BAB VI

MODEL ELEKTRON BEBAS

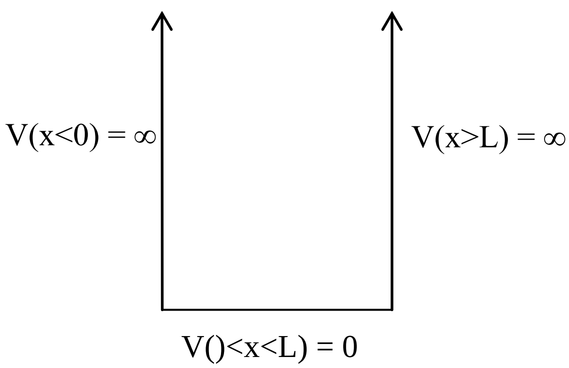
TIK : Energi Fermi (E_F) Rapat Keadaan

Kecepatan Fermi (v_F) Kapasitas Panas e

Vektor gelb. Fermi (k_F)

<u>Model Elektron Bebas</u> (1 Dimensi)

Pikirkan sebuah elektron bebas bergerak dalam sebuah sumur potensial yang lebarnya L dan kedalaman ∞.



Asumsi : energi potensial pada daerah dari 0-L adalah 0

Jika partikel tidak memiliki energi potensial, maka :

Pers. Eigen value (p.s.)

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\psi(x) = E\psi(x)$$

Untuk elektron bebas, V(x) = 0.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\psi(x) = A\sin kx + B\cos kx$$

Agar $\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0$

Maka

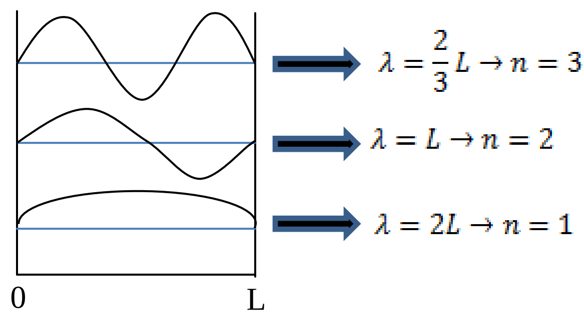
$$\psi(0) = A\sin k0 + B\cos k0$$

$$\psi(0) = 0 \ \rightarrow B = 0$$

$$\psi(x) = A \sin kx$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} k^2 A \sin kx = EA \sin kx$$

Sehingga didapat $E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \rightarrow bila\ k = \frac{2\pi}{\lambda}$



Karena $\psi(x = 0) = \psi(x = L) = 0$ maka $0 = A \sin kL \rightarrow kL = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{L} = \frac{2\pi}{\lambda}$

$$\frac{n\lambda}{2} = L$$

Semakin banyak gelombang, semakin tinggi tingkat energinya

* Untuk harga n terkecil

$$n = 1 \Rightarrow L = \frac{\lambda}{2}$$

panjang gelombang yang diperoleh kecil (minimum)

* Untuk harga n terbesar

$$n = 3 \Rightarrow L = \frac{3}{2}\lambda$$

panjang gelombang yang diperoleh besar (maksimum)

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$$

Jumlah tingkat energi yang terisi penuh oleh e yaitu pada : $n = \frac{Jumlah\ elektron}{jumlah\ spin\ (up\&down)} = \frac{N}{2}$

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{N\pi}{2L}\right)^2$$

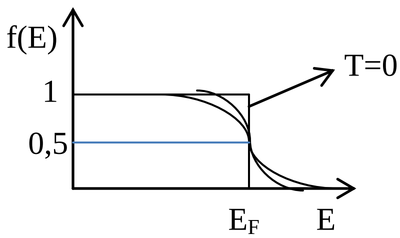
E_F merupakan tingkat energi tertinggi yang ditempati elektron pada temperatur T = 0 K (pada keadaan dasar)

Jika T > 0 K, maka elektron akan loncat ke energi yang lebih tinggi. Elektron lainnya pada waktu yang bersamaan tidak semua elektron akan loncat ke tingkat energi yang lebih tinggi (Pauli).

Disini akan dijelaskan oleh (F.D)

Distribusi <u>Fermi Dirac</u> $f(E) = \frac{1}{\left\{e^{(E-\mu)/k_bT} + 1\right\}}$ dengan μ = potensial kimia (pada T=0K, $\mu = E_F$)

f(E) merupakan peluang suatu partikel untuk berada di tingkat energi E.



T = 0

$E < E_F \Rightarrow F(E) = 1$

$E > E_F \Rightarrow F(E) = 0$

Untuk T > 0

Dari grafik di atas tingkat energi (E) makin tinggi maka peluang untuk tetap diam semakin kecil sehingga peluang untuk loncat akan semakin besar.

Sehingga tingkat energi yang lebih tinggi dari E_F juga ada yang terisi (memiliki peluang) :

$$(E - \mu) \gg k_b T$$

$$f(E) = \frac{1}{\left\{e^{(E-\mu)/k_bT}\right\}} = e^{(\mu-E)/k_bT}$$

<u>Untuk sistem 3 dimensi</u>

Partikel bebas V(x) = 0

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x.y.z) = E\psi(x,y,z)$$

$$\psi(x.y.z) = F(x) \times F(y) \times F(z)$$

Utuk menentukan $\psi(x.y.z)$ kita gunakan metoda pemisahan variabel (x,y,z)

Sehingga :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{F(x)}\frac{d^2}{dx^2}F(x)+\frac{1}{F(x)}\frac{d^2}{dx^2}F(x)+\frac{1}{F(x)}\frac{d^2}{dx^2}F(x)\right)=\frac{E\times F(x)\times F(y)\times F(z)}{F(x)\times F(y)\times F(z)}$$

Solusi

$$F(x) = A_x e^{ik_x x}, F(x) = A_y e^{ik_y y}, F(z) = A_z e^{ik_z z}$$

$$\therefore \psi(x.y.z) = Ae^{i\left(k_x x + k_y y + k_z z\right)}$$

$$\psi(r) = Ae^{i\left(\vec{k}\vec{r}\right)} \rightarrow simpangan\ elektron\ di\ dalam\ logam$$

$$\vec{r} = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath} + z\hat{k}$$

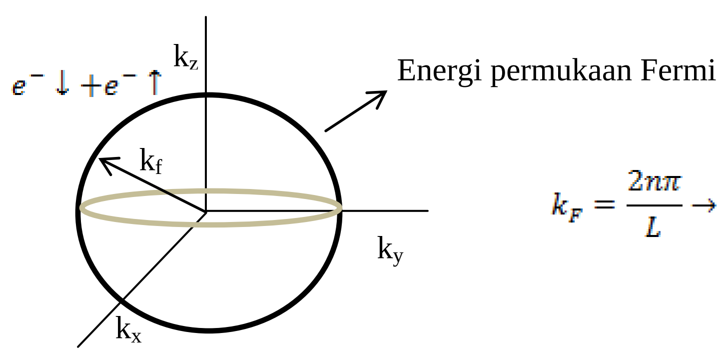
$$\vec{k} = k_x\hat{\imath} + k_y\hat{\jmath} + k_z\hat{k}$$

Syarat : $k_x \cdot k_y \cdot k_z = \left|\vec{k}\right| = 0; \frac{2\pi}{L}; \frac{4\pi}{L}; \ldots; \frac{2n\pi}{L}$ dengan n = 0, 1, 2, 3, ...

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)$$

Pada keadaan dasar :

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}k_F^2 \rightarrow k_F = \left[\frac{2m}{\hbar^2}E_F\right]^{\frac{1}{2}}$$



$$k_F = \frac{2n\pi}{L} \rightarrow n = 0,1,2,\ldots$$

Kita bayangkan elektron berada dalam sebuah bola.

Maka elemen volume dalam ruang : $k = V_e = \left(\frac{2\pi}{L}\right)^3$ → ditempati oleh 2 buah e^-

Jumlah orbital di dalam volume bola yang berjari-jari k_f adalah :

$$N = \frac{2V_m}{V_e}$$

Dengan V_m adalah volume bola; V_c adalah elemen volume (volume satuan); 2 menunjukkan jumlah spin (up & down)

Karena volume bola: $V = \frac{4}{3}\pi\ (k_f)^3$

maka, $N = \dfrac{2\frac{4}{3}\pi(k_F)^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3} = \dfrac{V}{3\pi^2}k_F{}^3$

$N = \dfrac{V}{3\pi^2}k_F{}^3$

$N = \dfrac{V}{3\pi^2}\dfrac{(2m.E_F)^{\frac{3}{2}}}{\hbar^3}$

$N\ (3\pi^2)^2\ \hbar^3 = V\ 2^{\frac{3}{2}}\ m^{\frac{3}{2}}\ E_F{}^{\frac{3}{2}}$

$N^2\ (3\pi^2)^2\ \hbar^6 = V^2\ 8\ m^3\ E_F{}^3$

$E_F{}^3 = \dfrac{N^2(3\pi^2)^2\hbar^6}{V^2 8m^3}$

$E_F = \sqrt[3]{\dfrac{N^{\frac{2}{3}}(3\pi^2)^2\hbar^6}{V^{\frac{2}{3}}2m}}$

$$\boxed{E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{3\pi^2 N}{V}\right]^{\frac{2}{3}}}$$

Bila: $\frac{N}{V}$ = n = konsentrasi elektron

Maka: kecepatan elektron pada permukaan fermi (V_F)

$$\boxed{V_F = \frac{\hbar k_F}{m} = \frac{\hbar}{m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{\frac{1}{3}}}$$

Rapat Keadaan (Density of State)

Rapat keadaan dapat didefinisikan sebagai $D(E) = \frac{dN_E}{dE}$, jumlah orbital per satu satuan rentang energi, dimana satuan rentang energi merupakan jumlah energi yang terdapat dalam ruang.

Untuk menentukan rapat keadaan, maka harus dicari nilai N terlebih dahulu dengan menggunakan rumus Energi Fermi.

dengan nilai $k = \left[\frac{3\pi^2 N}{V}\right]^{\frac{1}{3}}$

maka $k^2 = \left[\left(\frac{3\pi^2 N}{N}\right)^{\frac{1}{3}}\right]^2 = \left[3\pi^2 \frac{N}{V}\right]^{\frac{2}{3}}$

sehingga

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 \frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}$$

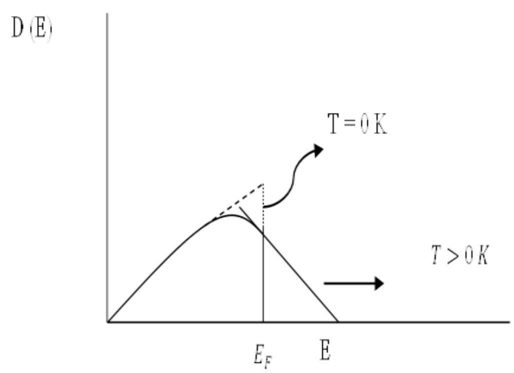
$$N^{\frac{2}{3}} = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{V^{\frac{2}{3}}}{\left(3\pi^2\right)^{\frac{2}{3}}} E$$

$$N = \left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{V}{3\pi^2}$$

jadi…

$$D(E) = \frac{d}{dE}\left\{\frac{V}{3\pi^2}.\left(\frac{2m}{\hbar_2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{3}{2}}\right\}$$

$$\boxed{D(E) = \frac{V}{2\pi^2}.\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}}$$



$$N = \frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} .E^{\frac{3}{2}}$$
$$karena:$$
$$\frac{V}{3\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} = C$$
$$maka$$
$$N = C.E^{\frac{3}{2}}$$
$$\ln N = \ln C.E^{\frac{3}{2}}$$
$$\ln N = \frac{3}{2}\ln E + \ln C$$
$$\frac{dN}{N} = \frac{3}{2}\frac{dE}{E}$$

$$\frac{dN}{dE} = \frac{3}{2}\frac{N}{E}$$
$$maka:$$
$$\boxed{D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{3N}{2E}}$$

Persamaan diatas merupakan bentuk lain dari fungsi rapat keadaan.

Kapasitas Panas Untuk Elektron (C_v)

Dari mekanika klasik

Energi untuk satu derajat kebebasan : $U = \frac{1}{2}k_bT$

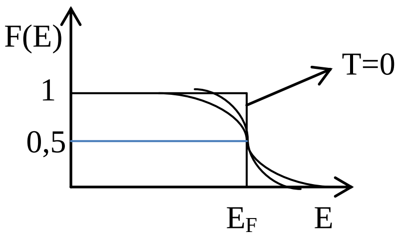
Jadi untuk partikel tunggal (3 derajat kebebasan) $U = 3 \times \frac{1}{2}k_bT = \frac{3}{2}k_bT$

Kapasitas panas untuk 1 partikel $C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{3}{2}k_b$, maka untuk N buah partikel $U = \frac{3}{2}Nk_b$

Bila $\frac{T}{T_F} \approx 0{,}01 \to E_F = \frac{\hbar^2}{2m} \times k_F^2 = k_bT_F$, maka T_F(Temperatur Fermi untuk T >0 K) = $\frac{E_F}{k_b}$

Untuk suhu rendah $k_bT \gg (E - \mu)$

Distribusi fungsi Fermi-Dirac $F(E) = \frac{1}{\left\{e^{(E-\mu)/k_b T} + 1\right\}}$



T = 0

$E < E_F \Longrightarrow F(E) = 1$

$E > E_F \Longrightarrow F(E) = 0$

Bila perubahan energi adalah : U = U(T) – U (0)

U(T) : energi setelah elektron pindah dari keaadaan dasar.

$$U = \int_0^{\sim} D(E)\, F(E)\, E\, dE - \int_0^{E_F} D(E) E\, dE$$

Bila $N = \int_0^{E_F} D(E)\, F(E)\, dE = \int_0^{\sim} D(E)\, F(E) dE$

$$N.E_F = \int_0^{\infty} D(E) f(E) E_F dE = \left[\int_0^{E_F} + \int_{E_F}^{\infty}\right] D(E) f(E) E_F dE$$

$$U = \int_{E_F}^{\infty} D(E) f(E)(E - E_F) dE + \int_0^{E_F} D(E)(E_F - E)(1 - f(E) dE$$

$C_V = \frac{dU}{dT}$ karena integran yang bergantung pada suhu adalah hanya f (E), maka diferensiasinya terhadap T hanya berlaku untuk suhu-suhu yang mengandung f (E) saja.

$$C_V = \frac{dU}{dT} = \frac{d}{dT}\left[\int_{E_F}^{\infty} D(E) f(E)(E - E_F) dE + \int_0^{E_F} D(E)(E - E_F) f(E) dE\right]$$

$$C_V = \frac{d}{dT}\int_0^{\infty} D(E) f(E)(E - E_F) dE = k_B \int_0^{\infty} D(E)(E - E_F) \frac{df}{dk_B T} dE$$

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{(E - E_F)}{k_B T}} + 1} \longrightarrow \frac{df}{dk_B T} = \frac{df}{d\tau}\left(e^{(E - E_F)\tau} + 1\right)^{-1}$$

$$\frac{df}{d\tau} = \frac{E - E_F}{\tau^2} \frac{e^{\frac{(E-E_F)}{\tau}}}{\left(e^{\frac{(E-E_F)}{\tau}} + 1\right)^2}$$

Untuk T ⟨⟨ :

$$C = k_B D(E_F) = \int_0^\infty \frac{E - E_F}{\tau^2} \frac{e^{\frac{(E-E_F)}{\tau}}}{\left(e^{\frac{(E-E_F)}{\tau}} + 1\right)^2} dE$$

Misal : $x = \frac{(E - E_F)}{\tau} \longrightarrow$ $E = 0 \longrightarrow x = \frac{E_F}{\tau}$

$E = \infty \longrightarrow x = \infty$

$$C = k_B D(E_F) \int_{\frac{E_F}{\tau}}^{\infty} x^2 \frac{e^x}{e^x + 1} \tau \ dx$$

$$C = \frac{k_B{}^2}{T} D(E_F) \int_{\frac{E_F}{\tau}}^{\infty} x^2 \frac{e^x}{e^x + 1} \ dx$$

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_B{}^2 T D(E_F)$$

dimana $D(E) = \frac{3}{2}\frac{N}{E} \longrightarrow D(E_F) = \frac{3N}{2E_F}$

$$C_V = \frac{\pi^2}{3} k_b{}^2 T \frac{3N}{2E_F} \longrightarrow E_F = k_B T_F$$

$$C_V = \pi^2 k_B{}^2 \frac{T}{2 k_B T_F}$$

Maka kapasitas panas untuk elektron : $\boxed{C_V = \frac{\pi^2}{2} k_B N \frac{T}{T_F}}$