

Kerapatan Keadaan pada Struktur Nano Berbentuk Sumur Nano, Kawat Nano dan Titik Nano

Ratno Nuryadi

Pusat Teknologi Material, Badan Pengkajian dan Penerapan Teknologi (BPPT)

BPPT Gedung II Lt. 22. Jl. M.H. Thamrin No. 8 Jakarta 10340

E-mail : ratnon@gmail.com

Abstrak

Teknologi fabrikasi semikonduktor saat ini mampu membuat struktur dalam ukuran sangat kecil sampai berukuran nanometer. Ada 3 struktur dasar material berukuran nanometer, yaitu sumur nano (*nano well*), kawat nano (*nano wire*) dan titik nano (*nano dot*). Pada divais nanoelektronika, perbedaan struktur ini akan memberikan perbedaan pada kalkulasi jumlah elektron yang dapat berada pada struktur tersebut, yang akhirnya menimbulkan perbedaan juga pada nilai arus listrik. Makalah ini membahas cara perhitungan kerapatan keadaan (*density of state*) dari ketiga struktur tersebut berikut contoh aplikasinya pada beberapa jenis semikonduktor seperti silikon dan germanium. Didapatkan hasil bahwa kerapatan keadaan pada sumur nano membentuk karakteristik tangga, kerapatan keadaan pada kawat nano membuat bentuk pola gabungan antara diskrit dan penurunan secara eksponensial, dan kerapatan keadaan pada titik nano membentuk karakteristik diskrit. Didapatkan hasil juga bahwa meskipun bentuk strukturnya sama, antara material satu dengan lainnya (silikon dan germanium) mempunyai nilai kerapatan keadaan yang berbeda. Ini dikarenakan perbedaan massa efektif (*effective mass*) pada material-material tersebut. Perhitungan kerapatan keadaan seperti ini penting karena kerapatan keadaan adalah unsur utama dalam kalkulasi jumlah elektron yang dapat mengisi struktur material tersebut, yang akhirnya akan menentukan jumlah arus yang mengalir.

1. Pendahuluan

Salah satu sifat dasar yang dimiliki oleh divais elektronika adalah karakteristik arus listrik versus tegangan. Arus listrik suatu divais elektronika merupakan fungsi dari jumlah elektron yang mengalir pada struktur divais tersebut dikalikan dengan muatan dasar elektron 1.602×10^{-19} Coulomb. Jumlah elektron yang mengalir bergantung pada bentuk struktur dan fungsi distribusi Fermi-Diract yang menunjukkan peluang elektron menempati struktur tersebut [1-2].

Seiring dengan perkembangan teknologi semikonduktor, teknik fabrikasi divais elektronika sedemikian maju dan memungkinkan untuk membuat struktur divais berukuran nanometer [3-5]. Berbagai bentuk divais selama ini telah dikembangkan oleh para ilmuwan baik dari bentuk yang sederhana sampai bentuk yang kompleks. Tetapi pada hakekatnya hanya ada 3 bentuk dasar ketika material berukuran nanometer, yaitu sumur nano (*nano well*), kawat nano (*nano wire*) dan titik nano (*nano dot*) [6]. Perbedaan kegiatan struktur tersebut menimbulkan perbedaan nilai kerapatan keadaan (*density of state*) yang akhirnya menimbulkan perbedaan nilai arus listrik.

Makalah ini membahas cara perhitungan kerapatan keadaan untuk struktur sumur nano, kawat nano, titik nano dan aplikasi perhitungannya pada jenis semikonduktor

silikon dan germanium. Formulasi kerapatan keadaan dilakukan berbasis perbandingan jumlah elektron pada satu unit keadaan dan volume struktur.

2. Kerapatan Keadaan

Kerapatan keadaan (*density of state*, DOS) adalah jumlah keadaan tiap unit energi dan tiap unit volume. Sebelum menghitung kerapatan keadaan pada struktur nanometer (sumur nano, kawat nano dan titik nano), di bawah ini akan dihitung terlebih dahulu struktur besar tiga dimensi (3D). Untuk menghitungnya perlu dilakukan analisa sebagai berikut.

Di dalam ruang kristal dimensi 3 berbentuk kubus (Gambar 1), hubungan antara energi dan k (ruang resiprokal) dapat dituliskan sebagai berikut,

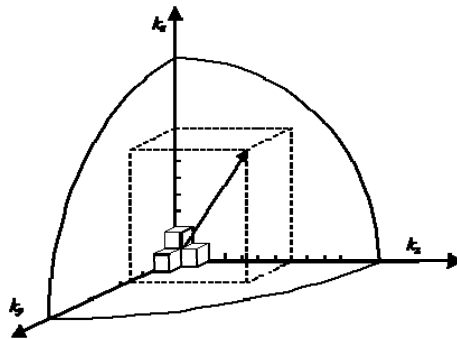
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1)$$

dalam hal ini,

$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, di mana $k_x = \frac{2\pi}{L}n_x$, $k_y = \frac{2\pi}{L}n_y$ dan $k_z = \frac{2\pi}{L}n_z$. Catatan bahwa n_x, n_y, n_z adalah bilangan bulat. Sehingga,

$$E = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m} \quad (2)$$

Ilustrasi ruang k ini digambarkan pada Gambar 1.



Gambar 1. Ilustrasi ruang k untuk perhitungan kerapatan keadaan.

Untuk menentukan densitas kerapatan, dihitung perbandingan sebagai berikut:

Volume bola : jumlah elektron n = volume satu unit keadaan : jumlah elektron dalam satu unit keadaan

$$\frac{4\pi k^3}{3} : n = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3 : 2 \text{ (berbeda spin dengan arah spin ke atas dan spin ke bawah)}$$

$$n = 2 \cdot \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^3} \quad (3)$$

Jumlah keadaan (didefinisikan sebagai N) pada hakikatnya sama dengan jumlah elektron n karena tiap elektron menempati satu keadaan. Densitas keadaan ρ adalah jumlah total keadaan per unit volume, per unit energi. Selanjutnya dilakukan langkah sebagai berikut:

Pertama, jumlah keadaan N (sama dengan n) dibagi dengan volume ruang kubus, yaitu L^3 .

$$N = \frac{n}{L^3}, N = 2 \cdot \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^3} \cdot \frac{1}{L^3}$$

$$N = 2 \cdot \frac{4\pi k^3}{3} \cdot \frac{1}{(2\pi)^3} \quad (4)$$

Selanjutnya, persamaan (4) didiferensialkan untuk mendapatkan kerapatan keadaan = jumlah keadaan per unit energi, per unit volume sehingga

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}, \text{ sehingga } \rho(E) = \frac{dN}{dk} \cdot \frac{dk}{dE}$$

$$\frac{dN}{dk} = 2 \cdot \frac{4\pi k^2}{(2\pi)^3} \quad (5)$$

Dari hubungan energi E dan k ,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ dan } k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ didapatkan } \frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{E^{\frac{1}{2}}}$$

$$\rho^{3D}(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

Satuan dari kerapatan keadaan pada dimensi 3 $\rho^{3D}(E)$ adalah $J^{-1}m^{-3}$ atau $eV^{-1}cm^{-3}$.

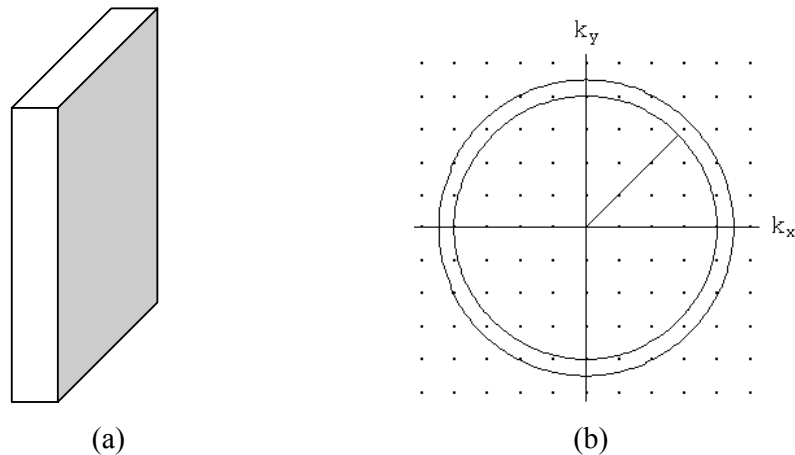
3. Densitas Keadaan pada Struktur Sumur Nano

Perhitungan densitas keadaan pada struktur dimensi 2 (sumur nano), pada hakikatnya sama dengan cara yang digunakan pada dimensi 3. Dengan memperhatikan Gambar 2 dan selanjutnya dihitung jumlah elektron di dalam lingkaran dengan luas πk^2 . Catatan bahwa dalam unit terkecil keadaan dengan luas $(2\pi/L)^2$ terisi oleh 2 elektron (berbeda arah spin).

Luas lingkaran : jumlah elektron n = luas satu unit keadaan : jumlah elektron dalam satu unit keadaan

$$\pi k^2 : n = \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 : 2 \text{ (berbeda spin, arah ke atas dan arah ke bawah)}$$

$$n = 2 \cdot \pi k^2 \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^2} \quad (7)$$



Gambar 2. Ilustrasi (a) sumur nano (ruang nyata) dan (b) ruang k (ruang resiprocal).

Jumlah keadaan N pada hakikatnya sama dengan jumlah elektron n . Densitas keadaan adalah jumlah keadaan per unit volume per unit energi. Pertama, perlu dihitung jumlah keadaan per unit volume dengan mengetahui bahwa struktur sumur kuantum mempunyai lebar L , tinggi L dan panjang w , sehingga volumenya wL^2 .

$$N = \frac{n}{wL^2}, \text{ sehingga } N = 2 \cdot \pi k^2 \cdot \frac{1}{(2\pi/L)^2} \cdot \frac{1}{wL^2}$$

$$N = \frac{k^2}{2\pi w}. \quad (8)$$

Selanjutnya dihitung jumlah keadaan per unit volume per unit energi dengan cara mendiferensialkan persamaan (8) terhadap energi.

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}, \text{ sehingga } \rho(E) = \frac{dN}{dk} \cdot \frac{dk}{dE}$$

$$\frac{dN}{dk} = \frac{k}{\pi w} \quad (9)$$

Dari hubungan energi E dan vektor gelombang k ,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \text{ dan } k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \text{ didapatkan } \frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{2}.$$

Maka densitas keadaan untuk dimensi 2 (sumur potensial) menjadi

$$\rho^{2D}(E) = \frac{1}{\pi w} \cdot \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{2}$$

$$\rho^{2D}(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2 w} \quad (10)$$

Satuan dari kerapatan keadaan pada dimensi 2, $\rho^{2D}(E)$ adalah $J^{-1}m^{-3}$ atau $eV^{-1}cm^{-3}$.

Apabila banyak level energi di dalam sumur kuantum, maka densitas keadaan pada energi tertentu merupakan gabungan dari total keadaan di bawah titik energi tersebut, sehingga dapat dinyatakan sebagai,

$$\rho^{2D}(E) = \sum_{i=1}^{\infty} \frac{m}{\pi \hbar^2} \Theta(E - E_i) \quad (11)$$

di mana Θ adalah unit fungsi step.

4. Densitas Keadaan pada Struktur Kawat Nano

Perhitungan densitas keadaan pada struktur dimensi 1 (kawat nano), pada hakekatnya sama dengan cara yang digunakan pada dimensi 3 dan dimensi 2. Pertama-tama dihitung jumlah keadaan (pada hakekatnya sama dengan jumlah elektron) pada batang dengan panjang $2k$. Catatan, $2k$ didapatkan dari definisi panjang batang dari $0 \leq k \leq k$ dan $0 \leq k \leq -k$.

Panjang sumbu x : jumlah elektron n = panjang satu unit keadaan : jumlah elektron dalam satu unit keadaan

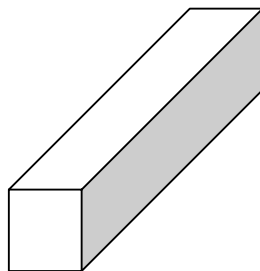
$$2k : n = \frac{2\pi}{L} : 2 \text{ (berbeda spin, up dan down)}$$

$$n = 2k \cdot \frac{1}{2\pi/L} \quad (12)$$

Jumlah keadaan N (sama dengan n) dibagi dengan volume dimensi 1 (kawat nano) dengan panjang $L \times w_1 \times w_2$ adalah,

$$N = \frac{n}{L w_1 w_2}, \text{ sehingga } N = 2k \cdot \frac{1}{2\pi/L} \cdot \frac{1}{L w_1 w_2}$$

$$N = \frac{2k}{\pi w_1 w_2} \quad (13)$$



Gambar 3. Struktur dimensi 1 (kawat nano) berbentuk balok.

Persamaan (13) adalah jumlah keadaan per unit volume. Selanjutnya, persamaan (13) dideferensialkan untuk mendapatkan jumlah keadaan per unit energi, per unit volume, yang merupakan definisi dari densitas keadaan, sehingga

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE}, \text{ sehingga } \rho(E) = \frac{dN}{dk} \cdot \frac{dk}{dE}$$

$$\frac{dN}{dk} = \frac{2}{\pi W^2} \quad (14)$$

Dari hubungan energi E dan vektor gelombang k ,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \text{ didapatkan } k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}}, \text{ sehingga } \frac{dk}{dE} = \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{2}$$

Maka densitas keadaan untuk dimensi 1 (kawat kuantum) menjadi

$$\begin{aligned} \rho^{1D}(E) &= \frac{2}{\pi W^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{E^{-\frac{1}{2}}}{2} \\ &= \frac{1}{\pi W^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot E^{-\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Satuan dari kerapatan keadaan pada dimensi 1, $\rho^{1D}(E)$ adalah $J^{-1}m^{-3}$ atau $eV^{-1}cm^{-3}$.

Sebagaimana pada dimensi 2, apabila banyak level energi di dalam sumur kuantum, maka densitas kerapatan pada energi tertentu merupakan gabungan dari semua keadaan di bawah titik energi tersebut, sehingga dapat dinyatakan sebagai,

$$\rho^{1D}(E) = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\pi W^2} \cdot \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{E-E_i}} \Theta(E-E_i) \quad (16)$$

di mana Θ adalah unit fungsi step.

Perhitungan energi level pada kawat nano dilakukan sebagai berikut. Pada struktur dimensi 2 elektron hanya terperangkap di satu koordinat saja (misalkan pada sumbu x), sehingga level energi,

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \text{ di mana,}$$

$$k_x = \frac{n\pi}{W} \quad (n=1, 2, 3, \dots, \text{ dan } W \text{ adalah lebar sumur potensial}).$$

Pada struktur dimensi 1, ada 2 arah koordinat di mana elektron terperangkap pada koordinat tersebut (misalkan sumbu y dan sumbu z), maka level energi menjadi,

$$E = \frac{\hbar^2 (k_y^2 + k_z^2)}{2m}.$$

Karena k_y dan k_z adalah,

$$k_y = \frac{n_y \pi}{W_y}, \quad k_z = \frac{n_z \pi}{W_z}$$

dan W_y dan W_z masing-masing adalah lebar dan tinggi kawat kuantum (bentuk kawat nano seperti balok terlihat pada Gambar 3).

Dari persamaan di atas didapatkan,

$$E_{(n_x, n_y, n_z)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (17)$$

Pada persamaan di atas bisa didapatkan energi level seperti di bawah

Level pertama $E_{(1,1)}$
 Level kedua $E_{(1,2)}$ dan $E_{(2,1)}$
 Level ketiga $E_{(2,2)}$
 Level keempat $E_{(1,3)}$ dan $E_{(3,1)}$
 Level kelima $E_{(2,3)}$ dan $E_{(3,2)}$
 Level keenam $E_{(3,3)}$
 dan seterusnya.

5. Densitas Keadaan pada Struktur Titik Nano

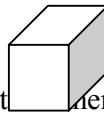
Pada dimensi 0, tidak ada gerakan bebas yang bisa dilakukan elektron, karena elektron terperangkap dalam semua arah, yaitu baik k_x , k_y dan k_z . Jadi tidak ada ruang k yang bisa diisi oleh elektron. Karena pada setiap keadaan level energi hanya bisa diisi oleh 2 elektron, maka densitas keadaan untuk struktur dimensi 0 (titik kuantum) dapat dinyatakan dengan fungsi delta.

$$\rho^{1D}(E) = 2\delta(E - E_0) \quad (18)$$

di mana $\delta(E - E_0)$ adalah fungsi delta.

Untuk kondisi lebih dari satu level energi, maka densitas kerapatan menjadi

$$\rho^{1D}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} 2\delta(E - E_n). \quad (19)$$



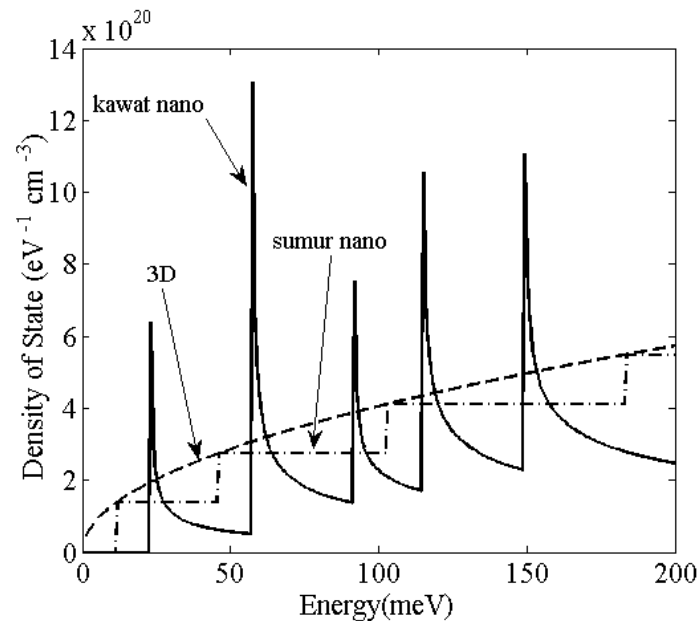
Gambar 4. Struktur dimensi 0 (titik nano)

6. Hasil Perhitungan

Gambar 5 menunjukkan hasil perhitungan kerapatan keadaan pada struktur dimensi 3, sumur nano (dimensi 2) dan kawat nano (dimensi nano) pada material silikon. Pada perhitungan ini diasumsikan bahwa silikon mempunyai massa efektif elektron *longitudinal* (m_l) sebesar 0.98 dan massa efektif elektron *transverse* (m_t) sebesar 0.19. Massa efektif total dihitung dengan persamaan $m = (m_l \times m_t)^{1/3}$. Sumur nano mempunyai lebar 10 nm, sedangkan kawat nano mempunyai lebar dan tinggi

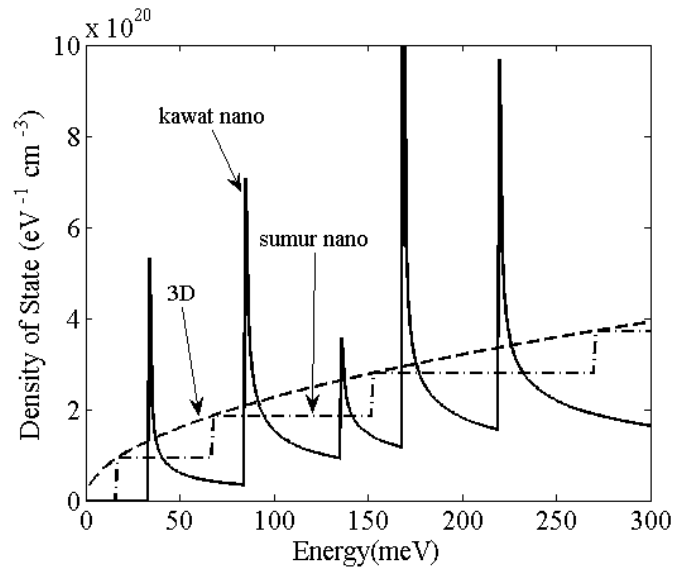
masing-masing 10 nm. Pada struktur dimensi 3, terlihat bahwa kerapatan keadaan berbanding lurus dengan akar energi. Hasil ini sebagaimana yang telah diketahui selama ini. Ekstensi perhitungan pada struktur dimensi 3 ini kemudian diaplikasikan pada struktur sumur nano (dimensi 2) dan hasilnya sebagaimana diplot pada grafik yang sama pada Gambar 5. Didapatkan hasil grafik berbentuk tangga (step) dengan posisi tangga (4 tangga pertama) dari energi terendah masing-masing 11.5 meV, 45.8 meV, 103.1 meV dan 183.2 meV. Selanjutnya hasil perhitungan untuk struktur kawat nano (dimensi 1) dengan lebar 10 nm dan tinggi 10 nm dapat terlihat pada Gambar 5. Grafik kerapatan keadaan menunjukkan bentuk irisan antara fungsi diskrit dan penurunan eksponensial, di mana energi diskrit menunjukkan 22.9 meV, 57.3 meV, 91.6 meV, 114.6 meV dan 148.9 meV.

Gambar 6 adalah hasil perhitungan kerapatan keadaan ketiga struktur pada material germanium. Di sini diasumsikan bahwa germanium mempunyai massa efektif elektron *longitudinal* (m_l) sebesar 1.64 dan massa efektif elektron *transverse* (m_t) sebesar 0.082. Ukuran sumur nano dan kawat nano pada germanium ini sama dengan ukuran pada silikon. Terlihat di sini bahwa baik pada struktur dimensi 3, sumur nano maupun kawat nano, kerapatan keadaan mempunyai bentuk seperti pada Gambar 5. Posisi tangga pada sumur nano (4 tangga pertama) dari energi terendah masing-masing 16.9 meV, 67.6 meV, 152.1 meV dan 270.4 meV. Sedangkan pada kawat nano, 5 energi diskrit pertama menunjukkan masing-masing 33.8 meV, 84.5 meV, 135.2 meV, 169.0 meV dan 219.6 meV.

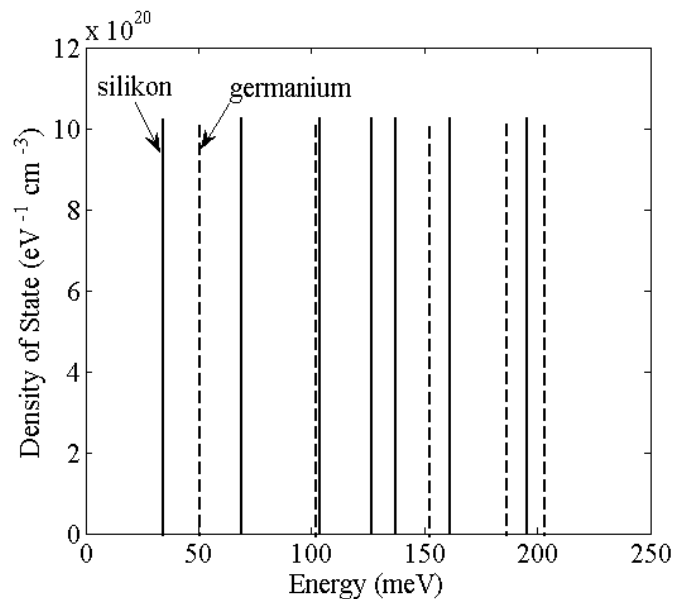


Gambar 5. Hasil perhitungan kerapatan keadaan untuk material silikon.

Gambar 7 adalah hasil perhitungan kerapatan keadaan struktur titik nano pada material silikon dan germanium sampai dengan energi berkisar 220 meV. Ukuran titik nano sama pada kedua material yaitu $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$. Terlihat di sini bahwa kerapatan keadaan hanya berbentuk energi diskrit saja. Meskipun demikian, posisi energi diskrit pada kedua material tidak sama, silikon memiliki energi yang lebih rendah dibandingkan germanium untuk energi level yang sama. Hal demikian terjadi juga pada sumur nano dan kawat nano pada Gambar 5 dan Gambat 6. Hal ini disebabkan karena perbedaan massa efektif dari ketiga material tersebut.



Gambar 6. Hasil perhitungan kerapatan keadaan untuk material germanium.



Gambar 7. Hasil perhitungan kerapatan keadaan struktur titik nano untuk material silikon (garis normal) dan germanium (garis putus-putus).

7. Kesimpulan

Makalah ini telah membahas cara perhitungan kerapatan keadaan dari ketiga struktur tersebut berikut contoh aplikasinya pada beberapa jenis semikonduktor seperti silikon dan germanium. Didapatkan hasil bahwa meskipun bentuk strukturnya sama antara material satu dengan lainnya (silikon dan germanium), masing-masing mempunyai

harga kerapatan keadaan yang berbeda. Ini dikarenakan perbedaan massa efektif pada material-material tersebut.

Terima Kasih

Terima kasih disampaikan kepada Sdri. Sri Purwiyanti atas diskusi yang mendalam dalam pelaksanaan riset ini.

Daftar Pustaka

- [1] S.M. Sze, “Physics of Semiconductor Devices”, John Wiley & Son, Second Edition, 1981, p. 22.
- [2] M.S. Tyagi, “Introduction to Semiconductor Materials and Devices”, John Wiley & Son, Second Edition, 1991, p. 89.
- [3] K.K. Likharev, “Single-electron devices and their applications”, Proceedings of the IEEE, 87, 606-632 (1999).
- [4] International Technology of Roadmap for Semiconductors (ITRS), 2010 Update.
- [5] Y. Takahashi, M. Nagase, H. Namatsu, K. Kurihara, K. Iwadate, Y. Nakajima, S. Horiguchi, K. Murase, and M. Tabe, "Fabrication technique Si single electron transistor operating at room temperature, Electron. Lett., Vol. 31, No. 2, 136–137 (1995).
- [6] P. Harrison, “Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics”, John Wiley & Sons, 1 edition, 2000.