

DOI: doi.org/10.21009/03.SNF2022.01.FA.03

REVIEW METODE PSEUDOPOTENSIAL UNTUK ANALISIS BAND GAP SEMIKONDUKTOR

Ali Sabeni^{a)}, Riser Fahdiran^{a)}, Iwan Sugihartono^{b)}

Program Studi Fisika, FMIPA Universitas Negeri Jakarta, Jl. Rawamangun Muka No. 01, Rawamangun 13220, Indonesia

Email: ^{a)}benisasabeni@gmail.com, ^{b)}isugihar@hotmail.com

Abstrak

Material semikonduktor adalah salah satu kunci perkembangan berbagai perangkat elektronik hingga saat ini. Pengetahuan mengenai semikonduktor semakin meningkat termasuk perhitungan pita energi atau *band gap* dari semikonduktor. Salah satu cara mengetahui *band gap* dari suatu semikonduktor adalah dengan metode analisis Pseudopotensial. Di dalam paper ini akan dilakukan review untuk memahami konsep metode pseudopotensial yang sudah dikembangkan untuk melakukan analisis band gap berbagai material semikonduktor. Secara umum, penggunaan metode Pseudopotensial memiliki beberapa keunggulan dibanding metode lain seperti efektivitas perhitungan yang lebih tinggi yakni dengan menyelesaikan persamaan gelombang Schrödinger satu elektron (SWE) yang dapat dilakukan secara komputasi. Selain itu, metode ini tidak melibatkan seluruh bagian atom melainkan hanya fokus pada elektron kulit terluar saja sehingga perhitungan dapat dilakukan secara efektif.

Kata-kata kunci: Review, Pseudopotensial, Semikonduktor, Band gap.

Abstract

Semiconductor materials are one of the pioneer to the development of various electronic devices until now. Research about semiconductors is increasing including the calculation of the energy band or band gap of semiconductors. One way to determine the bandgap of a semiconductor is the pseudopotential analysis method. The use of the pseudopotential method has several advantages over other methods such as those with higher computations by solving the one-electron Schrödinger wave equation (SWE) which can be done computationally. In addition, this method does not involve all parts of the atom, but only focuses on the outer shell electrons so that calculations can be carried out effectively. Tuliskan abstrak dalam bahasa Inggris.

Keywords: Review, Pseudopotential, Semiconductors, Band gap.

PENDAHULUAN

Perkembangan ilmu material merupakan salah satu kunci kemajuan dunia teknologi sehingga penelitian mengenai material terus dilakukan. Beragam divais elektronika memerlukan berbagai jenis material sebagai komponen penyusun. Jenis material yang digunakan dalam membentuk suatu divais mampu mempengaruhi performa kerja divais. Untuk meningkatkan kualitas kerja divais maka penemuan material penyusun yang baik dilakukan dengan berbagai cara seperti eksperimen laboratorium hingga sampai pada saat ini memasuki eksperimen komputasi yang mampu memodelkan material berdasarkan sifat fisis dan properti material dengan bantuan algoritma komputasi.

Dalam penelitian material baik melalui eksperimen di laboratorium hingga eksperimen secara komputasi yang menjadi perhatian utama adalah sifat fisis material dan prediksinya. Salah satu sifat fisis yang diperhatikan dari suatu material adalah konfigurasi elektron. Konfigurasi elektron merupakan interaksi antara inti atom dan elektron yang terdapat pada material. Pada beberapa material sederhana, konfigurasi elektron dapat dipecahkan dengan menggunakan persamaan schroffinger dengan mengidentifikasi besaran fisis dalam sistem kuantum. Tetapi hal ini kemudian menjadi rumit ketika dihadapkan pada material bersistem kompleks yang melibatkan banyak jumlah partikel termasuk semikonduktor.

Semikonduktor adalah jenis bahan yang berpengaruh pada kemajuan teknologi dan alat-alat elektronik yang berkembang pesat hingga saat ini. Berbagai macam perangkat seperti ponsel pintar, perkakas rumah tangga, hingga sarana transportasi tidak bisa dilepaskan dari keterlibatan semikonduktor. Semikonduktor adalah bahan dengan konduktivitas listrik karena aliran elektron (sebagai lawan konduktivitas ionik) yang besarnya antara yang dari konduktor dan isolator. Energi band gap merupakan salah satu indikator pembeda antara bahan semikonduktor dengan bahan lainnya. Masing-masing bahan yang terdapat di alam memiliki dua jenis pita yaitu pita valensi dan pita konduksi dimana kedua pita ini merupakan area perpindahan elektron. Energi band gap merupakan karakteristik semikonduktor yang menginformasikan energi minimum yang dibutuhkan suatu bahan untuk mengeksitasi elektron dari pita valensi menuju pita konduksi Dengan mengetahui energi gap suatu semikonduktor, akan memudahkan untuk melakukan perlakuan terhadap suatu bahan.

Metode Pseudopotensial adalah cara pemodelan elektron-elektron pada suatu bahan untuk dipelajari karakteristik fisis dari bahan tersebut. Salah satu besaran fisis yang dapat diteliti menggunakan metode Pseudopotensial adalah besaran energi band gap suatu bahan. Keunggulan metode ini adalah perhitungan yang hanya melibatkan elektron kulit terluar saja dan mengabaikan elektron pada kulit terdalam (Gibson 2018). Hal ini dikarenakan sifat atom pada kulit terdalam yang cenderung kaku, tidak terpolarisasi dan terikat erat pada intinya. (Richard 1998). Penelitian mengenai energi band gap menggunakan metode Pseudopotensial telah dicoba untuk melihat besaran energi band gap beberapa material semikonduktor seperti Si dan Ge. Pada penelitian ini akan dilakukan pengamatan energi band gap semikonduktor ZnO menggunakan metode Pseudopotensial.

METODOLOGI

Metode empiris pseudopotensial merupakan salah satu cara untuk menentukan karakteristik atomik suatu material. Metode ini mampu melakukan perhitungan dengan hasil yang akurat mendekati hasil perhitungan dengan menggunakan metode lain seperti DFT (Samaneh dan Aminollah 2021). Kunci utama dari metode Pseudopotensial adalah mengetahui karakteristik suatu material dengan hanya memperhitungkan elektron kulit terluar dan memperlakukannya sebagai elektron bebas, *Nearly Free Electron* (NFC) serta membekukan pengaruh elektron di bagian inti (Cohen dan Chelikowsky 1988). Potensial ini membentuk gelombang fungsi elektron yang disebut dengan *plane waves* (gelombang bidang) yang memiliki persamaan sebagai berikut:

$$|k \rangle = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum e^{i(k+G)r} \quad (1)$$

Pseudopotensial dihitung dengan pendekatan Orthogonalized Plane Wave (OPW). Pada OPW dilakukan pemisahan antara inti dan kulit terluar dari fungsi gelombang.

$$\varphi = \varphi_{pw} + \sum_c \beta_c \phi_c \quad (2)$$

Dimana φ adalah total fungsi gelombang, φ_{pw} adalah plane waves. Sedangkan ϕ_c merupakan kombinasi linear antar atom di pusat inti.

Penjabaran persamaan pseudopotensial didapatkan dari Cohen dan Bergstresser, dimulai dengan persamaan schrodinger bergantung waktu.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{(r)}\right]\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (3)$$

Selanjutnya Teorema Bloch digunakan untuk memulai kembali fungsi gelombang dalam basis gelombang bidang (plane waves) yang disebabkan oleh struktur periodic dari Kristal.

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4)$$

Berdasarkan periodisasi kedua fungsi gelombang dan potensial, perluasan gelombang bidang dapat digunakan untuk menuliskan sebuah deretan tak terbatas dan dijumlahkan dengan kisi vector timbal balik material.

$$\varphi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{h}\mathbf{r}} \quad (5)$$

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{K}\mathbf{m}} e^{i\mathbf{K}\mathbf{m}\mathbf{r}} \quad (6)$$

Pada persamaan (5) dan (6) parameter A dan V melambangkan koefisien Fourier untuk dimasukkan kedalam kisi vector. Dengan mensubsitusikan persamaan (5) dan (6) kedalam persamaan Schrodinger maka dihasilkan persamaan,

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{h}} |\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h}|^2 A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h})\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{h}} V_{\mathbf{K}\mathbf{m}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h} + \mathbf{K}\mathbf{m})\mathbf{r}} = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h})\mathbf{r}} \quad (7)$$

Persamaan (7) kemudian dikalikan dengan fungsi orthogonal $e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h})\mathbf{r}}$ dan diintegrasikan bersama volume kristal. Proses tersebut menghasilkan fungsi delta Kronecker dimana sebelumnya merupakan fungsi eksponensial.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{h}} |\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h}|^2 A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{j}} + \sum_{\mathbf{m}} \sum_{\mathbf{h}} V_{\mathbf{K}\mathbf{m}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} \delta_{\mathbf{m}\mathbf{j}-\mathbf{h}} = E(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{h}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{j}} \quad (8)$$

Pada persamaan (8) satu penjumlahan disetiap elemen dapat dieliminasi. Contohnya pada elemen pertama, h dan l bernilai sama. Setelah persamaan dieliminasi didapatkan persamaan berikut.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{\mathbf{h}} |\mathbf{k} + \mathbf{K}\mathbf{h}|^2 A_{\mathbf{K}\mathbf{j}} + \sum_{\mathbf{h}} V_{\mathbf{K}\mathbf{j}-\mathbf{h}} A_{\mathbf{K}\mathbf{h}} = E(\mathbf{K}) A_{\mathbf{K}\mathbf{j}} \quad (9)$$

Persamaan (9) dapat dijadikan sebagai persamaan nilai eigen dengan bentuk matriks berikut, dimana H mewakili elemen matriks Hamiltonian. Jika deret Fourier tidak terpotong, maka matriks akan menjadi tak terbatas. Pada akhir perhitungan akan didapatkan hasil akurat berupa matriks 124×124 . Dari persamaan (8) menunjukkan bahwa matriks hanya melibatkan nilai positif dari l dan h yang sepertinya tidak benar. Jenis ekspansi Fourier ini harus simetris terhadap titik asal. Jika tidak, maka nilai eigen yang didapatkan tidak benar.

$$\begin{bmatrix} \ddots & & & & & & \ddots \\ \dots & H_{-2,-2} & H_{-2,-1} & H_{-2,0} & H_{-2,1} & H_{-2,2} & \dots \\ \dots & H_{-1,-2} & H_{-1,-1} & H_{-1,0} & H_{-1,1} & H_{-1,2} & \dots \\ \dots & H_{0,-2} & H_{0,-1} & H_{0,0} & H_{0,1} & H_{0,2} & \dots \\ \dots & H_{1,-2} & H_{1,-1} & H_{1,0} & H_{1,1} & H_{1,2} & \dots \\ \dots & H_{2,-2} & H_{2,-1} & H_{2,0} & H_{2,1} & H_{2,2} & \dots \\ \ddots & & & & & & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vdots \\ A_{K-2} \\ A_{K-1} \\ A_{K0} \\ A_{K1} \\ A_{K2} \\ \vdots \end{bmatrix} = E(k) \begin{bmatrix} \vdots \\ A_{K-2} \\ A_{K-1} \\ A_{K0} \\ A_{K1} \\ A_{K2} \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{10}$$

Untuk menyelesaikan persamaan (10), matrik Hamiltonian harus didiagonalisasi dengan cara numerik standar. Nilai eigen dari matriks tersebut kemungkinan adalah nilai energy E(k). Matriks harus didiagonalisasikan untuk setiap vektor k dalam diagram pita.

Persamaan (11) memungkinkan perhitungan setiap elemen dalam matriks. Langkah selanjutnya yaitu menemukan nilai yang sesuai untuk fungsi potensial V.

$$H_{i,j} = \frac{\hbar}{2m} |k + K_i|^2 \delta_{i,j} + V_{Ki,j} \tag{11}$$

Karena terdapat dua atom per sel dalam struktur FCC untuk material Zincblende atau intan, maka masing-masing atom harus berkontribusi dengan cara menggunakan konvensi Cohen dan Bergstresser untuk mengambil titik tengah antara atom sebagai titik mulai dalam struktur FCC. Titik-titik tengah tersebut dapat dipecah menjadi dua bagian yaitu simetris dan antisimetris seperti pada persamaan (12).

$$V_{Km} = V_{Km}^S \cos(\mathbf{K}_m \cdot \boldsymbol{\tau}) + iV_{Km}^A \sin(\mathbf{K}_m \cdot \boldsymbol{\tau}) \tag{12}$$

Dimana $\boldsymbol{\tau}$ merupakan absolute *offset* dari sebuah atom yang berasal dari inti masing-masing kisi dalam susunan sebagai berikut

$$\boldsymbol{\tau} = a \left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right) \tag{13}$$

Lambang V_{Km}^S dan V_{Km}^A merupakan form factor yang diketahui nilainya dengan perhitungan empiris.

Review struktur elektronik energi band gap semikonduktor yang dihitung secara teoritik menggunakan metode empiris pseudopotensial. Review dilakukan dengan mempelajari karakteristik hasil perhitungan metode pseudopotensial. Diantara jenis semikonduktor yang digunakan adalah Si dan Ge.

Dalam melakukan perhitungan energi band gap dengan metode pseudopotensial dilakukan beberapa langkah berikut

- Menemukan form factor material semikonduktor
- Form factor yang didapatkan diinput kedalam algoritma perhitungan dan diproses menggunakan software pendukung. Form factor dapat dilihat pada tabel berikut.

TABEL 1. Pseudopotential form factors, in rydbergs, derived from the experimental energy band splittings

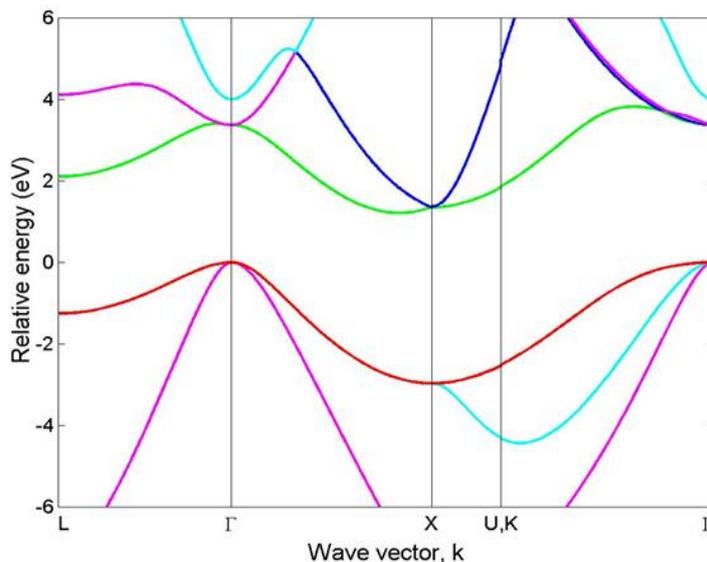
	V_1^S	V_8^S	V_{11}^S	V_2^A	V_4^A	V_{11}^A
Si	-0.21	+0.04	+0.08	0	0	0
Ge	-0.23	+0.01	+0.06	0	0	0
Sn	-0.20	0.00	+0.04	0	0	0
GaP	-0.22	+0.03	+0.07	+0.12	+0.07	+0.02
GaAs	0.23	+0.01	+0.06	+0.07	+0.05	+0.01

	V_1^S	V_8^S	V_{11}^S	V_2^A	V_4^A	V_{11}^A
AlSb	0.21	+0.02	+0.06	+0.06	+0.04	+0.02
InP	0.23	+0,01	+0.06	+0.07	+0.05	+0.01
GaSb	0.22	0.00	+0.05	+0.06	+0.05	+0.01
InAs	0.22	0.00	+0.05	+0.08	+0.05	+0.03
InSb	0.20	0.00	+0.04	+0.06	+0.05	+0.01
ZnS	0.22	+0.03	+0.07	+0.24	+0.14	+0.04
ZnSe	0.23	0.01	+0.06	+0.18	+0.12	+0.03
ZnTe	0.22	0.00	+0.05	+0.13	+0.10	+0.01
CdTe	0.20	0.00	+0.04	+0.15	+0.09	+0.04

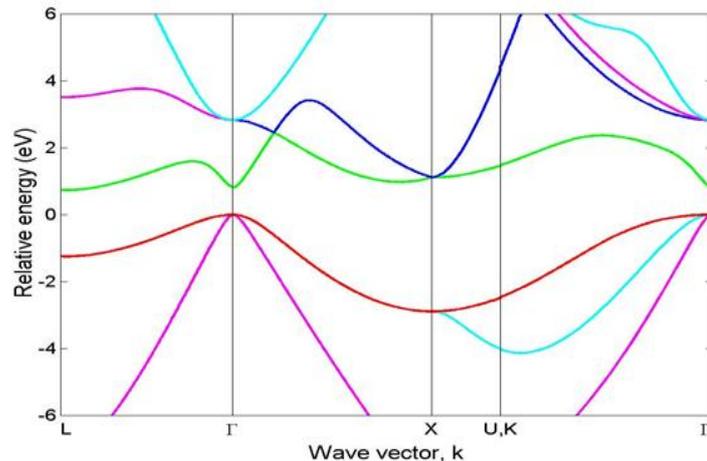
- Hasil yang akan didapatkan berupa grafik pita energi

HASIL DAN PEMBAHASAN

Si adalah semikonduktor celah pita tidak langsung. Gap primernya, yaitu gap minimum, dihitung dari pita valensi maksimum pada titik ke minimum pita konduksi sepanjang arah Γ ke X. Celah pita Si dihitung menjadi $E_{gSi} = 1,08$ eV, sesuai dengan temuan eksperimental. Ge juga merupakan semikonduktor celah pita tidak langsung. Celah pitanya ditentukan dari puncak pita valensi di hingga pita konduksi minimum di L. Celah pita Ge dihitung menjadi $E_{gGe} = 0,73$ eV. Celah langsung, yang ditentukan dari pita valensi maksimum pada hingga minimum pita konduksi pada Γ , dihitung masing-masing sebesar 3,27 eV dan 0,82 eV untuk Si dan Ge. Perhatikan bahwa kelengkungan pita valensi atas Ge lebih besar dari pada Si. Ini sesuai dengan fakta bahwa massa lubang efektif Si lebih besar daripada Ge. Perhatikan bahwa penyertaan interaksi spin-orbit akan mengangkat degenerasi rangkap tiga pita pada titik G, meninggalkan pita berat dan lubang ringan yang mengalami degenerasi ganda dan pita split-off bergerak ke bawah dalam energi beberapa 10 detik meV (tergantung atas bahan yang sedang dipertimbangkan).



GAMBAR 1. Band gap Silicon



GAMBAR 2. Band Gap Germanium

SIMPULAN

Singkatnya, metode pseudopotensial empiris lokal yang dijelaskan di bagian ini cukup baik untuk deskripsi yang akurat untuk menentukan band gap energi semikonduktor. Namun, seperti dicatat oleh Chelikowsky dan Cohen ketika perhitungan lokal ini diperluas untuk menghasilkan kerapatan elektronik pita valensi keadaan, hasil yang diperoleh jauh dari memuaskan. Alasan perbedaan ini muncul dari penghilangan inti dalam derivasi potensi semu di bagian sebelumnya. Ini, seperti yang disebutkan sebelumnya, memungkinkan penggunaan basis gelombang bidang sederhana. Untuk mengoreksi kesalahan yang diperkenalkan, istilah koreksi non-lokal yang bergantung pada energi ditambahkan ke potensial atom lokal. Hal ini meningkatkan jumlah parameter yang dibutuhkan tetapi mengarah pada konvergensi yang lebih baik dan hasil struktur pita yang lebih tepat.

REFERENSI

- [1] M. Silver, "Application of the Pseudopotential Method to the Theory of Semiconductors," (*Doctoral dissertation, University of Surrey*), 1991.
- [2] S. Gonzalez, D. Vasileska, A. A. Demkov, "Empirical pseudopotential method for the band structure calculation of strained-silicon germanium materials," *Journal of Computational Electronics*, vol. 1, no. 1, pp. 179-183, 2002.
- [3] Perdew *et al.*, "Understanding band gaps of solids in generalized Kohn-Sham theory," *Proceedings of the national academy of sciences*, vol. 114, no. 11, pp. 2801-2806, 2017.
- [4] C. M. Fang *et al.*, "Ab initio band structure calculations of Mg₃N₂ and MgSiN₂," *Journal of Physics, Condensed Matter*, vol. 11, no. 25, p. 4833, 1999.
- [5] U. Rössler, "Energy bands of hexagonal II-VI semiconductors," *Physical Review*, vol. 184, no. 3, p. 733.
- [6] S. E. Jin, H. E. Jin, "Synthesis, characterization, and three-dimensional structure generation of zinc oxide-based nanomedicine for biomedical applications," *Pharmaceutics*, vol. 11, no. 11, p. 575, 2019.
- [7] Dente, C. Gregory, M. L. Tilton, "Pseudopotential methods for superlattices: Applications to mid-infrared semiconductor lasers," *Journal of Applied Physics*, vol. 86, no. 3, pp. 1420-1429, 1999.

- [8] Rahman *et al.*, “Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂,” *Prosiding SKF*, pp. 497-503, 2015.
- [9] Kurniawan *et al.*, “Studi Struktur Pita Energi dan Rapat Keadaan Elektron pada ZnO dan ZnO_{1-δ} ($\delta = 12.5\%$) Wurtzite dengan Teknik Ab-Initio,” *Prosiding SNIPS*, pp. 243-246, 2017.
- [10] Alaa *et al.*, “THE STUDY OF GRAPHENE BAND GAP USING HARTREE FOCK METHOD IN MOLECULAR SCALE,” *Indonesian Physical Review*, vol. 3, no. 1, pp. 24-29, 2020.
- [11] A. W. Pramono, A. Suryantoro, “OVERVIEW OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY FOR SUPERCONDUCTORS [Sekilas Tentang Teori Fungsional Kerapatan Elektron pada Superkonduktor],” *Metalurgi*, vol. 27, no. 2, pp. 67-76, 2016.
- [12] B. Prabandono, “Sintesis material semikonduktor zno didoping cu untuk modul termoelektrik berbasis material zno,” *Doctoral dissertation*, UNS (Sebelas Maret University), 2015.
- [13] H. Aliah, Y. Karlina, “Semikonduktor TiO₂ sebagai material fotokatalis berulang,” *Jurnal Istek*, vol. 9, no. 1, 2015.

