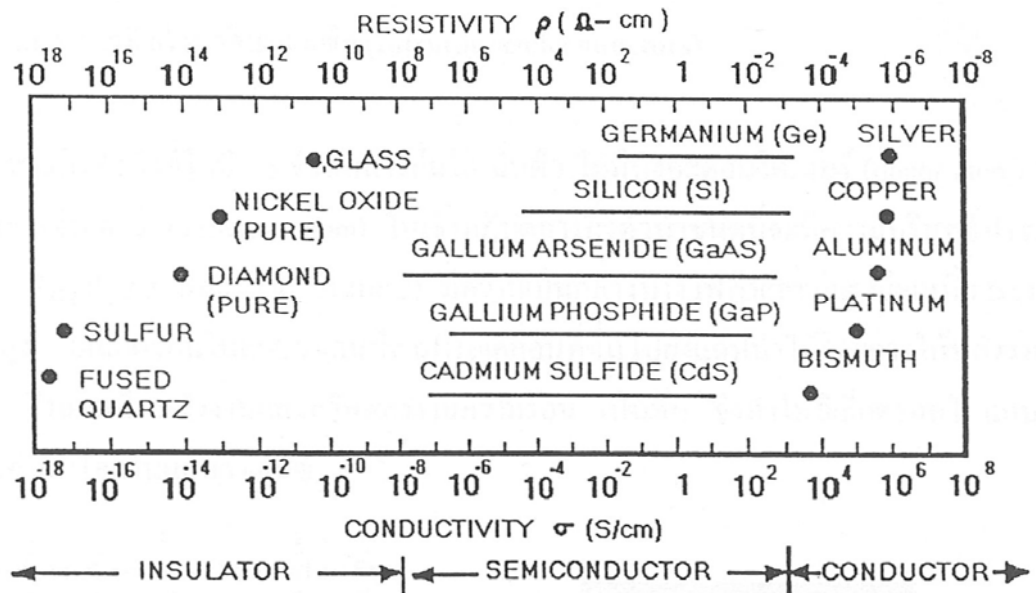


บทที่ 2

ทฤษฎีและหลักการ

2.1 วัสดุสารกึ่งตัวนำ

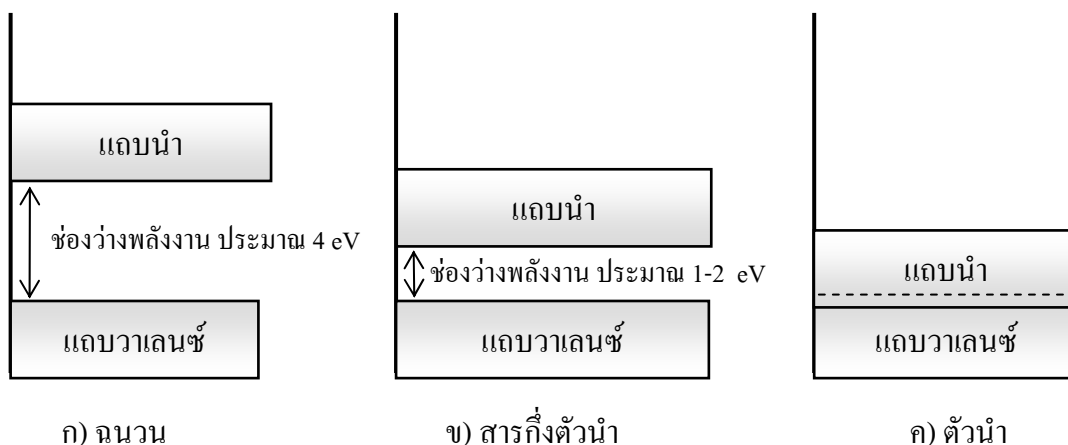
การแบ่งประเภทของวัสดุที่เป็นของแข็งโดยใช้สภาพนำไฟฟ้า σ (หรือเทียบได้กับสภาพต้านทานไฟฟ้า $\rho \equiv 1/\sigma$) เป็นตัวบ่งชี้สามารถแบ่งได้เป็น 3 ประเภท คือ ฉนวน สารกึ่งตัวนำ และตัวนำ โดยที่วัสดุที่เป็นฉนวนจะมีสภาพนำไฟฟ้าอยู่ที่ช่วงประมาณ $10^{-18} - 10^{-8}$ S/cm วัสดุที่เป็นตัวนำจะมีสภาพนำไฟฟ้าอยู่ที่ช่วงประมาณมากกว่า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

การที่วัสดุที่เป็นของแข็งมีสภาพนำไฟฟ้าที่แตกต่างกันเนื่องมาจากภายในของแข็งประกอบด้วยอะตอมจำนวนมากและอะตอมเหล่านี้จะอยู่ชิดติดกัน 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 แสดงบางส่วนของตารางธาตุที่เกี่ยวข้องกับสารกึ่งตัวนำ

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

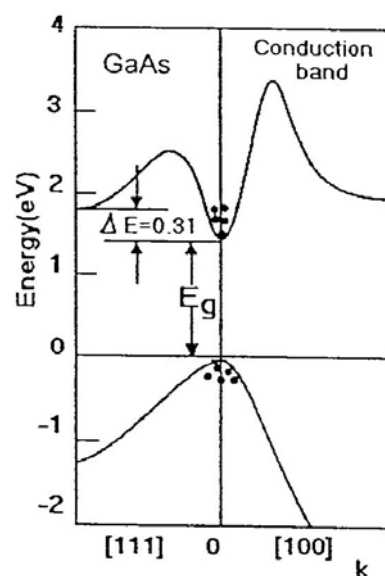
ในการแบ่งประเภทของสารกึ่งตัวนำอาจทำได้โดยการแบ่งตามลักษณะของช่องว่างพลังงานของสารกึ่งตัวนำซึ่งจะแบ่งได้ 2 แบบคือ

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 Arsenide
	GaSb	Gallium antimonide
	InP	Indium phosphide
	InAs	Indium arsenide
	InSb	Indium antimonide
II-VI.....	ZnO	Zinc 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)

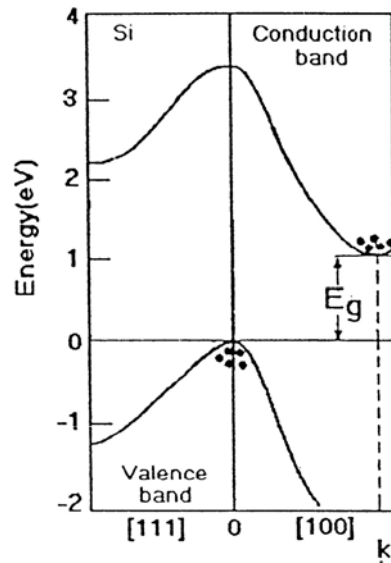
สารกึ่งตัวนำประเภทนี้ ถ้าพิจารณาจากแผนภาพความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานกับโมเมนตัม (E-k diagram) ตามรูปที่ 2.3 จะเห็นว่าระดับพลังงานต่ำสุดของแถบนำ (conduction band) จะมีค่าโมเมนตัมตรงกับระดับพลังงานสูงสุดของแถบวาเลนซ์ (valence band) ระยะห่างระหว่างระดับพลังงานทั้งสองจะมีค่าเท่ากับช่องว่างแถบพลังงาน ดังนั้นถ้าต้องการให้อิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์เคลื่อนที่ไปยังแถบนำต้องใ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



รูปที่ 2.3 ความสัมพันธ์ระหว่างโมเมนตัมและพลังงานของ แกลเลียมอาร์เซไนด์

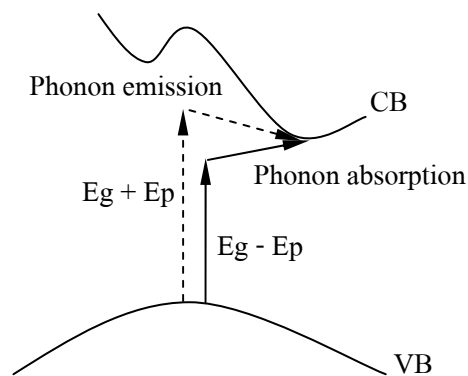
2.1.3.2 สารกึ่งตัวนำที่มีแถบช่องว่างพลังงานแบบอ้อม (indirect band gap)

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

$$h\nu = E_g - E_p$$

เมื่อ

$h\nu$ = พลังงานที่ใช้ในการกระตุ้นอิเล็กตรอนจากแถบวาเลนซ์ไปยังแถบนำ

E_g = พลังงานแถบช่องว่าง

E_p = พลังงานโฟนอน

2.2 สารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม (quantum well semiconductors)

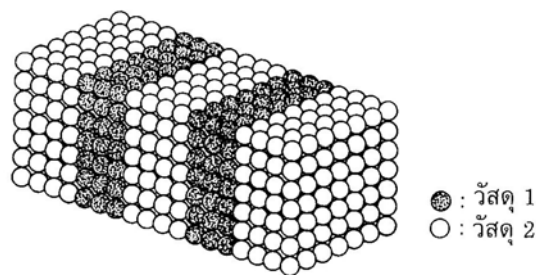
ในการศึกษาสิ่งประดิษฐ์ออปโตอิเล็กทรอนิกส์พบว่ายังมีสิ่งประดิษฐ์ที่มีความสำคัญมากอีกชนิดหนึ่งได้แก่ สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม หรือบางครั้งเรียกว่าสิ่งประดิษฐ์ซูเปอร์แลตทิซ (superlattice device) พบว่ามีปรากฏการณ์ทางฟิสิกส์ ทั้งทางไฟฟ้าและทางแสง เช่น มีการเกิดแถบพลังงานย่อย (subbands) และเกิดระดับพลังงานควอนไทซ์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

ตาราง 2.3 ตัวอย่างสารกึ่งตัวนำที่นิยมประดิษฐ์เป็นสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัม

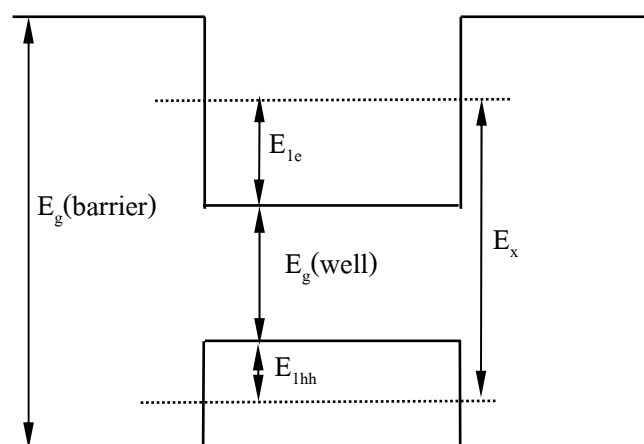
ตระกูล	สารกึ่งตัวนำ	
III-V	GaAs / GaAlAs	GaAs / AlAs
	InP / InGaAsP	GaAs / InGaAs*
	GaAs / InAs*	GaP / GaAsP*
	GaAs / GaAsP*	InAs / GaSb*
IV	Si / SiGe*	
II-VI	CdTe / HgTe*	ZnSe / ZnTe*
		ZnS / ZnSe*
Amorphous	a-SiH/a-SiC:H	a-Si:H/a-SiN:H
	a-SiC:H/a-SiC:H	a-Si:H/a-SiGe:H
		a-SiC:H/a-SiN:H
หมายเหตุ * เป็นสารกึ่งตัวนำบ่อควอนตัมแบบสเตรน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



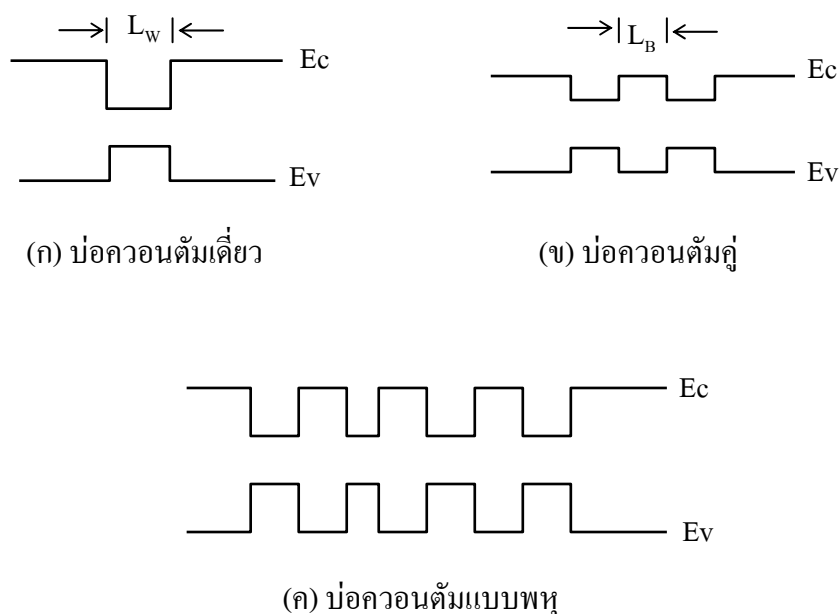
รูปที่ 2.6 ตัวอย่างการเรียงตัวของอะตอมในบ่อควอนตัม



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 หรือมัลติควอนตัมเวลด์ (multi-quantum well)

ประกอบด้วยชั้นก้ำแพงและชั้นบ่อจำนวนมาก แสดงดังรูป 2.8(ค)

2.2.2.4 บ่อควอนตัมแบบอื่น ๆ

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

ตาราง 2.4 ปรากฏการณ์ต่าง ๆ ที่เกิดขึ้นในสารกึ่งตัวนำที่มีโครงสร้างแบบบ่อและการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์อิเล็กทรอนิกส์

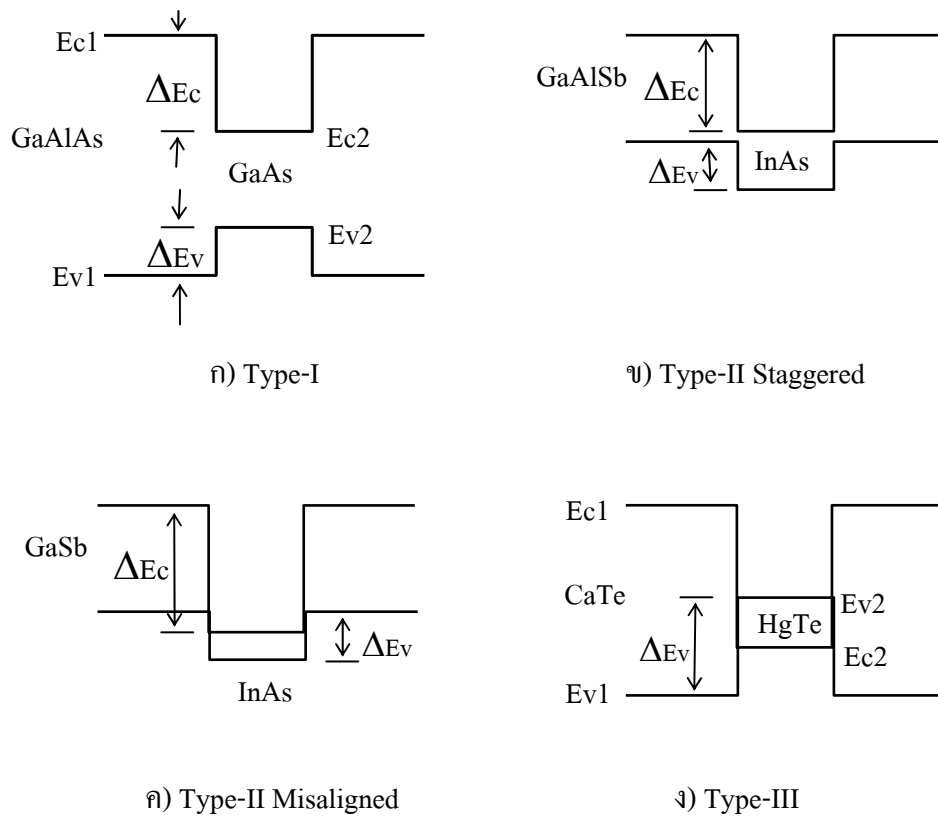
ประเภท	ตัวอย่างการประยุกต์ใช้งานเป็นสิ่งประดิษฐ์
คุณสมบัติทางไฟฟ้า (Quantized states, sub-bands, tunneling, quantum sized effect)	SDHT (Selectively Doped Heterojunction Transistor) TEGFET (Two-dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) HEMT (High Electron Mobility Transistor) MODFET (Modulation 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 Photomultiplier
คุณสมบัติทางแม่เหล็ก (Shubnikov-de Haas Effect)	Quantum Hall Device

2.2.3 แบบของสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม (type of quantum well devices)

เนื่องจากตำแหน่งของแถบนำของชั้นกึ่งตัวนำและชั้นบ่ออาจจะเหลื่อมกันบ้าง ดังนั้นจึงสามารถแบ่งสิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมตามรูปร่างของแถบพลังงานได้เป็น 3 แบบคือ

2.2.3.1 สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมแบบที่ I (type I of quantum well devices)

ได้แก่สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่มีค่าช่องพลังงานของส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_w) น้อยกว่าและอยู่ในช่องว่างพลังงานของกึ่งตัวนำ (ΔE_b) แสดงดังรูปที่ 2.9 (ก) ซึ่งเป็นกรณีที่มีการศึกษาวิจัยมากที่สุดรวมทั้งการศึกษาขั้นนี้ 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)

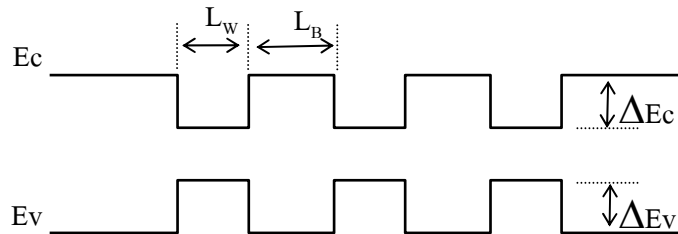
ได้แก่สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัมที่มีผลต่างของแถบนำของส่วนที่เป็นก้ำแพงและส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_c) มากกว่าผลต่างของแถบวาเลนซ์ของส่วนที่เป็นก้ำแพงและส่วนที่เป็นบ่อ (ΔE_v) และค่าแถบวาเลนซ์ส่วนที่เป็นบ่ออยู่ต่ำกว่าค่าแถบวาเลนซ์ของส่วนที่เป็นก้ำแพง แสดงดังรูปที่ 2.9 (ข,ค) เช่น สิ่งประดิษฐ์บ่อควอนตัม InAs/GaSb และ 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 บ่อขึ้นไปควรมีชั้นกำแพงที่อยู่ภายในมีความหนาเท่าไรที่จะไม่ทำให้การซึมผ่านของคลื่นนิ่งมีความต่อเนื่องทุกบ่อ
4. ความหนาของชั้นบ่อ L_w คือความหนาของส่วนของสารที่มีแถบพลังงานน้อยให้มีความหนาที่เหมาะสมที่จะแสดงคุณสมบัติทางแสงได้

2.3 การคำนวณหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์

พิจารณาสมการชโรดิงเงอร์ (Schrodinger's equation)

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

จัดรูปสมการใหม่ได้เป็น

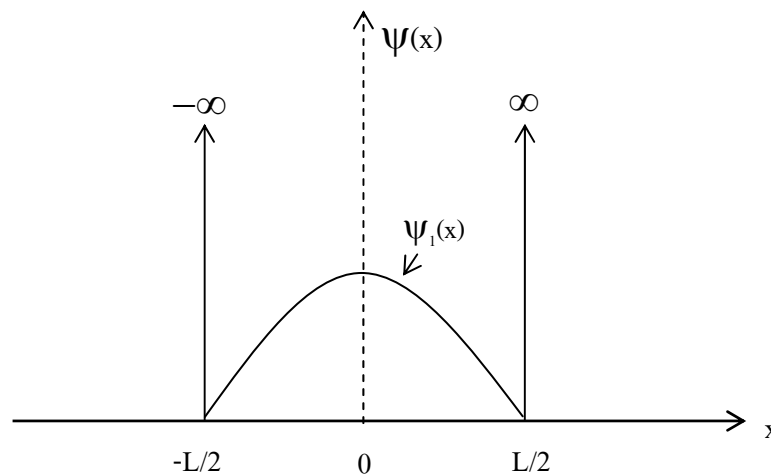
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V(x)-E)\psi(x) \quad (2.2)$$

จะเห็นว่าสามารถแก้สมการเพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ภายในบ่อศักย์ 1 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

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

จะได้ว่าในกรณีที่เป็นระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้น ($n=1$) 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

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

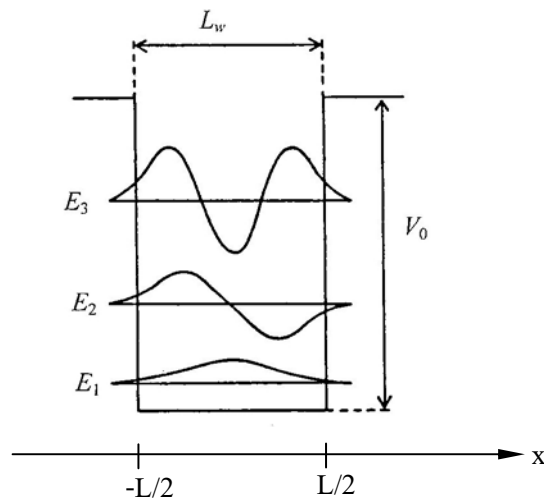
หรือ

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad (2.11)$$

หรือระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นของบ่อศักย์สี่กอนันต์ คือ

$$E_1 = \frac{h^2}{8mL^2} \quad (2.12)$$

2.3.1.2 บ่อศักย์สี่กจำกัด (finite potential well)



รูปที่ 2.12 แสดงบ่อควอนตัมที่มีกำแพงศักย์จำกัดค่า V_0

พิจารณาจากรูป 2.12 จะได้ความสัมพันธ์ของศักย์ของบ่อศักย์กับระยะทางตามแนวแกน x คือ

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

ดังนั้นจากสมการชโรดิงเงอร์จะได้ความสัมพันธ์เป็น

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

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

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

นั่นคือการหาฟังก์ชันคลื่นที่เป็นผลเฉลยจะแบ่งพิจารณาเป็น 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

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

$$\psi(x) = D \exp(-\kappa x) \quad \text{เมื่อ } L/2 < x$$

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 $n=2,4,6,\dots$ ในกรณีนี้จะพิจารณาหาค่าระดับพลังงานที่สถานะพื้น ($n=1$) 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) หาสสมการ (2.27) ได้

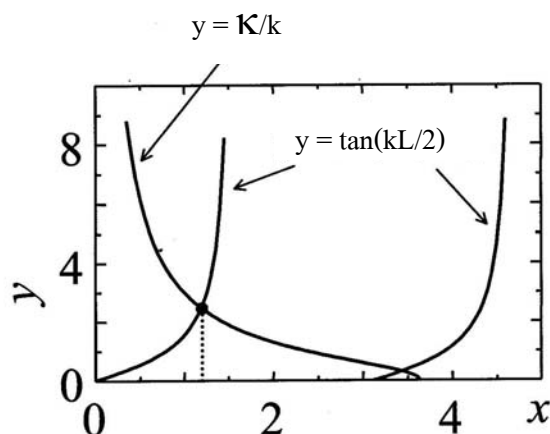
$$\tan\left(k \frac{L}{2}\right) = \frac{\kappa}{k} \quad (2.28)$$

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 ($E_{e1}, E_{e2}, \dots$) 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)

ปัญหาในงานวิทยาศาสตร์ที่ส่วนใหญ่อยู่ในรูปสมการเชิงอนุพันธ์สามารถหาผลเฉลยแน่นอนตรง (exact solution) ได้โดยวิธีการทางคณิตศาสตร์ แต่หากปัญหานั้นมีความซับซ้อนไม่สามารถทำการหาผลเฉลยแน่นอนตรงได้โดยง่าย จะใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขในการหาผลเฉลยโดยประมาณได้ ค่าผลเฉลยที่ประมาณได้จะมีความถูกต้องมากน้อยเพียงใดขึ้นอยู่กับวิธีที่ใช้ซึ่งมีหลายวิธีการให้เลือกใช้ตามความเหมาะสม วิธีการแก้ปัญหานั้น ส่วนใหญ่เป็นวิธีการที่ใช้ในการแก้ปัญหาค่าเริ่มต้น (initial value problem: IVP) แต่ปัญหาในงานวิทยาศาสตร์ส่วนใหญ่เป็นปัญหาที่กำหนดค่าที่ขอบของปัญหามาให้เพื่อหาผลเฉลยเรียกปัญหแบบนี้ว่าปัญหาค่าขอบเขต (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

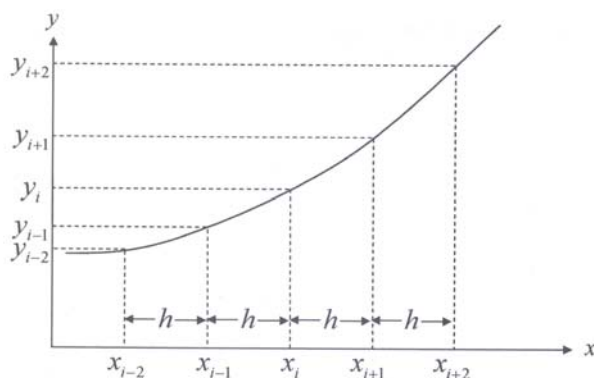
$$y'' = f(x, y, y') \quad , y(a) = y_1 \text{ และ } y'(a) = \beta \quad (2.31)$$

ในการแก้ปัญหตามสมการ (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

วิธีการของวิธีผลต่างสี่เหลี่ยมนี้คือการแทนเทอมอนุพันธ์ 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

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

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

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

สูตรผลต่างสี่แบบเนื่องเป็นการประมาณค่าอนุพันธ์อันดับหนึ่งโดยการคำนวณค่าความชันของเส้นที่เชื่อมจุด 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) คือสมการหาค่าผลเฉลยโดยประมาณของค่าอนุพันธ์อันดับสองโดยวิธีผลต่างสี่แบบเนื่อง (finite difference method)

2.3.2.2 ปัญหาค่าขอบเขต (Boundary value problems : BVP)

ปัญหาค่าขอบเขตคือปัญหาที่กำหนดค่าสมการหรือปัญหามาให้พร้อมทั้งค่าที่ขอบเขตทั้งสองของปัญหานั้น มีรูปแบบ คือ

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

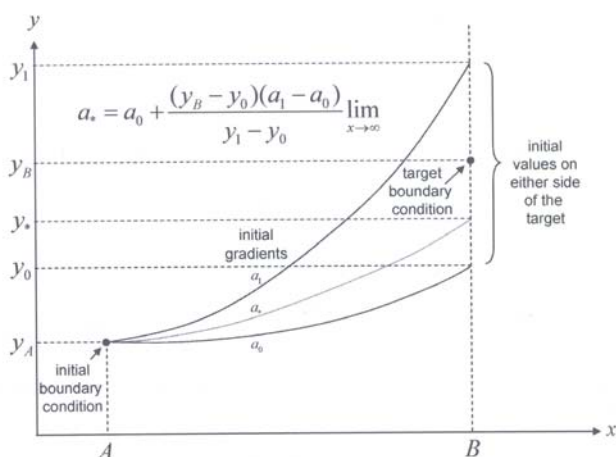
ในการแก้ปัญหาค่าขอบเขตที่มีรูปแบบเป็นดังนี้ไม่สามารถหาผลเฉลยได้โดยตรง วิธีการแก้ปัญหานี้ส่วนใหญ่ต้องทำการเปลี่ยนเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับหนึ่ง 2 สมการ ที่อยู่ในรูปของปัญหาค่าเริ่มต้นเสียก่อน คือ อยู่ในรูปแบบปัญหาค่าเริ่มต้น คือ

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

นั่นคือต้องทำการหาค่าอนุพันธ์ของจุดเริ่มต้น คือ β ให้ได้เสียก่อนแล้วจึงทำการแก้ปัญหาโดยวิธีการหาผลเฉลยปัญหาค่าเริ่มต้น วิธีการหาค่าอนุพันธ์ของจุดเริ่มต้นสามารถทำได้โดยใช้วิธีการยิงเป้า (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

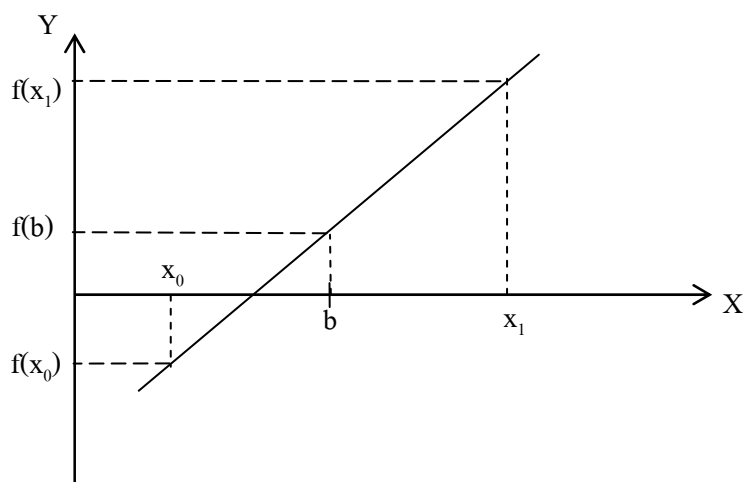
แสดงว่าอนุพันธ์ที่เป็นค่าเงื่อนไขเริ่มต้นจริง ๆ, a , อยู่ระหว่างค่าอนุพันธ์ที่สมมุติขึ้นคือ a_0 และ a_1 วิธีการหาค่าเงื่อนไขเริ่มต้นจริงที่ทำให้ค่าขอบเขตที่กำหนดมาให้เป็นจริงคือ $y(B) = a$ ทำได้โดยวิธีการหารากหรือคำตอบซึ่งมีหลายวิธี แต่ในกรณีนี้เป็นกรณีที่ทราบจุดปลาย 2 ทั้งสองและค่ารากอยู่ระหว่างจุดปลายทั้งสองนี้

2.3.2.2.2 วิธีการหารากสมการ (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 เนื่องจากเป็นวิธีที่สอดคล้องกับเงื่อนไขที่มีคือทราบค่าจุดปลายทั้งสองด้านและค่าความชันน่าจะเป็นค่าเดียวกันตลอดทั้งช่วงนี้ 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 จะได้ค่าเข้าหารากของสมการ 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)