Domácí úkol – Diracův hřeben *(termín odevzdání: 24.11.2021, 25.11.2021)*

Částice se pohybuje v potenciálu složeném z periodicky se opakujících δ funkcí

$$V(x) = c \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na),$$

jehož vlnové funkce na intervalu $x \in (na; (n+1)\,a)$, $n \in \mathbb{Z}$, $c > 0$, $E > 0$ jsou podle Blochova teorému

$$\psi_q(x) = \left[A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-na)} + B\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k(x-na)}\right]\mathrm{e}^{iqna},$$

kde q je krystalová hybnost (kvazihybnost) částice. Mezi $k = \sqrt{2ME}/\hbar$ a K platí vztah

$$\cos qa = \cos ka + \frac{K}{2k}\sin ka,$$

kde $K = 2Mc/\hbar^2$ (M je hmotnost částice).

1. Pro dvě hodnoty $K = 2$ a $K = 10$ vypočítejte a zakreslete do grafu disperzní relaci $E(q)$ pro nejnižší čtyři energetické pásy. Uvažujte následující konvenci: pokud $\pi n \leq ka \leq \pi(n+1)$, pak $\pi n \leq qa \leq \pi(n+1)$, $n \in \mathbb{Z}$.

2. Vypočítejte grupovou rychlost
$$v_\mathrm{g} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial E}{\partial q}$$
a zakreslete její závislost na q a na E pro dvě hodnoty parametru $K = 2$, $K = 10$ a nejnižší čtyři energetické pásy. Srovnejte s případem volné částice.

3. Najděte řešení Schrödingerovy rovnice pro případ $K < 0$ (v tomto případě může být energie i záporná). Podobně jako v bodě 1 zakreslete disperzní relaci $E(q)$ pro $K = -2$ a $K = -10$.

4. Nalezněte parametry A, B vlnové funkce. Vlnovou funkci normalizujte na intervalu mezi sousedními dvěma δ funkcemi:
$$\int_0^a \left|\psi_q(x)\right|^2 \mathrm{d}x = 1.$$

Pro všechny numerické výpočty uvažujte $a = M = \hbar = 1$.