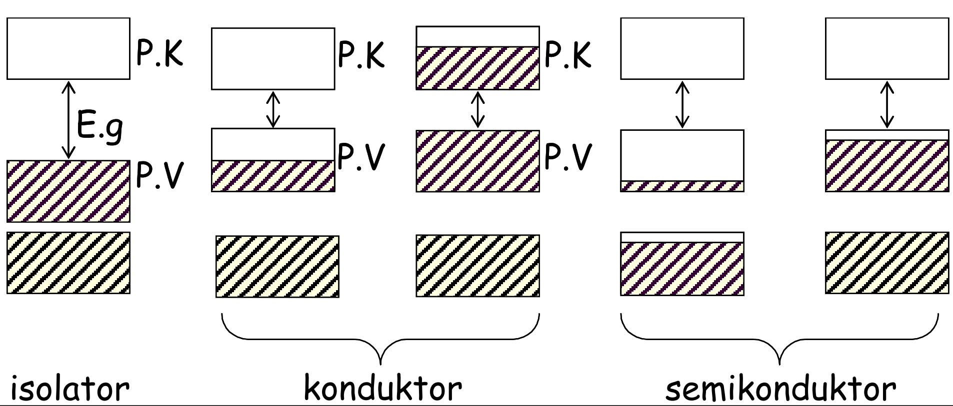
BAB VII
PITA ENERGI

A. Pendahuluan

Model elektron bebas dari logam memberikan pengetahuan tentang konduktivitas panas, konduktivitas listrik, suseptibilitas magnet dan elektrodinamika dari logam. Tapi model tersebut gagal untuk membantu pertanyaan lain yang besar, yaitu perbedaan antara logam, semilogam, semikonduktor, isolator, harga positif koefisien hall, hubungan elektron konduksi dari logam sampai elektron valensi atom bebas, dan beberapa pergerakan yang dimilikinya terutama pergerakan magnet.

Konduktor yang baik dengan isolator yang baik memiliki sifat yang sangat berbeda. Hambatan listrik suatu logam murni kira-kira sebesar $10^{-10}\,\Omega cm$ pada suhu 1K, selain dari kemungkinan superkonduktivitas, hambatan dari sebuah isolator yang baik adalah sebesar $10^{22}\ \Omega cm$.

Setiap zat padat mengandung elektron. Hal yang penting untuk daya hantar listrik adalah respon elektron jika di tempatkan pada medan listrik. Dapat terlihat bahwa elektron pada kristal menyusun pita energi (gambar 1) yang dipisahkan oleh daerah dalam energi dimana orbital elektron itu berada yang disebut celah energi atau celah pita, dan hasil interaksi gelombang elektron konduksi dengan inti ion dari kristal.



Gambar 1. Skema pita energi untuk isolator, logam, dan semikonduktor. Pita yang diarsir berarti terisi elektron.

P.V = Pita Valensi = pita energi yang terisi oleh elektron valensi

P.K = Pita Konduksi = pita energi diatas pita valensi,yang akan terisi elektron konduksi

E.g = celah energi = energi yang diperlukan elektron untuk loncat ke pita konduksi

Kristal berkelakuan sebagai isolator jika pita energi terisi penuh atau kosong oleh elektron, sehingga tidak ada elektron yang berpindah akibat adanya medan listrik. Kristal berkelakuan sebagai logam jika satu atau lebih pita terisi sebagian oleh elektron, pita energinya terisi antara (10-90)% oleh elektron. Kristal berkelakuan sebagai semikonduktor atau semilogam jika satu atau dua pita terisi sedikit penuh atau sedikit kosong.

Kristal dapat dikelompokkan dalam 4 golongan berdasarkan konduktivitasnya :

- Konduktor $\rho <<$
- Semikonduktor $0 \leq \rho \leq \infty$
- Isolator $\rho \approx \infty$
- Superkonduktor $\rho = 0$

Untuk memahami perbedaan antara isolator dengan konduktor, kita harus memberikan model elektron bebas untuk menjelaskan kisi periodik zat padat. Kemungkinan celah pita sangat penting untuk menjelaskan adanya konduktor, semikonduktor, dan isolator.

Kita akan menemukan sifat lain pada elektron yang sangat luar biasa pada kristal, sebagai contoh respon elektron pada medan listrik atau medan magnet jika elektron dibantu dengan massa efektif m*, dimana bisa lebih besar atau kecil dari massa elektron bebasnya atau bisa jadi negatif. Elektron dalam kristal dapat bergerak jika diberikan medan listrik.

B. Pendekatan Model Elektron Bebas

Model elektron bebas memberikan harga energi yang terdistribusi secara terus menerus dari nol sampai tak hingga, seperti pada bab 6 diketahui bahwa

$$\varepsilon k = \frac{\hbar^2}{2m}\left(kx^2 + ky^2 + kz^2\right) \tag{1}$$

dimana untuk kondisi batas yang periodik pada sebuah kubus yang sisi-sisinya L

$$k_x, k_y, k_z = 0; \pm\frac{2\pi}{L}; \pm\frac{4\pi}{L} \tag{2}$$

Fungsi gelombang elektron bebas berbentuk:

$$\psi_k(r) = e^{ikr} \tag{3}$$

Persamaan ini mewakili gelombang berjalan dan momentum $p = \hbar k$.

Struktur pita kristal dapat dijelaskan dengan pendekatan model elektron bebas, dimana pita elektron diperlakukan sebagai potensial periodik pada inti ion. Model ini menjelaskan semua pertanyaan kualitatif tentang perilaku elektron pada logam. Kita ketahui bahwa refleksi Bragg merupakan karakteristik dari pertambahan gelombang dalam kristal. Refleksi Bragg dari gelombang elektron pada kristal merupakan penyebab adanya celah energi (pada refleksi Bragg, solusi persamaan gelombang dari persamaan Schrodinger tidak ada, seperti pada gambar 2). Celah energi ini merupakan penentu suatu bahan termasuk isolator atau konduktor.

Kita dapat menjelaskan secara fisis asal mula dari celah energi yang merupakan persoalan sederhana pada sebuah kisi zat padat yang linier untuk sebuah konstanta a. Pada energi rendah bagian dari struktur pita dapat dilihat secara kualitatif seperti pada gambar (2) dengan (a) untuk seluruh elektron bebas dan (b) untuk elektron yang hampir bebas. Tetapi dengan celah energi pada $k = \pm\pi/a$, kondisi Bragg $(k + G)^2 = k^2$. Untuk difraksi dari gelombang pada vektor gelombang k dalam 1 dimensi,

$$k = \pm\frac{1}{2}G = \pm\frac{n\pi}{a} \tag{4}$$

dimana $G = {}^{2\pi n}\!/_{a}$ yaitu vektor kisi resiprok dan n adalah bilangan bulat. Refleksi pertama dan celah energi pertama terjadi pada $k = \pm {}^{\pi}\!/_{a}$, daerah k diantara $-{}^{\pi}\!/_{a}$ dan ${}^{\pi}\!/_{a}$ merupakan daerah Brillouin pertama dari kisi ini. Celah energi lain terjadi untuk harga lainnya dari bilangan bulat n.

Model Elektron Bebas (V=0)

$$H\psi = E\psi$$

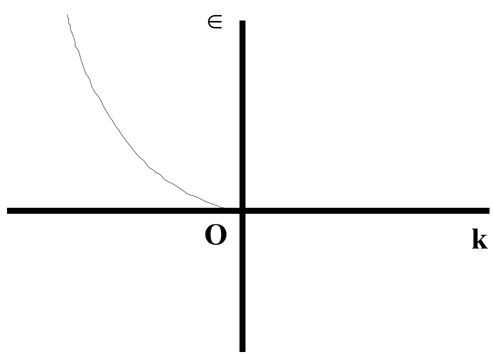
Hamiltonian :

$$H = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$

Fungsi Gelombang elektron bebas : $\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$$



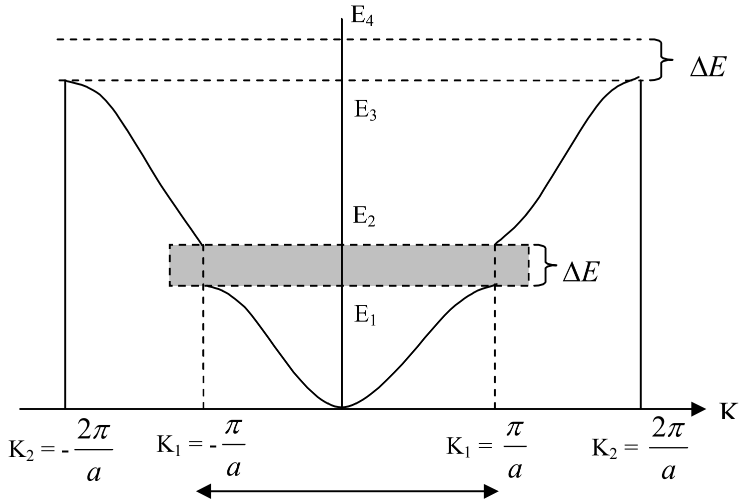
(a)

Makna:
Energi yang boleh dimiliki oleh elektron sembarang mulai dari nol sampai tak hingga untuk setiap nilai k

Gagal digunakan sebagai teori untuk menjelaskan perbedaan antara konduktor, semikonduktor, isolator, dan superkonduktor, karena energi yang dimiliki elektron kontinu sehingga tidak ada energi gap (celah energi).

Model elektron yang hampir bebas:

ΔE : Tidak boleh ditempati oleh elektron (celah terlarang)

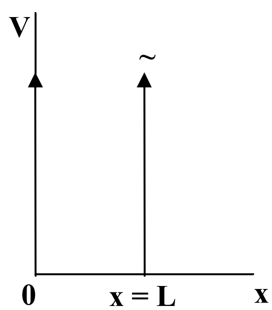


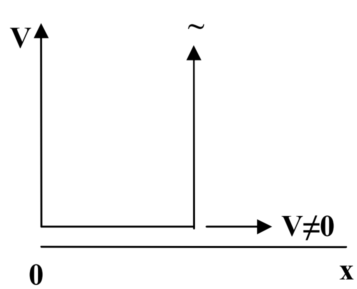
Daerah Brillouin Pertama

(b)

Gambar 2. (a). Grafik energi $\in$ terhadap vektor gelombang *k* untuk sebuah elektron bebas. (b). Grafik energi terhadap vektor gelombang untuk sebuah elektron dalam kisi monoatomik linier dengan konstanta kisi a .

Sehingga model yang berlaku adalah model elektron yang hampir bebas (V << ; V ≠0)





Persamaan Schrodinger : $e^{\pm i\pi x/a}$

Misal : Logam 1-Dimensi

Fungsi gelombang berjalan = $e^{\pm i\pi x/a}$

Fungsi gelombang dengan $k = \pm \pi/a$ merupakan gelombang berjalan adalah $e^{i\pi x/a}$ atau $e^{-i\pi x/a}$ dari elektron bebas tetapi nilai k fungsi gelombang itu dibuat sama oleh bagian gelombang yang menjalar ke kanan dan ke kiri. Ketika kondisi refleksi Bragg $k = \pm \pi/a$ dipenuhi sebagai vektor gelombang, sebuah gelombang yang menjalar ke kanan adalah refleksi Bragg untuk gelombang yang menjalar ke kiri. Masing-masing refleksi Bragg akan mengembalikan secara langsung dari penjalaran gelombang berjalan. Sebuah gelombang yang penjalaran gelombangnya tidak ke kanan atau tidak ke kiri disebut gelombang berdiri.

Gelombang berdiri tidak tergantung pada waktu. Kita bisa mendapatkan dua bentuk gelombang berdiri yang berbeda dari dua gelombang berjalan $e^{\pm i\pi x/a}$, ditulis:

$$\psi(+) = e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a} = 2\cos\left(\pi x/a\right); \tag{5}$$

$$\psi(-) = e^{i\pi x/a} - e^{-i\pi x/a} = 2i\sin\left(\pi x/a\right)$$

Gelombang berdiri disimbolkan (+) atau (–) berdasarkan perubahan tanda ketika (–x) disubstitusikan ke (x). Kedua gelombang berdiri dibentuk oleh bagian yang sama antara kiri dan kanan dari sebuah gelombang berjalan.

C. Asal Mula Adanya Celah Energi

Dua gelombang berdiri $\psi(+)$ dan $\psi(-)$ ditempati elektron pada daerah yang berbeda dan kedua gelombang itu mempunyai nilai energi potensial yang berbeda. Hal ini merupakan asal mula dari celah energi. Kemungkinan kerapatan ρ dari suatu partikel adalah $\psi^*\psi = |\psi|^2$. Untuk gelombang berjalan e^{ikx}, kita mempunyai $\rho = e^{-ikx}e^{ikx} = 1$ dengan demikian kerapatannya adalah konstan. Nilai kerapatan tidak konstan untuk perpaduan gelombang datar. Dengan menggunakan gelombang berdiri untuk $\psi(+)$ pada persamaan (5), maka :

$$\rho(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a$$

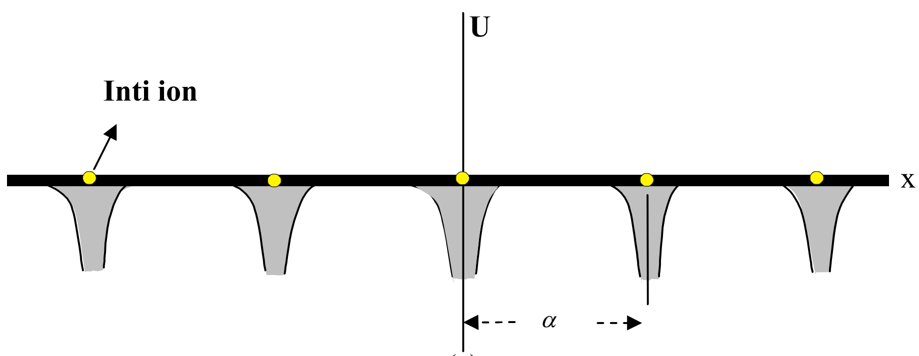
ini merupakan fungsi pengisian elektron (pengisian yang negatif) dalam inti ion positip pada x = 0, a, 2a,... seperti gambar (3), dimana energi potensialnya sangat rendah.

Gambar 3a menggambarkan variasi dari energi potensial elektrostatik, sebuah elektron konduksi dalam medan ion positip. Inti ion membawa muatan positif, karena atom-atom diionisasi dalam logam dengan elektron valensi, kemudian diberikan pada pita konduksi. Energi potensial dari sebuah elektron dalam medan ion positif adalah negatif. Sehingga gaya antara keduanya adalah tarik-menarik.

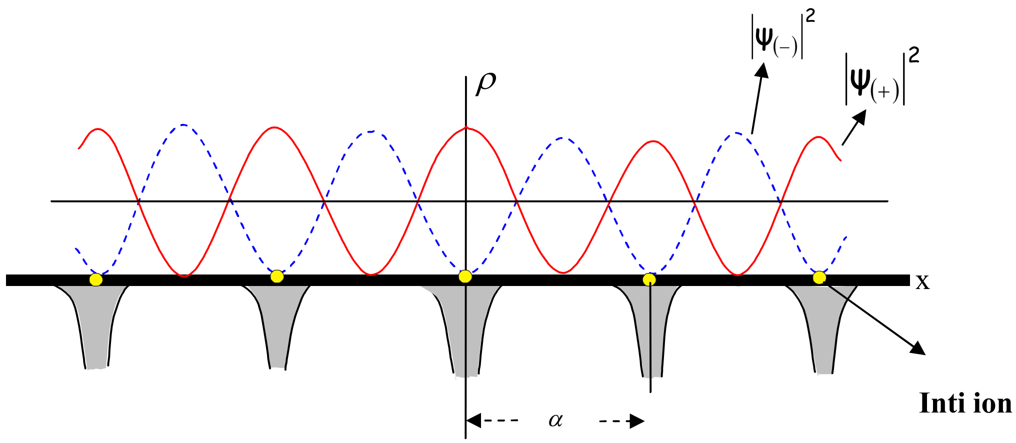
Untuk gelombang berdiri $\psi(-)$, kemungkinan kerapatannya adalah

$$\rho(-) = |\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a$$

dengan konsentrasi elektron jauh dari inti ion. Gambar 3b menunjukkan konsentrasi elektron untuk gelombang berdiri $\psi(+)$, $\psi(-)$, dan untuk gelombang berjalan. Ternyata kedua solusi untuk $\rho(+)$ dan $\rho(-)$ ini menumpuk elektron pada daerah berlainan relatif terhadap kedudukan ion-ionnya sehingga energi potensialnya berbeda, hal inilah yang menimbulkan loncatan energi sehingga timbul celah energi pada $k = \pm\pi/a$.



(a)



(b)

Gambar 3. (a). Variasi energi potensial sebuah elektron konduksi di medan inti ion dalsm sebauh kisi linier. (b). Distribusi probabilitas kerapatan ρ di dalam sebuak kisi untuk $|\psi(-)|^2 \propto \sin^2 \pi x/a; |\psi(+)|^2 \propto \cos^2 \pi x/a$; dan untuk sebuah gelombang berjalan. Dalam gambar terlihat penumpukan muatan elektron terhadap kedudukan teras ion.

Ketika kita menghitung nilai rata-rata atau nilai ekspektasi dari energi potensial yang melebihi ketiga distribusi muatannya, kita menemukan bahwa energi potensial $\rho(+)$ lebih rendah daripada gelombang berjalan dan energi potensial dari $\rho(-)$ lebih besar daripada gelombang berjalannya. Kita mempunyai celah energi dengan lebar E_g jika energi dari $\rho(-)$ dan $\rho(+)$ berbeda dari E_g. Dengan memperhatikan celah energi pada point A dalam gambar 2 fungsi gelombangnya adalah $\psi(+)$, dan celah energi pada point B dalam gambar 2 fungsi gelombangnya adalah $\psi(-)$.

D. Besar Dari Celah Energi

Fungsi gelombang dari daerah Brillouin dengan batas $k = \pi/a$ adalah $\sqrt{2}\cos \pi x/a$ dan $\sqrt{2}\sin \pi x/a$, dinormalisasi melebihi garis batas. Kita dapat menuliskan energi potensial dari elektron dalam kristal pada titik x adalah

$$U(x) = U \cos 2\pi x/a$$

Perbedaan energi pertama antara dua gelombang berdiri adalah

$$E_g = \int_0^1 dxU(x)\left[\left|\psi(+)\right|^2 - \left|\psi(-)\right|^2\right]$$
$$E_g = 2\int dxU\cos(2\pi x/a)\left(\cos^2 \pi x/a - \sin^2 \pi x/a\right) = U \quad (6)$$

Kita dapat melihat celah adalah komponen Fourier yang sama pada potensial kristal.

Besarnya celah energi: $Eg = \int_0^1 dxU(x)\left[\left|\psi(+)\right|^2 - \left|\psi(-)\right|^2\right] = U$

dimana $U(x) = U\cos 2\pi x/a$

$V(r) = \text{periodik}$

maka $V(\vec{r}) = V(\vec{r} + \vec{T})$

$\vec{T} = n_1\vec{a}_1 + n_2\vec{a}_2 + n_3\vec{a}_3 \longrightarrow$ 3 Dimensi

E. Fungsi Bloch

Fungsi Bloch merupakan teorema yang sangat penting untuk menyelesaikan persamaan Schrodinger pada potensial periodik, yang memiliki bentuk

$$\psi_k(r) = u_k(r)e^{ik\bullet r} \quad (7)$$

dimana $U_k(r)$ mempunyai perioda dari kisi kristal dengan $U_k(r) = U_k(r + T)$. Hasil persamaan 7 tersebut merupakan teorema Bloch :

Fungsi eigen dari persamaan gelombang untuk sebuah potensial periodik adalah hasil kali antara gelombang sejajar $e^{ik.r}$ dengan fungsi $u_k(r\ )$pada sebuah kisi kristal yang periodik.

Sebuah fungsi gelombang dari elektron pada bentuk 7 disebut fungsi Bloch dapat dipisahkan dalam penjumlahan gelombang berjalan. Fungsi Bloch dapat dikumpulkan dalam paket-paket gelombang untuk mewakili elektron yang menyebar secara bebas sampai medan potensial dari inti ion.

Teorema Bloch akan berlaku ketika ψ_k nya tidak berkurang. Hal tersebut terjadi ketika tidak ada satupun fungsi gelombang dengan energi sama dan vektor gelombang sebagai ψ_k. Kita menganggap N sebagai titik kisi dalam sebuah cincin dengan panjang Na. Energi potensial adalah periodik dalam a dengan $U(x) = U(x + sa)$U(x), dimana s adalah bilangan bulat.

Kita menggunakan cincin yang simetri untuk menyelesaikan persamaan gelombang sebagai berikut :

$$\psi(x + a) = C\psi(x) \tag{8}$$

dimana C adalah sebuah konstanta. Kemudian dengan meninjau sebagian kecil daerah cincin, yaitu :

$$\psi(x + Na) = \psi(x) = C^N \psi(x)$$

karena $\psi(x)$ harus berharga tunggal. Hal itu ditunjukkan bahwa C adalah salah satu bagian dari akar N, atau

$$C = e^{i2\pi s/N}; s = 0,1,2,\cdots, N - 1 \tag{9}$$

Kita melihat bahwa :

$$\psi(x) = u_k(x)e^{i2\pi s/Na} \tag{10}$$

Dipenuhi pada persamaan (8), yang ditunjukkan bahwa $u_k(x)$ mempunyai periodik a, sehingga $u_k(x) = u_k(x + a)$. Dengan $k = 2\pi s/Na$, kita mempunyai hasil dari persamaan (7).

Fungsi gelombang elektron yang hampir bebas dinyatakan oleh :

Fungsi Bloch : $\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$

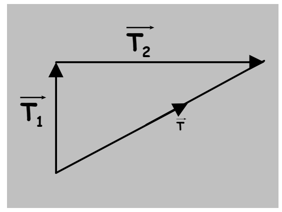
Fungsi Bloch merupakan teorema untuk menyelesaikan persamaan Scrhodinger pada potensial pada potensial periodik $U_k(\vec{r} + \vec{T}) = U_k(\vec{r})$

sehingga : $\left|\psi(\vec{r} + \vec{T})\right|^2 = |\psi(\vec{r})|^2$

dimana : $\psi(\vec{r} + \vec{T}) = f(\vec{T})\psi(\vec{r})$

dengan : $\left|f\left(\vec{T}\right)\right|^2 = e^0 = 1$

atau : $f\left(\vec{T}\right) = e^{ik\cdot r}$



$$\left|f\left(\vec{T}\right)\right|^2 = e^0 = 1$$

$$f\left(\vec{T}\right) = e^{i\alpha\left(\vec{T}\right)}$$

bila : $\vec{T} = \vec{T}_1 + \vec{T}_2$

maka : $f\left(\vec{T}_1 + \vec{T}_2\right) = e^{i\alpha\left(\vec{T}_1 + \vec{T}_2\right)} = e^{i\alpha\left(\vec{T}_1\right)} \cdot e^{i\alpha\left(\vec{T}_2\right)}$

α merupakan fungsi $\left(\vec{T}_1 + \vec{T}_2\right)$

$$\alpha\left(\vec{T}\right) = A\,T_X + B\,T_y + C\,T_Z$$

$$\alpha\left(\vec{T}\right) = A\,T_X + B\,T_y + C\,T_Z$$

$$\vec{k} = A\,\hat{X} + B\,\hat{Y} + C\,\hat{Z}$$

$$\vec{T} = T_X\,\hat{X} + T_y\,\hat{Y} + T_Z\,\hat{Z}$$

$$\vec{k}\cdot\vec{T} = A\,T_X + B\,T_y + C\,T_Z$$

sehingga : $\alpha\left(\vec{T}\right) = \vec{k}\cdot\vec{T}$

maka : $\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}\psi\left(\vec{r}\right)$

Bukti bahwa : $U_{\mathbf{k}}$ periodik

Persamaan Bloch : $\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = e^{i\vec{k}.\vec{T}}\psi\left(\vec{r}\right)$

$$\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = U_k\left(\vec{r} + \vec{T}\right).e^{i\vec{k}.\left(\vec{r} + \vec{T}\right)}$$

$$\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = e^{i\vec{k}.\vec{T}}\psi\left(\vec{r}\right)$$

$$\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = U_k(r)e^{i\vec{k}.\left(\vec{r} + \vec{T}\right)}$$

$$\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = U_k(r)e^{i\vec{k}.\left(\vec{r} + \vec{T}\right)}$$

Bila kita bandingkan :

$$\psi\left(\vec{r} + \vec{T}\right) = U_k\left(\vec{r} + \vec{T}\right)e^{i\vec{k}.\left(\vec{r} + \vec{T}\right)}$$

$$\psi(\vec{r}+\vec{T}) = U_k(r)\, e^{i\vec{k}.(\vec{r}+\vec{T})}$$

$$U_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r}+\vec{T})$$ terbukti $U_{\mathbf{k}}$ fungsi periodik

F. Model Kronig-Penney

Sebuah potensial periodik untuk fungsi gelombang dapat diselesaikan dalam bentuk sumur potensial pada gambar (4). Dengan fungsi gelombang adalah

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + U(x)\psi = \epsilon\psi \tag{11}$$

dimana U(x) adalah energi potensial dan Є adalah nilai energi eigen.

Pada daerah *0<x<a* yang *U=0*, fungsi eigennya adalah kombinasi linier,

$$\psi = Ae^{iKx} + Be^{-iKx} \tag{12}$$

dari gelombang datar yang menjalar ke kanan dan ke kiri dengan energi,

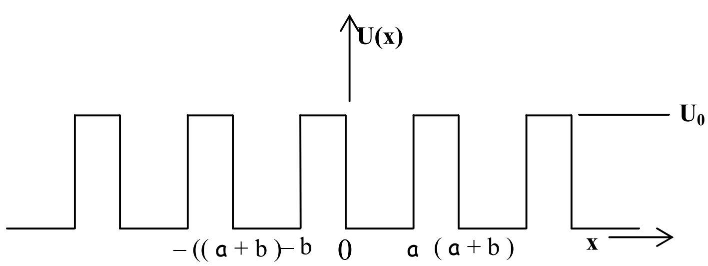
$$\epsilon = \hbar^2 K^2 / 2m \tag{13}$$

Pada daerah yang dibatasi *–b<x<0* , maka solusinya

$$\psi = Ce^{Qx} + De^{-Qx} \tag{14}$$

dengan

$$U_0 - \epsilon = \hbar^2 Q^2 / 2m \tag{15}$$



Gambar 4. sumber potensial periodik yang diperbolehkan oleh Kroning dan Penney.

Kita ingin melengkapi solusi Bloch bentuk (7). Dengan demikian solusi pada daerah $a < x < a+b$ harus dihubungkan dengan solusi (14) pada daerah $-b < x < 0$ oleh teorema Bloch :

$$\psi(a < x < a + b) = \psi(-b < x < 0)e^{ik(a+b)} \qquad (16)$$

Dengan mendefinisikan vektor gelombang k yang digunakan sebagai simbol pada penyelesaian tersebut.

Konstanta A, B, C, D yang dipilih sehingga ψ dan $\frac{d\psi}{dx}$ kontinu pada $x = 0$ dan $x = a$. Hal ini ada dalam permasalahan mekanika kuantum pada daerah yang dibatasi seperti pada sumur potensial. Pada $x = 0$

$$A + B = C + D \qquad (17)$$

$$i\,k\,(A - B) = Q\,(C - D) \qquad (18)$$

pada $x = a$, dengan menggunakan persamaan (16) untuk ψ_a dibawah ini adalah bentuk dari ψ_{-b}

$$Ae^{ika} + Be^{-ika} = \left(Ce^{-Q_b} + De^{Q_b}\right)e^{ik(a+b)} \qquad (19)$$

$$ik(Ae^{ika} - Be^{-ika}) = Q\left(Ce^{-Q_b} - De^{Q_b}\right)e^{ik(a+b)} \qquad (20)$$

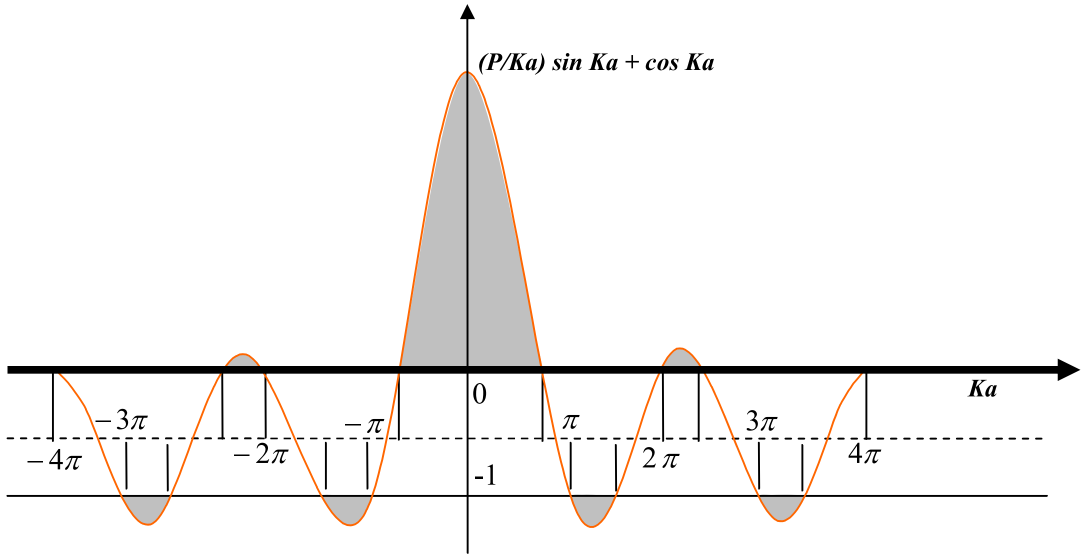
Keempat persamaan dari persamaan (17) sampai (20) akan mempunyai solusi jika determinan dari koefesien A, B, C, D dihilangkan atau jika

$$\left[\left(Q^2 - K^2\right)/2QK\right]\sinh Qb \sin Ka + \cosh Qb \cos Ka = \cos k(a + b) \qquad (21.a)$$

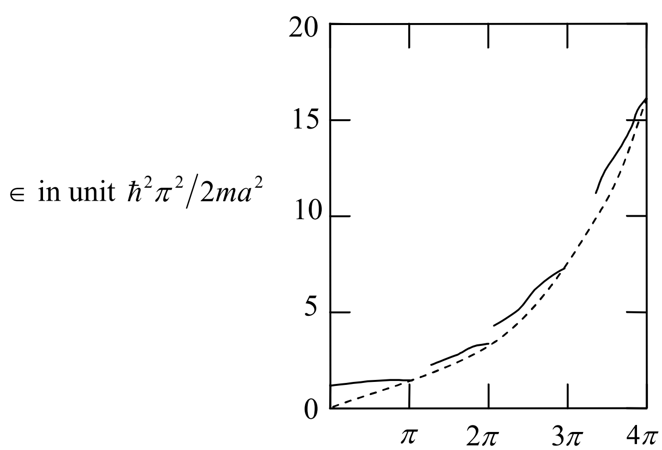
Persamaan yang dihasilkan akan lebih sederhana jika dapat mewakili potensial dari fungsi delta periodik yang diperoleh ketika memasukan batas $b = 0$ dan $U_0 = \infty$ dengan demikian $Q^2ba/2 = P$ sebuah kuantitas terbatas. Dalam batas $Q >> K$ dan $Q_b << 1$. Kemudian persamaan (21a) direduksi menjadi

$$\left(P/Ka\right)\sin Ka + \cos Ka = \cos ka \qquad (21\ b)$$

Nilai K dari persamaan tersebut mempunyai solusi dalam gambar 5 dengan $P = 3\pi/2$. Nilai yang bersesuaian dari energi dipetakan dalam gambar (6). Dimana celah energinya pada daerah yang dibatasi. Vektor gelombang k dari fungsi Bloch adalah petunjuk penting, bukan K dalam persamaan (12), yang dihubungkan pada energi dari persamaan (13).



Gambar 5. Daerah dari fungsi $(P/Ka)\sin Ka + \cos Ka$, untuk $P = 3\pi/2$. Nilai energi E yang diperbolehkan pada daerah $Ka = \left(2mE/\hbar^2\right)^{1/2}$ yang fungsinya anatara ± 1. Nilai lain dari energi bukan gelombang yang berpindah-pindah atau seperti solusi Bloch dalam persamaan gelombang, jadi celah yang dilarang adalah bentuk spektrum energi.



Gambar 6. Daerah antara energi dan nomor gelombang untuk potensial Krong-Penney, dengan $P = {}^{3\pi}\!/_{2}$. Perhatikan celah energi pada $ka = \pi, 2\pi, 3\pi, ...$

G. Persamaan Gelombang Dari Elektron Dalam Sebuah Potensial Periodik

Kita memandang gambar 3 mendekati bentuk persamaan gelombang Schrodinger jika vektor gelombang pada syarat batas adalah $k = \pi/a$. Kita jabarkan persamaan gelombang untuk potensial umum, pada nilai umum dari *k*. $U(x)$ sebagai simbol dari energi potensial dari elektron dalam kisi linier dengan konstanta kisi a. Kita tahu bahwa energi potensial tidak berubah-ubah di bawah translasi kisi kristal : $U(x) = U(x+a)$. Sebuah fungsi dibawah translasi kisi kristal dapat ditambahkan deret Fourier dalam vektor kisi resiprok G. Kita tuliskan deret Fourier dari energi potensial sebagai :

$$U(x) = \sum_G U_G e^{iGx} \qquad (22)$$

Nilai dari koefisien U_G untuk potensial kristal akan berkurang kecepatan dengan menambah besarnya G. Untuk pengurangan potensial U_G sebesar $\frac{1}{G^2}$.

Kita menginginkan energi potensial $U(x)$ menjadi fungsi real :

$$U(x) = \sum_{G>0} U_G \left(e^{iGx} + e^{-iGx}\right) = 2\sum_{G>0} U_G \cos Gx \qquad (23)$$

Agar berfungsi riil, kita asumsikan kristal simetris pada x = 0 sehingga $U_0 = 0$.

Persamaan gelombang dari elektron pada kristal adalah $H\psi = \epsilon\psi$ dimana H adalah fungsi Hamilton dan ϵ adalah nilai energi Eigen. Solusi ψ disebut fungsi Eigen atau orbital atau fungsi Bloch. Secara eksplisit persamaan gelombang adalah :

$$\left(\frac{1}{2m}p^2 + U(x)\right)\psi(x) = \left(\frac{1}{2m}p^2 + \sum_G U_G e^{iGx}\right)\psi(x) = \epsilon\psi(x) \qquad (24)$$

Persamaan (24) dituliskan dengan pendekatan satu elektron yang orbitalnya $\psi(x)$ digambarkan dengan gerakan satu elektron dalam potensial pusat ion dan dalam potensial rata-rata lainnya pada elektron konduksi.

Fungsi gelombang $\psi(x)$ dapat ditulis sebagai penjumlahan deret Fourier untuk semua nilai vektor gelombang dalam kondisi batas, maka :

$$\psi = \sum_{K} C(k) e^{ikx} \tag{25}$$

dimana *k* real. (Kita dapat menuliskan indeks *k* dalam C menjadi C_k).

Nilai *k* mempunyai bentuk $2\pi n/L$, karena nilai tersebut ada sepanjang syarat batas L. Dengan n adalah bilangan bulat positif atau negatif. Kita tidak bisa mengasumsikan bahwa pernyataan itu umumnya benar, $\psi(x)$ itu sendiri adalah periodik di kisi tranlasi dasar a. Translasinya mengandung $\psi(x)$ yang ditentukan oleh Teorema Bloch (7).

Tidak semua vektor gelombang $2\pi n/L$ dimasukkan ke Deret Fourier pada berbagai Fungsi Bloch. Jika vektor gelombang *k* terkandung di ψ, kemudian vektor gelombangnya dimasukkan ke deret Fourier maka ψ akan mempunyai bentuk $k + G$, dimana G adalah vektor kisi resiprok. Kita membuktikan hasil ini di persamaan 29.

Kita dapat menuliskan sebuah fungsi gelombang ψ yang mengandung komponen *k* sebagai ψ_k atau sebagai ψ_{k+G}, karena jika *k* disubstitusikan ke deret Fourier, maka $k + G$ juga disubstitusi. Vektor gelombang $k + G$ yang melebihi G dan dibatasi $2\pi n/L$ ditunjukkan dalam gambar 7.

Kita biasanya memiliki simbol untuk fungsi Bloch adalah *k* yang terletak pada daerah Brillouin pertama. Jika konvensi lain digunakan, biasanya mendapatkan bentuk itu juga. Namun situasi berbeda untuk masalah phonon, dimana tidak ada komponen gerakan ion diluar daerah pertama. Masalah elektron adalah pada masalah difraksi karena medan elektromagnetnya ada di setiap tempat dalam kristal, tidak hanya pada ion.

Untuk memecahkan persamaan gelombangnya, substitusi persamaan (25) ke persamaan (24) untuk mendapatkan persamaan aljabar yang linier untuk koefisien Fourier. Bentuk energi kinetiknya adalah :

$$\frac{1}{2m} P^2 \psi(x) = \frac{1}{2m}\left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right)^2 \psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{\hbar^2}{2m}\sum_k k^2 C(k) e^{ikx}$$

Dan bentuk energi potensialnya :

$$\left(\sum_G U_G e^{iGx}\right)\psi(x) = \sum_G \sum_k U_G e^{iGx} C(k) e^{ikx}$$

Persamaan gelombang diperoleh dengan menjumlahkan energi kinetik dan energi potensialnya:

$$\sum_k \frac{\hbar^2}{2m} k^2 C(k) e^{ikx} + \sum_G \sum_k U_G C(k) e^{i(k+G)x} = \in \sum_k C(k) e^{ikx} \tag{26}$$

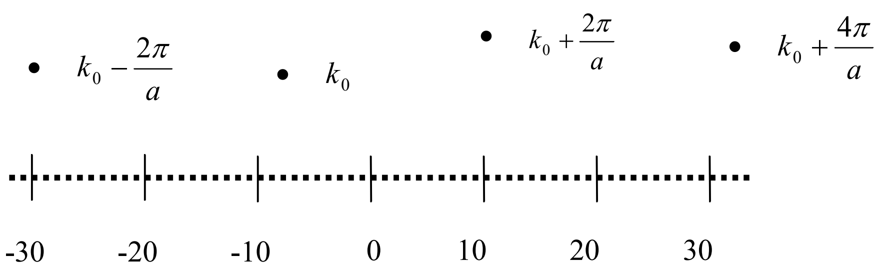
Masing-masing komponen Fourier harus mempunyai koefisien sama di kedua bagian persamaan, yaitu :

$$(\lambda_k - \in) C(k) + \sum_G U_G C(k-G) = 0 \tag{27}$$

dengan notasi

$$\lambda_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{28}$$

Persamaan (27) adalah bentuk persamaan gelombang yang berguna di sebuah kisi periodik dan disebut sebagai persamaan sentral.



Gambar 7. Titik yang lebih rendah mewakili nilai vektor gelombang $k = 2\pi n/L$, ini merupakan titik yang diijinkan oleh kondisi batas periodik pada fungsi gelombang pada sebuah lingkaran yang dibatasi oleh L dan ditempati oleh 20 sel primitif. Nilai yang diijinkan sampai $\pm \sim$. Titik tertinggi mewakili beberapa vektor gelombang yang disubstitusi ke dalam deret Fourier untuk fungsi gelombang $\psi(x)$ dimulai dari vektor gelombang $k = k_o = 8(2\pi/L)$. Vektor kisi resiprok yang paling rendah adalah $2\pi/a = 20(2\pi/L)$.

Persamaan sentral dapat juga diturunkan dengan cara lain, yaitu sebagai berikut :

V merupakan fungsi yang periodik maka V dapat dinyatakan dalam bentuk deret Fouriernya.

Deret fourier untuk bentuk satu dimensi adalah :

$$V = \sum V_{n_1} \cos \frac{2\pi}{a} nx + iV_{n_2} \sin \frac{2\pi}{a} nx$$

Bila : $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$, $\vec{b}$ adalah vektor kisi resiprok dan a adalah konstanta kisi .

Maka : $\frac{2\pi}{a} n\hat{x} = n\vec{b}_1.\vec{r}$ dimana $r = n\hat{x}$

Sehingga dalam bentuk 3 dimensinya, dapat kita tuliskan:

$$e^{i\frac{2\pi}{a}\left(n_x X + n_y Y + n_z Z\right)} = e^{i\left(n_x \vec{b}_1 + n_y \vec{b}_2 + n_z \vec{b}_3\right)}$$

apabila $n_x \vec{b}_1 + n_y \vec{b}_2 + n_z \vec{b}_3 = \vec{G}$ dengan $\vec{G}$ adalah vektor kisi resipok

jadi : $V = \sum_G V_G . e^{i\vec{G}.\vec{r}}$

atau $U_k(\vec{r}) = \sum_G U_G . e^{i\vec{G}.\vec{r}}$

Persamaan Schrodinger: $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = E(\psi)$ (1)

dengan $\nabla^2\psi = \nabla^2\left\{\left(\sum_G U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}}\right)e^{i\vec{k}.\vec{r}}\right\}$

$= \nabla^2\left\{\sum_G U_G e^{i(\vec{k}+\vec{G}).r}\right\}$

maka turunan keduanya adalah : $\nabla^2\psi = \sum\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G e^{i(\vec{k}+\vec{G}).\vec{r}}$ (2)

Bila persamaan (2) di substitusi ke persamaan (1), maka akan diperoleh:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G e^{i\left(\vec{k}+\vec{G}\right)r} + \sum_G\sum_{G'} V_{G'} U_G e^{i(G+G'+\vec{k}).\vec{r}} = E\psi$$

dimana :

$$V\psi = \sum_{G'} V_{G'} e^{iG'.\vec{r}}\left(\sum_G U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}}\right).e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

Maka $-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}} + \sum_G\sum_{G'} V_{G'} U_G e^{i(G+G').r} = E\sum_G U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}}$

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G + \sum EU_G\right)e^{i\vec{G}.\vec{r}} = -\sum_{G'}\sum_G V_{G'}U_{G'}e^{i(G'+G).\vec{r}}$$

apabila $G' \neq 0$ dan $G' = 0$ maka persamaannya menjadi

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G + \sum EU_G\right)e^{i\vec{G}.\vec{r}} = -\left\{\sum_{G'\neq 0}\sum_G V_{G'}U_G e^{i(\vec{G}+\vec{G}')\cdot\vec{r}} + V_0\sum_G U_G e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}\right\}$$

$$\sum\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G - EU_G + V_0 U_G\right)e^{i\vec{G}.\vec{r}} = -\sum_{G'\neq 0}\sum_G V_{G'}U_G e^{i(\vec{G}+\vec{G}').\vec{r}} \qquad (3)$$

bila $G + G' = G''$

maka $G = G'' - G'$

bila $G = G'$ atau $G' = 0$

maka dari persamaan (3) diperoleh :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\vec{k}+\vec{G}''\right)^2 U_{G''} - EU_{G''} + VU_{G''} = -\sum_{G'\neq 0} V_{G'}U_{G''-G'}$$

Persamaan diatas juga disebut sebagai persamaan sentral.

I. Solusi Persamaan Sentral

Persamaan (27) disebut sebagai persamaan sentral :

$$(\lambda_k - \in)C(k) + \sum_G U_G C(k-G) = 0 \qquad (31)$$

Persamaan ini mewakili persamaan linier dengan menghubungkan koefisien C (k – G) untuk semua vektor kisi resiprok G. Persamaan ini dibentuk karena disana ada persamaan yang mengandung koefisien C. Persamaan ini tetap jika determinan koefisien hilang.

Kita tuliskan persamaan untuk masalah eksplisit. Kita simbolkan g yang mendekati G. Kita misalkan energi potensial U(x) hanya mengandung sebuah komponen fourier Ug=U-g, dinotasikan dengan U. Maka determinan dari koefisiennya adalah:

$\lambda_{k-2g} - \in$	U	0	0	0
U	$\lambda_{k-2g} - \in$	U	0	0

$$
\begin{array}{ccccc}
0 & U & \lambda_k - \in & U & 0 \\
0 & 0 & U & \lambda_{k+g} - \in & U \\
0 & 0 & 0 & U & \lambda_{k+2g} - \in
\end{array} \qquad (32)
$$

Dari sini dapat dilihat lima persamaan berturut-turut dari (31). Pada prinsipnya determinan bernilai tak berhingga, tetapi sering juga menghasilkan nol.

Dari nilai k, tiap-tiap akar $\in$ atau $\in_k$ menunjukkan pita energi yang berbeda, kecuali pada keadaan khusus. Solusi dari faktor (32) menunjukkan energi nilai Eigen $\in_{nk}$, dimana n adalah indeks untuk mengoperasikan energi dan k adalah vektor gelombang dengan lambang C_k.

Sebagian besar sering kali k digunakan dalam zona pertama., untuk megurangi kemungkinan kebingungan dalam pemberian lambang. Jika kita memilih k berbeda dari yang sebenarnya dengan menghitung perbandingan kisi vektor, kita dapatkan persamaan yang sama dalam urutan yang berbeda – tetapi memiliki spektrum energi yang sama.