BAB VII

PITA ENERGI

TIK : (1) MENJELASKAN ASAL MULA CELAH ENERGI

(2) MENGGUNAKAN PERSAMAAN SENTRAL UNTUK MENENTUKAN NILAI CELAH ENERGI

Digunakan untuk membedakan antara konduktor, semikonduktor, isolator dan superkonduktor.

Kristal dapat dikelompokkan dalam 4 golongan:

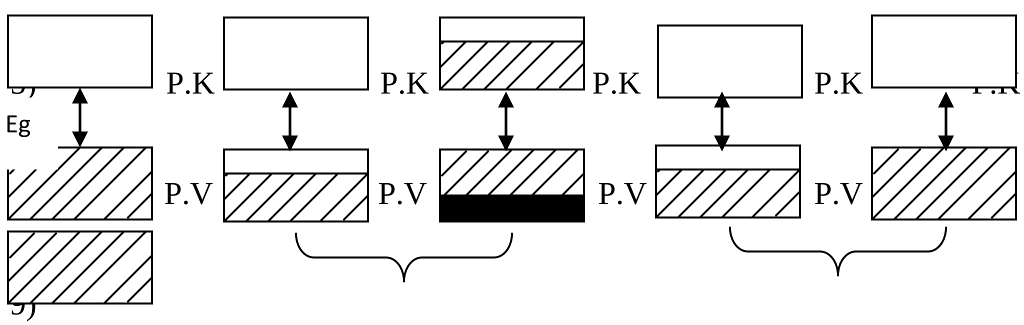
1) Konduktor

   Konduktor bagus : $\rho = 0$

   Konduktor biasa : $\rho <<$

2) Semikonduktor
3) Isolator : $\rho \approx \infty$; σ kecil
4) Superkonduktor : $\rho = 0$; $\sigma = \infty$

Keempat kelompok kristal di atas dapat dibedakan dari pita energinya:



isolator konduktor semikonduktor

P.V = Pita Valensi = Pita energi yang terisi penuh (oleh electron)

P.K = Pita Konduksi = Pita energi di atas pita valensi yang masih belum penuh oleh electron

E_g = Energi gap

Model elektron bebas (V = 0)

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{h^2}{2m}\nabla^2$$

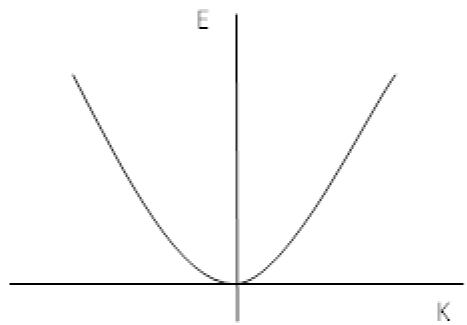
Hamiltonian : $H\Psi = E\Psi$

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi + \Psi = E\Psi$$

$$\Psi = e^{i\overrightarrow{K.r}}$$

Fungsi gelombang : $E = \frac{h^2}{2m}K^2$

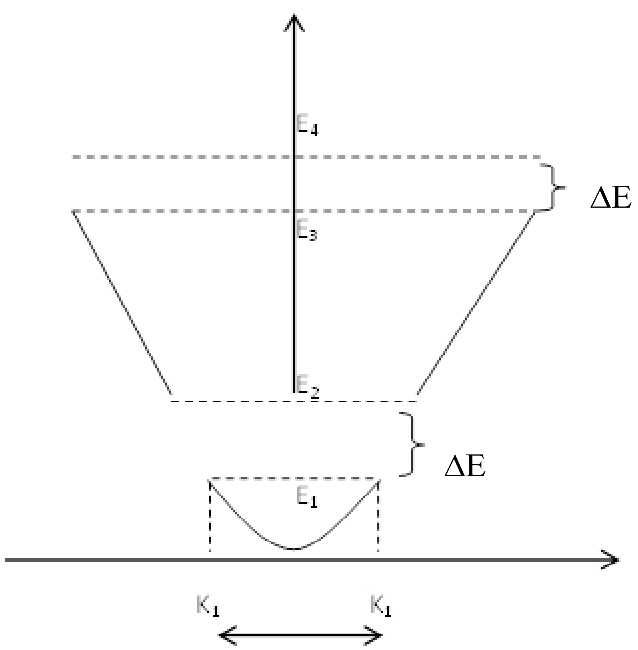
Gagal digunakan sebagai teori untuk menjelaskan perbedaan antara: Konduktor, semikonduktor, isolator dan superkonduktor



Makna:

Energi yang boleh dimiliki oleh electron sembarang mulai dari nol sampai tak hingga untuk setiap nilai K

Model Elektron yang Hampir Bebas

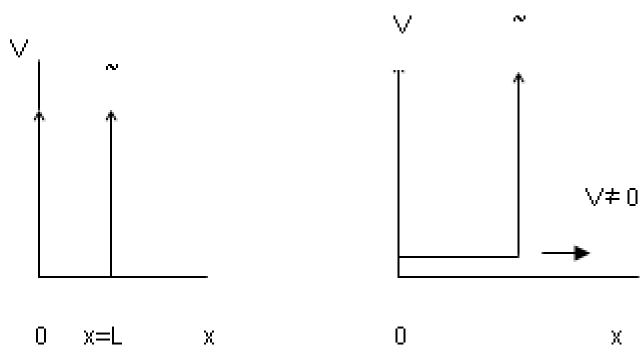


ΔE = Tidak boleh ditempati oleh electron. (celah terlarang)

Daerah Brillouin Pertama

<u>Sehingga : Model yang berlaku adalah model elektron yang hampir bebas</u>

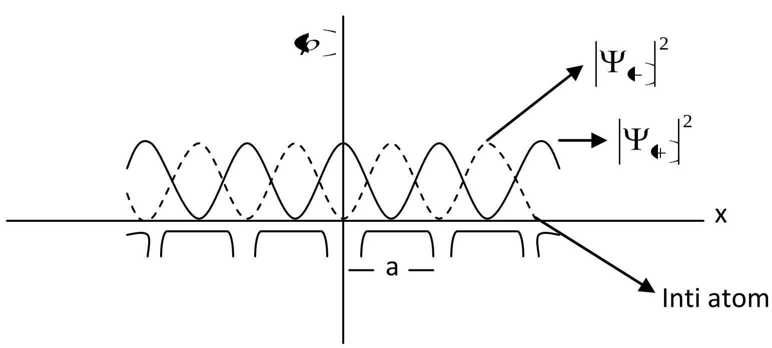
(V<< ; V $\neq$ 0)



Persamaan Schrodinger:

$$-\frac{h^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = \mathrm{E}\Psi$$

Misal: Logam 1 Dimensi



Energi Potensial

V (r) $\longrightarrow$ periodic

Maka: V (r) = V (r + T)

$T = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3 \longrightarrow$ (3 dimensi)

Fungsi gelombang e yang hampir bebas dinyatakan oleh:

Fungsi Bloch

$\psi(\mathbf{k},\mathbf{r}) = U_x(\mathbf{r})\, e^{\mathbf{ik.r}}$ ……………………….(1)

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

Dengan: $|\psi(\mathbf{r} + \mathbf{T})|^2 - |\psi(\mathbf{r})|^2$

Artinya: $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = f(\mathbf{T})\, \psi(\mathbf{r})$

Beberapa fungsi dari **T**

Dengan : $|f(\mathbf{T})|^2 = 1$

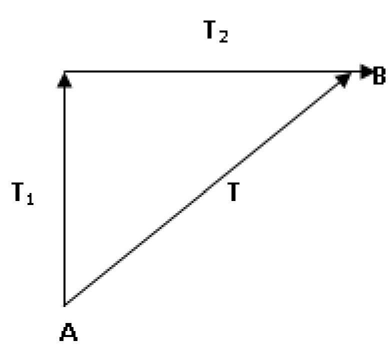
$f(\mathbf{T}) = e^{\mathbf{ik.r}}$

$|f(\mathbf{T})|^2 = e^0 = 1$

$f(\mathbf{T}) = e^{i\alpha(\mathbf{T})}$ ………………………(2)

Bila : $\mathbf{T} = \mathbf{T_1} + \mathbf{T_2}$

Maka : $f(\mathbf{T_1} + \mathbf{T_2}) = e^{i\alpha(T1 + T2)} = e^{i\alpha(T1)} \cdot e^{i\alpha(T2)}$



$\alpha(\mathbf{T_1} + \mathbf{T_2}) = \alpha(\mathbf{T_1}) + \alpha(\mathbf{T}_2)$

$\alpha(\mathbf{T}) = A\, T_X + B\, T_y + cT_z$

$\vec{k} = A\hat{x} + B\hat{y} + C\hat{z}$

$\vec{T} = T_x\hat{x} + T_y\hat{y} + T_z\hat{z}$

$\vec{k}.\vec{T} = AT_X + BT_Y + CT_Z$

$d(\vec{T}) = \vec{k}.\vec{T}$

Maka: ψ (**r** + **T**)= e $^{i\mathbf{k}.T}$ ψ (**r**) …………………….(3)

Bukti bahwa U_k periodic

Pers Bloch : ψ (**k**,**r**)= U_k(**r**) e $^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$

U_k(**r**) = ψ (**k**,**r**)/e $^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}}$

ψ(**r** + **T**)= U_k (**r** +**T**) e $^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}+\mathbf{T})}$ ....(*)

Dari pers (3)

ψ (**r** + **T**)= e $^{i\mathbf{k}.T}$ ψ(**r**)

Bila disubstitusikan pers (3) ke (1), menjadi:

ψ (**r** + **T**)= e $^{i\mathbf{k}.T}$ U_k (**r**) e $^{i\mathbf{k}.r}$

ψ (**r** + **T**)=U_k (**r**) e $^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}+\mathbf{T})}$

Bila dibandingkan:

ψ (**r** + **T**)= U_k (**r** + **T** **).** e $^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}+\mathbf{T})}$

ψ (**r** + **T**)= U_k (**r** **).** e $^{i\mathbf{k}.(\mathbf{r}+\mathbf{T})}$

U_k (**r** **)** = U_k (**r** + **T**) ………………Terbukti bahwa U_k adalah fungsi periodik

Teorema Bloch: "fungsi eigen dari persamaan gelombang untuk suatu potensial periodik adalah hasil kali antara suatu gelombang bidang berjalan e$^{ik.\mathbf{r}}$ dengan suatu fungsi modulasi $U_{k(}$**r)** dengan periode sifat kisi kristal.

Karena *V* periodik, maka *V* dapat dinyatakan dalam bentuk deret fourier (untuk 1 dimensi):

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

$$V = \sum V_{n1} Cosi \frac{2\pi}{a} nx + iV_{n2} \sin i \frac{2\pi}{a} nx$$

Bila $\vec{b} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$ dinamakan kisi reciprok

a= konstanta kisi

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

Sehingga dalam 3 dimensi dapat kita tuliskan:

$$e^{\frac{2\pi}{a}(n_x x + n_y y + n_z z)} = e^{i(n_x b_1 + n_y b_2 + n_z b_3)}$$

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

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

Persamaan Schrodingernya:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V)\Psi = E\Psi \text{ ……………………(4)}$$

$$\nabla^2\Psi - \nabla^2\left\{\sum_G U_G . e^{i\vec{G}.\vec{r}}\right\} . e^{i\vec{k}.\vec{r}}$$

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

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

Bila Pers (4) dimasukkan ke pers (3) didapat:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\sum\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G.e^{i(k+\vec{G}).\vec{r}} + \sum_G\sum_{G'} V_{G'}U_G.e^{i(G+G'+K)}$$
$$= E\Psi$$
$$Karena: V\Psi = \sum_{G'} V_{G'}.e^{i\vec{G}'.\vec{r}}\left(\sum_G V_G.e^{i\vec{G}}.e^{ik\vec{r}}\right)$$

Maka:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G.e^{i\vec{G}.\vec{r}} + \sum_{G'}\sum_G V_{G'}U_G.e^{i(G+G').\vec{r}}$$
$$= E\sum_G U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_G\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G.e^{i\vec{G}.\vec{r}} - \sum EU_G)e^{i\vec{G}.\vec{r}} = -\sum_{G'}\sum_G V_{G'}U_G.e^{i(\vec{G}'+\vec{G}).\vec{r}}$$
$$= -\sum_{G'\neq 0}\sum_G V_{G'}U_G.e^{i(\vec{G}'+\vec{G}).\vec{r}} + V_0\sum_G U_G e^{i\vec{G}.\vec{r}}$$
$$\sum -\frac{\hbar^2}{2m}\left|\vec{k}+\vec{G}\right|^2 U_G - EU_G + V_0U_G)e^{i\vec{G}.\vec{r}} = \sum_{G'\neq 0}\sum_G V_{G'}U_G.e^{i(\vec{G}'+\vec{G}).\vec{r}} \ldots\ldots\ldots\ldots(6)$$

Bila: G+G’ = G’’

Maka: G=G’’-G’

Bila G=G’’ atau G’=0 maka dari pers (6) diperoleh:

$$\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{K}+\vec{G}'')^2 U_{G''} - EU_{G''} + V_0U_{G''} = -\sum_{G\neq 0} V_{G'}U_{G''-G'} \ldots\ldots\ldots\ \ldots\ldots\ldots\ \ldots(7)$$

Bila

$$\vec{k}' = \vec{G}'' + \vec{k}$$
$$dapat\ dituliskan$$
$$\Psi = \sum_G U_G.e^{i\vec{G}.\vec{r}}.e^{i\vec{k}.\vec{r}} = \sum_{k'} c_{k'}.e^{ik'.\vec{r}}$$
$$Sehingga:$$
$$(-\frac{\hbar^2}{2m}k' - E)c_k = -\sum_{G'} V_G c_{k'-G'}$$

Persamaan terakhir merupakan persamaan central