

การคำนวณการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้าง
บ่อควอนตัม

CALCULATION OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF
TRANSITION ENERGY FOR QUANTUM WELL STRUCTURE

บรรจง จักรกมลจันทร์
BUNJONG JUKGOLJUN

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาฟิสิกส์ประยุกต์

บัณฑิตวิทยาลัย

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

พ.ศ. 2550

สำนักหอสมุดกลาง พระจอมเกล้าลาดกระบัง

การคำนวณการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้าง
บ่อควอนตัม

CALCULATION OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF
TRANSITION ENERGY FOR QUANTUM WELL STRUCTURE



บรรจง จักรกลจันทร์

BUNJONG JUKGOLJUN

เลขหมู่.....
เลขทะเบียน.....74890
วัน,เดือน,ปี 15 ต.ค. 2550

b. 1183108x
i.....

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชาฟิสิกส์ประยุกต์
บัณฑิตวิทยาลัย
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
พ.ศ.2550

**CALCULATION OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF
TRANSITION ENERGY FOR QUANTUM WELL STRUCTURE**

BUNJONG JUKGOLJUN

**A THESIS SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT
OF THE REQUIREMENT FOR THE DEGREE OF
MASTER OF SCIENCE IN APPLIED PHYSICS
SCHOOL OF GRADUATE STUDIES
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG
2007**

COPYRIGHT 2007

SCHOOL OF GRADUATE STUDIES

KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG

บัณฑิตวิทยาลัย
สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง
ใบรับรองวิทยานิพนธ์

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การคำนวณการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับ โครงสร้าง
บ่อควอนตัม

Calculation of Temperature Dependence of Transition Energy for
Quantum Well Structure

ชื่อนักศึกษา นายบรรจง จักรกลจันทร์

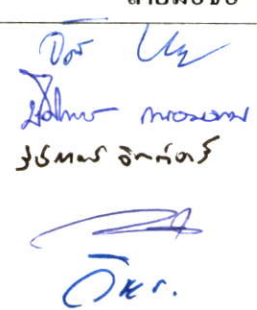
รหัสประจำตัว 45064004

ปริญญา วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

สาขาวิชา ฟิสิกส์ประยุกต์

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ รศ.วิชาญ เดชดิธีระ

อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม รศ.วิญญ เพชรภา

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์		ลายมือชื่อ
รศ.ดร.จิติ	หนูแก้ว	
ดร.ปิติพร	ถนอมงาม	
ผศ.ดร.รัชฎาภย์	จิตต์อารี	
รศ.วิญญ	เพชรภา	
รศ.วิชาญ	เดชดิธีระ	

วัน / เดือน / ปี ที่สอบ 28 พฤษภาคม 2550 เวลา 10.00 น. เป็นต้นไป

สถานที่สอบ ณ อาคารจุฬารามณวลัยลักษณ์ 1 ห้อง 307


บัณฑิตวิทยาลัยรับรองแล้ว
(รศ.ดร.จารุวัตร เจริญสุข)
คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

วันที่.....23.....เดือน.....พฤษภาคม.....พ.ศ.....2550.....

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การคำนวณการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับ โครงสร้างบ่อควอนตัม
นักศึกษา	นายบรรจง จักรกลจันทร์
รหัสประจำตัว	45064004
ปริญญา	วิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
สาขาวิชา	ฟิสิกส์ประยุกต์
พ.ศ.	2550
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์	รศ.วิชาญ เดชดิธีระ
อาจารย์ที่ปรึกษาวิทยานิพนธ์ร่วม	รศ.ดร.วิญญู เพชรภา

บทคัดย่อ

ช่องว่างพลังงานจะเป็นส่วนที่กำหนดคุณสมบัติของวัสดุ ในการศึกษานี้จะ
ทำการศึกษาการเปลี่ยนระดับพลังงาน (transition energy) ของอิเล็กตรอนจากระดับ $hh1$ ในแถบ
วาเลนซ์ไปสู่ระดับ $e1$ ในแถบนำ ของสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัม โดยใช้วิธีการ
เชิงตัวเลข (numerical method) หาค่าพลังงานสถานะพื้นและนำค่าที่ได้นี้ไปเปรียบเทียบกับค่าที่
คำนวณได้จากแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาสเลอร์ (Passler's model) ซึ่งเป็นแบบจำลองที่
คิดว่าช่องว่างพลังงานของกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัมขึ้นกับ
อุณหภูมิ ในการศึกษานี้จะทำการหาค่าพลังงานที่สถานะพื้นอิเล็กตรอนในบ่อศักย์แบบลิกอนันต์
และบ่อศักย์แบบลิกจำกัดก่อนที่จะหาพลังงานระดับ $hh1$ และ $e1$ ในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้าง
แบบบ่อควอนตัม

Thesis Title	Calculation of temperature dependence of transition energy for quantum well structure
Student	Mr.Bunjong Jukgoljun
Student ID	45064004
Degree	Master of Science
Program	Applied Physics
Year	2007
Thesis Advisor	Assoc.Prof.Wichan Techitdheera
Thesis Co-Advisor	Assoc.Prof.Dr.Wisanu Petcharapa

ABSTRACT

In this thesis, the transition energy of electron for quantum well structure semiconductor from hh1 energy level in valence band to e1 energy level in conduction band was studied. The numerical method is employed for determination of the ground state energy in each subband based on Schrödinger's equation and consequently energy transition value. The temperature-dependent numerical values were calculated using the Passler's method with the condition of the temperature dependence. The results are also based on both infinite and finite square wells.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จได้อย่างดี ด้วยคำแนะนำ และคำปรึกษาจาก รศ.วิชาญ เดชดิธีระ ซึ่งเป็นอาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์ ที่ให้โอกาส รศ.ดร.วิษณุ เพชรภา อาจารย์ผู้ควบคุมวิทยานิพนธ์ร่วมที่คอยช่วยเหลือและให้คำแนะนำ รศ.ดร.จิตติ หนูแก้ว ผู้ให้คำชี้แนะในการแก้ปัญหา ดร.ปิติพร ถนอมงาม ผู้แนะนำและช่วยแก้ปัญหาในช่วงที่ย่างยากที่สุด ข้าพเจ้ารู้สึกซาบซึ้งในความอนุเคราะห์และขอขอบคุณอาจารย์ทุกท่านที่กล่าวมาเป็นอย่างสูง

ขอบคุณ ประจักษ์ กาญจนปัญญา ชีวะ นื่องเก่ง และน้อง ๆ ที่คอยให้ความช่วยเหลือด้วยความจริงใจ

ขอบคุณบัณฑิตวิทยาลัย ที่มอบทุนในการจัดพิมพ์วิทยานิพนธ์ และบัณฑิตศึกษา คณะวิทยาศาสตร์ ที่ให้ความช่วยเหลือในเรื่องต่าง ๆ

ขอบคุณเจ้าหน้าที่ของภาควิชาฟิสิกส์ประยุกต์ผู้นำรักทุกท่านที่ให้ความอนุเคราะห์

ท้ายสุดนี้ขอขอบคุณบิดา มารดา ที่ให้ชีวิต ทรัพย์ ผู้สละเวลา น้องควิน และน้องควิก ผู้ที่ทำให้พ่อต้องสู้ ทำให้มีวิทยานิพนธ์ฉบับนี้

คุณค่าและประโยชน์อันพึงได้จากวิทยานิพนธ์ฉบับนี้ ข้าพเจ้าขอบอบแด่ผู้มีพระคุณทุกท่าน

บรรจง จักรกลจันทร์

สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อ.....	I
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ.....	II
กิตติกรรมประกาศ.....	III
สารบัญ.....	IV
สารบัญตาราง.....	VII
สารบัญรูป.....	VIII
บทที่ 1 บทนำ.....	I
1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของงานวิจัย.....	1
1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย.....	2
1.3 ขอบเขตของงานวิจัย.....	2
1.4 ประโยชน์ที่ได้รับจากงานวิจัย.....	2
1.5 แนวทางในการศึกษาวิจัย.....	2
บทที่ 2 ทฤษฎีและหลักการ.....	4
2.1 วัสดุสารกึ่งตัวนำ.....	4
2.1.1 สารกึ่งตัวนำมูลฐาน.....	6
2.1.2 สารกึ่งตัวนำประเภทสารประกอบ.....	6
2.1.3 แถบช่องว่างพลังงาน.....	6
2.1.3.1 สารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบตรง.....	8
2.1.3.2 สารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบอ้อม.....	8
2.2 สารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม.....	10
2.2.1 นิยามของบ่อควอนตัมและแถบพลังงาน.....	11
2.2.2 โครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม.....	12
2.2.2.1 บ่อควอนตัมเดี่ยว.....	12
2.2.2.2 บ่อควอนตัมคู่.....	12
2.2.2.3 บ่อควอนตัมแบบพหุ หรือมัลติควอนตัมเวลล์.....	12
2.2.2.4 บ่อควอนตัมแบบอื่น ๆ	13
2.2.3 แบบของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม.....	13
2.2.3.1 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ I	13

สารบัญ (ต่อ)

หน้า

2.2.3.2 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ II	14
2.2.3.3 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ III	14
2.2.4 พารามิเตอร์ในสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม.....	15
2.3 การคำนวณหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์.....	15
2.3.1 การแก้สมการชโรดิงเงอร์โดยวิธีการทางคณิตศาสตร์.....	16
2.3.1.1 บ่อศักย์สูงอนันต์.....	16
2.3.1.2 บ่อศักย์สูงจำกัด.....	18
2.3.2 ระเบียบวิธีเชิงตัวเลข.....	22
2.3.2.1 ปัญหาเริ่มต้น.....	23
2.3.2.2 ปัญหาขอบเขต.....	23
2.3.2.2.1 วิธีการยิงเป้า.....	25
2.3.2.2.2 วิธีหารากสมการ.....	26
บทที่ 3 ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย.....	28
3.1 การวิเคราะห์และแนวทางในแก้ปัญหา.....	28
3.1.1 ลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์ โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข.....	28
3.1.1.1 การหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์.....	31
3.1.1.2 การหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงจำกัด.....	33
3.1.2 การคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงาน ในโครงสร้างบ่อควอนตัม.....	34
3.1.1.3.1 การหาความสูงของบ่อควอนตัม $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$	36
3.1.1.3.2 การคำนวณหาช่องว่างพลังงานของก้ำแพง.....	36
3.1.1.3.3 ความสัมพันธ์ของ Varshni	36
3.1.1.3.4 ความสัมพันธ์ของ Vina	37
3.1.1.3.5 ความสัมพันธ์ของ Passler	37

สารบัญ (ต่อ)

	หน้า
บทที่ 4 ผลการคำนวณ.....	39
4.1 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงอนันต์.....	39
4.2 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงจำกัด.....	41
4.3 ผลการคำนวณโครงสร้างบ่อควอนตัม.....	43
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัย.....	45
5.1 สรุปผลการทดลอง.....	45
5.2 ข้อเสนอแนะ.....	47
เอกสารอ้างอิง.....	48
ภาคผนวก.....	50
ภาคผนวก ก โปรแกรมสำหรับบ่อศักย์สูงอนันต์ (infinite potential well).....	51
ภาคผนวก ข โปรแกรมสำหรับบ่อศักย์สูงจำกัด (finite potential well).....	54
ภาคผนวก ค โปรแกรมสำหรับการคำนวณหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงาน (transition energy)	59
ประวัติผู้เขียน.....	66

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
2.1 แสดงบางส่วนที่เกี่ยวข้องกับสารกึ่งตัวนำ.....	6
2.2 วัสดุสารกึ่งตัวนำ.....	7
2.3 ตัวอย่างสารกึ่งตัวนำที่นิยมประดิษฐ์เป็นสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม.....	10
2.4 ปรากฏการณ์ต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบบ่อ และการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์อิเล็กทรอนิกส์.....	13
4.1 แสดงระดับพลังงานและค่าฟังก์ชันคลื่นของบ่อศักย์สูงอนันต์ ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้า.....	40
4.2 ค่าศักย์ของบ่อในแถบนำและแถบวาเลนซ์ที่คำนวณได้.....	43
4.3 ค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลข และค่าที่ได้จากการทดลอง.....	44

สารบัญรูป

รูปที่	หน้า
2.1 แสดงช่วงต่าง ๆ ของสภาพนำไฟฟ้าสำหรับวัสดุที่เป็นฉนวนสารกึ่งตัวนำและตัวนำ.....	4
2.2 แสดงแถบพลังงานของ ก)ฉนวน ข)สารกึ่งตัวนำ และ ค)ตัวนำ.....	5
2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนตัมและพลังงานของอิเล็กตรอนในดี.....	8
2.4 ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนตัมและพลังงานของอิเล็กตรอน.....	9
2.5 การดูดกลืนและปลดปล่อยโฟนอน.....	9
2.6 ตัวอย่างการเรียงตัวของอะตอมในบ่อควอนตัม.....	11
2.7 โครงสร้างของบ่อควอนตัม.....	11
2.8 ช่องว่างพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่เกิดจากการนำสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานไม่เท่ากันมาซ้อนกันเป็นจำนวนชั้นที่แตกต่างกัน และมีชื่อเรียกแตกต่างกัน.....	12
2.9 แถบพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม (ก)แบบที่ I (ข)แบบที่ II	14
2.10 แถบพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมและพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้อง.....	15
2.11 แสดงบ่อศักย์อิเล็กตรอนที่อยู่ในช่วง $-L/2 < x < L/2$	16
2.12 แสดงบ่อควอนตัมที่มีกำแพงศักย์จำกัดค่า V_0	18
2.13 แสดงกราฟการหาพลังงานย่อยระดับต่าง ๆ ในบ่อควอนตัมเมื่อกำแพงศักย์มีความสูงจำกัดโดยแกน x คือค่าพลังงาน E และแกน y คือค่าในแต่ละข้างของสมการ (2.28) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของพลังงาน.....	22
2.14 แสดงวิธีการของวิธีการยิงเป้า.....	24
2.15 แสดงวิธีการของวิธีการยิงเป้า (shooting method).....	25
2.16 แสดงวิธีหาค่ารากโดยวิธีเส้นตัด (secant method).....	26
3.1 แสดงลำดับขั้นในการหาระดับพลังงานย่อยภายในบ่อศักย์.....	29
3.2 แสดงลำดับขั้นวิธีการยิงเป้าเพื่อหามุมหาระดับพลังงาน E ที่ทำให้ผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข.....	29
3.3 แสดงลำดับขั้นวิธีการหารากหรือค่า E ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์มีค่าตรงตามเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดให้โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข.....	30
3.4 แสดงโครงสร้างบ่อศักย์อิเล็กตรอน.....	31
3.5 แสดงโครงสร้างบ่อศักย์อิเล็กตรอน.....	33
3.6 แสดงโครงสร้างบ่อควอนตัม.....	34

สารบัญรูป(ต่อ)

รูปที่	หน้า
3.7 แสดงลำดับชั้นในการคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัม.....	35
3.8 แบบจำลองบ่อควอนตัมเดี่ยวของ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As / GaAs$	36
4.1 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่า ต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์ สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้า.....	39
4.2 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่า ต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์ สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้าบริเวณที่ค่าพลังงานที่มีค่าฟังก์ชัน คลื่นเป็นศูนย์.....	40
4.3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางตามแนวแกน x กับค่าฟังก์ชันคลื่น จากจุดกึ่งกลางของบ่อศักย์ถึงขอบของบ่อศักย์ทางด้านขวา.....	41
4.4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานและค่าฟังก์ชันคลื่น ที่ได้จากวิธีการยิงเป้าของบ่อศักย์ลึกจำกัด.....	42
4.5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางตามแนวแกนของบ่อศักย์ลึกจำกัด และค่าฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากค่าพลังงานที่ได้จากวิธีการยิงเป้า (E1 E2) และจาก การประมาณค่าที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบมีค่าประมาณศูนย์ของบ่อศักย์ลึกจำกัด.....	42
4.6 กราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิและค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ได้ จากการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลข และที่ได้จากการทดลอง.....	44
5.1 สเปกตรัมโฟโตลูมิเนสเซนส์ของ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As / GaAs$ (SQW) ที่อุณหภูมิต่างๆ.....	47

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ความเป็นมาและความสำคัญของงานวิจัย

สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม (quantum well devices) เป็นสิ่งประดิษฐ์ที่มีความสำคัญมากชนิดหนึ่งในสิ่งประดิษฐ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์ ซึ่งสิ่งประดิษฐ์นี้ถูกเสนอโดย Esaki และ Tsu ในปี ค.ศ. 1969 และได้รับความสนใจจากนักวิทยาศาสตร์เป็นอย่างมากเนื่องจากการเกิดปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์หลายอย่างในสิ่งประดิษฐ์นี้ทั้งทางไฟฟ้าและทางแสงที่ไม่มีในธรรมชาติ เช่นการเกิดซับแบนด์ (sub-band) การเกิดระดับพลังงานแบบไม่ต่อเนื่อง (quantized energy levels) ซึ่งเป็นระดับพลังงานควอนตัมพิเศษที่เกิดขึ้นในบ่อพลังงาน การเกิดการดูดกลืนแสงและการเปล่งแสงอย่างแรงในบ่อควอนตัม

ในการศึกษาสมบัติทางแสงของบ่อควอนตัมวิธีที่นิยมคือเทคนิควิธีโฟโตลูมิเนสเซนส์สเปกโตรสโกปี (photoluminescence spectroscopy) ซึ่งการเปล่งแสงของบ่อควอนตัมนี้เกิดเนื่องจากการเปลี่ยนแปลงพลังงานของอิเล็กตรอนภายในบ่อควอนตัมหลังจากที่โดนกระตุ้นด้วยโฟตอนจากภายนอกทำให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์มีพลังงานมากขึ้นและขึ้นไปอยู่ในแถบนำ เมื่ออิเล็กตรอนกลับสู่แถบวาเลนซ์จึงมีการคายพลังงานในรูปของโฟตอนหรือแสงออกมาทำให้สามารถตรวจวัดได้ว่าโฟตอนที่ปลดปล่อยออกมามีค่าพลังงานเป็นเท่าไร

แต่เนื่องจากว่าแถบช่องว่างพลังงาน (energy gap) ที่อยู่ระหว่างแถบวาเลนซ์และแถบนำมีค่าขึ้นกับอุณหภูมิคือถ้าอุณหภูมิต่ำแถบนี้จะมีค่าเพิ่มขึ้น หากต้องการกระตุ้นให้อิเล็กตรอนขึ้นไปอยู่ในแถบนำจะต้องให้พลังงานเพิ่มขึ้นด้วย แต่เนื่องจากการศึกษาวิจัยโดยทั่วไปการหาค่าแถบช่องว่างพลังงานของกึ่งตัวนำในบ่อควอนตัมจะคำนวณจากอัตราส่วนผสมของโลหะแต่เพียงอย่างเดียวโดยไม่ขึ้นกับอุณหภูมิ ในขณะที่ส่วนที่เป็นบ่อจะคำนวณแถบช่องว่างพลังงานขึ้นกับอุณหภูมิ ดังนั้นในการศึกษาวิจัยนี้เป็นการศึกษาว่าถ้าแถบช่องว่างพลังงานของกึ่งตัวนำขึ้นกับอุณหภูมิจะมีผลอย่างไรกับการส่งผ่านพลังงานของ $hh1$ ในแถบวาเลนซ์กับ $e1$ ในแถบนำ ซึ่งมีแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ที่นิยมใช้ในการคำนวณคือแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของวาซนี, วินา และพาสเลอร์ (Varshni, Vina and Passler's method) ในการศึกษาจะใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาสเลอร์ในการเขียน โปรแกรมเพื่อคำนวณหาค่าช่องว่างพลังงาน เพื่อนำไปหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม

1.2 วัตถุประสงค์ของงานวิจัย

1. หาค่าพลังงาน (E) ในสมการชโรดิงเงอร์ที่ทำให้ผลเฉลยหรือค่าฟังก์ชันคลื่นของสมการเป็นจริงตามเงื่อนไขขอบเขต ที่ระดับพลังงานสถานะพื้น (ground state) โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลข (numerical methods)
2. คำนวณค่าการเปลี่ยนระดับพลังงาน (transition energy) ที่ขึ้นกับอุณหภูมิทั้งส่วนที่เป็นบ่อและส่วนที่เป็นกำแพงสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม โดยใช้วิธีการหาค่าระดับพลังงานที่สถานะพื้น ตามวัตถุประสงค์ข้อ 1

1.3 ขอบเขตของงานวิจัย

ในงานวิจัยนี้เป็นการศึกษาถึงการหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขในการแก้ปัญหาโดยทำการศึกษาจากโครงสร้างบ่อศักย์ที่มีความลึกอนันต์ และบ่อศักย์ที่มีความลึกจำกัด ซึ่งทราบเงื่อนไขขอบเขต จะได้ปัญหาเงื่อนไขขอบเขตซึ่งไม่สามารถแก้ปัญหาคำถามได้โดยตรงต้องทำการแปลงเป็นปัญหาเงื่อนไขค่าเริ่มต้นแล้วทำการหาค่าพลังงานที่สถานะพื้น ซึ่งในโครงสร้างบ่อควอนตัมจะต้องทำการหาทั้งในแถบวาเลนซ์และแถบนำเพื่อใช้ในการหาค่าการส่งผ่านพลังงาน ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้กับค่าการส่งผ่านพลังงานที่ได้โดยการแก้ปัญหาคำถามด้วยวิธีการทางคณิตศาสตร์ และคิดว่าอุณหภูมิมีผลต่อช่องว่างพลังงานตามแบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาาสเลอร์

1.4 ประโยชน์ที่คาดว่าจะได้รับ

1. เข้าใจถึงทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับเรื่องบ่อควอนตัม
2. เข้าใจการแก้ปัญหาคำถามขอบเขตโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลข
3. สามารถทำนายค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างบ่อควอนตัมเมื่อมีการเปลี่ยนพารามิเตอร์ที่เกี่ยวข้อง
4. ทราบค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานในกรณี que คิดว่าอุณหภูมิมีผลต่อความกว้างของช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นกำแพงโดยใช้ร่วมกับแบบจำลองทางคณิตศาสตร์

1.5 แนวทางในการศึกษาวิจัย

แผนการดำเนินการแบ่งเป็นขั้นตอนดังนี้

ขั้นตอนที่ 1 ศึกษาทฤษฎีที่เกี่ยวข้องกับบ่อควอนตัม

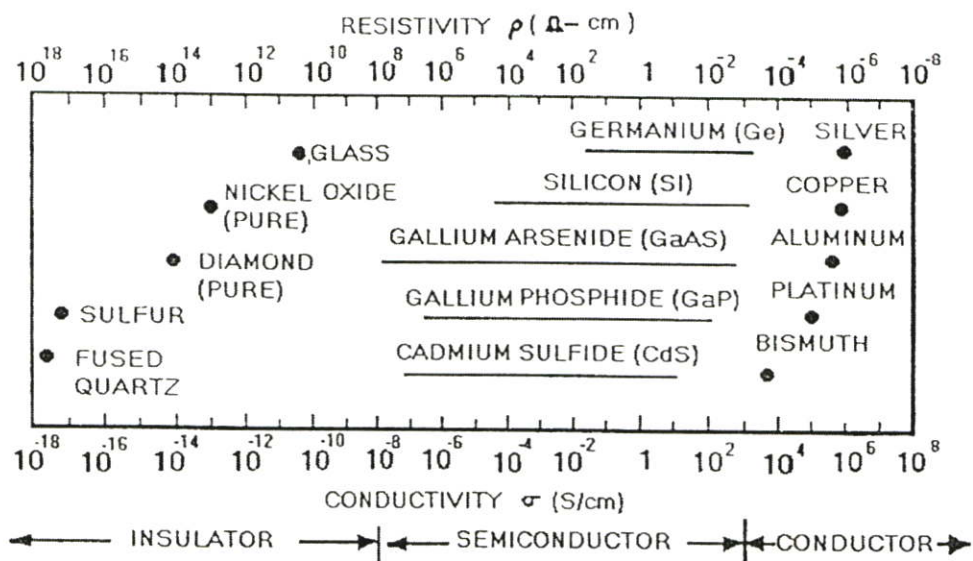
- ขั้นตอนที่ 2 ศึกษาถึงการใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขแก้ปัญหาค่าขอบเขต ของบ่อศักย์ลิกอนันต์ และบ่อศักย์ลิกจำกัด โดยพิจารณาถึงค่าขอบเขตและค่าเริ่มต้นที่ต้องใช้ในการหาผลเฉลย เปรียบเทียบกับค่าที่ทราบคำตอบ
- ขั้นตอนที่ 3 ศึกษาถึงค่าขอบเขตและค่าเริ่มต้นของปัญหาโครงสร้างบ่อควอนตัม
- ขั้นตอนที่ 4 ออกแบบและเขียนโปรแกรมที่ใช้ในการแก้ปัญหาค่า
- ขั้นตอนที่ 5 ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้จากการแก้ปัญหาค่าโดยระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขกับค่าที่ได้จากการแก้ปัญหาค่าโดยใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์
- ขั้นตอนที่ 6 ทำการเปรียบเทียบค่าที่ได้กับค่าที่ได้โดยคิดว่าอนุกรมนี้มีผลต่อความกว้างของช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นกำแพงโดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ช่วยในการคำนวณ
- ขั้นตอนที่ 7 สรุปและเขียนวิทยานิพนธ์

บทที่ 2

ทฤษฎีและหลักการ

2.1 วัสดุสารกึ่งตัวนำ

การแบ่งประเภทของวัสดุที่เป็นของแข็งโดยใช้สภาพนำไฟฟ้า σ (หรือเทียบได้กับสภาพต้านทานไฟฟ้า $\rho \equiv 1/\sigma$) เป็นตัวบ่งชี้สามารถแบ่งได้เป็น 3 ประเภท คือ ฉนวน สารกึ่งตัวนำ และตัวนำ โดยที่วัสดุที่เป็นฉนวนจะมีสภาพนำไฟฟ้าอยู่ที่ช่วงประมาณ $10^{-18} - 10^{-8}$ S/cm วัสดุที่เป็นตัวนำจะมีสภาพนำไฟฟ้าอยู่ที่ช่วงประมาณมากกว่า 10^3 S/cm ขึ้นไป ส่วนวัสดุที่เป็นสารกึ่งตัวนำจะมีสภาพนำไฟฟ้าอยู่ในช่วงระหว่างกลางระหว่างวัสดุที่เป็นฉนวนและวัสดุตัวนำ คือ มีค่าอยู่ที่ช่วงประมาณ $10^{-8} - 10^3$ S/cm แสดงดังรูปที่ 2.1

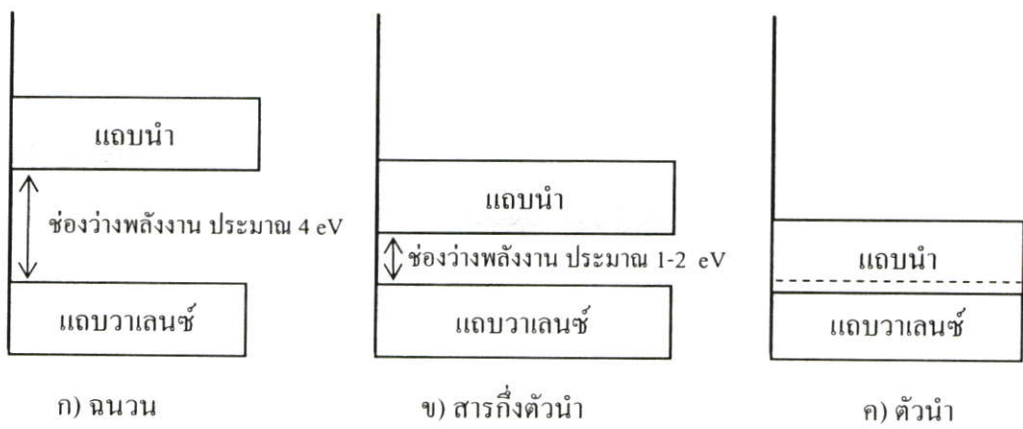


รูปที่ 2.1 แสดงช่วงต่าง ๆ ของสภาพนำไฟฟ้าสำหรับวัสดุที่เป็นฉนวน สารกึ่งตัวนำ และตัวนำ

(Sze, 2002)

การที่วัสดุที่เป็นของแข็งมีสภาพนำไฟฟ้าที่แตกต่างกันเนื่องจากภายในของแข็งประกอบด้วยอะตอมจำนวนมากและอะตอมเหล่านี้จะอยู่ชิดติดกัน ทำให้อะตอมเหล่านี้มีอิทธิพลกับอะตอมข้างเคียงทำให้พลังงานของอิเล็กตรอนมีลักษณะเป็นแถบ ๆ เรียกว่าแถบพลังงาน (energy band) ซึ่งถ้าเป็นแถบพลังงานที่อนุญาตให้อิเล็กตรอนเข้าไปอยู่ได้และเป็นวงนอกสุดของอะตอมเรียกว่าแถบวาเลนซ์ (valence band) และหากกระตุ้นอิเล็กตรอนที่อยู่วงนอกสุดของอะตอมคืออิเล็กตรอนตัวที่อยู่ในแถบวาเลนซ์ให้มีพลังงานสูงขึ้นทำให้อิเล็กตรอนนั้นเป็นอิเล็กตรอนอิสระ ซึ่งจะเป็นตัวที่แสดงคุณสมบัติการนำไฟฟ้าได้ของวัสดุนั้นส่วนที่อิเล็กตรอนอิสระอยู่เรียกว่า แถบนำ

(conduction band) ส่วนแถบที่ไม่อนุญาตให้มีอิเล็กตรอนเข้าไปอยู่เรียกว่าแถบต้องห้ามหรือแถบช่องว่างพลังงาน (forbidden band หรือ energy band gap) ซึ่งจะอยู่ระหว่างแถบวาเลนซ์กับแถบนำ และแถบนี้จะแสดงคุณสมบัติเฉพาะตัวของสารหรือธาตุแต่ละตัว ดังนั้นถ้าต้องการแบ่งประเภทของวัสดุโดยใช้แถบพลังงานนี้สามารถทำได้คือ หากเป็นฉนวนจะมีแถบช่องว่างพลังงานค่อนข้างกว้างคือประมาณตั้งแต่ 4 eV ขึ้นไป ส่วนวัสดุที่เป็นสารกึ่งตัวนำจะมีค่ามากกว่า 0 eV ส่วนวัสดุที่เป็นตัวนำนั้นแถบนำและแถบวาเลนซ์จะทับซ้อนกัน แสดงดังรูป 2.2



รูปที่ 2.2 แสดงแถบพลังงานของ ก) ฉนวน ข) สารกึ่งตัวนำ และ ค) ตัวนำ

นอกจากนี้ ส่วนที่น่าสนใจคือคุณสมบัติของสารกึ่งตัวนำจะมีการเปลี่ยนแปลงไปเมื่อค่าสภาพนำไฟฟ้าหรือช่องว่างพลังงานเปลี่ยนแปลงไปเนื่องจากอุณหภูมิ แสง สนามแม่เหล็ก และปริมาณของอะตอมของสารเจือปนที่เติมลงในสารกึ่งตัวนำเพียงเล็กน้อย จากการที่คุณสมบัติของสารกึ่งตัวนำมีเปลี่ยนแปลงได้ง่ายดังกล่าวจึงทำให้สารกึ่งตัวนำเป็นวัสดุที่สำคัญที่สุดประเภทหนึ่งที่สามารถนำมาประยุกต์ใช้งานด้านอุตสาหกรรมสิ่งประดิษฐ์อุปกรณ์อิเล็กทรอนิกส์ได้อย่างกว้างขวาง

ได้มีการศึกษาวิจัยเกี่ยวกับวัสดุสารกึ่งตัวนำอย่างมากมายพอที่จะแบ่งสารกึ่งตัวนำได้เป็นประเภทต่าง ๆ คือ

2.1.1 สารกึ่งตัวนำมูลฐาน (Element semiconductors)

การศึกษาเกี่ยวกับวัสดุสารกึ่งตัวนำได้เริ่มต้นศึกษาในช่วงต้นศตวรรษที่ 19 หลังจากนั้นได้มีการทำวิจัยและพัฒนาเกี่ยวกับวัสดุสารกึ่งตัวนำ ตารางที่ 2.1 แสดงให้เห็นวัสดุที่เป็นสารกึ่งตัวนำที่อยู่ในตารางธาตุ สารกึ่งตัวนำมูลฐานจะประกอบด้วยอะตอมของธาตุเพียงชนิดเดียว เช่น เจมันเนียม (Ge) และซิลิคอน (Si) ซึ่งเป็นธาตุในหมู่ IV

ตาราง 2.1 แสดงบางส่วนที่เกี่ยวข้องกับสารกึ่งตัวนำ

Period	Column II	III	IV	V	VI
2		B	C	N	O
		Boron	Carbon	Nitrogen	Oxygen
3	Mg	Al	Si	P	S
	Magnesium	Aluminum	Silicon	Phosphorus	Sulfur
4	Zn	Ga	Ge	As	Se
	Zinc	Gallium	Germanium	Arsenic	Selenium
5	Cd	In	Sn	Sb	Te
	Cadmium	Indium	Tin	Antimony	Tellurium
6	Hg		Pb		
	Mercury		Lead		

2.1.2 สารกึ่งตัวนำประเภทสารประกอบ (Compound semiconductor)

สารประกอบกึ่งตัวนำคือการนำธาตุที่อยู่ในกลุ่ม III-V หรือ II-VI มาประกอบกันเป็นสารประกอบตัวใหม่ซึ่งมีคุณสมบัติเป็นสารกึ่งตัวนำในส่วนนี้มีการแบ่งกันหลายแบบ ดังแสดงในตารางที่ 2.2 เช่นถ้าประกอบด้วยธาตุเพียง 2 ชนิดจะเรียกว่าสารประกอบกึ่งตัวนำแบบ binary หรือสารประกอบกึ่งตัวนำซึ่งส่วนใหญ่เกิดจากการนำธาตุในหมู่ III และหมู่ V ในตารางธาตุมาประกอบกัน เช่น GaAs หรืออาจเกิดจากการนำธาตุในหมู่ IV มาประกอบกัน เช่น SiC แต่ถ้าหากประกอบด้วยธาตุที่มากกว่า 2 ชนิดจะเรียกว่า สารกึ่งตัวนำประเภทอัลลอย (Alloy semiconductor) เช่น ternary คือสารประกอบกึ่งตัวนำที่ประกอบด้วยธาตุ 3 ชนิด เช่น AlGaAs และถ้าสารประกอบกึ่งตัวนำนี้ประกอบด้วยธาตุ 4 ชนิดจะเรียกว่า quaternary เช่น GaInAsP เป็นต้น

2.1.3 แถบช่องว่างพลังงาน (energy gap: E_g)

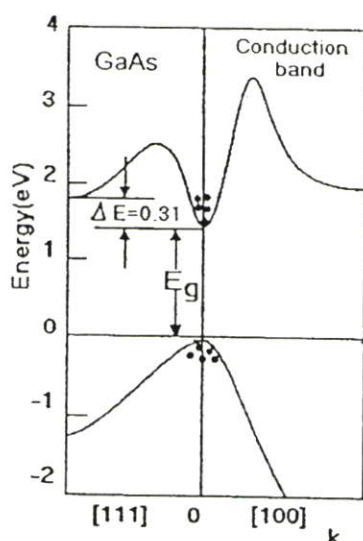
ในการแบ่งประเภทของสารกึ่งตัวนำอาจทำได้โดยการแบ่งตามลักษณะของช่องว่างพลังงานของสารกึ่งตัวนำซึ่งจะแบ่งได้ 2 แบบคือ

ตาราง 2.2 วัสดุสารกึ่งตัวนำ

General	Semiconductor	
Classification	Symbol	Name
Element	Si	Silicon
	Ge	Germanium
Binary compound		
IV-IV.....	SiC	Silicon carbide
III-V.....	AlP	Aluminum phosphide
	AlAs	Aluminum arsenide
	AlSb	Aluminum antimonide
	GaN	Gallium nitride
	GaP	Gallium phosphide
	GaAs	Gallium Areside
	GaSb	Gallium antimonide
	InP	Indium phosphide
	InAs	Indium arsenide
	InSb	Indium antimonide
II-VI.....	ZnO	Zine oxide
	ZnS	Zinc sulfide
	ZnSe	Zinc selenide
	ZnTe	Zinc telluride
	CdS	Cadmium Sulfide
	CdSe	Cadmiumselenide
	CdTe	Cadmium telluride
	HgS	Mercury sulfide
IV-VI.....	PbS	Lead sulfide
	PbSe	Lead selenide
	PbTe	Lead telluride
Ternary compound	$Al_xGa_{1-x}As$	Aluminum gallium arsenide
	$Al_xIn_{1-x}As$	Aluminum indium arsenide
	$GaAs_{1-x}P_x$	Gallium arsenic phosphide
	$Ga_xIn_{1-x}As$	Gallium indium arsenide
	$Ga_xIn_{1-x}P$	Gallium indium phosphide
Quaternary compound	$Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$	Aluminum gallium arsenic antimonide
	$Ga_xIn_{1-x}As_{1-y}P_y$	Gallium indium arsenic phosphide

2.1.3.1 สารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบตรง (direct band gap)

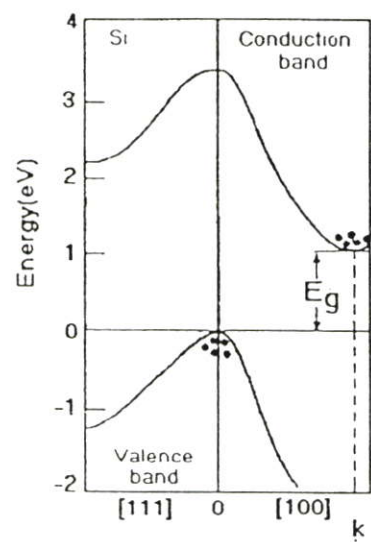
สารกึ่งตัวนำประเภทนี้ ถ้าพิจารณาจากแผนภาพความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานกับโมเมนตัม (E-k diagram) ตามรูปที่ 2.3 จะเห็นว่าระดับพลังงานต่ำสุดของแถบนำ (conduction band) จะมีค่าโมเมนตัมตรงกับระดับพลังงานสูงสุดของแถบวาเลนซ์ (valence band) ระยะห่างระหว่างระดับพลังงานทั้งสองจะมีค่าเท่ากับช่องว่างแถบพลังงาน ดังนั้นถ้าต้องการให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์เคลื่อนที่ไปยังแถบนำต้องใช้พลังงานมากกว่าหรืออย่างน้อยต้องเท่ากับค่าช่องว่างพลังงานนี้ ตัวอย่างของสารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบนี้คือ แกลเลียมอาร์เซไนด์ (GaAs)



รูปที่ 2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนตัมและพลังงานของ แกลเลียมอาร์เซไนด์

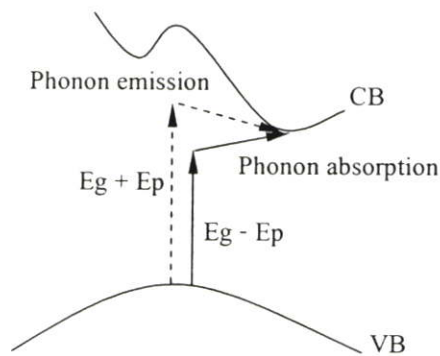
2.1.3.2 สารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบอ้อม (indirect band gap)

สารกึ่งตัวนำประเภทนี้ ถ้าพิจารณาจากแผนภาพความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานกับโมเมนตัม ตามรูปที่ 2.4 จะเห็นว่าระดับพลังงานต่ำสุดของแถบนำ จะมีค่าตำแหน่งของโมเมนตัมที่ไม่ตรงกับของระดับพลังงานสูงสุดของแถบวาเลนซ์ ระยะห่างระหว่างระดับพลังงานทั้งสองจะมีค่าเท่ากับช่องว่างแถบพลังงาน แต่ถ้าต้องการให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์เคลื่อนที่ไปยังแถบนำนั้นมีโอกาสน้อย เนื่องจากต้องเปลี่ยนขนาดของโมเมนตัมมาก ดังนั้นในการทำให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ขึ้นไปยังแถบนำจะต้องใช้พลังงานโฟตอนที่มีพลังงานมากกว่าพลังงานแถบช่องว่างมาก ๆ



รูปที่ 2.4 ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนตัมและพลังงานของ ซิลิกอน

แต่อย่างไรก็ตาม การเปลี่ยนพลังงานโดยโฟตอนที่มีพลังงานต่ำกว่านั้นก็สามารถเกิดขึ้นได้โดยกระบวนการ 2 ขั้นตอน คือ กระบวนการการดูดกลืนโฟนอน (phonon absorption) ต่อเนื่องด้วยการปลดปล่อยโฟนอน (phonon emission) แสดงดังรูป 2.5



รูปที่ 2.5 การดูดกลืนและปลดปล่อยโฟนอน

ดังนั้นจะได้ว่า

$$h\nu = E_c - E_v$$

เมื่อ $h\nu$ = พลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ

$$E_g = \text{พลังงานแถบช่องว่าง}$$

$$E_p = \text{พลังงานโฟนอน}$$

2.2 สารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม (quantum well semiconductors)

ในการศึกษาสิ่งประดิษฐ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์พบว่ายังมีสิ่งประดิษฐ์ที่มีความสำคัญมากอีกชนิดหนึ่งได้แก่ สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม หรือบางครั้งเรียกว่าสิ่งประดิษฐ์ซูเปอร์แลตทิซ (superlattice device) พบว่ามีปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์ ทั้งทางไฟฟ้าและทางแสง เช่น มีการเกิดแถบพลังงานย่อย (subbands) และเกิดระดับพลังงานควอนไทซ์ (quantize energy levels) ขึ้นภายในบ่อพลังงาน อีกทั้งมีการกักพาหะแบบ 1 และ 2 มิติ ซึ่งกระบวนการเหล่านี้มีผลต่อการดูดกลืน และการเปล่งแสงอย่างมาก สมบัติต่าง ๆ เหล่านี้ถูกนำไปประยุกต์ให้เป็นประโยชน์ในสิ่งประดิษฐ์ที่ใช้งานทั้งทางออปโตอิเล็กทรอนิกส์และด้านไฟฟ้ามากมาย เช่น สามารถทำให้เลเซอร์ไดโอดเกิดการปล่อยแสงที่กระแสไฟต่ำและได้แสงเลเซอร์ที่มีกำลังเอาต์พุตสูงมาก สามารถทำสิ่งประดิษฐ์ตรวจจับแสงได้ เช่น อะวาลานซ์โฟโตไดโอดมีความไวในการรับแสง และมีค่าการตรวจวัด (detectivity) ที่สูง เป็นต้น ตาราง 2.3 แสดงตัวอย่างชื่อของสารกึ่งตัวนำที่นิยมประดิษฐ์เป็นสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม

ตาราง 2.3 ตัวอย่างสารกึ่งตัวนำที่นิยมประดิษฐ์เป็นสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม

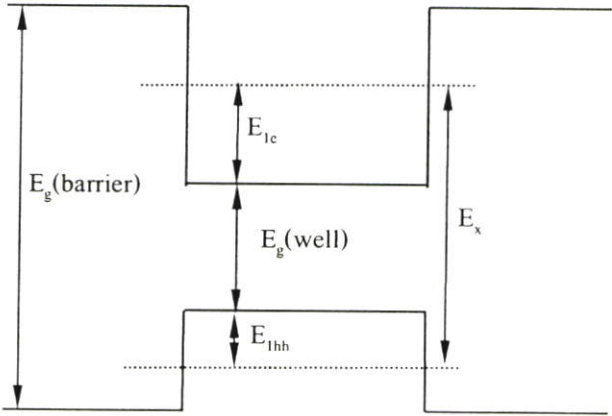
ตระกูล	สารกึ่งตัวนำ	
III-V	GaAs / GaAlAs	GaAs / AlAs
	InP / InGaAsP	GaAs / InGaAs*
	GaAs / InAs*	GaP / GaAsP*
	GaAs / GaAsP*	InAs / GaSb*
IV	Si / SiGe*	
II-VI	CdTe / HgTe*	ZnSe / ZnTe*
		ZnS / ZnSe*
Amorphous	a-SiH/a-SiC:H	a-Si:H/a-SiN:H
	a-SiC:H/a-SiC:H	a-Si:H/a-SiGe:H
		a-SiC:H/a-SiN:H
หมายเหตุ * เป็นสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัมแบบสเตรน (strained quantum well)		

2.2.1 นิยามของบ่อควอนตัมและแถบพลังงาน (the definition of quantum well and energy band)

ในการสร้างสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัมจะต้องคำนึงถึงองค์ประกอบด้านโครงสร้าง และมีจุดบกพร่องภายในให้น้อยที่สุด โดยคำนึงถึงสมบัติด้านการนำไฟฟ้าและจุดประสงค์ของการนำไปใช้ เมื่อนำสารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานสูงต่ำไม่เท่ากันมาปลูกผลึกเป็นชั้นบาง ๆ หลายชั้นด้วยความหนาที่กำหนดให้ โครงสร้างที่เกิดขึ้นจะเรียกว่าบ่อควอนตัม สิ่งที่แตกต่างกันอย่างชัดเจนสำหรับสารกึ่งตัวนำแต่ละชนิดคือ ค่าอิเล็กตรอนแอฟฟินิตี (electron affinity) และช่องว่างพลังงานทำให้มีกำแพงและบ่อเกิดขึ้น โดยจะเรียกสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานกว้างว่าชั้นของกำแพง (barrier) และเรียกสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานแค่ว่าชั้นบ่อ (well) โดยที่สารที่มีช่องว่างพลังงานน้อยที่สุดอยู่บริเวณส่วนกลางถูกประกบด้วยชั้นผลึกของสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานมากกว่า จะทำให้เกิดเป็นกำแพงขึ้น โดยอิเล็กตรอนจะถูกกักในบริเวณบ่อซึ่งเป็นชั้นของสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานน้อยกว่า



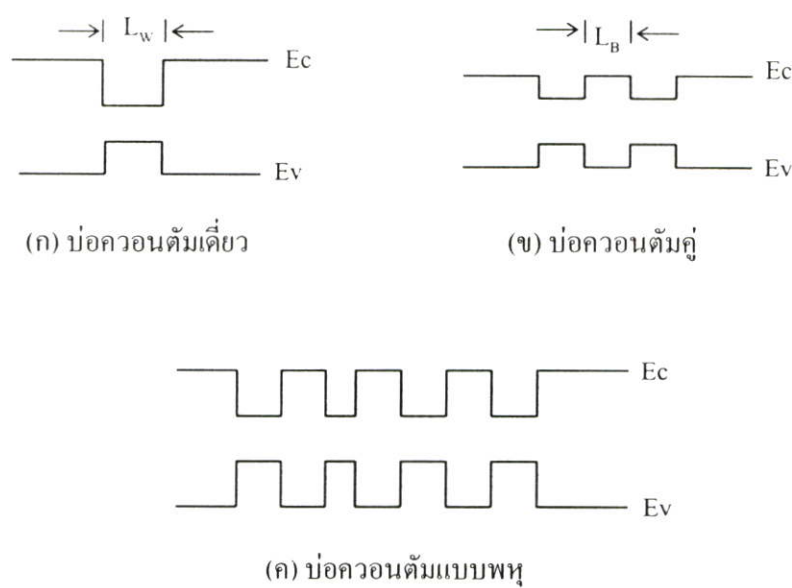
รูปที่ 2.6 ตัวอย่างการเรียงตัวของอะตอมในบ่อควอนตัม



รูปที่ 2.7 โครงสร้างของบ่อควอนตัม

2.2.2 โครงสร้างของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม

เนื่องจากสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมอาจประกอบด้วยชั้นก้ำแพงและชั้นบ่อที่มีจำนวนชั้นมากน้อยตามวัตถุประสงค์ ดังนั้นจึงมีชื่อเรียกสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมเหล่านี้ตามจำนวนชั้นคือ



รูปที่ 2.8 ช่องว่างพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่เกิดจากการนำสารกึ่งตัวนำที่มีช่องว่างพลังงานไม่เท่ากันมาซ้อนกันเป็นจำนวนชั้นที่แตกต่างกัน และมีชื่อเรียกแตกต่างกัน

2.2.2.1 บ่อควอนตัมเดี่ยว (single quantum well)

เป็นสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่ประกอบด้วยชั้นบ่อเพียงชั้นเดียวและถูกประกบด้วยชั้นก้ำแพงทั้ง 2 ด้าน แสดงดังรูป 2.8(ก)

2.2.2.2 บ่อควอนตัมคู่ (double quantum well)

ประกอบด้วยชั้นบ่อ 2 ชั้นและแต่ละชั้นจะถูกประกบด้วยชั้นที่เป็นก้ำแพงแสดงดังรูป 2.8(ข)

2.2.2.3 บ่อควอนตัมแบบพหุ หรือมัลติควอนตัมเวลล์ (multi-quantum well)

ประกอบด้วยชั้นก้ำแพงและชั้นบ่อจำนวนมาก แสดงดังรูป 2.8(ค)

2.2.2.4 บ่อควอนตัมแบบอื่น ๆ

นอกจากบ่อควอนตัมที่กล่าวถึงทั้ง 3 แบบแล้วยังมีบ่อควอนตัมรูปแบบอื่น ๆ อีก นอกจากที่แสดงในรูป 2.8 ซึ่งขึ้นอยู่กับวิธีการออกแบบและการประยุกต์ใช้ ตารางที่ 2.4 แสดงตัวอย่างปรากฏการณ์ต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างเป็นแบบบ่อควอนตัมและการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์อิเล็กทรอนิกส์ต่าง ๆ

ตาราง 2.4 ปรากฏการณ์ต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบบ่อและการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์อิเล็กทรอนิกส์

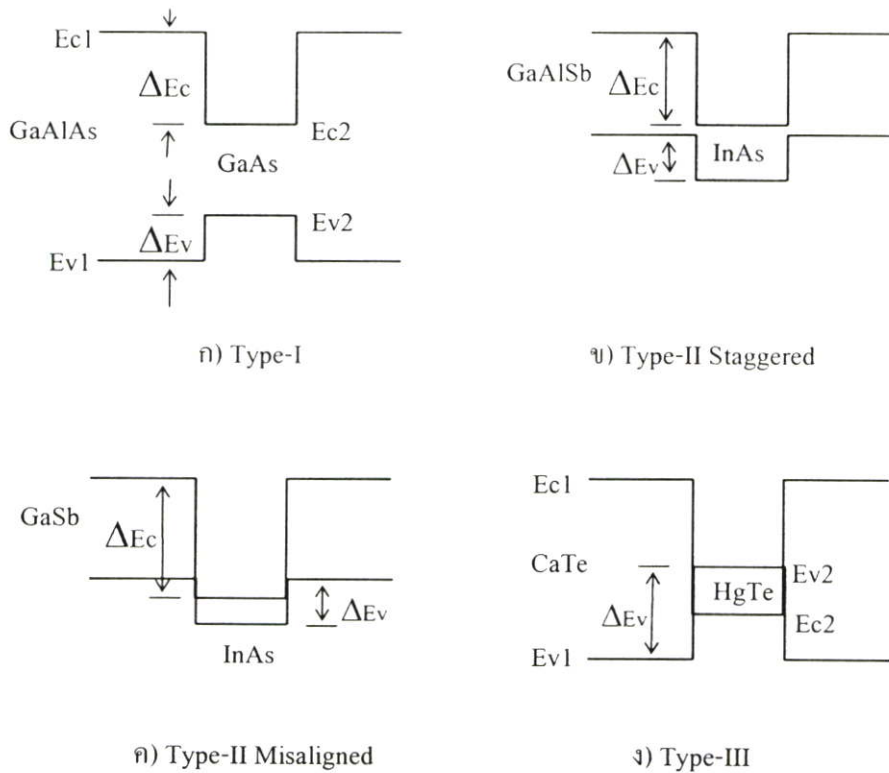
ประเภท	ตัวอย่างการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์
คุณสมบัติทางไฟฟ้า (Quantized states, sub-bands, tunnling, quantum sized effect)	SDHT (Selectively Doped Heterojunction Transistor) TEGFET (Two-dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) HEMT (High Electron Mobility Transistor) MODFET (Modulation Doped Field Effect Transistor) RHET (Resonant Hot Electron Transistor) NIPI
คุณสมบัติทางแสง+ไฟฟ้า (Carrier confinement, optical confinement, quantized states, sub-band, tunneling, quantum sized effect)	Quantum Well Laser Diode Quantum Well Avalanche Photodiode Quantum Well Solar Cell Quantum Well Solid State Photomutiplier
คุณสมบัติทางแม่เหล็ก (Shubnikov-de Haas Effect)	Quantum Hall Device

2.2.3 แบบของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม (type of quantum well devices)

เนื่องจากตำแหน่งของแถบนำของชั้นก้ำแพงและชั้นบ่ออาจจะเหลื่อมกันบ้าง ดังนั้นจึงสามารถแบ่งสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมตามรูปร่างของแถบพลังงานได้เป็น 3 แบบคือ

2.2.3.1 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ I (type I of quantum well devices)

ได้แก่สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่มีค่าช่องพลังงานของส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_w) น้อยกว่าและอยู่ภายในช่องว่างพลังงานของก้ำแพง (ΔE_b) แสดงดังรูปที่ 2.9 (ก) ซึ่งเป็นกรณีที่มีการศึกษาวิจัยมากที่สุดรวมทั้งการศึกษาชั้นนี้ ตัวอย่างสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบนี้ เช่น สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม AlGaAs/GaAs



รูปที่ 2.9 แถบพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม (ก) แบบที่ I (ข) (ค) แบบที่ II (ง) แบบที่ III

2.2.3.2 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ II (type II of quantum well devices)

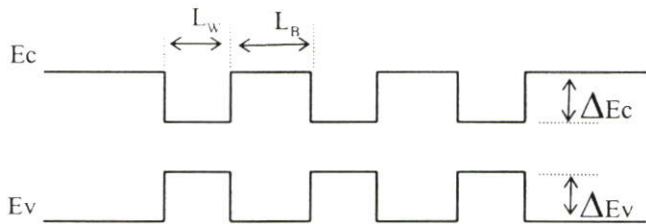
ได้แก่สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่มีผลต่างของแถบนำของส่วนที่เป็นก้ำแพงและส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_c) มากกว่าผลต่างของแถบวาเลนซ์ของส่วนที่เป็นก้ำแพงและส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_v) และค่าแถบวาเลนซ์ส่วนที่เป็นบ่ออยู่ต่ำกว่าค่าแถบวาเลนซ์ของส่วนที่เป็นก้ำแพง แสดงดังรูปที่ 2.9 (ข,ค) เช่น สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม InAs/GaSb และ GaSb/InAs ตามลำดับ

2.2.3.3 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ III (type III of quantum well devices)

ได้แก่สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่แถบวาเลนซ์และแถบนำของส่วนที่เป็นบ่อทับซ้อนกัน (เช่นเดียวกับแถบพลังงานของตัวนำ) และอยู่ระหว่างแถบวาเลนซ์และแถบนำของส่วนที่เป็นก้ำแพง แสดงดังรูปที่ 2.9 (ง) เช่น สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม CaTe/HgTe

2.2.4 พารามิเตอร์ในสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม

ในสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมมีค่าพารามิเตอร์หรือตัวแปรหลายตัวที่มีความสำคัญต่อคุณสมบัติของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมดังแสดงในรูป 2.10



รูปที่ 2.10 แถบพลังงานของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมและพารามิเตอร์ต่าง ๆ ที่เกี่ยวข้อง

พารามิเตอร์ต่าง ๆ ในสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม คือ

1. กำแพงศักย์ของอิเล็กตรอน (ΔE_c) คือความแตกต่างของความสูงของแถบนำในชั้นกำแพงและชั้นบ่อ ค่าของ ΔE_c มีค่าโดยประมาณเท่ากับความแตกต่างของระดับพลังงานของอิเล็กตรอนแอฟฟินิตีของชั้นกำแพงและชั้นบ่อ
2. กำแพงศักย์ของโฮล (ΔE_v) คือความแตกต่างของความสูงของแถบวาเลนซ์ในชั้นกำแพงและชั้นบ่อ
3. ความหนาของชั้นกำแพง L_b คือการปลูกสารที่มีแถบพลังงานกว้างเป็นส่วนของกำแพงของระบบบ่อควอนตัมโดยพิจารณาว่าถ้าเป็นบ่อควอนตัมเดี่ยวควรหนาเท่าใดที่จะสามารถกักอิเล็กตรอนไว้ในส่วนที่เป็นบ่อไว้ได้ และถ้าเป็นบ่อควอนตัมตั้งแต่ 2 บ่อขึ้นไปควรมีชั้นกำแพงที่อยู่ภายในมีความหนาเท่าไรที่จะไม่ทำให้การซึมผ่านของคลื่นนี้มีความต่อเนื่องทุกบ่อ
4. ความหนาของชั้นบ่อ L_w คือความหนาของส่วนของสารที่มีแถบพลังงานน้อยให้มีความหนาที่เหมาะสมที่จะแสดงคุณสมบัติทางแสงได้

2.3 การคำนวณหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์

พิจารณาสมการชโรดิงเงอร์ (Schrodinger's equation)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E \psi(x) \tag{2.1}$$

จัดรูปสมการใหม่ได้เป็น

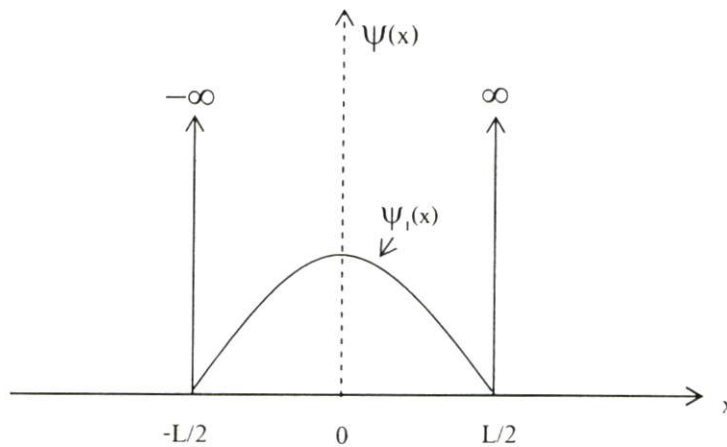
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi(x) \quad (2.2)$$

จะเห็นว่าสามารถแก้สมการเพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ภายในบ่อศักย์ V มิติตามแนวแกน x ได้จากฟังก์ชันคลื่นที่ใช้อธิบายพฤติกรรมของอนุภาค ซึ่งคือผลเฉลย ในการหาผลเฉลยทำได้โดยแยกพิจารณาว่าจะหาผลเฉลยโดยใช้วิธีการทางคณิตศาสตร์ และหาผลเฉลยโดยใช้วิธีระเบียบวิธีเชิงตัวเลข (numerical methods) ของบ่อศักย์แบบลึกอนันต์ (infinite potential well) (ศักย์ที่ขอบของบ่อศักย์มีค่าสูงมาก) และบ่อศักย์แบบลึกจำกัด (finite potential well) (ศักย์ที่ขอบของบ่อศักย์มีค่า $V(x)=V_0$)

2.3.1 การแก้สมการชโรดิงเงอร์โดยวิธีการทางคณิตศาสตร์

2.3.1.1 บ่อศักย์ลึกอนันต์ (infinite potential well)

พิจารณาอนุภาคที่ถูกขังในช่วง $-L/2 < x < L/2$ ที่มีค่าศักย์ $V(x)$ ภายในบ่อมีค่าเท่ากับศูนย์ และค่าศักย์ที่อยู่ภายนอกมีค่าอนันต์ แสดงดังรูป 2.11



รูปที่ 2.11 แสดงบ่อศักย์ลึกอนันต์อยู่ในช่วง $-L/2 < x < L/2$

จากสมการชโรดิงเงอร์ (2.1)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E \psi(x) \quad (2.3)$$

จากเงื่อนไขที่กำหนดคือค่าศักย์ภายในบ่อศักย์มีค่าเท่ากับศูนย์ดังนั้นจะได้

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad (2.4)$$

ผลเฉลยที่เป็นฟังก์ชันคลื่นคือ

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2.5)$$

เมื่อ

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.6)$$

ในการหาระดับพลังงานย่อย (E) สามารถหาได้โดยกำหนดเงื่อนไขของฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์ คือที่ $x = -L/2$ และ $x = L/2$ มีค่าเท่ากับศูนย์เนื่องจากที่ขอบบ่อมีค่าศักย์สูงมากทำให้อิเล็กตรอนไม่สามารถผ่านไปได้ นั่นคือ

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0 \quad (2.7)$$

จะได้ว่าในกรณีที่ระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้น ($n=1$) ค่าฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าสูงสุดที่ตำแหน่ง $x = 0$ คือ $\psi(0) = 1$ ดังนั้นผลเฉลยฟังก์ชันคลื่นคือ

$$\psi(x) = A \cos kx \quad (2.8)$$

จากเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดจะได้

$$\psi(L/2) = A \cos k(L/2) = 0 \quad (2.9)$$

หรือจะได้ว่า

$$k(L/2) = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \dots, \frac{n\pi}{2} \quad ; n = 1, 3, 5, \dots, n \quad (2.10)$$

พิจารณาที่สถานะพื้น ($n=1$) ได้ $k = \pi/2$ แทนค่าในสมการ (2.6) ได้

$$\frac{\pi}{2} = \sqrt{\frac{2mE_1}{\hbar^2}}$$

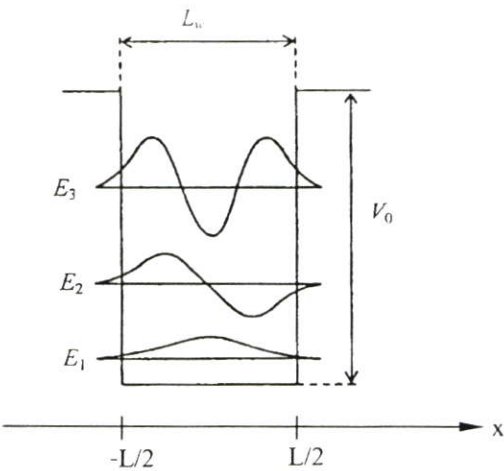
หรือ

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \tag{2.11}$$

หรือระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ลึกอนันต์ คือ

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{8mL^2} \tag{2.12}$$

2.3.1.2 บ่อศักย์ลึกจำกัด (finite potential well)



รูปที่ 2.12 แสดงบ่อควอนตัมที่มีกำแพงศักย์จำกัดค่า V_0

พิจารณาจากรูป 2.12 จะได้ความสัมพันธ์ของศักย์ของบ่อศักย์กับระยะทางตามแนวแกน x คือ

$$V(x) = \begin{cases} 0 & ; -L/2 \leq x \leq L/2 \\ V_0 & ; x < -L/2, \quad x > L/2 \end{cases} \tag{2.13}$$

ดังนั้นจากสมการชโรดิงเงอร์จะได้ความสัมพันธ์เป็น

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x) - E) \psi(x) \tag{2.14}$$

ในการหาฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยของสมการ (2.14) นั้นจะแบ่งเป็น 2 กรณีด้วยกันเนื่องจากค่าศักย์มีค่าไม่ต่อเนื่อง คือ พิจารณาในกรณีที่ ค่า $|x| < L/2$ คือในช่วงที่เป็นบ่อมีค่า $V(x) = 0$ และในกรณีที่ $L/2 < |x|$ คือในช่วงที่เป็นกำแพงมีค่า $V(x) = V_0$ ตามความสัมพันธ์ในสมการ (2.13) และฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยนั้นจะต้องมีเงื่อนไขที่สำคัญ คือ

1. ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยต้องมีค่าเท่ากันที่ขอบรอยต่อ

$$\psi_{\text{well}}(\pm L/2) = \psi_{\text{barrier}}(\pm L/2) \quad \text{ที่ตำแหน่งรอยต่อ } x = \pm L/2$$

2. ค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันคลื่นที่ขอบรอยต่อต้องมีค่าเท่ากัน คือ มีความต่อเนื่อง

$$\frac{d}{dx}\psi_{\text{well}}(\pm L/2) = \frac{d}{dx}\psi_{\text{barrier}}(\pm L/2)$$

นั่นคือในการหาฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยจะแบ่งพิจารณาเป็น 2 กรณีคือ กรณีที่ 1 ที่ตำแหน่ง $|x| < L/2$ ค่ามีค่าศักย์ $V(x) = 0$ จากสมการ (2.13) ได้

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) \quad (2.15)$$

ได้ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลย คือ

$$\psi(x) = A \cos kx + B \sin kx \quad (2.16)$$

เมื่อ

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad (2.17)$$

ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยในกรณีนี้เหมือนฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยในกรณีที่บ่อศักย์ที่ลึกอนันต์ แต่มีเงื่อนไขขอบเขตที่แตกต่างกันคือฟังก์ชันคลื่นที่ขอบเขตของบ่อจะมีค่าเท่ากันแต่ไม่เท่ากับศูนย์ คือ

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) \neq 0 \quad (2.18)$$

และค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของกำแพงจะมีค่าเท่ากับศูนย์ คือ

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} [\psi(x)] = \lim_{x \rightarrow \infty} [\psi(x)] = 0 \quad (2.19)$$

กรณีที่ 2 ที่ตำแหน่ง $L/2 < |x|$ มีค่าศักย์ $V(x) = V_0$ จากสมการ (2.13) ได้

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x) \quad (2.20)$$

จะได้ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลย คือ

$$\psi(x) = C \exp(\kappa x) + D \exp(-\kappa x) \quad (2.21)$$

เมื่อ

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)} \quad (2.22)$$

จากเงื่อนไขขอบเขตคือค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่าเข้าใกล้ศูนย์หรือประมาณศูนย์ เมื่อระยะทางตามแนวแกน x มีค่ามาก ๆ หรือถือว่ามีค่าเป็นอนันต์ทั้งทางด้านบวกและด้านลบหรือ

$$\psi(x) \rightarrow 0 \quad \text{เมื่อ } x \rightarrow +\infty \text{ และ } x \rightarrow -\infty \quad (2.23)$$

จะได้ฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลย คือ

$$\begin{aligned} \psi(x) &= C \exp(\kappa x) & \text{เมื่อ } x < -L/2 \\ \psi(x) &= D \exp(-\kappa x) & \text{เมื่อ } L/2 < x \end{aligned} \quad (2.24)$$

จากฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยทั้ง 2 กรณี ตามสมการ (2.21) และ (2.24) สามารถพิจารณาหาฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยของบ่อศักย์ลึกอนันต์ได้ 2 กรณีคือ ผลเฉลยแบบสมมาตร หรือผลเฉลยคู่ (even-parity solution) หรือที่ระดับพลังงานย่อย $n=1,3,5,\dots$ และผลเฉลยแบบไม่สมมาตร หรือ

ผลเฉลยที่ (odd-parity solution) หรือที่ระดับพลังงานย่อย $n=2,4,6,\dots$ ในกรณีนี้จะพิจารณาหาว่าระดับพลังงานที่สถานะพื้น ($n=1$) ซึ่งเป็นผลเฉลยแบบคู่ ดังนั้นค่าฟังก์ชันคลื่นในช่วง $|x| < L/2$ คือ

$$\psi(x) = A \cos kx \quad (2.25)$$

และจากเงื่อนไขที่รอยต่อของบ่อศักย์กับกำแพงศักย์คือ

1. ฟังก์ชันคลื่นต้องมีค่าเท่ากันที่ขอบรอยต่อ ดังนั้นที่ตำแหน่งรอยต่อ $x=L/2$ จะได้

$$A \cos\left(k \frac{L}{2}\right) = D \exp\left(-\kappa \frac{L}{2}\right) \quad (2.26)$$

2. ค่าอนุพันธ์ของฟังก์ชันคลื่นที่ขอบรอยต่อต้องมีค่าเท่ากัน คือ

$$-kA \sin\left(k \frac{L}{2}\right) = -\kappa D \exp\left(-\kappa \frac{L}{2}\right) \quad (2.27)$$

นำสมการ (2.26) หารสมการ (2.27) ได้

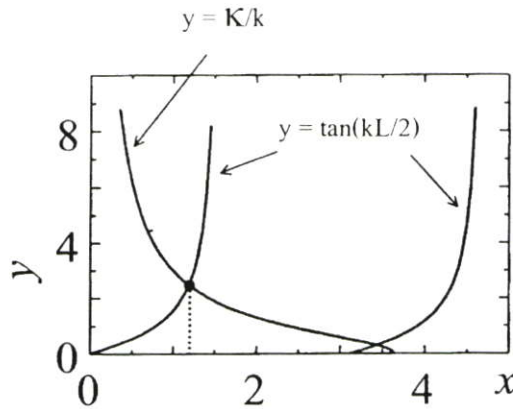
$$\tan\left(k \frac{L}{2}\right) = \frac{\kappa}{k} \quad (2.28)$$

หรือ

$$\tan\left(\frac{L}{2} \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\right) = \sqrt{\frac{V_0 - E}{E}} \quad (2.29)$$

จากสมการ (2.29) หากต้องการทราบค่าระดับพลังงานย่อย E นั้นเป็นเรื่องยากหากหาโดยการแก้สมการหาค่าโดยตรง แต่สามารถหาได้โดยใช้คอมพิวเตอร์ช่วยในการคำนวณ

สมการ (2.28) จะเป็นสมการที่ใช้หาระดับพลังงานย่อยภายในบ่อควอนตัมในแถบนำ ($E_{c1}, E_{c2}, \dots$) และในแถบวาเลนซ์ ($E_{hh1}, E_{hh2}, \dots$) โดยค่าระดับพลังงานย่อยคือค่าที่ทำให้สมการ (2.28) เป็นจริง ซึ่งสามารถเขียนกราฟในการหาพลังงานย่อยได้ดังรูป 2.13



รูปที่ 2.13 แสดงกราฟการหาพลังงานย่อยระดับต่าง ๆ ในบ่อควอนตัมเมื่อกำแพงศักย์มีความสูงจำกัด โดยแกน x คือค่าพลังงาน E และแกน y คือค่าในแต่ละข้างของสมการ (2.28) ซึ่งเป็นฟังก์ชันของพลังงาน

2.3.2 ระเบียบวิธีเชิงคณิตศาสตร์ (Numerical methods)

ปัญหาในงานวิทยาศาสตร์ที่ส่วนใหญ่อยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์สามารถหาผลเฉลยแม่นยำตรง (exact solution) ได้โดยวิธีการทางคณิตศาสตร์ แต่หากปัญหานั้นมีความซับซ้อนไม่สามารถทำการหาผลเฉลยแม่นยำตรงได้โดยง่าย จะใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในการหาผลเฉลยโดยประมาณได้ ค่าผลเฉลยที่ประมาณได้จะมีความถูกต้องมากน้อยเพียงใดขึ้นอยู่กับวิธีที่ใช้ซึ่งมีหลายวิธีการให้เลือกใช้ตามความเหมาะสม วิธีการแก้ปัญหานั้น ส่วนใหญ่เป็นวิธีการที่ใช้ในการแก้ปัญหที่กำหนดเงื่อนไขเริ่มต้นมาให้แล้วจึงทำการหาผลเฉลย หรือเรียกปัญหาแบบนี้ว่าปัญหาค่าเริ่มต้น (initial value problem: IVP) แต่ปัญหาในงานวิทยาศาสตร์ส่วนใหญ่เป็นปัญหาที่กำหนดค่าที่ขอบของปัญหามาให้เพื่อหาผลเฉลยเรียกปัญหาแบบนี้ว่าปัญหาค่าขอบเขต (boundary value problem: BVP) ดังนั้นหากต้องการผลเฉลยของปัญหาค่าขอบเขตต้องทำการเปลี่ยนปัญหาค่าขอบเขตเป็นปัญหาค่าเริ่มต้นเสียก่อน วิธีการเปลี่ยนนี้มีวิธีการที่จะกล่าวถึงในหัวข้อต่อไป โดยการพิจารณาว่าปัญหานั้นเป็นปัญหาแบบใด คือปัญหาเงื่อนไขเริ่มต้น หรือปัญหาเงื่อนไขขอบเขต

2.3.2.1 ปัญหาค่าเริ่มต้น (Initial value problems : IVP)

ปัญหาค่าเริ่มต้นของสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่งมีรูปแบบ คือ

$$y' = f(x, y) \quad , y(a) = y_1 \text{ และ } y'(a) = \beta \quad (2.30)$$

โดยกำหนดเงื่อนไขเริ่มต้น คือ ที่ตำแหน่ง $x = a$, $y = y_1$ และมีค่าอนุพันธ์ที่จุดนี้เท่ากับ β ซึ่งค่าเหล่านี้จะใช้เป็นค่าเริ่มต้นในการแก้ปัญหา หากปัญหาที่ต้องการแก้เป็นปัญหาค่าอนุพันธ์อันดับสองซึ่งมีรูปแบบ คือ

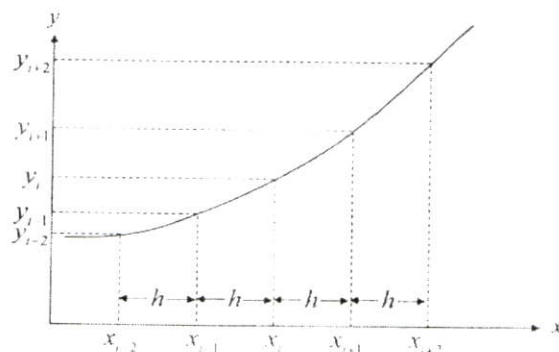
$$y'' = f(x, y, y') \quad , y(a) = y_1 \text{ และ } y'(a) = \beta \quad (2.31)$$

ในการแก้ปัญหาคตามสมการ (2.31) ทำได้โดยการเปลี่ยนสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองนี้เป็นสมการอันดับหนึ่ง 2 สมการแล้วจึงทำการหาผลเฉลยโดยการแก้ปัญหาค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งทั้ง 2 สมการ วิธีการในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น มีด้วยกันหลายวิธี เช่น

1. วิธีการออยเลอร์ (Euler's method)
2. วิธีฮวน (Heun's method)
3. วิธีรุงเง-คุตตา (Runge-Kutta method)
4. วิธีผลต่างสี่เหลี่ยม (Finite difference method)
5. วิธีแบบหลายขั้น (Multistep method)

วิธีการเหล่านี้มีจุดประสงค์เดียวกันคือการประมาณค่าผลเฉลยของปัญหา ในงานวิจัยนี้ใช้วิธีผลต่างสี่เหลี่ยม ซึ่งมีวิธีการดังนี้

วิธีการของวิธีผลต่างสี่เหลี่ยมคือการแทนเทอมอนุพันธ์ ด้วยค่าโดยประมาณของผลต่างที่มีค่าจำกัด เริ่มโดยการกำหนดค่าโดยประมาณของค่าอนุพันธ์ พิจารณาจากรูป 2.14 ซึ่งเป็นกราฟของผลเฉลย โดยแบ่งค่าตามแนวแกน x เป็นช่วงสั้น ๆ ยาว h



รูป 2.14 แสดงการแบ่งช่วงของวิธีผลต่างสี่เหลี่ยม

ค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งของ y เทียบกับ x ณ จุด x_i สามารถทำได้หลายวิธี คือ

$$y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad \text{ผลต่างด้านหน้า} \quad (2.32)$$

$$y'_i \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad \text{ผลต่างด้านหลัง} \quad (2.33)$$

$$y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2h} \quad \text{ผลต่างตรงกลาง} \quad (2.34)$$

สูตรผลต่างสี่บเนื่องเป็นการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งโดยการคำนวณค่าความชันของเส้นที่เชื่อมจุด 2 จุดที่อยู่ติดกัน โดยสูตรผลต่างด้านหน้าและผลต่างด้านหลังเป็นการหาค่าที่ใช้ค่าที่อยู่ด้านขวาหรือด้านซ้ายของจุด x_i ส่วนผลต่างตรงกลางนั้นจะใช้ค่าที่อยู่ทั้งด้านขวาและด้านซ้ายของจุด x_i

การประมาณค่าอนุพันธ์ที่มีค่าสูงขึ้นสามารถทำได้ในทำนองเดียวกัน เช่น การหาค่าสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองที่จุด x_i สามารถประมาณได้โดยการแทนค่าผลต่างด้านหลังของอนุพันธ์อันดับหนึ่ง คือ

$$y''_i \approx \frac{y'_i - y'_{i-1}}{h} \quad (2.35)$$

แทนค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งในสมการ (2.35) ด้วยสูตรผลต่างด้านหน้า คือ

$$y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad \text{และ} \quad y'_{i-1} \approx \frac{y_i - y_{i-1}}{h} \quad (2.36)$$

จะได้สูตรผลต่างตรงกลางของ y''_i ได้คือ

$$y''_i \approx \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} \quad (2.37)$$

สมการ (2.37) คือสมการหาค่าผลเฉลยโดยประมาณของค่าอนุพันธ์อันดับสองโดยวิธีผลต่างสี่บเนื่อง (finite difference method)

2.3.2.2 ปัญหาค่าขอบเขต (Boundary value problems : BVP)

ปัญหาค่าขอบเขตคือปัญหาที่กำหนดค่าสมการหรือปัญหามาให้พร้อมทั้งค่าที่ขอบเขตทั้งสองของปัญหานั้น มีรูปแบบ คือ

$$y'' = f(x, y, y') \quad , y(a) = y_a \text{ และ } y(b) = y_b \quad (2.38)$$

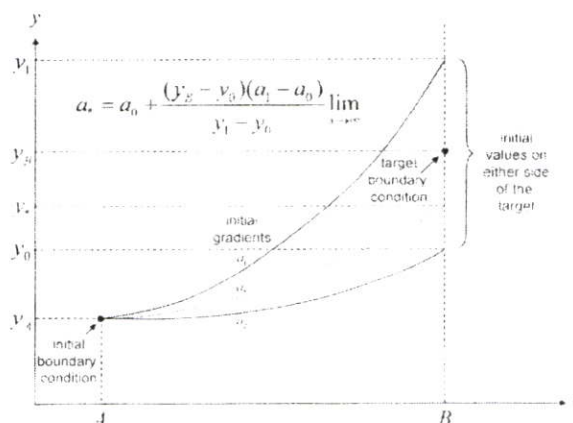
ในการแก้ปัญหาค่าขอบเขตที่มีรูปแบบเป็นดังนี้ไม่สามารถหาผลเฉลยได้โดยตรง วิธีการแก้ปัญหานี้ส่วนใหญ่ต้องทำการเปลี่ยนเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง 2 สมการ ที่อยู่ในรูปของปัญหาค่าเริ่มต้นเสียก่อน คือ อยู่ในรูปแบบปัญหาค่าเริ่มต้น คือ

$$y'' = f(x, y, y') \quad , y(a) = y_1 \text{ และ } y'(a) = \beta \quad (2.39)$$

นั่นคือต้องทำการหาค่าอนุพันธ์ของจุดเริ่มต้น คือ β ให้ได้เสียก่อนแล้วจึงทำการแก้ปัญหาโดยวิธีการหาค่าผลเฉลยปัญหาค่าเริ่มต้น วิธีการหาค่าอนุพันธ์ของจุดเริ่มต้นสามารถทำได้โดยการใช้วิธีการยิงเป้า (shooting method)

2.3.2.2.1 วิธีการยิงเป้า (Shooting method)

วิธีการยิงเป้าเป็นวิธีการที่ใช้สำหรับหาค่าอนุพันธ์ที่เป็นค่าเริ่มต้นโดยวิธีการเดาค่าอนุพันธ์ของ $y'(A) = a$ ที่เป็นเงื่อนไขเริ่มต้นและนำไปแก้สมการเพื่อหาผลเฉลย จนกระทั่งได้ค่าอนุพันธ์ 2 ค่าคือ a_0 และ a_1 ที่ทำให้ได้ผลเฉลย 2 ค่าคือ y_0 และ y_1 ที่มีค่าใกล้เคียงกับค่า $y(B)$ หรือ y_B ที่เป็นเงื่อนไขขอบเขตของปัญหากำหนดให้ โดยที่ $y_0 < y_B < y_1$ แสดงดังรูป 2.15



รูปที่ 2.15 แสดงวิธีการของวิธีการยิงเป้า

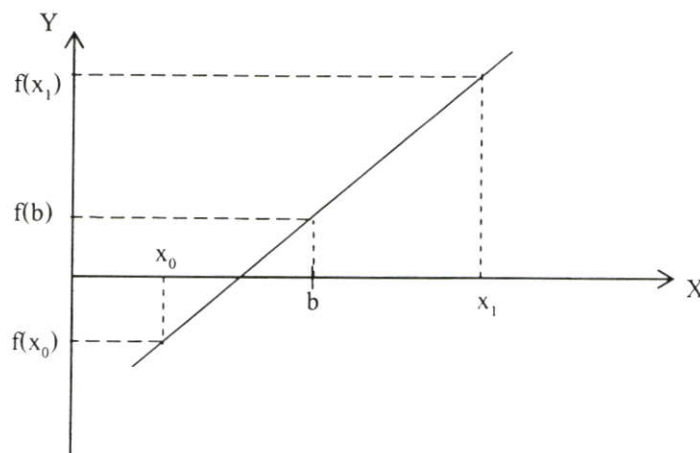
แสดงว่าอนุพันธ์ที่เป็นค่าเงื่อนไขเริ่มต้นจริง ๆ, a , อยู่ระหว่างค่าอนุพันธ์ที่สมมุติขึ้นคือ a_0 และ a_1 วิธีการหาค่าเงื่อนไขเริ่มต้นจริงที่ทำให้ค่าขอบเขตที่กำหนดมาเป็นจริงคือ $y(B) = a$ ทำได้โดยวิธีการหารากหรือคำตอบซึ่งมีหลายวิธี แต่ในกรณีนี้เป็นกรณีที่ทราบจุดปลาย 2 ทั้งสองและค่ารากอยู่ระหว่างจุดปลายทั้งสองนี้

2.3.2.2.2 วิธีการสมการ (Root of equation method)

วิธีการหารากของสมการมีด้วยกันหลายวิธี เช่น

1. วิธีการกราฟ (Graph method)
2. วิธีแบ่งครึ่งช่วง (Bisection method)
3. วิธีของนิวตัน-ราฟสัน (Newton-Raphson method)
4. วิธีเส้นตัด (Secant method)

วิธีที่ใช้ในงานวิจัยนี้เลือกใช้วิธีแบ่งครึ่งช่วง เนื่องจากเป็นวิธีที่สอดคล้องกับเงื่อนไขที่มีคือทราบค่าจุดปลายทั้งสองด้านและค่าความชันจะเป็นค่าเดียวกันตลอดทั้งช่วงนี้ และมีค่ารากหรือคำตอบอยู่ระหว่างค่าทั้งสอง



รูปที่ 2.16 แสดงวิธีหารากโดยวิธีแบ่งครึ่งช่วง (bisection method)

เป็นวิธีการหารากหรือคำตอบที่ง่ายและไม่ซับซ้อนและให้ผลที่น่าพอใจโดยมีหลักการทำงานคือถ้าจุด x_0 และ x_1 คือจุดปลายทั้งสองด้านของช่วงที่มีค่าคำตอบอยู่ภายในคือที่ $f(x) = 0$ วิธีการคือแบ่งช่วง $[x_0, x_1]$ ออกเป็นสองส่วน คือช่วง $[x_0, x_b]$ และ ช่วง $[x_b, x_1]$ และหาค่าฟังก์ชัน ที่จุดนั้น ๆ ได้ $f(x_0)$, $f(x_b)$ และ $f(x_1)$ ที่ทราบค่า หลังจากนั้นทำการทดสอบเงื่อนไขคือถ้ารากอยู่ในช่วงใด ผลคูณของช่วงนั้นต้องน้อยกว่าศูนย์ หากผลคูณมีค่ามากกว่าศูนย์

แสดงว่าค่าฟังก์ชันของช่วงนั้น ๆ มีเครื่องหมายเหมือนกันแสดงว่าไม่มีค่ารากของสมการอยู่ในช่วงนั้นทำการตัดช่วงนี้ออก แล้วปรับค่าจุดปลายของช่วงเริ่มต้นใหม่และทำเช่นนี้ไปเรื่อย ๆ จนได้ค่าเข้าหารากของสมการ ในกรณีตัวอย่างดังเช่นรูปที่ 2.16 จะได้ว่า

$$f(x_0) * f(b) < 0 \quad (2.40)$$

แสดงว่าค่าที่อยู่ในช่วง $[b, x_2]$ ไม่มีค่ารากของสมการอยู่ในช่วงนี้เนื่องจากผลคูณของค่าฟังก์ชันทั้งสองมีค่ามากกว่าศูนย์ แต่ค่ารากของสมการจะอยู่ในช่วง $[x_0, b]$ เนื่องจากผลคูณของค่าฟังก์ชันทั้งสองมีค่าน้อยกว่าศูนย์ตามสมการ (2.40) ดังนั้นทำการปรับค่าปลายทั้งสองด้านที่ค่ารากของสมการอยู่ภายในคือทางด้านขวาจาก b เป็น x_1 และทางด้านซ้ายยังคงเดิม ทำเช่นนี้ไปเรื่อย ๆ จนกระทั่งได้ค่าที่มีค่าเข้าใกล้รากของสมการมากที่สุด วิธีการนี้เรียกว่าวิธีการแบ่งครึ่งช่วง (bisection method)

บทที่ 3

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

3.1 การวิเคราะห์และแนวทางในการแก้ปัญหา

ในการหาค่าการส่งผ่านพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมนั้นต้องทำการหาค่าระดับพลังงานสถานะพื้นของอิเล็กตรอน e_l ในแถบนำ และระดับพลังงานสถานะพื้นของโฮล h_h ในแถบวาเลนซ์ การหาระดับพลังงานทั้งสองนี้มีพื้นฐานเช่นเดียวกับการหาระดับพลังงานย่อย E_n ในบ่อศักย์ (energy levels in potential well) ที่มีความลึกจำกัด (finite potential well) โดยการหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ คือ

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi(x) \quad (3.1)$$

ในการวิจัยนี้ทำโดยการศึกษาเป็นขั้นตอนคือเริ่มจากการศึกษาการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์ และบ่อศักย์ลึกจำกัดโดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข แล้วจึงทำการหาผลเฉลยเพื่อหาระดับพลังงาน e_l และ ระดับพลังงาน h_h เพื่อนำไปคำนวณหาค่าการส่งผ่านพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมต่อไป

3.1.1 ลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

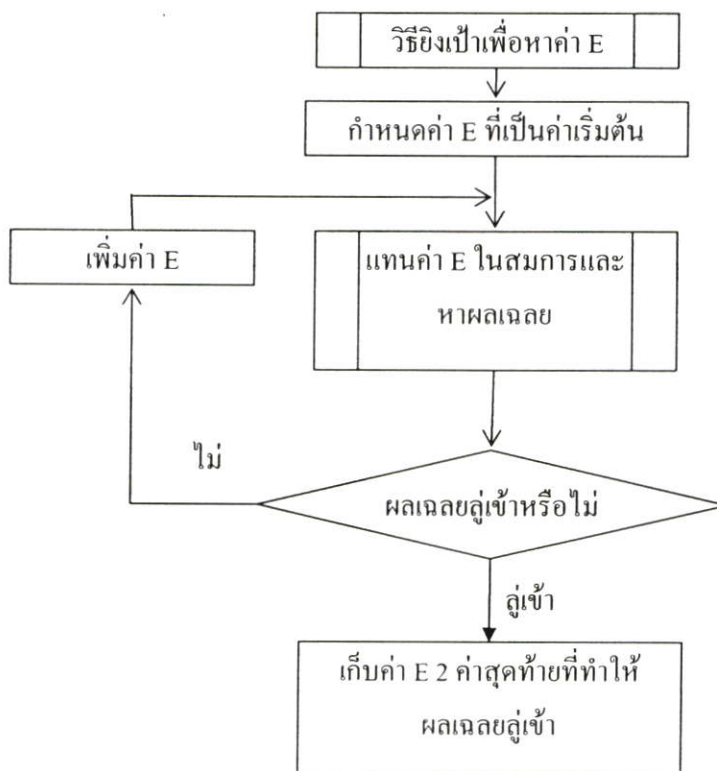
ในการแก้สมการชโรดิงเงอร์ (3.1) เพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นซึ่งเป็นผลเฉลยของสมการมีค่าเป็นจริงตามเงื่อนไขของบ่อศักย์แต่ละชนิดที่ทำการศึกษา

ในการแก้สมการชโรดิงเงอร์เพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขนั้นสามารถกระทำได้ตามขั้นตอนดังแสดงในรูปที่ 3.1 คือ จากรูปจะเห็นว่ามีส่วนย่อยที่ทำงานเฉพาะของแต่ละส่วนดังนี้คือ

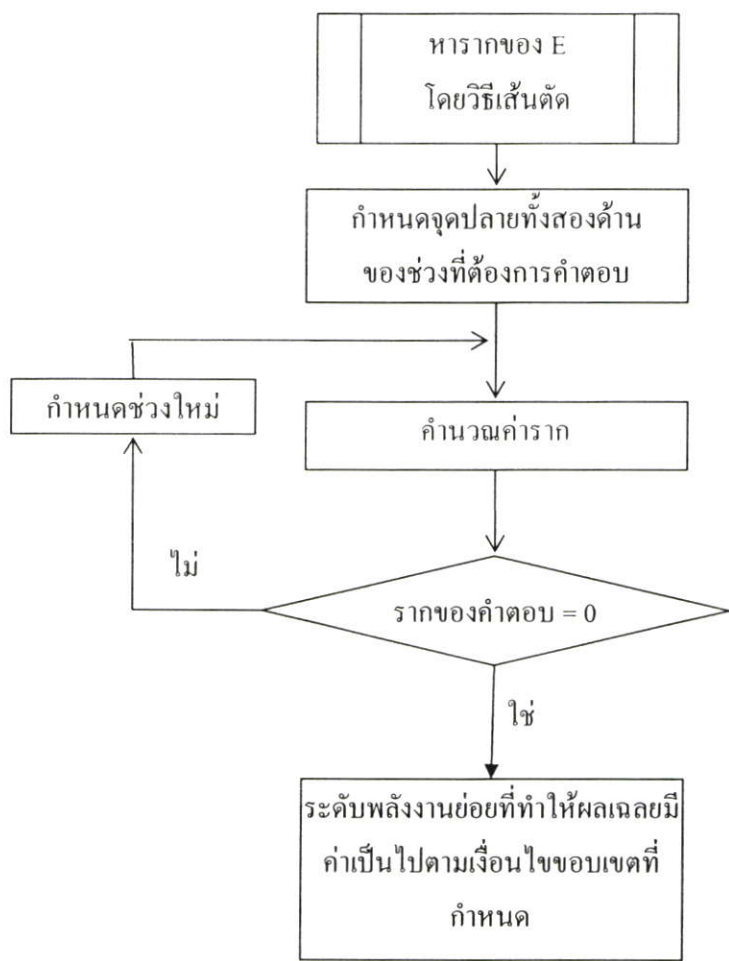
1. ส่วนที่ใช้กำหนดค่าคงที่ต่าง ๆ ที่ต้องใช้ในการแก้ปัญหา
2. ส่วนที่ใช้หาค่าช่วงของระดับพลังงานย่อยที่ครอบคลุมค่าระดับพลังงานย่อยจริงที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยมีค่าเป็นจริงตามเงื่อนไข เรียกส่วนนี้ว่าส่วนวิธียิงเป้า (shooting method) ส่วนนี้เป็นส่วนที่สำคัญที่สุด
3. ส่วนที่ใช้หาค่าระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์จากช่วงของระดับพลังงานที่ได้จากส่วนที่ 2 ส่วนนี้เรียกว่าส่วนที่ใช้สำหรับหารากของสมการ



รูปที่ 3.1 แสดงลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยภายในบ่อสัณฐานจากผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข



รูปที่ 3.2 แสดงลำดับขั้นตอนวิธีการยิงเป้าเพื่อหาค่าระดับพลังงาน E 2 ค่า ที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ตรงตามเงื่อนไขขอบเขต (เท่ากับศูนย์) อยู่ภายในช่วงโดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข



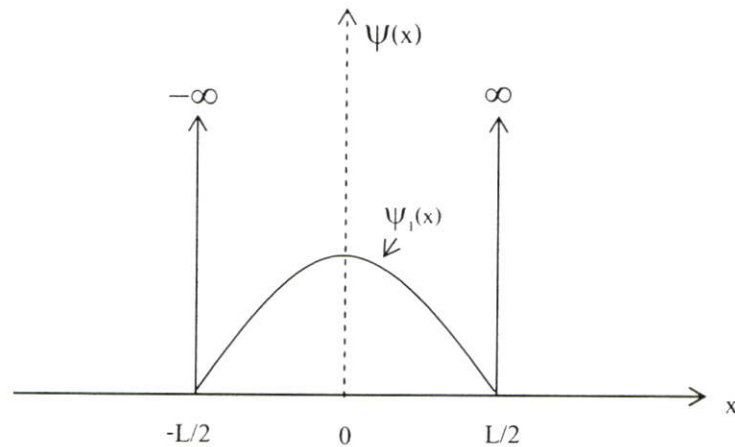
รูปที่ 3.3 แสดงลำดับขั้นวิธีการหารากหรือค่า E ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์มีค่าตรงตามเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดให้โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

จากรูปที่ 3.1 เห็นว่ามีส่วนที่ทำงานเฉพาะ 2 ส่วนหลักด้วยกันคือส่วนที่ 2 และ 3 ซึ่งมีรายละเอียดแสดงในรูปที่ 3.2 สำหรับส่วนที่ 2 และรูปที่ 3.3 สำหรับส่วนที่ 3

จากลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยแสดงดังรูปที่ 3.1 จะแยกพิจารณาเป็น 2 กรณีคือกรณีที่ เป็นบ่อศักย์ที่มีความสูงอนันต์ และกรณีที่ เป็นบ่อศักย์สูงจำกัด

3.1.1.1 การหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์

พิจารณาโครงสร้างบ่อศักย์สูงอนันต์จากรูปที่ 3.4



รูปที่ 3.4 แสดงโครงสร้างบ่อศักย์ลึกลอนันต์

จากรูปที่ 3.4 เห็นว่าค่าศักย์ที่ขอบจะมีค่ามากทำให้ฟังก์ชันคลื่นไม่สามารถผ่านเข้าไปได้ ดังนั้นจะได้เงื่อนไขขอบเขตที่สำคัญคือค่าฟังก์ชันคลื่นต้องเท่ากับศูนย์ที่ขอบของบ่อศักย์ และค่าศักย์ภายในบ่อมีค่าเท่ากับศูนย์ หรือ

$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) = 0 \quad (3.2)$$

และ

$$V(x) = 0 \quad ; \quad -L/2 < x < L/2 \quad (3.3)$$

สมการ (3.2) และ สมการ (3.3) เป็นเงื่อนไขที่สำคัญในการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์ จากเงื่อนไขที่ได้จะทำการพิจารณาหาฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยโดยเริ่มจากการพิจารณาหาวิธีการแก้สมการชโรดิงเงอร์ สมการ (3.1)

จากรูปที่ 3.2 เห็นว่าในการหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์นั้นจะต้องมีวิธีการหาผลเฉลยสมการอนุพันธ์อันดับสอง ในกรณีนี้ใช้วิธีการผลต่างสลับเนื่อง (finite difference method) ในการหาผลเฉลย ซึ่งโดยหลักการของวิธีผลต่างสลับเนื่องได้กล่าวในบทที่ 2 ดังนั้นสามารถนำค่าการหาผลเฉลยโดยประมาณตามสมการ (2.37) คือ

$$y_i'' \approx \frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{h^2} \quad (3.4)$$

หรือ

$$\psi''(x_i) = \frac{\psi(x_i - \delta x) - 2\psi(x_i) + \psi(x_i + \delta x)}{(\delta x)^2} ; \delta x = x_i - x_{i-1} \quad (3.5)$$

แทนค่าสมการ (3.5) ในสมการ (3.1) ได้

$$\frac{\psi(x_i - \delta x) - 2\psi(x_i) + \psi(x_i + \delta x)}{(\delta x)^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(x_i) - E) \psi(x_i) \quad (3.6)$$

หรือ

$$\psi(x_i + \delta x) = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\delta x)^2 (V(x_i) - E) + 2 \right] \psi(x_i) - \psi(x_i - \delta x) \quad (3.7)$$

สมการ (3.7) เป็นสมการหาค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์โดยใช้วิธีผลต่างสืบเนื่องในการแก้ปัญหาโดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

ในการแก้ปัญหาเพื่อหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์ในงานวิจัยนี้จะใช้สมการ (3.7) ดังนั้นการที่จะได้ผลเฉลยจะต้องหาค่าฟังก์ชันคลื่นที่ตำแหน่ง x_i และที่ตำแหน่ง x_{i-1} ซึ่งคือจุดเริ่มต้น

พิจารณาจากรูปที่ 3.4 จะเห็นว่าฟังก์ชันคลื่นเป็นแบบสมมาตร ดังนั้นจะพิจารณาแก้ปัญหาเพียงครึ่งเดียวคือจากตำแหน่ง 0 ถึง $L/2$ ได้ $\psi(0) = 1$ และจากสมการ (3.2) ได้

$$\psi(0 - \delta x) = \psi(0 + \delta x) \quad (3.8)$$

แทนค่าสมการ (3.8) ในสมการ (3.7) ได้

$$\psi(0 + \delta x) = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (\delta x)^2 (V(0) - E) + 2 \right] \psi(0) - \psi(0 - \delta x)$$

หรือ

$$2\psi(\delta x) = \left[\frac{2m}{\hbar^2}(\delta x)^2(V(0)-E)+2 \right]$$

หรือได้

$$\psi(\delta x) = \frac{m}{\hbar^2}(\delta x)^2(V(0)-E)+1 \tag{3.9}$$

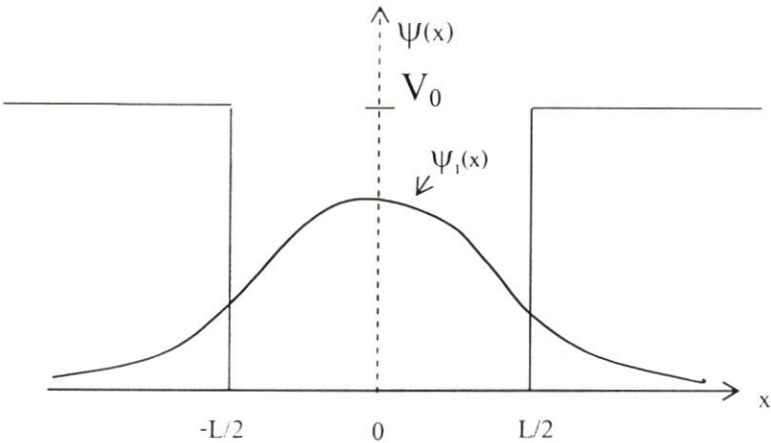
เมื่อ

$$\psi(0)=1 \tag{3.10}$$

สมการ (3.9) และสมการ (3.10) คือค่าเริ่มต้นในการหาฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยสมการชโรดิงเงอร์ของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่เป็นแบบสมมาตรที่ระดับพลังงานสถานะพื้น $n=1$ ที่ใช้วิธีผลต่างสี่เหลี่ยมในการแก้ปัญหา

ดังนั้นจากรูปที่ 3.2 สมการ (3.7), (3.9) และสมการ (3.10) จึงเป็นสมการที่จะนำไปหาช่วงของพลังงานที่จะนำไปหาค่าพลังงานสถานะพื้น ($n=1$) โดยวิธีการยิงเป้า

3.1.1.2 การหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงจำกัด



รูปที่ 3.5 แสดงโครงสร้างบ่อศักย์ลึกจำกัด

พิจารณารูปที่ 3.5 โครงสร้างบ่อศักย์ลึกจำกัดเห็นได้ว่าคล้ายกับในกรณีของบ่อศักย์สูงอนันต์คือปัญหามีลักษณะสมมาตรส่วนที่ต่างกันคือค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยจะไม่เท่ากับศูนย์ที่ขอบของบ่อศักย์เหมือนกับกรณีของบ่อศักย์สูงอนันต์ และค่าของฟังก์ชันคลื่นจะมีการลดลงแบบเอ็กซ์โปเนนเชียล ดังนั้นจะมีค่าเข้าใกล้ศูนย์เมื่อระยะลึกเข้าไปในส่วนของกำแพงหรือถึงระยะหนึ่งจะมีค่าประมาณศูนย์ ซึ่งเป็นเงื่อนไขที่สำคัญสำหรับกรณีนี้ หรือได้

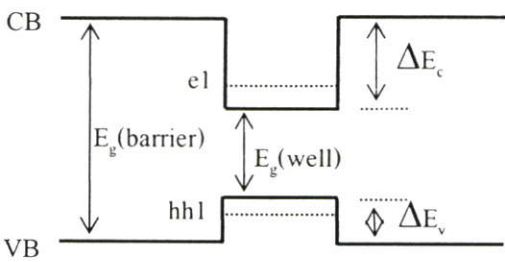
$$\psi(-L/2)=\psi(L/2)\neq 0 \tag{3.11}$$

และ

$$\psi(0)=1 \quad \text{และ} \quad \psi(x)\rightarrow 0 \quad \text{เมื่อ} \quad x\rightarrow \infty \tag{3.12}$$

จะเห็นว่าค่าเริ่มต้นจะเหมือนกับกรณีบ่อศักย์ลึกอนันต์ ต่างกันที่เงื่อนไขขอบเขตคือฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการ (3.7) นั้นจะเป็นไปตามสมการ (3.11) การหาระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นโดยระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขนั้นสามารถทำได้เช่นเดียวกับการหาพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ลึกอนันต์

3.1.1.3 การคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงาน ในโครงสร้างบ่อควอนตัม

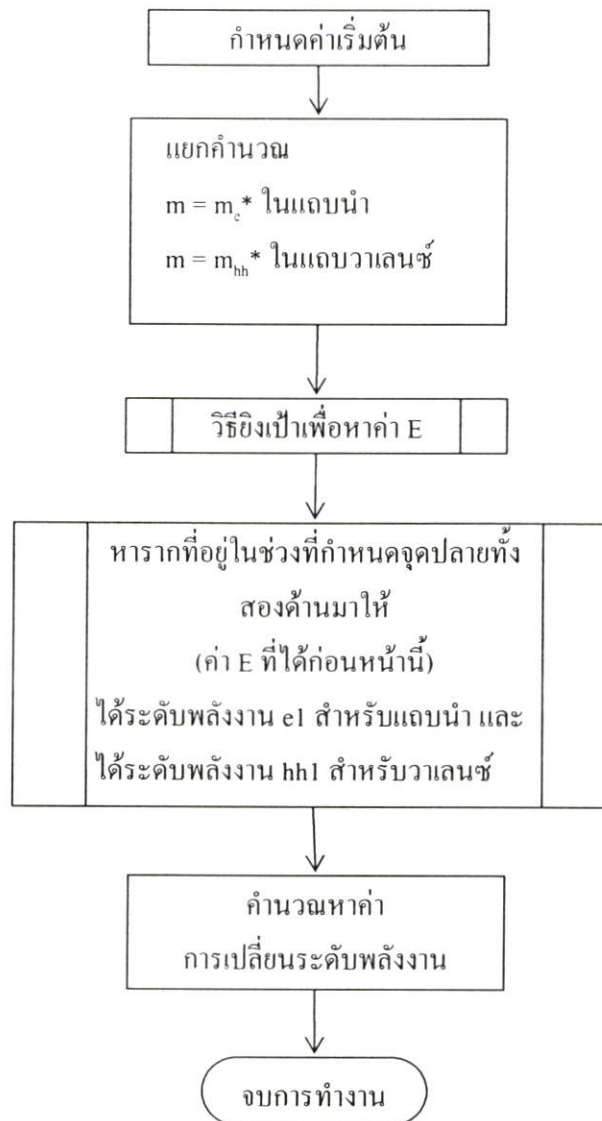


รูปที่ 3.6 แสดงโครงสร้างบ่อควอนตัม

พิจารณารูปที่ 3.6 จะเห็นว่า การเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมนั้นคือ อิเล็กตรอนต้องได้รับพลังงานมีค่าเท่ากับผลรวมของระดับพลังงานย่อย hh1 ในแถบวาเลนซ์ ค่าพลังงานของแถบช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นบ่อ $E_g(\text{well})$ และระดับพลังงานย่อย e1 ในแถบนำ

ดังนั้นสิ่งที่ต้องทำคือการหาระดับพลังงานย่อย e1 และระดับพลังงานย่อย hh1 ซึ่งถ้าพิจารณาแล้วจะเห็นว่าการหาระดับพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่มีความลึกจำกัดดังกล่าว

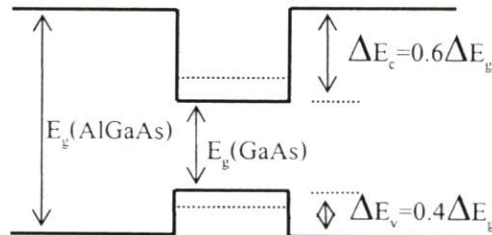
แล้วในตอนต้น หากแต่ลำดับขั้นในการแก้ปัญหานั้นเพิ่มส่วนที่จะบอกว่าเป็นการคำนวณค่าระดับพลังงาน e_l และระดับพลังงาน $h h_l$ ซึ่งมีค่ามวลยังผล (effective mass) ต่างกัน แสดงดังรูปที่ 3.7



รูปที่ 3.7 แสดงลำดับขั้นในการคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัม

3.1.1.3.1 การหาความสูงของบ่อควอนตัม $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$

ในงานวิจัยนี้ได้นำโครงสร้างบ่อควอนตัมของ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ ทำการคำนวณความสัมพันธ์ต่าง ๆ แสดงดังรูปที่ 3.8



รูปที่ 3.8 แบบจำลองบ่อควอนตัมเดี่ยวของ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$

สามารถหาค่าความสูงของบ่อควอนตัมได้จากความสัมพันธ์

$$\Delta E_g = E_g(\text{AlGaAs}) - E_g(\text{GaAs}) \quad (3.13)$$

โดยที่

$$E_g(\text{GaAs}) = 1.519 - \frac{5.405 \times 10^{-4} T^2}{T + 204} \quad (3.14)$$

3.1.1.3.2 การคำนวณหาช่องว่างพลังงานของกัมแพง ($E_g(\text{AlGaAs})$)

ในการคำนวณหาช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นกัมแพงทำได้โดยการหาจากความสัมพันธ์ของ Varshni, Vina และ Passler [p1] ซึ่งเป็นการคำนวณที่พิจารณาว่าช่องว่างแถบพลังงานขึ้นกับอุณหภูมิ คือ

3.1.1.3.3 ความสัมพันธ์ของ Varshni

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \alpha_{Var} \frac{T^2}{\beta + T} \quad (3.15)$$

เมื่อ $E_g(T)$ คือ ช่องว่างพลังงานที่อุณหภูมิ T
 α_{Var} และ β คือ ค่าพารามิเตอร์

และ

$$E_{\text{var}}(T=0, x) = 1.523 + 1.23x \quad (eV) \quad (3.16a)$$

$$\alpha_{\text{var}}(x) = 5.5 + 3.35x + 50x^2 \quad (10^{-4} eV/K) \quad (3.16b)$$

$$\beta(x) = 198 + 88x + 4300x^2 \quad (K) \quad (3.16c)$$

3.1.1.3.4 ความสัมพันธ์ของ Vina

$$E_g(T) = E_B - \alpha_B \left[1 + \frac{2}{\exp(\Theta_B/T) - 1} \right] \quad (3.17)$$

เมื่อ

α_B คือ ค่าอันตรกิริยาของอิเล็กตรอนและโฟนอน,
 $\Theta_B = \hbar w / k_B$ คือค่าอุณหภูมิเฉพาะแทนพลังงานโฟนอนยังผลบนสัดส่วนของ
 อุณหภูมิ

$$E_g(T=0) = E_B - \alpha_B$$

และ

$$E_B(x) = 1.576 + 1.33x \quad (eV) \quad (3.18a)$$

$$\alpha_B(x) = 60 + 81x \quad (meV) \quad (3.18b)$$

$$\Theta_B(x) = 240 + 180x \quad (K) \quad (3.18c)$$

3.1.1.3.5 ความสัมพันธ์ของ Passler

$$E_g(T) = E_g(T=0) - \frac{\alpha\Theta}{2} \left[\sqrt[p]{1 + \left(\frac{2T}{\Theta} \right)^p} - 1 \right] \quad (3.19)$$

เมื่อ $E_g(T=0)$ คือค่าช่องว่างพลังงานที่ 0K.

Θ คือ ค่าอุณหภูมิเฉพาะ (characteristic temperature),

p คือ ค่าพารามิเตอร์เอมไพริคัล (empirical parameter) ในที่นี้มีค่าเท่ากับ 3.5 ที่ $x=0.3$

[1]

โดยที่

$$E(T=0, x) = 1.517 + 1.23x \quad (eV) \quad (3.20a)$$

$$\alpha(x) = 4.9 + 0.7x + 3.7x^2 \quad (10^{-4} eV/K) \quad (3.20b)$$

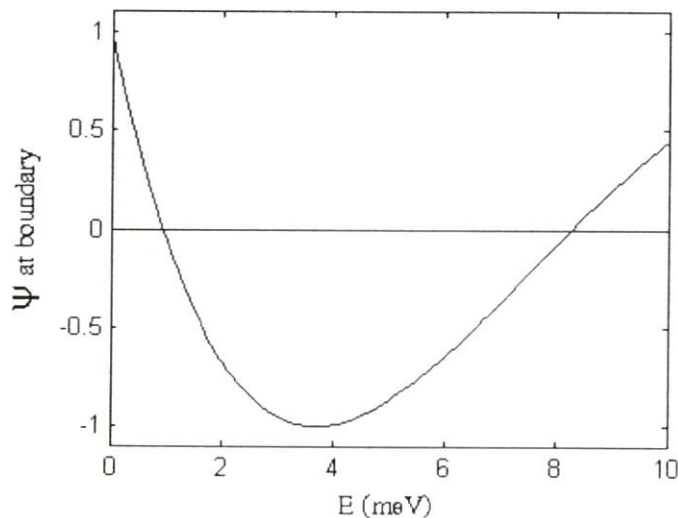
$$\Theta(x) = 202 + 5x + 260x^2 \quad (K) \quad (3.20c)$$

บทที่ 4

ผลการคำนวณ

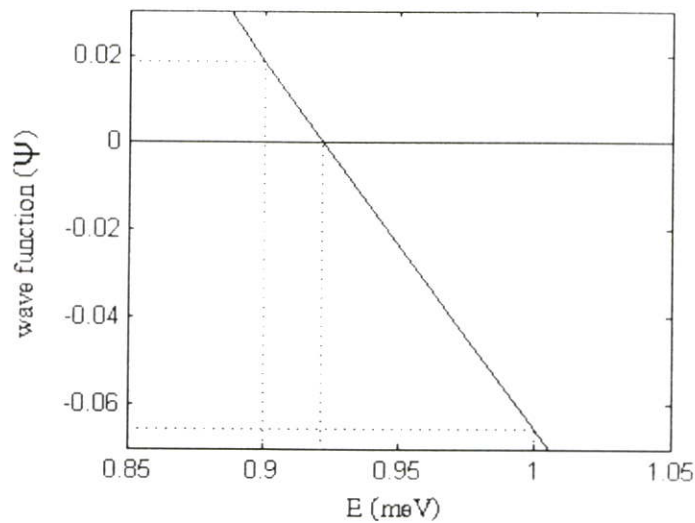
4.1 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงอนันต์

ในการคำนวณเพื่อหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานดังกล่าวก่อนหน้านี้นี้จะทำการศึกษาการคำนวณค่าระดับพลังงานในบ่อศักย์ที่เป็นพื้นฐานทั้ง 2 แบบก่อนเพื่อเป็นพื้นฐานและความเข้าใจดังในหัวข้อนี้เป็นการใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขหาระดับพลังงานที่สถานะพื้นโดยวิธีการยิงเป้า แสดงดังรูปที่ 4.1 เป็นความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานที่ค่าต่าง ๆ และค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์สำหรับบ่อศักย์สูงอนันต์ โดยใช้ค่าบ่อศักย์สูงอนันต์เป็นแบบสี่เหลี่ยม 1 มิติกว้าง (L) ตามแนวแกน x จาก -10 นาโนเมตร ถึง 10 นาโนเมตร และค่าพลังงานที่ใช้สำหรับหาค่าฟังก์ชันคลื่นโดยวิธีการยิงเป้ามามีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 10 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์ (meV) โดยเพิ่มค่าครั้งละ 0.1 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์



รูปที่ 4.1 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่า ต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้า

จากรูปที่ 4.1 จะเห็นว่ามีการคำนวณพลังงานอย่างน้อย 2 ค่าที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ ซึ่งจุดนี้เป็นจุดที่ตรงตามเงื่อนไขขอบเขตคือที่ขอบของบ่อศักย์ต้องมีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ ในที่นี้สนใจจุดที่ค่าพลังงานมีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์จุดแรกแสดงดังรูปที่ 4.2 ซึ่งเป็นภาพขยายจุดดังกล่าว



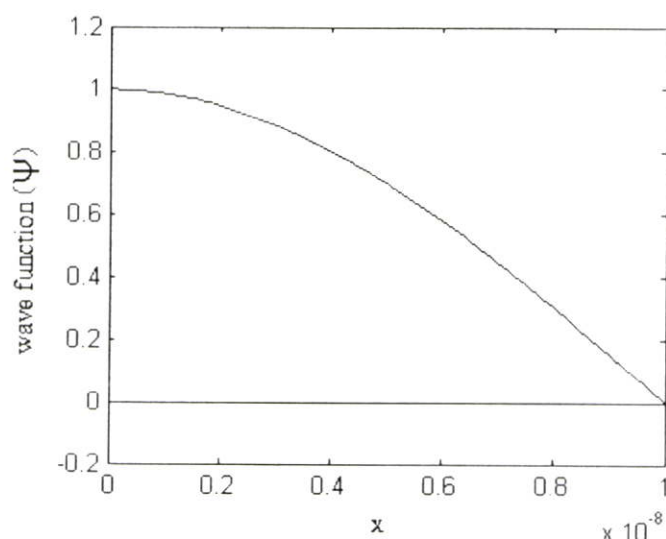
รูปที่ 4.2 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่าต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลข โดยวิธีการยิงเป้าบริเวณที่ค่าพลังงานที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์

จากรูปที่ 4.2 จะทำให้ได้ค่าพลังงานที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นมีการเปลี่ยนค่าจากทางด้านบวกเป็นด้านลบ นั่นแสดงว่ามีค่าพลังงานที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ซึ่งตรงตามเงื่อนไขขอบเขต ค่าดังกล่าวแสดงดังตารางที่ 4.1 ขั้นตอนต่อไปเป็นการนำค่าที่ได้นี้ไปหาค่าพลังงานที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์โดยวิธีหารากแบบแบ่งครึ่ง (bisection method)

ตารางที่ 4.1 แสดงค่าพลังงานและฟังก์ชันคลื่นที่มีการเปลี่ยนค่าจากด้านบวกเป็นด้านลบ

ค่าพลังงาน (meV)	ฟังก์ชันคลื่น (Ψ)
0.900000	0.018466825922191
1.000000	-0.065456491174901

ซึ่งจะได้ค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริงมีค่าประมาณ 0.921541344188154 meV และเมื่อนำค่านี้ไปแทนค่ากลับเพื่อหาค่าฟังก์ชันคลื่นแสดงดังรูปที่ 4.3 แสดงค่าฟังก์ชันคลื่นที่สัมพันธ์กับระยะทางตามแนวแกน x จากจุดกึ่งกลางบ่อถึงขอบบ่อทางด้านขวา

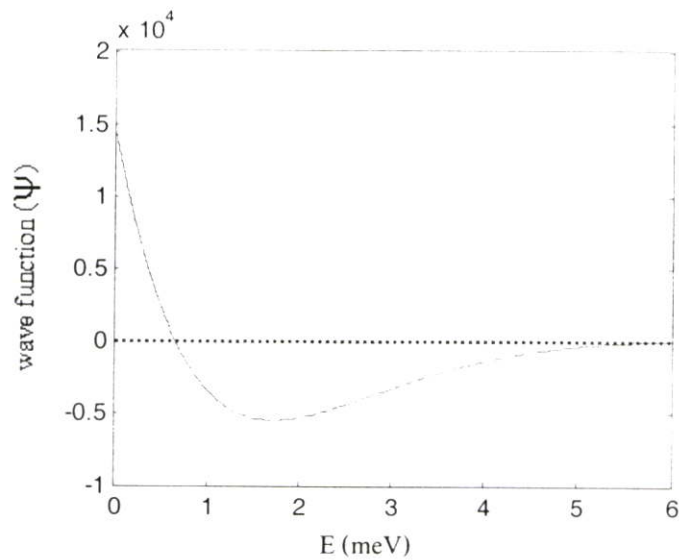


รูปที่ 4.3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางตามแนวแกน x กับค่าฟังก์ชันคลื่นจากจุดกึ่งกลางของบ่อศักย์ถึงขอบของบ่อศักย์ทางด้านขวา

4.2 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงจำกัด

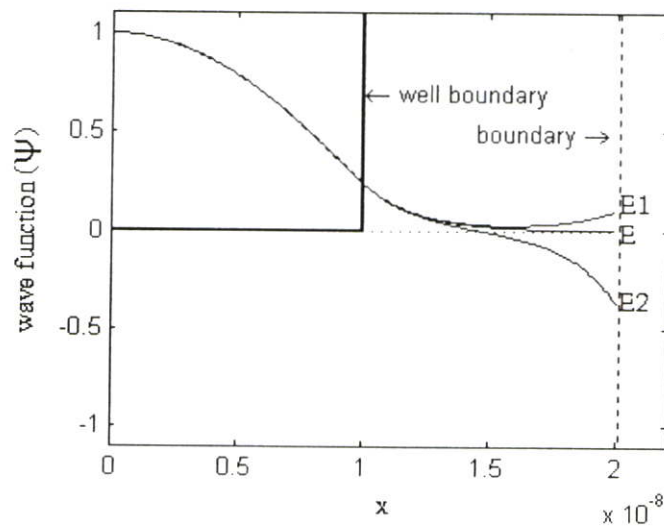
จากการศึกษาหาค่าระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ลึกจำกัดนี้ในการคำนวณหาค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยจากการใช้วิธียิงเป้าเพื่อหาค่าพลังงาน E นั้นได้ผลดังแสดงในรูปที่ 4.4 โดยในการคำนวณใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขซึ่งข้อมูลของบ่อศักย์คือมีความกว้างบ่อ 20 นาโนเมตร ความกว้างของกำแพง 10 นาโนเมตร และมีค่าความสูงของศักย์ที่กำแพง 20 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์ และจากผลการคำนวณจะได้ค่าช่วงของพลังงานที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นตรงตามค่าเงื่อนไขขอบเขตคือมีค่าเป็นศูนย์อยู่ภายใน ช่วงของพลังงานที่ได้ในกรณีนี้คือค่าที่อยู่ระหว่าง 0.66 ถึง 0.67 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์

นำค่าปลายของช่วงที่ได้เป็นค่าจุดปลายเพื่อนำไปหาค่ารากหรือค่าพลังงานที่ทำให้ค่าเงื่อนไขขอบเขตโดยวิธีการแบ่งครึ่งช่วง ในกรณีนี้จะได้ค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริงประมาณ 0.661096542224405 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์



รูปที่ 4.4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานและค่าฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากวิธีการยิงเป้าของบ่อศักย์ลึกจำกัด

นำค่าปลายทั้งสองของช่วงพลังงานที่ได้โดยวิธีการยิงเป้า (E_1 และ E_2) และค่าที่เป็นรากหรือคำตอบที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริง (E) เขียนกราฟความสัมพันธ์กับระยะทางจากจุดกึ่งกลางบ่อถึงขอบกำแพงทางด้านขวาจะได้ดังรูปที่ 4.5



รูปที่ 4.5 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางตามแนวแกนของบ่อศักย์ลึกจำกัด และค่าฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากค่าพลังงานที่ได้จากวิธีการยิงเป้า (E_1 E_2) และจากการประมาณค่าที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบมีค่าประมาณศูนย์ของบ่อศักย์ลึกจำกัด

4.3 ผลการคำนวณโครงสร้างบ่อควอนตัม

ในการศึกษานี้ใช้คุณสมบัติของโครงสร้างบ่อควอนตัม $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ เพื่อเป็นกรณีศึกษา และใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาาสเลอร์ สมการ (3.7) คำนวณหาค่าแถบช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นกำแพง ส่วนค่าแถบช่องว่างพลังงานในส่วนที่เป็นบ่อคำนวณโดยสมการ (3.2) จากสมการทั้งสองจะเห็นว่าค่าแถบช่องว่างพลังงานทั้งสองขึ้นกับอุณหภูมิ นำค่าแถบช่องว่างพลังงานทั้งสองที่ได้คำนวณหาค่าความสูงของบ่อศักย์ที่อยู่ในแถบนำ และแถบวาเลนซ์ สมการ (3.1) ซึ่งมีสัดส่วน 60:40 หรือค่าความสูงของบ่อศักย์ในแถบนำ ($V0_CB$) มีค่าเท่ากับ $0.6 \times \Delta E_g$ และค่าความสูงของบ่อศักย์ในแถบวาเลนซ์ ($V0_VB$) มีค่าเท่ากับ $0.4 \times \Delta E_g$ จะได้ค่าดังตารางที่ 4.4

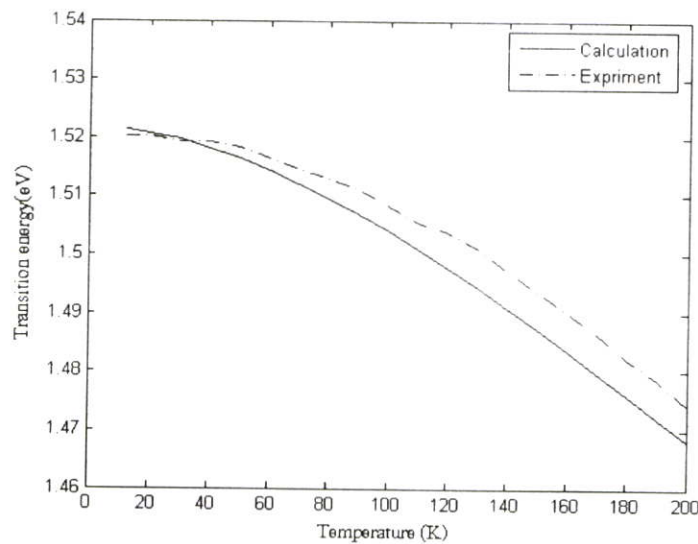
ตารางที่ 4.2 ค่าศักย์ของบ่อในแถบนำและแถบวาเลนซ์ที่คำนวณได้

from Passler's model					
T(K)	Eg_b(Passler)	Eg_w	Eg_b - Eg_w	V0_CB	V0_VB
12	1.88599	1.51864	0.36735	0.22041	0.14694
15	1.88599	1.51844	0.36754	0.22052	0.14702
20	1.88596	1.51803	0.36792	0.22075	0.14717
30	1.88583	1.51692	0.36891	0.22135	0.14756
40	1.88555	1.51546	0.37009	0.22205	0.14804
50	1.88502	1.51368	0.37134	0.22280	0.14853
60	1.88417	1.51163	0.37254	0.22352	0.14902
70	1.88294	1.50933	0.37360	0.22416	0.14944
80	1.88127	1.50682	0.37445	0.22467	0.14978
90	1.87916	1.50411	0.37505	0.22503	0.15002
100	1.87659	1.50122	0.37537	0.22522	0.15015
110	1.87360	1.49817	0.37543	0.22526	0.15017
120	1.87023	1.49498	0.37525	0.22515	0.15010
130	1.86652	1.49165	0.37487	0.22492	0.14995
140	1.86253	1.48820	0.37433	0.22460	0.14973
150	1.85831	1.48465	0.37366	0.22420	0.14946
160	1.85388	1.48099	0.37289	0.22374	0.14916
170	1.84929	1.47723	0.37206	0.22323	0.14882
180	1.84457	1.47340	0.37117	0.22270	0.14847
190	1.83973	1.46948	0.37026	0.22215	0.14810
200	1.83481	1.46549	0.36932	0.22159	0.14773

นำค่าความสูงของศักย์ในแต่ละแถบคำนวณหาค่าระดับพลังงานพื้นคือระดับพลังงาน eI และระดับพลังงาน hhI ในแถบนำ และแถบวาเลนซ์ตามลำดับ และนำค่าระดับพลังงานทั้งสองที่ได้คำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมนี้ ณ อุณหภูมิต่าง ๆ เปรียบเทียบกับค่าที่ได้จากการทดลอง [11] ได้ค่าดังตารางที่ 4.3 และนำค่าที่ได้นี้เขียนกราฟความสัมพันธ์จะได้ดังรูปที่ 4.6

ตารางที่ 4.3 ค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขและค่าที่ได้จากการทดลอง [11]

Transition energy calculate and experiment						
T(K)	e1	hh1	Eg(well)	transition Energy		
				คำนวณ	ทดลอง	ผลต่าง
12	0.00229323	0.00037466	1.51863967	1.5213075617	1.5202	0.001108
15	0.00229327	0.00037468	1.51844469	1.5211126415	1.5202	0.000913
20	0.00229333	0.00037473	1.51803482	1.5207028835	1.5202	0.000503
30	0.00229351	0.00037484	1.51692115	1.5195895046	1.5192	0.000390
40	0.00229372	0.00037497	1.51545574	1.5181244330	1.5192	-0.001076
50	0.00229394	0.00037512	1.51368012	1.5163491783	1.5183	-0.001951
60	0.00229416	0.00037525	1.51162955	1.5142989578	1.5165	-0.002201
70	0.00229435	0.00037537	1.50933412	1.5120038474	1.5146	-0.002596
80	0.00229450	0.00037547	1.50681972	1.5094896902	1.5128	-0.003310
90	0.00229461	0.00037554	1.50410867	1.5067788186	1.5110	-0.004221
100	0.00229466	0.00037557	1.50122039	1.5038906336	1.5082	-0.004309
110	0.00229468	0.00037558	1.49817182	1.5008420712	1.5055	-0.004658
120	0.00229464	0.00037556	1.49497778	1.4976479818	1.5037	-0.006052
130	0.00229458	0.00037552	1.49165135	1.4943214407	1.5009	-0.006579
140	0.00229448	0.00037546	1.48820407	1.4908740047	1.4973	-0.006426
150	0.00229436	0.00037538	1.48464619	1.4873159256	1.4937	-0.006384
160	0.00229422	0.00037529	1.48098681	1.4836563284	1.4902	-0.006544
170	0.00229407	0.00037520	1.47723409	1.4799033616	1.4866	-0.006697
180	0.00229391	0.00037510	1.47339531	1.4760643246	1.4822	-0.006136
190	0.00229375	0.00037499	1.46947703	1.4721457749	1.4787	-0.006554
200	0.00229358	0.00037489	1.46548515	1.4681536202	1.4743	-0.006146



รูปที่ 4.6 กราฟความสัมพันธ์ระหว่างอุณหภูมิและค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ได้จากการคำนวณโดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลข และค่าที่ได้จากการทดลอง [11]

สรุปผลการทดลอง

5.1 สรุปผลการทดลอง

ในการศึกษาวิจัยนี้เป็นการคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิ สำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัมโดยใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองที่เป็นปัญหาค่าขอบเขต (boundary value problem : BVP) คือ ปัญหาที่กำหนดเงื่อนไขที่ขอบมาให้ปัญหานั้นไม่มีวิธีการในการหาผลเฉลยหรือคำตอบโดยตรง ต้องทำการแปลงปัญหาค่าขอบเขตเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น (initial value problem : IVP) เสียก่อนแล้วจึงใช้เทคนิคในปัญหาเริ่มต้นหาค่าผลเฉลยของปัญหา ในการศึกษานี้จะทำการแปลงโดยใช้เทคนิคที่เรียกว่าวิธีการสุมยิง (shooting method) วิธีการนี้โดยทั่วไปจะเป็นการเดาหรือสมมติค่าผลเฉลยขึ้นมาค่าหนึ่งแล้วแทนค่าได้คำตอบตรงกับค่าเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดให้หรือไม่ หากไม่ตรงก็สมมติค่าคำตอบขึ้นใหม่และพิจารณาว่าค่าที่ได้เมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่สมมติก่อนหน้านี้เป็นค่าที่ลู่ออกเข้าหาเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดหรือไม่ หากไม่ลู่ออกแสดงว่าค่าที่สมมติขึ้นจะต้องมีการเปลี่ยนแปลงไปทางด้านตรงข้าม กระทำซ้ำเช่นนี้ไปเรื่อย ๆ จนกระทั่งได้คำตอบ

เนื่องจากปัญหาที่ศึกษานี้ไม่สามารถสมมติค่าผลเฉลยได้ เนื่องจากในสมการชโรดิงเงอร์ ค่าที่ต้องการได้คือค่าพลังงาน (E) ซึ่งเป็นค่าคงที่ ที่ทำให้ที่ค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นจริงที่ขอบเขต คือมีค่าเป็นศูนย์ โดยที่ค่าพลังงานนี้จะมีค่าเฉพาะสำหรับสถานะหนึ่ง ๆ ในกรณีที่ทำการศึกษานี้ ต้องการได้ค่าพลังงานที่สถานะพื้น

ดังนั้นในการศึกษาจึงต้องหาวิธีการในการยิงสุม หรือการสมมติค่าพลังงานขึ้นมาและทำการหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์หรือค่าฟังก์ชันคลื่นจนกระทั่งได้ค่าพลังงานนี้ โดยเริ่มศึกษาจากปัญหาที่ง่ายและทราบคำตอบก่อนคือการศึกษาการหาค่าพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่ลึกอนันต์

ในกรณีนี้ค่าศักย์ที่ขอบบ่อมีค่าสูงมากทำให้ฟังก์ชันคลื่นไม่สามารถผ่านขอบบ่อออกสู่ภายนอกได้ การศึกษาได้ใช้วิธีการยิงสุมค่าพลังงานและทำการคำนวณค่าฟังก์ชันคลื่นออกมาจากการศึกษานี้จะได้ผลดังรูปที่ 4.1 และรูปที่ 4.2 จะเห็นว่าค่าพลังงานที่อยู่ระหว่าง 0.9 ถึง 1.0 meV จะมีค่าหนึ่งที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่าเป็นศูนย์ ใช้วิธีการแบ่งครึ่งช่วงในการหาค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริง และแทนค่าพลังงานที่ได้นี้ลงในสมการชโรดิงเงอร์แล้วทำการหาค่าผลเฉลยหรือค่าฟังก์ชันคลื่นจะได้ดังรูปที่ 4.3 จะเห็นว่าค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่ามากที่สุดที่บริเวณกึ่งกลางบ่อ และมีค่าลดลงเมื่อระยะห่างจากจุดกึ่งกลางบ่อเพิ่มขึ้นและมีค่าเป็นศูนย์ที่ขอบ

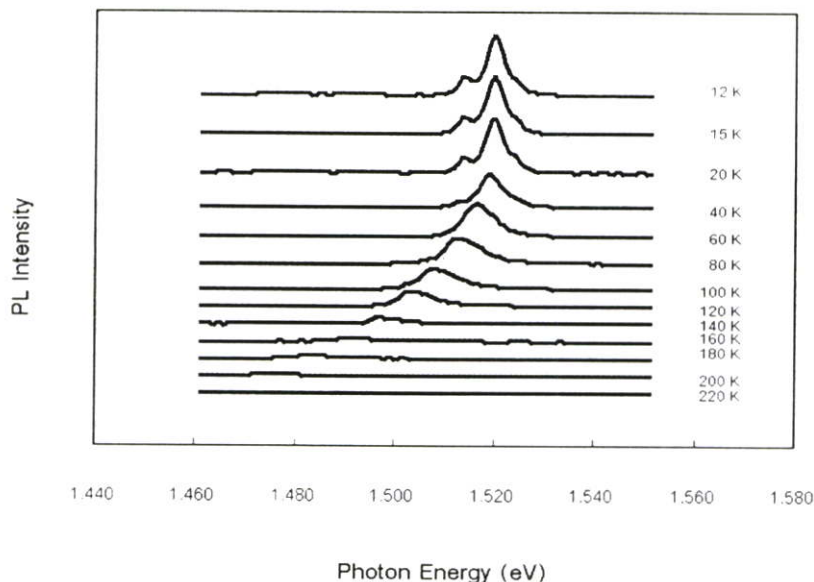
บ่อซึ่งตรงตามเงื่อนไขขอบเขตของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่มีฟังก์ชันคลื่นแบบคู่ (even parity) ที่สถานะพื้นหรือที่สถานะ $n=1$

จากการศึกษาในกรณีบ่อศักย์สูงอนันต์ในตอนแรกแล้ว ทำการศึกษาเพื่อแก้ปัญหาหาค่าพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่มีความลึกจำกัด ซึ่งในกรณีนี้ความซับซ้อนของปัญหามีเพิ่มขึ้น คือค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบบ่อมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ แต่จะมีค่าเป็นศูนย์ที่ขอบของกำแพง และต้องมีค่าความต่อเนื่องที่ขอบบ่อด้วย ในการศึกษาโดยใช้วิธียิงส้อมจะได้ค่าช่วงของพลังงาน (E_1, E_2) ที่มีค่าพลังงาน (E) ค่าหนึ่งที่ทำให้เงื่อนไขต่าง ๆ เป็นจริง คือค่าพลังงานที่ทำให้ผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ หรือค่าฟังก์ชันคลื่นตรงตามเงื่อนไข รูปที่ 4.4 แสดงค่าพลังงานที่ส้อมและผลเฉลยหรือฟังก์ชันคลื่นที่ได้ รูปที่ 4.5 แสดงค่าฟังก์ชันคลื่น ณ ตำแหน่งต่าง ๆ จากจุดกึ่งกลางบ่อถึงของกำแพงจะเห็นว่าค่าฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าสูงสุดที่จุดกึ่งกลางบ่อ ที่ขอบบ่อค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่าไม่เท่ากับศูนย์และมีความต่อเนื่อง และที่ขอบกำแพงค่าฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าเท่ากับศูนย์ และในรูปที่ 4.5 นี้ยังเปรียบเทียบค่าฟังก์ชันคลื่นที่ค่าพลังงานที่จุดปลายช่วง (E_1, E_2) กับค่าพลังงาน (E) ที่สถานะพื้น ซึ่งตรงกับเงื่อนไข

ในการศึกษาดอนสุดท้ายคือการหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาเซลอร์ในการหาค่าแถบช่องว่างพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิของส่วนที่เป็นกำแพง และนำวิธีการหาค่าระดับพลังงานในบ่อศักย์ลึกจำกัดมาประยุกต์ใช้หาค่าพลังงานสถานะพื้นในแถบนำ และแถบวาเลนซ์ คือค่า e_1 และ hh_1 ตามลำดับ

โครงสร้างบ่อควอนตัมที่ใช้คือ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As/GaAs$ โดยการแทนค่า m ในสมการชโรดิงเงอร์ด้วยค่ามวลยังผลของอิเล็กตรอนในแถบนำ ($m_e^*=0.067m_0$) และค่ามวลยังผลของโฮลในแถบวาเลนซ์ ($m_{hh}^*=0.45m_0$) ส่วนค่าศักย์ (V) ของบ่อทั้งในแถบนำและแถบวาเลนซ์หาจากสมการ (3.13) และค่า band offset จากรูปที่ 3.8 ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

ผลที่ได้จากการคำนวณค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง [11] แสดงดังรูปที่ 4.6 จะเห็นว่าค่าทั้งสองจะมีแนวโน้มไปในทิศทางเดียวกัน แต่ในช่วงอุณหภูมิน้อยกว่า 40K จะเห็นว่าค่าทั้งสองมีค่าใกล้เคียงกันมาก และที่อุณหภูมิสูงกว่า 40K จะมีค่าแตกต่างกันอย่างเห็นได้ชัด ที่เป็นเช่นนี้อาจเนื่องจากถ้าพิจารณารูปที่ 5.1 ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากการทดลองจะเห็นว่าที่อุณหภูมิดังกล่าวจะมีขดคลื่น 2 ขด ซึ่งก็คือค่าพลังงานที่ได้จากส่วนที่เป็นบ่อและส่วนที่เป็นกำแพง แต่ถ้าอุณหภูมิตั้งแต่ 40K ขึ้นไปจะมีเพียงขดเดียวซึ่งก็น่าจะเป็นส่วนที่เป็นค่าพลังงานที่เกิดจากส่วนที่เป็นกำแพง



รูปที่ 5.1 สเปกตรัมโฟโตลูมิเนสเซนซ์ของ $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As} / \text{GaAs}$ (SQW) ที่อุณหภูมิต่างๆ [11]

สรุปได้ว่าการหาการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขแก้ปัญหามการชโรดิงเจอร์ ซึ่งเป็นปัญหาค่าขอบเขต โดยการใช้วิธีการยิงสุ่มหาค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขค่าขอบเขตเป็นจริงสามารถกระทำได้ หากทราบค่าพารามิเตอร์ของวัสดุที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัม

5.2 ข้อเสนอแนะ

1. ในการศึกษานี้หากมีข้อมูลในการทดลองที่น่าเชื่อถือได้มาเปรียบเทียบจะทำให้ทราบชัดเจนว่าผลที่คำนวณได้โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขมีความถูกต้องมากน้อยเพียงใด
2. ในการแก้ปัญหามการชโรดิงเจอร์ซึ่งเป็นปัญหาค่าขอบเขต สำหรับการหาการระดับพลังงานที่สถานะสูงกว่าสถานะพื้น โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขด้วยวิธีการยิงสุ่มเพื่อหาการระดับพลังงานที่สถานะสูงกว่าสถานะพื้นสามารถกระทำได้
3. สามารถหาการระดับพลังงานในกรณีที่เป็นสถานะคี่ (odd parity) ได้โดยการพิจารณาหาค่าเริ่มต้นใหม่แล้วใช้วิธีการเดียวกันกับกรณีที่เป็นสถานะคู่
4. สามารถหาการเปลี่ยนระดับพลังงานของสารที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัมได้หากทราบค่าพารามิเตอร์ เช่น ค่ามวลยังผล (effective mass) ,ค่า band offset ,ค่าแถบช่องว่างพลังงาน, ณ อุณหภูมิต่าง ๆ
5. สามารถนำวิธีการนี้ไปสุ่มหาค่าพารามิเตอร์ตัวอื่น ๆ ได้ เช่นค่ามวลยังผล, ค่า band offset ทั้งนี้ทำได้โดยการเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่น่าเชื่อถือได้

เอกสารอ้างอิง

- [1] Hideo Itoh, Mitsuaki Shimizu, Mutsuo Ogura, Seiji Mukai and Masanobu Watanabe, **Optoelectronic fuzzy interence architecture using beam-steering vertical cavity surface-emitting laser diodes**, *J. Opt. A: Pure Appl. Opt.*, **1**, 1991, 338-340.
- [2] M. S. Ünlü, M. Gökkavas, B. M. Onat, E. Ata, E. Özby, R. P. Mirin, K. J. Knopp, K. A. Bertness and D. H. Chritensen, **High bandwidth-efficiency resonant cavity enhanced Schottky photodiodes for 800-850 nm wavelength operation**, *Appl. Phys. Lett.*, **72**, 1998, 2727-2729.
- [3] C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri, H. Page, and J. Nanle, **Low-loss Al-free waveguides for unipolar semiconductor lasers**, *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 1999, 3911-3913.
- [4] A. J. Steckl, P. Chen, Xuelong Cao, Howard E. Jackson, M. Kumar and J. T. Boyd, **GaAs quantum well distributed Bragg reflection laser with AlGaAs/GaAs superlattice gratings fabricated by focused ion beam mixing**, *Appl. Phys. Lett.*, **67**, 1995, 179-181.
- [5] Z. Hang, D. Yan and F.H. Pollak, **Temperature dependence of the direct band gap of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x=0.06$ and 0.15)**, *Phys. Rev. B*, **44**, 1991, 10546-10550 .
- [6] S. Biernacki, U. Scherz, and B.K. Meyer, **Temperature dependence of optical transitions between electronic energy levels in semiconductors**, *Phys. Rev. B*, **49**, 1994, 4501-4510.
- [8] B. Lambert, A. Le Corre, V. Drouot, H.L. Haridon, S. Loualiche, **High photoluminescence efficiency of InAs/InP self-assembled quantum dots emitting at 1.5-1.6 μm** , *Semicond. Sci. Tech.* **13**, 1998, 143-145.
- [9] S.A.Lourenço et al, **Temperature Dependence of Optical Transitions in AlGaAs**, *Journal of Applied Physics*, Vol.89, No.11, 2001, 6159-6164.
- [10] S.A.Lourenço et al, **Thermal Expansion Contribution to the Temperature Dependence of Excitonic Transition in GaAs and AlGaAs**, *Brazilian Journal of Physics*, Vol.34, No.2A, 2004, 517-525.
- [11] ชวรัตน์ ศิริวงษ์ โชคชัย พุทธรักษา เอกชัย จงเสรีเจริญ, **การศึกษาผลของอุณหภูมิและแหล่งกำเนิดแสงต่อสเปกตรัมโฟโตลูมิเนสเซนส์ของบ่อนควอนตัม**, นครปฐม, มหาวิทยาลัยศิลปากร, 2547.

- [12] ศุติต เครื่องาม, **สิ่งประดิษฐ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์ เล่ม 1** , สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, กรุงเทพมหานคร, 2542
- [13] ศุติต เครื่องาม, **สิ่งประดิษฐ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์ เล่ม 2** , สำนักพิมพ์จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย, กรุงเทพมหานคร, 2542
- [14] ศุติต เครื่องาม, **โซลิตสเดทฟิสิกส์** , ซีเอ็ดยูเคชั่น, กรุงเทพมหานคร 2521
- [15] Jasprit Singh, **Semiconductor Devices : An Introduction**. McGraw-Hill, 1994.
- [16] S.M.SZE, **Semiconductor Devices Physics and Technology** , New York, John Wiley&Son Inc., 2002.
- [17] J, Singh, **Physics of Semiconductors and their Heterostructures**, Singapore, McGraw-Hill, 1993.
- [18] Bar-Lav A., **Semiconductors and Electronic Devices**, UK, Partice Hall International Inc., 1993.
- [19] C. Kittel, **Introduction to Solid State Physics**, USA, John Wiley & Sons, Inc, 2005.
- [20] John Singleton, **Band Theory and Electronic Properties of Solids**, New York, Oxford University Press Inc., 2001.
- [21] B.R. Nag, **Physics of Quantum Well Device**, USA, Kluwer Academic, 2000.
- [22] Shyh Wang, **Fundamentals of Semiconductor Theory and Device Physics**, USA, Prentice-Hall International Inc., 1989.
- [23] J.G.Solé, L.E.Busá, D.Jaque, **An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids**, England, John Wiley & Sons Ltd., 2005.
- [24] D.R.Vij, **Luminescence of Solids**, New York, Plenum Press, 1998.
- [25] D. Hanselman, B.Littlefield, **Mastering MATLAB 6**, USA, Pearson Education International, 2001.
- [26] P.Marchand, O.T.Holland, **Graphics and with MATLAB**, USA, Chapmand & Hall/CRC, 2003.
- [27] S.Nakamura, **Numerical Analysis and Graphic Visualization with MATLAB**, USA, Prentice Hall PTR, 2002.

ภาคผนวก

ภาคผนวก ก.

โปรแกรมสำหรับบ่อศักย์สูงอนันต์ (infinite potential well)

ภาคผนวก ข.

โปรแกรมสำหรับบ่อศักย์สูงจำกัด (finite potential well)

ฟังก์ชันการคำนวณค่าระดับพลังงานพื้นในบ่อศักย์สงจำกัด

[illegible]

ภาคผนวก ค.

โปรแกรมสำหรับการคำนวณค่าการเปลี่ยนระดับพลังงาน (transition energy)


```

%***** Show output *****
disp('')
disp('')
disp('=====')
disp(' from Passler''s model')
disp('=====')
disp(' T(K)  Eg_b(Passler)  Eg_w  Eg_b - Eg_w  V0_CB  V0_VB')
disp('=====')
for t=1:length(Temperature)
    fprintf('%4.0f %8.5f %8.5f %8.5f %8.5f %8.5f\n',...
        Temperature(t),Epas(t),Ewell(t),C(t),VoCB(t),VoVB(t))
end
disp('=====')
disp('')
disp('')
disp('=====')
disp(' Transition energy calculate and expriment')
disp('=====')
disp(' T(K)      e1      hh1      Eg(well) transition E(cal) transition')
disp(' E(Exp.)')
disp('=====')

for t=1:length(Temperature)
    fprintf('%4.0f %10.8f %10.8f %10.8f %13.10f %8.4f %10.6f\n',...
        Temperature(t),e1(t),hh1(t),Ewell(t),...
        transition_energy(t),Data_Experiment(t),...
        transition_energy(t)-Data_Experiment(t))
end
disp('=====')
plot(Temperature,transition_energy,'k',Temperature,DAEX,'k-.')
xlabel('Temperature (K)','FontName','Angsana News','fontsize',16)
ylabel('Transition energy(eV)','FontName','Angsana News','fontsize',16)
legend('Calculation','Expriment');
%
% end main for calcaultion transition energy
%
```

ฟังก์ชันคำนวณค่าช่องว่างพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิในส่วนที่เป็นบ่อ

```

function y = Eg_well(T)
y = 1.519-((5.405e-4)*(T^2))/(T+204);
```

ฟังก์ชันคำนวณค่าช่องว่างพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิในส่วนที่เป็นกำแพง โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาสเตอร์

```

function y=passler(mol,T)
x = mol;
p = 3.5;
Eg = 1.517 + 1.23*x; % in eV
alfa = (4.9 + 0.7*x + 3.7*x^2)*1e-4; % in eV/K
theta = 202 + 5*x + 260*x^2; % in K
A1 = (alfa*theta)/2;
A2 = (2*T/theta)^p;
A3 = (1+A2)^(1/p);
y = Eg - A1*(A3-1);
```


ประวัติผู้เขียน

นายบรรจง จักรกลจันทร์ ปัจจุบันรับราชการ ในตำแหน่งนักวิทยาศาสตร์ สังกัดภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยบูรพา เกิดเมื่อวันที่ 25 กันยายน 2504 ที่อำเภอเมือง จังหวัดนครนายก สำเร็จชั้นมัธยมศึกษาจากโรงเรียนนครนายกวิทยาคม อำเภอเมือง จังหวัดนครนายก ในปีการศึกษา 2522 สำเร็จการศึกษาปริญญาตรีวิทยาศาสตร์บัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ จาก ภาควิชาฟิสิกส์ คณะวิทยาศาสตร์ มหาวิทยาลัยศรีนครินทรวิโรฒ วิทยาเขตบางแสน (มหาวิทยาลัยบูรพาในปัจจุบัน) อำเภอเมือง จังหวัดชลบุรี ปีการศึกษา 2526 และเข้าศึกษาต่อในระดับมหาบัณฑิต สาขาวิชาฟิสิกส์ประยุกต์ ภาควิชาฟิสิกส์ประยุกต์ คณะวิทยาศาสตร์ สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง