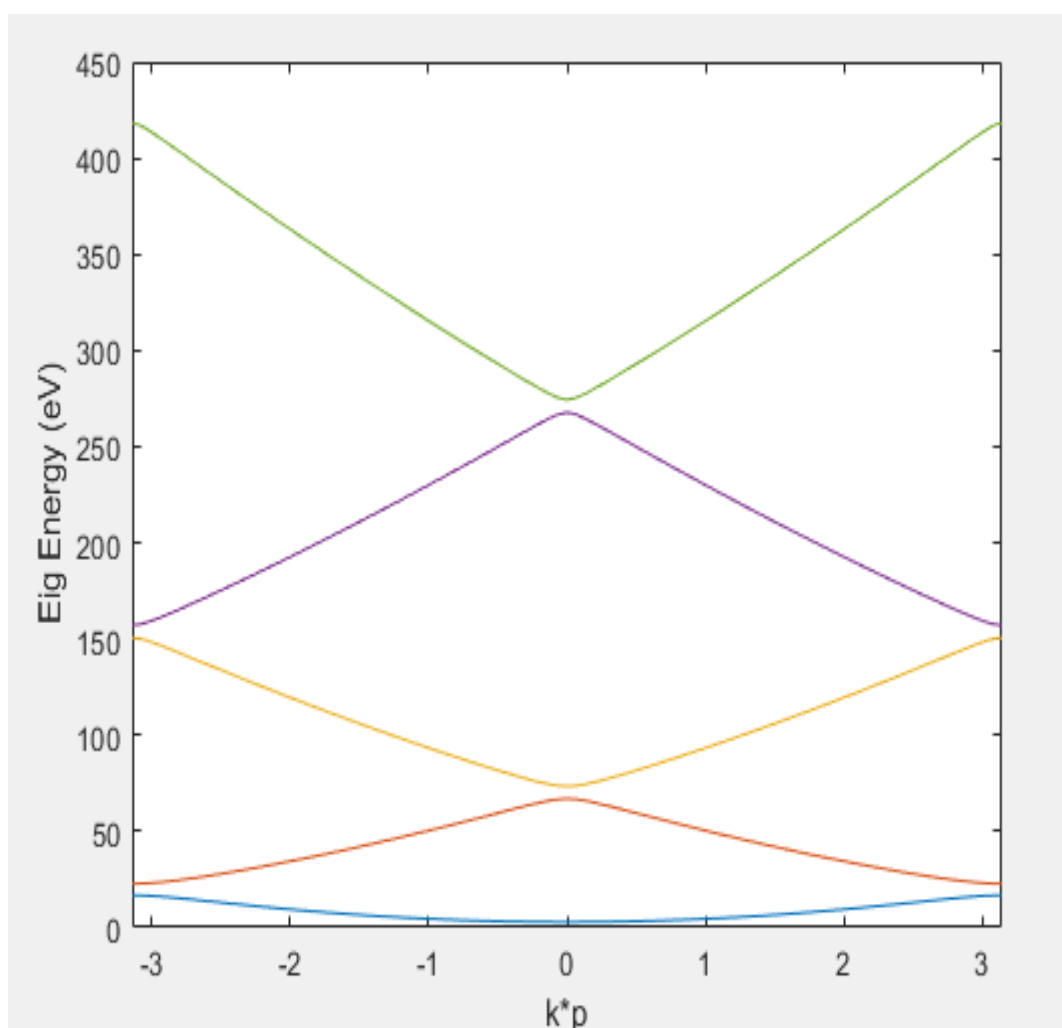


《量子信息基础》C3-2 作业答案

《量子信息基础》2022.3.17 随堂作业：

撰写数值模拟报告一份。模拟中使用 Matlab 开发的 `bandstructure.m` 代码（注意不是 `matrix_QM.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 3-4 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：

1. 在 Matlab 环境下执行 `bandstructure.m`。将 'type' 设为 `delta`, `height=1000eV`, `aN=299`。画出能量最低的 5 个能带的 E-k 关系。并提取出在第一布里渊区中心和边界上的本征能量。



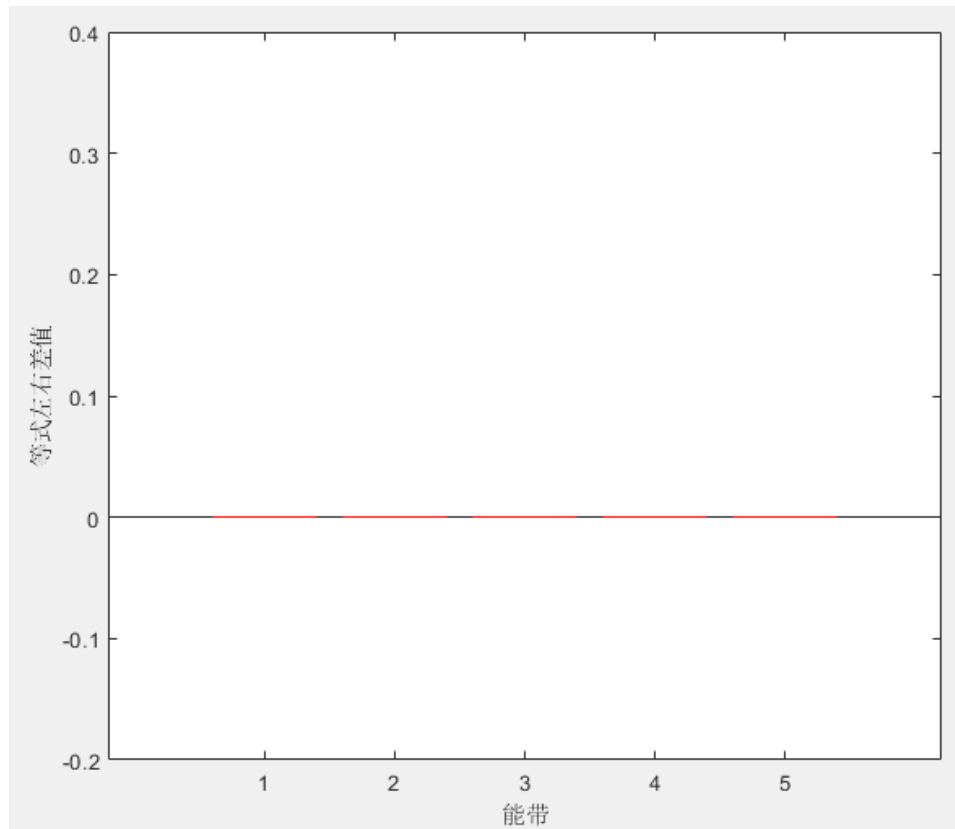
| | | | | | |
|----------------|--------|--------|---------|---------|---------|
| E_center(eV) | 2.852 | 66.940 | 73.408 | 267.729 | 274.343 |
| E_boundary(eV) | 16.735 | 22.783 | 150.607 | 157.181 | 418.293 |

2. 将 1 中提取出的布里渊区中心能量代入教材 5.71 式（英文第三版），验证其是否满足方程。注意，该式中 q , a , k 的定义与 ppt 以及代码中不同，应作相应替换。提示， δ 势垒的强度 α ，其值等于 $\text{height} \cdot eV2J \cdot \delta_x$

$$\cos(qa) = \cos(ka) + \frac{m\alpha}{\hbar^2 k} \sin(ka).$$

*公式中的 q , a , k 对应于 PPT 中的 k , p , α ;

公式中 q , a 的乘积对应于代码中 `kp_list`, k 值则需自行计算;



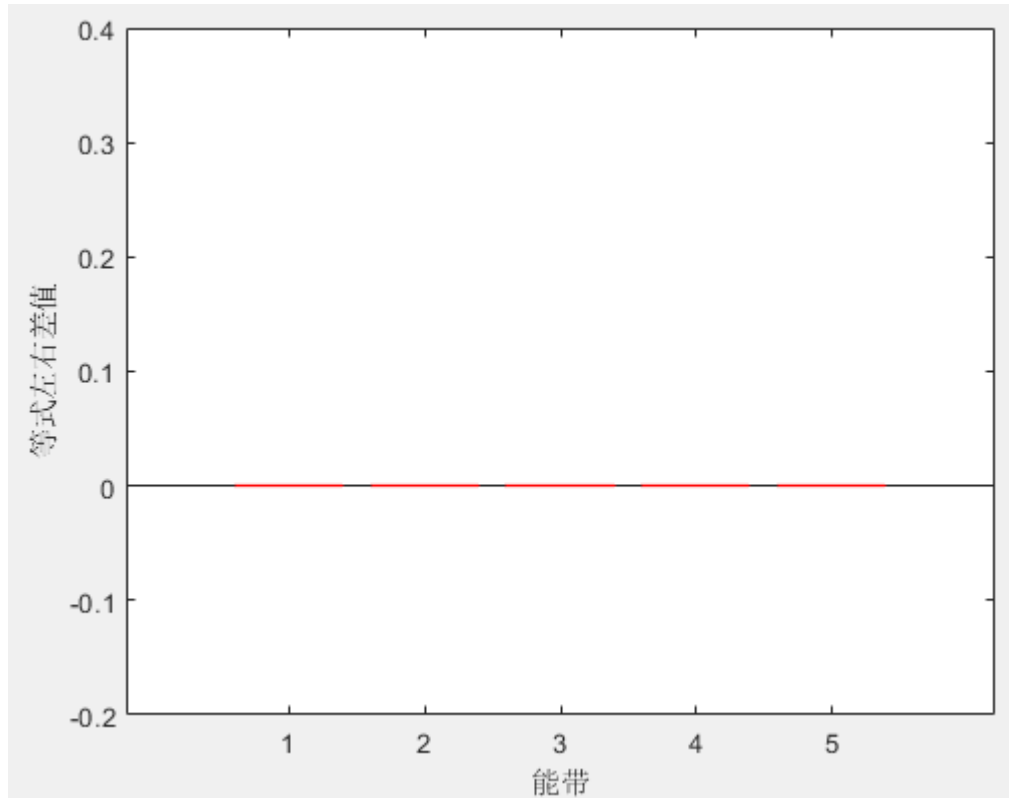
`left =`

`1`

`right =`

`1.0000 1.0000 1.0000 0.9999 1.0001`

3. 将 1 中提取出的布里渊区边界 ($kp=\pi$) 能量代入教材 5.71 式 (英文第三版), 验证其是否满足方程。



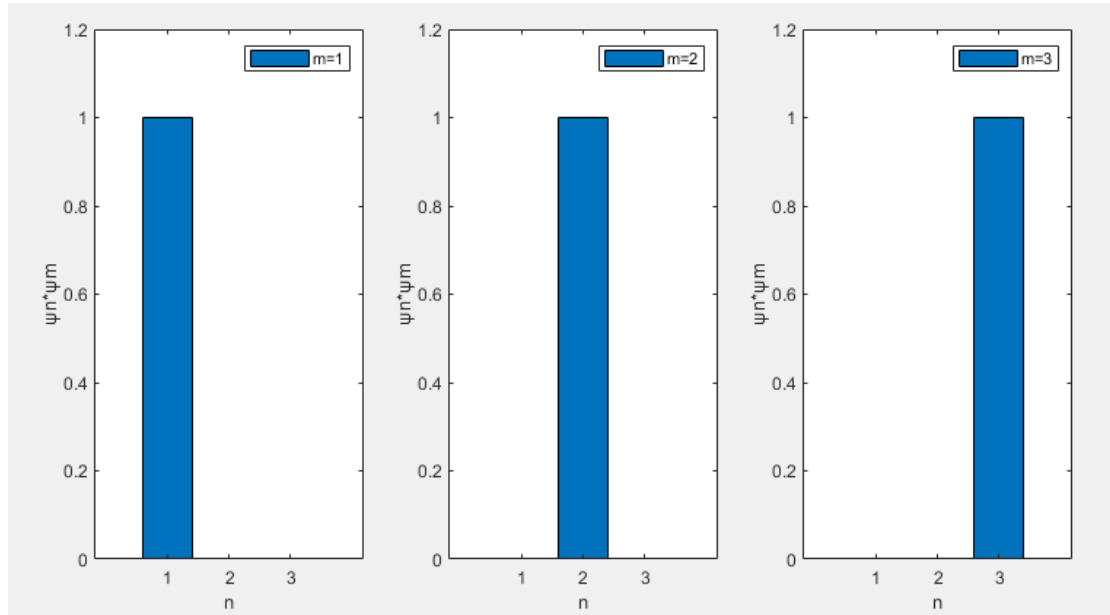
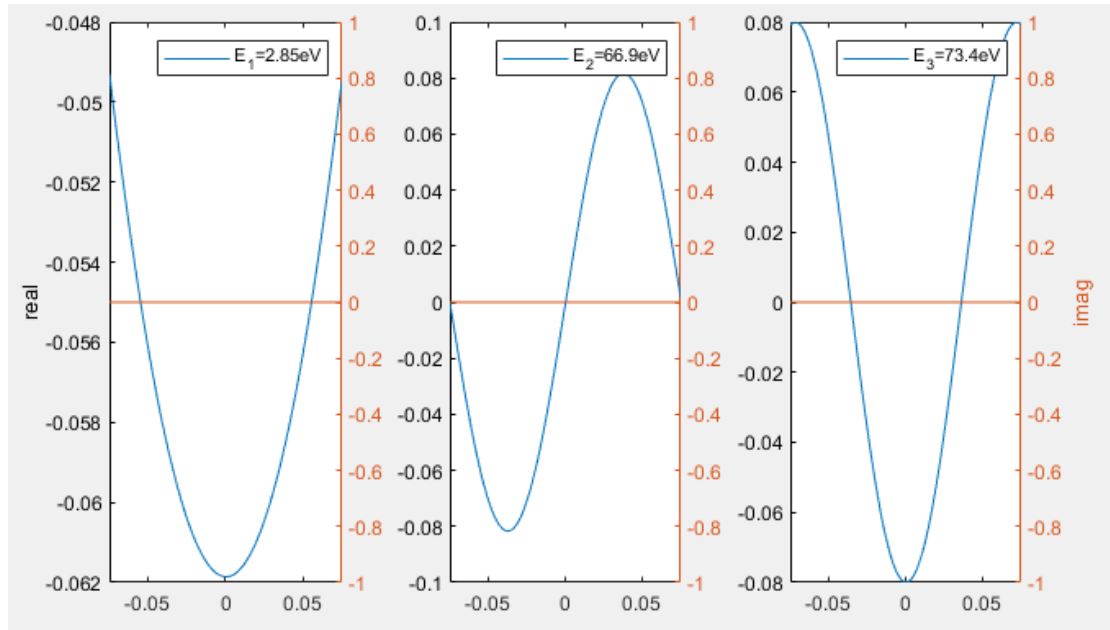
`left =`

`-1`

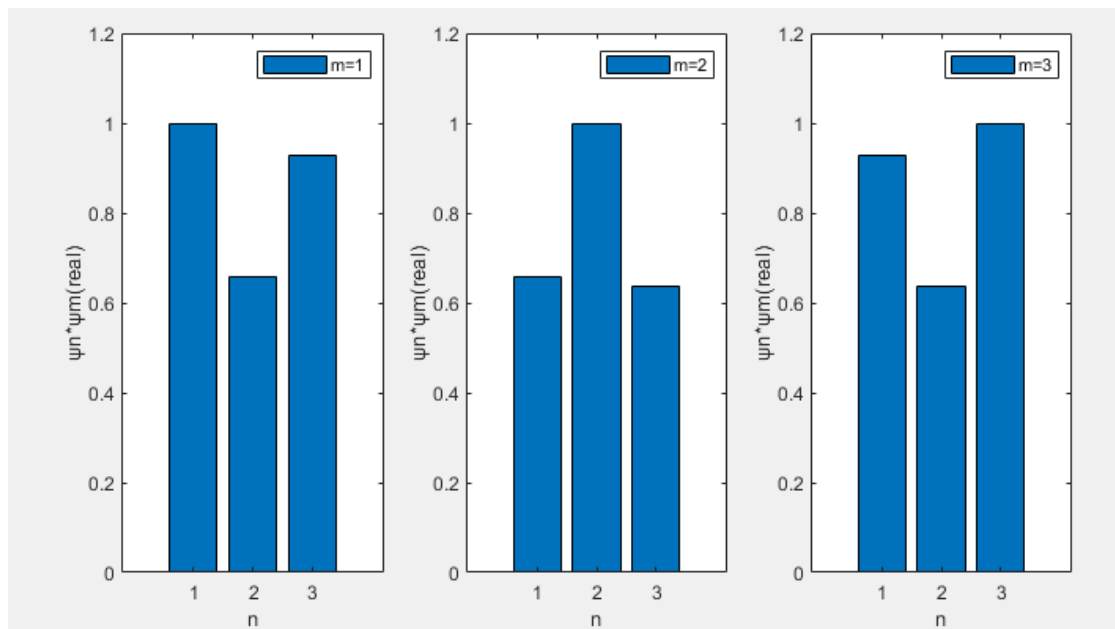
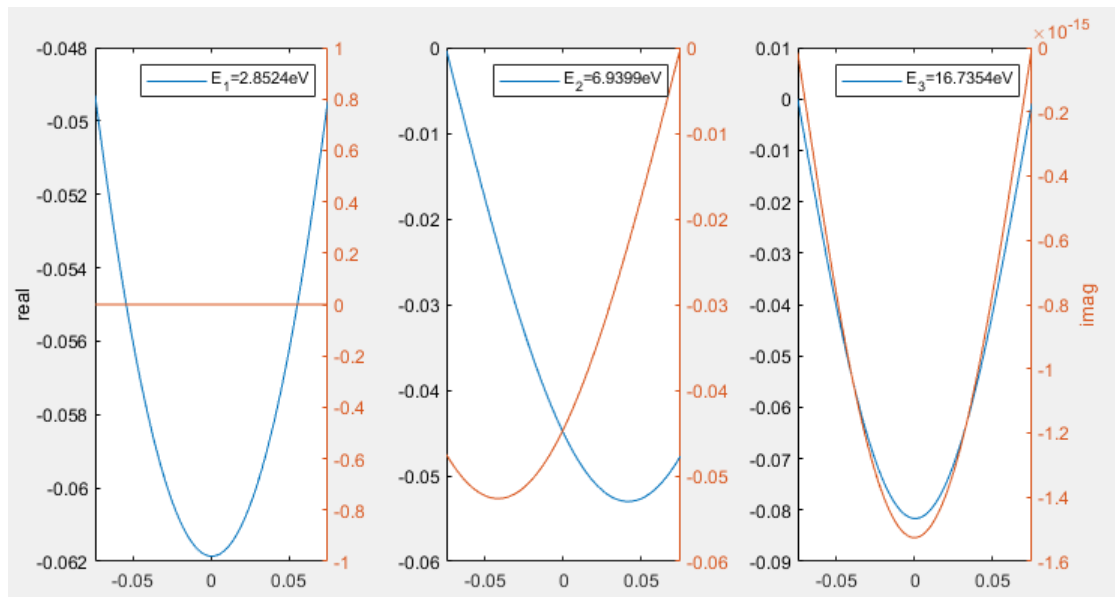
`right =`

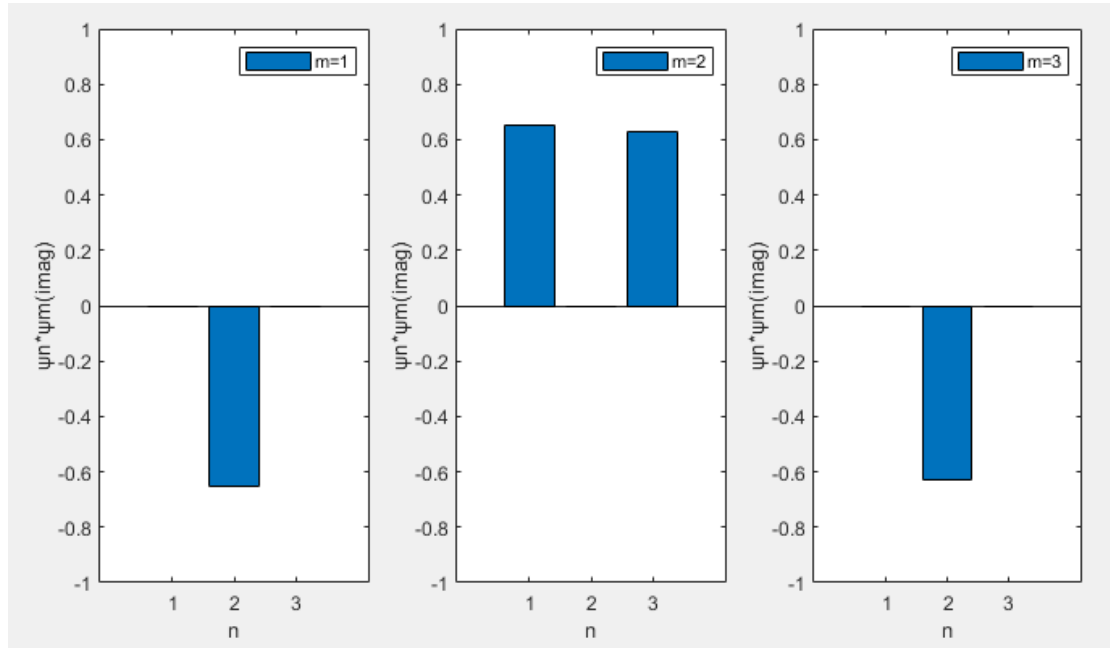
`-1.0000 -1.0000 -1.0000 -1.0000 -0.9999`

4. 画出前 3 个能带 $k=0$ 处的波函数，并验证其是否相互正交。提示，设定 `kp_list=linspace(-pi,0,100)`; `phi` 数组中保存了针对 `kp_list` 中的最后一个值计算的特征向量。

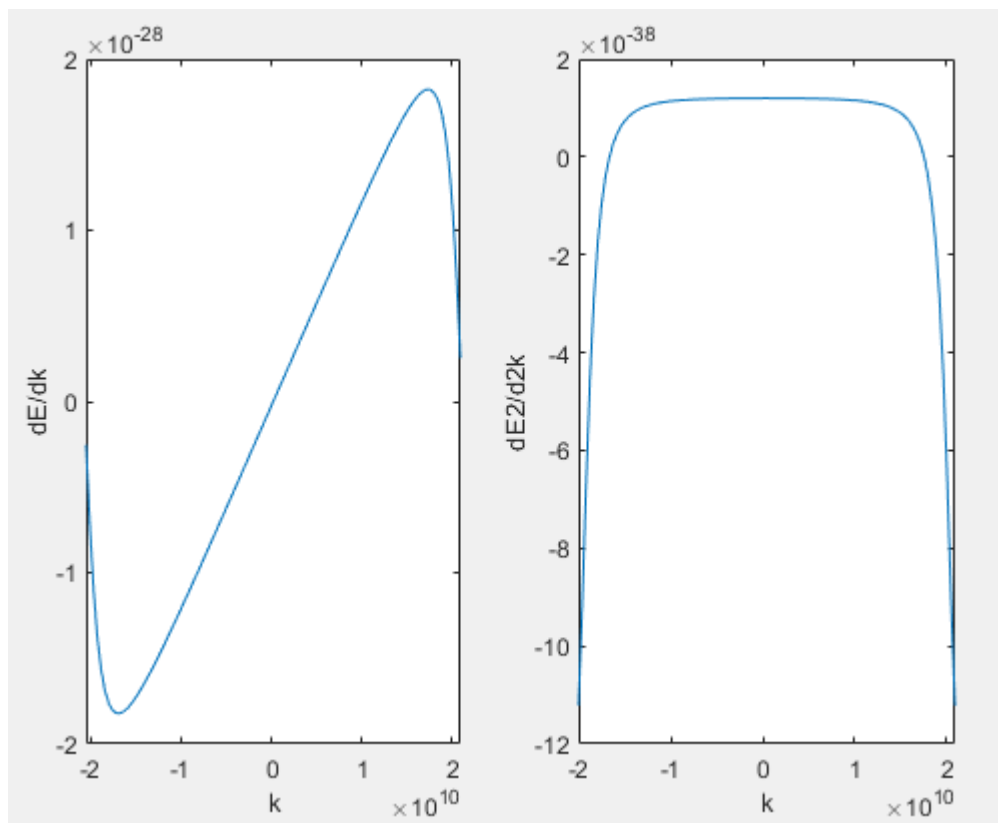


5. 画出第 1 个能带 $k^*p=0$, $k^*p=\pi/2$, 以及 $k^*p=\pi$ 处的波函数, 并验证其是否相互正交。如果不正交, 尝试分析原因。





6. 画出第 1 能带的 E-k 关系 1 阶导数和 2 阶导数，求取有效质量。注意，程序中给出的范例，其作图横坐标为 k_p ，应作合理修改。提示，采用差分代替求导。



$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}$$

