Laplaceoperator für Funktionen, die nur vom Abstand zum Koordinatenursprung abhängen:
Sei f eine zweimal differenzierbare Funktion, die nur vom Abstand $r := |\vec{r}| = \sqrt{x^2+y^2+z^2}$ zum Koordinatenursprung abhängt. Dann gilt:

$$\Delta f(r) = \frac{d^2 f}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{df}{dr} = f''(r) + \frac{2}{r} \cdot f'(r) \tag{1}$$

Beweis:
Es gilt

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\sqrt{x^2+y^2+z^2} = \frac{x}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}} = \frac{x}{r} \tag{2}$$

und mit der Kettenregel folgt:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{df}{dr} \cdot \frac{\partial r}{\partial x} = \frac{df}{dr} \cdot \frac{x}{r} = f'(r) \cdot \frac{x}{r} \tag{3}$$

Aus (3) folgt mit Produktregel, Quotientenregel und (2):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left[f'(r) \cdot \frac{x}{r}\right] = \frac{\partial f'(r)}{\partial x} \cdot \frac{x}{r} + f'(r)\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{x}{r}\right] \\
&= f''(r) \cdot \frac{x}{r} \cdot \frac{x}{r} + f'(r)\frac{r - x \cdot \frac{\partial r}{\partial x}}{r^2} = f''(r) \cdot \frac{x^2}{r^2} + f'(r)\frac{r - x \cdot \frac{x}{r}}{r^2} = f''(r) \cdot \frac{x^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - x^2}{r^3}
\end{aligned}$$

Analog ergibt sich

$$\frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = f''(r) \cdot \frac{y^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - y^2}{r^3}; \quad \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = f''(r) \cdot \frac{z^2}{r^2} + f'(r)\frac{r^2 - z^2}{r^3}$$

und damit:

$$\begin{aligned}
\Delta f(r) &= \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} = f''(r)\left\{\frac{x^2}{r^2} + \frac{y^2}{r^2} + \frac{z^2}{r^2}\right\} + f'(r)\left\{\frac{r^2-x^2}{r^3} + \frac{r^2-y^2}{r^3} + \frac{r^2-z^2}{r^3}\right\} \\
&= f''(r) \cdot \frac{r^2}{r^2} + f'(r) \cdot \frac{3r^2 - \left(x^2+y^2+z^2\right)}{r^3} = f''(r) + f'(r) \cdot \frac{2}{r} \qquad \square
\end{aligned}$$

Grundzustand des Wasserstoffatoms:
Eine Lösung der DGL

$$f''(r) + \frac{2}{r}f'(r) + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)f(r) = 0 \tag{4}$$

ist durch $f(r) = Ae^{-\frac{r}{a}}$ gegeben (passt für den für Grundzustand des Wasserstoffatoms).

Normierung: Für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit im $\mathbb{R}^3$ gilt:

$$\begin{aligned}
1 &= \int_{\mathbb{R}^3} |\Psi|^2 \, dV = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left(Ae^{-\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a}}\right)^2 dx\,dy\,dz \\
&= A^2 \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{\infty} e^{-2\frac{r}{a}} \underbrace{r^2 \sin\theta \, dr\, d\theta\, d\phi}_{dx\,dy\,dz} = 4\pi A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\frac{r}{a}}\, r^2\, dr
\end{aligned}$$

Zweifache partielle Integration ergibt sich die Stammfunktion

$$\int r^2 e^{-\frac{2r}{a}}\, dr = -\frac{1}{4}\left(2ar^2 + 2a^2 r + a^3\right)e^{-\frac{2r}{a}} + c \tag{5}$$

und damit $\int_0^{\infty} r^2 e^{-\frac{2r}{a}}\, dr = \frac{1}{4}a^3$. Es ergibt sich $A = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$ und unsere Lösung von (4) hat die Form

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \cdot e^{-\frac{r}{a}}$$

wobei $a = \dfrac{h^2 \varepsilon_0}{e^2 m \pi} \approx 5,29 \cdot 10^{-11} m$ dem Radius r_1 des Bohrschen Atommodells im Grundzustand entspricht! Aus der Gleichung ergibt sich außerdem die Energie des Grundzustands: $E = -\dfrac{e^4 m}{8h^2 \varepsilon_0^2}$.

Aufenthaltswahrscheinlichkeit und radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte:

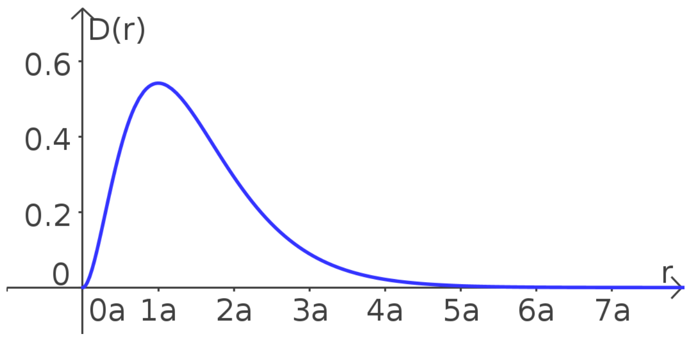
Im Grundzustand ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb einer Kugel mit Radius R um den Koordinatenursprung gegeben durch:

$$P = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{R} e^{-2\frac{r}{a}} \underbrace{r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi}_{dV} = \int_0^R \underbrace{\frac{4}{a^3} r^2 e^{-2\frac{r}{a}}}_{:=D(r)} dr$$

Der Integrand $D(r) = \frac{4}{a^3} r^2 e^{-2\frac{r}{a}}$ entspricht $4\pi r^2 |\psi|^2$ und könnte als eine Art

"Radialdichte der Aufenthaltswahrscheinlichkeit" *oder* ***"radiale Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte"***

interpretiert werden:



Aufenthaltswahrscheinlichkeit "im Bohr Atom":

Im Bohrschen Atommodell befindet sich bei Wasserstoff im Grundzustand das Elektron auf der Bahn mit dem Bahnradius $a \approx 5,29 \cdot 10^{-11} m$. Bei der quantenmechanischen Betrachtung ergibt sich für die Aufenthaltswahrscheinlichkeit innerhalb einer Kugel mit Radius a:

$$\begin{aligned} P &= \iiint \frac{1}{\pi a^3} \cdot e^{-2\frac{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}{a}} dx\, dy\, dz = \frac{1}{\pi a^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{a} e^{-2\frac{r}{a}} \underbrace{r^2 \sin\theta \, dr \, d\theta \, d\phi}_{dx\, dy\, dz} \\ &= \frac{4\pi}{\pi a^3} \int_0^a r^2 e^{-2\frac{r}{a}} dr \overset{(5)}{=} \frac{4}{a^3} \left[-\frac{1}{4} \left(2ar^2 + 2a^2 r + a^3 \right) e^{-\frac{2r}{a}} + c \right]_0^a \\ &= -5e^{-2} + 1 \approx 0,323 = 32,3\,\% \end{aligned}$$