

Perhitungan Kurva Dispersi dari Vibrasi Fonon untuk Kisi Satu Dimensi secara Numerik dengan Matlab

Septia E.M.P.* , Vessabhu W.K., Frans W., Fransiska R.W. dan R. Hidayat*

Abstrak

Dalam struktur kristal, fonon dapat memiliki pengaruh besar terhadap sifat kapasitas panas dan sifat elektroniknya. Vibrasi fonon berbeda dengan vibrasi dalam suatu molekul, yang biasanya merupakan vibrasi individual dari suatu pasangan atom yang berikatan secara langsung. Fonon adalah vibrasi atom-atom yang terjadi secara kolektif, yang terjadi pada frekuensi karakteristik dan arah perjalanan tertentu, bergantung pada struktur kristalnya. Karakteristik vibrasi fonon tersebut dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan geraknya, yang solusinya menghasilkan suatu bentuk kurva dispersi. Kurva ini merepresentasikan karakteristik antara vektor perjalanan fonon dan energinya di dalam kristal itu. Sementara solusi analitik untuk kristal berstruktur sederhana dapat diperoleh dengan mudah, tetapi tidak halnya untuk kristal yang kompleks. Dalam makalah ini akan dipaparkan hasil kegiatan Research Based Learning kami, bahwa dengan mengubah persamaan gerak tersebut ke dalam bentuk persoalan nilai eigen, maka solusi numeriknya dapat diperoleh secara cepat dan mudah dengan menggunakan fungsi yang tersedia dalam perangkat lunak saintifik, seperti Matlab. Hasil perhitungan dari program yang dibuat menunjukkan bahwa kurva dispersi yang mirip seperti dalam literatur atau buku teks Zat Padat. Kurva dispersi vibrasi fonon monoatomik satu dimensi hanya terdiri dari bagian akustik sedangkan kurva dispersi vibrasi fonon diatomik satu dimensi terdiri dari bagian akustik dan optik.

Kata-kata kunci: kristal, fonon, persoalan eigen, zat padat, research based learning

Pendahuluan

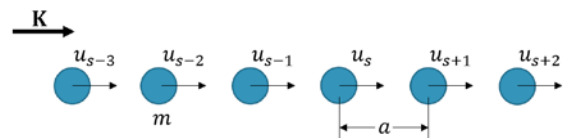
Vibrasi fonon adalah vibrasi atom secara kolektif pada suatu struktur kristal. Vibrasi ini memiliki frekuensi karakteristik dan arah rambat getaran ini bergantung pada struktur kristal yang ditinjau. Dalam buku pegangan kuliah Zat Padat, vibrasi fonon ini kerap ditinjau dari gerak osilasi harmonik. Persamaan gerak dari osilasi harmonik ini kemudian dapat diselesaikan secara analitik [1].

Penyelesaian secara analitik ini dapat diperoleh dengan mudah untuk struktur sederhana seperti yang akan dipaparkan pada teori dasar. Untuk struktur yang lebih kompleks, kerap penyelesaian secara numerik dapat memberikan solusi yang lebih cepat dan mudah. Oleh karena itu, sebagai bagian dari kegiatan pembelajaran Research Based Learning (RBL), kami mencoba mencari bagaimana penyelesaian secara numerik untuk menghitung kurva dispersi fonon tersebut. Di sini kami mencoba menggunakan fungsi-fungsi yang tersedia dalam perangkat lunak saintifik Matlab.

Teori Dasar

Untuk memahami peristiwa vibrasi fonon secara sederhana, kita bisa memulai dengan meninjau model kisi 1 dimensi saja. Kisi 1

dimensi ini dapat terbentuk dari satu jenis atom saja (monoatomik) atau dua jenis atom yang berbeda (diatomik). Kasus kisi monoatomik satu dimensi dengan konstanta kisi a dapat dimodelkan sebagai berikut.



Gambar 1. Ilustrasi vibrasi fonon pada model kisi monoatomik satu dimensi.

Gambar 1 mengilustrasikan atom-atom pembentuk kristal pada posisi setimbangnya $s-1, s, s+1, \dots$, sedangkan simpangan atom dari posisi setimbang dinyatakan dengan $u_{s-1}, u_s, u_{s+1}, \dots$. Getaran pada kisi yang kita tinjau saat ini adalah getaran longitudinal. Diasumsikan pula bahwa interaksi antar atom terdiri dari gaya restorsi yang memenuhi sifat-sifat dari hukum Hooke, sehingga persamaan gerak atom ke- s dapat dituliskan sebagai berikut

$$m \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2} = \alpha(u_{s+1} + u_{s-1} - 2u_s) \quad (1)$$

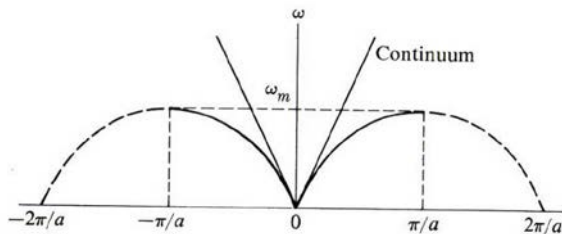
dengan α adalah tetapan restorsi. Karena kisi memiliki simetri translasi, maka massa atom akan sama pada setiap interval panjang kisi a . Oleh karena itu, solusi persamaan di atas akan berbentuk periodik pula, yakni

$$u_s(t) = u_s e^{i(\omega t)} = u_0 e^{i(Ksa - \omega t)} \quad (2)$$

yang merupakan solusi persamaan diferensial dari persamaan gerak di atas. Nilai frekuensi sudut ω dan tetapan propagasi K , tidak saling independen, tetapi membentuk suatu hubungan yang berbentuk

$$\omega^2 = \frac{2\alpha}{m} (1 - \cos Ka) \quad (3)$$

dan membentuk suatu kurva dispersi dari vibrasi fonon dalam kristal seperti ditunjukkan oleh Gambar 2. Bentuk kurva dispersi ini menunjukkan bahwa cara propagasinya tidak seperti gelombang dalam ruang bebas (*continuum*), dimana ω berbanding secara linier dengan K .



Gambar 2. Kurva dispersi dari vibrasi fonon dalam kristal satu dimensi monoatomik (dari referensi [2])

Gambar 3 mengilustrasikan kisi satu dimensi diatomik (dengan massa masing-masing M_1 dan M_2) dengan konstanta kisi a . Persamaan gerak untuk masing-masing massa dapat ditulis sebagai berikut

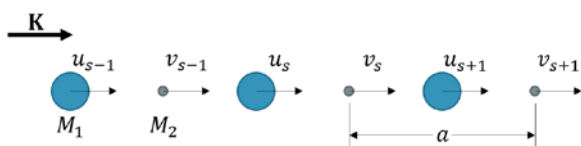
$$M_1 \frac{\partial^2 u_s}{\partial t^2} = \alpha(v_{s+1} + v_{s-1} - 2u_s) \quad (4)$$

$$M_2 \frac{\partial^2 v_s}{\partial t^2} = \alpha(u_{s+1} + u_s - 2v_s) \quad (5)$$

dimana u_s dan v_s adalah simpangan masing-masing atom-atom akibat gerak vibrasinya. Serupa dengan kasus sebelumnya, karena vibrasi atom tersebut bersifat periodik juga, sehingga u_s dan v_s tersebut dapat dituliskan sebagai berikut:

$$u_s(t) = u_s e^{i(\omega t)} = u_0 e^{i(Ksa - \omega t)} \quad (6)$$

$$v_s(t) = v_s e^{i(\omega t)} = v_0 e^{i(Ksa - \omega t)} \quad (7)$$



Gambar 3. Ilustrasi vibrasi fonon pada kasus kisi satu dimensi diatomik.

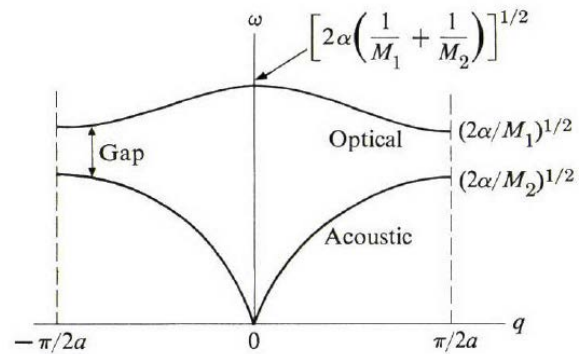
Dengan mensubstitusikan persamaan 6 dan 7 ke persamaan 4 dan 5, kita dapat memperoleh sebuah set persamaan linier yang dapat dituliskan dalam bentuk matriks

$$\begin{pmatrix} 2\alpha - M_1 \omega^2 & -\alpha(1 + e^{-iKa}) \\ -\alpha(1 + e^{iKa}) & 2\alpha - M_2 \omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

Persamaan tersebut dapat memiliki solusi non-trivialnya jika nilai frekuensi sudutnya adalah

$$\omega_{1,2}^2 = \alpha \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \alpha \left\{ \left(\frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 Ka}{M_1 M_2} \right\}^{1/2} \quad (9)$$

Solusi persamaan di atas dapat digunakan untuk melukiskan hubungan dispersi ω vs. K , seperti diilustrasikan dalam Gambar 4.



Gambar 4. Kurva dispersi dari vibrasi fonon diatomik satu dimensi pada referensi [2]

Metoda dan hasil

Perhitungan kurva dispersi dispersi di atas dilakukan dengan menggunakan persamaan linier di atas (pers. 8). Jika kita tulis ulang, pers. 8 dapat dituliskan sebagai

$$\begin{pmatrix} 2\alpha/M_1 & -\alpha/M_1(1 + e^{-iKa}) \\ -\alpha/M_2(1 + e^{iKa}) & 2\alpha/M_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} = \omega^2 \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}, \quad (10)$$

yang tidak lain adalah persamaan eigen. Untuk mencari solusi persamaan eigen tersebut dapat dilakukan dengan beberapa metoda, yang biasanya didasari pada operasi perhitungan matriks. [3] Akan tetapi, perangkat lunak saintifik, seperti MATLAB atau Mathematica, telah menyediakan fungsi untuk mencari solusi dari persamaan tersebut.

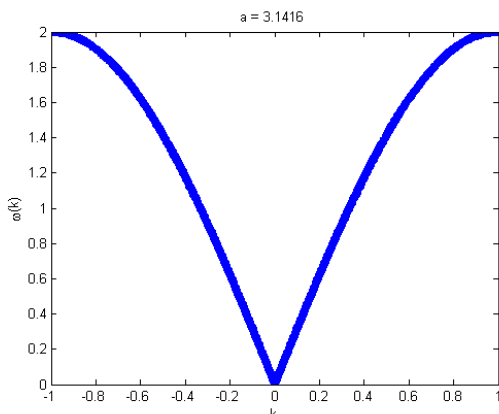
Jika kita perhatikan pers. 10 di atas, maka kita hanya akan memperoleh satu nilai ω dan K .

Untuk mendapatkan kurva dispersi yang lengkap, yakni untuk satu zona Brillouin pertama, maka perhitungan harus dilakukan untuk seluruh nilai k yang mungkin. Untuk itu perlu dilakukan diskritisasi untuk rentang zona tersebut. Semakin kecil diskritisasi yang dilakukan, maka ukuran matriks menjadi besar. Berikut contoh penggalan program yang dibuat.

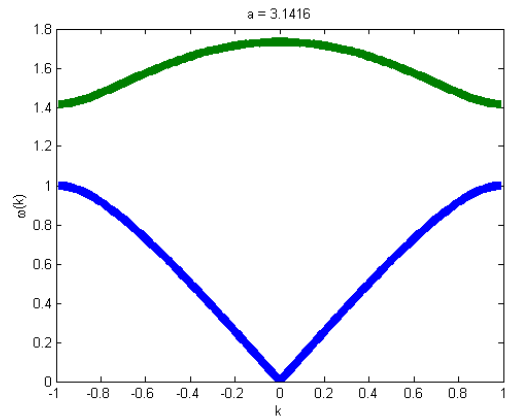
```
%penghitungan G dan k serta pembuatan
dummy matrix
G = pi/a;
k = (1/(n+1))*(G)*(-n:1:n);
Q = zeros(2,2);
s1 = zeros(n+1,1);
s2 = zeros(n+1,1);
i=1;

for j = -n:1:n
%pengisian elemen matriks persamaan
eigen
Q(1,1) = 2*alpha/m1;
Q(1,2) = - alpha *(1 + exp(-
(k(i)*a)*sqrt(-1)))/m1;
Q(2,2) = 2* alpha /m2;
Q(2,1) = - alpha *(1 +
exp((k(i)*a)*sqrt(-1)))/m2;
En = eig(Q);%pencarian nilai eigen
matriks
%pencarian solusi omega yang mungkin
s1(i) = sqrt(En(1));
s2(i) = sqrt(En(2));
i = i+1;
end
```

Gambar 5 dan 6 menunjukkan hasil perhitungan kurva dispersi untuk yang diperoleh dengan menggunakan cara seperti di atas. Tampak bahwa bentuk kurva serupa dengan yang diperoleh dengan cara analitik.



Gambar 5. Kurva dispersi untuk kristal satu dimensi monatomik hasil perhitungan numerik.



Gambar 6. Kurva dispersi untuk kristal satu dimensi diatomik hasil perhitungan numerik.

Dapat dilihat pada Gambar 5, untuk kisi satu dimensi monatomik, hasil perhitungan menunjukkan hanya ada satu moda, yakni moda akustik saja. Sedangkan pada Gambar 6 terdapat dua moda, yakni moda akustik dan optik. Puncak kurva dispersi berada pada bidang batas zona Brillouin.

Kesimpulan

Kurva dispersi yang diperoleh dari perhitungan numerik berhasil menggambarkan kurva dispersi vibrasi fonon dari kristal satu dimensi monoatomik maupun diatomik seperti yang terdapat pada beberapa referensi yang diperoleh secara analitik. Perhitungan tersebut dibangun dengan mengubah persamaan gerak, yang merupakan persamaan diferensial, menjadi sebuah set persamaan linier, yang juga merupakan persamaan eigen. Penyelesaian selanjutnya dengan menggunakan fungsi yang telah disediakan oleh perangkat lunak MATLAB untuk menyelesaikan persamaan eigen tersebut.

Referensi

- [1] C. Kittel. 2005. Introduction to Solid State Physics 8ed. USA: John Willey & Sons. Inc.
- [2] M.A. Omar, 1993, Elementary Solid State Physics: Principles and Applications, Addison-Wesley
- [3] S.I. Hayek, 2001, Advanced Mathematical Methods in Science and Engineering, Marcell-Dekker.

Septia Eka Marsha Putra*
Program Studi Fisika
Insititut Teknologi Bandung
septia.eka.m.p@students.itb.ac.id

Vessabhu Wijawa Kusumah
Program Studi Fisika
Insitut Teknologi Bandung
vessabhu@students.itb.ac.id

Frans Willy
Program Studi Fisika
Insitut Teknologi Bandung
frans.willy@students.itb.ac.id

Fransiska Ratih Widasari
Program Studi Fisika
Insitut Teknologi Bandung
fransiska.ratih@students.itb.ac.id

Rahmat Hidayat*
Program Studi Fisika
Insitut Teknologi Bandung
rahmat@fi.itb.ac.id

*Corresponding author