Transformation der Schrödingergleichung

*„Die **Schrödingergleichung** ist eine grundlegende Gleichung der Quantenmechanik. Sie beschreibt in Form einer partiellen Differentialgleichung die Zeitentwicklung des quantenmechanischen Zustands eines nichtrelativistischen Systems. Die Gleichung wurde 1926 von Erwin Schrödinger (1887–1961) zuerst als Wellengleichung aufgestellt[1] und schon bei ihrer ersten Anwendung erfolgreich zur Erklärung der Spektren des Wasserstoffatoms genutzt“.* , aus Wikipedia [1]

Aufgabe a

Warum kann man die Transformation durchführen und erhält exakte Lösungen?

Eine Transformation einer DGL höheren Ordnung führt nur dazu, dass die DGL „umgeschrieben“ wird. Sie wird dabei auf keinster Weise gelöst, sondern nur vereinfacht. Meistens wird dies verwendet um nummerische Methoden mit einer entsprechenden Software durchzuführen. Die alte DGL wird transformiert in eine neue und so werden auch die Lösungen der alten DGL transformiert und werden zu Lösungen der neuen, transformierten DGL.

Aufgabe b

Aufgabe: Führe die Transformation durch und stelle Bedingungen an r und f

Transformation:

$$R(x) = f(r(x)) \cdot G(r(x)),$$

Diese Transformation wird dann 2x nach x abgeleitet.

$$R''(x) = f''(r(x)) * r'(x) * r'(x) * G(r(x)) + f'(r(x)) * r''(x) * G(r(x)) + f'(r(x)) * r'(x) * G'(r(x)) * r'(x) + f'(r(x)) * r'(x) * G'(r(x)) * r'(x) + G''(r(x)) * r'(x) * f(r(x)) * r'(x) + f(r(x)) * G'(r(x)) * r''(x)$$

nun wird dies in die ursprüngliche Gleichung:

$$R''(x) + V(x) \cdot R(x) = 0.$$

eingesetzt.

Und daraus folgt dann

$$+V(x) * f(r(x)) * G(r(x))$$
$$f''(r(x)) * r'(x) * r'(x) * G(r(x)) + f'(r(x)) * r''(x) * G(r(x)) + f'(r(x)) * r'(x) * G'(r(x)) * r'(x) + f'(r(x)) * r'(x) * G'(r(x)) * r'(x) + G''(r(x)) * r'(x) * f(r(x)) * r'(x) + f(r(x)) * G'(r(x)) * r''(x) += 0$$

(1)

Nun muss man noch Bedingungen für f und r setzten, sodass sie die Form der DGL erfüllen. Dafür Klammern wir im oberen Term G, G' und G'' aus.

$$G\big(r(x)\big)\cdot\left[f'\big(r(x)\big)\cdot\big(r'(x)\big)^2+f'\big(r(x)\big)\cdot r''(x)\right]+$$
$$G'\big(r(x)\big)\cdot\left[f'\big(r(x)\big)\cdot\big(r'(x)\big)^2+f'\big(r(x)\big)\cdot\big(r'(x)\big)^2+f\big(r(x)\big)\cdot r''(x)\right]+$$
$$G''\big(r(x)\big)\cdot\left[\big(r'(x)\big)^2\cdot f\big(r(x)\big)\right]=0$$

G' [...] muss =0 sein, da wir sonst die ursprüngliche Form der DGL nicht hätten.
Desswegen setzten wir das in der Klammer = 0

$$\frac{2f'(r)}{f(r)}+\frac{r''}{r'^2}=0. \qquad (2)$$

Nun werden alle r's auf eine und alle f's auf die andere Seite gesetzt, dh die Variablen werden separiert. Durch Integration von

$$\int\frac{r''}{r'}dx=-2\int\frac{f'(r)}{f'(r)}dr$$

erhalten wir

$$\log(|r'(x)|)=-2\log(|f(r)|)+C$$

lösen wir diese nach r'auf:

$$r'=C*f(r)^{-2} \qquad C=\pm e^c$$

K wird danach eingesetzt und r' wird dann in Gleichung (1) eingesetzt und nach r'' aufgelöst.

Fügen wir r' und r'' in Gleichung (1) ein und erhalten

$$G''(r)+\left[\frac{f'''(r)}{f(r)}-2\left(\frac{f'(r)}{f(r)}\right)^2+f^4(r)\right]G(r)=0.$$

Der Term vor $G(r)$ übernimmt die Rolle des neuen V.

Quellen

[1] https://de.wikipedia.org/wiki/Schrödingergleichung, Wikipedia, 3.05.17

Diego Burri & Rafael Lopes Laranjeira