

Seminární úlohy 8

1. Vlnová funkce základního stavu elektronu atomu vodíku (kvantová čísla $N = 1, l = 0, m = 0$) je ve sférických souřadnicích $\Psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) = R_{10}(r)Y_{00}(\vartheta, \varphi)$, kde

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right)$$

$$Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

(a_0 je Bohrovův poloměr). Hustota pravděpodobnosti výskytu elektronu v bodě o souřadnicích (r, ϑ, φ) je $\Psi_{100}\Psi_{100}^*$. Vypočítejte marginální hustotu pravděpodobnosti pro vzdálenost elektronu od jádra.

Řešení:

Marginální hustota pravděpodobnosti pro vzdálenost elektronu od jádra je

$$\begin{aligned} f_r(r) &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \Psi_{100}(r, \vartheta, \varphi) \Psi_{100}^*(r, \vartheta, \varphi) r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = \\ &= \left[\int_0^{2\pi} -\frac{1}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \cos \vartheta d\varphi \right]_0^\pi = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 d\varphi = \left[\frac{2}{\pi a_0^3} \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \varphi \right]_0^{2\pi} = \\ &= \frac{4}{a_0^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right). \end{aligned}$$

2. Při experimentu bylo provedeno 10 opakovaných měření náhodných proměnných a, b, c , které mají normální rozdělení. Byly získány následující hodnoty:

a	b	c
30	10.1	9.9
31	9.5	9.5
39	12.1	9.2
40	12.5	9.0
41	13.5	9.1
42	12.4	8.9
39	11.4	9.3
45	12.6	8.8
36	8.8	10.2
46	13	8.7

Na základě naměřených dat vyšetřete korelaci náhodných proměnných a, b, c . Proveďte odhad očekávané hodnoty a chyby veličiny $y = \frac{3ab}{c^2}$.

Řešení:

Kovarianci náhodných proměnných a a b odhadneme jako:

$$\text{cov}(a, b) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i b_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i,$$

kde je počet naměřených hodnot (zde $N = 10$).

Korelace těchto náhodných proměnných je

$$\rho(a, b) = \frac{\text{cov}(a, b)}{s_{1a} s_{1b}}$$

$$\text{kde } s_{1a} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(a_i - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N a_j \right)^2} \text{ a } s_{1b} = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(b_i - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N b_j \right)^2}.$$

$$\text{Odhad chyby korelace je } \sigma_\rho \approx \frac{1 - \rho(a, b)}{\sqrt{N-1}}.$$

Pro konkrétní číselné hodnoty z tabulky dostáváme $\text{cov}(a, b) = 6.16$, $s_{1a} = 5.30$, $s_{1b} = 1.59$, $\rho(a, b) = 0.73$, $s_\rho = 0.16$. Tedy odhad korelace náhodných proměnných a, b je 0.73 ± 0.16 .

Podobným způsobem spočítáme korelaci náhodných proměnných b, c : $\rho(b, c) = -0.74 \pm 0.15$ a náhodných proměnných a, c : $\rho(a, c) = -0.81 \pm 0.12$.

$$\text{Očekávanou hodnotu veličiny } y \text{ odhadneme jako } \sum_{i=1}^N \frac{3a_i b_i}{c_i^2} = 15.8.$$

Chybu veličiny y odhadneme metodou přenosu chyb

$$\sigma_y^2 \approx \left(\frac{\partial y}{\partial a} \right)^2 s_{1a}^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial b} \right)^2 s_{1b}^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial c} \right)^2 s_{1c}^2 + 2 \frac{\partial y}{\partial a} \frac{\partial y}{\partial b} \text{cov}(a, b) + 2 \frac{\partial y}{\partial b} \frac{\partial y}{\partial c} \text{cov}(b, c) + 2 \frac{\partial y}{\partial a} \frac{\partial y}{\partial c} \text{cov}(a, c) =$$

$$= \left(\frac{3b}{c^2}\right)^2 s_{1a}^2 + \left(\frac{3a}{c^2}\right)^2 s_{1b}^2 + \left(-\frac{6ab}{c^3}\right)^2 s_{1c}^2 + 2\frac{3b}{c^2}\frac{3a}{c^2}\text{cov}(a,b) - 2\frac{3a}{c^2}\frac{6ab}{c^3}\text{cov}(b,c) - 2\frac{3b}{c^2}\frac{6ab}{c^3}\text{cov}(a,c)$$

yní za a, b, c v předchozí rovnici dosadíme jejich průměrné hodnoty $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N a_i$, $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N b_i$, $\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N c_i$ a

dostáváme sy $\sigma_y \approx 5.3$.