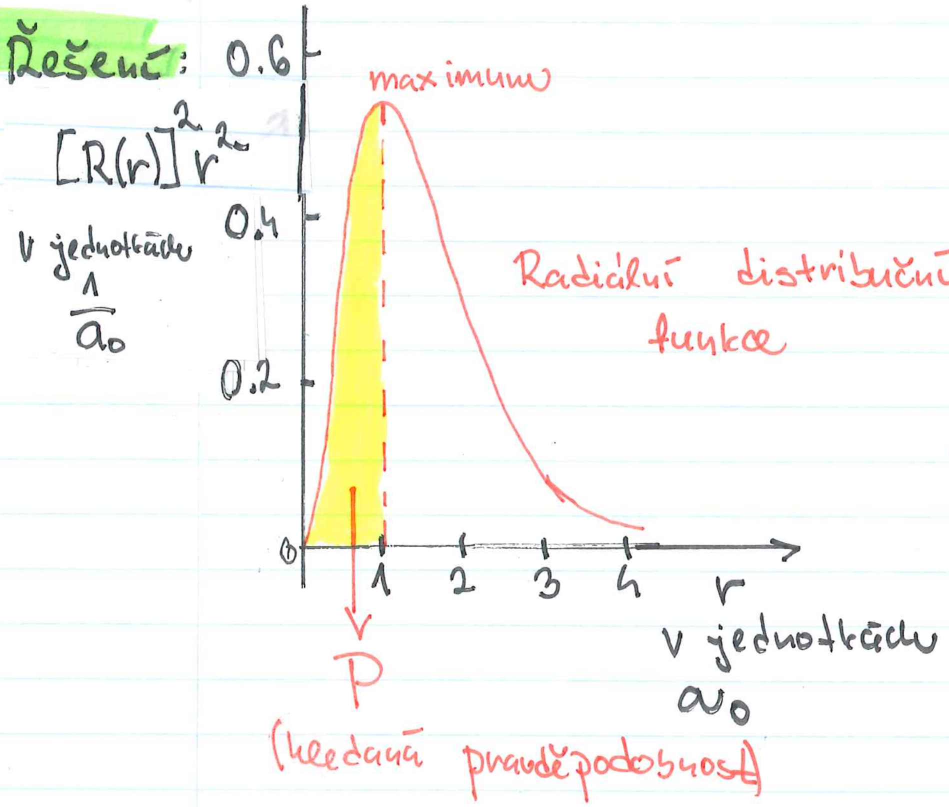
Příklad: Určete pravděpodobnost, se kterou je elektron v základním stavu atomu H ve vzdálenosti $\leq a_0$ (Bohrův poloměr).

Řešení:



$$R(r) = 2\cdot\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

↓

$$[R(r)]^2 r^2 = \left[2\cdot\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}\right]^2 r^2 \quad (*)$$

$$P = \int_0^{a_0} [R(r)]^2 r^2 \, dr \underset{\text{za } (*)}{\overset{\text{dosadím}}{=}} \int_0^{a_0} \left[2\cdot\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{Zr}{a_0}}\right]^2 r^2 \, dr =$$

$Z = 1$

$$= \frac{4}{a_0^3}\int_0^{a_0} \underbrace{e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2}_{(\Delta)} \, dr$$

vytknu konstanty

substituce $r \rightarrow x$

$-\frac{2}{a_0} \rightarrow b$

Vypočteme nejprve neurčitý integrál z výrazu (Δ)

$$\int e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 \, dr \overset{\text{substituce}}{=} \int x^2 e^{bx} \, dx =$$

"per partes" poprvé

$$= \underbrace{x^2 \cdot \frac{e^{bx}}{b}}_{u \cdot v} - \underbrace{\int \frac{e^{bx}}{b} \cdot 2x \, dx}_{\int v u' \, dx} =$$

Per partes poprvé:

$$\int u v' \, dx = uv - \int v u' \, dx$$

$$v' = e^{bx} \qquad v = \frac{e^{bx}}{b}$$

$$u = x^2 \qquad u' = 2x$$

vytknu konstantu, přeskládám

$$= \frac{x^2 \cdot e^{bx}}{b} - \frac{2}{b} \int x \cdot e^{bx} \, dx =$$

"per partes" podruhé

$$= \frac{x^2 \cdot e^{bx}}{b} - \frac{2}{b} \left[\underbrace{\frac{x e^{bx}}{b}}_{u \cdot v} - \underbrace{\int \frac{e^{bx}}{b} \, dx}_{\int v \cdot u' \, dx} \right] =$$

Per partes podruhé:

$$v' = e^{bx} \qquad v = \frac{e^{bx}}{b}$$

$$u = x \qquad u' = 1$$

provedu poslední $\int$ a roznásobím závorku

$$= \frac{x^2 \cdot e^{bx}}{b} - \frac{2x e^{bx}}{b^2} + \frac{2 e^{bx}}{b^3} =$$

vytknu e^{bx}

$$= e^{bx} \left(\frac{x^2}{b} - \frac{2x}{b^2} + \frac{2}{b^3} \right)$$ ... Done.

Vrátíme se k určitému $\int$ vrácením substituce zpět.

$$\boxed{P=}\ \frac{4}{a_0^3}\int_0^{a_0} e^{-\frac{2r}{a_0}}\, r^2\, dr =$$

$$= \frac{4}{a_0^3}\left[e^{bx}\left(\frac{x^2}{b}-\frac{2x}{b^2}+\frac{2}{b^3}\right)\right]_0^{a_0} =$$

vrátíme = subst. zpět

$$\frac{4}{a_0^3}\left[e^{-\frac{2r}{a_0}}\left(\frac{-a_0 r^2}{2}-\frac{a_0^2\, 2r}{4}+\frac{2a_0^3}{-8}\right)\right]_0^{a_0} =$$

dosadíme za horní a dolní mez

$$= \frac{4}{a_0^3}\left\{\underbrace{e^{-\frac{2a_0}{a_0}}\left(-\frac{a_0^3}{2}-\frac{a_0^3}{2}-\frac{a_0^3}{4}\right)}_{\text{dosazuji horní mez: } r=a_0} - e^{0}\left(0-0-\frac{a_0^3}{4}\right)\right\} =$$

dosazuji dolní mez: $r=0$

$$= \frac{\cancel{4}}{\cancel{a_0^3}}\left\{e^{-2}\cdot\frac{(-5\cancel{a_0^3})}{\cancel{4}} - 1\cdot\frac{(-\cancel{a_0^3})}{\cancel{4}}\right\}$$

$$= -5e^{-2}+1 = \boxed{1-\frac{5}{e^2}}$$ $(= 0.323)$ $\boxed{32\%}$