Domácí úkol – Diracův hřeben

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 $x \in (na; (n+1)\,a)$, $n \in \mathbb{Z}$, $E > 0$ 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 na počítači vykreslete graf disperzní relace $E(q)$ pro nejnižší čtyři energetické pásy. Uvažujte následující konvenci: pokud $\pi n \le ka \le \pi(n+1)$, pak $\pi n \le qa \le \pi(n+1)$, $n \in \mathbb{Z}$.

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, $E < 0$). Podobně jako v bodě 1 zakreslete disperzní relaci $E(q)$ pro $K = -2$ a $K = -10$.

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