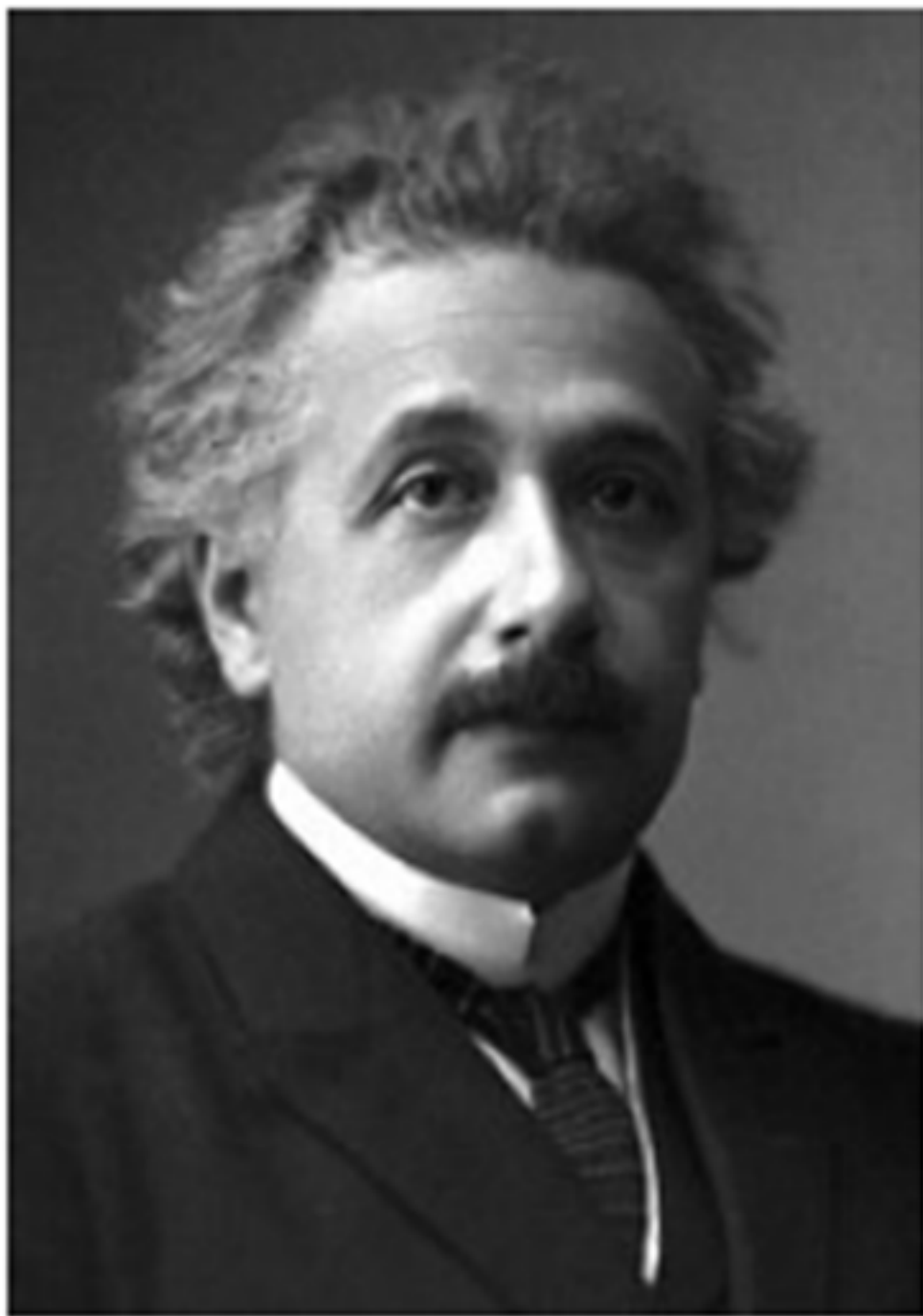


# SIFAT THERMAL KRISTAL

Rita Prasetyowati  
Fisika FMIPA UNY  
2012



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  $\varepsilon = n\hbar\omega$  dengan  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  dan  $\omega$  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:

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

- Persamaan tersebut menghasilkan:

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

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

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

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

dengan  $\omega_E$  adalah frekuensi Einstein

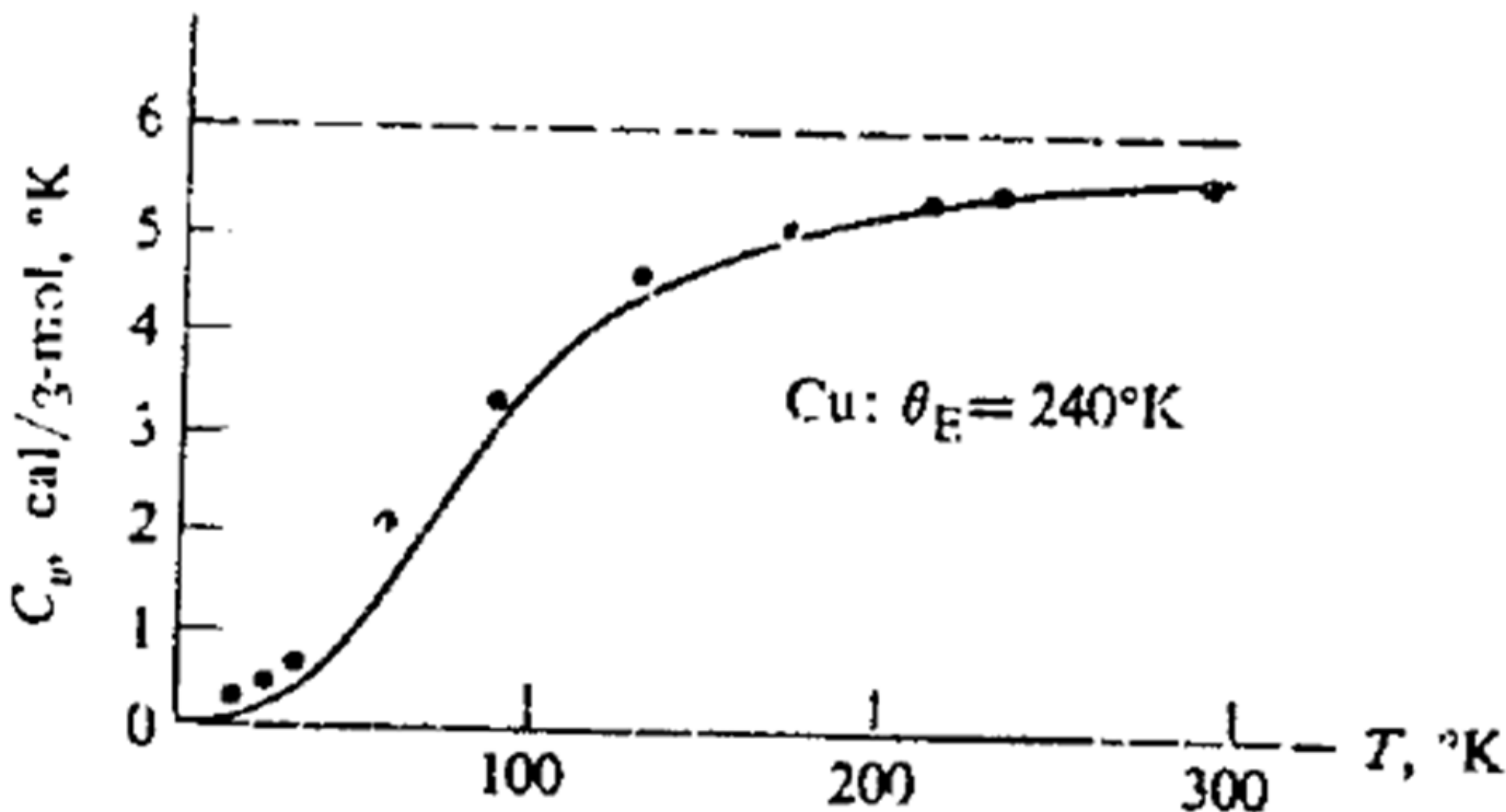
- Maka kalor jenisnya adalah:

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

- Persamaan tersebut dapat disederhanakan melalui substitusi suhu Einstein  $\theta_E$  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  $\theta_E$  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  $\omega$  pada model Einstein adalah tunggal, yaitu  $\omega_E$ , sedangkan pada model Debye nilai  $\omega$  bervariasi dari 0 hingga nilai  $\omega$  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 kontinyu, 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 (*cutoff 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  $n = N_A/V$

Dalam padatan, terdapat dua jenis energi thermal yang tersimpan di dalamnya yaitu

1. energi vibrasi atom-atom di sekitar posisi keseimbangannya
2. energi kinetik yang dikandung elektron-bebas.

Jika suatu padatan menyerap panas maka *energi internal* yang tersimpan dalam padatan meningkat yang diindikasikan oleh kenaikan temperaturnya.

- Energi total getaran kekisinya adalah:

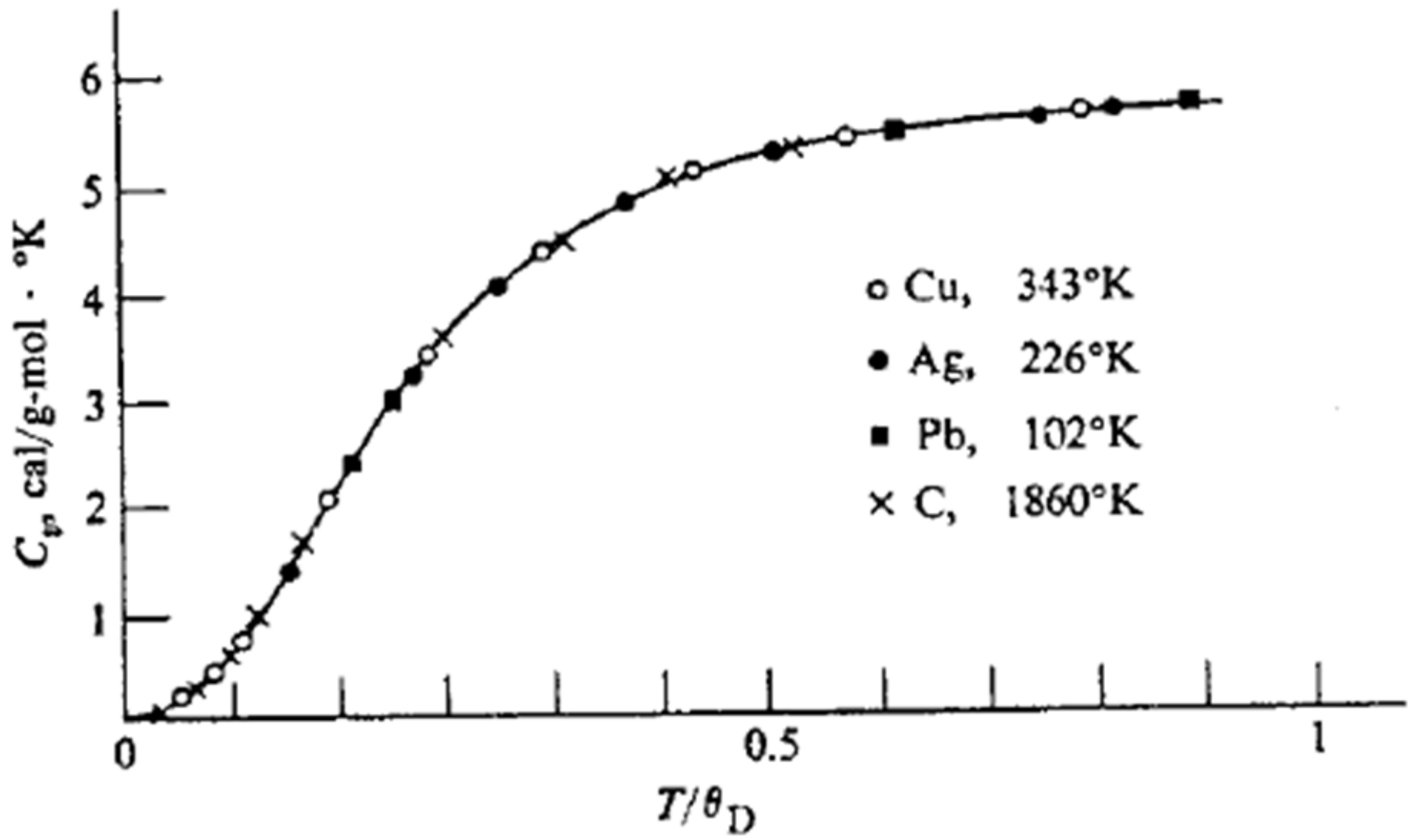
$$E = \frac{3V}{2\pi^2 v_s^3} \int_0^{\omega_D} \frac{\hbar \omega^3}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1} d\omega$$

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  $\theta_D$  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-Petit
- 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  $c_V \sim T^3$

# Ekspansi thermal (pemuaian)

- Koefisien muai volume,  $\alpha_v$ , adalah tiga kali koefisien muai panjang,  $\alpha_L$ .
- Pengukuran muai  $\alpha_L$  dilakukan pada tekanan konstan dengan relasi :

$$\alpha_L = \frac{1}{l} \left( \frac{dl}{dT} \right)_p$$



Analisis koefisien muai panjang dengan menggunakan model Debye, yang melibatkan kapasitas panas molar  $C_v$ , kompresibilitas  $\beta$ , dan volume molar  $V$ :

$$\alpha_v = 3\alpha_L = \frac{\gamma C_v \beta}{V}$$

dengan  $\gamma$  adalah konstanta *Gruneisen*

Tabel-11.1.  $c_p$ ,  $\alpha_L$ ,  $\gamma$ , untuk beberapa material.[7].

Material	$c_p$ (300 °K) cal/g °K	$\alpha_L$ (300°K) $1/^\circ\text{K} \times 10^6$	$\gamma$ (konst. Gruneisen)
Al	0,22	24,1	2,17
Cu	0,092	17,6	1,96
Au	0,031	13,8	3,03
Fe	0.11	10,8	1,60
Pb	0,32	28,0	2,73
Ni	0,13	13,3	1.88
Pt	0,031	8,8	2,54
Ag	0,056	19,5	2,40
W	0,034	3,95	1,62
Sn	0,54	23,5	2,14
Tl	0,036	6,7	1,75

# Thermal conduction by phonons

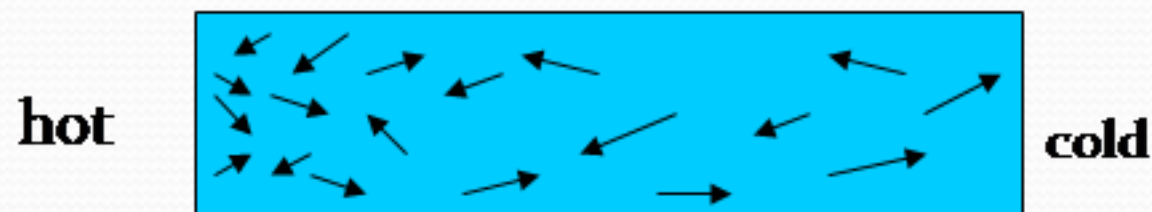
- A flow of heat takes place from a hotter region to a cooler region when there is a temperature gradient in a solid.
- The most important contribution to thermal conduction comes from the flow of phonons in an electrically insulating solid.
- *Transport property* is an example of thermal conduction.
- *Transport property is* the process in which the flow of some quantity occurs.
- *Thermal conductivity* is a transport coefficient and it describes the flow.
- The thermal conductivity of a phonon gas in a solid will be calculated by means of the elementary kinetic theory of the transport coefficients of gases.

# Heat conduction in a phonon and real gas

## The essential differences between the processes of heat conduction in a phonon and real gas;

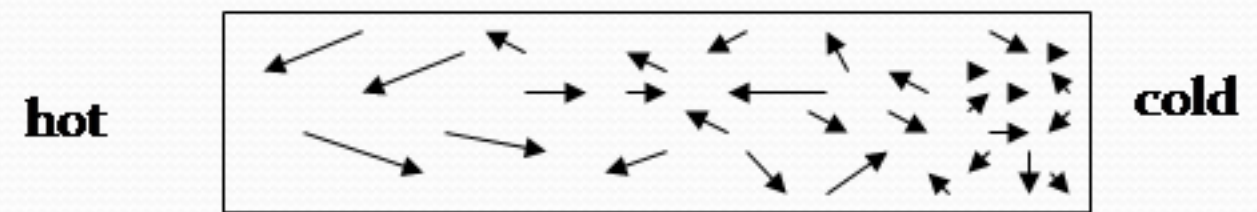
### Phonon gas

- Speed is approximately constant.
- Both the number density and energy density is greater at the hot end.
- Heat flow is primarily due to phonon flow with phonons being *created* at the hot end and *destroyed* at the cold end



### Real gas

- No flow of particles
- Average velocity and kinetic energy per particle are greater at the hot end, but the number density is greater at the cold end, and the energy density is uniform due to the uniform pressure.
- Heat flow is solely by transfer of kinetic energy from one particle to another in collisions which is a minor effect in phonon case.



# Konduktivitas thermal

- Laju perambatan panas pada padatan ditentukan oleh konduktivitas panas,  $\sigma_T$ , dan gradien temperatur,  $dT/dx$ .
- Jika didefinisikan  $q$  sebagai jumlah kalori yang melewati satu satuan luas (A) per satuan waktu ke arah  $x$  maka :

$$q = \frac{Q}{A} = -\sigma_T \frac{dT}{dx}$$

Jadi perubahan energi pada atom-atom dan elektron-bebas menentukan sifat-sifat thermal padatan. Sifat-sifat thermal yang akan kita bahas adalah

1. kapasitas panas
2. Pemuaian / ekspansi thermal
3. konduktivitas panas.

# Kapasitas kalor

- Kapasitas panas (*heat capacity*) adalah jumlah panas yang diperlukan untuk meningkatkan temperatur padatan sebesar satu derajat K.
- Konsep mengenai kapasitas panas dinyatakan dengan dua cara, yaitu :
  - a. Kapasitas panas pada volume konstan,  $C_v$ , dengan relasi :

$$C_v = \left. \frac{dE}{dT} \right|_v$$

dengan  $E$  adalah energi internal padatan yaitu total energi yang ada dalam padatan baik dalam bentuk vibrasi atom maupun energi kinetik elektronbebas.

b. Kapasitas panas pada tekanan konstan,  $C_p$ , dengan relasi :

$$C_p = \left. \frac{dH}{dT} \right|_p$$

dengan  $H$  adalah *enthalpi*.

$$H = E + PV$$



# Kalor Jenis

- Kalor jenis per mol didefinisikan sebagai  $c = \frac{\Delta Q}{\Delta T}$  dengan  $\Delta Q$  adalah panas yang dibutuhkan untuk menaikkan suhu 1 mol sebesar  $\Delta T$
- Jika proses dilakukan pada volume konstan, maka  $\Delta Q = \Delta E$  dengan  $\Delta E$  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)

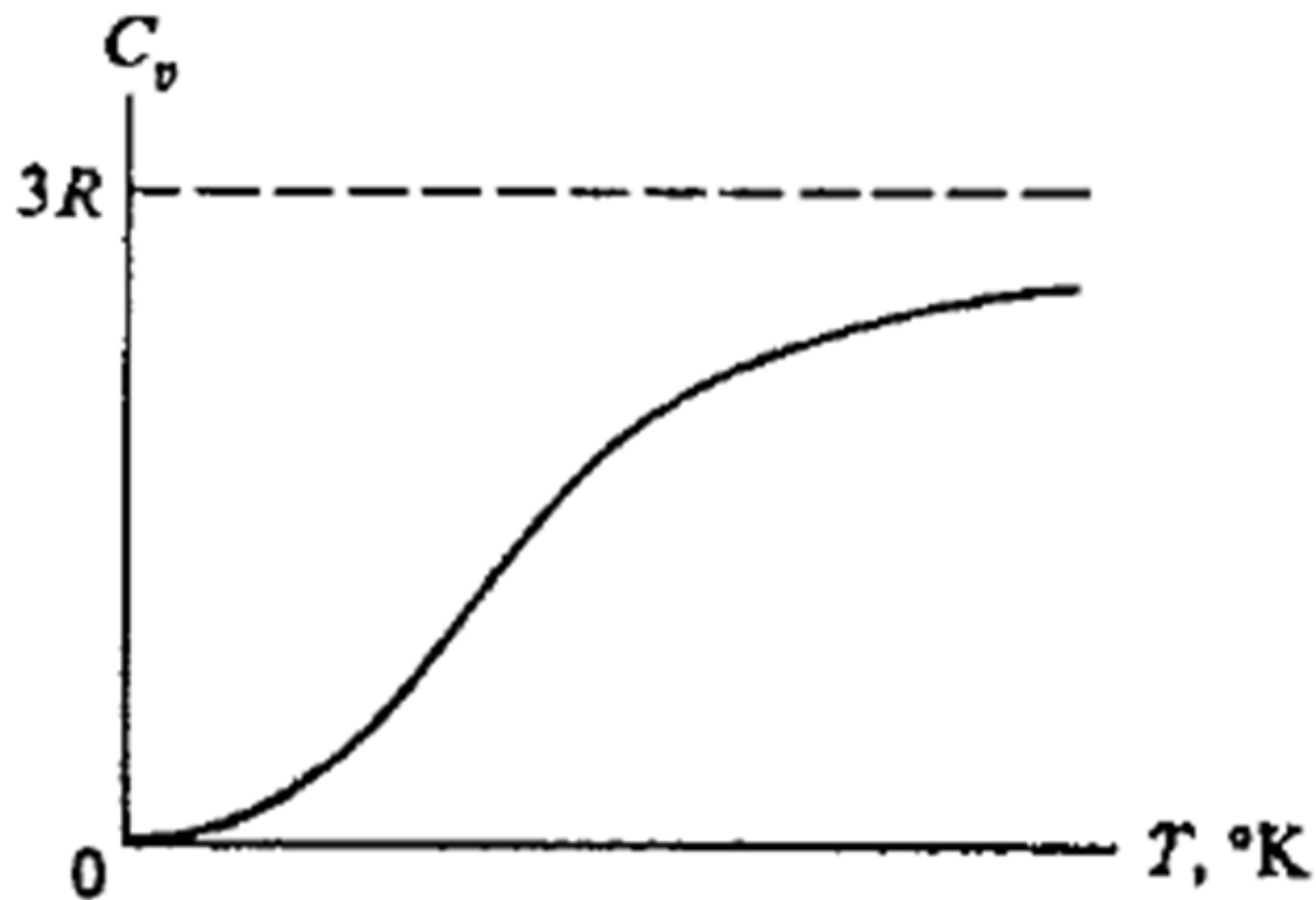
*French Physicist & Chemist*



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 bergetar di sekitar titik kekisi seperti osilator harmonik
- Energi internal rerata untuk osilator 1-D adalah  $\varepsilon = k_B T$
- Untuk kasus 3-D, maka  $\varepsilon = 3k_B T$
- Maka untuk 1 mol atom,  $\varepsilon = 3N_A k_B T = 3RT$  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