

Densitas keadaan elektron silikon karbon amorf terhidrogenasi ($a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{H}_y$) dengan metode random bethe lattice: Pengaruh kehadiran hidrogen dan karbon dalam konfigurasi tetrahedral (sp^3) dan trigonal (sp^2)

Risman Adnan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=70625&lokasi=lokal>

Abstrak

Densitas keadaan elektron $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x$, and $a\text{-Si}_{1-x}\text{H}_y$ telah dihitung untuk seluruh konsentrasi karbon dan beberapa konsentrasi hidrogen ($0 \leq y \leq 0.5$). Struktur atom dimodelkan dengan struktur acak kontinu yang menghubungkan atom Si, C dan H. Keadaan elektron diperoleh dengan menyelesaikan Hamiltonian tight binding kisi Bethe dengan pendekatan medan efektif. Metode Gomez-Santos dan Verges digunakan untuk memperoleh perata-rataan DOS yang memperhitungkan ketidakteraturan diagonal dan off diagonal serta ketidakteraturan parameter SRO (short range order). Model struktur yang digunakan berdasarkan konfigurasi tetrahedral dari atom Si dan C serta konfigurasi trigonal dari atom C. Kehadiran hidrogen menyebabkan pergeseran ujung atas pita valensi ke energi yang lebih rendah sehingga mengakibatkan pelebaran gap pada $a\text{-Si}_{1-x}\text{H}_y$, $a\text{-C}_{1-y}\text{H}_y (C\text{-}sp^3)$ dan $a\text{-C}_{1-y}\text{H}_y (C\text{-}sp^2)$. Pergeseran ujung atas pita valensi ke energi yang lebih rendah juga terjadi dengan kenaikan konsentrasi karbon pada $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x (C\text{-}sp^3)$. Pergeseran ujung atas pita valensi yang berbeda terjadi pada $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x (C\text{-}sp^2)$ yang bergeser ke energi yang lebih tinggi. Selain itu ujung bawah pita konduksi juga bergeser ke energi yang lebih tinggi. Kenaikan lebar gap yang lebih tinggi terjadi untuk konfigurasi karbon berikatan tetrahedral sp^3 dibandingkan konfigurasi karbon berikatan trigonal sp^2 . Kehadiran hydrogen dan karbon secara bersamaan pada $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x\text{H}_y (C\text{-}sp^3)$ dan $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x (C\text{-}sp^2)$ meningkatkan lebar gap. Peningkatan fraksi karbon dalam bentuk grafit meningkatkan lebar gap $a\text{-Si}_{1-x}\text{C}_x (C\text{-}sp^2)$ dan $C\text{-}sp^3$ sampai konsentrasi karbon $x=0.6$.