Seminární úlohy 7

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 Bohrův 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

$$f_r(r) = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \Psi_{100}(r,\vartheta,\varphi)\Psi_{100}^*(r,\vartheta,\varphi) r^2 \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} \frac{1}{\pi a_0^3}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \sin\vartheta \, d\vartheta \, d\varphi =$$

$$= \left[\int_0^{2\pi} -\frac{1}{\pi a_0^3}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \cos\vartheta \, d\varphi\right]_0^{\pi} = \int_0^{2\pi} \frac{2}{\pi a_0^3}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \, d\varphi = \left[\frac{2}{\pi a_0^3}\exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) r^2 \varphi\right]_0^{2\pi} =$$

$$= \frac{4}{a_0^3} r^2 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right).$$

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:

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

kde je počet naměřených hodnot (zde $N = 10$).
Korelace těchto náhodných proměnných je

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

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

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

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

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

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

Chybu veličiny *y* odhadneme metodou přenosu chyb

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

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

nyní 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 $\sigma_y \approx 5.3$.