Balmerova série

Abstrakt

Smyslem úlohy "Balmerova série" je změření Rydbergovy konstanty z naměřených vlnových délek spektrálních čar $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$ ve spektru vodíku. Tyto vlnové délky čar jsou měřeny hranolovým spektrometrem 5601.1. K měření je nezbytné zjistit disperzní křivku $n = n(\lambda)$ pro sklo, z kterého je hranol vyroben, což lze zjistit tak, že pro známé vlnové délky (čar z Hg a Na spektra) se naměří přislušný index lomu. Z disperzní křivky lze pak určit vlnové délky čar vodíkového spektra.

Pomůcky: Goniometr S Go 1.1 - návod na `http://fyzport.fjfi.cvut.cz/Hardware/Goniometr/goniometr.pdf`, štěrbina, kolimátorový nitkový kříž, hranol, rtuťová, sodíková a vodíková výbojka, návod ke goniometru, návod k úloze, webová stránka `http://astro.u-strasbg.fr/~koppen/discharge/index.html`,

1 Základní pojmy a vztahy

1.1 Bohrův model atomu

Podle klasické elektrodynamiky se planetární model atomu, kde záporně nabité elektrony obíhají podle Keplerových zákonů kolem kladně nabitého jádra, hroutí, neboť elektrony jakožto nabité částice pohybující se po zakřivené dráze ztrácejí svou energii vyzařováním a nakonec po čase (cca 10^{-15} s) spadnou na jádro. Dále podle planetárního modelu by také spektrum záření pocházející z těchto elektronů mělo být spojité, ale spektroskopická měření toto nepotrvdila. Spektrum vyzařovaného záření se ukázalo být diskrétní. Navíc zde existovala Planckova hypotéza týkající se energetického spektra harmonického oscilátoru.

Tyto všechny argumenty vedly k tomu, že Niels Bohr postuloval v r. 1913 pro atom toto:

- Atomy a atomové soustavy mohou setrvávat delší dobu v určitých stavech (*stacionárních stavech*), ve kterých bez ohledu na to, jaké pohyby vykonávají nabité částice, nevyzařují ani nepohlcují energii. V těchto stavech nabývají atomové soustavy takových hodnot energie, které tvoří diskrétní spektrum $E_1, \ldots, E_{\mathfrak{n}}$.
- Při přechodu z jednoho stacionárního stavu na jiný dojde k vyzáření nebo k pohlcení energie ve formě fotonu a platí

$$h\nu = E_m - E_{\mathfrak{n}}, \tag{1}$$

  kde h je Planckova konstanta a ν kmitočet.

Princip korespondence

Jeden z nejpoužívanějších fyzikálních principů. Jak jsme se zmínili v předchozím odstavci, Bohrova teorie je klasickou teorií, která má v sobě zahrnuty kvantovací podmínky (Kvantovou mechanikou v pravém slova smyslu není, neboť pracuje s fyzikálními veličinami jako s čísly, zatímco kvantová mechanika jako s operátory). Existují zde tedy 2 teorie:

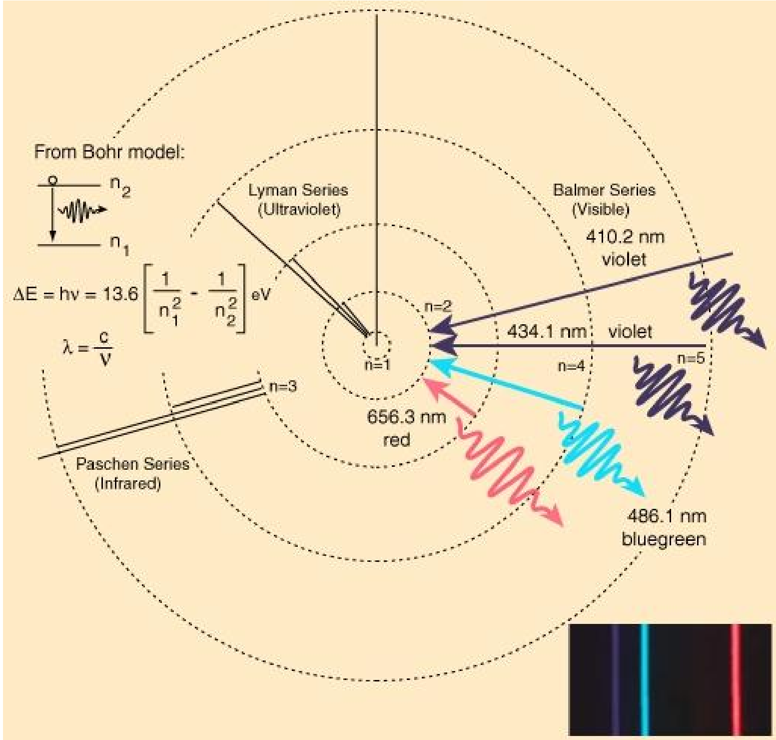
- Klasickou - popisuje makroskopická tělesa, například pohyb planet Sluneční soustavy kolem Slunce.
- Bohrovu - popisuje mikroskopickou strukturu, atom vodíku.

Zároveň ale víme, že makroskopické jevy klasická mechanika popisuje spolehlivě a s dostatečnou přesností. Bohrova teorie by měla být tedy obecnější a měla by umět popsat i makroskopické jevy, kde by měla dávat tytéž výsledky, jako klasická mechanika. Jinými slovy by v oblasti makroskopických jevů měla s klasickou mechanikou korespondovat. Jelikož je Bohrova teorie klasickou teorií s dodatečnými kvantovacími podmínkami, měla by se ona korespondence týkat právě těchto podmínek. A skutečně, podíváme-li se na vztah (6)), tak vidíme, že v případě vyskokých kvantových čísel je rozdíl mezi energetickými hladinami malý až nekonečně malý a spektrum se tedy stává spojitým.

Spektrální série energetických hladin atomu vodíku a výpočet Rydbergovy konstanty

Při studiu spektrálních čar atomárního vodíku (1885) bylo zjištěno, že vlnové délky čtyř čar ležících ve viditelné části spektra a označených symboly $H_\alpha, H_\beta, H_\gamma, H_\delta$ mohou být vyjádřeny empirickým vztahem

$$\lambda = B\frac{\mathfrak{n}^2}{\mathfrak{n}^2 - 4}, \quad \mathfrak{n} = 3, 4, 5, 6, \; B = 364.56\text{nm}. \tag{2}$$



Obrázek 1: Atom vodíku - energetické hladiny

Ve spektroskopii se často používá místo vlnové délky tzv. *vlnočtu* ν, což je převrácená hodnota vlnové délky:

$$\nu = \frac{1}{\lambda} = \underbrace{\frac{4}{B}}_{R} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{\mathfrak{n}^2} \right), \tag{3}$$

kde R je Rydbergova konstanta. Ze vzorce (3) je zřejmé, že s růstnem $\mathfrak{n}$ se zmenšuje rozdíl mezi vlnočty sousedních čar a při $n = \infty$ dostaneme konstantní hodnotu $\nu = R/2^2$.

Zároveň s Balmerovou sérií byly objeveny ve spektru atomárního vodíku ještě jiné série (viz. obr. 2), které lze vyjádřit úplně analogickými vzorci a zobecnit se to dá do vzorce:

$$\nu = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{\mathfrak{n}^2} \right), \tag{4}$$

kde m má v každé sérii konstantní hodnotu ($m = 1, 2, 3, 4, 5$). Tyto série se nazývají ve směru rostoucího m: Lymanova, Balmerova, Paschenova, Brackettova, Pfundova. Ze zobecněného Balmerova vzorce (4) je patrno, že vlnočet libovolné spektrální čáry lze vyjádřit jako rozdíl dvou členů typu $\frac{R}{m^2}$ a $\frac{R}{\mathfrak{n}^2}$. V tom spočívá formulace tzv. kombinačního principu. Zavedeme-li označení

$$T_m = \frac{R}{m^2}, \qquad T_\mathfrak{n} = \frac{R}{\mathfrak{n}^2},$$

můžeme (4) napsat ve tvaru rozdílu dvou funkcí celých čísel

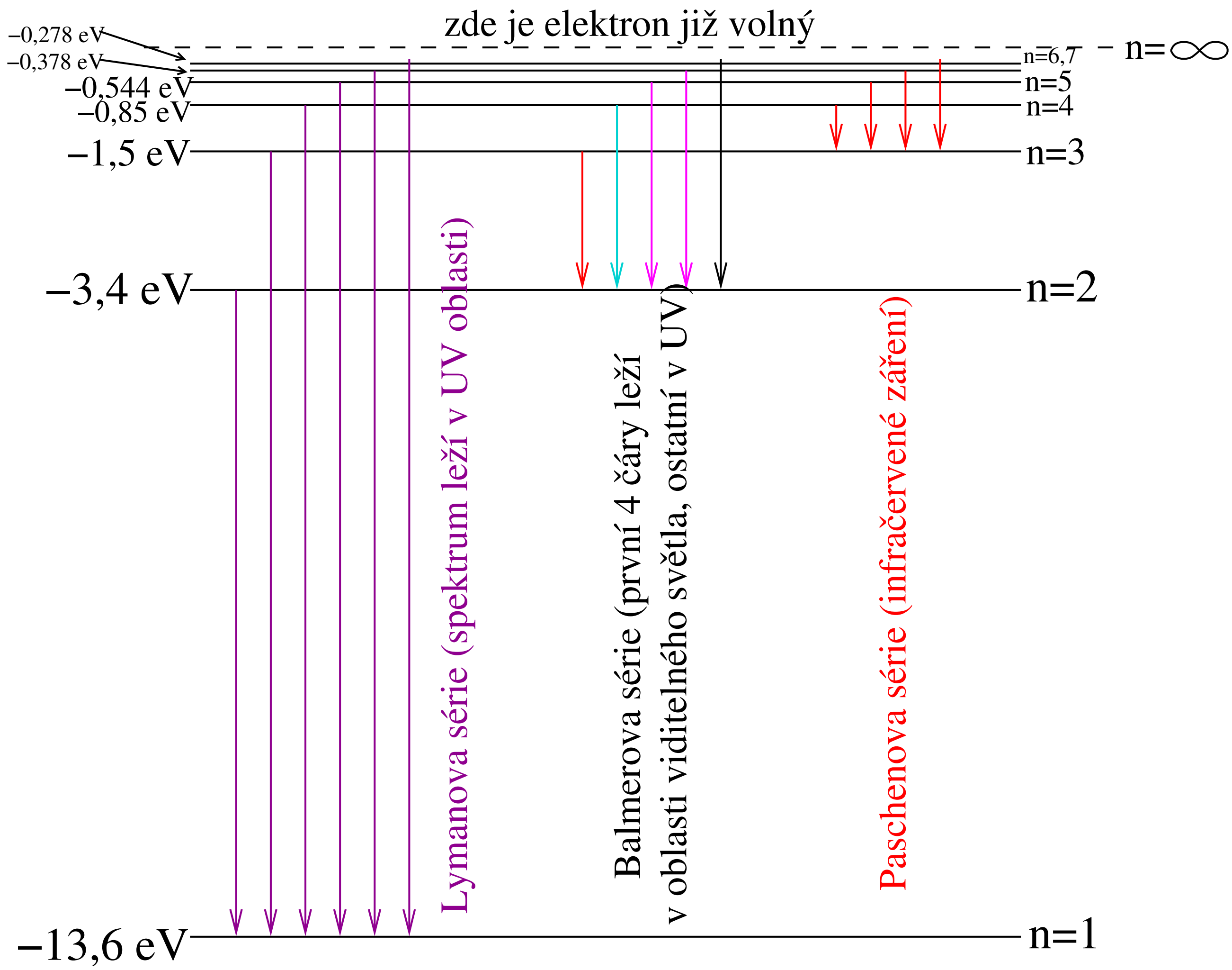
$$\nu = T_m - T_\mathfrak{n} \tag{5}$$

Čísla $T_m, T_\mathfrak{n}$ se nazývají *spektrální termy*, dále jen termy. Známe-li soustavu termů pro daný atom, můžeme dostat vlnočet libovolné spektrální čáry jako rozdíl příslušných členů této soustavy. A naopak, známe-li vlnočty dvou spektrálních čar téže série, bude jejich rozdíl také vlnočtem nějaké třetí spektrální čáry. Pozor! Neplést si vlnočet s frekvenci. Pokud bychom chtěli určit energii určitého termu $T_\mathfrak{n}$, musíme ho vynásobit planckovou konstantou h a rychlostí světla c, takže dostaneme:

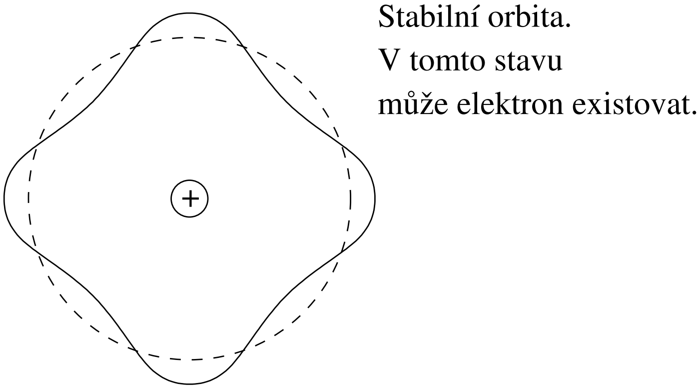
$$E_\mathfrak{n} = -\frac{Rhc}{\mathfrak{n}^2}, \qquad E_m = -\frac{Rhc}{m^2} \tag{6}$$

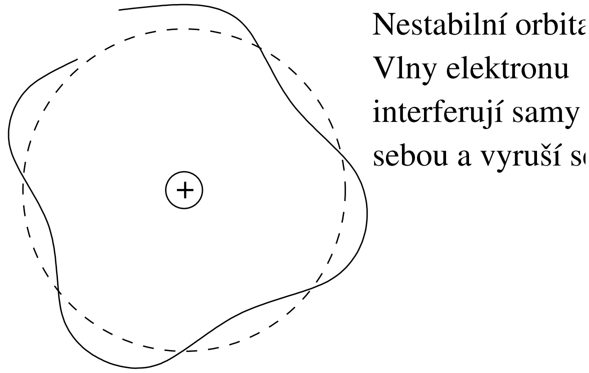
Rydbergova konstanta

Kvantové vlastnosti částic jsou důsledkem jejich vlnových vlastností (difrakce elektronů na na krystalu), zatímco kvantové vlastnosti záření jsou důsledkem jejich korpuskulárních vlastností (Comptonův rozptyl). Pokud tedy elektron má vlnové vlastnosti, potom musí mít nějakou vlnovou délku - tzv. de Broglieovu vlnovou délku $\lambda = h/p$, kde h je Planckova konstanta a p hybnost elektronu. V *Bohrově modelu atomu* se elektrony pohybují po kružnicích kolem jádra, což klade podmínku na jejich vlnovou délku:



Obrázek 2: Spektrální série atomu vodíku





Vlnová délka musí být celočíselným násobkem délky orbity $2\pi r = \mathfrak{n}\lambda$. λ je de Broglieova vlnová délka elektronu $\lambda = h/p = h/mv$, kde p, v je hybnost, resp. rychlost elektronu. Spojením výše uvedených vztahů dostaneme *Bohrovu kvantovačí podmínku*:

$$2\pi m v r = \mathfrak{n} h, \quad \mathfrak{n} \in \mathbb{N} \tag{7}$$

Rydbergova konstanta se dá i jednoduše spočítat a to tak, že na planetární model atomu aplikujeme Bohrův postulát (1) a Bohrovu kvantovací podmínku (7). Nechť záporně nabitý elektron obíhá kolem kladně nabitého jádra. Aby orbita byla stabilní, musí se coulombická síla rovnat dostředivé

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e r \omega^2, \tag{8}$$

kde ϵ_0 je permitivita vakua, e náboj elektronu, r poloměr kruhové dráhy elektronu, m_e hmotnost elektronu, ω úhlová a v obvodová rychlost elektronu. A zároveň musí platit (7). Takže poloměr dráhy a rychlost elektronu lze nakvantovat:

$$v = \frac{e^2}{2\mathfrak{n}h\epsilon_0} \text{ a } r = \frac{\mathfrak{n}h}{2\pi m_e v} = \frac{\mathfrak{n}^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} \tag{9}$$

Pro celkovou energii tohoto systému platí

$$E = T + U$$

kde kinetická energie $T = m_e v^2/2 = m_e r^2 \omega^2/2$ a potenciální je zde rovna práci, kterou coulombická síla působící na elektron vykoná, když se přesune z nekonečna do vzdálenosti r od jádra. Takže

$$U = \int_\infty^r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \varrho^2} \mathrm{d}\varrho = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

Celková energie je tedy

$$E = \frac{1}{2} m_e r^2 \omega^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \tag{10}$$

Nyní tuto energii nakvantujme podle Bohrova modelu, tj. položme rovnost mezi vztahem (10) a (6). Za rychlost v a poloměr r dosadíme z (9) a po úpravě (viz úkol č.3) můžeme vyjádřit Rydbergovu konstantu pomocí konstant:

$$R = \frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c}. \tag{11}$$

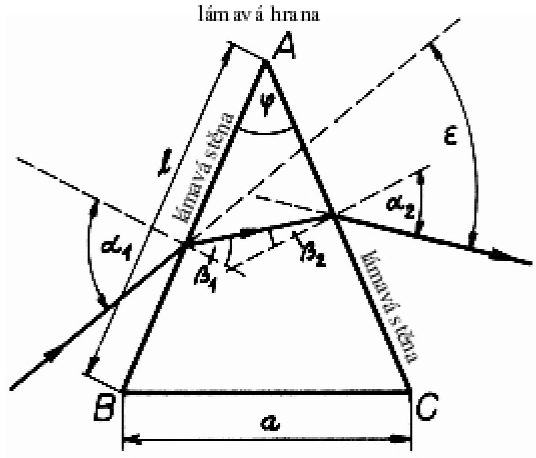
Po dosazení číselných hodnot příslušných konstant dostaneme hodnotu $R = 10973731.8\ \mathrm{m}^{-1}$. Tento vztah lze ještě vylepšit, pokud započítáme i pohyb jádra, tj. nahradíme hmotnost elektronu m_e redukovanou hmotností jádra a elektronu $\mu = \frac{m_e M_Z}{m_e + M_Z}$. Potom dostaneme $R = 10967758.2\ \mathrm{m}^{-1}$.

Měření energetických hladin atomu vodíku

Energetické hladiny atomu vodíku měříme zařízením, které se nazývá spektrometr. Spektrometr je zařízení, které nám rozkládá záření vycházející z atomu na spektrální čáry. Každá z těchto čar odpovdídá přechodu mezi příslušnými energetickými hladinami.

V našem případě použijeme jako energetický zdroj výbojku naplněnou vodními parami, které se vysokonapěťovými výboji rozkládá a vzniká tak atomární vodík. Tyto výboje také vybuzují vzniklé vodíkové atomy do vysokých energetických hladin, ze kterých se potom tyto atomy snaží přecházet do nižších stavů. Tyto přechody jsou doprovázené emisí fotonů příslušné energie. My se soustředíme na fotony viditelného světla a to jsou první čtyři čáry Balmerovy série. Spektrometr se v našem případě bude skládat z hranolu, který rozkládá viditelné světlo (díky lomu světla v disperzním prostředí) z výbojky na monochromatické paprsky, a zařízením na přesné měření úhlů nazývané Goniometr. Goniometrem budeme měřit úhel, pod kterým se láme průchodem skrz hranol ta která čára, z úhlu pak na základě disperzních vlastností hranolu určíme vlnovou délku té které čáry a poté na základě těchto výsledků měření ověříme Balmerův vzorec (3) a spočteme Rydbergovu konstantu.

Lom světla hranolem



Obrázek 3: Lom světla hranolem

Hranolem nazýváme čiré látkové prostředí(např. sklo), ohraničené dvěma různoběžnými rovinami - lámavými stěnami. Průsečnice lámavých stěn se nazývá lámavá hrana a úhel jimi sevřený lámavý úhel φ. Na hranol nechť dopadá monochromatický světelný paprsek dané vlnové délky λ v rovině kolmé na lámavou hranu, tedy v tzv. hlavním řezu. Paprsek dopadá na lámavou stěnu pod úhlem α_1, láme se podle zákona lomu pod úhlem β_1. Úhel dopadu na další stěně označíme β_2 a úhel lomu do vnějšího prostředí α_2. Úhel mezi paprskem vstupujícím do hranolu a z něj vystupujícím budeme nazývat deviací a označovat písmenem ε. Jestliže úhel dopadu volíme tak, aby uvnitř hranolu byl paprsek kolmý k ose lámavého úhlu φ, bude jeho deviace od původního směru minimální a paprsek bude vystupovat z hranolu pod úhlem $\alpha_1 = \alpha_2$. Pro minimální deviaci paprsku, kterou budeme značit písmenem ε_0, dostaneme

$$\frac{\sin\left(\dfrac{\varepsilon_0+\varphi}{2}\right)}{\sin(\varphi/2)} = n, \tag{12}$$

kde n je relativní index lomu materiálu, z kterého je hranol vyroben.

Úhlová disperze

Úhlová disperze charakterizuje disperzní vlastnosti hranolu. Nech hranolem procházejí v úzké spektrální oblasti paprsky o různých vlnových délkách. Pak jejich odchylka od původního směru ε je funkcí vlnové délky λ; $\varepsilon = \varepsilon(\lambda)$. Úhlová disperze je definována vztahem $d\varepsilon/d\lambda$ a udává, jak rychle se mění úhel ε s vlnovou délkou.

Všechny látky vykazují disperzi, tj. jejich index lomu je závislý na vlnové délce světla $n = n(\lambda)$. Veličina $\mathrm{d}n/\mathrm{d}\lambda$ se nazývá charakteristická disperze. Je ji možno vyjádřit derivováním disperzní závislosti $n = n(\lambda)$, je-li známé její analytické vyjádření.

Průběh disperzní závislosti se aproximuje různými vzorci. Dobře vyhovujícím vzorcem je

$$n = n_n + \frac{C}{\lambda - \lambda_n}, \tag{13}$$

v němž n_n , C , λ_n jsou konstanty, které se určí z naměřených dat nelineární regresí funkce (13).

Derivujeme-li rovnici pro minimální deviaci ε_o (12) podle λ, dostaneme po úpravě pro úhlovou disperzi $\mathrm{d}\varepsilon_o/\mathrm{d}\lambda$ vztah

$$\frac{\mathrm{d}\varepsilon_0}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{2\sin(\varphi/2)}{\cos[(\varepsilon_0+\varphi)/2]}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda} = \frac{2\sin(\varphi/2)}{\sqrt{1-n^2 sin^2(\varphi/2)}}\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda} \tag{14}$$

Úhlová disperze hranolu je tedy poměrně složitou funkcí vlnové délky. Závisí na ní jednak přes charakteristickou disperzi $\mathrm{d}n/\mathrm{d}\lambda$, jednak přes index lomu n ve jmenovateli posledního členu.

Rozlišovací schopnost hranolu

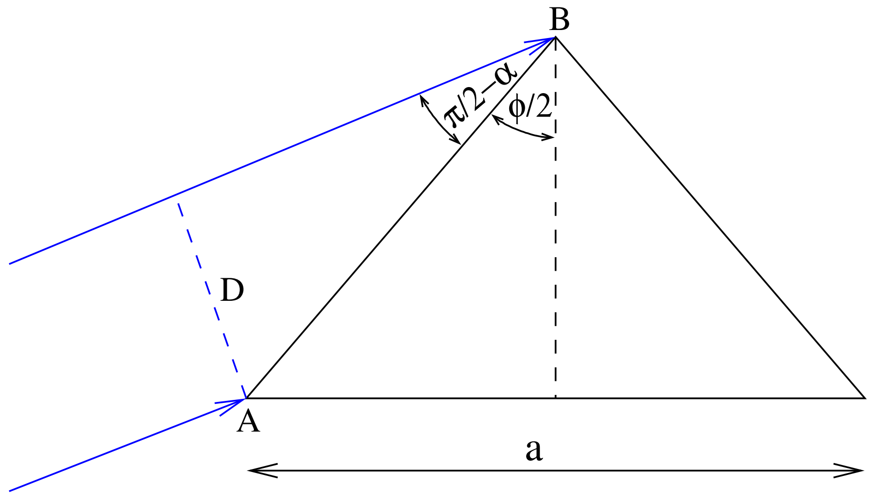
Budeme uvažovat rozlišovací schopnost rovnoramenného hranolu. Rozlišovací schopnost je omezena ohybovými jevy, které nastávají při průchodu světla hranolem. Rozlišovací schopnost hranolu je obvykle charakterizována veličinou

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda}, \tag{15}$$

kde $\Delta\lambda$ je minimální diference vlnových délek, které mohou být hranolem ještě rozlišeny. Použijeme Rayleighovo kritérium. Z něj vyplývá, že minimální úhlová vzdálenost γ rozlišitelných svazků je dána vztahem

$$\gamma = \frac{\lambda}{D}, \tag{16}$$

v němž D je rozměr otvoru, který je rozhodující pro omezení svazků.



Obrázek 4: K rozlišovací shopnosti hranolu

Uvažujme svazek rovnoběžných paprsků dopadající na lámavou stěnu hranolu tak, aby byla splněna podmínka pro minimální deviaci. Nechť je svazek dostatečně široký, takže je využita celá šířka lámavé stěny (délka AB z obrázku 4). Potom $\mathrm{d}\varepsilon_0 = \gamma$.

Pro výpočet rozlišovací schopnosti R, definované vztahem (15), použijeme vzorce (14) a (16) a dostaneme

$$R = \frac{\lambda}{\Delta\lambda} = a\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\lambda} \tag{17}$$

kde a je délka BC z obrázku 3.

Pokyny pro měření:

Před tím, než začnete měřit, je nutné, abyste si prostudovali návod ke goniometru.

Měření úhlu nejmenší deviace ε_0:

(Před měřením je potřeba zkontrolovat, jestli máme spávnou kombinaci utažených a povolených šroubů - viz `http://fyzport.fjfi.cvut.cz/Hardware/Goniometr/goniometr.pdf`. Správná kombinace je utažený šroub 18 a povolené šrouby 20 a 22.)

Jak už sám název napovídá, budeme experimentálně hledat extrém. Pokud například posvítíme na hranol přes kolimátor rtuťovou výbojkou, uvidíme v zorném poli řadu spektrálních čar. Zaměřme se na jednu čáru a pomalu otáčejme otočným stolkem (nebo prstencem 17 z návodu ke goniometru). Uvidíme, že se ta čára pohybuje, tj. platí závislost úhlu deviace na úhlu dopadu záření nebo-li $\varepsilon = \varepsilon(\alpha_1)$. Po chvíli však uvidíme, že se ta spektrální čára zastavila a směr svého "putování" obrací. A ačkoli my otáčíme stolkem stále stejným směrem, čára cestuje opačným směrem. Když zkusíme stolkem otáčet na druhou stranu, uvidíme to samé. A právě ten bod obratu směru, to je místo, kde je deviace paprsku monochromatického světla, který se nám jeví jako ta "putující" čára, nejmenší. A v tomto místě odečteme úhel d_1 z goniometru - viz obrázek (5).

!!! Pro každou spektrální čáru je úhel nejmenší deviace ε_0 jiný. A proto musíme před každým odečtením znovu nalézt úhel nejmenší deviace!!!

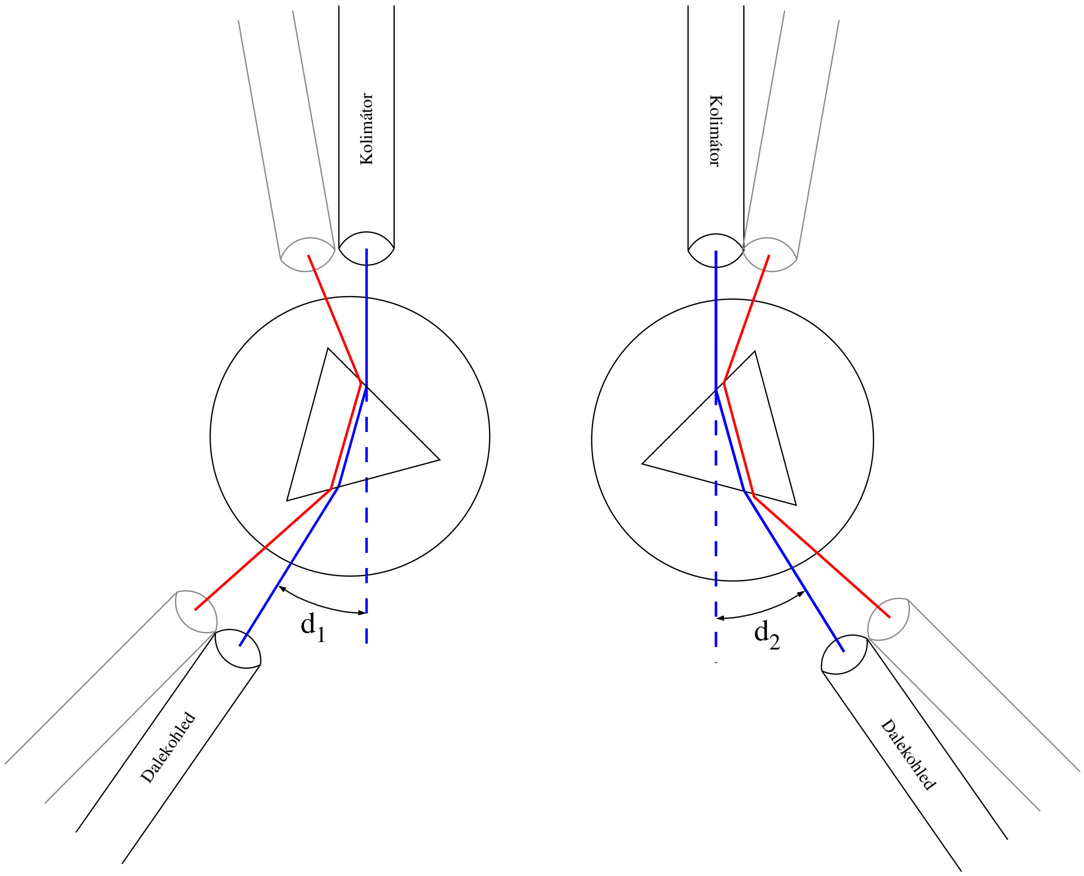
Získáme tak úhly d_1 pro všechny spektrální čáry. Když takto naměříme celé spektrum, tak dalekohled i hranol zrcadlově symetricky otočíme, jak je znázorněno na obrázku (5) a stejným způsobem naměříme úhly d_2. Úhly nejmenší deviace jednotlivých čar pak spočítáme

$$\varepsilon_0 = \frac{|d_1 - d_2|}{2} \tag{18}$$

Opět je potřeba dát si pozor, když přejedete 360°, aby to bylo při výpočtu ε_0 zohledněno.

2 Pracovní úkoly

1. **(Nepovinné)** V přípravě nalezněte obecně pro $\alpha_1 \neq \alpha_2$ podmínku nejmenší deviace $\alpha_1 = \alpha_2$ a z toho odvoďte vzorec (12).
   Návod: Uvědomte si, že deviace ε je složenou funkcí α_1: $\varepsilon = \varepsilon\left(\alpha_2\left(\beta_2\left(\beta_1(\alpha_1)\right)\right)\right)$
2. V přípravě odvoďte vzorec (12) v případě, že je splněna podmínka úhlu nejmenší deviace $\alpha_1 = \alpha_2$.
3. V přípravě vypočtěte (i numericky) hodnotu Rydberghovy konstanty (tj. odvoďte vztah (11) ze vztahů (6), (10) a (9)).
4. V přípravě odvoďte vzorce (14) a (17).
5. Metodou dělených svazků viz `http://fyzport.fjfi.cvut.cz/Hardware/Goniometr/goniometr.pdf` změřte lámavý úhel hranolu. Měření proveďte 4x.



Obrázek 5: Měření úhlu nejmenší deviace

6. Změřte index lomu hranolu v závislosti na vlnové délce pro čáry rtuťového spektra, nakreslete graf a fitováním nelineární funkcí (13) určete disperzní vztah $n = n(\lambda)$. Fitovací program kromě hodnot parametrů funkce (13) vypočte i hodnoty chyb těchto parametrů a korelační matici. Poznamenejte si tyto hodnoty.
7. Změřte spektrum vodíkové výbojky (Balmerovu sérii atomu vodíku) a ověřte platnost vztahu (3).
8. Metodou nejmenších čtverců nebo fitováním spočtěte Rydbergovu konstantu pro atomární vodík. Výpočet té konstanty je analogický jako výpočet Planckovy konstanty v úloze Studium rentgenového spektra Mo anody. Podívejte se na úkol č. 4 této úlohy.
9. Určete charakteristickou disperzi $\mathrm{d}n/\mathrm{d}\lambda$ v okolí vlnové délky 589 nm (žluté čáry v sodíkovém spektru).
10. Určete rozlišovací schopnost hranolu pro sodíkový dublet a vypočítejte minimální velikost základny hranolu, vyrobeného ze stejného materiálu jako hranol, s kterým měříte, který je ještě schopen rozlišit sodíkový dublet.

3 Poznámky

1. Před měřením si nutně musíte prostudovat návod ke goniometru, který je zde `http://fyzport.fjfi.cvut.cz/Hardware/Goniometr/goniometr.pdf`
2. Justaci goniometru provádějte pouze ve spolupráci s asistentem. Špatný postup může značně rozhodit přesné nastavení otočného stolku, dalekohledu i kolimátoru a opětné nastavení správných poloh je potom dosti pracné.
3. S hranolem zacházejte opatrně, abyste nepoškodili nebo neznečistili jeho lámavé stěny.
4. Vlnové délky čárových spekter pro Hg a Na jsou též uvedeny u úlohy.
5. Při měření indexu lomu je potřeba si uvědomit, že vztah 12, z kterého index lomu n počítáme, platí pro úhel nejmenší deviace ε_0. Proto je nutné pro <u>každou</u> spektrální čáru najít tento úhel.
6. Na ploše je soubor s názvem balmer.xls, kde je možné dosazovat hodnoty úhlů a program vypočítává rovnou indexy lomu pro jednotlivé čáry.
7. Fitování je prokládání naměřených dat známou funkcí metodou nejmenších čtverců. V našem případě je vhodné použít např. programu Gnuplot, který je freeware k dispozici na *www.gnuplot.info*. Po spuštění programu se v příkazové řádce napíše
```
f(x)=a+b/(x-c)
fit f(x) 'data' via a,b,c
```

tento příkaz nafituje naměřená data a vypíše zjištěné hodnoty parametrů `a, b, c` a jejich chyby. Parametry a jejich chyby zapište do souboru balmer.xls. Potom je možné vytvořit graf, kde jsou jak data, tak i jejich fit
`set xlabel 'popis osy x'`, např. `set xlabel "{/Symbol l} [nm]"` - zde Symbol znamená řecká písmena
`set ylabel 'popis osy y'`
`set label 'popisek' at číslo souřadnice x, číslo souřadnice y set title 'název grafu'`
`plot f(x), 'data'`

`data` je soubor, kde jsou uložena naměřená data. Je to obyčejný textový soubor, kde jsou x-ové a y-nové hodnoty uloženy ve dvou sloupcích oddělených tabulátorem.

!!! mocniny se v definici funkce nepíší, jak jsme dnes zvyklí x^y, ale $x**y$, jako ve Fortranu.

Pokud chceme výstup grafu uložit do souboru (například obrázek postscript), tak napíšeme `set output 'název obrázku.ps'`
`set terminal postscript enhanced`
Teď, když se napíše `plot f(x), 'data'`, tak se v pracovním adresáří objeví soubor postscript s grafem. Gnuplot umožňuje export i do LaTeXu a mnoha dalších formátů. Soubory .ps lze na stránce www.ps2pdf.com převést do .pdf souborů.

Pokud máme u y-nových hodnot i jejich chyby (které jsou ve 3. sloupci textového souboru), potom při
`fit f(x) 'data' using 1:2:3 via a,b,c`
gnuplot přiřadí jednotlivým bodům váhy, podle toho, jak velkou chybu má daný bod. Vykreslení chyb (tzv. errorbars) se provede příkazem
`plot f(x), 'data' with errorbars`

8. K výpočtu standartní odchylky vlnové délky spektrální čáry σ_λ z chyb parametrů (získaných fitem) je potřeba použít obecný vzorec pro propagaci chyb, který má pro funkci $f(x) = a + b/(x - c)$ tvar

$$\sigma_\lambda^2 = \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)^2 \sigma_a^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)^2 \sigma_b^2 + \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)^2 \sigma_c^2 + 2\mathrm{cov}(a,b)\frac{\partial f}{\partial a}\frac{\partial f}{\partial b} + 2\mathrm{cov}(a,c)\frac{\partial f}{\partial a}\frac{\partial f}{\partial c} + 2\mathrm{cov}(b,c)\frac{\partial f}{\partial b}\frac{\partial f}{\partial c}$$

Gnuplot poskytuje tzv. *korelační matici*, která má mimo diagonálu hodnoty příslušných korelačních koeficientů $\rho_{ab}, \rho_{ac}, \rho_{bc}$ pro jednotlivé dvojice parametrů. Mezi kovariancemi a korelačními koeficienty platí vztah

$$\rho_{ab} = \frac{\mathrm{cov}(a,b)}{\sigma_a \sigma_b}.$$

Pokud jsou parametry funkce nezávislé, tak jak korelační koeficienty, tak kovariance jsou rovny nule, a chyby se jednoduše kvadraticky sčítají. Vztah pro výpočet chyb je zahrnut v šabloně `balmer.xls`.

Reference

[1] BROŽ, *Základy fyzikálních měření I*, Praha: Státní pedagogické nakladatelství. 1983. (str. 551 až 557)

[2] HORÁK, *Praktická fysika*, Praha: Státní nakladatelství technické literatury. 1958. (str. 531 až 540 a 590 až 593), (V této knize jsou otištěny tabulky vlnových délek čárových spekter různých prvků, tedy i Hg a Na.)

[3] KOLEKTIV KATEDRY FYZIKY, *Fyzikální praktikum II*, Praha: Ediční středisko ČVUT. 1989.

[4] ŠPOLSKIJ, E. V., *Atomová Fysika I.* Praha: Technicko-vědecké vydavatelství. 1952.

[5] HAKEN, H. WOLF, H. C., *The Physics of Atoms and quanta*, Berlin: Springer. 1984.

[6] http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/hyde.html [cit. 03. 04. 2009]