

# PITA ENERGI

Rita Prasetyowati  
Fisika FMIPA UNY  
2012

syarat terjadinya difraksi Bragg adalah :

$$(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 = k^2.$$

Dalam 1 D :

$$k^2 + 2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{G} + G^2 = k^2.$$

Untuk kristal satu dimensi,  $\mathbf{k}$  berimpit dengan  $\mathbf{G}$ ,  
sehingga  $2 \mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = 2 k G \cos 0 = 2 k G$

Sehingga :  $k^2 + 2 k G + G^2 = k^2$

$$\rightarrow k = \pm \frac{1}{2} G$$

$G = n (2\pi/a)$  adalah vektor kisi resiprok dan  $n$  adalah bilangan bulat.

$$\text{Jadi : } k = \pm \frac{1}{2} G = \pm n \pi/a ,$$

Difraksi pertama dan celah energi pertama terjadi untuk nilai  $k = \pm \pi/a$ .

Celah energi-celah energi yang lainnya terjadi untuk nilai-nilai  $k$  yang merupakan kelipatan dari  $\pm \pi/a$

Fungsi gelombang di  $k = \pm \pi/a$  bukan merupakan gelombang berjalan  $e^{\pm i\pi x/a}$  dari elektron bebas, tetapi fungsi gelombang di titik  $k = \pm \pi/a$  adalah gabungan antara gelombang yang berjalan ke kanan dan ke kiri.

Fungsi gelombang di titik  $k = \pm \pi/a$  merupakan fungsi gelombang hasil interferensi antara gelombang yang berjalan ke kanan dan ke kiri.

Hal ini dapat terjadi jika syarat difraksi Bragg terpenuhi oleh fungsi gelombang  $k$ .

→ fungsi gelombang di titik  $k = \pm \pi/a$  merupakan **gelombang berdiri**

Secara matematik, kedua fungsi gelombang berdiri tersebut dapat dibentuk dari fungsi gelombang yang berjalan ke kanan dan ke kiri :

$$\psi(+)=\exp(i\pi x/a)+\exp(-i\pi x/a)=2\cos(\pi x/a)$$

dan

$$\psi(-)=\exp(i\pi x/a)-\exp(-i\pi x/a)=2i\sin(\pi x/a)$$

*Kedua fungsi gelombang  $\psi(+)$  dan  $\psi(-)$  menumpukkan elektron di dua tempat yang berbeda, dan karena itu, kedua kelompok elektron itu memiliki nilai energi potensial yang berbeda*

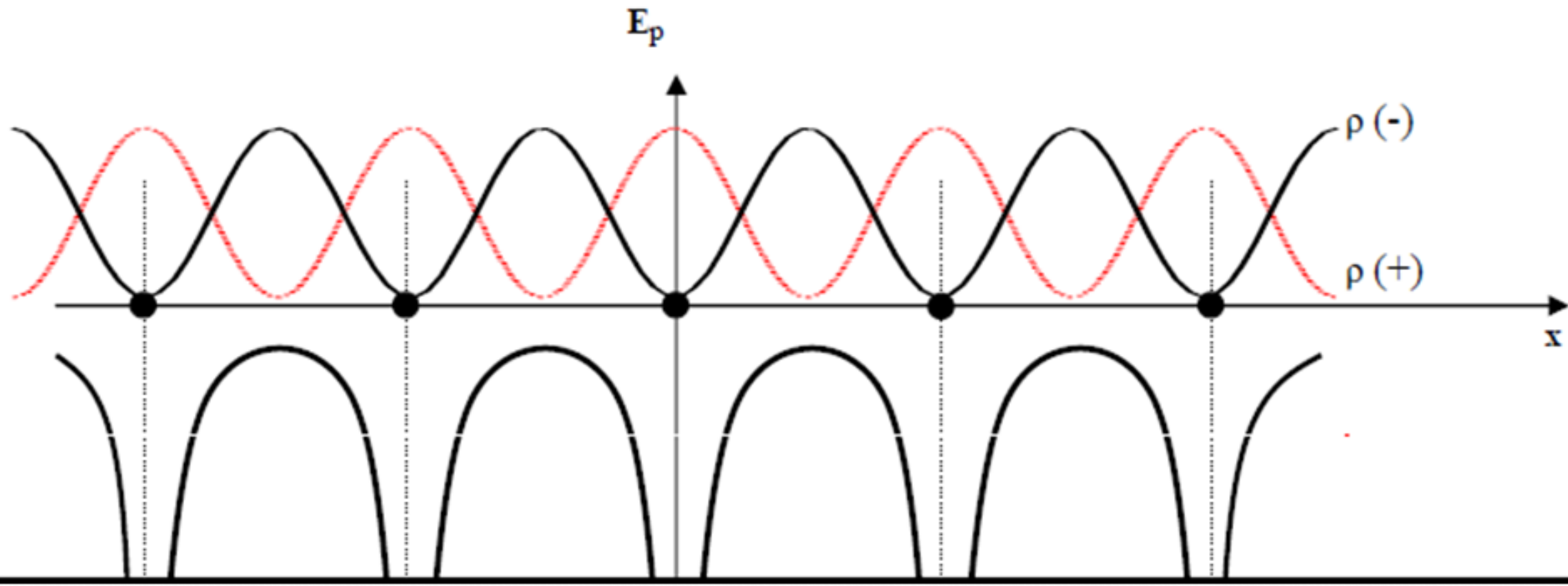
Rapat peluang ( $\rho$ ) atau dalam hal ini sama dengan rapat muatan untuk kedua gelombang berdiri di atas adalah :

$$\rho(+)=\psi^{*}(+)\psi(+)=|\psi(+)|^2=4\cos^2\pi x/a$$

$$\rho(-)=\psi^{*}(-)\psi(-)=|\psi(-)|^2=4\sin^2\pi x/a$$

Persamaan  $\rho(+)$  akan menumpukkan elektron (muatan-muatan negatif) di atas ion-ion positif (di atas badan atom) yang dipusatkan di titik-titik  $x=0, \pm a, \pm 2a, \pm 3a, \text{dst}$   $\rightarrow$  Energi potensial rendah

Persamaan  $\rho(-)$  akan menumpukkan elektron-elektron tersebut di tengah-tengah antara ion-ion positif tersebut  $\rightarrow$  Energi potensial tinggi



Rapat peluang (rapat muatan)  $\rho(+)$  dan  $\rho(-)$  di sekitar inti atom dalam sebuah kristal satu dimensi

Fungsi gelombang di titik A tepat di bawah celah energi adalah  $\psi(+)$  sedangkan di titik B tepat di atas celah energi adalah  $\psi(-)$ .

Tepat pada batas daerah Brillouin pertama, yaitu di  $k = \pm \pi/a$  kedua fungsi gelombang  $\psi(+)$  dan  $\psi(-)$  dinormalisasi, masing masing adalah  $\sqrt{2} \cos \pi x/a$  dan  $\sqrt{2} \sin \pi x/a$



# Bagaimana cara menghitung nilai $E_g$ ?

Misalkan energi potensial sebuah elektron di titik  $x$  dalam kristal :

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

Cara menentukan nilai energi celah,  $E_g$  (yaitu perbedaan energi potensial antara kedua kelompok elektron) :

$$E_g = \int_0^1 dx U(x) \{|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2\}$$

Energi celah tsb merupakan hasil interaksi antara fungsi gelombang elektron konduksi dengan badan atom (core) dalam kristal  
→ kita tentukan fungsi gelombang elektron dalam kristal yang periodik

# 1. Teorema Bloch

Persamaan Schrodinger untuk elektron yang bergerak dalam energi potensial yang nilainya tetap ( $V_0$ ) dan satu dimensi :

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = 0.$$

solusi untuk persamaan tersebut berupa gelombang bidang (datar) yang berbentuk :

$$\psi(x) = e^{\pm ikx}$$

Dimana  $(E - V_0) = \hbar^2 k^2 / 2m$  = energi kinetik

# Mengapa dipelajari teori pita energi?

Teori elektron bebas tidak bisa menjelaskan :

- mengapa beberapa logam dengan jumlah elektron bebas yang banyak dapat bersifat sebagai konduktor, sedangkan logam-logam dengan jumlah elektron konduksi sedikit akan bersifat sebagai isolator
- perubahan resistivitas konduktor oleh adanya perubahan suhu, dan sifat-sifat semikonduktor.

Elektron yang bergerak dalam energi potensial periodik satu dimensi, persamaan Schrodinger-nya adalah :

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x)) \psi(x) = 0$$

Energi potensial  $V(x)$  ini periodik dengan perioda sama dengan konstanta kisi ( $a$ ).

$$V(x) = V(x + a)$$

Solusi untuk persamaan Schrodinger di atas diatur oleh sebuah teorema, yaitu ***teorema Bloch***

Berdasarkan teorema tsb, solusi untuk persamaan Schrodinger di atas adalah sama dengan gelombang-gelombang datar yang dimodulasi oleh sebuah fungsi  $u_k(x)$  yang memiliki perioda yang sama dengan konstanta kisi ( $a$ ).

Jadi menurut teorema tersebut, solusi yang cocok untuk persamaan tsb adalah :

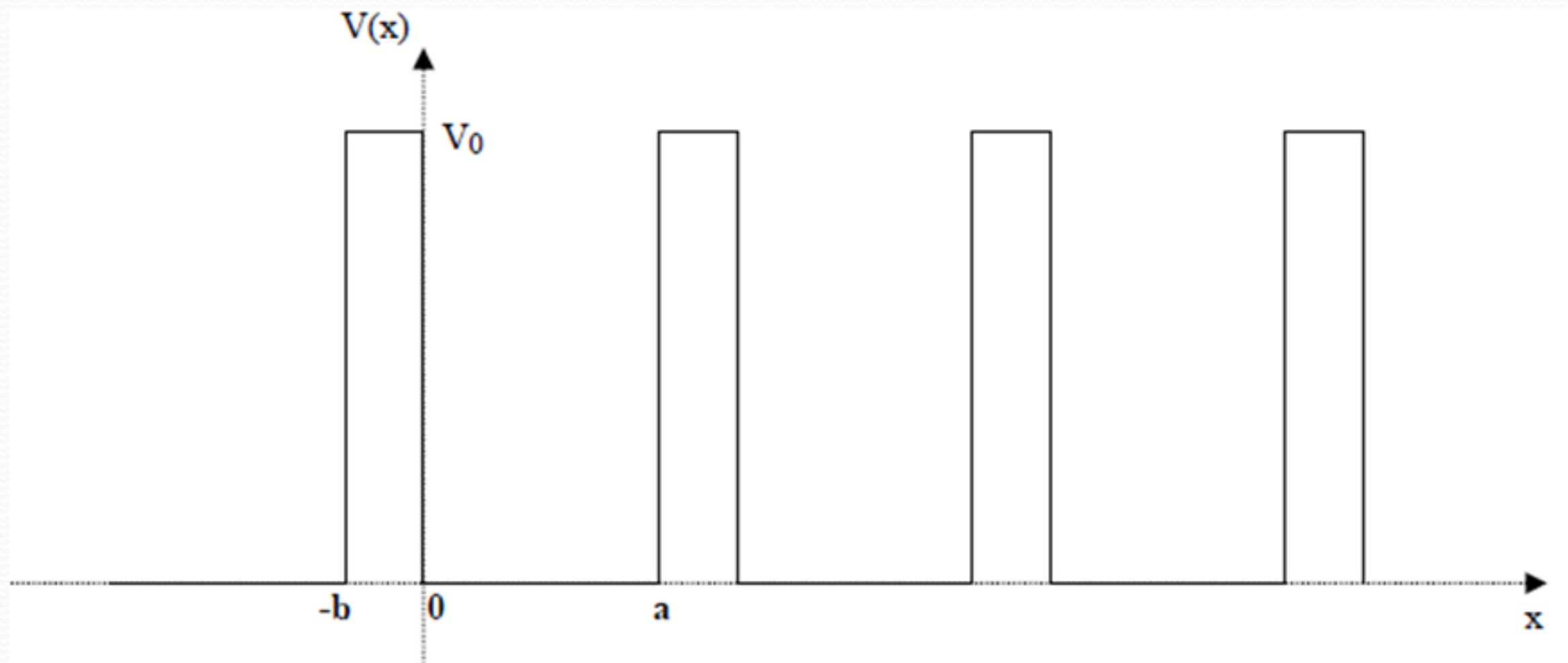
$$\psi(x) = e^{\pm ikx} u_k(x) \rightarrow \text{fungsi Bloch}$$

Dimana  $u_k(x) = u_k(x + a)$ .

Fungsi Bloch digunakan untuk menghitung nilai energi celah dengan menggunakan persamaan sentral.

## 2. Model Kronig-Penney

Model ini menjelaskan tingkah laku elektron dalam sebuah energi potensial yang periodik, dengan menganggap energi potensial periodik itu merupakan deretan sumur energi potensial persegi.



Gambar. Energi potensial periodik satu dimensi yang digunakan oleh Kronig dan Penney.

Energi potensial dari sebuah elektron dalam sebuah susunan inti-inti atom yang positif dianggap berbentuk seperti sebuah susunan sumur potensial periodik dengan perioda  $a + b$ .

Di dasar sumur, yaitu untuk  $0 < x < a$ , elektron dianggap berada di sekitar sebuah inti atom (atau diantara dua inti atom), dan energi potensialnya dianggap nol  $\rightarrow$  di daerah ini elektron bertingkah sebagai elektron bebas.

Di luar sumur, yaitu untuk  $-b < x < 0$ , energi potensial elektron dianggap sama dengan  $V_0$ .



Fungsi-fungsi gelombang elektron diperoleh dari persamaan Schrodinger untuk kedua daerah (yaitu daerah  $0 < x < a$ , dan daerah  $-b < x < 0$ ) :

a. untuk  $0 < x < a$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \quad (\text{untuk elektron bebas, } V_0 = 0)$$

b. untuk  $-b < x < 0$ .

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = 0$$

misalkan bahwa energi elektron lebih kecil dari pada  $V_0$ , dan kita definisikan dua besaran real  $\alpha$  dan  $\beta$  :

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

$$\beta^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

Sehingga :

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi(x) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \alpha^2 \psi(x) = 0 \quad (*)$$

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(x) = 0 \quad \rightarrow \quad \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} - \beta^2 \psi(x) = 0 \quad (*)$$

Energi potensial dari model Kronig-Penney itu adalah periodik, maka fungsi-fungsi gelombang tersebut haruslah berbentuk fungsi Bloch :

$$\psi(x) = e^{\pm ikx} u_k(x) \quad \rightarrow \text{dicari turunan ke-2}$$

terhadap  $x$  kemudian dimasukkan ke dalam dua persamaan sebelumnya (\*).

$$u_k(x) = u_k(x + (a + b))$$

$u_k(x)$  adalah sebuah fungsi periodik dalam  $x$  dengan perioda  $a + b$ ,

Persamaan determinan yang dapat digunakan untuk menentukan fungsi gelombang adalah :

$$\frac{\alpha^2 + \beta^2}{2\alpha\beta} \sinh(\beta b) \sin(\alpha a) + \cosh(\beta b) \cos(\alpha a) = \cos k(a + b)$$

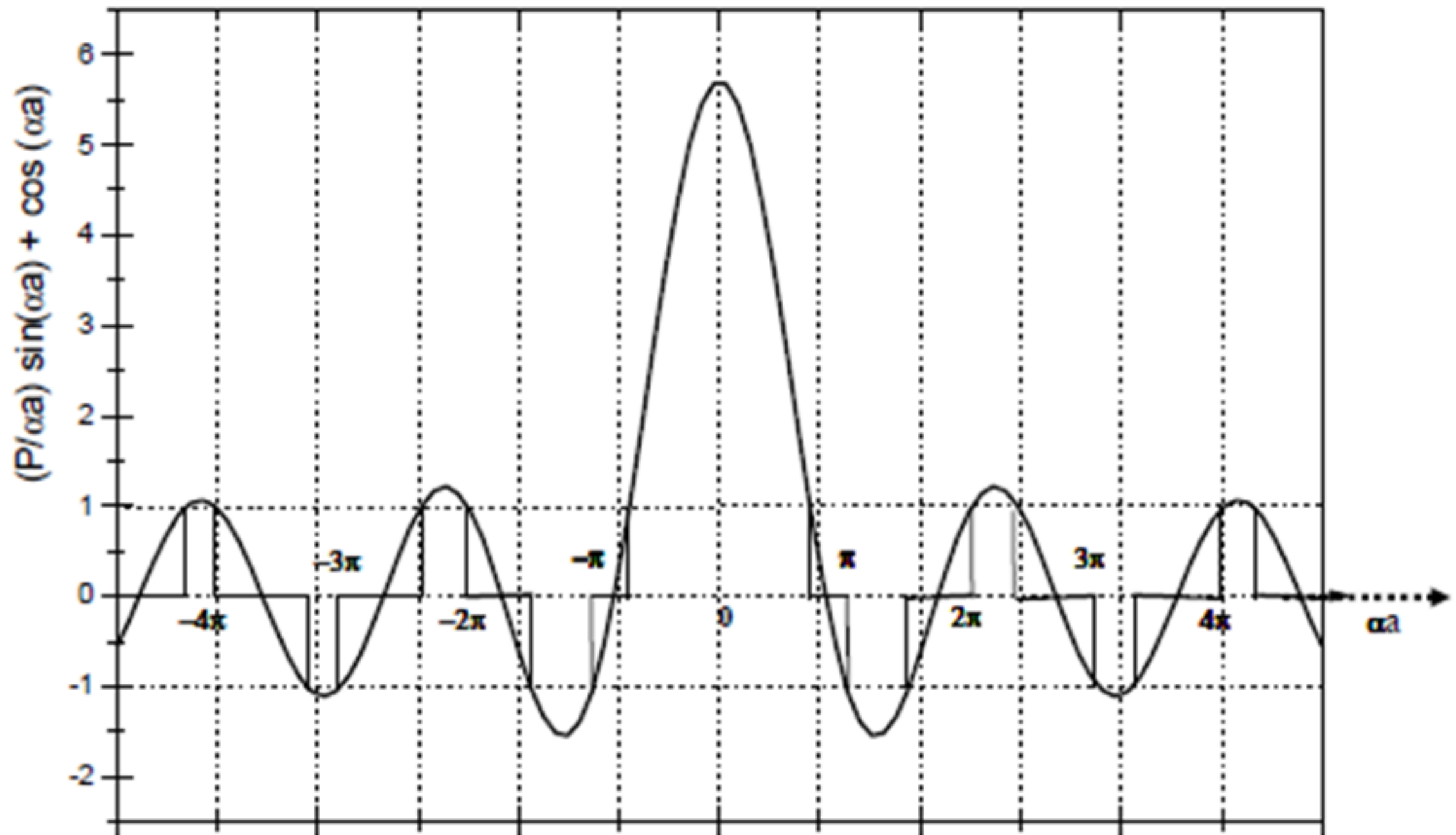
Kasus yang dipilih oleh Kronig dan Penney dalam menyederhanakan persamaan determinan tsb adalah untuk  $V_0$  cenderung menuju tak hingga dan nilai  $b$  menuju nol, tetapi hasil kali  $V_0 \cdot b$  tetap terhingga. Hasil kali  $V_0 \cdot b$  (untuk  $V_0 \rightarrow \infty$  dan  $b \rightarrow 0$ ) disebut kekuatan penghalang (*barrier strength*).

$P = (mV_0ba/\hbar^2)$  adalah luas energi potensial penghalang  $V_0 \cdot b$

Jika nilai  $P$  membesar berarti elektron terikat secara kuat pada sebuah sumur tertentu

Persamaan yang merupakan syarat agar solusi untuk persamaan gelombang itu ada adalah :

$$(P/\alpha a) \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka).$$



# Mengapa tidak bisa menjelaskan hal tsb?

Karena penyederhanaan yang berlebihan tentang elektron konduksi

- Menurut teori elektron bebas, elektron konduksi (elektron valensi) dianggap mengalami energi potensial yang tetap atau bahkan tidak memiliki energi potensial dari inti atom dan elektron-elektron lainnya di dalam atom.

*(inti atom dan elektron-elektron lainnya di dalam atom akan kita sebut sebagai pusat atom atau badan atom (core))*

- Menurut teori elektron bebas, elektron konduksi ini bebas bergerak di dalam kristal dan hanya dibatasi oleh permukaan kristal itu sendiri

## TETAPI

- Kenyataannya, energi potensial akibat badan atom itu tidaklah tetap, tetapi energi potensial itu merupakan fungsi posisi elektron.

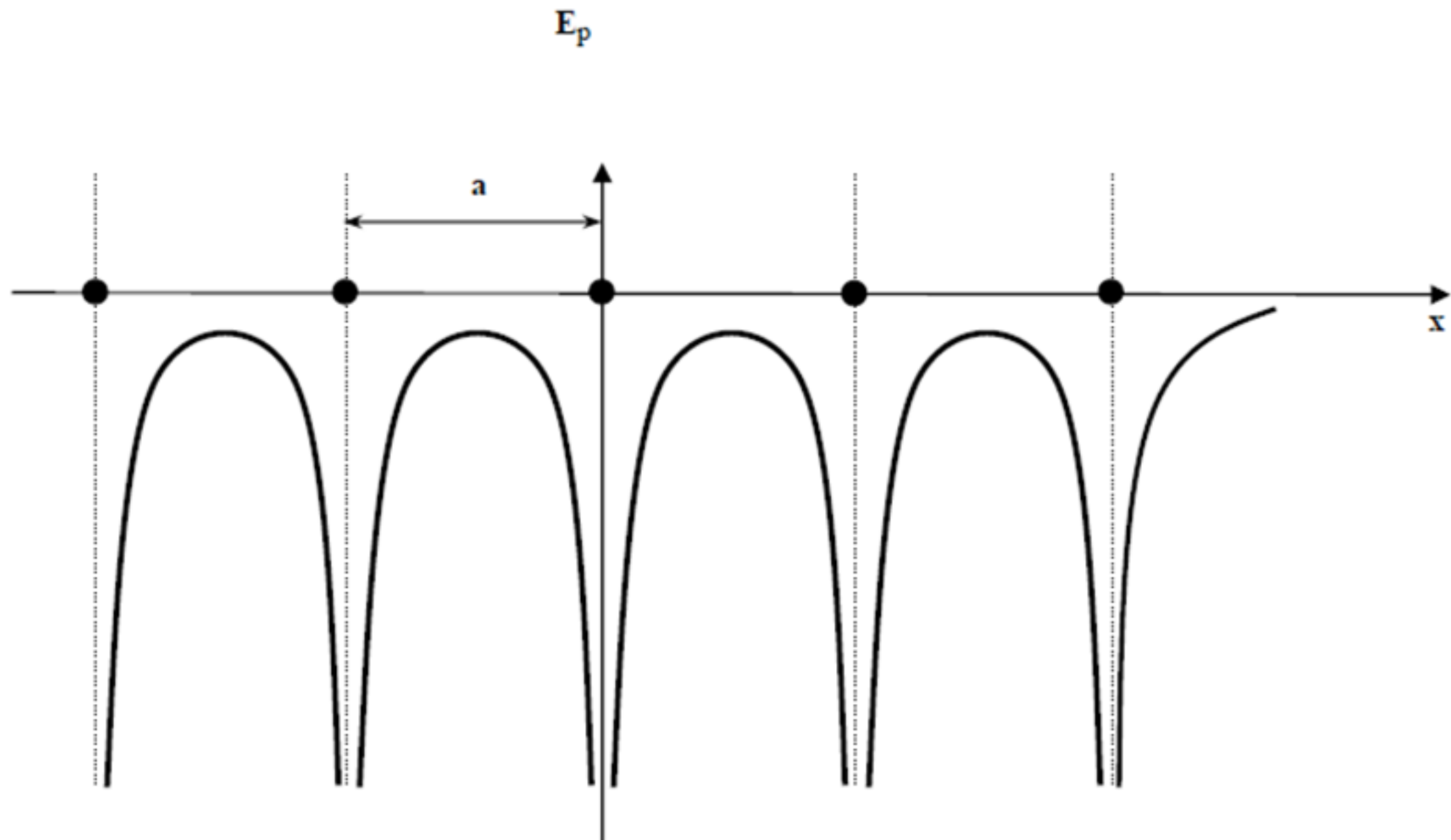
Artinya, nilai energi ini bergantung pada posisi elektron tersebut di dalam kristal diukur relatif terhadap inti atom.

Di samping itu, energi potensial itu juga mungkin timbul akibat adanya elektron-elektron konduksi lainnya di dalam kristal itu

# Solusi

- mencoba menggunakan pendekatan yang lebih baik dari pada pendekatan yang digunakan dalam teori elektron bebas
- Pendekatan itu adalah bahwa badan atom atom itu dianggap diam dan energi potensial itu merupakan fungsi yang periodik dengan perioda sebesar konstanta kisi ( $a$ ) kristal
- Asumsi ini didasarkan pada kenyataan bahwa atom-atom di dalam kristal disebarkan secara periodik pada setiap titik kisi. Asumsi ini menganggap bahwa energi potensial akibat elektron-elektron lainnya adalah konstan.





Energi potensial ( $E_p$ ) elektron sebagai fungsi posisi ( $x$ ) dalam sebuah kristal satu dimensi yang periodik dengan perioda sama dengan konstanta kisi  $a$ .

Kurva paling kanan menyatakan energi potensial di sekitar permukaan kristal.

fungsi gelombang total untuk sistem diperoleh dari gabungan fungsi gelombang setiap elektron.

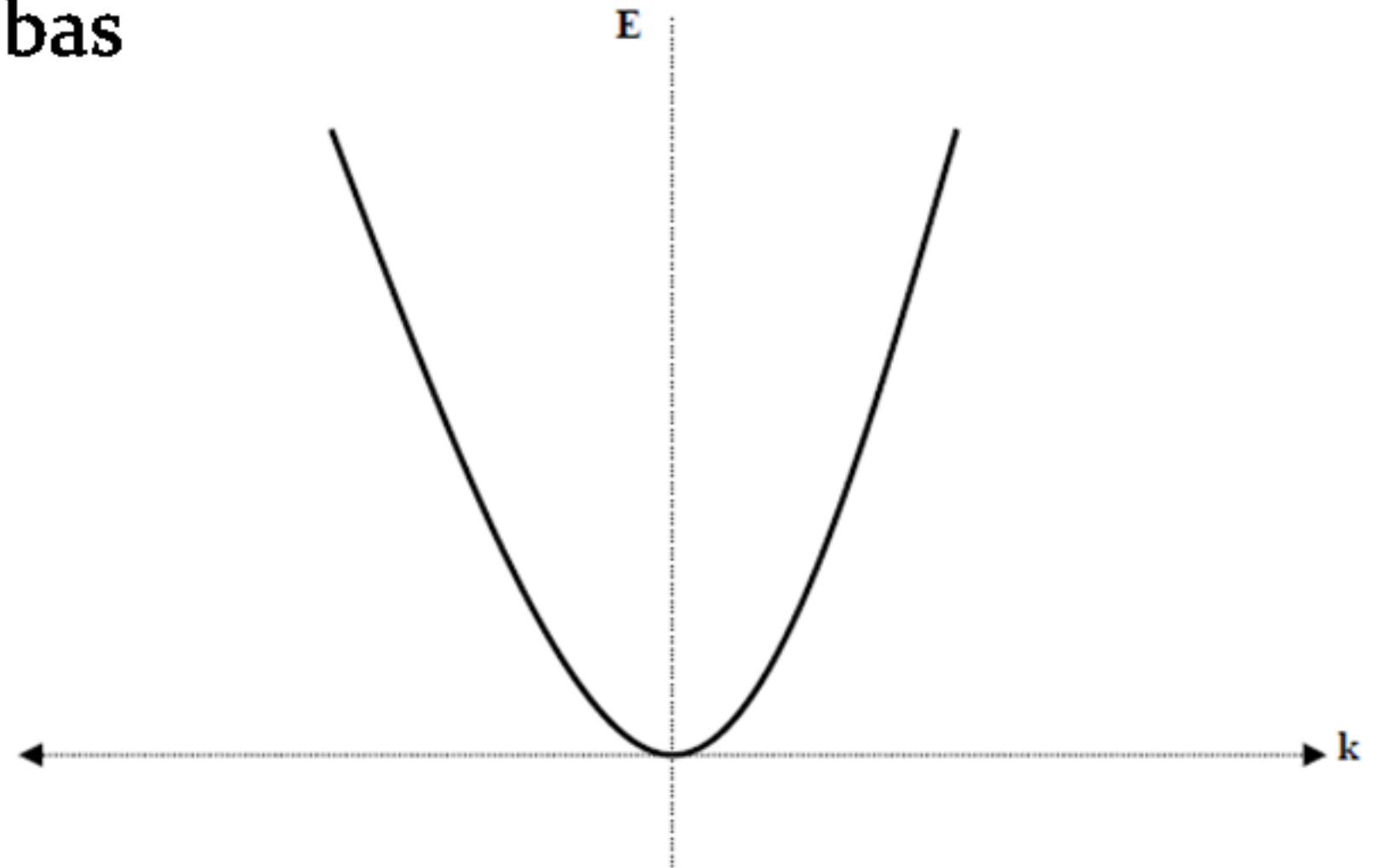
medan listrik yang dialami sebuah elektron tertentu dianggap sebagai resultan dari medan listrik inti dan medan listrik rata-rata elektron lainnya.

Gerak elektron di dalam energi potensial listrik periodik ini menghasilkan hal-hal berikut:

1. Pita-pita energi yang dipisahkan oleh energi celah.
2. Fungsi energi elektron  $E(k)$  adalah periodik

# Model elektron hampir bebas

## Model Elektron bebas



Menurut teori elektron bebas ( $V = 0$ ), energi elektron bebas adalah

$$E = \hbar^2 k^2 / 2m.$$

Menurut model elektron hampir bebas ( $V(x) \neq 0$ ) energi elektron tidak lagi kontinu untuk semua nilai  $k$ , tetapi tepat pada nilai-nilai  $k$  tertentu, tingkat energi elektron mengalami diskontinu, yaitu pada nilai-nilai  $k = n\pi/a$ , dimana  $n = 1, 2, 3$ , dan seterusnya

