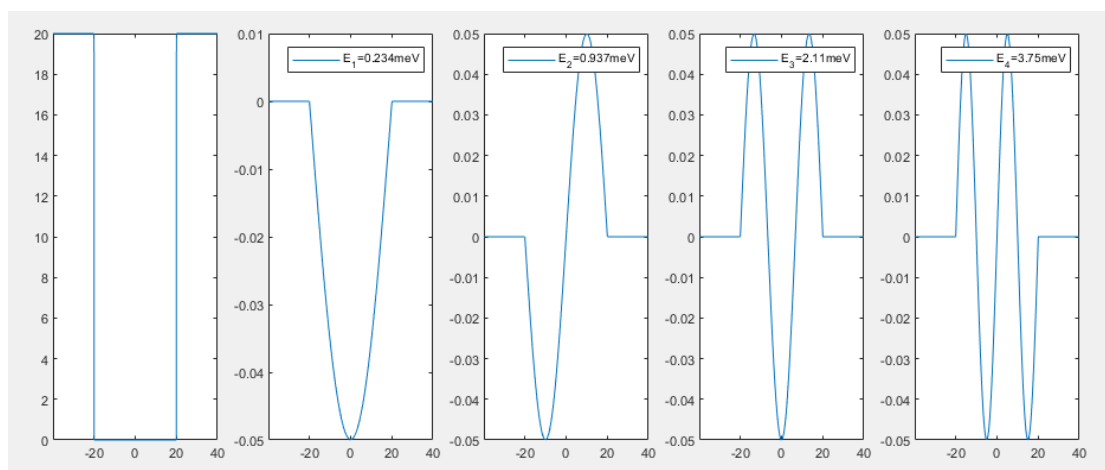
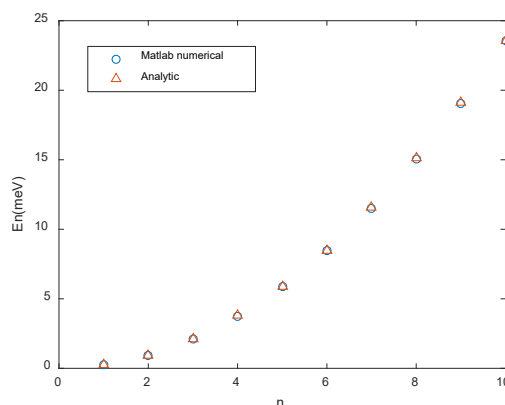


撰写数值模拟报告一份。模拟中使用 Matlab 开发的 **matrix_QM.m** 代码。报告内容包括题目、摘要、数值模拟过程与结果、数值结果讨论与分析、总结、参考文献等部分。要求图文并茂，报告长度 3-4 页。并使用附件中的报告模板。报告必须覆盖如下技术内容：

1. 在 matlab 环境下执行 **matrix_QM.m** 得到 40nm 宽无限深势阱结构的势能曲线，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（参考教学 PPT 倒数第 3 页）。**%%原程序为~25nm 势阱宽度。**



2. 画出 40nm 宽无限深势阱前 10 个本征能量和量子数之间的离散关系，并与公式所得到的关系相比较。**%%原程序为~25nm 势阱宽度。**

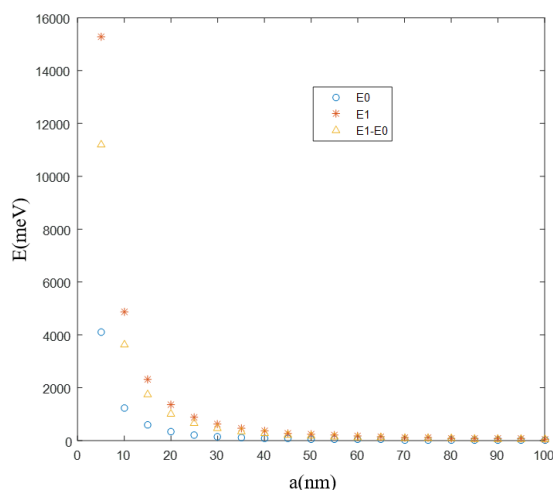


由本征能量公式可知：

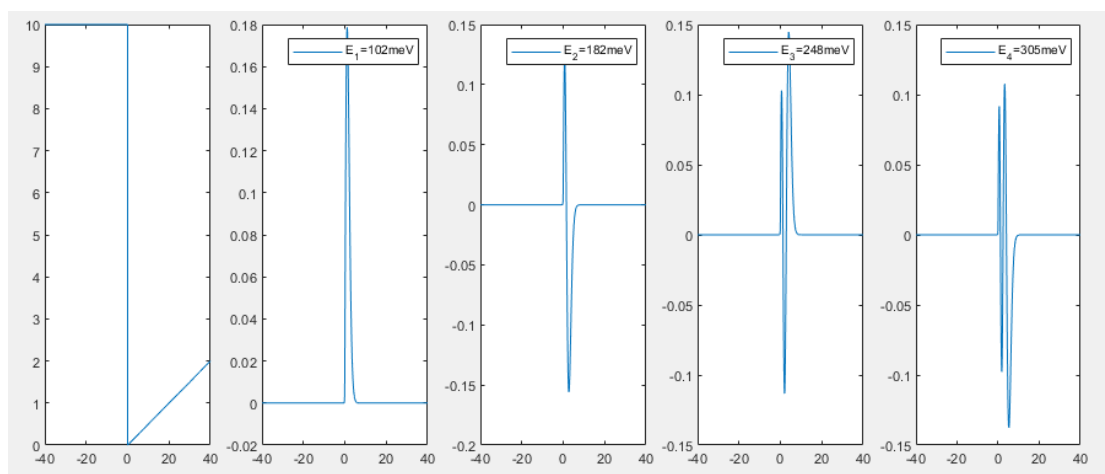
$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = n^2 E_1$$

数值模拟结果与公式所得关系相符。

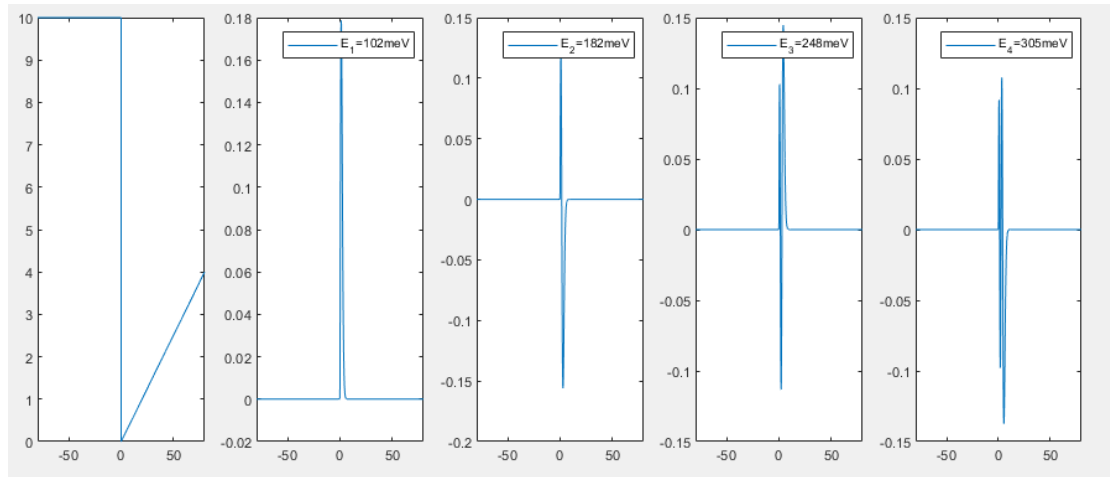
3. 修改无限深势阱的宽度，画出势阱宽度从 5nm 调节到 100nm 的情况下，基态能量、第一激发态能量、和他们的能量差与势阱宽度变化的关系。分析为什么会得到这样的结果。**%%原程序计算范围为-25~25nm，如要计算到势阱 100nm 宽度，需将计算总宽度改至 200nm。**



4. 修改 `matrix_QM.m` 得到三角势阱结构的势能曲线（将 `matrix_QM.m` 程序中第 17 行修改为 `type='triangle'` 并执行），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（参考教学 PPT 倒数第 3 页）。**%%第 18 行 `type` 赋值为**
`'triangle'`

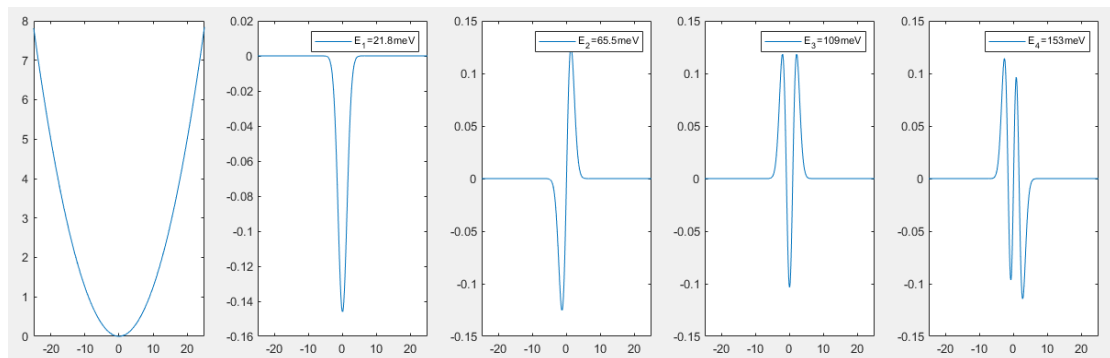


5. 保持三角势阱斜率不变（ dV/dx 不变）的情况下，把势阱宽度扩大一倍到 80nm，比较 40nm 和 80nm 宽三角势阱的定态波函数曲线的异同（在比较时注意保持两个结果的横坐标区间一致），并解释为什么会得到这样的结果。**%%原程序三角势阱宽度为 25nm，题面更改为比较 25nm 和 50nm 的三角势阱波函数与本征能量。注意总计算宽度需要增加**



40nm 和80nm 宽三角势阱定态波函数变化趋势相同，基态及各激发态本征能量取值相等。对于波函数来说，其能量远小于40nm宽三角势阱的势垒高度，80nm宽三角势阱在其较低势垒部分与40nm宽三角势阱完全相同，而其更高部分远大于波函数能量，因而不会影响到波函数的分布。

- 修改势阱结构为抛物线函数，函数过 $(V, x) = (0, 0)$ ， $(5\text{eV}, 20\text{nm})$ ， $(5\text{eV}, -20\text{nm})$ 三点。得到抛物线结构的势能曲线，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。计算基态和第一激发态，第一激发态与第二激发态，第二激发态与第三激发态之间的能量差，并分析结果。



由薛定谔方程可知：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + Ax^2 \cdot \psi = E\psi$$

求解出抛物线形式无限深势阱本征能量表达方式为：

$$E_n = (2n+1)E_1, \quad E_{n+1} - E_n = 2E_1$$

数值模拟得到：

$$E_2 - E_1 = 65.5 - 21.8 = 43.7\text{meV}$$

$$E_3 - E_2 = 109 - 65.5 = 43.5\text{meV}$$

$$E_4 - E_3 = 153 - 109 = 44\text{meV}$$

发现相邻态能量差近似相等，且为基态能量的两倍，与公式所得关系相符