

บทที่ 3

ขั้นตอนการดำเนินงานวิจัย

3.1 การวิเคราะห์และแนวทางในการแก้ปัญหา

ในการหาค่าการส่งผ่านพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมนั้นต้องทำการหาค่าระดับพลังงานสถานะพื้นของอิเล็กตรอน $e1$ ในแถบนำ และระดับพลังงานสถานะพื้นของโฮล $hh1$ ในแถบวาเลนซ์ การหาระดับพลังงานทั้งสองนี้มีพื้นฐานเช่นเดียวกับการหาระดับพลังงานย่อย E_n ในบ่อศักย์ (energy levels in potential well) ที่มีความลึกจำกัด (finite potential well) โดยการหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ คือ

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

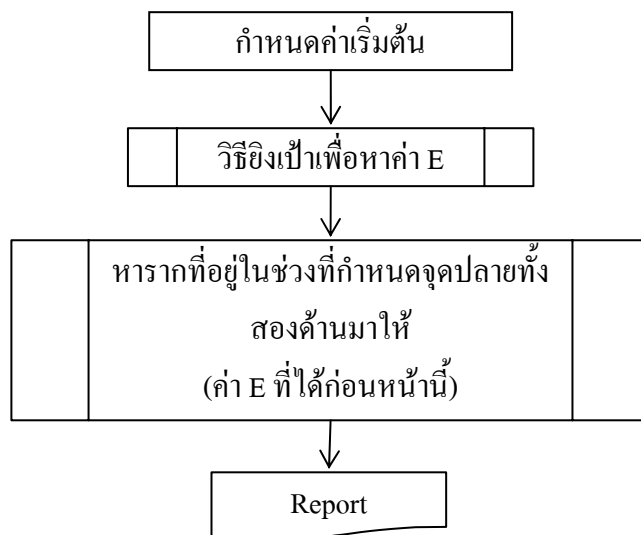
ในการวิจัยนี้ทำโดยการศึกษาเป็นขั้นตอนคือเริ่มจากการศึกษาการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์สูงอนันต์ และบ่อศักย์ลึกจำกัดโดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข แล้วจึงทำการหาผลเฉลยเพื่อหาระดับพลังงาน $e1$ และ ระดับพลังงาน $hh1$ เพื่อนำไปคำนวณหาค่าการส่งผ่านพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัมต่อไป

3.1.1 ลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

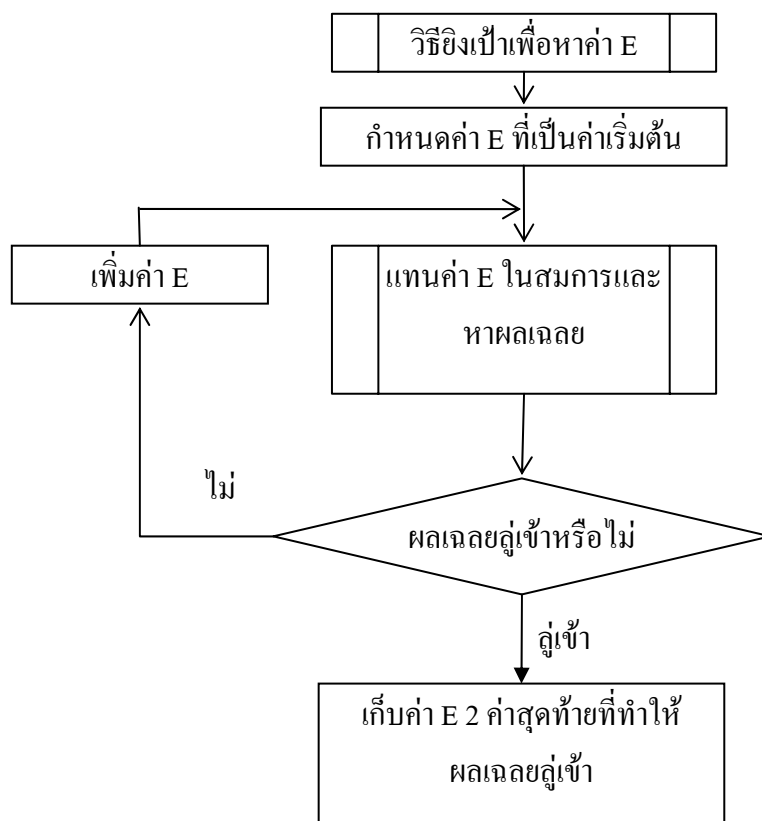
ในการแก้สมการชโรดิงเงอร์ (3.1) เพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นซึ่งเป็นผลเฉลยของสมการมีค่าเป็นจริงตามเงื่อนไขของบ่อศักย์แต่ละชนิดที่ทำการศึกษา

ในการแก้สมการชโรดิงเงอร์เพื่อหาระดับพลังงานย่อย E ด้วยระเบียบวิธีเชิงตัวเลขนั้นสามารถกระทำได้ตามขั้นตอนดังแสดงในรูปที่ 3.1 คือ จากรูปจะเห็นว่ามีส่วนย่อยที่ทำงานเฉพาะของแต่ละส่วนดังนี้คือ

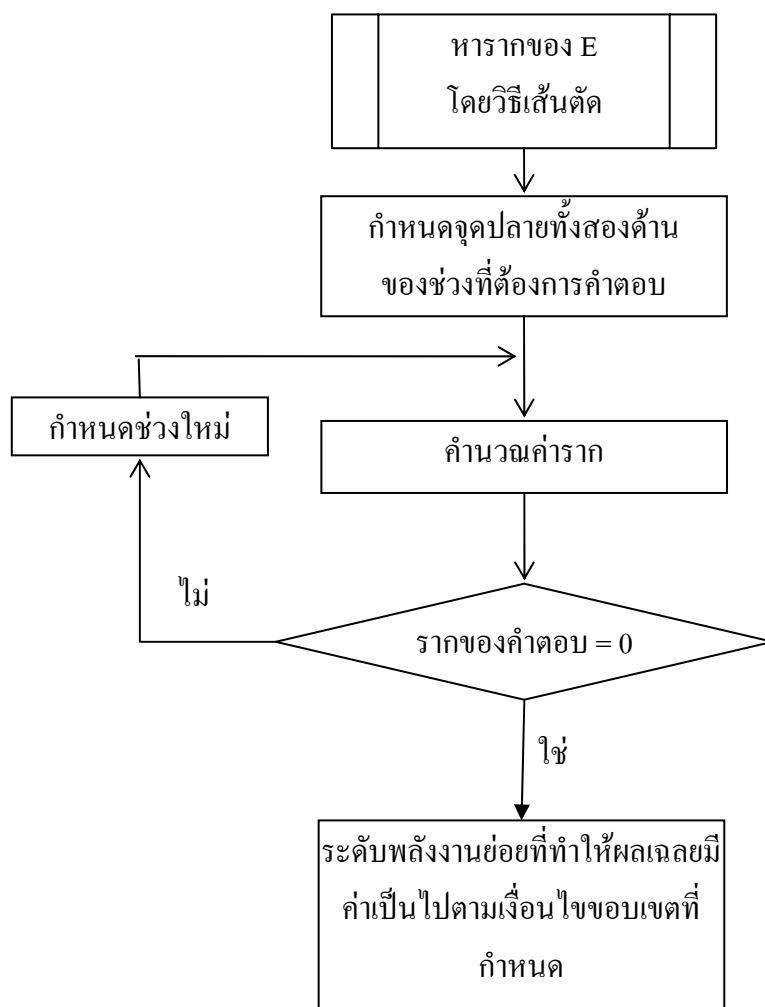
1. ส่วนที่ใช้กำหนดค่าคงที่ต่าง ๆ ที่ต้องใช้ในการแก้ปัญหา
2. ส่วนที่ใช้หาค่าช่วงของระดับพลังงานย่อยที่ครอบคลุมค่าระดับพลังงานย่อยจริงที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยมีค่าเป็นจริงตามเงื่อนไข เรียกส่วนนี้ว่าส่วนวิธียิงเป้า (shooting method) ส่วนนี้เป็นส่วนที่สำคัญที่สุด
3. ส่วนที่ใช้หาค่าระดับพลังงานย่อยในบ่อศักย์จากช่วงของระดับพลังงานที่ได้จากส่วนที่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



รูปที่ 3.1 แสดงลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยภายในบ่อศักย์จากผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข



รูปที่ 3.2 แสดงลำดับขั้นตอนวิธีการยิงเป้าเพื่อหาค่าระดับพลังงาน E 2 ค่า ที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์ตรงตามเงื่อนไขขอบเขต (เท่ากับศูนย์) อยู่ภายในช่วงโดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข



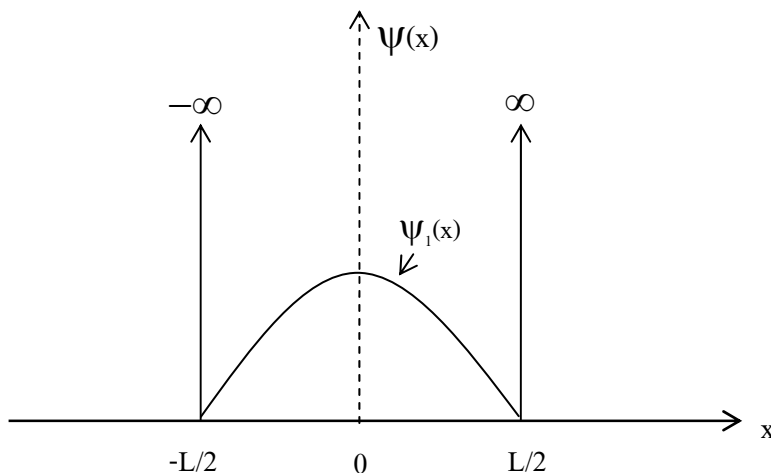
รูปที่ 3.3 แสดงลำดับขั้นตอนวิธีการหารากหรือค่า E ที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการชโรดิงเงอร์มีค่าตรงตามเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดให้โดยระเบียบวิธีเชิงตัวเลข

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

จากลำดับขั้นตอนในการหาระดับพลังงานย่อยแสดงดังรูปที่ 3.1 จะแยกพิจารณาเป็น 2 กรณีคือกรณีที่เป็นการบ่งชี้ที่มีความสูงอนันต์ และกรณีที่เป็นบ่งชี้สูงจำกัด

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 ในกรณีนี้ใช้วิธีการผลต่างสืบเนื่อง (finite difference method) ในการหาผลเฉลย ซึ่งโดยหลักการของวิธีผลต่างสืบเนื่องได้กล่าวในบทที่ 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

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

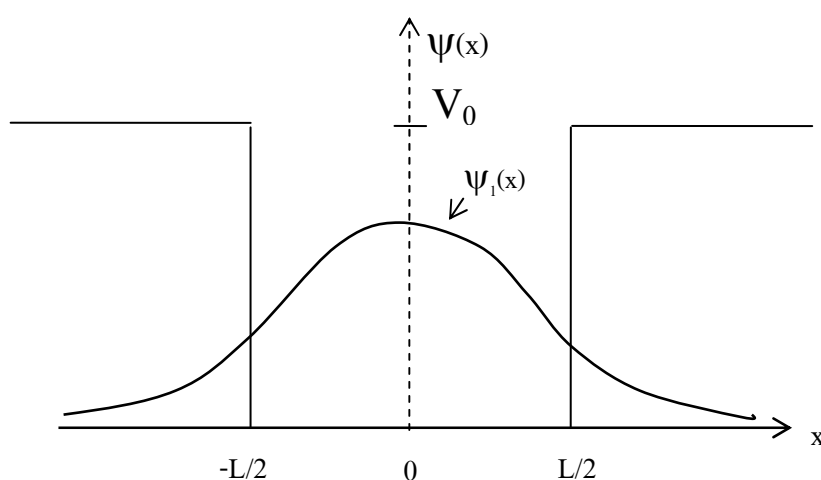
เมื่อ

$$\psi(0) = 1 \quad (3.10)$$

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

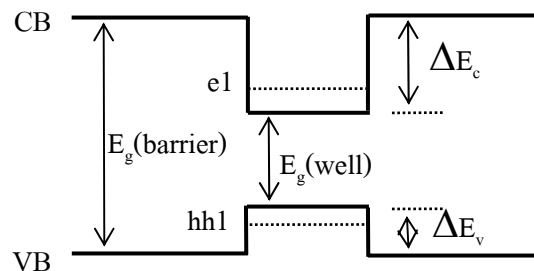
$$\psi(-L/2) = \psi(L/2) \neq 0 \quad (3.11)$$

และ

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

จะเห็นได้ว่าค่าเริ่มต้นจะเหมือนกับกรณีบ่อศักย์ลึกอนันต์ ต่างกันที่เงื่อนไขขอบเขตคือฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยของสมการ (3.7) นั้นจะเป็นไปตามสมการ (3.11) การหาระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นโดยระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขนั้นสามารถทำได้เช่นเดียวกับการหาพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ลึกอนันต์

3.1.1.3 การคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงาน ในโครงสร้างบ่อควอนตัม

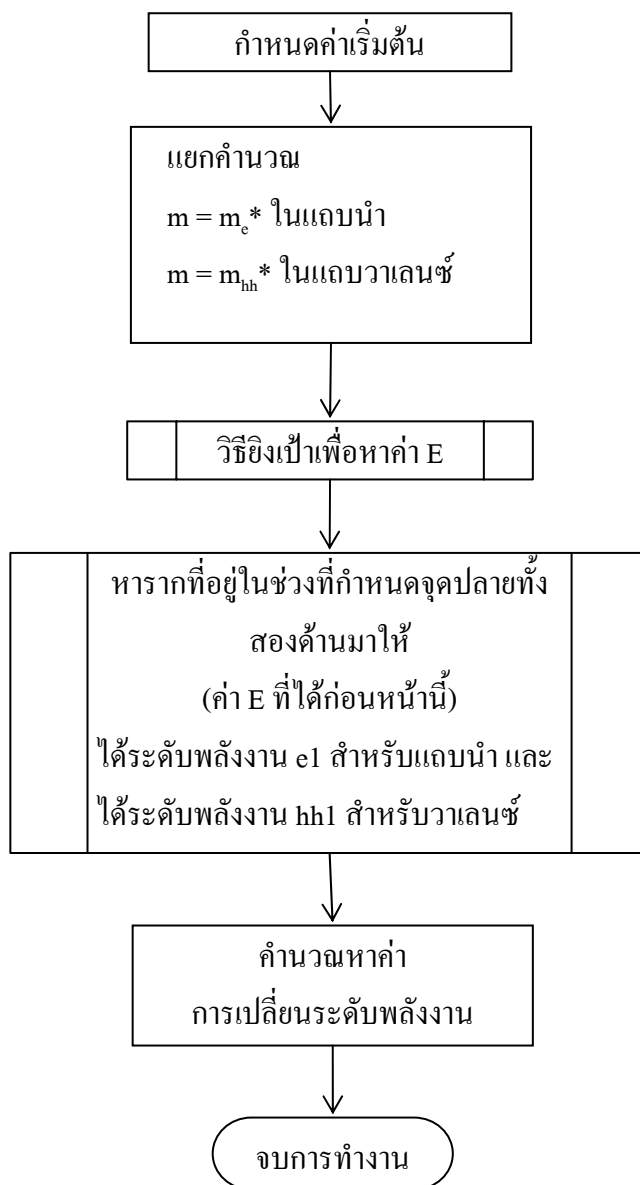


รูปที่ 3.6 แสดงโครงสร้างบ่อควอนตัม

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

ดังนั้นสิ่งที่ต้องทำคือการหาระดับพลังงานย่อย e1 และระดับพลังงานย่อย hh1 ซึ่งถ้าพิจารณาแล้วจะเห็นว่าการหาระดับพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่มีความลึกจำกัดดังกล่าว

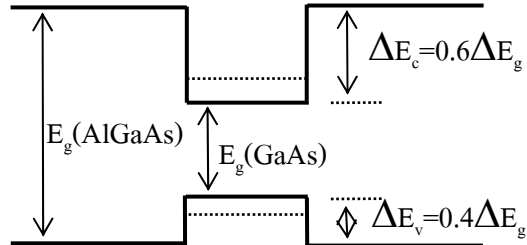
แล้วในตอนต้น หากแต่ลำดับขั้นในการแก้ปัญหานั้นเพิ่มส่วนที่จะบอกว่าเป็นการคำนวณค่าระดับพลังงาน $e1$ และระดับพลังงาน $hh1$ ซึ่งมีค่ามวลยังผล (effective mass) ต่างกัน แสดงดังรูปที่ 3.7



รูปที่ 3.7 แสดงลำดับขั้นในการคำนวณหาการเปลี่ยนระดับพลังงานในโครงสร้างบ่อควอนตัม

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

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



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

สามารถหาค่าความสูงของบ่อคอนดั้มได้จากความสัมพันธ์

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

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

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

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

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

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,
 $\Theta_B = \hbar\omega/k_B$ คือค่าอุณหภูมิเฉพาะแทนพลังงานโฟนอนยังผลบนสัดส่วนของ
 อุณหภูมิ

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

และ

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

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

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

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 ค่าพารามิเตอร์เอ็มไพริคัล (empirical parameter) ในที่นี้มีค่าเท่ากับ 3.5 ที่ $x=0.3$
- [1]

โดยที่

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

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

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