บทที่ 5
สรุปผลการทดลอง

5.1 สรุปผลการทดลอง

ในการศึกษาวิจัยนี้เป็นการคำนวณหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัมโดยใช้ระเบียบวิธีเชิงตัวเลขหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเจอร์ ซึ่งเป็นสมการเชิงอนุพันธ์อันดับสองที่เป็นปัญหาค่าขอบเขต (boundary value problem : BVP) คือปัญหาที่กำหนดเงื่อนไขที่ขอบมาให้ปัญหาชนิดนี้ไม่มีวิธีการในการหาผลเฉลยหรือคำตอบโดยตรง ต้องทำการแปลงปัญหาค่าขอบเขตเป็นปัญหาค่าเริ่มต้น (initial value problem : IVP) เสียก่อนแล้วจึงใช้เทคนิคในปัญหาเริ่มต้นหาค่าผลเฉลยของปัญหา ในการศึกษานี้จะทำการแปลงโดยใช้เทคนิคที่เรียกว่าวิธีการสุ่มยิง (shooting method) วิธีการนี้โดยทั่วไปจะเป็นการเดาหรือสมมติค่าผลเฉลยขึ้นมาค่าหนึ่งแล้วแทนค่าได้คำตอบตรงกับค่าเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดให้หรือไม่ หากไม่ตรงก็สมมติค่าคำตอบขึ้นใหม่และพิจารณาว่าค่าที่ได้เมื่อเปรียบเทียบกับค่าที่สมมติก่อนหน้านี้เป็นค่าที่ลู่เข้าหาเงื่อนไขขอบเขตที่กำหนดหรือไม่ หากไม่ลู่เข้าแสดงว่าค่าที่สมมติขึ้นจะต้องมีการเปลี่ยนแปลงไปทางด้านตรงข้าม กระทำซ้ำเช่นนี้ไปเรื่อย ๆ จนกระทั่งได้คำตอบ

เนื่องจากปัญหาที่ศึกษานี้ไม่สามารถสมมติค่าผลเฉลยได้ เนื่องจากในสมการชโรดิงเจอร์ค่าที่ต้องการได้คือค่าพลังงาน (E) ซึ่งเป็นค่าคงที่ ที่ทำให้ที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นเป็นจริงที่ขอบเขตคือมีค่าเป็นศูนย์ โดยที่ค่าพลังงานนี้จะมีค่าเฉพาะสำหรับสถานะหนึ่ง ๆ ในกรณีที่ทำการศึกษานี้ต้องการได้ค่าพลังงานที่สถานะพื้น

ดังนั้นในการศึกษาจึงต้องหาวิธีการในการยิงสุ่ม หรือการสมมติค่าพลังงานขึ้นมาและทำการหาผลเฉลยของสมการชโรดิงเจอร์หรือค่าฟังก์ชันคลื่นจนกระทั่งได้ค่าพลังงานนี้ โดยเริ่มศึกษาจากปัญหาที่ง่ายและทราบคำตอบก่อนคือการศึกษาการหาค่าพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่ลึกอนันต์

ในกรณีนี้ค่าศักย์ที่ขอบบ่อมีค่าสูงมากทำให้ฟังก์ชันคลื่นไม่สามารถผ่านขอบบ่อออกสู่ภายนอกได้ การศึกษาได้ใช้วิธีการยิงสุ่มค่าพลังงานและทำการคำนวณค่าฟังก์ชันคลื่นออกมา จากการศึกษานี้จะได้ผลดังรูปที่ 4.1 และรูปที่ 4.2 จะเห็นว่าค่าพลังงานที่อยู่ระหว่าง 0.9 ถึง 1.0 meV จะมีค่าหนึ่งที่ทำให้ค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่าเป็นศูนย์ ใช้วิธีการแบ่งครึ่งช่วงในการหาค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขขอบเขตเป็นจริง และแทนค่าพลังงานที่ได้นี้ลงในสมการชโรดิงเจอร์แล้วทำการหาค่าผลเฉลยหรือค่าฟังก์ชันคลื่นจะได้ดังรูปที่ 4.3 จะเห็นว่าค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่ามากที่สุดที่บริเวณกึ่งกลางบ่อ และมีค่าลดลงเมื่อระยะห่างจากจุดกึ่งกลางบ่อเพิ่มขึ้นและมีค่าเป็นศูนย์ที่ขอบ

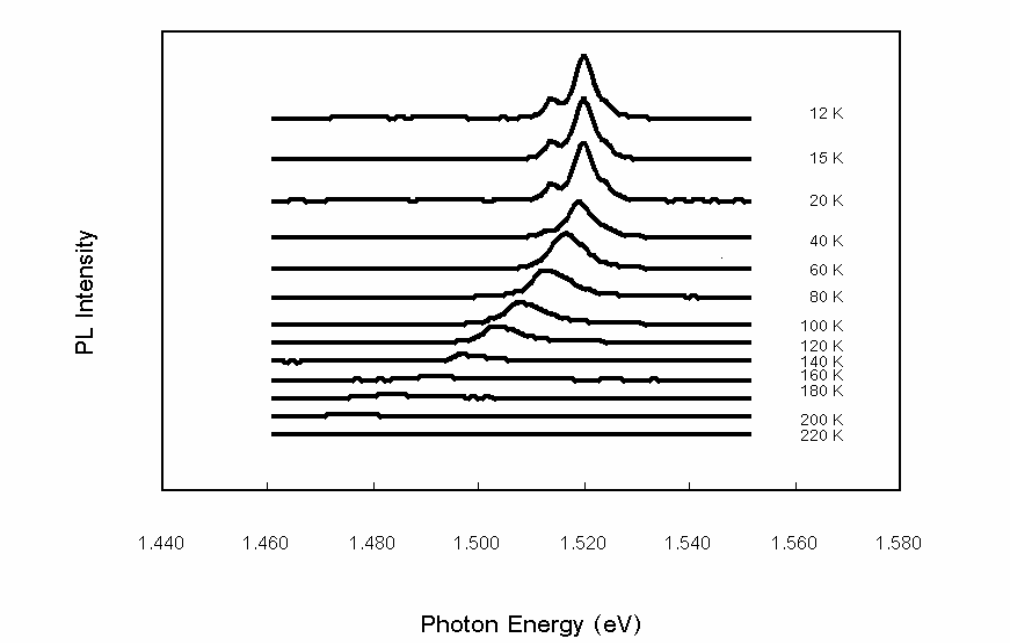
บ่อซึ่งตรงตามเงื่อนไขขอบเขตของบ่อศักย์สูงอนันต์ที่มีฟังก์ชันคลื่นแบบคู่ (even parity) ที่สถานะพื้นหรือทีสถานะ n=1

จากการศึกษาในกรณีบ่อศักย์สูงอนันต์ในตอนแรกแล้ว ทำการศึกษาเพื่อแก้ปัญหาหาค่าพลังงานที่สถานะพื้นของบ่อศักย์ที่มีความลึกจำกัด ซึ่งในกรณีนี้ความซับซ้อนของปัญหามีเพิ่มขึ้น คือค่าฟังก์ชันคลื่นที่ขอบบ่อมีค่าไม่เท่ากับศูนย์ แต่จะมีค่าเป็นศูนย์ที่ขอบของกำแพง และต้องมีค่าความต่อเนื่องที่ขอบบ่อนี้ด้วย ในการศึกษาโดยใช้วิธียิงสุ่มจะได้ค่าช่วงของพลังงาน (E1,E2) ที่มีค่าพลังงาน (E) ค่าหนึ่งที่ทำให้เงื่อนไขต่าง ๆ เป็นจริง คือค่าพลังงานที่ทำให้ผลเฉลยของสมการชโรดิงเจอร์ หรือค่าฟังก์ชันคลื่นตรงตามเงื่อนไข รูปที่ 4.4 แสดงค่าพลังงานที่สุ่มและผลเฉลยหรือฟังก์ชันคลื่นที่ได้ รูปที่ 4.5 แสดงค่าฟังก์ชันคลื่น ณ ตำแหน่งต่าง ๆ จากจุดกึ่งกลางบ่อถึงของกำแพงจะเห็นว่าค่าฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าสูงสุดที่จุดกึ่งกลางบ่อ ที่ขอบบ่อค่าฟังก์ชันคลื่นมีค่าไม่เท่ากับศูนย์และมีความต่อเนื่อง และที่ขอบกำแพงค่าฟังก์ชันคลื่นจะมีค่าเท่ากับศูนย์ และในรูปที่ 4.5 นี้ยังเปรียบเทียบค่าฟังก์ชันคลื่นที่ค่าพลังงานที่จุดปลายช่วง (E1,E2) กับค่าพลังงาน (E) ที่สถานะพื้น ซึ่งตรงกับเงื่อนไข

ในการศึกษาตอนสุดท้ายคือการหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม โดยใช้แบบจำลองทางคณิตศาสตร์ของพาสเลอร์ในการหาค่าแถบช่องว่างพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิของส่วนที่เป็นกำแพง และนำวิธีการหาค่าระดับพลังงานในบ่อศักย์ลึกจำกัดมาประยุกต์ใช้หาค่าพลังงานสถานะพื้นในแถบนำ และแถบวาเลนซ์ คือค่า e1 และ hh1 ตามลำดับ

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

ผลที่ได้จากการคำนวณค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานเทียบกับข้อมูลที่ได้จากการทดลอง [11] แสดงดังรูปที่ 4.6 จะเห็นว่าค่าทั้งสองจะมีแนวโน้มไปในทิศทางเดียวกัน แต่ที่ช่วงอุณหภูมิน้อยกว่า 40K จะเห็นว่าค่าทั้งสองมีค่าใกล้เคียงกันมาก และที่อุณหภูมิสูงกว่า 40K จะมีค่าแตกต่างกันอย่างเห็นได้ชัด ที่เป็นเช่นนี้อาจเนื่องจากถ้าพิจารณารูปที่ 5.1 ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากการทดลองจะเห็นว่าที่อุณหภูมิดังกล่าวจะมียอดคลื่น 2 ยอด ซึ่งก็คือค่าพลังงานที่ได้จากส่วนที่เป็นบ่อและส่วนที่เป็นกำแพง แต่ถ้าอุณหภูมิตั้งแต่ 40K ขึ้นไปจะมีเพียงยอดเดียวซึ่งก็น่าจะเป็นส่วนที่เป็นค่าพลังงานที่เกิดจากส่วนที่เป็นกำแพง



รูปที่ 5.1 สเปกตรัมโฟโตลูมิเนสเซนต์ของ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ / GaAs (SQW) ที่อุณหภูมิต่างๆ [11]

สรุปได้ว่าในการหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานที่ขึ้นกับอุณหภูมิสำหรับโครงสร้างบ่อควอนตัม โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขแก้ปัญหาสมการชโรดิงเจอร์ ซึ่งเป็นปัญหาค่าขอบเขต โดยการใช้วิธีการยิงสุ่มหาค่าพลังงานที่ทำให้เงื่อนไขค่าขอบเขตเป็นจริงสามารถกระทำได้ หากทราบค่าพารามิเตอร์ของวัสดุที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัม

5.2 ข้อเสนอแนะ

1. ในการศึกษานี้หากมีข้อมูลในการทดลองที่น่าเชื่อถือได้มาเปรียบเทียบจะทำให้ทราบชัดเจนว่าผลที่คำนวณได้โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขมีความถูกต้องมากน้อยเพียงใด

2. ในการแก้ปัญหาชโรดิงเจอร์ซึ่งเป็นปัญหาค่าขอบเขต สำหรับการหาค่าระดับพลังงานที่สถานะสูงกว่าสถานะพื้น โดยใช้ระเบียบวิธีการเชิงตัวเลขด้วยวิธีการยิงสุ่มเพื่อหาค่าระดับพลังงานที่สถานะสูงกว่าสถานะพื้นสามารถกระทำได้

3. สามารถหาค่าระดับพลังงานในกรณีที่เป็นสถานะคี่ (odd parity) ได้โดยการพิจารณาหาค่าเริ่มต้นใหม่แล้วใช้วิธีการเดียวกันกับกรณีที่เป็นสถานะคู่

4. สามารถหาค่าการเปลี่ยนระดับพลังงานของสารที่มีโครงสร้างแบบบ่อควอนตัมได้หากทราบค่าพารามิเตอร์ เช่น ค่ามวลยังผล (effective mass) ,ค่า band offset .ค่าแถบช่องว่างพลังงาน, ณ อุณหภูมิต่าง ๆ

5. สามารถนำวิธีการนี้ไปสุ่มหาค่าพารามิเตอร์ตัวอื่น ๆ ได้ เช่นค่ามวลยังผล, ค่า band offset ทั้งนี้ทำได้โดยการเปรียบเทียบกับผลการทดลองที่น่าเชื่อถือได้