GETARAN KRISTAL

Rita Prasetyowati
Fisika FMIPA UNY
2012

Tegangan yang bekerja pada elemen batang dx menghasilkan gaya sebesar :

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

- ➔ massa elemen batang tersebut ($\rho A dx$) mendapatkan percepatan sebesar $(\partial^2 u / \partial t^2)$

➔ Sehingga : $$\rho A dx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = A\{\sigma(x+dx) - \sigma(x)\}$$

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

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

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

$$= E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx$$

Diperoleh : $$\rho A dx \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = E \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} dx \,.\, A$$

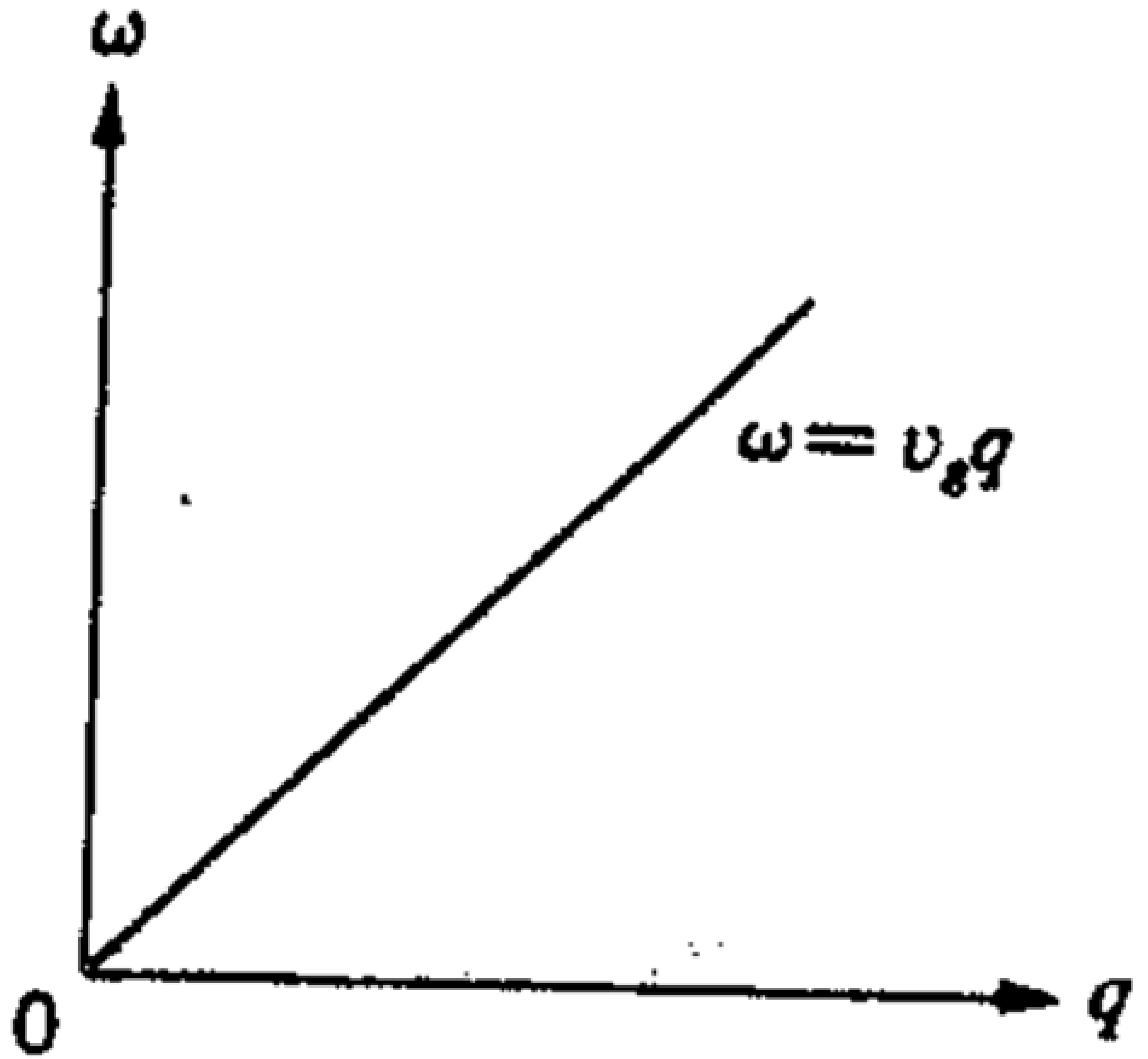
Disederhanakan : $$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \left(\frac{\rho}{E}\right) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$$ **➔ persamaan gelombang elastis**

- 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 $v_s = \left(\frac{E}{\rho}\right)^{1/2}$ 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*



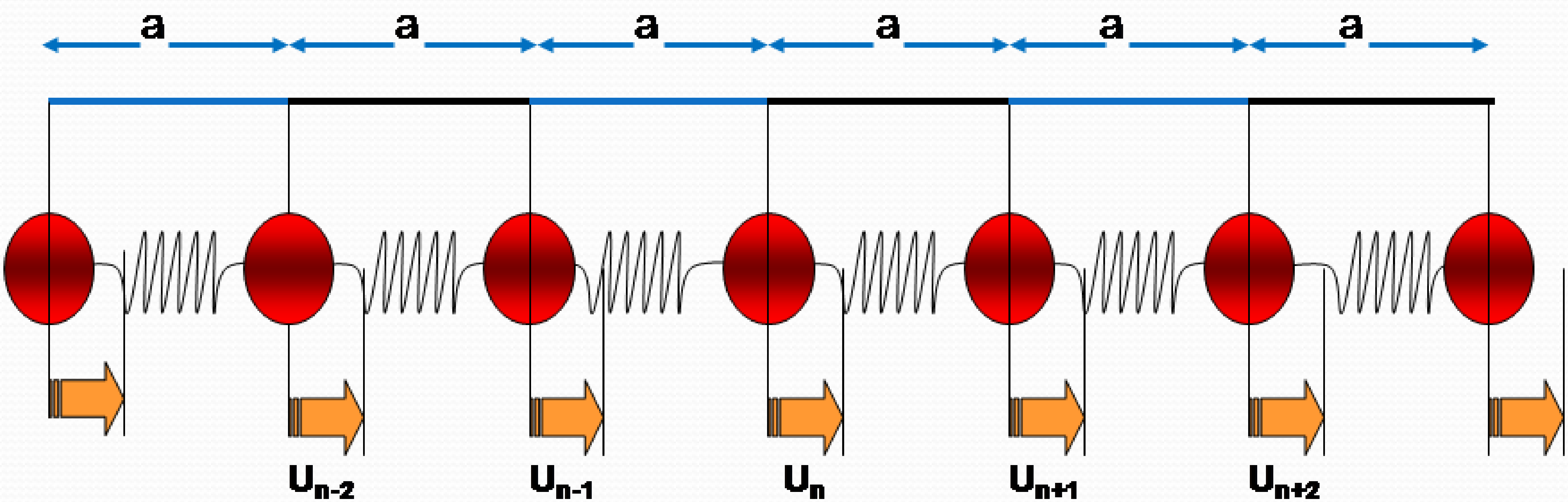
Dispersion curve of an elastic wave.

Gelombang Kekisi

- Pada bahasan sebelumnya, diasumsikan bahan sebagai medium kontinyu dan mengabaikan kediskritan 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 kediskritan kekisi (bahwa kekisi bahan terdiri atas atom-atom) dimana ketika panjang gelombangnya cukup pendek, atom mulai menghamburkan gelombang dan mengurangi kelajuan gelombang

Modus Normal Monoatomik 1D

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



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

- Ditinjau atom ke-n : gaya yang bekerja pada atom ini diakibatkan oleh interaksi dengan atom ke-(n+1) yaitu $-\alpha(u_{n+1} - u_n)$ dengan u_{n+1} 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:

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

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 $u_n = Ae^{i(kX_n - \omega t)}$

  dengan X_n adalah posisi setimbang atom ke-n, yaitu $X_n = na$

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

- Dengan mensubstitusikan solusi ke persamaan gerak, diperoleh:

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

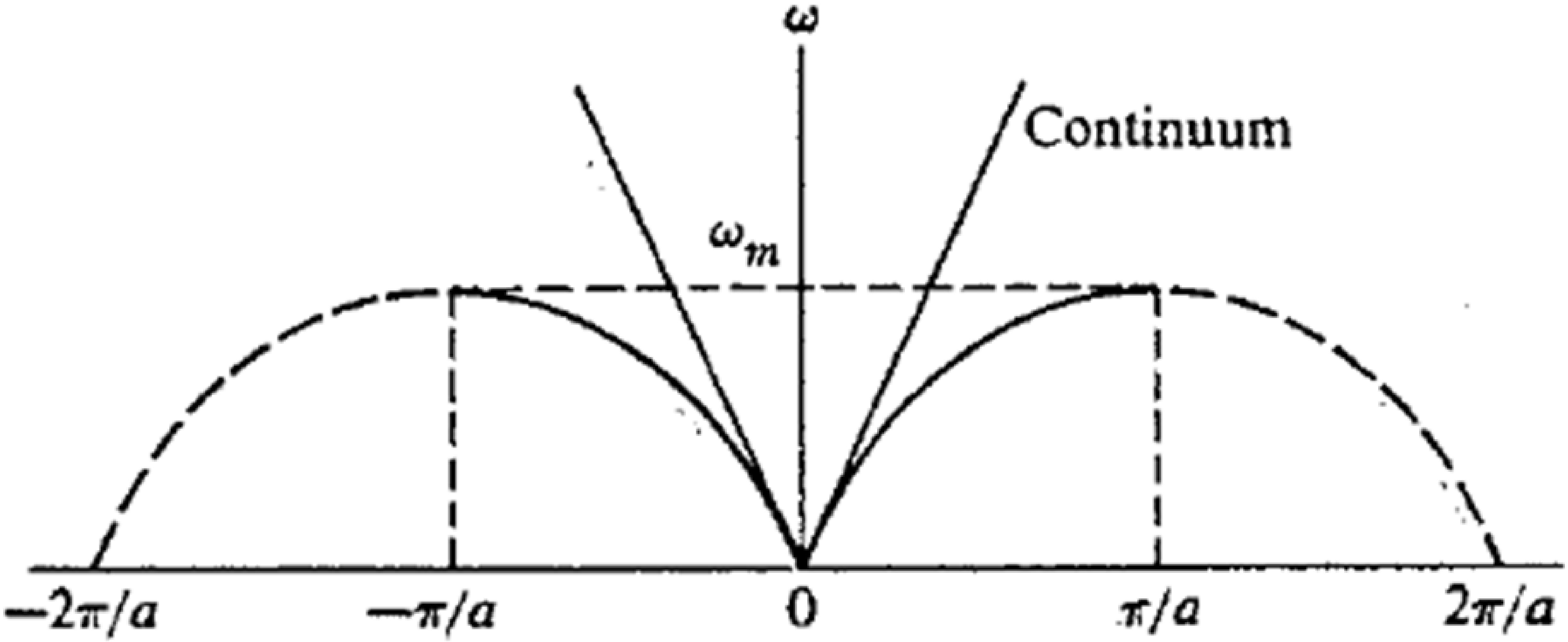
Crystal Dynamics

- Atomic motions are governed by the forces exerted on atoms when they are displaced from their equilibrium positions.

- To calculate the forces it is necessary to determine the wavefunctions and energies of the electrons within the crystal. Fortunately many important properties of the atomic motions can be deduced without doing these calculations.

Dihasilkan:

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



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 dilewatkan oleh kekisi, frekuensi lainnya dilemahkan → *low-pass filter*
- Untuk panjang gelombang yang besar, $k \to 0$ sehingga

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

yang bersifat linear seperti pada medium kontinyu

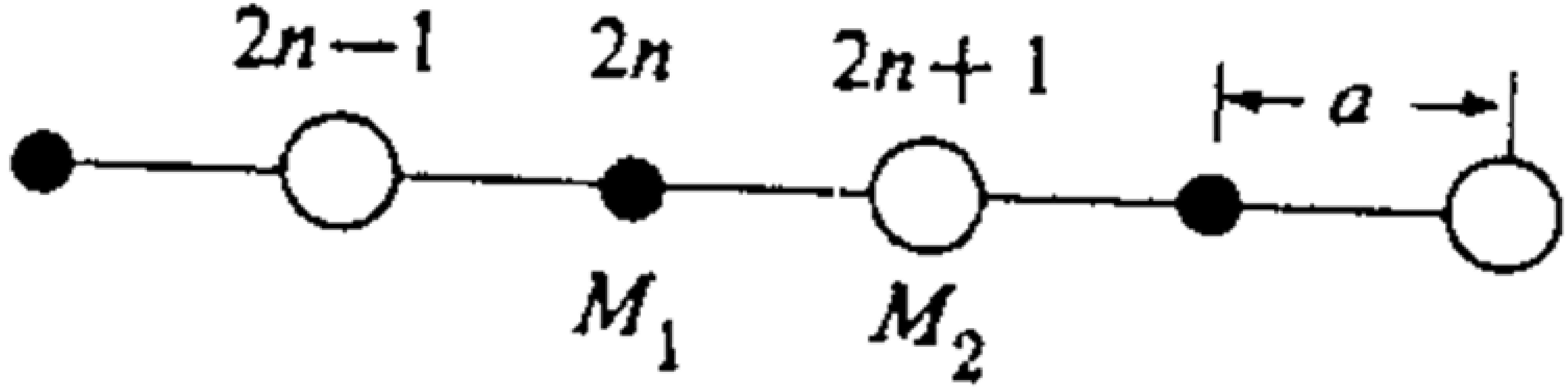
- Kurva dispersi memiliki sifat simetri: periodik pada ruang-k yaitu pada interval $-\pi/a < k < \pi/a$ dan memiliki simetri cermin pada $k = 0$
- Interval $-\pi/a < k < \pi/a$ tidak lain merupakan zona Brillouin pertama sehingga kajian pada ruang-k dapat dibatasi hanya pada zona pertama saja
- Simetri 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 $n = 0, \pm1, \pm2$, dst. 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

Modus Normal Diatomik

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

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

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

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

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

- Dicoba solusi dalam bentuk:

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

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:

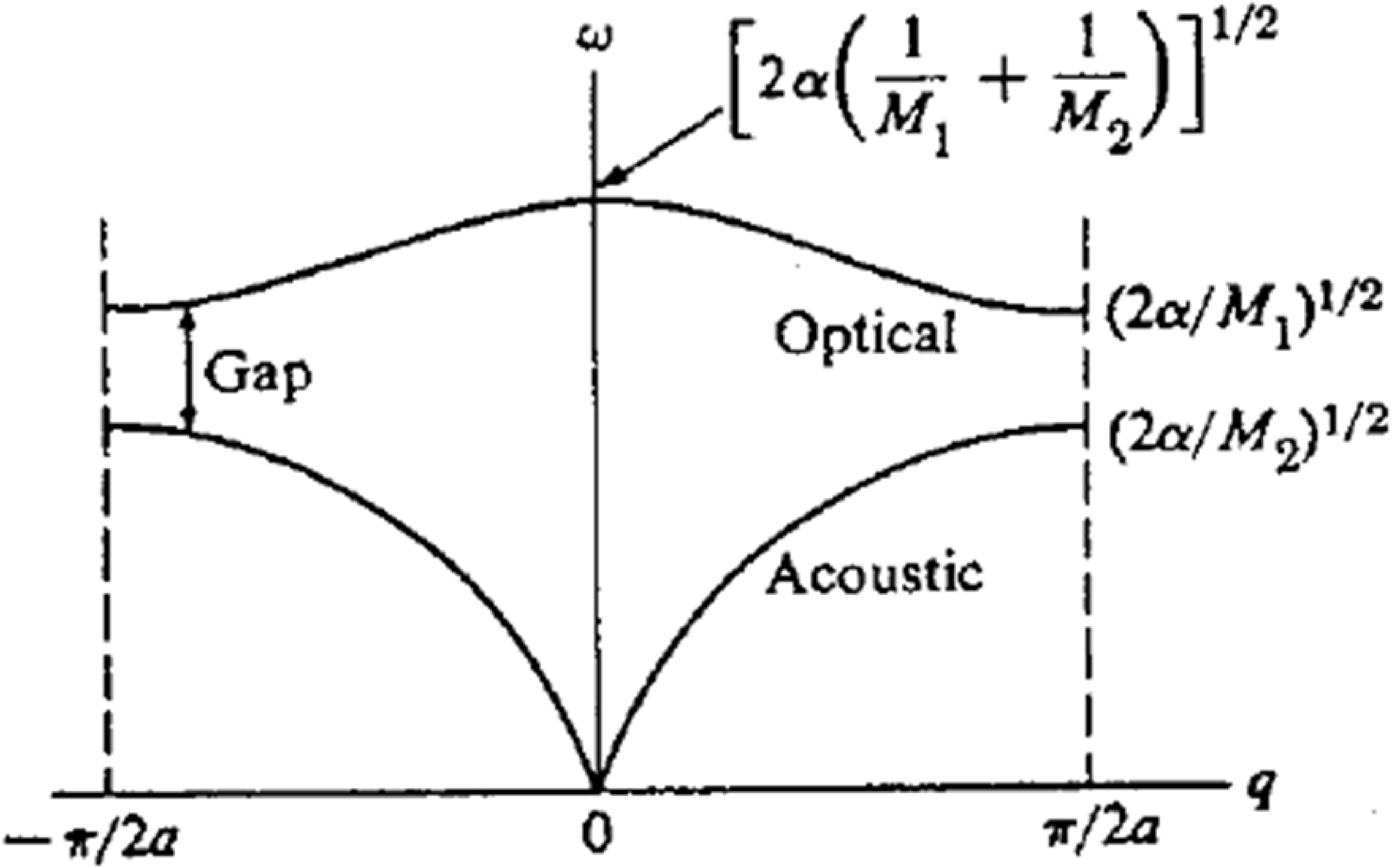
$$\begin{vmatrix} 2\alpha - M_1\omega^2 & -2\alpha\cos(ka) \\ -2\alpha\cos(ka) & 2\alpha - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

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:

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



ω
$\left[2\alpha\left(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2}\right)\right]^{1/2}$
$(2\alpha/M_1)^{1/2}$
Optical
Gap
$(2\alpha/M_2)^{1/2}$
Acoustic
q
$-\pi/2a$
0
$\pi/2a$

- Atom-atom penyusun kristal TIDAK DIAM pada posisinya di titik kisi tetapi BERGETAR pada posisi KESETIMBANGANNYA.
- Mengapa atom-atom bergetar ?

➔ akibat dari energi termal, yaitu energi panas yang dimiliki atom-atom (pada suhu kamar)

➔ disebabkan oleh gelombang yang merambat pada kristal (gelombang mekanik (bunyi/ultrasonik) atau gelombang termal (inframerah)

Kedua gelombang tersebut dapat menyebabkan getaran kisi.

Penyelesaian I : (frekuensi cabang optik)

$$\omega^2 = c\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right) + c\left[\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right)^2 - \frac{4\sin^2 qa}{Mm}\right]^{1/2}$$

➔Jika dihitung nilai frekuensi ini (sekitar ω2) ada di bawah gelombang inframerah (optik)

Penyelesaian II : (frekuensi cabang akustik)

$$\omega^2 = c\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right) - c\left[\left(\frac{1}{M}+\frac{1}{m}\right)^2 - \frac{4\sin^2 qa}{Mm}\right]^{1/2}$$

➔ sifatnyaseperti gelombang bunyi : q → 0, ω→0, dan q meningkat, ω juga meningkat secara "hampir" linier.

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

- Ditinjau dari panjang gelombang yang digunakan dan dibandingkan dengan jarak antar atom dalam kristal :

1. Pendekatan gelombang pendek

➔ gelombang yang digunakan memiliki panjang gelombang yang lebih kecil dari pada jarak antar atom

➔ gelombang akan "melihat" kristal sebagai tersusun oleh atom-atom yang diskrit

➔ pendekatan kisi diskret

2. Pendekatan gelombang panjang.

➔ gelombang yang digunakan memiliki panjang gelombang yang lebih panjang dari pada jarak antar atom

➔ kisi akan "nampak" malar (kontinyu) sebagai suatu media perambatan gelombang

➔ pendekatan kisi malar (kontinyu)

- 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

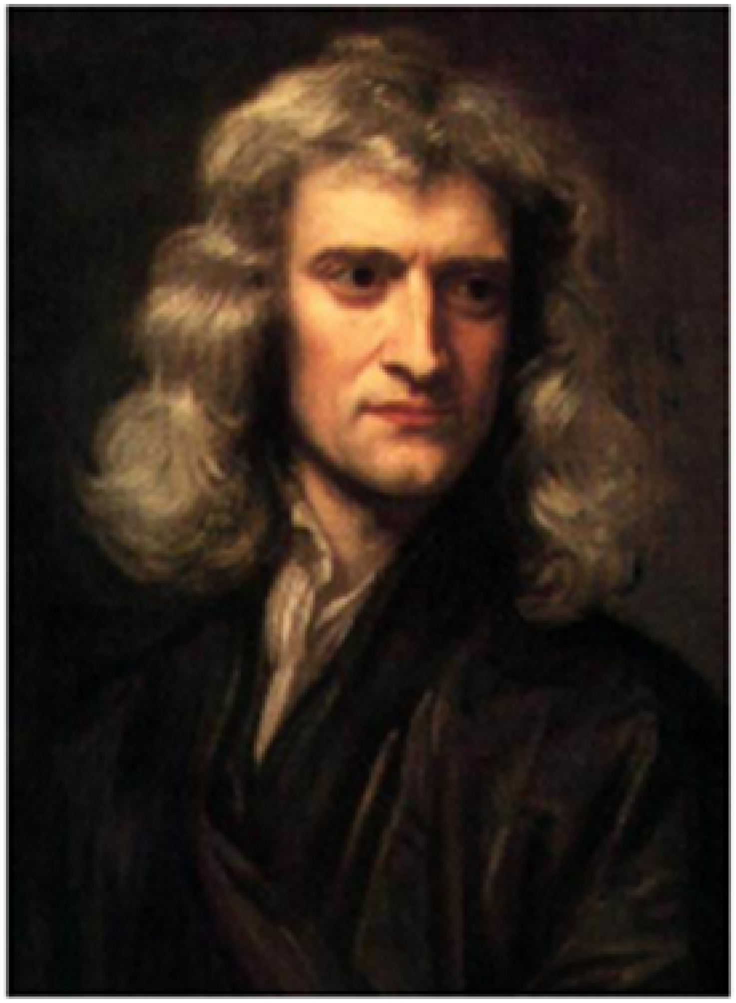
- Ketika panjang gelombangnya sangat panjang, struktur atom pada bahan dapat diabaikan dan bahan dapat ditinjau sebagai medium kontinyu
- Maka getaran kekisi dapat dilihat sebagai gelombang elastis
- Ditinjau perambatan gelombang elastik pada suatu batang logam yang panjang
- Misal gelombangnya longitudinal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

- ✓Regangan (*Strain*) ϵ (didefinisikan sebagai perubahan panjang per satuan panjang) dinyatakan sebagai $\epsilon = du/dx$
- ✓Tegangan (*Stress*) σ (didefinisikan sebagai gaya per satuan luas), menurut hukum Hooke, sebanding dengan *strain:*

$\sigma = E\,\epsilon$

Dengan E 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*

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