(n_1'-n_2')\frac{n^2+n'^2}{(n+n')^2} - (n_1-n_2)\frac{4nn'}{(n+n')^2}\right) \cdot\right.$$
$$\cdot\, G_m(n_1,n_1') \cdot G_m(n_2,n_2') - 2\Big[n_1' \cdot G_m(n_1,n_1'-1) \cdot G_m(n_2,n_2') - n_2' \cdot G_m(n_1,n_1') \cdot$$
$$\left.\cdot\, G_m(n_2,n_2'-1)\Big]\right]. \tag{8.10}$$

G_m je hipergeometrijska funkcija $F(a,b,c,x)$[2] koja iznosi:

$$F(a,b,c,x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(a)_n\cdot(b)_n}{n!\cdot(c)_n}\cdot x^n \qquad \text{gde je} \qquad (a)_n=a(a+1)(a+2)\ldots(a+n-1).$$

Takođe mora biti zadovoljeno da je $(a)_0=1$ i $a\neq 0$. Isto važi i za parametre b i c. U izrazu za matrični element (8.10) figurišu funkcije oblika $G_m(n_i,n_i')$ gde je $i=1,2$, koje su sa hipergeometrijskom funkcijom povezane sledećom relcijom:

$$G_m(n_i,n_i')=F\left(-n_i,-n_i',m+1,-\frac{4nn'}{(n-n')^2}\right)=1-\frac{n_i\cdot n_i'}{m+1}\cdot\frac{4nn'}{(n-n')^2}+\ldots \tag{8.11}$$

Relacija (8.10) postaje znatno jednostavnija kada se radi o Lajmanovoj[3] seriji, jer je tada $n'=1$ i $n_1'=n_2'=m'=0$, a sam matrični element dobija oblik:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|z|1\{0,0,0\}\rangle=\frac{a_0}{4\cdot Z}\cdot\sqrt{\frac{(n_1+m)!}{n_1!}\cdot\frac{(n_2+m)!}{n_2!}}\cdot\frac{(4n)^{m+2}}{(n-1)^{2(m+2)}}\cdot\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^{n+1}\cdot$$
$$\cdot\left[-(n_1-n_2)\frac{4n}{(n+1)^2}\cdot G_m(n_1,0)\cdot G_m(n_2,0)\right]. \tag{8.12}$$

Vrednost kvantnog broja m nije proizvoljna, već je određena izbornim pravilom (8.4) i iznosi $m=m'=0$. Funkcije $G_m(n_1,0)$ i $G_m(n_2,0)$ su prema definiciji hipergeometrijske funkcije jednake:

$$G_m(n_i,0)=F\left(-n_i,0,m+1,-\frac{4n}{(n-1)^2}\right)=1-\frac{n_i\cdot 0}{m+1}\cdot\frac{4n}{(n-1)^2}+\ldots=1.$$

Uzimanjem u obzir poslednje dve činjenice, relacija (8.12) postaje:

$$\langle n\{n_1,n_2,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle=-\frac{a_0}{4\cdot Z}\cdot\sqrt{\frac{n_1!}{n_1!}\cdot\frac{n_2!}{n_2!}}\cdot\frac{(4n)^2}{(n-1)^4}\cdot\left(\frac{n-1}{n+1}\right)^{n+1}\cdot(n_1-n_2)\frac{4n}{(n+1)^2},$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1,n_2,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle=-\frac{a_0}{Z}\cdot 16\cdot n^3\cdot\frac{(n-1)^{n-3}}{(n+1)^{n+3}}\cdot(n_1-n_2). \tag{8.13}$$

Provera identičnosti navedenih formula (8.9) i (8.10) za izračunavanje matričnog elementa z koordinate biće sprovedena na Lajmanovoj liniji Ly-α koja nastaje pri prelazu $|2\{n_1,n_2,m\}\rangle\to|1\{0,0,0\}\rangle$, a detaljan proračun je sproveden u dodatku C. Sada je potrebno izračunati i matrične elemente x koordinate.

8.3 Određivanje matričnih elemenata $\langle n\{n_1,n_2,m\}|x|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$

Određivanje matričnog elementa x koordinate koji karakteriše σ-polarizaciju zračenja, neće detaljno biti sprovedeno, već ćemo samo navesti rezultat iz [13]:

$$\langle n\{n_1,n_2,m\}|x|n'\{n_1',n_2',m-1\}\rangle=\frac{(-1)^{n_1'+n_2'}\cdot a_0}{4[(m-1)!]^2\cdot Z}\cdot\sqrt{\frac{(n_1+m)!}{n_1!}\cdot\frac{(n_2+m)!}{n_2!}\cdot\frac{(n_1'+m-1)!}{n_1'!}}\cdot$$
$$\cdot\sqrt{\frac{(n_2'+m-1)!}{n_2'!}}\cdot\frac{(4nn')^{m+1}}{(n-n')^{2(m+1)}}\cdot\left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'}\cdot\left[G_{m-1}(n_1,n_1')\cdot G_{m-1}(n_2,n_2')-\right.$$
$$\left.-\left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^2\cdot G_{m-1}(n_1+1,n_1')\cdot G_{m-1}(n_2+1,n_2')\right]. \tag{8.14}$$

Ova relacija je napisana za slučaj kada je $m'=m-1$, odnosno kada krajnje stanje ima niži magnetni kvantni broj. Ona se može koristiti i u slučaju kada je $m'=m+1$, ali je neophodno izvršiti smenu početnog

[2]Pored ove za hipergeometrijsku funkciju se koriste i oznake:

$$F\left[\begin{matrix}a,b;\\c;\end{matrix}\ x\right] \qquad \text{ili} \qquad {}_2F_1(a,b;c;x).$$

[3]Theodore Lyman (1874-1954)

i krajnjeg stanja $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle \leftrightarrow |n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$, a potom izvršiti smenu kvantnog broja $m \to m+1$. Pošto je koordinata x ermitski[4] operator, izmena krajnjeg i početnog stanja ne menja vrednost matričnog elementa:

$$\langle n'\{n_1', n_2', m\}|x|n\{n_1, n_2, m+1\}\rangle = \frac{(-1)^{n_1'+n_2'} \cdot a_0}{4(m!)^2 \cdot Z} \cdot \sqrt{\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!} \cdot \frac{(n_2+m+1)!}{n_2!} \cdot \frac{(n_1'+m)!}{n_1'!}} \cdot$$
$$\cdot \sqrt{\frac{(n_2'+m)!}{n_2'!}} \cdot \frac{(4nn')^{m+2}}{(n-n')^{2(m+2)}} \cdot \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^{n+n'} \cdot \Big[G_m(n_1, n_1') \cdot G_m(n_2, n_2') -$$
$$- \left(\frac{n-n'}{n+n'}\right)^2 \cdot G_m(n_1+1, n_1') \cdot G_m(n_2+1, n_2')\Big]. \tag{8.15}$$

Kao primer nalaženja matričnih elemenata za σ-komponente poslužiće linija Lajmanove serije Ly-α atoma vodonika koja odgovara prelazu $|2\{0,0,1\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$, kao i linija Balmerove[5] serije atoma vodonika H-α koja odgovara prelazu $|3\{1,1,0\}\rangle \to |2\{0,0,1\}\rangle$. Detaljno izračunavanje je dato u dodatku C.

Pošto su utvrđene relacije po kojima se nalaze vrednosti matričnih elemenata koordinata, a samim tim i vrednosti matričnih elemenata električnog dipolnog momenta može se preći na izračunavanje intenziteta neperturbovanih štarkovskih komponenti.

[4]Charles Hermite (1822-1901)
[5]Johann Jakob Balmer (1825-1898)

Poglavlje 9

Određivanje intenziteta Štarkovih komponenti

U ovom poglavlju će biti određeni intenziteti štarkovskih komponenti u dipolnoj aproksimaciji, sa tačnošću do na mali parametar λ. Izraz koji će biti dobijen je sledeći:

$$I^{(\mathrm{I})}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'} + I^{(1)}_{n\to n'} \cdot t.$$

gde je $t = R_0/R$, $I^{(0)}_{n\to n'}$ neperturbovan intenzitet, a $I^{(1)}_{n\to n'}$ prva popravka na intenzitet. Prva popravka $I^{(1)}_{n\to n'}$ se nalazi prema relaciji:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'} \cdot \frac{a_0}{R_0} \langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle,$$

gde veličina $\varepsilon^{(1)}$ zavisi od matričnih elemenata električnog dipolnog momenata. Intenzitet $I^{(0)}_{n\to n'}$ se nalazi prema formuli:

$$I^{(0)}_{n\to n'} = g_{n\to n'} \cdot \frac{1}{C^2_{n\to n'}} \cdot \left(r^{n_1,n_2,m}_{n'_1,n'_2,m'}\right)^2,$$

gde je $g_{n\to n'}$ statistička težina prelaza, a izraz u zagradi matrični element $\langle n\{n_1, n_2, m\}|r|n'\{n'_1, n'_2, m'\}\rangle$. Izraz za intenzitet u dipolnoj aproksimaciji ima takav oblik da dovodi do pojave različitih intenziteta odgovarajućih štarkovskih komponenti koje se javljaju u okviru jedne spektralne linije atoma vodonika. Ovim je pokazano da popravka $I^{(1)}_{n\to n'}$ unosi određen stepen asimetrije u profil vodonikovih linija, ali je ovaj doprinos mnogo manji od onog koji potiče od kvadrupolnog doprinosa pomerajima štarkovskih komonenti (7.4).

9.1 Intenzitet spektralne linije u dipolnoj aproksimaciji

Da bismo pokazali čemu je jednak intenzitet zračenja pri nekom prelazu iz početnog $|i\rangle$ u krajnje stanje $|f\rangle$, krenućemo od izraza za verovatnoću ovog prelaza koji se može naći u bilo kom udžbeniku iz kvantne mehanike (npr. [15]):

$$\mathrm{d}P_{fi} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3 m_e^2} \cdot \left|\langle f|\vec{p} \cdot \exp(-i\vec{k}\vec{r})\,|i\rangle \cdot \vec{e}_\alpha\right|^2 \mathrm{d}\Omega,$$

gde je ω frekvencija zračenja, $\vec{e}_\alpha$ jedinični vektor pravca polarizacije, $\vec{k}$ talasni vektor, $\vec{p}$ impuls i $\mathrm{d}\Omega$ elementaran prostorni ugao. Eksponencijalna funkcija u matričnom elementu se može razviti u red, pošto je proizvod $\vec{k}\vec{r}$ mala veličina. Naime, intenzitet radijus vektora je reda veličine Borovog radijusa a_0, a talasni broj odgovara zračenju iz vidljive oblasti spektra, pa je proizvod $\vec{k}\vec{r}$ reda veličine 10^{-4}. Razvojem eksponencijalne funkcije u red se dobija:

$$\exp(-i\vec{k}\vec{r}) = 1 - i\vec{k}\vec{r} + \frac{1}{2!}(\vec{k}\vec{r})^2 + \ldots$$

Ako se u ovom razvoju zadržimo samo na prvom članu, kažemo da je izvršena dipolna aproksimacija. Verovatnoća prelaza u tom slučaju postaje:

$$\mathrm{d}P_{fi} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{\omega}{2\pi\hbar c^3 m_e^2} \cdot \left|\langle f|\vec{p}|i\rangle \cdot \vec{e}_\alpha\right|^2 \mathrm{d}\Omega.$$

Pogodno je impuls izraziti preko komutatora operatora koordinate $\vec{r}$ i hamiltonijana $\hat{H}$ i to na sledeći način:

$$[\vec{r},\hat{H}] = \left[\vec{r},\frac{\vec{p}^2}{2m_e}+\hat{V}(\vec{r})\right] = \frac{1}{2m_e}\cdot[\vec{r},\vec{p}^2] = \frac{\vec{p}}{m_e}\cdot[\vec{r},\vec{p}] = \frac{\vec{p}}{m_e}\cdot i\hbar,$$
$$\vec{p} = \frac{m_e}{i\hbar}\cdot[\vec{r},\hat{H}].$$

Dejstvo hamiltonijana na funkcije $|i\rangle$ i $|f\rangle$ je poznato, pa se za matrični element impulsa $\vec{p}$, koji se javlja u izrazu za verovatnoću prelaza, dobija sledeće:

$$\langle f|\vec{p}|i\rangle = \langle f|\frac{m_e}{i\hbar}\cdot[\vec{r},\hat{H}]|i\rangle = \frac{m_e}{i\hbar}\cdot\langle f|\vec{r}\hat{H}-\hat{H}\vec{r}|i\rangle = \frac{m_e}{i\hbar}\cdot(\langle f|\vec{r}\hat{H}|i\rangle - \langle f|\hat{H}\vec{r}|i\rangle),$$
$$\langle f|\vec{p}|i\rangle = \frac{m_e}{i\hbar}\cdot(E_i\langle f|\vec{r}|i\rangle - E_f\langle f|\vec{r}|i\rangle) = \frac{im_e}{\hbar}\cdot(E_f-E_i)\cdot\langle f|\vec{r}|i\rangle.$$

Razlika energija početnog i krajnjeg stanja, upravo je jednaka energiji emitovanog zračenja:

$$E_f - E_i = \hbar\omega,$$

pa verovatnoća prelaza postaje

$$\mathrm{d}P_{fi} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\omega}{2\pi\hbar c^3 m_e^2}\cdot\left|\frac{im_e}{\hbar}\cdot(E_f-E_i)\cdot\langle f|\vec{r}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2\mathrm{d}\Omega = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\cdot\left|\langle f|\vec{r}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2\mathrm{d}\Omega.$$

Ako se uzme u obzir da je električni dipolni moment definisan kao $\vec{d} = e\vec{r}$, verovatnoća spontanog prelaza dobija sledeći oblik:

$$\mathrm{d}P_{fi} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\cdot\left|\langle f|\vec{d}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2\mathrm{d}\Omega.$$

Spektralni intenzitet spontane emisije se dobija kada se energija fotona $\hbar\omega$ koji se emituje pri ovom prelazu pomnoži brojem emisionih procesa N_{if} koji se dešavaju u jedinici vremena i po jedinici zapremine:

$$\mathrm{d}I_{fi} = \hbar\omega\cdot N_{if},$$

gde je $N_{if} = N_i\cdot\mathrm{d}P_{fi}$. Veličina N_i je okupacioni broj po jedinici zapremine za početno kvantno stanje $|i\rangle$. Ovaj okupacioni broj je dat Bolcmanovom[1] formulom:

$$\frac{N_i}{N} = \frac{g_i}{u(T)}\cdot\exp(-\frac{E_i}{kT}),$$

gde je N koncentracija atoma u osnovnom stanju, g_i statistička težina početnog kvantnog stanja posmatranog prelaza, a $u(T)$ particiona funkcija. Ova funkcija zavisi od temperature ambijenta T i data je relacijom:

$$u(T) = \sum_i g_i\cdot\exp(-\frac{E_i}{kT}),$$

gde je E_i energija kvantnog stanja $|i\rangle$. Uvrštavanjem navedenih relacija u izraz za $\mathrm{d}I_{fi}$, dobija se sledeće:

$$\mathrm{d}I_{fi} = \hbar\omega\cdot N_i\cdot\mathrm{d}P_{fi} = \hbar\omega\cdot\frac{g_i\cdot N}{u(T)}\cdot\exp(-\frac{E_i}{kT})\cdot\mathrm{d}P_{fi},$$
$$\mathrm{d}I_{fi} = g_i\cdot\hbar\omega\cdot\frac{N}{u(T)}\cdot\exp(-\frac{E_i}{kT})\cdot\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\cdot\left|\langle f|\vec{d}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2\mathrm{d}\Omega,$$
$$\mathrm{d}I_{fi} = g_i\cdot\frac{N}{u(T)}\cdot\exp(-\frac{E_i}{kT})\cdot\frac{\mathrm{d}\Omega}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{\omega^4}{2\pi c^3}\cdot\left|\langle f|\vec{d}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2.$$

Pošto se u praksi spektralni intenzitet daje u relativnim jedinicama, gornja relacija se može napisati i u sledećem obliku:

$$\mathrm{d}I_{fi} = g_i\cdot\frac{1}{C_{fi}^2}\cdot\left|\langle f|\vec{d}|i\rangle\cdot\vec{e}_\alpha\right|^2,$$

gde C_{fi}^2 predtavlja konstantu za dati prelaz i temperaturu ambijenta. U ovom slučaju se kaže da je intenzitet spektralnog zračenja dat u Šredingerovim jedinicama. Ovim je pokazano da je intenzitet zračenja pri prelazu iz početnog $|i\rangle$ u krajnje stanje $|f\rangle$ u dipolnoj aproksimaciji srazmeran kvadratu modula matričnog elementa električnog dipolnog momenta. Sada možemo preći na izračunavanje intenziteta štrarkovskih komponenti i to u aproksimaciji do λ.

[1] Ludwig Boltzmann (1844-1906)

9.2 Određivanje intenziteta Štarkovih komponenti u aproksimaciji do λ

U jednom od prethodnih poglavlja ovog rada, određen je izraz za talasnu funkciju sa tačnošću do na mali parametar λ. Relacija koja daje ovu zavisnost je (5.8), a ima sledeći oblik:

$$\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) = \psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi) + \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot\psi_{n_1+1,n_2-1,m}(\xi,\eta,\varphi) - \\ - \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\psi_{n_1-1,n_2+1,m}(\xi,\eta,\varphi).$$

Prethodna relacija se može zapisati i upotrebom Dirakove[2] notacije:

$$\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m} = |n\{n_1,n_2,m\}\rangle + \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot|n\{n_1+1,n_2-1,m\}\rangle - \\ - \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot|n\{n_1-1,n_2+1,m\}\rangle.$$

Jednostavnija forma poslednje relacije data je sledećim izrazom:

$$\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m} = |n\{n_1,n_2,m\}\rangle + \sum_{\nu}{}' \mathcal{A}_\nu|n\nu\rangle, \tag{9.1}$$

gde je koeficijent $\mathcal{A}_\nu$ definisan kao proizvod parametra λ i koeficijenta $\beta_{n\{n_1,n_2,m\},n\nu}$ koji je određen u dodatku A relacjom (A.13). Dakle, za koeficijent $\mathcal{A}_\nu$ dobijamo sledeći izraz:

$$\mathcal{A}_\nu = \frac{\langle n\nu|\lambda^3V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle}{\langle n\{n_1,n_2,m\}|\lambda^2V^{(2)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle - \langle n\nu|\lambda^2V^{(2)}|n\nu\rangle} = \frac{\langle n\nu|\lambda^3V^{(3)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle}{E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{II})}_{\nu}}, \tag{9.2}$$

gde je operator $V^{(3)}$ definisan relacijom (2.13), a energija $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ relacijom (3.12). Moguće vrednosti za koeficijente $\mathcal{A}_\nu$ se direktno mogu pročitati iz izraza za talasnu funkciju $\Psi^{(\mathrm{I})}_{n_1,n_2,m}$, a iznose:

$$\mathcal{A}_\nu \in \left\{-\frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)},\ \frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\right\}. \tag{9.3}$$

Indeks ν pri prebrojavanju početnih stanja ima sledeće moguće vrednosti:

$$\nu \in \{\{n_1-1,n_2+1,m\},\{n_1+1,n_2-1,m\}\}, \tag{9.4}$$

dok oznaka $'$ na sumi predstavlja uslov da indeks ν ne može da uzme vrednost trenutno posmatranog početnog stanja $\{n_1,n_2,m\}$. Za određivanje intenziteta spektralnih linija neophodno je utvrditi vrednost matričnog elementa dipolnog momenta $\vec{d}$ pri prelazu $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle \to |n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$. Imajući u vidu da je talasna funkcija data relacijom (9.1), za matrični element se dobija:

$$\langle\Psi^{(\mathrm{I})}_n|\vec{d}|\Psi^{(\mathrm{I})}_{n'}\rangle = \Big(\langle n\{n_1,n_2,m\}| + \sum_{\nu}{}'\langle n\nu|\mathcal{A}^*_\nu\Big)\vec{d}\Big(|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle + \sum_{\mu}{}'\mathcal{A}_\mu|n'\mu\rangle\Big),$$

gde μ uzima sledeće vrednosti

$$\mu \in \{\{n_1'-1,n_2'+1,m'\},\{n_1'+1,n_2'-1,m'\}\}. \tag{9.5}$$

Da bi zapis bio što jednostavniji, uvodimo skraćene oznake za početno i krajnje stanje:

$$|n\{n_1,n_2,m\}\rangle \equiv |n\rangle,$$
$$|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle \equiv |n'\rangle.$$

Nakon uvođenja ovih veličina i množenja svih članova, izraz za matrični element postaje:

$$\langle\Psi^{(\mathrm{I})}_n|\vec{d}|\Psi^{(\mathrm{I})}_{n'}\rangle = \langle n|\vec{d}|n'\rangle + \sum_{\nu}{}'\mathcal{A}^*_\nu\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle + + \sum_{\mu}{}'\mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle + \sum_{\nu}{}'\sum_{\mu}{}'\mathcal{A}^*_\nu\mathcal{A}_\mu\langle n\nu|\vec{d}|n'\mu\rangle.$$

Pošto je intenzitet spektralne linije srazmeran kvadratu modula matričnog elementa dipolnog momenta, potrebno je pronaći vrednost sledećeg izraza:

$$\left|\langle\Psi^{(\mathrm{I})}_n|\vec{d}|\Psi^{(\mathrm{I})}_{n'}\rangle\right|^2 = \Big(\langle\Psi^{(\mathrm{I})}_n|\vec{d}|\Psi^{(\mathrm{I})}_{n'}\rangle\Big)\cdot\Big(\langle\Psi^{(\mathrm{I})}_n|\vec{d}|\Psi^{(\mathrm{I})}_{n'}\rangle\Big)^*,$$

[2]Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984)

odnosno,

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = \Big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle + \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu^*\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle + \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle + \sum_\nu{}' \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\nu^*\mathcal{A}_\mu\langle n\nu|\vec{d}|n'\mu\rangle\Big)\cdot$$
$$\cdot\Big(\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\big(\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu^*\big(\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big)^* + \sum_\nu{}' \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\nu\mathcal{A}_\mu^*\cdot$$
$$\cdot\big(\langle n\nu|\vec{d}|n'\mu\rangle\big)^*\Big).$$

Kao rezultat množenja u prethodnoj relaciji javlja se velik broj članova, ali nije neophodno zadržati sve, već samo one koji su proporcionalni parametru λ. Pošto se ovaj parametar javlja samo u veličini $\mathcal{A}_\nu$ i pri tome su proporcionalni $\mathcal{A}_\nu \sim \lambda$, neophodno je u izrazu zadržati samo one članove koji ne zavise od $\mathcal{A}_\nu$ ili su proporcionalni $\mathcal{A}_\nu$:

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = \langle n|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\big(\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu^*\big(\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big)^* +$$
$$+ \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu^*\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*.$$

Prvi član u poslednjem izrazu predstavlja kvadrat modula matričnog elementa dipolnog momenta u neperturbovanom stanju:

$$\left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2 = \langle n|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*,$$

dok je veličina $\mathcal{A}_\nu$ jednaka svojoj konjugovanoj vrednosti $\mathcal{A}_\nu^*$, s obzirom da je to realna veličina. Imajući sve ovo u vidu izraz za kvadrat modula matričnog elementa postaje:

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = \left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2 + \langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\big(\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\big(\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big)^* +$$
$$+ \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*. \tag{9.6}$$

U dobijenom izrazu se mogu grupisati prvi i treći član, kao i drugi i četvrti, ali ako se prethodno izvrši adekvatna transformacija. Ova transformacija podrazumeva sledeće promene u okviru prvog i drugog člana:

$$\langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\big(\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big)^* = \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*,$$
$$\langle n|\vec{d}|n'\rangle\sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\big(\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big)^* = \sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*.$$

Uvrštavanjem poslednje dve relacije u izraz za kvadrat modula matričnog elementa (9.6), dobijamo sledeće:

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = \left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2 + 2\sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^* + 2\sum_\mu{}' \mathcal{A}_\mu\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*.$$

U prethodnoj relaciji se može prvi član izvući ispred zagrade, s obzirom da on odgovara neperturbovanom staju, pa se dobija:

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = \left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2\cdot\left[1 + 2\sum_\nu{}' \frac{\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*}{\left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2}\cdot\mathcal{A}_\nu + 2\sum_\mu{}' \frac{\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*}{\left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2}\cdot\mathcal{A}_\mu\right].$$

Radi kraćeg zapisivanja uvode se koeficijenti a_ν i a_μ:

$$a_\nu = 2\cdot\frac{\langle n\nu|\vec{d}|n'\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*}{\left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2},$$
$$a_\mu = 2\cdot\frac{\langle n|\vec{d}|n'\mu\rangle\big(\langle n|\vec{d}|n'\rangle\big)^*}{\left|\langle n|\vec{d}|n'\rangle\right|^2},$$

a kvadrat modula matričnog elementa električnog dipolnog momenta postaje

$$\left|\langle\Psi_n^{(\mathrm{I})}|\vec{d}|\Psi_{n'}^{(\mathrm{I})}\rangle\right|^2 = |\langle n|\vec{d}|n'\rangle|^2 \cdot \Big[1 + \sum_\nu{}' a_\nu \mathcal{A}_\nu + \sum_\mu{}' a_\mu \mathcal{A}_\mu\Big].$$

S obzirom da je intenzitet spektralne linije srazmeran kvadratu modula matričnog elementa električnog dipolnog momenta, relacija koja određuje intenzitet spektralne linije sa tačnošću do na mali parametar λ ima oblik:

$$I_{n\to n'} = I_{n\to n'}^{(0)}\Big[1 + \sum_\nu{}' a_\nu \mathcal{A}_\nu + \sum_\mu{}' a_\mu \mathcal{A}_\mu\Big],$$

gde je $I_{n\to n'}^{(0)}$ intenzitet zračenja koje nastaje pri prelazu sa neperturbovanog početnog stanja $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$ na neperturbovano krajnje stanje $|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$. Pošto i ν i μ imaju samo po dve moguće vrednosti date relacijama (9.4) i (9.5), izraz za intenzitet postaje:

$$I_{n\to n'}^{(\mathrm{I})} = I_{n\to n'}^{(0)}\Big[1 + a_{\nu 1}\mathcal{A}_{\nu 1} + a_{\nu 2}\mathcal{A}_{\nu 2} + a_{\mu 1}\mathcal{A}_{\mu 1} + a_{\mu 2}\mathcal{A}_{\mu 2}\Big].$$

Vrednosti koeficijenata $\mathcal{A}_{\nu 1}$ i $\mathcal{A}_{\nu 2}$, mogu se napisati prema relaciji (9.3). Slično je i za koeficijente $\mathcal{A}_{\mu 1}$ i $\mathcal{A}_{\mu 2}$, samo se u ovom slučaju uzimaju u obzir krajnja stanja. Dakle, izraz za intenzitet spektralne linije postaje:

$$\begin{aligned} I_{n\to n'}^{(\mathrm{I})} =& I_{n\to n'}^{(0)}\Big[1 - \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot a_{\nu 1} + \frac{na_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2}\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n-n_2)}\cdot a_{\nu 2} - \frac{n'a_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_2'+1)(n'-n_2'-1)n_1'(n'-n_1')}\cdot a_{\mu 1} + \frac{n'a_0}{2R}\cdot\sqrt{(n_1'+1)}\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n'-n_1'-1)n_2'(n'-n_2')}\cdot a_{\mu 2}\Big]. \end{aligned} \tag{9.7}$$

Eksplicitan oblik za koeficijente a_ν i a_μ dat je sledećim relacijama:

$$\begin{aligned} a_{\nu 1} &= 2\cdot\frac{\langle n\{n_1-1, n_2+1, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big(\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big)^*}{\big|\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big|^2}, \\ a_{\nu 2} &= 2\cdot\frac{\langle n\{n_1+1, n_2-1, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big(\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big)^*}{\big|\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big|^2}, \\ a_{\mu 1} &= 2\cdot\frac{\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1'-1, n_2'+1, m'\}\rangle\big(\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big)^*}{\big|\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big|^2}, \\ a_{\mu 2} &= 2\cdot\frac{\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1'+1, n_2'-1, m'\}\rangle\big(\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big)^*}{\big|\langle n\{n_1, n_2, m\}|\vec{d}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\big|^2}. \end{aligned}$$

U slučaju π-polarizovane komponente zračenja, neophodno je električni dipolni moment zameniti proizvodom elementarnog naelektrisanja e i koordinate z, dok je u slučaju σ-polarizovane komponente zračenja potrebno uvrstiti proizvod elementarnog naelektrisanja e i koordinate x.

Pogodno je u relaciji za intenzitet spektralne linije (9.7) umesto veličine R koja karakteriše rastojanje jezgra atoma vodonika i najbližeg pozitivnog jona, uvesti srednje rastojanje između teških naelektrisanih čestica koje čine mikropolje u plazmi R_0:

$$\begin{aligned} I_{n\to n'}^{(\mathrm{I})} =& I_{n\to n'}^{(0)}\Big[1 + \frac{a_0}{R_0}\Big(-n\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\frac{a_{\nu 1}}{2} + n\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2}\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n-n_2)}\cdot\frac{a_{\nu 2}}{2} - n'\cdot\sqrt{(n_2'+1)(n'-n_2'-1)n_1'(n'-n_1')}\cdot\frac{a_{\mu 1}}{2} + n'\cdot\sqrt{(n_1'+1)}\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n'-n_1'-1)n_2'(n'-n_2')}\cdot\frac{a_{\mu 2}}{2}\Big)\cdot\frac{R_0}{R}\Big]. \end{aligned}$$

Oblik poslednje relacije se može dalje pojednostaviti uvođenjem sledećeg matričnog elementa:

$$\begin{aligned} \varepsilon_k \equiv& \langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle = -n\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\frac{a_{\nu 1}}{2} + n\cdot\sqrt{(n_1+1)}\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot\frac{a_{\nu 2}}{2} - n'\cdot\sqrt{(n_2'+1)(n'-n_2'-1)n_1'(n'-n_1')}\cdot\frac{a_{\mu 1}}{2} + n'\cdot \\ &\cdot\sqrt{(n_1'+1)(n'-n_1'-1)n_2'(n'-n_2')}\cdot\frac{a_{\mu 2}}{2}, \end{aligned} \tag{9.8}$$

koji se sumama po indeksima ν i μ povezan na sledeći način

$$a_{\nu 1}\mathcal{A}_{\nu 1} + a_{\nu 2}\mathcal{A}_{\nu 2} + a_{\mu 1}\mathcal{A}_{\mu 1} + a_{\mu 2}\mathcal{A}_{\mu 2} = \frac{a_0}{R}\langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle = \frac{a_0}{R}\cdot\varepsilon_k. \tag{9.9}$$

Na ovaj način je određena vrednost intenziteta spektralne linije sa tačnošću do na mali parametar λ, a ona iznosi:

$$I^{(\mathrm{I})}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'}\left[1 + \frac{a_0}{R_0}\langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle\cdot t\right], \quad \text{gde je} \quad t = \frac{R_0}{R}.$$

Drugi član predstavlja prvu popravku na intenzitet spektralne linije $I^{(1)}_{n\to n'}$ i iznosi:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'}\cdot\frac{a_0}{R_0}\langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle.$$

Prethodna relacija se može zapisati i na drugačiji način, ako se veličina R_0 zameni koncentracijom elektrona prema relaciji (7.7):

$$I^{(1)}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'}\cdot a_0\cdot\left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}}\cdot\mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}}\cdot\langle n\{n_1, n_2, m\}|\varepsilon^{(1)}|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle, \tag{9.10}$$

a intenzitet $I^{(\mathrm{I})}_{n\to n'}$ postaje

$$I^{(\mathrm{I})}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'} + I^{(1)}_{n\to n'}\cdot t.$$

Popravka na intenzitet $I^{(1)}_{n\to n'}$ može imati i pozitivne i negativne vrednosti, pa dovodi do promene intenziteta pojedinih štarkovskih komponenti u odnosu na intenzitet neperturbovane spektralne linije. Ova pojava dovodi do asimetrije u okviru pojedinih spektralnih linija atoma vodonika. Preostalo je još da se odredi izraz prema kojem se određuje intenzitet neperturbovane spektralne linije $I^{(0)}_{n\to n'}$.

Određivanje izraza za neperturbovan intenzitet $I^{(0)}_{n\to n'}$

Za određivanje intenziteta $I^{(0)}_{n\to n'}$ koristićemo formulu iz rada [1] koja daje vrednost neperturbovanog intenziteta u Šredingerovim jedinicama. Dakle, intenzitet neperturbovane Štarkove komponente u dipolnoj aproksimaciji iznosi:

$$I^{(0)}_k = g_k\cdot\frac{1}{C_k^2}\cdot\left(r^{n_1,n_2,m}_{n_1',n_2',m'}\right)^2, \quad \text{gde je} \quad k \equiv |n\{n_1, n_2, m\}\rangle \to |n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle, \tag{9.11}$$

dok je g_k statistička težina prelaza, a izraz u zagradi matrični element $\langle n\{n_1, n_2, m\}|r|n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$. Statistička težina spontanog emisionog prelaza, u potpunosti je određena karakteristikama početnog stanja $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle$. Ona se sastoji od proizvoda statističke težine početnog stanja g_n i polarizacione statističke težine prelaza g_π ili g_σ. Postoje četiri slučaja za promenu magnetnog broja m i tri različite moguće vrednosti za g_k.

1. Ako je emitovano zračenje π-polarizovano, tada je $g_\pi = 1$ i $g_k = g_n$.
2. Ako je emitovano zračenje σ-polarizovano, tada je $g_\sigma = 2$ (u ravni postoje dva uzajamno nezavisna pravca) i $g_k = 2g_n$.
3. Statistička težina početnog stanja g_n je određena vrednošću magnetnog kvantnog broja m. Ako je $m = 0$ onda je za određene vrednosti n_1 i n_2 postoji samo jedna talasna funkcija $|n\{n_1, n_2, 0\}\rangle$, pa je $g_n = 1$. Ako je $m \neq 0$ onda postoje dve talasne funkcije $|n\{n_1, n_2, +m\}\rangle$ i $|n\{n_1, n_2, -m\}\rangle$, pa je $g_n = 2$.

Iz poslednjeg razmatranja se može zaključiti da su tri različite vrednosti g_k, date sledećom relacijom:

$$g_k = \begin{cases} 1 & \text{za} \quad \Delta m = 0 \quad \text{i} \quad m = 0, \\ 2 & \text{za} \quad \Delta m = 0 \quad \text{i} \quad m \neq 0, \\ 2 & \text{za} \quad \Delta m = \pm 1 \quad \text{i} \quad m = 0. \\ 4 & \text{za} \quad \Delta m = \pm 1 \quad \text{i} \quad m \neq 0. \end{cases}$$

Za krajnje stanje bi trebalo uvek uzimati ono sa nižim magnetnim kvantnim brojem m. Kao primer za nalaženje popravke na intenzitet spektralnih linija poslužiće linije iz Lajmanove serije Ly-α, a kao primer za

određivanje neperturbovanog intenziteta spektralne linije, linija Balmerove sreije H-α atoma vodonika. Ovi primeri su dati u dodatku D.

Dakle, u ovom delu je pokazano da asimetrija vodonikovih linija emitovanih iz plazme potiče od kvadrupolne popravke intenziteta neperturbovanih komponenti koja je sadržana u koeficijentima $\mathcal{A}_\nu$. Takođe je važno naglasiti da prva popravka na intenzitet $I^{(1)}_{n\to n'}$ zavisi od koncentracije naelektrisanih čestica u plazmi, a jednaka je nuli za centralne komponente, pošto su za centralne komponente matrični elementi električnog dipolnog momenta identički jednaki nuli.

Deo IV

Teorija asimetrije Štarkovih profila vodonikovih linija u gustoj plazmi

Poglavlje 10

Konture Štarkovih komponenti

U prethodnom delu ovog rada pokazano je kako jedan jedini kvazistatički jon utiče na energijske nivoe atoma vodonika, kao i na štarkovske komponente koje čine spektalnu liniju emitovanu usled radijativnog prelaza u samom atomu. Svaka od tih komponenti biva simetrično proširena (što rezultuje Lorencovim profilom) usled nasumičnih i veoma učestalih sudara brzih elektrona iz plazme sa emitujućim atomom. Oblik Lorencovog profila svake štarkovske komponente suštinski zavisi od položaja jona perturbera. Sledeći korak u nalaženju oblika svake štarkovske komponente sastoji se u statističkom usrednjavanju Lorentzovih profila po svim mogućim položajima perturbujućeg jona oko atoma koji emituje. Samo električno polje u kojem se nalazi emitujući atom je nehomogeno, pri čemu komponente gradijenta tog polja definišu kvadrupolnu perturbaciju koja je, kako je to pokazano odgovorna za asimetriju vodonikovih linija.

Svrha narednih poglavlja je, da se prateći rezultate radova [2] i [16] izvedu i provere relacije koje se koriste u priručniku [17], a u kome su uočene neke neusaglašenosti prilikom pokušaja računarske primene priloženih teorijskih profila vodonikovih linija. U tu svrhu će biti detaljno ponovljeno izvođenje kontura štarkovih komponenti linija atoma vodonika emitovanih iz vodonikove plazme.

Takođe će u okviru teorije perturbacija prvog reda po parametru λ biti rešen problem asimetrije štarkovskih profila (uslovljene nehomogenošću jonskog polja) emitovanih (u vidu bilo koje vodonikove spektralne linije) iz guste plazme. Popravke koje određuju asimetriju konture linije (izražene pomoću univerzalnih funkcija $\Lambda(\beta)$ i $\chi(\beta)$) povezane su prvim momentima komponenti tenzora nehomogenosti električnog polja jona.

10.1 Konture Štarkovih komponenti pri stalnoj jačini električnog polja jona i tenzora nehomogenosti jonskog polja

Pre nego što se otpočne sa izračunavanjem kontura štarkovskih komponenti, potrebno je definisati sve veličine koje su odgovorne za oblik ovih spektralnih linija. To će biti učinjeno u ovom delu.

Razmatraćemo pojavu uticaja prostornih karakteristika mikropolja na formiranje kontura spektralnih linija atoma vodonika u optički tankoj neturbulentnoj plazmi. Od interesa su oblasti parametara plazme gde se uračunavanje dejstva jonskog električnog polja $\vec{F}$ na atom, može izvesti u aproksimaciji kvazistatičnosti jona [16], dok se uticaj polja elektrona $\vec{E}(t)$ na atom razmatra u udarnoj aproksimaciji [18]. Samo u tom slučaju nehomogenost jonskog polja predstavlja osnovnu prostornu karakteristiku mikropolja koja dovodi do najvažnijeg uticaja na profil spektralne linije [1].

Pretpostavimo da je gustina plazme dovljno velika, a temperatura jona dovljno mala da se može zanemariti uticaj toplotnog kretanja na konture linije [16]. Hamiltonijan atoma vodonika u plazmi, sa uračunavanjem nehomogenosti polja ima sledeći oblik:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - \vec{d} \cdot \vec{F} - \frac{1}{6} \sum_{ik} Q_{ik} \cdot \frac{\partial F_i}{\partial x_k}, \tag{10.1}$$

gde je $\hat{H}_0$ neperturbovan hamiltonijan, $\vec{d}$ električni dipolni momont i $\hat{Q}$ tenzor kvadrupolnog momenta atoma vodonika. Poslednji član predstavlja kvadrupolnu interakciju:

$$\hat{U} = -\frac{1}{6} \sum_{ik} Q_{ik} \cdot \frac{\partial F_i}{\partial x_k}, \tag{10.2}$$

pri čemu su komponente kvadrupolnog tenzora $\hat{Q}$ definisane kao

$$Q_{ik} = -e \cdot (3x_i \cdot x_k - \delta_{i,k} \cdot r^2). \tag{10.3}$$

Jačina električnog jonskog polja je data relacijom:

$$\vec{F} = -\sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q_\alpha}{R_\alpha^3} \cdot \vec{R}_\alpha, \tag{10.4}$$

gde indek α vrši sumiranje po različitim vrstama jona, dok su q_α i $\vec{R}_\alpha$ naelektrisanje i radijus vektor jona vrste α. Komponente radijus vektora $\vec{R}_\alpha$ su $x_{\alpha i}$, odnosno:

$$\vec{R}_\alpha = \sum_{i=1}^{3} x_{\alpha i} \cdot \vec{e}_i.$$

Tenzor nehomogenosti jonskog polja je $\dfrac{\partial F_i}{\partial x_k}$ $(x_k = x, y, z)$, a može se predstaviti na sledeći način:

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} \equiv \begin{bmatrix} \dfrac{\partial F_x}{\partial x} & \dfrac{\partial F_x}{\partial y} & \dfrac{\partial F_x}{\partial z} \\ \dfrac{\partial F_y}{\partial x} & \dfrac{\partial F_y}{\partial y} & \dfrac{\partial F_y}{\partial z} \\ \dfrac{\partial F_z}{\partial x} & \dfrac{\partial F_z}{\partial y} & \dfrac{\partial F_z}{\partial z} \end{bmatrix}. \tag{10.5}$$

Tenzor nehomogenosti jonskog električnog polja se može izraziti i na drugačiji način, ako se upotrebi izraz za jačinu električnog jonskog polja (10.4) i izvrši diferenciranje:

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}(\vec{F} \cdot \vec{e}_i) = -\frac{\partial}{\partial x_k}\Big(\sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q_\alpha}{R_\alpha^3} \cdot x_{\alpha i}\Big),$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} = -\sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot q_\alpha \Big(-3\frac{1}{R_\alpha^4} \cdot x_{\alpha i} \cdot \frac{\partial R_\alpha}{\partial x_k} + \frac{1}{R_\alpha^3} \cdot \frac{\partial x_{\alpha i}}{\partial x_k}\Big).$$

U prethodnoj relaciji je neophodno odrediti $\dfrac{\partial R_\alpha}{\partial x_k}$, a da bi se to postiglo kreće se od izraza za intenzitet radijus vektora $\vec{R}_\alpha$:

$$\frac{\partial R_\alpha}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\Big(\sum_{i=1}^{3} x_{\alpha i}^2\Big) = \frac{1}{2}\Big(\sum_{i=1}^{3} x_{\alpha i}^2\Big)^{-\frac{1}{2}} \cdot 2x_{\alpha k} = \frac{x_{\alpha k}}{R_\alpha}.$$

U izrazu za tenzor nehomogenosti jonskog električnog polja figuriše i sledeći član:

$$\frac{\partial x_{\alpha i}}{\partial x_k} = \delta_{i,k}.$$

Pošto su određeni svi nepoznati članovi, može se konačno izraziti tenzor nehomogenosti jonkog električnog polja kao:

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} = -\sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot q_\alpha \Big(-3\frac{1}{R_\alpha^4} \cdot x_{\alpha i} \cdot \frac{x_{\alpha k}}{R_\alpha} + \frac{1}{R_\alpha^3} \cdot \delta_{i,k}\Big),$$

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} = \sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q_\alpha}{R_\alpha^5} \cdot (3x_{\alpha i} \cdot x_{\alpha k} - \delta_{i,k} \cdot R_\alpha^2). \tag{10.6}$$

Važno je napomenuti da su i jačina električnog jonskog polja $\vec{F}$ i tenzor nehomogenosti joskog polja $\dfrac{\partial F_i}{\partial x_k}$ određeni u sistemu koordinata u čijem se koordinatnom početku nalazi jezgro atoma vodonika. Lako se može zapaziti da važe sledeće relacije:

$$\frac{\partial F_i}{\partial x_k} = \frac{\partial F_k}{\partial x_i}, \tag{10.7}$$

$$\mathrm{Spur}\Big(\frac{\partial F_i}{\partial x_k}\Big) = 0. \tag{10.8}$$

Prva jednakost direktno sledi iz relacije (10.6), s obzirom da je ona invarijantna na promenu indeksa $i \leftrightarrow k$. Druga jednakost se lako dokazuje, ako se krene od definicije traga (špura) tenzora. Naime, trag matrice predstavlja sumu elemenata koji se nalaze na glavnoj dijagonali:

$$\mathrm{Spur}\Big(\frac{\partial F_i}{\partial x_k}\Big) = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial F_i}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^{3}\Big(\sum_{\alpha} \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{q_\alpha}{R_\alpha^5} \cdot (3x_{\alpha i} \cdot x_{\alpha i} - R_\alpha^2)\Big).$$

Ako se izvrši zamena sumiranja po indeksu α i indeksu i, dobija se sledeće:

$$\mathrm{Spur}\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_k}\right) = \sum_\alpha \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{q_\alpha}{R_\alpha^5}\cdot\sum_{i=1}^{3}(3x_{\alpha i}^2 - R_\alpha^2) = \sum_\alpha \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{q_\alpha}{R_\alpha^5}\cdot\left(3\sum_{i=1}^{3}x_{\alpha i}^2 - R_\alpha^2\sum_{i=1}^{3}1\right).$$

Prva suma u zagradi predstavlja kvadrat intenziteta radijus vektora jona R_α^2, dok druga sumira konstantu, pa se dobija:

$$\mathrm{Spur}\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_k}\right) = \sum_\alpha \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{q_\alpha}{R_\alpha^5}\cdot\left(3R_\alpha^2 - 3R_\alpha^2\right) \equiv 0.$$

Ovim je dokazana i ralacija (10.8) koja zajedno sa (10.7) određuje ukupan broj nezavisnih komponenti u tenzoru nehomogenosti jonskog električnog polja. Pošto relacija (10.7) predstavlja tri veze između komponenti tenzora, a relacija (10.8) još jednu, od ukupnog broja komponenti samo njih pet su nezavisne. Ovo je očigledno, s obzirom da postoje ukupno četiri veze između komponenti ovog tenzora.

Smatraćemo da su talasne funkcije u nultoj aproksimaciji paraboličke talasne funkcije $\psi_{n_1,n_2,m}(\xi,\eta,\varphi)$ sa osom kvantovanja duž električnog jonskog polja $\vec{F}$ i sa osobinom da su svojstvene talasne funkcije hamiltonijana $\hat{H}_0 - \vec{d}\cdot\vec{F}$ [6]. Pod pretpostavkom da je kvadrupolna popravka $\hat{U}$ mala u poređenju sa dipolnom popravkom $-\vec{d}\cdot\vec{F}$, može se za slučaj hamiltonijana datog relacijom (10.1) primeniti teorija perturbacije. Ova teorija kao rezultat daje izraz za talasnu funkciju $\Phi_{n_1,n_2,m}$:

$$\Phi_{n_1,n_2,m} = \psi_{n_1,n_2,m} + \psi^{(1)}_{n_1,n_2,m}, \qquad \text{gde je} \qquad \psi^{(1)}_{n_1,n_2,m} = \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu\psi_\nu, \tag{10.9}$$

kao i izraz za svojstvene energije $E_{n_1,n_2,m}$

$$E_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_{n_1,n_2,m} + E^{(1)}_{n_1,n_2,m}. \tag{10.10}$$

Dakle, ukupna energija se sastoji od dva člana. Prvi od njih $E^{(0)}_{n_1,n_2,m}$ predstavlja energiju neperturbovanog atoma vodonika i dipolne interakcije, a dat je izrazom:

$$E^{(0)}_{n_1,n_2,m} = E_n - \langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}\cdot\vec{F}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle, \tag{10.11}$$

gde je E_n neperturbovana vrednost energije atoma vodonika u stanju sa glavnim kvantnim brojem n. Izraz za E_n je poznat i dat je relacijom (1.37):

$$E_n = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{e^4 m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{e^2}{2a_0}\frac{1}{n^2}.$$

Srednja vrednost operatora $\vec{d}\cdot\vec{F}$ karakteriše dipolnu interakciju. Drugi član u izrazu (10.10) predstavlja kvadrupolnu interakciju, a izračunava se kao srednja vrednost operatora $\hat{U}$:

$$E^{(1)}_{n_1,n_2,m} = \langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{U}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle.$$

U izrazu za talasnu funkciju $\Phi_{n_1,n_2,m}$ (10.9), figuriše i koeficijent $\mathcal{A}_\nu$ koji se određuje na sledeći način:

$$\mathcal{A}_\nu = \frac{\langle\psi_\nu|\hat{U}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle}{E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu}, \tag{10.12}$$

gde indeks ν označava skup paraboličkih kvantnih brojeva pri čemu važi

$$n = n_1^{(\nu)} + n_2^{(\nu)} + |m|^{(\nu)} + 1, \qquad \nu \neq \{n_1, n_2, m\}.$$

Korišćenjem izraza za talasnu funkciju $\Phi_{n_1,n_2,m}$ i izraza za svojstvenu energiju $E_{n_1,n_2,m}$, moguće je odrediti promenu frekvencije $\Delta\omega_k$ i intenzitet zračenja I_k, k-te Štarkove komponente koja odgovara prelazu $|n\{n_1,n_2,m\}\rangle \to |n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$. Međutim, vrednost jačine jonskog polja $\vec{F}$ i operatora $\hat{U}$ mora biti stalna. U [19] su određeni izrazi za $\Delta\omega_k$ i I_k sa tačnošću do članova koji su proporcionalni malom parametru ε. Parametar ε predstavlja odnos kvadrupolne i dipolne interakcije:

$$\varepsilon = \left|\frac{\hat{U}}{\vec{d}\cdot\vec{F}}\right|.$$

Pomeraj perturbovane spektralne linije u odnosu na centralnu komponentu može se izraziti kao:

$$\Delta\omega_k = \Delta C_k + \Delta U_k. \tag{10.13}$$

Prvi član ΔC_k potiče od dipolne interakcije i iznosi:

$$\Delta C_k = \frac{1}{\hbar}\cdot\Big[\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}\cdot\vec{F}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle - \langle\psi_{n_1',n_2',m'}|\vec{d}\cdot\vec{F}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\Big], \tag{10.14}$$

dok drugi član ΔU_k karakteriše kvadrupolnu interakciju

$$\Delta U_k = \frac{1}{\hbar}\cdot\Big[\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{U}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle - \langle\psi_{n_1',n_2',m'}|\hat{U}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\Big]. \tag{10.15}$$

Intenzitet perturbovane spektralne linije I_k se može izraziti kao:

$$I_k = I_k^{(0)}\Big[1 + \sum_{\nu}{}' a_\nu\mathcal{A}_\nu + \sum_{\mu}{}' a_\mu\mathcal{A}_\mu\Big], \tag{10.16}$$

gde je $I_k^{(0)}$ intenzitet neperturbovane k-te Štarkove komponente. U prethodnoj relaciji figurišu i koeficijenti a_ν i a_μ koji zavise kako od matričnih elemenata komponenti električnog dipolnog momenta d_i tako i od matričnog elementa samog dipolnog momenta $\vec{d}$:

$$a_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|d_i|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|d_i|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}, \tag{10.17}$$

$$a_\mu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\mu|d_i|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big(\langle\psi_{n_1,n_2,m}|d_i|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}.$$

Indeksi ν i μ prebrojavaju početna i krajnja stanja respektivno, a komponente električnog dipolnog momenta su date u sistemu koordinata u kojem je z'-osa paralelna električnom jonskom polju $\vec{F}$.

Štarkove komponente su izolovane linije [18], a za stalne vrednosti jonskog polja $\vec{F}$ i tenzora nehomogenosti jonskog polja $\dfrac{\partial F_i}{\partial x_k}$ profil svake zasebne Štarkove komponente $I_k(\Delta\omega_k)$ ima sledeći disperzioni oblik:

$$I_k(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi}\cdot\frac{\gamma_k\cdot I_k}{(\Delta\omega-\Delta\omega_k)^2+\gamma_k^2}, \tag{10.18}$$

gde je ω frekvencija zračenja, ω_0 frekvencija neperturbovanog zračenja pri prelazu $|n\rangle\to|n'\rangle$, a $\Delta\omega=\omega-\omega_0$ njihova međusobna razlika. Samo izvođenje uticaja elektrona na oblik linije je prilično složeno, pa je zato iskorišćen rezultat teorije širenja spektralnih linija u udarnoj aproksimaciji [18]. Veličina G se određuje prema relaciji:

$$G = \sum_k I_k^{(0)}.$$

Veličina γ_k zavisi od individualne udarne elektronske polu-poluširine štarkovske komponente $\gamma_k^{(0)}$ pri prelazu $|n_1,n_2,m\rangle\to|n_1',n_2',m'\rangle$ i data je izrazom:

$$\gamma_k = \gamma_k^{(0)}\left(1+\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}}\right). \tag{10.19}$$

U poslednjoj relaciji figuriše odnos veličina $\Delta\gamma_k$ i $\gamma_k^{(0)}$, koji se eksplicitno može izraziti na sledeći način:

$$\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{8}{9}\cdot\Big[\sum_a\Big[\Big\langle\sum_\nu{}'\mathcal{A}_\nu\psi_\nu|\vec{r}_n|\psi_a\Big\rangle\langle\psi_a|\vec{r}_n|n_1,n_2,m\rangle + \langle n_1,n_2,m|\vec{r}_n|\psi_a\rangle\Big\langle\sum_{\nu'}{}'\mathcal{A}_{\nu'}\psi_{\nu'}|\vec{r}_n|n_1,n_2,m\rangle\Big] +$$
$$+\sum_b\Big[\Big\langle\sum_\mu{}'\mathcal{A}_\mu\psi_\mu|\vec{r}_{n'}|\psi_b\Big\rangle\langle\psi_b|\vec{r}_{n'}|n_1',n_2',m'\rangle + \langle n_1',n_2',m'|\vec{r}_{n'}|\psi_b\rangle\Big\langle\sum_{\mu'}{}'\mathcal{A}_{\mu'}\psi_{\mu'}|\vec{r}_{n'}|n_1',n_2',m'\rangle\Big]\Big]\cdot$$
$$\cdot\Big[\frac{n^2}{2}[n^2+(n_1-n_2)^2-|m|^2-1]+\frac{n'^2}{2}[n'^2+(n_1'-n_2')^2-|m'|^2-1]-2nn'(n_1-n_2)(n_1'-n_2')\Big]^{-1}.$$

Ovaj izraz je preuzet iz [18], a izražava uticaj nehomogenosti jonskog polja na veličinu elektronske udarne polu-poluširine sa tačnošću da članova koji su proporcionalni prvom stepenu parametra ε. Veličine $\vec{r}_n$ i $\vec{r}_{n'}$ predstavljaju radijus vektore elektrona atoma u stanju sa glavnim kvantnim brojem n i n' respektivno. ψ_a i ψ_b su paraboličke talasne funkcije stanja, koje odgovaraju početnom stanju $|n\rangle$ (odgovara mu viša energija) i krajnjem stanju $|n'\rangle$ (odgovara mu niža energija) respektivno.

Na ovaj način smo definisali sve neophodne veličine koje će se u narednim poglavljima koristiti za dalja izračunavanja.

Poglavlje 11

Potpuni profili vodonikovih spektralnih linija

U ovom poglavlju će se razmatrati potpuni profili spektralnih linija atoma vodonika $I_{nn'}(\Delta\omega)$ koji su definisani kao konvolucija intenziteta pojedinih štarkovskih komponenti $I_k(\Delta\omega)$ i ukupne funkcije raspodele jačine jonskog polja W. Osnovni problem je taj da sve veličine koje figurišu u ovoj konvoluciji nisu definisane u istom koordinatnom sistemu. Intenzitet $I_k(\Delta\omega)$ je definisan u sistemu $x'y'z'$ gde je z'-osa paralelna jonskom polju $\vec{F}$, a funkcija raspodele jačine jonskog polja W se određuje u sistemu koordinata xyz koji je nezavisan od pravca jonskog polja $\vec{F}$. Problem se rešava tako što se odredi oblik operatora $\hat{R}$ koji vrši rotaciju sistema $x'y'z'$ sve do poklapanja sa sistemom xyz. Ovaj operator transformacije omogućuje da se sve veličine koje se javljaju u izrazu za potpun profil spektralne linije $I_{nn'}(\Delta\omega)$, zapišu u istom koordinatnom sistemu, a to je u ovom slučaju sistem xyz. Na ovaj način transformisan izraz za $I_{nn'}(\Delta\omega)$ se koristi u daljim izračunavanjima.

11.1 Potpuni profili vodonikovih spektralnih linija sa uračunavanjem uticaja nehomogenosti jonskog polja

Potpun profil spektralne linije $I_{nn'}(\Delta\omega)$ sa uračunavanjem uticaja nehomogenosti jonskog polja, određuje se kao konvolucija intenziteta pojedinih štarkovskih komponenti $I_k(\Delta\omega)$ datih relacijom (10.18) i ukupne funkcije raspodele jačine jonskog polja W i to prema formuli:

$$I_{nn'}(\Delta\omega) = \int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F} \int\limits_{X} \mathrm{d}X \cdot W(X) \cdot \sum_k I_k(\Delta\omega, X). \tag{11.1}$$

Ako se uvrsti izraz za intenzitet štarkovske komponente $I_k(\Delta\omega)$, dobija se sledeće:

$$I_{nn'}(\Delta\omega) = \int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F} \int\limits_{X} \mathrm{d}X \cdot W(X) \cdot \sum_k \frac{1}{G\pi} \cdot \frac{\gamma_k(X) \cdot I_k(X)}{(\Delta\omega - \Delta\omega_k(X))^2 + (\gamma_k(X))^2}.$$

Veličina X predstavlja sve nezavisne promenljive od kojih zavisi funkcija raspodele jonskog električnog polja. Funkcija raspodele W sadrži tri komponente jonskog električnog polja $\vec{F}$ i pet nezavisnih komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja koji je definisan relacijom (10.5). Za pet nezavisnih komponenti ovog tenzora uzimaju se komponente prve vrste i treće kolone.

Uvodeći proizvoljan nepokretan koordinatni sistem xyz sa z-osom koja nije paralelna jonskom polju $\vec{F}$, moguće je dobiti opšti izraz za ukupnu funkciju raspodele pomoću metoda Markova ([20], [21]). Naravno, i u ovom slučaju se razmatra model koji ne uračunava jonsko-jonske korelacije i efekte Debajevog ekraniranja. Dakle, funkcija raspodele jačine jonskog polja W ima sledeći oblik:

$$W\left(\vec{F}, \frac{\partial F_x}{\partial x}, \frac{\partial F_z}{\partial z}, \frac{\partial F_x}{\partial y}, \frac{\partial F_x}{\partial z}, \frac{\partial F_y}{\partial z}\right) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot \exp\Big[-i\Big(\vec{\rho}\vec{F} + \sigma_1 \frac{\partial F_x}{\partial x} + \sigma_2 \frac{\partial F_z}{\partial z} + \\ + \sigma_3 \frac{\partial F_x}{\partial y} + \sigma_4 \frac{\partial F_x}{\partial z} + \sigma_5 \frac{\partial F_y}{\partial z}\Big)\Big] \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5). \tag{11.2}$$

Funkcija $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ koja figuriše u prethodnoj relaciji zavisi od koncentracije naelektrisanih čestica u plazmi N i definisana je kao:

$$A(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = \exp\left[-N \cdot C(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5)\right], \tag{11.3}$$

gde funkcija $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ ima sledeći oblik

$$C(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = \int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \left[1 - \exp\left(ie\left(-\frac{\vec{\rho}\vec{r}}{r^3} + \sigma_1 \frac{3x^2 - r^2}{r^5} + \sigma_2 \frac{3z^2 - r^2}{r^5} + \sigma_3 \frac{3xy}{r^5} + \sigma_4 \frac{3xz}{r^5} + \right.\right.\right.$$
$$\left.\left.\left. + \sigma_5 \frac{3yz}{r^5}\right)\right)\right]. \tag{11.4}$$

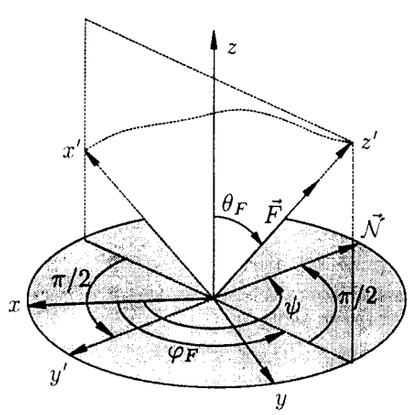
Pri izračunavanju konvolucije mora se voditi računa o tome da je veličina $I_k(\Delta\omega)$ u relaciji (11.1) zapisana u koordinatnom sistemu $x'y'z'$ gde je z'-osa paralelna jonskom polju $\vec{F}$, a funkcija raspodele jačine jonskog polja W se određuje u sistemu koordinata xyz koji je nezavisan od pravca jonskog polja $\vec{F}$.

11.2 Određivanje operatora transformacije $\hat{R}$

Pošto je veličina $I_k(\Delta\omega)$ zapisana u koordinatnom sistemu $x'y'z'$, a funkcija raspodele jačine jonskog polja W se određuje u sistemu koordinata xyz, neophodno je transformisati relaciju (10.18) u koordinatni sistem xyz. Problem se rešava na taj način što se odredi izraz za operator $\hat{R}$ koji ostvaruje rotaciju sistema $x'y'z'$ sve do poklapanja sa sistemom xyz, što se u matričnom obliku može prikazati kao:

$$\hat{R}\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}, \quad \text{odnosno} \quad \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}. \tag{11.5}$$

Oblik i svojstva operatora transformacije $\hat{R}$



Slika 11.1 Međusoban položaj koordinatnih sistema xyz i $x'y'z'$

Neka je sistem $x'y'z'$, koordinatni sistem u kojem su određene talasne funkcije za hamiltonijan dat izrazom (10.1) i u kojem je z'-osa paralelna jonskom polju $\vec{F}$. Položaj koordinatnog sistema $x'y'z'$ je u odnosu na položaj sistema koordinata xyz određen pomoću dva Ojlerova ugla θ i ψ (slika 11.1).

Sa slike se može zaključiti da je $\vec{\mathcal{N}}$ normala na ravan $x'Oz'$, kao i to da x, y' i y-osa leže u istoj ravni čija se normala poklapa sa pravcem Oz. Takođe se mogu uočiti relacije koje zadovoljavaju Ojlerovi uglovi:

$$\theta = \theta_F, \tag{11.6}$$

$$\psi = \varphi_F + \frac{\pi}{2}. \tag{11.7}$$

Korišćenjem odnosa sa slike, mogu se izraziti jedinični vektori koordinatnog sistema $x'y'z'$ preko jediničnih vektora koordinatnog sistema xyz:

$$\vec{e}_{x'} = \cos(\pi - \varphi_F) \cdot \cos\theta_F \cdot \vec{e}_x + \cos(\frac{3\pi}{2} - \varphi_F) \cdot \cos\theta_F \cdot \vec{e}_y + \cos(\frac{\pi}{2} - \theta_F) \cdot \vec{e}_z,$$
$$\vec{e}_{y'} = \cos(\varphi_F - \frac{\pi}{2}) \cdot \vec{e}_x + \cos(\pi - \varphi_F) \cdot \vec{e}_y,$$
$$\vec{e}_{z'} = \cos\varphi_F \cdot \sin\theta_F \cdot \vec{e}_x + \cos(\varphi_F - \frac{\pi}{2}) \cdot \sin\theta_F \cdot \vec{e}_y + \cos\theta_F \cdot \vec{e}_z.$$

U prethodne relacije je neophodno uvrstiti Ojlerove uglove θ i ψ umesto uglova θ_F i φ_F korišćenjem (11.6) i (11.7), pa se dobija:

$$\vec{e}_{x'} = \cos(\pi - \psi + \frac{\pi}{2}) \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_x + \cos(\frac{3\pi}{2} - \psi + \frac{\pi}{2}) \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_y + \cos(\frac{\pi}{2} - \theta) \cdot \vec{e}_z,$$
$$\vec{e}_{y'} = \cos(\psi - \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}) \cdot \vec{e}_x + \cos(\pi - \psi + \frac{\pi}{2}) \cdot \vec{e}_y,$$
$$\vec{e}_{z'} = \cos(\psi - \frac{\pi}{2}) \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_x + \cos(\psi - \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2}) \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_y + \cos\theta \cdot \vec{e}_z,$$

odnosno,

$$\vec{e}_{x'} = \cos(\frac{3\pi}{2} - \psi) \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_x + \cos(2\pi - \psi) \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_y + \cos(\frac{\pi}{2} - \theta) \cdot \vec{e}_z,$$
$$\vec{e}_{y'} = \cos(\psi - \pi) \cdot \vec{e}_x + \cos(\frac{3\pi}{2}\pi - \psi) \cdot \vec{e}_y,$$
$$\vec{e}_{z'} = \cos(\psi - \frac{\pi}{2}) \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_x + \cos(\psi - \pi) \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_y + \cos\theta \cdot \vec{e}_z.$$

Ako se uzmu u obzir relacije koje određuju kosinus zbira i razlike uglova:

$$\cos(\alpha \pm \beta) = \cos\alpha \cdot \cos\beta \mp \sin\alpha \cdot \sin\beta, \tag{11.8}$$

izrazi za jedinične vektore postaju

$$\vec{e}_{x'} = -\sin\psi \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_x + \cos\psi \cdot \cos\theta \cdot \vec{e}_y + \sin\theta \cdot \vec{e}_z, \tag{11.9}$$
$$\vec{e}_{y'} = -\cos\psi \cdot \vec{e}_x - \sin\psi \cdot \vec{e}_y, \tag{11.10}$$
$$\vec{e}_{z'} = \sin\psi \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_x - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot \vec{e}_y + \cos\theta \cdot \vec{e}_z. \tag{11.11}$$

Da bi se prethodne relacije mogle iskoristiti za pronalaženje oblika operatora $\hat{R}$, mora se prvo utvrditi veza između ovog operatora i jediničnih vektora u xyz i $x'y'z'$ koordinatnom sistemu. Bilo koja tačka u prostoru može se opisati vektorom položaja $\vec{r}$ ili $\vec{r}'$, ali uvek mora biti zadovoljena identičnost $\vec{r} \equiv \vec{r}'$. Pošto su vektori polažaja dati sledećim relacijama:

$$\vec{r} = \sum_j x_j \vec{e}_j,$$
$$\vec{r}' = \sum_i x_i' \vec{e}_i{}',$$

uslov identičnosti postaje

$$\sum_j x_j \vec{e}_j = \sum_i x_i' \vec{e}_i{}'.$$

Ako ovu relaciju pomnožimo skalarno vektorom $\vec{e}_k$, dobićemo zakon po kojem se transformišu koordinate:

$$\sum_j x_j \vec{e}_j \cdot \vec{e}_k = \sum_i x_i'(\vec{e}_i{}' \cdot \vec{e}_k),$$
$$\sum_j x_j \cdot \delta_{j,k} = \sum_i x_i'(\vec{e}_i{}' \cdot \vec{e}_k),$$
$$x_k = \sum_i x_i'(\vec{e}_i{}' \cdot \vec{e}_k).$$

Eksplicitan oblik ovog zakona transformacije za sve koordinate glasi:

$$x = (\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'}) \cdot x' + (\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{y'}) \cdot y' + (\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{z'}) \cdot z',$$
$$y = (\vec{e}_y \cdot \vec{e}_{x'}) \cdot x' + (\vec{e}_y \cdot \vec{e}_{y'}) \cdot y' + (\vec{e}_y \cdot \vec{e}_{z'}) \cdot z',$$
$$z = (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_{x'}) \cdot x' + (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_{y'}) \cdot y' + (\vec{e}_z \cdot \vec{e}_{z'}) \cdot z'.$$

Na osnovu ovog eksplicitnog zapisa može se zaključiti da je operator transformacije $\hat{R}$ dat sledećom matricom:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'} & \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{y'} & \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{z'} \\ \vec{e}_y \cdot \vec{e}_{x'} & \vec{e}_y \cdot \vec{e}_{y'} & \vec{e}_y \cdot \vec{e}_{z'} \\ \vec{e}_z \cdot \vec{e}_{x'} & \vec{e}_z \cdot \vec{e}_{y'} & \vec{e}_z \cdot \vec{e}_{z'} \end{bmatrix}.$$

Skalarni proizvodi koji figurišu u izrazu za operator $\hat{R}$, direktno se mogu dobiti iz jednakosti (11.9), (11.10) i (11.11):

$$\vec{e}_x \cdot \vec{e}_{x'} = -\sin\psi \cdot \cos\theta, \quad \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{y'} = -\cos\psi, \quad \vec{e}_x \cdot \vec{e}_{z'} = \sin\psi \cdot \sin\theta,$$
$$\vec{e}_y \cdot \vec{e}_{x'} = \cos\psi \cdot \cos\theta, \quad \vec{e}_y \cdot \vec{e}_{y'} = -\sin\psi, \quad \vec{e}_y \cdot \vec{e}_{z'} = -\cos\psi \cdot \sin\theta,$$
$$\vec{e}_z \cdot \vec{e}_{x'} = \sin\theta, \quad \vec{e}_z \cdot \vec{e}_{y'} = 0, \quad \vec{e}_z \cdot \vec{e}_{z'} = \cos\theta.$$

Ovi skalarni proizvodi omogućuju da se koordinate x, y i z izraze eksplicitno kao:

$$x = -\sin\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \cos\psi \cdot y' + \sin\psi \cdot \sin\theta \cdot z', \tag{11.12}$$
$$y = \cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z', \tag{11.13}$$
$$z = \sin\theta \cdot x' + 0 \cdot y' + \cos\theta \cdot z'. \tag{11.14}$$

Konačno je dobijen izraz za operator transformacije $\hat{R}$ koji sadrži Ojlerove uglove θ i ψ:

$$\hat{R} = \begin{bmatrix} -\cos\theta \cdot \sin\psi & -\cos\psi & \sin\theta \cdot \sin\psi \\ \cos\theta \cdot \cos\psi & -\sin\psi & -\sin\theta \cdot \cos\psi \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix}.$$

Veoma važno svojstvo operatora $\hat{R}$ je unitarnost. Unitarnost podrazumeva osobinu da je inverzan operator $\hat{R}^{-1}$ jednak adjungovanom $\hat{R}^{\dagger}$. Prvo ćemo odrediti inverzan operator $\hat{R}^{-1}$, koji se nalazi prema formuli:

$$\hat{R}^{-1} = \frac{1}{\det\hat{R}} \cdot \hat{R}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{\det\hat{R}} \begin{bmatrix} R_{11} & R_{21} & R_{31} \\ R_{12} & R_{22} & R_{32} \\ R_{13} & R_{23} & R_{33} \end{bmatrix},$$

gde $\hat{R}^{\mathrm{T}}$ predstavlja transponovan operator. Kod transponovanog operatora je izvršena smena vrsta i kolona. Lako se pokazuje da je $\det\hat{R} = 1$:

$$\det\hat{R} = \begin{vmatrix} -\cos\theta \cdot \sin\psi & -\cos\psi & \sin\theta \cdot \sin\psi \\ \cos\theta \cdot \cos\psi & -\sin\psi & -\sin\theta \cdot \cos\psi \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{vmatrix},$$
$$\det\hat{R} = \cos^2\theta \cdot \sin^2\psi + \sin^2\theta \cdot \cos^2\psi + \sin^2\theta \cdot \sin^2\psi + \cos^2\theta \cdot \cos^2\psi,$$
$$\det\hat{R} = \cos^2\theta \cdot (\sin^2\psi + \cos^2\psi) + \sin^2\theta \cdot (\cos^2\psi + \sin^2\psi) = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1.$$

Dakle, izraz za inverzan operator $\hat{R}^{-1}$ postaje:

$$\hat{R}^{-1} = \begin{bmatrix} -\cos\theta \cdot \sin\psi & \cos\theta \cdot \cos\psi & \sin\theta \\ -\cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\theta \cdot \sin\psi & -\sin\theta \cdot \cos\psi & \cos\theta \end{bmatrix}. \tag{11.15}$$

S druge strane, adjungovan operator dobijamo transponovanjem konjugovanog operatora. Pošto su svi elementi realni, adjungovan operator je upravo jednak transponovanom:

$$\hat{R}^{\dagger} = (\hat{R}^{*})^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{21} & R_{31} \\ R_{12} & R_{22} & R_{32} \\ R_{13} & R_{23} & R_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\cos\theta \cdot \sin\psi & \cos\theta \cdot \cos\psi & \sin\theta \\ -\cos\psi & -\sin\psi & 0 \\ \sin\theta \cdot \sin\psi & -\sin\theta \cdot \cos\psi & \cos\theta \end{bmatrix}. \tag{11.16}$$

Poređenjem relacija (11.15) i (11.16) zaključujemo da su inverzan $\hat{R}^{-1}$ i adjungovan operator $\hat{R}^{\dagger}$ jednaki:

$$\hat{R}^{-1} = \hat{R}^{\dagger},$$

odnosno da je operator $\hat{R}$ unitaran. Osobina unitarnosti se može zapisati i na sledeći način:

$$\hat{R}^{-1}\hat{R} = \hat{R}\hat{R}^{-1} = \hat{R}^{\dagger}\hat{R} = \hat{R}\hat{R}^{\dagger} = \hat{1}.$$

Dejstvo operatora transformacije $\hat{R}$

Osobina unitarnosti operatora $\hat{R}$ omogućuje da se u ovom slučaju primeni teorija unitarnih transformacija. Relacijom (11.5) je definisano kako operator $\hat{R}$ transformiše funkciju $\vec{r}\,'$ u $\vec{r}$:

$$\vec{r} = \hat{R}\vec{r}\,'. \tag{11.17}$$

Postavlja se pitanje kako će ovaj operator transformisati bilo koji operator koji je definisan u primovanom koordinatnom sistemu. Neka je operator $\hat{A}$ definisan u primovanom sistemu označen kao $\hat{A}_{\mathrm{p}}$ i neka on transformiše funkciju $\vec{r}\,'$ u $\vec{g}\,'$:

$$\hat{A}_{\mathrm{p}}\vec{r}\,' = \vec{g}\,'.$$

Nakon neznatne transformacije koja podrazumeva množenje poslednje relacije operatorom $\hat{R}$ sa leve strane i ubacivanje jediničnog operatora $\hat{1}$, dobijamo:

$$\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{1}\vec{r}' = \hat{R}\vec{g}',$$
$$\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}(\hat{R}^{\dagger}\hat{R})\vec{r}' = \hat{R}\vec{g}',$$
$$(\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{R}^{\dagger})\hat{R}\vec{r}' = \hat{R}\vec{g}'.$$

Pošto je dejstvo operatora $\hat{R}$ na funkciju poznato, dobijamo sledeće:

$$(\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{R}^{\dagger})\vec{r} = \vec{g}.$$

Iz oblika poslednje relacije može se zaključiti da operator $\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{R}^{\dagger}$ predstavlja operator $\hat{A}$ u neprimovanom sistemu, pa je na taj način određen postupak za transformaciju operatora iz primovanog u neprimovan koordinatni sistem:

$$\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{R}^{\dagger} = \hat{A}_{\mathrm{n}}.$$

Korišćenjem osobine unitarnosti operatora $\hat{R}$ lako se dobija obrazac za transformaciju operatora iz neprimovanog u primovan sistem:

$$\hat{R}^{\dagger}(\hat{R}\hat{A}_{\mathrm{p}}\hat{R}^{\dagger})\hat{R} = \hat{R}^{\dagger}\hat{A}_{\mathrm{n}}\hat{R},$$
$$(\hat{R}^{\dagger}\hat{R})\hat{A}_{\mathrm{p}}(\hat{R}^{\dagger}\hat{R}) = \hat{R}^{\dagger}\hat{A}_{\mathrm{n}}\hat{R},$$
$$\hat{A}_{\mathrm{p}} = \hat{R}^{\dagger}\hat{A}_{\mathrm{n}}\hat{R}. \tag{11.18}$$

Na ovom mestu će biti izračunat i izraz $\hat{R}^{\dagger}\vec{r}\hat{R}$, jer će se on kasnije koristiti u određivanju profila spektralnih linija. Transformacijom relacije(11.17) dobijamo:

$$\vec{r} = \hat{R}\vec{r}',$$
$$\hat{R}^{\dagger}\vec{r}\hat{R} = (\hat{R}^{\dagger}\hat{R})\vec{r}'\hat{R},$$
$$\hat{R}^{\dagger}\vec{r}\hat{R} = \vec{r}'\hat{R}.$$

Korišćenjem poslednje relacije i izraza za koordinate x (11.12), y (11.13) i z (11.14), dobijamo:

$$\hat{R}^{\dagger}x\hat{R} = -\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z', \tag{11.19}$$
$$\hat{R}^{\dagger}y\hat{R} = \cos\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \sin\psi\cdot y' - \cos\psi\cdot\sin\theta\cdot z', \tag{11.20}$$
$$\hat{R}^{\dagger}z\hat{R} = \sin\theta\cdot x' + 0\cdot y' + \cos\theta\cdot z'. \tag{11.21}$$

Pošto je operator transformacije kao i njegovo dejstvo u potpunosti određeno, može se preći na transformaciju svih veličina koje figurišu u izrazu za profil štarkovskih komponenti.

11.3 Transformisan oblik ukupnog profila vodonikovih spektralnih linija

Kao što je već navedeno, neophodno je izvršiti transformaciju izraza za profil pojedinih štarkovskih komponenti (10.18) u kojem figurišu veličine I_k, $\Delta\gamma_k$ i $\Delta\omega_k$ izražene preko matričnih elemenata u sistemu $x'y'z'$, u disperzioni profil u xyz sistemu. Transformacija je neizbežna, jer se izraz (10.18) konvoluira sa funkcijom raspodele W koja je izražena u neprimovanom sistemu. Ovo se postiže transformacijom matričnih elemenata koji ulaze u izraze za I_k, $\Delta\gamma_k$ i $\Delta\omega_k$ prema formuli (11.18):

$$\langle\psi_1|\hat{T}(x',y',z')|\psi_2\rangle = \langle\psi_1|\hat{R}^{\dagger}\hat{T}(x,y,z)\hat{R}|\psi_2\rangle = \langle\psi_1\hat{R}^{\dagger}|\hat{T}(x,y,z)|\hat{R}\psi_2\rangle, \tag{11.22}$$

gde je $\hat{T}$ proizvoljan operator, a $\langle\psi_1\hat{R}^{\dagger}|$ i $|\hat{R}\psi_2\rangle$ talasne funkcije u sistemu koordinata xyz. Ako se matrični elementi ΔC_k, ΔU_k, $\Delta\gamma_k$, a_ν, a_μ, $\mathcal{A}_\nu$ i $\mathcal{A}_\mu$ podvrgnuti transformaciji (11.22) prikažu kao $\Delta\overline{C}_k$, $\Delta\overline{U}_k$, $\Delta\overline{\gamma}_k$, $\overline{a}_\nu$, $\overline{a}_\mu$, $\overline{\mathcal{A}}_\nu$ i $\overline{\mathcal{A}}_\mu$, tada se za profil spektralne linije vodonika pri prelazu $|n\rangle \to |n'\rangle$ dobija:

$$I_{nn'}(\Delta\omega) = \int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_{\alpha}\mathrm{d}g_\alpha\cdot W(\vec{F},g_1,g_2,g_3,g_4,g_5)\sum_k\frac{1}{G\pi}\cdot\frac{\overline{\gamma}_k\cdot\overline{I}_k}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}. \tag{11.23}$$

U poslednjoj relaciji su uvedene nove veličine koje predstavljaju komponente tenzora nehomogenosti jonskog polja $g_1 = \frac{\partial F_x}{\partial x}$, $g_2 = \frac{\partial F_z}{\partial z}$, $g_3 = \frac{\partial F_x}{\partial y}$, $g_4 = \frac{\partial F_x}{\partial z}$ i $g_5 = \frac{\partial F_y}{\partial z}$. Ostale veličine su već prethodno definisane formulama (10.13), (10.16) i (10.19):

$$\Delta\overline{\omega}_k = \Delta\overline{C}_k + \Delta\overline{U}_k, \tag{11.24}$$

$$\overline{I}_k = I_k^{(0)}\Big[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu\Big], \tag{11.25}$$

$$\overline{\gamma}_k = \gamma_k^{(0)}\left(1 + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\right). \tag{11.26}$$

Rešavanje integrala (11.23) je veoma složeno, pa se zbog toga pribegava razvijanju u red podintegralne veličine:

$$\frac{\overline{\gamma}_k \cdot \overline{I}_k}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}, \tag{11.27}$$

po malom parametru δ. Ovaj parametar predstavlja odnos veličina $\Delta\overline{\gamma}_k$ i $\gamma_k^{(0)}$:

$$\delta = \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}. \tag{11.28}$$

Podintegralna veličina data relacijom (11.27) se razvija u red na taj način što se nazavisno razmatra brojilac, a potom imenilac datog izraza. U brojiocu figuriše veličina $\overline{\gamma}_k$, koja se uvođenjem parametra δ može predstaviti kao:

$$\overline{\gamma}_k = \gamma_k^{(0)}\left(1 + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\right) = \gamma_k^{(0)}(1+\delta).$$

S obzirom da je veličina $\overline{I}_k$ definisana relacijom (11.25), brojilac $\overline{\gamma}_k \cdot \overline{I}_k$ dobija sledeći oblik:

$$\overline{\gamma}_k \cdot \overline{I}_k = \gamma_k^{(0)}(1+\delta) \cdot I_k^{(0)}\Big[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu\Big],$$

$$\overline{\gamma}_k \cdot \overline{I}_k = I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)} \cdot \Big[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta + \delta\sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \delta\sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu\Big].$$

U poslednjoj relaciji je neophodno zadržati samo članove koji su proporcionalni parametru δ, odnosno potrebno je odbaciti sve članove koji su srazmerni δ^2. Pošto parametar δ nosi informaciju o uticaju nehomogenosti jonskog polja na veličinu udarne elektronske polu-poluširine, tada se iz deficije za koeficijent $\mathcal{A}_\nu$ (10.12) može zaključiti da je $\mathcal{A}_\nu \sim \delta$, jer sadrži u sebi matrični element kvadrupolne interakcije $\hat{U}$. Zbog toga se u poslednjoj relaciji zanemaruju dva poslednja člana kao male veličine drugog reda:

$$\overline{\gamma}_k \cdot \overline{I}_k \approx I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)} \cdot \Big[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta\Big]. \tag{11.29}$$

Na ovaj nači brojilac izraza (11.27) je sveden na veličinu koja je srazmerna parametru δ. S druge strane, imenilac se razvija u red po malom parametru δ, pri čemu se zadržavamo na članu linearnom po δ:

$$\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2} \approx \left[\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}\right]_{\delta=0} + \delta \cdot \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\delta}\left(\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}\right)\right]_{\delta=0}.$$

Prvi sabirak se jednostavno izračunava, ako se uzme u obzir da je prema (11.26) $\overline{\gamma}_k \equiv \gamma_k^{(0)}$ za $\delta = 0$:

$$\left[\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}\right]_{\delta=0} = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}.$$

Da bi se odredio drugi sabirak, prvo se mora izvršiti diferenciranje po parametru δ:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\delta}\left(\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}\right) = -\frac{2\cdot\overline{\gamma}_k}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2\right]^2} \cdot \frac{\mathrm{d}\overline{\gamma}_k}{\mathrm{d}\delta} = -\frac{2\cdot\overline{\gamma}_k}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2\right]^2} \cdot \overline{\gamma}_k^{(0)}.$$

Uvrštavajući izraz za $\overline{\gamma}_k$ prema relaciji (11.26), konačno se dobija:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\delta}\left(\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}\right)=-\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\cdot(1+\delta)}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2},$$

a za $\delta=0$ izraz dobija sledeći oblik

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\delta}\left(\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}\right)\right]_{\delta=0}=-\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}.$$

S obzirom da su određene vrednosti oba sabirka koji figurišu u izrazu za imenilac relacije (11.27), može se konačno zapisati:

$$\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}\approx\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}-\delta\cdot\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}. \tag{11.30}$$

Pošto su poznati izrazi za brojilac (11.29) i imenilac (11.30), može se utvrditi i oblik podintegralne funkcije (11.27):

$$\frac{\overline{\gamma}_k\cdot\overline{I}_k}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}=\left[\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}-\delta\cdot\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}\right]\cdot I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)}\cdot$$
$$\cdot\left[1+\sum_\nu{}'\,\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu+\sum_\mu{}'\,\overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu+\delta\right].$$

Naravno, i u ovom slučaju je potrebno zadržati samo članove koji su proporcionalni parametru δ, odnosno odbaciti one koji su srazmerni δ^2 ili $\overline{\mathcal{A}}_\nu\delta$, pa imamo:

$$\frac{\overline{\gamma}_k\cdot\overline{I}_k}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}=I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)}\cdot\left[\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\cdot\left(1+\sum_\nu{}'\,\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu+\sum_\mu{}'\,\overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu+\delta\right)-\right.$$
$$\left.-\delta\cdot\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}\right].$$

Ako se uzme u obzir i izraz za parametar δ dat relacijom (11.28), poslednja jednakost postaje:

$$\frac{\overline{\gamma}_k\cdot\overline{I}_k}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2}=I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)}\cdot\left[\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\cdot\left(1+\sum_\nu{}'\,\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu+\sum_\mu{}'\,\overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu+\frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\right)-\right.$$
$$\left.-\frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\cdot\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}\right].$$

Na ovaj način je određen oblik podintegralne funkcije koja figuriše u izrazu za profil spektralne linije atoma vodonika pri prelazu $|n\rangle\to|n'\rangle$, a dat je relacijom (11.23). Dakle, izraz za profil spektralne linije u slučaju atoma vodonika sa tačnošću do članova proporcionalnih malom parametru δ, ima oblik:

$$I_{nn'}(\Delta\omega)=\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty}\mathrm{d}\vec{F}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_\alpha\mathrm{d}g_\alpha\cdot W(\vec{F},g_1,g_2,g_3,g_4,g_5)\left\{\sum_k\frac{I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)}}{G\pi}\cdot\left[\frac{1}{(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\cdot\right.\right.$$
$$\left.\left.\cdot\left(1+\sum_\nu{}'\,\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu+\sum_\mu{}'\,\overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu+\frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\right)-\frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{\left[(\Delta\omega-\Delta\overline{\omega}_k)^2+(\overline{\gamma}_k)^2\right]^2}\right]\right\}. \tag{11.31}$$

Svi izrazi navedeni u ovom poglavlju se odnose na opšte rešenje problema uticaja jonskog polja na profil spektralne linije u okvirima popravke prvog reda po parametru ε za pomeraj, intenzitet i udarne elektronske polu-poluširine štarkovskih komponenti. Za dalji proračun je pogodno poslednji izraz (11.31) prikazati u obliku superpozicije centralnih i bočnih komponenti profila linije:

$$I_{nn'}(\Delta\omega)=I_0(\Delta\omega)+I_l(\Delta\omega),$$

gde je $I_0(\Delta\omega)$ udeo centralnih komponenti ($\Delta C_k=0$) u profilu linije, a $I_l(\Delta\omega)$ udeo bočnih komponenti ($\Delta C_k\neq0$). U narednim poglavljima će biti detaljno analiziran profil bočnih komponenti.

Poglavlje 12

Profil bočnih komponenti

12.1 Profil bočnih komponenti sa uračunavanjem nehomogenosti jonskog polja

Neposredno izdvajanje bočnih komponenti $I_l(\Delta\omega)$ iz ukupnog profila (11.31) nije moguće. Međutim, za bočne komponente je $\Delta\overline{C}_k \neq 0$ i može se smatrati da je kvadrupolna interakcija uvek mala u poređenju sa dipolnom:

$$|\Delta\overline{U}_k| \ll |\Delta\overline{C}_k|.$$

Ova činjenica omogućuje razvoj u red imenioca podintegralne funkcije u relaciji (11.31) po malom parametru Ω:

$$\Omega = \frac{\Delta\overline{U}_k}{\Delta\overline{C}_k} \ll 1. \tag{12.1}$$

Parametar Ω figuriše u izrazu za imenilac samo preko veličine $\Delta\overline{\omega}_k$, koja je prema (11.24) jednaka:

$$\Delta\overline{\omega}_k = \Delta\overline{C}_k + \Delta\overline{U}_k = \Delta\overline{C}_k\left(1 + \frac{\Delta\overline{U}_k}{\Delta\overline{C}_k}\right) = \Delta\overline{C}_k(1+\Omega).$$

Uzimajući poslednju relaciju u obzir, izraz koji figuriše u imeniocu relacije (11.31) se može zapisati kao:

$$g(\Omega) \equiv \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k(1+\Omega))^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}.$$

Sada je potrebno izvršiti razvoj imenioca $g(\Omega)$ u red po malom parametru Ω, pri čemu se zadržavamo samo na članovima linearnim po Ω:

$$g(\Omega) \approx g(0) + \Omega \cdot \left[\frac{\mathrm{d}g(\Omega)}{\mathrm{d}\Omega}\right]_{\Omega=0}. \tag{12.2}$$

Prvi sabirak se jednostavno pronalazi uvrštavanjem $\Omega = 0$ u izraz za $g(\Omega)$:

$$g(0) = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}.$$

Da bi se utvrdila vrednost drugog člana u izrazu (12.2), neophodno je diferencirati funkciju $g(\Omega)$:

$$\left[\frac{\mathrm{d}g(\Omega)}{\mathrm{d}\Omega}\right]_{\Omega=0} = \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\Omega}\left(\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k(1+\Omega))^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right)\right]_{\Omega=0},$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}g(\Omega)}{\mathrm{d}\Omega}\right]_{\Omega=0} = \left[\frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k(1+\Omega))\cdot\Delta\overline{C}_k\cdot(1+\Omega)}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k(1+\Omega))^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\right]^2}\right]_{\Omega=0} = \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\right]^2}.$$

Dakle, izraz za funkciju $g(\Omega)$ dobija sledeći oblik:

$$g(\Omega) \equiv \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} + \Omega\cdot\frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\right]^2}.$$

Ako se uvede izraz za parametar Ω prema relaciji (12.1), izraz za $g(\Omega)$ postaje:

$$\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} + \frac{\Delta\overline{U}_k}{\Delta\overline{C}_k} \cdot \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\right]^2}.$$

Prethodna relacija se može zapisati i na sledeći način koji podrazumeva izvlačenje prvog člana ispred zagrade i tom obliku će biti kasnije korišćena:

$$\frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{U}_k}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right]. \tag{12.3}$$

Preostalo je da se podintegralna funkcija iz relacije (11.31) $h(\Omega)$ transformiše na sličan način, odnosno da se razvije u red po parametru Ω. Prvo se funkcija $h(\Omega)$ dovodi na pogodan oblik:

$$h(\Omega) \equiv \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left(1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta\right) - \frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\cdot\delta}{\left[(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2\right]^2},$$

gde je δ definisano relacijom (11.28). Ipred zagrade u poslednjoj relaciji se izvlači zajednički član, pa funkcija $h(\Omega)$ dobija sledeći oblik:

$$h(\Omega) = \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta - \frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\cdot\delta}{(\Delta\omega - \Delta\overline{\omega}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k)^2}\right].$$

Može se uočiti da član ispred zagrade, kao i imenilac u poslednjem članu mogu biti razvijeni u red po parametru Ω prema već dobijenom obrascu (12.3):

$$\begin{aligned} h(\Omega) = & \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k\cdot\Omega}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right] \cdot \left\{1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta - \right. \\ & \left. - 2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\cdot\delta \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k\cdot\Omega}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right]\right\}. \end{aligned}$$

Množenjem svih članova u prethodnoj relaciji dobio bi se velik broj članova, ali od svih njih neophodno je zadržati samo one koji su proporcionalni parametru Ω. Dakle, članovi proporcionalni Ω^2, $\delta\Omega$ i $\mathcal{A}_\nu\Omega$ se zanemaruju, pa $h(\Omega)$ dobija mnogo jednostavniji oblik:

$$\begin{aligned} h(\Omega) = & \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \delta - \frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2\cdot\delta}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} + \right. \\ & \left. + \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{C}_k\cdot\Omega}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right]. \end{aligned}$$

Uvrštavanjem izraza za parametre δ i Ω dobija se sledeće:

$$\begin{aligned} h(\Omega) = & \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \left[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}}\left[1 - \frac{2\cdot(\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right] + \right. \\ & \left. + \frac{2\cdot(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)\cdot\Delta\overline{U}_k}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}\right]. \end{aligned} \tag{12.4}$$

Na ovaj način je dobijena podintegralna funkcija koja figuriše u relaciji (11.31) sa tačnošću do na mali parametar Ω. U slučaju bočnih linija veličina $I_{nn'}(\Delta\omega)$ postaje $I_l(\Delta\omega)$, a izraz (11.31) ima oblik:

$$I_l(\Delta\omega) = \int_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, g_2, g_3, g_4, g_5) \cdot \sum_k \frac{I_k^{(0)}\gamma_k^{(0)}}{G\pi} \cdot h(\Omega).$$

Ako se u prethodnu relaciju uvrsti izraz za funkciju $g(\Omega)$ (12.4), dobija se formula prema kojoj se računaju profili bočnih linija:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi} \int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, g_2, g_3, g_4, g_5) \cdot \left\{ \sum_k \frac{I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)}}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \right.$$
$$\cdot \left[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu \overline{\mathcal{A}}_\mu + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \right] + \right.$$
$$\left. \left. + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k) \cdot \Delta\overline{U}_k}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \right] \right\}. \tag{12.5}$$

Pre nego što se otpočne sa integracijom po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja $(g_1, \ldots, g_5)$, neophodno je matrične elemente operatora $\hat{U}$ koji ulaze u izraz za $\Delta\overline{U}_k$ transformisati.

12.2 Transformacija matričnih elemenata operatora $\hat{U}$

Da bismo izvršili transformaciju matričnih elemenata $\hat{U}$, iskoristićemo obrazac (11.22) pri čemu je oprator $\hat{T}$ identički jednak $\hat{U}$:

$$\langle \psi_1 | \hat{U}(x', y', z') | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x, y, z) \hat{R} | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 \hat{R}^\dagger | \hat{U}(x, y, z) | \hat{R}\psi_2 \rangle.$$

Operator $\hat{U}$ karakteriše kvadrupolnu interakciju, a njegov eksplicitan oblik je dat relacijom (10.2). Imajući ovo u vidu relacija za transformaciju operatora $\hat{U}$ postaje:

$$\langle \psi_1 | \hat{U}(x', y', z') | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 \hat{R}^\dagger | -\frac{1}{6} \sum_{ik} Q_{ik} \cdot \frac{\partial F_i}{\partial x_k} | \hat{R}\psi_2 \rangle,$$

odnosno,

$$\langle \psi_1 | \hat{U}(x', y', z') | \psi_2 \rangle = -\frac{1}{6} \cdot \langle \psi_1 \hat{R}^\dagger | Q_{xx} \frac{\partial F_x}{\partial x} + Q_{xy} \frac{\partial F_x}{\partial y} + Q_{xz} \frac{\partial F_x}{\partial z} + Q_{yx} \frac{\partial F_y}{\partial x} + Q_{yy} \frac{\partial F_y}{\partial y} + Q_{yz} \frac{\partial F_y}{\partial z} +$$
$$+ Q_{zx} \frac{\partial F_z}{\partial x} + Q_{zy} \frac{\partial F_z}{\partial y} + Q_{zz} \frac{\partial F_z}{\partial z} | \hat{R}\psi_2 \rangle. \tag{12.6}$$

Svi članovi koji se javljaju u prethodnoj relaciji nisu međusobno nezavisni. Relacija (10.7) omogućuje da se utvrde sledeće veze između komponenti nehomogenosti jonskog polja:

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} = \frac{\partial F_x}{\partial y}, \qquad \frac{\partial F_z}{\partial x} = \frac{\partial F_x}{\partial z}, \qquad \frac{\partial F_z}{\partial y} = \frac{\partial F_y}{\partial z}.$$

Prema relaciji (10.3) se mogu odrediti i sve komponente tenzora kvadrupolnog momenta:

$$Q_{xx} = -e \cdot (3x^2 - r^2), \qquad Q_{xy} = -e \cdot 3xy, \qquad Q_{xz} = -e \cdot 3xz, \tag{12.7}$$
$$Q_{yx} = -e \cdot 3xy, \qquad Q_{yy} = -e \cdot (3y^2 - r^2), \qquad Q_{yz} = -e \cdot 3yz, \tag{12.8}$$
$$Q_{zx} = -e \cdot 3xz, \qquad Q_{zy} = -e \cdot 3yz, \qquad Q_{zz} = -e \cdot (3z^2 - r^2), \tag{12.9}$$

a odatle se može zaključiti da je tenzor simetričan

$$Q_{xy} = Q_{yx}, \qquad Q_{xz} = Q_{zx}, \qquad Q_{zy} = Q_{yz}.$$

Dakle, uzimanjem u obzir jednakih članova relacija (12.6) može dobiti jednostavniji oblik:

$$\langle \psi_1 | \hat{U}(x', y', z') | \psi_2 \rangle = -\frac{1}{6} \cdot \langle \psi_1 \hat{R}^\dagger | Q_{xx} \frac{\partial F_x}{\partial x} + Q_{xy} \frac{\partial F_x}{\partial y} + Q_{xz} \frac{\partial F_x}{\partial z} + Q_{xy} \frac{\partial F_x}{\partial y} + Q_{yy} \frac{\partial F_y}{\partial y} + Q_{yz} \frac{\partial F_y}{\partial z} +$$
$$+ Q_{xz} \frac{\partial F_x}{\partial z} + Q_{yz} \frac{\partial F_y}{\partial z} + Q_{zz} \frac{\partial F_z}{\partial z} | \hat{R}\psi_2 \rangle = -\frac{1}{6} \cdot \langle \psi_1 \hat{R}^\dagger | Q_{xx} \frac{\partial F_x}{\partial x} + Q_{yy} \frac{\partial F_y}{\partial y} +$$
$$+ Q_{zz} \frac{\partial F_z}{\partial z} + 2Q_{xy} \frac{\partial F_x}{\partial y} + 2Q_{xz} \frac{\partial F_x}{\partial z} + 2Q_{yz} \frac{\partial F_y}{\partial z} | \hat{R}\psi_2 \rangle.$$

Postoji još jedna značajna veza između dijagonalnih komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja (10.8) koja omogućava da se eliminiše još jedna komponenta iz poslednjeg izraza:

$$\mathrm{Spur}\left(\frac{\partial F_i}{\partial x_k}\right) = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \equiv 0,$$
$$\frac{\partial F_y}{\partial y} = -\frac{\partial F_x}{\partial x} - \frac{\partial F_z}{\partial z}.$$

Slično važi i za tenzor električnog kvadrupolnog momenta $\hat{Q}$:

$$\mathrm{Spur}(Q_{ik}) = Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = -e \cdot (3x^2 - r^2) - e \cdot (3y^2 - r^2) - e \cdot (3z^2 - r^2) \equiv 0,$$
$$Q_{yy} = -Q_{xx} - Q_{zz}.$$

Konačno možemo izvršiti smenu još jednog člana u okviru matričnog elementa operatora $\hat{U}$:

$$Q_{yy}\frac{\partial F_y}{\partial y} = (Q_{xx} + Q_{zz})\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_z}{\partial z}\right).$$

Uvrštavanjem ove jednakosti u izraz za matrični element i nakon pregrupisavanja članova, dobijamo:

$$\begin{aligned}\langle\psi_1|\hat{U}(x',y',z')|\psi_2\rangle = &-\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_1\hat{R}^\dagger|Q_{xx}\frac{\partial F_x}{\partial x} + (Q_{xx}+Q_{zz})\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_z}{\partial z}\right) + Q_{zz}\frac{\partial F_z}{\partial z} + 2Q_{xy}\frac{\partial F_x}{\partial y} + \\ &+ 2Q_{xz}\frac{\partial F_x}{\partial z} + 2Q_{yz}\frac{\partial F_y}{\partial z}|\hat{R}\psi_2\rangle = -\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_1\hat{R}^\dagger|(2Q_{xx}+Q_{zz})\frac{\partial F_x}{\partial x} + (Q_{xx} + \\ &+ 2Q_{zz})\frac{\partial F_z}{\partial z} + 2Q_{xy}\frac{\partial F_x}{\partial y} + 2Q_{xz}\frac{\partial F_x}{\partial z} + 2Q_{yz}\frac{\partial F_y}{\partial z}|\hat{R}\psi_2\rangle. \qquad (12.10)\end{aligned}$$

Lako se može uočiti da u ovom izrazu figuriše samo pet nezavisnih komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja $\frac{\partial F_i}{\partial x_k}$ i isto toliko komponenti tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{ik}.

Poglavlje 13

Određivanje funkcije raspodele jačine jonskog polja W

Činjenica da postoji samo pet nezavisnih komponenti nehomogenosti jonskog polja i isti toliki broj nezavisnih komponenti tenzora električnog kvadrupolnog momenta, već je bila uzeta u obzir kada se definisala funkcija raspodele jačine jonskog polja W. Ako se komponente nehomogenosti jonskog polja označe sa $g_1, \ldots, g_5$, relacija kojom je definisana funkcija W (11.2) postaje:

$$W(\vec{F}, g_1, g_2, g_3, g_4, g_5) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot \exp\left[-i(\vec{\rho}\vec{F} + \sigma_1 g_1 + \sigma_2 g_2 + \sigma_3 g_3 + \sigma_4 g_4 + \sigma_5 g_5)\right] \cdot$$
$$\cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5).$$

Funkcija $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ se nalazi prema relaciji (11.3) koja glasi:

$$A(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = \exp\left[-N \cdot C(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5)\right], \tag{13.1}$$

gde je N koncentacija naelektrisanih čestica u plazmi. Funkcija $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ ima dimenzije zapremine i određena je izrazom (11.4) koji će na ovom mestu biti korišćen u nešto drugačijoj formi. Naime, lako se može zaključiti da članovi u eksponencijalnoj funkciji predstavljaju komponente tenzora električnog kvadrupolnog momenta, pa poređenjem sa izrazima za Q_{ik} dobijamo:

$$C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = \int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \left[1 - \exp\left[i\left(-e\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3} - \sigma_1\frac{Q_{xx}}{r^5} - \sigma_2\frac{Q_{zz}}{r^5} - \sigma_3\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_4\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_5\frac{Q_{yz}}{r^5}\right)\right]\right].$$

Da bi rešavanje integrala koji figurišu u izrazu za funkciju raspodele W bilo moguće, funkcija $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ se mora razviti u red po parametrima $\sigma_1, \ldots, \sigma_5$:

$$C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = C^{(0)}(\rho) + \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha, \tag{13.2}$$

pri čemu se zadržavamo na linearnom članu. Prvi član u razvoju predstavlja vrednost funkcije C u tački $\sigma_1 = \ldots = \sigma_5 = 0$, a ova vrednost je jednaka:

$$C^{(0)}(\rho) = C(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0) = \int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \left[1 - \exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right)\right]. \tag{13.3}$$

Član $C^{(0)}(\rho)$ opisuje karakterističnu zapreminu unutar koje se može smatrati da je jonsko polje homogeno. Koeficijent koji se javlja pod sumom predstavlja vrednosti prvih parcijalnih izvoda po parametrima $\sigma_1, \ldots, \sigma_5$ u tački gde su svi ovi parametri jednaki nuli:

$$C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0} \qquad \text{gde je} \quad \sigma_\mu \equiv \sigma_1, \ldots, \sigma_5.$$

Da bi se odredila vrednost ovog koeficijenta, mora se uzeti u obzir relacija koja definiše funkciju $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$. U slučaju diferenciranja po parametru σ_1, ovaj koeficijent ima sledeći oblik:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_1}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0}$$

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_1}\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\left[1 - \exp\left[i\Big(-\frac{e\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3} - \sigma_1\frac{Q_{xx}}{r^5} - \sigma_2\frac{Q_{zz}}{r^5} - \sigma_3\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_4\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_5\frac{Q_{yz}}{r^5}\Big)\right]\right]\right]_{\sigma_\mu=0}$$

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{xx}}{r^5}\cdot\exp\left[i\Big(-\frac{e\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3} - \sigma_1\frac{Q_{xx}}{r^5} - \sigma_2\frac{Q_{zz}}{r^5} - \sigma_3\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_4\frac{Q_{xy}}{r^5} - \sigma_5\frac{Q_{yz}}{r^5}\Big)\right]\right]_{\sigma_\mu=0}$$

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{xx}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right). \tag{13.4}$$

Na potpuno analogan način se dobijaju i ostali koeficijenti koji figurišu u razvoju funkcije $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ (13.2), a njihove vrednosti su sledeće:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_2}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0} = i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{zz}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right), \tag{13.5}$$

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_3}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0} = i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{xy}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right), \tag{13.6}$$

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_4}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0} = i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{xz}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right), \tag{13.7}$$

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_5}\Big(C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\Big)\right]_{\sigma_\mu=0} = i\int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{yz}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right). \tag{13.8}$$

Može se uočiti da svi koeficijenti koji odgovaraju linearnom članu po parametrima σ_μ, zavise od odgovarajućih komponenti tenzora električnog kvadrupolnog momenta.

13.1 Slučaj homogenog jonskog polja

U slučaju homogenog jonskog polja sve komponente tenzora nehomogenosti jonskog polja su jednake nuli ($g_1 = \ldots = g_5 = 0$). Takođe su i svi parametri σ_μ identički jednaki nuli, pa funkcija raspodele jačine jonskog polja W dobija sledeći oblik:

$$W(\vec{F}, 0, 0, 0, 0, 0) \equiv W(F) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho}\cdot\exp\big(-i\cdot\vec{\rho}\vec{F}\big)\cdot A(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0).$$

U prethodnoj relaciji se javlja funkcija $A(\vec{\rho}, 0, \ldots, 0)$, koja se prema formulama (13.1) i (13.3) može zapisati kao:

$$A(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0) = \exp\big[-N\cdot C(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0)\big],$$
$$A(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0) \equiv A(\rho) = \exp\big[-N\cdot C^{(0)}(\rho)\big]. \tag{13.9}$$

Uvrštavanjem funkcije $A(\rho)$ u izraz za funkciju raspodele W, dobija se:

$$W(F) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho}\cdot\exp\big(-i\cdot\vec{\rho}\vec{F}\big)\cdot A(\rho).$$

Prethodni integral označava integraciju po celom prostoru u koordinatnom sistemu xyz. Pogodno je na ovom mestu preći na integraciju po sfernim koordinatama ρ, θ_ρ i φ_ρ, gde uglovi θ_ρ i φ_ρ predstavljaju uglove koje

vektor $\vec{\rho}$ zaklapa sa odgovarajućim osama u koordinatnom sistemu xyz. Integral se transformiše u:

$$W(F) = \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \int_0^\pi \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \exp\left(-i \cdot \vec{\rho}\vec{F}\right) \cdot A(\rho).$$

Da bismo transformaciju korektno sproveli, moramo i argument u eksponencijalnoj funkciji predstaviti preko sfernih koordinata. Skalarni proizvod koji se javlja u argumentu jednak je:

$$\vec{\rho} \cdot \vec{F} = \rho F \cdot \vec{e}_\rho \vec{e}_F,$$
$$\vec{\rho} \cdot \vec{F} = \rho F \cdot \cos\theta_{\rho F},$$

gde su $\vec{e}_\rho$ i $\vec{e}_F$ jedinični vektori vektora $\vec{\rho}$ i vektora jačine jonskog polja $\vec{F}$, a $\theta_{\rho F}$ ugao između njih. Uzimajući poslednju relaciju u obzir funkcija raspodele $W(F)$ postaje:

$$W(F) = \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \int_0^\pi \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \exp\left(-i \cdot \rho F \cdot \cos\theta_{\rho F}\right). \tag{13.10}$$

Ovde je problem samo delimično rešen, jer i novouvedena veličina $\theta_{\rho F}$ zavisi od sfernih koordinata. Da bi se ta zavisnost eksplicitno odredila, mora se krenuti od izraza za jedinične vektore $\vec{e}_\rho$ i $\vec{e}_F$ u sfernim koordinatama:

$$\vec{e}_\rho = \sin\theta_\rho \cdot \cos\varphi_\rho \cdot \vec{e}_x + \sin\theta_\rho \cdot \sin\varphi_\rho \cdot \vec{e}_y + \cos\theta_\rho \cdot \vec{e}_z,$$
$$\vec{e}_F = \sin\theta_F \cdot \cos\varphi_F \cdot \vec{e}_x + \sin\theta_F \cdot \sin\varphi_F \cdot \vec{e}_y + \cos\theta_F \cdot \vec{e}_z,$$

gde su θ_F i φ_F uglovi koje zaklapa vektor $\vec{F}$ sa odgovarajućim osama u koordinatnom sistemu xyz. Skalarnim množenjem ova dva vektora se dobija sledeće:

$$\vec{e}_\rho \cdot \vec{e}_F = \sin\theta_\rho \cdot \cos\varphi_\rho \cdot \sin\theta_F \cdot \cos\varphi_F + \sin\theta_\rho \cdot \sin\varphi_\rho \cdot \sin\theta_F \cdot \sin\varphi_F + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_F,$$
$$\vec{e}_\rho \cdot \vec{e}_F = \sin\theta_\rho \cdot \sin\theta_F(\cos\varphi_\rho \cdot \cos\varphi_F + \sin\varphi_\rho \cdot \sin\varphi_F) + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_F.$$

Korišćenjem relacije (11.8), može se konciznije zapisati član u zagradi, pa konačno imamo:

$$\vec{e}_\rho \cdot \vec{e}_F = \sin\theta_\rho \cdot \sin\theta_F \cdot \cos(\varphi_\rho - \varphi_F) + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_F.$$

Poslednja jednakost u potpunosti određuje vrednost skalarnog proizvoda $\vec{\rho} \cdot \vec{F}$:

$$\cos\theta_{\rho F} = \sin\theta_\rho \cdot \sin\theta_F \cdot \cos(\varphi_\rho - \varphi_F) + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_F, \tag{13.11}$$
$$\vec{\rho} \cdot \vec{F} = \rho F \cdot \left[\sin\theta_\rho \cdot \sin\theta_F \cdot \cos(\varphi_\rho - \varphi_F) + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_F\right].$$

Da bi se izračunali integrali u relaciji (13.10), pored toga što je neophodno da se izrazi $\cos\theta_{\rho F}$ u sfernim koordinatama, mora se eksponencijalna funkcija razviti u red. Iskoristićemo razvoj ravnog talasa po Beselovim funkcijama $J_\nu(x)$ i Ležandrovim polinomima $P_n(x)$ na osnovu problema 7.78 u [5]:

$$\exp(ikr\cos\psi) = \left(\frac{\pi}{2kr}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} i^n \cdot (2n+1) \cdot J_{n+\frac{1}{2}}(kr) \cdot P_n(\cos\psi). \tag{13.12}$$

Beselova funkcija za proizvoljnu vrednost ν se definiše kao:

$$J_\nu(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \cdot \frac{x^{\nu+2k}}{2^{\nu+2k} \cdot k! \cdot \Gamma(\nu+k+1)}, \tag{13.13}$$

gde je $\Gamma(p)$ gama-funkcija koja se izračunava prema formuli

$$\Gamma(p) = \int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot t^{p-1} \cdot \exp(-t) = (p-1)\Gamma(p-1), \qquad p \in \mathbb{R}\mathrm{e}.$$

Ako je parametar p prirodan broj tada je vrednost gama-funkcije data sledećim izrazom:

$$\Gamma(p) = (p-1)!, \qquad p \in \mathbb{N}.$$

U slučaju da je parametar p poluceo broj, vrednost gama-funkcije se lako nalazi ako je poznata sledeća vrednost:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}.$$

Ležandrovi polinomi su već definisani relacijom (2.5) koja glasi:

$$P_n(x) = \frac{1}{n! \cdot 2^n} \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(x^2 - 1)^n.$$

Nekoliko prvih Ležandrovih polinoma su:

$$\begin{aligned}
P_0(x) &= 1,\\
P_1(x) &= x,\\
P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1),\\
P_3(x) &= \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),\\
P_4(x) &= \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3), \ldots
\end{aligned}$$

Pošto je potrebno da razvijemo eksponencijalnu funkciju iz relacije (13.10) u red, iskoristićemo izraz (13.12) prethodno zamenivši i sa $-i$, kr sa ρF i $\cos\psi$ sa $\cos\theta_{\rho F}$:

$$\exp(-i\rho F\cos\theta_{\rho F}) = \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\cos\theta_{\rho F}).$$

S obzirom da je $\cos\theta_{\rho F}$ složena funkcija sfernih koordinata, što je izraženo relacijom (13.11), razvoj eksponencijalne funkcije dobija nešto složeniji oblik koji je preuzet iz [2]:

$$\begin{aligned}
\exp(-i\rho F\cos\theta_{\rho F}) = &\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \Bigg[P_l(\cos\theta_\rho) \cdot P_l(\cos\theta_F) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot\\
&\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Bigg].
\end{aligned} \tag{13.14}$$

Uvrštavajući poslednji izraz u formulu za funkciju raspodele $W(F)$ (13.10), dobija se:

$$\begin{aligned}
W(F) = &\int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \Bigg[P_l(\cos\theta_\rho) \cdot\\
&\cdot P_l(\cos\theta_F) + \sum_{m=1}^{l} 2 \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Bigg].
\end{aligned}$$

Pogodno je uvesti nove promenljive μ_ρ i μ_F koje su sa promenljivima sfernog koordinatnog sistema θ_ρ i θ_F povezane relacijama:

$$\begin{aligned}
\mu_\rho &= \cos\theta_\rho,\\
\mu_F &= \cos\theta_F,
\end{aligned}$$

dok je element $\mathrm{d}\mu_\rho$ jednak

$$\mathrm{d}\mu_\rho = -\sin\theta_\rho \mathrm{d}\theta_\rho.$$

Uvrštavanjem ove smene u izraz za $W(F)$, on postaje:

$$\begin{aligned}
W(F) = -&\int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \int_{+1}^{-1} \mathrm{d}\mu_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \Bigg[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) +\\
&+ \sum_{m=1}^{l} 2 \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Bigg].
\end{aligned}$$

Pošto su operacije sumiranja i integraljenja nezavisne, može se izvršiti zamena redosleda ovih operacija. Takođe se znak – može iskoristiti za izmenu granica integracije po promenljivoj μ_ρ:

$$W(F) = \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \Big[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) +$$
$$+ \sum_{m=1}^{l} 2 \cdot \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Big].$$

Integracija po promenljivoj φ_ρ se odnosi samo na poslednji član i podrazumeva sledeći integral:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F) = 2\pi \cdot \delta_{m,0}.$$

Pošto je vrednost ovog integrala različita od nule samo u slučaju kada je $m = 0$, a sumiranje po m se vrši za $m \geq 1$, znači da je član koji sadrži sumu po m identički jednak nuli. Ova činjenica u mnogome pojednostavljuje izraz za funkciju $W(F)$, koja u ovom slučaju glasi:

$$W(F) = \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F).$$

Integracija po promenljivoj φ_ρ je nezavisna od ostalih članova i kao rezultat daje faktor 2π:

$$W(F) = 2\pi \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\mu_F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho). \tag{13.15}$$

Prethodna relacija se može dalje pojednostaviti, ako se uzme u obzir osobina ortogonalnosti Ležandrovih polinoma, koja se iskazuje sledećom jednakošću:

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}x \cdot P_n(x) \cdot P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \cdot \delta_{n,m}, \qquad m, n = 0, 1, 2, \ldots \tag{13.16}$$

U izrazu (13.15) figuriše sledeći integral koji sadrži Ležandrove polinome:

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho). \tag{13.17}$$

On se pogodno može transformisati na taj način što se u integral ubaci polinom nultog stepena koji je identički jednak jedinici i ne menja vrednost integrala:

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho) \cdot 1 = \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho) \cdot P_0(\mu_\rho) = \frac{2}{2l+1} \cdot \delta_{l,0}.$$

Dakle, integral (13.17) će biti različit od nule samo ako je $l = 0$. Ovo znači da od čitave sume po l ostaje samo prvi član kada je $l = 0$. Na ovaj način je izraz (13.15) još više pojednostavljen:

$$W(F) = 2\pi \sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\mu_F) \cdot \frac{2}{2l+1} \cdot \delta_{l,0},$$

$$W(F) = 4\pi \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{0+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_0(\mu_F).$$

Pošto je $P_0(\mu_F) \equiv 1$, prethodna relacija se transformiše u:

$$W(F) = 4\pi \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{\frac{1}{2}}(\rho F).$$

Preostalo je još da se odredi vrednost Beselove funkcije $J_{\frac{1}{2}}(\rho F)$, a to se može učiniti korišćenjem relacije (13.13). S obzirom da je vrednost parametra ν u ovom slučaju polucela, pogodno je upotrebiti obrazac kojim su određene Beselove funkcije sa polucelim parametrom ν, a koji glasi:

$$J_{n+\frac{1}{2}}(x) = (-1)^n \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot x^{(n+\frac{1}{2})} \cdot \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left(\frac{\sin x}{x}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Prvih nekoiko Beselovih funkcija polucelog reda date su sledećim relacijama:

$$J_{\frac{1}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot x}} \cdot \sin x, \tag{13.18}$$

$$J_{\frac{3}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot x}} \cdot \left(\frac{1}{x} \cdot \sin x - \cos x\right),$$

$$J_{\frac{5}{2}}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot x}} \cdot \left(\left(\frac{3}{x^2} - 1\right) \cdot \sin x - \frac{3}{x} \cdot \cos x\right), \ldots \tag{13.19}$$

Na osnovu ovih relacija moguće je odrediti vrednost Beselove funkcije $J_{\frac{1}{2}}(\rho F)$:

$$J_{\frac{1}{2}}(\rho F) = \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot \rho F}} \cdot \sin(\rho F),$$

kao i vrednost funkcije raspodele jačine jonskog polja $W(F)$

$$W(F) = 4\pi \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot A(\rho) \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{2}{\pi \cdot \rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sin(\rho F).$$

Nakon neznatnog sređivanja poslednjeg izraza, konačno se za funkciju $W(F)$ dobija:

$$W(F) = \frac{4\pi}{F} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho \cdot A(\rho) \cdot \sin(\rho F). \tag{13.20}$$

Korisno je pokazati da se iz uslova proporcionalnosti funkcije raspodele jačine jonskog polja W u slučaju homogenog jonskog polja i Holtsmarkove funkcije raspodele $H(\beta)$, dobija relacija koja u potpunosti definiše oblik funkcije $C^{(0)}(\rho)$.

$$W(\vec{F}, 0, 0, 0, 0, 0) \equiv W(F) \sim H(\beta), \qquad \text{gde je} \qquad \beta = \frac{F}{F_0}.$$

Veličina F_0 predstavlja normalnu jačinu jonskog polja i njen intenzitet iznosi:

$$|F_0| = 2\pi \cdot \left(\frac{4}{15}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{e}{4\pi\varepsilon_0} \cdot N^{\frac{2}{3}},$$

dok je Holtsmarkova funkcija raspodele data izrazom

$$H(\beta) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot (\beta v) \cdot \sin(\beta v) \cdot \exp(-v^{\frac{3}{2}}). \tag{13.21}$$

Da bismo relaciju (13.20) sveli na oblik koji sadrži Holtsmarkovu funkciju raspodele, prvo se moraju uvesti veličine β i F_0:

$$F = \beta F_0,$$

$$W(F) = \frac{4\pi}{\beta F_0} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho \cdot A(\rho) \cdot \sin(\rho\beta F_0).$$

Sada je potrebno uvesti smenu promenljive ρ, na sledeći način:

$$v = \rho F_0, \qquad \mathrm{d}v = F_0 \cdot \mathrm{d}\rho,$$

$$W(F) = \frac{4\pi}{\beta F_0} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \frac{1}{F_0} \cdot \frac{v}{F_0} \cdot A(v) \cdot \sin(\beta v) = \frac{4\pi}{\beta^2 F_0^3} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot (\beta v) \cdot A(v) \cdot \sin(\beta v).$$

Integral u poslednjoj relaciji će imati oblik Holtsmarkove funkcije raspodele (13.21), samo ako funkcija $A(\rho) \equiv A(v)$ data izrazom (13.9) ima strogo definisanu funkcionalnu zavisnost:

$$A(v) \equiv \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(v)\right] = \exp(-v^{\frac{3}{2}}). \tag{13.22}$$

Kao posledica ovog uslova, javlja se sledeća veza:

$$N \cdot C^{(0)}(v) = v^{\frac{3}{2}},$$

$$C^{(0)}(v) = \frac{1}{N} \cdot v^{\frac{3}{2}}.$$

Ovim je određena zavisnost funkcije $C^{(0)}(v)$ od promenljive v, ali se veoma lako može preći i na zavisnost po promenljivoj ρ, ako se uzme u obzir da je $v = \rho F_0$:

$$C^{(0)}(\rho) = \frac{1}{N} \cdot (\rho F_0)^{\frac{3}{2}}. \tag{13.23}$$

Preostalo je još da se odredi eksplicitna veza funkcije raspodele jačine jonskog polja $W(F)$ i Holtsmarkove funkcije raspodele $H(\beta)$. Pošto je funkcija $A(v)$ određena izrazom (13.22), za vrednost $W(F)$ dobijamo:

$$W(F) = \frac{2\pi^2}{\beta^2 F_0^3} \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot (\beta v) \cdot \exp(-v^{\frac{3}{2}}) \cdot \sin(\beta v),$$

$$W(F) = \frac{2\pi^2}{\beta^2 F_0^3} \cdot H(\beta).$$

Na ovaj način je pokazana i eksplicitna zavisnost funkcije raspodele homogenog jonskog polja od Holtsmarkove funkcije raspodele.

13.2 Slučaj nehomogenog jonskog polja

U slučaju nehomogenog jonskog polja, određivanje raspodele $W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)$ je prilično složeno zato što su komponente tenzora nehomogenosti jonskog polja $g_1, \ldots, g_5$ različiti od nule. Takođe se od nule razlikuju i parametri $\sigma_1, \ldots, \sigma_5$, pa je neophodno izračunati sve članove $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$. Ovaj proračun je detaljno sproveden u dodatku F. Poznavanjem svih vrednosti veličina $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$, može se pristupiti određivanju izraza za funkcije $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ (13.1). S obzirom da ova funkcija zavisi od $C(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ (13.2) konačan izraz ima sledeći oblik:

$$A(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5) = \exp\left[-N \cdot C(\vec{\rho}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5)\right] = \exp\left[-N\left(C^{(0)}(\rho) + \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right)\right].$$

Moguće je u prethodnoj relaciji razdvojiti deo koji zavisi od $C^{(0)}(\rho)$ od onog koji je funkcija veličina $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$:

$$A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot \exp\left[-N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right].$$

Ovo je učinjeno zbog toga što su parametri $\sigma_1, \ldots, \sigma_5$ male veličine približne nuli, pa se eksponencijalna funkcija koja sadrži ove parametre može razviti u red. U razvoju eksponencijalne funkcije:

$$\exp(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \ldots,$$

zadržaćemo se na linearnom članu, što u ovom slučaju odgovara članu linearnom po σ_α. Dakle, uvrštavanjem člana:

$$\exp\left[-N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right] \approx 1 - N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha,$$

u izraz za $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$, dobijamo u mnogome pojednostavljenu formu ove funkcije

$$A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot \left[1 - N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right]. \tag{13.24}$$

Konačno možemo zapisati funkciju raspodele jačine jonskog polja u slučaju kada je ovo polje nehomogeno, na sledeći način:

$$W(\vec{F}, g_1, g_2, g_3, g_4, g_5) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot \exp\left[-i\left(\vec{\rho}\vec{F} + \sigma_1 g_1 + \sigma_2 g_2 + \sigma_3 g_3 + \sigma_4 g_4 + \sigma_5 g_5\right)\right] \cdot$$

$$\cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot \left[1 - N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right].$$

Ovako dobijena funkcija raspodele se neće dalje razvijati, nego će prvo biti izračunate vrednosti integrala koji se javljaju prilikom daljeg izračunavanja funkcije raspodele jačine jonskog polja W. Tu se pre svega misli na prve momente $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ funkcije raspodele $W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)$ koji zadovoljavaju relaciju:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp\left(-i\vec{\rho} \cdot \vec{F}\right) \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right], \tag{13.25}$$

gde je $w(\vec{F})$ funkcija raspodele jačine jonskog polja. Ova funkcija raspodele je sa $W(\vec{F})$ i Holtsmarkovom funkcijom $H(\beta)$, povezana na sledeći način:

$$w(\vec{F}) = \frac{W(\vec{F})}{(2\pi)^3} = \frac{2\pi^2}{\beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \frac{1}{(2\pi)^3},$$

$$w(\vec{F}) = \frac{H(\beta)}{4\pi \cdot F_0^3 \cdot \beta^2}. \tag{13.26}$$

Da je relacija (13.25) zaista zadovoljena, pokazano je u dodatku E.

Poglavlje 14

Izračunavanje profila bočnih spektralnih linija

Određivanje izraza za prve momente $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ koje je sprovedeno u dodatku G, omogućuje da se izvrši integracija po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja g_α u relaciji (11.31), ali samo u slučaju bočnih štarkovskih komponenti. Zbog toga je potrebno razmotriti integraciju po veličinama g_α u izrazu (12.5), koja glasi:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi} \int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}\vec{F} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, g_2, g_3, g_4, g_5) \cdot \left\{ \sum_k \frac{I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)}}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \right.$$
$$\cdot \left[1 + \sum_\nu{}' \overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_\mu{}' \overline{a}_\mu \overline{\mathcal{A}}_\mu + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \right] + \right.$$
$$\left. \left. + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \Delta\overline{U}_k \right] \right\}. \tag{14.1}$$

Međutim, prvo se mora utvrditi koje sve veličine zavise od g_α. Pošto je g_α komponenta tenzora nehomogenosti tenzora jonskog polja i sadrži se u izrazu za kvadrupolnu interakciju $\hat{U}$ (10.2), potrebno je razmatrati samo one članove koji zavise od veličine $\hat{U}$. Prema definicijama (10.12) i (10.15), lako se može zaključiti da su to veličine $\mathcal{A}_\nu$ i ΔU_k. Naravno, svaka od ovih veličina se prvo transformiše u $\overline{\mathcal{A}}_\nu$ i $\Delta\overline{U}_k$. Na osnovu relacije koja definiše ΔU_k (10.15) i transformacione relacije (11.22), dobija se izraz za $\Delta\overline{U}_k$:

$$\Delta\overline{U}_k = \frac{1}{\hbar}\Big[\langle \psi_{n_1,n_2,m} | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle - \langle \psi_{n_1',n_2',m'} | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1',n_2',m'} \rangle\Big]. \tag{14.2}$$

Transformacija proizvoda $a_\nu \cdot \mathcal{A}_\nu$

Prvo ćemo razmatrati izraz za $\overline{\mathcal{A}}_\nu$, koja je prema transformaciji (11.22) jednaka:

$$\overline{\mathcal{A}}_\nu = \frac{\langle \psi_\nu \hat{R}^\dagger | \hat{U}(x,y,z) | \hat{R} \psi_{n_1,n_2,m} \rangle}{\overline{E}^{(0)}_{n_1,n_2,m} - \overline{E}^{(0)}_\nu}.$$

Vrednosti za energiju u prethodnom izrazu su samo formalno transformisane, jer energija kao karakteristika nekog sistema ne sme da zavisi od izbora koordinatnog sistema. Ovo tvrđenje će biti dokazano na primeru energije $E^{(0)}_{n_1,n_2,m}$. Kreće se od izraza za transformaciju operatora iz primovanog u neprimovani sistem:

$$\overline{E}^{(0)}_{n_1,n_2,m} = E_n - \langle \psi_{n_1,n_2,m} \hat{R}^\dagger | (\vec{d} \cdot \vec{F})_{\mathrm{n}} | \hat{R} \psi_{n_1,n_2,m} \rangle,$$

gde poslednji član predstavlja srednju vrednost operatora $\vec{d} \cdot \vec{F}$ u neprimovanom sistemu. Nakon transformacije ovog izraza dobijamo:

$$\overline{E}^{(0)}_{n_1,n_2,m} = E_n - \langle \psi_{n_1,n_2,m} | \hat{R}^\dagger \vec{d}_{\mathrm{n}} \hat{R} \hat{R}^\dagger \vec{F}_{\mathrm{n}} \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle,$$
$$\overline{E}^{(0)}_{n_1,n_2,m} = E_n - \langle \psi_{n_1,n_2,m} | (\vec{d} \cdot \vec{F})_{\mathrm{p}} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle,$$

Poslednji izraz prema relaciji (10.11) predstavlja energiju $E^{(0)}_{n_1,n_2,m}$, pa važi sledeće:

$$\overline{E}^{(0)}_{n_1,n_2,m} = E^{(0)}_{n_1,n_2,m},$$

odnosno, energija se prilikom transformacije iz neprimovanog u primovan koordinatni sistem ne menja. Ananlogan postupak se može sprovesti i za vrednost energije $E^{(0)}_\nu$:

$$\overline{E}^{(0)}_\nu = E^{(0)}_\nu,$$

pa izraz za $\overline{\mathcal{A}}_\nu$ postaje

$$\overline{\mathcal{A}}_\nu = \frac{\langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle}{E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu}. \tag{14.3}$$

Pošto u izrazu za ΔC_k (10.14), figurišu samo srednje vrednosti operatora $\vec{d}\cdot\vec{F}$, ova veličina se neće menjati prilikom prelaska u novi koordinatni sistem:

$$\Delta\overline{C}_k = \Delta C_k \equiv \frac{1}{\hbar}\Big[\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}\cdot\vec{F}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle - \langle\psi_{n_1',n_2',m'}|\vec{d}\cdot\vec{F}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\Big]. \tag{14.4}$$

Sledeći koeficijent koji se javlja u integralu (14.1) i koji je potrebno transformisati je a_ν. Ovaj koeficijent je dat relacijom (10.17), a ona glasi:

$$a_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|d_i|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|d_i|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\vec{d}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}.$$

U zavisnosti od toga da li je polarizacija emitovanog zračenja π ili σ, komponenta dipolnog momenta d_i postaje $-ez'$:

$$a^{(\pi)}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|(-ez')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|(-ez')|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|(-ez')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2},$$

$$a^{(\pi)}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|z'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}, \tag{14.5}$$

ili $-ex'$ (odnosno $-ey'$)

$$a^{(\sigma)}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|(-ex')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|(-ex')|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|(-ex')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2},$$

$$a^{(\sigma)}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|x'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}. \tag{14.6}$$

Transformisan izraz za koeficijent $\overline{a}_\nu$ je prema (11.22) jednak:

$$\overline{a}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger d_i\hat{R}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|\hat{R}^\dagger d_i\hat{R}^\dagger|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\vec{d}\hat{R}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}.$$

Pošto su sve komponente dipolnog momenta ekvivalentne, razmatraćemo samo slučaj x-komponente električnog diponog momenta. Dakle, u tom slučaju kao komponentu dipolnog momenta uvrštavamo veličinu $-ex$, pa imamo sledeće:

$$\overline{a}^{(\pi)}_\nu = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger x\hat{R}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|\hat{R}^\dagger x\hat{R}^\dagger|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger x\hat{R}|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}.$$

Izraz za $\hat{R}^\dagger x\hat{R}$ je već određen relacijom (11.19), pa koeficijent $\overline{a}_\nu$ postaje:

$$\begin{aligned}\overline{a}_\nu = {} & 2\cdot\langle\psi_\nu|(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\cdot \\ & \cdot\frac{\big(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\big)^*}{\big|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\big|^2}.\end{aligned} \tag{14.7}$$

Talasne funkcije $\psi_{n_1,n_2,m}$ i $\psi_{n_1',n_2',m'}$ koje se javljaju u prethodnom izrazu u okviru matričnih elementa koordinata x', y' i z', su određene u primovanom koordinatnom sistemu, odnosno u sistemu u kojem se z-osa poklapa sa pravcem jačine jonskog električnog polja. Ova činjenica omogućuje da se za određivanje matričnih elemenata iskoriste već izvedene relacije (8.10) i (8.14). Tako se za x' i y' koordinatu u slučaju π-polarizovanog zračenja ($\Delta m = 0$), prema (8.14) dobija:

$$\langle\psi_\nu|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle = 0,$$
$$\langle\psi_\nu|y'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle = 0,$$
$$\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|x'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = 0,$$
$$\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|y'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = 0.$$

Na ovaj način se dobija relacija za $\overline{a}_\nu^{(\pi)}$, u kojoj ostaju samo matrični elementi z' koordinate:

$$\overline{a}_\nu^{(\pi)} = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|(\sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\left(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|(\sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\right)^*}{\left|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|(\sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z')|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\right|^2}.$$

Promenljive θ i ψ se odnose na neprimovan koordinatni sistem, pa kao takve mogu da se napišu i van matričnog elemenata:

$$\overline{a}_\nu^{(\pi)} = 2\cdot\frac{(\sin\psi\cdot\sin\theta)^2\cdot\langle\psi_\nu|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\left(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|z'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\right)^*}{(\sin\psi\cdot\sin\theta)^2\cdot\left|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\right|^2},$$
$$\overline{a}_\nu^{(\pi)} = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\left(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|z'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\right)^*}{\left|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\right|^2}.$$

Može se uočiti da dobijeni izraz predstavlja vrednost koeficijenta a_ν u slučaju π-polarizovane komponente (14.5), pa je:

$$\overline{a}_\nu^{(\pi)} = a_\nu^{(\pi)}.$$

Isto važi i za σ-komponentu zračenja ($\Delta m = \pm 1$), kada su prema (8.10) matrični elementi koordinate z' jednaki nuli:

$$\langle\psi_\nu|z'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle = 0,$$
$$\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|z'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = 0.$$

Pored ove konstatacije mora se uzeti u obzir da su matrični elementi x' i y' koordinate jednaki, a ove koordinate ekvivalentne. Zbog toga se u slučaju σ-komponente, koordinate x' i y' mogu poistovetiti, pa relacija (14.7) postaje:

$$\overline{a}_\nu^{(\sigma)} = 2\cdot\frac{(-\sin\psi\cdot\cos\theta-\cos\psi)^2\cdot\langle\psi_\nu|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\left(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|x'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\right)^*}{(-\sin\psi\cdot\cos\theta-\cos\psi)^2\cdot\left|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\right|^2},$$
$$\overline{a}_\nu^{(\sigma)} = 2\cdot\frac{\langle\psi_\nu|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\left(\langle\psi_{n_1',n_2',m'}|x'|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle\right)^*}{\left|\langle\psi_{n_1,n_2,m}|x'|\psi_{n_1',n_2',m'}\rangle\right|^2}.$$

Može se uočiti da dobijeni izraz predstavlja vrednost koeficijenta a_ν u slučaju σ-polarizovane komponente (14.6), pa je:

$$\overline{a}_\nu^{(\sigma)} = a_\nu^{(\sigma)}.$$

Ovim postupkom je pokazano da koeficijent a_ν ne menja svoj oblik pri transformaciji operatora iz neprimovanog u primovan sistem, odnosno pokazano je da važi sledeća jednakost:

$$\overline{a}_\nu = a_\nu. \tag{14.8}$$

Uzimajući u obzir relacije (14.3) i (14.8), može se odrediti transformisan oblik proizvoda $a_\nu\mathcal{A}_\nu$:

$$\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu = a_\nu\cdot\frac{\langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle}{E^{(0)}_{n_1,n_2,m}-E^{(0)}_\nu}. \tag{14.9}$$

Integracija transformisanog operatora $\hat{U}$ po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja g_α

Može se lako uočiti da u integralu (14.1) figurše proizvod $\overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu$. Integracija ovog člana se praktično svodi na integraciju samo onog dela koji zavisi od komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja, a to je operator $\hat{U}$. Ovaj operator se u proizvodu $\overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu$ javlja samo u obliku matričnog elementa, što se može zaključiti na osnovu relacije (14.9). Dakle, neophodno je izvršiti integraciju ovog matričnog elementa po veličinama g_α, a oblik ovog matričnog elementa je određen i dat relacijom (12.10), koja glasi:

$$\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\Big[(2Q_{xx}+Q_{zz})\frac{\partial F_x}{\partial x}+(Q_{xx}+2Q_{zz})\frac{\partial F_z}{\partial z}+$$
$$+2Q_{xy}\frac{\partial F_x}{\partial y}+2Q_{xz}\frac{\partial F_x}{\partial z}+2Q_{yz}\frac{\partial F_y}{\partial z}\Big]\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle.$$

Svaka od komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja se može kraće zapisati kao g_α ($\alpha = 1,2,\ldots,5$), pa prethodna relacija postaje:

$$\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\big[(2Q_{xx}+Q_{zz})\hat{R}\cdot g_1+\hat{R}^\dagger(Q_{xx}+2Q_{zz})\hat{R}\cdot g_2+$$
$$+2\hat{R}^\dagger Q_{xy}\hat{R}\cdot g_3+2\hat{R}^\dagger Q_{xz}\hat{R}\cdot g_4+2\hat{R}^\dagger Q_{yz}\hat{R}\cdot g_5\big]|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle.$$

U relaciji (14.1) se mora izvršiti integracija proizvoda prethodnog matričnog elementa i funkcije raspodele nehomogenosti jonskog polja $W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)$:

$$T \equiv \int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{1}{6}\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha\cdot$$
$$\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\Big[\hat{R}^\dagger(2Q_{xx}+Q_{zz})\hat{R}\cdot g_1+\hat{R}^\dagger(Q_{xx}+2Q_{zz})\hat{R}\cdot g_2+2\hat{R}^\dagger Q_{xy}\hat{R}\cdot g_3+$$
$$+2\hat{R}^\dagger Q_{xz}\hat{R}\cdot g_4+2\hat{R}^\dagger Q_{yz}\hat{R}\cdot g_5\Big]|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle. \tag{14.10}$$

Talasne funkcije $\psi_{n_1,n_2,m}$ ne zavise od veličina g_α, pa integral po ovim veličinama može da se zapiše unutar matričnog elementa:

$$T = -\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\Big\{\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int \mathrm{d}g_1\mathrm{d}g_2\ldots\mathrm{d}g_5\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)\cdot\Big[\hat{R}^\dagger(2Q_{xx}+Q_{zz})\hat{R}\cdot g_1+\hat{R}^\dagger(Q_{xx}+$$
$$+2Q_{zz})\hat{R}\cdot g_2+2\hat{R}^\dagger Q_{xy}\hat{R}\cdot g_3+2\hat{R}^\dagger Q_{xz}\hat{R}\cdot g_4+2\hat{R}^\dagger Q_{yz}\hat{R}\cdot g_5\Big]\Big\}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle.$$

Sada je potrebno integral zbira razložiti na zbir integrala po g_α, jer će se svaki od njih zasebno razmatrati:

$$T = -\frac{1}{6}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\Big\{\hat{R}^\dagger(2Q_{xx}+Q_{zz})\hat{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_1\cdot g_1\iiiint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_2\mathrm{d}g_3\mathrm{d}g_4\mathrm{d}g_5\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)+\hat{R}^\dagger\cdot$$
$$\cdot(Q_{xx}+2Q_{zz})\hat{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_2\cdot g_2\iiiint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_1\mathrm{d}g_3\mathrm{d}g_4\mathrm{d}g_5\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)+2\hat{R}^\dagger Q_{xy}\hat{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_3\cdot g_3\cdot$$
$$\cdot\iiiint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_1\mathrm{d}g_2\mathrm{d}g_4\mathrm{d}g_5\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)+2\hat{R}^\dagger Q_{xz}\hat{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_4\cdot g_4\iiiint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_1\mathrm{d}g_2\mathrm{d}g_3\mathrm{d}g_5\cdot$$
$$\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)+2\hat{R}^\dagger Q_{yz}\hat{R}\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_5\cdot g_5\iiiint_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{d}g_1\mathrm{d}g_2\mathrm{d}g_3\mathrm{d}g_4\cdot W(\vec{F},g_1,\ldots,g_5)\Big\}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle$$

U prethodnoj relaciji figurišu integrali čije su vrednosti definisane preko prvih momenata $\langle g_\alpha\rangle_{\vec{F}}$ funkcije raspodele nehomogenosti jonskog polja W:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_{\beta=1}^{5}\mathrm{d}g_\beta\cdot g_\alpha\cdot W(g_1,\ldots,g_5) = \langle g_\alpha\rangle_{\vec{F}}\cdot\frac{(2\pi)^3\cdot(2\pi)^5}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot H(\beta).$$

Vrednosti svih prvih momenata $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ funkcije raspodele jačine jonskog polja $W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)$ su izračunati u dodatku G. Uvrštavanjem prethodne relacije u izraz za T, dobijamo sledeće:

$$T = -\frac{1}{6} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \langle \psi_{n_1,n_2,m} | \Big[\hat{R}^\dagger (2Q_{xx} + Q_{zz}) \hat{R} \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} + \hat{R}^\dagger (Q_{xx} + 2Q_{zz}) \hat{R} \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} +$$
$$+ 2\hat{R}^\dagger Q_{xy} \hat{R} \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{xz} \hat{R} \cdot \langle g_4 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{yz} \hat{R} \cdot \langle g_5 \rangle_{\vec{F}} \Big] | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle. \tag{14.11}$$

Vrednosti svih prvih momenta $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ su određene u jednom od prethodnih poglavlja ovog rada, pa ćemo se na ovom mestu zadržati na sledećoj integraciji koja se javlja u (14.1). Naravno, to je intgracija po jačini jonskog električnog polja $\vec{F}$. Pogodno je u ovom integralu izdvojiti ugaoni deo, jer se integracija matričnog elementa operatora $\hat{U}$, odnosno veličine T upravo svodi na integraciju po ugaonom delu:

$$\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2 \int\limits_0^\pi \mathrm{d}\theta_F \cdot \sin\theta_F \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_F.$$

Potrebno je izvršiti prelazak na promenljive θ i ψ, zato što prvi momenti $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ i transformisane vrednosti komponenti tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{ik} zavise od uglova θ i ψ. Prelazak na ove promenljive se odvija u skladu sa relacijama (11.6) i (11.7), pa imamo:

$$\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2 \int\limits_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int\limits_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi = \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2 \int\limits_\Omega \mathrm{d}\Omega, \tag{14.12}$$

gde integracija po Ω predstavlja integraciju po uglovima θ i ψ i to u intervalima $(0,\pi)$ i $(\pi/2, 5\pi/2)$ respektivno. Napomenuto je već da se u relaciji (14.1), javlja integracija veličine T po jačini električnog jonskog polja, odnosno neophodno je pronaći sledeće:

$$\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} \cdot T = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int\limits_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot T \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2 = \int\limits_\Omega \mathrm{d}\Omega \cdot T \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2,$$

Uvrštavanjem veličine T date relacijom (14.11) i uzimajući u obzir da integracija po uglovima može ući u matrični element, prethodni integral postaje:

$$\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} \cdot T = -\frac{1}{6} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \langle \psi_{n_1,n_2,m} | \Bigg\{ \int\limits_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int\limits_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \Big[\hat{R}^\dagger (2Q_{xx} + Q_{zz}) \hat{R} \cdot$$
$$\cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} + \hat{R}^\dagger (Q_{xx} + 2Q_{zz}) \hat{R} \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{xy} \hat{R} \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{xz} \hat{R} \cdot \langle g_4 \rangle_{\vec{F}} +$$
$$+ 2\hat{R}^\dagger Q_{yz} \hat{R} \cdot \langle g_5 \rangle_{\vec{F}} \Big] \Bigg\} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2.$$

Pošto će na ovom mestu pažnja biti usmerena na integraciju po uglovima, zgodno je uvesti oznaku P za izraz koji se nalazi unutar matričnog elementa:

$$\int\limits_{|\vec{F}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} \cdot T = -\frac{1}{6} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \langle \psi_{n_1,n_2,m} | P | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle \int\limits_0^\infty \mathrm{d}F \cdot F^2,$$
$$\int\limits_\Omega \mathrm{d}\Omega \cdot T = -\frac{1}{6} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \langle \psi_{n_1,n_2,m} | P | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle. \tag{14.13}$$

Dakle, neophodno je izračunati vrednost veičine P koja je eksplicitno data izrazom:

$$P = \int\limits_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int\limits_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \Big[\hat{R}^\dagger (2Q_{xx} + Q_{zz}) \hat{R} \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} + \hat{R}^\dagger (Q_{xx} + 2Q_{zz}) \hat{R} \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{xy} \hat{R} \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} +$$
$$+ 2\hat{R}^\dagger Q_{xz} \hat{R} \cdot \langle g_4 \rangle_{\vec{F}} + 2\hat{R}^\dagger Q_{yz} \hat{R} \cdot \langle g_5 \rangle_{\vec{F}} \Big]. \tag{14.14}$$

Pošto je svaki od integrala u poslednjoj relaciji različit, njihovo izračunavanje će biti sprovedeno zasebno, a pri tome će se smatrati da je veličina P jednaka:

$$P = \sum_{i=1}^{5} P_i.$$

Pre izračunavanja ovih integrala odredićemo zavisnost transformisanih komponenti tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{ik} od koordinata x, y i z. Korišćenjem relacija (12.7), (12.8) i (12.9) lako se nalazi da je izraz koji se javlja u pravom integralu, odnosno u veličini P_1, jednak:

$$\hat{R}^\dagger(2Q_{xx} + Q_{zz})\hat{R} = \hat{R}^\dagger\left[-2e(3x^2 - r^2) - e(3z^2 - r^2)\right]\hat{R} = -e\hat{R}^\dagger(6x^2 - 2r^2 + 3z^2 - r^2)\hat{R},$$
$$\hat{R}^\dagger(2Q_{xx} + Q_{zz})\hat{R} = -e\hat{R}^\dagger(3x^2 - 3y^2)\hat{R} = -3e\hat{R}^\dagger(x^2 - y^2)\hat{R}.$$

Praktično je transformacija komponenti Q_{ik} svedena na transformaciju koordinata x, y i z koja je poznata. Analogno se određuje i sledeći izraz koji se javlja u veličini P_2:

$$\hat{R}^\dagger(Q_{xx} + 2Q_{zz})\hat{R} = \hat{R}^\dagger\left[-e(3x^2 - r^2) - 2e(3z^2 - r^2)\right]\hat{R} = -e\hat{R}^\dagger(3x^2 - r^2 + 6z^2 - 2r^2)\hat{R},$$
$$\hat{R}^\dagger(Q_{xx} + 2Q_{zz})\hat{R} = -e\hat{R}^\dagger(3z^2 - 3y^2)\hat{R} = -3e\hat{R}^\dagger(z^2 - y^2)\hat{R}.$$

Nalaženje preostalih članova je mnogo jednostavnije i izvodi se na sledeći način:

$$\hat{R}^\dagger Q_{xy}\hat{R} = \hat{R}^\dagger(-3exy)\hat{R} = -3e\hat{R}^\dagger(xy)\hat{R},$$
$$\hat{R}^\dagger Q_{xz}\hat{R} = \hat{R}^\dagger(-3exz)\hat{R} = -3e\hat{R}^\dagger(xz)\hat{R},$$
$$\hat{R}^\dagger Q_{yz}\hat{R} = \hat{R}^\dagger(-3eyz)\hat{R} = -3e\hat{R}^\dagger(yz)\hat{R}.$$

Sada se pristupa izračunavanju svih integrala koji se javljaju u izrazu za veličinu P datu relacijom (14.14). Prvo se određuje vrednost integrala P_1 koji ima oblik:

$$P_1 = \int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} d\psi \cdot \hat{R}^\dagger(2Q_{xx} + Q_{zz})\hat{R} \cdot \langle g_1\rangle_{\vec{F}} = -3e\int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} d\psi \cdot \hat{R}^\dagger(x^2 - y^2)\hat{R} \cdot \langle g_1\rangle_{\vec{F}}.$$

Unitarnost operator $\hat{R}$ omogućuje sledeću transformaciju:

$$\hat{R}^\dagger(x^2 - y^2)\hat{R} = \hat{R}^\dagger x^2\hat{R} - \hat{R}^\dagger y^2\hat{R} = \hat{R}^\dagger x\hat{R}\hat{R}^\dagger x\hat{R}^\dagger - \hat{R}^\dagger y\hat{R}\hat{R}^\dagger y\hat{R}^\dagger = (\hat{R}^\dagger x\hat{R})^2 - (\hat{R}^\dagger y\hat{R})^2,$$

pa integral P_1 dobija oblik

$$P_1 = -3e\int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} d\psi \cdot \left[(\hat{R}^\dagger x\hat{R})^2 - (\hat{R}^\dagger y\hat{R})^2\hat{R}\right] \cdot \langle g_1\rangle_{\vec{F}}.$$

Pozivajući se na relacije (11.19) i (11.20) koje daju izraze za $\hat{R}^\dagger x\hat{R}$ i $\hat{R}^\dagger y\hat{R}$ respektivno i (G.5) koja daje vrednost prvog momenta $\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$, izraz za integral P_1 postaje:

$$P_1 = 3e\int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} d\psi \cdot \Big[(-\sin\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \cos\psi \cdot y' + \sin\psi \cdot \sin\theta \cdot z')^2 - (\cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' -$$
$$- \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z')^2\Big] \cdot \frac{\pi N e}{3} \cdot B(\beta) \cdot \left[3\sin^2\theta \cdot \cos 2\psi + 3\cos^2\theta - 1\right],$$

odnosno,

$$P_1 = \pi N e^2 \cdot B(\beta) \int_0^\pi d\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} d\psi \cdot \Big[(-\sin\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \cos\psi \cdot y' + \sin\psi \cdot \sin\theta \cdot z')^2 - (\cos\psi \cdot$$
$$\cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z')^2\Big] \cdot \left[3\sin^2\theta \cdot \cos 2\psi + 3\cos^2\theta - 1\right].$$

Posle izračunavanja velikog broja elementarnih integrala sa trigonometrijskim funkcijama, konačna vrednost integrala P_1 je:

$$P_1 = \pi N e^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{4\pi}{5}(5y'^2 - 4z'^2 - x'^2),$$

gde je $B(\beta)$ Fon Neumanova funkcija definisana u dodatku G relacijom (G.3) Sada prelazimo na rešavanje integrala P_2 koji ima sledeći oblik:

$$P_2 = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \hat{R}^\dagger (Q_{xx} + 2Q_{zz})\hat{R} \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = -3e \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \hat{R}^\dagger (z^2 - y^2)\hat{R} \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}}.$$

Ako se uzme u obzir jednakost:

$$\hat{R}^\dagger (z^2 - y^2)\hat{R} = (\hat{R}^\dagger z \hat{R})^2 - (\hat{R}^\dagger y \hat{R})^2,$$

izraz za P_2 postaje

$$P_2 = -3e \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \left[(\hat{R}^\dagger z \hat{R})^2 - (\hat{R}^\dagger y \hat{R})^2 \hat{R}\right] \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}}.$$

Uvrštavanjem relacija (11.20) i (11.21) koje definišu transformacije koordinata i izraza za prvi moment $\langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$ (G.6), dobijamo:

$$P_2 = -3e \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \Big[(\sin\theta \cdot x' + 0 \cdot y' + \cos\theta \cdot z')^2 - (\cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot$$
$$\cdot \sin\theta \cdot z')^2\Big] \cdot \frac{2\pi N e}{3} \cdot B(\beta) \cdot (3\cos^2\theta - 1),$$

odnosno,

$$P_2 = -2\pi N e^2 \cdot B(\beta) \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \Big[(\sin\theta \cdot x' + \cos\theta \cdot z')^2 - (\cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' -$$
$$- \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z')^2\Big] \cdot (3\cos^2\theta - 1).$$

Posle sređivanja i izračunavnja mnoštva elementarnih integrala sa trigonometrijskim funkcijama, vrednost integrala P_2 postaje:

$$P_2 = -2\pi N e^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{8\pi}{5}(z'^2 - x'^2).$$

Sledi rešavanje integrala P_3 koji ima sledeći oblik:

$$P_3 = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot 2\hat{R}^\dagger Q_{xy} \hat{R} \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} = -6e \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \hat{R}^\dagger (xy)\hat{R} \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}}.$$

I u ovom slučaju se može iskoristiti jednakost:

$$\hat{R}^\dagger (xy)\hat{R} = \hat{R}^\dagger x \hat{R} \hat{R}^\dagger y \hat{R} = (\hat{R}^\dagger x \hat{R})(\hat{R}^\dagger y \hat{R}),$$

pa izraz za P_3 dobija sledeću formu

$$P_3 = -6e \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot (\hat{R}^\dagger x \hat{R})(\hat{R}^\dagger y \hat{R}) \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}}.$$

Uvrštavanjem relacija koje definišu transformacije koordinata x i y, kao i izraza za prvi moment $\langle g_3\rangle_{\vec{F}}$ (G.7), dobijamo:

$$P_3 = 6e\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\Big[\big(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\cdot\big(\cos\psi\cdot\cos\theta\cdot x' -$$

$$-\sin\psi\cdot y' - \cos\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\Big]\cdot\pi Ne\cdot B(\beta)\cdot\sin^2\theta\cdot\sin 2\psi,$$

odnosno,

$$P_3 = 6\pi Ne^2\cdot B(\beta)\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\big(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\cdot\big(\cos\psi\cdot$$

$$\cdot\cos\theta\cdot x' - \sin\psi\cdot y' - \cos\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\cdot\sin^2\theta\cdot\sin 2\psi.$$

Nakon elementarne integracije trigonometrijskih funkcija, konačno dobijamo vrednost integrala P_3, koja iznosi:

$$P_3 = 6\pi Ne^2\cdot B(\beta)\cdot\frac{2\pi}{15}(5y'^2 - 4z'^2 - x'^2).$$

Sada se rešava integral P_4 koji ima sledeći oblik:

$$P_4 = \int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot 2\hat{R}^{\dagger}Q_{xz}\hat{R}\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = -6e\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\hat{R}^{\dagger}(xz)\hat{R}\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}}.$$

Uzimanjem u obzir jednakosti:

$$\hat{R}^{\dagger}(xz)\hat{R} = \big(\hat{R}^{\dagger}x\hat{R}\big)\big(\hat{R}^{\dagger}z\hat{R}\big),$$

izraz za P_4 postaje

$$P_4 = -6e\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\big(\hat{R}^{\dagger}x\hat{R}\big)\big(\hat{R}^{\dagger}z\hat{R}\big)\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}}.$$

Uvrštavanjem relacija koje definišu transformacije koordinata x i z, kao i izraza za prvi moment $\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$ (G.8), dobijamo sledeće:

$$P_4 = -6e\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\Big[\big(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\cdot\big(\sin\theta\cdot x' + 0\cdot y' +$$

$$+\cos\theta\cdot z'\big)\Big]\cdot 2\pi Ne\cdot B(\beta)\cdot\cos\theta\cdot\sin\theta\cdot\sin\psi,$$

odnosno,

$$P_4 = -12\pi Ne^2\cdot B(\beta)\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\big(-\sin\psi\cdot\cos\theta\cdot x' - \cos\psi\cdot y' + \sin\psi\cdot\sin\theta\cdot z'\big)\cdot\big(\sin\theta\cdot$$

$$\cdot x' + \cos\theta\cdot z'\big)\cdot\cos\theta\cdot\sin\theta\cdot\sin\psi.$$

Posle elementarne inegracije trigonometrijskih funkcija, konačno smo dobili vrednost integrala P_4, koja je jednaka:

$$P_4 = -6\pi Ne^2\cdot B(\beta)\cdot\frac{8\pi}{15}(z'^2 - x'^2).$$

Preostalo je još da se pronađe vrednost integrala P_5, koji ima oblik:

$$P_5 = \int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot 2\hat{R}^{\dagger}Q_{yz}\hat{R}\cdot\langle g_5\rangle_{\vec{F}} = -6e\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\cdot\hat{R}^{\dagger}(yz)\hat{R}\cdot\langle g_5\rangle_{\vec{F}}.$$

S obzirom da važi:

$$\hat{R}^{\dagger}(yz)\hat{R} = (\hat{R}^{\dagger}y\hat{R})(\hat{R}^{\dagger}z\hat{R}),$$

izraz za P_5 postaje

$$P_5 = -6e\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot (\hat{R}^{\dagger}y\hat{R})(\hat{R}^{\dagger}z\hat{R}) \cdot \langle g_5\rangle_{\vec{F}}.$$

Uvrštavanjem relacija koje definišu transformacije koordinata y i z, kao i izraza za prvi moment $\langle g_5\rangle_{\vec{F}}$ (G.9), dobijamo sledeće:

$$P_5 = 6e\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot \Big[(\cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z') \cdot (\sin\theta \cdot x' + 0 \cdot y' + \\ + \cos\theta \cdot z')\Big] \cdot 2\pi Ne \cdot B(\beta) \cdot \cos\theta \cdot \sin\theta \cdot \cos\psi,$$

odnosno,

$$P_5 = 12\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot (\cos\psi \cdot \cos\theta \cdot x' - \sin\psi \cdot y' - \cos\psi \cdot \sin\theta \cdot z') \cdot (\sin\theta \cdot x' + \\ + \cos\theta \cdot z') \cdot \cos\theta \cdot \sin\theta \cdot \cos\psi.$$

Kao i u prethodnim slučajevima, neophodno je izvršiti integraciju velikog broja trigonometrijskih funkcija, pa se konačno dobija i vrednost poslednjeg integrala P_5:

$$P_5 = 6\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{8\pi}{15}(x'^2 - z'^2).$$

Dakle, poznavanjem vrednosti svih integrala koji figurišu u izrazu za veličinu P (14.14), moguće je dobiti sledeće:

$$P = \sum_{i=1}^{5} P_i = \pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{4\pi}{5}(5y'^2 - 4z'^2 - x'^2) - 2\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{8\pi}{5}(z'^2 - x'^2) + 6\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \\ \cdot \frac{2\pi}{15}(5y'^2 - 4z'^2 - x'^2) - 6\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{8\pi}{15}(z'^2 - x'^2) + 6\pi Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{8\pi}{15}(x'^2 - z'^2).$$

Poslednja relacija se može pojednostaviti izdvajanjem zajedničkih faktora iz svih članova, kao i grupisanjem odgovarajućih članova:

$$P = \pi^2 Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \left[\frac{24}{15} \cdot (5y'^2 - 4z'^2 - x'^2) - 2 \cdot \frac{8}{5}(z'^2 - x'^2) + 12 \cdot \frac{8}{15}(x'^2 - z'^2)\right],$$

$$P = \pi^2 Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \left[\frac{24}{15} \cdot (5y'^2 - 4z'^2 - x'^2) + 6 \cdot \frac{24}{15}(x'^2 - z'^2)\right],$$

$$P = \pi^2 Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \frac{24}{15} \cdot (-10z'^2 + 5y'^2 + 5x'^2).$$

Izraz u zagradi se neznatno transformiše da bi se dobio pogodan oblik koji će se kasnije povezati sa odgovarajućom komponentom tenzora električnog kvadrupolnog momenta:

$$P = -16\pi^2 Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \left[z'^2 - \frac{1}{2} \cdot (x'^2 + y'^2)\right].$$

Kada se dobijeni izraz za integral P uvrsti u relaciju (14.13), dobijamo:

$$\int_{\Omega} \mathrm{d}\Omega \cdot T = \frac{1}{6} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta) \cdot \langle\psi_{n_1,n_2,m}|16\pi^2 Ne^2 \cdot B(\beta) \cdot \left[z'^2 - \frac{1}{2} \cdot (x'^2 + y'^2)\right]|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle,$$

$$\int_{\Omega} \mathrm{d}\Omega \cdot T = \frac{2}{3} \cdot Ne^2 \cdot \frac{(2\pi)^{10} \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \langle\psi_{n_1,n_2,m}|z'^2 - \frac{1}{2} \cdot (x'^2 + y'^2)|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle. \tag{14.15}$$

Potrebno je iz člana koji se javlja u matričnom elementu eliminisati koordinate x' i y', što se radi na sledeći način:

$$z'^2 - \frac{1}{2}\cdot(x'^2 + y'^2) = \frac{1}{2}\cdot(2z'^2 - x'^2 - y'^2) = \frac{1}{2}\cdot(3z'^2 - r'^2).$$

Ovako dobijeni izraz se lako može uporediti i povezati sa komponentom $Q_{z'z'}$ tenzora električnog kvadrupolnog momenta, a u skladu sa relacijom (12.9):

$$z'^2 - \frac{1}{2}\cdot(x'^2 + y'^2) = -\frac{1}{2e}\cdot\left[-e(3z'^2 - r'^2)\right] = -\frac{1}{2e}\cdot Q_{z'z'}.$$

Ovim je pokazano da je dovoljno pronaći vrednost matričnog elementa komponente $Q_{z'z'}$ i na taj način rešiti integral po promenljivoj Ω dat relacijom (14.15):

$$\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\cdot T = \frac{2}{3}\cdot Ne^2\cdot\frac{(2\pi)^{10}\cdot H(\beta)\cdot B(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}| - \frac{1}{2e}\cdot Q_{z'z'}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle,$$

$$\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\cdot T = -\frac{1}{3}\cdot Ne\cdot\frac{(2\pi)^{10}\cdot H(\beta)\cdot B(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|Q_{z'z'}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle. \tag{14.16}$$

Pogodnost prelaska na veličinu $Q_{z'z'}$, ogleda se u tome što je ona proporcionalna operatoru $V^{(3)}$ koji je dat izrazom (2.11) i iznosi:

$$V^{(3)} = -\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^3}\cdot\frac{1}{2}\cdot(3z'^2 - r'^2).$$

Veza između $Q_{z'z'}$ i $V^{(3)}$ se određuje na jednostavan način:

$$V^{(3)} = \frac{Z_\mathrm{j}\cdot e}{4\pi\varepsilon_0\cdot n^6a_0^3}\cdot\frac{1}{2}\cdot\left[-e(3z'^2 - r'^2)\right] = \frac{1}{2}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e}{4\pi\varepsilon_0\cdot n^6a_0^3}\cdot Q_{z'z'},$$

$$Q_{z'z'} = 2\cdot\frac{4\pi\varepsilon_0\cdot n^6a_0^3}{Z_\mathrm{j}\cdot e}\cdot V^{(3)}.$$

Na ovaj način smo veličinu $Q_{z'z'}$ zamenili potencijalom $V^{(3)}$, a vrednost matričnog elementa ovog operatora $\langle\psi_{n_1,n_2,m}|V^{(3)}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle$ je poznata i u potpunosti određena relacijom (4.16):

$$\langle\psi_{n_1,n_2,m}|V^{(3)}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2n^4a_0}\cdot[6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1].$$

Bitno je navesti važnu osobinu matričnog elementa operatora $V^{(3)}$, a to je da su ovi matrični elementi dijagonalni po kvantnom broju m. Ova osobina je dokazana u poglavlju u kojem se određuje vrednost matričnog elementa operatora $V^{(3)}$. Uvrštavanjem izraza za operator $V^{(3)}$ u kojem figuriše veličina $Q_{z'z'}$, za matrični element dobijamo:

$$\langle\psi_{n_1,n_2,m}|\frac{1}{2}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e}{4\pi\varepsilon_0\cdot n^6a_0^3}\cdot Q_{z'z'}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2n^4a_0}\cdot[6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1],$$

$$\frac{1}{2}\cdot\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e}{4\pi\varepsilon_0\cdot n^6a_0^3}\cdot\langle\psi_{n_1,n_2,m}|Q_{z'z'}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -\frac{Z_\mathrm{j}\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{2n^4a_0}\cdot[6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1],$$

$$\langle\psi_{n_1,n_2,m}|Q_{z'z'}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle = -e\cdot a_0^2\cdot n^2\cdot[6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1].$$

Pošto je dobijena vrednost za matrični element komponente tenzora električnog kvadrupolnog momenta $Q_{z'z'}$, ona se može uvrstiti u relaciju (14.16), pa sledi:

$$\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\cdot T = \frac{1}{3}\cdot Ne\cdot\frac{(2\pi)^{10}\cdot H(\beta)\cdot B(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot e\cdot a_0^2\cdot n^2\cdot[6(n_1 - n_2)^2 - n^2 + 1],$$

$$\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\cdot T = -2\pi Ne^2a_0^2\cdot\frac{(2\pi)^9\cdot H(\beta)\cdot B(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\frac{1}{3}\cdot[n^4 - n^2 - 6n^2(n_1 - n_2)^2],$$

$$\int_\Omega \mathrm{d}\Omega\cdot T = \hbar\cdot\frac{(2\pi)^9\cdot H(\beta)\cdot B(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\left(-\frac{2F_0}{e}\right)\cdot\frac{2\pi Ne}{3F_0}\cdot\frac{3\cdot e^2a_0^2}{2\hbar}\cdot\frac{1}{3}\cdot[n^4 - n^2 - 6n^2(n_1 - n_2)^2].$$

Prethodna jednakost se može napisati i u nešto drugačijoj formi, ako se uzme u obzir izraz za veličinu T (14.10):

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \langle \psi_{n_1,n_2,m} | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = \hbar \cdot \frac{(2\pi)^9}{4\pi} \cdot$$
$$\cdot \frac{H(\beta) \cdot B(\beta)}{\beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2F_0}{e}\right) \cdot \frac{2\pi N e}{3F_0} \cdot \frac{3 \cdot e^2 a_0^2}{2\hbar} \cdot \frac{1}{3} \cdot [n^4 - n^2 - 6n^2(n_1 - n_2)^2].$$

Značaj poslednje relacije ogleda se i u tome što se na osnovu nje direktno može napisati vrednost sledećeg integrala:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \Delta\overline{U}_k,$$

gde je veličina $\Delta\overline{U}_k$ definisana relacijom (14.2). Dakle, vrednost ovog integrala je:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \Big[\langle \psi_{n_1,n_2,m} | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle -$$
$$- \langle \psi_{n_1',n_2',m'} | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1',n_2',m'} \rangle\Big] = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2F_0}{e}\right) \cdot \frac{2\pi N e}{3F_0} \cdot$$
$$\cdot \frac{3 \cdot e^2 a_0^2}{2\hbar} \cdot \frac{1}{3} \cdot \left[n^4 - n^2 - 6n^2(n_1 - n_2)^2 - n'^4 + n'^2 + 6n'^2({n_1'}^2 - {n_2'}^2)\right]. \tag{14.17}$$

Poslednji činilac u ovoj relaciji predstavlja veličinu Δ_k^{q} koja karakteriše kvadrupolnu interakciju, a definisana je relacijom (7.3):

$$\Delta_k^{\mathrm{q}} = \frac{1}{3} \cdot \left[n^4 - n^2 - 6(n_1 - n_2)^2 \cdot n^2 - n'^4 + n'^2 + 6(n_1' - n_2')^2 \cdot n'^2\right].$$

Pored ove mogu se definisati i nove veličine Q_k i H_k koje su proporcionalne Δ_k^{q}:

$$Q_k = \frac{3 \cdot e^2 a_0^2}{2\hbar} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}},$$
$$H_k = \frac{2\pi N e}{3F_0} \cdot Q_k = \frac{\pi \cdot N e^3 a_0^2}{\hbar \cdot F_0} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}}.$$

Uvrštavanjem veličine H_k u vrednost integrala (14.17), dobija se jednostavnija forma:

$$\int_{\Omega} \mathrm{d}\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \Delta\overline{U}_k = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2F_0}{e}\right) \cdot H_k. \tag{14.18}$$

Već je objašnjeno da članovi $\Delta\overline{C}_k$ ne menjaju svoj oblik prilikom prelaska iz jednog u drugi koordinatni sistem, pa je njihova vrednost data relacijom (14.4):

$$\Delta\overline{C}_k = \frac{1}{\hbar}\Big[\langle \psi_{n_1,n_2,m} | \vec{d} \cdot \vec{F} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle - \langle \psi_{n_1',n_2',m'} | \vec{d} \cdot \vec{F} | \psi_{n_1',n_2',m'} \rangle\Big].$$

Važno je uočiti da ovi članovi ne zavise od komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja, kao ni od uglova θ i ψ, pa se ponašaju kao multiplikativne konstante u integralu (14.1). Naravno, preostaje da se izračuna vrednost ovog člana. Da bi se to uradilo operator $\vec{d} \cdot \vec{F}$ se mora prikazati u nešto drugačijoj formi. Naime, ovaj operator karakteriše dipolnu interakciju u primovanom sistemu u kojem se z'-osa poklapa sa pravcem jonskog električnog polja:

$$\vec{d} \cdot \vec{F} = -e\vec{r}' \cdot \vec{F} = -e(x'\vec{e}_{x'} + y'\vec{e}_{y'} + z'\vec{e}_{z'}) \cdot F\vec{e}_{z'} = -eFz'.$$

Ovo praktično znači da se u članu $\Delta\overline{C}_k$ moraju odrediti matrični elementi z' koordinate:

$$\Delta\overline{C}_k = -\frac{eF}{\hbar} \cdot \left[\langle \psi_{n_1,n_2,m} | z' | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle - \langle \psi_{n_1',n_2',m'} | z' | \psi_{n_1',n_2',m'} \rangle\right].$$

Pogodno je to što su koordinata z' i operator $V^{(2)}$ međusobno povezani relacijom (2.10):

$$V^{(2)} = -\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot z',$$

a matrični element ovog operatora je već izračunat (3.10)

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|V^{(2)}|n\{n_1, n_2, m\}\rangle = -\frac{3}{2} \cdot \frac{Z_j \cdot e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot n \cdot (n_1 - n_2).$$

Uvrštavanjem izraza $V^{(2)}$ u izraz za matrični element, lako se dobija vrednost matričnog elementa z' koordinate:

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}| - \frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot z'|n\{n_1, n_2, m\}\rangle = -\frac{3}{2} \cdot \frac{Z_j \cdot e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot n \cdot (n_1 - n_2),$$

$$-\frac{Z_j \cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot \langle n\{n_1, n_2, m\}|z'|n\{n_1, n_2, m\}\rangle = -\frac{3}{2} \cdot \frac{Z_j \cdot e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0(n^2a_0)^2} \cdot n \cdot (n_1 - n_2),$$

$$\langle n\{n_1, n_2, m\}|z'|n\{n_1, n_2, m\}\rangle = \frac{3}{2} \cdot a_0 \cdot n \cdot (n_1 - n_2).$$

Uvrštavajući ovaj rezultat u izraz za $\Delta\overline{C}_k$, dobijamo:

$$\Delta\overline{C}_k = -\frac{eF}{\hbar} \cdot \left[\frac{3}{2} \cdot a_0 \cdot n \cdot (n_1 - n_2) - \frac{3}{2} \cdot a_0 \cdot n' \cdot (n_1' - n_2')\right],$$

$$\Delta\overline{C}_k = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0F}{\hbar} \cdot \left[n' \cdot (n_1' - n_2') - n \cdot (n_1 - n_2)\right].$$

Pošto izraz u zagradi predstavlja veličinu Δ_k^{d} koja karakteriše dipolnu interakciju, a definisana je relacijom (7.2):

$$\Delta_k^{\mathrm{d}} = n'(n_1' - n_2') - n(n_1 - n_2),$$

izraz za $\Delta\overline{C}_k$ možemo jednostavnije zapisati kao

$$\Delta\overline{C}_k = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0F}{\hbar} \cdot \Delta_k^{\mathrm{d}}.$$

Zaključujemo da $\Delta\overline{C}_k$ zavisi samo od intenziteta električnog jonskog polja F, pa će samo ova zavisnost biti od značaja pri integraciji u relaciji (14.1). Pogodno je umesto jačine jonskog polja F uvesti parametar β:

$$\Delta\overline{C}_k = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0}{\hbar} \cdot F_0\frac{F}{F_0} \cdot \Delta_k^{\mathrm{d}} = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0}{\hbar} \cdot F_0\beta \cdot \Delta_k^{\mathrm{d}} = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0}{\hbar} \cdot F_0 \cdot \Delta_k^{\mathrm{d}} \cdot \beta,$$

i na taj način izdvojiti veličinu C_k koja zavisi samo od intenziteta normalnog jonskog polja

$$\Delta\overline{C}_k = C_k \cdot \beta, \qquad \text{gde je} \qquad C_k = \frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0}{\hbar} \cdot F_0 \cdot \Delta_k^{\mathrm{d}}. \tag{14.19}$$

Ovim postupkom smo u potpunosti odredili vrednost člana $\Delta\overline{C}_k$. Sada se pristupa integraciji članova koji sadrže $\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu$, odnosno $\overline{a}_\mu\overline{\mathcal{A}}_\mu$ po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja:

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu.$$

Pošto je oblik $\overline{a}_\nu\overline{\mathcal{A}}_\nu$ određen i dat relacijom (14.9), prethodni integral se svodi na:

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot a_\nu \cdot \frac{\langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle}{E_{n_1,n_2,m}^{(0)} - E_\nu^{(0)}}.$$

Koeficijent a_ν i energije u imeniocu ne zavise od promenljivih po kojima se vrši integracija, pa mogu da izađu ispred integrala:

$$\frac{a_\nu}{E_{n_1,n_2,m}^{(0)} - E_\nu^{(0)}} \int_0^\pi \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \langle\psi_\nu|\hat{R}^\dagger\hat{U}(x,y,z)\hat{R}|\psi_{n_1,n_2,m}\rangle.$$

Za izračunavanje integrala iz poslednje relacije, neophodno je koristiti jednakost (14.16), prema kojoj se dobija:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \langle \psi_\nu | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = -\frac{1}{3} \cdot Ne \cdot$$
$$\cdot \frac{(2\pi)^{10} \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle.$$

Dakle, rešavanje integrala se svodi na određivanje vrednosti matričnog elementa komponente tenzora električnog kvadrupolnog momenta $Q_{z'z'}$, koji se pak svodi na određivanje matričnog elementa operatora $V^{(3)}$:

$$\langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = \langle \psi_\nu | 2 \cdot \frac{4\pi\varepsilon_0 \cdot n^6 a_0^3}{Z_\mathrm{j} \cdot e} \cdot V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = 2 \cdot \frac{4\pi\varepsilon_0 \cdot n^6 a_0^3}{Z_\mathrm{j} \cdot e} \cdot \langle \psi_\nu | V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle.$$

Da bi se iskoristio rezultat dobijen u poglavlju u kojem je određena vrednost matričnog elementa operatora $V^{(3)}$, odnosno $\langle n\{n_1, n_2, m\} | V^{(3)} | n'\{n_1', n_2', m'\} \rangle$, moramo u poslednji izraz uvrstiti treći stepen malog parametra λ:

$$\langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = 2 \cdot \frac{4\pi\varepsilon_0 \cdot n^6 a_0^3}{Z_\mathrm{j} \cdot e} \cdot \frac{R^3}{n^6 a_0^3} \cdot \langle \psi_\nu | \lambda^3 V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle,$$
$$\langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = 2R \cdot \frac{4\pi\varepsilon_0 \cdot R^2}{Z_\mathrm{j} \cdot e} \cdot \langle \psi_\nu | \lambda^3 V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle.$$

Dobijeni izraz se može pojednostaviti uvođenjem izraza za jačinu električnog jonskog polja F:

$$\langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = \frac{2R}{F} \cdot \langle \psi_\nu | \lambda^3 V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle.$$

Relacija (9.2) daje vezu koeficijenata $\mathcal{A}_\nu$ i matričnog elementa operatora $V^{(3)}$:

$$\mathcal{A}_\nu = \frac{\langle \psi_\nu | \lambda^3 V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle}{E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{II})}_\nu},$$

pa matrični element operatora $V^{(3)}$ postaje

$$\langle \psi_\nu | \lambda^3 V^{(3)} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = \mathcal{A}_\nu \cdot \left(E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{II})}_\nu \right).$$

Potrebno je naglasiti da su vrednosti koeficijenata $\mathcal{A}_\nu$ date izrazom (9.3), a $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ predstavlja energiju atoma vodonika u prvoj aproksimaciji i određena je relacijom (3.12). Vrednost energije u prvoj aproksimaciji $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ odgovara energiji neperturbovanog stanja atoma vodonika $E^{(0)}_{n_1,n_2,m}$, jer se i jedna i druga energija odnose na dipolnu interakciju. Dakle, važi sledeće:

$$E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{II})}_\nu = E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu,$$

a matrični element komponente tenzora električnog kvadrupolnog momenta $Q_{z'z'}$ dobija oblik

$$\langle \psi_\nu | Q_{z'z'} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle = \frac{2R}{F} \cdot \mathcal{A}_\nu \cdot \left(E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m} - E^{(\mathrm{II})}_\nu \right) = \frac{2R}{F} \cdot \mathcal{A}_\nu \cdot \left(E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu \right).$$

Ako se sada vratimo na integral koji je trebalo rešiti, dobijamo:

$$\frac{a_\nu}{E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu} \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \langle \psi_\nu | \hat{R}^\dagger \hat{U}(x,y,z) \hat{R} | \psi_{n_1,n_2,m} \rangle =$$
$$= -\frac{a_\nu}{E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu} \cdot \frac{1}{3} \cdot Ne \cdot \frac{(2\pi)^{10} \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \frac{2R}{F} \cdot \mathcal{A}_\nu \cdot \left(E^{(0)}_{n_1,n_2,m} - E^{(0)}_\nu \right).$$

Izraz se može zapisati i u nešto pogodnijoj formi i to na sledeći način:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{4\pi Ne \cdot B(\beta)}{3} \right) \cdot$$
$$\cdot \frac{R}{F} \cdot a_\nu \mathcal{A}_\nu. \tag{14.20}$$

Indeks ν prebrojava samo dva različita početna stanja $\nu_1 = \{n_1 - 1, n_2 + 1, m\}$ i $\nu_2 = \{n_1 + 1, n_2 - 1, m\}$, dok indeks μ prebrojava dva različita krajnja stanja $\mu_1 = \{n_1' - 1, n_2' + 1, m'\}$ i $\mu_2 = \{n_1' + 1, n_2' - 1, m'\}$, što je izraženo sumama po ovim indeksima u podintegralnoj funkciji integrala (14.1). Integracija ovih suma se nalazi vrlo jednostavno na osnovu relacije (14.20):

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \Big[\sum_{\nu}{}' \overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_{\mu}{}' \overline{a}_\mu \overline{\mathcal{A}}_\mu \Big] = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot$$
$$\cdot \Big(-\frac{4\pi N e \cdot B(\beta)}{3} \Big) \cdot \frac{R}{F} \cdot \Big[\sum_{\nu}{}' a_\nu \mathcal{A}_\nu + \sum_{\mu}{}' a_\mu \mathcal{A}_\mu \Big].$$

Već je napomenuto da svaka suma sadrži samo dva člana, odnosno da važi:

$$\sum_{\nu}{}' a_\nu \mathcal{A}_\nu + \sum_{\mu}{}' a_\mu \mathcal{A}_\mu = a_{\nu 1} \mathcal{A}_{\nu 1} + a_{\nu 2} \mathcal{A}_{\nu 2} + a_{\mu 1} \mathcal{A}_{\mu 1} + a_{\mu 2} \mathcal{A}_{\mu 2},$$

Prema relaciji (9.9) ova se suma može povezati sa veličinom ε_k

$$\sum_{\nu}{}' a_\nu \mathcal{A}_\nu + \sum_{\mu}{}' a_\mu \mathcal{A}_\mu = \frac{a_0}{R} \cdot \varepsilon_k,$$

pa traženi integral postaje

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \Big[\sum_{\nu}{}' \overline{a}_\nu \overline{\mathcal{A}}_\nu + \sum_{\mu}{}' \overline{a}_\mu \overline{\mathcal{A}}_\mu \Big] = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot$$
$$\cdot \Big(-\frac{4\pi N e \cdot B(\beta)}{3} \Big) \cdot \frac{R}{F} \cdot \frac{a_0}{R} \cdot \varepsilon_k = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \Big(-\frac{4\pi N e a_0}{3 F_0} \Big) \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \varepsilon_k. \tag{14.21}$$

Sada će se ispitati ponašanja veličine $\Delta\overline{\gamma}_k / \gamma_k^{(0)}$ prilikom integracije po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja u izrazu (14.1). Ovaj odnos je proporcionalan koeficijentu $\overline{\mathcal{A}}_\nu$, pa se i integrali na sličan način. Pošto se integracija veličine $\overline{\mathcal{A}}_\nu$ odvija prema relaciji (14.20) na sledeći način:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \overline{\mathcal{A}}_\nu = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \Big(-\frac{4\pi N e \cdot B(\beta)}{3} \Big) \frac{R}{F} \cdot \mathcal{A}_\nu,$$

to se i odnos $\Delta\overline{\gamma}_k / \gamma_k^{(0)}$ integrali potpuno analogno

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \Big(-\frac{4\pi N e B(\beta)}{3} \Big) \frac{R}{F} \cdot \frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}}.$$

Naravno, ostaje problem nalaženja izraza $\Delta\overline{\gamma}_k / \gamma_k^{(0)}$, koji će ovde biti naveden u nešto skraćenom obliku. Naime, biće korišćene relacije iz rada [18], a da se prethodno ne izvedu. Relacija od koje se polazi prilikom određivanja odnosa $\Delta\overline{\gamma}_k / \gamma_k^{(0)}$ je:

$$\langle\alpha|\langle\beta|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha'\rangle|\beta'\rangle = \langle\alpha|\hat{\gamma}_n^{(0)}|\alpha'\rangle \cdot \delta_{\beta,\beta'} + \langle\beta'|\hat{\gamma}_{n'}^{(0)}|\beta\rangle \cdot \delta_{\alpha,\alpha'} - \frac{6\pi\hbar^2 N_e}{m^2} \cdot \Big(\frac{2m}{\pi k T_e} \Big)^{\frac{1}{2}} \Big[\ln \frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}(\langle v \rangle)} + 0.215 \Big] \cdot$$
$$\cdot nn' \cdot \frac{\langle\alpha|\hat{M}_z|\alpha'\rangle \cdot \langle\beta'|\hat{M}_z|\beta\rangle}{\hbar^2}. \tag{14.22}$$

U ovom izrazu figurišu matrični elementi $\langle\alpha|\hat{M}_z|\alpha'\rangle$ i $\langle\beta'|\hat{M}_z|\beta\rangle$ koji se nalaze prema relacijama:

$$\langle\alpha|\hat{M}_z|\alpha'\rangle = \langle\alpha|\hat{M}_z|\alpha\rangle \cdot \delta_{\alpha,\alpha'},$$
$$\langle\beta'|\hat{M}_z|\beta\rangle = \langle\beta|\hat{M}_z|\beta\rangle \cdot \delta_{\beta,\beta'},$$

a čije su vrednosti povezane sa paraboličkim kvantnim brojevima n_1 i n_2 na sledeći način

$$\langle\alpha|\hat{M}_z|\alpha\rangle = \hbar \cdot (n_2^{(\alpha)} - n_1^{(\alpha)}),$$
$$\langle\beta|\hat{M}_z|\beta\rangle = \hbar \cdot (n_2^{(\beta)} - n_1^{(\beta)}).$$

Matrični element operatora $\hat{\gamma}_n^{(0)}$, nalazi se prema relaciji:

$$\langle\alpha|\hat{\gamma}_n^{(0)}|\alpha'\rangle = \frac{3}{2}\cdot\frac{\pi\hbar^2 N_e}{m^2}\cdot\left(\frac{2m}{\pi kT_e}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot n^2\cdot\left[n^2+(n_1^{(\alpha)}-n_2^{(\alpha)})^2-|m|-1\right]. \tag{14.23}$$

U slučaju da stanja $|\alpha\rangle$ i $|\alpha'\rangle$ odgovaraju početnom stanju $|n\{n_1,n_2m\}\rangle$, a $|\beta\rangle$ i $|\beta'\rangle$ krajnjem stanju $|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle$, izraz (14.22) postaje:

$$\begin{aligned}\langle n\{n_1,n_2,m\}|\langle n'\{n_1',n_2',m'\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle &= \langle n\{n_1,n_2,m\}|\hat{\gamma}_n^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle + \\ &+ \langle n'\{n_1',n_2',m'\}|\hat{\gamma}_{n'}^{(0)}|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle - \frac{6\pi\hbar^2 N_e}{m^2}\cdot\left(\frac{2m}{\pi kT_e}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot nn'\cdot \\ &\cdot\frac{1}{\hbar^2}\cdot\left(\langle n\{n_1,n_2,m\}|\hat{M}_z|n\{n_1,n_2,m\}\rangle\cdot\langle n'\{n_1',n_2',m'\}|\hat{M}_z|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle\right),\end{aligned}$$

a predstavlja veličinu $\gamma_k^{(0)}$ koja se javlja u integralu (14.1) i neophodna je za dalja izračunavanja

$$\gamma_k^{(0)} = \langle n\{n_1,n_2,m\}|\langle n'\{n_1',n_2',m'\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle|n'\{n_1',n_2',m'\}\rangle.$$

Izraz za $\gamma_k^{(0)}$ se lako pronalazi, ako se primeni obrazac za izračunavnje $\langle\alpha|\langle\beta|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha'\rangle|\beta'\rangle$ (14.22) i obrazac za izračunavanje $\langle\alpha|\hat{\gamma}_n^{(0)}|\alpha'\rangle$ (14.23), a glasi:

$$\begin{aligned}\gamma_k^{(0)} =& \frac{3}{2}\cdot\frac{\pi\hbar^2 N_e}{m^2}\cdot\left(\frac{2m}{\pi kT_e}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]n^2\left[n^2+(n_1-n_2)^2-|m|-1\right]+\frac{3}{2}\cdot\frac{\pi\hbar^2 N_e}{m^2}\cdot\left(\frac{2m}{\pi kT_e}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot \\ &\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]n'^2\left[n'^2+(n_1'-n_2')^2-|m'|-1\right]-\frac{6\pi\hbar^2 N_e}{m^2}\cdot\left(\frac{2m}{\pi kT_e}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot \\ &\cdot nn'\cdot\frac{1}{\hbar^2}\cdot\hbar\cdot(n_2-n_1)\cdot\hbar\cdot(n_2'-n_1').\end{aligned}$$

Pogodno je u poslednji izraz uvesti veličinu $\langle v\rangle$ koja je jednaka:

$$\langle v\rangle = \left(\frac{\pi kT_e}{2m}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

Odgovarajućim grupisanjem članova, konačno za veličinu $\gamma_k^{(0)}$ dobijamo:

$$\begin{aligned}\gamma_k^{(0)} =& \frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot\left[\frac{n^2}{2}\cdot\left[n^2+(n_1-n_2)^2-|m|-1\right]+\frac{n'^2}{2}\cdot\left[n'^2+(n_1'-n_2')^2-\right.\right. \\ &\left.\left.-|m'|-1\right]-2nn'\cdot(n_2-n_1)(n_2'-n_1')\right].\end{aligned}$$

Ovim je u potpunosti određen izraz za $\gamma_k^{(0)}$, pa je još preostalo da se utvrdi oblik veličine $\Delta\gamma_k$. To će se učiniti na osnovu relacije (10.19) prema kojoj je veličina γ_k jednaka:

$$\gamma_k = \gamma_k^{(0)} + \Delta\gamma_k,$$

gde je $\Delta\gamma_k$ proporcionalno prvom stepenu malog parametra λ. Ista ova relacija se može dobiti i iz (14.18), ako se odredi oblik veličine γ_k i pri tome se za talasnu funkciju koristi funkcija $\Psi^{(I)}_{n_1,n_2,m}$ koja je određena sa tačnošću do na mali parametar λ (9.1):

$$\Psi^{(I)}_{n_1,n_2,m} = |n\{n_1,n_2,m\}\rangle + \sum_\nu{}' \mathcal{A}_\nu|n\nu\rangle,$$

$$|\alpha\rangle = |\alpha^{(0)}\rangle + |\alpha^{(1)}\rangle.$$

Iz poslednje relacije je jasno da $|\alpha\rangle$ predstavlja talasnu funkciju $\Psi^{(I)}_{n_1,n_2,m}$, $|\alpha^{(0)}\rangle$ neperturbovanu talasnu funkciju, a $|\alpha^{(1)}\rangle$ popravku na talasnu funkciju koja je proporcionalna parametru λ:

$$|\alpha^{(1)}\rangle = \sum_{\nu_\alpha}{}' \mathcal{A}_{\nu_\alpha}|\nu_\alpha^{(0)}\rangle \sim \lambda.$$

Sada se ovako definisana talasna funkcija koristi za izračunavanje veličine γ_k:

$$\gamma_k = \langle\alpha|\langle\beta|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha\rangle|\beta\rangle = \left(\langle\alpha^{(0)}|+\langle\alpha^{(1)}|\right)\left(\langle\beta^{(0)}|+\langle\beta^{(1)}|\right)\hat{\gamma}_k^{(0)}\left(|\alpha^{(0)}\rangle+|\alpha^{(1)}\rangle\right)\left(|\beta^{(0)}\rangle+|\beta^{(1)}\rangle\right).$$

S obzirom da se proračun radi sa tačnošću do na mali parametar λ, potrebno je zadržati samo one članove koji su proporcionalni ovom parametru, pa za γ_k dobijamo:

$$\gamma_k \approx \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + \langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(1)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(1)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle.$$

Pošto su članovi koji sadrže talasnu funkciju $|\alpha^{(1)}\rangle$ međusobno jednaki, mogu se sabrati. Isto važi i za članove koji sadrže $|\beta^{(1)}\rangle$, pa prethodni izraz postaje:

$$\gamma_k = \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + 2\cdot\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + 2\cdot\langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle.$$

Prvi član ne zavisi od parametra λ i predstavlja veličinu $\gamma_k^{(0)}$, dok su poslednja dva srazmerna prvom stepenu λ i predstavljaju $\Delta\gamma_k$:

$$\gamma_k^{(0)} = \langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle,$$
$$\Delta\gamma_k = 2\cdot\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle + 2\cdot\langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle.$$

Dakle, ovim je dobijen obrazac po kojem je neophodno tražiti izraz za $\Delta\gamma_k$. Prvo se prema jednačini (14.22), određuje vrednost izraza $\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle$ koji eksplicitno glasi:

$$\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle = \sum_{\nu_\alpha}{}' \mathcal{A}_{\nu_\alpha}\langle\nu_\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle.$$

S obzirom da se talasne funkcije koje odgovaraju $\langle\alpha|$ i $|\alpha'\rangle$ razlikuju, drugi i treći član u relaciji (14.22) će biti jednaki nuli. Zbog toga preostaje samo prvi član koji ima sledeći oblik:

$$\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle = \sum_{\nu_\alpha}{}' \mathcal{A}_{\nu_\alpha}\langle\nu_\alpha^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle = -\frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot$$
$$\cdot\langle n\{n_1-1,n_2+1,m\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle + \frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot$$
$$\cdot\langle n\{n_1+1,n_2-1,m\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle.$$

Vrednosti matričnih elemenata koji se javljaju u poslednjoj relaciji su izračunati u radu [18], a iznose:

$$\langle n\{n_1-1,n_2+1,m\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = \frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot n^2\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)}\cdot$$
$$\cdot\sqrt{n_1(n-n_1)},$$

odnosno,

$$\langle n\{n_1+1,n_2-1,m\}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|n\{n_1,n_2,m\}\rangle = \frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot n^2\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)}\cdot$$
$$\cdot\sqrt{n_2(n-n_2)}.$$

Uvrštavanjem poslednja dva matrična elementa u izraz za $\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle$, dobijamo:

$$\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle = -\frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot$$
$$\cdot n^2\cdot\sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)} + \frac{na_0}{2R}\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot$$
$$\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]\cdot n^2\cdot\sqrt{(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)}.$$

Nakon grupisanja odgovarajućih članova, dobija se nešto jednostavnija forma:

$$\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle = \frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right]n^3\left[-(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)+\right.$$
$$\left.+(n_1+1)(n-n_1-1)n_2(n-n_2)\right] = \frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}}+0.215\right].n^3\cdot I$$

Uvedena veličina I predstavlja određenu funkciju kvantnih brojeva i može se zapisati u nešto drugačijoj formi, ako se uzme u obzir da se od veličine I_4 (6.4) razlikuje samo po predznaku:

$$I = -I_4 = (n_2 - n_1)\big[2n_1n_2 + (n_1 + n_2 + m)(m+1)\big] = (n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big].$$

Na ovaj način je izračunata vrednost veličine $\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle$, a ona glasi:

$$\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle = \frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big].$$

Na potpuno analogan način se dobija i $\langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle$, a rezultat se razlikuje samo po tome što su kvantni brojevi primovani. Ovo se i moglo očekivati, jer se talasna funkcija $|\beta^{(1)}\rangle$ odnosi na krajnje stanje:

$$\langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle = \frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big].$$

Na osnovu dobijenih izraza za $\langle\alpha^{(0)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(1)}\rangle$ i $\langle\alpha^{(1)}|\langle\beta^{(0)}|\hat{\gamma}_k^{(0)}|\alpha^{(0)}\rangle|\beta^{(0)}\rangle$ lako se dobija veličina $\Delta\gamma_k$, koja je jednaka:

$$\begin{aligned}\Delta\gamma_k =& 2\cdot\frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big] + 2\cdot\frac{a_0}{2R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\\ &\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big] = \frac{a_0}{R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]\cdot\\ &\cdot\Big[n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big] + n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big]\Big].\end{aligned}$$

Nađene relacije za $\Delta\gamma_k$ i $\gamma_k^{(0)}$ omogućuju da se formira i njihov odnos kao:

$$\begin{aligned}\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}} =& \left[\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\right]^{-1}\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]^{-1}\Big[\frac{n^2}{2}\cdot\big[n^2 + (n_1 - n_2)^2 - |m| - 1\big] + \frac{n'^2}{2}\cdot\big[n'^2 + (n_1' - n_2')^2 -\\ &- |m'| - 1\big] - 2nn'\cdot(n_2 - n_1)(n_2' - n_1')\Big]^{-1}\cdot\frac{a_0}{R}\cdot\frac{3\pi\hbar^2 N_e}{m^2\langle v\rangle}\cdot\left[\ln\frac{\rho_{\max}}{\rho_{\min}} + 0.215\right]\cdot\\ &\cdot\Big[n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big] + n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big]\Big].\end{aligned}$$

Skraćivanjem određenih faktora, prethodni izraz se može zapisati u jednostavnijoj formi:

$$\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{a_0}{R}\cdot\frac{2\cdot\Big[n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big] + n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big]\Big]}{n^2\big[n^2 + (n_1 - n_2)^2 - |m| - 1\big] + n'^2\big[n'^2 + (n_1' - n_2')^2 - |m'| - 1\big] - 4nn'(n_2 - n_1)(n_2' - n_1')}.$$

Pogodno je na ovom mestu uvesti veličinu Δ_k^γ, koja je definisana na sledeći način:

$$\Delta_k^\gamma = \frac{2}{3}\cdot\frac{2\cdot\Big[n^3(n_2 - n_1)\big[(n-1)(m+1) + 2n_1n_2\big] + n'^3(n_2' - n_1')\big[(n'-1)(m'+1) + 2n_1'n_2'\big]\Big]}{n^2\big[n^2 + (n_1 - n_2)^2 - |m| - 1\big] + n'^2\big[n'^2 + (n_1' - n_2')^2 - |m'| - 1\big] - 4nn'(n_2 - n_1)(n_2' - n_1')}.$$

Iz definicione relacije za Δ_k^γ, direktno sledi veza ove veličine sa $\Delta\gamma_k/\gamma_k^{(0)}$:

$$\Delta_k^\gamma = \frac{2}{3}\cdot\frac{R}{a_0}\cdot\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}},$$

$$\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{3}{2}\cdot\frac{a_0}{R}\cdot\Delta_k^\gamma.$$

Pošto je vrednost za odnos $\Delta\gamma_k/\gamma_k^{(0)}$ izračunata, može se odrediti vrednost integrala po uglovima θ i ψ za veličinu $\Delta\overline{\gamma}_k/\gamma_k^{(0)}$:

$$\begin{aligned}&\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\cdot\sin\theta\int_{\pi/2}^{5\pi/2}\mathrm{d}\psi\int_{-\infty}^{+\infty}\cdots\int\prod_\alpha \mathrm{d}g_\alpha\cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)\cdot\frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{(2\pi)^9\cdot H(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\Big(-\frac{4\pi NeB(\beta)}{3}\Big)\cdot\frac{R}{F}\cdot\\ &\cdot\frac{\Delta\gamma_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{(2\pi)^9\cdot H(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2\cdot F_0^3}\cdot\Big(-\frac{4\pi NeB(\beta)}{3}\Big)\cdot\frac{R}{F_0\beta}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{a_0}{R}\cdot\Delta_k^\gamma,\end{aligned}$$

što nakon sređivanja postaje

$$\int_{\Omega} \mathrm{d}\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_{\alpha} \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} = \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2\pi N e a_0 \cdot B(\beta)}{F_0 \cdot \beta}\right) \cdot \Delta_k^{\gamma}. \tag{14.24}$$

Ovo je bio poslednji integral koji je trebalo izračunati da bi se odredila vrednost integrala (14.1), koji opisuje profil bočnih štarkovskih komponenti. U ovom integralu se mora prvo izvršiti izdvajanje integrala po uglovima θ i ψ, što je opisano relacijom (14.12), kao i izvlačenje ispred integrala konstantnih članova:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^{\infty} \mathrm{d}F \cdot F^2 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_{\alpha} \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \cdot$$
$$\cdot \left\{ \frac{1}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \sum_{\nu}{}' \overline{a}_{\nu}\overline{\mathcal{A}}_{\nu} + \sum_{\mu}{}' \overline{a}_{\mu}\overline{\mathcal{A}}_{\mu} + \frac{\Delta\overline{\gamma}_k}{\gamma_k^{(0)}} \left[1 - \frac{2 \cdot (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \right] + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)}{(\Delta\omega - \Delta\overline{C}_k)^2 + (\overline{\gamma}_k^{(0)})^2} \cdot \Delta\overline{U}_k \right] \right\}.$$

Integracija po uglovima je određena relacijom (14.21) za sume po indeksima ν i μ, relacijom (14.24) za odnos $\Delta\overline{\gamma}_k/\gamma_k^{(0)}$ i relacijom (14.18) za veličinu $\Delta\overline{U}_k$. Vrednost integracije konstantnog člana, a to je jedinica u srednjoj zagradi, može se odrediti na sledeći način:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_{\alpha} \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \cdot G_2,$$

gde je G_2 vrednost integrala po komponentama nehomogenosti jonskog polja g_{α} i prema (E.2) iznosi

$$G_2 = \frac{(2\pi)^8 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3}.$$

Integracija po uglovima daje kao rezultat 4π pa je konačna vrednost integrala jednaka:

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int_{\pi/2}^{5\pi/2} \mathrm{d}\psi \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_{\alpha} \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = 4\pi \cdot \frac{(2\pi)^8 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3}.$$

Pored navedenog, mora se uzeti u obzir da multiplikativne veličine $\Delta\overline{C}_k$ i $\overline{\gamma}_k^{(0)}$ pri transformaciji koordinatnog sistema postaju $C_k\beta$ i $\gamma_k^{(0)}$, a integral $I_l(\Delta\omega)$ je jednak:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^{\infty} \mathrm{d}F \cdot F^2 \cdot \left\{ \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \left[4\pi \cdot \frac{(2\pi)^8 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} + \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \right.\right.$$
$$\cdot \left(-\frac{4\pi N e a_0}{3F_0}\right) \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \varepsilon_k + \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2\pi N e a_0 \cdot B(\beta)}{F_0 \cdot \beta}\right) \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] \cdot$$
$$\left.\left. \cdot \Delta_k^{\gamma} + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta) \cdot B(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot \left(-\frac{2F_0}{e}\right) \cdot H_k \right] \right\}.$$

U prethodnoj relaciji se vrši smena jačine jonskog polja $F = F_0\beta$, a takođe se izdvaja i zajednički faktor iz svih članova:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{1}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\beta \cdot \beta^2 F_0^3 \cdot \frac{(2\pi)^9 \cdot H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 F_0^3} \cdot \left\{ \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \left[2 + \left(-\frac{4\pi N e a_0}{3F_0}\right) \cdot \right.\right.$$
$$\cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \varepsilon_k + \left(-\frac{2\pi N e a_0}{F_0}\right) \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] \cdot \Delta_k^{\gamma} + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot$$
$$\left.\left. \cdot B(\beta) \cdot \left(-\frac{2F_0}{e}\right) \cdot H_k \right] \right\}.$$

U poslednjoj relaciji se mora uzeti u obzir da jonsko električno polje ima negativnu vrednost, što je u skladu sa definicijom (10.4), pa dalje imamo:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{H(\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \frac{2\pi \cdot Nea_0}{3|F_0|} \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \varepsilon_k + \frac{\pi \cdot Nea_0}{|F_0|} \cdot \right.$$
$$\left. \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right] \cdot \Delta_k^{\mathrm{r}} + \frac{2 \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot B(\beta) \cdot \frac{|F_0|}{e} \cdot H_k\right].$$

Uvođenjem sledećih veličina:

$$\delta_k = \frac{2\pi}{3} \cdot \frac{Nea_0}{|F_0|} \cdot \varepsilon_k, \tag{14.25}$$

$$P_k = \pi \cdot \frac{Nea_0}{|F_0|} \cdot \Delta_k^{\mathrm{r}}, \tag{14.26}$$

$$\mathcal{X}_k = \frac{|F_0|}{e} \cdot H_k = \frac{|F_0|}{e} \cdot \frac{\pi \cdot Ne^3a_0^2}{\hbar \cdot F_0} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}} = \frac{\pi \cdot Ne^2a_0^2}{\hbar} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}}, \tag{14.27}$$

izraz za veličinu $I_l(\Delta\omega)$ koja određuje profil bočnih štarkovskih komponenti postaje

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{H(\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \left[1 + \delta_k \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} + P_k \cdot \frac{B(\beta)}{\beta} \cdot \right.$$
$$\left. \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right] + \mathcal{X}_k \cdot \frac{2 \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot B(\beta)\right].$$

Da bi se poslednja relacija dovela na oblik pogodan za upoređivanje sa slučajem širenja samo usled linearnog Štarkovog efekta, integrali se parcijalno poslednji član:

$$\mathcal{X}_k \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{2 \cdot H(\beta) \cdot B(\beta) \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{\left[(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2\right]^2} = \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \cdot \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot H(\beta) \cdot B(\beta) \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}\left(\frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right) =$$
$$= \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \cdot \left[\frac{H(\beta) \cdot B(\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\Bigg|_0^{+\infty} - \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}(H(\beta) \cdot B(\beta))) \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right].$$

Prvi član je jednak nuli u obe granice, što se lako može zaključiti iz izraza za funkciju $H(\beta)$, pa se dalje dobija:

$$\mathcal{X}_k \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{2 \cdot H(\beta) \cdot B(\beta) \cdot (\Delta\omega - C_k\beta)}{\left[(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2\right]^2} = \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}(-H(\beta) \cdot B(\beta))) \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}.$$

Pogodno je na ovom mestu uvesti novi koeficijent, koji predstavlja odnos $\mathcal{X}_k$ i $|C_k|$, a vrednost mu je jednaka:

$$q_k = \frac{\mathcal{X}_k}{|C_k|} = \frac{\pi \cdot Ne^2a_0^2}{\hbar} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}} \cdot \left[\frac{3}{2} \cdot \frac{ea_0}{\hbar} \cdot |F_0| \cdot |\Delta_k^{\mathrm{d}}|\right]^{-1} = \frac{\pi \cdot Nea_0}{3|F_0|} \cdot \frac{\Delta_k^{\mathrm{q}}}{|\Delta_k^{\mathrm{d}}|}.$$

Uvrštavanjem poslednje relacije u izraz za $I_l(\Delta\omega)$, profil bočne linije postaje:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_k I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \left[H(\beta) + \delta_k \cdot \frac{H(\beta) \cdot B(\beta)}{\beta} + P_k \cdot H(\beta) \cdot \right.$$
$$\left. \cdot \frac{B(\beta)}{\beta}\left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right] + \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}(-H(\beta) \cdot B(\beta))) \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2}\right].$$

Kako su bočne komponente određene uslovom $C_k \neq 0$, a centralne $C_k = 0$, gornja suma se može razdvojiti na dve sume, prva obhvata kombinacije paraboličkih kvantnih brojeva $\{n_1, n_2, m\}$ i $\{n_1', n_2', m'\}$ posmatranog prelaza $|n\{n_1, n_2, m\}\rangle \to |n'\{n_1', n_2', m'\}\rangle$ za koje je $C_k > 0$, a druga je za $C_k < 0$. Ako se iskoriste sledeća svojstva koeficijenata:

$$C_{(k>0)} = -C_{(k<0)}, \qquad H_{(k>0)} = H_{(k<0)}, \qquad \delta_{(k>0)} = -\delta_{(k<0)}, \qquad P_{(k>0)} = P_{(k<0)},$$

u relaciji za $I_l(\Delta\omega)$, može se suma razdvojiti na članove za koje je $k > 0$ i $k < 0$. Imajući ovo u vidu, dobijamo sledeće:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_{k>0} I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \Bigg[H(\beta) + \Lambda(\beta) \cdot \delta_k + \Lambda(\beta) \cdot P_k \cdot$$
$$\cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] + \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \cdot \frac{\chi(\beta)}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \Bigg] +$$
$$+ \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_{k<0} I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \frac{1}{(\Delta\omega + C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \Bigg[H(\beta) - \Lambda(\beta) \cdot \delta_k - \Lambda(\beta) \cdot P_k \cdot$$
$$\cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega + C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] - \frac{\mathcal{X}_k}{C_k} \cdot \frac{\chi(\beta)}{(\Delta\omega + C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \Bigg].$$

Neznatnim transformacijama, prethodna relacija se može dovesti na pogodniji oblik, koji se dalje analizira:

$$I_l(\Delta\omega) = \frac{(2\pi)^8}{G\pi} \cdot \sum_{k>0} I_k^{(0)} \gamma_k^{(0)} \int_0^\infty \mathrm{d}\beta \cdot \Bigg\{ \frac{1}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \Bigg[H(\beta) + q_k \cdot \chi(\beta) + \Lambda(\beta) \Bigg[\delta_k + P_k \cdot$$
$$\cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega - C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] \Bigg] + \frac{1}{(\Delta\omega + C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \cdot \Bigg[H(\beta) - q_k \cdot \chi(\beta) - \Lambda(\beta) \Bigg[\delta_k +$$
$$+ P_k \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega + C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right] \Bigg] \Bigg] \Bigg\}. \tag{14.28}$$

Kombinacije k u poslednjoj relaciji su takve da je $C_k > 0$, a izraz opisuje profil bočnih komponenti sa uračunavanjem uticaja nehomogenosti jonskog polja. Čalanovi proporcionalni $H(\beta)$ opisuju neperturbovan profil formiran linearnim Štarkovim efektom, članovi proporcionalni $\Lambda(\beta)$, $\Lambda(\beta) \cdot \left[1 - \frac{2 \cdot (\gamma_k^{(0)})^2}{(\Delta\omega \mp C_k\beta)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2} \right]$ i $\chi(\beta)$ opisuju uticaj nehomogenosti jonskog polja na intenzitet, udarnu elektronsku polu-poluširinu i pomeraj štarkovskih komponenti respektivno. Razlika u znacima popravki za "plave" i "crvene" komponente dovodi do pojave asimetrije profila $I_l(\Delta\omega)$. Univerzalne funkcije $\Lambda(\beta)$ i $\chi(\beta)$ se lako mogu izraziti preko $H(\beta)$ i to na sledeći način:

$$\Lambda(\beta) = \frac{H(\beta) \cdot B(\beta)}{\beta} = \frac{3}{\beta^2} \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') - \frac{H(\beta)}{\beta},$$

$$\chi(\beta) = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta} \left[H(\beta) \cdot \left(\frac{3}{\beta H(\beta)} \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') - 1 \right) \right] = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta} \left[\frac{3}{\beta} \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') - H(\beta) \right],$$

$$\chi(\beta) = \frac{3}{\beta^2} \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') - \frac{3}{\beta} H(\beta) + \frac{\mathrm{d}H(\beta)}{\mathrm{d}\beta}.$$

Ovim je u potpunosti završen proračun za profil bočnih spektralnih linija, čime je pokazano da asimetrija potiče od nehomogenosti jonskog polja koja je sadržana u funkcijama $\Lambda(\beta)$ i $\chi(\beta)$. Preostaje da se razmotre još i centralne komponente za koje je $\Delta C_k = 0$.

14.1 Profil centralnih komponenti sa uračunavanjem nehomogenosti jonskog polja

Izdvajanje centralnih komponenti iz potpunog profila (11.31) je veoma težak zadatak koji prevazilazi okvire ovog diplomskog rada. Međutim, iz iste relacije se mogu dobiti zadovoljavajuće aproksimacije centralnih profila u okviru već korišćene aproksimacije najbližeg suseda. U kvantno-mehaničkom delu ovog rada pokazano je da u izrazu (7.4) za pomeraje centralnih komponenti odsustvuje dipolna popravka ($\Delta\overline{C}_0 \sim \Delta_0^{\mathrm{d}} = 0$), što ima za posledicu da je prva popravka na intenzitete (9.10) neperturbovanih centralnih komponenti takođe jednaka nuli. Zato je tek kvadrupolni član ($\Delta\overline{U}_0 \sim \Delta_0^{\mathrm{q}}$) prva nenulta popravka za pomeraje, dok se u

slučaju intenziteta ona može zanemariti kao veličina malog reda. Sam parametar ε koji predstavlja odnos kvadrupolne i dipolne interakcije se smatra takođe zanemarljivom veličinom što na osnovu (10.19) ima za posledicu da je $\gamma_{k=0} \approx \gamma_k^{(0)}$. Time je zanemaren član koji uračunava nehomogenost jonskog mikropolja. Zato se u (11.31) integral funkcije raspodele nehomogenog jonskog mikropolja u plazmi mora zameniti funkcijom raspodele najbližeg suseda:

$$\int_{\vec{F}=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{F} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\alpha} \mathrm{d}g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) \to \int_0^{\infty} \mathrm{d}R \cdot W_{\mathrm{NS}}(R),$$

gde je $W_{\mathrm{NS}}(R)$ funkcija raspodele najbližeg suseda i ima oblik

$$W_{\mathrm{NS}}(R) = 4\pi \cdot NR^2 \exp(-\frac{4\pi \cdot N}{3} \cdot R^3).$$

Veličina N je koncentracija teških čestica u plazmi, R_0 njihovo srednje međusobno rastojanje, a veza između ovih veličina je:

$$N = \left(\frac{4\pi}{3} \cdot R_0^3\right)^{-1}.$$

Karakteristika raspodele $W_{\mathrm{NS}}(R)$ je ta da svojim maksimumom definiše najverovatnije međusobno rastojanje čestica u plazmi R_{eff}, koje iznosi:

$$R_{\mathrm{eff}} = \frac{2}{3} \cdot R_0.$$

Uvodeći u (11.31) sve gore navedeno, dolazi se do izraza za udeo centralnih komponenti po kojima se sumiranje jedino i vrši:

$$I_0(\Delta\omega) \approx \sum_{k=0} \frac{I_k^0 \gamma_k^0}{G\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{d}R \cdot \frac{W_{\mathrm{NS}}(R)}{(\Delta\omega - \Delta\overline{U}_k)^2 + (\gamma_k^{(0)})^2},$$

gde je $\Delta\overline{U}_k$ definisano drugim sabirkom u izrazu (7.4), dok su neperturbovane elektronske polu-poluširine funkcije elektronske temperature i koncentracije i date su u [17].

Ovim je završeno razmatranje profila spektralne linije atoma vodonika pri čemu je sprovedena zasebna analiza za bočne i zasebna analiza za centralne komponente. Pokazano je da asimetrija profila potiče od nehomogenosti jonskog polja u plazmi, što je izraženo kroz univerzalne funkcije $\Lambda(\beta)$ i $\chi(\beta)$.

Zaključak

Cilj ovog diplomskog rada je bio da se na jednom mestu iznese teorija koja objašnjava asimetriju spektralnih linija atoma vodonika. Kao glavne odrednice korišćeni su rezultati iz [1] i [2], pri čemu su sve formule detaljno izvedene. Pošto je osnovni cilj bio da se provere rezultati teorije iznesene u ovim radovima, velika pažnja je posvećena transformisanju jednačina i njihovom zapisivanju u istom onom obliku u kojem se nalaze u [1] i [2].

Rešeno je kvantovanje atoma vodonika u spoljašnjem električnom polju koje potiče od najbližeg suseda i to u paraboličkom koordinatnom sistemu. Prednost paraboličkih koordinata u odnosu na sferne koordinate se ogleda u tome što se Štarkov efekat kod atoma vodonika u paraboličkom koordinatnom sistemu daleko lakše analizira. Ukazano je na moguće uzorke asimetrije vodonikovih linija i izračunato pomeranje i intenziteti pojedinih štarkovskih komponenti.

Potom je razmatran oblik profila spektralne linije atoma vodonika kada se on nalazi u plazmi. Kao glavna odrednica, poslužio je rad [2]. Izvedena je opšta formula za asimetrične profile vodonikovih spektralnih linija i pokazano je da je uzrok asimetrije profila upravo nehomogenost jonskog mikropolja u plazmi.

Proračuni u ovom radu su pokazali da se u [1] i [2] pojavljuje niz grešaka, pa da bi se ovi rezultati mogli koristiti za upoređivanje teorijskih i eksperimentalnih rezultata, moraju se korigovati. Uočene greške navedene su u dodatku H ovog diplomskog rada.

Pokazano je takođe da se značajni rezultati mogu izvesti korišćenjem znanja iz specijalnih teorijskih kurseva na redovnim studijama.

Deo V

Dodaci

Dodatak A

Određivanje izraza za svojstvene talasne funkcije i svojstvene energije u teoriji perturbacije

U ovom dodatku će detaljno biti izvedene relacije u okviru teorije perturbacije, ali u slučaju da operator perturbacije $\hat{V}$ ima oblik:

$$\hat{V} = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \dots .$$

gde je λ mali parametar [1]. Operator $\hat{V}$ nema linearan član po parametru λ, a član $\lambda^4 V^{(4)}$ u potpunosti otklanja degeneraciju energijskog nivoa.

A.1 Svojstvene talasne funkcije i svojstvene energije degenerisanog energijskog nivoa na koji deluje perturbacija oblika $\hat{V} = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \dots$

Pre nego što se otpočne sa izračunavanjem energija za određena kvantno-mehanička stanja atoma vodonika pri Štarkovom efektu, razmotrićemo neke opšte zakonitosti teorije perturbacije za degenerisan nivo i to u slučaju kada na njega deluje perturbacija sledećeg oblika:

$$\hat{V} = \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} + \dots .$$

Ova perturbacija ne sadrži linearan član po malom parametru λ, a kvadratni član perturbacije $\lambda^2 V^{(2)}$ samo delimično snižava stepen degeneracije određenog kvantnog stanja. Potpuno otklanjanje degeneracije vrši član $\lambda^4 V^{(4)}$. Pretpostavićemo da postoji sistem koordinata u kojem su nedijagonalni matrični elementi operatora perturbacije $\lambda^2 V^{(2)}$ identički jednaki nuli za jedno isto stanje sa glavnim kvantnim brojem n. U tom slučaju se može primeniti opšta teorija perturbacije za nedegenerisani nivo, bez obzira što je nivo u suštini degenerisan. Neka je hamiltonijan neperturbovanog sistema $\hat{H}_0$ poznat, kao i rešenja njegovog svojstvenog problema:

$$\hat{H}_0 |\psi_{k\nu}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_{k\nu}\rangle, \qquad \nu = 1, 2, \dots, g_k,$$

gde je k glavni kvantni broj stanja, indeks ν prebrojava kombinacije sporednih kvantnih brojeva kojima su definisana sva moguća podstanja sa glavnim kvantnim brojem k, a g_k predstavlja stepen degeneracije. Prema teoriji perturbacije za nedegenerisan nivo, potrebno je rešiti svojstveni problem perturbovanog hamiltonijana:

$$(\hat{H}_0 + \hat{V}) |\varphi_{k\nu}\rangle = E_{k\nu} |\varphi_{k\nu}\rangle, \qquad \nu = 1, 2, \dots, g_k.$$

Ovaj problem se rešava tako što se svojstvene vrednosti energije traže u sledećem obliku:

$$E_{k\nu} = E_k^{(0)} + \lambda^2 E_{k\nu}^{(2)} + \lambda^3 E_{k\nu}^{(3)} + \lambda^4 E_{k\nu}^{(4)} + \dots , \tag{A.1}$$

a svojstvene talasne funkcije u opštem obliku

$$\begin{aligned} |\varphi_{k\nu}\rangle = & |k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu} |k\mu\rangle + \lambda \sum_{l \neq k} a_{k\nu,l} |l\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} |k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l \neq k} b_{k\nu,l} |l\rangle + \lambda^3 \sum_{\mu} \delta_{k\nu,k\mu} |k\mu\rangle + \\ & + \lambda^3 \sum_{l \neq k} c_{k\nu,l} |l\rangle + \lambda^4 \sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu} |k\mu\rangle + \lambda^4 \sum_{l \neq k} d_{k\nu,l} |l\rangle . \end{aligned} \tag{A.2}$$

Sumiranje po indeksu μ vrši se po svim podstanjima sa glavnim kvantnim brojem k, a sumiranje po indeksu l se vrši po svim stanjima čiji se glavni kvantni broj razlikuje od k. Uvrštavanjem izraza za operator perturbacije $\hat{V}$ i za talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}\rangle$, Šredingerova jednačina postaje:

$$\Big(\hat{H}_0 + \lambda^2 V^{(2)} + \lambda^3 V^{(3)} + \lambda^4 V^{(4)} - E_k^{(0)} - \lambda^2 E_{k\nu}^{(2)} - \lambda^3 E_{k\nu}^{(3)} - \lambda^4 E_{k\nu}^{(4)}\Big)\Big(|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle +$$
$$+ \lambda \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}|l\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle + \lambda^3 \sum_{\mu} \delta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^3 \sum_{l\neq k} c_{k\nu,l}|l\rangle +$$
$$+ \lambda^4 \sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^4 \sum_{l\neq k} d_{k\nu,l}|l\rangle\Big) = 0.$$

Posle grupisanja članova uz odgovarajuće stepene po malom parametru λ, dobija se sledeća jednačina koja se javlja uz prvi stepen po λ:

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})\Big(\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}|l\rangle\Big) = 0. \tag{A.3}$$

Uz članove po λ^2 javlja se sledeća jednačina:

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})\Big(\sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle\Big) + (V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)})|k\nu\rangle = 0. \tag{A.4}$$

Uz treći stepen po malom parametru λ, dobija se sledeća relacija:

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})\Big(\sum_{\mu} \delta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} c_{k\nu,l}|l\rangle\Big) + (V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)})\Big(\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}|l\rangle\Big) +$$
$$+ (V^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)})|k\nu\rangle = 0, \tag{A.5}$$

a uz četvrti stepen po malom parametru λ

$$(\hat{H}_0 - E_k^{(0)})\Big(\sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} d_{k\nu,l}|l\rangle\Big) + (V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)})\Big(\sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle\Big) +$$
$$+ (V^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)})\Big(\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}|l\rangle\Big) + (V^{(4)} - E_{k\nu}^{(4)})|k\nu\rangle = 0. \tag{A.6}$$

Da bi se odredile sve popravke na energiju, kao i talasna funkcija $|\varphi_{k\nu}\rangle$, moraju se odrediti koeficijenti koji figurišu u izrazu za $|\varphi_{k\nu}\rangle$. Da bi se to učinilo, moraju se sve napred navedene jednačine skalarno pomnožiti prvo talasnom funkcijom $\langle k\mu'|$, a potom funkcijom $\langle l'|$. Ako se uzme u obzir uslov ortonormiranosti funkcija:

$$\langle k\mu'|l\rangle = 0,$$
$$\langle k\mu'|k\mu\rangle = \delta_{\mu',\mu},$$
$$\langle l'|l\rangle = \delta_{l',l},$$

lako se nalaze relacije za koeficijente koji figurišu u izrazu za $|\varphi_{k\nu}\rangle$. Prvo se jednačina (A.3) skalarno množi sa $\langle k\mu'|$, što daje sledeći rezultat:

$$\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}\langle k\mu'|l\rangle = 0,$$
$$\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}\big(\langle k\mu'|\hat{H}_0|k\mu\rangle - \langle k\mu'|E_k^{(0)}|k\mu\rangle\big) = 0,$$
$$\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}\big(E_k^{(0)}\delta_{\mu,\mu'} - E_k^{(0)}\delta_{\mu,\mu'}\big) = 0,$$
$$\beta_{k\nu,k\mu'}\big(E_k^{(0)} - E_k^{(0)}\big) = 0.$$

Prethodna relacija je uvek zadovoljena, pa iz nje ne možemo ništa zaključiti o koeficijentima $\beta_{k\nu,k\mu'}$. Skalarno množenje jednačine (A.3) talasnom funkcijom $\langle l'|$ daje:

$$\sum_{\mu} \beta_{k\nu,k\mu}\langle l'|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}\langle l'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|l\rangle = 0,$$
$$\sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}\left(\langle l'|\hat{H}_0|l\rangle - \langle l'|E_k^{(0)}|l\rangle\right) = 0,$$
$$\sum_{l\neq k} a_{k\nu,l}\left(E_l^{(0)}\delta_{l',l} - E_k^{(0)}\delta_{l',l}\right) = 0,$$
$$a_{k\nu,l'}\left(E_{l'}^{(0)} - E_k^{(0)}\right) = 0.$$

Pošto je energija $E_{l'}^{(0)}$ uvek različita od energije $E_k^{(0)}$, poslednja relacija će biti zadovoljena samo u slučaju da su koeficijenti $a_{k\nu,l}$ identički jednaki nuli:

$$a_{k\nu,l} = a^*_{k\nu,l} = 0.$$

Sada se razmatra izgled talasne funkcije (A.2), ali samo do članova koji su proporcionalni parametru λ. Pošto su koeficijenti $a_{k\nu,l}$ jednaki nuli, izraz za ovu talasnu funkciju je:

$$|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = |k\nu\rangle + \lambda\sum_{\mu}\beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle.$$

Uslov normiranja za funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle$ glasi:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(1)}|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = \left(\langle k\nu| + \lambda\sum_{\mu'}\beta^*_{k\nu,k\mu'}\langle k\mu'|\right)\left(|k\nu\rangle + \lambda\sum_{\mu}\beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle\right) \equiv 1,$$

i omogućuje da se odrede relacije koje zadovoljavaju koeficijenti $\beta_{k\nu,k\mu}$. Važno je naglasiti da se i u ovom slučaju moramo zadržati na članovima koji su srazmerni parametru λ, odnosno odbaciti član koji sadrži λ^2, pa imamo:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(1)}|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = \langle k\nu|k\nu\rangle + \lambda\sum_{\mu'}\beta^*_{k\nu,k\mu'}\langle k\mu'|k\nu\rangle + \lambda\sum_{\mu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\nu|k\mu\rangle,$$
$$\langle\varphi_{k\nu}^{(1)}|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = 1 + \lambda\sum_{\mu'}\beta^*_{k\nu,k\mu'}\delta_{\mu',\nu} + \lambda\sum_{\mu}\beta_{k\nu,k\mu}\delta_{\nu,\mu},$$
$$\langle\varphi_{k\nu}^{(1)}|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = 1 + \lambda(\beta^*_{k\nu,k\nu} + \beta_{k\nu,k\nu}).$$

Uslov normiranja će biti zadovoljen samo u slučaju kada su dijagonalni koeficijenti $\beta_{k\nu,k\nu}$ i $\beta^*_{k\nu,k\nu}$ jednaki nuli:

$$\beta^*_{k\nu,k\nu} = \beta_{k\nu,k\nu} = 0,$$

pa u sumi koja figuriše u izrazu za talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle$, možemo izbaciti sabirak koji odgovara $\mu = \nu$

$$|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle = |k\nu\rangle + \lambda\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle. \tag{A.7}$$

Jednačina (A.4) koja stoji uz λ^2, skalarnim množenjem talasnom funkcijom $\langle k\mu'|$ postaje:

$$\sum_{\mu}\gamma_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|l\rangle + \langle k\mu'|V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)}|k\nu\rangle = 0,$$
$$\sum_{\mu}\gamma_{k\nu,k\mu}\left(E_k^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\delta_{\mu,\mu'} + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\left(E_l^{(0)} - E_k^{(0)}\right)\langle k\mu'|l\rangle + \langle k\mu'|V^{(2)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(2)}\delta_{\mu',\nu} = 0,$$
$$E_{k\nu}^{(2)}\delta_{\mu',\nu} = \langle k\mu'|V^{(2)}|k\nu\rangle.$$

U poslednjoj relaciji figuriše Kronekerov simbol $\delta_{\mu',\nu}$, pa razlikujemo dva slučaja. Prvi slučaj se odnosi na $\mu' = \nu$ i definiše popravku na energiju koja je srazmerna λ^2:

$$E_{k\nu}^{(2)} = \langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle. \tag{A.8}$$

Drugi slučaj se odnosi na $\mu' \neq \nu$ i ima za posledicu da su svi nedijagonalni matrični elementi za fiksiran glavni kvantni broj k jednaki nuli:

$$\langle k\mu'|V^{(2)}|k\nu\rangle = 0, \qquad \mu' \neq \nu.$$

Skalarno množenje jednačine (A.4) talasnom funkcijom $\langle l'|$ kao rezultat ima sledeće:

$$\sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}\langle l'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\langle l'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|l\rangle + \langle l'|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle l'|E_{k\nu}^{(2)}|k\nu\rangle = 0,$$

$$\sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}(E_k^{(0)} - E_k^{(0)})\langle l'|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}(E_l^{(0)} - E_k^{(0)})\delta_{l',l} + \langle l'|V^{(2)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(2)}\langle l'|k\nu\rangle = 0,$$

$$b_{k\nu,l'}(E_{l'}^{(0)} - E_k^{(0)}) + \langle l'|V^{(2)}|k\nu\rangle = 0.$$

Iz prethodne relacije direktno sledi izraz za koeficijente $b_{k\nu,l}$:

$$b_{k\nu,l} = \frac{\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}. \tag{A.9}$$

Sada razmatramo izraz za talasnu funkciju koja je određena sa tačnošću do na λ^2, a ona prema (A.2) iznosi:

$$|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = |k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle. \tag{A.10}$$

Uslov normiranja za ovu talasnu funkciju je dat sledećom jednakošću:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(2)}|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = \Big(\langle k\nu| + \lambda \sum_{\mu'\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu'}^{*}\langle k\mu'| + \lambda^2 \sum_{\mu'} \gamma_{k\nu,k\mu'}^{*}\langle k\mu'| + \lambda^2 \sum_{l'\neq k} b_{k\nu,l'}^{*}\langle l'|\Big)\Big(|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \cdot$$
$$\cdot |k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle\Big) \equiv 1.$$

Naravno, potrebno je zadržati samo one članove koji su proporcionalni λ^2:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(2)}|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = \langle k\nu|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu'\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu'}^{*}\langle k\mu'|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}\langle k\nu|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu'} \gamma_{k\nu,k\mu'}^{*}\langle k\mu'|k\nu\rangle + \lambda^2 \cdot$$
$$\cdot \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}\langle k\nu|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu'\neq\nu}\sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu'}^{*}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l'} b_{k\nu,l'}^{*}\langle l'|k\nu\rangle + \lambda^2 \sum_{l} b_{k\nu,l}\langle k\nu|l\rangle.$$

Ako se uzmu u obzir i uslovi ortonormiranosti talasnih funkcija, prethodna relacija za $\langle\varphi_{k\nu}^{(2)}|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle$ se može u mnogome pojednostaviti:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(2)}|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = 1 + \lambda \sum_{\mu'\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu'}^{*}\delta_{\mu',\nu} + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}\delta_{\nu,\mu} + \lambda^2 \sum_{\mu'} \gamma_{k\nu,k\mu'}^{*}\delta_{\mu',\nu} + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}\delta_{\nu,\mu} + \lambda^2 \cdot$$
$$\cdot \sum_{\mu'\neq\nu}\sum_{\mu\neq\nu} |\beta_{k\nu,k\mu}|^2\delta_{\mu',\mu} = 1 + \lambda^2(\gamma_{k\nu,k\nu}^{*} + \gamma_{k\nu,k\nu}) + \lambda^2 \sum_{\mu\neq\nu} |\beta_{k\nu,k\mu}|^2.$$

Grupisanjem članova koji stoje uz kvadrat malog parametra λ, dobija se:

$$\langle\varphi_{k\nu}^{(2)}|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = 1 + \lambda^2\Big(2\gamma_{k\nu,k\nu} + \sum_{\mu\neq\nu} |\beta_{k\nu,k\mu}|^2\Big).$$

Normiranje ove talasne funkcije na jedinicu, ostvarivo je samo u slučaju kada je zadovoljena sledeća veza između $\gamma_{k\nu,k\nu}$ i $\beta_{k\nu,k\mu}$:

$$\gamma_{k\nu,k\nu} = -\frac{1}{2}\sum_{\mu\neq\nu} |\beta_{k\nu,k\mu}|^2.$$

Potrebno je sada izvršiti skalarno množenje jednačine koja se javlja uz λ^3, talasnom funkcijom $\langle k\mu'|$:

$$\sum_{\mu} \delta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} c_{k\nu,l}\langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|l\rangle + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle + \langle k\mu'| \cdot$$
$$\cdot (V^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)})|k\nu\rangle = \sum_{\mu} \delta_{k\nu,k\mu}\big(\langle k\mu'|\hat{H}_0|k\mu\rangle - E_k^{(0)}\delta_{\mu',\mu}\big) + \sum_{l\neq k} c_{k\nu,l}\big(\langle k\mu'|\hat{H}_0|l\rangle - \langle k\mu'|E_k^{(0)}|l\rangle\big) +$$
$$+ \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}\big(\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle\big) + \langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle - \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(3)}|k\nu\rangle \equiv 0.$$

U poslednjoj relaciji je potrebno odrediti dejstvo hamiltonijana $\hat{H}_0$ na odgovarajuće talasne funkcije, pa se za rezultat dobija:

$$\sum_{\mu}\delta_{k\nu,k\mu}(E_k^{(0)}-E_k^{(0)})\delta_{\mu',\mu}+\sum_{l\neq k}c_{k\nu,l}(E_l^{(0)}-E_k^{(0)})\langle k\mu'|l\rangle+\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle-\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\cdot$$
$$\cdot E_{k\nu}^{(2)}\langle k\mu'|k\mu\rangle+\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}\langle k\mu'|k\nu\rangle=0.$$

Prvi član ovog izraza je identički jednak nuli, a drugi član nestaje zbog uslova ortogonalnosti talasnih funkcija, pa se dobija nešto jednostavnija forma:

$$\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle-\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}E_{k\nu}^{(2)}\delta_{\mu',\mu}+\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}\delta_{\mu',\nu}=0,$$
$$\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}E_{k\mu'}^{(2)}\delta_{\mu',\mu}-\beta_{k\nu,k\mu'}E_{k\nu}^{(2)}+\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}\delta_{\mu',\nu}=0,$$
$$\beta_{k\nu,k\mu'}E_{k\mu'}^{(2)}-\beta_{k\nu,k\mu'}E_{k\nu}^{(2)}+\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}\delta_{\mu',\nu}=0.$$

Prisustvo Kronekerovog simbola u prethodnoj relaciji ukazuje na to da su moguća dva različita slučaja. Prvi se odnosi na $\mu'=\nu$ i daje popravku za energiju srazmernu λ^3:

$$\beta_{k\nu,k\nu}E_{k\nu}^{(2)}-\beta_{k\nu,k\nu}E_{k\nu}^{(2)}+\langle k\nu|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}=0, \tag{A.11}$$
$$E_{k\nu}^{(3)}=\langle k\nu|V^{(3)}|k\nu\rangle. \tag{A.12}$$

Drugi slučaj se javlja za $\mu'\neq\nu$ i daje relaciju za koeficijente $\beta_{k\nu,k\mu'}$:

$$\beta_{k\nu,k\mu'}(E_{k\mu'}^{(2)}-E_{k\nu}^{(2)})+\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle=0,$$
$$\beta_{k\nu,k\mu'}=\frac{\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle}{E_{k\nu}^{(2)}-E_{k\mu'}^{(2)}}.$$

Uvrštavanjem izraza za popravke energija $E_{k\nu}^{(2)}$ i $E_{k\mu'}^{(2)}$ prema relaciji (A.8) i smenom indeksa $\mu'\to\mu$, dobija se nešto pogodnija forma, koja glasi:

$$\beta_{k\nu,k\mu}=\frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle-\langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}. \tag{A.13}$$

Relacija (A.13) u potpunosti određuje koeficijente $\beta_{k\nu,k\mu}$, a samim tim i talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle$ (A.7):

$$|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle=|k\nu\rangle+\lambda\sum_{\mu\neq\nu}\frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle-\langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}|k\mu\rangle. \tag{A.14}$$

Upravo ova talasna funkcija se koristi u izračunavanju intenziteta štarkovskih komponenti atoma vodonika. Za određivanje koeficijenata $c_{k\nu,l}$ koji stoje uz članove srazmerne λ^3 u izrazu za $|\varphi_{k\nu}\rangle$, moraju se skalarno pomnožiti jednačina (A.5) i talasna funkcija $\langle l'|$:

$$\sum_{\mu}\delta_{k\nu,k\mu}\langle l'|\hat{H}_0-E_k^{(0)}|k\mu\rangle+\sum_{l\neq k}c_{k\nu,l}\langle l'|\hat{H}_0-E_k^{(0)}|l\rangle+\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle l'|V^{(2)}-E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle+\langle l'|V^{(3)}-$$
$$-E_{k\nu}^{(3)})|k\nu\rangle=\sum_{\mu}\delta_{k\nu,k\mu}(\langle l'|\hat{H}_0|k\mu\rangle-E_k^{(0)}\langle l'|k\mu\rangle)+\sum_{l\neq k}c_{k\nu,l}(\langle l'|\hat{H}_0|l\rangle-\langle l'|E_k^{(0)}|l\rangle)+$$
$$+\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}(\langle l'|V^{(2)}|k\mu\rangle-\langle l'|E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle)+\langle l'|V^{(3)}|k\nu\rangle-\langle l'|E_{k\nu}^{(3)}|k\nu\rangle\equiv 0.$$

Prvi član u poslednjoj relaciji je identički jednak nuli, dok će poslednji član takođe biti jednak nuli, ali zbog ortogonalnosti funkcija koje se javljaju u skalarnom proizvodu:

$$\sum_{l\neq k}c_{k\nu,l}(E_l^{(0)}-E_k^{(0)})\delta_{l',l}+\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle l'|V^{(2)}|k\mu\rangle+\langle l'|V^{(3)}|k\nu\rangle-E_{k\nu}^{(3)}\langle l'|k\nu\rangle=0,$$
$$c_{k\nu,l'}(E_{l'}^{(0)}-E_k^{(0)})+\sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle l'|V^{(2)}|k\mu\rangle+\langle l'|V^{(3)}|k\nu\rangle=0.$$

Iz prethodne relacije direktno sledi izraz za koeficijente $c_{k\nu,l}$, ali se prethodno mora izvršiti smena indeksa $l' \to l$:

$$c_{k\nu,l} = \frac{\langle l|V^{(3)}|k\nu\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \frac{\langle l|V^{(2)}|k\mu\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}.$$

Sada se pristupa skalarnom množenju jednačine (A.6) talasnom funkcijom $\langle k\mu'|$, sa ciljem da se dobiju vrednosti preostalih koeficijenata i popravka na energiju srazmerna četvrtom stepenu $E_{k\nu}^{(4)}$. Dakle, imamo sledeće:

$$\sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu} \langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} d_{k\nu,l} \langle k\mu'|\hat{H}_0 - E_k^{(0)}|l\rangle + \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \langle k\mu'|V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \cdot$$
$$\cdot \langle k\mu'|V^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\mu'|V^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)}|k\mu\rangle + \langle k\mu'|V^{(4)} - E_{k\nu}^{(4)}|k\nu\rangle = 0.$$

Kao i u prethodnim slučajevima, neophodno je zasebno napisati sve matrične elemente:

$$\sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|\hat{H}_0|k\mu\rangle - \langle k\mu'|E_k^{(0)}|k\mu\rangle\big) + \sum_{l\neq k} d_{k\nu,l} \big(\langle k\mu'|\hat{H}_0|l\rangle - \langle k\mu'|E_k^{(0)}|l\rangle\big) + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \big(\langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle -$$
$$- \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(2)}|l\rangle\big) + \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(2)}|k\mu\rangle\big) + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle -$$
$$- \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(3)}|k\mu\rangle\big) + \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle - \langle k\mu'|E_{k\nu}^{(4)}|k\nu\rangle = 0,$$

a potom dejstvovati neperturbovanim hamiltonijanom $\hat{H}_0$

$$\sum_{\mu} \varepsilon_{k\nu,k\mu} \big(E_k^{(0)} - E_k^{(0)}\big) \langle k\mu'|k\mu\rangle + \sum_{l\neq k} d_{k\nu,l} \big(E_l^{(0)} - E_k^{(0)}\big) \langle k\mu'|l\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \big(\langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \langle k\mu'|l\rangle\big) +$$
$$+ \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \langle k\mu'|k\mu\rangle\big) + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(3)} \langle k\mu'|k\mu\rangle\big) +$$
$$+ \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(4)} \langle k\mu'|k\nu\rangle = 0.$$

Prva suma u prethodnoj relaciji je identički jednaka nuli, dok druga nestaje zbog ortogonalnosti talasnih funkcija koje se javljaju u skalarnom proizvodu:

$$\sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \delta_{\mu',\mu}\big) + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \big(\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(3)} \delta_{\mu',\mu}\big) +$$
$$+ \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(4)} \delta_{\mu',\nu} = 0.$$

Kronekerovi simboli skidaju sume po indeksu μ, pa se dobija nešto jednostavniji izraz:

$$\sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \gamma_{k\nu,k\mu'} + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(3)} \beta_{k\nu,k\mu'} +$$
$$+ \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(4)} \delta_{\mu',\nu} = 0. \tag{A.15}$$

Prethodna jednakost ukazuje na postojanje dva različita slučaja, od kojih se prvi odnosi na $\mu' = \nu$, kada se dobija izraz za popravku na energiju $E_{k\nu}^{(4)}$:

$$\sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu} \langle k\nu|V^{(2)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \gamma_{k\nu,k\nu} + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(3)} \beta_{k\nu,k\nu} +$$
$$+ \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(4)} = 0.$$

Članovi koji sadrže dijagonalni koeficijent $\beta_{k\nu,k\nu}$ i nedijagonalne matrične elemente $\langle k\nu|V^{(2)}|k\mu\rangle$, identički su jednaki nuli, pa imamo:

$$E_{k\nu}^{(4)} = \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle + \gamma_{k\nu,k\nu} \langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - E_{k\nu}^{(2)} \gamma_{k\nu,k\nu} + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle,$$
$$E_{k\nu}^{(4)} = \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle + E_{k\nu}^{(2)} \gamma_{k\nu,k\nu} - E_{k\nu}^{(2)} \gamma_{k\nu,k\nu} + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle,$$
$$E_{k\nu}^{(4)} = \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l} \langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu} \langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle.$$

Ako se u dobijenu relaciju uvrste izrazi za koeficijente $b_{k\nu,l}$ (A.9) i $\beta_{k\nu,k\mu}$ (A.13), dobijamo sledeće:

$$E_{k\nu}^{(4)} = \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \sum_{l\neq k} \frac{\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} + \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}.$$

Svi operatori koji se ovde razmatraju su ermitski, pa se proizvodi matričnih elemenata mogu predstaviti i na drugačiji način:

$$\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle = \left(\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle\right)^*\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle = \left|\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2,$$
$$\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\langle k\nu|V^{(3)}|k\mu\rangle = \langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\left(\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\right)^* = \left|\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\right|^2,$$

što u mnogome pojednostavljuje izraz za popravku $E_{k\nu}^{(4)}$

$$E_{k\nu}^{(4)} = \langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \sum_{l\neq k} \frac{\left|\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} + \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\right|^2}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}. \tag{A.16}$$

Konačno su određene sve popravke na energiju koje figurišu u izrazu za $E_{k\nu}$ (A.1), pa uvrštavanjem $E_{k\nu}^{(2)}$ prema (A.8), $E_{k\nu}^{(3)}$ prema (A.12) i $E_{k\nu}^{(4)}$ prema (A.16), dobijamo:

$$E_{k\nu} = E_k^{(0)} + \lambda^2\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle + \lambda^3\langle k\nu|V^{(3)}|k\nu\rangle + \lambda^4\langle k\nu|V^{(4)}|k\nu\rangle + \lambda^4\sum_{l\neq k}\frac{\left|\langle k\nu|V^{(2)}|l\rangle\right|^2}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}} +$$
$$+ \lambda^4\sum_{\mu\neq\nu}\frac{\left|\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\right|^2}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}.$$

Ovaj izraz predstavlja obrazac na osnovu kojeg će se izračunavati sve popravke na energiju u slučaju atoma vodonika. Moguće je odrediti i koeficijente $\gamma_{k\nu,k\mu}$ koji se javljaju u relaciji za talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle$ (A.10), korišćenjem izraza (A.15) za slučaj kada je $\mu' \neq \nu$:

$$\sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle + \sum_{\mu}\gamma_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(2)}\gamma_{k\nu,k\mu'} + \sum_{\mu\neq\nu}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle - E_{k\nu}^{(3)}\beta_{k\nu,k\mu'} +$$
$$+ \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle = 0.$$

Iz suma po indeksu μ može se izdvojiti član za koji je $\mu' = \mu$. Pošto su preostali matrični elementi $\langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu\rangle$ u sumi po μ nedijagonalni i identički jednaki nuli, cela suma će nestati:

$$\sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\langle k\mu'|V^{(2)}|l\rangle + \gamma_{k\nu,k\mu'}\left(E_{k\mu'}^{(2)} - E_{k\nu}^{(2)}\right) + \sum_{\mu\neq\nu,\mu'}\beta_{k\nu,k\mu}\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu\rangle + \beta_{k\nu,k\mu'}\langle k\mu'|V^{(3)}|k\mu'\rangle -$$
$$- \beta_{k\nu,k\mu'}\langle k\nu|V^{(3)}|k\nu\rangle + \langle k\mu'|V^{(4)}|k\nu\rangle = 0.$$

Iz ove jednakosti se može u potpunosti odrediti izraz za koeficijente $\gamma_{k\nu,k\mu}$ uz prethodnu izmenu ideksa $\mu' \leftrightarrow \mu$:

$$\gamma_{k\nu,k\mu} = \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}\frac{\langle k\mu|V^{(2)}|l\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} + \sum_{\mu'\neq\nu,\mu}\beta_{k\nu,k\mu'}\frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\mu'\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} + \beta_{k\nu,k\mu}\frac{E_{k\mu}^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)}}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} + \frac{\langle k\mu|V^{(4)}|k\nu\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}}.$$

Koeficijenti $\gamma_{k\nu,k\mu}$ mogu se prikazati i na drugačiji način:

$$\gamma_{k\nu,k\mu} = \sum_{l\neq k}\frac{\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}\cdot\frac{\langle k\mu|V^{(2)}|l\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} + \sum_{\mu'\neq\nu,\mu}\frac{\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu'\rangle}\cdot\frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\mu'\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} +$$
$$+ \frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}\cdot\frac{E_{k\mu}^{(3)} - E_{k\nu}^{(3)}}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}} + \frac{\langle k\mu|V^{(4)}|k\nu\rangle}{E_{k\nu}^{(2)} - E_{k\mu}^{(2)}}.$$

U radu [1] koeficijent $\gamma_{k\nu,k\mu}$ ne sadrži pretposlednji član, jer se on verovatno zanemaruje kao mala veličina višeg reda. Dakle, ako se uzme u obzir da su operatori ermitski i da su popravke energije $E_{k\nu}^{(2)}$ date jednačinom (A.8), za $\gamma_{k\nu,k\mu}$ dobijamo:

$$\gamma_{k\nu,k\mu} = \sum_{l\neq k}\frac{\langle k\mu|V^{(2)}|l\rangle\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle}{\left(E_k^{(0)} - E_l^{(0)}\right)\left(\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle\right)} + \sum_{\mu'\neq\nu,\mu}\frac{\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu'\rangle}\cdot$$
$$\cdot\frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\mu'\rangle}{\left(\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle\right)} + \frac{\langle k\mu|V^{(4)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}.$$

Pošto su na ovaj način određeni i izrazi za koeficijente $\gamma_{k\nu,k\mu}$, uz rezultate za koeficijente $\beta_{k\nu,k\mu}$ i $b_{k\nu,l}$ lako se pronalazi relacija za $|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle$. Prethodno je potrebno izdvojiti član sa dijagonalnim koeficijentom $\gamma_{k\nu,k\nu}$, jer je poslednja relacija dobijena u slučaju kada je $\nu \neq \mu$:

$$|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = |k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2\gamma_{k\nu,k\nu}|k\nu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle,$$

$$|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = |k\nu\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{\mu\neq\nu} |\beta_{k\nu,k\mu}|^2|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \beta_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{\mu} \gamma_{k\nu,k\mu}|k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} b_{k\nu,l}|l\rangle.$$

Konačno dobijamo izraz za talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle$, koji glasi:

$$|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle = |k\nu\rangle - \frac{\lambda^2}{2} \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\left|\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle\right|^2}{\left(\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle\right)^2}|k\nu\rangle + \lambda \sum_{\mu\neq\nu} \frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle}|k\mu\rangle +$$

$$+ \lambda^2 \sum_{\mu\neq\nu} \Bigg[\sum_{l\neq k} \frac{\langle k\mu|V^{(2)}|l\rangle\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle}{\left(E_k^{(0)} - E_l^{(0)}\right)\left(\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle\right)} + \sum_{\mu'\neq\nu,\mu} \frac{\langle k\mu'|V^{(3)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu'|V^{(2)}|k\mu'\rangle} \cdot$$

$$\cdot \frac{\langle k\mu|V^{(3)}|k\mu'\rangle}{\left(\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle\right)} + \frac{\langle k\mu|V^{(4)}|k\nu\rangle}{\langle k\nu|V^{(2)}|k\nu\rangle - \langle k\mu|V^{(2)}|k\mu\rangle} \Bigg] |k\mu\rangle + \lambda^2 \sum_{l\neq k} \frac{\langle l|V^{(2)}|k\nu\rangle}{E_k^{(0)} - E_l^{(0)}}|l\rangle.$$

Može se uočiti da talasna funkcija određena sa tačnošću do na drugi stepen malog parametra λ ne zavisi samo od matričnih elemenata operatora perturbacije $V^{(2)}$, nego i od matričnih elemenata operatora $V^{(3)}$ i $V^{(4)}$. Iako smo odredili izraz za talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(2)}\rangle$, u ovom radu za izračunavanje intenziteta štarkovskih komponenti, koristimo isključivo talasnu funkciju $|\varphi_{k\nu}^{(1)}\rangle$.

Dodatak B

Određivanje popravke na energiju usled kvadratičnog Štarkovog efekta

U ovom dodatku je prikazano izračunavanje popravke na energiju atoma vodonika kada se on nalazi u konstantnom spoljašnjem električnom polju i to primenom metoda koji su razvili Švarcšild, Epštajn i Šredinger. Osnovni cilj ovog proračuna je pronalaženje popravke na energiju koja je posledica kvadratičnog Štarkovog efekta.

B.1 Izvođenje popravke na energiju za atom u konstantnom spoljašnjem električnom polju

Razmatranje simetrije

Za proizvoljan atom sa Z elektrona koji se nalazi u homogenom spoljašnjem električnom polju $\vec{K} = K \cdot \vec{e_z}$, nerelativistička Šredingerova jednačina je oblika:

$$(\hat{H}_0 + \hat{W})\psi = E\psi,$$

gde je $\hat{H}_0$ hamiltonijan za atom van spoljašnjeg električnog polja, a $\hat{W}$ operator perturbacije. Operator perturbacije zavisi kako od primenjenog električnog polja, tako i od ukupnog dipolnog momenta atoma $\vec{D}$:

$$\hat{W} = -\vec{K} \cdot \vec{D}, \quad \text{gde je} \quad \vec{D} = -e\sum_{i=1}^{N} \vec{r}_i.$$

Svojstveni problem operatora $\hat{H}_0$ znamo da rešimo:

$$\hat{H}_0 u^{(0)} = E^{(0)} u^{(0)}, \quad \text{gde je} \quad \hat{H}_0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m_e} \cdot p_i^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N,).$$

Svojstvene talasne funkcije $u^{(0)}$ se koriste da bi se pokazalo da je očekivana vrednost potencijala perturbacije $\hat{W}$ u opštem slučaju uvek jednaka nuli:

$$\overline{\hat{W}} \equiv \langle u^{(0)} | \hat{W} | u^{(0)} \rangle = \int_{\tau} \mathrm{d}\tau \left(u^{(0)}\right)^* \cdot \hat{W} \cdot u^{(0)}. \tag{B.1}$$

Pri inverziji koordinata i-tog elektrona u odnosu na atomsko jezgro ($\vec{r}_i \to -\vec{r}_i$), bez izmene spinske talasne funkcije, hamiltonijan $\hat{H}_0$ ostaje nepromenjen u aproksimaciji centralnog polja $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \ldots, \vec{r}_N,)$. Pri tome svojstvene talasne funkcije $u^{(0)}$ mogu, a i ne moraju da menjaju znak što zavisi od toga da li su pozitivne ili negativne parnosti. U oba slučaja proizvod $\left(u^{(0)}\right)^* \cdot u^{(0)}$ ne menja znak pri inverziji koordinata. Pošto operator perturbacije $\hat{W}$ pri inverziji koordinata menja znak, prostorni integral (B.1) identički je jednak nuli, zbog integracije neparne funkcije u simetričnim granicama. Sličan zaključak sledi i za matrične elemente operatora perturbacije $\hat{W}$ za prelaz $|u_a^{(0)}\rangle \to |u_b^{(0)}\rangle$. Samo ako stanja $|a\rangle$ i $|b\rangle$ imaju suprotne parnosti, odgovarajući matrični element će biti različit od nule:

$$\langle u_a^{(0)} | \hat{W} | u_b^{(0)} \rangle \neq 0.$$

U složenim atomima, stanja sa različitom parnošću imaju različite energije $E^{(0)}$. Perturbacija prvog reda primenjena na operator $\hat{W}$ ne daje ni pomeranje ni cepanje energetskih nivoa, jer je $\overline{\hat{W}} = 0$. Za slaba spoljašnja električna polja, energija interakcije koja pomera i cepa energetske nivoe $E^{(0)}$ određena je teorijom perturbacije drugog reda. Ta popravka energije je proporcionalna kvadratu jačine spoljašnjeg polja ($\sim K^2$), a pojava se naziva kvadratičnim Štarkovim efektom.

Međutim, odstupanje od ovog pravila je karakteristično za one energetske nivoe kod atoma vodonika, koji su degenerisani po orbitalnom kvantnom broju l. U nerelativističkoj aproksimaciji, energijski nivoi atoma vodonika kao i atoma vodonikovog tipa su degenerisana po kvantnom broju l, jer za jedan određen kvantni broj n postoji ukupno n podnivoa ($l = 0, 1, \ldots, n-1$) sa istom energijom (van spoljašnjeg polja). Svaki od ovih podnivoa ima različitu parnost, određenu relacijom:

$$\pi_l = (-1)^l,$$

gde je $\pi_l = 1$ parno, a $\pi_l = -1$ neparno stanje. Zbog toga perturbacija $\hat{W}$ otklanja degeneraciju nivoa već u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije. U tom slučaju su svojstvene talasne funkcije atoma vodonikovog tipa u spoljašnjem homogenom električnom polju, linearna superpozicija svojstvenih talasnih funkcija $|u^{(0)}\rangle$ za slučaj bez polja, pri čemu se superponiraju funkcije $|u^{(0)}\rangle$ za različite vrednosti l. Popravka na energiju je proporcionalna spoljašnjem električnom polju ($\sim K$), a pojava se naziva linearnim Štarkovim efektom.

Linearan Štarkov efekat

Kod atoma vodonikovog tipa, moguće je dobiti linearan Štarkov efekat na osnovu teorije perturbacije za degenerisane nivoe u sfernom koordinatnom sistemu. Isti rezultat se može dobiti i u paraboličkom koordinatnom sistemu. Šredingerova jednačina za atom vodonikovog tipa van spoljašnjeg polja u nerelativističkom slučaju, rešena je u paraboličkom koordinatnom sistemu u prvom delu ovog rada. Pošto se mogućnost razdvajanja promenljivih javlja i u prisustvu spoljašnjeg električnog polja, možemo koristiti neke od rezultata koje smo dobili pri rešavanju Šredingerove jednačine za atom vodonikovog tipa van spoljašnjeg polja.

Šredingerova jednačina za atom vodonikovog tipa u prisustvu spoljašnjeg homogenog električnog polja $\vec{K} = K\vec{e_z}$ u nerelativističkom slučaju glasi:

$$\begin{aligned}
&(\hat{H}_0 + \hat{W})\psi = E\psi, \\
&\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z\cdot e^2}{r} + e\vec{r}\cdot\vec{K}\right)\psi = E\psi, \\
&\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta\psi + \left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z\cdot e^2}{r} - e\vec{r}\cdot\vec{K}\right)\psi = 0, \\
&\Delta\psi + \frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E + \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z\cdot e^2}{r} - e\vec{r}\cdot\vec{K}\right)\psi = 0.
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Sve članove koji figurišu u prethodnoj diferencijalnoj jednačini, neophodno je izraziti preko paraboličkih koordinata ξ, η i φ. Laplasov operator izražen preko paraboličkih koordinata dat je relacijom (1.5) i ima sledeći oblik:

$$\Delta = \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.$$

Intenzitet vektora položaj elektrona r dat je relacijom (1.6):

$$r = \frac{1}{2}(\xi+\eta).$$

Preostalo je još da se odredi oblik operatora interakcije u paraboličkim koordinatama. Zbog jednostavnijeg računa, koordinatni sistem postavljamo tako da se z-osa poklapa sa pravcem spoljašnjeg električnog polja, odnosno:

$$\vec{K} = K\cdot\vec{e_z}.$$

U tom slučaju operator perturbacije $\hat{W}$ postaje:

$$\begin{aligned}
\hat{W} &= e\vec{r}\cdot\vec{K} = eK\cdot(x\vec{e_x} + y\vec{e_y} + z\vec{e_z})\vec{e_z}, \\
\hat{W} &= ez\cdot K = eK\cdot\frac{1}{2}(\xi-\eta).
\end{aligned}$$

Na ovaj način smo odredili sve članove koji figurišu u diferencijalnoj jednačini (B.2), pa njihovim uvrštavanjem dobijamo:

$$\frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{4}{\xi+\eta}\cdot\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{\xi\eta}\cdot\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{2m_e}{\hbar^2}\left(E+\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{2Z\cdot e^2}{\xi+\eta}-\frac{1}{2}eK(\xi-\eta)\right)\psi=0.$$

Množenjem prethodne jednačine članom $\frac{1}{4}(\xi+\eta)$, dobija se:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{4}\frac{\xi+\eta}{\xi\eta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\psi=0,$$

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\psi=0.$$

Kao što je to bio slučaj kod rešavanja Šredingerove jednačine za atom vodonikovog tipa van spoljašnjeg polja, tako i u slučaju prisustva spoljašnjeg električnog polja, možemo talasnu funkciju tražiti u obliku:

$$\psi(\xi,\eta,\varphi)=u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi).$$

Uvrštavanjem poslednje relacije u Šredingerovu jednačinu, imamo:

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)}{\partial\xi}\right)+\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)}{\partial\varphi^2}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\right.$$
$$\left.+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)=0,$$

odnosno,

$$v(\varphi)\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\xi}\right)+v(\varphi)\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\eta}\right)+u(\xi,\eta)\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2v(\varphi)}{\partial\varphi^2}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\right.$$
$$\left.+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)=0.$$

Potrebno je poslednju relaciju transformisati tako da sa jedne strane znaka jednakosti budu samo članovi koji zavise od promenljivih ξ i η, a sa druge članovi koji zavise od promenljive φ. U tom cilju delimo obe strane jednačine funkcijom $u(\xi,\eta)\cdot v(\varphi)$:

$$\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{1}{v(\varphi)}\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2v(\varphi)}{\partial\varphi^2}+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\right.$$
$$\left.+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)=0.$$

Član koji sadrži funkciju $v(\varphi)$ prebacujemo na desnu stranu jednačine:

$$\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)=$$
$$=-\frac{1}{v(\varphi)}\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)\frac{\partial^2v(\varphi)}{\partial\varphi^2}.$$

Da bi se u potpunosti ostvarilo razdvajanje promenljivih, neophodno je prethodnu jednačinu pomnožiti članom:

$$4\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)^{-1}=4\left(\frac{\xi+\eta}{\xi\eta}\right)^{-1}=4\cdot\frac{\xi\eta}{\xi+\eta}.$$

Na taj način dobijamo:

$$4\cdot\frac{\xi\eta}{\xi+\eta}\cdot\left[\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\right]=-\frac{1}{v(\varphi)}\frac{\partial^2v(\varphi)}{\partial\varphi^2}\equiv m^2,$$

gde je $m>0$. Pošto leva strana jednačine zavisi samo od promenljivih ξ i η, a desna od promenljive φ, obe strane moraju biti jednake konstanti koja je i u ovom slučaju označena sa m^2. Ovim postupkom su razdvojene promenljive u Šredingerovoj jednačini, što znači da se posebno rešava zavisnost od promenljivih ξ i η, a posebno od φ.

Rešavanje dela jednačine zavisnog od promenljive φ

Prvo ćemo posmatrati desnu stranu jednačine, koja zavisi samo od promenljive φ. Parcijalni izvodi su zamenjeni totalnim izvodima, jer funkcija zavisi samo od jedne promenljive. Diferencijalna jednačina ima sledeći oblik:

$$-\frac{1}{v(\varphi)}\frac{\mathrm{d}^2 v(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} = m^2,$$
$$\frac{\mathrm{d}^2 v(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} = -m^2 v(\varphi),$$
$$\frac{\mathrm{d}^2 v(\varphi)}{\mathrm{d}\varphi^2} + m^2 v(\varphi) = 0.$$

Dobija se homogena diferencijalna jednačina drugog reda sa konstantnim koeficijentima, a rešenje ove diferencijalne jednačine je:

$$v(\varphi) = \exp(\pm i m\varphi), \qquad m \geq 0.$$

Na ovaj način je određena zavisnost funkcije $v(\varphi)$ od promenljive φ. Trebalo bi uočiti da deo talasne funkcije koji zavisi od promenljive φ ne menja svoj oblik u prisustvu spoljašnjeg električnog polja, odnosno jednak je funkciji $v(\varphi)$ koja je dobijena rešavanjem Šredingerove jednačine za atom vodonikovog tipa van spoljšnjeg polja (1.10). Fizički, to je posledica očuvanja aksijalne simetrije.

Rešavanje dela jednačine zavisnog od promenljivih ξ i η

Preostalo je da posmatramo levu stranu diferencijalne jednačine, koja zavisi od promenljivih ξ i η i ima oblik:

$$4\cdot\frac{\xi\eta}{\xi+\eta}\cdot\left[\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u(\xi,\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u(\xi,\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{Z\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\right]=m^2,$$

Dobijena diferencijalna jednačina zavisi od obe promenljive ξ i η, pa je pogodno izvršiti transformaciju koja će razdvojiti promenljive i time olakšati rešavanje diferencijalne jednačine. U tom cilju ćemo naelektrisanje jezgra Z predstaviti kao zbir dva cela broja:

$$Z = Z_1 + Z_2,$$

gde Z_1 i Z_2 ne moraju biti međusobno jednaki. Takođe se funkcija $u(\xi,\eta)$, predstavlja kao proizvod dve funkcije:

$$u(\xi,\eta) = u_1(\xi)\cdot u_2(\eta).$$

Uzimajući prethodne relacije u obzir, dobijamo:

$$4\cdot\frac{\xi\eta}{\xi+\eta}\cdot\left[\frac{1}{u_1(\xi)\cdot u_2(\eta)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u_1(\xi)\cdot u_2(\eta)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u_1(\xi)\cdot u_2(\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u_1(\xi)\cdot u_2(\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\cdot\right.\right.$$
$$\left.\left.\cdot(\xi+\eta)+\frac{(Z_1+Z_2)\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\right]=m^2,$$

odnosno,

$$4\cdot\frac{\xi\eta}{\xi+\eta}\cdot\left[\frac{1}{u_1(\xi)}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial u_1(\xi)}{\partial\xi}\right)+\frac{1}{u_2(\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial u_2(\eta)}{\partial\eta}\right)+\frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{(Z_1+Z_2)\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\right.\right.$$
$$\left.\left.-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)\right]=m^2.$$

Parcijalni izvodi se mogu zameniti totalnim izvodima, jer funkcije $u_1(\xi)$ i $u_2(\eta)$ zavise od jedne promenljive:

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right)+\frac{1}{u_2(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right)+\frac{m_\mathrm{e}}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E(\xi+\eta)+\frac{(Z_1+Z_2)\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0}-\frac{1}{4}eK(\xi^2-\eta^2)\right)=$$
$$=\frac{1}{4}\left(\frac{1}{\xi}+\frac{1}{\eta}\right)m^2.$$

Grupisanjem članova koji zavise samo od promenljive ξ i članova koji zavise samo od promenljive η, dobija se:

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) - \frac{1}{4}\frac{m^2}{\xi} + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{Z_1\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{1}{4}eK\xi^2\right) + \frac{1}{u_2(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) - \frac{1}{4}\frac{m^2}{\eta} + \\ + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta + \frac{Z_2\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} + \frac{1}{4}eK\eta^2\right) = 0,$$

odnosno,

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{Z_1\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\xi} - \frac{1}{4}eK\xi^2\right) + \frac{1}{u_2(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) + \\ + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta + \frac{Z_2\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\eta} + \frac{1}{4}eK\eta^2\right) = 0.$$

Poslednja jednačina je zadovoljena samo ako su i član koji zavisi od promenljive ξ i član koji zavisi od promenljive η, jednaki nuli:

$$\frac{1}{u_1(\xi)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{Z_1\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\xi} - \frac{1}{4}eK\xi^2\right) = 0,$$
$$\frac{1}{u_2(\eta)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta + \frac{Z_2\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\eta} + \frac{1}{4}eK\eta^2\right) = 0,$$

odnosno,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{Z_1\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\xi} - \frac{1}{4}eK\xi^2\right)u_1(\xi) = 0, \tag{B.3}$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta + \frac{Z_2\cdot e^2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\eta} + \frac{1}{4}eK\eta^2\right)u_2(\eta) = 0. \tag{B.4}$$

Na ovaj način su dobijene dve diferencijalne jednačine za određivanje funkcija $u_1(\xi)$ i $u_2(\eta)$. Pored toga, ove jednačine su potpuno istog oblika i razlikuju se samo u predznaku poslednjeg člana koji zavisi od jačine spoljašnjeg električnog polja K. Diferencijalne jednačine (B.3) i (B.4) se za $K = 0$ svode na relacije (1.16) i (1.17):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi + \frac{e^2Z_1}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2\hbar^2}{4m_e\xi}\right)u_1(\xi) = 0,$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta + \frac{e^2Z_2}{4\pi\varepsilon_0} - \frac{m^2\hbar^2}{4m_e\eta}\right)u_2(\eta) = 0,$$

a rešenja ovih diferencijalnih jednačina (1.31) i (1.32) smo odredili u prvom delu ovog rada prilikom rešavanja Šredingerove jednačine za atom vodonikovog tipa van spoljašnjeg polja. Međutim, za slučaj atoma vodonikovog tipa u spoljašnjem električnom polju nećemo rešavati diferencijalne jednačine (B.3) i (B.4), već ćemo primenom teorije perturbacije pronaći izraze za energiju u prvoj i drugoj aproksimaciji.

Popravka $Z^{(1)}$

Diferencijalne jednačine (B.3) i (B.4) se mogu zapisati i u sledećem transformisanom obliku:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\xi\frac{\mathrm{d}u_1(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\xi - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\xi} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(Z_1 - \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\xi^2\right)\right)u_1(\xi) = 0,$$
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\left(\eta\frac{\mathrm{d}u_2(\eta)}{\mathrm{d}\eta}\right) + \frac{m_e}{\hbar^2}\left(\frac{1}{2}E\eta - \frac{\hbar^2}{m_e}\frac{1}{4}\frac{m^2}{\eta} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(Z_2 + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\eta^2\right)\right)u_2(\eta) = 0.$$

Ove relacije ukazuju da se u prisustvu spoljašnjeg električnog polja javlja dodatna interakcija koja menja vrednost Z_1 i Z_2, pa se prema teoriji perturbacija mogu tražiti popravke na ove veličine. Primena teorije perturbacija je opravdana samo u slučaju kada je interakcija perturbacije dovoljno mala. Prvo će biti određena popravka za Z_1. Za dovoljno slabo električno polje K, član:

$$+\frac{1}{4}\frac{m_e}{\hbar^2}\cdot eK\xi^2,$$

se može smatrati malom perturbacijom, pa se po teoriji perturbacije veličina Z_1 može u prvoj aproksimaciji tražiti u obliku $Z_1^{(1)} = Z_1^{(0)} + Z_1^{(1)}$. Veličina $Z_1^{(0)}$ predstavlja odgovarajuću veličinu Z_1 za atom vodonikovog tipa u slučaju odsustva spoljašnjeg električnog polja, a dat je relacijom (1.35):

$$Z_1^{(0)} = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2 \varepsilon}{e^2 m_e}\left(n_1 + \frac{m+1}{2}\right),$$

$$Z_1^{(0)} = a_0 \varepsilon\left(n_1 + \frac{m+1}{2}\right), \quad \text{jer je} \quad a_0 = 4\pi\varepsilon_0 \frac{\hbar^2}{e^2 m_e}. \tag{B.5}$$

Popravka $Z_1^{(1)}$ se nalazi prema poznatoj relaciji teorije perturbacije, kao:

$$Z_1^{(1)} = \langle u_1^{(0)}(\xi)| + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\xi^2 |u_1^{(0)}(\xi)\rangle.$$

U matričnom elementu figuriše svojstvena talasna funkcija neperturbovanog stanja $u_1^{(0)}(\xi)$, koja je poznata i data relacijom (1.31):

$$u_1^{(0)}(\xi) = C_1 u_1(\xi) = C_1 \xi^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n \xi) \cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n \xi),$$

gde je veličina ε određena relacjom (1.21)

$$\varepsilon_n = \sqrt{-\frac{2m_e E}{\hbar^2}}. \tag{B.6}$$

Može se primetiti da se matrični element određuje samo korišćenjem dela svojstvene talasne funkcije $\psi(\xi, \eta, \varphi)$ koji zavisi od promenljive ξ. Ovo je razumljivo, jer perturbacioni član zavisi samo od ξ, a ne i od ostalih koordinata. Međutim, mora se voditi računa o tome da talasna funkcija koja se koristi (u ovom slučaju $u_1^{(0)}(\xi)$) bude normirana, što se postiže izračunavanjem koeficijenta C_1. U cilju dobijanja C_1 krećemo od uslova normiranja:

$$\int_0^\infty (u_1^{(0)}(\xi))^* u_1^{(0)}(\xi) \cdot \mathrm{d}\xi = 1,$$

$$C_1 C_1^* \int_0^\infty u_1^*(\xi) u_1(\xi) \cdot \mathrm{d}\xi = 1.$$

S obzirom da je $u_1(\xi)$ realna funkcija, imamo:

$$|C_1|^2 \int_0^\infty u_1^2(\xi) \cdot \mathrm{d}\xi = 1.$$

Integral koji figuriše u poslednjem izrazu je već određen relacijom (1.46) i iznosi:

$$\int_0^\infty u_1^2(\xi) \cdot \mathrm{d}\xi = \frac{[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1} \cdot n_1!}.$$

Na taj način za konstantu C_1 dobijamo:

$$|C_1|^2 \frac{[(n_1+m)!]^3}{\varepsilon_n^{m+1} \cdot n_1!} = 1,$$

odnosno,

$$C_1 = \frac{\sqrt{\varepsilon_n^{m+1} \cdot n_1!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}} = \frac{\sqrt{n_1!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}} \cdot \varepsilon_n^{\frac{m+1}{2}}.$$

Dakle, funkcija $u_1^{(0)}(\xi)$ ima oblik:

$$u_1^{(0)}(\xi) = \frac{\sqrt{n_1!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}} \cdot \varepsilon_n^{\frac{m+1}{2}} \cdot \xi^{\frac{m}{2}} \cdot \exp(-\frac{1}{2}\varepsilon_n \xi) \cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n \xi).$$

Uzimajući u obzir relaciju za funkciju $u_1^{(0)}(\xi)$, pristupamo pronalaženju prve popravke za Z_1:

$$Z_1^{(1)} = \langle u_1^{(0)}(\xi)|\frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\xi^2|u_1^{(0)}(\xi)\rangle = \int_0^\infty (u_1^{(0)}(\xi))^* \cdot \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\xi^2 \cdot u_1^{(0)}(\xi)\cdot \mathrm{d}\xi,$$

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\int_0^\infty (u_1^{(0)}(\xi))^2 \cdot \xi^2 \cdot \mathrm{d}\xi,$$

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\int_0^\infty \frac{n_1!}{[(n_1+m)!]^3}\cdot \varepsilon_n^{m+1}\cdot \xi^{m+2}\cdot \exp(-\varepsilon_n\xi)\cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi)\cdot L_{n_1+m}^m(\varepsilon_n\xi)\cdot \mathrm{d}\xi.$$

Uvođenjem smene promenljive $x = \varepsilon_n\xi$, prethodni izraz postaje:

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{n_1!}{[(n_1+m)!]^3}\cdot \varepsilon_n^{m+1}\int_0^\infty x^{m+2}\varepsilon_n^{-(m+2)}\cdot \exp(-x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)\cdot \frac{1}{\varepsilon_n}\cdot \mathrm{d}x,$$

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{n_1!}{[(n_1+m)!]^3}\cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2}\int_0^\infty x^{m+2}\cdot \exp(-x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)\cdot \mathrm{d}x.$$

Integral u poslednjoj jednakosti se prema (1.41) može zapisati kao $J_{n_1+m,n_1+m}^m(2)$:

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{n_1!}{[(n_1+m)!]^3}\cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot J_{n_1+m,n_1+m}^m(2),$$

a vrednost mu je data relacijom (3.8)

$$J_{n_1+m,n_1+m}^m(2) = \frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)].$$

U tom slučaju se za prvu popravku $Z_1^{(1)}$ dobija:

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{n_1!}{[(n_1+m)!]^3}\cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot\frac{[(n_1+m)!]^3}{n_1!}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)],$$

$$Z_1^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)]. \tag{B.7}$$

Analogno se dobija i prva popravka za Z_2, samo je predznak suprotan, jer je interakcija perturbacije u ovom slučaju:

$$-\frac{1}{4}\frac{m_e}{\hbar^2}\cdot eK\xi^2.$$

Prva popravka $Z_2^{(1)}$ je data relacijom:

$$Z_2^{(1)} = \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_2^2+6n_2(m+1)+(m+1)(m+2)]. \tag{B.8}$$

Na ovaj način su nađeni svi članovi koji figurišu u izrazu za $Z_1^{(\mathrm{I})}$ i $Z_2^{(\mathrm{I})}$:

$$Z_1^{(\mathrm{I})} = Z_1^{(0)} + Z_1^{(1)} = a_0\varepsilon_n\left(n_1+\frac{m+1}{2}\right) + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)],$$

$$Z_2^{(\mathrm{I})} = Z_2^{(0)} + Z_2^{(1)} = a_0\varepsilon_n\left(n_2+\frac{m+1}{2}\right) - \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_2^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)].$$

Konačno se za veličinu Z u prvoj aproksimaciji teorije perturbacije dobija:

$$Z \equiv Z^{(\mathrm{I})} = Z_1^{(\mathrm{I})} + Z_2^{(\mathrm{I})},$$

$$Z = a_0\varepsilon_n(n_1+n_2+m+1) + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6(n_1^2-n_2^2)+6(m+1)(n_1-n_2)],$$

$$Z = a_0\varepsilon_n(n_1+n_2+m+1) + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[n_1^2-n_2^2+(m+1)(n_1-n_2)].$$

Poslednja relacija se neznatno transformiše da bi se uveo glavni kvantni broj $n = n_1 + n_2 + m + 1$:

$$Z = a_0\varepsilon_n \cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot [(n_1 + n_2)(n_1 - n_2) + (m+1)(n_1 - n_2)],$$
$$Z = a_0\varepsilon_n \cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot (n_1 + n_2 + m + 1)(n_1 - n_2),$$
$$Z = a_0\varepsilon_n \cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot n(n_1 - n_2).$$

Poslednji izraz daje vezu između Z i ε_n koje je direktno vezano za energiju relacijom (B.6). Rešenje ove jednačine se traži do članova koji su proporcionalni jačini spoljašnjeg električnog polja ($\sim K$). Najpre izražavamo ε_n iz prvog sabirka:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{na_0}\left[Z - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot n(n_1 - n_2)\right],$$
$$\varepsilon_n = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{ea_0} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot (n_1 - n_2). \tag{B.9}$$

Poznato je da je vrednost ε_n u nultoj aproksimaciji jednaka onoj vrednosti koja karakteriše veličinu ε_n u slučaju atoma vodonikovog tipa u odsustvu spoljašnjeg polja:

$$\varepsilon_n^{(0)} = \frac{Z}{na_0}. \tag{B.10}$$

Vrednost za ε_n u prvoj aproksimaciji se nalazi pomoću relacije (B.9), kada se u nju uvrsti nulta aproksimacija, odnosno $\varepsilon_n^{(0)}$:

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{ea_0} \cdot \frac{1}{(\varepsilon^{(0)})^2} \cdot (n_1 - n_2),$$
$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{ea_0} \cdot \frac{n^2a_0^2}{Z^2} \cdot (n_1 - n_2),$$
$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n^2a_0}{Z^2} \cdot (n_1 - n_2). \tag{B.11}$$

Dobijena vrednost za $\varepsilon_n^{(1)}$ se koristi za izračunavanje energije. Veza između energije E i ε_n je data relacijom (B.6):

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\varepsilon_n^{(1)})^2,$$
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n^2a_0}{Z^2} \cdot (n_1 - n_2)\right]^2,$$
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\left(\frac{Z}{na_0}\right)^2 - 2\frac{Z}{na_0}\frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n^2a_0}{Z^2} \cdot (n_1 - n_2) + \left(\frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n^2a_0}{Z^2} \cdot (n_1 - n_2)\right)^2\right].$$

Poslednji član se zanemaruje jer sadrži kvadrat jačine električnog polja, a zadržavaju se samo članovi proporcionalni jačini električnog polja:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z^2}{n^2a_0^2} - 3\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n}{Z} \cdot (n_1 - n_2)\right].$$

Pogodno je član ispred zagrade transformisati tako da sadrži Borov radijus a_0:

$$E = -\frac{4\pi\varepsilon_0}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{e^2}\frac{\hbar^2}{m_e}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n}{Z} \cdot (n_1 - n_2)\right],$$
$$E = -\frac{e^2a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e} \cdot \frac{n}{Z} \cdot (n_1 - n_2)\right]. \tag{B.12}$$

Ako spoljašnje električno polje potiče od najbližeg suseda, vrednost za veličinu K je data sledećom relacijom:

$$K = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_j e}{R^2}, \tag{B.13}$$

ali se mora uzeti u obzir da je ovo aproksimacija nehomogenog polja homogenim. Uvrštavanjem ove vrednosti K u relaciju (B.12), dobija se sledeća vrednost za energiju:

$$E = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_j e}{R^2}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)\right],$$
$$E = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)\right].$$

Dobijena relacija ukazuje da je energetska razlika između podnivoa sa najvećom i najmanjom energijom proporcionalna $n(n-1)$. Prema relaciji (3.13) maksimalna vrednost $n_1 - n_2$ je $(n-1)$, a minimalna $-(n-1)$

$$\Delta E = E_{\max} - E_{\min} = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot\frac{n}{Z}\cdot[(n-1)+(n-1)],$$
$$\Delta E = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot\frac{n}{Z}\cdot 2(n-1),$$
$$\Delta E \sim n(n-1).$$

Sa porastom jačine električnog polja K, pored linearnog Štarkovog efekta ($\sim K$) u popravci za energiju, javlja se i član $\sim K^2$, odnosno dolazi do mešanja nivoa sa različitim glavnim kvantnim brojevima n.

U slučaju atoma vodonika izraz za energiju (B.14) postaje:

$$E = -\frac{e^2 a_0}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot n(n_1-n_2)\right].$$

i u potpunosti se poklapa sa već dobijenom relacijom za energiju atoma vodonika $E^{(\mathrm{II})}_{n_1,n_2,m}$ (3.12).

Navedeni metod teorije perturbacije po veličini Z, a ne po energijama E prvi su uveli Švarcšild i Epštajn na osnovu stare kvantne teorije, odnosno Šredinger na bazi talasne mehanike.

Popravka $Z^{(2)}$

U slučaju kada dolazi do mešanja energetskih nivoa sa različitim vrednostima glavnog kvantnog broja n, neophodno je ispitati nedijagonalne matrične elemente $\langle n|\hat{W}|n'\rangle$ $(n \neq n')$, jer oni po teoriji perturbacije drugog reda određuju popravke $Z^{(2)} \sim K^2$.

Prvo ćemo odrediti popravku u drugoj aproksimaciji za $Z_1^{(2)}$. Ona je data relacijom:

$$Z_1^{(2)} = \sum_{n_1'\neq n_1}\frac{\left|\langle u_1^{(0)}|\frac{4\pi\varepsilon_0}{4e}\cdot K\xi^2\cdot|(u_1^{(0)})'\rangle\right|^2}{Z_1^{(0)}(n_1)-Z_1^{(0)}(n_1')} = \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\cdot K^2\cdot\sum_{n_1'\neq n_1}\frac{\left|\langle u_1^{(0)}|\xi^2|(u_1^{(0)})'\rangle\right|^2}{Z_1^{(0)}(n_1)-Z_1^{(0)}(n_1')}, \tag{B.14}$$

$$Z_1^{(2)} = \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\cdot K^2\cdot\sum_{n_1'\neq n_1}\frac{\left|\langle n|\xi^2|n'\rangle\right|^2}{Z_1^{(0)}(n_1)-Z_1^{(0)}(n_1')}. \tag{B.15}$$

Uvrštavanjem izraza za $Z_1^{(0)}(n_1)$ i $Z_1^{(0)}(n_1')$ prema relaciji (B.5), za popravku drugog reda se dobija:

$$Z_1^{(2)} = \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\cdot K^2\cdot\sum_{n_1'\neq n_1}\frac{\left|\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle\right|^2}{a_0\varepsilon_n(n_1+\frac{m+1}{2})-a_0\varepsilon_n(n_1'+\frac{m+1}{2})},$$
$$Z_1^{(2)} = \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\cdot\sum_{n_1'\neq n_1}\frac{\left|\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle\right|^2}{n_1-n_1'}.$$

Na ovom mestu ćemo odrediti za koje su vrednosti n', matrični elementi $\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle$ različiti od nule. Vrednost matričnog elementa $\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle$ je data sledećom relacijom:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle \equiv \langle u_1^{(0)}|\xi^2|(u_1^{(0)})'\rangle = \int_0^\infty \frac{\sqrt{n_1!\cdot n_1'!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_1'+m)!]^3}}\cdot\varepsilon_n^{m+1}\cdot\xi^{m+2}\cdot\exp(-\varepsilon_n\xi)\cdot L^m_{n_1+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot$$
$$\cdot L^m_{n_1'+m}(\varepsilon_n\xi)\cdot d\xi.$$

Nakon smene promenljive $x = \varepsilon_n \xi$, prethodni izraz postaje:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle = \frac{\sqrt{n_1!\cdot n_1'!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_1'+m)!]^3}}\int_0^\infty \varepsilon_n^{m+1}\cdot x^{m+2}\cdot\varepsilon_n^{-(m+2)}\cdot\exp(-x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)\cdot L_{n_1'+m}^m(x)\cdot$$

$$\cdot\frac{1}{\varepsilon_n}\cdot \mathrm{d}x = \frac{\sqrt{n_1!\cdot n_1'!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_1'+m)!]^3}}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\int_0^\infty x^{m+2}\cdot\exp(-x)\cdot L_{n_1+m}^m(x)L_{n_1'+m}^m(x)\cdot \mathrm{d}x.$$

Integral u poslednjem izrazu se prema (1.41), može zapisati kao $J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2)$, pa imamo:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle = \frac{\sqrt{n_1!\cdot n_1'!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_1'+m)!]^3}}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2).$$

Vrednost integrala $J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2)$ data je relacijom (1.42) i iznosi:

$$J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2) = (-1)^{n_1+n_1'+2m}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1'-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},$$

$$J_{n_1+m,n_1'+m}^m(2) = (-1)^{n_1+n_1'}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1'+m)!\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{n_1,n_1'\}}\binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1'-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!}.$$

Zanimaju nas samo nedijagonalni matrični elementi ($n_1 \neq n_1'$) za koje su binomni koeficijenti različiti od nule. Binomni koeficijenti su sigurno različiti od nule, ako se kvantni brojevi n_1 i n_1' razlikuju najviše za dva, odnosno ako je zadovoljena relacija:

$$n_1' \in \{n_1 \pm 1, n_1 \pm 2\}.$$

Prvo određujemo vrednost matričnog elementa $\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle$ za slučaj $n_1' = n_1 + 1$:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = \frac{\sqrt{n_1!\cdot(n_1+1)!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3\cdot[(n_1+m+1)!]^3}}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot J_{n_1+m,n_1+m+1}^m(2) = \frac{\sqrt{n_1!\cdot(n_1+1)!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}}\cdot$$
$$\cdot\frac{1}{\sqrt{[(n_1+m+1)!]^3}}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot(-1)^{n_1+n_1+1}\cdot(n_1+m)!\cdot(n_1+m+1)!\cdot$$
$$\cdot\sum_{\nu=0}^{n_1}\binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1+1-\nu}\frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},$$

odnosno,

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = -\frac{\sqrt{n_1!\cdot(n_1+1)!}}{\sqrt{(n_1+m)!\cdot(n_1+m+1)!}}\frac{1}{\varepsilon_n^2}\left[\binom{2}{0}\binom{2}{1}\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}+\binom{2}{1}\binom{2}{0}\frac{(n_1+m+1)!}{(n_1-1)!}\right],$$

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = -\frac{\sqrt{n_1!\cdot(n_1+1)!}}{\sqrt{(n_1+m)!\cdot(n_1+m+1)!}}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot\left[2\frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}+2\frac{n_1(n_1+m+1)!}{n_1(n_1-1)!}\right],$$

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = -2\frac{\sqrt{n_1!\cdot(n_1+1)!}}{\sqrt{(n_1+m)!\cdot(n_1+m+1)!}}\frac{(n_1+m+1)!}{n_1!}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[(n_1+m+2)+n_1],$$

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = -2\sqrt{(n_1+1)(n_1+m+1)}\cdot\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[2n_1+m+2]. \tag{B.16}$$

Matrični element $\langle n_1|\xi^2|n_1-1\rangle$ može da se dobije na potpuno isti način kao i prethodni, ali ako se iskoristi osobina ermitivnosti operatora ξ^2, odnosno:

$$\langle n|\xi^2|n'\rangle = \langle n'|\xi^2|n\rangle,$$

račun se može u mnogome skratiti. Matrični element $\langle n_1|\xi^2|n_1-1\rangle$ se može dobiti iz $\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle$ na sledeći način:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle = \langle n_1+1|\xi^2|n_1\rangle,$$

a potom se izvrši smena $n_1 \to n_1 - 1$. Dakle, dobijamo sledeći izraz:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1 - 1\rangle = -2\sqrt{n_1(n_1+m)} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot [2n_1 + m]. \tag{B.17}$$

Sada određujemo vrednost matričnog elementa $\langle n_1|\xi^2|n_1'\rangle$ za slučaj $n_1' = n_1 + 2$:

$$\begin{aligned}\langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle =& \frac{\sqrt{n_1! \cdot (n_1+2)!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_1+m+2)!]^3}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot J^m_{n_1+m,n_1+m+2}(2) = \frac{\sqrt{n_1! \cdot (n_1+2)!}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3}} \cdot \\ & \cdot \frac{1}{\sqrt{[(n_1+m+2)!]^3}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot (-1)^{n_1+n_1+2} \cdot (n_1+m)! \cdot (n_1+m+2)! \cdot \\ & \cdot \sum_{\nu=0}^{n_1} \binom{2}{n_1-\nu}\binom{2}{n_1+2-\nu} \frac{(m+2+\nu)!}{\nu!},\end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned}\langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle &= \frac{\sqrt{n_1! \cdot (n_1+2)!}}{\sqrt{(n_1+m)! \cdot (n_1+m+2)!}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot \binom{2}{0}\binom{2}{2} \frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}, \\ \langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle &= \frac{\sqrt{n_1! \cdot (n_1+2)!}}{\sqrt{(n_1+m)! \cdot (n_1+m+2)!}} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2} \cdot \frac{(n_1+m+2)!}{n_1!}, \\ \langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle &= \sqrt{(n_1+2)(n_1+1)(n_1+m+2)(n_1+m+1)} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2}.\end{aligned} \tag{B.18}$$

Matrični element $\langle n_1|\xi^2|n_1 - 2\rangle$ se može dobiti iz $\langle n_1|\xi^2|n_1 + 2\rangle$ na već pomenut način koji se zasniva na osobini ermitivnosti operatora ξ^2:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle = \langle n_1+2|\xi^2|n_1\rangle,$$

a potom se izvrši smena $n_1 \to n_1 - 2$. Dakle, dobijamo sledeći izraz:

$$\langle n_1|\xi^2|n_1-2\rangle = \sqrt{n_1(n_1-1)(n_1+m)(n_1+m-1)} \cdot \frac{1}{\varepsilon_n^2}. \tag{B.19}$$

Pošto su pronađeni svi neophodni matrični elementi, potrebno je sumu u formuli za popravku $Z_1^{(2)}$ (B.15) razviti:

$$\begin{aligned}Z_1^{(2)} &= \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2} \cdot \left[\frac{|\langle n_1|\xi^2|n_1-1\rangle|^2}{n_1-(n_1-1)} + \frac{|\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle|^2}{n_1-(n_1+1)} + \frac{|\langle n_1|\xi^2|n_1-2\rangle|^2}{n_1-(n_1-2)} + \frac{|\langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle|^2}{n_1-(n_1+2)}\right], \\ Z_1^{(2)} &= \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2} \cdot \left[|\langle n_1|\xi^2|n_1-1\rangle|^2 - |\langle n_1|\xi^2|n_1+1\rangle|^2 + \frac{1}{2}|\langle n_1|\xi^2|n_1-2\rangle|^2 - \frac{1}{2}|\langle n_1|\xi^2|n_1+2\rangle|^2\right].\end{aligned}$$

U poslednju relaciju se uvrštavaju izrazi za matrične elemente (B.16), (B.17), (B.18) i (B.19):

$$\begin{aligned}Z_1^{(2)} =& \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2} \cdot \left[\frac{4}{\varepsilon_n^4}(2n_1+m)^2 n_1(n_1+m) - \frac{4}{\varepsilon_n^4}(2n_1+m+2)^2(n_1+1)(n_1+m+1) + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\varepsilon_n^4}n_1(n_1-1)(n_1+m)(n_1+m-1) - \frac{1}{2\varepsilon_n^4}(n_1+2)(n_1+1)(n_1+m+2)(n_1+m+1)\right].\end{aligned}$$

Poslednja jednačina se može uprostiti izdvajanjem zajedničkih elemenata za sve sabirke i njihovim pisanjem ispred zagrade:

$$\begin{aligned}Z_1^{(2)} =& -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2} \cdot \left[-8(2n_1+m)^2 n_1(n_1+m) + 8(2n_1+m+2)^2(n_1+1)(n_1+m+1) + \right. \\ & \left. - n_1(n_1-1)(n_1+m)(n_1+m-1) + (n_1+2)(n_1+1)(n_1+m+2)(n_1+m+1)\right],\end{aligned}$$

odnosno,

$$Z_1^{(2)} = -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2} \cdot I_2. \tag{B.20}$$

Uvedena veličina I_2 predstavlja čitav izraz u zagradi, a uvodi se zbog jednostavnijeg zapisa. Naravno, i u ovom slučaju je preporučljivo što više pojednostaviti izraz za I_2, jer se time pojednostavljuje i izraz za $Z_1^{(2)}$, a on se posle koristi u daljim proračunima. Iz tog razloga se drugi član u izrazu za veličinu I_2 razvija kao kvadrat binoma, a dobija se sledeće:

$$\begin{aligned} I_2 = &- 8(2n_1+m)^2 n_1(n_1+m) + 8(2n_1+m)^2(n_1+1)(n_1+m+1) - 32(2n_1+m)(n_1+1)\cdot \\ &\cdot(n_1+m+1) + 32(n_1+1)(n_1+m+1) - n_1(n_1-1)(n_1+m)(n_1+m+1) + 2n_1\cdot \\ &\cdot(n_1-1)(n_1+m) + (n_1+2)(n_1+1)(n_1+m+2)(n_1+m+1). \end{aligned}$$

Članovi koji su se pojavili prilikom ove transformacije mogu biti međusobno grupisani, pa dalje imamo:

$$\begin{aligned} I_2 =& 8(2n_1+m)^2[(n_1+1)(n_1+m+1) - n_1(n_1+m)] + 32(2n_1+m+1)(n_1+1)(n_1+m+1) - \\ &- n_1(n_1+1)(n_1+m)(n_1+m+1) + 2n_1(n_1+m)(n_1+m+1) + 2n_1(n_1-1)(n_1+m) + \\ &+ (n_1+2)(n_1+1)(n_1+m+2)(n_1+m+1) = [8(2n_1+m)^2[n_1^2+n_1m+2n_1+m+1 - \\ &- n_1^2 - n_1m] + 32(2n_1+m+1)(n_1+1)(n_1+m+1) - (n_1+1)(n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot[(n_1+2)(n_1+m+2) - n_1(n_1+m)] + 2n_1(n_1+m)(2n_1+m), \end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned} I_2 =& 8(2n_1+m)^2(2n_1+m+1) + 32(2n_1+m+1)(n_1+1)(n_1+m+1) + (n_1+1)(n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot[n_1^2+n_1m+4n_1+2m+4-n_1^2-n_1m] + 2n_1(n_1+m)(2n_1+m). \end{aligned}$$

Daljim sređivanjem izraza se dobija:

$$\begin{aligned} I_2 =& (2n_1+m+1)[8(2n_1+m)^2 + 32(n_1+1)(n_1+m+1)] + 2(n_1+m+1)(n_1+1)(2n_1+m+2) + \\ &+ 2n_1(n_1+m)(2n_1+m) = (2n_1+m+1)[8(4n_1^2+4n_1m+m^2) + 32(n_1^2+n_1m+2n_1+m+ \\ &+ 1)] + 2(n_1+m+1)(n_1+1)(2n_1+m+2) + 2n_1(n_1+m)(2n_1+m) = (2n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+32)] + 2(n_1+m+1)(n_1+1)(2n_1+m+2) + \\ &+ 2n_1(n_1+m)(2n_1+m). \end{aligned}$$

Može se uočiti da prvi član sadrži faktor $(2n_1+m+1)$, pa se zbog toga i ostali članovi transformišu na taj način da se u njima pojavi isti ovaj faktor:

$$\begin{aligned} I_2 =& (2n_1+m+1)[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+32)] + 2(n_1+1)(n_1+m+1)(2n_1+m+ \\ &+ 1) + 2(n_1+m+1)(n_1+1) + 2n_1(n_1+m)(2n_1+m+1) - 2n_1(n_1+m) = [(2n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+32)] + (2n_1+m+1)[2n_1(n_1+m+1) + 2n_1(n_1+m)] + \\ &+ 2[(n_1+1)(n_1+m+1) - n_1(n_1+m)] = (2n_1+m+1)[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+ \\ &+ 32)] + (2n_1+m+1)[2(n_1^2+n_1m+2n_1+m+1) + 2n_1^2+n_1m] + 2[n_1^2+n_1m+2n_1+m+ \\ &+ 1 - n_1^2 - n_1m]. \end{aligned}$$

S obzirom da je izraz transformisan tako da svaki član sadrži faktor $(2n_1+m+1)$, on se može izvući ispred zagrade, a ostali sabirci dalje grupisati:

$$\begin{aligned} I_2 =& (2n_1+m+1)[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+32)] + (2n_1+m+1)[4n_1^2+4n_1m+4n_1+ \\ &+ 2m+4] + 2(2n_1+m+1) = (2n_1+m+1)\cdot[64n_1^2+64n_1m+8m^2+64n_1+32m+32+ \\ &+ 4n_1^2+4n_1m+4n_1+2m+4+2] = (2n_1+m+1)\cdot[68n_1^2+68n_1m+8m^2+68n_1+34m+36]. \end{aligned}$$

Dakle, veličina I_2 ima vrednost:

$$I_2 = (2n_1+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36].$$

Ovim postupkom smo dobili izraz za drugu popravku $Z_1^{(2)}$, koja je prema jednačini (B.20) data sledećom relacijom:

$$Z_1^{(2)} = -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot(2n_1+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36]. \tag{B.21}$$

Analogno se dobija i izraz za popravku $Z_2^{(2)}$. Predznak se ne menja, jer u ovom slučaju posmatramo kvadrat modula matričnog elementa:

$$Z_2^{(2)} = -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot(2n_2+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_2^2+2n_2m+2n_2+m)+36]. \tag{B.22}$$

Uzimajući u obzir relacije za veličinu $Z_1^{(0)}$ (B.5) i popravke $Z_1^{(1)}$ (B.7) i $Z_1^{(2)}$ (B.21), možemo dobiti izraz za vrednost veličine $Z_1^{(\mathrm{II})}$ sa tačnošću reda K^2, kao:

$$\begin{aligned}Z_1^{(\mathrm{II})} =& Z_1^{(0)} + Z_1^{(1)} + Z_1^{(2)} = a_0\varepsilon_n\left[n_1+\frac{m+1}{2}\right] + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_1^2+6n_1(m+1)+(m+1)(m+2)] - \\ &- \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot(2n_1+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36].\end{aligned}$$

Analogno se dobija izraz za $Z_2^{(\mathrm{II})}$ samo je neophodno koristiti jednačine koje daju vrednosti za veličinu $Z_2^{(0)}$ i popravke $Z_2^{(1)}$ (B.8) i $Z_2^{(2)}$ (B.22):

$$\begin{aligned}Z_2^{(\mathrm{II})} =& Z_2^{(0)} + Z_2^{(1)} + Z_2^{(2)} = a_0\varepsilon_n\left[n_2+\frac{m+1}{2}\right] - \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6n_2^2+6n_2(m+1)+(m+1)(m+2)] - \\ &- \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot(2n_2+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_2^2+2n_2m+2n_2+m)+36].\end{aligned}$$

S obzirom da je određena i vrednost za $Z_1^{(\mathrm{II})}$ i vrednost za $Z_2^{(\mathrm{II})}$, veličina Z se dobija na sledeći način:

$$\begin{aligned}Z =& Z_1^{(\mathrm{II})} + Z_2^{(\mathrm{II})} = a_0\varepsilon_n\cdot(n_1+n_2+m+1) + \frac{4\pi\varepsilon_0}{4}\frac{K}{e}\frac{1}{\varepsilon_n^2}\cdot[6(n_1^2-n_2^2)+6(n_1-n_2)(m+1)] - \\ &- \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot\big[(2n_1+m+1)\cdot[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36]+(2n_2+m+1)\cdot \\ &\cdot[8m^2+34(2n_2^2+2n_2m+2n_2+m)+36]\big].\end{aligned}$$

Uzimajući u obzir da je $n = n_1+n_2+m+1$, prethodni izraz postaje:

$$\begin{aligned}Z =& a_0\varepsilon_n\cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{\varepsilon_n^2}\cdot[(n_1-n_2)(n_1+n_2)+(n_1-n_2)(m+1)] - \frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\big[(2n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36]+(2n_2+m+1)[8m^2+ \\ &+34(2n_2^2+2n_2m+2n_2+m)+36]\big],\end{aligned}$$

odnosno,

$$Z = a_0\varepsilon_n\cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{\varepsilon_n^2}\cdot n(n_1-n_2) + Z^{(2)}. \tag{B.23}$$

U poslednjoj jednačini je uvedena oznaka za popravku $Z^{(2)}$, koja potiče od popravki srazmernih kvadratu jačine spoljašnjeg električnog polja i data je izrazom:

$$Z^{(2)} = Z_1^{(2)} + Z_2^{(2)}.$$

Ova popravka se može zapisati i u eksplicitnoj formi kao:

$$\begin{aligned}Z^{(2)} =& -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\big[(2n_1+m+1)[8m^2+34(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+36]+(2n_2+m+1)\cdot \\ &\cdot[8m^2+34(2n_2^2+2n_2m+2n_2+m)+36]\big],\end{aligned}$$

odnosno,

$$Z^{(2)} = -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2}\cdot I_3, \tag{B.24}$$

gde je veličina I_3 uvedena iz praktičnih razloga. Potrebno je adekvatno transformisati I_3, da bi se dobio što pogodniji izraz. Prvo se iz svih sabiraka koji figurišu u I_3 izvuče 2 kao zajednički član, a potom se grupišu članovi uz stepene od m:

$$\begin{aligned}I_3 =& 2\big[(2n_1+m+1)[4m^2+17(2n_1^2+2n_1m+2n_1+m)+18]+(2n_2+m+1)[4m^2+17(2n_2^2+ \\ &+2n_2m+2n_2+m)+18]\big] = 2\big[(4m^2+17m+18)(2n_1+2n_2+2m+2)+34(2n_1+m+1)\cdot \\ &\cdot(n_1m+n_1^2+n_1)+34(2n_2+m+1)(n_2m+n_2^2+n_2)\big].\end{aligned}$$

U prvom članu u zagradi figuriše glavni kvantni broj $n = n_1 + n_2 + m + 1$, a ostali se transformišu tako da i oni sadrže n. Zbog toga se trećem članu dodaje i oduzima kvantni broj n_2, a četvrtom članu kvantni broj n_1:

$$\begin{aligned} I_3 =& 2\big[2n(4m^2 + 17m + 18) + 34n_1(2n_1 + m + 1)(n_1 + m + 1 \pm n_2) + 34n_2(2n_2 + m + 1)(n_2 + m + \\ &+ 1 \pm n_1)\big] = 2\big[2n(4m^2 + 17m + 18) + 34n_1(2n_1 + m + 1)(n_1 + n_2 + m + 1) + 34n_2(2n_2 + \\ &+ m + 1)(n_1 + n_2 + m + 1) - 34n_1n_2(2n_1 + m + 1) - 34n_1n_2(2n_1 + m + 1)\big] = 2\big[2n(4m^2 + \\ &+ 17m + 18) + 34nn_1(2n_1 + m + 1) + 34nn_2(2n_2 + m + 1) - 34n_1n_2(2n_1 + 2n_2 + 2m + 2)\big]. \end{aligned}$$

Ovim postupkom je izraz doveden u takav oblik, da svaki član u zagradi sadrži glavni kvantni broj n, pa se on kao zajednički činilac može izvući ispred zagrde. Dalja transformacija se sprovodi ponovnim dodavanjem i oduzimanjem kvantnih brojeva n_1 i n_2, pa dobijamo sledeću relaciju:

$$\begin{aligned} I_3 =& 2n \cdot \big[2(4m^2 + 17m + 18) + 34n_1(2n_1 + m + 1) + 34n_2(2n_2 + m + 1) - 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[2(4m^2 + \\ &+ 17m + 18) + 34n_1(n_1 + m + 1) + 34n_1^2 + 34n_2(n_2 + m + 1) + 34n_2^2 - 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[2(4m^2 + \\ &+ 17m + 18) + 34n_1(n_1 + n_2 + m + 1) + 34n_1^2 + 34n_2(n_1 + n_2 + m + 1) + 34n_2^2 - 136n_1n_2\big]. \end{aligned}$$

U poslednjoj relaciji figuriše zbir kvadrata $n_1^2 + n_2^2$, koji se korišćenjem člana $-n_1n_2$ lako transformiše u kvadrat razlike ovih kvantnih brojeva, odnosno u $(n_1 - n_2)^2$:

$$\begin{aligned} I_3 =& 2n \cdot \big[2(4m^2 + 17m + 18) + 34n(n_1 + n_2) + 34(n_1^2 + n_2^2) - 136n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[2(4m^2 + 17m + 18) + \\ &+ 34n(n_1 + n_2 + m + 1) - 34n(m + 1) + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[8m^2 + 34(m + 1) + \\ &+ 2 + 34n^2 - 34n(m + 1) + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[34n^2 - 34(n - 1)(m + 1) + \\ &+ 8m^2 + 2 + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big]. \end{aligned}$$

Sada želimo da se oslobodimo člana koji sadrži proizvod n_1n_2, pa u tu svrhu prvi član predstavljamo kao dva sabirka i jedan od njih dalje razvijamo:

$$\begin{aligned} I_3 =& 2n \cdot \big[17n^2 + 17(n_1 + n_2 + m + 1)^2 - 34(n_1 + n_2 + m)(m + 1) + 8m^2 + 2 + 34(n_1 - n_2)^2 - \\ &- 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[17n^2 + 17(n_1 + n_2 + m + 1)(n_1 + n_2 + m) + 17(n_1 + n_2 + m + 1) - \\ &- 34(n_1 + n_2 + m)(m + 1) + 8m^2 + 2 + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big]. \end{aligned}$$

Pravilnim grupisanjem članova, dobijamo sledeću relaciju:

$$\begin{aligned} I_3 =& 2n \cdot \big[17n^2 + 17(n_1 + n_2 + m + 1)(n_1 + n_2 + m) - 17(n_1 + n_2 + m)(m + 1) + 17(n_1 + n_2 + \\ &+ m + 1) - 17(n_1 + n_2 + m)(m + 1) + 8m^2 + 2 + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big], \end{aligned}$$

odnosno,

$$\begin{aligned} I_3 =& 2n \cdot \big[17n^2 + 17(n_1 + n_2 + m + 1)(n_1 + n_2) - 17m(n_1 + n_2 + m) + 8m^2 + 19 + 34(n_1 - n_2)^2 - \\ &- 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \big[17n^2 + 17(n_1 + n_2)^2 - 17m^2 + 8m^2 + 19 + 34(n_1 - n_2)^2 - 68n_1n_2\big] = 2n \cdot \\ &\cdot \big[17n^2 + 17(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19 + 34(n_1 - n_2)^2\big]. \end{aligned}$$

Konačno je veličina I_3 dobijena u konciznijoj formi, a data je relacijom:

$$I_3 = 2n \cdot [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19].$$

Ovim postupkom smo izraz za popravku $Z^{(2)}$ dobili u pogodnijoj formi, koja je prema jednačini (B.24) data sledećom formulom:

$$Z^{(2)} = -\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{32e^2} \cdot 2n \cdot [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19],$$

$$Z^{(2)} = -\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5} \cdot \frac{n}{16} \cdot [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19].$$

Ako ovaj izraz za popravku $Z^{(2)}$ uvrstimo u jednačinu za Z (B.23), dobijamo Z sa tačnošću do na članove proporcionalne kvadratu jačine električnog polja K^2:

$$Z = a_0\varepsilon_n \cdot n + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{\varepsilon_n^2} \cdot n(n_1 - n_2) - \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5} \cdot \frac{n}{16} \cdot [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19].$$

Prethodna relacija daje vezu između veličina Z i ε_n. Veličinu ε_n koja je povezana sa energijom izražavamo iz prvog člana prethodne relacije, pa imamo:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{na_0}\left[Z - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{\varepsilon_n^2}\cdot n(n_1-n_2) + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\frac{K^2}{a_0\varepsilon_n^5}\cdot\frac{n}{16}\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19]\right],$$

$$\varepsilon_n = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{\varepsilon_n^2 a_0}\cdot(n_1-n_2) + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2}{a_0^2\varepsilon_n^5}\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19].$$

Da bismo dobili veličinu $\varepsilon_n^{(2)}$ koja je proporcionalna kvadratu jačine električnog polja K^2, neophodno je da se umesto ε_n u prethodnu jednačinu uvrsti $\varepsilon_n^{(1)}$:

$$\varepsilon_n^{(2)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{a_0}\cdot\frac{1}{(\varepsilon_n^{(1)})^2}(n_1-n_2) + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2}{a_0^2}\frac{1}{(\varepsilon_n^{(1)})^5}\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19].$$

Međutim, mora se strogo voditi računa o tome da je $\varepsilon_n^{(1)}$ linearna funkcija jačine električnog polja K, što je dato jednačinom (B.11):

$$\varepsilon_n^{(1)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0 K}{e}\cdot\frac{n^2a_0}{Z^2}\cdot(n_1-n_2) = \varepsilon_n^{(0)} - \alpha K, \tag{B.25}$$

gde je

$$\alpha = \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n^2a_0}{Z^2}\cdot(n_1-n_2). \tag{B.26}$$

Ova činjenica se mora uzeti u obzir, jer ima za posledicu to da se $\varepsilon_n^{(1)}$ ne sme u svom punom obliku uvrstiti u izraz za $\varepsilon_n^{(2)}$. Ako bi se to učinilo, $\varepsilon_n^{(2)}$ bi zavisilo od K ne samo preko kvadratnog člana već i preko viših stepena po K. Dakle, posmatramo veličinu koja figuriše u izrazu za $\varepsilon_n^{(2)}$:

$$\frac{1}{\varepsilon_n^{(1)}} = \frac{1}{\varepsilon_n^{(0)} - \alpha K} = \frac{1}{\varepsilon_n^{(0)}}\cdot\frac{1}{1-(\varepsilon_n^{(0)})^{-1}\alpha K}.$$

Pošto je jačina spoljašnjeg električnog polja dovoljno slaba i predstavlja malu perturbaciju, veličina $(\varepsilon_n^{(0)})^{-1}\alpha K$ je manja od 1, pa se izraz za $(\varepsilon_n^{(1)})^{-1}$ može razviti u red, prema formuli:

$$\frac{1}{1-x} = \sum_{n=0}^{\infty} x^n = 1 + x + x^2 + \ldots \qquad \text{gde je} \qquad |x| < 1.$$

Koristeći ovaj razvoj u red i činjenicu da je $x = (\varepsilon_n^{(0)})^{-1}\alpha K$, dobijamo:

$$\frac{1}{\varepsilon_n^{(1)}} \approx \frac{1}{\varepsilon_n^{(0)}}\left(1 + \frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}}\right).$$

U izrazu za $\varepsilon_n^{(2)}$ figuriše $(\varepsilon_n^{(1)})^{-2}$ i taj član množi jačinu električnog polja K. Zbog toga se u izrazu za $(\varepsilon_n^{(1)})^{-2}$ zadržavamo na linearnom članu po K, a član koji sadrži K^2 zanemarujemo:

$$\frac{1}{(\varepsilon_n^{(1)})^2} \approx \frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^2}\left(1 + \frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}}\right)^2 = \frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^2}\left(1 + 2\frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}} + \frac{\alpha^2K^2}{(\varepsilon_n^{(0)})^2}\right) \approx \frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^2}\left(1 + 2\frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}}\right).$$

Slično je i sa $(\varepsilon_n^{(1)})^{-5}$ koji množi kvadrat jačine električnog polja. Zbog toga se u izrazu za $(\varepsilon_n^{(1)})^{-5}$ zanemaruje čak i linearan član po K:

$$\frac{1}{(\varepsilon_n^{(1)})^5} \approx \frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^5}\left(1 + \frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}}\right)^5 \approx \frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^5}.$$

Konačno su određeni svi članovi koji figurišu u izrazu za $\varepsilon_n^{(2)}$, pa njihovim uvrštavanjem dobijamo:

$$\begin{aligned}\varepsilon_n^{(2)} &= \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{a_0}\cdot\frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^2}\cdot\left(1 + 2\frac{\alpha K}{\varepsilon_n^{(0)}}\right)(n_1-n_2) + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2}{a_0^2}\cdot\frac{1}{(\varepsilon_n^{(0)})^5}\cdot[17n^2+51\cdot \\ &\cdot(n_1-n_2)^2-9m^2+19] = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{a_0}\cdot\frac{n^2a_0^2}{Z^2}\cdot\left(1 + 2\frac{\alpha K n a_0}{Z}\right)(n_1-n_2) + \\ &+ \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2}{a_0^2}\cdot\frac{n^5a_0^5}{Z^5}\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19].\end{aligned}$$

Uvrštavanjem izraza za α prema jednačini (B.26), poslednja relacija dobija sledeći oblik:

$$\varepsilon_n^{(2)} = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{K}{a_0}\cdot\frac{n^2a_0^2}{Z^2}\cdot\left(1+2\frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\frac{a_0}{Z^2}\cdot n^2(n_1-n_2)\cdot\frac{Kna_0}{Z}\right)(n_1-n_2) + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2a_0^3}{Z^5}\cdot$$
$$\cdot n^5\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19] = \frac{Z}{na_0} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{Ka_0}{Z^2}\cdot n^2(n_1-n_2) - \frac{9}{2}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot$$
$$\cdot\frac{K^2a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot(n_1-n_2)^2 + \frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{16e^2}\frac{K^2a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot[17n^2+51(n_1-n_2)^2-9m^2+19].$$

Poređenjem sa jednačinom (B.11), lako se može uočiti da prva dva člana poslednje relacije čine $\varepsilon_n^{(1)}$, dok se druga dva mogu napisati konciznije:

$$\varepsilon_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(1)} + \frac{1}{16}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{K^2a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot[17n^2+(51-72)(n_1-n_2)^2-9m^2+19],$$
$$\varepsilon_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(1)} + \frac{1}{16}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{K^2a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot[17n^2-21(n_1-n_2)^2-9m^2+19].$$

Ako se uvede veličina β, koja predstavlja koeficijent uz K^2 u prethodnoj relaciji:

$$\beta = \frac{1}{16}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot[17n^2-21(n_1-n_2)^2-9m^2+19], \tag{B.27}$$

izraz za $\varepsilon_n^{(2)}$ postaje

$$\varepsilon_n^{(2)} = \varepsilon_n^{(1)} + \beta K^2.$$

Dobijena vrednost za $\varepsilon_n^{(2)}$ se koristi za izračunavnje energije. Veza između energije E i ε_n je data relacijom (B.6), pa dalje sledi:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}(\varepsilon_n^{(2)})^2,$$
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\varepsilon_n^{(1)}+\beta K^2\right]^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[(\varepsilon_n^{(1)})^2+2\varepsilon_n^{(1)}\beta K^2+(\beta K^2)^2\right].$$

Poslednji član se zanemaruje, jer sadrži četvrti stepen jačine električnog polja. Pošto se energija određuje sa tačnošću do članova $\sim K^2$, zadržavaju se samo oni članovi koji sadrže jačinu električnog polja K kao linearan ili kvadratan član. U relaciju se takođe uvrštava i izraz za $\varepsilon_n^{(1)}$ dat jednačinom (B.25):

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[(\varepsilon_n^{(1)})^2+2\varepsilon_n^{(1)}\beta K^2\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[(\varepsilon_n^{(0)}-\alpha K)^2+2(\varepsilon_n^{(0)}-\alpha K)\beta K^2\right],$$
$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[(\varepsilon_n^{(0)})^2-2\varepsilon_n^{(0)}\alpha K+\alpha^2K^2+2\varepsilon_n^{(0)}\beta K^2\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[(\varepsilon_n^{(0)})^2-2\varepsilon^{(0)}\alpha K+(\alpha^2+2\varepsilon_n^{(0)}\beta)K^2\right].$$

S obzirom da su veličine $\varepsilon_n^{(0)}$, α i β poznate i date relacijama (B.10), (B.26) i (B.27), izraz za energiju postaje:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z^2}{n^2a_0^2} - 2\frac{Z}{na_0}\frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n^2a_0}{Z^2}\cdot(n_1-n_2)K + \left(\frac{9}{4}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot(n_1-n_2)^2 + 2\frac{Z}{na_0}\frac{1}{16}\cdot\right.\right.$$
$$\left.\left.\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{a_0^3}{Z^5}\cdot n^5\cdot[17n^2-21(n_1-n_2)^2-9m^2+19]\right)K^2\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z^2}{n^2a_0^2} - 3\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\right.$$
$$\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)K + \left(\frac{9}{4}\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot(n_1-n_2)^2 + \frac{1}{8}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot\right.$$
$$\left.\left.\cdot[17n^2-21(n_1-n_2)^2-9m^2+19]\right)K^2\right].$$

Poslednja dva člana u prethodnom izrazu se mogu grupisati, što omogućuje jednostavnije zapisivanje energije:

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z^2}{n^2a_0^2} - 3\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)K + \frac{1}{8}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2+(18-21)(n_1-n_2)^2-\right.$$
$$\left.-9m^2+19]K^2\right] = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{Z^2}{n^2a_0^2} - 3\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)K + \frac{1}{8}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2-\right.$$
$$\left.-3(n_1-n_2)^2-9m^2+19]K^2\right].$$

Pogodno je član ispred zagrade transformisati tako da sadrži Borov radijus a_0:

$$E = -\frac{4\pi\varepsilon_0 e^2}{4\pi\varepsilon_0 e^2}\frac{\hbar^2}{m_e}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)K + \frac{1}{16}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]K^2\right] = -\frac{a_0e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} - \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)K + \frac{1}{16}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]K^2\right].$$

Na ovaj način je dobijen izraz za energiju atoma vodonikovog tipa u konstantnom električnom polju K određen sa tačnošću reda K^2, odnosno ovaj izraz obuhvata popravku usled kvadratičnog Štarkovog efekta što je izraženo poslednjim sabirkom u prethodnoj relaciji. Ako spoljašnje električno polje potiče od najbližeg suseda (pozitivan jon), vrednost za veličinu K je data relacijom (B.13), pa se za energiju dobija sledeći izraz:

$$E = -\frac{a_0e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{4\pi\varepsilon_0}{e}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2)\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_je}{R^2} + \frac{1}{16}\cdot\frac{(4\pi\varepsilon_0)^2}{e^2}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{Z_j^2e^2}{R^4}\right],$$

odnosno,

$$E = -\frac{a_0e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{Z^2}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot\frac{n}{Z}\cdot(n_1-n_2) + \frac{1}{16}\frac{Z_j^2}{R^4}\cdot\frac{n^4a_0^2}{Z^4}\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]\right].$$

U slučaju atoma vodonika, kada je $Z = 1$, prethodna relacija postaje:

$$E = -\frac{a_0e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{1}{2n^2a_0^2} + \frac{3}{2}\frac{Z_j}{R^2}\cdot n(n_1-n_2) + \frac{1}{16}\cdot\frac{Z_j^2}{R^4}\cdot n^4a_0^2\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]\right].$$

Dakle, ova relacija određuje energiju atoma vodonika u konstantnom električnom polju koje potiče od najbližeg suseda (pozitivan jon), sa tačnošću reda kvadrata jačine tog električnog polja (kvadratičan Štarkov efekat). Popravka usled kvadratičnog Štarkovog efekta izražena je poslednjim članom i iznosi:

$$E_{\mathrm{QSE}} = -\frac{a_0e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{16}\cdot\frac{Z_j^2}{R^4}\cdot n^4a_0^2\cdot[17n^2 - 3(n_1-n_2)^2 - 9m^2 + 19]. \tag{B.28}$$

Dodatak C

Izračunavanje matričnih elemenata koordinata z i x

U ovom dodatku će biti prikazano izračunavanje matričnih elemenata koordinata na primeru nekoliko spektralnih linija atoma vodonika. Preostali proračun matričnih elemenata za neke važnije serije atoma vodonika nije urađen, jer već postoje tabelirane vrednosti u radu [1] za Lajmanovu, Balmerovu i Pašenovu[1] seriju.

C.1 Primer izračunavanja matričnog elementa z koordinate

Provera identičnosti navedenih formula (8.9) i (8.10) za izračunavanje matričnog elementa z koordinate biće sprovedena na Lajmanovoj liniji Ly-α koja nastaje pri prelazu $|2\{n_1, n_2, m\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$. Ova linija se sastoji iz tri štarkovske komponente koje odgovaraju prelazima:

$$|2\{1,0,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle,$$
$$|2\{0,1,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle,$$
$$|2\{0,0,1\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle,$$

od kojih samo prve dve π-komponente zadovoljavaju izborno pravilo $\Delta m = 0$, pa se samo one i razmatraju. Matrični element z koordinate poslednje σ-komponente identički je jednak nuli, jer izborno pravilo nije zadovoljeno $\Delta m = m' - m = 0 - 1 = -1$. Naravno, nije neophodno koristiti relaciju (8.10) u svom punom obliku, već je dovoljno posmatrati izraz za matrični element z koordinate u slučaju Lajmanove serije, odnosno uporediti rezultate relacija (8.9) i (8.13).

Prvo se razmatra π-komponenta koja odgovara prelazu $|2\{1,0,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$. Kvantni brojevi koji karakterišu ovaj prelaz imaju sledeće vrednosti: $n = 2$, $n_1 = 1$, $n_2 = 0$, $m = 0$, $n' = 1$ i $n_1' = n_2' = m' = 0$. Pošto se razmatra atom vodonika naelektrisanje jezgra atoma je $Z = 1$, a parametri koji figurišu u (8.9) su jednaki:

$$\varepsilon_n = \frac{Z}{a_0} \cdot \frac{1}{n} = \frac{1}{2a_0}, \qquad \varepsilon_{n'} = \frac{Z}{a_0} \cdot \frac{1}{n'} = \frac{1}{a_0}, \qquad \bar{\varepsilon} = \frac{1}{2}(\varepsilon_n + \varepsilon_{n'}) = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2a_0} + \frac{1}{a_0}\right) = \frac{3}{4a_0},$$

dok konstante imaju sledeće vrednosti

$$C^{n}_{n_1,n_2,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{1! \cdot 0!}}{\sqrt{[(1+0)!]^3 \cdot [(0+0)!]^3}} \cdot \frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}},$$

$$C^{n'}_{n_1',n_2',m'} = \frac{1}{\sqrt{\pi n'}} \frac{\sqrt{n_1'! \cdot n_2'!} \cdot \varepsilon_{n'}^{m'+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1'+m)!]^3 \cdot [(n_2'+m)!]^3}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{0! \cdot 0!}}{\sqrt{[(0+0)!]^3 \cdot [(0+0)!]^3}} \cdot \frac{1}{(a_0)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}.$$

Vrednosti integrala koji figurišu u relaciji (8.9) se mogu odrediti na osnovu formule (8.8), ali se prvo moraju ustanoviti vrednosti parametara a i b:

$$a = \frac{2n'}{n+n'} = \frac{2}{2+1} = \frac{2}{3}, \qquad b = \frac{2n}{n+n'} = \frac{4}{2+1} = \frac{4}{3}.$$

[1] Friedrich Paschen (1865-1947)

Prvo izračunavamo vrednost integrala $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2,a,b)$:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(2,a,b) = J^0_{1,0}\Big(2,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = 1!\cdot 0!\cdot \sum_{\beta=0}^{1}\sum_{\gamma=0}^{0}\binom{1}{\beta}\binom{0}{\gamma}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{1-\beta}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-\gamma}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{\beta}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{\gamma}\cdot$$
$$\cdot(-1)^{\beta+\gamma}\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{\beta,\gamma\}}\binom{2}{\beta-0-\nu}\binom{2}{\gamma-0-\nu}\frac{(0+2+\nu)!}{\nu!}.$$

Iz poslednje relacije se može zaključiti da γ uzima samo jednu vrednost $\gamma = 0$, dok β može da ima dve vrednosti $\beta \in \{0,1\}$. Uzimajući navedenu činjenicu u obzir, dobijamo:

$$J^0_{1,0}\Big(2,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = \binom{1}{0}\binom{0}{0}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{1-0}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-0}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{0}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{0}\cdot(-1)^{0+0}\cdot\binom{2}{0-0-0}\binom{2}{0-0-0}\cdot$$
$$\cdot\frac{(0+2+0)!}{0!}+\binom{1}{1}\binom{0}{0}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{1-1}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-0}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{1}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{0}\cdot(-1)^{1+0}\cdot$$
$$\cdot\binom{2}{1-0-0}\cdot\binom{2}{0-0-0}\frac{(0+2+0)!}{0!}.$$

Izračunavanjem binomnih koeficijenata i nakon jednostavnih operacija, dobija se vrednost:

$$J^0_{1,0}\Big(2,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = \Big(1-\frac{2}{3}\Big)\cdot 2! + \frac{2}{3}\cdot(-1)\cdot 2\cdot 2! = \frac{2}{3}-\frac{8}{3} = -\frac{6}{3} = -2.$$

Sledeći integral čija vrednost bi trebalo da se odredi je $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0,a,b)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(0,a,b) = J^0_{0,0}\Big(0,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = 0!\cdot 0!\cdot\sum_{\beta=0}^{0}\sum_{\gamma=0}^{0}\binom{0}{\beta}\binom{0}{\gamma}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{0-\beta}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-\gamma}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{\beta}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{\gamma}\cdot$$
$$\cdot(-1)^{\beta+\gamma}\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{\beta,\gamma\}}\binom{0}{\beta-0-\nu}\binom{0}{\gamma-0-\nu}\frac{(0+0+\nu)!}{\nu!}.$$

U ovom slučaju β i γ imaju samo jednu moguću vrednost $\beta = \gamma = 0$, pa izraz postaje:

$$J^0_{0,0}\Big(0,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = \binom{0}{0}\binom{0}{0}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{0-0}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-0}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{0}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{0}\cdot(-1)^{0+0}\cdot\binom{0}{0-0-0}\binom{0}{0-0-0}\cdot$$
$$\cdot\frac{(0+0+0)!}{0!} = 1.$$

Sada izračunavamo vrednost sledećeg integrala u relaciji (8.9), a to je $J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0,a,b)$:

$$J^m_{n_1+m,n_1'+m}(0,a,b) = J^0_{1,0}\Big(0,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = 1!\cdot 0!\cdot\sum_{\beta=0}^{1}\sum_{\gamma=0}^{0}\binom{1}{\beta}\binom{0}{\gamma}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{1-\beta}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-\gamma}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{\beta}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{\gamma}\cdot$$
$$\cdot(-1)^{\beta+\gamma}\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{\beta,\gamma\}}\binom{0}{\beta-0-\nu}\binom{0}{\gamma-0-\nu}\frac{(0+0+\nu)!}{\nu!}.$$

Jedino za $\beta = \gamma = 0$ gornji izraz je različit od nule. Uzimajući to u obzir, dobijamo sledeće:

$$J^0_{1,0}\Big(0,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = \binom{1}{0}\binom{0}{0}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{1-0}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-0}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{0}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{0}\cdot(-1)^{0+0}\cdot\binom{0}{0-0-0}\binom{0}{0-0-0}\cdot$$
$$\cdot\frac{(0+0+0)!}{0!} = \Big(1-\frac{2}{3}\Big) = \frac{1}{3}.$$

Poslednji integral čiju je vrednost potrebno odrediti je $J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2,a,b)$:

$$J^m_{n_2+m,n_2'+m}(2,a,b) = J^0_{0,0}\Big(2,\frac{2}{3},\frac{4}{3}\Big) = 0!\cdot 0!\cdot\sum_{\beta=0}^{0}\sum_{\gamma=0}^{0}\binom{0}{\beta}\binom{0}{\gamma}\cdot\Big(1-\frac{2}{3}\Big)^{0-\beta}\Big(1-\frac{4}{3}\Big)^{0-\gamma}\cdot\Big(\frac{2}{3}\Big)^{\beta}\Big(\frac{4}{3}\Big)^{\gamma}\cdot$$
$$\cdot(-1)^{\beta+\gamma}\cdot\sum_{\nu=0}^{\min\{\beta,\gamma\}}\binom{2}{\beta-0-\nu}\binom{2}{\gamma-0-\nu}\frac{(0+2+\nu)!}{\nu!}.$$

U ovom slučaju β i γ imaju samo jednu moguću vrednost $\beta = \gamma = 0$, pa izraz postaje:

$$J^0_{0,0}\left(2, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right) = \binom{0}{0}\binom{0}{0} \cdot \left(1 - \frac{2}{3}\right)^{0-0}\left(1 - \frac{4}{3}\right)^{0-0} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^0\left(\frac{4}{3}\right)^0 \cdot (-1)^{0+0} \cdot \binom{2}{0-0-0}\binom{2}{0-0-0} \cdot$$
$$\cdot \frac{(0+2+0)!}{0!} = 2! = 2.$$

Pošto su pronađene vrednosti svih članova koji figurišu u izrazu (8.9), za matrični element se dobija:

$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot \left(\frac{3}{4a_0}\right)^{-4} \cdot \left[-2 \cdot 1 - \frac{1}{3} \cdot 2\right],$$
$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{a_0^3} \cdot \left(\frac{4a_0}{3}\right)^4 \cdot \left[-2 - \frac{2}{3}\right] = -\frac{8}{3} \cdot \frac{4^2 a_0}{3^4} = -4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0$$

Prema relaciji (8.13) isti matrični element za kvantne brojeve $n = 2$, $n_1 = 1$, $n_2 = 0$, $m = 0$, $n' = 1$ i $n'_1 = n'_2 = m' = 0$ i atom vodonika $Z = 1$, ima vrednost:

$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = -a_0 \cdot 16 \cdot 2^3 \cdot \frac{(2-1)^{2-3}}{(2+1)^{2+3}} \cdot (1-0) = -a_0 \cdot 2^4 \cdot 2^3 \cdot \frac{1^{-1}}{3^5},$$
$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = -a_0 \cdot 2^2 \cdot 2^5 \cdot \frac{1}{3^5} = -4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0. \tag{C.1}$$

Dakle, zaključujemo da formule (8.9) i (8.13) daju iste rezultate za prelaz $|2\{1,0,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$.

Sada ćemo razmotriti π-komponentu koja odgovara prelazu $|2\{0,1,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$. Kvantni brojevi koji karakterišu ovaj prelaz imaju sledeće vrednosti: $n = 2, n_1 = 0, n_2 = 1, m = 0, n' = 1$ i $n'_1 = n'_2 = m' = 0$. Potrebno je uočiti da se ovaj slučaj od prethodnog razlikuje samo po vrednostima kvantnih brojeva n_1 i n_2 pa se vrednosti za sve veličine koje ne sadrže ove kvantne brojeve mogu preuzeti iz prethodnog slučaja. Naelektrisanje jezgra atoma je $Z = 1$, a parametri koji figurišu u (8.9) su jednaki:

$$\varepsilon_n = \frac{1}{2a_0}, \qquad \varepsilon_{n'} = \frac{1}{a_0}, \qquad \bar{\varepsilon} = \frac{3}{4a_0},$$

dok konstante imaju sledeće vrednosti

$$C^n_{n_1,n_2,m} = \frac{1}{\sqrt{\pi n}} \frac{\sqrt{n_1! \cdot n_2!} \cdot \varepsilon_n^{m+\frac{3}{2}}}{\sqrt{[(n_1+m)!]^3 \cdot [(n_2+m)!]^3}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{\sqrt{0! \cdot 1!}}{\sqrt{[(0+0)!]^3 \cdot [(1+0)!]^3}} \cdot \frac{1}{(2a_0)^{\frac{3}{2}}} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}},$$
$$C^{n'}_{n'_1,n'_2,m'} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}}.$$

Vrednosti integrala koji figurišu u relaciji (8.9) se određuju na osnovu formule (8.8), dok su vrednosti parametara a i b:

$$a = \frac{2}{3}, \qquad b = \frac{4}{3}.$$

Svi integrali koji se javljaju u izrazu za matrični element z koordinate, svode se na već izračunate integrale u prethodnom slučaju:

$$J^m_{n_1+m,n'_1+m}(2,a,b) = J^0_{0,0}\left(2, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right) = 2,$$
$$J^m_{n_2+m,n'_2+m}(0,a,b) = J^0_{1,0}\left(0, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right) = \frac{1}{3},$$
$$J^m_{n_1+m,n'_1+m}(0,a,b) = J^0_{0,0}\left(0, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right) = 1,$$
$$J^m_{n_2+m,n'_2+m}(2,a,b) = J^0_{1,0}\left(2, \frac{2}{3}, \frac{4}{3}\right) = -2.$$

S obzirom da su pronađene vrednosti svih članova koji figurišu u izrazu (8.9), za matrični element se dobija:

$$\langle 2\{0,1,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = \frac{\pi}{4} \cdot \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{1}{a_0^{\frac{3}{2}}} \cdot \left(\frac{3}{4a_0}\right)^{-4} \cdot \left[2 \cdot \frac{1}{3} - 1 \cdot (-2)\right],$$
$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{1}{a_0^3} \cdot \left(\frac{4a_0}{3}\right)^4 \cdot \left[\frac{2}{3} + 2\right] = \frac{8}{3} \cdot \frac{4^2 a_0}{3^4} = 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0$$

Prema relaciji (8.13) isti matrični element za kvantne brojeve $n = 2$, $n_1 = 0$, $n_2 = 1$, $m = 0$, $n' = 1$ i $n_1' = n_2' = m' = 0$ i atom vodonika $Z = 1$, ima vrednost:

$$\langle 2\{0,1,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = -a_0 \cdot 16 \cdot 2^3 \cdot \frac{(2-1)^{2-3}}{(2+1)^{2+3}} \cdot (0-1) = a_0 \cdot 2^4 \cdot 2^3 \cdot \frac{1^{-1}}{3^5},$$

$$\langle 2\{0,1,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = a_0 \cdot 2^2 \cdot 2^5 \cdot \frac{1}{3^5} = 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0. \tag{C.2}$$

Dakle, i u ovom slučaju je utvrđena identičnost relacija (8.9) i (8.13).

C.2 Primer izračunavanja matričnog elementa x koordinate

Kao primer nalaženja matričnih elemenata za σ-komponente poslužiće linija Lajmanove serije Ly-α atoma vodonika koja odgovara prelazu $|2\{0,0,1\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$. Matrični element x koordinate je u ovom slučaju prema (8.14) jednak:

$$\begin{aligned}\langle 2\{0,0,1\}|x|1\{0,0,0\}\rangle &= \frac{(-1)^{0+0} \cdot a_0}{4[(1-1)!]^2 \cdot 1} \cdot \sqrt{\frac{(0+1)!}{0!} \cdot \frac{(0+1)!}{0!} \cdot \frac{(0+1-1)!}{0!} \cdot \frac{(0+1-1)!}{0!}} \cdot \\ &\cdot \frac{(4 \cdot 2 \cdot 1)^{1+1}}{(2-1)^{2(0+1)}} \cdot \left(\frac{2-1}{2+1}\right)^{2+1} \cdot \left[G_{1-1}(0,0) \cdot G_{1-1}(0,0) - \left(\frac{2-1}{2+1}\right)^2 \cdot G_{1-1}(0+1,0) \cdot \right. \\ &\left. \cdot G_{1-1}(0+1,0)\right] = \frac{a_0}{4} \cdot 2^6 \cdot \left(\frac{1}{3}\right)^3 \cdot \left[G_0(0,0) \cdot G_0(0,0) - \left(\frac{1}{3}\right)^2 \cdot G_0(1,0) \cdot G_0(1,0)\right].\end{aligned}$$

Vrednosti svih hipergeometrijskih funkcija koje figurišu u prethodnoj relaciji su jednake jedinici. Ovo se lako može zaključiti na osnovu izraza za $G_m(n_i, n_i')$ (8.11), jer je dovoljno da samo jedan argument bude jednak nuli pa da se funkcija sastoji samo od prvog člana, a to je jedinica. Uzimajući ovo razmatranje u obzir, dobijamo:

$$\langle 2\{0,0,1\}|x|1\{0,0,0\}\rangle = a_0 \cdot 2^4 \cdot \frac{1}{3^3} \cdot \left[1 - \frac{1}{3^2}\right] = a_0 \cdot 2^4 \cdot \frac{1}{3^3} \cdot \frac{8}{3^2} = 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0.$$

Drugi primer se odnosi na liniju Balmerove serije atoma vodonika H-α koja odgovara prelazu $|3\{1,1,0\}\rangle \to |2\{0,0,1\}\rangle$. Matrični element x koordinate je u ovom slučaju prema (8.15) jednak:

$$\begin{aligned}\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle &= \frac{(-1)^{1+1} \cdot a_0}{4(0!)^2 \cdot 1} \cdot \sqrt{\frac{(0+0+1)!}{0!} \cdot \frac{(0+0+1)!}{0!} \cdot \frac{(1+0)!}{1!} \cdot \frac{(1+0)!}{1!}} \cdot \\ &\cdot \frac{(4 \cdot 2 \cdot 3)^{0+2}}{(2-3)^{2(0+2)}} \cdot \left(\frac{2-3}{2+3}\right)^{2+3} \cdot \left[G_0(0,1) \cdot G_0(0,1) - \left(\frac{2-3}{2+3}\right)^2 \cdot G_0(0+1,1) \cdot G_0(0+1,1)\right],\end{aligned}$$

odnosno,

$$\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle = \frac{a_0}{4} \cdot 2^6 \cdot 3^2 \cdot \left(\frac{-1}{5}\right)^5 \cdot \left[G_0(0,1) \cdot G_0(0,1) - \left(\frac{-1}{5}\right)^2 \cdot G_0(1,1) \cdot G_0(1,1)\right].$$

Prema formuli (8.11) lako se pronalaze funkcije koje figurišu u poslednjoj relaciji:

$$G_0(1,1) = F\left(-1,-1,0+1,-\frac{4 \cdot 2 \cdot 3}{(2-3)^2}\right) = F(-1,-1,1,-24) = 1 - \frac{1 \cdot 1}{0+1} \cdot \frac{4 \cdot 2 \cdot 3}{(2-3)^2} = -23.$$

Ako vrednost prethodne funkcije uvrstimo u izraz za matrični element x-koordinate, dobijamo sledeće:

$$\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle = \frac{a_0}{4} \cdot 2^6 \cdot 3^2 \cdot \frac{-1}{5^5} \cdot \left[1 - \frac{1}{5^2} \cdot 23^2\right] = -\frac{a_0}{4} \cdot \frac{2^6 \cdot 3^2}{5^5} \cdot \frac{-504}{5^2},$$

$$\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle = 21 \cdot \left(\frac{2}{5}\right)^7 \cdot 27 \cdot a_0. \tag{C.3}$$

Dodatak D

Izračunavanje intenziteta štarkovskih komponenti u aproksimaciji do λ

U ovom dodatku su detaljno prikazani primeri za izračunavanje prve popravke na intenzitet štarkovske linije, kao i primer za izračunavanje neperturbovanog intenziteta. Vrednosti intenziteta za linije iz Lajmanove, Balmerove i Pašenove serije date su u tablicama rada [1].

D.1 Primeri izračunavanja prve popravke na intenzitet štarkovskih komponenti

Kao primer za nalaženje prve popravke na intenzitet spektralnih linija poslužiće linije iz Lajmanove serije Ly-α. Linija koja odgovara prelazu $|2\{1,0,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$ predstavlja π-polarizovanu komponentu. Prvo se određuju koeficijenti a_ν i a_μ koji odgovaraju ovom prelazu:

$$a_{\nu 1} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{0,1,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle \left(\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\nu 2} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{2,-1,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle \left(\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\mu 1} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{-1,1,0\}\rangle \left(\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\mu 2} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{1,-1,0\}\rangle \left(\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{1,0,0\}|ez|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2}.$$

Koeficijenti u kojima figurišu kvantni brojevi n_1 i n_2 manji od nule, identički su jednaki nuli, jer ovi kvantni brojevi ne mogu uzimati negativne vrednosti:

$$a_{\nu 2} = 0, \qquad a_{\mu 1} = 0, \qquad a_{\mu 2} = 0.$$

Lako se zaključuje da je samo koeficijent $a_{\nu 1}$ različit od nule, a u njemu figurišu matrični elementi čije su vrednosti određene i date relacijama (C.1) i (C.2):

$$\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = -4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0,$$

$$\langle 2\{0,1,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle = 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0.$$

Uzimajući prethodne izraze u obzir, koeficijent $a_{\nu 1}$ ima vrednost:

$$a_{\nu 1} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{0,1,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle \left(\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\nu 1} = -2 \cdot 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0 \cdot 4 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^5 \cdot a_0 \cdot \frac{1}{4^2} \cdot \left(\frac{3}{2}\right)^{10} \cdot \frac{1}{a_0^2} = -2.$$

Sledeća veličina koju je potrebno odrediti je matrični element veličine $\varepsilon^{(1)}$:

$$\langle 2\{1,0,0\}|\varepsilon^{(1)}|1\{0,0,0\}\rangle = -n \cdot \sqrt{(n_2+1)(n-n_2-1)n_1(n-n_1)} \cdot \frac{a_{\nu 1}}{2},$$

$$\langle 2\{1,0,0\}|\varepsilon^{(1)}|1\{0,0,0\}\rangle = -2 \cdot \sqrt{(0+1)(2-0-1)1(2-1)} \cdot \frac{-2}{2} = 2.$$

Dakle, prva popravka na intenzitet spektralne linije prema relaciji (9.10) iznosi:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'} \cdot a_0 \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}} \cdot \langle 2\{1,0,0\}|\varepsilon^{(1)}|1\{0,0,0\}\rangle,$$

dok se intenzitet $I^{(0)}_{n\to n'}$ određuje prema formuli (9.11)

$$I^{(0)}_{n\to n'} = g_{n\to n'} \cdot \frac{1}{C^2} \cdot \left(\langle 2\{1,0,0\}|z|1\{0,0,0\}\rangle\right)^2,$$

$$I^{(0)}_{n\to n'} = 1 \cdot \frac{1}{4^2} \cdot \left(\frac{3}{2}\right)^{10} \cdot \frac{1}{a_0^2} \cdot (-1)^2 \cdot 4^2 \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^{10} \cdot a_0^2 = 1.$$

Na ovaj način su određene sve veličine koje se pojavljuju u izrazu za prvu popravku na intenzitet spektralne linije $I^{(1)}_{n\to n'}$:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = 1 \cdot a_0 \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}} \cdot 2 = 2 \cdot a_0 \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}}.$$

Ako se uzme u obzir i vrednost Borovog radijusa prema relaciji (2.8) $a_0 = 5.29 \cdot 10^{-11}$ m, konačno se dobija:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = 1.706 \cdot 10^{-10} \cdot \mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}}.$$

Drugi primer se odnosi na određivanje intenziteta Lajmanove serije koja odgovara prelazu $|2\{0,0,1\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$ i predstavlja σ-polarizovanu komponentu. Prvo se određuju koeficijenti a_ν i a_μ koji odgovaraju ovom prelazu:

$$a_{\nu 1} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{-1,1,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\left(\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\nu 2} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{1,-1,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\left(\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\mu 1} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{-1,1,0\}\rangle\left(\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2},$$

$$a_{\mu 2} = 2 \cdot \frac{\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{1,-1,0\}\rangle\left(\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right)^*}{\left|\langle 2\{0,0,1\}|ex|1\{0,0,0\}\rangle\right|^2}.$$

Svi koeficijenti u kojima figurišu kvantni brojevi n_1 i n_2 manji od nule, identički su jednaki nuli:

$$a_{\nu 1} = 0, \qquad a_{\nu 2} = 0, \qquad a_{\mu 1} = 0, \qquad a_{\mu 2} = 0.$$

Pošto su svi koeficijenti jednaki nuli, sledi da je i matrični element veličine $\varepsilon^{(1)}$ jednak nuli:

$$\langle 2\{0,0,1\}|\varepsilon^{(1)}|1\{0,0,0\}\rangle = 0.$$

Dakle, prva popravka na intenzitet spektralne linije prema relaciji (9.10) iznosi:

$$I^{(1)}_{n\to n'} = I^{(0)}_{n\to n'} \cdot a_0 \cdot \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{\frac{1}{3}} \cdot \mathcal{N}_e^{\frac{1}{3}} \cdot \langle 2\{0,0,1\}|\varepsilon^{(1)}|1\{0,0,0\}\rangle = 0.$$

D.2 Primer izračunavanja neperturbovanog intenziteta štarkovske komponente

Kao primer za određivanje neperturbovanog intenziteta spektralne linije, poslužiće intenzitet linije Balmerove serije H-α atoma vodonika koja odgovara prelazu $|3\{1,1,0\}\rangle \to |2\{0,0,1\}\rangle$. Intenzitet ove linije je dat sledećim izrazom:

$$I^{(0)}_k = g_k \cdot \frac{1}{C^2} \cdot \left(x^{1,1,0}_{0,0,1}\right)^2, \qquad \text{gde je} \qquad k \equiv |3\{1,1,0\}\rangle \to |2\{0,0,1\}\rangle.$$

Izraz u zagradi predstavlja matrični element $\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle$, a njegova vrednost je već izračunata i data relacijom (C.3), dok je $g_k = 4$:

$$I_k^{(0)} = 4 \cdot \frac{1}{C^2} \cdot \left(\langle 3\{1,1,0\}|x|2\{0,0,1\}\rangle\right)^2 = 4 \cdot \frac{1}{C^2} \cdot \left(21 \cdot \left(\frac{2}{5}\right)^7 \cdot 27 \cdot a_0\right)^2.$$

Konstanta C upravo iznosi:

$$C = \left(\frac{2}{5}\right)^7 \cdot 27 \cdot a_0,$$

a vrednost je preuzeta iz rada [1]. Zbog toga vrednost za intenzitet dobija jednostavniju formu

$$I_k^{(0)} = 4 \cdot \frac{1}{C^2} \cdot (21 \cdot C)^2 = 4 \cdot 21^2 = 1764.$$

Rezultat je izražen u Šredingerovim jedinicama.

Dodatak E

Dokazivanje relacije koju zadovoljavaju prvi momenti funkcije raspodele W

Da bi se dokazala ispravnost relacije (13.25), koju zadovoljavaju prvi momenti $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ funkcije raspodele W:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho} \cdot \vec{F}) \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \right].$$

mora se krenuti od definicije prvog momenta $M(x_1)$ proizvoljne funkcije više promenljivih $f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Definicija prvog momenta $M(x_1)$ je data na sledeći način:

$$M(x_1) = \frac{\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \ldots \int \mathrm{d}x_n \cdot x_1 \cdot f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}{\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \ldots \int \mathrm{d}x_n \cdot f(x_1, x_2, \ldots, x_n)}.$$

Ako se ova relacija primeni na funkciju raspodele jačine jonskog polja $W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)$, imamo sledeće:

$$\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} \equiv \frac{G_1}{G_2} = \frac{\int \mathrm{d}g_1 \int \mathrm{d}g_2 \ldots \int \mathrm{d}g_5 \cdot g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)}{\int \mathrm{d}g_1 \int \mathrm{d}g_2 \ldots \int \mathrm{d}g_5 \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)}, \qquad \alpha = 1, 2, \ldots, 5,$$

gde je brojilac ovog razlomka označen sa G_1, a imenilac sa G_2 iz razloga što će oba člana biti razmatrana posebno. Da bismo mogli da izračunamo G_1 i G_2, moramo prvo funkciju raspodele W:

$$W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot \exp\left[-i\left(\vec{\rho}\vec{F} + \sigma_1 g_1 + \sigma_2 g_2 + \sigma_3 g_3 + \sigma_4 g_4 + \sigma_5 g_5\right)\right] \cdot$$
$$\cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5),$$

zapisati na pogodniji način. Pod tim podrazumevamo da se argument eksponencijalne funkcije zapiše u obliku sume:

$$W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot \exp\left[-i\left(\vec{\rho}\vec{F} + \sum_{\beta=1}^{5} \sigma_\beta g_\beta\right)\right], \tag{E.1}$$

a potom možemo preći na izračunavanje G_1 i G_2.

Izračunavanje G_2

Prvo ćemo izračunati vrednost imenioca G_2, pošto je on jednostavnijeg oblika i glasi:

$$G_2 \equiv \int \mathrm{d}g_1 \int \mathrm{d}g_2 \ldots \int \mathrm{d}g_5 \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5).$$

Ako se u ovaj izraz uvrsti funkcija raspodele W koja je data relacijom (E.1), za veličinu G_2 se dobija sledeće:

$$G_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot \exp\left[-i\left(\vec{\rho}\vec{F} + \sum_{\beta=1}^{5} \sigma_\beta g_\beta\right)\right].$$

Deo eksponencijalne funkcije koji zavisi od promenljive $\vec{\rho}$, može se izdvojiti i zapisati na samom početku uz integral po $\vec{\rho}$, dok se integracija po komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja zapisuje uz poslednji član. Ova izmena reda integracije je moguća, s obzirom da su sve integracije međusobno nezavisne:

$$G_2 = \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot \exp\left(-i \sum_{\beta=1}^{5} \sigma_\beta g_\beta\right).$$

Integracija po g_β ima oblik δ-funkcije koja se u integralnoj reprezentaciji može zapisati kao:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k \cdot \exp(\pm ikx).$$

U slučaju koji posmatramo promenljiva x je jednaka g_β, a parametar k je jednak σ_β, pa imamo:

$$\prod_{\beta=1}^{5} \delta(\sigma_\beta) = \frac{1}{(2\pi)^5} \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot \exp\left(-i \sum_{\beta=1}^{5} \sigma_\beta g_\beta\right).$$

Uvrštavanjem poslednje relacije u izraz za G_2, dobija se sledeće:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot \delta(\sigma_\beta).$$

Funkcije $\delta(\sigma_\beta)$ imaju takvu osobinu da skidaju integrale po σ_β i ostavljaju vrednosti podintegralnih funkcija za slučaj kada su parametri σ_β identički jednaki nuli. Ova činjenica u mnogome pojednostavljuje izraz za G_2:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot A(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0).$$

Pošto je vrednost funkcije $A(\vec{\rho}, 0, 0, 0, 0, 0)$ poznata i data relacijom (13.9), možemo dalje pisati:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp(-N \cdot C^{(0)}(\rho)).$$

S druge strane znamo i vezu između $C^{(0)}(\rho)$ i normalne jačine jonskog polja F_0 koja je data jednakošću (13.23), pa se veličina G_2 može predstaviti i kao:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right].$$

U sledećem koraku prelazimo na integraciju u sfernom koordinatnom sistemu, a skalarni proizvod $\vec{\rho}\vec{F}$ izražavamo na drugačiji način, uvodeći ugao $\theta_{\rho F}$ između ova dva vektora:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \exp(-i\rho F \cdot \cos\theta_{\rho F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right].$$

Uvođenjem smene $\mu_\rho = \cos\theta_\rho$ prethodni izraz postaje:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \exp(-i\rho F \cdot \cos\theta_{\rho F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right].$$

Preostalo je da se i eksponencijalna funkcija zapiše preko sfernih koordinata, a to se može učiniti razvojem (13.14), što dalje daje:

$$G_2 = (2\pi)^5 \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \Big[P_l(\mu_\rho) \cdot$$

$$\cdot P_l(\mu_F) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Big].$$

Pošto je sumiranje po indeksu l nezvisno od svih integracija, može se zapisati i na početku izraza, dok se integracija po promenljivoj φ_ρ ubacuje u zagradu, čime se omogućuje zasebno razmatranje članova u zagradi:

$$G_2 = (2\pi)^5 \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \Big[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot$$

$$\cdot \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\Big].$$

U prvom članu, integracija po φ_ρ daje faktor 2π, dok drugi član nestaje s obzirom da se u rezultatu integracije javlja Kronekerov simbol $\delta_{m,0}$:

$$G_2 = (2\pi)^6 \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\mu_F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho).$$

Vrednost integracije po μ_ρ se dobija na osnovu ortogonalnosti Ležandrovih polinoma i to prema postupku koji je sproveden kod integrala (13.17). U tom slučaju se za G_2 dobija sledeća jednakost:

$$G_2 = (2\pi)^6 \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\mu_F) \cdot 2 \cdot \delta_{l,0}.$$

Kronekerov simbol $\delta_{l,0}$ omogućuje uklanjanje sume po indeksu l, pri čemu ostaje samo član za koji je $l = 0$:

$$G_2 = 2 \cdot (2\pi)^6 \cdot \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_0(\mu_F).$$

Ležandrov polinom koji se javlja u prethodnoj relaciji identički je jednak nuli, a oblik Beselove funkcije $J_{\frac{1}{2}}(\rho F)$ se može utvrditi prema relaciji (13.18):

$$G_2 = 2 \cdot (2\pi)^6 \cdot \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot \rho F}} \cdot \sin(\rho F),$$

$$G_2 = \frac{2 \cdot (2\pi)^6}{F} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \sin(\rho F).$$

Pogodno je uvesti novu promenljivu $x = \rho \cdot F_0$, da bi se poslednji integral mogao svesti na oblik Holtsmarkove funkcije $H(\beta)$ raspodele:

$$x = \rho \cdot F_0, \qquad \mathrm{d}x = F_0 \cdot \mathrm{d}\rho.$$

Uvođenjem smene u izraz za G_2 i imajući u vidu oblik Holtsmarkove funkcije raspodele dat relacijom (13.21), dobijamo sledeće:

$$G_2 = \frac{2 \cdot (2\pi)^6}{\beta F_0} \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \cdot \frac{1}{F_0} \cdot \frac{x}{F_0} \cdot \exp\left(-x^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \sin(\beta x),$$

$$G_2 = \frac{\pi \cdot (2\pi)^6}{\beta^2 F_0^3} \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{d}x \cdot (\beta x) \cdot \exp\left(-x^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \sin(\beta x) = \frac{\pi \cdot (2\pi)^6}{\beta^2 F_0^3} \cdot H(\beta).$$

Jednostavnim transformacijama možemo dovesti veličinu G_2 u vezu sa funkcijom raspodele jačine jonskog polja $w(\vec{F})$ koja je definisana relacijom (13.26), i to na sledeći način:

$$G_2 = (2\pi)^2 \cdot (2\pi)^6 \cdot \frac{H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} = (2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5 \cdot \frac{H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3}, \tag{E.2}$$
$$G_2 = (2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5 \cdot w(\vec{F}).$$

Ovim postupkom je određena vrednost imenioca G_2 koji se javlja u izrazu za prvi momenat $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$, pa je preostalo još da se odredi vrednost brojioca G_1.

Izračunavanje G_1

U definiciji za prvi momenat brojilac izraza je obeležen kao G_1 i prema definiciji iznosi:

$$G_1 \equiv \int \mathrm{d}g_1 \int \mathrm{d}g_2 \ldots \int \mathrm{d}g_5 \cdot g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot g_\alpha \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5).$$

Uvrštavanjem izraza za funkciju raspodele jačine jonskog polja W (E.1), relacija za G_1 postaje:

$$G_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}g_\beta \cdot W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}g_\beta \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot$$
$$\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot \exp\left[-i\left(\vec{\rho}\vec{F} + \sum_{\beta=1}^{5} \sigma_\beta g_\beta\right)\right].$$

Prvo se iz eksponencijalne funkcije izdvoji deo koji zavisi samo od promenljive $\vec{\rho}$, a potom se razdvoje integrali po g_α i g_β. Integral po g_α se razlikuje od integrala po g_β samo po tome što se podintegralna funkcija množi dodatnim članom g_α, pa imamo:

$$G_1 = \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}g_\beta \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot$$
$$\cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot \exp\left(-i \sum_{\beta\neq\alpha} \sigma_\beta g_\beta\right).$$

S obzirom da funkcija $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ ne zavisi od komponenti tenzora nehomogenosti jonskog polja, ona se može izvući ispred integrala po g_β:

$$G_1 = \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot$$
$$\cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}g_\beta \cdot \exp\left(-i \sum_{\beta\neq\alpha} \sigma_\beta g_\beta\right).$$

Integrali po komponentama g_beta nisu ništa drugo do δ-funkcije $\delta(\sigma_\beta)$. Ova činjenica u mnogome olakšava račun, jer opstaju samo integrali po σ_α i g_α:

$$G_1 = (2\pi)^4 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha) \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta\neq\alpha} \mathrm{d}\sigma_\beta \cdot A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) \cdot$$
$$\cdot \delta(\sigma_\beta) = (2\pi)^4 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha) \cdot A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0).$$

Sada je neophodno razdvojiti integracije po promenljivama σ_α i g_α, da bi se integral po g_α mogao zasebno razmatrati:

$$G_1 = (2\pi)^4 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha).$$

Poslednji integral se može prikazati pomoću δ-funkcije i to kao njen prvi izvod, što je demonstrirano na sledeći način:

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha)\right] = -i\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha),$$

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha)\right] = -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha),$$

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\delta(\sigma_\alpha)\right] = -\frac{i}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha).$$

Dakle, ako se iz prethodne relacije izrazi integral po promenljivoj g_α, dobijamo vrednost u kojoj figuriše i izvod δ-funkcije $\delta(\sigma_\alpha)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}g_\alpha \cdot g_\alpha \cdot \exp(-i\sigma_\alpha g_\alpha) = i \cdot 2\pi \cdot \frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\delta(\sigma_\alpha)\right].$$

Kada se ovaj izraz uvrsti u G_1, dobija se sledeće:

$$G_1 = (2\pi)^4 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0) \cdot i \cdot 2\pi \cdot \frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\delta(\sigma_\alpha)\right].$$

Izvod δ-funkcije omogućuje da se jednostavno sprovede parcijalna integracija, pri čemu se dobija:

$$G_1 = i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0) \cdot \frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha}\left[\delta(\sigma_\alpha)\right] = i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot$$

$$\cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \left\{ A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0) \cdot \delta(\sigma_\alpha) \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0)\right] \cdot \delta(\sigma_\alpha) \right\}.$$

Prvi član parcijalne integracije je jednak nuli, pošto je vrednost δ-funkcije u obe granice identički jednaka nuli. Što se tiče drugog člana, on sadrži δ-funkciju $\delta(\sigma_\alpha)$ koja uklanja integraciju po promenljivoj σ_α, pa izraz za G_1 postaje:

$$G_1 = -i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\sigma_\alpha \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0)\right] \cdot \delta(\sigma_\alpha),$$

$$G_1 = -i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, 0, \sigma_\alpha, \ldots, 0)\right]_{\sigma_\alpha=0}.$$

Svi parametri $\sigma_1, \ldots, \sigma_5$ predstavljaju male veličine koje u graničnom slučaju teže nuli, pa se zbog toga prethodna relacija može zapisati i na sledeći način:

$$G_1 = -i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right].$$

Na ovaj način je određena relacija za brojilac G_1 koji figuriše u izrazu za prvi momenat $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$. Ako se uzme u obzir i vrednost veličine G_2, za prvi momenat funkcije raspodele jačine jonskog polja se dobija:

$$\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} = \frac{G_1}{G_2} = -i \cdot (2\pi)^5 \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right] \cdot \frac{1}{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5 \cdot w(\vec{F})},$$

$$\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} = -\frac{i}{(2\pi)^3} \cdot \frac{1}{w(\vec{F})} \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial\sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right].$$

Iz prethodne relacije, lako se izražava proizvod $w(\vec{F}) \cdot \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$, što daje:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_\alpha} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right],$$

a to je upravo relacija koju je trebalo dokazati. Zanimljivo je veličinu G_1 izraziti preko prvog momenta $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$, zato što će ta relacija biti korišćena u računu koji se pojavljuje u ovom radu. Dakle, važi sledeće:

$$G_1 \equiv \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot g_\alpha \cdot W(g_1, \ldots, g_5) = \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} \cdot G_2,$$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int \prod_{\beta=1}^{5} \mathrm{d}g_\beta \cdot g_\alpha \cdot W(g_1, \ldots, g_5) = \langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}} \cdot \frac{(2\pi)^3 \cdot (2\pi)^5}{4\pi \cdot \beta^2 \cdot F_0^3} \cdot H(\beta). \tag{E.3}$$

Dodatak F

Određivanje koeficijenata koji figurišu u izrazu za $C_\alpha(\vec{\rho})$

F.1 Izračunavenje $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$

Prvo se određuje veličina $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$ definisana relacijom (13.4), koja glasi:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i \int\limits_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \frac{Q_{xx}}{r^5} \cdot \exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right).$$

Prelaskom na integraljenje po sfernim koordinatama, dobijamo sledeće:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}r \cdot r^2 \int\limits_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \cdot \sin\theta \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \frac{Q_{xx}}{r^5} \cdot \exp\left(-ie\frac{\rho r \cdot \cos\theta_{\rho r}}{r^3}\right).$$

Ugao $\theta_{\rho r}$ predstavlja ugao između vektora $\vec{\rho}$ i $\vec{r}$, pa se $\cos\theta_{\rho r}$ može predstaviti na analogan način kako je to prokazano relacijom (13.11). Dakle, vrednost $\cos\theta_{\rho r}$ je:

$$\cos\theta_{\rho r} = \sin\theta_\rho \cdot \sin\theta_r \cdot \cos(\varphi_\rho - \varphi_r) + \cos\theta_\rho \cdot \cos\theta_r.$$

Argument eksponencijalne funkcije nameće potrebu da se uvede nova promenljiva t koja je u direktnoj vezi sa intenzitetom radijus vektora $\vec{r}$:

$$t = \frac{e\rho}{r^2}, \qquad \mathrm{d}t = -\frac{2e\rho}{r^3} \cdot \mathrm{d}r,$$
$$r = \left(\frac{e\rho}{t}\right)^{\frac{1}{2}}, \qquad \mathrm{d}r = -\frac{r^3}{2e\rho} \cdot \mathrm{d}t = -\frac{1}{2e\rho}\left(\frac{e\rho}{t}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \mathrm{d}t = -\frac{1}{2} \cdot (e\rho)^{\frac{1}{2}} \cdot t^{-\frac{3}{2}} \cdot \mathrm{d}t.$$

Takođe je veoma pogodno uvesti i smenu za promenljivu θ na sledeći način:

$$\mu = \cos\theta, \qquad \mathrm{d}\mu = -\sin\theta \cdot \mathrm{d}\theta.$$

Imajući u vidu vezu između promenljivih r i t, eksponencijalnu funkciju možemo razviti prema obrascu (13.14), što daje:

$$\exp(-it\cos\theta_{\rho r}) = \left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t) \cdot \left[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot \right.$$
$$\left. \cdot P_l^{|m|}(\mu) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_r)\right].$$

Sledeći član koji bi trebalo izraziti preko sfernih koordinata je Q_{xx}. Ova transformacija se izvodi na jednostavan način pošto je komponenta tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{xx} definisana relacijom

(12.7), a veza Dekartovih i sfernih koordinata je poznata:

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -e\cdot\frac{3x^2-r^2}{r^5} = -\frac{e}{r^5}\cdot(3r^2\cdot\sin^2\theta\cdot\cos^2\varphi - r^2) = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(3\sin^2\theta\cdot\frac{1+\cos 2\varphi}{2}-1\right),$$

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(\frac{3}{2}\sin^2\theta+\frac{3}{2}\sin^2\theta\cdot\cos 2\varphi - 1\right) = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(\frac{3}{2}(1-\cos^2\theta)+\frac{3}{2}\sin^2\theta\cdot\cos 2\varphi - 1\right),$$

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(\frac{1}{2}(1-3\cos^2\theta)+\frac{3}{2}(1-\cos^2\theta)\cos 2\varphi\right).$$

S obzirom na smenu $\mu = \cos\theta$, poslednji izraz postaje:

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(\frac{1}{2}(1-3\mu^2)+\frac{3}{2}(1-\mu^2)\cos 2\varphi\right).$$

Ovaj izraz je potrebno zapisati korišćenjem Ležandrovih $P_n(x)$ i asociranih Ležandrovih $P_n^m(x)$ polinoma. Ležandrovi polinomi već definisani, dok su asocirani Ležandrovi polinomi u potpunosti određeni relacijom:

$$P_n^m(x) = (1-x^2)^{\frac{m}{2}}\frac{\mathrm{d}^m}{\mathrm{d}x^m}(P_n(x)), \qquad m \le n = 0,1,2,\ldots$$

Nekoliko prvih asociranih Ležandrovih polinoma koji će se koristiti dalje u radu su:

$$P_0^0(x) = 1,$$

$$P_1^0(x) = x, \qquad P_1^1(x) = (1-x^2)^{\frac{1}{2}},$$

$$P_2^0(x) = \frac{1}{2}(3x^2-1), \qquad P_2^1(x) = 3x(1-x^2)^{\frac{1}{2}}, \qquad P_2^2(x) = 3(1-x^2),\ldots$$

Ako se imaju u vidu ove relacije, jednostavnim transformacijama dobijamo sledeće:

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(3(1-\mu^2)\frac{\cos 2\varphi}{2}-\frac{1}{2}(3\mu^2-1)\right) = -\frac{e}{r^3}\cdot\left(P_2^2(\mu)\frac{\cos 2\varphi}{2}-P_2(\mu)\right),$$

$$\frac{Q_{xx}}{r^5} = -\frac{e\cdot t^{\frac{3}{2}}}{(e\rho)^{\frac{3}{2}}}\cdot\left(P_2^2(\mu)\frac{\cos 2\varphi}{2}-P_2(\mu)\right).$$

Na ovaj način su određeni svi članovi koji figurišu u izrazu za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, pa se dalje dobija:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{i}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot(e\rho)^{\frac{3}{2}}\cdot t^{-\frac{5}{2}}\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\frac{e\cdot t^{\frac{3}{2}}}{(e\rho)^{\frac{3}{2}}}\cdot\left[P_2^2(\mu)\frac{\cos 2\varphi}{2}-P_2(\mu)\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot$$
$$\cdot(2l+1)\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot\left[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\right].$$

Pošto je sumiranje po indeksu l nezavisno od bilo koje integracije, ono može da se izvuče na početak izraza za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\left[P_2^2(\mu)\frac{\cos 2\varphi}{2}-P_2(\mu)\right]\cdot$$
$$\cdot\left[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\right]. \tag{F.1}$$

Da bi se pristupilo analizi prethodne relacije, podintegralni članovi se moraju međusobno izmnožiti, što daje:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\left[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\frac{\cos 2\varphi}{2}-\right.$$
$$-P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu)+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\cdot$$
$$\left.\cdot\frac{\cos 2\varphi}{2}-\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\right].$$

Uvlačenjem integracije po promenljivoj φ u zagradu, omogućuje se pojednostavljivanje izraza, pošto će neki od integrala identički biti jednaki nuli ili će u rezultatu sadržati Kronekerov simbol:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\left[\frac{1}{2}\cdot P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\right.$$

$$\cdot\cos 2\varphi - P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi + \sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\cdot$$

$$\cdot\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r) - \sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2(\mu)\cdot$$

$$\left.\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\right].$$

Razmotrićemo integrale po uglu φ onim redom kojim se javljaju u poslednjoj jednakosti za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$. Prvi integral po φ identički je jednak nuli:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi = 0,$$

pa prvi član u zagradi otpada. U drugom članu integracija po φ daje faktor 2π, dok treći član sadrži nešto složeniji integral, koji se razvijanjem prema (11.8) transformiše u:

$$I \equiv \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\big(\cos m\varphi_\rho\cdot\cos m\varphi + \sin m\varphi_\rho\cdot\sin m\varphi\big),$$

$$I = \cos m\varphi_\rho\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\cos m\varphi + \sin m\varphi_\rho\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\sin m\varphi.$$

Da bi se prethodni integrali sveli na tablične, a samim tim i da bi bilo moguće njihovo izračunavanje, moramo primeniti poznate trigonometrijske identičnosti:

$$\cos\alpha\cdot\cos\beta = \frac{1}{2}\big(\cos(\alpha+\beta)+\cos(\alpha-\beta)\big),$$
$$\cos\alpha\cdot\sin\beta = \frac{1}{2}\big(\sin(\alpha+\beta)-\sin(\alpha-\beta)\big).$$

Korišćenjem ovih relacija integral I se svodi na zbir četiri tablična integrala:

$$I = \frac{\cos m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\big(\cos(2+m)\varphi+\cos(2-m)\varphi\big) + \frac{\sin m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\big(\sin(2+m)\varphi-\sin(2-m)\varphi\big),$$

od kojih je od nule različit samo drugi integral. Kao rešenje ovog integrala javlja se i Kronekerov simbol koji će u daljoj analizi u mnogome pojednostaviti račun:

$$I = \frac{\cos m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos(2-m)\varphi = \frac{\cos m\varphi_\rho}{2}\cdot 2\pi\cdot\delta_{2,m} = \pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot\delta_{2,m},$$

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = \pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot\delta_{2,m}. \tag{F.2}$$

Integral po promenljivoj φ koji se javlja u četvrtom članu izraza za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, ima vrednost različitu od nule samo u slučaju da je m jednako nuli:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = 2\pi\cdot\delta_{m,0}.$$

Pošto pri sumiranju indeks m uzima vrednosti veće ili jednake jedinici, čitav ovaj član će biti jednak nuli. Imajući sve navedeno u vidu, izraz za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$ postaje:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\Big[-P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu)\cdot 2\pi +$$
$$+\sum_{m=1}^{l}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\cdot\pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot\delta_{2,m}\Big].$$

Sada se u zagradu uvlači i integracija po promenljivoj μ, ali se prethodno mora uzeti u obzir da u sumi po m opstaje samo član za $m=2$, pa dalje možemo pisati:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot\Big[-2\pi\cdot P_l(\mu_\rho)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu) +$$
$$+\pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\cdot P_l^2(\mu_\rho)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l^2(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\Big].$$

Integrali po promenljivoj μ, svojim oblikom nalažu da se primene relacije za ortogonalnost Ležandrovih (13.16) i asociranih Ležandrovih polinoma. Prvi član u zagradi sadrži integral sa Ležandrovim polinomima i on je jednak:

$$\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu) = \frac{2}{2l+1}\cdot\delta_{l,2} = \frac{2}{5}\cdot\delta_{l,2}.$$

Drugi član u zagradi sadrži integrale sa asociranim Ležandrovim polinomima, čija je osobina ortogonalnosti data na sledeći način:

$$\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}x\cdot P_n^k(x)\cdot P_m^k(x) = \frac{2}{2n+1}\cdot\frac{(n+k)!}{(n-k)!}\cdot\delta_{n,m}, \qquad k\le n, m = 0,1,2,\ldots, \tag{F.3}$$

dok je vrednost integrala jednaka

$$\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l^2(\mu)\cdot P_2^2(\mu) = \frac{2}{5}\cdot\frac{(l+2)!}{(l-2)!}\cdot\delta_{l,2}.$$

Vrednost ovih integrala se uvrštava u izraz za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, koji je već sada dobio mnogo jednostavniju formu za rešavanje:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot\Big[-2\pi\cdot P_l(\mu_\rho)\cdot\frac{2}{5}\cdot\delta_{l,2}+\pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot$$
$$\cdot\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\cdot P_l^2(\mu_\rho)\cdot\frac{2}{5}\cdot\frac{(l+2)!}{(l-2)!}\cdot\delta_{l,2}\Big].$$

I u prvom i u drugom sabirku u zagradi opstaju samo članovi sume za koje je $l=2$, pa relacija postaje:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = \frac{ie}{2}\cdot 5\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t)\cdot\Big[-2\pi\cdot P_2(\mu_\rho)\cdot\frac{2}{5}+\pi\cdot\cos 2\varphi_\rho\cdot P_2^2(\mu_\rho)\frac{2}{5}\Big],$$

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot 2\pi e\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t)\cdot\Big[\frac{\cos 2\varphi_\rho}{2}\cdot P_2^2(\mu_\rho)-P_2(\mu_\rho)\Big].$$

Promenljive μ_ρ i φ_ρ se u integralu po t ponašaju kao parametri, odnosno funkcije ovih promenljivih mogu nesmetano da se napišu ispred integrala.

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot 2\pi e\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\Big[\frac{\cos 2\varphi_\rho}{2}\cdot P_2^2(\mu_\rho)-P_2(\mu_\rho)\Big]\cdot\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot t^{-\frac{3}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t).$$

Dakle, za određivanje veličine $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, neophodno je izračunati integral koji sadrži Beselovu funkciju. Za njegovo rešavanje iskoristićemo rezultat [22] zadatak 3822, koji se može predstaviti kao:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \cdot x^n \cdot J_m(x) = 2^n \cdot \Gamma\Big(\frac{m+n+1}{2}\Big) \cdot \Big[\Gamma\Big(\frac{m-n+1}{2}\Big)\Big]^{-1}.$$

Ako se umesto m uvrsti vrednost $5/2$, a umesto n vrednost $-3/2$, za rešenje integrala dobijamo:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot t^{-\frac{3}{2}} \cdot J_{\frac{5}{2}}(t) = 2^{-\frac{3}{2}} \cdot \Gamma\Big(\frac{\frac{5}{2}-\frac{3}{2}+1}{2}\Big) \cdot \Big[\Gamma\Big(\frac{\frac{5}{2}+\frac{3}{2}+1}{2}\Big)\Big]^{-1} = 2^{-\frac{3}{2}} \cdot \Gamma(1) \cdot \Big[\Gamma\Big(\frac{5}{2}\Big)\Big]^{-1},$$

$$\int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot t^{-\frac{3}{2}} \cdot J_{\frac{5}{2}}(t) = 2^{-\frac{3}{2}} \cdot 1 \cdot \Big[\frac{3}{2} \cdot \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\Big]^{-1} = 2^{-\frac{3}{2}} \cdot \frac{4}{3\sqrt{\pi}} = \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}}. \tag{F.4}$$

Sada se ova vrednost može uvrstiti u izraz za $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, pa dalje sledi:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot 2\pi e \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \Big[\frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} \cdot P_2^2(\mu_\rho) - P_2(\mu_\rho)\Big] \cdot \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}},$$

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot \frac{2\pi e}{3} \cdot \Big[\frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} \cdot P_2^2(\mu_\rho) - P_2(\mu_\rho)\Big].$$

Na ovaj način u potpunosti je određena vrednost veličine $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$, koja se može napisati i na nešto drugačiji način. Naime, zamenom veličine μ_ρ, veličinom $\cos\theta_\rho$ konačno se dobija:

$$C_1^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot \frac{2\pi e}{3} \cdot \Big[P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} - P_2(\cos\theta_\rho)\Big]. \tag{F.5}$$

Postupak za određivanje $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ je potpuno analogan, samo se u ovom slučaju koriste neke relacije koje su već izvedene u prethodnom slučaju. Veličina $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ je definisana relacijom (13.5) i ima oblik:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = i \int_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \frac{Q_{zz}}{r^5} \cdot \exp\Big(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\Big).$$

Komponenta tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{zz} (12.9), se može u sfernom koordinatnom sistemu prikazati kao:

$$\frac{Q_{zz}}{r^5} = -e \cdot \frac{3z^2 - r^2}{r^5} = -\frac{e}{r^5} \cdot \big(3r^2 \cdot \cos^2\theta - r^2\big) = -\frac{e}{r^3} \cdot \big(3\cos^2\theta - 1\big).$$

Uzimanjem u obzir veze između promenljivih $\mu = \cos\theta$ i oblika Ležandrovih polinoma, imamo sledeće:

$$\frac{Q_{zz}}{r^5} = -\frac{e}{r^3} \cdot \big(3\mu^2 - 1\big) = -\frac{2e}{r^3} \cdot \frac{1}{2}\big(3\mu^2 - 1\big) = -\frac{e}{r^3} \cdot 2P_2(\mu).$$

Čitav račun koji bi sada trebalo da sledi, u potpunosti se poklapa sa onim izvedenim u slučaju $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$. Jedina razlika se ogleda u tome, što komponenta Q_{zz} zavisi od Ležandrovih polinoma na drugačiji način. Zbog toga je dovoljno u relaciju (F.1) uvrstiti $2P_2(\mu)$ umesto člana koji potiče od komponente Q_{xx}. Ovaj postupak će se koristiti i u izračunavanju ostalih veličina $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$. Dakle, za izraz $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ dobijamo:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot \frac{1}{t}\Big(\frac{\pi}{2t}\Big)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi \cdot 2P_2(\mu) \cdot \Big[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu) +$$

$$+ \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_r)\Big].$$

Posle množenja svih članova i ubacivanja integracije po uglu φ u zagradu, imamo sledće:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l \cdot (2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot \frac{1}{t}\Big(\frac{\pi}{2t}\Big)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\Big[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot 2P_2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi +$$

$$+ \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu) \cdot 2P_2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_r)\Big].$$

U prvom članu u zagradi integracija po φ daje faktor 2π, dok drugi član nestaje zbog toga što rezultat integracije sadrži Kronekerov simbol $\delta_{m,0}$, a to je već bilo razmotreno kod izračunavanja $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot 2P_2(\mu)\cdot 2\pi.$$

Sada je potrebno izdvojiti integraciju po promenljivoj μ, a potom iskoristiti osobinu ortogonalnosti Ležandrovih polinoma:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot 2\pi e\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot P_l(\mu_\rho)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l(\mu)\cdot P_2(\mu),$$

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot 2\pi e\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot P_l(\mu_\rho)\cdot\frac{2}{5}\cdot\delta_{l,2}.$$

U sumi po indeksu l opstaje samo član za koji je $l=2$, pa se izraz za $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ prilično pojednostavljuje:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot\frac{4\pi e}{5}\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot P_2(\mu_\rho)\cdot 5\cdot\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot t^{-\frac{3}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t).$$

Integral koji se javlja u ovoj relaciji već je izračunat i dat jednakošću (F.4), pa dalje sledi:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot 4\pi e\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot P_2(\mu_\rho)\cdot\frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}} = i\cdot\frac{4\pi e}{3}\cdot P_2(\mu_\rho).$$

Posle smene promenljive μ_ρ, konačno se za veličinu $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ dobija:

$$C_2^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot\frac{4\pi e}{3}\cdot P_2(\cos\theta_\rho). \tag{F.6}$$

Sada prelazimo na izračunavanje vrednosti veličine $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$ koja je definisana relacijom (13.6) i glasi:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = i\int_{|\vec{r}|=0}^{\infty}\mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{xy}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right).$$

Komponenta tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{xy} data je izrazom (12.7), a u sfernom koordinatnom sistemu ima oblik:

$$\frac{Q_{xy}}{r^5} = -e\cdot\frac{3xy}{r^5} = -\frac{e}{r^5}\cdot 3r^2\cdot\sin\theta\cdot\cos\varphi\cdot\sin\theta\cdot\sin\varphi = -\frac{3e}{r^3}\cdot\sin^2\theta\cdot\cos\varphi\cdot\sin\varphi,$$

$$\frac{Q_{xy}}{r^5} = -\frac{3e}{r^3}\cdot(1-\cos^2\theta)\cdot\frac{\sin 2\varphi}{2}.$$

Ako se uvede smena promenljivih $\mu=\cos\theta$, lako se može utvrditi da ova komponenta tenzora zavisi od asociranog Ležandrovog polinoma $P_2^2(\mu)$:

$$\frac{Q_{xy}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot 3(1-\mu^2)\cdot\frac{\sin 2\varphi}{2} = -\frac{e}{r^3}\cdot P_2^2(\mu)\cdot\frac{\sin 2\varphi}{2}.$$

Ova zavisnost se uvrštava u relaciju (F.1), pošto je račun koji prethodi, potpuno isti kao i u slučaju $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$. Naravno, član koji potiče od komponente Q_{xx} se izbacuje, a izraz postaje:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot P_2^2(\mu)\cdot\frac{\sin 2\varphi}{2}\cdot\Bigg[P_l(\mu_\rho)\cdot$$

$$\cdot P_l(\mu)+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\Bigg].$$

Množenjem članova i ubacivanjem integracije po promenljivoj φ u zagradu, dobija se forma koja je pogodna za analizu, kao što je to bio slučaj i u prethodnim izračunavanjima:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{4}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\Big[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi +$$

$$+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2^2(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\Big].$$

U prvom članu se javlja integral koji je identički jednak nuli:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi = 0,$$

pa ovaj član nestaje. Drugi član sadrži nešto složeniji oblik integrala po promenljivoj φ, koji se razvijanjem prema (11.8) transformiše u:

$$I \equiv \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = \int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\big(\cos m\varphi_\rho\cdot\cos m\varphi+\sin m\varphi_\rho\cdot\sin m\varphi\big),$$

$$I = \cos m\varphi_\rho\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\cos m\varphi+\sin m\varphi_\rho\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\sin m\varphi.$$

Da bi se prethodni integrali sveli na tablične, a samim tim i da bi bilo moguće njihovo izračunavanje, moramo primeniti poznate trigonometrijske identičnosti:

$$\sin\alpha\cdot\cos\beta = \frac{1}{2}\big(\sin(\alpha+\beta)+\sin(\alpha-\beta)\big),$$

$$\sin\alpha\cdot\sin\beta = \frac{1}{2}\big(\cos(\alpha-\beta)-\cos(\alpha+\beta)\big).$$

Uvrštavanjem ovih relacija integral I se svodi na zbir četiri tablična integrala:

$$I = \frac{\cos m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\big(\sin(2+m)\varphi+\sin(2-m)\varphi\big)+\frac{\sin m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\big(\cos(2-m)\varphi-\cos(2+m)\varphi\big),$$

od kojih je samo treći različit od nule. U rešenju ovog integrala figuriše i Kronekerov simbol koji će dalje odrediti moguće vrednosti indeksa m:

$$I = \frac{\sin m\varphi_\rho}{2}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\cos(2-m)\varphi = \frac{\sin m\varphi_\rho}{2}\cdot 2\pi\cdot\delta_{m,2},$$

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin 2\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = \pi\cdot\sin 2\varphi_\rho\cdot\delta_{2,m}. \tag{F.7}$$

Dakle, u izrazu za veličinu $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$ ostaje samo drugi sabirak u zagradi:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{4}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot$$

$$\cdot P_2^2(\mu)\cdot\pi\cdot\sin 2\varphi_\rho\cdot\delta_{2,m}.$$

Kronekerov simbol skida sumu po indeksu m i ostavlja samo član za koji je $m = 2$, dok integracija po promenljivoj μ sadrži asocirane Ležandrove polinome:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot\frac{e\pi}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\cdot\sin 2\varphi_\rho\cdot P_l^2(\mu_\rho)\int_0^\infty\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l^2(\mu)\cdot$$

$$\cdot P_2^2(\mu).$$

Relacija (F.3) koja predstavlja osobinu ortogonalnosti asociranih Ležandrovih polinoma, omogućuje rešavanje integrala po μ:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = -i \cdot \frac{e\pi}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot \frac{(l-2)!}{(l+2)!} \cdot \sin 2\varphi_\rho \cdot P_l^2(\mu_\rho) \int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot \frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}} J_{l+\frac{1}{2}}(t) \cdot \frac{2}{5}\frac{(l+2)!}{(l-2)!} \cdot \delta_{l,2},$$

dok od sume po indeksu l ostaje samo član za koji je $l = 2$

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot \frac{e\pi}{2} \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \frac{2}{5} \cdot 5 \cdot \sin 2\varphi_\rho \cdot P_2^2(\mu_\rho) \int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot t^{-\frac{3}{2}} \cdot J_{\frac{5}{2}}(t).$$

Vrednost integrala po promenljivoj t određena je relacijom (F.4), pa izraz za $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$ dobija sledeći oblik:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot e\pi \cdot \sqrt{\frac{\pi}{2}} \cdot \sin 2\varphi_\rho \cdot P_2^2(\mu_\rho) \cdot \frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}} = i \cdot \frac{e\pi}{3} \cdot \sin 2\varphi_\rho \cdot P_2^2(\mu_\rho).$$

Konačna vrednost $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$, dobija se kada se izvrši smena promenljive μ_ρ i ona iznosi:

$$C_3^{(1)}(\vec{\rho}) = i \cdot \frac{e\pi}{3} \cdot P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \sin 2\varphi_\rho. \tag{F.8}$$

Na sličan način se dobija i vrednost veličine $C_4^{(1)}(\vec{\rho})$ koja je definisana relacijom (13.7):

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = i \int_{|\vec{r}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{r} \cdot \frac{Q_{xz}}{r^5} \cdot \exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right).$$

Komponenta tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{xz} određena je relacijom (12.7), a u sfernom koordinatnom sistemu ima oblik:

$$\frac{Q_{xz}}{r^5} = -e \cdot \frac{3xz}{r^5} = -\frac{e}{r^5} \cdot 3r^2 \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \cdot \cos\theta = -\frac{e}{r^3} \cdot 3\cos\theta \cdot (1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \cdot \cos\varphi.$$

Smenom promenljive $\mu = \cos\theta$ i uvođenjem izraza za asociran Ležandrov polinom $P_2^1(\mu)$, izraz za komponentu Q_{xz} postaje:

$$\frac{Q_{xz}}{r^5} = -\frac{e}{r^3} \cdot 3\mu \cdot (1-\mu^2)^{\frac{1}{2}} \cdot \cos\varphi = -\frac{e}{r^3} \cdot P_2^1(\mu) \cdot \cos\varphi.$$

Kao što je to bio slučaj i u prethodnim izračunavanjima, poslednji izraz uvrštavamo u relaciju (F.1), pa se dobija:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot \frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot P_2^1(\mu) \cdot \cos\varphi \cdot \Big[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu) +$$
$$+ \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu) \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_r)\Big].$$

Kada se integracija po promenljivoj φ ubaci u zagradu, prvi član će nestati s obzirom da je intgral po φ identički jednak nuli:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}t \cdot \frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu \Big[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu) \cdot P_2^1(\mu) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \cos\varphi +$$
$$+ \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu) \cdot P_2^1(\mu) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \cos\varphi \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_r)\Big].$$

Što se tiče drugog člana, on sadrži integral koji je po obliku sličan integralu (F.2). Razlika se ogleda u tome što je vrednost 2φ zamenjena vrednošću φ, a to ima za posledicu da Kronekerov simbol sdrži jedinicu umesto dvojke:

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \cdot \cos\varphi \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi) = \pi \cdot \cos\varphi_\rho \cdot \delta_{1,m}. \tag{F.9}$$

Ako se ima u vidu sve što je prethodno navedeno, izraz za veličinu $C_4^{(1)}(\vec{\rho})$ postaje:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot$$
$$\cdot P_2^1(\mu)\cdot\pi\cdot\cos\varphi_\rho\cdot\delta_{1,m}.$$

Dakle, u sumi po indeksu m opstaje samo član za koji je $m = 1$, a integracija po promenljivoj μ sadrži asocirane Ležandrove polinome, pa dalje sledi:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot e\pi\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\cdot\cos\varphi_\rho\cdot P_l^1(\mu_\rho)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l^1(\mu)\cdot$$
$$\cdot P_2^1(\mu).$$

Vrdnost koja se dobija integracijom asociranih Ležandrovih polinoma nalazi se prema (F.3), pa $C_4^{(1)}(\vec{\rho})$ postaje:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot e\pi\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\cdot\cos\varphi_\rho\cdot P_l^1(\mu_\rho)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot\frac{2}{5}\frac{(l+1)!}{(l-1)!}\cdot\delta_{l,2}.$$

Kronekerov simbol $\delta_{l,2}$ skida sumu po indeksu l ostavljajući samo član za koji je $l = 2$, dok je vrednost integrala po promenljivoj t određena relacijom (F.4):

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot e\pi\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\frac{2}{5}\cdot 5\cdot\cos\varphi_\rho\cdot P_2^1(\mu_\rho)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot t^{-\frac{3}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t),$$

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot 2e\pi\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\cos\varphi_\rho\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}} = i\cdot\frac{2\pi e}{3}\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\cos\varphi_\rho.$$

Konačan izraz za $C_4^{(1)}(\vec{\rho})$, posle zamene promenljive μ_ρ, jednak je:

$$C_4^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot\frac{2\pi e}{3}\cdot P_2^1(\cos\theta_\rho)\cdot\cos\varphi_\rho. \tag{F.10}$$

Preostalo je još samo da se odredi izraz za veličinu $C_5^{(1)}(\vec{\rho})$ koja je definisana relacijom (13.8) i glasi:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = i\int_{|\vec{r}|=0}^{\infty}\mathrm{d}^3\vec{r}\cdot\frac{Q_{yz}}{r^5}\cdot\exp\left(-ie\frac{\vec{\rho}\cdot\vec{r}}{r^3}\right).$$

U prethodnoj relaciji se javlja komponenta tenzora električnog kvadrupolnog momenta Q_{yz} koja je definisana relacijom (12.8), a u sfernim koordinatama ima oblik:

$$\frac{Q_{yz}}{r^5} = -e\cdot\frac{3yz}{r^5} = -\frac{e}{r^5}\cdot 3r^2\cdot\sin\theta\cdot\sin\varphi\cdot\cos\theta = -\frac{e}{r^3}\cdot 3\cos\theta\cdot(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\cdot\sin\varphi.$$

Smenom $\mu = \cos\theta$ i uvrštavanjem asociranog Ležandrovog polinoma $P_2^1(\mu)$, oblik komponente q_{yz} se transformiše u:

$$\frac{Q_{yz}}{r^5} = -\frac{e}{r^3}\cdot 3\mu\cdot(1-\mu^2)^{\frac{1}{2}}\cdot\sin\varphi = -\frac{e}{r^3}\cdot P_2^1(\mu)\cdot\sin\varphi.$$

Sada se dobijena relacija za komponentu Q_{yz} uvrsti u (F.1), na isti način kao što je to bio slučaj i prethodnim proračunima:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot P_2^1(\mu)\cdot\sin\varphi\cdot\Big[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)+$$
$$+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\Big].$$

Nakon ubacivanja integracije po promenljivoj φ u zagradu, može se uočiti da prvi član nestaje, jer je integral po φ identički jednak nuli:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\Big[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu)\cdot P_2^1(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin\varphi +$$

$$+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot P_2^1(\mu)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_r)\Big].$$

Integral po φ u drugom članu je po obliku sličan integralu (F.7), samo je potrebno izvršiti smenu 2φ u φ i zameniti dvojku jedinicom u Kronekerovom simbolu:

$$\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\sin\varphi\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi) = \pi\cdot\sin\varphi_\rho\cdot\delta_{1,m}.$$

Uvrštavanjem ovog rezultata u izraz za $C_5^{(1)}(\vec{\rho})$, dobijamo sledeće:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = -\frac{ie}{2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu)\cdot$$

$$\cdot P_2^1(\mu)\cdot\pi\cdot\sin\varphi_\rho\cdot\delta_{1,m}.$$

Suma po indeksu m se svodi na samo jedan član kada je $m = 1$, a integracija po μ sadrži asocirane Ležandrove polinome:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot e\pi\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\cdot\sin\varphi_\rho\cdot P_l^1(\mu_\rho)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu\cdot P_l^1(\mu)\cdot$$

$$\cdot P_2^1(\mu).$$

Prema relaciji (F.3) koja definiše osobinu ortogonalnosti asociranih Ležandrovih polinoma, može se odrediti vrednost integrala po μ, pa dalje sledi:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = -i\cdot e\pi\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\cdot\sin\varphi_\rho\cdot P_l^1(\mu_\rho)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot\frac{1}{t}\left(\frac{\pi}{2t}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(t)\cdot\frac{2}{5}\frac{(l+1)!}{(l-1)!}\cdot\delta_{l,2}.$$

Od sume po indeksu l opstaje samo jedan član za koji je $l = 2$, a integral po promenljivoj t je određen relacijom (F.4), pa imamo:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot e\pi\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\frac{2}{5}\cdot 5\cdot\sin\varphi_\rho\cdot P_2^1(\mu_\rho)\int_0^\infty \mathrm{d}t\cdot t^{-\frac{3}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(t),$$

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot 2e\pi\cdot\sqrt{\frac{\pi}{2}}\cdot\sin\varphi_\rho\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\frac{1}{3}\sqrt{\frac{2}{\pi}} = i\cdot\frac{2\pi e}{3}\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\sin\varphi_\rho.$$

Posle zamene promenljive μ_ρ, konačno se dibija izraz za $C_5^{(1)}(\vec{\rho})$ koji glasi:

$$C_5^{(1)}(\vec{\rho}) = i\cdot\frac{2\pi e}{3}\cdot P_2^1(\cos\theta_\rho)\cdot\sin\varphi_\rho. \tag{F.11}$$

Na ovaj način su određene sve veličine $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$ koje će biti neophodne u računu.

Dodatak G

Određivanje prvih momenata funkcije raspodele jačine jonskog polja W

U ovom delu biti izračunati svi prvi momenti $\langle g_\alpha \rangle_{\vec{F}}$ funkcije raspodele jačine jonskog polja $W(\vec{F}, g_1, \ldots, g_5)$ po odgovarajućim komponentama tenzora nehomogenosti jonskog polja koje su definisane relacijom (13.25). Prvi moment koji je neophodno izračunati je $\langle g_1 \rangle_{\vec{F}}$, i to prema relaciji:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{i}{(2\pi)^3} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \left[\frac{\partial}{\partial \sigma_1} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)\right]. \tag{G.1}$$

U ovoj relaciji jedino nam nije poznat izraz za parcijalan izvod po σ_1. Njega nalazimo na taj način što koristimo relaciju za funkciju $A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5)$ (13.24) i nju parcijalno diferenciramo:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_1} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = \frac{\partial}{\partial \sigma_1}\left[\exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot \left[1 - N \sum_{\alpha=1}^{5} C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho}) \cdot \sigma_\alpha\right]\right],$$

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_1} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot C_1^{(1)}(\vec{\rho}).$$

U rezultatu figuriše i veličina $C_1^{(1)}(\vec{\rho})$ koja je već određena i njena vrednost je data relacijom (F.5), pa parcijalan izvod postaje:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_1} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot i \cdot \frac{2\pi e}{3} \cdot \left[P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} - P_2(\cos\theta_\rho)\right].$$

Uvrštavanjem ovog izvoda u relaciju (G.1), dobijamo sledeće:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3(2\pi)^2} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \left[P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} - P_2(\cos\theta_\rho)\right].$$

Sledeći korak podrazumeva uvrštavanje izraza za veličinu $C^{(0)}(\rho)$ i to prema relaciji (13.23), što kao rezultat daje sledeće:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3(2\pi)^2} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left[P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} - P_2(\cos\theta_\rho)\right].$$

Integracija po veličini $\vec{\rho}$ u prethodnoj relaciji se transformiše u integraciju u sfernom koordinatnom sistemu, a eksponencijalna funkcija se razvija prema poznatom obrascu (13.14), pa dobijamo:

$$\begin{aligned} w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = &-\frac{Ne}{3(2\pi)^2} \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \int\limits_0^{\pi} \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot \\ &\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_l(\cos\theta_\rho) \cdot P_l(\cos\theta_F) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F) \cdot \right. \\ &\left. \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\right] \cdot \left[P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} - P_2(\cos\theta_\rho)\right]. \end{aligned} \tag{G.2}$$

Sumiranje po indeksu l može da zameni mesta sa svim integralima, jer su ove operacije međusobno nezavisne. Takođe se uvode smene promenljivih $\mu_\rho = \cos\theta_\rho$ i $\mu_F = \cos\theta_F$, dok se integracija po uglu φ_ρ uvlači u zagradu:

$$
\begin{aligned}
w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = &- \frac{Ne}{3(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot \\
&\cdot \left[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot P_2^2(\mu_\rho) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot \right. \\
&\cdot P_2^2(\mu_\rho) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \frac{\cos 2\varphi_\rho}{2} \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F) - P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot P_2(\mu_\rho) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho - \\
&\left. - \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_2(\mu_\rho) \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F) \right].
\end{aligned}
$$

Sada se pristupa analizi svakog člana u zagradi. Prvi član nestaje pošto je integral po φ_ρ identički jednak nuli, dok je vrednost integrala u drugom članu određena u jednom od prethodnih proračuna, a data je relacijom (F.2) uz prethodnu smenu promenljivih $\varphi \to \varphi_\rho$ i $\varphi_\rho \to \varphi_F$. Vrednost integrala u trećem članu u zagradi je 2π, dok je poslednji član identički jednak nuli, pošto rezultat integracije po φ_ρ sadrži Kronekerov simbol $\delta_{m,0}$. Ako se sve ovo uzme u obzir, relacija za $w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}}$ postaje:

$$
\begin{aligned}
w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = &- \frac{Ne}{3(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot \\
&\cdot \left[\sum_{m=1}^{l} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot P_2^2(\mu_\rho) \cdot \pi \cdot \cos 2\varphi_F \cdot \delta_{m,2} - P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot \right. \\
&\left. \cdot P_2(\mu_\rho) \cdot 2\pi \right].
\end{aligned}
$$

U sumi po ideksu m opstaje samo jedan član i to kada je $m = 2$, dok se u integracijama po promenljivoj μ_ρ javljaju Ležandrovi i asocirani Ležandrovi polinomi:

$$
\begin{aligned}
w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = &- \frac{Ne}{3 \cdot 2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_l^2(\mu_F) \cdot \right. \\
&\left. \cdot \frac{(l-2)!}{(l+2)!} \cdot \frac{\cos 2\varphi_F}{2} \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l^2(\mu_\rho) \cdot P_2^2(\mu_\rho) - P_l(\mu_F) \int_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho) \cdot P_2(\mu_\rho) \right].
\end{aligned}
$$

Vrednosti integrala po promenljivoj μ_ρ, lako se određuju upotrebom relacija (F.3) i (13.16) koje se odnose na osobinu ortogonalnosti ovi polinoma, pa se dalje dobija:

$$
\begin{aligned}
w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = &- \frac{Ne}{3 \cdot 2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_l^2(\mu_F) \cdot \right. \\
&\left. \cdot \frac{(l-2)!}{(l+2)!} \cdot \frac{\cos 2\varphi_F}{2} \cdot \frac{2}{5} \cdot \frac{(l+2)!}{(l-2)!} \cdot \delta_{l,2} - P_l(\mu_F) \cdot \frac{2}{5} \cdot \delta_{l,2} \right].
\end{aligned}
$$

U oba člana u zagradi se javlja Kronekerov simbol $\delta_{l,2}$ koji dovodi do toga da od čitave sume po indeksu l ostane samo član za koji je $l = 2$. Ako se zatim ispred integrala izdvoje sve veličine koje ne zavise od ρ,

dobija se sledeće:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_2^2(\mu_F) \cdot \frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right],$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi} \cdot \left[P_2^2(\mu_F) \cdot \frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_1 \rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi} \cdot \left[P_2^2(\mu_F) \cdot \frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right] \cdot I$$

U prethodnoj relaciji veličina I predstavlja integral po promenljivoj ρ, koji će biti rešavan posebno. Prethodno se mora uzeti u obzir izraz za Beselovu funkciju $J_{\frac{5}{2}}(\rho F)$ (13.19), a potom uvesti parametar β i normalna jačina jonskog polja F_0. Na taj način se dobija:

$$I \equiv \left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$I = \left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \sqrt{\frac{2}{\pi \cdot \rho F}} \cdot \left[\left(\frac{3}{(\rho F)^2} - 1\right) \cdot \sin(\rho F) - \frac{3}{\rho F} \cdot \cos(\rho F)\right],$$

$$I = \frac{1}{\beta F_0} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left[\frac{3}{(\rho\beta F_0)^2} \cdot \sin(\rho\beta F_0) - \sin(\rho\beta F_0) - \frac{3}{\rho\beta F_0} \cdot \cos(\rho\beta F_0)\right].$$

Potrebno je uvesti smenu promenljive $v = \rho F_0$, što za posledicu ima sledeću transformaciju integrala:

$$I = \frac{1}{\beta F_0^3} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \left[\frac{3}{(\beta v)^2} \cdot \sin(\beta v) - \sin(\beta v) - \frac{3}{\beta v} \cdot \cos(\beta v)\right].$$

Da bi se ovaj integral svео na poznate funkcije, mora se prvo predstaviti kao zbir dva integrala:

$$I = -\frac{1}{\beta^2 F_0^3} \cdot \left[\int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \beta v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \sin(\beta v) + 3 \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \left[\cos(\beta v) - \frac{1}{\beta v} \cdot \sin(\beta v)\right]\right].$$

Prvi od njih je srazmeran Holtsmarkovoj funkciji $H(\beta)$, dok je drugi srazmeran integralu funkcije $H(\beta)$. Ispravnost prvog tvrđenja je očigledna, dok je za dokazivanje druge neophodno krenuti od izraza za integral funkcije $H(\beta)$:

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') = \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \beta' v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \cdot \sin(\beta' v),$$

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot \beta' \cdot \sin(\beta' v).$$

Za izračunavanje poslednjeg integrala po β', koristićemo relaciju iz matematičke analize, a određuje vrednost integrala koji nam je neophodan:

$$\int \mathrm{d}x \cdot x \cdot \sin(ax) = -\frac{x}{a} \cdot \cos(ax) + \frac{1}{a^2} \cdot \sin(ax), \qquad a = const.$$

Uvrštavanjem ovog izraza u integral Holtsmarkove funkcije, dobija se sledeće:

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \left[-\frac{\beta}{v} \cdot \cos(v\beta) + \frac{1}{v^2} \cdot \sin(v\beta)\right],$$

$$\int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta') = -\frac{2\beta}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right) \left[\cos(v\beta) - \frac{1}{\beta v} \cdot \sin(v\beta)\right].$$

Iz prethodne relacije se može izraziti integral po promenljivoj v i to na sledeći način:

$$\int_0^\infty \mathrm{d}v \cdot \exp\left(-v^{\frac{3}{2}}\right)\left[\cos(v\beta) - \frac{1}{\beta v}\cdot\sin(v\beta)\right] = -\frac{\pi}{2\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\beta' \cdot H(\beta'),$$

čime smo eksplicitno pokazali da je vrednost drugog integrala u izrazu za I srazmerna integralu funkcije $H(\beta)$. Imajući ovu činjenicu u vidu, izraz za integral I se uz neznatne transformacije može prikazati kao:

$$I = -\frac{1}{\beta^2 F_0^3}\cdot\left[\frac{\pi}{2}\cdot H(\beta) - \frac{3\pi}{2\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\beta'\cdot H(\beta')\right],$$

$$I = -\frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2 F_0^3}\cdot\left[1 - \frac{3}{\beta\cdot H(\beta)}\int_0^\beta \mathrm{d}\beta'\cdot H(\beta')\right] = \frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2 F_0^3}\cdot\left[\frac{3}{\beta\cdot H(\beta)}\int_0^\beta \mathrm{d}\beta'\cdot H(\beta') - 1\right].$$

Izraz u poslednjoj zagradi predstavlja Fon Neumanovu[1] funkciju $B(\beta)$:

$$B(\beta) = \frac{3}{\beta\cdot H(\beta)}\int_0^\beta \mathrm{d}\beta'\cdot H(\beta') - 1. \tag{G.3}$$

Uvođenjem ove funkcije u izraz za integral I, on dobija oblik:

$$I \equiv \left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^{\frac{3}{2}}\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F) = \frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2 F_0^3}\cdot B(\beta). \tag{G.4}$$

Ako se sada vratimo na izraz za proizvod $w(\vec{F})\cdot\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$ i uvrstimo u njega vrednost za integral I (G.4), kao rezultat dobijamo sledeće:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi}\cdot\left[P_2^2(\mu_F)\cdot\frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right]\cdot\frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2 F_0^3}\cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot\left[P_2^2(\mu_F)\cdot\frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right]\cdot\frac{H(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2 F_0^3}\cdot B(\beta).$$

U prethodnu relaciju može se uvrstiti izraz za funkciju raspodele $w(\vec{F})$ koja je definisana izrazom (13.26):

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot\left[P_2^2(\mu_F)\cdot\frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\mu_F)\right]\cdot w(\vec{F})\cdot B(\beta),$$

a nakon skraćivanja dobija se i konačan izraz za prvi moment $\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$

$$\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot\left[P_2^2(\cos\theta_F)\cdot\frac{\cos 2\varphi_F}{2} - P_2(\cos\theta_F)\right].$$

Ovakav oblik prvog momenta $\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$ nije pogodan za dalja izračunavanja, već je neophodno izvršiti smenu promenljivih θ_F i φ_F u θ i ψ. Naravno, menjaju se i funkcije ovih uglova:

$$\cos\theta_F = \cos\theta,$$

$$\cos 2\varphi_F = \cos 2(\psi - \frac{\pi}{2}) = \cos 2\psi\cdot\cos\pi = -\cos 2\psi.$$

Uvrštavanjem ovih izraza u relaciju za $\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$, dobijamo sledeći oblik:

$$\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = -\frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot\left[P_2^2(\cos\theta)\cdot\frac{\cos 2\psi}{2} + P_2(\cos\theta)\right].$$

Ako se ima u vidu zavisnost Ležandrovih i asociranih Ležandrovih polinoma od funkcije $\cos\theta$, izraz za $\langle g_1\rangle_{\vec{F}}$ se može prikazati i na sledeći način:

$$\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = -\frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot\left[3(1-\cos^2\theta)\cdot\frac{\cos 2\psi}{2} + \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1)\right],$$

$$\langle g_1\rangle_{\vec{F}} = -\frac{\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot\left[3\sin^2\theta\cdot\cos 2\psi + 3\cos^2\theta - 1\right]. \tag{G.5}$$

[1] Von Neumann

Sada se prelazi na određivanje izraza za prvi moment $\langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$. Parcijalan izvod koji je neophodan za izračunavenje je dat prema relaciji koja je potpuno analogna onoj u prethodnom slučaju:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_2} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot C_2^{(1)}(\vec{\rho}).$$

Vrednost veličine $C_2^{(1)}(\vec{\rho})$ je određena relacijom (F.6), pa dalje imamo:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_2} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot i \cdot \frac{4\pi e}{3} \cdot P_2(\cos\theta_\rho).$$

Ovaj parcijalan izvod po promenljivoj σ_2 se uvrštava u relaciju za proizvod $w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$, a veličina $C^{(0)}(\rho)$ se izražava preko jačine normalnog jonskog polja F_0:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{2Ne}{3(2\pi)^2} \int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot P_2(\cos\theta_\rho).$$

Poslednja relacija je u potpunosti analogna odgovarajućoj relaciji koja se javlja u prethodnom slučaju gde se izračunavao prvi moment $\langle g_1 \rangle_{\vec{F}}$, samo je poslednji član koji sadrži Ležandrove polinome iz veličina $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$ različit. Ovo ima za posledicu to, da možemo da koristimo gotovu relaciju (G.2), ali ako prethodno zamenimo član sa Ležandrovim polinomima koji potiču od $C_\alpha^{(1)}(\vec{\rho})$:

$$\begin{aligned} w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = &-\frac{2Ne}{3(2\pi)^2} \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \int\limits_0^{\pi} \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot \\ &\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_l(\cos\theta_\rho) \cdot P_l(\cos\theta_F) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F) \cdot \right. \\ &\left. \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\right] \cdot P_2(\cos\theta_\rho). \end{aligned}$$

Kada se integracije po uglu φ_ρ ubace u zagradu, svaki od članova se može razmatrati zasebno:

$$\begin{aligned} w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = &-\frac{2Ne}{3(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int\limits_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot \\ &\cdot \left[P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot P_2(\mu_\rho) \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\mu_F) \cdot P_2(\mu_\rho) \cdot \right. \\ &\left. \cdot \int\limits_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\right]. \end{aligned}$$

Prva integracija po φ_ρ daje faktor 2π, dok druga ima u rezultatu Kronekerov simbol $\delta_{m,0}$, što za posledicu ima to da je drugi član identički jednak nuli:

$$\begin{aligned} w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = &-\frac{2Ne}{3(2\pi)^2} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \int\limits_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot \\ &\cdot P_l(\mu_\rho) \cdot P_l(\mu_F) \cdot P_2(\mu_\rho) \cdot 2\pi. \end{aligned}$$

Polinom $P_l(\mu_F)$ bi trebalo napisati ispred integrala po μ_ρ i time dobiti oblik na koji se može primeniti ortogonalnost Ležandrovih polinoma:

$$\begin{aligned} w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = &-\frac{2Ne}{3 \cdot 2\pi} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \int\limits_0^{\infty} \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot P_l(\mu_F) \cdot \\ &\cdot \int\limits_{-1}^{+1} \mathrm{d}\mu_\rho \cdot P_l(\mu_\rho) \cdot P_2(\mu_\rho). \end{aligned}$$

Ortogonalnost Ležandrovih polinoma dovodi do toga, da samo član za koji je $l = 2$ ostaje od cele sume, a izraz za $w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$ postaje:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2Ne}{3 \cdot 2\pi} \cdot \frac{2}{5} \cdot 5 \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F) \cdot P_2(\mu_F),$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2Ne}{3\pi} \cdot P_2(\mu_F) \cdot \left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2Ne}{3\pi} \cdot P_2(\mu_F) \cdot I.$$

Vrednost integrala I je određena i data relacijom (G.4), pa se dalje dobija:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2Ne}{3\pi} \cdot P_2(\mu_F) \cdot \frac{\pi \cdot H(\beta)}{2 \cdot \beta^2 F_0^3} \cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{4\pi Ne}{3} \cdot P_2(\mu_F) \cdot \frac{H(\beta)}{4\pi \cdot \beta^2 F_0^3} \cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{4\pi Ne}{3} \cdot P_2(\mu_F) \cdot w(\vec{F}) \cdot B(\beta).$$

Nakon skraćivanja prethodne relacije i vraćanjem smene za μ_F, može se izraziti vrednost momenta $\langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$ koja glasi:

$$\langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{4\pi Ne}{3} \cdot B(\beta) \cdot P_2(\cos\theta_F).$$

Smenom promenljive $\theta_F = \theta$ i imajući u vidu izraz za polinom $P_2(\cos\theta)$, nalazimo konačan izraz za moment $\langle g_2 \rangle_{\vec{F}}$:

$$\langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{4\pi Ne}{3} \cdot B(\beta) \cdot P_2(\cos\theta),$$

$$\langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{4\pi Ne}{3} \cdot B(\beta) \cdot \frac{1}{2}(3\cos^2\theta - 1),$$

$$\langle g_2 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3} \cdot B(\beta) \cdot (3\cos^2\theta - 1). \tag{G.6}$$

Na potpuno analogan način se nalazi i prvi moment $\langle g_3 \rangle_{\vec{F}}$. Parcijalan izvod koji je neophodan za izračunavanje ovog momenta, dat je na sledeći način:

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_3} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot C_3^{(1)}(\vec{\rho}).$$

Uvrštavanjem veličine $C_3^{(1)}(\vec{\rho})$ čija je vrednost određena relacijom (F.8), parcijalan izvod po promenljivoj σ_3 postaje:

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_3} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot i \cdot \frac{e\pi}{3} \cdot P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \sin 2\varphi_\rho.$$

Ovaj izraz se sada uvrštava u relaciju koja definiše proizvod $w(\vec{F}) \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}}$, uz smenu veličine $C^{(0)}(\rho)$, što za rezultat ima:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6(2\pi)^2} \int_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty} \mathrm{d}^3\vec{\rho} \cdot \exp(-i\vec{\rho}\vec{F}) \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \cdot P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \sin 2\varphi_\rho.$$

Primenom istih transformacija kojim je dobijena relacija (G.2), može se izvesti sledeća formula za $w(\vec{F}) \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}}$:

$$w(\vec{F}) \cdot \langle g_3 \rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6(2\pi)^2} \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \cdot \rho^2 \cdot \exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right] \int_0^\pi \mathrm{d}\theta_\rho \cdot \sin\theta_\rho \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi_\rho \cdot \left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{l=0}^{\infty} (-i)^l \cdot (2l+1) \cdot$$

$$\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F) \cdot \left[P_l(\cos\theta_\rho) \cdot P_l(\cos\theta_F) + \sum_{m=1}^{l} 2\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho) \cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F) \cdot \right.$$

$$\left. \cdot \cos m(\varphi_\rho - \varphi_F)\right] \cdot P_2^2(\cos\theta_\rho) \cdot \sin 2\varphi_\rho.$$

Množenjem svih članova u podintegralnoj funkciji, kao i ubacivanjem integracije po promenljivoj φ_ρ u zagradu, može se izvesti sledeća pogodna forma za analizu:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot$$
$$\cdot\left[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu_F)\cdot P_2^2(\mu_\rho)\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_\rho\cdot\sin 2\varphi_\rho + \sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu_F)\cdot\right.$$
$$\left.\cdot P_2^2(\mu_\rho)\cdot\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_\rho\cdot\sin 2\varphi_\rho\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_F)\right].$$

Integracija po φ_ρ u prvom članu u zagradi daje faktor 2π, a vrednost inegrala u drugom članu je već izračunata i data relacijom (F.7) u kojoj se moraju izvršiti smene promenljivih $\varphi\to\varphi_\rho$ i $\varphi_\rho\to\varphi_F$, pa se dalje dobija:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot$$
$$\cdot\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu_F)\cdot P_2^2(\mu_\rho)\cdot\pi\cdot\sin 2\varphi_F\cdot\delta_{m,2}.$$

U sumi po indeksu m ostaju samo član za koji je $m=2$, dok se u integralu po μ_ρ javljaju asocirani Ležandrovi polinomi:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot$$
$$\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\cdot P_l^2(\mu_F)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot P_l^2(\mu_\rho)\cdot P_2^2(\mu_\rho).$$

Ortogonalnost asociranih Ležandrovih polinoma (F.3), omogućuje rešavanje integrala po promenljivoj μ_ρ:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{6\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-2)!}{(l+2)!}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot$$
$$\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\cdot P_l^2(\mu_F)\cdot\frac{2}{5}\cdot\frac{(l+2)!}{(l-2)!}\cdot\delta_{l,2}.$$

U sumi po indeksu l od nule je različit samo član za koji je $l=2$, a ova činjenica dovodi do pojednostavljivanja izraza za $w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}}$:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{6\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot 5\cdot\frac{2}{5}\cdot P_2^2(\mu_F)\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot P_2^2(\mu_F)\cdot\left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^{\frac{3}{2}}\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot P_2^2(\mu_F)\cdot I.$$

Vrednost integrala I se može uzeti iz relacije (G.4), a nakon toga se neznatnim transformacijama može dobiti sledeće:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot P_2^2(\mu_F)\cdot\frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2F_0^3}\cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{\pi Ne}{3}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot P_2^2(\mu_F)\cdot\frac{H(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2F_0^3}\cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{\pi Ne}{3}\cdot\sin 2\varphi_F\cdot P_2^2(\mu_F)\cdot w(\vec{F})\cdot B(\beta).$$

Skraćivanjem obe strane posledjeg izraza funkcijom raspodele $w(\vec{F})$ i vraćanjem smene za μ_F, za prvi moment $\langle g_3\rangle_{\vec{F}}$ se konačno dobija:

$$\langle g_3\rangle_{\vec{F}} = \frac{\pi N e}{3}\cdot B(\beta)\cdot P_2^2(\cos\theta_F)\cdot\sin 2\varphi_F.$$

Prelaskom na funkcije θ i ψ, kao i transformisanjem trigonometrijskih funkcija:

$$\sin 2\varphi_F = \sin 2(\psi - \frac{\pi}{2}) = \sin 2\psi\cdot\cos\pi = -\sin 2\psi,$$

može se dobiti izaraz za $\langle g_3\rangle_{\vec{F}}$ u sistemu koordinata xyz. Naravno, uzima se u obzir i oblik Ležandrovog polinom $P_2^2(\cos\theta)$, pa je konačan izraz za prvi moment $\langle g_3\rangle_{\vec{F}}$:

$$\begin{aligned}
\langle g_3\rangle_{\vec{F}} &= -\frac{\pi N e}{3}\cdot B(\beta)\cdot P_2^2(\cos\theta)\cdot\sin 2\psi,\\
\langle g_3\rangle_{\vec{F}} &= -\frac{\pi N e}{3}\cdot B(\beta)\cdot 3(1-\cos^2\theta)\cdot\sin 2\psi,\\
\langle g_3\rangle_{\vec{F}} &= -\pi N e\cdot B(\beta)\cdot\sin^2\theta\cdot\sin 2\psi.
\end{aligned}\tag{G.7}$$

Sledi određivanje prvog momenta $\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$, a parcijalan izvod koji je neophodan za ovo izračunavanje je dat sledećom relacijom:

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_4}A(\vec{\rho},\sigma_1,\ldots,\sigma_5) = -N\cdot\exp\left[-N\cdot C^{(0)}(\rho)\right]\cdot C_4^{(1)}(\vec{\rho}).$$

Vrednost veličine $C_4^{(1)}(\vec{\rho})$ je određena izrazom (F.10), pa parcijalan izvod postaje:

$$\frac{\partial}{\partial\sigma_4}A(\vec{\rho},\sigma_1,\ldots,\sigma_5) = -N\cdot\exp\left[-N\cdot C^{(0)}(\rho)\right]\cdot i\cdot\frac{2\pi e}{3}\cdot P_2^1(\cos\theta_\rho)\cdot\cos\varphi_\rho.$$

Kada se ovaj izvod uvrsti u relaciju za proizvod $w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$ i kada se uvrsti izraz za veličinu $C^{(0)}(\rho)$, dobijamo sledeće:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3(2\pi)^2}\int\limits_{|\vec{\rho}|=0}^{\infty}\mathrm{d}^3\vec{\rho}\cdot\exp(-i\vec{\rho}\vec{F})\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot P_2^1(\cos\theta_\rho)\cdot\cos\varphi_\rho.$$

Primenom istih transformacija kojim je dobijena relacija (G.2), može se izvesti sledeća formula za proizvod $w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$:

$$\begin{aligned}
w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = &-\frac{Ne}{3(2\pi)^2}\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\int\limits_0^{\pi}\mathrm{d}\theta_\rho\cdot\sin\theta_\rho\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_\rho\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\\
&\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\cdot\left[P_l(\cos\theta_\rho)\cdot P_l(\cos\theta_F)+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\cos\theta_F)\cdot\right.\\
&\left.\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_F)\right]\cdot P_2^1(\cos\theta_\rho)\cdot\cos\varphi_\rho.
\end{aligned}$$

Množenjem svih članova u podintegralnoj funkciji i uvlačenjem integracije po promenljivoj φ_ρ u zagradu, dobija se sledeće:

$$\begin{aligned}
w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = &-\frac{Ne}{3(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int\limits_0^{\infty}\mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\int\limits_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot\\
&\cdot\left[P_l(\mu_\rho)\cdot P_l(\mu_F)\cdot P_2^1(\mu_\rho)\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_\rho\cdot\cos\varphi_\rho+\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu_F)\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\right.\\
&\left.\cdot\int\limits_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_\rho\cdot\cos\varphi_\rho\cdot\cos m(\varphi_\rho-\varphi_F)\right].
\end{aligned}$$

Integral po φ_ρ u prvom članu u zagradi identički je jednak nuli, dok je integral u drugom članu već izračunat i dat relacijom (F.9). Imajući ovo u vidu možemo izvesti sledeće:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot$$

$$\cdot\sum_{m=1}^{l}2\frac{(l-m)!}{(l+m)!}\cdot P_l^{|m|}(\mu_\rho)\cdot P_l^{|m|}(\mu_F)\cdot P_2^1(\mu_\rho)\cdot\pi\cdot\cos\varphi_F\cdot\delta_{m,1}.$$

U sumi po indeksu m opstaje samo jedan član i to onaj za koji je $m=1$:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\cos\varphi_F\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\cdot P_l^1(\mu_F)\int_{-1}^{+1}\mathrm{d}\mu_\rho\cdot P_l^1(\mu_\rho)\cdot P_2^1(\mu_\rho).$$

Integracija po promenljivoj μ_ρ izračunava se na osnovu osobine ortogonalnosti asociranih Ležandrovih polinoma (F.3), pa dalje imamo:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = -\frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\cos\varphi_F\sum_{l=0}^{\infty}(-i)^l\cdot(2l+1)\cdot\frac{(l-1)!}{(l+1)!}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot$$

$$\cdot J_{l+\frac{1}{2}}(\rho F)\cdot P_l^1(\mu_F)\cdot\frac{2}{5}\cdot\frac{(l+1)!}{(l-1)!}\cdot\delta_{l,2}.$$

U sumi po indeksu l od nule je različit samo član za koji je $l=2$, što u mnogome pojednostavljuje račun. Nakon neznatnih transformacija, može se dobiti sledeći oblik:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\cdot 2\pi}\cdot\cos\varphi_F\cdot 5\cdot\frac{2}{5}\cdot P_2^1(\mu_F)\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^2\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot\left(\frac{\pi}{2\rho F}\right)^{\frac{1}{2}}\cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi}\cdot\cos\varphi_F\cdot P_2^1(\mu_F)\cdot\left(\frac{\pi}{2F}\right)^{\frac{1}{2}}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\cdot\rho^{\frac{3}{2}}\cdot\exp\left[-(\rho F_0)^{\frac{3}{2}}\right]\cdot J_{\frac{5}{2}}(\rho F),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi}\cdot\cos\varphi_F\cdot P_2^1(\mu_F)\cdot I.$$

Imajući u vidu da je vrednost integrala I poznata (G.4) za proizvod $w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$ se dobija:

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{Ne}{3\pi}\cdot\cos\varphi_F\cdot P_2^1(\mu_F)\cdot\frac{\pi\cdot H(\beta)}{2\cdot\beta^2F_0^3}\cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot\cos\varphi_F\cdot P_2^1(\mu_F)\cdot\frac{H(\beta)}{4\pi\cdot\beta^2F_0^3}\cdot B(\beta),$$

$$w(\vec{F})\cdot\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot\cos\varphi_F\cdot P_2^1(\mu_F)\cdot w(\vec{F})\cdot B(\beta).$$

Nakon skraćivanja prethodne relacije funkcijom raspodele $w(\vec{F})$ i vraćanjem smene za μ_F, lako se nalazi izraz za $\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$:

$$\langle g_4\rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot P_2^1(\cos\theta_F)\cdot\cos\varphi_F.$$

Prelazak na promenljive θ i ψ zahteva i sledeću transformaciju:

$$\cos\varphi_F = \cos(\psi-\frac{\pi}{2}) = \sin\psi\cdot\sin\frac{\pi}{2} = \sin\psi.$$

Uvrštavanjem izraza za asociran Ležandrov polinom $P_2^1(\cos\theta)$, izraz za prvi moment $\langle g_4\rangle_{\vec{F}}$ zadobija svoj krajnji oblik:

$$\begin{aligned}\langle g_4\rangle_{\vec{F}} &= \frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot P_2^1(\cos\theta)\cdot\sin\psi,\\ \langle g_4\rangle_{\vec{F}} &= \frac{2\pi Ne}{3}\cdot B(\beta)\cdot 3\cos\theta(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}}\cdot\sin\psi,\\ \langle g_4\rangle_{\vec{F}} &= 2\pi Ne\cdot B(\beta)\cdot\cos\theta\cdot\sin\theta\cdot\sin\psi.\end{aligned}\tag{G.8}$$

Preostalo je još samo da se izračuna vrednost poslednjeg momenta $\langle g_5 \rangle_{\vec{F}}$, a za to je neophodno odrediti parcijalan izvod:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_5} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot C_5^{(1)}(\vec{\rho}).$$

Vrednost za veličinu $C_5^{(1)}(\vec{\rho})$ izračunata je i data relacijom (F.11), pa izvod po promenljivoj σ_5 postaje:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_5} A(\vec{\rho}, \sigma_1, \ldots, \sigma_5) = -N \cdot \exp\left[-N \cdot C^{(0)}(\rho)\right] \cdot i \cdot \frac{2\pi e}{3} \cdot P_2^1(\cos\theta_\rho) \cdot \sin\varphi_\rho.$$

Važno je uočiti da je oblik ovog izvoda isti kao i u prethodnom slučaju, samo je funkcija $\sin\varphi_\rho$ zamenjena $\cos\varphi_\rho$. Zbog toga se može uzeti rešenje za moment $\langle g_4 \rangle_{\vec{F}}$ i u njemu funkciju $\cos\varphi_F$ zameniti funkcijom $\sin\varphi_F$:

$$\langle g_5 \rangle_{\vec{F}} = \frac{2\pi N e}{3} \cdot B(\beta) \cdot P_2^1(\cos\theta_F) \cdot \sin\varphi_F.$$

Prelaskom na promenljive θ i ψ, kao i transformacijom trigonometrijske funkcije:

$$\sin\varphi_F = \sin(\psi - \frac{\pi}{2}) = -\cos\psi \cdot \sin\frac{\pi}{2} = -\cos\psi,$$

može se konačno dobiti vrednost prvog momenta $\langle g_5 \rangle_{\vec{F}}$. Naravno, mora se uzeti u obzir i izraz za asociran Ležandrov polinom $P_2^1(\cos\theta)$, pa se konačno dobija:

$$\begin{aligned}
\langle g_5 \rangle_{\vec{F}} &= -\frac{2\pi N e}{3} \cdot B(\beta) \cdot P_2^1(\cos\theta) \cdot \cos\psi, \\
\langle g_5 \rangle_{\vec{F}} &= -\frac{2\pi N e}{3} \cdot B(\beta) \cdot 3\cos\theta(1-\cos^2\theta)^{\frac{1}{2}} \cdot \cos\psi, \\
\langle g_5 \rangle_{\vec{F}} &= -2\pi N e \cdot B(\beta) \cdot \cos\theta \cdot \sin\theta \cdot \cos\psi.
\end{aligned} \tag{G.9}$$

Na ovaj način su određeni svi prvi momenti funkcije raspodele jačine jonskog polja W.

Dodatak H

Posebne napomene

NAPOMENA 1: U Šolinovom radu [1], relacija (21) se razlikuje od (6.18) ovog rada u članu koji potiče od kvadrupolne interakcije. Naime, koeficijent 3/16 u radu [1] bi trebalo zameniti faktorom 3/8, odnosno povećati ga dva puta. Mora se naglasiti da u izrazu (21) ne figriše faktor $1/4\pi\varepsilon_0$, pošto su sva izvođenja u [1] obavljena u CGS-sistemu. Prelaz u SI-sistem zahteva dodavanje ovog člana i to se ne sme gubiti iz vida kada se vrši bilo kakvo izračunavanje, a koriste se gotove formule rada [1].

NAPOMENA 2: Šolinov rezultat (relacija (25) u radu [1]) se u poređenju sa relacijom (7.3) razlikuje u predznacima ispred članova $6(n_1 - n_2)^2 n^2$ i $6(n_1' - n_2')^2 n'^2$, što je posledica štamparske greške. Ovo se može zaključiti na primer iz vrednosti za Δ^{q} koje su navedene u Tablici 1. istog rada. Za liniju Ly-α koja odgovara prelazu $|2\{1,0,0\}\rangle \to |1\{0,0,0\}\rangle$ vrednost Δ^{q} prema relaciji (7.3) iznosi:

$$\Delta^{\mathrm{q}}_{2\to 1} = \frac{1}{3}\cdot\left[2^4 - 2^2 - 6(1-0)^2\cdot 2^2 - 1^4 + 1^2 + 6(0-0)^2\cdot 1^2\right] = -4,$$

a to je upravo vrednost navedena u Tablici 1. Prema relaciji iz Šolinovog rada vrednost Δ^{q} bi trebalo da bude 12, što očigledno nije tačno.

NAPOMENA 3: U radu [1], relacija (27) koja definiše koeficijent $b_{n\to n'}$, razlikuje se od (7.9) ovog rada u stepenu po λ_0. Treći stepen λ_0 bi trebalo zameniti drugim stepenom, a tačna defiicija za $b_{n\to n'}$ bi bila:

$$b_{n\to n'} = -\frac{3}{4\pi}\cdot\frac{e}{\hbar c}\cdot\frac{a_0^2}{R_0}\cdot\left(\lambda^{(0)}_{n\to n'}\right)^2\cdot\Delta^{\mathrm{q}}_{n\to n'}.$$

NAPOMENA 4: U radu [2], relacija koja definiše koeficijent C_k se razlikuje od izraza (14.19) po tome što je u [2] uvršteno jedno elementarno naelektrisanje viška e, odnosno ispravno bi bilo sledeće:

$$C_k = \frac{3}{2}\cdot\frac{ea_0}{\hbar}\cdot F_0\cdot\Delta^{\mathrm{d}}_k.$$

Ovaj rezultat i dimenziono odgovara s obzirom da su mu dimenzije:

$$[C_k] = \frac{\mathrm{Cm}}{\mathrm{Js}}\cdot\frac{\mathrm{V}}{\mathrm{m}} = \frac{\mathrm{Jm}}{\mathrm{Js}}\cdot\frac{1}{\mathrm{m}} = \frac{1}{\mathrm{s}}$$

NAPOMENA 5: U radu [2], veličina δ_k se definiše kao

$$\delta_k = \frac{2\pi}{3}\cdot\frac{Nea_0}{|F_0|}\cdot\varepsilon_k,$$

što se poklapa sa (14.25). Međutim, u ovoj relaciji figuriše ε_k koje je određeno izrazom (9.8), a ova relacija se pak od Šolinove [2] razlikuje u faktoru 1/2. Zaključujemo, da je u [2] ispušten ovaj faktor, a greška je popravljena u kasnijem radu [17].

NAPOMENA 6: U radu [2], veličina P_k se definiše kao

$$P_k = \frac{2\pi}{3}\cdot\frac{Nea_0}{|F_0|}\cdot Q^{\gamma}_k = \frac{2\pi}{3}\cdot\frac{Nea_0}{|F_0|}\cdot\frac{3}{2}\cdot\frac{e^2a_0}{\hbar}\cdot\Delta^{\gamma}_k = \pi\cdot\frac{Ne^3a_0^2}{\hbar|F_0|}\cdot\Delta^{\gamma}_k.$$

Međutim, prema relaciji (14.26) veličina P_k je definisana kao:

$$P_k = \pi \cdot \frac{Nea_0}{|F_0|} \cdot \Delta_k^{\mathrm{c}},$$

što je u suprotnosti sa rezultatom u radu [2].

NAPOMENA 7: Da bi izvođenje za oblik profila bočnih komponenti bilo ispravno, u relaciji (14.27) se mora definisati veličina $\mathcal{X}_k$ koja se javlja umesto veličine H_k u izrazu (31) rada [2]:

$$\mathcal{X}_k = \frac{|F_0|}{e} \cdot H_k = \frac{|F_0|}{e} \cdot \frac{\pi \cdot Ne^3 a_0^2}{\hbar \cdot F_0} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}} = \frac{\pi \cdot Ne^2 a_0^2}{\hbar} \cdot \Delta_k^{\mathrm{q}}.$$

Ova funkcija se javlja i kasnije, u svim rezultatima u kojima figuriše H_k. Naravno, zbog ove smene po obliku se razlikuju i sve ostale funkcije koje zavise od H_k.

NAPOMENA 8: Izraz za profil bočnih komponenti koji je dat relacijom (14.28), razlikuje se od izraza (33) u [2] samo po faktoru $(2\pi)^8$. Ovaj faktor je verovatno posledica neke integralne transformacije i to u nesimetričnom slučaju, s obzirom da se tada kao faktor javlja 2π. Međutim, normiranjem intenziteta na jedinicu razlika u ovom faktoru se gubi, a relacije (14.28) i (33) iz [2] postaju ekvivalentne.

Bibliografija

[1] Г. В. Шолин. Теория асимметрии штарковских профилей водородных линий в плотной плазме. *Оптика и спектроскопия*, (26):489–505, 1969.

[2] А. В. Демура, Г.В. Шолин. Теория асимметрии штарковских профилей водородных линий в плотной плазме. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, (15):881–899, 1975.

[3] А. А. Соколов, И. М. Тернов, В. Ч. Жуковский. *Квантовая механика.* Наука, Москва, 1979.

[4] B. Milić Đ. Mušicki. *Matematičke osnove teorijske fizike sa zbirkom rešenih zadataka.* Naučna knjiga, Beograd, 1975.

[5] D. S. Mitrinović. *Specijalne funkcije, Zbornik zadataka i problema.* Naučna knjiga, Beograd, 1990.

[6] E. E. Salpeter H. A. Bethe. *Quantum mechanics of one- and two-electron atoms.* Springer-Verlag, Berlin, 1957.

[7] E. M. Lifšic L. D. Landau. *Kvantna mehanika - nerelativistička teorija.* Građevinska knjiga, Beograd, 1966.

[8] D. M. Ivanović. *Kvantna mehanika.* Naučna knjiga, Beograd, 1974.

[9] L. I. Šif. *Kvantna mehanika.* Vuk Karadžić, Beograd, 1968.

[10] А. С. Давыдов. *Квантовая механика* . Наука, Москва, 1973.

[11] D. S. Mitrinović. *Uvod u specijalne funkcije.* Građevinska knjiga, Beograd, 1986.

[12] А. Зоммерфельд. *Строение атома и спектры.* Государственное издательство технико-теоретической литературы, Москва, 1956.

[13] W. Gordon. *Ann. d. Phys.*, (2):1031, 1929.

[14] A. B. Underhill. *Publ. Dominion Astrophys. Obs.*, (8):386, 1951.

[15] П. В. Елютин, В. Д. Кривченков. *Квантовая механика.* Наука, Москва, 1976.

[16] Г. В. Шолин, В. С. Лисица, В. И. Коган. *ЖТЭФ*, (59):1390, 1970.

[17] А. В. Демура, В. В. Плешков, Г. В. Шолин. Атлас детальных штарковских контуров водородных спектральных линий в плотной плазме. Москва, 1991.

[18] Г. В. Шолин, А. В. Демура, В. С. Лисица. *ЖТЭФ*, (64):2097, 1973.

[19] C. Vidal J. Cooper, E. Smith. *J. Phys.*, (B7):L101, 1974.

[20] J. Holtsmark. *Ann. Physic*, (58):577, 1919.

[21] S. Chandrasekhar. *Rev. Mod. Phys.* , (15):1, 1943.

[22] P. M. Miličić M. P. Ušćumlić. *Zbirka zadataka iz više matematike II.* Nauka, Beograd, 1994.

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: *Marijana Kirćan, br. dos. 147/95*
  AU
- ☐ Mentor: *dr Darko Kapor*
  MN
- ☐ Naslov rada: *Proračun oblika spektralnih linija neutralnog vodonika u aproksimaciji najbližeg suseda*
  NR
- ☐ Jezik publikacije: *srpski-latinica*
  JP
- ☐ Jezik izvoda: *srpski*
  JI
- ☐ Zemlja publikovanja: *Jugoslavija*
  ZP
- ☐ Uže geografsko područje: *Vojvodina*
  UGP
- ☐ Godina: *2000.*
  GO
- ☐ Izdavač: *Autorski reprint*
  IZ
- ☐ Mesto i adresa: *Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, 21000 Novi Sad*
  MA
- ☐ Fizički opis rada:
  FO
- ☐ Naučna oblast: *Fizika*
  NO
- ☐ Naučna disciplina: *Fizika atoma i molekula*
  ND
- ☐ Predmetna odrednica / Ključne reči: *Fizika, atom vodonika, Štarkov efekat*
  PO
  UDK:

☐ Čuva se:
ČU

☐ Važna napomena: *nema*
VN

☐ Izvod:
IZ

☐ Datum prihvatanja teme od strane NN veća:
DP

☐ Datum odbrane:
DO

☐ Članovi komisije: (*naučni stepen / ime i prezime / zvanje / fakultet*)

- mentor: *dr Darko Kapor, redovan profesor, PMF u Novom Sadu*
- član komisije: *dr Stevica Đurović, redovan profesor, PMF u Novom Sadu*
- član komisије: *dr Zoran Mijatović, docent, PMF u Novom Sadu*

KO

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ
ИНСТИТУТ ЗА ФИЗИКУ
Библиотека
НОВИ САД