Transformation der Schrödingergleichung

In der Aufgabe war die vereinfachte Form der radialen Schrödingergleichung gegeben:

$$R''(x) + V(x) * R(x) = 0 \tag{1}$$

Um diese Differentialgleichung besser lösen zu können, muss diese zuerst umgeformt werden. Dafür wird für R(x) folgendes in die Differentialgleichung eingesetzt.:

$$R(x) = f\big(r(x)\big) * \ G(r(x)) \tag{2}$$

Nachdem eingesetzt wurde, kann daraus eine neue Differentialgleichung aufgestellt werden (siehe Teilaufgabe b). Lösungen der neuen Differentialgleichung sind auch Lösungen der ursprünglichen Differentialgleichung.

Aufgabe a)

In der Aufgabe a) soll erklärt werden, wieso der oben beschriebene Vorgang funktioniert. Dies lässt sich wie folgt begründen:

Bei der Umformung wird die gesamte ursprüngliche Differentialgleichung in eine neue überführt. Bei diesem Prozess werden von alleine auch die ursprünglichen Lösungen in neue Lösungen umgewandelt. Deshalb werden so neue exakte Lösungen erhalten.

Aufgabe b: Transformation der Schrödingergleichung

Um neue Lösungen der Schrödingergleichungen zu finden, wird oftmals die Schrödingergleichung mit einem V(x) von welchem man die exakten Lösungen kennt genommen und danach transformiert.
Dazu wird die Gleichung (1) mit den unbekannten Lösungen transformiert, indem man den folgenden Ansatz nimmt:

$$R(x) = f\big(r(x)\big) * \ G\big(r(x)\big) \tag{2}$$

Dazu muss die zweite Ableitung der Gleichung (2) berechnet werden:

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

Anschliessend wird die Ableitung in die Schrödingergleichung (1) eingesetzt. Diese wird zusammengefasst und mit f(r) und r' gekürzt und anschliessend werden alle Terme die G, G' oder G'' enthalten ausgeklammert. Dadurch wird der folgende Ausdruck erhalten:

$$0 = \underbrace{G''(r)}_{Entspricht\ R''(x)} + G'(r) * \left[\frac{2f'(r)}{f(r)} + \frac{r''(x)}{r'^2(x)}\right] + \underbrace{G(r)}_{Entspricht\ R(x)} * \underbrace{\left[\frac{f''(r)}{f(r)} + \frac{r'' * f'(r)}{r'^2(x) * f(r)} + \frac{V(r)}{r'^2(x)}\right]}_{Entspricht\ V(x)} \quad (3)$$

Damit die Gleichung (3) der ursprünglichen Schrödingergleichung entspricht, muss der Term der mit G'(x) multipliziert wird null sein. Deshalb muss folgendes gelten:

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

Diese Differenzialgleichung wird nach r'(x) aufgelöst, wie unten aufgeführt:

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

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

$$r'(x) = K * f(r)^{-2}$$

Die Konstante K entspricht dabei K $= \pm e^C$. Diese Konstante kann jetzt gleich 1 gesetzt werden. Somit kommt man auf die folgende Lösung der Differentialgleichung und deren Ableitung:

$$r'(x) = \frac{1}{f^2(r)} \quad (4)$$

$$r''(x) = \frac{-2r'(x) * f'(r)}{f^3(r)} \quad (5)$$

Wenn man diese Lösungen in die Gleichung (3) einsetzt verschwindet der unerwünschte Term und es ist möglich alle r'(x) und r''(x) zu eliminieren. Somit kommt man auf die neue Schrödingergleichung.

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