Jaká je pravděpodobnost, že se elektron atomu vodíku vyskytuje ve vzdálenosti nižší než a_0?

$$\int_0^{a_0} 2^2 \frac{Z}{a_0}^3 \cdot r^2 \cdot e^{\frac{-2Zr}{a_0}} \,\mathrm{d}r$$

Pro atom H platí $Z = 1$:

$$\int_0^{a_0} 2^2 \frac{1}{a_0}^3 \cdot r^2 \cdot e^{\frac{-2r}{a_0}} \,\mathrm{d}r$$

Vytknutí konstant před integrál:

$$\frac{4}{a_0^3} \int_0^{a_0} r^2 \cdot e^{\frac{-2r}{a_0}} \,\mathrm{d}r$$

Zavedeme substituci

$$\begin{aligned} x = \frac{-2r}{a_0} \mathrm{d}x &= \frac{-2}{a_0}\,\mathrm{d}r \qquad \rightarrow \qquad \mathrm{d}r = \frac{a_0 \mathrm{d}x}{-2} \\ r &= \frac{x}{-2a_o} \end{aligned}$$

a dostáváme tedy

$$\frac{4}{a_0^3} \int_0^{-2} \left(\frac{x}{-2a_0}\right)^2 \cdot e^x \left(\frac{a_0}{-2}\right) \mathrm{d}x$$

Po vykrácení:

$$\frac{-1}{2} \int_0^{-2} x^2 e^x \,\mathrm{d}x$$

1. Užití znalosti integrálu $\int P_n(x) e^x \,\mathrm{d}x = e^x \sum_{k=0}^{n} (-1)^k P_n^{(k)}(x) + C$
Pro $n = 2$ platí

$$\begin{aligned} \frac{-1}{2} \int_0^{-2} x^2 e^x \,\mathrm{d}x = \frac{-1}{2} \left[e^x (x^2 - 2x + 2)\right]_0^{-2} = \\ = \frac{-1}{2} \left(e^{-2}(4 + 4 + 2) - e^0(0 + 0 + 2)\right) = \mathbf{1} - \frac{\mathbf{5}}{\mathbf{e^2}} \end{aligned}$$

2. Aplikace per partes

$$\begin{aligned}
\frac{-1}{2}\int_0^{-2} x^2e^x\,\mathrm{d}x = \frac{-1}{2}\left(\left[x^2e^x\right]_0^{-2} - 2\int_0^{-2} xe^x\,\mathrm{d}x\right) &= \\
\frac{-1}{2}\left(\left[x^2e^x\right]_0^{-2} - 2\left[xe^x\right]_0^{-2} + 2\int_0^{-2} e^x\,\mathrm{d}x\right) &= \\
\frac{-1}{2}\left(\left[x^2e^x\right]_0^{-2} - 2\left[xe^x\right]_0^{-2} + 2\left[e^x\right]_0^{-2}\right) &= \\
\frac{-1}{2}\left[e^x(x^2-2x+2)\right]_0^{-2} = \mathbf{1} - \frac{\mathbf{5}}{\mathbf{e^2}}
\end{aligned}$$