BAB IV
VIBRASI KRISTAL

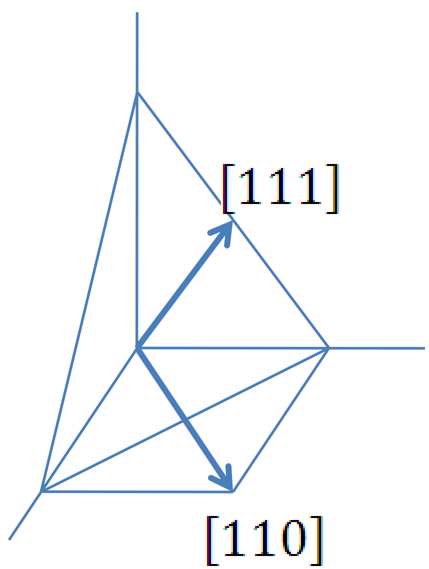
Phonon : partikel yang terdapat dalam gelombang elastis

TIK : menentukan frekuensi gelombang elastik dalam bentuk wave vector $(\vec{k})$ ω= f (k)

GETARAN KRISTAL yang BERBASIS SATU ATOM (MONOATOMIK)

Kita mulai dengan kasus yang sederhana yaitu :

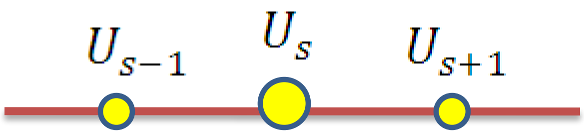
Kasus yang melibatkan getaran kristal akibat adanya gelombang elastis yang merambat dalam arah [100]; [110]; [111]



untuk setiap vektor gelombang $(\vec{k})$ terdapat 3 model getaran yaitu :

1 buah gelombang longitudinal

2 buah gelombang transfersal



Sekarang kita anggap KRISTAL akan merespon gelombang elastik secara linier terhadap gaya. Artinya : Gaya yang bekerja pada bidang kristal yang ke-s adalah sebanding dengan selisih simpangannya.

Jadi

$$F_s = C(U_{s+1} - U_s) + C(U_{s-1} - U_s)$$

$$F_s = C(U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s) \quad \ldots\ldots. (1)$$

Dengan :

$$F_s = gaya\ yang\ bekerja\ pada\ bidang\ kristal\ yang\ ke-s$$

$$C = tetapan\ elastisitas$$

$$U_s = simpangan\ bidang\ kristal\ yang\ ke-s$$

$$U_{s+1} = simpangan\ bidang\ kristal\ yang\ ke-s+1$$

$$U_{s-1} = simpangan\ bidang\ kristal\ yang\ ke-s-1$$

Jadi persamaan gerak bidang kristal ke-s adalah :

$$F \Rightarrow m \cdot a = C \cdot \Delta x$$

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

Solusi dari persamaan gerak ini tergantung pada waktu (t)

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

Karena pers (2) merupakan turunan hanya terhadap waktu maka:

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

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

Karena itu pers (2) dapat ditulis :

$$-\omega^2 \mathrm{m} U_s = \mathrm{c}(U_{s+1} + U_{s-1} - 2U_s) \quad \text{............ (3)}$$

Solusinya : $U_s = e^{-i\omega t}$ dapat di tulis :

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

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

Secara lengkap Us dapat ditulis sbb :

$$U_s = U \cdot e^{-iksa} \quad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots (4) \qquad U = \text{Amplitudo}$$

Karena itu :

$$U_{s\pm 1} = U \cdot e^{-ik(s\pm 1)a} = U \cdot e^{-iksa} \cdot e^{\pm ika}$$

$$U_{s\pm 1} = U_s \cdot e^{\pm ika} \quad \ldots\ldots\ldots (5)$$

Pers (5) → (3) didapat :

$$-\omega^2 m U_s = c\left(U_s \cdot e^{ika} + U_s \cdot e^{-ika} - 2U_s\right)$$

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

Sehingga pers (6) menjadi :

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

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

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

$$ingat : 1 - coska = 1 - cos\alpha = 2sin^2\left(\frac{1}{2}\alpha\right)$$

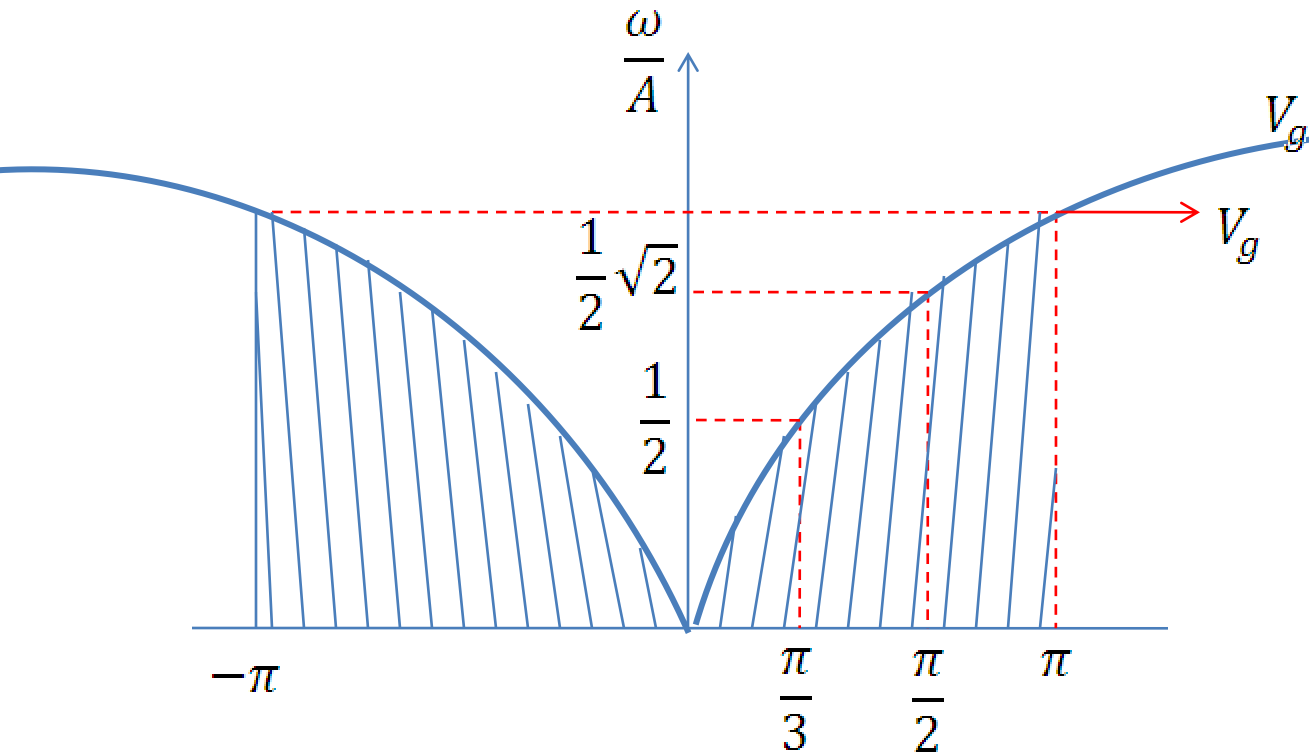
Akibatnya pers (7) menjadi :

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

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

Pers (8) menyatakan hubungan antara frekuensi sudut (ω) terhadap vektor gelombang $(\vec{k})$ ω = f (k)

Bila digambarkan dengan grafik :



$$\sin\frac{\pi}{2} = 90^\circ \rightarrow max = 1$$

$$\sin\frac{\pi/2}{2} = 45^\circ = \frac{1}{2}\sqrt{2}$$

$$\sin\frac{\pi/3}{2} = 30^\circ = \frac{1}{2}$$

daerah Brillouin I

Kecepatan group (kecepatan kelompok) (V_g)

$$V_g = \frac{d\omega}{dk} \rightarrow gradien$$

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

$$= \cancel{2}\sqrt{\frac{c}{m}} \cdot \frac{a}{\cancel{2}} \cdot \cos\frac{ka}{2}$$

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

Pada saat ka = π → $\frac{2\pi}{\lambda}a = \pi \rightarrow \lambda = 2a$

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

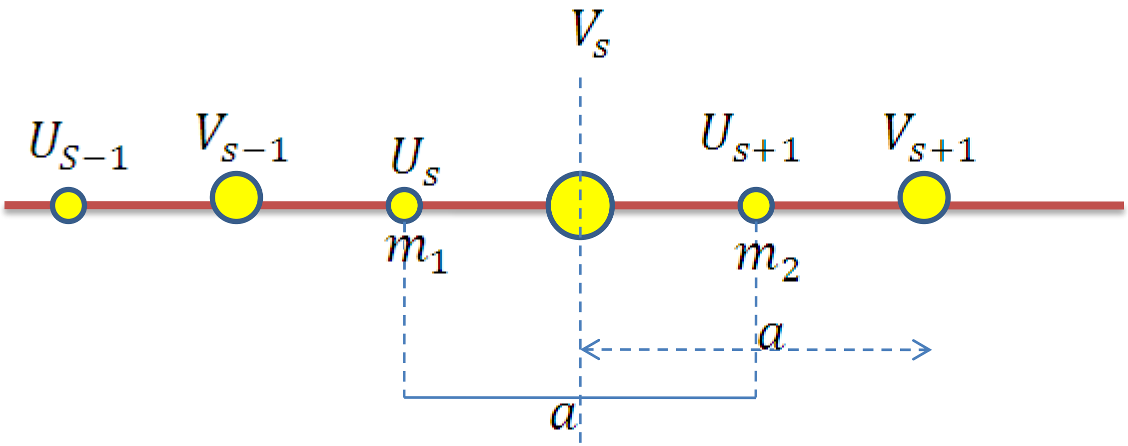
artinya : tidak ada gradien kemiringan

Untuk $ka = \frac{\pi}{2} = \frac{2\pi}{\lambda}a = \frac{\pi}{2} \rightarrow \lambda = 4a$

$$V_g = a\sqrt{\frac{c}{m}} \cdot \cos\frac{\pi}{4} \approx 0{,}47 \cdot a\sqrt{\frac{c}{m}}$$

→ ada gradien kemiringannya

VIBRASI KRISTAL DIATOMIK



Persamaan gerak :

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

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

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

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

Solusinya :

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

Pers (3) dapat dimasukan ke pers (1), di peroleh

$$U_s = U \cdot e^{i(ksa-\omega t)}$$

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

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

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

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

Dengan cara yang sama bila pers (3) dimasukkan ke pers (2) didapat :

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

Dari pers (4) dan (5) bila dibuat Determinan :

$$\begin{bmatrix} 2c - m_1\omega^2 & (-c)\left(1 + e^{ika}\right) \\ (-c)\left(1 + e^{-ika}\right) & 2c - m_2\omega^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U \\ v \end{bmatrix} = [0]$$

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

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

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

Ingat : $e^{\pm ika} = \cos ka \pm i \sin ka$

Maka :

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

Gunakan rumus ABC

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

$$ingat\ 1-\cos ka = sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)$$

$$(\omega_1)^2 = c\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) + c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad \text{...... (6)}$$

$$(\omega_2)^2 = c\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right) - c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2} sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)} \quad \text{...... (7)}$$

Grafik :

$$untuk\ k = 0 \rightarrow \omega_{op}^2 = 2c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) \rightarrow \omega_{op} = \sqrt{2c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)}$$

$$\omega_{ak}^2 = c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) - c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) = 0$$

$$k = \frac{\pi}{a} \rightarrow \omega_{op}^2 = c\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right) + c\sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^2 - \frac{4}{m_1 m_2}} +$$

$$c\sqrt{\frac{1}{m_1}^2 + \frac{1}{m_2}^2 + \frac{2}{m_1 m_2} - \frac{4}{m_1 m_2}}$$

$$\omega_{op}^2 = c\left(\frac{1}{m_1} + \cancel{\frac{1}{m_2}}\right) + c\left(\frac{1}{m_1} - \cancel{\frac{1}{m_2}}\right)$$

Jadi

$$\omega_{op}^2 = \frac{2c}{m_1} \quad \text{.........} \ (8)$$

Dengan cara yang sama :

$$\omega_{ak}^2 = c\left(\cancel{\frac{1}{m_1}} + \frac{1}{m_2}\right) - c\left(\cancel{\frac{1}{m_1}} - \frac{1}{m_2}\right)$$

Jadi

$$\omega_{ak}^2 = \frac{2c}{m_2} \quad \text{.........}(9)$$

Bila

$$m_1 < m_2 \rightarrow \sqrt{\frac{2c}{m_1}} > \sqrt{\frac{2c}{m_2}}$$

Yang terjadi adalah tidak ada celah terlarang

Artinya : untuk setiap energi selalu menghasilkan getaran