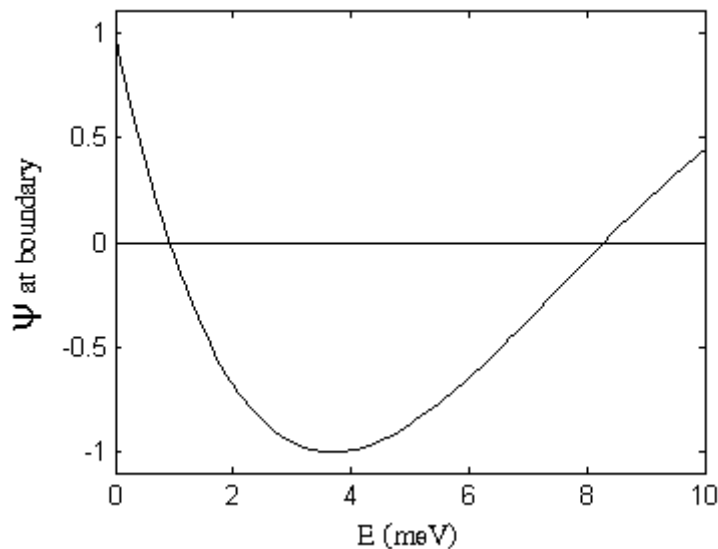


บทที่ 4

ผลการคำนวณ

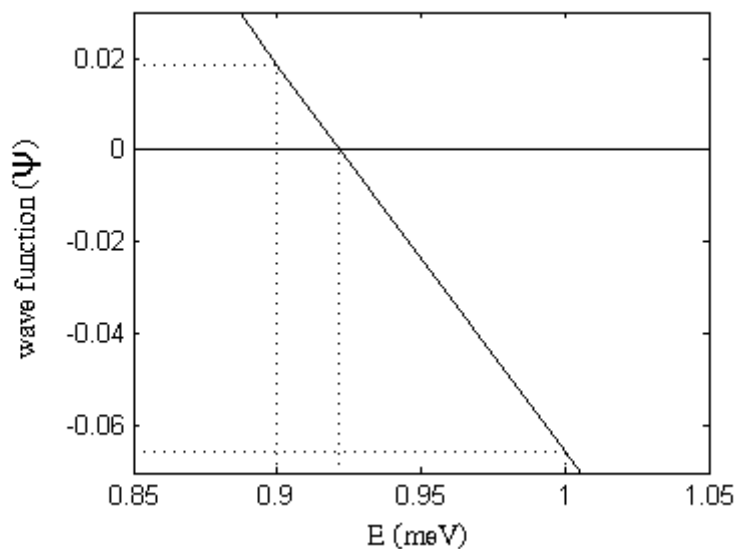
4.1 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงอนันต์

ในการคำนวณเพื่อหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานดังกล่าวก่อนหน้านี้จะทำการศึกษาการคำนวณค่าระดับพลังงานในบ่อศักย์ที่เป็นพื้นฐานทั้ง 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 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่าต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้า

จากรูปที่ 4.1 จะเห็นว่ามีการคำนวณพลังงานอย่างน้อย 2 ค่าที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ ซึ่งจุดนี้เป็นจุดที่ตรงตามเงื่อนไขขอบเขตคือที่ขอบของบ่อศักย์ต้องมีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ ในที่นี้สนใจจุดที่ค่าพลังงานมีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์จุดแรกแสดงดังรูปที่ 4.2 ซึ่งเป็นภาพขยายจุดดังกล่าว



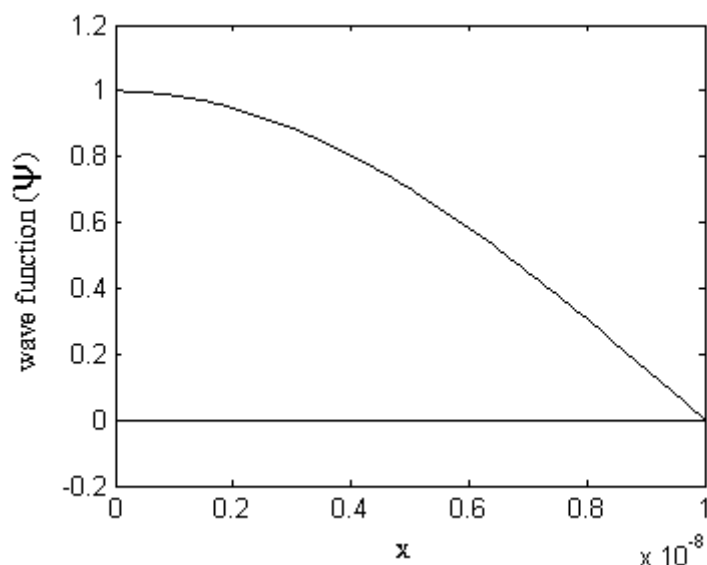
รูปที่ 4.2 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานค่า ต่าง ๆ กับค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่ได้จากระเบียบวิธีเชิงตัวเลขโดยวิธีการยิงเป้าบริเวณที่ค่าพลังงานที่มีค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์

จากรูปที่ 4.2 จะทำให้ได้ค่าพลังงานที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นมีการเปลี่ยนค่าจากทางด้านบวกเป็นด้านลบ นั่นแสดงว่ามีค่าพลังงานที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์ซึ่งตรงตามเงื่อนไขขอบเขต ค่าดังกล่าวแสดงดังตารางที่ 4.1 ขั้นต่อไปเป็นการนำค่าที่ได้นี้ไปหาค่าพลังงานที่ทำให้ฟังก์ชันคลื่นเป็นศูนย์โดยวิธีหารากแบบแบ่งครึ่ง (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

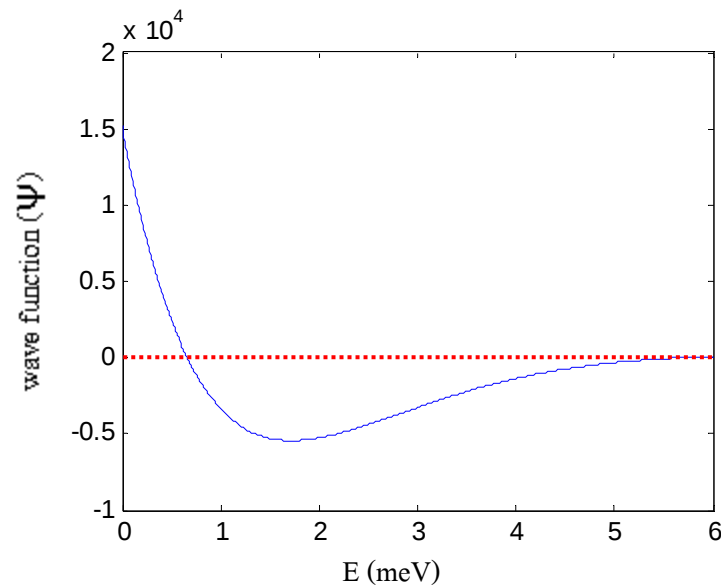


รูปที่ 4.3 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะทางตามแนวแกน x กับค่าฟังก์ชันคลื่นจากจุดกึ่งกลางของบ่อศักย์ถึงขอบของบ่อศักย์ทางด้านขวา

4.2 ผลการคำนวณพลังงานสถานะพื้นบ่อศักย์สูงจำกัด

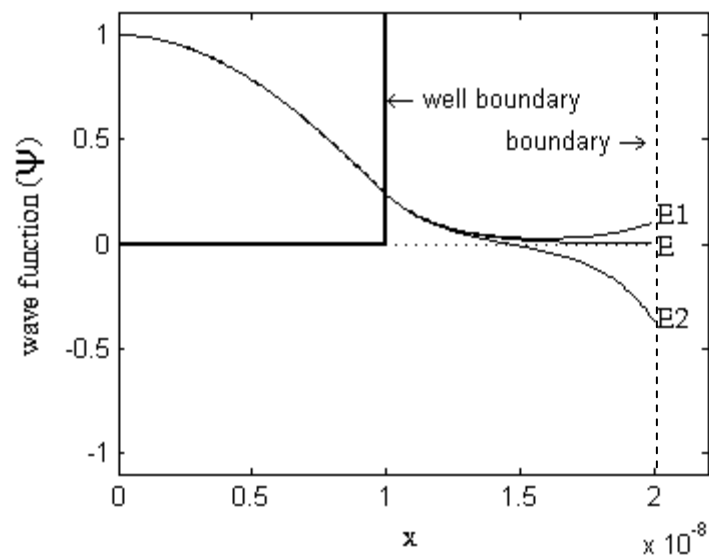
จากการศึกษาหาค่าระดับพลังงานย่อยที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ลึกจำกัดนี้ในการคำนวณหาค่าฟังก์ชันคลื่นหรือผลเฉลยจากการใช้วิธียิงเป้าเพื่อหาค่าพลังงาน E นั้นได้ผลดังแสดงในรูปที่ 4.4 โดยในการคำนวณใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขซึ่งข้อมูลของบ่อศักย์คือมีความกว้างบ่อ 20 นาโนเมตร ความกว้างของกำแพง 10 นาโนเมตร และมีค่าความสูงของศักย์ที่กำแพง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

นำค่าปลายของช่วงที่ได้เป็นค่าจุดปลายเพื่อนำไปหาค่ารากหรือค่าพลังงานที่ทำให้ค่าเงื่อนไขขอบเขตโดยวิธีการแบ่งครึ่งช่วง ในกรณีนี้จะได้ค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริงประมาณ 0.661096542224405 มิลลิอิเล็กตรอนโวลต์



รูปที่ 4.4 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่าพลังงานและค่าฟังก์ชันคลื่นที่ได้จากวิธีการยิงเป้าของบ่อศักย์ลึกจำกัด

นำค่าปลายทั้งสองของช่วงพลังงานที่ได้โดยวิธีการยิงส้อม (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 และใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาสเตอร์ สมการ (3.7) คำนวณหาค่าแถบช่องว่างพลังงานของส่วนที่เป็นกัมแพง 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

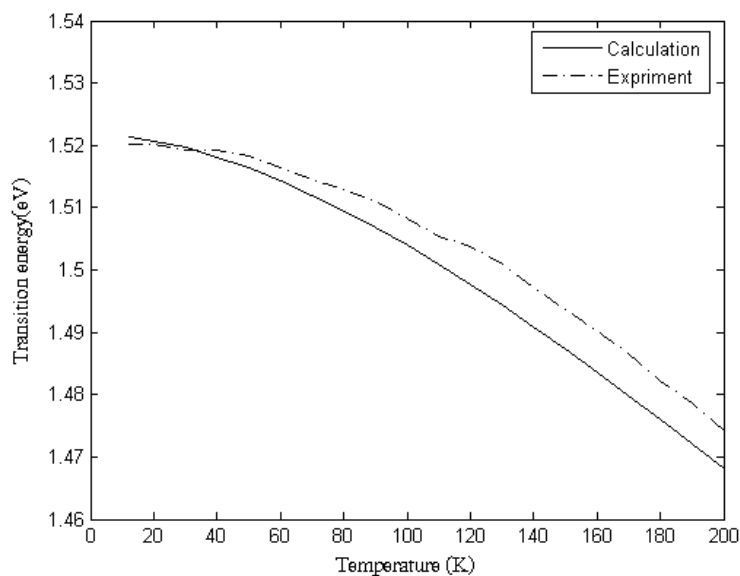
ตารางที่ 4.2 ค่าศักย์ของบ่อในแถบนำและแถบวาเลนซ์ที่คำนวณได้

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 e1 และระดับพลังงาน hh1 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(we11)	transition Eenergy		
				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]