Wobei hier wieder der gleiche Integrations-Trick wie in 26 verwendet werden kann. Allgemeiner:

$$\int_a^\infty dr\, r^n e^{-\beta r} = (-1)^n \partial_\beta^n \int_a^\infty dr\, e^{-\beta r}$$

$$= (-1)^n \partial_\beta^n \left[-\frac{e^{-\beta r}}{\beta} \right]_a^\infty$$

$$= (-1)^n \partial_\beta^n \frac{e^{-\beta a}}{\beta}$$

d) $$n(\vec{r}) = e\,\delta(r) - e\,|\psi_{100}(\vec{r})|^2$$

$\uparrow$ positiver Kern $\qquad$ $\uparrow$ Elektron

$$\Rightarrow n(r) = e\,\delta(r) - \frac{e}{\pi a_0^3} e^{-2r/a_0}$$

Poisson-Gleichung: $\Delta \varphi(r) = -4\pi n(r)$

Ansatz: $\varphi(r) = \chi(r)/r$ für $r > 0$.

$$\Delta \frac{\chi}{r} = \frac{1}{r^2}\partial_r \left(r^2 \partial_r \frac{\chi}{r} \right) = \frac{\partial_r^2 \chi}{r}$$

$$\Rightarrow \chi''(r) = -4\pi r e \left(\delta(r) - \frac{1}{\pi a_0^3} e^{-\frac{2r}{a_0}} \right)$$

Integrieren für R bzw $r > 0$

$$\int_{R>0}^{\infty} \chi''(r)\, dr = -\chi'(R) = \frac{4e}{a_0^3} \int_{R>0}^{\infty} r e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \ldots$$

$$= \frac{4e}{a_0^3} (-1)^1 \partial_\beta \frac{e^{-\beta R}}{\beta} \Big|_{\beta=\frac{2}{a_0}}$$

$$= -\frac{4e}{a_0^3} \left(-R \frac{e^{-\beta R}}{\beta} - \frac{e^{-\beta R}}{\beta^2} \right) \Bigg|_{\beta=\frac{2}{a_0}}$$

$$= \frac{4e}{a_0^3} \left(R \frac{a_0}{2} + \frac{a_0^2}{4} \right) e^{-2R/a_0}$$

$$= \left(\frac{2eR}{a_0^2} + \frac{e}{a_0} \right) e^{-2R/a_0}$$

$$\Rightarrow \quad \chi'(r) = \frac{e}{a_0} e^{-2r/a_0} + \frac{a_0}{2} \chi''(r)$$

Noch mal integrieren:

$$\int_R^\infty \chi'(r)\, dr = -\chi(R) = \frac{e}{a_0} \int_R^\infty e^{-2r/a_0} - \frac{a_0}{2} \int_R^\infty \chi''(r)\, dr$$

$$= \frac{e}{a_0} \left(-\frac{a_0}{2} \right) e^{-\frac{2r}{a_0}} \Big|_R^\infty - \frac{a_0}{2} \left(-\chi'(R) \right)$$

$$= \frac{e}{2} e^{-2R/a_0} + \frac{a_0}{2} \left(\frac{e}{a_0} + \frac{2eR}{a_0^2} \right) e^{-2R/a_0}$$

$$= e\, e^{-2R/a_0} \left(1 + \frac{R}{a_0} \right)$$

$$\Rightarrow \quad \varphi(r) = \frac{\chi(r)}{r} = e \left(\frac{1}{r} + \frac{1}{a_0} \right) e^{-2r/a_0}$$

Wie kann das funktionieren, wenn wir immer nur für $r>0$ integriert haben und den "Kern" eigentlich nicht beachtet haben?

Antwort: Wir haben $\frac{1}{r}$ - Potential vom Kern über Ansatz $\varphi(r) = \frac{\chi(r)}{r}$ "erzwungen"!

Zwar gilt für $r>0$: $\quad \Delta\varphi = \frac{\chi''}{r}$

ABER für alle r gilt eigentlich:

$$\Delta\varphi = \Delta\left(\frac{1}{r}\chi\right) = \frac{1}{r}\Delta\chi + \chi\Delta\frac{1}{r} - \frac{2\chi'}{r^2}$$

$$= \frac{1}{r^3}\left(r^2\chi'\right)' - 4\pi\delta(r)\chi - \frac{2\chi'}{r^2}$$

$$= \frac{1}{r^3}\left(2r\chi' + r^2\chi''\right) - 4\pi\delta(r)\chi - \frac{2\chi'}{r^2}$$

$$= \frac{2\chi'}{r^2} + \frac{\chi''}{r} - 4\pi\delta(r)\chi - \frac{2\chi'}{r^2}$$

$$= \frac{\chi''}{r} - 4\pi\delta(r)\chi \overset{!}{=} -4\pi\left[e\delta(r) - e|\psi(\vec{r})|^2\right]$$

Im Ansatz steckt schon das Kern-Potential, $\chi(r=0) = e$

$$\Rightarrow \varphi(r) \to \frac{e}{r} \text{ für } r \to 0$$