

LECTURE NOTES

FISIKA ZAT PADAT (FIS-327)

Denny Darmawan, M.Sc.
[\(darmawan@uny.ac.id\)](mailto:darmawan@uny.ac.id)

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA & ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS NEGERI YOGYAKARTA**

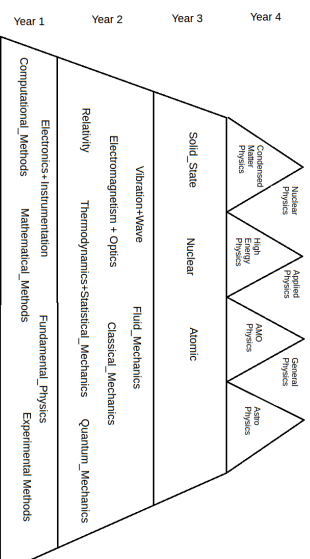
Solid State Physics

Lecturer:
Denny Darmawan

What is it about?

- “A branch of physics that studies the properties of material in the solid state” (Wordnet, Princeton.edu)
- “The study of rigid matter, or solids, [...] the largest branch of condensed matter physics [...] studies how the large-scale properties of solid materials result from their atomic-scale properties [...] forms the theoretical basis of material science.” (Wikipedia)

A study on the properties
[mechanical, thermal, electrical, magnetic & optical]
of material in the solid state
[crystalline & amorphous]



What are we going to learn?

- Crystal Structure, Lattice & Reciprocal Lattice
- Lattice Vibration (Theory of Phonon)
- Theory of Metal
(Drude Model, Sommerfeld/ Free Electron Model, Nearly-Free Electron Model, Energy Bands)
- Semiconductor

Prerequisites

- Electromagnetism
- Statistical Mechanics (+Thermodynamics)
- Quantum Mechanics

Textbooks

- **Compulsory:**
 - Ashcroft & Mermin, *Solid State Physics*, Brooks Cole, 1976
- **Additional:**
 - Omar, *Elementary Solid State Physics*, Addison-Wesley, 1993
 - Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, 2004

Grading

- 50% midterm exam + assignments
- 50% final exam

Fisika Zat Padat

Kekisi Kristal

Apa itu kekisi?

- Kekisi (kekisi Bravais)** merupakan deretan tak hingga dari titik-titik diskrit dengan susunan dan orientasi yang nampak tepat sama
- Singkatnya: *kekisi adalah deretan periodik dan teratur dari titik-titik dalam ruang*
 - Kekisi merupakan abstraksi matematis
 - **Struktur kristal** terbentuk ketika **basis** yang terdiri atas atom-atom ditempatkan secara identik ke setiap titik kekisi
 - Struktur kristal = kekisi + basis



Auguste Bravais (1811 – 1863)

Apa itu kekisi?

Kekisi Bravais terdiri atas titik-titik yang memiliki vektor posisi R dengan bentuk

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

dengan $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ = sembarang vektor primitif yang tidak selalu berada di bidang yang sama
 n_1, n_2, n_3 = bilangan bulat (negatif, nol, atau positif)

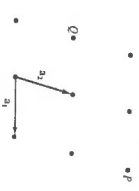


Figure 4.1
 A general two-dimensional Bravais lattice of no particular symmetry, the oblique net. Primitive vectors a_1 and a_2 are shown. All points in the net are linear combinations of these with integral coefficients, for example: $P = a_1 + 2a_2$, and $Q = -a_1 + 3a_2$.

Kekisi Bravais 2D (jejaring/net)

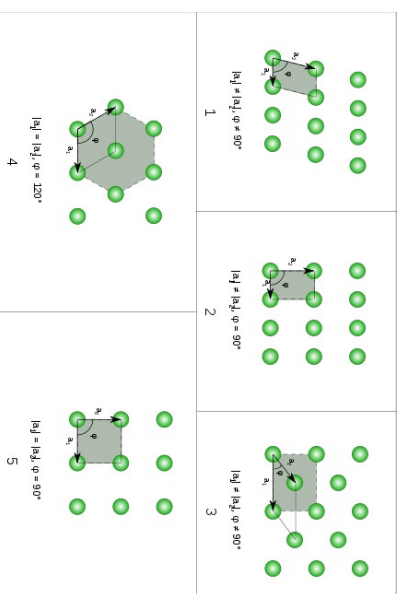


Figure 4.2
 A simple cubic three-dimensional Bravais lattice. The three primitive vectors can be taken to be mutually perpendicular, and with a common magnitude.

Kekisi Bravais 3D

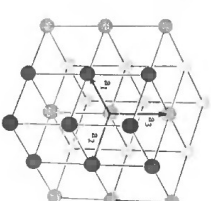
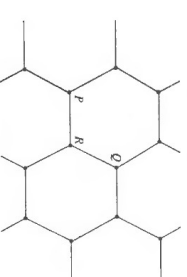


Figure 4.3
 The vertices of a two-dimensional honeycomb do not form a Bravais lattice. The array of points has the same appearance whether viewed from point P or point Q . However, the view from point R is rotated through 180° .

Gambar berikut bukan kekisi Bravais!
 Susunannya sama namun orientasinya beda!



Contoh lain kekisi Bravais 3D

Kekisi Tak Hingga

- Kekisi Bravais mengisi ruang tak hingga
- Namun kristal bahan memiliki volume berhingga
- Kekisi tak hingga merupakan idealisasi, jika kekisinya berhingga akan muncul efek permukaan
- Untuk mudahnya, kita kaji kristal berhingga yang yang terdiri atas N situs:

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$
 maka

$$0 \leq n_1 < N_1, 0 \leq n_2 < N_2, 0 \leq n_3 < N_3 \text{ dan } N = N_1 N_2 N_3$$

Jika kekisi simple cubic memiliki vektor primitif:

$$a \hat{x}, a \hat{y}, \text{ dan } a \hat{z}$$

Maka untuk bcc: $\vec{a}_1 = a \hat{x}$, $\vec{a}_2 = a \hat{y}$, $\vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

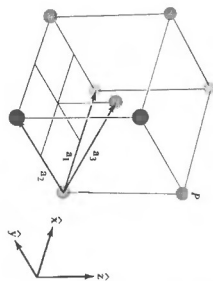


Figure 4.6
Three primitive vectors, specified in Eq. (4.3), for the body-centered cubic Bravais lattice. The lattice is formed by taking all linear combinations of the primitive vectors with integral coefficients. The point P , for example, is $P = -a_1 - a_2 + 2a_3$.

Contoh lain: kekisi fcc

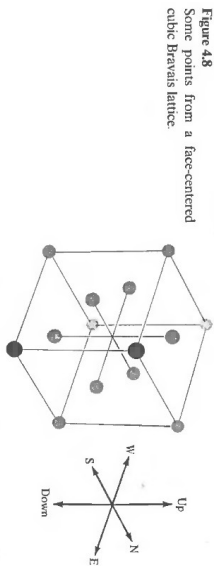


Figure 4.8
Some points from a face-centered cubic Bravais lattice.

fcc = face-centered cubic

Untuk sembarang kekisi Bravais, set vektor primitifnya tidak unique!

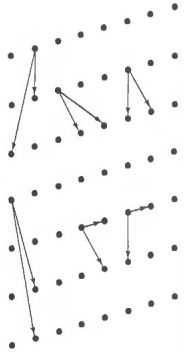


Figure 4.4
Several possible choices of pairs of primitive vectors for a two-dimensional Bravais lattice. They are drawn, for clarity, from different origins.

Atau dapat dituliskan sebagai:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z} - \hat{x}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x} - \hat{y}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$$

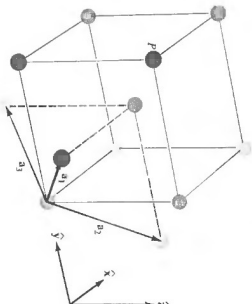


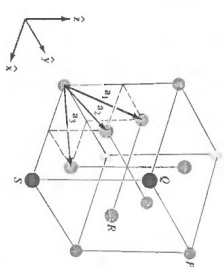
Figure 4.7
A more symmetric set of primitive vectors, specified in Eq. (4.4), for the body-centered cubic Bravais lattice. The point P , for example, has the form $P = 2a_1 + a_2 + a_3$.

Kedua set menyatakan kekisi Bravais bcc

set vektor primitif untuk kekisi fcc:

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (\hat{y} + \hat{z}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (\hat{z} + \hat{x}), \quad \vec{a}_3 = \frac{a}{2} (\hat{x} + \hat{y})$$

Figure 4.9
A set of primitive vectors, as given in Eq. (4.5), for the face-centered cubic Bravais lattice. The labeled points are $P = a_1 + a_2 + a_3$, $Q = 2a_2$, $R = a_2 + a_3$, and $S = -a_1 + a_2 + a_3$.

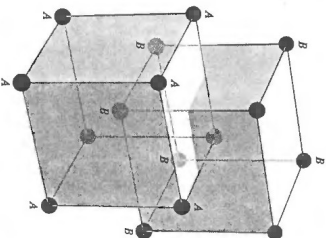


cek Kittel untuk sel fcc primitif

Contoh lain: kekisi bcc

Figure 4.5
A few sites from a body-centered cubic Bravais lattice. Note that it can be regarded either as a simple cubic lattice formed from the points A with the points B at the cube centers, or as a simple cubic lattice formed from the points B with the points A at the cube centers. This observation establishes that it is indeed a Bravais lattice.

bcc = body-centered cubic



cek Kittel untuk sel bcc primitif

Table 4.1
ELEMENTS WITH THE MONATOMIC FACE-CENTERED
CUBIC CRYSTAL STRUCTURE

ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)
Ar	5.26 (4.2 K)	Ir	3.84	Pt	3.92
Ag	4.09	Kr	5.12 (58 K)	Rh	4.64
Al	4.05	La	5.30	Ru	3.80
Au	4.08	Ne	4.43 (4.2 K)	Se	4.54
Ca	5.58	Ni	3.52	Sr	6.08
Ce	5.16	Pb	4.95	Th	5.08
β -Co	3.55	Pd	3.89	Xe (58 K)	6.20
Cu	3.61	Pr	5.16	Yb	5.49

Table 4.2
ELEMENTS WITH THE MONATOMIC BODY-CENTERED
CUBIC CRYSTAL STRUCTURE

ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)	ELEMENT	a (Å)
Ba	5.02	Li	3.49 (78 K)	Ta	3.31
Cr	2.88	Mo	3.15	Tl	3.88
Cs	6.05 (78 K)	Na	4.23 (5 K)	V	3.02
Fe	2.87	Nb	3.30	W	3.16
K	5.23 (5 K)	Rb	5.39 (5 K)		

Catatan: unsur dengan kekisi simple cubic sangat jarang ditemukan, fase alpha dari Polonium (Po) merupakan satu-satunya contoh yang ditemukan pada kondisi normal

Bilangan Koordinasi

- Titik-titik pada kekisi Bravais yang berada paling dekat dengan sebuah titik pilihan disebut *nearest neighbors (tetangga terdekat)*
- Setiap titik pada kekisi Bravais memiliki jumlah tetangga terdekat yang sama, disebut sebagai *bilangan koordinasi* dari kekisi tersebut
- Bilangan koordinasi untuk kekisi sc : 6
- Bilangan koordinasi untuk kekisi bcc : 8
- Bilangan koordinasi untuk kekisi fcc : 12

Sel Satuan Primitif

- Sel (satuan) primitif merupakan volum ruang yang, ketika ditranslasikan melalui seluruh vektor kekisi Bravais, tepat mengisi ruang tanpa overlap atau meninggalkan ruang kosong (void)
- Untuk sebarang kekisi Bravais, tidak ada cara khusus untuk memilih sel primitif
- Sel primitif harus mengandung hanya satu titik kekisi
- Volume sel primitif tidak bergantung pada pemilihan bentuk sel ($v = 1/n$, $v = \text{volume}$, $n = \text{rapat titik kekisi}$)

Sel Satuan Primitif

- Sel primitif yang berkaitan dengan set vektor primitif $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ merupakan set untuk titik r dengan bentuk
- $$\vec{r} = x_1 \vec{a}_1 + x_2 \vec{a}_2 + x_3 \vec{a}_3 \text{ dengan } 0 \leq x_i \leq 1$$
- Set ini umumnya tidak menunjukkan bentuk simetri dari kekisi Bravais. Misal:

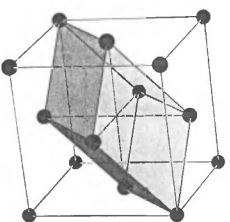


Figure 4.12
Primitive and conventional unit cells for the face-centered cubic Bravais lattice. The conventional cell is the large cube. The primitive cell is the figure with six parallelogram faces. It has one quarter the volume of the cube, and rather less symmetry.

Agar diperoleh simetri...

Sel Satuan Konvensional

- Sel satuan merupakan daerah yang mengisi ruang tanpa overlap ketika ditranslasikan melalui set vektor kekisi Bravais
- Sel satuan konvensional umumnya dipilih lebih besar daripada sel satuan primitif agar dapat memiliki simetri
- Pada sel konvensional, bcc nampak sebagai sel satuan berbentuk kubus dua kali lebih besar dari sel satuan bcc primitif
- Dan kekisi fcc nampak sebagai sel kubus 4 kali lebih besar dari sel satuan fcc primitif

Bilangan yang menyatakan ukuran dari sel satuan disebut sebagai tetapan kekisi (lattice constants)

Sel Primitif Wigner-Seitz

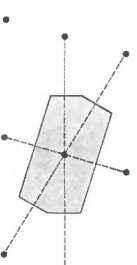
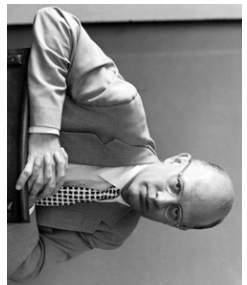


Figure 4.14
The Wigner-Seitz cell for a two-dimensional Bravais lattice. The six sides of the cell bisect the lines joining the central points to its six nearest neighboring points (shown as dashed lines). In two dimensions the Wigner-Seitz cell is always a hexagon unless the lattice is rectangular (see Problem 4a).



Eugene Wigner
(1902 - 1995)



Frederick Seitz
(1911 - 2008)

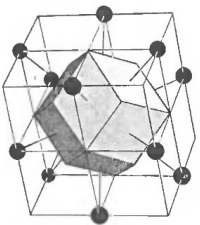


Figure 4.15
The Wigner-Seitz cell for the body-centered cubic Bravais lattice (a "truncated octahedron"). The surrounding cube is a conventional body-centered cubic cell with a lattice point at its center and on each vertex. The hexagonal faces bisect the lines joining the central point to the points on the vertices (drawn as solid lines). The square faces bisect the lines joining the central point to the central points in each of the six neighboring cubic cells (not drawn). The hexagons are regular (see Problem 4d).

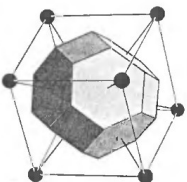


Figure 4.16
Wigner-Seitz cell for the face-centered cubic Bravais lattice (a "rhombicuboctahedron"). The surrounding cube is *not* the conventional cubic cell of Figure 4.12, but one in which lattice points are at the center of the cube and at the center of the 12 edges. Each of the 12 (congruent) faces is perpendicular to a line joining the central point to a point on the center of an edge.

Kekisi Non-Bravais

Struktur Intan

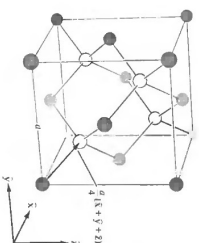


Table 4.3
ELEMENTS WITH THE DIAMOND CRYSTAL STRUCTURE

ELEMENT	CRYSTAL SIDE a (Å)
C (diamond)	3.57
Si	3.53
Ce	5.66
α -Sn (gray)	6.49

Terdiri atas dua kekisi fcc yang saling menyisip, bergeser sepanjang diagonal utama kekisi kubus sejauh $\frac{1}{4}$ panjang diagonal. Dapat juga dianggap sebagai kekisi fcc dengan basis basis titik 0 dan $(a/4)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

Struktur Hexagonal Close-Packed (hcp)

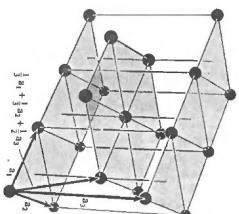


Figure 4.20
The hexagonal close-packed crystal structure. It can be viewed as two interpenetrating simple hexagonal Bravais lattices, displaced vertically by a distance $a/2$ along the common c -axis, and displaced horizontally so that the points of one lie directly above the centers of the triangles formed by the points of the other.

Untuk struktur hcp ideal: $\frac{c}{a} = \sqrt{\frac{8}{3}}$

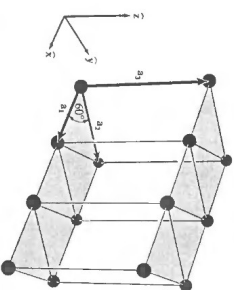


Figure 4.19
The simple hexagonal Bravais lattice. Two-dimensional triangular nets (shown in inset) are stacked directly above one another, a distance c apart.

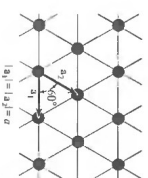


Table 4.4
ELEMENTS WITH THE HEXAGONAL CLOSE-PACKED CRYSTAL STRUCTURE

ELEMENT	a (Å)	c	c/a	ELEMENT	a (Å)	c	c/a
Be	2.29	3.58	1.56	Os	2.74	4.32	1.58
Cd	2.98	5.62	1.89	Pr	3.67	5.92	1.61
Ce	3.65	5.96	1.63	Re	2.76	4.46	1.62
α -Co	2.51	4.07	1.62	Ru	2.70	4.28	1.59
Dy	3.59	5.65	1.57	Sc	3.31	5.27	1.59
Er	3.56	5.59	1.57	Tb	3.60	5.69	1.58
Gd	3.64	5.78	1.59	Tl	2.95	4.69	1.59
He(2 K)	3.57	5.83	1.63	Ti	3.46	5.53	1.60
Hf	3.20	5.06	1.58	Tm	3.54	5.55	1.57
Ho	3.58	5.62	1.57	Y	3.65	5.73	1.57
La	3.75	6.07	1.62	Zn	2.66	4.95	1.86
Lu	3.50	5.55	1.59	Zr	3.23	5.15	1.59
Mg	3.21	5.21	1.62	"Ideal"	—	—	1.63
Nd	3.66	5.90	1.61				

Struktur NaCl

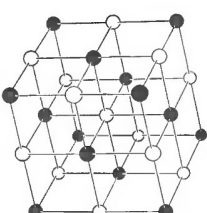


Figure 4.24
The sodium chloride structure. One type of ion is represented by black balls, the other type by white. The black and white balls form interpenetrating fcc lattices.

Terdiri atas ion Na and Cl yang berjumlah sama dan terletak pada titik-titik yang berselang-seling pada kekisi sc. Dapat juga digambarkan sebagai kekisi fcc dengan basis terdiri atas ion Na 0 dan ion Cl di $(a/2)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$

Table 4.5
SOME COMPOUNDS WITH THE SODIUM CHLORIDE STRUCTURE

CRYSTAL	a (Å)	CRYSTAL	a (Å)	CRYSTAL	a (Å)
LiF	4.02	RbF	5.64	CaS	5.69
LiCl	5.13	RbCl	6.38	CaSe	5.91
LiBr	5.50	RbBr	6.85	CaTe	6.34
LiI	6.00	RbI	7.34	SiO	5.16
NaF	4.62	CaF	6.01	SrS	6.02
NaCl	5.64	AgF	4.92	SrSe	6.23
NaBr	5.97	AgCl	5.55	SrTe	6.47
NaI	6.47	AgBr	5.77	BaO	5.52
KF	5.35	MgO	4.21	BaS	6.39
KCl	6.29	MgS	5.20	BaSe	6.60
KBr	6.60	MgSe	5.45	BaTe	6.99
KI	7.07	CaO	4.81		

Fisika Zat Padat

Kekisi Baik

Definisi

- Ditinjau sekumpulan titik \mathbf{R} yang membentuk kekisi Bravais, dan gelombang bidang datar $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$
- Untuk \mathbf{k} secara umum, gelombang bidang tersebut tidak memiliki sifat periodik kekisi Bravais, namun dapat dimiliki oleh vektor gelombang tertentu yang dipilih secara khusus
- Kekisi baik didefinisikan sebagai *kumpulan semua vektor gelombang \mathbf{K} yang menghasilkan gelombang bidang yang memiliki sifat periodik dari suatu kekisi Bravais*

- \mathbf{K} merupakan kekisi baik dari kekisi Bravais dengan titik-titik dinyatakan \mathbf{R} , selama relasi

$$e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}+\vec{R})} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

dipenuhi oleh sembarang \vec{r} dan semua \mathbf{R} pada kekisi Bravais

- Maka kekisi baik adalah *kumpulan vektor gelombang \mathbf{K} yang memenuhi*

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$$

- Kekisi Bravais yang menentukan kekisi baik sering disebut sebagai *kekisi langsung (direct lattice)*
- \mathbf{K} disebut kekisi baik hanya jika kumpulan vektor \mathbf{R} merupakan kekisi Bravais

- Misal $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ merupakan vektor-vektor primitif untuk kekisi langsung, maka kekisi baik dapat ditentukan oleh vektor-vektor primitif berikut:

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} \\ \vec{b}_2 &= 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} \\ \vec{b}_3 &= 2\pi \frac{\vec{a}_1 \times \vec{a}_2}{\vec{a}_3 \cdot (\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)} \end{aligned}$$

- \vec{b}_i akan memenuhi $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$ dengan $\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$

- Sembarang vektor \mathbf{k} dapat dinyatakan sebagai kombinasi linear dari \vec{b}_i

$$\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$$

- Jika \mathbf{R} merupakan vektor kekisi langsung (n_i bilangan bulat) :

$$\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

- Maka $\vec{k} \cdot \vec{R} = 2\pi (k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)$

- Koefisien k_i harus berupa bilangan bulat agar $e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} = 1$ dipenuhi untuk semua \mathbf{R}

- Jadi, kekisi baik merupakan kekisi Bravais dan \vec{b}_i merupakan vektor-vektor primitif

Contoh

- Kekisi Bravais *simple cubic* (sc), dengan sel primitif bersisi a , memiliki kekisi baik berbentuk *simple cubic* dengan sel primitif bersisi $2\pi/a$
- Kekisi Bravais fcc dengan sel kubus konvensional bersisi a memiliki kekisi baik berbentuk bcc dengan sel kubus konvensional bersisi $4\pi/a$
- Kekisi Bravais bcc dengan sel kubus konvensional bersisi a memiliki kekisi baik berbentuk fcc dengan sel kubus konvensional bersisi $4\pi/a$

- Jika v adalah volume sel primitive pada kekisi langsung, maka sel primitive dari kekisi baik memiliki volume $(2\pi)^3/v$

Zona Brillouin Pertama

- **Zona Brillouin pertama** merupakan sel primitif Wigner-Seitz dari kekisi baik
- Umumnya, istilah *zona Brillouin pertama* hanya diterapkan pada sel ruang- k
- Karena kekisi baik dari kekisi bcc adalah kekisi fcc, zona Brillouin pertama dari kekisi bcc adalah sel Wigner-Seitz fcc, dan begitu juga sebaliknya.

- Karena kekisi baik merupakan kekisi Bravais, kita dapat membentuk kekisi baik dari kekisi lain, yang tidak lain adalah kekisi langsung semula

Figure 5.2
 (a) The first Brillouin zone for the body-centered cubic lattice.
 (b) The first Brillouin zone for the face-centered cubic lattice.

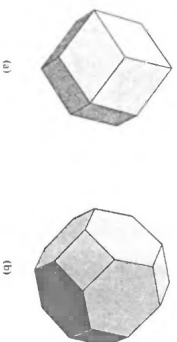
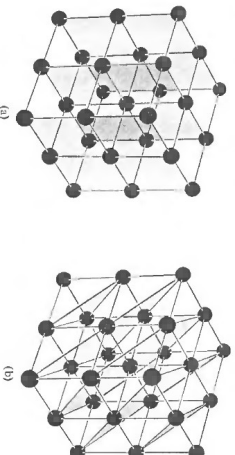


Figure 5.3
 Some lattice planes (shaded) in a simple cubic Bravais lattice: (a) and (b) show two different ways of representing the lattice as a family of lattice planes.



- *Keluarga bidang kekisi* didefinisikan sebagai kumpulan bidang-bidang kekisi yang sejajar dan terpisah pada jarak yang sama, yang mengandung seluruh titik kekisi Bravais 3-D
- Untuk sembarang keluarga bidang kekisi yang jarak pisahnya adalah d , terdapat vektor kekisi \mathbf{K} yang tegak lurus terhadap bidang, paling pendek memiliki panjang $2\pi/d$
- Sebaliknya, untuk sembarang vektor kekisi \mathbf{K} , terdapat keluarga bidang kekisi yang tegak lurus \mathbf{K} dan memiliki jarak pisah d , dimana $2\pi/d$ merupakan panjang dari vektor kekisi \mathbf{K} terpendek yang sejajar \mathbf{K}

Indeks Miller Bidang Kekisi

- Indeks Miller dari suatu bidang kekisi merupakan koordinat vektor kekisi \mathbf{a} terpendek yang tegak lurus terhadap bidang tersebut, yang terkait dengan kumpulan vektor kekisi \mathbf{a} primitif tertentu
- Jadi, bidang dengan indeks Miller h, k, l , berada tegak lurus terhadap vektor \mathbf{K}

$$h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$$



William Hallows Miller
 (1801 – 1880)

- Indeks Miller berupa bilangan bulat, karena sembarang vektor kekisi \mathbf{a} baik merupakan kombinasi linear dari tiga vektor primitif dengan koefisien bilangan bulat
- Indeks Miller bergantung pada pemilihan vektor primitif
- Indeks Miller dari suatu bidang memiliki interpretasi geometris pada kekisi langsung, yang terkadang ditawarkan sebagai cara alternatif pendefinisian indeks

- Karena bidang kekisi dengan indeks Miller h, k, l , tegak lurus terhadap vektor \mathbf{K}
 $\vec{K} = h\vec{a}_1 + k\vec{a}_2 + l\vec{a}_3$, indeks ini akan terkandung pada bidang kontinyu $\vec{K} \cdot \vec{r} = A$ untuk nilai tetapan A yang sesuai

- Bidang ini akan memotong sumbu yang ditentukan oleh vektor primitif kekisi langsung \mathbf{a}_i pada titik:
 $x_1\vec{a}_1, x_2\vec{a}_2$, dan $x_3\vec{a}_3$ dengan $\vec{K} \cdot (x_i\vec{a}_i) = A$

Léon Brillouin (1889 – 1969)



Bidang Kekisi

- *Bidang kekisi (lattice plane)* didefinisikan sebagai sembarang bidang yang mengandung setidaknya tiga titik kekisi Bravais non-kolinear (tidak segaris)
- Karena simetri translasi dari kekisi Bravais, bidang tersebut akan mengandung banyak titik kekisi, yang membentuk kekisi Bravais 2-D pada bidang tersebut

- Karena $\vec{K} \cdot \vec{a}_1 = 2\pi h$, $\vec{K} \cdot \vec{a}_2 = 2\pi k$, dan $\vec{K} \cdot \vec{a}_3 = 2\pi l$ maka $x_1 = \frac{A}{2\pi h}$, $x_2 = \frac{A}{2\pi k}$, $x_3 = \frac{A}{2\pi l}$
- Maka titik potong bidang keksi dengan sumbu kristal berbanding terbalik dengan indeks Miller dari bidang tersebut

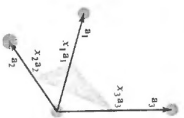


Figure 5.4
An illustration of the crystallographic definition of the Miller indices of a lattice plane. The shaded plane can be a portion of the continuous plane in which the points of the lattice plane lie, or any plane parallel to the lattice plane. The Miller indices are inversely proportional to the x_i .

- Kristalografer mendefinisikan Indeks Miller sebagai kumpulan bilangan bulat tanpa faktor persekutuan, berbanding terbalik dengan titik potong bidang kristal pada sumbu kristal

$$h : k : l = \frac{1}{x_1} : \frac{1}{x_2} : \frac{1}{x_3}$$

Konvensi

- Bidang keksi umumnya ditunjukkan dengan menyatakan Indeks Miller dalam tanda kurung (h,k,l)
- Koma dihilangkan dengan \bar{n} menggantikan $-n$
- Untuk menunjukkan arah, kurung persegi digunakan untuk menghindari kerancuan dengan indeks Miller $\rightarrow [hkl]$
- Untuk menunjukkan keluarga lain yang ekuivalen dengan keluarga bidang keksi tertentu, digunakan $\{hkl\}$
- misal: bidang (100) , (010) dan (001) ekuivalen pada kristal kubus, sehingga dapat dinyatakan sebagai bidang $\{100\}$

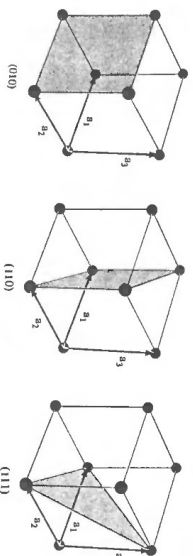


Figure 5.5
Three lattice planes and their Miller indices in a simple cubic Bravais lattice.

Fisika Zat Padat

Difraksi Sinar X oleh Kekisi Kristal

Formulasi Bragg

- Pada bahan kristal, untuk panjang gelombang dan arah sinar datang yang ditentukan secara tepat, terdapat puncak-puncak intensitas hamburan radiasi sinar-X yang disebut **puncak Bragg**
- Ditinjau kristal yang tersusun atas bidang-bidang sejajar terisi ion, terpisah pada jarak $d \rightarrow$ **bidang kekisi**
- Syarat diperoleh puncak intensitas pada radiasi hamburan:
- Sinar-X harus dipantulkan oleh ion pada satu bidang dengan sudut pantul sama dengan sudut datang
- Sinar pantulan dari bidang berturutan harus berinterferensi secara konstruktif



William L. Bragg
(1890 – 1971)
Fisikawan Inggris



Max von Laue
(1879 – 1960)
Fisikawan Jerman

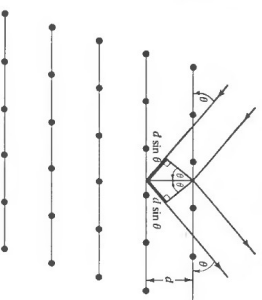
Mengapa Harus Sinar-X?

- Jarak antar atom pada bahan padat umumnya berada pada orde angstrom (10^{-10} m)
- Maka, probe elektromagnetik untuk struktur mikroskopis bahan padat harus memiliki energi:

$$E = h\omega = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1,24 \times 10^{-6} \text{ eV} \cdot \text{m}}{10^{-10} \text{ m}} = 12,4 \text{ keV}$$

yang berada pada orde energi sinar-X

Figure 6.1
A Bragg reflection from a particular family of lattice planes, separated by a distance d . Incident and reflected rays are shown for the two neighboring planes. The path difference is $2d \sin \theta$.



- Jika θ merupakan sudut datang, agar sinar hamburan berinterferensi secara konstruktif, beda lintasan harus berupa kelipatan bulat panjang gelombang:

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

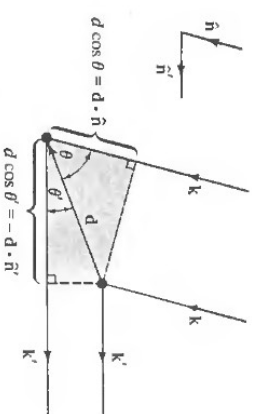
yang merupakan hukum Bragg

- Bilangan bulat n dikenal sebagai orde pantulan
- Untuk berkas sinar-X yang nilai panjang gelombangnya banyak ('radiasi putih'), akan teramati banyak pantulan

Formulasi von Laue

- Ditinjau kristal yang tersusun atas objek mikroskopis identik (kumpulan ion atau atom) yang berada di titik \mathbf{R} pada kekisi Bravais
- Tiap objek dapat meradiasikan ulang radiasi yang datang ke segala arah
- Puncak radiasi hamburan hanya akan teramati pada arah dan panjang gelombang dimana sinar hamburan dari seluruh titik kekisi berinterferensi secara konstruktif

- Ditinjau dua penghambur, terpisah oleh vektor perpindahan \mathbf{d}
- Misal sinar-X datang dari kejauhan, sepanjang arah \mathbf{n} , dengan panjang gelombang λ dan vektor gelombang $\mathbf{x} = 2\pi\mathbf{n}/\lambda$
- Sinar hamburan akan teramati pada arah \mathbf{n}' dengan panjang gelombang λ dan vektor gelombang $\mathbf{k}' = 2\pi\mathbf{n}'/\lambda$. selama beda lintasan dari kedua sinar yang terhambur oleh kedua ion berupa kelipatan bulat dari panjang gelombang, misal m



- Beda lintasnya adalah:

$$d \cos \theta + d \cos \theta' = \vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}')$$

- Syarat agar terjadi interferensi konstruktif:

$$\vec{d} \cdot (\hat{n} - \hat{n}') = m \lambda$$

- Kalikan kedua sisi persamaan di atas dengan $2\pi/\lambda$, maka dihasilkan syarat untuk nilai vektor gelombang sinar datang dan sinar hamburan:

$$\vec{d} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m$$

- Selanjutnya, ditinjau rangkaian penghambur yang berada pada kekisi Bravais

- Karena titik-titik kekisi saling terpisah oleh vektor kekisi Bravais \mathbf{R} , syarat agar seluruh sinar terhambur berinterferensi konstruktif adalah bahwa syarat untuk dua penghambur juga berlaku untuk seluruh nilai d yang merupakan kekisi Bravais:

$$\vec{R} \cdot (\vec{k} - \vec{k}') = 2\pi m$$

- Untuk bilangan bulat m dan vektor Bravais \mathbf{R}

- Dapat dituliskan pula dalam bentuk ekuivalen:

$$e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}} = 1$$

- Dibandingkan dengan definisi kekisi baik, diperoleh syarat Laue:

interferensi konstruktif akan terjadi selama perubahan vektor gelombang, $\mathbf{K} = \mathbf{K}' - \mathbf{K}$ merupakan vektor kekisi baik

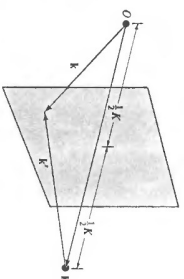
- Karena kekisi baik juga kekisi Bravais, jika $\mathbf{K}' - \mathbf{K}$ merupakan vektor kekisi baik, begitu juga $\mathbf{K} - \mathbf{K}'$
- Jika $\mathbf{K} - \mathbf{K}' = \mathbf{K}$, maka syarat bahwa \mathbf{K} dan \mathbf{K}' memiliki besar (*magnitude*) yang sama adalah $k = |\mathbf{K} - \mathbf{K}'|$
- Kuadratkan kedua sisi diperoleh syarat:

$$\vec{k} \cdot \vec{k}' = 1/2 k$$

→ komponen vektor gelombang datang \mathbf{K} sepanjang vektor kekisi baik \mathbf{K} harus bernilai separo panjang \mathbf{K}

- Maka vektor gelombang datang \mathbf{k} akan memenuhi syarat Laue jika dan hanya jika ujung vektor terletak pada bidang yang tegak lurus dan membagi dua garis penghubung titik asal ruang- \mathbf{k} ke sebuah titik kekisi baik \mathbf{K}
- Bidang ruang- \mathbf{k} ini disebut *bidang Bragg*

Figure 6.5
The Laue condition. If the sum of \mathbf{k} and $-\mathbf{k}'$ is a vector \mathbf{K} , and if \mathbf{K} and \mathbf{k} have the same length, then the tip of the vector \mathbf{K} is equidistant from the origin O and the tip of the vector \mathbf{k} , and therefore it lies in the plane bisecting the line joining the origin to the tip of \mathbf{K} .



Ekuivalensi Formulasi Bragg & Laue

- Misal vektor gelombang datang dan terhambur, \mathbf{k} dan \mathbf{k}' , memenuhi syarat Laue yaitu bahwa $\mathbf{K} = \mathbf{K}' - \mathbf{K}$ adalah vektor kekisi baik
- Karena gelombang datang dan terhambur memiliki panjang gelombang yang sama (*hamburan elastik*), \mathbf{k}' dan \mathbf{k} memiliki besar (*magnitude*) yang sama
- Sehingga, \mathbf{k}' dan \mathbf{k} membentuk sudut yang sama yaitu θ dengan bidang tegak lurus \mathbf{K}
- Maka hamburan dapat dilihat sebagai pantulan Bragg dengan sudut Bragg θ , dari keluaran bidang kekisi langsung yang tegak lurus vektor kekisi baik \mathbf{K}

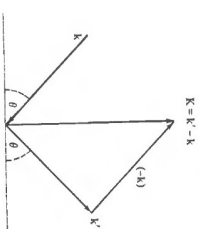


Figure 6.6
The plane of the paper contains the incident wave vector \mathbf{k} , the reflected wave vector \mathbf{k}' , and their difference \mathbf{K} satisfying the Laue condition. Since the scattering is elastic ($k' = k$), the direction of \mathbf{K} bisects the angle between \mathbf{k} and \mathbf{k}' . The dashed line is the intersection of the plane perpendicular to \mathbf{K} with the plane of the paper.

- Vektor \mathbf{K} merupakan kelipatan bulat dari vektor kekisi baik terpendek \mathbf{K}_0 yang sejajar \mathbf{K}
- Menurut teori keluarga bidang kekisi (lihat bab 5), besarnya \mathbf{K}_0 adalah $2\pi/d$, dimana d adalah jarak antar bidang yang berdekatan dalam keluarga tersebut yang tegak lurus \mathbf{K}_0 atau \mathbf{K}
- Maka $K = 2\pi n/d$ dimana n adalah bilangan bulat
- Dari gambar: $K = 2k \sin \theta$, maka $k \sin \theta = \pi n/d$
- Karena $k = 2\pi/\lambda$, diperoleh $2d \sin \theta = n\lambda$ sehingga panjang gelombang memenuhi syarat Bragg

- Jadi puncak difraksi Laue yang merupakan perubahan vektor gelombang sebesar vektor kekisi baik \mathbf{K} , bersesuaian dengan pantulan Bragg dari bidang kekisi langsung yang tegak lurus \mathbf{K}
- Orde n pada pantulan Bragg merupakan panjangnya \mathbf{K} dibagi dengan panjangnya vektor kekisi baik terpendek yang sejajar \mathbf{K}

Konstruksi Ewald

- Vektor gelombang datang k akan memunculkan puncak difraksi jika dan hanya jika ujung vektor gelombang berada pada ruang- k bidang Bragg
- Untuk mencari puncak Bragg secara eksperimen besama k harus divariasikan (\rightarrow divariasikan panjang gelombang sinar datangnya) atau divariasikan arahnya (pada prakteknya yang divariasikan orientasi kristalnya)

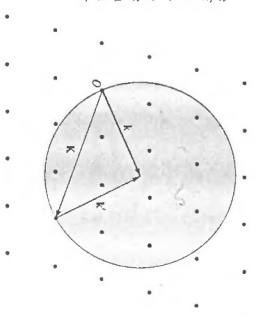


Paul Peter Ewald
(1888 – 1985)
German Physicist

Konstruksi Ewald

- Gambarkan pada ruang- k sebuah bola yang berpusat pada ujung vektor gelombang datang k dengan jejari k (sehingga bola tersebut menyentuh titik asal)
- Akan terdapat beberapa vektor gelombang k' yang memenuhi syarat Laue jika dan hanya jika beberapa titik kekisi balok (termasuk titik asal) terletak pada permukaan bola
- Akan terdapat pantulan Bragg dari keluarga bidang kekisi langsung yang tegak lurus vektor kekisi balok

Figure 6.7
The Ewald construction. Given the incident wave vector K , a sphere of radius k is drawn about the point K . Diffraction peaks corresponding to reciprocal lattice vectors K' will be observed only if K gives a reciprocal lattice point on the surface of the sphere. Such a reciprocal lattice vector is indicated in the figure, together with the wave vector K' of the Bragg reflected ray.



Umumnya, bola pada ruang- k dengan titik asal berada di permukaan tidak akan memiliki titik kekisi balok di permukaannya. Maka, untuk sembarang vektor gelombang datang, tidak akan muncul puncak Bragg

Agar dapat dihasilkan puncak Bragg:

- Metode Laue: tidak menggunakan sinar-X monokromatik, namun sinar-X yang memiliki panjang gelombang dari λ_1 hingga λ_0
- Metode *Rotating-Crystal*: menggunakan sinar-X monokromatik namun dapat divariasikan (pada prakteknya, yang divariasikan justsu arah kristalnya)
- Metode bubuk atau Debye-Scherrer: sama dengan eksperimen kristal berputar dimana sumbu rotasi divariasikan pada seluruh arah yang mungkin

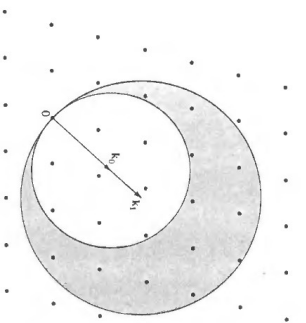
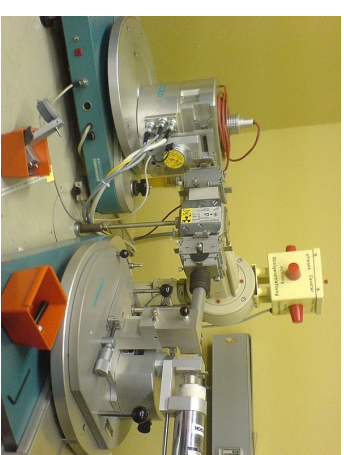
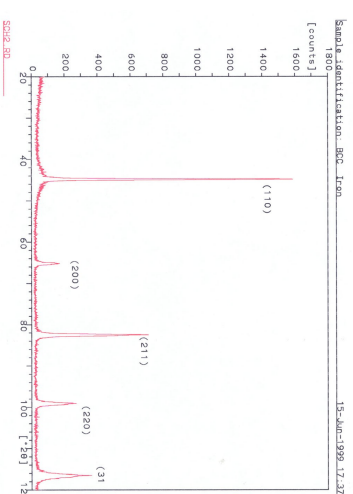


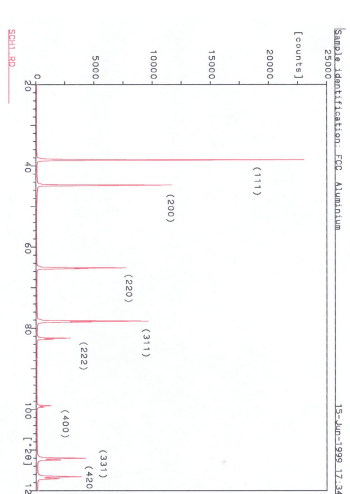
Figure 6.8
The Ewald construction for the Laue method. The crystal and incident X-ray direction are fixed, and a continuous range of wavelengths, corresponding to wave vectors between k_0 and k_1 , in magnitude, is present. The Ewald spheres for all incident wave vectors fill the shaded region between the sphere centered on the tip of the vector k_0 and that centered on the tip of k_1 . Bragg peaks will be observed corresponding to all reciprocal lattice points lying within the shaded region. (For simplicity in illustration, the incident direction has been taken to lie in a lattice plane, and only reciprocal lattice points lying in that plane are shown.)



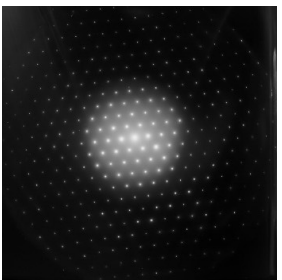
X-Ray Diffractometer (XRD)



Pola Difraksi untuk BCC



Pola Difraksi untuk FCC



Pola Difraksi Sinar-X

Fisika Zat Padat

Teori Logam : Model Drude

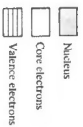
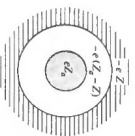


Paul Karl Ludwig Drude
(1863 – 1906, Fisikawan Jerman)

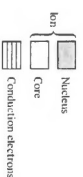
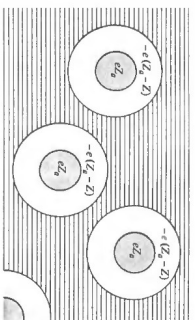
- Logam merupakan penghantar listrik dan panas yang sempurna, mudah dibentuk dan dilempa
- Lebih dari dua pertiga unsur di alam berupa logam
- Pada tahun 1900, 3 tahun setelah penemuan elektron oleh J.J. Thomson, Drude membangun teori konduksi listrik dan panas untuk logam
- Beliau menerapkan teori kinetik gas pada logam yang dikenal sebagai **gas elektron**
- Teori kinetik memperlakukan molekul gas sebagai bola pejal identik yang bergerak pada lintasan lurus hingga saling bertumbukan

- Diasumsikan antar partikel tidak ada gaya yang bekerja, kecuali untuk gaya yang muncul sesaat ketika terjadi tumbukan
- Muatan positif disematkan pada partikel yang lebih berat, dan dianggap tidak bergerak
- Maka, ketika atom-atom unsur logam membentuk bahan logam, elektron valensi lepas dan mengembara bebas di dalam logam membentuk gas elektron
- Ion logam tetap berada ditempatnya dan menjadi partikel positif yang tidak bergerak

- Atom dengan bilangan atomik Z_a memiliki inti bermuatan eZ_a ($e = 1,6 \times 10^{-19} \text{ C}$)
- Z_a elektron mengelilingi inti dengan muatan total $-eZ_a$
- Z elektron merupakan elektron valensi yang terikat lemah ke inti
- $Z_a - Z$ merupakan elektron inti yang terikat kuat ke inti
- Elektron inti tetap terikat kuat ke inti membentuk ion logam, sedangkan elektron valensi diperbolehkan mengembara menajauhi atom induknya → **elektron konduksi**



(a)



(b)

Figure 11
(a) Schematic picture of an isolated atom (not to scale). (b) In a metal, the nucleus and ion core retain their configuration in the free atom, but the valence electrons leave the atom to form the electron gas.

- Misal rapat massa unsur logam adalah ρ_m
- Jumlah atom per sentimeter kubik adalah 6.022×10^{23} (bilangan Avogadro) $\times \rho_m / A$ dengan A adalah massa atom dari unsur tersebut
- Karena tiap atom menyumbang Z elektron konduksi, banyaknya elektron per sentimeter kubik adalah:

$$n = \frac{N}{V} = 6.022 \times 10^{23} \times \frac{Z \rho_m}{A}$$

- {lihat Tabel}

Table 1.1
FREE ELECTRON DENSITIES OF SELECTED METALLIC ELEMENTS

ELEMENT	Z	n ($10^{23}/\text{cm}^3$)	r_s (Å)	r_s / a_0
Li (78 K)	1	4.70	1.72	3.25
Nb (5 K)	1	2.65	2.08	3.93
K (5 K)	1	1.40	2.57	4.86
Rb (5 K)	1	1.15	2.75	5.20
Cs (5 K)	1	0.91	2.98	5.62
Cu	1	8.47	1.41	2.67
Ag	1	5.86	1.60	3.02
Au	1	5.90	1.59	3.01
Be	2	2.47	1.99	1.87
Mg	2	8.61	1.41	2.66
Ca	2	4.61	1.73	3.27
Sr	2	3.55	1.89	3.57
Ba	2	3.15	1.96	3.71
Nb	1	5.56	1.63	3.07
Fe	2	17.0	1.12	2.12
Mn (9)	2	16.5	1.13	2.14
Zn	2	13.2	1.22	2.30
Cd	2	9.27	1.37	2.59
Hg (78 K)	2	8.65	1.40	2.65
Al	3	18.1	1.10	2.07
Ga	3	15.4	1.16	2.19

- r_s didefinisikan sebagai jejari suatu bola yang volumenya sama dengan volume tiap elektron konduksi:

$$\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4}{3} \pi r_s^3 \quad ; \quad r_s = \left(\frac{3}{4 \pi n} \right)^{1/3}$$

- Kerapatan gas elektron umumnya seribu kali lebih besar dibanding gas klasik pada suhu dan tekanan normal

Asumsi Dasar Model Drude

- (1) Pada proses tumbukan, interaksi dari suatu elektron dengan elektron yang lain maupun dengan ion cenderung diabaikan
- Pengabaian interaksi elektron-elektron pada proses tumbukan dikenal sebagai **independent electron approximation**
- Pengabaian interaksi elektron-ion pada proses tumbukan dikenal sebagai **free electron approximation**

Asumsi Dasar Model Drude

- (2) Proses tumbukan bersifat **sesaat yang secara langsung mengubah kecepatan elektron**
- Proses tumbukan berupa elektron yang memantuli dari inti ion yang tak ditembus (bukan tumbukan antar elektron)

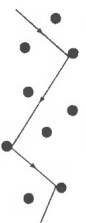


Figure 1.2
Trajectory of a conduction electron scattering off the ions, according to the naive picture of Drude.

Asumsi Dasar Model Drude

- (3) Sebuah elektron mengalami tumbukan dengan **peluang per satuan waktu sebesar $1/\tau$**
- Maka, peluang sebuah elektron mengalami tumbukan pada selang waktu dt adalah dt/τ
- Besarnya τ dikenal sebagai **waktu relaksasi**, atau **waktu tumbukan**, atau **waktu bebas terata**
- Sebuah elektron akan berjalan selama τ sebelum mengalami tumbukan berikutnya, atau telah berjalan selama τ sejak tumbukan sebelumnya
- Waktu tumbukan tidak bergantung pada posisi dan kecepatan elektron

Asumsi Dasar Model Drude

- (4) Elektron dianggap **mencapai kesetimbangan termal dengan sekitarnya hanya melalui proses tumbukan**
- Semakin panas daerah di mana tumbukan terjadi, elektron akan keluar dari tumbukan dengan kecepatan yang semakin besar

Konduktivitas Listrik DC pada Logam

- Besarnya arus I yang mengalir pada kawat yang terbuat dari logam akan sebanding dengan beda potensial V sepanjang kawat: $V = IR$ (*Hukum Ohm*) dengan R (hambatan kawat) bergantung pada ukuran kawat, namun tidak bergantung pada besarnya I atau V
- Resistivitas ρ didefinisikan sebagai tetapan perbandingan antara medan listrik \mathbf{E} di sebuah titik pada logam dan rapat arus \mathbf{j} yang diinduksikan

$$\mathbf{E} = \rho \mathbf{j}$$

- Ketergantungan R pada bentuk atau ukuran kawat diganti dengan besaran yang mencirikan logam yang membentuk kawat
- Rapat arus \mathbf{j} merupakan vektor, sejajar aliran muatan, yang besarnya adalah banyaknya muatan per satuan waktu yang melewati satuan luasan yang tegak lurus aliran
- Untuk arus seragam I yang mengalir melalui kawat dengan panjang L dan luas tampang-lintang A , rapat arusnya adalah $\mathbf{j} = I/A$
- Karena $V = EL$, maka $V = \rho L/A$ dan $R = \rho L/A$

- Jika n elektron per satuan volume bergerak dengan kecepatan v , maka rapat arus yang muncul akan sejajar dengan v
- Dalam waktu dt elektron akan berpindah sejauh $v dt$ pada arah v , sehingga elektron sebanyak $n (v dt) A$ akan melintasi luasan A yang tegak lurus v
- Karena setiap elektron membawa muatan $-e$, maka besarnya rapat arus adalah

$$j = \frac{I}{A} = \frac{dq}{A dt} = \frac{-n e v A dt}{A dt} = -n e v$$

- Ketika tidak ada medan listrik, elektron akan bergerak pada arah sembarang sehingga rerata v adalah nol, dan tidak ada rapat arus listrik
- Ketika muncul medan listrik \mathbf{E} , akan terdapat kecepatan elektron rerata yang berlawanan arah dengan arah medan:
- Misal t adalah waktu yang dicapai setelah terjadi tumbukan, kecepatan elektron rerata adalah $-\mathbf{eE}t/m$

Rerata dari t adalah waktu relaksasi τ , sehingga

$$\mathbf{v}_{avg} = -\frac{e\mathbf{E}\tau}{m} ; \mathbf{j} = \left(\frac{n e^2 \tau}{m} \right) \mathbf{E}$$

- Hasilnya biasa dinyatakan dalam **konduktivitas**:
 $\sigma = 1/\rho$

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E} ; \sigma = \frac{n e^2 \tau}{m}$$

- Untuk memperoleh waktu relaksasi, dapat digunakan nilai resistivitas dari eksperimen untuk memperkirakan besarnya:

$$\tau = \frac{m}{\rho n e^2}$$

- Pada suhu kamar, τ biasanya bernilai 10^{-14} hingga 10^{-15} detik

ELECTRICAL RESISTIVITIES OF SELECTED ELEMENTS*

ELEMENT	77 K	273 K	373 K	$(\rho/T)_{373 K}$	
				$(\rho/T)_{273 K}$	$(\rho/T)_{77 K}$
Li	1.04	8.55	12.4		
Na	0.8	4.2	Mixed		1.06
K	1.38	6.1	Mixed		
Rb	2.2	11.0	Mixed		
Cs	4.5	18.8	Mixed		
Cu	0.2	1.56	2.24		1.05
Ag	0.3	1.51	2.13		1.03
Au	0.5	2.04	2.84		1.02
Be		2.8	5.3		1.39
Mg	0.62	3.9	5.6		1.05
Ca		3.43	5.0		1.07
Sr	7	23			
Ba	17	60			
Nb	3.0	15.2	19.2		0.92
Fe	0.66	8.9	14.7		1.21
Zn	1.1	5.5	7.8		1.04
Cd	1.6	6.8			
Hg	5.8	6.8			
Method	0.3	2.45	3.55		1.06

Konduktivitas Listrik dalam Medan

- Saat t kecepatan elektron rerata v adalah $\mathbf{p}(t)/m$ dengan \mathbf{p} merupakan momentum total per elektron
- Maka rapat arusnya adalah

$$\vec{j} = -\frac{n e \vec{p}(t)}{m}$$

- Sebuah elektron yang dipilih saat t akan mengalami tumbukan sebelum $t + dt$ dengan peluang dt/τ , dan bertahan hingga $t + dt$ tanpa tumbukan dengan peluang $(1 - dt/\tau)$

Efek Hall

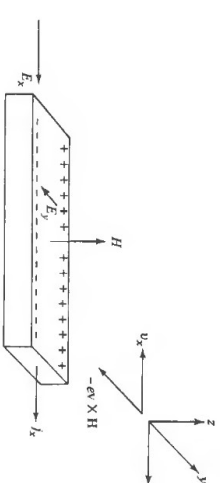


Figure 1.3
Schematic view of Hall's experiment.

- **Lintasan bebas rerata** l didefinisikan sebagai jarak rerata yang ditempuh elektron antar 2 tumbukan
- $l = v_0 t$, dengan v_0 adalah kelajuan elektron rerata
- Dalam model Drude, v_0 diperkirakan dari energi ekuipartisi Klasik: $\frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{3}{2} k_B T$
- Dari massa elektron, diperoleh nilai v_0 pada orde 10^7 cm/detik pada suhu kamar, sehingga nilai lintasan bebas rerata berada pada orde 1 hingga 10 \AA
 → jarak ini sebanding dengan jarak pisah antar atom, sehingga proses tumbukan merupakan proses tumbukan elektron dengan ion

Table 1.3
DRUDE RELAXATION TIMES IN UNITS OF 10^{-14} SECOND*

ELEMENT	77 K	273 K	373 K
Nb	17	3.2	
K	18	4.1	
Rb	14	2.8	
Cs	8.6	2.1	
Cu	21	2.7	1.9
Ag	20	4.0	2.8
Au	12	3.0	2.1
Be		0.51	0.27
Mg	1.1	1.1	0.74
Ca	6.7	2.2	1.5
Sr	1.4	0.44	
Ba	0.66	0.19	
Nb	2.1	0.42	0.33
Fe	3.2	0.24	0.14
Zn	2.4	0.49	0.14
Cd	2.4	0.56	0.14
Hg	0.71		
Al	6.5	0.80	0.55
Ga	0.84	0.17	
In	1.7	0.38	0.25

→ nilai τ dihitung dengan model Drude

- Jika tidak mengalami tumbukan, elektron akan dipengaruhi gaya $\mathbf{f}(t)$ yang muncul akibat medan listrik atau magnet dan memperoleh momentum tambahan $\mathbf{f}(t)dt = O(dt)^2$
 → $O(dt)^2$ bermakna suku dengan orde $(dt)^2$
- Maka, kontribusi dari seluruh elektron yang tidak bertumbukan antara t dan $t + dt$ terhadap momentum, dan mengakibatkan kontribusi dari elektron yang mengalami tumbukan, adalah:

$$\begin{aligned} \vec{p}(t+dt) &= (1 - \frac{dt}{\tau})[\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt + O(dt)^2] \\ &= \vec{p}(t) - (\frac{dt}{\tau})\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt + O(dt)^2 \end{aligned}$$

- Maka

$$\vec{p}(t+dt) - \vec{p}(t) = -(\frac{dt}{\tau})\vec{p}(t) + \vec{f}(t)dt + O(dt)^2$$

dibagi dt dan diambil limit pada $dt \rightarrow 0$, diperoleh

$$\frac{d}{dt} \vec{p}(t) = -\frac{\vec{p}(t)}{\tau} + \vec{f}(t)$$

yang menyatakan bahwa efek tumbukan sebuah elektron adalah menambahkan suku redaman pada persamaan gerak yang menggambarkan besarnya momentum per elektron

- Medan listrik E_x dikenakan pada kawat yang membentangi pada arah-x dimana rapat arus j_x mengalir pada kawat
- Medan magnet \mathbf{H} dikenakan pada arah-z positif

$$\text{Gaya Lorentz} \quad -\frac{e}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{H}$$

- membelokkan elektron pada arah-y negatif (kecepatan alir elektron berlawanan dengan arah aliran arus)
- Maka, elektron akan terkumpul pada sisi kawat, dan medan listrik muncul pada arah-y yang melawan gerakan dan akumulasi elektron lebih lanjut

- Pada kesetimbangan, medan transversal (atau **medan Hall**) E_y akan mengimbangi gaya Lorentz, sehingga arus hanya mengalir pada arah-x
- **magnetoresistansi**, rasio medan pada sepanjang kawat E_x terhadap rapat arus j_x adalah

$$\rho(H) = \frac{E_x}{j_x}$$

- Medan transversal E_y akan sebanding dengan H dan j_x , sehingga dapat didefinisikan **koefisien Hall** sebagai:

$$R_H = \frac{E_y}{j_x H}$$

- Karena medan Hall berada pada arah-y negatif, R_H harus bernilai negatif

- Jika pembawa muatannya positif, maka arah kecepatan-x harus dibalik, dan arah medan Hall akan pembawa muatannya negatif
 - Koefisien Hall dan magnetoresistansi dapat ditentukan dari Drude:
- ketika terdapat medan E dan H , gaya yang bekerja pada setiap elektron adalah:

$$f = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{H}/c)$$

- momentum per elektron menjadi:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -e\left(\vec{E} + \frac{\vec{p}}{mc} \times \vec{H}\right) - \frac{\vec{p}}{\tau}$$

- Pada keadaan tunak, arus tidak bergantung pada waktu, sehingga p_x dan p_y memenuhi:

$$0 = -eE_x - \omega_c p_y - \frac{p_x}{\tau}$$

$$0 = -eE_y - \omega_c p_x - \frac{p_y}{\tau}$$

dengan $\omega_c = \frac{eH}{mc}$ adalah frekuensi cyclotron

- dikalikan $-ne\tau/m$ dan karena $j = -nev$, diperoleh

$$\sigma_0 E_x = \omega_c \tau j_y + j_x$$

$$\sigma_0 E_y = -\omega_c \tau j_x + j_y$$

- dengan σ_0 adalah konduktivitas DC pada model Drude ketika medan magnet tidak ada = $ne^2\tau/m$
- Medan Hall E_y ditentukan dengan memilih nilai j_y nol:

$$E_y = -\left(\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0}\right) j_x = -\left(\frac{H}{nec}\right) j_x$$

- Maka koefisien Hall adalah: $R_H = -\frac{1}{nec}$ yang hanya bergantung pada kerapatan pembawa

Konduktivitas Listrik AC Pada Logam

- Ditinjau medan listrik gayut waktu dengan bentuk $\mathbf{E}(t) = \text{Re}(\mathbf{E}(\omega)e^{i\omega t})$

- Persamaan gerak untuk momentum per elektron menjadi

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\vec{p}}{\tau} - e\vec{E}$$

- Dicari solusi keadaan tunak dengan bentuk

$$\mathbf{p}(t) = \text{Re}(\mathbf{p}(\omega)e^{i\omega t})$$

- Substitusikan \mathbf{p} dan \mathbf{E} ke persamaan gerak diperoleh:

$$-i\omega \vec{p}(\omega) = -\frac{\vec{p}(\omega)}{\tau} - e\vec{E}(\omega)$$

- Karena $\mathbf{j} = -ne\mathbf{p}/m$, besarnya rapat arus adalah $\mathbf{j}(t) = \text{Re}(\mathbf{j}(\omega)e^{i\omega t})$

$$\vec{j}(\omega) = -\frac{ne\vec{p}(\omega)}{m} = \frac{(ne^2/m)\vec{E}(\omega)}{(1/\tau) - i\omega}$$

- Dapat dituliskan sebagai $\mathbf{j}(\omega) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\omega)$ dengan

$$\sigma(\omega) = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau}, \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$$

yang tereduksi ke hasil Drude DC saat $\omega = 0$

Konduktivitas Termal Logam

- **Hukum Wiedemann-Franz** menyatakan bahwa rasio konduktivitas termal terhadap konduktivitas listrik (κ/σ) untuk sejumlah besar logam akan berbanding lurus dengan suhu, dengan nilai tetapan kesebandingan yang hampir sama untuk semua logam

- Model Drude mengasumsikan bahwa arus termal pada logam dibawa oleh elektron konduksi
- Asumsi ini didasarkan pada pengamatan empiris bahwa logam menghantarkan panas lebih baik dibanding insulator

Table 1.6
EXPERIMENTAL THERMAL CONDUCTIVITIES AND LORENZ NUMBERS
OF SELECTED METALS

ELEMENT	273 K		373 K	
	κ (wat/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (wat-cm/m-K ²)	κ (wat/cm-K)	$\kappa/\sigma T$ (wat-cm/m-K ²)
Li	0.71	2.22×10^{-8}	0.73	2.43×10^{-8}
Na	1.38	2.12		
K	1.0	2.23		
Rb	0.6	2.42		
Cu	3.85	2.20	3.82	2.29
Ag	4.18	2.31	4.17	2.38
Au	3.1	2.32	3.1	2.36
Be	2.3	2.36	1.7	2.42
Mg	1.5	2.14	1.5	2.25
Nb	0.52	2.90	0.54	2.78
Fe	0.80	2.61	0.73	2.88
Zn	1.13	2.28	1.1	2.30
Cd	1.0	2.49	1.0	2.19
Al	2.38	2.14	2.30	2.14
In	0.88	2.58	0.80	2.60
Tl	0.5	2.75	0.45	2.75
Sn	0.64	2.48	0.60	2.54
Pb	0.38	2.64	0.35	2.53

- Ditinjau batang logam yang memiliki variasi suhu
- Jika tidak ada sumber atau pembuangan panas pada ujung-ujung batang untuk mempertahankan gradien suhu, energi termal akan mengalir bertawanan terhadap gradien suhu
- Didefinisikan rapat arus termal \mathbf{j}^t sebagai vektor yang sejajar arah aliran panas. Untuk gradien suhu yang kecil dipenuhi

$$\mathbf{j}^t = -\kappa \nabla T \quad (\text{Hukum Fourier})$$

κ dikenal sebagai konduktivitas termal dan bernilai positif

- Untuk kasus 1-D, dimana aliran hanya pada arah-x:

$$\mathbf{j}^t = -\kappa \frac{dT}{dx}$$

- Di titik x, separo elektron muncul dari salah satu sisi x yang bersuhu tinggi, dan separonya dari sisi bersuhu rendah
- Jika $\epsilon(T)$ adalah energi termal per elektron dalam logam pada suhu T , maka elektron yang tumbukan terakhirnya di x' akan memiliki energi termal $\epsilon(T(x'))$

- Elektron yang tiba di x dari sisi bersuhu tinggi akan mengalami tumbukan terakhir di $x - v\tau$, sehingga membawa energi termal per elektron $e(T[x - v\tau])$
- Maka rapat arus termalnya $(n/2)v_e(T[x - v\tau])$
- Elektron yang tiba di x dari sisi bersuhu rendah akan membawa energi termal sebesar $(n/2)(-v)_e(T[x + v\tau])$ sehingga $j^e = (1/2)n v [e(T[x - v\tau]) - T[x + v\tau])]$

- Diperoleh

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 1.11 \times 10^{-8} \text{ watt-ohm/K}^2$$
 yang bernilai separo dari nilai yang dinyatakan pada Tabel 1.6

- Jika variasi suhu sepanjang lintasan bebas rerata ($l = v\tau$) sangat kecil (perubahan pada l adalah ll/L dikalikan perubahan pada L), dapat diperluas untuk sekitar titik x hingga diperoleh:

$$j^e = n v^2 \tau \frac{d\epsilon}{dT} \left(-\frac{dT}{dx} \right)$$

- Untuk 3-D, v diganti v_x dari kecepatan elektron v dan direrata pada seluruh arah
- Karena $\langle v_x^2 \rangle = \langle v_y^2 \rangle = \langle v_z^2 \rangle = 1/3 v^2$ dan karena $n \frac{d\epsilon}{dT} = (N/V) \frac{d\epsilon}{dT} = (d\epsilon/dT) / V = c_v$ (kalor jenis elektron), diperoleh

$j^e = 1/3 v^2 \tau c_v (-\nabla T)$ maka $\kappa = 1/3 v^2 \tau c_v = 1/3 l v c_v$ dengan v^2 kelajuan elektron kuadrat rerata

• Maka,
$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{1/3 c_v m v^2}{m e^2}$$

- Dari gas ideal klasik, $c_v = 3/2 n k_B$ dan $1/2 m v^2 = 3/2 k_B T$ dengan k_B adalah tetapan Boltzmann

sehingga

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{3}{2} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 T$$

Fisika Zat Padat

Teori Logam :
Model Drude-Sommerfeld



Arnold Sommerfeld
(1868 – 1951)
German Physicist

- 25 tahun setelah Drude mengajukan modelnya, diketahui bahwa distribusi Maxwell-Boltzmann untuk elektron harus diganti dengan distribusi Fermi-Dirac:
- Sommerfeld menerapkan distribusi Fermi-Dirac pada gas elektron bebas dalam logam (sehingga memodifikasi model Drude untuk teori logam), model ini kemudian dikenal sebagai model Drude-Sommerfeld

$$f(v) = \frac{(m/h)^3}{4\pi^3 \exp[(1/2mv^2 - k_B T)/k_B T] + 1}$$

Sifat Ground State Gas Elektron

- Ditinjau N elektron yang terjebak dalam volume V
- Dalam model Drude, elektron tidak saling berinteraksi, sehingga ground state dari sistem dapat ditentukan dengan mencari level energi untuk elektron tunggal dalam volume V , dan mengisi level-level ini dengan prinsip larangan Pauli (satu level hanya ditempati satu elektron)
- Elektron tunggal dapat digambarkan dengan fungsi gelombang $\psi(r)$ yang berkaitan dengan level energi ϵ

- Jika elektron tidak berinteraksi, maka fungsi gelombang dan energinya akan memenuhi persamaan Schrödinger:

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 \psi(r) = \epsilon \psi(r) \quad \text{dengan} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

maka $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) = \epsilon \psi(r)$
dalam koordinat Kartesius:

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

- Pada model Drude, diasumsikan bahwa distribusi kecepatan elektron mengikuti distribusi Maxwell-Boltzmann
- Maka jumlah elektron per satuan volume $n = N/V$ dengan kecepatan pada interval dv di sekitar nilai v adalah $f(v)dv$ dimana

$$f_B(v) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-m v^2 / 2 k_B T}$$

- Tetapan pada persamaan di atas dipilih sedemikian sehingga syarat normalisasi dipenuhi:
- $$n = \int f(v) dv$$

James C. Maxwell (1831 – 1879)	+	Ludwig E. Boltzmann (1844 – 1906)	VS.	Enrico Fermi (1901 – 1954)	+	Paul A.M. Dirac (1902 – 1984)

whatever..

Sorry, Drude...



Drude Model
(1900)

Drude-Sommerfeld Model
(1927)

Sifat Ground State Gas Elektron

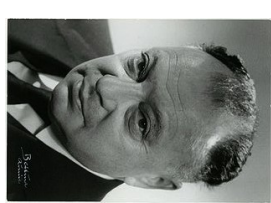
- Ditinjau N elektron yang terjebak dalam volume V
- Dalam model Drude, elektron tidak saling berinteraksi, sehingga ground state dari sistem dapat ditentukan dengan mencari level energi untuk elektron tunggal dalam volume V , dan mengisi level-level ini dengan prinsip larangan Pauli (satu level hanya ditempati satu elektron)
- Elektron tunggal dapat digambarkan dengan fungsi gelombang $\psi(r)$ yang berkaitan dengan level energi ϵ

- Jika elektron tidak berinteraksi, maka fungsi gelombang dan energinya akan memenuhi persamaan Schrödinger:

$$\frac{1}{2m} \hat{p}^2 \psi(r) = \epsilon \psi(r) \quad \text{dengan} \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \nabla$$

maka $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(r) = \epsilon \psi(r)$
dalam koordinat Kartesius:

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



Wolfgang E. Pauli
(1900 – 1958)
Austrian Physicist



Erwin Schrödinger
(1887 – 1961)
Austrian Physicist

- Ditinjau sebuah elektron yang terjebak dalam suatu kubus dengan panjang rusuk $L = V^{1/3}$ (logam cukup besar sehingga sifat-sifat elektron tidak dipengaruhi oleh geometri ruangnya)
- Selanjutnya, diperlukan syarat batas untuk persamaan Schrödinger yang menggambarkan terbacaknya elektron di dalam kubus
- Pada ruang 1-D, tidak dipilih elektron yang terjebak pada garis dari 0 hingga L , melainkan ditinjau elektron yang terjebak dalam suatu lingkaran dengan keliling L sehingga syarat batasnya adalah $\psi(x + L) = \psi(x)$

• Generalisasi untuk kubus 3-D adalah

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

persamaan ini dikenal sebagai **syarat batas Born-von Karman (periodik)**

- Untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger dan untuk sementara mengabaikan syarat batasnya, dipilih solusi dalam bentuk

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad \text{dengan energi } \epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$



Max Born
(1882 – 1970)
German Physicist



Theodore von Karman
(1881 – 1963)
Hungarian-American
Aerospace Engineer

- Tetapan normalisasi dipilih sedemikian sehingga peluang menemukan elektron di dalam volume V adalah satu

$$1 = \int |\psi(\vec{r})|^2 d\tau$$

- Level $\psi_k(\vec{r})$ merupakan *eigenstate* dari operator momentum \mathbf{p} dengan *eigenvalue* $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ karena

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \hbar\mathbf{k} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

maka, elektron yang berada pada level $\psi_k(\vec{r})$ memiliki momentum $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ dan kecepatan $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ yaitu $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$ dan energi

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2} m v^2$$

- k dapat ditinjau sebagai vektor gelombang
- Gelombang bidang $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ bernilai konstan pada sembarang bidang yang tegak lurus terhadap \mathbf{k} (karena $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \text{konstan}$) dan periodik sepanjang garis yang sejajar terhadap \mathbf{k} dengan panjang gelombang $\lambda = 2\pi/k$ (panjang gelombang de Broglie)

- Dari syarat batas Born-von Karman:

$$e^{i\mathbf{k}_x L} = e^{i\mathbf{k}_y L} = e^{i\mathbf{k}_z L} = 1$$

- Karena $e^{iz} = 1$ hanya jika $z = n2\pi$, dengan n adalah bilangan bulat, komponen vektor gelombang \mathbf{k} harus berbentuk:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

n_x, n_y, n_z adalah bilangan bulat

- Maka, dalam ruang 3-D dengan sumbu Kartesius k_x, k_y dan k_z (*ruang-k*) vektor gelombang yang diijinkan adalah vektor gelombang yang koordinat sepanjang tiga sumbu tersebut dinyatakan oleh perkalian bulat dari $2\pi/L$
- Jumlah titik \mathbf{k} yang diijinkan adalah: volume ruang- \mathbf{k} yang terkandung dalam ruang 3-D dibagi dengan volume ruang- \mathbf{k} setiap titik (untuk titik-titik dengan nilai \mathbf{k} yang diijinkan) yang berukuran $(2\pi/L)^3$

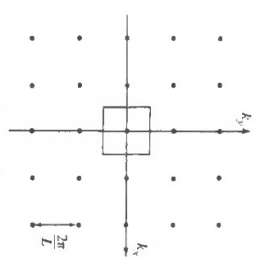


Figure 2.2
Points in a two-dimensional k -space of the form $k_x = 2\pi n_x/L, k_y = 2\pi n_y/L$. Note that the area per point is just $(2\pi/L)^2$. In d dimensions the volume per point is $(2\pi/L)^d$.

- Maka, suatu daerah ruang- \mathbf{k} dengan volume Ω akan berisi $\frac{\Omega}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega V}{8\pi^3}$ nilai \mathbf{k} yang diijinkan
- Sehingga, jumlah nilai- \mathbf{k} yang diijinkan per satuan volume ruang- \mathbf{k} (*rapat level ruang-k*) adalah

$$\frac{V}{8\pi^3}$$

- Karena elektron tidak berinteraksi, ground state dari N -elektron dapat dibentuk dengan menyusun elektron-elektron ke dalam level-level milik elektron tunggal yang diijinkan
- Dari prinsip larangan Pauli, setiap vektor gelombang \mathbf{k} yang diijinkan memiliki dua level elektron, satu untuk setiap arah spin elektron (*up dan down*)
- Ground state N -elektron dibentuk dengan menempatkan dua elektron pada level elektron tunggal dengan nilai $\mathbf{k} = 0$ yang memiliki energi terendah $\epsilon = 0$, kemudian secara berturut-turut mengisi level elektron tunggal untuk energi terendah berikutnya yang belum terisi

- Karena $\epsilon \sim k^2$, ketika N cukup besar, daerah yang ditempati akan berbentuk bola
- Jejeri bolanya disebut k_F (F untuk Fermi, sehingga **vektor gelombang Fermi**) dan volumenya Ω adalah $4\pi k_F^3/3$

- Jumlah nilai k yang diijinkan dalam bola ini adalah:

$$\Omega V = \left(\frac{4\pi k_F^3}{3} \right) \left(\frac{V}{8\pi^3} \right) = \frac{k_F^3}{6\pi^2} V$$

- Karena setiap nilai- k yang diijinkan berisi dua level elektron-tunggal (satu untuk setiap nilai spin), untuk menempatkan N elektron harus dimiliki

$$N = 2 \frac{k_F^3}{6\pi^2} V = \frac{k_F^3}{3\pi^2} V$$

- Jadi jika dimiliki N elektron dalam volume V (rapat elektron $n = N/V$), ground state dari sistem N -elektron dibenteng dengan menempati seluruh level elektron tunggal dengan nilai $k < k_F$ dan menyisakan $k > k_F$ kosong, dengan k_F dinyatakan oleh

$$n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$$

- Bola berjejari k_F berisi level-level elektron tunggal yang telah ditempati disebut **bola Fermi**
- Permukaan bola yang memisahkan level yang telah ditempati dan yang belum ditempati disebut **permukaan Fermi**
- Momentum dari level elektron tunggal yang telah ditempati $p_F = \hbar k_F$ yang memiliki energi tertinggi disebut **momentum Fermi**, dan energinya $\epsilon_F = \hbar^2 k_F^2 / 2m$ merupakan **energi Fermi** dan kecepatannya $v_F = p_F/m$ adalah **kecepatan Fermi**
- Kecepatan Fermi dalam logam sebanding dengan kecepatan termal $v = (3k_B T/m)^{1/2}$ pada gas klasik

- Karena $\frac{V}{N} = \frac{1}{n} = \frac{4}{3} \pi r_s^3$; $r_s = \left(\frac{3}{4\pi n} \right)^{1/3}$ maka $r_s = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} \frac{1}{k_F}$ sehingga $k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s}$

- Dengan menggunakan Tabel 1.1, diperoleh ϵ_F , T_F , k_F dan v_F seperti ditunjukkan pada Tabel 2.1

FERMI ENERGIES, FERMI TEMPERATURES, FERMI WAVE VECTORS, AND FERMI VELOCITIES FOR REPRESENTATIVE METALS*

ELEMENT	r_s/a_0	ϵ_F	T_F	k_F	v_F
Li	3.25	4.74 eV	5.51×10^4 K	$1.12 \times 10^8 \text{ cm}^{-1}$	$1.29 \times 10^8 \text{ cm/s}$
Na	3.93	3.24	3.77	0.92	1.07
K	4.86	2.12	2.46	0.75	0.86
Rb	5.20	1.85	2.15	0.70	0.81
Cs	5.62	1.59	1.84	0.65	0.75
Cu	2.67	7.00	8.16	1.36	1.57
Ag	3.02	5.49	6.38	1.20	1.39
Au	3.01	5.53	6.42	1.21	1.40
Be	1.87	14.3	16.6	1.94	2.25
Mg	2.66	7.08	8.23	1.36	1.58
Ca	3.27	4.69	5.44	1.11	1.28
Sr	3.57	3.93	4.57	1.02	1.18
Ba	3.71	3.64	4.23	0.98	1.13
Nb	3.07	5.32	6.18	1.18	1.37
Fe	2.12	11.1	13.0	1.71	1.98
Mn	2.14	10.9	12.7	1.70	1.96
Zn	2.30	9.47	11.0	1.58	1.83
Cd	2.59	7.47	8.68	1.40	1.62
Hg	2.65	7.13	8.29	1.37	1.58
Al	2.07	11.7	13.6	1.75	2.05
Ga	2.19	10.4	12.1	1.60	1.92
In	2.41	8.63	10.0	1.51	1.74

- Untuk menghitung energi ground-state dari N elektron dalam suatu volume V , energi dari seluruh level elektron tunggal dalam bola Fermi dijumlahkan:

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

- Perhatikan bahwa jumlahan dilakukan dalam ruang 3D! (pada koordinat Kartesius, k memiliki komponen k_x, k_y dan k_z)
- Untuk menjumlah sembarang fungsi $F(k)$ pada seluruh nilai k yang diijinkan, dapat dilakukan langkah berikut: karena volume ruang- k per nilai k yang diijinkan adalah $\Delta k = 8\pi^3/V$, maka

$$\sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) = \frac{V}{8\pi^3} \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) \Delta \vec{k}$$

Untuk batas $\Delta k \rightarrow 0$ (yaitu $V \rightarrow \infty$) bentuk jumlahan $\sum F(k)/\Delta k$ akan mendekati bentuk integral $\int dk F(k)$, sehingga

$$\lim_{V \rightarrow \infty} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} F(\vec{k}) = \int \frac{d\vec{k}}{8\pi^3} F(\vec{k})$$

- Maka rapat energi gas elektron adalah:

$$\frac{E}{V} = 2 \frac{1}{8\pi^3} \int_{r(k < k_F)} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{4\pi^3} \int_{k=0}^{k_F} (k^2 dk) 4\pi \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\frac{E}{V} = \frac{1}{\pi^2} \frac{\hbar^2 k_F^5}{10m}$$

- Untuk menentukan besar energi per elektron E/N pada ground state, hasil tersebut dibagi dengan $N/V = k_F^3/3\pi^2$ yang memberikan

$$\frac{E}{N} = \frac{3}{10} \frac{\hbar^2 k_F^2}{m} = \frac{3}{5} \epsilon_F = \frac{3}{5} k_B T_F$$

dengan T_F (suhu Fermi) ditunjukkan pada Tabel 2.1

- Nilai energi per elektron pada gas klasik adalah $3/2 k_B T$ yang akan lenyap pada $T = 0$

Sifat Termal Gas Elektron Bebas

- Selanjutnya akan diterapkan statistik Fermi-Dirac dalam perhitungan kontribusi elektron pada kalor jenis logam untuk volume tetap

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_V; \quad u = \frac{U}{V}$$

- Pada metode *independent electron approximation*, energi internal U adalah jumlahan seluruh level elektron tunggal $\epsilon_i(k)$ dikalikan jumlah rerata elektron di level tersebut

$$U = 2 \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) f(\epsilon(\vec{k}))$$

dimana dikenalkan **fungsi Fermi** $f(\epsilon)$ yang menggambarkan peluang terdapatnya elektron pada level tertentu dari elektron tunggal, atau umumnya dikenal sebagai fungsi distribusi:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\mu)/k_B T} + 1}$$

dan banyaknya elektron total N adalah jumlahan untuk seluruh level:

$$N = \sum_i f(\epsilon_i) = \sum_i \frac{1}{e^{(\epsilon_i-\mu)/k_B T} + 1}$$

- Jika kedua sisi pada persamaan untuk U dibagi dengan volume V dan dengan menerapkan metode yang telah digunakan untuk menghitung energi ground-state, maka rapat energi $u = U/V$ adalah

$$u = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \epsilon(\vec{k}) f(\epsilon(\vec{k}))$$

- Jika kedua sisi pada persamaan untuk N dibagi dengan V , diperoleh rapat elektron $n = N/V$ untuk menghilangkan potensial kimia μ

$$n = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} f(\epsilon(\vec{k}))$$

- Pada persamaan untuk u dan n , integrand hanya bergantung pada k melalui energi elektron $\epsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$

- Dengan meng-evaluasi integral pada koordinat bola dan mengubah variabel dari k ke ϵ :

$$\int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} f(\epsilon(\vec{k})) = \int_0^\infty \frac{k^2 dk}{\pi^2} f(\epsilon(\vec{k})) = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

dimana

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}$$

dikenal sebagai **rapat level per satuan volume** atau **rapat level** (pada praktiknya, lebih umum dikenal sebagai **density of states, DOS**)

- Karena $n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}$ sehingga $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (3n\pi^2)^{2/3}$ maka $g(\epsilon)$ dapat ditulis sebagai

$$g(\epsilon) = \frac{m}{\hbar^2 \pi^2} \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}} = \frac{(3n\pi^2)^{2/3}}{2\pi^2 \epsilon_F} \left(\frac{3n\pi^2}{\epsilon_F} \right)^{1/2}$$

$$g(\epsilon) = \frac{3n}{2\epsilon_F} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F} \right)^{1/2}$$

- Maka rapat level pada energi Fermi adalah

$$g(\epsilon_F) = \frac{3n}{2\epsilon_F}$$

- Dengan menggunakan rapat level, persamaan untuk u dan n dapat dituliskan sebagai

$$u = \int_0^\infty \epsilon g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon \quad \text{dan} \quad n = \int_0^\infty g(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

- Secara umum, kedua persamaan memiliki bentuk yang kompleks. Namun, terdapat metode ekspansi sederhana yang memanfaatkan fakta bahwa T jauh lebih kecil dari T_F untuk seluruh suhu logam yang diukur

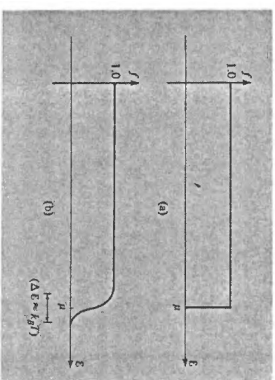


Figure 2.3 The Fermi function, $f(\epsilon) = 1/[e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1]$ versus ϵ for given μ , at (a) $T = 0$ and (b) $T \approx 0.01\mu$ (of order room temperature, at typical metallic densities). The two curves differ only in a region of order $k_B T$ about μ .

- Dari Gbr. 2.3, dapat dilihat bahwa $f(\epsilon)$ berbeda dengan bentuk pada suhu nol hanya di daerah sempit di sekitar μ dengan lebar beberapa $k_B T$

- Perbedaan integral berbentuk

$$\int_{-\infty}^\infty H(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

dengan bentuk nilai nolnya:

$$\int_{-\infty}^{\epsilon_F} H(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$$

ditentukan oleh bentuk $H(\epsilon)$ di dekat $\epsilon = \mu$

- Jika $H(\epsilon)$ tidak bervariasi tajam di sekitar μ , $H(\epsilon)$ dapat diganti dengan beberapa suku dari deret Taylor fungsi tersebut di sekitar $\epsilon = \mu$

- Maka, integral dengan bentuk $\int_{-\infty}^\infty H(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$ dapat diekspansikan dengan deret Sommerfeld menjadi (lihat Appendix C dalam buku Ashcroft)

$$\int_{-\infty}^\infty H(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 H'(\mu) + O(T^4)$$

- Selanjutnya dievaluasi persamaan untuk u dan n yang dapat dituliskan dalam bentuk

$$u = \int_0^{\mu} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 [\mu g'(\mu) + g(\mu)] + O(T^4)$$

$$n = \int_0^{\mu} g(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\mu) + O(T^4)$$

- Persamaan untuk n menunjukkan bahwa μ berbeda dari nilainya pada $T = 0$, yaitu ϵ_F , oleh suku pada orde T^2 . Maka dapat dituliskan

$$\int_0^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon = \int_0^{\epsilon_F} H(\epsilon) d\epsilon + (\mu - \epsilon_F) H(\epsilon_F)$$

- Jadi, persamaan untuk u dan n dapat dituliskan ulang lagi ke dalam bentuk

$$u = \int_0^{\epsilon_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon + \epsilon_F [(\mu - \epsilon_F) g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\epsilon_F)] + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g(\epsilon_F) + O(T^4)$$

$$n = \int_0^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon + [(\mu - \epsilon_F) g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\epsilon_F)]$$

- Suku pertama pada sisi kanan kedua persamaan tidak lain merupakan nilai untuk u dan n pada ground state
- Karena n tidak bergantung pada suhu, dari persamaan untuk n diperoleh

$$0 = (\mu - \epsilon_F) g(\epsilon_F) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g'(\epsilon_F)$$

yang menentukan deviasi μ dari ϵ_F :

$$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \frac{g'(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)}$$

Konduktivitas Termal

- Selanjutnya, dengan menggunakan kalor jenis gas elektron, konduktivitas termal dapat ditentukan:

$$\kappa = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v$$

- Karena $\tau = \frac{\sigma m}{n e^2}$ dan $v_F^2 = \frac{2 \epsilon_F}{m}$

$$\text{maka } \frac{\kappa}{\sigma T} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 = 2.44 \times 10^{-8} \text{ watt-ohm/K}^2$$

sesuai dengan data di Tabel 1.6

- Karena $g(\epsilon) = \frac{3}{2} \frac{n}{\epsilon_F} \left(\frac{\epsilon}{\epsilon_F} \right)^{1/2}$ maka

$$\mu = \epsilon_F \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{\pi k_B T}{2 \epsilon_F} \right)^2 \right]$$

- Dari ketakbergantungan n pada suhu, suku di dalam kurung kurawal pada persamaan untuk u bernilai nol, sehingga:

$$u = u_0 + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 g(\epsilon_F)$$

dimana u_0 adalah rapat energi pada ground state

- Maka, diperoleh kalor jenis gas elektron sebesar

$$c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_n = \frac{\pi^2}{3} k_B^2 T g(\epsilon_F) = \frac{\pi^2}{2} \left(\frac{k_B T}{\epsilon_F} \right) n k_B$$

- Bandingkan nilai ini dengan nilai untuk gas ideal klasik $c_v = 3/2 n k_B$, maka efek dari statistik Fermi-Dirac adalah mengurangi nilai kalor jenis sebesar $(\pi^2/3)(k_B T/\epsilon_F)$ yang sebanding dengan suhu

- Penggunaan statistik Fermi-Dirac hanya mempengaruhi prediksi dari model Drude yang membutuhkan nilai distribusi kecepatan elektron

• Jika laju $1/\tau$ saat elektron mengalami tumbukan tidak bergantung pada energi elektron, maka hanya prediksi lintasan bebas rerata elektron dan konduktivitas termal yang terpengaruh oleh perubahan fungsi distribusi

Fisika Zat Padat

Potential Periodik (Teorema Bloch)



Felix Bloch
(1905 – 1983)
Swiss Physicist

- Karena ion-ion pada kristal ideal tersusun secara periodik, maka selanjutnya ditinjau kasus elektron yang berada dalam potensial $U(r)$ yang memiliki periodisitas kekisi Bravais

$$U(r + R) = U(r)$$
 untuk seluruh vektor kekisi Bravais R
- Karena skala keperiodikan potensial U ($\sim 10^8$ cm) berada pada orde panjang gelombang de Broglie milik elektron dalam model elektron bebas, perlu digunakan mekanika kuantum untuk meninjau efek keperiodikan ini pada gerak elektron

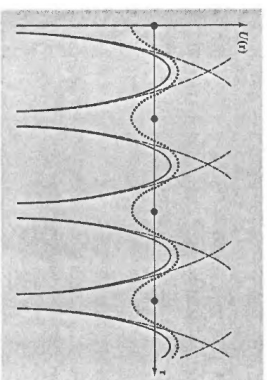


Figure 8.1
A typical crystalline periodic potential, plotted along a line of ions and along a line midway between a plane of ions. (Closed circles are the equilibrium ion sites; the solid curves give the potential along the line of ions; the dotted curves give the potential along the line between planes of ions; the dashed curves give the potential of single isolated ions.)

- Bentuk umum persamaan Schrodinger untuk elektron tunggal adalah:

$$\hat{H}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(r) \right) \psi(r) = \epsilon\psi(r)$$

dengan potensial U memiliki periodisitas $U(r+R) = U(r)$

- Persamaan Schrodinger untuk elektron bebas dalam model Sommerfeld merupakan kasus khusus dari persamaan di atas
- Elektron-elektron yang mematuhi persamaan Schrodinger untuk elektron tunggal dengan potensial periodik dikenal sebagai **elektron Bloch** (untuk membedakan dengan "elektron bebas")

Teorema Bloch

- Eigenstate ψ dari Hamiltonan elektron tunggal dengan potensial periodik dapat dipilih berbentuk gelombang bidang dikalikan suatu fungsi yang mengandung periodisitas kekisi Bravais:

$$\psi_{nk}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{nk}(\vec{r})$$

- dengan $u_{nk}(r + R) = u_{nk}(r)$ untuk seluruh R pada kekisi Bravais

- Kedua persamaan membentuk

$$\psi_{nk}(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi_{nk}(\vec{r})$$

- Indeks n dikenal sebagai indeks pita dan muncul karena untuk satu nilai k akan terdapat banyak eigenstate
- Dengan kata lain, eigenstate dari H dapat dipilih sedemikian sehingga untuk setiap ψ terdapat vektor gelombang k yang memenuhi

$$\psi(\vec{r} + \vec{R}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} \psi(\vec{r})$$
 untuk setiap R pada kekisi Bravais

Bukti Persamaan Bloch

- Untuk setiap vektor kekisi Bravais R didefinisikan operator translasi T_R yang ketika dioperasikan pada sembarang fungsi $f(r)$ akan menggeser masukannya sebesar R :

$$T_R f(r) = f(r + R)$$
- Karena Hamiltonan bersifat periodik, diperoleh:

$$T_R H \psi = H(r + R) \psi(r + R) = H(r) \psi(r + R) = H T_R \psi$$
 maka $T_R H = H T_R$

- Hasil dari menerapkan dua translasi secara berturut-turut tidak bergantung pada urutan penerapan, karena untuk semua $\psi(r)$

$$T_R T_R \psi(r) = T_R T_R \psi(r) = \psi(r + R + R)$$
 sehingga $T_R T_R = T_R T_R = T_{2R}$
- Eigenstate dari H dapat dipilih sebagai eigenstate simultan untuk semua T_R

$$H \psi = \epsilon \psi$$

$$T_R \psi = c(R) \psi$$

- Karena $T_R T_R \psi = c(R) T_R \psi = c(R) c(R) \psi$ dan $T_R T_R \psi = c(R) T_{RR} \psi = c(R) c(R) \psi$ maka $c(R + R) = c(R) c(R)$

- Misal a_i adalah tiga vektor primitif untuk kekisi Bravais, $c(a_i)$ dapat dituliskan dalam bentuk $c(a_i) = e^{2\pi i x_i}$ dengan pemilihan x_i yang sesuai
- Jika R adalah vektor kekisi Bravais umum yang dinyatakan sebagai $\vec{R} = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$ maka $c(R) = c(a_1)^{n_1} c(a_2)^{n_2} c(a_3)^{n_3}$

- Persamaan tersebut ekuivalen dengan $c(\vec{R}) = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}}$ dimana $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$ dan b_j adalah vektor kekisi balik yang memenuhi $\vec{b}_i \cdot \vec{a}_j = 2\pi \delta_{ij}$
- Maka: $T_R \psi = \psi(\vec{r} + \vec{R}) = c(\vec{R}) \psi = e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \psi(\vec{r})$ yang merupakan teorema Bloch

Syarat Batas Born-von Karmann

- Dalam model Sommerfeld, nilai k yang diijinkan dihitung dengan menggunakan syarat batas Born-von Karmann yang diterapkan pada sistem di mana sebuah elektron terjebak di dalam sebuah kubus berukuran L
- Namun, jika kekisi Bravais bukan kubus dan L bukan perkalian bulat konstanta kekisi a , tidak akan sesuai jika perhitungan dilakukan pada sistem volume kubus berisi L
- Lebih sesuai jika perhitungan dilakukan untuk volume yang bersesuaian dengan sel primitif dari kekisi Bravais yang sedang ditinjau

- Syarat batas periodik digeneralisasikan ke $\psi(r + N_i a_i) = \psi(r)$, $i = 1, 2, 3$ dengan a_i adalah tiga vektor primitif dan N_i adalah bilangan bulat berorde $N_1^{1/3}$ di mana $N = N_1 N_2 N_3$ merupakan cacah total sel primitif dalam kristal
- Saat mengadopsi syarat batas ini, digunakan asumsi bahwa sifat bahan tidak bergantung pada pemilihan syarat batas

- Dengan menerapkan teorema Bloch pada syarat batas diperoleh $\psi_{mk}(r + N_i a_i) = e^{i N_i \vec{k} \cdot \vec{a}_i} \psi_{mk}(r)$, $i = 1, 2, 3$ yang mensyaratkan $e^{i N_i \vec{k} \cdot \vec{a}_i} = 1$, $i = 1, 2, 3$
- Jika $\vec{k} = k_1 \vec{b}_1 + k_2 \vec{b}_2 + k_3 \vec{b}_3$ maka $e^{2\pi i N_i x_i} = 1$ sehingga harus dimiliki $x_i = m_i/N_i$, m_i bilangan bulat
- Maka bentuk umum vektor gelombang Bloch yang diijinkan $\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i$, m_i bilangan bulat

Contoh:

- Untuk kekisi Bravais simple cubic (sc), vektor primitifnya adalah $\vec{a}_1 = a \hat{x}$, $\vec{a}_2 = a \hat{y}$, $\vec{a}_3 = a \hat{z}$ maka kekisi baliknya adalah

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \hat{x}, \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \hat{y}, \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{a} \hat{z}$$

- Karena $N_1 = N_2 = N_3 = L/a$, maka

$$\vec{k} = \sum_{i=1}^3 \frac{m_i}{N_i} \vec{b}_i = \frac{m_1 2\pi}{L} \hat{x} + \frac{m_2 2\pi}{L} \hat{y} + \frac{m_3 2\pi}{L} \hat{z}$$

- Dari persamaan umum untuk nilai k , Bloch yang diijinkan, volume Δk dari ruang- k per nilai k yang diijinkan adalah volume bangun miring dengan rusuk b_i/N_i : $\Delta k = \frac{b_1}{N_1} \cdot \left(\frac{b_2}{N_2} \times \frac{b_3}{N_3} \right) = \frac{1}{N} b_1 \cdot (b_2 \times b_3)$
- Karena $b_1 \cdot (b_2 \times b_3)$ adalah volume sel primitif kekisi balik, persamaan di atas menyatakan bahwa *banyaknya k yang diijinkan dalam sel primitif kekisi balik sama dengan banyaknya titik kekisi dalam kristal*
- Volume sel primitif kekisi baik adalah $(2\pi)^3/V$ dengan $v = V/N$ adalah volume sel primitif kekisi langsung, maka $\Delta k = (2\pi)^3/v$

General Remarks

- Meskipun vektor gelombang untuk elektron bebas adalah \mathbf{p}/\hbar dengan \mathbf{p} adalah momentum elektron, maka dalam kasus Bloch k tidak sebanding dengan momentum elektron
- $\hbar k$ akan dikenal sebagai momentum kristal dari elektron (namun sebenarnya bukan menyatakan momentum)
- Vektor gelombang k selalu dibatasi pada zona Brillouin pertama, karena jika k' tidak berada pada zona Brillouin pertama, selalu dapat dituliskan dalam bentuk $k' = k + K$

- Untuk satu nilai k , terdapat banyak solusi persamaan Schrodinger, sehingga indeks n muncul dalam teorema Bloch
- Untuk satu nilai n , eigenstate dan eigenvalue merupakan fungsi periodik dari k dalam kekisi balik

$$\psi_{n, \mathbf{k}+\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \psi_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}), \\ \epsilon_{n, \mathbf{k}+\mathbf{K}} = \epsilon_{n, \mathbf{k}}$$

untuk setiap n , kumpulan level-level elektron yang ditentukan oleh $\epsilon_n(\mathbf{k})$ disebut **pita energi**

- Suatu elektron dalam suatu level yang ditentukan oleh indeks pita n dan vektor gelombang k memiliki kecepatan rerata yang tidak nol, yang dinyatakan oleh

$$\mathbf{v}_n(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon_n(\mathbf{k}),$$

yang berarti elektron bergerak selamanya tanpa pengurangan kecepatan rerata, meskipun berinteraksi dengan ion positif

Permukaan Fermi

- Dalam model Sommerfeld, ground state N elektron bebas dibentuk dengan cara mengisi seluruh level k dari elektron tunggal yang memiliki energi $\epsilon(\mathbf{k})$ kurang dari ϵ_F
- Ground state N elektron Bloch diperoleh dengan cara yang sama, kecuali bahwa level level elektron tunggal diberi label bilangan kuantum n dan k
- $\epsilon_n(\mathbf{k})$ tidak memiliki bentuk sederhana seperti pada elektron bebas dan k harus dibatasi pada sel primitif tunggal dari kekisi balik

Ketika bagian terendah dari level-level ini diisi oleh sejumlah elektron:

- Sejumlah pita akan terisi penuh, sementara lainnya akan kosong. Selisih energi antara bagian teratas level terisi dan bagian terendah level kosong disebut sebagai **band gap (celah energi)**
- Jika lebar band gap lebih dari $k_B T$ (T berada pada suhu kamar), diperoleh insulator
- Jika lebar band gap sebanding dengan $k_B T$, diperoleh semiconductor intrinsik

- Sejumlah pita dapat terisi sebagian, maka energi dari level terisi paling tinggi, energi Fermi ϵ_F , terletak pada interval satu pita atau lebih
- Untuk setiap pita yang terisi sebagian, terdapat permukaan Fermi yang memisahkan level terisi dengan level kosong yang disebut cabang permukaan Fermi (**branch of Fermi surface**)
- Cabang permukaan Fermi pada pita ke- n adalah permukaan pada ruang- k yang ditentukan oleh

$$\epsilon_n(\mathbf{k}) = \epsilon_F$$

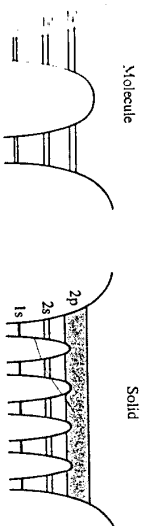
Fisika Zat Padat

Pita Energi

- Ditinjau atom Lithium sebagai contoh
- Untuk atom Li bebas, persamaan Schrodinger untuk sistem elektron yang berada pada sumur potensial menghasilkan level-level energi diskret $1s, 2s, 2p, 3s, \dots$ dst
- Atom Li mengandung 3 elektron, sehingga 2 elektron menempati level $1s$ (terisi penuh) dan sisanya di level $2s$
- Misal 2 atom Li membentuk molekul Li_2 , potensial yang 'dilihat' elektron berbentuk sumur ganda

- Spektrum energi pada molekul Li_2 akan terdiri atas kumpulan *douplet* diskret: level tiap atom Li akan pecah (*split*) menjadi 2 level berdekatan
- Tiap *douplet* juga dilabeli $1s, 2s, 2p, \dots$ dst yang tersusun atas 2 sub-level
- Tiap level dapat menampung 2 elektron dengan spin berlawanan, sehingga *douplet* $1s$ terisi 4 elektron dan *douplet* $2s$ terisi 2 elektron
- Pemecahan level bergantung pada orbital atomnya, level $2p$ pecah lebih lebar dibanding $2s$ yang lebih lebar juga dari $1s$
- Maka semakin besar energi, lebar pemecahan semakin besar

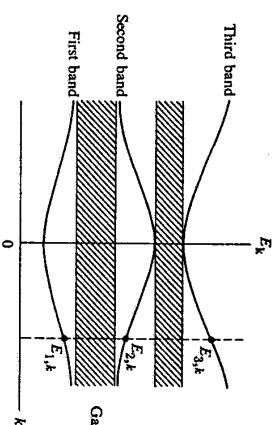
- Untuk molekul poliatom, jika terdapat 3 atom, maka level energi pecah menjadi triplet, jika 4 atom pecah menjadi *quadruplet*, ... dst, sehingga untuk N atom, level energi pecah ke dalam N sub-level
- Untuk logam Li, karena $N \sim 10^{23}$ atom, maka antar sub-level sangat berdekatan sehingga tidak bisa dibedakan dan dapat dianggap distribusinya kontinu membentuk pita energi
- Maka level $1s, 2s, 2p, \dots$ dst membentuk pita $1s, 2s, 2p, \dots$ dst



- Fungsi gelombang elektron pada atom tunggal akan terlokalisasi pada atom itu sendiri dan berkurang secara eksponensial ketika menjauhi atom
- Sementara fungsi gelombang elektron pada kristal akan membentang di seluruh bahan sehingga disebut orbital terdelokalisasi

- Dari fungsi Bloch: $\psi_k(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r})$ dan $\hat{p} = -\nabla$ maka dari persamaan Schrodinger diperoleh:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla + i\vec{k})^2 + U(\vec{r}) \right] u_k(\vec{r}) = E_k u_k(\vec{r})$$
- Untuk setiap nilai k , persamaan tersebut memiliki solusi lebih dari satu, yang merupakan kumpulan energi diskrit: $E_{1,k}, E_{2,k}, E_{3,k}, \dots$ yang menyatakan pita energi, sehingga dapat ditulis sebagai $E_n(\mathbf{k})$ dengan n adalah indeks pita
- Banyaknya pita dapat mencapai tak hingga, namun hanya pita terendah yang ditempati elektron
- Antar pita terdapat celah energi yang tidak dapat ditempati oleh elektron yang biasa disebut energy gap



Simetri Pita Dalam Ruang-k

- Setiap pita energi $E_n(\mathbf{k})$ memenuhi sifat simetri:
 - $E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = E_n(\mathbf{k})$
- yang menyatakan bahwa $E_n(\mathbf{k})$ bersifat periodik dengan periode sesuai vektor transisi keksi balik
- $E_n(-\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k})$
- yang menyatakan bahwa energi pita memiliki simetri cermin

Banyaknya Level Pada Suatu Pita

- Jumlah level pada suatu pita akan sama dengan banyaknya sel satuan pada kristal
- Dapat ditunjukkan pada kasus 1-D di mana fungsi Bloch berbentuk:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

- Jika digunakan syarat batas periodik pada fungsi tersebut, dan sifat periodisitas potensial $u_k(x + L) = u_k(x)$, maka nilai k yang diijinkan adalah:

$$k = n_x \frac{2\pi}{L} \quad \text{dengan } n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \text{ dst}$$

- Maka banyaknya level dalam zona Brillouin pertama yang lebarnya $2\pi/a$ adalah:

$$|2\pi/a| / |2\pi/L| = \frac{L}{a} = N$$

dengan N menyatakan banyaknya atom dalam kekisi

- Karena setiap level dapat menampung 2 elektron dengan spin berlawanan, maka maksimum banyaknya elektron yang dapat diampung suatu pita tunggal adalah $2N$

Model Elektron Hampir Bebas

- Untuk mendapatkan gambaran rinci dari sistem elektron yang bergerak dalam kristal, persamaan Schrödinger harus diselesaikan dalam potensial periodik $U(r)$ yang ditentukan
- Namun proses perhitungan akan sangat rumit, sehingga lebih disukai kajian di mana bentuk potensialnya disederhanakan
- Akan ditinjau ketika potensialnya sangat lemah sehingga seolah-olah elektron berperilaku seperti partikel bebas, pendekatan ini disebut sebagai *model elektron hampir bebas (nearly free electron/NFE)*

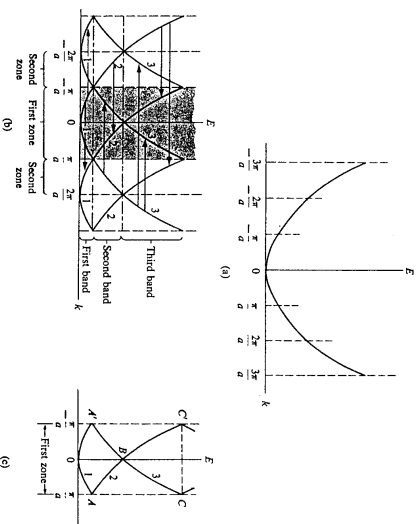
- Tahap awal dalam kajian model NFE adalah solusi persamaan Schrödinger untuk kasus di mana potensialnya tepat nol sehingga elektron bergerak bebas

- Namun juga disyaratkan bahwa solusinya memiliki sifat simetris

- Model ini juga disebut sebagai *model kekisi kosong* untuk model ini adalah:

$$\psi_k^{(0)} = \frac{1}{L^{1/2}} e^{ikx} \quad \text{dan} \quad E_k^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

di mana plot energi terhadap k menghasilkan kurva parabola



- Gambar (a) menyatakan relasi antara E dengan k untuk model kekisi kosong yang membentuk kurva parabola, biasa disebut dengan *skema zona diperluas (extended zone scheme)*
- Gambar (b) menyatakan sifat simetri: $E_n(\mathbf{k} + \mathbf{K}) = E_n(\mathbf{k})$ di mana segmen parabola ditranslasikan sebesar $\mathbf{K} = 2\pi/a$, disebut sebagai *skema zona periodik (periodic zone scheme)*
- Gambar (c) menyatakan spektrum energi yang dibatasi hanya pada zona Brillouin pertama saja, disebut dengan *skema zona tereduksi (reduced zone scheme)*

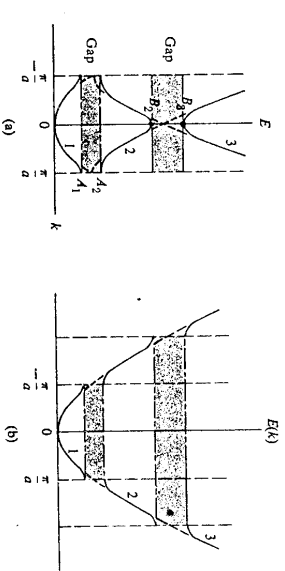
Bagaimana jika potensialnya ada, namun cukup lemah?

- Pita pertama dan kedua yang tadinya bersentuhan akan terpisah sehingga memunculkan gap energi pada batas zona Brillouin

- Pita kedua dengan ketiga yang pada model kekisi kosong saling memotong akan terpisah, begitu juga untuk pita ketiga dan keempat

- Secara umum, gap energi muncul di ruang- k jika pada model kekisi kosong pita energi saling berpotongan, baik di pusat maupun di batas zona Brillouin pertama

- Pada daerah lainnya, bentuk spektrum tetap berupa kurva parabola dan elektron tetap berperilaku seperti partikel bebas



Logam, Insulator, Semikonduktor

- Logam (konduktor) adalah bahan padat di mana ketika dikenai medan listrik akan memunculkan arus listrik, sementara pada insulator tidak akan muncul arus
- Suatu pita yang terisi penuh tidak akan membawa arus listrik meskipun dikenai medan listrik
- Maka suatu bahan bersifat logam jika terdapat pita energi yang terisi sebagian

Contoh: atom Na dengan $11e$ ($1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$)

- Pita $1s$, $2s$ dan $2p$ terisi penuh sehingga tidak berkontribusi pada arus
- Pita $3s$ merupakan pita paling atas yang ditempati (pita valensi) dan dapat menampung $2N$ elektron ($N =$ banyaknya sel satuan)
- Karena setiap sel satuan menyumbang 1 elektron valensi, maka pita $3s$ terisi separo dan Na bersifat logam

Kecepatan Elektron Bloch

- Elektron pada level ψ_k bergerak dalam kristal dengan kecepatan yang tergantung pada energi level tersebut
- Untuk partikel bebas, di mana kecepatan dinyatakan sebagai $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ dan karena $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$, maka $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m$ (kecepatan sebanding dengan vektor gelombang)
- Untuk elektron Bloch, kecepatan juga sebanding dengan \mathbf{k} namun menggunakan kecepatan grup paket gelombang: $\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})$

Dinamika Massa Efektif

- Ketika medan listrik dikenakan pada kristal, elektron Bloch mengalami percepatan. Misal pada kasus 1-D:

$$a = \frac{dv}{dt}$$

- Karena kecepatan adalah fungsi dari vektor gelombang, maka:

$$a = \frac{dv}{dk} \frac{dk}{dt}$$

Contoh: Intan (Karbon) dengan $6e$ ($1s^2 2s^2 2p^2$)

- Pita teratas berasal dari penggabungan level $2s$ dan $2p$ (sehingga memiliki 2 pita, $1s$ dan $2s+p$, terpisah oleh 1 gap energi)
- Karena pita valensi berasal dari level $s+p$ dan tiap sel satuan mengandung 2 atom, maka pita valensi intan mampu menampung $8N$ elektron
- Pada intan, setiap atom menyumbang 4 elektron sehingga diperoleh 8 elektron per sel satuan
- Maka pita valensi terisi penuh dan intan bersifat insulator

ω adalah frekuensi paket gelombang yang ditentukan oleh $\omega = E/\hbar$ dan \mathbf{k} adalah vektor gelombang paket gelombang, sehingga kecepatan elektron Bloch dituliskan sebagai:

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$$

yang menyatakan kecepatan elektron pada level \mathbf{k} sebanding dengan gradien energi dalam ruang- \mathbf{k} dan tidak harus sejajar vektor gelombang \mathbf{k}

- Untuk 1-D dapat dituliskan $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$

- dk/dt memberikan F_{ext}/\hbar dan $v = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial k}$ sehingga

$$a = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} F_{ext}$$

- Bentuk ini sama dengan hukum kedua Newton, dengan definisi massa efektif m^* yang berbentuk:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{d^2 E}{dk^2} \right)}$$

Massa Efektif?

- Nilai momentum elektron Bloch ditentukan dari $\mathbf{p} = \langle \psi_{\mathbf{k}} | \hbar \nabla | \psi_{\mathbf{k}} \rangle$

dengan $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\mathbf{k}}(\vec{r})$

- Karena $u_{\mathbf{k}}$ tidak konstan, maka $\hbar\mathbf{k}$ bukan menunjukkan momentumnya, namun disebut sebagai *momentum kristal* \mathbf{p}_c

- Ketika medan listrik dikenakan pada kristal, maka vektor gelombang akan bervariasi menurut:

$$\frac{d}{dt} (\hbar \mathbf{k}) = F_{ext}$$

- Terdapat bahan yang memiliki sifat di antara logam (konduktor) dan insulator yang disebut *semikonduktor*
- Semikonduktor memiliki gap energi yang sempit antara pita valensi terisi penuh dengan pita kosong di atasnya
- Elektron dapat tereksitasi secara termal ke pita di atasnya sehingga kedua pita menjadi terisi sebagian dan berkontribusi pada arus listrik
- Konduktivitas semikonduktor sangat kecil jika dibandingkan dengan logam, namun lebih besar dari insulator
- Contoh: Si ($14e$) dan Ge ($32e$) dengan gap energi hanya 1 eV dan $0,7 \text{ eV}$

- Karena di sekitar pusat zona elektron berperilaku seperti partikel bebas sehingga $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ dengan m^* adalah massa efektif, maka $\mathbf{v} = \hbar\mathbf{k}/m^*$
- Gambaran yang diperoleh: elektron Bloch berperilaku mirip dengan elektron bebas, yang membedakan hanya massanya
- Ketika elektron berada pada level $\psi_{\mathbf{k}}$, maka elektron tersebut akan tetap berada pada level itu selama kekisi tetap periodik
- Maka elektron tidak mengalami perubahan kecepatan meskipun menabrak titik kekisi (kecepatan elektron tetap konstan)

- Jika \mathbf{p}_c adalah momentum elektron, maka gaya di ruas kanan persamaan tidak hanya untuk gaya eksternal saja, namun gaya total termasuk gaya dari kekisi (yang ternyata tidak berpengaruh pada \mathbf{p}_c)

- Jika momentum elektron Bloch adalah $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, maka:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = F_{\text{tot}} = F_{\text{ext}} + F_{\text{kekisi}}$$

- Ruas kanan dapat diubah ke bentuk massa efektif:

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = m^* \frac{F_{\text{ext}}}{m}$$

- Maka:
$$m^* = m \frac{F_{\text{ext}}}{F_{\text{ext}} + F_{\text{kekisi}}}$$

sehingga ketika gaya kekisi lenyap (saat potensial periodik tidak muncul), elektron Bloch akan berlaku sebagai elektron bebas

Fisika Zat Padat

Getaran Kekisi

- Atom tidak diam, namun berosilasi di sekitar titik setimbangnya akibat adanya energi termal
- Getaran kekisi memberikan pengaruh pada sifat termal, optik dan akustik dari kristal
- Pada batas panjang gelombang yang panjang dari gelombang elastik, kristal dapat dilihat sebagai medium kontinyu
- Namun nantinya juga akan ditinjau sifat diskrit dari kekisi

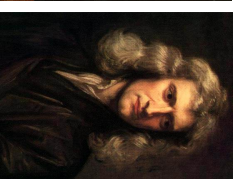
Gelombang Elastik

- Ketika panjang gelombangnya sangat panjang, struktur atom pada bahan dapat diabaikan dan bahan dapat ditinjau sebagai medium kontinyu
- Maka getaran kekisi dapat dilihat sebagai gelombang elastis
- Ditinjau perambatan gelombang elastik pada suatu batang logam yang panjang
- Misal gelombangnya longitudinal dan pergeseran elastik di titik x adalah $u(x)$

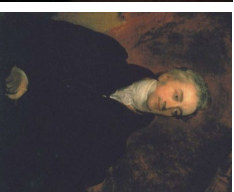
- *Strain* e (didefinisikan sebagai perubahan panjang per satuan panjang) dinyatakan sebagai $e = du/dx$
 - *Stress* S (didefinisikan sebagai gaya per satuan luas), menurut hukum Hooke, sebanding dengan *strain*:
 $S = Ye$
- dengan Y adalah tetapan elastik atau *modulus Young*



Robert Hooke
British Physicist
(1635 - 1705)



Isaac Newton
British Physicist
(1643 - 1727)



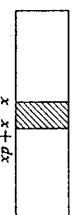
Thomas Young
British Physicist
(1773 - 1829)

Selanjutnya, ditinjau dinamika pada batang:

- Dipilih sembarang segmen dengan panjang dx
- Dari hukum Newton kedua, pergerakan segmen dinyatakan sebagai:

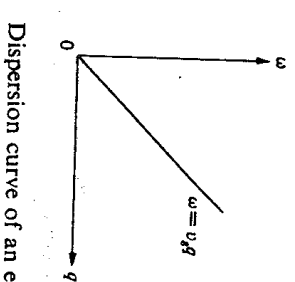
$$\left(\rho A' dx\right) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = [S(x+dx) - S(x)] A'$$

ρ adalah rapat massa, A' adalah luas tampang-lintang dari batang



- Untuk segmen yang sempit, dapat dituliskan $S(x+dx) - S(x) = \partial S/\partial x dx$
 - Dari definisi stress dan strain, diperoleh persamaan dinamik:
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{\rho}{Y} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$
- yang merupakan persamaan gelombang 1-D
- Dicoba solusi dalam bentuk gelombang bidang yang merambat:
$$u = A e^{i(kx - \omega t)}$$
- dengan A adalah amplitudo, k adalah vektor gelombang dan ω adalah frekuensi

- Maka diperoleh $\omega = v_s k$ dengan $v_s = \sqrt{Y/\rho}$ adalah kecepatan rambat gelombang pada batang, dan merupakan gelombang suara
- Hubungan antara ω dan k dikenal sebagai *dispersion relation* (hubungan dispersi)
- Jenis hubungan dispersi di mana ω berbanding linear dengan k dipenuhi juga oleh gelombang lainnya (gelombang optik, gelombang suara pada gas dan cairan)
- Penyimpangan dari hubungan linear ini disebut sebagai *dispersi*



Dispersion curve of an elastic wave.

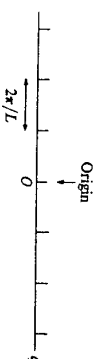
- Efek kediskritan kekisi adalah memunculkan dispersi pada kurva dispersi (→ ketika panjang gelombangnya lebih pendek dari jarak pisah antar atom)
- Analisis yang sama juga dapat diterapkan pada gelombang transversal (*shear*) yang memunculkan tetapan elastis shear yang analog dengan modulus Young
- Kedua tetapan elastik (Young's dan shear) dapat digunakan untuk menggambarkan perambatan gelombang elastik pada bahan

- Kajian tersebut berlandaskan pada asumsi bahwa bahan bersifat isotropik, sementara kristal sebenarnya bersifat anisotropik
- Efek anisotropi pada sifat elastik bahan adalah memunculkan tetapan elastik yang lebih dari dua (seperti yang dimiliki bahan isotropik)

Rapat Keadaan (*Density of States*) Medium Kontinyu

- Ditinjau gelombang elastik pada batang panjang dimana gelombang merambat dalam 1-D
- Solusinya adalah (bagian waktu diabaikan) :
 $u(x) = Ae^{ikx}$
- Jika jumlah ion sangat banyak, dapat diterapkan syarat batas periodik pada solusi gelombang elastik (→ ujung kanan batang selalu memiliki state osilasi yang sama dengan ujung kiri)
- Seolah-olah batang diubah ke bentuk lingkaran sehingga ujung kiri dan kanan bergabung

- Jika panjang batang adalah $L = Na$ (N adalah banyaknya ion, a adalah jarak antar atom), maka $u(x=0) = u(x=L)$
- Sehingga $e^{ikL} = 1$ yang dipenuhi ketika $k = n \frac{2\pi}{L}$ dengan $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$
- Jarak antar dua nilai k yang bersebelahan adalah $2\pi/L$

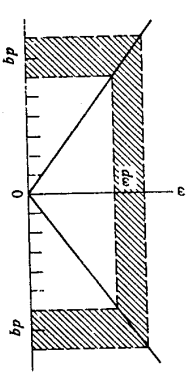


- Ketika L besar, jarak pisah menjadi kecil dan titik-titik membentuk garis kuasi-kontinyu
- Tiap nilai- k (tiap titik) mewakili sebuah mode getaran
- Misal dk adalah interval pada ruang- k , banyaknya mode yang nilai k -nya terletak pada interval ini adalah:
$$\frac{dq}{2\pi/L} = \frac{L}{2\pi} dk$$
- Namun k dan ω terkait melalui hubungan dispersi, sehingga banyaknya mode juga dapat ditentukan pada interval frekuensi $d\omega$ yang terletak antara ω dan $\omega+d\omega$

- **Rapat keadaan (*density of states*)** $g(\omega)$ didefinisikan sedemikian sehingga $g(\omega)d\omega$ memberikan banyaknya mode
- Maka $g(\omega)d\omega = (L/2\pi) dk$ atau $g(\omega) = (L/2\pi) / (d\omega/dk)$
- Karena daerah k negatif juga harus disertakan (mewakili gelombang yang berjalan ke kiri), $g(\omega)$ dikalikan dua, sehingga:

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{d\omega/dk}$$

- Karena $d\omega/dk = v_s$, maka
- $$g(\omega) = \frac{L}{\pi v_s}$$
- yang merupakan tetapan tak gayut ω



- Pada kasus 3-D, solusi gelombangnya adalah:

$$u = A e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} = A e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$$

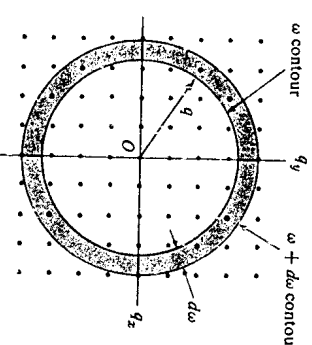
- Syarat batas periodik memberikan batasan (untuk sampel kubus yang rusuknya L):

$$e^{i(k_x L + k_y L + k_z L)} = 1$$

- Maka

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L}, \quad k_y = \frac{2\pi n_y}{L}, \quad k_z = \frac{2\pi n_z}{L}$$

n_x, n_y, n_z bilangan bulat



- Jika nilai-nilai ini diplot pada ruang-k, diperoleh jejaring kubus 3-D di mana volume yang ditempati setiap titik adalah $(2\pi L)^3$
- Setiap titik mewakili satu mode
- Maka banyaknya mode di dalam bola yang jejaringnya k (sehingga volumenya $4\pi k^3/3$):

$$\frac{4\pi k^3}{3} \left(\frac{L}{2\pi} \right)^3 = \frac{4\pi}{3} k^3 \frac{V}{(2\pi)^3}$$

dengan $V = L^3$ adalah volume sampel

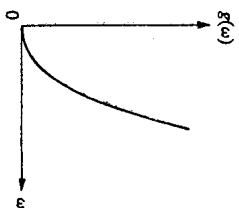
- Banyaknya mode (titik) pada rongga sferis antara jejari k dan $k + dk$ ditentukan dengan mendiferensialkan persamaan sebelumnya terhadap k yang memberikan:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk$$

- Dari definisi $g(\omega)$ dan hubungan dispersi diperoleh

$$g(\omega) d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{\omega}{v_s} \right)^2 \frac{d\omega}{v_s}$$

- Maka rapat keadaan untuk kasus 3-D adalah
- $$g(\omega) = \frac{V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}$$
- Pada kajian di atas, diasumsikan setiap nilai k memiliki mode tunggal
 - Namun untuk kasus 3-D, setiap nilai k memiliki 3 mode yang berbeda, satu longitudinal dan dua transversal
 - Hubungan dispersi untuk gelombang longitudinal dan transversal berbeda, karena memiliki kelajuan yang berbeda



Density of modes, or states, in an elastic medium

- Dengan mengabaikan perbedaan mode dan menganggap kelajuannya sama, maka rapat keadaan (*density of state*) totalnya adalah

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}$$

- Ketika panjang gelombang untuk mode nilainya cukup kecil dibandingkan dimensi sampel, fungsi rapat keadaan tidak bergantung pada pemilihan syarat batas

Kalor Jenis

- Kalor jenis per mol didefinisikan sebagai $c = \frac{\Delta Q}{\Delta T}$ dengan ΔQ adalah panas yang dibutuhkan untuk menaikkan suhu 1 mol sebesar ΔT
 - Jika proses dilakukan pada volume konstan, maka $\Delta Q = \Delta E$ dengan ΔE adalah kenaikan energi internal sistem:
- $$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)$$
- Menurut Hukum Dulong-Petit, pada suhu tinggi (termasuk suhu kamar), $c_v = 3R$ dengan R adalah tetapan gas = 8314 J/(kmol K)

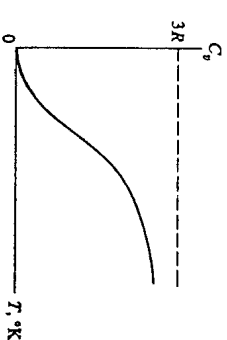


Pierre Louis Dulong
(1785 – 1838)
French Physicist & Chemist



Alexis Therese Petit
(1791 – 1820)
French Physicist

- Pada suhu rendah, ketika T turun, c_v juga berkurang dan lenyap pada suhu mutlak
- Dari eksperimen, di dekat suhu mutlak, c_v sebanding dengan T^3



Model Klasik

- Menurut teori klasik, atom terikat pada titik kekisi oleh adanya gaya harmonik
- Ketika bahan dipanaskan, atom bergerak di sekitar titik kekisi seperti osilator harmonik
- Energi internal rerata untuk osilator 1-D adalah $\epsilon = k_B T$
- Untuk kasus 3-D, maka $\epsilon = 3k_B T$
- Maka untuk 1 mol atom, $\epsilon = 3N_A k_B T = 3RT$ dengan N_A adalah bilangan Avogadro
- Dari definisi untuk c_v , diperoleh $c_v = 3R$
- Model klasik sesuai dengan Hukum Dulong-Petit, namun tidak cocok dengan hasil eksperimen pada suhu rendah



Albert Einstein
(1879 – 1955)
German-born Physicist



Peter Debye
(1884 – 1966)
Dutch Physicist

Model Einstein

- Dalam model ini, atom dianggap sebagai osilator bebas, dan energinya ditentukan lewat mekanika kuantum
- Energi sebuah osilator terisolasi secara kuantum bernilai $\epsilon = n\hbar\omega$ dengan $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ dan ω adalah frekuensi osilator
- Pada bahan, osilator tidak terisolasi, namun bertukar energi dengan reservoir panas dari bahan, sehingga selalu berubah

- Energi rerata dari osilator pada bahan adalah:

$$\bar{\epsilon} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \epsilon_n e^{-\epsilon_n/k_B T}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\epsilon_n/k_B T}}$$

$$\bar{\epsilon} = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

- Persamaan tersebut menghasilkan:

yang menunjukkan pada suhu tinggi $\epsilon \rightarrow k_B T$ sesuai kajian klasik, namun saat T berkurang, nilai ϵ berkurang hingga lenyap saat $T = 0$ K

- Dalam bahan, setiap atom mewakili 3 osilator, sehingga total terdapat $3N_A$ osilator, jadi energi totalnya:

$$\bar{\epsilon} = 3N_A \frac{\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1}$$

dengan ω_E adalah frekuensi Einstein

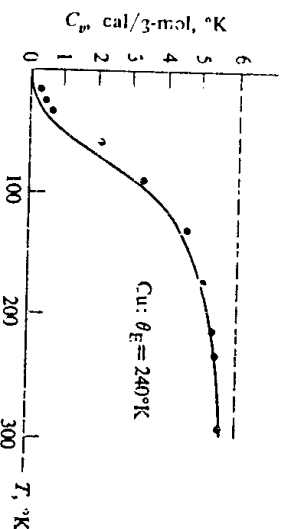
- Maka kalor jenisnya adalah:

$$c_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right) = 3R \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}$$

- Persamaan tersebut dapat disederhanakan melalui substitusi suhu Einstein θ_E dengan $k_B\theta_E = \hbar\omega_E$:

$$c_v = 3R \left(\frac{\theta_E}{T} \right)^2 \frac{e^{\theta_E/T}}{(e^{\theta_E/T} - 1)^2}$$

- suhu Einstein θ_E merupakan parameter yang dipilih untuk menghasilkan kurva yang mendekati hasil pengukuran pada interval suhu yang luas



Model Debye

- Atom pada model Einstein diasumsikan berosilasi bebas, sedangkan pada kenyataannya, atom-atom saling berinteraksi sehingga osilasi satu atom akan mempengaruhi atom lainnya
- Gerak yang ditinjau adalah gerak kekisi secara keseluruhan, bukan gerak atom secara individu, sehingga ditinjau mode kekisi kolektif
- Contoh umum dari mode kolektif ini adalah gelombang suara pada bahan

- Debye mengasumsikan bahwa mode kekisi menyerupai sifat gelombang suara yang memiliki relasi dispersi: $\omega = v_s k$
- Nilai ω pada model Einstein adalah tunggal, yaitu ω_E , sedangkan pada model Debye nilai ω bervariasi dari 0 hingga nilai ω maksimum
- Total energi getaran seluruh kekisi adalah:

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) g(\omega) d\omega$$
dengan $g(\omega)$ adalah rapat keadaan (*density of states*)

- Energi rerata dinyatakan oleh: $\bar{\epsilon} = \frac{\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1}$

- Namun bentuk integral tersebut harus memiliki batas integrasi, yaitu ujung bawah dan atas spektrum frekuensi
- Batas bawah spektrum frekuensi adalah $\omega = 0$ sedangkan batas atas ditentukan sedemikian sehingga banyaknya mode harus sama dengan banyaknya derajat kebebasan atom diseluruh bahan, yaitu $3N_A$

- Untuk menentukan banyaknya mode, digunakan DOS medium kontinu, karena Debye mengasumsikan bentuk relasi dispersi yang sama dengan gelombang suara pada bahan

$$g(\omega) = \frac{3V}{2\pi^2} \frac{\omega^2}{v_s^3}$$

- Maka frekuensi Debye yang merupakan frekuensi batas (*cut-off frequency*) pada getaran kekisi ini ditentukan melalui

$$\int_0^{\omega_D} g(\omega) d\omega = 3N_A$$

sehingga diperoleh: $\omega_D = v_s (6\pi^2 n)^{1/3}$ dengan $n = N_A/V$

- Energi total getaran kekisinya adalah:

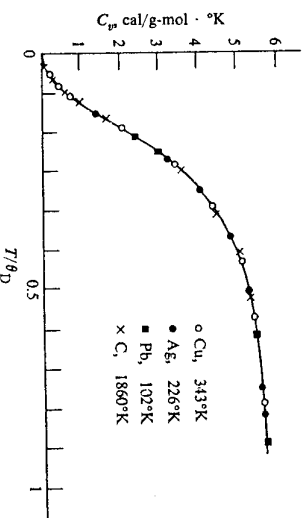
$$E = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar\omega^3}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1} d\omega$$

sehingga kalor jenisnya:

$$c_v = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \frac{\hbar^2}{k_B T^2} \int_0^{\omega_D} \frac{\omega^4 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} d\omega$$

untuk menyederhanakan, substitusikan $x = \hbar\omega/k_B T$ dan suhu Debye $\theta_D = \hbar\omega_D/k_B$ sehingga

$$c_v = 9R \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$$



- Nilai θ_D dipilih sedemikian sehingga memberikan kurva c_v yang mendekati hasil pengukuran

- Untuk suhu tinggi, $T \gg \theta_D$ sehingga $x_D \ll 1$ maka dengan pendekatan $e^x = 1 + x$ diperoleh $c_v = 3R$ yang sama dengan hukum Dulong-Perit
- Untuk suhu rendah, $T \ll \theta_D$ sehingga $x_D \rightarrow \infty$ maka diperoleh $c_v = 12/5 \pi^4 R (T/\theta_D)^3$ yang sesuai eksperimen bahwa $c_v \sim T^3$

Fisika Zat Padat

Fonon

- Dalam model Debye, energi setiap model terkuantisasi dengan satuan energi kuantumnya $\hbar\omega$
- Karena modernya adalah gelombang elastik, maka yang terkuantisasi adalah energi gelombang suara, dan quasi-partikel yang membawa kuantisasi energi ini disebut sebagai fonon yang berarti membawa energi sebesar $\hbar\omega$
- Fonon juga merepresentasikan gelombang berjalan dengan momentum $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$
- Maka gelombang suara elastik dapat dilihat sebagai aliran fonon yang bergerak dengan kecepatan suara dalam bahan

- Banyaknya fonon pada suatu mode pada suhu tertentu dinyatakan sebagai:

$$\bar{n} = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

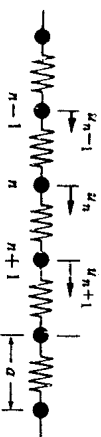
- yang bergantung pada suhu, dengan $n = 0$ saat $T = 0$ dan membesar ketika suhunya juga naik
- Maka fonon 'diciptakan' dengan menaikkan suhu bahan kristal dan cacahnya tidak tetap (berbeda dengan partikel biasa yang cacahnya selalu tetap)

Gelombang Kekisi

- Pada bahasan sebelumnya, diasumsikan bahan sebagai medium kontinyu dan mengabaikan kedisritian kekisi sehingga diperoleh relasi dispersi yang bersifat linear $\omega = v_s k \rightarrow$ cocok selama jarak antar atom lebih kecil dari panjang gelombang
- Pada bahasan berikutnya akan ditinjau sifat kedisritian kekisi (bahwa kekisi bahan terdiri atas atom-atom) dimana ketika panjang gelombangnya cukup pendek, atom mulai menghamburkan gelombang dan mengurangi kelajuan gelombang

Kekisi Monatomik 1-D

- Ditinjau kekisi monatomik 1-D dengan tetapan kekisi a



ketika kekisi bergetar setiap atom akan bergeser, dan karena berinteraksi dengan atom lainnya, harus ditinjau gerak dari seluruh kekisi

- Ditinjau atom ke- n : gaya yang bekerja pada atom ini diakibatkan oleh interaksi dengan atom ke- $(n+1)$ yaitu $-\alpha(U_{n+1} - U_n)$ dan U_n adalah pergeseran atom ke- n dan ke- $(n+1)$
- α adalah tetapan gaya antar atom; selisih $(U_{n+1} - U_n)$ merupakan perpindahan relatif \rightarrow asumsi bahwa gaya yang bekerja sebanding dengan perpindahan relatif disebut sebagai *pendekatan harmonik*
- Gaya akibat atom ke- $(n-1)$ juga sebesar $-\alpha(U_{n-1} - U_n)$

- Dengan hukum Newton kedua diperoleh:

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= -\alpha(u_{n+1} - u_n) - \alpha(u_{n-1} - u_n) \\ &= -\alpha(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}) \end{aligned}$$

dengan M adalah massa atom

- Dalam pendekatan harmonik ini, hanya ditinjau interaksi atom ke- n dengan atom tetangga terdekatnya saja dan mengabaikan interaksi dengan atom lainnya
- Gerak atom ke- n akan terkopel dengan atom ke $(n + 1)$ dan ke $(n - 1)$ begitu juga dengan atom lainnya sehingga diperoleh N persamaan differensial terkopel yang harus dicari solusinya

- Dicoba solusi dalam bentuk $u_n = Ae^{i(kn - \omega t)}$ dengan X_n adalah posisi setimbang atom ke- n , yaitu $X_n = na$

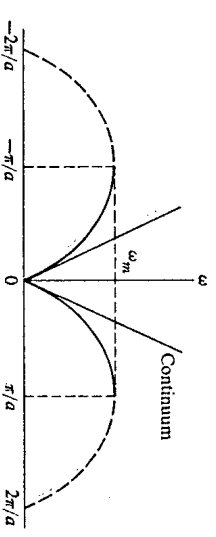
- Solusi tersebut merepresentasikan gelombang berjalan di mana atom-atom berosiiasi dengan frekuensi yang sama yaitu ω dan amplitudo yang sama yaitu A

- Dengan mensubstitusikan solusi ke persamaan gerak, diperoleh:

$$M(-\omega^2) e^{ikna} = -\alpha[2e^{ikna} - e^{i(k(n+1)a)} - e^{i(k(n-1)a)}]$$

Dihasilkan:

$$\omega = \omega_m |\sin(ka/2)| \quad \text{dengan} \quad \omega_m = \sqrt{4\alpha/M}$$



Kurva dispersi yang diperoleh juga berlaku untuk kekisi 2D dan 3D dan memiliki sifat:

- Frekuensi yang diperoleh berada pada jangkauan $0 < \omega < \omega_m$ dan hanya frekuensi dengan nilai ini yang diawatkan oleh kekisi, frekuensi lainnya dilemahkan \rightarrow low-pass filter
- Untuk panjang gelombang yang besar, $k \rightarrow 0$ sehingga

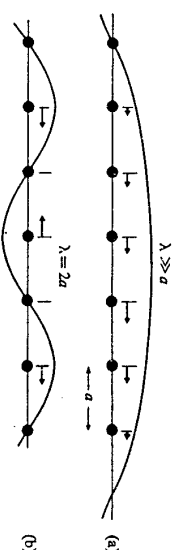
$$\omega = \left(\frac{\omega_m a}{2} \right) k$$

yang bersifat linear seperti pada medium kontinyu

- Kurva dispersi memiliki sifat simetri: periodik pada ruang- k yaitu pada interval $-\pi/a < k < \pi/a$ dan memiliki simetri cermin pada $k = 0$
- Interval $-\pi/a < k < \pi/a$ tidak lain merupakan zona Brillouin pertama sehingga kajian pada ruang- k dapat dibatasi hanya pada zona pertama saja
- Simetri cermin pada $k = 0$ menunjukkan bahwa $\omega(-k) = \omega(k)$ sehingga gelombang yang bergerak ke kanan maupun ke kiri akan memiliki sifat yang sama

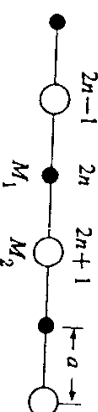
Banyaknya mode pada zona pertama

- Dari syarat batas periodik, akan diperoleh bahwa nilai k yang diijinkan adalah $k = n 2\pi/L$ dengan $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ dan jarak antar titik adalah $2\pi/L$
- Banyaknya titik pada zona pertama adalah $(2\pi/a)/(2\pi/L) = L/a = N$ dengan N adalah cacah total atom atau sel satuan pada kekisi



Kekisi Diatomik 1-D

- Ditinjau kekisi diatomik 1-D dimana setiap sel satuan terdiri atas 2 atom dengan massa M_1 dan M_2 serta jarak pisah antar atomnya adalah a



- Karena terdapat 2 atom, diperoleh 2 persamaan gerak yang terkopel

$$M_1 \frac{d^2 u_{2n+1}}{dt^2} = -\alpha (2u_{2n+1} - u_{2n} - u_{2n+2})$$

$$M_2 \frac{d^2 u_{2n+2}}{dt^2} = -\alpha (2u_{2n+2} - u_{2n+1} - u_{2n+3})$$

disini atom dengan massa M_1 diberi indeks ganjil dan atom bermassa M_2 diberi indeks genap

- Dari setiap sel, maka diperoleh 2N persamaan differensial terkopel yang harus dicari solusinya

- Dicoba solusi dalam bentuk:

$$\begin{bmatrix} u_{2n+1} \\ u_{2n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_1 e^{i(kx_{2n+1})} \\ A_2 e^{i(kx_{2n+2})} \end{bmatrix} e^{-i\omega t}$$

dengan A_1 adalah amplitudo atom bermassa M_1 dan A_2 adalah amplitudo atom bermassa M_2

- Substitusikan solusi ke persamaan gerak akan diperoleh:

$$\begin{bmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -2\alpha \cos(ka) \\ -2\alpha \cos(ka) & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = 0$$

- Karena persamaan homogen, maka solusi diperoleh jika determinannya nol:

$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -2\alpha \cos(ka) \\ -2\alpha \cos(ka) & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

yang merupakan persamaan kuadratik dalam ω^2 dengan solusi

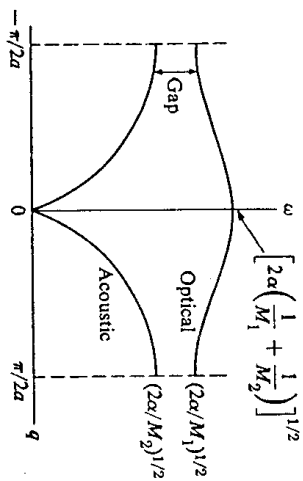
$$\omega^2 = \alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \sqrt{\left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2(ka)}{M_1 M_2}}$$

- Karena terdapat 2 tanda (+ dan -) maka terdapat 2 relasi dispersi atau cabang pada kekisi diatomik

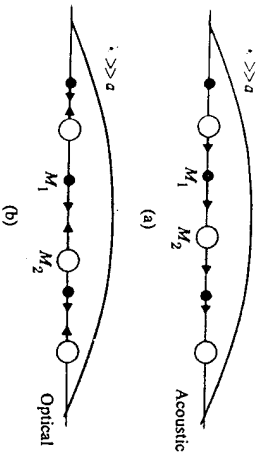
• Kurva yang di bawah, untuk tanda (-) merupakan cabang akustik sedangkan kurva yang di atas untuk tanda (+) menunjukkan cabang optik

- Cabang akustik dimulai dari titik $k = 0$ yang memberikan nilai $\omega = 0$ sedangkan cabang optik dimulai dari titik $k = 0$ yang memberikan nilai ω berhingga:

$$\omega = \left[2\alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \right]^{1/2}$$



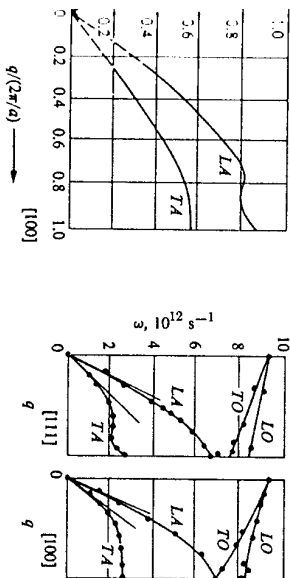
- Interval frekuensi antara bagian atas cabang akustik dengan bagian bawah cabang optik tidak diijinkan memiliki nilai sehingga kekesi tidak dapat melewati gelombang pada interval frekuensi ini karena mengalami atenuasi
- Maka kekesi diatomik berlaku sebagai *band-pass filter*



Kekesi 3-D

- Ditinjau kekesi Bravais monatomik, solusi umum dari persamaan getaran berbentuk:

$$\vec{u}_n = \vec{A} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}_n - \omega t)}$$
- Vektor A menentukan amplitudo dan arah getaran, sehingga menentukan polarisasi dari gelombang, yaitu apakah longitudinal (A sejajar k) atau transversal (A tegak lurus k)
- Substitusi u_n ke persamaan gerak akan diperoleh tiga persamaan untuk A_x, A_y dan A_z yang juga saling terkopel dan memberikan 3 relasi dispersi yang berbeda



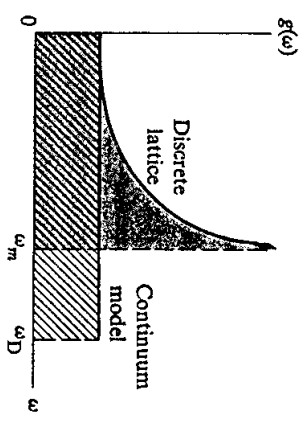
Rapat Keadaan (DOS) Foton

- Rapat keadaan didefinisikan sedemikian sehingga $g(\omega)d\omega$ memberikan banyaknya mode pada jangkauan frekuensi $(\omega, \omega+d\omega)$
- Pada kasus 1-D sebelumnya, telah diperoleh:

$$g(\omega) = \frac{L}{\pi} \frac{1}{d\omega/dk}$$

- Berdasarkan bentuk relasi dispersi pada kekesi diskrit, maka diperoleh bentuk rapat keadaan:

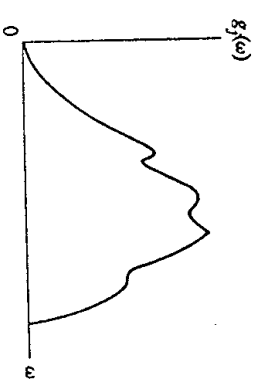
$$g(\omega) = \frac{2L}{\pi a \omega_m \cos(ka/2)}$$



DOS Kekesi 1-D

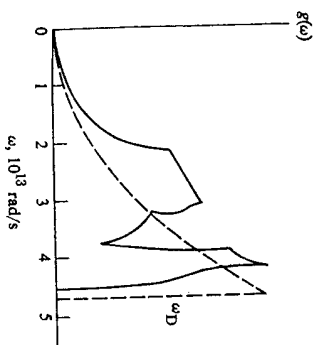
- Area di bawah kurva DOS menunjukkan banyaknya mode yaitu N
- Untuk menentukan $g(\omega)$ kekesi 3-D digunakan cara yang sama seperti sebelumnya: untuk cabang ke-j, plot kontur frekuensi $\omega_j(k) = \omega$ dan $\omega_j(k) = \omega + d\omega$ dan hitung banyaknya mode yang dibatasi permukaan kontur; nilai ini merupakan nilai $g(\omega)d\omega$ yang menentukan $g(\omega)$
- DOS total ditentukan dari jumlahan DOS untuk setiap cabang

$$g(\omega) = \sum_j g_j(\omega)$$



DOS Untuk Suatu Cabang Mode

DOS Total Untuk Cu



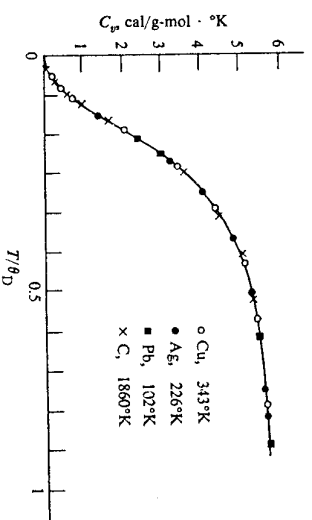
Kalor Jenis

- Setelah mendapatkan nilai $g(\omega)$, dapat ditentukan nilai kalor jenis dari suatu kekisi 3D
- Bentuk umum dari energi kekisi termal:

$$E = \int \bar{\epsilon}(\omega) g(\omega) d\omega$$
 dan bentuk kalor jenis diperoleh dengan mendiferensialkan bentuk energi terhadap suhu sehingga diperoleh:

$$C_v = k_B \int \left(\frac{\hbar \omega}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar \omega / k_B T}}{(e^{\hbar \omega / k_B T} - 1)^2} g(\omega) d\omega$$

Grafik Kalor Jenis



Fisika Zat Padat

Semikonduktor

- Semikonduktor menjadi bahan yang banyak digunakan dalam teknologi setelah penemuan transistor oleh Shockley, Bardeen dan Brattain
- Semikonduktor terbagi dalam beberapa kelas:
 - Grup IV: C, Si, Ge dan α -Sn yang semuanya memiliki kekisi intan dan ikatan kovalen
 - Grup III-V: terdiri atas 2 unsur dari unsur gol. III dan gol. V, contoh: GaAs dan InSb; memiliki struktur zincblende dan ikatan kovalen namun tidak simetris sehingga bersifat polar
 - Grup II-IV: CdS dan ZnS yang memiliki struktur zincblende, dan sifat polar yang lebih kuat

Struktur Pita pada Semikonduktor

- Semikonduktor memiliki pita valensi terisi penuh pada $T = 0$ K (bersifat insulator)
- Gap (celah) energi di atas pita valensi cukup sempit
- Pada suhu kamar, elektron dapat tereksitasi ke pita di atas pita valensi yang disebut sebagai pita konduksi \rightarrow pada logam konduktor, pita valensi = pita konduksi, namun pada semikonduktor pita valensi \neq pita konduksi

- Jika gap energi bernilai kurang dari 2 eV, pada suhu kamar elektron yang tereksitasi cukup banyak \rightarrow semikonduktor
- Jika gap energi lebih dari 2 eV, pada suhu kamar elektron yang tereksitasi sangat sedikit dan dapat diabaikan \rightarrow insulator
- Ketika elektron tereksitasi ke pita konduksi, bagian bawah pita konduksi (PK) terisi oleh elektron, bagian atas pita valensi (PV) terisi hole
- Maka PV dan PK terisi sebagian dan membawa arus ketika dikenai medan listrik

Parameters for Band Structure of Semiconductors (Room Temperature)

Crystal	E_g , eV	Electrons Effective mass, m_e/m_0	Holes Effective mass, m_h/m_0
C	5.3		
Si	1.1	$m_e = 0.97, m_h = 0.19$	0.5, 0.16
Ge	0.7	$m_e = 1.6, m_h = 0.08$	0.3, 0.04
α -Sn	0.08		
GaAs	1.4	0.07	0.09
GaP	2.3	0.12	0.50
GaSb	0.7	0.20	0.39
InAs	0.4	0.03	0.02
InP	1.3	0.07	0.69
InSb	0.2	0.01	0.18
CdS	2.6	0.21	0.80
CdSe	1.7	0.13	0.45
CdTe	1.5	0.14	0.37
ZnS	3.6	0.40	5.41
ZnSe	2.7	0.10	0.60
ZnTe	2.3	0.10	0.60
PbSe	0.4	0.25	0.25
PbS	0.3	0.33	0.34
PbTe	0.3	0.22	0.29

- Konduktivitas semikonduktor masih lebih kecil jika dibandingkan dengan logam yang memiliki jumlah elektron sedikit
- Pita lebih rendah dari PV terisi penuh, begitu juga pita di atas PK tidak terisi, sehingga hanya PV dan PK yang perlu ditinjau dalam kajian konduktivitas semikonduktor

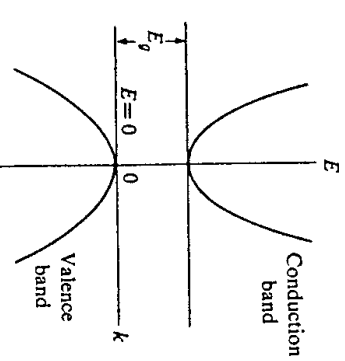
- Jika level energi nol dipilih pada bagian atas PV, maka energi dari PK dinyatakan sebagai:

$$E_c(\vec{k}) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e^*}$$

- Pada PV, energinya dinyatakan sebagai:

$$E_v(\vec{k}) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2 m_h^*}$$

- m_e^* = massa efektif elektron; E_g = gap energi; m_h^* = massa efektif hole

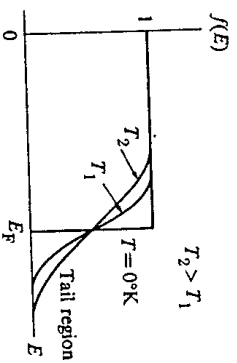


Konsentrasi Pembawa (Carrier)

- Dalam kajian semikonduktor, elektron dan hole disebut sebagai **carrier**, karena partikel inilah yang membawa arus listrik
- Banyaknya carrier menentukan besarnya konduktivitas listrik bahan semikonduktor
- Pada suhu T , peluang level energi E ditempati sebuah elektron memenuhi distribusi Fermi-Dirac:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-E_f)/k_B T} + 1}$$

- Tingkat keterisian (occupation) untuk level energi tinggi semakin meningkat dengan semakin naiknya suhu
- $f(E) = \frac{1}{2}$ saat $E = E_F$



- Pada suhu di atas nol, $(E - E_F) \gg k_B T$ sehingga angka 1 pada penyebut dapat diabaikan sehingga:

$$f(E) = e^{-E/k_B T} e^{-E/k_B T}$$

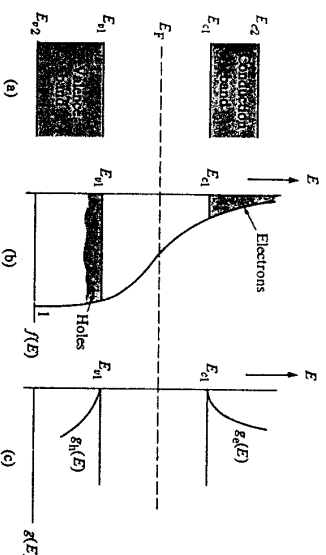
yang tidak lain merupakan distribusi klasik Maxwell-Boltzmann

- Banyaknya elektron pada interval energi dE dinyatakan sebagai $g_e(E)dE$ dengan $g_e(E)$ adalah DOS elektron

- Karena tiap state memiliki peluang ditempati elektron sebesar $f(E)$, maka banyaknya elektron pada interval energi dE adalah $f(E)g_e(E)dE$
- Jadi konsentrasi elektron pada PK adalah

$$n = \int_{E_{c1}}^{E_{c2}} f(E) g_e(E) dE$$

dengan E_{c1} dan E_{c2} berturut-turut menyatakan level bawah dan level atas pita



- Karena DOS untuk elektron konduksi adalah
- $$g_e(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} E^{1/2}$$
- lihat model Sommerfeld

- Maka DOS untuk PK dinyatakan sebagai
- $$g_e(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_g)^{1/2}$$
- dimana $g_e(E)$ lenyap pada $E < E_g$

- Maka:

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_g}^{\infty} e^{-E/k_B T} e^{-E/k_B T} \int_{E_g}^{\infty} (E - E_g)^{1/2} e^{-(E - E_g)/k_B T} dE$$

- Dengan substitusi $x = (E - E_g)/k_B T$ dan nilai

$$\int_0^{\infty} x^{1/2} e^{-x} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

diperoleh:

$$n = 2 \left(\frac{m_e k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-E_g/k_B T} e^{-E_g/k_B T}$$

dengan nilai E_F yang belum diketahui

- Konsentrasi hole juga dapat dihitung dengan cara serupa
- Peluang suatu hole menempati level E di PV adalah $1 - f(E)$ karena $f(E)$ adalah peluang keterisian elektron sehingga

$$f_h = 1 - f(E)$$

- Maka

$$f_h = 1 - \frac{1}{e^{-(E - E_F)/k_B T} + 1} = \frac{1}{e^{(E - E_F)/k_B T} + 1} \approx e^{-E/k_B T} e^{E_F/k_B T}$$

karena $(E_F - E) \gg k_B T$

- DOS untuk hole adalah:

$$g_h(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_h}{\hbar^2} \right)^{3/2} (-E)^{1/2}$$

- Maka konsentrasi hole dinyatakan oleh:

$$p = \int_{-\infty}^0 f_h(E) g_h(E) dE$$

yang memberikan

$$p = 2 \left(\frac{m_h k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} e^{-E_F/k_B T}$$

- Karena elektron pada PK berasal dari PV akibat eksitasi melewati celah energi, maka banyaknya elektron konduksi sama dengan banyaknya hole ($n = p$)

- Maka diperoleh

$$E_F = \frac{1}{2} E_g + \frac{3}{4} k_B T \ln \left(\frac{m_h}{m_e} \right)$$

- Substitusi nilai ini ke persamaan konsentrasi elektron menghasilkan:

$$n = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T}$$

- Persamaan tersebut menunjukkan bahwa n meningkat pesat dengan naiknya suhu (bertambah secara eksponensial) sehingga dengan meningkatnya suhu, semakin banyak elektron yang tereksitasi melintasi gap energi
- Untuk nilai $E_g = 1 \text{ eV}$, $m_e = m_h = m_0$ dan $T = 300 \text{ K}$ diperoleh $n = 10^{15} \text{ elektron/cm}^3$
- Jika dimiliki konsentrasi elektron sama dengan konsentrasi hole, maka disebut *semikonduktor intrinsik*
- Jika bahan mengandung impuritas yang menyumbang cacah carrier, maka disebut *semikonduktor ekstrinsik*

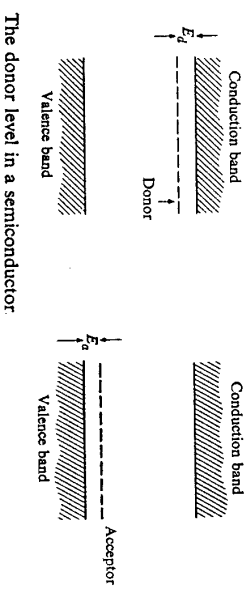
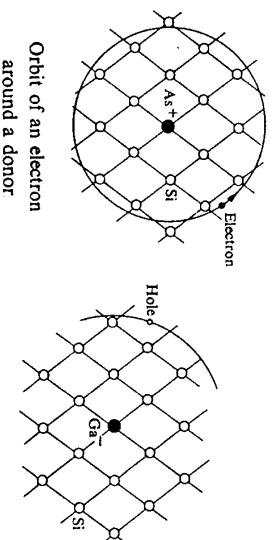
Impuritas

- Semikonduktor murni mengandung dua tipe carrier, elektron dan hole yang banyaknya sama
- Dalam prakteknya, dibutuhkan semikonduktor yang hanya mengandung 1 jenis carrier saja (elektron saja atau hole saja) dan diperoleh dengan cara doping impuritas pada bahan semikonduktor

- Contoh: Si yang didoping As
- Si dapat membuat 4 ikatan kovalen, sedangkan As dapat membuat 5 ikatan kovalen, maka tersisa 1 elektron ketika Si dan As membentuk 4 ikatan kovalen
- 1 elektron yang tersisa dari As akan masuk ke PK tanpa memunculkan hole pada PV sehingga pengotor As disebut sebagai *donor* karena menyumbang elektron pada PK
- Level donor berada di dalam gap energi, tepat di bawah PK, sehingga pada suhu kamar hampir seluruh elektron donor akan tereksitasi ke PK

- Contoh: Si yang didoping Ga
- Si dapat membuat 4 ikatan kovalen sedangkan Ga hanya dapat membuat 3 ikatan kovalen menyisakan 1 elektron dari Si yang tidak berpasangan
- 1 elektron Si yang tidak berpasangan dapat membentuk ikatan jika terdapat 1 elektron yang dipindah dari ikatan yang lain, yang tentunya akan memunculkan hole pada ikatan tersebut maka Ga disebut sebagai *aseptor* karena menerima tambahan elektron untuk dapat membentuk ikatan

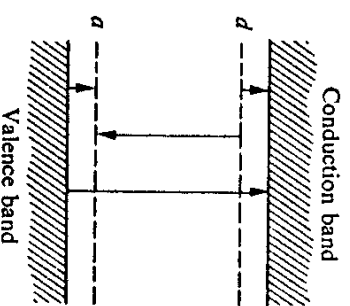
- Level energi hole berada tepat di atas ujung atas PV yang menggambarkan hole yang ditangkap oleh aseptor
- Ketika aseptor terionisasi (elektron tereksitasi dari bagian atas PV mengisi hole di level aseptor), hole tersebut jatuh ke bagian atas PV dan menjadi carrier bebas



The donor level in a semiconductor

Statistik Semikonduktor

- Semikonduktor umumnya mengandung donor dan aseptor
- Elektron pada PK dapat diciptakan melalui eksitasi termal antar pita atau ionisasi termal oleh donor
- Hole pada PV dapat diciptakan melalui eksitasi antar pita atau eksitasi termal elektron dari PV ke level aseptor
- Elektron dapat jatuh dari level donor ke level aseptor



Daerah Intrinsik

- Konsentrasi carrier pada daerah intrinsik ditentukan oleh transisi termal antar pita, maka $n = p$
- Sehingga konsentrasi carrier dinyatakan oleh:

$$n = p = n_i = 2 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2} (m_e m_h)^{3/4} e^{-E_g/2k_B T}$$
- Daerah intrinsik diperoleh ketika doping impuritas cukup kecil

Daerah Ekstrinsik

- Pada daerah ekstrinsik, kontribusi impuritas melebihi carrier yang disumbang oleh eksitasi antar pita
- Terdapat 2 kasus: ketika konsentrasi donor melebihi konsentrasi aseptor ($N_d \gg N_a$)
- Karena energi ionisasi donor cukup kecil, seluruh donor terionisasi dan masuk ke PK
- Maka $n = N_d$
- Dalam kasus ini konsentrasi hole cukup kecil

- Perkalian antara n dengan p tidak tergantung pada E_F

$$np = 4 \left(\frac{k_B T}{2\pi \hbar^2} \right)^3 (m_e m_h)^{3/2} e^{-E_g/k_B T}$$

- Sisi kanan persamaan di atas juga menyatakan n_i^2 , sehingga $np = n_i^2$
- Maka jika tidak ada perubahan suhu, perkalian np tidak bergantung pada doping, dan ketika konsentrasi elektron meningkat konsentrasi hole berkurang

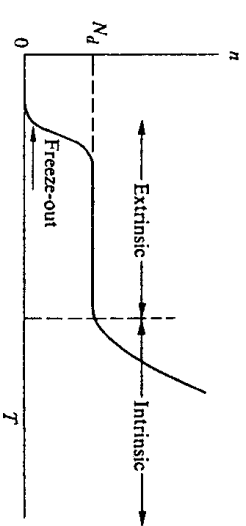
- Ketika doping mayoritas bertipe donor $n \sim N_d$, maka konsentrasi hole adalah

$$p = \frac{n_i^2}{N_d}$$

- Karena berada pada daerah ekstrinsik, $n_i \ll N_D$ sehingga $p \ll N_D = n$ yang menyatakan konsentrasi elektron jauh lebih besar dari hole
- Maka semikonduktor dengan $n \gg p$ disebut **semikonduktor tipe-n**

- Tipe lain daerah ekstrinsik terjadi ketika $N_a \gg N_D$ yaitu ketika doping mayoritas adalah aseptor
- Dengan analisis yang sama, maka $p \sim N_a$ yaitu seluruh aseptor terionisasi
- Konsentrasi elektron yang sangat kecil diberikan oleh $n = \frac{n_i^2}{N_a}$
- Bahan ini disebut sebagai **semikonduktor tipe-p**

- Kajian semikonduktor tipe n dan p tersebut menggunakan asumsi bahwa suhu cukup tinggi sehingga seluruh donor dan aseptor terionisasi (cocok pada suhu kamar)
- Namun jika suhunya diturunkan sehingga energi termalnya terlalu kecil untuk mengeksitasi elektron, maka elektron akan jatuh dari PK ke level donor dan konduktivitas bahan menurun cepat \rightarrow disebut sebagai **pembekuan** (elektron "membeku" di tempat impuritas)



Variasi Konsentrasi Elektron Terhadap Suhu Pada Semikonduktor Tipe n