

Bentuk Fungsional Energi Elektron Bloch pada Potensial Periodik Semikonduktor

Rinto Agustino, M. Farchani Rosyid

Kosmologi, Astrofisika dan Fisika Matematika (KAM), Jurusan Fisika Universitas Gadjah Mada
rinto_agustino@yahoo.co.id

Abstrak – Telah dilakukan kajian bentuk fungsional energi elektron Bloch pada potensial periodik dengan sistem terdistribusi Fermi-Dirac terdegenerasi.

Kata kunci: fungsional energi, elektron Bloch, potensial periodik

Abstract – Has been study energy functional Bloch's electron form on periodic potential with the system satisfied Fermi-Dirac distribution degeneracy.

Key words: energy functional, Bloch's electron, periodic potential

I. PENDAHULUAN

Teori Kerapatan Fungsional (TKF) untuk sistem kuantum adalah teori atau gagasan eksak tentang masalah banyak partikel, untuk mempelajari perilaku-perilaku keadaan dasar sistem-sistem elektron melalui prinsip variasi. Walaupun secara formal eksak, fungsional tersebut secara umum tidak diketahui. Namun demikian, terdapat berbagai teknik pendekatan yang bekerja dengan baik untuk berbagai sistem elektronik. TKF pada awalnya dikembangkan untuk sistem-sistem kuantum. Pada tahun 1964, teori ini pertama kali digagas dan dibuktikan eksistensinya oleh P. Hohenberg dan Walter Kohn [1], yang mempelajari struktur elektron. Hasil karya ini dikenal sebagai teorema Hohenberg-Kohn (HK). Namun, yang dihasilkan sebatas konsep, belum berada pada tataran terapan. Selanjutnya skema Kohn-Sham diperkenalkan 1965. Skema ini sudah dilengkapi dengan *Local Density Approximation* (LDA) [2]. Hasil ini selanjutnya dikembangkan untuk sistem-sistem kuantum pada suhu berhingga [3].

Metode terdahulu dalam perhitungan struktur elektron seperti teori Hartree-Fock didasarkan pada fungsi gelombang banyak elektron yang rumit. TKF menggantikan fungsi gelombang yang rumit ini dengan kerapatan elektron sebagai besaran dasarnya. Tiga puluh tahun belakangan ini, TKF telah menjadi metode yang dominan digunakan untuk simulasi mekanika kuantum sistem periodik. TKF juga digunakan dalam kimia kuantum dan sekarang banyak digunakan untuk simulasi energi permukaan di dalam molekul [4].

Pada makalah ini akan dikaji bentuk fungsional energi elektron Bloch pada potensial periodik dengan asumsi elektron mematuhi statistik Fermi-Dirac yang terdegenerasi.

II. ELEKTRON BLOCH PADA POTENSIAL PERIODIK

Massa efektif elektron merupakan massa elektron dalam pita energi ketika mengalami gaya atau percepatan.

Potensial periodik diambil dari persamaan Schrodinger, sehingga masalahnya kembali pada kasus klasik elektron bebas. Massa elektron pada kekisi anisotrop, sehingga massanya tensor. Adapun langkah-langkah menentukan besarnya massa efektif adalah sebagai berikut. Dari persamaan gerak kita tahu bahwa perumusan untuk kecepatan elektron adalah

$$V_g = \frac{d}{dk}(\omega) = \frac{d}{dk}\left(\frac{T}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} T$$

apabila kecepatan grup ini kita turunkan terhadap waktu, maka akan kita peroleh

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 T}{dk dt}$$

atau dapat dituliskan dalam bentuk

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 T}{dk^2} \frac{dk}{dt}$$

Dari persamaan gerak kita ketahui bahwa

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{\vec{F}}{\hbar}$$

dengan mensubstitusi persamaan gerak ini ke persamaan sebelumnya, sehingga diperoleh

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2 T}{dk^2} \frac{F}{\hbar}$$

atau dapat ditulis menjadi

$$\frac{dV_g}{dt} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 T}{dk^2} F$$

Dari persamaan ini, ruas kiri merupakan percepatan, dan ruas kanan merupakan sesuatu dikalikan gaya F. Berdasarkan hukum II Newton kita ketahui bahwa:

$$F = ma \text{ atau } a = \frac{F}{m}$$

sehingga dari persamaan tersebut didefinisikanlah massa efektif

$$m^* = \hbar^2 \frac{1}{\frac{d^2 T}{dk^2}}$$

Hubungan sebaran elektron Bloch menggunakan pendekatan kuadratik vektor gelombang. Pada kristal kubik, ketika pada keadaan minimum, maka titik simetri k_0 , pendekatan energi menjadi

$$T_k \approx T_{k_0} + A(k - k_0)^2$$

dengan koefisien A dinyatakan sebagai

$$A = \frac{\hbar^2}{2m^*}$$

Hubungan sebaran bentuknya sama seperti elektron bebas, tetapi massa elektron m_e diubah menjadi m^* , yang mana bergantung pada potensial periodik dan didefinisikan sebagai

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 T_k}{\partial k^2}$$

parameter ini disebut massa efektif pada elektron Bloch.

Secara alamiah, massa efektif berbeda dari massa elektron bebas, perbedaannya pada nilai masing-masing pita dan jika ada beberapa minimum dalam pita, juga bergantung pada kekisi zona Brillouin. Massa efektif berguna pada elektron ketika menentukan sifat termal kristal pada daerah pita dengan pendekatan kuadratik energi telah diketahui. Pita pada logam atau pita konduksi dan valensi dalam semikonduktor merupakan contoh yang terbaik. Dalam kasus ini system elektron Bloch pada massa elektron bebas diganti menjadi massa efektif elektron.

Kristal yang bukan kubik, hubungan persebarannya bukan simetri bola. Jika simetri secara lokal pada zona Brillouin ortorombik, maka bentuk energinya

$$T_k \approx T_{k_0} + A_x(k_x - k_{0x})^2 + A_y(k_y - k_{0y})^2 + A_z(k_z - k_{0z})^2$$

$$T_k \approx T_{k_0} + \frac{\hbar^2(k_x - k_{0x})^2}{2m^*_{x}} + \frac{\hbar^2(k_y - k_{0y})^2}{2m^*_{y}} + \frac{\hbar^2(k_z - k_{0z})^2}{2m^*_{z}}$$

Watak-watak elektron dicirikan oleh triplet m^*_x, m^*_y, m^*_z .

Sehingga nilai harap energi sebuah Hamiltonian Efektif adalah

$$H_{efektif} = T_{k=0} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{1}{m^*}\right)_{i,j} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} + V(r)$$

dengan $V(r)$ bervariasi pada ruang riil, kemudian energi elektron merupakan potensial gangguan yang dihitung dengan teorema massa efektif.

Misalkna massa berada pada potensial satu dimensi

$$V(x) = A \sum_{n \rightarrow \infty}^{\infty} \delta(x - nL)$$

dengan L adalah parameter kekisi dan A adalah luasan penghalang. Menurut teorema Bloch, fungsi gelombang elektron dalam suatu potensial periodic dinyatakan sebagai

$$\psi(x) = \exp(ikx)U(x)$$

$\hbar k$ merupakan momentum Kristal. Disini $U(x)$ adalah periodik dengan periode L sebagai berikut

$$U(x + nL) = U(x)$$

sehingga memenuhi persamaan

$$\left[-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) (\partial + ik)^2 + V(x) \right] U(x) = T_0(k)U(x)$$

dengan ∂ menyatakan turunan yang bergantung terhadap x dan $T_0(k)$ adalah nonrelativistik energi elektron. Perluasan elektron Bloch dapat diterapkan untuk sistem relativistik [5].

III. FUNGSIONAL ENERGI ELEKTRON BLOCH

Sistem yang digunakan dalam kajian ini memenuhi distribusi Fermi Dirac yang terdegenerasi, sehingga peluang terdapatnya electron di daerah lebih besar dari k_f adalah 0. Sistem Hamiltonian untuk elektro-elektron Bloch pada potensial periodic semikonduktor adalah

$$T_k = T_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \mathbf{k} \cdot \left(\frac{m}{m^*}\right)_{3 \times 3} \cdot \mathbf{k}$$

$$= [k_x \quad k_y \quad k_z] \begin{bmatrix} \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} \\ \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yx} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} \\ \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zx} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zy} & \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{bmatrix}$$

$$= k_x \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} k_x + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yx} k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zx} k_z\right) + k_y \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k_x + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zy} k_z\right) + k_z \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k_x + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} k_z\right)$$

$$= \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} k_x^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} k_y^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} k_z^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yx} k_x k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k_x k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zx} k_z k_x + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k_x k_z + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zy} k_z k_y + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k_y k_z$$

Karena simetri komponen tensor yakni komponen $xy =$ komponen yx , komponen $yz =$ komponen zy , komponen $xz =$ komponen zx

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} k_x^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} k_y^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} k_z^2 \\ &\quad + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k_x k_y + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k_x k_z \\ &\quad + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k_y k_z \\ &\quad k_x = k \sin \theta \cos \varphi \\ &\quad k_y = k \sin \theta \sin \varphi \\ &\quad k_z = k \cos \theta \end{aligned}$$

Rerata energi kinetik elektron dihitung

$$\begin{aligned} \langle T_k \rangle &= \frac{1}{2} \langle \mathbf{k} \cdot \left(\frac{m}{m^*}\right) \cdot \mathbf{k} \rangle \\ &= \int_{k=0}^{k_f} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} f(k) \left(\mathbf{k} \cdot \left(\frac{m}{m^*}\right) \cdot \mathbf{k}\right) dk \\ &= \int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} (k \sin \theta \cos \varphi)^2 + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} (k \sin \theta \sin \varphi)^2 \right. \\ &\quad + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} (k \cos \theta)^2 + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k^2 \sin \theta \cos \varphi \sin \theta \sin \varphi \\ &\quad + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k^2 \sin \theta \cos \varphi \cos \theta \\ &\quad \left. + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k^2 \sin \theta \sin \varphi \cos \theta \right] k^2 \sin \theta dk d\theta d\varphi \\ &= \int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left[\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} k^4 \sin^3 \theta \cos^2 \varphi dk d\theta d\varphi \right. \\ &\quad + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} k^4 \sin^3 \theta \sin^2 \varphi dk d\theta d\varphi \\ &\quad + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} k^4 \sin \theta \cos^2 \theta dk d\theta d\varphi \\ &\quad + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k^4 \sin^3 \theta \cos \varphi \sin \varphi dk d\theta d\varphi \\ &\quad + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k^4 \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi dk d\theta d\varphi \\ &\quad \left. + 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k^4 \sin^3 \theta \cos \varphi \sin \varphi dk d\theta d\varphi \right] \end{aligned}$$

Uraikan masing-masing suku

$$\begin{aligned} &\int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} k^4 \sin^3 \theta \cos^2 \varphi dk d\theta d\varphi \\ &= \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} \frac{1}{5} k_f^5 \frac{4\pi}{3} = \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} \\ &\int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} k^4 \sin^3 \theta \sin^2 \varphi dk d\theta d\varphi \\ &= \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} \frac{1}{5} k_f^5 \frac{4\pi}{3} = \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &\int_{k=0}^{k_f} \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} k^4 \sin \theta \cos^2 \theta dk d\theta d\varphi = \\ &\left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \frac{1}{5} k_f^5 \frac{2}{3} \cdot 2\pi = \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \\ &\int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} k^4 \sin^3 \theta \cos \varphi \sin \varphi dk d\theta d\varphi \\ &= 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xy} \frac{1}{5} k_f^5 \frac{4}{3} \cdot 0 = 0 \\ &\int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} k^4 \sin^2 \theta \cos \theta \cos \varphi dk d\theta d\varphi \\ &= 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xz} \frac{1}{5} k_f^5 \cdot 0 = 0 \\ &\int_0^{k_f} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} k^4 \sin^3 \theta \cos \varphi \sin \varphi dk d\theta d\varphi \\ &= 2\left(\frac{m}{m^*}\right)_{yz} \frac{1}{5} k_f^5 \frac{4}{3} \cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

Semua suku-suku tersebut diberikan oleh

$$\begin{aligned} &\frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \\ &= \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \right) \end{aligned}$$

Dengan demikian fungsional energi kinetiknya

$$T_k = T_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4\pi}{15} k_f^5 \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \right)$$

Momentum Fermi untuk gas elektron $3\pi^2 \rho = k_f^3$ [1], sehingga,

$$T_k = T_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4\pi}{15} (3\pi^2 \rho)^{5/3} \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \right)$$

Dalam sistem tak homogen, dimana kerapatan merupakan fungsi posisi, diasumsikan bentuk fungsional energi kinetiknya sama, sehingga

$$T_k = T_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4\pi}{15} (3\pi^2)^{5/3} \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \right) \int \rho^{5/3}(r) dr$$

Sehingga bentuk fungsional energinya

$$F_{RR}(\rho) = T_{k_0} + \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{4\pi}{15} (3\pi^2)^{5/3} \left(\left(\frac{m}{m^*}\right)_{xx} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{yy} + \left(\frac{m}{m^*}\right)_{zz} \right) \int \rho^{5/3}(r) dr$$

Dengan fungsional yang didapatkan, kita dapat menghitung minimizer untuk beberapa potensial yang memenuhi syarat.

IV. KESIMPULAN

Fungsional energi elektron Bloch pada semikonduktor merupakan fungsi dari fungsional kerapatan. Dengan asumsi elektron mematuhi distribusi Fermi Dirac yang terdegenerasi didapatkan fungsional F_{RR} yang nantinya akan digunakan untuk mencari minimizing dalam teori kerapatan fungsional.

UCAPAN TERIMA KASIH

Terima kasih saya ucapkan kepada Laboratorium Atom Inti kelompok riset Kosmologi, Astrofisika dan Fisika Matematika, jurusan Fisika Universitas Gadjah Mada.

PUSTAKA

Artikel jurnal:

- [1] Hohenberg dan Kohn, Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.*, vol. 136, no. 3B, 9 November 1964.
- [2] W.Kohn dan L. J. Sham, Self Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effect, *Phys. Rev.*, vol. 140, no. 4A, 15 November 1965.
- [3] Mermin, N.D., Thermal Properties of inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* **137**, A1441 (1965).
- [4] S. M. Agarwall and A. Grover, Nucleotide Composition and Amino Acid Usage in AT-Rich Hyperthermophilic Species, *The Open Bioinformatics Journal*, Vol. 2, 2008, pp. 11-19.
- [5] F. Dominguez dan Adame, Relativistic and nonrelativistic Kronig-Penney Model, *Am. J. Phys.* 55 (11), November 1987.

Buku:

- [6] Harrison. N. M, *An Introduction to Density Functional Theory*, London, Imperial College of Science and Medicine, 2003.