

Density functional theory (DFT) calculations to investigate the effects of substitution of Ga with Al on the band gap and the optical spectrum of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0.125, 0.25$) = Studi pengaruh substitusi Ga dengan Al dalam sifat-sifat optis dan struktur elektronik $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($x=0.125, 0.25$) berbasis density functional theory (DFT)

Naima Amaliah Asmah Ramadani, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20456416&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRACT

Semiconductors have long been the main materials used in the manufacture of charge based as well as photonic based electronic devices. GaN, owing to its wide band gap, is often used for light emitting diodes, and other optoelectronic applications. To adjust to the desired energy band gap, GaN is often combined with Al in form of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, which is expected to have a wider band gap than that of pure GaN. The increase of aluminum content yields an increase of electron activation energy. Here, we theoretically investigate how the band structure and optical spectrum evolve as the aluminum content is varied, by performing Density Functional Theory DFT calculation on pure wurtzite GaN and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ with $x=0.125$ and 0.25 . Simple band structures without rigorous treatment of the electron-electron interactions are obtained through Plane Wave Self Consistent Field PWSCF calculation of DFT. Our calculation results show that the energy band gap increases as a function of x in the region we study.

ABSTRAK

Semikonduktor seringkali digunakan sebagai bahan dasar elektronika berbasis daya listrik maupun cahaya. GaN memiliki celah energi yang besar kerap kali digunakan untuk aplikasi light-emitting diode LED dan alat optoelektronika lainnya. Semikonduktor golongan III GaN dan AlN kerap kali digunakan bersama dan membentuk lapisan $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ untuk memvariasikan lebar celah energi, dimana dengan menambahkan Al celah energi akan semakin melebar dibanding GaN murni. Penambahan Al pada GaN dapat menaikkan energi aktivasi elektron. Hal ini kami pelajari secara teoritis apakah benar adanya dengan mengkaji struktur elektronika dan spektrum optis dari materi. Penelitian ini menggunakan metode komputasi berbasis Density Functional Theory DFT untuk meneliti struktur elektronika dan spektrum optis dari GaN dan $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Struktur pita energi dapat dicari tanpa perlu memasukan faktor interaksi elektron-elektron dengan menggunakan Plane-Wave Self-Consistent Field PWSCF untuk mengkalkulasi DFT. Hasil dari penelitian kami menunjukkan bahwa celah energi semakin lebar seiring bertambahnya konsentrasi bergantung dengan nilai x yang diberikan.