

$u_{k_v}(x)$ entwickeln wir um $k=0$
und nehmen nur den Term niedrigster
Ordnung mit:

$$W\left(\begin{smallmatrix} k_1 k_4 \\ L V \end{smallmatrix} \middle| \begin{smallmatrix} k_2 k_3 \\ V L \end{smallmatrix}\right) \approx \int dx \int dx' e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} e^{-i\vec{k}_4 \cdot \vec{r}'} \\ \times \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}'} e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r}} \\ \times |u_{0,L}(x)|^2 |u_{0,V}(x')|^2 \quad (V98)$$

- Da $\vec{k}$'s klein, ändern sich die e-Funktionen nur langsam über eine Gitterzelle. Ansatz: sind die Bloch-Funktionen über einer Gitterzelle auf 1 normiert

$$\Rightarrow W \approx \frac{1}{V^2} \int dx \int dx' e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r} - i(-\vec{k}_2) \cdot \vec{r}'} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \\ \times e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{r} + i(-\vec{k}_4) \cdot \vec{r}'} \quad (V99)$$

Vernachlässigt man noch den Austausch-
term in der geschweiften Klammer in (V96),

$$\Rightarrow C_{k_1 k_2} \left(\frac{\hbar^2 k_1^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m_V} + \Delta E \right) - \sum_{k_3 k_4} C_{k_3 k_4} W \\ = E C_{k_1 k_2} \quad (V100)$$

- Man kann zeigen, dass diese Gl. zur
Zweifelhaken-Schrödingers-Gl

$$\left(\Delta E - \frac{\hbar^2}{2m_L} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_V} \nabla_2^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \psi(x_1, x_2) = E \psi(x_1, x_2) \quad (V_{101})$$

äquivalent ist. Dann setzt man $\psi(x_1, x_2) = \sum_{k_1, k_2} C_{k_1, k_2} \frac{1}{V} e^{i\vec{k}_1 \vec{r}_1 - i\vec{k}_2 \vec{r}_2}$ ein.)

- LB-Elektron und VB-Defektel. verhalten sich wie zwei Teilchen entgegengesetzter Ladung und effektiven Massen m_L und m_V
- Da Coulomb-Anziehung $\Rightarrow$ Bindungszustände
- $\rightarrow$ wasserstoffartige Spektren

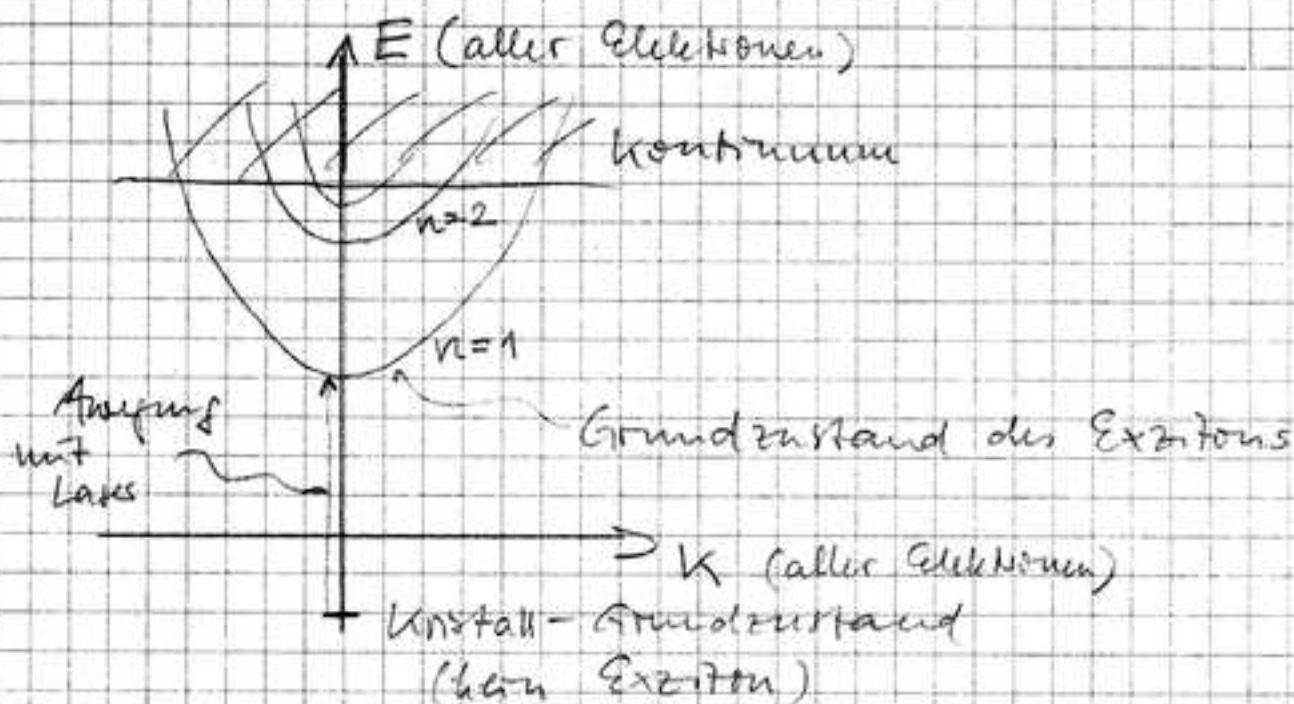
Wie beim H-Atom Zulegung in Schwerpunktsbewegung und Relativbewegung

$$E_{sp} = \frac{\hbar^2 k^2}{2(m_V + m_L)}$$

k : Gesamtwellenzahl red. Masse $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_V} + \frac{1}{m_L}$

$$E_{rel} = - \frac{m e^4}{\hbar^2 \epsilon^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3$$

$\nwarrow$ Rydberg-Konstante



- Wir haben um $k=0$ herum entwickelt
 - kleiner Impuls des Elektrons und des Lochs
 - räumlich große Abstände
- (begründet a posteriori die Vernachlässigung des Austauschterms in (V.100))
- Solche Exzitonen mit großen Bahnradien heißen Wannier-Exzitonen
- Räumlich lokalisierte Exzitonen heißen Frenkel-Exzitonen (z.B. in Molekülen)
 - Entwicklung nicht nach Blochwellen sondern atomaren Funktionen oder sog. Wannierfunktionen (die räumlich an einem Gitterplatz lokalisiert sind).

VI. Relativistische Wellengleichungen

192

- Bewegungsgesetze müssen in allen Inertialsystemen gelten

→ relativistische Quantentheorie muss in einer Lorentz-kovarianten Form formulierbar sein

→ Ziel: nicht-rel. QM so erweitern, dass spezielle Relativitätstheorie erfüllt, aber die "übliche" Interpretation wie in der nicht-rel. QM erhalten bleibt ($|\psi|^2$ ist Wahrsch.-dichte, Eigenwerte sind mögliche Messwerte, Superpositionsprinzip, $i\hbar \partial \psi / \partial t = \hat{H} \psi$ etc.)

Versuch: nicht-rel. QM:

$$H \rightarrow i\hbar \partial_t, \quad \vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}$$
$$\Rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi$$

- Diese Gl.en sind nicht relativistisch kovariant, denn

$$p^\mu = \left(\frac{E}{c}, p_x, p_y, p_z \right)$$

$$\sum_{\mu=0}^3 p_\mu p^\mu = \underbrace{p_\mu p^\mu}_{\substack{\text{Summenkonvention} \\ p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z}} = \frac{E^2}{c^2} - \underbrace{\vec{p} \cdot \vec{p}}$$

$$p_x p_x + p_y p_y + p_z p_z$$

in jedem Bezugssystem gleich

Im Ruhesystem folgt mit $\vec{p} = \vec{0}$ und $E = mc^2$

$$p_\mu p^\mu = m^2 c^2$$

also

$$p_\mu p^\mu = \frac{E^2}{c^2} - \vec{p} \cdot \vec{p} = m^2 c^2 \quad (\text{VI } 1)$$

in jedem Inertialsystem.

Es bietet sich an, als Hamilton-Op eines rel. freien Teilchens

$$\hat{H} = \sqrt{\hat{p}^2 c^2 + m^2 c^4}$$

anzusetzen, und als „Schrödinger-Gl.“

$$i\hbar \partial_t \psi = \sqrt{-\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m^2 c^4} \psi$$

Hier gibt es ein Problem, da ∇^2 unter der Wurzel steht (man könnte die Wurzel entwickeln, hätte dann aber alle Potenzen von ∇^2 ($\rightarrow$ nicht-lokale Theorie)).

Versuche stattdessen:

$$H^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

$$\Rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = (-\hbar^2 \nabla^2 c^2 + m^2 c^4) \psi$$

$$\text{Mit } \square = \frac{\partial}{\partial x_\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2, \quad x^\mu = (ct, \vec{r})$$

können wir auch

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0 \quad (\text{VI.2})$$

schreiben. (Klein-Gordon-Gleichung)

- Durch das Quadrieren haben wir weitere Lösungen

$$H = - \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Zufassen $\Rightarrow$ Energie nicht mehr positiv definit (macht aber nichts, führt sogar auf Anti-Teilchen, die experimentell beobachtet wurden).

- Lässt sich $|\psi|^2$ noch als Wahrsch. dichte interpretieren?

$$\psi^* \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi = 0$$

$$\psi \cdot (\text{VI.2})^* \Rightarrow \psi \left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \right) \psi^* = 0$$

Subtraktion

$$\psi^* \square \psi - \psi \square \psi^* = 0$$

$$\psi^* \partial^\mu \partial_\mu \psi - \psi \partial^\mu \partial_\mu \psi^* = 0$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial}{\partial x^\mu}}_{\partial^\mu \partial_\mu}$$

$$\Rightarrow \partial^\mu (\psi^* \partial_\mu \psi) - \partial^\mu \psi^* \partial_\mu \psi =$$

$$- (\partial^\mu (\psi \partial_\mu \psi^*) - \partial^\mu \psi \partial_\mu \psi^*) = 0$$

$$\Rightarrow \partial^\mu (\psi^* \partial_\mu \psi - \psi \partial_\mu \psi^*) = 0 \quad (\text{VI.3})$$

Dies hat die richtige relativistische kovariante Form einer Kontinuitätsgleichung.
Ausgeschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial(ct)} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial(ct)} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial(ct)} \psi^* \right) + \frac{\partial}{\partial(x)} \left(\psi^* \frac{\partial}{\partial x} \psi - \psi \frac{\partial}{\partial x} \psi^* \right) + \dots = 0$$

mit y, z

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) - \vec{\nabla} \cdot (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*) \right\} + \vec{\nabla} \cdot \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*) = 0$$

Im Vgl. zur Kontinuitätsgl.

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0 \quad (\text{VI 4})$$

könnte man nun $\rho = \frac{i\hbar}{2mc^2} (\psi^* \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^*)$

als Wahrsch. dichte interpretieren und

$\vec{j} = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$ wie üblich als

Wahrsch.- Stromdichte. Allerdings ist dann

ρ nicht positiv definit! Eine Inter-

pretation von ρ als Wahrsch. dichte ist

daher nicht möglich.

Daher hat man die Klein-Gordon-Gl.
(VI 2) zunächst verworfen und wollte
eine lineare Gl. in ∂_t , damit $|\psi|^2$
als Wahrsch. dichte interpretierbar bleibt.

Dirac-Gleichung

- Wir suchen eine Gleichung linear in ∂_t .
(aus dem oben genannten Grund der
pos. definiten Wahrsch. dichte).
- Damit die Gl. sich relativistisch vernünftig
transformiert, sollten auch die Orts-
ableitungen nur linear auftreten
- Ansatz (Dirac 1928)

$$\hat{H} = c \underbrace{\vec{\alpha} \cdot \vec{\hat{p}}}_{\alpha_x \hat{p}_x + \alpha_y \hat{p}_y + \alpha_z \hat{p}_z} + \beta m c^2 \quad (\text{VI 5})$$

Schreibe $(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$.

α_i, β nicht von $\vec{r}$ oder t abhängig wegen
Homogenität des Raumes

- $\hat{H}^2$ muß die rel. Gesamtenergie $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$
geben

$$\begin{aligned} \hat{H}^2 &= c^2 \sum_{i,k=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i \alpha_k \hat{p}_k + m c^3 \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i \beta \\ &\quad + m c^3 \sum_{k=1}^3 \beta \alpha_k \hat{p}_k + \beta^2 m^2 c^4 \end{aligned}$$