

Analisis Numerik Pengaruh Bentuk dan Ukuran Quantum Dot Semikonduktor Terhadap Keadaan Energi Elektron

Idha Royani, Fistri S Arsyad, Fiber Monado
Jurusan Fisika FMIPA Universitas Sriwijaya

Abstract

In this article we present a model for studying the effect of the sizes and shapes of small semiconductor quantum dots on the electron and hole energy states. We solve the three-dimensional Schrodinger equation for semiconductor quantum dots with cylindrical and conical shapes. Electron and hole energy states decreased if QD volume increased. Electron and hole energy states of the cylindrical QD is higher and sensitively on the volume shift than conical QD. Whereas, probability of density of state of electron in the cylindrical QD is higher (0.4%) than conical QD.

Key words: Quantum Dot, Numerical model, semiconductor

PENDAHULUAN

Kemajuan teknologi yang pesat di bidang fabrikasi material semikonduktor seperti MOCVD dan MBE telah menghasilkan berbagai material baru yang berpotensi untuk aplikasi divais elektronik maupun optoelektronik, diantaranya adalah quantum dot (QD) semikonduktor (Binberg, 1999 & Nakamura, 1998). Quantum dot adalah struktur material semikonduktor generasi baru yang saat ini sangat intensif dipelajari dan dikembangkan (Morkoc, 2001 & Arakawa, 2002). Keunikan struktur ini adalah terdiri dari kumpulan molekul-molekul semikonduktor dalam ukuran nano, di mana molekul-molekul semikonduktor tersebut merupakan potensial kurungan (*confinement*) bagi pembawa muatan (elektron dan hole). Keadaan ini menghasilkan tingkat-tingkat energi diskrit bagi elektron dan hole. Berbeda dengan *bulk* semikonduktor yang memiliki struktur pita pada tingkat energi elektroniknya.

Kehadiran QD telah memberikan prediksi dan topik baru di bidang fisika semikonduktor untuk pengembangan aplikasi divais-divais baru seperti *transistor elektron tunggal* dan *laser quantum dot* (Arakawa, 2002). Aplikasi quantum dot pada dioda laser diharapkan mampu meningkatkan unjuk kerja divais. Quantum dot diyakini sangat efektif mereduksi arus ambang (I_{th}) dioda karena QD mampu menahan pembawa untuk bermigrasi menuju pusat rekombinasi non radiatif (Morkoc, 2001)

Meskipun demikian, disamping keunikan dan keunggulan sifat optik dan elektronik yang dimiliki QD dibandingkan dengan bulk material, ada permasalahan yang cukup signifikan dihadapi QD dalam aplikasinya pada divais laser yaitu *pelebaran spektral* pada spektrum photoluminescence (PL) QD (Ramvall, 2000). Pelebaran spektral ini disebabkan karena pada kumpulan QD, bentuk dan ukuran tiap-tiap QD tidak uniform. Bentuk dan ukuran QD yang tidak uniform akan menyebabkan intensitas PL dan energi radiasi elektron dan hole berbeda satu sama lain, akibatnya spektrum emisi yang terdeteksi mengalami pelebaran spektral karena tidak saling menguatkan. Kondisi ini sangat tidak menguntungkan apabila QD diaplikasikan pada divais laser.

Analisis di atas adalah karakteristik PL QD hasil eksperimen yang telah dilakukan Ramvall dkk. Analisis teori secara numerik dapat dilakukan dengan tujuan untuk

memperkuat dan mempertegas analisis hasil eksperimen. Berdasarkan tujuan tersebut, maka dalam penelitian ini penulis mencoba menganalisis secara numerik pengaruh bentuk dan ukuran QD terhadap keadaan energi elektron dan hole.

TINJAUAN PUSTAKA

Quantum Dot (QD) Semikonduktor

Konsep QD semikonduktor pertama kali dikemukakan oleh Arakawa dan Sakaki pada tahun 1982. QD disebut material nol dimensi karena terdiri dari kumpulan molekul semikonduktor dalam ukuran nano (gambar 1). Molekul semikonduktor tersebut berfungsi sebagai potensial kurungan (*confinement*) bagi elektron dan hole dan menahan mereka bermigrasi menuju pusat rekombinasi non radiatif.



Gambar 1. Karakteristik QD GaN pada permukaan AlGaIn. (Ramvall, 2000 & Tanaka, 2002)

QD disebut juga dengan nama atom-atom artificial, karena sifatnya yang menyerupai sifat atom. Elektron-elektron terkurung dalam ruang 3-D dan menduduki tingkat-tingkat energi diskrit yang menggambarkan energi dasar, energi tereksitasi pertama, kedua, dan seterusnya (E_0, E_1, E_2, \dots). Tingkat-tingkat energi elektron dan hole tersebut diperoleh dengan memecahkan persamaan Schrodinger 3-D. Pemecahan persamaan Schrodinger untuk kasus ini adalah dalam formalisme elektron dan hole yang terperangkap dalam potensial penghalang 3-D. Hamiltonian sistem diberikan oleh persamaan berikut,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \nabla_r \left(\frac{1}{m(E,r)} \right) \nabla_r + V(r) \quad (1)$$

Dimana ∇_r adalah gradient ruang, $m(E,r)$ adalah massa efektif elektron yang bergantung pada energi E dan posisi r , dinyatakan sebagai berikut,

$$\frac{1}{m_e(E,r)} = \frac{P^2}{\hbar^2} \left(\frac{2}{E + E_g(r) - E_c(r)} + \frac{1}{E + E_g(r) - \Delta(r) - E_c(r)} \right) \dots (2)$$

dimana $V(r) = E_c(r)$ adalah potensial penghalang dan $E_g(r)$, $\Delta(r)$, dan $E_c(r)$ masing-masing menyatakan energi gap, spin-orbit dalam pita valensi dan tepi pita elektron bergantung posisi, sedangkan P adalah elemen matriks momentum.

Untuk QD berbentuk silinder, pemecahan persamaan Schrodinger tiga dimensi dalam sistem koordinat silinder dinyatakan oleh persamaan berikut,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i(E)} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{\partial}{\partial R} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{l^2}{R^2} \right) \Phi_i(R,z) + V_i(R,z) \Phi_i(R,z) = E \Phi_i(R,z) \dots (3)$$

dimana $V_1(R,z) = 0$ ($i = 1$) di dalam potensial dan $V_2(R,z) = V_0$ ($i = 2$) diluar potensial, dengan syarat batas adalah $\Phi_1(R,z) = \Phi_2(R,z)$, $z = f_3(R)$ dan,

$$\frac{1}{m_i(E)} \left(\frac{\partial \Phi_i(R,z)}{\partial R} + \frac{df_i}{dR} \frac{\partial \Phi_i(R,z)}{\partial z} \right)_{z=f_i(R)} = \frac{1}{m_i(E)} \left(\frac{\partial \Phi_i(R,z)}{\partial R} + \frac{df_i}{dR} \frac{\partial \Phi_i(R,z)}{\partial z} \right)_{z=f_i(R)} \dots (4)$$

Tentu saja, solusi persamaan Schrodinger pada sistem ini memerlukan pemecahan matematika yang sulit dipecahkan secara analitik. Oleh karena itu dalam penelitian ini, analisa numerik dilakukan untuk mendapatkan informasi nilai eigen energi dan fungsi gelombang elektron sistem.

Pada divais laser berbasis bulk semikonduktor, cacat pada material dapat menimbulkan proses rekombinasi non radiativ dari pembawa-pembawa muatan (elektron dan hole) yang sangat tidak menguntungkan bagi unjuk kerja divais laser. QD semikonduktor dapat memperkecil kemungkinan tersebut karena fungsinya dapat menahan pembawa muatan bermigrasi menuju pusat rekombinasi non radiativ. Kondisi ini dapat mereduksi arus ambang dioda laser apabila QD diaplikasikan pada divais laser. (Morkoc, 2001)

Arus ambang (I_{th}) adalah arus forward dc minimum yang diterapkan untuk menaikkan daya out put cahaya laser dan dinyatakan oleh persamaan berikut ini :

$$I_{th} = \frac{eVn_{th}}{\tau} \quad (5)$$

dimana

- e : muatan elektron
- V : volume lapisan aktif
- n_{th} : rapat pembawa pada keadaan ambang
- τ : lifetime pembawa

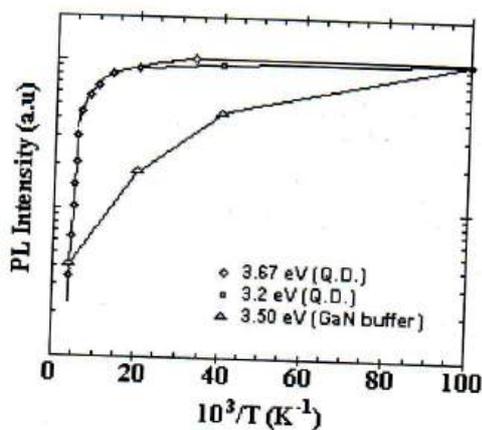
Dari persamaan di atas terlihat bahwa arus ambang rendah dapat dicapai dengan cara:

- mengurangi volume (V) lapisan aktif, (aplikasi QD)
- meningkatkan jumlah rapat pembawa (n_{th}), dan
- meningkatkan life time (τ).

Karakteristik Optik dan Listrik QD Semikonduktor

Studi eksperimen dan teori QD semikonduktor telah banyak dilakukan. Beberapa grup telah berhasil menumbuhkan struktur ini dengan metode *molecular beam epitaxy* (MBE) (Sen, 1998) dan *metal organic chemical vapor deposition* (MOCVD) (Morkoc, 2001, Ramvall, 2000, & Tanaka, 1996). Hasil analisis sifat optik dan listrik menunjukkan bahwa struktur QD ini berpotensi besar dalam meningkatkan unjuk kerja divais laser dibandingkan dengan bulk material. Gambar

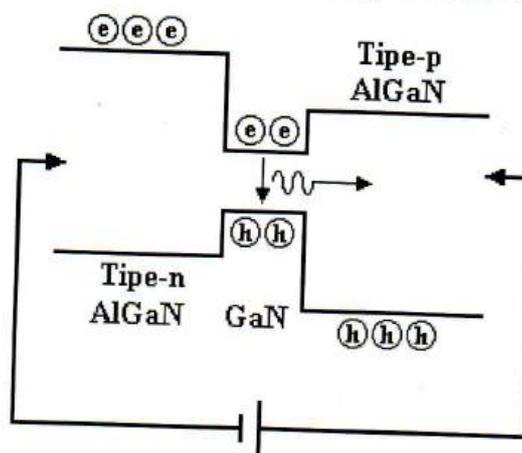
2. memperlihatkan perbedaan intensitas PL yang cukup signifikan antara QD GaN dengan bulk GaN sebagai fungsi temperatur.



Gambar 2. Ketergantungan terhadap temperatur dari intensitas PL QD dan bulk GaN (Morkoc, 2001)

Dari gambar terlihat bahwa kenaikan temperatur menghasilkan perubahan intensitas PL yang besar pada bulk GaN (GaN buffer) dibandingkan dengan QD GaN yang cenderung konstan. Hal ini menunjukkan bahwa ketergantungan struktur QD terhadap temperatur lebih kecil dibandingkan bulk GaN, dengan kata lain QD lebih stabil dari pada bulk. Keuntungan ini meningkatkan unjuk kerja divais laser karena ketergantungan divais terhadap temperatur berkurang.

Pada dioda laser, QD berfungsi sebagai lapisan aktif yang dapat menghasilkan emisi foton hasil dari proses rekombinasi radiativ elektron dan hole. Gambar 3 memperlihatkan skema keadaan energi dioda laser QD

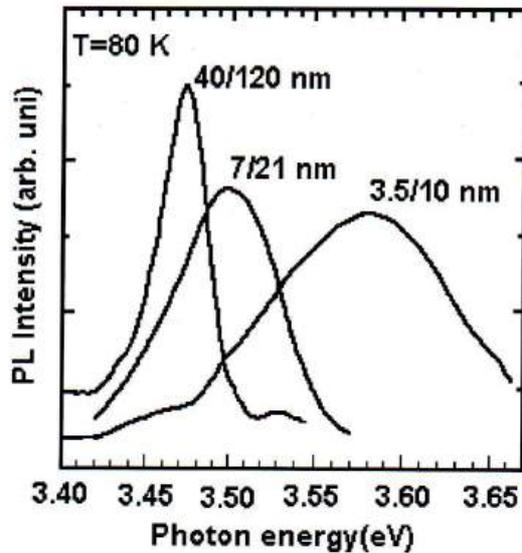


Gambar 3. Skema energi dioda laser QD

Dalam aplikasinya pada divais temperatur ruang, persyaratan penting yang harus dipenuhi QD adalah :

- Potensial yang terlokalisasi cukup besar dan ukuran QD harus kecil. Hal ini merupakan syarat untuk mengamati efek *confinement* nol dimensi.
- Memiliki ukuran dan bentuk yang uniform dengan kerapatan yang tinggi.
- Tidak memiliki cacat seperti *dislocation*.

Pengaruh bentuk, ukuran dan uniformitas QD terhadap intensitas PL dan spektrum energi diperlihatkan seperti pada gambar 4. berikut ini.



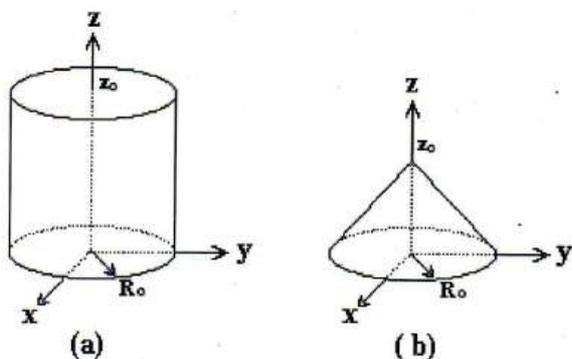
Gambar 4. Spektrum PL QD dengan tiga ukuran yang berbeda (Ramvall, 2000)

Penurunan intensitas PL dan peningkatan energi spektrum dengan puncak PL yang melebar terjadi jika ukuran QD menurun. Hal ini disebabkan karena semakin kecil ukuran QD, efek fluktuasi ukuran QD semakin besar dan tekanan terhadap eksiton semakin kuat. Fluktuasi ukuran QD yang besar menghasilkan perubahan yang besar pada posisi intensitas PL dan energi foton karena intensitas PL dan energi foton masing-masing QD tidak saling menguatkan, dan hal ini merupakan permasalahan utama dioda laser. Analisis di atas adalah analisis eksperimen yang telah dilakukan (Sen, 1998, Morkoc, 2001, Ramvall, 2000, & Tanaka, 1996). Dalam penelitian ini, penulis mencoba mempertegas analisis tersebut dengan melakukan analisis teori secara numerik untuk melihat pengaruh bentuk dan ukuran QD terhadap keadaan tingkat energi dan fungsi gelombang elektron.

METODELOGI PENELITIAN

Metode dalam penelitian ini adalah metode komputasi dengan tahapan sebagai berikut:

- Pemodelan bentuk dan ukuran quantum dot dengan bentuk a) Silinder dan b) kerucut.

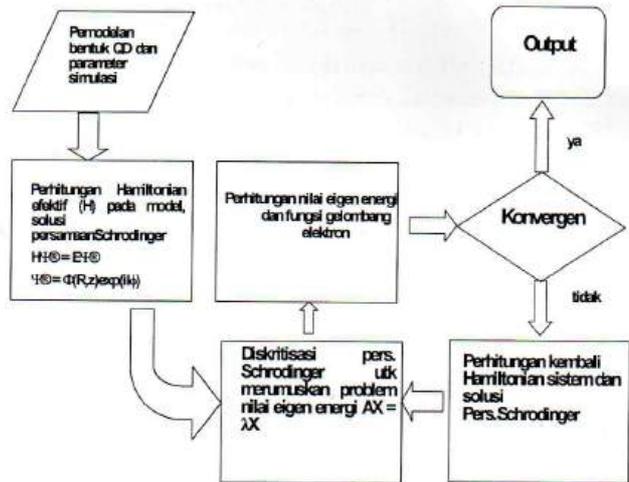


Gambar 5. a) QD Silinder b) QD Kerucut

- Mencari solusi persamaan Schrodinger dalam sistem koordinat silinder
- Perumusan harga eigen energi elektron dan hole dalam kedua sistem di atas
- Perhitungan harga eigen energi dan fungsi keadaan elektron dan hole kedua sistem di atas.

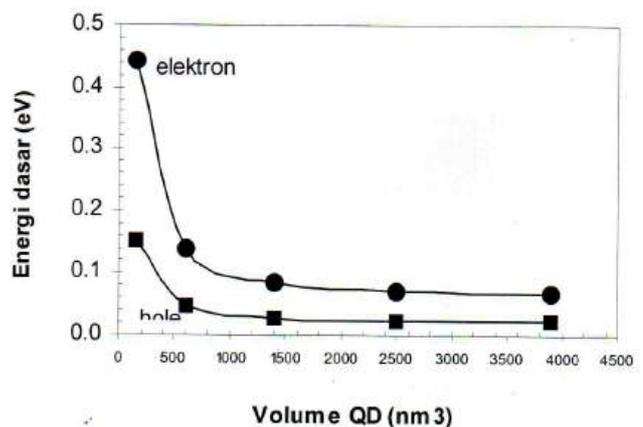
Secara garis besar, skematik tahapan metode komputasi yang digunakan ditunjukkan seperti pada diagram alir berikut. Software yang digunakan adalah FEMLAB 2.1.

Flowchart Perhitungan Nilai Eigen Energi dan Fungsi Gelombang Elektron-Hole dalam Sistem QD Silinder dan Kerucut.

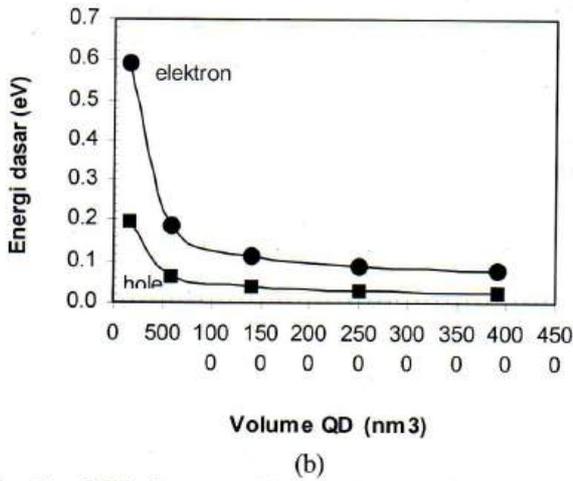


HASIL DAN PEMBAHASAN

QD yang disimulasikan dalam penelitian ini berbasis gallium nitrida (GaN) dengan bentuk silinder dan kerucut. Masing-masing bentuk disimulasikan dengan mengubah volume untuk melihat pengaruhnya terhadap keadaan energi elektron-hole dan fungsi gelombangnya. Perubahan tingkat energi dasar elektron dan hole sebagai fungsi volume QD GaN silinder dan kerucut diperlihatkan pada gambar 6 berikut ini.

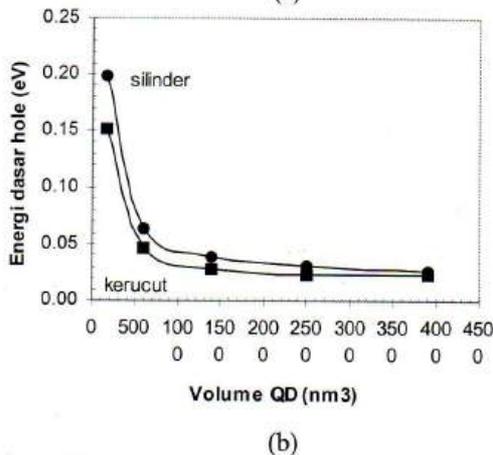
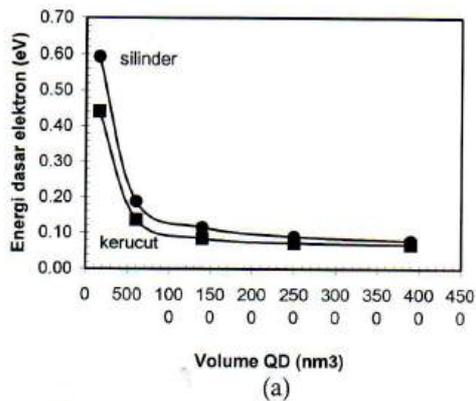


(a) Gambar 6



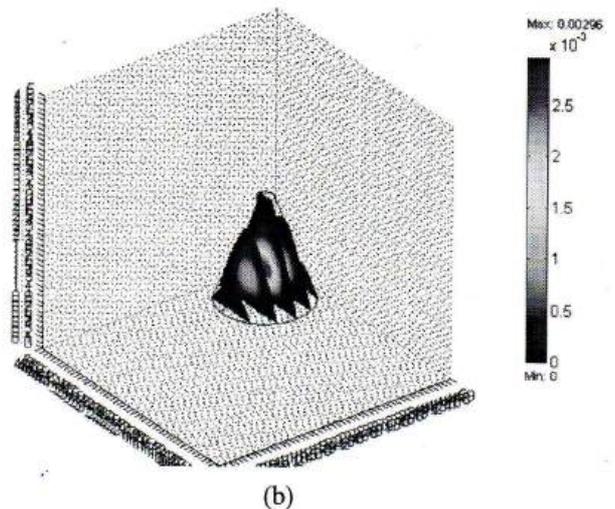
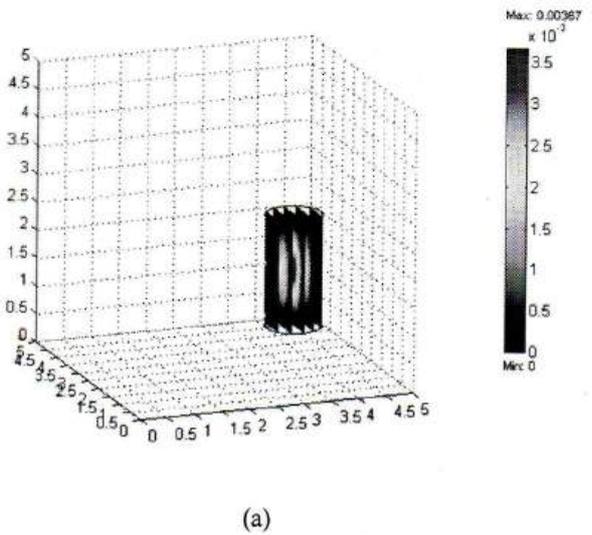
Gambar 6. Tingkat energi dasar elektron-hole QD GaN sebagai fungsi volume QD. (a) silinder. (b) kerucut

Masing-masing gambar, baik QD GaN silinder maupun kerucut memperlihatkan kecenderungan yang sama yaitu kenaikan volume QD akan menurunkan tingkat energi elektron dan hole. Seperti dinyatakan dalam persamaan (1), energi elektron dan hole berbanding terbalik terhadap lebar sumur quantum (L_x, L_y, L_z). Semakin besar volume dot, maka semakin kecil level energi elektron dan hole. Dari gambar juga terlihat bahwa, tingkat energi dasar elektron lebih besar dibandingkan dengan tingkat energi dasar hole. Hal ini disebabkan karena pada material GaN massa efektif elektron lebih kecil dibandingkan dengan massa efektif hole ($m_e = 0.27m_0, m_h = 0.8m_0$).



Gambar 7. (a) Tingkat energi dasar elektron sebagai fungsi volume QD GaN. (b) Tingkat energi dasar hole sebagai fungsi volume QD GaN

Gambar 7(a) dan (b) masing-masing memperlihatkan perbandingan tingkat energi dasar elektron dan hole antara QD GaN silinder dan kerucut. Dari gambar terlihat bahwa keadaan energi bentuk silinder lebih tinggi dan lebih sensitif terhadap perubahan volume dibandingkan dengan bentuk kerucut, dan menjadi konvergen pada volume besar. Hal ini disebabkan karena pada volume kecil, potensial dan fungsi gelombang elektron-hole bentuk silinder terlokalisasi lebih besar dan terikat lebih kuat dibandingkan dengan bentuk kerucut. Gambar 8 memperlihatkan fungsi gelombang elektron QD GaN silinder dan kerucut pada volume 160 nm^3 dengan probabilitas masing-masing 0,4% dan 0,3%. Probabilitas menemukan elektron pada QD silinder lebih besar dibandingkan dengan bentuk kerucut. Hal ini menunjukkan bahwa QD silinder lebih confinement dibandingkan kerucut.



Gambar 8. Fungsi gelombang electron (a) QD GaN silinder, (b) QD GaN kerucut. Masing-masing pada volume 160 nm^3

KESIMPULAN

1. Kenaikan volume QD akan menurunkan tingkat energi elektron dan hole
2. Keadaan energi QD bentuk silinder lebih tinggi dan lebih sensitif terhadap perubahan volume dibandingkan dengan bentuk kerucut, dan menjadi konvergen pada volume besar.
3. Fungsi gelombang elektron pada QD silinder lebih besar (0.4%) dibandingkan dengan bentuk kerucut (0.3%).

DAFTAR PUSTAKA

- D. Bimberg, et. al., 1999, *Quantum Dot Heterostructures*, John Wiley & Sons Ltd.
- H. Morkoc, et. al., 2001, *Growth and investigation of GaN/AlN quantum dot*, : Mat. Res. Soc. Symp.
- P. Ramvall, et.al., 2000, *Optical properties of GaN quantum dots*, Journal of Apply. Phys
- Royani, Idha, et.al. 2004, *Analisis numerik pengaruh bentuk dan ukuran qunatum dot semikonduktor terhadap keadaan energi elektron*, Laporan Penelitian Dosen Muda Dikti Depdiknas.
- S. Tanaka, et. al. 1996, *Self-assembling GaN Quantum dot on AlGaIn surfaces using a surfactant*, Apply. Phys. Lett
- S. Nakamura., 1998, *III - V nitride - based short-wavelength LEDs and LDs*, Clarendon pres, Oxford.
- Xu - Qiang Shen, et. al., 1998, *The formation of GaN quantum dot on AlGaIn surface using Si in gas-source MBE*, Apply. Phys. Lett.
- Y. Arakawa., 2002, *Progress in GaN-Based Quantum Dots for Optoelectronics Application*, IEEE Journal of selected topics in Quantum Electronics