BAB 7

PITA ENERGI

MATERI:

7.1.Asal mula celah energi

- .Model elektron hampir bebas.

7.2.Nilai energi celah

- .Fungsi Bloch
- .Model Kronig-Peney
- .Persamaan sentral

INDIKATOR:

Mahasiswa harus dapat :

- Menjelaskan asal mula celah energi.
- Menggunakan persamaan sentral untuk menentukan nilai celah energi.

PITA ENERGI

TUJUAN :

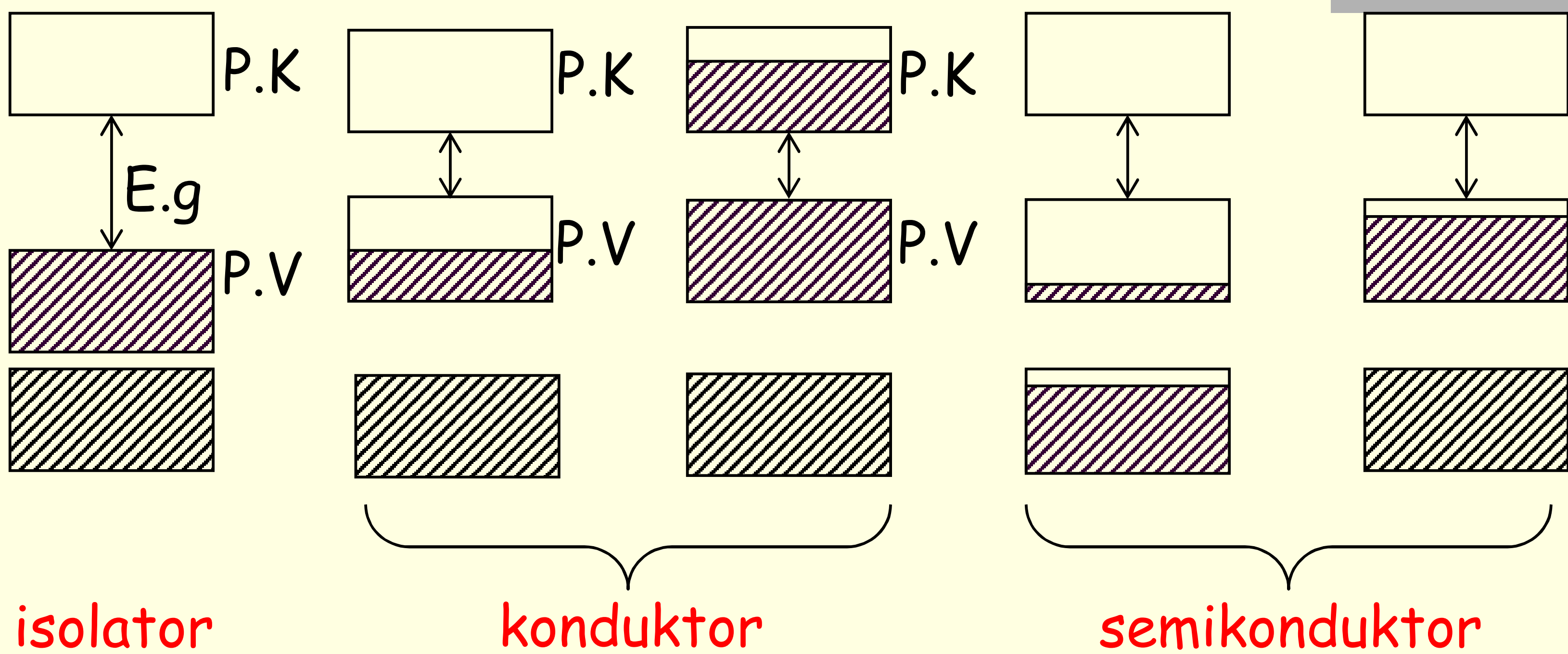
- Menjelaskan asal mula celah energi
- Menggunakan persamaan sentral untuk menentukan nilai celah energi

Pita energi digunakan untuk membedakan antara konduktor, semikonduktor, isolator dan superkonduktor.

Kristal dapat dikelompokkan dalam 4 golongan :

1. Konduktor $\rho <<$
2. Semikonduktor $0 \leq \rho \leq \infty$
3. Isolator $\rho \approx \infty$
4. Superkonduktor $\rho = 0$

Dapat dijelaskan berdasarkan konduktivitasnya dan berdasarkan pita energinya :



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

Model Elektron Bebas (V=0)

$$H\psi = E\psi$$

Hamiltonian :

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

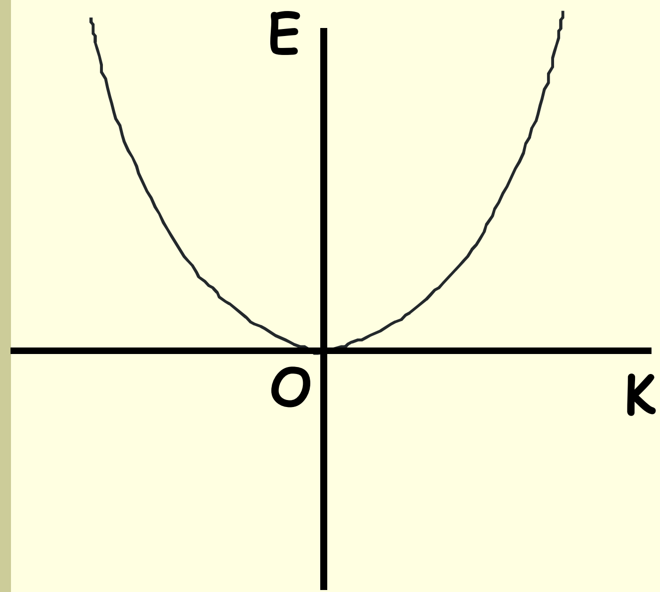
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$

Fungsi Gelombang elektron bebas :

$$\psi = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

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

Dari nilai $E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2$ diperoleh grafik :

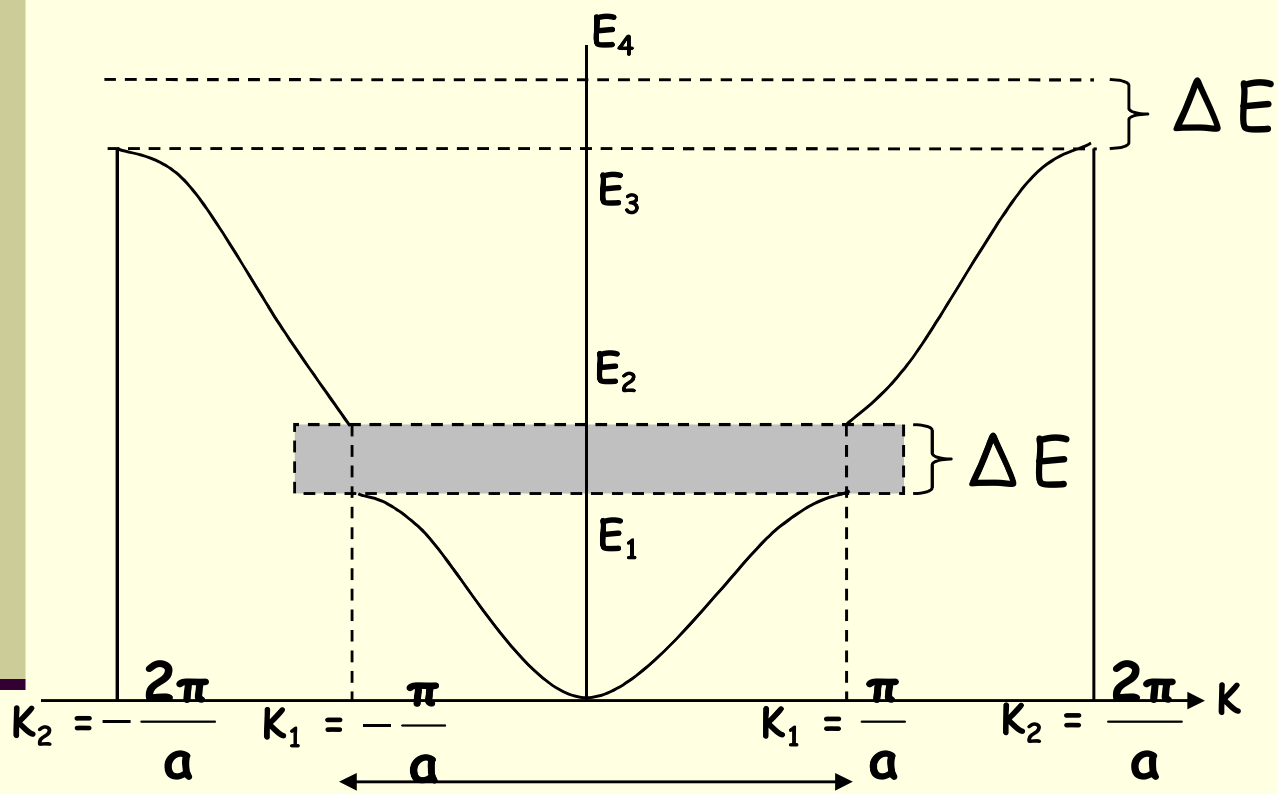


Makna:

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).

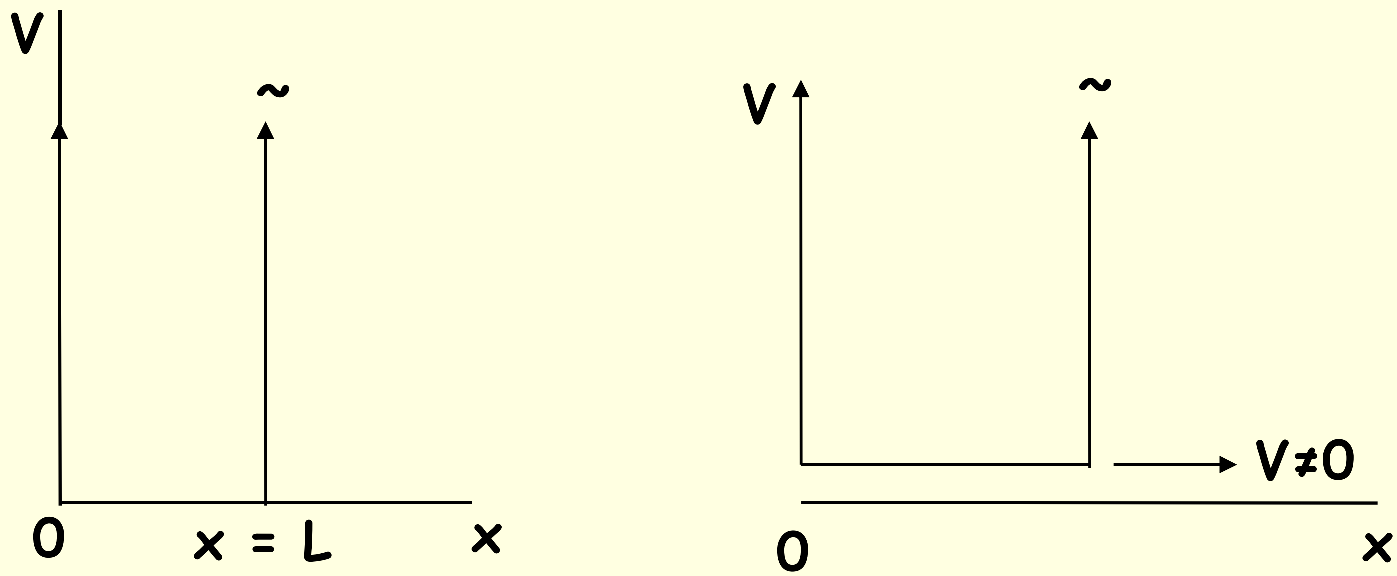
Model elektron yang hampir bebas



Daerah Brillouin Pertama

ΔE : Tidak boleh ditempati oleh elektron (celah terlarang)

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



Persamaan Schrodinger : $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi$

Misal : Logam 1-Dimensi

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

Sehingga persamaan gelombang berdiri dapat diturunkan dari persamaan gelombang berjalan yaitu :

$$\psi(+) = e^{i\pi x/a} + e^{-i\pi x/a} = 2\cos(\pi x/a)$$

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

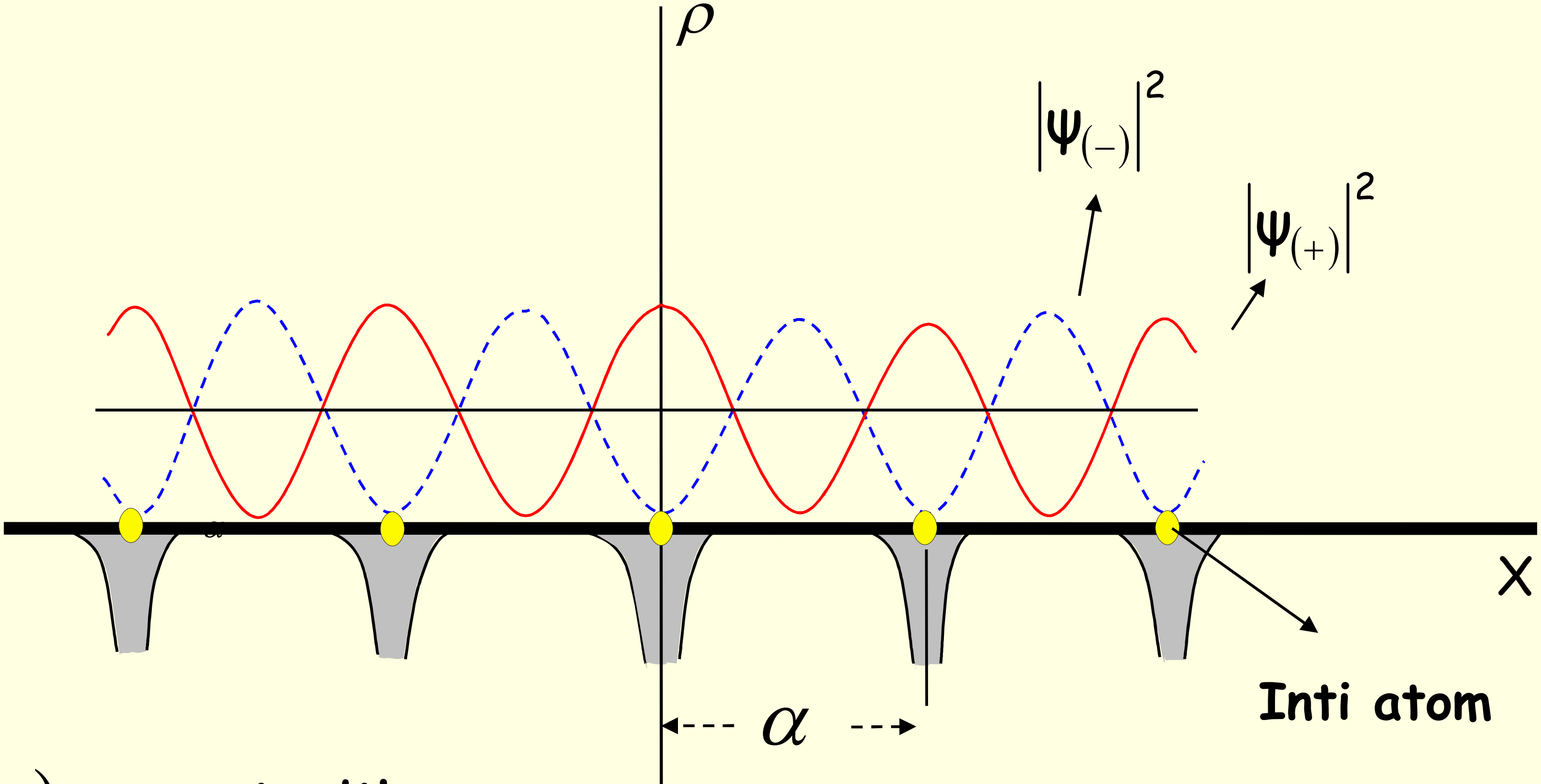
Dari solusi gelombang berdiri dapat dicari kerapatan elektronnya sebagai berikut : $\rho(+) = |\psi(+)|^2 \propto \cos^2(\pi x/a)$

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

Ternyata kedua solusi ini menumpuk elektron pada daerah yang berlainan relatif terhadap kedudukan ion-ionnya sehingga energi potensialnya berbeda, hal inilah yang menimbulkan loncatan energi sehingga timbul celah energi pada $k = \pm \pi/a$

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

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

Fungsi gelombang elektron yang hampir bebas dinyatakan oleh :

Fungsi Bloch : merupakan teorema untuk menyelesaikan persamaan Scrhodinger pada potensial pada potensial periodik

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \text{..................(1)}$$

$$U_k(\vec{r}+\vec{T}) = U_k(\vec{r})$$

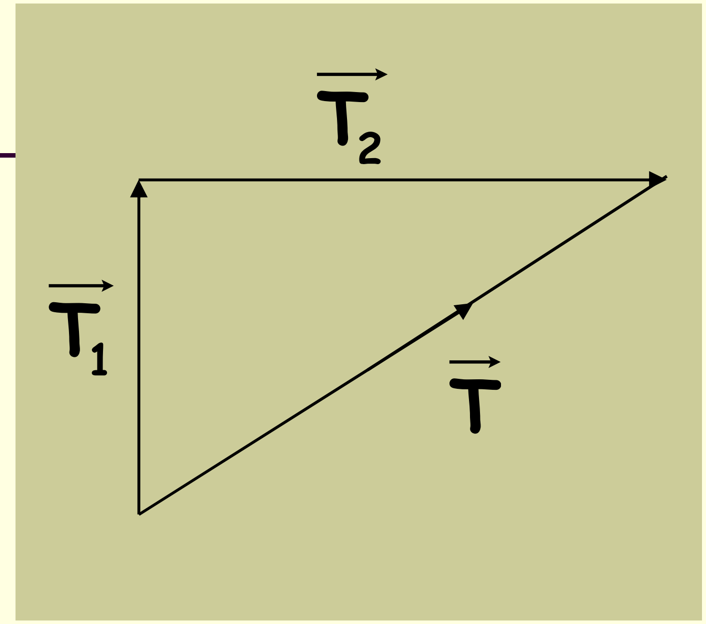
sehingga : $$\left|\psi(\vec{r}+\vec{T})\right|^2 = \left|\psi(\vec{r})\right|^2$$

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

Beberapa fungsi dari T

dengan :

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



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

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

atau : $$f\left(\vec{T}\right) = e^{i\alpha\left(\vec{T}\right)} \qquad \text{.....................(2)}$$

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

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

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

$$a\left(\vec{T}_1+\vec{T}_2\right)=a\left(\vec{T}_1\right)+a\left(\vec{T}_2\right)$$

Untuk kasus 3D

$$a\left(\vec{T}\right)=A\,T_x+B\,T_y+C\,T_z$$

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

$$\vec{T}=T_x\,\hat{X}+T_y\,\hat{Y}+T_z\,\hat{Z}$$

$$\vec{k}\cdot\vec{T}=A\,T_x+B\,T_y+C\,T_z$$

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

maka : $\psi\left(\vec{r}+\vec{T}\right)=e^{i\vec{k}\cdot\vec{T}}\psi\left(\vec{r}\right)$ ....(3)

Bukti bahwa : U_k periodik

Persamaan Bloch :

$$\psi_k(\vec{r}) = U_k(\vec{r})e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

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

$$\psi(\vec{r}+\vec{T}) = e^{i\vec{k}.\vec{T}}\psi(\vec{r}) \qquad \text{.................**}$$

subtitusikan dari pers.(1) ke pers.(3) :

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

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

Bila kita bandingkan :

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

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

$$U_k\left(\vec{r}\right)=U_k\left(\vec{r}+\vec{T}\right)$$ …………………. terbukti U_k fungsi periodik

Karena : V periodik maka V dapat dinyatakan dalam bentuk

Deret Fourier (untuk 1 dimensi) :

$$V = \sum V_n . e^{i(\frac{2\pi}{a} n\vec{x})}$$

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

Bila : $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$ $\longrightarrow$ Vektor kisi resiprok

a = konstanta kisi

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

Sehingga dalam 3-dimensi, dapat kita tuliskan:

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

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

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

Persamaan Schrodingernya:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = E(\psi) \qquad \text{....................(4)}$$

dengan

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

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

$$\nabla^2\psi = \sum\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G e^{i(\vec{k}+\vec{G}).\vec{r}} \qquad \text{....................(5)}$$

Bila persamaan (5) di substitusi ke persamaan (4), akan diperoleh:

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

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

Maka

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

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

$$= -\left\{ \sum_{G^{'} \neq 0} \sum_{G} V_{G^{'}} U_{G} e^{i(\vec{G}+\vec{G}^{'})\cdot\vec{r}} + V_0 \sum_{G} U_{G} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \right\}$$

$$\sum \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left| \vec{k} + \vec{G} \right|^2 U_G - EU_G + V_0 U_G \right) e^{i\vec{G}.\vec{r}} = -\sum_{G\neq 0} \sum_{G} V_{G^{'}} U_G e^{i(\vec{G}+\vec{G}^{'}).\vec{r}} \quad \text{.............}(6)$$

bila $G + G^{'} = G^{''}$

maka $G = G^{''} - G^{'}$

bila $G = G^{''}$ atau $G^{'} = 0$

maka dari persamaan (6) 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 SENTRAL

LATIHAN SOAL

1. Jelaskan
   - Asal mula terbentuknya celah energi untuk model elektron hampir bebas.
   - Fungsi Bloch
   - Model Kronig-Peney
2. Gunakan persamaan sentral untuk menentukan nilai celah energi.
3. Jelaskan apa yang dimaksud dengan energi gap

LATIHAN SOAL

4. Jelaskan

   Perbedaan antara konduktor, semikonduktor, isolator dan superkonduktor berdasarkan konduktivitasnya.

5. Jelaskan

   Perbedaan antara konduktor, semikonduktor, isolator dan superkonduktor berdasarkan energi gapnya.

LATIHAN SOAL

6. A cubic lattice with lattice spacing a has crystal potential, where a = lattice spacing of a cubic lattice

   $U = - U \sin(2\pi x/a) \sin(2\pi y/a) \sin(2\pi z/a)$

   a. Apply the central equation to calculate the approximate band gap at the point $k = (\pi/a, \pi/a, \pi/a)$

   b. Sketch the band diagram along the [111] direction, including the first two bands.