

Transmitansi Elektron yang Melalui Penghalang dengan Ketebalan Nanometer pada Heterostruktur Anisotropik yang Diberi Tegangan Panjar

Lilik Hasanah[#], Khairurrijal[§], Mikrajuddin Abdullah, Toto Winata, and Sukirno
*KK Fisika Material Elektronik, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam,
Institut Teknologi Bandung
Jalan Ganesa 10, Bandung 40132
[#]Jurusan Fisika, FPMIPA
Universitas Pendidikan Indonesia
Jalan Dr. Setiabudi no 229, Bandung 40154
[§]E-mail: krijal@fi.itb.ac.id*

Abstrak

Pernyataan analitik dari transmitansi elektron yang datang pada heterostruktur anisotropik diturunkan dengan memecahkan persamaan Schrödinger yang melibatkan termasuk elemen-elemen tensor massa-efektif *off-diagonal*. Di sini di asumsikan bahwa arah dari propagasi elektron adalah sembarang sudut terhadap antarmuka heterostruktur dan massa efektif elektron tergantung pada posisi. Pernyataan analitik ini diterapkan pada heterostruktur Si(110)/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si(110) dimana ketebalan penghalang Si_{0.7}Ge_{0.3} adalah 5 nm. Penghalang diberi tegangan panjar 50 meV. Hasil perhitungan transmitansi dihitung untuk energi datang elektron lebih rendah dan lebih tinggi dari potensial penghalang. Disini ada tiga perhitungan yang digunakan yaitu untuk kasus $E > V(z)$ dan untuk kasus $E < V(z)$ digunakan perhitungan transmitansi terobosan langsung (*direct tunneling*) dan Fowler Nordheim (FN). Hasil perhitungan menunjukkan bahwa transmitansi tidak simetri terhadap sudut datang. Apabila energi datangnya dinaikkan, transmitansi akan naik sampai lebih dari satu untuk energi datang tertentu kemudian akan menurun dan beresilasi disekitar satu.

Kata kunci—**transmitansi, material anisotropik, penghalang dengan ketebalan nanometer, heterostruktur**

Pendahuluan

Fenomena terobosan melalui penghalang potensial sudah sejak lama dipelajari dan sampai sekarang masih merupakan topik yang menarik untuk dipelajari. Beberapa penulis sebelumnya yang telah mengawali mempelajari tentang perhitungan koefisien transmisi ini di antaranya Paranjape yang membahas tentang waktu terobosan dan koefisien transmisi elektron yang melalui heterostruktur isotropik dengan masa efektif yang berbeda-beda[1], kemudian Kim dan Lee telah menurunkan waktu terobosan, posisi setelah penerobosan dan koefisien transmisi elektron dalam penghalang heterostruktur yang ditumbuhkan pada material anisotropik dengan melibatkan elemen-elemen tensor masa-efektif *off-diagonal* [2],[3]. Sebelumnya, penulis telah menghitung transmitansi dan waktu terobosan elektron yang datang pada penghalang potensial heterostruktur yang ditumbuhkan pada material anisotropik Si(110)/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si(110) tanpa diberi tegangan panjar dengan memvariasikan sudut datang dari arah propagasi elektron[4]. Kemudian

kami mempelajari secara teori transmitansi elektron bila penghalang potensial diberi tegangan panjar sebesar 50 meV dengan ketebalan penghalang adalah 5 nm pada struktur Si(110)/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si(110) [5] dan struktur Si(110)/Si_{0.5}Ge_{0.5}/Si(110) [6]. Perhitungan transmitansi dilakukan untuk energi elektron yang lebih rendah dari penghalang potensial dan sudut datang dari arah propagasi elektron terhadap antar muka heterostruktur divariasikan. Pada paper ini, kami melakukan perhitungan transmitansi elektron melalui struktur Si(110)/Si_{0.7}Ge_{0.3}/Si(110) yang diberi tegangan panjar sebesar 50 meV dan ketebalan penghalang Si_{0.7}Ge_{0.3} adalah 5 nm dengan energi elektron lebih tinggi dari penghalang potensial dan sudut datang dari arah propagasi elektron terhadap antar muka heterostruktur divariasikan.

Model Teoritis

Untuk mempelajari kelakuan elektron dalam heterostruktur anisotropik maka persamaan Schrödinger berikut harus dipecahkan :

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) , \quad (1)$$

dimana

$$H = \frac{1}{2m_0} \mathbf{p}^T \alpha(\mathbf{r}) \mathbf{p} + V(\mathbf{r}) . \quad (2)$$

H adalah Hamiltonian, m_0 adalah masa elektron bebas, \mathbf{p} vektor momentum, $(1/m_0)\alpha$ adalah invers tensor masa efektif and $V(\mathbf{r})$ adalah energi potensial. Gambar 1 memperlihatkan profil potensial dalam arah z. Elektron datang dari daerah I menuju penghalang potensial (daerah II). Masa efektif elektron hanya tergantung pada arah z. Fungsi gelombang yang diperoleh dari (1) dan (2) adalah

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(z)\exp(-i\gamma z)\exp(i(k_x x + k_y y)) , \quad (3)$$

dimana

$$\gamma = \frac{k_x \alpha_{xz} + k_y \alpha_{yz}}{\alpha_{zz}} \quad (4)$$

$\varphi(z)$ memenuhi persamaan Schrödinger satu dimensi berikut :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \alpha_{zz,l} \frac{d^2 \varphi(z)}{dz^2} + V(z)\varphi(z) = E_z \varphi(z) \quad (5)$$

dimana l menyatakan masing-masing daerah pada Gambar 1. Energi elektron datang dalam arah z dapat ditulis sebagai :

$$E_z = E - \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{i,j \in \{x,y\}} \beta_{ij} k_i k_j , \quad (6)$$

dimana energi elektron yang masuk ke dalam penghalang potensial adalah

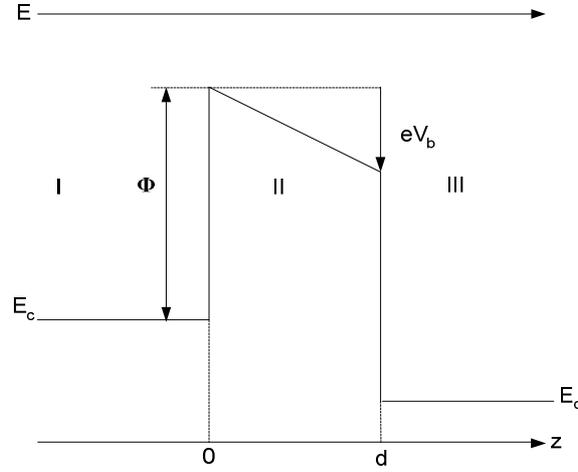
$$E = \sum_{i,j \in \{x,y,z\}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \alpha_{ij,l} k_i k_j , \quad (7)$$

dengan

$$\beta_{ij} = \alpha_{ij} - \frac{\alpha_{iz} \alpha_{zj}}{\alpha_{zz}} , \quad (8)$$

dan α_{ij} adalah elemen-elemen tensor berhubungan dengan invers tensor masa efektif.

Fungsi gelombang elektron di masing-masing daerah adalah :



Gambar 1. Model yang digunakan dalam perhitungan numerik.

$$\Psi_I(z) = (Ae^{ik_1 z} + Be^{-ik_1 z})e^{-(i\gamma_1 z)} e^{-(ik_x x + ik_y y)} \quad z \leq 0, \quad (9)$$

$$\Psi_2(z) = (Ce^{-\int_0^z k_2(z) dz} + De^{\int_0^z k_2(z) dz})e^{-(i\gamma_2 z)} e^{-(ik_x x + ik_y y)} \quad 0 < z < d, \quad (10)$$

$$\Psi_3(z) = Fe^{ik_3 z} e^{-(i\gamma_1 z)} e^{-(ik_x x + ik_y y)} \quad z \geq d, \quad (11)$$

dengan bilangan gelombang k_1 , k_2 , dan k_3 adalah sebagai berikut :

$$k_1 = \left\{ \frac{2m_0 E_z}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha_{zz,1}} \right\}^{1/2}, \quad (12)$$

$$k_2^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha_{zz,2}} (\Phi - eFz) - \frac{\alpha_{zz,1}}{\alpha_{zz,2}} k_1^2 - \frac{1}{\alpha_{zz,2}} \sum_{i,j \in (x,y)} (\beta_{ij,1} - \beta_{ij,2}) k_i k_j, \quad (13)$$

$$k_3 = \left\{ \frac{2m_0 (E_z + eV_b)}{\hbar^2} \frac{1}{\alpha_{zz,1}} \right\}^{1/2}, \quad (14)$$

dimana Φ adalah tinggi penghalang potensial akibat ketidakkontinuan pita Si(110)-Si_{0.7}Ge_{0.3} dan V_b adalah tegangan panjar yang diberikan pada penghalang potensial.

Syarat batas fungsi gelombang pada $z = 0$ dan $z = d$ diberikan oleh [2],[3]:

$$\Psi_I(z = 0^-) = \Psi_2(z = 0^+), \quad (15a)$$

$$\frac{1}{m_0} \left[\alpha_{zx,1} \frac{d\Psi_1}{dz} + \alpha_{zy,1} \frac{d\Psi_1}{dz} + \alpha_{zz,1} \frac{d\Psi_1}{dz} \right]_{z=0^-} = \frac{1}{m_0} \left[\alpha_{zx,2} \frac{d\Psi_2}{dz} + \alpha_{zy,2} \frac{d\Psi_2}{dz} + \alpha_{zz,2} \frac{d\Psi_2}{dz} \right]_{z=0^+}, \quad (15b)$$

$$\Psi_2(z = d^-) = \Psi_3(z = d^+), \quad (15c)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{m_0} \left[\alpha_{zx,2} \frac{d\psi_2}{dz} + \alpha_{zy,2} \frac{d\psi_2}{dz} + \alpha_{zz,2} \frac{d\psi_2}{dz} \right]_{z=d^-} \\ &= \frac{1}{m_0} \left[\alpha_{zx,1} \frac{d\psi_3}{dz} + \alpha_{zy,1} \frac{d\psi_3}{dz} + \alpha_{zz,1} \frac{d\psi_3}{dz} \right]_{z=d^+}. \end{aligned} \quad (15d)$$

Dari syarat batas ini, diperoleh amplitudo transmisi T_a sebagai :

$$T_a = G \exp(i\phi), \quad (16)$$

dimana:

$$G = \begin{cases} \frac{2k_1 k_2^d}{(P^2 \sinh^2(u) + Q^2 \cosh^2(u))^{1/2}}, & k_2^d > 0 \\ \frac{2k_1 k_2^d}{(P'^2 \sin^2(u') + Q'^2 \cos^2(u'))^{1/2}}, & k_2^d < 0 \end{cases}, \quad (17)$$

adalah amplitudo T_a ,

$$\phi = \begin{cases} \left[\tan^{-1} \left(\frac{P}{Q} \right) \tanh(u) \right] - k_3 d + (\gamma_1 - \gamma_2) d \\ \left[\tan^{-1} \left(\frac{P'}{Q'} \right) \tan(u') \right] - k_3 d + (\gamma_1 - \gamma_2) d \end{cases}, \quad (18)$$

adalah fasa T_a ,

$$P = \left(\frac{\alpha_{zz,1}}{\alpha_{zz,2}} k_1 k_3 - \frac{\alpha_{zz,2}}{\alpha_{zz,1}} k_2^0 k_2^d \right), \quad (19a)$$

$$P' = \left(\frac{\alpha_{zz,1}}{\alpha_{zz,2}} k_1 k_3 + \frac{\alpha_{zz,2}}{\alpha_{zz,1}} k_2^0 k_2^d \right), \quad (19b)$$

$$Q = k_3 k_2^0 + k_1 k_2^d, \quad (20a)$$

$$Q' = k_3 k_2^0 + k_1 k_2^d, \quad (20b)$$

$$u = \int_0^d k_2 dz, \quad (21a)$$

$$u' = \int_0^d k_2' dz, \quad (21b)$$

dan

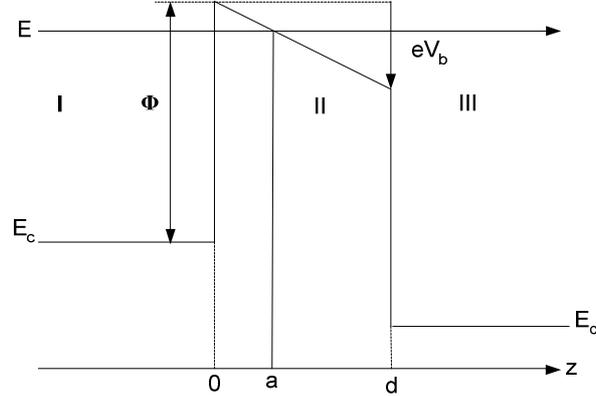
$$k_2^2 = -k_2'^2. \quad (22)$$

k_2^2 positif apabila energi datang elektron lebih kecil dari penghalang potensial ($E < V(z)$)

untuk kasus terobosan langsung (*direct tunneling*) dan k_2^2 negatif apabila energi datang elektron lebih besar dari penghalang potensial ($E > V(z)$). Apabila energi datang elektron ada diantara Φ dan $(\Phi - V_b)$ maka terjadi terobosan Fowler Nordheim (FN) seperti yang

ditunjukkan oleh gambar 2. Pada kasus terobosan FN maka fungsi gelombang di daerah II menjadi

$$\Psi_2(z) = (C e^{-\left(\int_0^a k'_2(z) dz - i \int_a^d k'_2(z) dz\right)} + D e^{\left(\int_0^a k'_2(z) dz - i \int_a^d k'_2(z) dz\right)}) e^{-(i\gamma_2 z)} e^{-i(k_x x + i k_y y)} \quad (23)$$



Gambar 2. Model terobosan Fowler Nordheim (FN)

Amplitudo tranmisi T_a adalah :

$$G = \frac{2k_1 k_2^d}{(P''^2 \sinh^2(v - iw) + Q''^2 \cosh^2(v - iw))^{1/2}} \quad (24)$$

dan fasa T_a adalah :

$$\phi = \left[\tan^{-1} \left(\frac{P''}{Q''} \right) \tanh(v - iw) \right] - k_3 d + (\gamma_1 - \gamma_2) d \quad (25)$$

dimana

$$P'' = \left(-\frac{\alpha_{zz,I}}{\alpha_{zz,2}} k_1 k_3 - \frac{\alpha_{zz,2}}{\alpha_{zz,I}} k_2^0 k_2^d \right) \quad (26)$$

$$Q'' = -k_3 k_2^0 - k_1 k_2^d \quad (27)$$

$$v = \int_0^a k'_2 dz \quad (28)$$

dan

$$w = \int_a^d k'_2 dz \quad (29)$$

Penurunan transmitansi di atas akan kembali seperti persamaan koefisien tranmitansi yang telah diturunkan oleh Kim dan Lee [2], [3] apabila keadaan penghalang potensialnya tidak diberi tegangan panjar.

Transmitansi diperoleh dari persamaan berikut :

$$T = T_a^* T_a \quad (30)$$

Hasil Perhitungan dan Diskusi

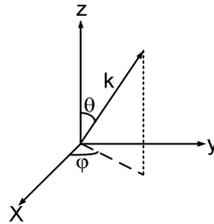
Mengacu pada gambar 1 dan 2, penghalang potensial $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ (daerah II) ditumbuhkan pada Si (110) (daerah I dan III). Tebal penghalang adalah 50\AA dan ketidakkontinuan pita adalah 216 meV [2]. Invers masa efektif yang digunakan dalam contoh ini berhubungan dengan elemen-elemen tensor α_{ij} pada lembar 1 diberikan oleh tabel 1 [7].

Tabel I
Elemen-elemen tensor (α_{ij}) yang digunakan dalam perhitungan numerik

Daerah I, III			Daerah II		
5.26	0	0	5.91	0	0
0	3.14	2.12	0	3.86	2.45
0	2.12	3.14	0	2.45	3.86

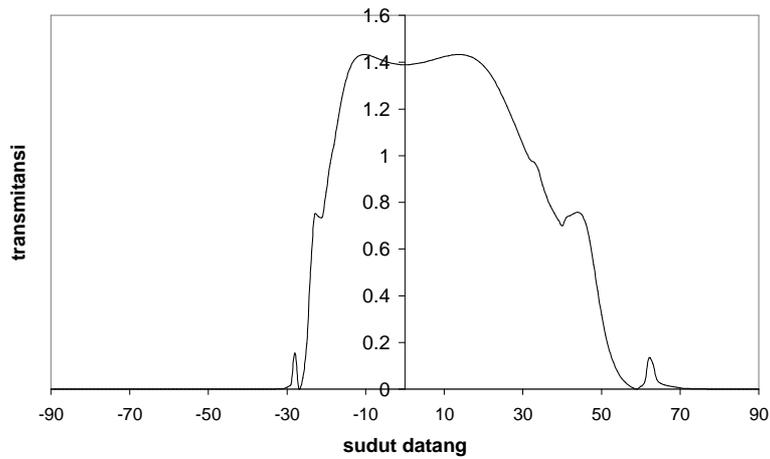
Gambar 3 memperlihatkan sistem koordinat yang digunakan. Posisi ketika elektron menumbuk penghalang dipilih sebagai pusat sistem koordinat. Dari sistem koordinat ini, maka (7) menjadi:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ \alpha_{xx1} k^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \alpha_{yy1} k^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi + \alpha_{zz1} k^2 \cos^2 \theta + 2 \left(\alpha_{xy1} k^2 \sin^2 \theta \cos \varphi \sin \varphi + \alpha_{yz1} k^2 \sin^2 \theta \cos \theta \sin \varphi + \alpha_{zx1} k^2 \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi \right) \right\} \quad (31)$$

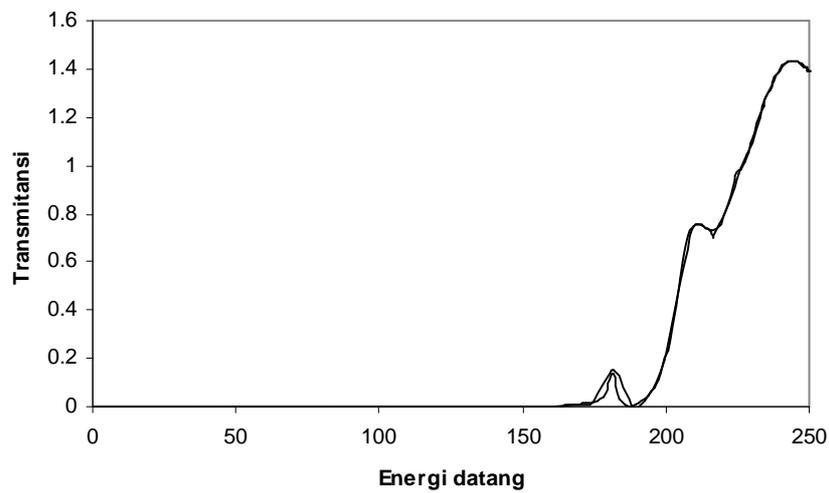


Gambar 3. Sistem koordinat yang digunakan dalam analisis

Kami melakukan perhitungan transmitansi untuk sudut datang \mathbf{k} (vektor gelombang elektron datang) yang divariasikan dari -90° sampai 90° . Meskipun sudut datang adalah θ dan φ , tetapi kami menetapkan φ pada $\pi/2$ untuk penyederhanaan. Sudut datang ini mempengaruhi nilai energi datang elektron pada sumbu z . Hasil plot grafik transmitansi untuk energi elektron 250 meV terhadap variasi sudut diperlihatkan oleh gambar 4, terlihat transmitansi tidak simetri dengan perubahan tanda sudut datang ($\theta \rightarrow -\theta$), ini menunjukkan material anisotropik. Transmitansi bernilai terbesar yaitu sekitar 1.4 untuk sudut datang -20° sampai 20° , pada sudut ini energi datangnya sekitar 250 meV . Pada gambar 5, transmitansi di plot terhadap energi datang terlihat bahwa nilai transmitansi naik sampai dengan 1.4 untuk energi datang $0\text{ meV} - 250\text{ meV}$.

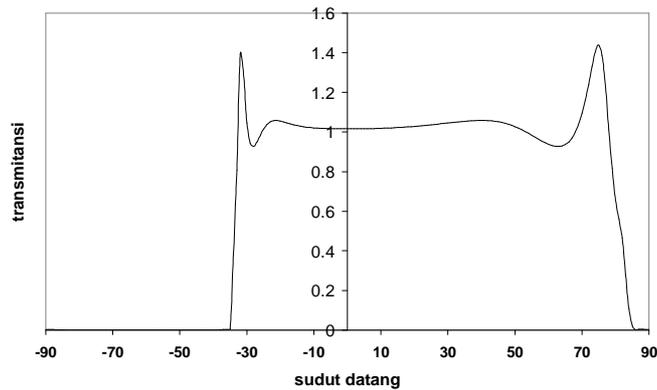


Gambar 4. Transmittansi terhadap sudut datang vektor gelombang dari -90° sampai dengan 90° untuk energi elektron 250 meV

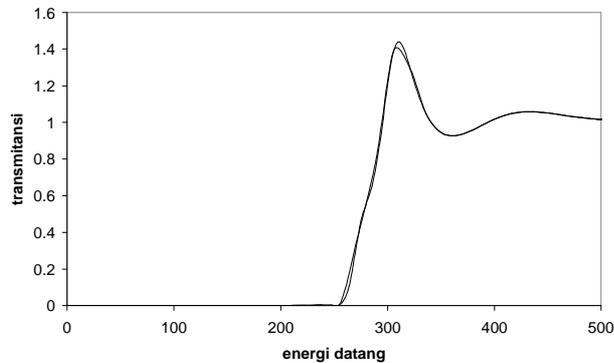


Gambar 5. Transmittansi terhadap energi datang elektron untuk energi masuk penghalang potensial sebesar 250 meV

Apabila energi elektron yang menembus penghalang potensial dinaikkan menjadi 500 meV, maka plot grafik transmittansi terhadap sudut datang dan plot grafik transmittansi terhadap energi datang masing-masing diperlihatkan oleh gambar 6 dan 7.



Gambar 6. Transmittansi terhadap sudut datang vektor gelombang dari -90° sampai dengan 90° untuk energi elektron 500 meV



Gambar 7. Transmittansi terhadap energi datang elektron untuk energi masuk penghalang potensial sebesar 500 meV

Transmittansi pada gambar 6 juga tidak simetri terhadap perubahan sudut datang. Transmittansi bernilai satu untuk sudut datang antara -30° sampai dengan 70° , energi pada sudut datang ini bernilai antara 350meV-500meV dan transmittansi bernilai sekitar 1.4 pada sudut datang sekitar -25° dan 80° dimana pada sudut datang ini, energi datang elektronnya bernilai sekitar 300 meV. Dari gambar 7 terlihat bahwa nilai transmittansi meningkat sampai dengan 1.4 untuk energi datang 0-300 meV dan kemudian menurun dan beresilasi di sekitar satu untuk energi datang di atas 300 meV. Baik untuk energi elektron 250 meV maupun 500 meV, transmittansi di atas satu terjadi untuk energi datang elektron di atas penghalang potensial yang kemudian menurun lagi nilainya dan beresilasi di sekitar nilai transmittansi satu.

Kesimpulan

Kami sudah menurunkan pernyataan analitik dari koefisien transmisi elektron dalam penghalang potensial dengan ketebalan nanometer yang diberi tegangan panjar yang ditumbuhkan pada material anisotropik dengan memvariasikan sudut datang. Efek masa efektif yang berbeda pada antarmuka sambungan hetero turut diikutsertakan. Syarat batas

untuk fungsi gelombang elektron (dalam pendekatan masa efektif) pada sambungan heterostruktur anisotropik juga dilibatkan dalam perhitungan. Perhitungan dikerjakan untuk penghalang potensial $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$ yang ditumbuhkan pada Si (110). Perhitungan menunjukkan bahwa transmitansi tidak simetri terhadap sudut datang, ini menunjukkan material anisotropik. Transmitansi akan meningkat sampai dengan 1.4 apabila energi datangnya dinaikkan kemudian akan menurun dan akan beresilasi pada nilai satu apabila energi datangnya terus dinaikkan.

Daftar Pustaka

- [1] V.V. Paranjape: Transmission coefficient and stationary-phase tunneling time of an electron through a heterostructure, *Phys.Rev. B* Vol 52. No 15, 1995, pp. 10 740-10 743
- [2] K.-Y. Kim and B. Lee: Transmission coefficient of an electron through a heterostructure barrier grown on anisotropic materials, *Phys.Rev. B* Vol 58 No 11, 1998, pp. 6728-6731.
- [3] K.-Y. Kim and B. Lee: Tunneling time and the post-tunneling position of an electron through a potential barrier in an anisotropic semiconductor, *Superlattice Microstruct.* Vol 24. No 6, 1998, pp. 389-397.
- [4] L. Hasanah, Khairurrijal, Mikrajudin, T. Winata and Sukirno : Tunneling Time and Transmission Coefficient of An Electron Tunneling Through A Nanometer-Thick Square Barrier in an Anisotropic Heterostructure, Proc. Int. Conf. Applied .Math .(ICAM05), Bandung 22-26 August 2005, CP14.
- [5] L. Hasanah, F. A. Noor, Khairurrijal, Mikrajuddin, T. Winata dan Sukirno : Koefisien transmisi elektron yang melalui pemghalang dengan ketebalan nanometer pada heterostruktur anisotropic yang diberi tegangan panjar, Proc. Nas. 3rd Kentingan Physics Forum (KPI), Solo 24 September 2005, 152-154
- [6] L. Hasanah, F. A. Noor, Khairurrijal, Mikrajuddin, T. Winata dan Sukirno : Transmission Coefficient of an Electron through a Heterostructure with Nanometer-Thick Trapezoidal Barrier Grown on an Anisotropic Material, *Proc. ITB Sains & Tek.* Vol. 38 A, No. 1, 2006, pp. 41-50
- [7] K.-Y. Kim and B. Lee, " Wigner function formulation in anisotropic semiconductor quantum wells" *Phys.Rev. B*, vol. 64, 115304, 2001.