BAB IV

VIBRASI KRISTAL

MATERI :
Getaran (Vibrasi) Kristal

- 4.1.persamaan dispersi untuk kristal
  berbasis satu atom.
- 4.2.kecepatan kelompok
  (group velocity)
- 4.3 persamaan dispersi untuk kristal
  berbasis dua atom.
- 4.4.cabang optik
- 4.5.cabang akustik.

INDIKATOR

- menentukan persamaan dispersi untuk kristal berbasis satu atom.
- menghitung kecepatan kelompok untuk sebuah gelombang.
- menentukan frekuensi/energi untuk cabang optik.
- menentukan frekuensi /energi untuk cabang akustik.

TIK :

Menentukan frequensi Gelombang elastik dalam bentuk

(sebagai fungsi) Vektor gelombang (k) ,

Atau dapat dinyatakan : W = f (k)

VIBRASI KRISTAL

GELOMBANG ELASTIK
DAN PHONON

MONOATOMI
K

DIATOMIK

Getaran atom dapat disebabkan oleh :

- Zat padat yang menyerap energi panas.
- Gelombang yang merambat pada kristal.

Dari bab sebelumnya,telah dibahas bahwa kristal tersusun oleh atom atom yang diam pada posisi di titik kisi.
Sesungguhnya atom-atom tersebut tidaklah diam, tetapi bergetar pada posisi kesetimbangnya.

Ditinjau dari panjang gelombang yang digunakan dan dibandingkan dengan jarak antar atom dalam kristal,dapat dibedakan menjadi :

- pendekatan gelombang pendek
- pendekatan gelombang panjang

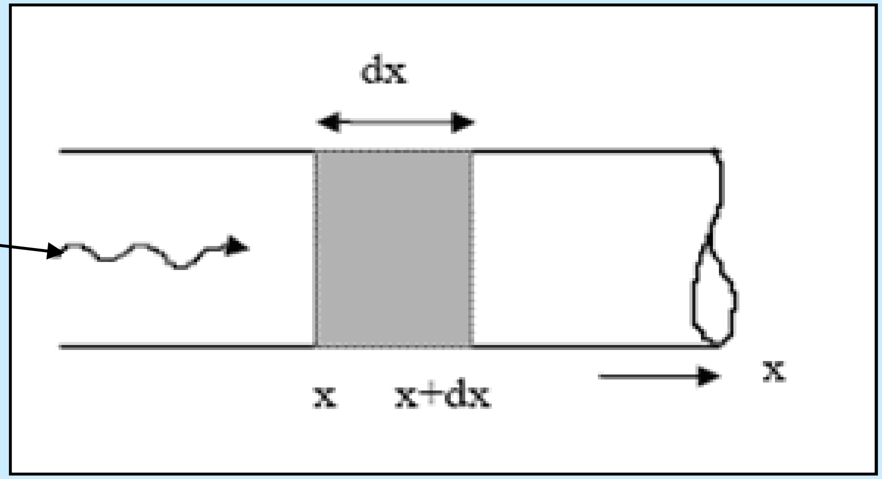
Disebut pendekatan gelombang pendek apabila :

- Apabila panjang gelombang yang digunakan memiliki panjang gelombang yang lebih kecil dari jarak antar atom.
- Dalam keadaan ini gelombang akan “melihat” bahwa kristal merupakan susunan atom atom diskret, sehingga pendekatan ini sering disebut pendekatan kisi diskret.

- Sebaliknya , bila diapakai gelombang yang panjang, gelombangnya lebih besar dari jarak antar atom,kisi akan “nampak” malar (kontinue) sebagai suatu media perambatan gelombang. Oleh karena itu, pendekatan ini sering disebut sebagai pendekatan kisi malar.

GELOMBANG ELASTIK

Gelombang mekanik



regangan pada batang : $\in = \dfrac{du}{dx}$ ....(1)

tegangan σ yang memenuhi hukum Hooke sebagai berikut:

$\sigma = E\in$ ....(2)

menurut hukum kedua Newton, tegangan yang bekerja pada elemen batang dx menghasilkan gaya sebesar :

$F = A\,\{\sigma(x + dx) - \sigma(x)\}$ ....(3)

$$\rho A dx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = A\{\sigma(x+dx) - \sigma(x)\} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(4)}$$

$$= \frac{\partial \sigma}{\partial x} dx$$

$$= E \frac{\partial \varepsilon}{dx} dx$$

$$= E \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{du}{dx}\right) dx$$

$$= E\left(\frac{d^2 u}{dx^2}\right) dx \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(5)}$$

Substitusikan persamaan (5) ke persamaan (4), sehingga diperoleh :

$$\rho \mathrm{Adx} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx.A$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \left(\frac{\rho}{E}\right) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \text{(6)}$$

Fonon

Fonon adalah fenomena yang muncul dari kuantisasi sistem Fisika.

Fonon dapat ditemui dalam sistem kristal. Jadi, Fonon adalah partikel yang terdapat dalam gelombang elastik.

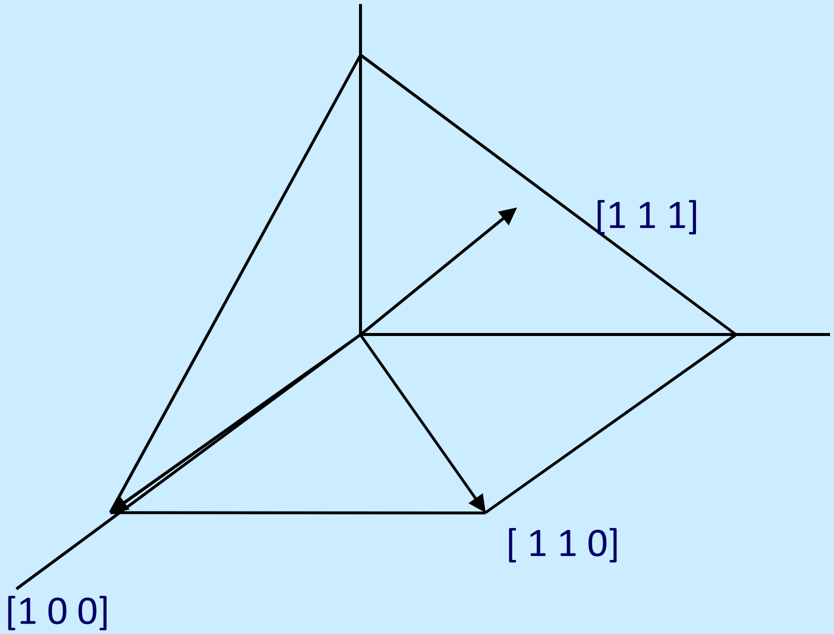
Contoh : nitrogen vacancy center (NV Center) in diamond, konfigurasi elektron nya membentuk energi level 'ground state' dan 'excited state' yang perbedaan energinya sebesar 637 Nm.

MONOATOMIK

- PERSAMAAN GERAK
- GRAFIK
- KECEPATAN GROUP

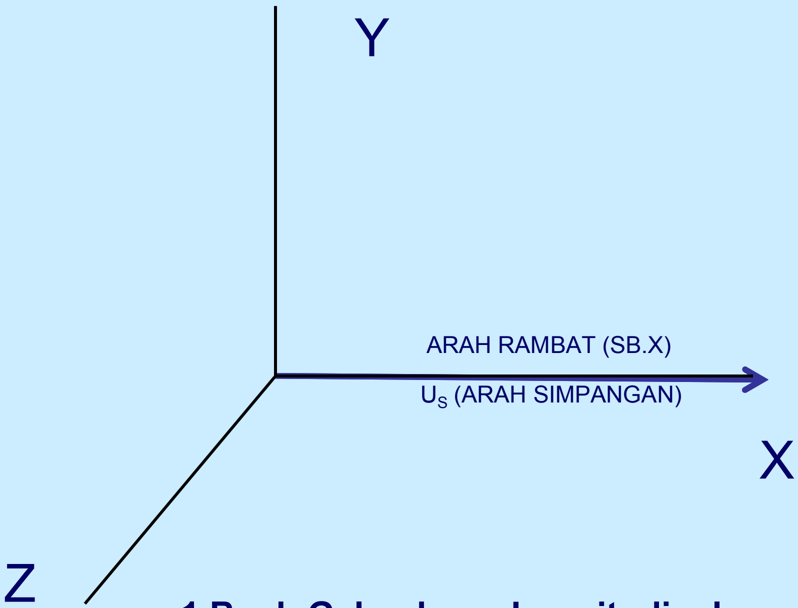
GETARAN KRISTAL YANG BERBASIS SATU ATOM (MONOATOMIK)

Pembahasan ini kita mulai dengan kasus yang paling sederhana yaitu kasus yang melibatkan getaran kristal akibat adanya gelombang elastis yang merambat dalam arah $[100];[110];[111]$

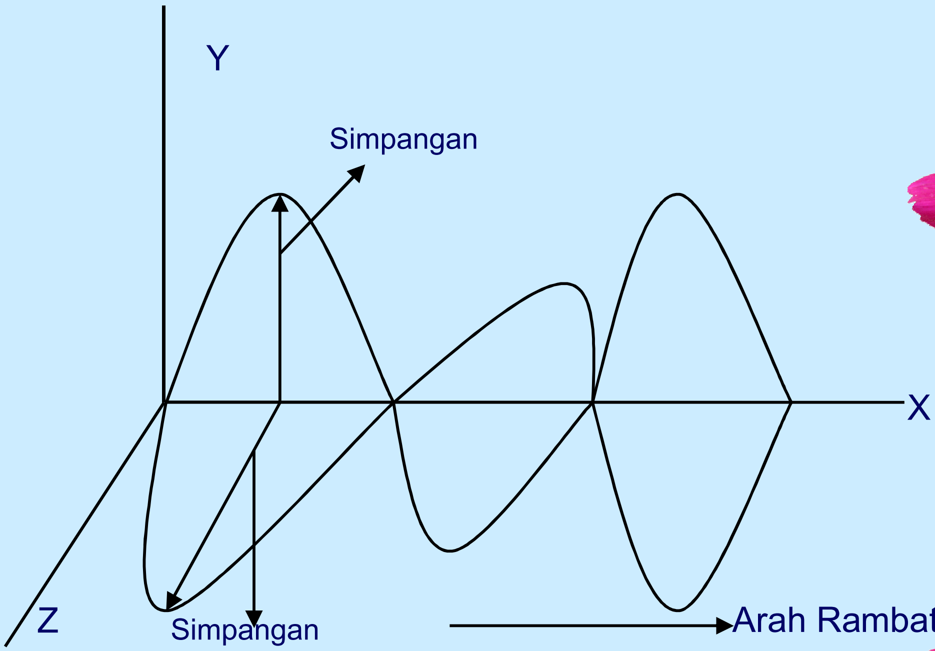


Untuk setiap vektor gelombang $(\vec{k})$ terdapat 3 model getaran, yaitu :1 buah longitudinal

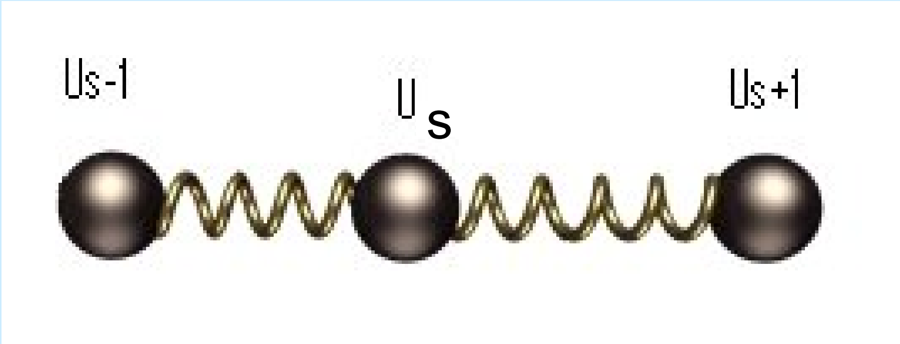
2 buah transversal.



1 Buah Gelombang Longitudinal



2 Buah Gelombang Transversal



Jadi : $F_s = c\left(U_{s+1} - U_s\right) + c\left(U_{s-1} - U_s\right)$

$$F_s = c\left(U_{s+1} + U_{s-1} - 2Us\right) \qquad \text{.............. (1)}$$

Persamaan gerak bidang kristal ke s adalah :

Hukum Newton : $\sum F = \text{m}a$

Hukum Hooke : $F = c.\Delta x$

Dari kedua persamaan di atas diperoleh :

$$\text{m}\, a = c.\, \Delta\, x$$

$$m\frac{d^2U_s}{dt^2} = c(U_{s+1} + U_{s-1} - 2Us) \qquad \text{..............(2)}$$

Solusi dari persamaan gerak ini tergantung pada waktu (t), dinyatakan oleh :

$$U_s = e^{-i\omega t}$$

Karena persamaan (2) merupakan turunan hanya terhadap waktu, maka :

$$\frac{d^2 U_s}{dt^2} = \frac{d^2}{dt^2}\left[e^{-i\omega t} \right] = -\omega^2 e^{-i\omega t}$$

$\boxed{U_S}$

Jadi :

$$\boxed{\frac{d^2 U_s}{dt^2} = -\omega^2 U_s}$$

Sehingga, persamaan (2) dapat ditulis :

$$-\omega^2 mU_s = c\left[U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s\right]$$

Solusi : $U_s = e^{-i\omega t}$ dapat ditulis sebagai berikut :

$$U_s = e^{-i\omega t} \approx e^{-i2\pi\vartheta t} = e^{-i\frac{2\pi}{\lambda}\vartheta\lambda t}$$

$$U_s = e^{-ikx} = e^{-iksa}$$

Secara lengkap, Us dapat ditulis sebagai berikut :

$$Us = Ue^{-iksa}$$

Karena itu :

$$U_{s\pm1} = U.e^{-ik(s\pm1)a} = U.e^{-iksa}.e^{\pm ika}$$

$$U_{s\pm1} = U_s e^{\pm ika} \quad \ldots\ldots\ldots\ \ \ldots\ldots\ldots\ \ \ldots\ldots\ldots\ \ \ldots\ldots\ldots\ \ \ldots\ (5)$$

Persamaan (5) dan (3) dapat ditulis :

$$-\omega^2 mU_s = c\ (U_s e^{ika} + U_s e^{-ika} - 2U_s)$$

$$-\omega^2 m = c\ (e^{ika} + e^{-ika} - 2) \ \ldots\ldots\ldots\ \ \ldots\ldots\ldots\ (6)$$

Karena : $e^{\pm i\theta} = \cos\theta \pm i \sin\theta$

maka : $e^{ika} + e^{-ika} = 2\cos ka$

Sehingga persamaan (6) menjadi :

$$\omega^2 m = -c\left(2\cos ka - 2\right)$$

$$\omega^2 = \frac{2c}{m}\left(1 - \cos\ ka\right)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{2c}{m}}\left(1 - \cos ka\right)^{1/2} \qquad \text{............(7)}$$

Solusi persamaan (7) menjadi:

$$\omega^2 = \frac{2c}{m}\left(2\sin^2 \frac{1}{2}ka\right)$$

$$\omega = \underbrace{2\sqrt{\frac{c}{m}}}_{A}\left|\sin\ \frac{1}{2}ka\right| \qquad \text{..............(8)}$$

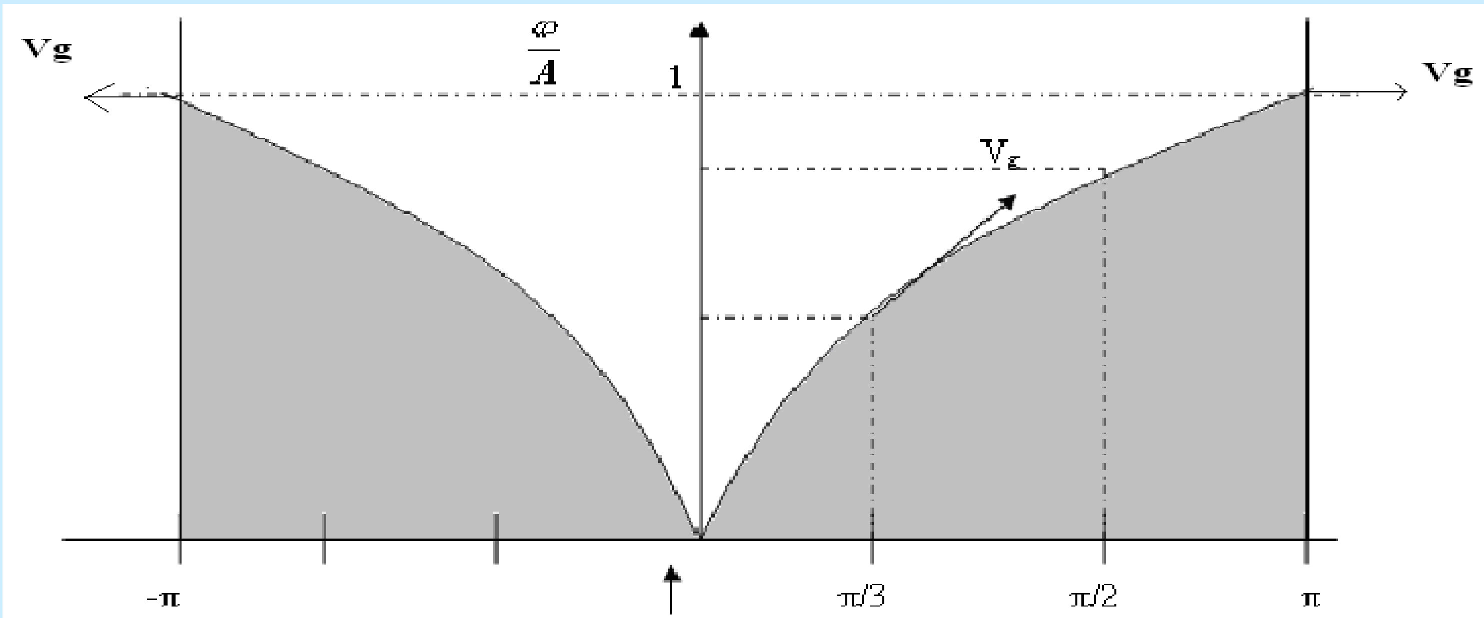
Persamaan (8) $\rightarrow$ Persamaan dispersi

Menyatakan hubungan antara frekuensi sudut (ω) terhadap vektor gelombang (k)

$$\omega = \mathrm{f}(k)$$

Persamaan (8) merupakan Persamaan Dispersi. Persamaan (8) menyatakan hubungan antara frekuensi sudut (ω) terhadap vektor gelombang (k). $\boldsymbol{\omega}$ = f(k)

Bila dinyatakan dengan grafik



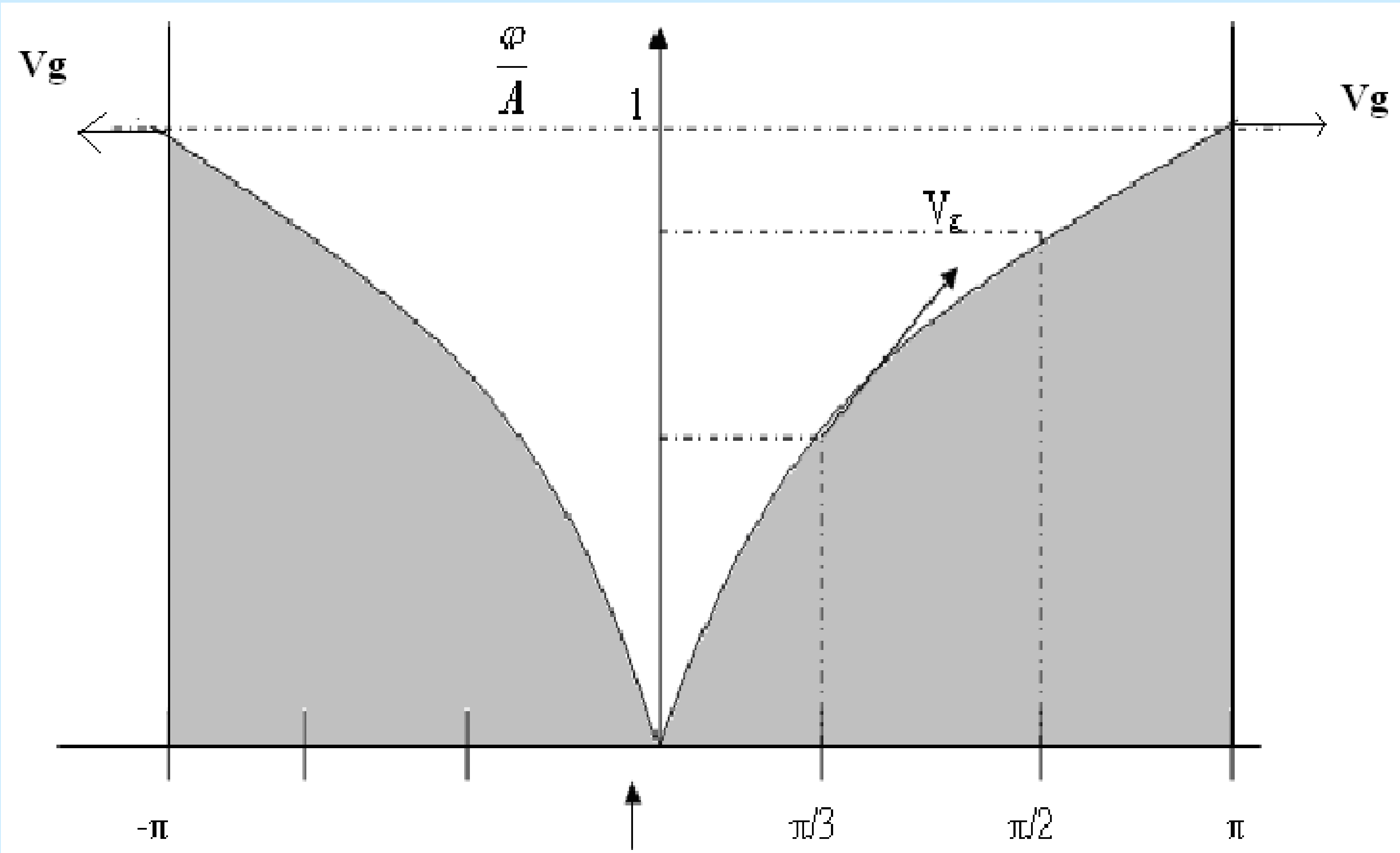
Daerah Brillovin I

Sin π/2 = sin 90^o → max = 1

Sin $\frac{\pi/2}{2}$ = sin 45^o = ½ √2

Sin $\frac{\pi/3}{2}$ = sin 30^o = ½

Bila dinyatakan dengan grafik, maka:



KECEPATAN GROUP /KECEPATAN KELOMPOK (Vg)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}$$ → Gradien atau arah

$$= \frac{d}{dk}\left\{2\sqrt{\frac{c}{m}}\left|\sin\frac{1}{2}ka\right|\right\}$$

$$= 2\sqrt{\frac{c}{m}}\frac{a}{2}\cos\frac{ka}{2}$$ ....(9)

Pada saat ka = π $\longrightarrow$ $\frac{2\pi}{\lambda}a = \pi \Rightarrow \lambda = 2a$

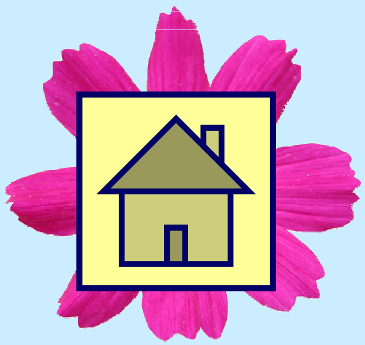
$$v_g = a\sqrt{\frac{c}{m}}\cos\frac{\pi}{2} = 0$$

Artinya tidak ada gradien /kemiringan

Pada saat $ka = \frac{\pi}{2} \longrightarrow \frac{2\pi}{\lambda}a = \frac{\pi}{2} \Rightarrow \lambda = 4a$

$$v_g = a\sqrt{\frac{c}{m}}\cos\frac{\pi}{4} \approx 0{,}74a\sqrt{\frac{c}{m}}$$

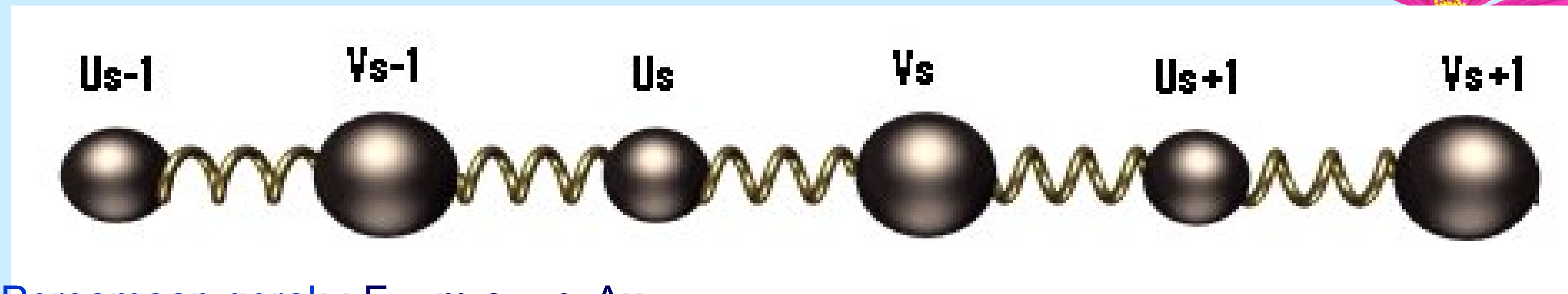
Artinya ada gradien /kemiringan



DIATOMIK

- PERSAMAAN GERAK
- GRAFIK
- KECEPATAN GROUP

VIBRASI KRISTAL DIATOMIK



Persamaan gerak : F = m.a = c. Δx

Untuk

$$m_1 \rightarrow m_1 \frac{d^2U_s}{dt^2} = c\ \{(V_s - U_s) + (V_{s-1} - U_s)\}$$

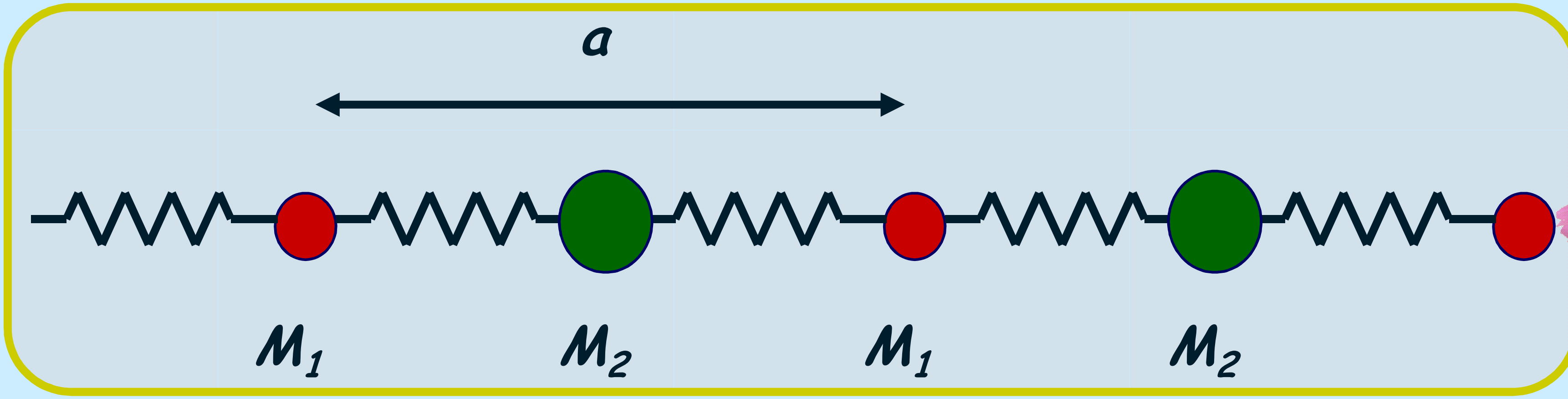
$$\mathbf{m_1 \frac{d^2U_s}{dt^2} = c\ \{ V_s + V_{s-1} - 2\ U_s\} ....(1)}$$

Untuk

$$m_2 \rightarrow m_2 \frac{d^2U_s}{dt^2} = c\ \{(U_{s+1} - V_s) + (U_s - V_s)\}$$

$$\mathbf{m_2 \frac{d^2U_s}{dt^2} = c\ \{ U_{s+1} + U_s - 2\ V_s\} ....(2)}$$

PERSAMAAN GERAK



Untuk $m_1 \Rightarrow m_1 \dfrac{d^2 U_s}{dt^2} = c\{(V_s - U_s) + (V_{s-1} - U_s)\}$

$$m_1 \frac{d^2 U_s}{dt^2} = c\{V_s + V_{s-1} - 2U_s\} \quad \text{..................... (1)}$$

Untuk $m_2 \Rightarrow m_2 \dfrac{d^2 V_s}{dt^2} = c\{(U_{s+1} - V_s) + (U_s - V_s)\}$

$$m_2 \frac{d^2 V_s}{dt^2} = c\{U_{s+1} + U_s - 2V_s\} \quad \text{........................... (2)}$$

Solusinya :

$$U_s = U\, e^{i(ksa - \omega t)} \longrightarrow \frac{dU_s}{dt} = U\, i(-\omega(\, e^{i(ksa - \omega t)}$$

$$\frac{d^2 U_s}{dt} = -U\, \omega^2\, e^{i(ksa - \omega t)}$$

$$\left.\begin{aligned} V_s &= V\, e^{i(ksa - \omega t)} \\ U_{s+1} &= U\, e^{i(ksa - \omega t)}\, e^{-ika} \\ V_{s+1} &= V\, e^{i(ksa - \omega t)}\, e^{-ika} \end{aligned}\right\} \longrightarrow \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (3)$$

Persamaan (3) disubstitusikan ke persamaan (1) diperoleh :

$$-m_1 U \omega^2 e^{i(ksa-\omega t)} = c\left\{ V e^{i(ksa-\omega t)} + V e^{i(ksa-\omega t)} - 2U e^{i(ksa-\omega t)} \right\}$$

$$-m_1\, \omega^2 U = cV\left(1 + e^{-ika}\right) - 2cU \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (4)$$

$$-m_2\, \omega^2 V = cU\left(1 + e^{ika}\right) - 2cV \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \quad (5)$$

Determinan dari persamaan (4) dan (5)

$$\begin{vmatrix} 2c - m_1\omega^2 & (-c)(1+e^{ika}) \\ (-c)(1+e^{ika}) & 2c-m_2\omega^2 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} U \\ V \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} 2c - m_1\omega^2 & (-c)(1+e^{ika}) \\ (-c)(1+e^{ika}) & 2c-m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$$\{(2c - m_1\omega^2)(2c - m_2\omega^2)\} - \{(-c)(1 + e^{ika})(-c)(1+e^{-ika})\} = 0$$

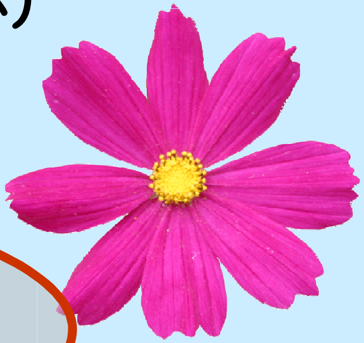
$$(m_1 m_2)\omega^4 - \{2c(m_1+m_2)\}\omega^2 - c^2(2 + e^{ika} + e^{-ika}) = 0$$

$$(m_1 m_2)\omega^4 - \{2c(m_1+m_2)\}\omega^2 + 2c^2(1 - \cos ka) = 0$$

Rumus abc:

$$(\omega_{12})^2 = \frac{2c(m_1 + m_2) \pm \sqrt{\{2c(m_1+m_2)\}^2 - 4(m_1 m_2)(2c^2)(1-\cos ka)}}{2(m_1 m_2)}$$

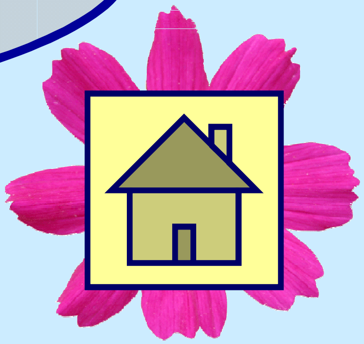
Persamaan cabang optik (gelombang elektromagnetik)



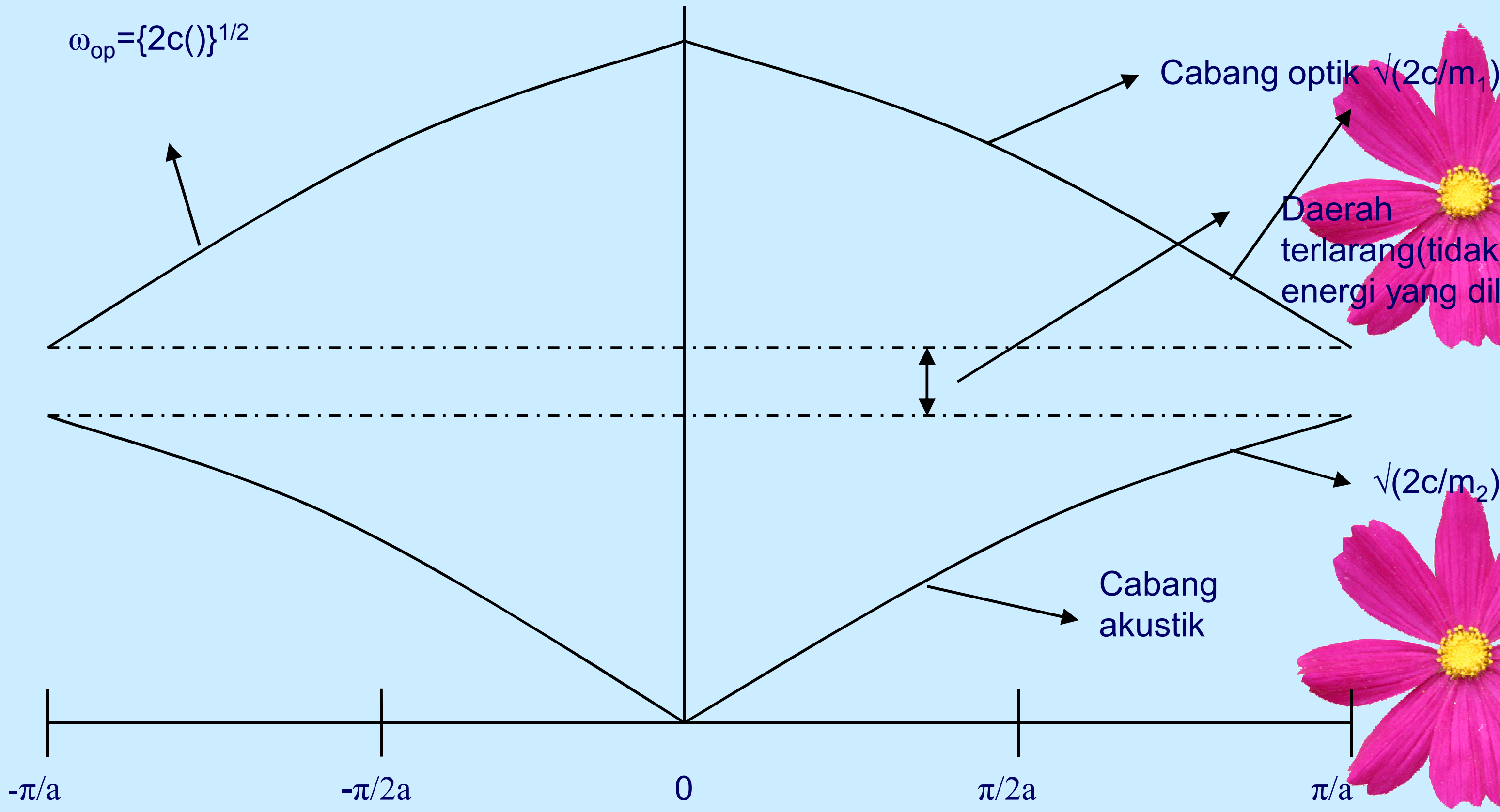
$$(\omega_1)^2 = c\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)+c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2-\frac{4}{m_1 m_2}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

Persamaan cabang akustik (bunyi)

$$(\omega_1)^2 = c\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)-c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2-\frac{4}{m_1 m_2}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$



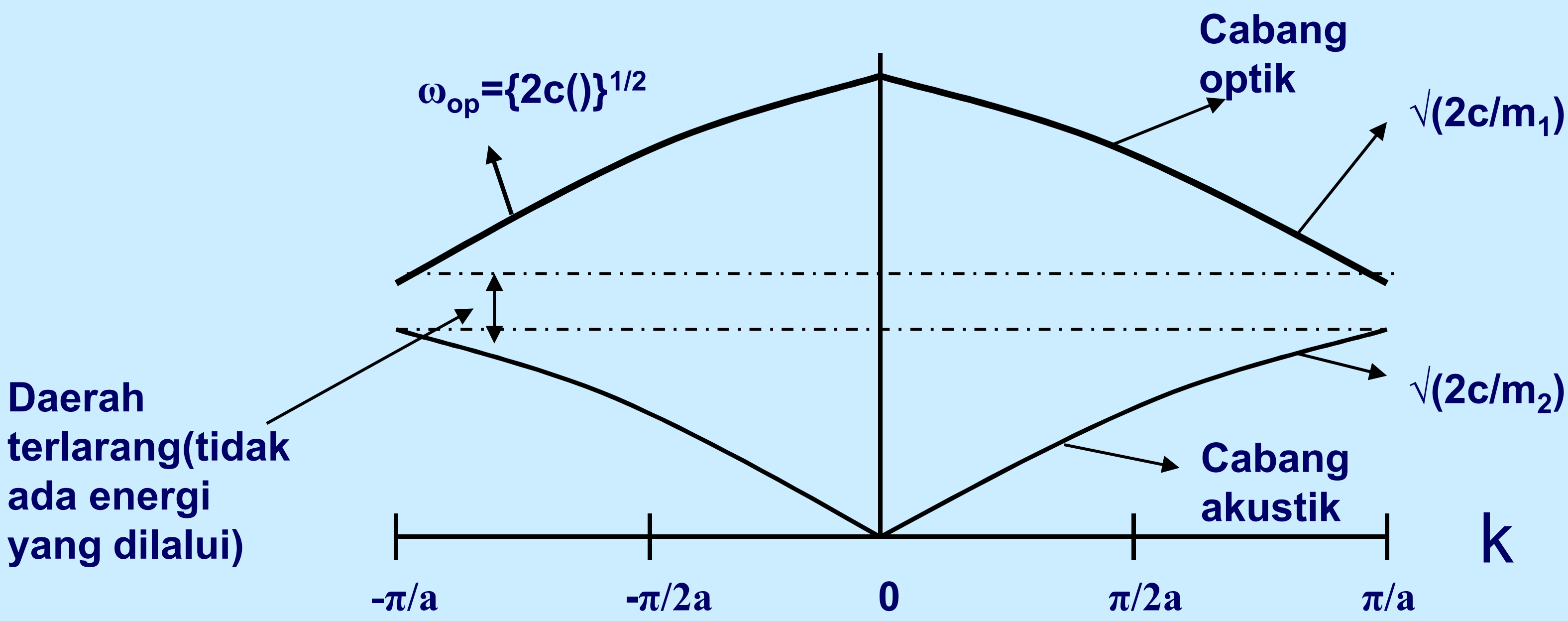
Bila m1‹ m2 → $\sqrt{\dfrac{2c}{m_1}} \;›\; \sqrt{\dfrac{2c}{m_2}}$



Bila m1 › m2 → $\sqrt{\dfrac{2c}{m_1}} \;‹\; \sqrt{\dfrac{2c}{m_2}}$

Yang terjadi adalah tidak ada celah terlarang yang artinya untuk setiap energi selalu menghasilkan getaran

Grafik ω terhadap k pada vibrasi kristal diatomik



Bila m1 › m2 maka

Yang terjadi adalah tidak ada celah terlarang yang artinya untuk setiap energi selalu menghasilkan getaran.

ω untuk vibrasi kristal diatomik

$$(\omega_{1,2})^2 = C\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) \pm C\sqrt{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2}\sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

Untuk cabang optik

$$\omega_1 = \left[C\left[\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right] + C\left\{\left[\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right]^2 - \frac{2}{m_1 m_2} + \frac{2}{m_1 m_2}\cos ka\right\}^{1/2}\right]^{1/2}$$

Untuk cabang akustik

$$\omega_2 = \left[C\left[\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right] - C\left\{\left[\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right]^2 - \frac{2}{m_1 m_2} + \frac{2}{m_1 m_2}\cos ka\right\}^{1/2}\right]^{1/2}$$

KECEPATAN GROUP

Untuk cabang optik

$$Vg_1 = \frac{\partial \omega_1}{\partial k}$$

$$Vg_1 = \frac{\partial}{\partial k}\left[C\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)+C\left\{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2-\frac{2}{m_1m_2}+\frac{2}{m_1m_2}\cos ka\right\}^{1/2}\right]^{1/2}$$

$$Vg_1 = -\frac{a}{2m_1m_2}C\sin ka\left\{\left[C\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)+C\left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2-\frac{2}{m_1m_2}+\frac{2}{m_1m_2}\cos ka\right]^{1/2}\right]^{-1/2}\right\}$$

$$\left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2-\frac{2}{m_1m_2}+\frac{2}{m_1m_2}\cos ka\right]^{-1/2}$$

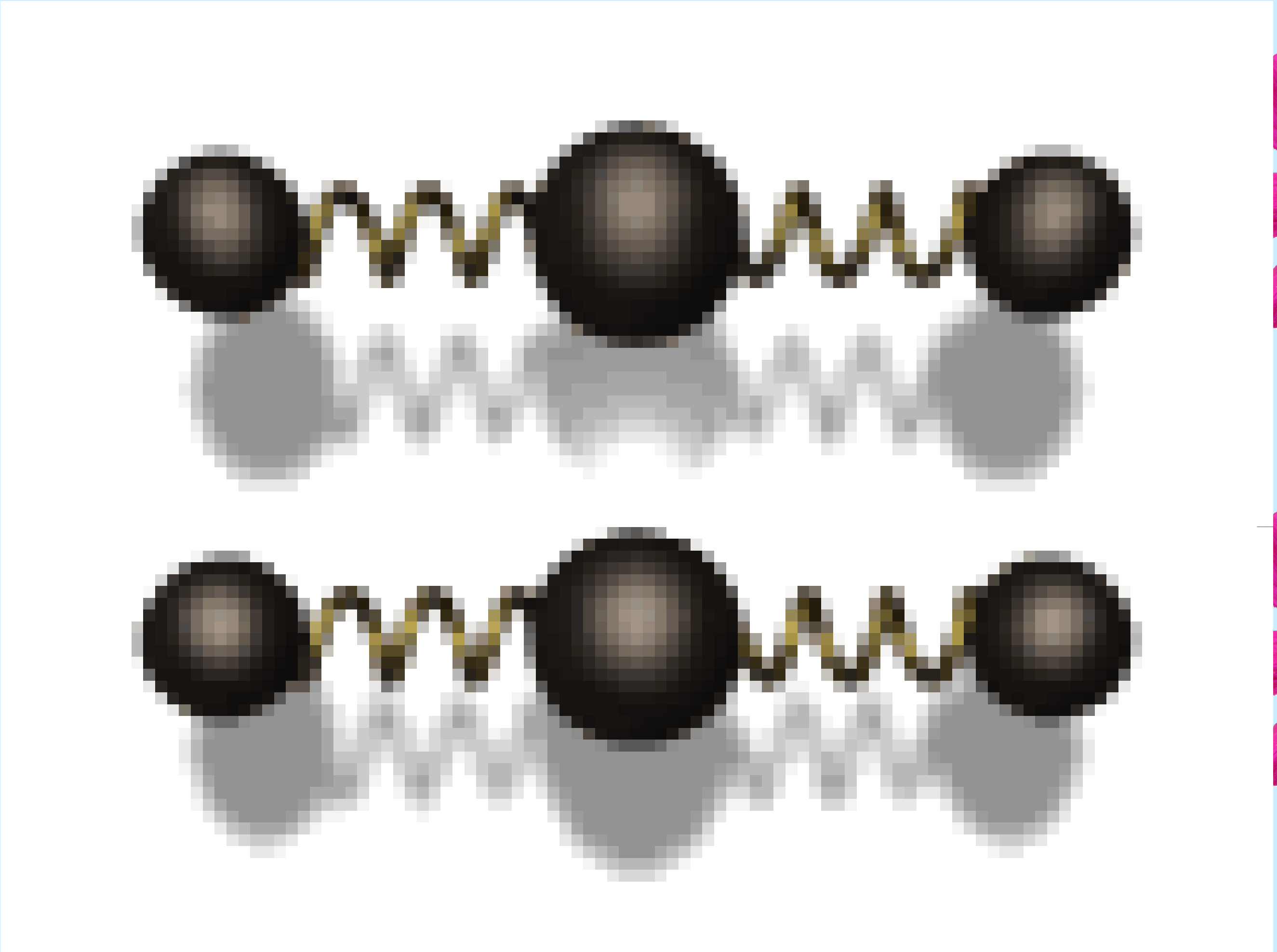
Untuk cabang akustik

$$Vg_2 = \frac{\partial \omega_2}{\partial k}$$

$$Vg_2 = \frac{\partial}{\partial k}\left[C\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) - C\left\{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{2}{m_1 m_2} + \frac{2}{m_1 m_2}\cos ka\right\}^{1/2}\right]^{1/2}$$

$$Vg_2 = -\frac{aC\sin ka}{2m_1 m_2}\left\{\begin{array}{l}\left[C\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) - C\left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{2}{m_1 m_2} + \frac{2}{m_1 m_2}\cos ka\right]\right]^{1/2} \\ \left[\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{2}{m_1 m_2} + \frac{2}{m_1 m_2}\cos ka\right]\end{array}\right]^{-1/2}$$

ANIMASI PHONON



LATIHAN SOAL :

1. Jelaskan persamaan dispersi untuk kristal berbasis satu dan dua atom.
2. Hitung kecepatan kelompok untuk sebuah gelombang pada kristal monoatomik dan diatomik.
3. Tentukan frekuensi/energi untuk cabang optik.
4. Tentukan frekuensi /energi untuk cabang akustik.

Latihan soal

1. Sebuah gelombang elastis merambat didalam krital monoatomik satu dimensi dengan konstanta kisi sebesar 2 A^0.

   Tentukan :

a. w (k) dan kecepatan group (v_g) pada energi : 1 eV dan $0,8.10^{-18}$ Joule

b. Batas nilai k dan panjang gelombang (λ)$_{max}$ yang membatasi daerah Brillouin-I

c. Buatlah grafik sebagai fungsi (k), untuk kasus diatas.

Latihan soal :

2.a.Jelaskan tentang konsep vibrasi kristal,

b.Jelaskan 4(empat) karakteristik dari kristal monoatomik

c.Jelaskan 4(empat) karakteristik dari kristal di atomik.

3. Turunkan kecepatan group untuk kristal di atomik untuk cabang

a. optik

b. akustik

Test Unit I :

Selasa : 7 April 2009

Materi : Bab I – III

Test Unit II :

Selasa 02 Juni 2009

Materi : Bab IV- VI

Test Unit III :

Di jadwal Tentamen

Materi : Bab : VII - X

TUGAS TIAP KELOMPOK DIKUMPULKAN : PADA SAAT TU-I

A. Print-Out Tugas Kelompok 1-3:
   Soal di Kittel (bab I)
   Buku b'wien (Modul 1-2)
   Semua latihan soal (selama kuliah)

B. Print-Out Tugas Kelompok 4-6:
   Soal di Kittel (bab 2)
   Buku b'wien (Modul 3-4)
   Semua latihan soal (selama kuliah)

C. Print-Out Tugas Kelompok 7-10:
   Soal di Kittel (bab 3)
   Buku b'wien (Modul 5-6)
   Semua latihan soal (selama kuliah)