

MODEL MATEMATIKA PADA VIBRASI KISI ATOM Ni DALAM RUANG BERDIMENSI SATU

By M. TOIFUR

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/314793569>

Model Matematika pada Vibrasi kisi Atom Ni dalam Ruang Berdimensi Satu

Conference Paper · November 2010

CITATIONS

0

READS

101

2 authors, including:



Umi Mahmudah
IAIN Pekalongan

21 PUBLICATIONS 9 CITATIONS

[SEE PROFILE](#)

MODEL MATEMATIKA PADA VIBRASI KISI ATOM Ni DALAM RUANG BERDIMENSI SATU

Umi Mahmudah¹, Moh. Toifur²

¹Jabatan Matematik, Fakulti Sains dan Teknologi, Universiti Malaysia Terengganu
21030 Kuala Terengganu, Terengganu, Malaysia

²Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan alam
Universitas Ahmad Dahlan, Yogyakarta
e-mail :, ¹u_mudah@yahoo.com , ²mtoifur@yahoo.com

Abstrak

Model merupakan suatu analogi atau bayangan mengenai sebuah fenomena, sehingga dapat memberikan gambaran pendekatan ketika kita tidak bisa melihat apa yang sebenarnya terjadi. Vibrasi kisi atom dalam ruang berdimensi satu terkait dengan gaya pegas dan gerakannya berbentuk gelombang. Makalah ini bertujuan membangun suatu model matematika yang muncul pada vibrasi kisi atom dalam ruang berdimensi satu. Untuk kepentingan simulasi, atom yang akan digunakan dalam penelitian ini adalah atom nikel (Ni). Dalam penelitian ini, model yang diperoleh saat terjadi vibrasi kisi atom mengikuti persamaan gelombang dengan penyelesaiannya berupa satu mode frekuensi atom Ni, yaitu mode akustik. Kemudian model yang telah dibangun akan disimulasikan menggunakan *software* MATLAB.

Kata kunci: model matematika, atom, vibrasi, kisi, monoatomik, mode akustik, angka gelombang.

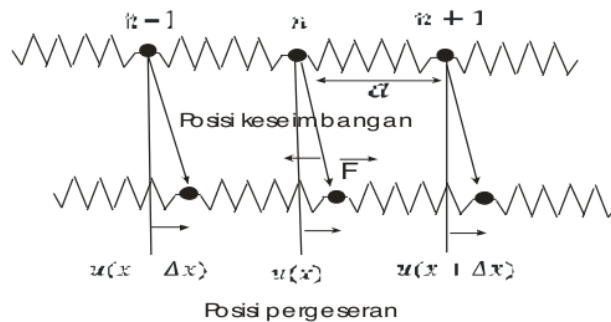
A. PENDAHULUAN

Kristal merupakan suatu padatan yang susunannya teratur dan polanya berulang. Gerakan atom pada kristal tidak seperti udara, dimana molekulnya bebas bergerak, akan tetapi gerakan atom dibatasi sampai gerakan kecil di sekitar ujungnya hingga menempati kisi kristal. Gerakan atom pada kristal dapat dianalisis dalam bentuk vibrasi kisi. Terjadinya vibrasi kisi dapat disebabkan oleh energi internal maupun eksternal. Efek energi internal adalah akan diperoleh informasi mengenai sifat termal bahan, sedangkan efek dari energi eksternal adalah timbulnya getaran tipe akustik maupun optik. Sifat elastis gerakan vibrasi kisi dapat diselidiki dengan mempertimbangkan sebuah kisi atom berdimensi satu. Disebabkan karena ketahanannya pada udara dan pengoksidaan, nikel digunakan dalam *syiling*, selain itu nikel juga digunakan untuk mewarnai kaca menjadi hijau.

B. MASALAH RIIL

Atom-atom dalam susunan zat padat tidak bebas bergerak sebagai akibat adanya gaya antar atom yang menyusunnya. Keadaan ini dipandang bahwa susunan atom-atom dalam benda padat terkait oleh gaya pegas sehingga atom yang menyusun benda padat selalu bervibrasi terhadap posisi keseimbangannya. Susunan atom dalam kristal berbentuk rapi sehingga dalam bentuk besar merupakan susunan berulang dari kisi-kisi atom dengan periodisitas tertentu. Karena atom bervibrasi terhadap posisi keseimbangannya, maka secara otomatis kisi-kisi kristalpun selalu bervibrasi. Gerakan vibrasi kisi-kisi kristal dapat diselidiki dengan mempertimbangkan kisi-kisi berdimensi satu, misalnya kisi-kisi yang terdiri atas rantai atom yang linier.

Mempertimbangkan kisi-kisi kristal monoatomik yang berdimensi satu dimana setiap atom mempunyai massa m dan dihubungkan ke atom lain oleh pegas dengan jarak antar atom a . Misalkan tempat kedudukan masing-masing atom adalah $\dots, (n-1)a, na, (n+1)a, \dots$ jika kisi bergetar maka m akan menyimpang dari posisi keseimbangannya. Misalkan pergeseran atom ke $(n-1), n, (n+1)$ berturut-turut adalah $u(x-\Delta x), u(x), u(x+\Delta x)$. Gambar berikut melukiskan vibrasi kisi-kisi monoatomik dalam ruang berdimensi satu.



Gambar 1 Kisi-kisi monoatomik pada posisi keseimbangan dan pergeseran

Jika u menunjukkan pergeseran dan β menunjukkan konstanta pegas, asumsikan bahwa gaya antar atom pada kisi-kisi sebanding dengan perpindahan relatif dari posisi keseimbangannya. Maka gaya yang digunakan oleh pegas pada atom adalah sebagai berikut:

$$F = \beta u \quad 2.1$$

C. PEMBENTUKAN MODEL

Berdasar gambar 1 di atas dapat dilihat bahwa pegas dengan arah ke kiri pada atom n mengalami perubahan panjang yang diberikan oleh:

$$\Delta x + u(x) - [\Delta x + u(x - \Delta x)] = u(x) - u(x - \Delta x)$$

Sehingga gaya yang bekerja pada pegas kearah kiri adalah

$$F_- = \beta[u(x) - u(x - \Delta x)] \quad 3.1$$

Sedangkan pegas dengan arah ke kanan pada atom n mengalami perubahan panjang yang diberikan oleh:

$$\Delta x + u(x + \Delta x) - [\Delta x + u(x)] = u(x + \Delta x) - u(x)$$

Sehingga gaya yang bekerja pada pegas kearah kanan adalah

$$F_+ = \beta[u(x + \Delta x) - u(x)] \quad 3.2$$

Maka gaya total yang digunakan pegas pada atom ke- n adalah

$$F = F_+ - F_- = \beta[u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)] \quad 3.3$$

Dengan menggunakan hukum II Newton tentang gerak yang disajikan dalam rumus:

$$F = m \frac{dv}{dt} \text{ atau } F = ma$$

Maka persamaan untuk percepatan atom ke- n bergerak yaitu:

$$a_n = \frac{d^2u(x)}{dt^2}$$

Maka diperoleh

$$F = m \frac{d^2u(x)}{dt^2} \quad 3.4$$

Kemudian dari persamaan (3.3) dan (3.4) diperoleh

$$m \frac{d^2u(x)}{dt^2} = \beta[u(x + \Delta x) + u(x - \Delta x) - 2u(x)] \quad 3.5$$

dimana m = massa atom, β = konstanta pegas, $\frac{d^2u(x)}{dt^2}$ = percepatan atom ke- n , $u(x)$ = pergesean atom ke- n , $u(x + \Delta x)$ = pergesean atom ke- $(n+1)$, dan $u(x - \Delta x)$ = pergesean atom ke- $(n-1)$.

Persamaan (3.5) merupakan model matematika pada vibrasi kisi-kisi atom monoatomik dalam ruang berdimensi satu.

D. PENYELESAIAN MODEL

Pergesean u merupakan fungsi yang terdiri atas dua variabel independen, t dan x . sehingga model tersebut dapat juga ditulis dalam bentuk persamaan diferensial parsial sebagai berikut:

$$m \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2} = \beta[u(x + \Delta x, t) + u(x - \Delta x, t) - 2u(x, t)] \quad 4.1$$

Pertimbangkan atom ke- n , berdasar gambar 1 maka pergesean $u(x, t)$ dipengaruhi oleh pergesean $u(x + \Delta x, t)$ dan $u(x - \Delta x, t)$. Dengan menggunakan deret Taylor, maka pergesean $u(x + \Delta x, t)$ dan $u(x - \Delta x, t)$ dapat diperluas sebagai berikut:

$$u(x + \Delta x, t) \approx u(x, t) + \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)(\Delta x)^2$$

$$u(x - \Delta x, t) \approx u(x, t) - \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x, t)(\Delta x)^2$$

Sehingga persamaan (4.1) menjadi:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\beta}{m} (\Delta x)^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad 4.2$$

Persamaan (4.2) menunjukkan persamaan gelombang dengan cepat rambat gelombang

$c = \Delta x \sqrt{\frac{\beta}{m}}$. Sehingga dapat ditulis menjadi:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad 4.3$$

Persamaan (4.3) menunjukkan bahwa gelombang dengan kuantitas u yang menjalar dalam arah x dengan kelajuan c . Dalam hal ini u menyatakan pergeseran atom dari sumbu x . Mempertimbangkan pergeseran awal $u(0) = u_0$ dan sewaktu bergeser tanpa kecepatan awal, maka pergeseran u harus memenuhi syarat awal $u(x, 0) = u_0$ maka $u'(x, 0) = 0$.

Untuk menyelesaikan persamaan (4.3) dengan menggunakan metode separasi variabel, yaitu mengandaikan penyelesaiannya dalam bentuk:

$$u(x, t) = X(x)T(t) \quad 4.4$$

Jika diturunkan dua kali terhadap x dan t maka akan diperoleh:

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = XT'' \text{ dan } \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = X''T$$

Dengan mensubstitusikan kedua persamaan tersebut ke persamaan (4.3) maka diperoleh:

$$\frac{1}{c^2} \frac{T}{T''} = \frac{X''}{X} \quad 4.5$$

Dapat dilihat bahwa ruas kiri hanya tergantung pada t dan ruas kanan hanya tergantung pada x . Persamaan (4.5) hanya mungkin terjadi jika masing-masing ruas konstan, misalnya sama dengan $-k^2$. Sehingga diperoleh:

$$\frac{X''}{X} = -k^2 \text{ dan } \frac{1}{c^2} \frac{T}{T''} = -k^2 \quad 4.6$$

Maka diperoleh bentuk penyelesaian dari persamaan (4.6) adalah:

$$X = A_1 e^{ikx} + A_2 e^{-ikx} \text{ dan } T = B_1 e^{i\omega t} + B_2 e^{-i\omega t} \quad 4.7$$

Dimana A_1, A_2, B_1, B_2 adalah konstanta sembarang dan $\omega = kc$.

Misalkan dipilih sembarang suku pada ruas kanan persamaan pertama dengan asumsi bahwa hanya bagian riil dari gelombang yang memiliki arti penting. Untuk kasus gelombang berjalan kearah kanan dari persamaan pertama dan misalkan dipilih suku kedua pada ruas kanan persamaan kedua maka diperoleh

$$u(x, t) = C e^{-i(\omega t - kx)} \quad 4.8$$

dimana $C = A_1 B_2$.

Persamaan ini dapat ditulis dalam bentuk:

$$u(x, t) = C \cos(\omega t - kx) \quad 4.9$$

Dengan menggunakan syarat awal di atas, maka diperoleh $-\omega C \sin(\omega t - kx) = 0$, yang berarti bahwa $\sin kx = 0$ maka $kx = n\pi$ dengan n bilangan bulat. Kemudian $u(x, t) = C \cos(\omega t - n\pi)$ dan $u(x, 0) = u_0 = C \cos(-n\pi)$. Hal ini berarti $u_0 = C$. Sehingga persamaan (4.8) menjadi

$$u(x, t) = u_0 e^{-i(\omega t - kx)} \quad 4.10$$

Karena nilai x diskrit, maka gelombang berkenaan dengan $x = na$, dimana n bilangan bulat dan a konstanta kisi, dan na menunjukkan posisi keseimbangan atom ke- n pada sumbu x . Misalkan $u(x, t) = u_n$, $u(x + \Delta x, t) = u_{n+1}$, $u(x - \Delta x, t) = u_{n-1}$. Sehingga diperoleh:

$$u_n = u_0 e^{-i(\omega t - kna)} \quad 4.11$$

$$u_{n+1} = u_0 e^{-i(\omega t - k(n+1)a)} \quad 4.12$$

$$u_{n-1} = u_0 e^{-i(\omega t - k(n-1)a)} \quad 4.13$$

Dimana u_n, u_{n+1}, u_{n-1} adalah pergeseran atom ke- $n, (n+1), (n-1)$; u_0 adalah amplitude getar; $\omega t - kna$ adalah fase getaran; k adalah bilangan gelombang; ω adalah frekuensi sudut gelombang.

Dengan mensubstitusikan persamaan (4.11), (4.12), dan (4.13) ke persamaan (4.1) maka diperoleh:

$$\omega = \pm \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \quad 4.14$$

Jika c dan ρ berturut-turut menunjukkan gaya untuk menimbulkan simpangan longitudinal dan massa jenis, maka $c = \beta a$ dan $\rho = m/a$. Sedangkan $v_s = \sqrt{c/\rho}$ adalah kecepatan bunyi, maka persamaan (4.14) menjadi

$$\omega = \pm \frac{2}{a} v_s \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \quad 4.15$$

Dari persamaan (4.14) dan (4.15) diperoleh:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{2}{a} v_s \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| \quad 4.16$$

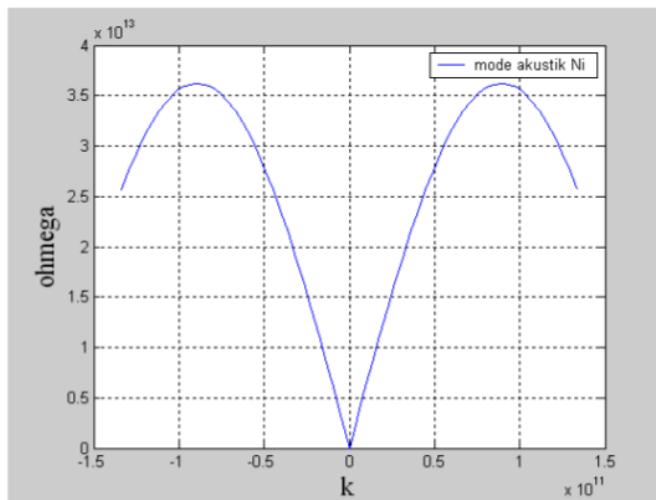
Persamaan (4.16) menunjukkan hubungan antara frekuensi dan bilangan gelombang yang dinamakan kaitan dispersi.

E. KAITAN DISPERSI ATOM Ni

Menurut tabel periodik, atom nikel (Ni) mempunyai nomor atom 28, massa atom 58,69g/mol, dan jarak antar atom 0,352 nm. Nilai konstanta pegas diperoleh dengan memisalkan untuk pemberian kenaikan tenaga potensial sebesar 1eV (=1,6 x 10-19 jolue) menyebabkan simpangan atom dari posisi keseimbangan sebesar δa = 1Å sehingga dari kaitan ΔV = 1/2 âδa², maka diperoleh nilai β sama dengan 32 nm. Jika data ini dimasukkan ke persamaan (4.16) maka diperoleh kaitan dispersi untuk atom nikel sebagai berikut:

$$\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{58,71}} \left| \sin\left(\frac{0,352k}{2}\right) \right| \tag{5.1}$$

Gambar di bawah ini melukiskan kaitan dispersi atom Ni

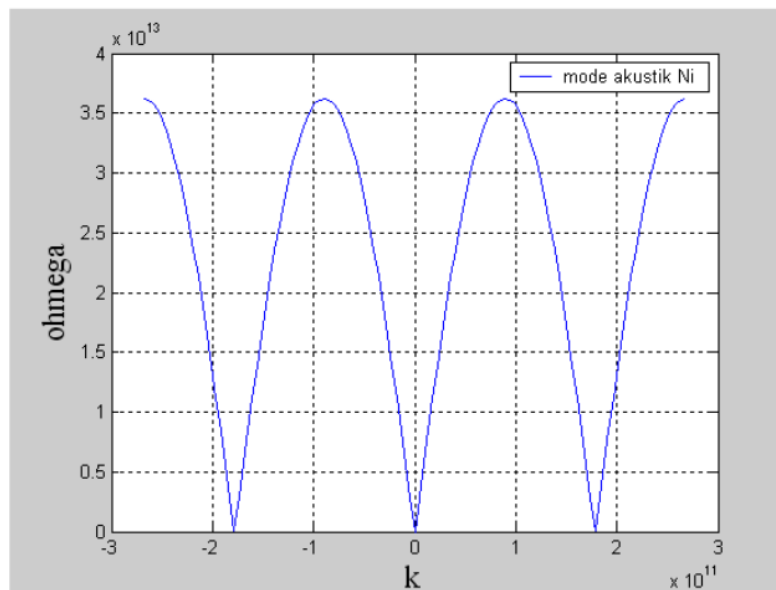


Gambar 2 Kaitan Dispersi Atom Ni

- a. Pada frekuensi rendah, maka λ sangat panjang. Mempertimbangkan $\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{ka}{2} - \frac{1}{3!}\left(\frac{ka}{2}\right)^3 + \frac{1}{5!}\left(\frac{ka}{2}\right)^5 - \frac{1}{7!}\left(\frac{ka}{2}\right)^7 + \dots$. Jika $k \rightarrow 0$ maka $\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = \frac{ka}{2}$. Persamaan (4.16) menjadi $\omega = v_s k$. Kecepatan fase adalah $v_p = \frac{\omega}{k}$, sedangkan kecepatan grupnya adalah $v_g = \frac{d\omega}{dk}$.
- b. Pada frekuensi lebih tinggi, kecepatan fase dan kecepatan kelompok berbeda, dan didapatkan dari persamaan (4.16) $v_p = \frac{\omega}{k} = \frac{2}{ka} v_s \sin\left(\frac{ka}{2}\right)$, sedangkan kecepatan grup $v_g = \frac{d\omega}{dk} = v_s \cos\left(\frac{ka}{2}\right)$.

- c. Pada frekuensi maksimum, dimana $\omega = \sqrt{\frac{4\beta}{m}}$, maka persamaan (4.16) memberikan $k = \frac{\pi}{a}$ dan $a = 2a$ maka diperoleh $v_p = \frac{2v_s}{\pi}$ dan $v_g = 0$. Hal ini menyatakan bahwa tidak ada pengiriman sinyal atau tenaga yang sesuai pada batas frekuensi ini. Maka hanya frekuensi getaran $\omega < \sqrt{\frac{4\beta}{m}}$ yang dapat merambat melalui kisi-kisi atom. Oleh karena itu kisi berperilaku sebagai filter yang melewati frekuensi rendah dan berlaku hanya jika frekuensi berada antara 0 dan $\sqrt{\frac{4\beta}{m}}$.

Gambar di bawah melukiskan kaitan dispersi atom Ni dengan beberapa nilai k dan pengaruhnya terhadap ω .



Gambar 3 Kaitan Dispersi Atom Ni dengan beberapa nilai k

F. KESIMPULAN

Model matematika pada vibrasi kisi atom dalam ruang berdimensi satu mengikuti persamaan gelombang yang penyelesaiannya berupa kaitan dispersi. Persamaan gelombang pada vibrasi kisi atom mengikuti gelombang yang berjalan ke arah kanan. Kaitan dispersi pada kisi atom yaitu hubungan antara bilangan gelombang k dengan frekuensi ω . Frekuensi maksimum mode akustik atom Ni sebesar $3,6241 \times 10^{13}$ Hz sedangkan frekuensi minimumnya adalah nol.

G. REFERENSI

Derrick, William L. dan Grossman, Stanley L. 1976. *Elementary Differential Equations with Applications a Short Course*. Philippines: Addison-Wesley Publishing company, Inc.

Hall, H.E. 1974. *Solid State Physics*. London: Arrowsmith Ltd. England

Halliday dan Resnick. 1985. *Fisika Jilid I*. Erlangga : Bandung

Hirose, Akira dan Lonngren, Karl E. 1985. *Introduction to Wave Phenomenon*. Kanada: John Wiley&Sons, Inc.

Kittel, Charles. 1995. *Introduction to Solid state Physics 5th Edition*. Newyork: Wiley Eastern Ltd.

Ross, Shepley L. 1984. *Differential Equation*. Newyork: John Wiley&Sons, Inc

Toifur, M., Sujatmoko, Ridwan, Ariadi, W. 2007. *Telaah Kaitan Dispersi dan Pita Frekuensi Terlarang Getaran kekisi Diatomik $Ni_{50}Fe_{50}$ dan $Ni_{66}Fe_{33}$* . Jurnal Sains Materi Indonesia, 2207, ISSN, Akreditasi No:89/akred-LIPI/P2MBI/2007,Akreditasi No:39/Dikti/Kep/2004,edisi khusus

MODEL MATEMATIKA PADA VIBRASI KISI ATOM Ni DALAM RUANG BERDIMENSI SATU

ORIGINALITY REPORT

0%

SIMILARITY INDEX

PRIMARY SOURCES

EXCLUDE QUOTES ON

EXCLUDE MATCHES OFF

EXCLUDE
BIBLIOGRAPHY ON