Misura delle righe di Balmer per H con metodi Monte Carlo

F. Polleri* and M. Sotgia[†]

Dipartimento di Fisica, Università degli Studi di Genova, 16146 Genova, Italy (Dated: 25 novembre 2022)

I. INTRODUZIONE

Un prisma ottico può essere utilizzato, sfruttando il fenomeno della rifrazione, come spettrometro per eseguire misure precise della lunghezza d'onda dato un fascio monocromatico incidente, in grado anche di separare le componenti di un fascio non monocromatico.

Si sa che infatti la differenza δ_i tra l'angolo in ingresso θ_0 e l'angolo in uscita θ_i risulta essere legato al valore dell'indice di rifrazione del materiale,

$$\delta_i = \theta_0 - \alpha + \arcsin\left(n\sin\left(\alpha - \arcsin\left(\frac{\sin\theta_0}{n}\right)\right)\right),$$
 (1)

con n indice di rifrazione e α apertura angolare del prisma.

Si osserva che δ_i ha un minimo in corrispondenza del quale la misura è più stabile e la relazione precedente si semplifica come

$$n\sin\frac{\alpha}{2} = \sin\frac{\delta_m + \alpha}{2} = \sin\theta_{0_m}.$$
 (2)

Da quest'ultima relazione possiamo ottenere una forma per l'indice

$$n(\theta, \theta_0) = \frac{\sin\frac{\theta - \theta_0 + \alpha}{2}}{\sin\frac{\alpha}{2}}.$$
 (3)

Possiamo anche però ricavare la relazione che lega l'indice di rifrazione n al valore di δ_m , e poichè $n = n(\lambda)$, secondo la relazione di Cauchy

$$n(\lambda) = A + \frac{B}{\lambda^2},\tag{4}$$

appropriata ad un ordine $\mathcal{O}(1/\lambda^2)$, con A e B coefficienti propri del materiale in questione, allora possiamo concludere che esistono relazioni che legano λ con il valore di δ_i .

A. Angoli di Balmer

Data la lunghezza d'onda, in cui si osservano rispetto ad un elemento le bande di assorbimento o di emissione, viene definita da Balmer una relazione che permette di quantificare la posizione di queste bande

$$\frac{1}{\lambda} = R_H(T(n) - T(m)) \tag{5}$$

che nel caso dell'idrogeno assume una forma particolarmente comoda, dove $T(n) = 1/n^2$. Otteniamo quindi una equazione del tipo

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \tag{6}$$

Queste lunghezze d'onda corrispondono implicitamente ad alcuni angoli determinati dallo strumento appena caratterizzato.

 $^{^{\}ast}$ s
5025011@studenti.unige.it

 $^{^{\}dagger}$ s4942225@studenti.unige.it

II. MISURA DELLA COSTANTE DI RYDBERG

Un utilizzo che possiamo fare delle relazioni fino ad ora trovate, e dello strumento che abbiamo descritto, è quello di sfruttarlo per ottenere una stima del parametro R_H , detto costante di Rydberg, dalla relazione degli angoli di Balmer. Sono noti gli angoli θ_m ai quali si trovano le bande di emissione dell'idrogeno, per m=3,4,5,6 e n=2, e si conoscono i parametri A,B con le loro distribuzioni e il coefficiente di correlazione che esiste tra i due, ρ_{AB} .

Possiamo allora determinare per ogni θ_m il valore λ_m come

$$\frac{1}{\lambda_m} = \sqrt{\frac{n(\theta, \theta_0) - A}{B}},\tag{7}$$

dove $n(\theta, \theta_0)$ è fornito dalla Eq. (3). Possiamo quindi chiaramente trovare una relazione tra i dati forniti e il valore di R_H . Obiettivo primario è quindi calcolare il valore delle lugnhezze d'onda a partire dai dati conosciuti. Conosciamo la forma effettiva di $\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\lambda}(\theta, \theta_0, A, B, \alpha)$, dove, a parte α , i parametri presentano deviazione standard non trascurabile, comportando una correlazione tra i valori λ_m al variare di m. Inoltre, prima ancora di incontrare il problema legato alla correlazione tra le diverse lunghezze d'onda, dobbiamo capire come procedere per poterle ottenere, con anche una loro deviazione standard. Dalle relazioni (7) e (6) osserviamo che la quantità che in realtà è utile ottenere è il fattore $1/\lambda$, comune alle due equazioni.

Possiamo osservare che la dipendenza della lunghezza d'onda dai suoi parametri è molto probabilmente non lineare (si può vedere solo dalla radice quadrata che si ha per ottenere il valore di $1/\lambda$), senza considerare che A e B sono tra loro legati da un coefficente di correlazione $\rho_{A,B}$. L'unico modo per ottenere il valore di $1/\lambda$ sarà quindi procedendo con metodi Monte Carlo (da qui in avanti MC). I parametri che presentano errore associato, e che non sono correlati tra loro e con le altre variabili (θ_m , θ_0), sono ipotizzati essere distribuiti secondo una Gaussiana, centrata nel calor medio μ_i e deviazione standard σ_i , con $i = \theta_m$, θ_0 . Il parametro α è considerato privo di errore. Supponendo di poter considerare A, B come distribuzioni Gaussiane di valor medio μ_A , μ_B e deviazione standard σ_A , σ_B resta da capire come possiamo generare valori di A, B che presentano invece coefficente di correlazione $\rho_{A,B} = -0.872$. Analizziamo in seguito il problema.

A. Generazione di variabili correlate

Il risultato che si ottiene è frutto di una ricerca e non tutto farina del nostro sacco, i crediti vanno a [1-3], anche se siamo riusciti a rieseguire i calcoli e trovare la soluzione proposta.

Sapendo che le distribuzioni di A, B corrispondono a distribuzioni Gaussiane (fig. 1), possiamo ipotizzare che siano legate tra loro imponendo che

$$\begin{cases}
A = x_1 X_1 + x_2 X_2 \\
B = X_1
\end{cases}$$
(8)

con x_1, x_2 ignote e X_1, X_2 distribuzioni che consideriamo essere gaussiane. Sappiamo inoltre che

$$Corr[A, B] = \rho = \frac{Cov[A, B]}{\sqrt{Var[A] Var[B]}} = \frac{x_1 Cov[X_1, X_1]}{\sqrt{x_1^2 Var[X_1] + x_2^2 Var[X_2]}} = \frac{x_1 \sigma_1^2}{\sqrt{x_1 \sigma_1^2 + x_2 \sigma_2^2}}, \quad (9)$$

oltre a sapere che

$$\rho = x_1 \frac{\sigma_B}{\sigma_A} \implies x_1 = \rho \frac{\sigma_A}{\sigma_B},\tag{10}$$

dove abbiamo considerato che $\sigma_B = \sigma_1$ e $\mu_B = \mu_1$.

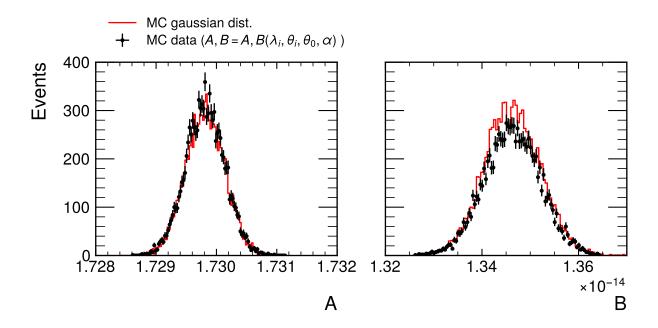


Figura 1. Abbiamo generato A, B prima utilizzando le formule, quindi a partire da λ_i , θ_i , θ_0 , α , poi utilizzando media e deviazione standard abbiamo ricostruito A e B come distribuzioni gaussiane, riportate in rosso.

Dalle relazioni in (8) abbiamo ottenuto il sistema

$$\begin{cases}
\mu_A = x_1 \mu_1 + x_2 \mu_2 \\
\mu_B = \mu_1 \\
\sigma_A^2 = x_1^2 \sigma_1^2 + x_2^2 \sigma_2^2 \\
\sigma_B^2 = \sigma_1^2,
\end{cases}$$
(11)

da cui abbiamo che, con le dovute sostituzioni,

$$\begin{cases} x_1 = \rho \frac{\sigma_A}{\sigma_B} \\ x_2 = \sigma_A \sqrt{1 - \rho^2} \\ \mu_1 = \mu_B \\ \sigma_1 = \sigma_B \\ \mu_2 = \left(\frac{\mu_A}{\sigma_A} - \rho \frac{\mu_B}{\sigma_B}\right) \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} \\ \sigma_2 = 1 \end{cases}$$

$$(12)$$

Abbiamo quindi la possibilità di generare in modo coerente con quanto atteso il valore di A e il valore di B, generando quindi B secondo una distribuzione Gaussiana (μ_B, σ_B) e ottenendo invece A come $A = \rho \frac{\sigma_A}{\sigma_B} \cdot B + \sigma_A \sqrt{1 - \rho^2} \cdot X_2$, con X_2 generata come una Gaussiana

$$\begin{cases}
\mu_2 = \left(\frac{\mu_A}{\sigma_A} - \rho \frac{\mu_B}{\sigma_B}\right) \frac{1}{\sqrt{1 - \rho^2}} \\
\sigma_2 = 1
\end{cases}$$
(13)

.

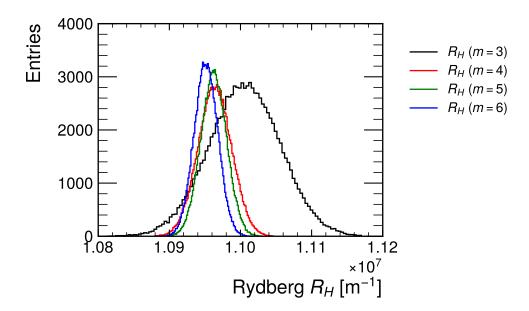


Figura 2. possiamo generare N_{exp} esperimenti per ogni coppia (m, θ_m) , per ognuno dei quali otteniamo il valore di $R_{H,m}$ per ogni valore di m, e possiamo così avere quattro distribuzioni per R_H corrispondenti ai rispettivi valori di m.

B. Valori di R_H dagli angoli di Balmer

Con metodi MC possiamo ora trovare i valori di $1/\lambda$, e poi conoscendo la (6) potremmo realizzare un fit lineare per trovare il parametro R_H . Se considerassimo un fit minimizzando il valore del χ^2 in maniera standard potremmo non coniderare i coefficenti di correlazione che esistono dovuti al modo in cui stiamo calcolando i valori di $1/\lambda_m$, che dipendono tutti dagli stessi valori (con errore associato non trascurabile) di $A, B \in \theta_0$.

Però possiamo caloclare per ogni coppia (m, λ_m) , o meglio $(m, 1/\lambda_m)$, un valore di $R_{H,m}$, considerando quindi una soluzione del tipo

$$R_{H,m} = \frac{n^2 m^2}{m^2 - n^2} \sqrt{\frac{1}{B} \left(\frac{\sin \frac{\theta_m - \theta_0 + \alpha}{2}}{\sin \frac{\alpha}{2}} - A \right)},\tag{14}$$

dove α è considerato privo di errore, θ_m , θ_0 sono considerati con errore, n=2, m=3,4,5,6 sono privi di errori, e A, B sono generati come definito prima. Considerata questa relazione possiamo generare N_{exp} esperimenti per ogni coppia (m, θ_m) , per ognuno dei quali otteniamo il valore di $R_{H,m}$ per ogni valore di m, e possiamo così avere quattro distribuzioni per R_H corrispondenti ai rispettivi valori di m (come in fig. 2).

^[1] Anthony, "How does the formula for generating correlated random variables work?" (2015).

^[2] A. Sobolev, "How does the formula for generating correlated random variables work?" (2015).

^[3] H. F. Kaiser and K. Dickman, Sample and population score matrices and sample correlation matrices from an arbitrary population correlation matrix, Psychometrika 27, 179 (1962).