

STUDI KAITAN DISPERSI DAN PITA FREKUENSI TERLARANG GETARAN KEKISI DIATOMIK

$\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ DAN $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$

Moh. Toifur¹, Sujatmoko², Ridwan³ dan Wisnu Ari Adi³

¹Jurusan Fisika, Universitas Ahmad Dahlan Yogyakarta
Jl. Kapas 9, Semaki, Yogyakarta 55166

²Pusat Teknologi Akselerator dan Proses Bahan (PTAPB)-BATAN
Jl. Babarsari Kotak Pos 6101 Ykbb, Yogyakarta 55281

³Pusat Teknologi Bahan Industri Nuklir (PTBIN)-BATAN
Kawasan Puspiptek, Serpong 15314, Tangerang

ABSTRAK

STUDI KAITAN DISPERSI DAN PITA FREKUENSI TERLARANG GETARAN KEKISI $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ dan $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$. Telah dilakukan telaah mengenai getaran kekisi NiFe dengan perbandingan massa keduanya 1:1 dan 1:2, untuk mengetahui kaitan dispersi mode optik dan mode akustik dari frekuensi getarnya. Kekisi dimisalkan berbentuk rantai atom 1 dimensi yang dihubungkan dengan pegas seragam. Sebagai masukan digunakan tetapan kekisi (a) 3,62009 Å yang merupakan nilai terhitung dari pola XRD untuk lapisan NiFe hasil deposisi dengan teknik *sputtering* pada suhu 200 °C berbantuan medan *annealing* 150 G serta tipikal konstanta pegas (β) 32 N/m. Hasil penelitian menunjukkan, untuk $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ profil kaitan dispersi terdiri dari mode optik dan akustik dan tidak ada perbedaan bentuk antara *Brillouin zone* pertama ($0 < k < \pi/2a$) dengan yang lain. Sedangkan untuk $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$ pada larik kekisi Ni-Fe terdapat perbedaan kaitan dispersi antara zone pertama ($0 < k < \pi/2a$) dan kedua ($\pi/2a < k < \pi/a$) baik untuk mode optik maupun mode akustik. Untuk larik kekisi Ni-Ni, kaitan dispersi berupa mode optik yang terjadi pada zone pertama ($0 < k < \pi/a$). Selain itu pada kedua jenis kekisi $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ dan $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$ ditemukan lebar pita frekuensi terlarang yang sama yaitu $2,56 \times 10^{13}$ Hz hingga $2,63 \times 10^{13}$ Hz.

Kata kunci : Kaitan dispersi, Pita frekuensi terlarang, Mode optik, Mode akustik

ABSTRACT

A STUDY ABOUT DISPERSION RELATION AND FORBIDDEN FREQUENCY BAND OF DIATOMIC LATTICE VIBRATION $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ And $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$. A study about lattice vibration of NiFe with the mass ratio of 1:1 and 2:1 had been done for knowing the dispersion relation of optical mode and acoustical mode of the vibration frequencies. Lattice is assumed in the form of 1-D atomic chain connected with uniform springs. Lattice parameter (a) of 3.62009 Å as a calculated value from XRD spectrum of NiFe thin film resulted from sputtering deposition on the 200°C temperature, assisted with annealing field 150 G and typical of spring constant (β) 32 N/m is used as input. The result show that $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ has one dispersion relation profile, either optical mode or acoustical ones. No profile difference between the first Brillouin zone ($0 < k < \pi/2a$) and the others. While, for $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$, on the Ni-Fe chain, the dispersion relation between the first zone ($0 < k < \pi/2a$) and the second one ($\pi/2a < k < \pi/a$) shows difference, neither optical mode nor acoustical mode. On the Ni-Ni chain, the dispersion relation is in the optical mode only, no others and happened in the first zone ($0 < k < \pi/a$). Beside that, in the the two $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$ and $\text{Ni}_{66}\text{Fe}_{33}$ lattices, it is found the forbidden frequency band in the same width i.e. $(2.56 - 2.63) \times 10^{13}$ Hz.

Key words : Dispersion relation, Forbidden frequency band, Optical mode, Acoustical mode

PENDAHULUAN

Umumnya buku teks membahas getaran kekisi (fonon) untuk kekisi monoatomik atau diatomik. Pada kekisi monoatomik kekisinya diisi oleh satu jenis atom sedangkan pada kekisi diatomik, kekisinya diisi oleh dua

jenis atom yang tersusun secara berselang-seling. Pada bahan paduan antara Ni dan Fe dengan perbandingan massa Ni terhadap massa Fe 1:1 (atau $\text{Ni}_{50}\text{Fe}_{50}$) susunan atom-atomnya jika ditinjau dari larik satu dimensi terdiri

dari ...Ni-Fe-Ni-Fe..., sedangkan untuk Ni dan Fe dengan perbandingan massa 2:1 atau ($Ni_{66}Fe_{33}$) maka larik atom-atomnya berbentuk ...Ni-Ni-Fe-Ni-Ni-Fe... Oleh karena itu jenis kekisi $Ni_{50}Fe_{50}$ adalah diatomik, sementara untuk $Ni_{66}Fe_{33}$ tidak dapat dikatakan diatomik walaupun mengandung dua jenis atom yaitu Ni dan Fe. Hal ini disebabkan adanya dua jenis ikatan yaitu Ni-Fe dan Ni-Ni.

Sementara itu pembahasan teoritis mengenai kaitan dispersi kekisi diatomik telah ditulis secara lengkap oleh para fisikawan. Pembahasan terdiri dari 2 versi. Versi pertama, seperti ditulis peneliti sebelumnya [1-4], bahwa kedua jenis atom tersusun berselang-seling dihubungkan dengan pegas homogen. Versi kedua sebagaimana dinyatakan peneliti sebelumnya [5,6], kedua jenis atom tersusun berselang-seling dihubungkan dengan pegas tak homogen.

Pada makalah ini penulis menampilkan kaitan dispersi dari $Ni_{50}Fe_{50}$ mengikuti versi pertama, sedangkan untuk $Ni_{66}Fe_{33}$ masih merupakan hal yang baru karena disini tipologi getaran untuk ikatan antara Ni dan Fe berbeda dengan getaran untuk ikatan antara Ni dan Ni. Pembahasan tentang kaitan dispersi untuk NiFe penting karena bahan ini banyak digunakan sebagai perekam magnetik (*magnetic recording*) dan sensor pembaca (*reading head*) yang berbasis pada medan magnet lemah.

Sebagai perekam magnetik laju sinyal masukan yang berperan sebagai pembawa informasi akan berinteraksi dengan bahan perekam. Interaksi ini akan menimbulkan getaran kekisi pada bahan perekam. Besarnya angka gelombang (k) sinyal masukan berhubungan dengan frekuensi getaran kekisi tertentu (ω). Demikian pula sebagai sensor pembaca, kecepatan pita magnetik bergerak menentukan angka gelombang sinyal yang timbul. Sinyal ini diterima oleh *head* pembaca dan menimbulkan getaran kekisi pada *head* pembaca dengan frekuensi tertentu. Jika nilai k divariasikan maka akan diperoleh ω yang bervariasi juga. Hubungan antara variasi k dengan ω ini dikenal dengan kaitan dispersi. Dari hubungan antara k dengan ω dikenal ada dua tipe kaitan dispersi yaitu tipe akustik dan optik.

Model Kekisi $Ni_{50}Fe_{50}$

Misalkan kekisi 1 dimensi berisi rantai atom Ni dan Fe dengan massa masing-masing M dan m yang dihubungkan oleh pegas dengan konstanta pegas β menempati kedudukan sebagaimana ditunjukkan oleh Gambar 1.

Nama atom	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni	Fe	Ni
Gambar									
Massa atom	M	m	M	m	M	m	M	m	M
Identitas	$n-3$	$n-2$	$n-1$	n	$n+1$	$n+2$	$n+3$	$n+4$	$n+5$
Amplitudo	B	A	B	A	B	A	B	A	B

Gambar 1. Susunan atom-atom $Ni_{50}Fe_{50}$ pada kekisi 1 dimensi.

Tempat kedudukan masing-masing atom ditandai dengan ... $n-1, n, n+1, n+2$... Jika kisi bergetar maka M dan m akan menyimpang dari kedudukan setimbangnya. Misalkan simpangan maksimum M dan m sebesar A dan B . Menurut Hukum Newton II persamaan gerak untuk atom ke n dan $n+1$ adalah

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \beta(U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \quad \dots\dots\dots (1)$$

$$M \frac{d^2 U_{n+1}}{dt^2} = \beta(U_{n+2} + U_n - 2U_{n+1}) \quad \dots\dots\dots (2)$$

dimana

$$U_{n-1} = B e^{i(\omega t - k(n-1)a)} \quad \dots\dots\dots (3)$$

$$U_n = A e^{i(\omega t - kna)} \quad \dots\dots\dots (4)$$

$$U_{n+1} = B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} \quad \dots\dots\dots (5)$$

$$U_{n+2} = A e^{i(\omega t - k(n+2)a)} \quad \dots\dots\dots (6)$$

dan

- U_n = simpangan atom ke n
- ω = frekuensi fonon
- k = angka gelombang
- t = waktu

Jika persamaan (3), persamaan (4) dan persamaan (5) disubstitusikan ke (1) menjadi

$$-m\omega^2 A e^{i(\omega t - kna)} = \beta(B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} + B e^{i(\omega t - k(n-1)a)} - 2A e^{i(\omega t - kna)})$$

Jika $\beta e^{i(\omega t - kna)}$ pada ruas kanan dikeluarkan dari kurung maka menjadi

$$-m\omega^2 A e^{i(\omega t - kna)} = \beta e^{i(\omega t - kna)} (B e^{-ika} + B e^{ika} - 2A) \quad \dots(8)$$

dengan menghilangkan $e^{i(\omega t - kna)}$ pada kedua ruas maka diperoleh

$$-m\omega^2 A = \beta \left[2B \left(\frac{e^{ika} + e^{-ika}}{2} \right) - 2A \right] \quad \dots\dots\dots (9)$$

dengan mengingat $(e^{-ika} + e^{ika})/2 = \cos ka$, maka persamaan (9) menjadi

$$-m\omega^2 A = 2\beta B \cos ka - 2\beta A \quad \dots\dots\dots (10)$$

Jika ruas kanan persamaan (10) dipindah ke ruas kiri dan menyusun kembali dalam suku-suku yang mengandung variabel A dan B maka diperoleh

$$(2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos ka)B = 0 \quad \dots\dots\dots (11)$$

Selanjutnya dengan cara yang sama jika persamaan (4), persamaan (5) dan persamaan (6) disubstitusikan ke persamaan (2) maka diperoleh

$$-M\omega^2 B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} = \beta \left(A e^{i(\omega t - k(n+2)a)} + A e^{i(\omega t - kna)} - 2B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} \right) \dots (12)$$

Dengan mengeluarkan $e^{i(\omega t - k(n+1)a)}$ pada ruas kanan dari dalam kurung maka diperoleh

$$-M\omega^2 B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} = \beta e^{i(\omega t - k(n+1)a)} \left[A(e^{-ika} + e^{ika}) - 2B \right]$$

Dengan menghilangkan $e^{i(\omega t - k(n+1)a)}$ pada kedua ruas maka diperoleh

$$-M\omega^2 B = \beta \left[A(e^{-ika} + e^{ika}) - 2B \right] \dots (14)$$

Selanjutnya dengan menuliskan $e^{-ika} + e^{ika} = 2 \cos ka$, suku-suku pada ruas kanan dipindah ke ruas kiri dan mengelompokkan suku-suku sejenis dengan variabel A dan B maka persamaan (14) dapat diungkapkan menjadi

$$(-2\beta \cos ka)A + (2\beta - M\omega^2)B = 0 \dots (15)$$

Persamaan (11) dan persamaan (15) merupakan set persamaan dengan dua variabel A dan B , dimana A dan B dapat ditentukan jika determinannya sama dengan nol.

$$\begin{vmatrix} 2\beta - M\omega^2 & -(2\beta \cos ka) \\ -(2\beta \cos ka) & 2\beta - M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \dots (16)$$

$$\omega^4 - \frac{2\beta(m+M)}{mM} \omega^2 - \frac{4\beta^2 \sin^2 ka}{mM} = 0 \dots (17)$$

Penyelesaian dari persamaan (17) adalah :

$$\omega_{\pm} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4 \sin^2 ka}{mM}} \right]^{1/2} \dots (18)$$

Nilai ω pada persamaan (18) ada dua macam yaitu ω_+ untuk mode optik dan ω_- untuk mode akustik. Profil ω_{\pm} terhadap k dapat didiskripsikan melalui simulasi dengan masukan nilai-nilai β, m, M , dan a untuk Ni dan Fe yang diketahui.

Dari data diperoleh massa atom Ni 58,69 sma dan massa atom Fe 55,847 sma [7]. Tetapan pegasnya (β) diperoleh dengan memisalkan untuk pemberian kenaikan tenaga potensial sebesar 1 eV ($= 1,6 \times 10^{-19}$ joule) menyebabkan simpangan atom dari posisi setimbangnya sebesar $\delta a = 1 \text{ \AA}$ [3], sehingga dari kaitan:

$$\Delta V = \frac{1}{2} \beta \delta a^2 \dots (19)$$

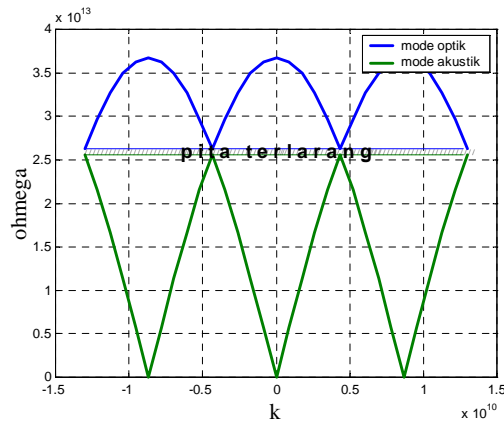
maka diperoleh β sama dengan 32 Nm. Konstanta kekisi a sebesar 3,62009 \AA merupakan nilai terhitung jarak antar bidang (d) sebesar 2,08223 \AA untuk indeks Miller [111]

pada pola spektrum sinar-X lapisan tipis NiFe hasil deposisi dengan teknik *sputtering* pada suhu 200 °C berbantuan medan *annealing* 150 G.

Persamaan untuk a untuk struktur kubik adalah:

$$a = d_{hkl} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} = d_{111} \sqrt{3} \dots (20)$$

Hubungan antara ω_{\pm} terhadap k dapat dilihat pada Gambar 2.



Gambar 2. Kaitan dispersi kekisi diatomik Ni₅₀Fe₅₀ untuk mode akustik dan mode optik.

Dari Gambar 2 dapat diamati bahwa jangkau frekuensi yang diijinkan terpisah menjadi dua mode yaitu mode optik dan mode akustik. Mode akustik mirip dengan kurva kaitan dispersi untuk kekisi monoatomik [2] sementara mode optik menyatakan tipe gerak gelombang yang lain. Dari nilai-nilai maksimum dan minimum kedua mode dapat diperjelas sebagai berikut

a. Nilai maksimum mode optik diperoleh dengan memasukkan $k \rightarrow 0$ sehingga $\sin ka \rightarrow 0$. Sehingga persamaan (10) menjadi

$$\omega_{+\max} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \sqrt{\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2} \right]^{1/2} = \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)} \quad (21)$$

Dengan memasukkan nilai β, m dan M maka diperoleh $\omega_{+\max} = 3,67 \times 10^{13}$ Hz.

b. Nilai minimum mode optik berlaku pada $k \rightarrow \pi/2a$ sehingga $\sin ka \approx 1$, maka persamaan (18) menjadi

$$\omega_{+\min} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4}{mM}} \right]^{1/2} \quad (22)$$

Dengan mengolah bagian yang berada di dalam tanda akar pada ruas kanan maka diperoleh:

$$\omega_{+\min} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right)^2} \right]^{1/2} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right) \right]^{1/2}$$

$$\omega_{+\min} = \sqrt{\frac{2\beta}{m}} \dots\dots\dots (23)$$

dengan memasukkan nilai β dan m diperoleh $\omega_{+\min} = 2,63 \times 10^{13}$ Hz.

- c. Nilai maksimum mode akustik terjadi pada $k \rightarrow \pi/2a$ sehingga

$$\omega_{-\max} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right)^2} \right]^{1/2} = \sqrt{\frac{2\beta}{M}} \quad (24)$$

dengan memasukkan nilai β dan M maka diperoleh $\omega_{-\max} = 2,56 \times 10^{13}$ Hz.

- d. Nilai minimum mode akustik diperoleh pada $k \rightarrow 0$ dan agar nilai ω pada persamaan (18) tidak sama dengan nol maka $\sin ka \cong ka$ [4] sehingga

$$\omega_{-\min}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \left(1 - \frac{(4k^2 a^2)mM}{(M+m)^2} \right)^{1/2}$$

dengan bantuan deret Taylor untuk x kecil sekali dari 1 maka dapat $(1+x)^p$ dapat diekspansikan menjadi

$$(1+x)^p = 1 + px + \frac{p(p-1)}{2!} x^2 + \dots \quad (26)$$

maka suku kedua pada ruas kanan persamaan (25) menjadi

$$\left(1 - \frac{(4k^2 a^2)mM}{(M+m)^2} \right)^{1/2} = 1 - \frac{1}{2} \frac{(4k^2 a^2)mM}{(M+m)^2} + \frac{1}{2!} \left(\frac{1}{2} \right) \left(-\frac{1}{2} \right) \left(\frac{(4k^2 a^2)mM}{(M+m)^2} \right)^2 + \dots$$

Jika dari persamaan (25) digunakan hanya sampai suku kedua mengingat suku ketiga dan seterusnya sangat kecil sehingga dapat diabaikan maka diperoleh:

$$\begin{aligned} \omega_{-\min}^2 &= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) \left(1 - \frac{(4k^2 a^2)mM}{2(M+m)^2} \right) \\ &= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \left(\beta \frac{(M+m)}{Mm} \right) \frac{(2k^2 a^2)mM}{(M+m)^2} \\ &= \beta \frac{2k^2 a^2}{(M+m)} \end{aligned}$$

$$\omega_{-\min} = ka \sqrt{\frac{2\beta}{M+m}} \dots\dots\dots (28)$$

Dari persamaan (28) jika $ka \rightarrow 0$ maka $\omega_{-\min} \approx 0$

Selain nilai-nilai karakteristik bagi ω tersebut, terdapat pula daerah yang berada diantara kedua mode frekuensi yang disebut pita terlarang. Kekisi tidak mungkin bergetar pada daerah frekuensi ini. Lebar pita (frekuensi) terlarang berada diantara $2,56 \times 10^{13}$ Hz hingga $2,63 \times 10^{13}$ Hz. Dengan mengikuti definisi Brillouin zone pertama yaitu untuk $-\pi/2a < k < \pi/2a$ (atau $-4,34 \times 10^9 < k < 4,34 \times 10^9$) maka

terdapat panjang gelombang terkecil yang masih menimbulkan gerakan atom yaitu yang terjadi pada batas zone $\lambda = 4a = 14,48 \text{ \AA}$.

Model Kekisi Ni₆₆Fe₃₃

Pada kekisi Ni₆₆Fe₃₃ mengingat perbandingan antara massa Ni dan Fe adalah 2:1 maka susunan atom-atomnya secara larik 1-dimensi adalah ...-Ni-Ni-Fe-... sebagaimana ditunjukkan oleh Gambar 3.

Nama atom	Fe	Ni	Ni	Fe	Ni	Ni	Fe	Ni	Ni
Gambar									
Massa atom	m	M	M	m	M	M	m	M	M
Identitas	n-3	n-2	n-1	n	n+1	n+2	n+3	n+4	n+5
Amplitudo	A	B	B	A	B	B	A	B	B

Gambar 3. Susunan atom-atom Ni₆₆Fe₃₃ pada kekisi 1 dimensi.

Menurut Hukum Newton II persamaan gerak untuk atom ke $n, n+1$ dan $n+2$ adalah:

$$m \frac{d^2 U_n}{dt^2} = \beta (U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n) \dots\dots\dots (29)$$

$$M \frac{d^2 U_{n+1}}{dt^2} = \beta (U_{n+2} + U_n - 2U_{n+1}) \dots\dots\dots (30)$$

$$M \frac{d^2 U_{n+2}}{dt^2} = \beta (U_{n+3} + U_{n+1} - 2U_{n+2}) \dots\dots\dots (31)$$

dengan

$$U_{n-1} = B e^{i(\omega t - k(n-1)a)} \dots\dots\dots (32)$$

$$U_n = A e^{i(\omega t - kna)} \dots\dots\dots (33)$$

$$U_{n+1} = B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} \dots\dots\dots (34)$$

$$U_{n+2} = B e^{i(\omega t - k(n+2)a)} \dots\dots\dots (35)$$

$$U_{n+3} = A e^{i(\omega t - k(n+3)a)} \dots\dots\dots (36)$$

Jika persamaan (32), persamaan (33) dan persamaan (34) disubstitusikan ke persamaan (29) menjadi

$$\begin{aligned} -m\omega^2 A e^{i(\omega t - kna)} &= \beta (B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} + B e^{i(\omega t - k(n-1)a)} - 2A e^{i(\omega t - kna)}) \\ &= \beta e^{i(\omega t - kna)} (B e^{-ika} + B e^{ika} - 2A) \dots (37) \end{aligned}$$

dengan membagi kedua ruas persamaan (27) dengan $e^{i(\omega t - kna)}$ dan dengan mengingat $e^{ika} + e^{-ika} = 2 \cos ka$ maka persamaan (37) dapat ditulis menjadi

$$-m\omega^2 A = \beta (2B \cos ka - 2A) \dots\dots\dots (38)$$

Dengan menggabungkan suku-suku dalam variabel A dan B diperoleh :

$$(2\beta - m\omega^2)A - (2\beta \cos ka)B = 0 \dots\dots\dots (39)$$

Selanjutnya jika persamaan (33), persamaan (34) dan persamaan (35) disubstitusikan ke persamaan (30) maka diperoleh:

$$-M\omega^2 B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} = \beta \left(B e^{i(\omega t - k(n+2)a)} + A e^{i(\omega t - kna)} - 2B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} \right)$$

dengan mengeluarkan $e^{i(\omega t - k(n+1)a)}$ pada ruas kanan dari dalam kurung maka diperoleh

$$-M\omega^2 B e^{i(\omega t - k(n+1)a)} = \beta e^{i(\omega t - k(n+1)a)} (B e^{-ika} + A e^{ika} - 2B)$$

Karena pada kedua ruas terdapat $e^{i(\omega t - k(n+1)a)}$ maka dapat saling menghilangkan sehingga persamaan (41) menjadi

$$-M\omega^2 B = \beta (B e^{-ika} + A e^{ika} - 2B) \quad \dots (42)$$

Dengan menggabungkan suku-suku yang mengandung variabel A dan B maka diperoleh

$$(\beta e^{ika})A + (\beta(e^{-ika} - 2) + M\omega^2)B = 0 \quad \dots (43)$$

Kemudian jika persamaan (34), persamaan (35) dan persamaan (36) disubstitusikan ke persamaan (31) dan membagi kedua ruas dengan dengan $e^{i(\omega t - k(n+2)a)}$ maka diperoleh persamaan dalam variabel A dan B:

$$(\beta e^{-ika})A + (\beta(e^{ika} - 2) + M\omega^2)B = 0 \quad \dots (44)$$

Disini diperoleh 3 persamaan dengan dua variabel A dan B yaitu persamaan (39), persamaan (43) dan persamaan (44). Walaupun demikian tidak bisa memilih dua diantara ketiga persamaan tersebut secara sembarang, karena secara fisis persamaan (39) dan persamaan (43) terkait dengan interaksi antara atom Fe dan atom Ni sedangkan persamaan (43) dan persamaan (44) terkait dengan interaksi antara atom Ni dan atom Ni. Dengan demikian masing-masing pasangan memiliki penyelesaian ω sendiri-sendiri.

Dari set persamaan (39) dan persamaan (43) dengan menyusun kembali dalam bentuk perkalian matrik, menjadi

$$\begin{pmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta \cos ka \\ \beta e^{ika} & \beta(e^{-ika} - 2) + M\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad \dots (45)$$

Persamaan (45) dapat diselesaikan jika determinannya sama dengan nol.

$$\begin{vmatrix} 2\beta - m\omega^2 & -2\beta \cos ka \\ \beta e^{ika} & \beta(e^{-ika} - 2) + M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \dots (46)$$

Persamaan (46) jika disusun dalam variabel ω maka diperoleh

$$mM\omega^4 - \beta(2M + 2m - m e^{-ika})\omega^2 + 2\beta^2(2 - \cos ka e^{ika} - e^{-ika}) = 0$$

Dengan mengingat

$$e^{ika} = \cos ka + i \sin ka$$

$$e^{-ika} = \cos ka - i \sin ka \quad \dots (48)$$

maka kedua persamaan terdiri dari bagian riil dan bagian imajiner. Sesuai dengan realitas maka hanya diambil bagian riilnya, sehingga persamaan (47) menjadi

$$mM\omega^4 - \beta(2M + 2m - m \cos ka)\omega^2 + 2\beta^2(2 - \cos^2 ka - \cos ka) = 0$$

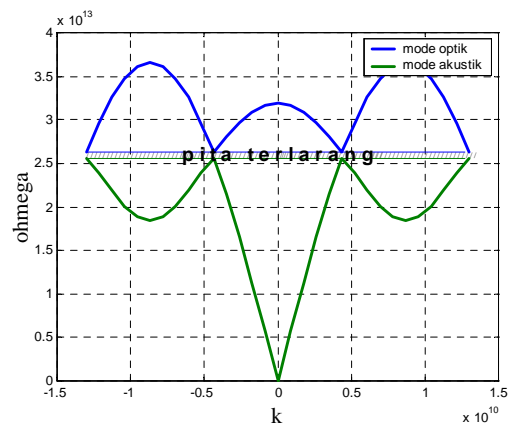
Persamaan (49) merupakan persamaan kuadrat dalam ω^2 yang akar-akarnya.

$$\omega^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M + 2m - m \cos ka) \pm \sqrt{(2M + 2m - m \cos ka)^2 - 8mM(2 - \cos^2 ka - \cos ka)} \right]$$

atau

$$\omega_{\pm} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{\cos ka}{2M} \right) \pm \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{\cos ka}{2M} \right)^2 + \frac{2}{mM} (\cos^2 ka + \cos ka - 2)} \right]^{1/2}$$

Ini menyatakan frekuensi getaran untuk pasangan Ni-Fe. Dengan memasukkan nilai-nilai β, m, M, a , maka diperoleh hubungan ω_{\pm} terhadap k dalam bentuk grafik seperti ditampilkan pada Gambar 4.



Gambar 4. Kaitan dispersi kekisi diatomik Ni₆₆Fe₃₃ antara atom Ni dan Fe.

Untuk gelombang elastik, secara fisik hanya daerah Brillouin zone yang penting, namun sebagaimana pada Gambar 4, daerah ini terbagi menjadi 2 bagian dengan profil yang berbeda baik untuk mode optik ω_{\pm} maupun untuk mode akustik ω_{-} . Zone 1 yaitu pada $-\pi/2a < k < \pi/2a$ dan zone 2 yaitu pada $-\pi/a < k < -\pi/2a$ dan $\pi/2a < k < \pi/a$). Melalui nilai maksimum dan minimum, kedua mode dapat diperjelas sebagai berikut

a. Nilai Maksimum Mode Optik

Nilai maksimum mode ini terdiri dari dua macam yaitu jenis 1 (ω_{+max1}) dan jenis 2

() dan jenis 2 ()

Studi Kaitan Dispersi dan Pita Frekuensi Terlarang Getaran Kekisi $Ni_{50}Fe_{50}$ dan $Ni_{66}Fe_{33}$ (Moh. Toifur)

($\omega_{+max 2}$). $\omega_{+max 1}$ terkait dengan frekuensi getar kekisi Ni-Fe sedangkan $\omega_{+max 2}$ terkait dengan frekuensi getar kekisi Ni-Ni.

(1) Nilai maksimum mode optik jenis 1 ($\omega_{+max 1}$) terjadi pada $k \rightarrow 0$. Akibatnya $\cos ka = 1$, dan persamaan (51) menjadi

$$\omega_{+max 1} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{1}{2M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{1}{2M} \right)^2 + \frac{2}{mM}(1+1-2)} \right]^{1/2}$$

$$= \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{1}{2M} \right) + \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{1}{2M} \right) \right]^{1/2} = \left[\beta \left(\frac{2}{m} + \frac{1}{M} \right) \right]^{1/2}$$

$$\omega_{+max} = \sqrt{2\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{2M} \right)} \dots \dots \dots (52)$$

Dengan memasukkan nilai-nilai β , m dan M maka diperoleh $\omega_{+max 1} = 3,19 \times 10^{13}$ Hz. Nilai ini lebih kecil dibanding dengan ω_{+max} pada $Ni_{50}Fe_{50}$ sebagaimana telah disebutkan pada persamaan (21).

(2) Nilai maksimum mode optik jenis 2 ($\omega_{max 2}$) terjadi pada $k = \pi/a$ ($= 0,87 \times 10^{10}$). Akibatnya $\cos ka = -1$. Dengan mensubstitusikan nilai ini pada persamaan (51) dan mengkuadratkan maka diperoleh

$$\omega_{+max 2}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} + \frac{1}{2M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} + \frac{1}{2M} \right)^2 + \frac{2}{mM}(1-1-2)}$$

$$= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right)^2 - \frac{4}{mM}}$$

$$= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right)^2 - \frac{4}{mM}}$$

$$= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) + \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) \left(1 - \frac{4}{mM \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right)^2} \right)^{1/2}$$

Karena nilai $4/mM \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right)^2$ cukup kecil dibanding 1 maka dapat digunakan ekspansi menurut deret Taylor sebagaimana pada persamaan (26) sehingga menjadi

$$\omega_{+max 2}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) + \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right) \left(1 - \frac{4}{2mM \left(\frac{1}{m} + \frac{3}{2M} \right)^2} \right) \dots \dots \dots (53)$$

Jika suku terakhir ruas kanan persamaan (53) diabaikan karena dari nilai terhitung berorde 10^{-28} maka diperoleh

$$\omega_{+max 2} = \sqrt{2\beta \left(\frac{3}{2M} + \frac{1}{m} \right)} \dots \dots \dots (54)$$

Dengan memasukkan nilai β , m dan M maka diperoleh $\omega_{+max 2} = 3,66 \times 10^{13}$ Hz.

Nilai Minimum Mode Optik

Nilai minimum mode optik terjadi pada $k = \pi/2a$ ($= 0,43 \times 10^{10}$). Dengan mengkuadratkan persamaan (51) menjadi:

$$\omega_{+min}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{\cos ka}{2M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} - \frac{\cos ka}{2M} \right)^2 + \frac{2}{mM}(\cos^2 ka + \cos ka - 2)}$$

Karena $\cos ka = 0$, maka

$$\omega_{+min}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+2m) + \sqrt{(2M+2m)^2 - 16mM} \right]$$

$$\omega_{+min}^2 = \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 + \frac{2}{mM}(-2)}$$

$$= \beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) + \beta \left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right) = \frac{2\beta}{m}$$

$$\omega_{+min} = \sqrt{\frac{2\beta}{m}} \dots \dots \dots (55)$$

Dengan memasukkan nilai β , m dan M maka diperoleh $\omega_{+min} = 2,63 \times 10^{13}$ Hz. Nilai ini sama dengan yang dihitung dari persamaan (23) yaitu nilai minimum mode optik untuk $Ni_{50}Fe_{50}$.

Nilai Maksimum Mode Akustik

Nilai maksimum mode akustik terjadi pada $k = \pi/2a$ ($= 0,43 \times 10^{10}$), sehingga $\cos ka = 0$. Dengan mensubstitusikan nilai ini pada persamaan (51), maka diperoleh

$$\omega_{-max} = \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right)^2 - \frac{4}{mM}} \right]^{1/2}$$

$$= \left[\beta \left(\frac{1}{m} + \frac{1}{M} \right) - \beta \sqrt{\left(\frac{1}{m} - \frac{1}{M} \right)^2} \right]^{1/2}$$

$$\omega_{-max} = \sqrt{\frac{2\beta}{M}} \dots \dots \dots (56)$$

Dengan memasukkan nilai β dan M maka diperoleh $\omega_{-max} = 2,56 \times 10^{13}$ Hz. Nilai ini sama dengan ω_{-max} pada $Ni_{50}Fe_{50}$ sebagaimana disebutkan pada sub bagian 2 persamaan (24).

Nilai Minimum Mode Akustik Terdiri dari 2 Macam yaitu Jenis 1 ($\omega_{-min 1}$) dan Jenis 2 ($\omega_{-min 2}$)

(1) Nilai minimum mode akustik jenis 1 terjadi pada $k \rightarrow 0$. Dengan mengkuadratkan persamaan (50) maka diperoleh

$$\omega_{-\min 1}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2m+2M-m) - \sqrt{(2m+2M-m)^2 + 8mM(\cos^2 ka - 1 + \cos ka - 1)} \right]$$

Untuk $k \rightarrow 0$ maka $\cos ka \cong 1$ atau $\cos ka - 1 \cong 0$ sehingga persamaan menjadi

$$\omega_{-\min 1}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+2m-m) - \sqrt{(2M+2m-m)^2 + 8mM(\cos^2 ka - 1)} \right]$$

Selanjutnya dengan menggantikan $\cos^2 ka - 1 = \sin^2 ka$ dan untuk $ka \rightarrow 0$ maka $\sin ka \approx ka$ maka persamaan menjadi

$$\omega_{-\min 1}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+m) - \sqrt{(2M+m)^2 - 8mM(ka)^2} \right] \quad (57)$$

Pada bagian akar di ruas kanan, suku $8mM(ka)^2$ kecil sekali dibandingkan dengan $(2M+m)^2$ sehingga dapat dibuat deret Taylor.

$$\begin{aligned} \omega_{-\min 1}^2 &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+m) - \sqrt{(2M+m)^2 \left(1 - \frac{8mM(ka)^2}{(2M+m)^2} \right)} \right] \\ &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+m) - (2M+m) \left(1 - \frac{8mM(ka)^2}{(2M+m)^2} \right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

$$\omega_{-\min 1}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+m) - (2M+m) \left(1 - \frac{8mM(ka)^2}{2(2M+m)^2} \right) \right]$$

$$\omega_{-\min 1}^2 = \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+m) - (2M+m) + \frac{8mM(ka)^2(2M+m)}{2(2M+m)^2} \right]$$

$$\omega_{-\min 1} = \sqrt{\frac{2\beta(ka)^2}{2(2M+m)}} = ka \sqrt{\frac{2\beta}{2(2M+m)}}$$

$$\omega_{-\min 1} = ka \sqrt{\frac{\beta}{\left(M + \frac{1}{2}m\right)}} \quad \dots \dots \dots (58)$$

Dengan memasukkan nilai ka , β , M dan m maka diperoleh $\omega_{-\min 1} \approx 0$

- (2) Nilai minimum mode akustik jenis 2 ($\omega_{-\min 2}$) terjadi pada $k = \pi/a = 0,87 \times 10^{10}$. Dengan mengkuadratkan persamaan (50) dan mensubstitusikan $\cos ka = -1$ diperoleh

$$\begin{aligned} \omega_{-\min 2}^2 &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+2m+m) - \sqrt{(2M+2m+m)^2 - 8mM(2-1+1)} \right] \\ &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+3m) - \sqrt{(2M+3m)^2 - 16mM} \right] \\ &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+3m) - \sqrt{(2M+3m)^2 \left(1 - \frac{16mM}{(2M+3m)^2} \right)} \right] \\ &= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+3m) - (2M+3m) \left(1 - \frac{16mM}{(2M+3m)^2} \right)^{1/2} \right] \end{aligned}$$

$$= \frac{\beta}{2mM} \left[(2M+3m) - (2M+3m) \left(1 - \frac{16mM}{2(2M+3m)^2} \right) \right]$$

$$= \frac{\beta}{2mM} \left[(3m+2M) - (3m+2M) - \frac{16mM(3m+2M)}{2(3m+2M)^2} \right]$$

$$= \frac{4\beta}{(2M+3m)} = \frac{2\beta}{\left(M + \frac{3}{2}m\right)}$$

$$\omega_{-\min 2} = \sqrt{\frac{2\beta}{\left(M + \frac{3}{2}m\right)}} \quad \dots \dots \dots (59)$$

Dengan memasukkan nilai β , M dan m maka diperoleh $\omega_{-\min 2} = 1,84 \times 10^{13}$ Hz.

Selanjutnya dari set persamaan (43) dan persamaan (44) dan menyusun kedua persamaan dalam bentuk perkalian matrik maka menjadi

$$\begin{pmatrix} \beta e^{ika} & \beta(e^{-ika} - 2) + M\omega^2 \\ \beta e^{-ika} & \beta(e^{ika} - 2) + M\omega^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = 0 \quad \dots (60)$$

Penyelesaian persamaan (60) dilakukan dengan mengambil determinannya sama dengan nol, menjadi

$$\begin{vmatrix} \beta e^{ika} & \beta(e^{-ika} - 2) + M\omega^2 \\ \beta e^{-ika} & \beta(e^{ika} - 2) + M\omega^2 \end{vmatrix} = 0 \quad \dots \dots \dots (61)$$

Dengan menyusun persamaan (61) dalam variable ω maka diperoleh

$$M(e^{ika} - e^{-ika})\omega^2 + \beta(e^{2ika} - e^{-2ika}) - 2\beta(e^{ika} - e^{-ika}) = 0 \quad (62)$$

dengan mengingat $(e^{ika} - e^{-ika}) = 2i \sin ka$ dan $(e^{2ika} - e^{-2ika}) = 2i \sin 2ka$ maka diperoleh

$$(M \sin ka)\omega^2 + \beta \sin 2ka - 2\beta \sin ka = 0 \quad \dots (63)$$

Dengan menuliskan $\sin 2ka = 2 \sin ka \cos ka$ pada persamaan (63) maka diperoleh ω^2

$$\omega^2 = -\frac{2\beta(\sin ka \cos ka - \sin ka)}{M \sin ka} = \frac{2\beta(1 - \cos ka)}{M}$$

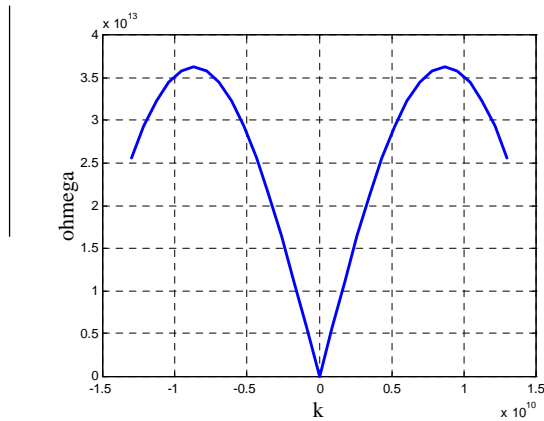
Maka diperoleh ω sama dengan:

$$\omega = \sqrt{\frac{2\beta(1 - \cos ka)}{M}} \quad \dots \dots \dots (64)$$

Ini merupakan frekuensi getaran dari Ni-Ni. Kaitan dispersi untuk ini ditampilkan pada Gambar 5.

Kaitan dispersi untuk Ni-Ni ini merupakan mode optik seperti yang terjadi pada kisi monoatomik. Nilai-nilai ekstremum ω dapat dijelaskan sebagai berikut

- a. Nilai maksimum terjadi pada $k = \pi / a$ sehingga $\cos ka = 1$, maka



Gambar 5. Kaitan dispersi kekisi diatomik $Ni_{66}Fe_{33}$ untuk getaran atom Ni-Ni

$$\omega_{\max} = \sqrt{\frac{4\beta}{M}} \dots\dots\dots (65)$$

Dengan memasukkan nilai β dan M maka diperoleh $\omega_{\max} = 3,62 \times 10^{13}$ Hz.

- b. Nilai minimum terjadi pada $k = 0$ diperoleh dengan memisalkan $\cos ka = 1 - 2 \sin^2(ka/2)$ dan untuk $k \rightarrow 0$ maka $\sin(ka/2) \approx (ka/2)$, maka diperoleh:

$$\omega_{\min} = \sqrt{\frac{2\beta(1-\cos ka)}{M}} = \sqrt{\frac{2\beta[1-(1-2\sin^2(ka/2))]}{M}} = \sqrt{\frac{4\beta(ka/2)^2}{M}}$$

$$\omega_{\min} = ka \sqrt{\frac{\beta}{M}} \dots\dots\dots (66)$$

karena $ka \rightarrow 0$ maka $\omega_{\min} \cong 0$

KESIMPULAN

Dari pembahasan di atas dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Profil kaitan dispersi getaran kekisi $Ni_{50}Fe_{50}$ sebagaimana pada kekisi diatomik umumnya yaitu terdiri dari mode optik ω_+ dan mode akustik ω_- . Nilai maksimum dan minimum dari ω_+ adalah $3,67 \times 10^{13}$ Hz dan $2,63 \times 10^{13}$ Hz. Nilai maksimum dan minimum untuk ω_- adalah $2,56 \times 10^{13}$ Hz dan 0. *Brillouin zone* pertama berada pada daerah $0 < k < \pi/2a$ atau $0 < k < 0,43 \times 10^{10}$.
2. Profil kaitan dispersi untuk kekisi $Ni_{66}Fe_{33}$ terdiri dari dua bagian yaitu untuk Ni-Fe yang terdiri dari dua mode mode optik dan mode akustik namun masing-masing mode memiliki profil yang berbeda antara zone 1 dengan $0 < k < \pi/2a$ dan zone 2 dengan $\pi/2a < k < \pi/2$. Pada zone 1 dan zone 2 nilai maksimum untuk mode optik adalah $3,19 \times 10^{13}$ Hz dan $3,66 \times 10^{13}$ Hz sedangkan nilai frekuensi minimum mode optik pada kedua zone sama yaitu $2,63 \times 10^{13}$ Hz. Untuk mode akustik nilai frekuensi

maksimum pada kedua zone sama yaitu $2,56 \times 10^{13}$ Hz sedangkan nilai frekuensi minimumnya untuk zone 1 dan zone 2 adalah 0 dan $1,84 \times 10^{13}$ Hz. Antara mode optik dan mode akustik terdapat pita frekuensi terlarang yaitu $2,56 \times 10^{13}$ Hz $< \omega < 2,63 \times 10^{13}$ Hz. Profil kaitan dispersi kekisi Ni-Ni sebagaimana pada kekisi monoatomik linier yaitu berupa mode optik dengan batas *Brillouin zone* pertama antara $0 < k < \pi/a$. Nilai frekuensi maksimum dan minimum dari mode ini adalah $3,62 \times 10^{13}$ Hz dan 0.

DAFTARACUAN

- [1]. LEVI, A.F.J., *Applied Quantum Mechanics*, Cambridge University Press, New York, (2003)
- [2]. KITTEL, C., *Introduction to Solid States Physics*, 7th Ed. John Wiley & Sons Inc., New York, (1996)
- [3]. HALL, H.E. . *Solid State Physics*, John Wiley & Sons Ltd., (1973)
- [4]. PURI, R.K. and BABBAR, V.K. *Solid State Physics & Electronics*, S. Chand & Company LMD., Ram Nagar, New Delhi, India, (2001)
- [5]. BRITTON, D.T., *Phy 322S Solid State Physics*, <http://www.phy.uct.ac.za/courses/phy322s/ss01.pdf> (2007)
- [6]. PICKARD, C. J., *Lattice Vibrations*, <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~cjp20/lectures/topic4.pdf> (2007)
- [7]. BARTHELMY, D. , *Mineralogy Database*, <http://webmineral.com/chem/Chem-Ni.shtml> (2007)