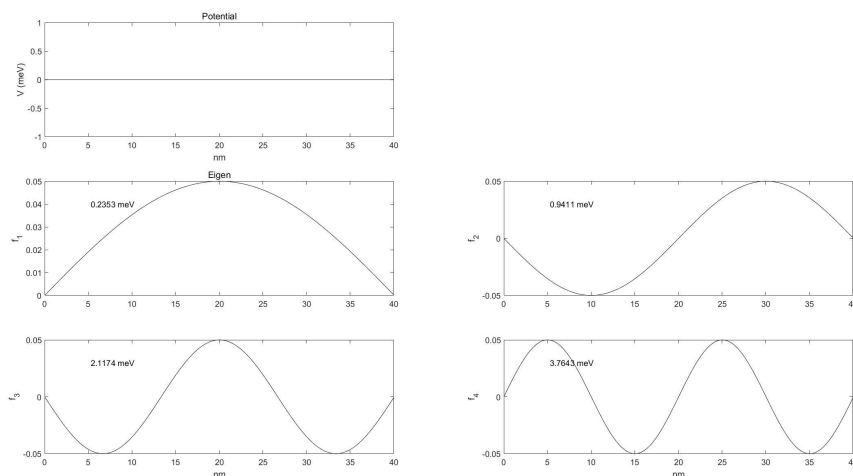


## 课后作业 5 参考答案

撰写数值模拟报告一份。模拟中使用 Matlab 开发的 eigenfunction.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：

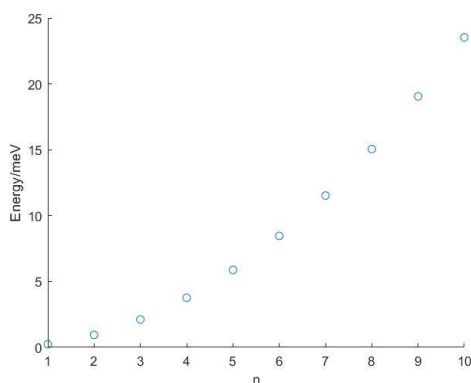
1. 在 matlab 环境下执行 eigenfunction.m 得到 40nm 宽无限深势阱结构的势能曲线，以及基态的定态波函数和第一到第三激发态的定态波函数。

```
V = zeros(1, NN);
% V shaped potential
for n = 1 : NN
    % V(n) = eV2*(.0005)*(abs(NN / 2 - n)); % Triangle potential
    % V(n) = eV2*(.0125)*(abs(NN / 2 - n)/20)^2; % Parabolic potential
    % V(n) = eV2*(.002)*(NN / 2 - n); % With electric field
end
```



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。

```
E=zeros(1, 10); % 把前10个本征能量放在这个数组里
for i = 1 : 1 : 10
    E(i, i) = D(i, i);
end
X=1:1:10;
scatter(X, E*J2eV*1000) % 把本征能量的单位化为meV
xlabel('n');
ylabel('Energy/meV');
```



与  $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$  所得到的关系吻合（抛物线型）

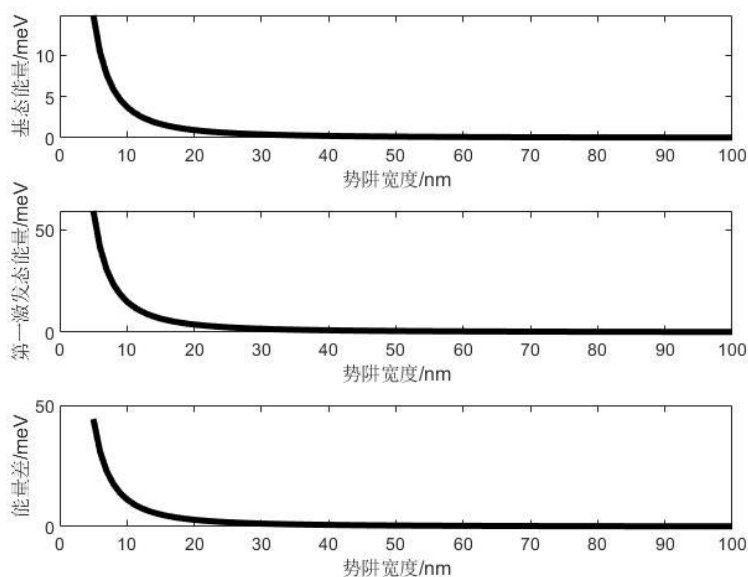
- 修改无限深势阱的宽度，画出势阱宽度从 5nm 调节到 100nm 的情况下，基态能量、第一激发态能量、和他们的能量差与势阱宽度变化的关系。分析为什么会得到这样的结果。

加一个循环，步长为 1nm

```
for length = 5 : 1 : 100
    NN = 20*length;
```

建三个数组，把基态能量、第一激发态能量、和他们的能量差的值保存：

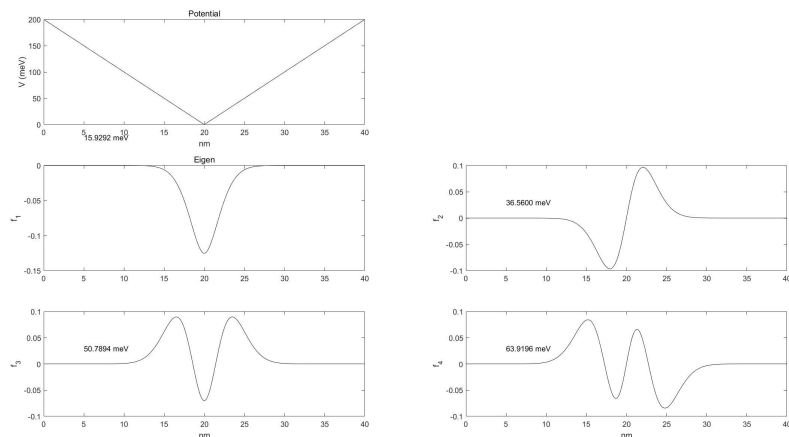
```
E0(1,i) = D(1,1);
E1(1,i) = D(2,2);
deltaE(1,i) = E1(1,i) - E0(1,i);
```



由公式  $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$  知,  $E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ ,  $E_2 = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ ,  $\Delta E_{21} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ , 这三个量  $\sim a^{-2}$ , 所以其随势阱宽度的变化会有上述结果

- 修改 eigenfunction.m 得到三角势阱结构的势能曲线（去掉 eigenfunction.m 程序中第 22 行的注释并执行），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。

```
V = zeros(1,NN);
% V shaped potential
for n = 1 : NN
    V(n) = eV2J*(0.0005)*(abs(NN / 2 - n)); % Triangle potential]
    % V(n) = eV2J*(0.0125)*(abs(NN / 2 - n)/20)^2; % Parabolic potential
    %V(n) = eV2J*(0.002)*(NN / 2 - n); % With electric field
end
```

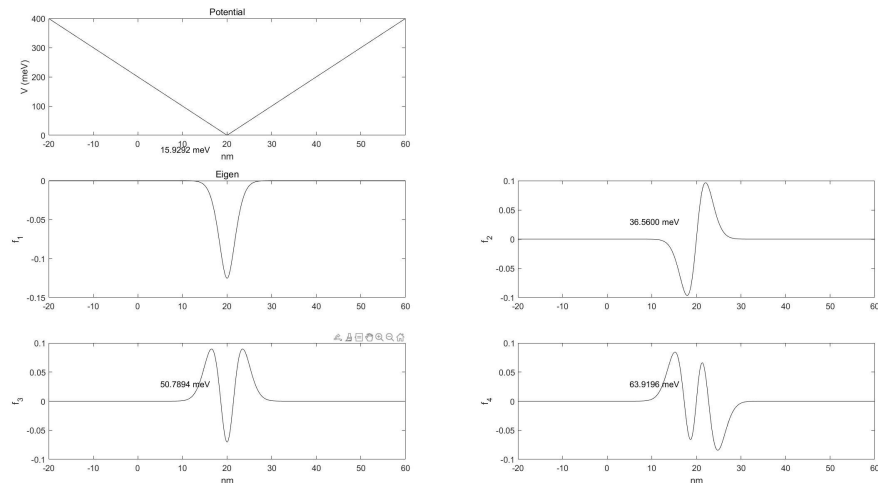


5. 保持三角势阱斜率不变 ( $dV/dx$  不变) 的情况下, 把势阱宽度扩大一倍到 80nm, 比较 40nm 和 80nm 宽三角势阱的定态波函数曲线的异同 (在比较时注意保持两个结果的横坐标区间一致), 并解释为什么会得到这样的结果。

NN = 1600;

其次, 为了使得前后结果横坐标区间一致, 我们把三角势阱的中心保持在 20nm 不变, 这样一来, 新的势阱的区间就变成了 -20nm~60nm。在代码中作如下修改:

XX = (DX-20 : DX : DX \* NN-20);



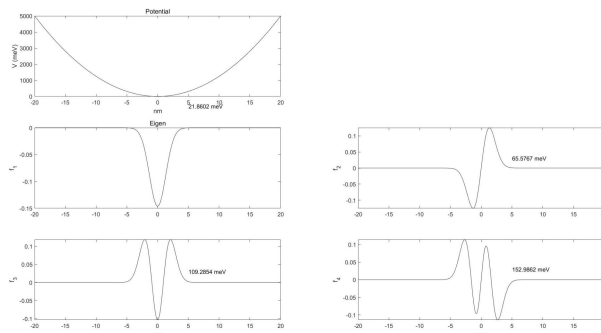
通过比较 4 和 5 可见, 势阱的斜率不变的情况下, 宽度增加一倍后, 本征能量和定态波函数的形状保持不变。这是由于势阱的斜率决定了粒子的能量, 在能量不足以逃出势阱时, 势阱宽度不会改变定态波函数的形状

6. 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。

代码改两个地方:

XX = (DX-20 : DX : DX \* NN-20);

```
for n = 1 : NN
    % V(n) = eV2J*(.0005)*(abs(NN / 2 - n)); % Triangle potential
    V(n) = eV2J*(.0125)*(abs(NN / 2 - n)/20)^2; % Parabolic potential
    %V(n) = eV2J*(.002)*(NN / 2 - n); % With electric field
end
```



基态与第一激发态的能量差： $65.5757\text{meV} - 21.8602\text{meV} = 43.7155\text{meV}$

第一激发态与第二激发态的能量差： $109.2854\text{meV} - 65.5757\text{meV} = 43.7097\text{meV}$

第二激发态与第三激发态的能量差： $152.9862\text{meV} - 109.2854\text{meV} = 43.7008\text{meV}$

可以发现，相邻能级的能量差相等