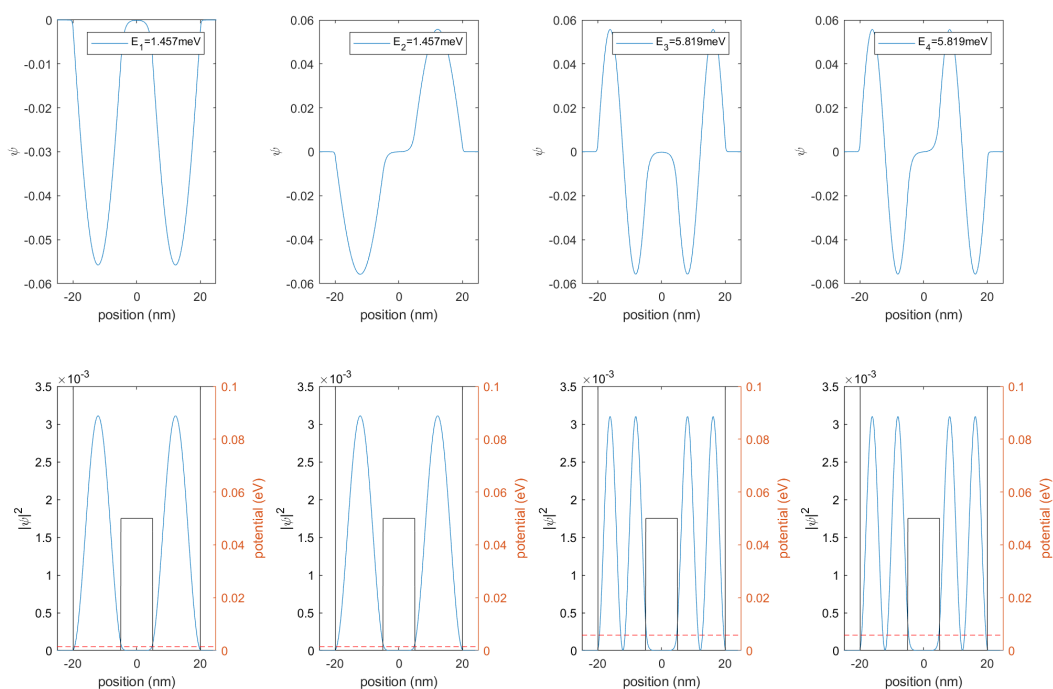


《量子信息基础》2022.3.24 随堂作业:

撰写数值模拟报告一份。模拟中使用 Matlab 开发的 `eigenfunctionCW.m` 代码（注意不是 `eigenfunction.m`，需要在浙大钉群中下载新程序）。报告内容包括题目、摘要、数值模拟过程与结果、数值结果讨论与分析、总结、参考文献等部分。要求图文并茂，报告长度 4 页。并使用下一页中的报告模板。报告必须覆盖如下技术内容：

（基本格式按照以上要求的给 20 分，缺少一部分或报告长度不足扣 5 分。数值模拟过程和数值结果分析写在一起的不扣分。）

1. 设定总势阱宽度为 40nm，深度 1 eV，中间势垒高度 50 meV，宽度 10nm。在 Matlab 环境下执行 `matrix_QM_full_annotation.m`。请画出其势能曲线，以及基态的定态波函数和第一到第三激发态的定态波函数。



给出势能曲线和波函数结果给 10 分

2. 用柱状图验证基态的定态波函数和第一到第三激发态的定态波函数之间满足正交归一性（波函数以列矢量的形式保存在矩阵 `phi` 中，`phi(:,i)` 语句表示取出第 `i` 列的矢量）。在二维柱状图的基础上，尝试画出 `x, y` 坐标分别是 `n, m` 的三维柱状图（类似下图，需要先查找合适的 Matlab 命令）。

数值求解的波函数以列矢量的形式保存在 `phi` 矩阵中。取出前 4 个：

```
>> psia=phi(:,1:4);
```

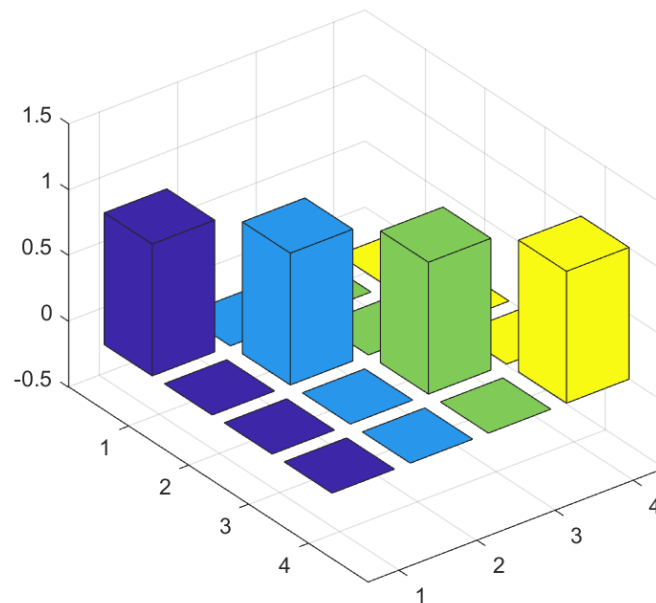
而后对各个列矢量两两求内积，可以用矩阵乘法一步实现：

orthmatrix=psia'*psia;%%%结果为 4x4 矩阵:

```
orthmatrix =  
  
    1.0000    -0.0000    -0.0000     0.0000  
   -0.0000     1.0000    -0.0000    -0.0000  
   -0.0000    -0.0000     1.0000    -0.0000  
    0.0000    -0.0000    -0.0000     1.0000
```

最后使用 bar3()函数，绘制三维柱状图:

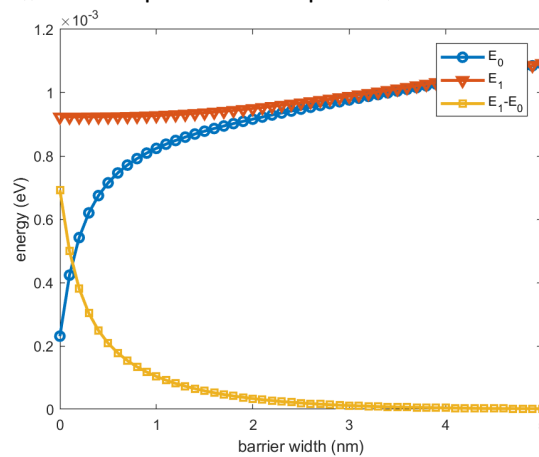
```
>> bar3(orthmatrix)
```



给出三维正交归一柱状图，结果正确的给 20 分、

(给出二维正交归一柱状图，结果正确的给 15 分)

3. 耦合势垒高度保持在 0.05eV 的情况下，调节耦合势垒宽度，从 0nm 变化到 5nm，画出基态和第一激发态能量差随着势垒宽度变化的曲线，并分析结果。注意，当前程序最小空间格点为 50pm，因此 50pm 以内的宽度差别无法体现。

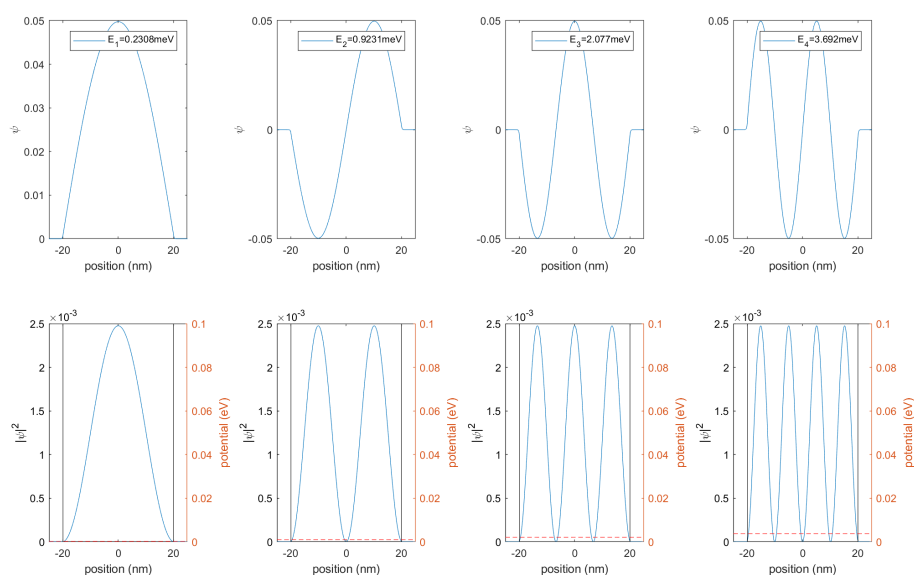


- 基态和第一激发态的能量差随着势垒宽度的增加而减小，反映了势垒宽度增加时两个势阱内的波函数耦合程度越来越低的事实。
- 当势垒宽度超过 4nm 时，耦合可忽略，基态和激发态能量简并。
- 随着势垒宽度进一步增加，基态和激发态能量缓慢上升，反映了势垒宽度增加压缩波函数，导致动量不确定度增加的物理事实。

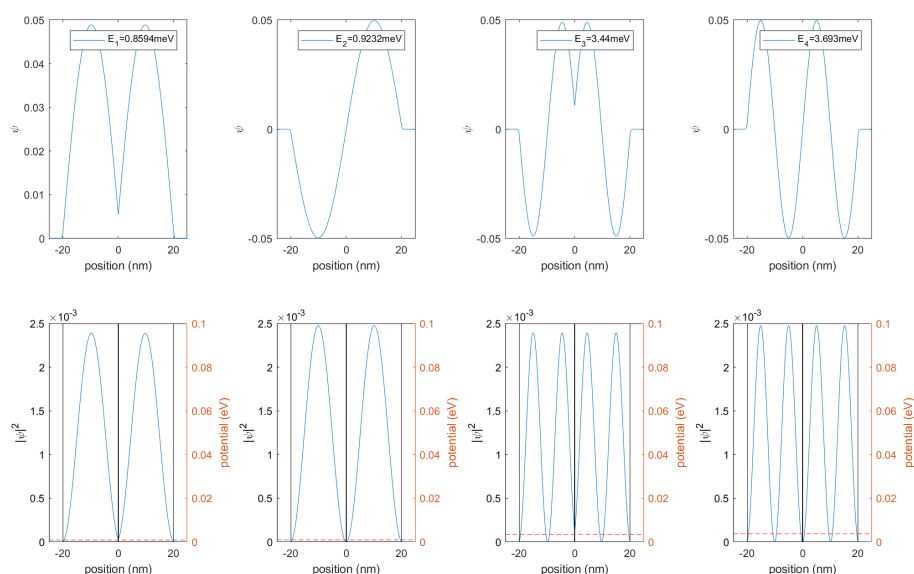
给出基态和第一激发态能量差的变化，结果正确的给 15 分。给出每一条分析的额外加 5 分，有理有据皆可加分。

4. 比较耦合势垒高度 1eV，宽度为 0nm 和 50pm 条件下的能量最低的 4 个本征态的能量及波函数分布。总结其中的特征，并尝试解释其来源。（Text book* Problem 7.1）

0pm



50pm

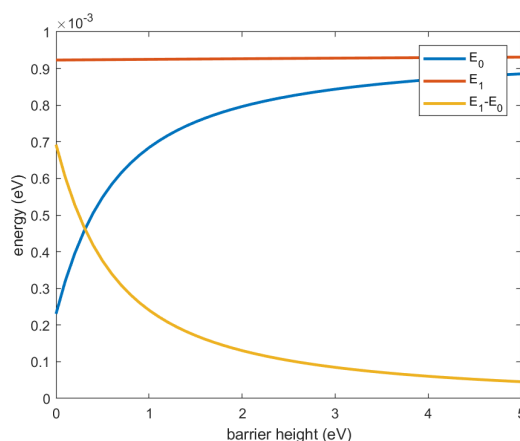


- 势垒宽度很薄时，其微扰对原势阱中的奇对称波函数能量修正可忽略，波函数修正可忽略。原因在于奇对称波函数在坐标 0 附近的波函数分布为 0；

- 引入的薄势垒微扰，将显著改变偶对称波函数的能量和波函数分布。势垒对波函数产生强烈挤压作用，导致本正能量上升；
- 微扰后的波函数可理解为两个单独势阱中的波函数的同相或反向叠加，前者能量低，后者能量高。

给出两组波函数分布，结果正确的给 20 分。给出每一条分析的额外加 5 分，有理有据皆可加分。

5. 耦合势垒宽度保持在 1nm 的情况下，调节耦合势垒高度，从 0.0eV 变化到 0.1eV，画出基态和第一激发态能量差随着势垒高度变化的曲线，并分析结果。



- 基态和第一激发态的能量差随着势垒高度的增加而减小，反映了势垒高度增加时两个势阱内的波函数耦合程度越来越低的事实。
- 第一激发态能量几乎不随中间窄势垒高度的变化而变化，反映了第一激发态波函数在中心的概率分布接近 0 的事实，因此一阶能量修正接近 0。
- 当势垒高度越来越大，可预计基态与第一激发态将趋于能量简并。

给出基态和第一激发态能量差的变化，结果正确的给 15 分。给出每一条分析的额外加 5 分，有理有据皆可加分。

《量子信息基础》课程报告的格式和要求

姓名：张量子 学号 00200000

所在学院：信息与电子工程学院, 浙江大学

Email: zhanglz@zju.edu.cn

摘要：这份报告的开头部分包括报告标题、作者信息、署名单位、通讯方式等信息，以及最多 100 字的摘要。报告标题字体使用 18 号粗体宋体，摘要使用 12 号标准宋体。报告长度 3-4 页。

一. 数值模拟过程和结果

这份报告使用 A4 的标准版式 ($21 \times 29.7 \text{ cm}^2$)，四边都使用 3cm 的白边。小节标题使用 14 号粗体宋体。正文使用 12 号标准宋体。数值模拟部分的结果通过执行文献[1]中的代码并做进一步开发后获得。

二. 数值结果讨论与分析

这份报告使用 A4 的标准版式 ($21 \times 29.7 \text{ cm}^2$)，四边都使用 3cm 的白边。小节标题使用 14 号粗体宋体。正文使用 12 号标准宋体。数值结果的讨论基于文献[2]中的量子力学知识。

三. 总结

这份报告使用 A4 的标准版式 ($21 \times 29.7 \text{ cm}^2$)，四边都使用 3cm 的白边。小节标题使用 14 号粗体宋体。正文使用 12 号标准宋体。

参考文献：

- [1] C.Y. Jin, eigenfunctionDW.m 程序及其注释 (2020).
- [2] David J. Griffiths, and Darrell F. Schroeter, Introduction to Quantum Mechanics (3rd Edition), Cambridge University Press (2018).