

SIMULASI PERHITUNGAN PROBABILITAS TEROBOSAN PADA STRUKTUR RESONANCE TUNNELING DIODE

Ratno Nuryadi

Pusat Teknologi Material, Badan Pengkajian dan Penerapan Teknologi (BPPT)
Gedung II BPPT Lt. 22, Jl. M.H. Thamrin No. 8, Jakarta 10340, Indonesia

Email : ratnon@gmail.com

Abstrak

Penggunaan komputer untuk tujuan simulasi karakterisasi divais elektronik menjadi kebutuhan yang mendasar, terutama untuk proses analisis dan prediksi karakteristik divais. Makalah ini akan membahas perhitungan matematika dan simulasi dari probabilitas terobosan yang melewati material berstruktur dinding potensial ganda. Hasil simulasi menunjukkan bahwa probabilitas terobosan mengalami kenaikan yang signifikan pada level-level energi tertentu. Kenaikan ini berhubungan erat dengan munculnya level energi diskrit pada sumur potensial kuantum dan terjadinya interferensi gelombang elektron pada level-level energi diskrit tersebut. Perhitungan ini sangat berguna dalam analisa dan disain divais berstruktur nanometer baik itu divais Resonance Tunneling Diode, single electron device maupun nano transistor.

Kata Kunci: *probabilitas terobosan, dinding potensial ganda, persamaan Schrodinger, propagasi matrik, level energi diskrit.*

1. PENDAHULUAN

Teknologi elektronika telah berkembang begitu cepat dan melahirkan divais-divais elektronik berukuran nanometer, seperti divais terobosan resonansi (*resonant tunneling device*) [1-2], divais electron/hole tunggal (*single electron/hole device*) [3-8] dan detektor foton tunggal (*single-photon detector*) [9, 10]. Dalam ukuran yang sangat kecil itu, fenomena fisika yang terjadi dalam divais tidak cukup diselesaikan dengan pendekatan fisika klasik, tetapi perlu ditambahkan solusi pendekatan fisika kuantum. Salah satu fenomena penting dalam divais nano adalah efek terobosan (*Tunneling Effect*). Probabilitas terobosan yang dikalkulasi dari persamaan Schrodinger menjadi kunci dalam memahami karakteristik divais nano.

Makalah ini akan memaparkan simulasi perhitungan probabilitas terobosan pada struktur dinding potensial ganda yang merupakan basis struktur dari divais Resonance Tunneling Diode. Perhitungan probabilitas ini sangat penting karena akan menentukan besarnya arus listrik yang mengalir pada struktur tersebut, disamping parameter lain seperti kecepatan elektron dan jumlah elektron yang mengalir.

2. PERSAMAAN SCHRODINGER

Perhitungan probabilitas terobosan dilakukan melalui penyelesaian persamaan Schrodinger dengan metode pendekatan propagasi matriks [11, 12, 13, 14]. Persamaan Schrodinger tanpa bergantung waktu pada dimensi satu mempunyai bentuk sebagai berikut,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right) \psi(x) = E\psi(x). \quad (1)$$

Fungsi gelombang elektron ψ_j pada posisi j , yang merefleksikan sebuah elektron dengan energi E yang bergerak tegak lurus pada dinding, dapat ditulis sebagai:

$$\psi_j(x) = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x}. \quad (2)$$

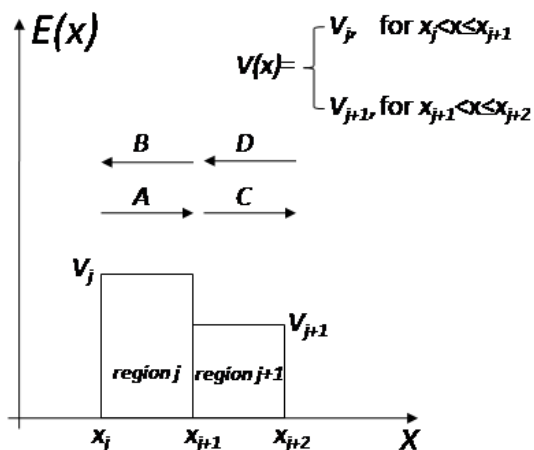
Fungsi gelombang ψ_{j+1} pada posisi $j+1$ juga dapat dinyatakan sebagai:

$$\psi_{j+1}(x) = C_{j+1} e^{ik_{j+1} x} + D_{j+1} e^{-ik_{j+1} x}. \quad (3)$$

Dalam hal ini,

$$k_j = \sqrt{\frac{2m_j(E-V_j)}{\hbar^2}}, \quad (4)$$

\hbar adalah konstanta Planck. $\exp(ik_j x)$ adalah gelombang yang bergerak ke kanan, sedangkan $\exp(-ik_j x)$ adalah gelombang yang bergerak ke kiri.



Gambar 1. Step propagasi matrik

Menimbang kondisi batas, di mana ψ_j dan $(d\psi_j/dx)$ akan bersifat kontinyu pada batas $x = x_{j+1}$, maka

$$\psi_j(x) \Big|_{x=x_{j+1}} = \psi_{j+1}(x) \Big|_{x=x_{j+1}}, \quad (5)$$

$$\frac{d\psi_j(x)}{dx} \Big|_{x=x_{j+1}} = \frac{d\psi_{j+1}(x)}{dx} \Big|_{x=x_{j+1}}, \quad (6)$$

dan selanjutnya akan didapatkan dari persamaan (5) dan (6) sebagai berikut:

$$A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} = C_{j+1} e^{ik_{j+1} x} + D_{j+1} e^{-ik_{j+1} x} \quad (7)$$

$$A_j e^{ik_j x} - B_j e^{-ik_j x} = \frac{k_{j+1}}{k_j} C_{j+1} e^{ik_{j+1} x} - \frac{k_{j+1}}{k_j} D_{j+1} e^{-ik_{j+1} x} \quad (8)$$

Pada kondisi $x_{j+1}=0$, persamaan (7) dan (8) menjadi

$$A_j + B_j = C_{j+1} + D_{j+1}, \quad (9)$$

$$A_j - B_j = \frac{k_{j+1}}{k_j} C_{j+1} - \frac{k_{j+1}}{k_j} D_{j+1}. \quad (10)$$

Kedua persamaan di atas dapat ditulis dalam matrik sebagai berikut,

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \frac{k_{j+1}}{k_j} & -\frac{k_{j+1}}{k_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Untuk menyelesaikan persamaan matrik di atas perlu dilakukan perhitungan inverse matrik. Jika A adalah matrik dengan harga,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad (12)$$

maka inverse matrik A adalah

$$A^{-1} = \frac{1}{|A|} \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}, \quad (13)$$

di mana $|A| = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$.

Jika rumus inverse matrik ini diberlakukan pada

matrik $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$ maka akan didapatkan,

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = \frac{-1}{2} \begin{bmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Untuk menyelesaikan persamaan matrik pada persamaan (11), maka kedua ruas dikalikan

dengan $\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1}$, sehingga menjadi :

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_{j+1} & -k_{j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix} \quad (15)$$

Selanjutnya persamaan (15) bisa ditulis,

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ k_{j+1} & -k_{j+1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix} \quad (16)$$

Persamaan di atas dapat disederhanakan lagi menjadi,

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \mathbf{P}_{jstep} \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

di mana,

$$\mathbf{P}_{jstep} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} \\ 1 - \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 + \frac{k_{j+1}}{k_j} \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Jika perhitungan masa efektif diikutkan maka akan didapatkan,

$$\mathbf{P}_{jstep} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{m_j}{m_{j+1}} \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 - \frac{m_j}{m_{j+1}} \frac{k_{j+1}}{k_j} \\ 1 - \frac{m_j}{m_{j+1}} \frac{k_{j+1}}{k_j} & 1 + \frac{m_j}{m_{j+1}} \frac{k_{j+1}}{k_j} \end{bmatrix}. \quad (19)$$

Pada kondisi matrik propagasi antar step, hanya terjadi perubahan fase, sehingga:

$$A_j e^{ik_j L_j} = C_{j+1}, \quad (20)$$

$$B_j e^{-ik_j L_j} = D_{j+1}. \quad (21)$$

Kedua persamaan di atas bisa ditulis dalam matrik sehingga menjadi,

$$\begin{bmatrix} e^{ik_j L_j} & 0 \\ 0 & e^{-ik_j L_j} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix}. \quad (22)$$

Penyelesaian dari persamaan matrik di atas adalah,

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = \mathbf{P}_{jfree} \begin{bmatrix} C_{j+1} \\ D_{j+1} \end{bmatrix}, \quad (23)$$

di mana,

$$\mathbf{P}_{jfree} = \begin{bmatrix} e^{-ik_j L_j} & 0 \\ 0 & e^{ik_j L_j} \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Propagasi matrik pada posisi ke-j dapat ditulis sebagai :

$$\mathbf{P}_j = \mathbf{P}_{jfree} \mathbf{P}_{jstep} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{bmatrix}. \quad (25)$$

Perkalian kedua matrik di atas menghasilkan,

$$\mathbf{P}_j = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{-ik_j L_j} & \left(1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{-ik_j L_j} \\ \left(1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{ik_j L_j} & \left(1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{ik_j L_j} \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Selanjutnya propagasi matrik dari awal sampai akhir ditulis sebagai,

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 \cdots \mathbf{p}_j \cdots \mathbf{p}_N = \prod_{j=1}^{j=N} \mathbf{P}_j. \quad (27)$$

Maka persamaan umum propagasi matrik bisa ditulis menjadi,

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix} = \mathbf{P} \begin{bmatrix} C \\ D \end{bmatrix}. \quad (28)$$

Di sini, dengan mengambil kondisi bahwa amplituda $A=1$ dan $D=0$ (artinya tidak ada refleksi gelombang pada posisi $N+1$), maka persamaan di atas menjadi,

$$\begin{bmatrix} 1 \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Maka akan didapatkan probabilitas terobosan sebagai berikut,

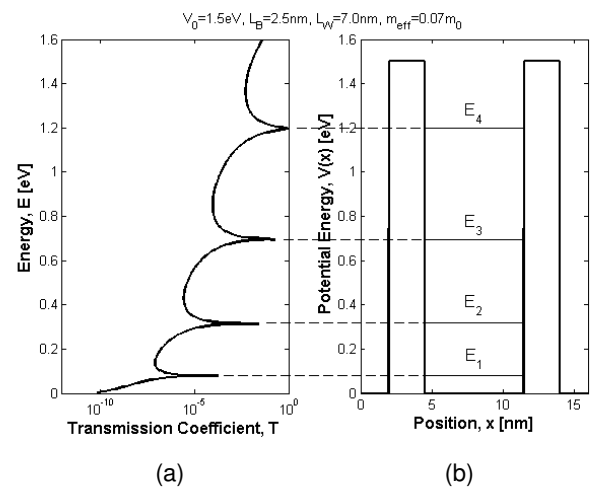
$$|C|^2 = \left| \frac{1}{p_{11}} \right|^2. \quad (30)$$

3. HASIL SIMULASI

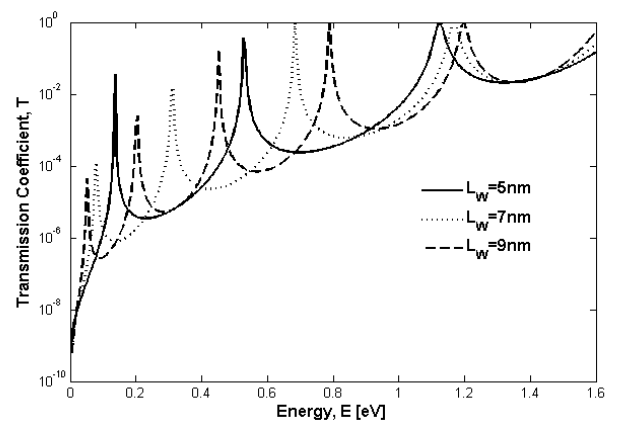
Gambar 2 menunjukkan hasil simulasi probabilitas terobosan dari struktur dinding potensial ganda dengan menggunakan metode propagasi matrik sebagaimana dibahas sebelumnya. Dalam hal ini struktur dinding potensial ganda terdiri atas lapisan tipis semikonduktor GaAs/AlGaAs/GaAs/AlGaAs/GaAs. Dinding potensial AlGaAs mempunyai tinggi $V_0=1.5$ eV dan ketebalan $L_B=2.5$ nm, sedangkan sumur potensial GaAs yang diapit oleh kedua lapisan AlGaAs mempunyai lebar $L_W=7.0$ nm. Masa efektif elektron (m_{eff}) sebesar $0.07m_0$, di mana m_0 adalah masa elektron pada ruang gemp. Ketika gelombang elektron bergerak dari arah kiri tegak lurus terhadap dinding potensial, maka akan terjadi refleksi gelombang electron yang berulang-ulang. Pada saat itu, ketika ketebalan sumur potensial (L_w) lebarnya sama dengan $\frac{1}{2}$ (atau kelipatan dari bilangan bulat) dari panjang gelombang electron yang masuk, maka akan terjadi interferensi gelombang refleksi tersebut, yang berakibat gelombang refleksi tereliminir dan probabilitas terobosan menjadi mendekati nilai 1. Fenomena interferensi gelombang refleksi pada struktur dinding potensial tunggal semacam ini dikenal dengan efek resonance tunneling. Probabilitas terobosan yang nilainya mendekati nilai 1 ini disebabkan karena energy electron yang masuk dari sebelah kiri E tepat berada pada level energy diskrit pada sumur kuantum, yaitu $E_n = (\hbar^2/2m_{eff})(n\pi/L_w)^2$.

Gambar 3, 4 dan 5 menunjukkan hasil kalkulasi perubahan probabilitas terobosan ketika ketebalan dinding potensial, lebar sumur potensial dan tinggi dinding potensial dirubah. Gambar 3 adalah probabilitas terobosan ketika tinggi dinding potensial dan ketebalannya dibuat tetap, yaitu $V_0=1.5$ eV dan $L_B=2.3$ nm, sedangkan lebar sumur potensial L_W diubah dari 5 nm sampai 9 nm. Terlihat ketika lebar sumur potensial diperlebar maka

puncak resonansi dari probabilitas terobosan bergerak ke arah energi rendah disertai dengan mengecilnya Lebar Setengah Tinggi Maksimum (*Full Width Half Maximum=FWHM*) dari puncak resonansi tersebut. Perubahan ini disebabkan karena energi level dalam sumur potensial menurun dan meningkatnya tinggi efektif (V_0-E) dari dinding potensial tersebut.



Gambar 2. (a) Probabilitas terobosan dan (b) level energi diskrit pada struktur dinding potensial ganda.



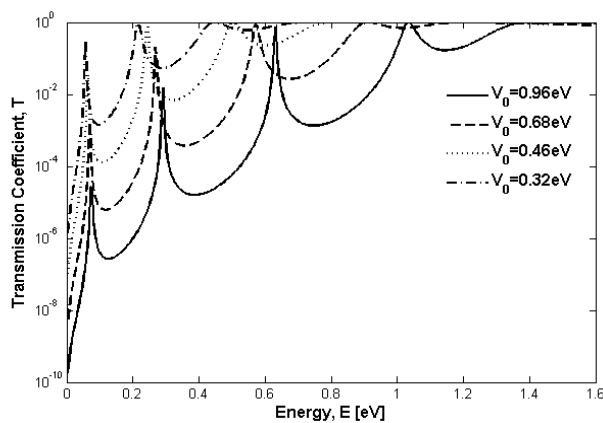
Gambar 3. Perubahan probabilitas terobosan disebabkan variasi lebar sumur potensial, yaitu $L_W=5$ nm, $L_W=7$ nm dan $L_W=9$ nm.

Gambar 4 menunjukkan perubahan probabilitas terobosan ketika tinggi dinding potensial diubah berdasarkan perubahan nilai x pada komposisi material $Al_xGa_{1-x}As$. Tinggi dinding

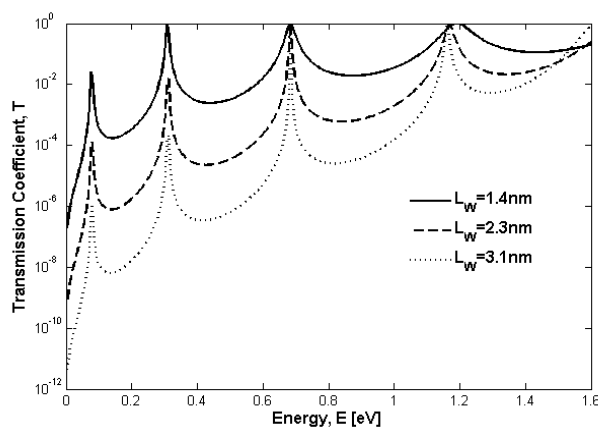
potensial dihitung dengan menggunakan persamaan sebagai berikut [12, 15],

$$V_0 = \begin{cases} 0.75x \text{ (eV)} & \text{for } x < 0.45 \\ 0.75x + 0.69(x - 0.45)^2 \text{ (eV)} & \text{for } x > 0.45 \end{cases} \quad (31)$$

Nilai x dibuat 4 variasi, yaitu $x=0.43, 0.6, 0.8$ dan 1 , yang masing-masing mempunyai tinggi dinding potensial $V_0=0.32 \text{ eV}, 0.46 \text{ eV}, 0.68 \text{ eV}$ dan 0.96 eV . Pada kalkulasi ini ketebalan dinding potensial konstan $L_B=3.1 \text{ nm}$ dan lebar sumur potensial $L_W=7 \text{ nm}$. Terlihat hasil simulasi bahwa ketika dinding potensial bertambah tinggi maka posisi puncak resonansi bergeser ke arah energi tinggi dan jarak antar puncak resonansi menjadi lebih lebar.



Gambar 4. Puncak resonansi probabilitas terobosan bergeser ke arah energi lebih tinggi ketika tinggi sumur potensial bertambah tinggi.



Gambar 5. Puncak resonansi probabilitas terobosan tidak berubah ketika ketebalan dinding potensial

bertambah tebal, tetapi besar probabilitas relatif menurun.

4. KESIMPULAN

Makalah ini telah memaparkan perhitungan probabilitas terobosan dengan metode propagasi matrik. Dengan metode ini, persamaan Schrodinger pada struktur dinding potensial ganda dapat diselesaikan dan menghasilkan karakteristik osilasi. Karakteristik ini muncul akibat interferensi gelombang, yang selanjutnya memunculkan resonansi probabilitas. Metode propagasi matrik ini sangat berguna untuk analisis dan disain terhadap divais nanoelektronik yang memanfaatkan efek kuantum.

5. DAFTAR PUSTAKA

- [1] David Bohm, "Quantum Theory", Prentice-Hall, New York, 1951.
- [2] R. Tsu and L. Esaki, "Tunneling in a finite superlattice", *Appl. Phys. Lett.* 22, 562 (1973).
- [3] K.K. Likharev, "Correlated discrete transfer of single electrons in ultrasmall junctions", *IBM J. Res. Develop.* 32(1), 144 (1988).
- [4] Nuryadi, Ratno, Hiroya Ikeda, Yasuhiko Ishikawa, and Michiharu Tabe. "Ambipolar Coulomb blockade characteristics in a two-dimensional Si multidot device." *IEEE transactions on nanotechnology* 2, no. 4 (2003): 231-235.
- [5] Nuryadi, Ratno, Hiroya Ikeda, Yasuhiko Ishikawa, and Michiharu Tabe. "Current fluctuation in single-hole transport through a two-dimensional Si multidot." *Applied Physics Letters* 86, no. 13 (2005): 133106.
- [6] Tabe, Michiharu, Yoichi Terao, Ratno Nuryadi Ishikawa, Noboru Asahi, and Yoshihito Amemiya. "Simulation of visible light induced effects in a tunnel junction array for photonic device applications." *Japanese journal of applied physics* 38, no. 1S (1999): 593.

- [7].Burhanudin, Zainal A., Ratno Nuryadi, and Michiharu Tabe. "Detection of field-induced single-acceptor ionization in Si by single-hole-tunneling transistor." *Applied Physics Letters* 91, no. 4 (2007): 042103.
- [8].Ikeda, Hiroya, Ratno Nuryadi, Yasuhiko Ishikawa, and Michiharu Tabe. "Photoinduced effects on single-charge tunneling in a Si two-dimensional multidot field-effect transistor." *Japanese journal of applied physics* 43, no. 6B (2004): L759.
- [9] S. Komiyama, O. Astafiev, V. Antonov, T. Kutsuwa, and H. Hirai, "A single-photon detector in the far-infrared range", *Nature London*, 403, 405 (2000).
- [10] R. Nuryadi, Y. Ishikawa and M. Tabe, "Single-photon-induced random telegraph signal in a two-dimensional multiple-tunnel-junction array", *Phys. Rev. B*, 73, 045310 (2006).
- [11] Anthony Frederic John Levi, "Applied quantum mechanics", Cambridge University Press, 2003.
- [12] Y. Ando and T. Itoh, "Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers", *J. Appl. Phys.* 61(4), 1497 (1987).
- [13] C. E. Simion, and C. I. Ciucu "Triple barrier resonant tunneling : A transfer matrix approach" *Romanian Reports in Physics*, Vol. 59, Number 3, pp. 803-814, Sept. 2007.
- [14] Abbas Zarifkar and Abolfazl Mohammadi Bagherabadi, "Numerical Analysis of Triple – Barrier GaAs/ Al_xGa_{1-x}As Resonant Tunneling Structure Using PMM Approach", *IJCSNS International Journal of Computer Science and Network Security*, Vol.8 No.6 pp. 266-270, June 2008.
- [15] H. C. Casey and M. B. Panish, "Heterostructure Laser", Academic, New York, 1978, Part A, Chap. 4.