Pengantar

1. Target: mahasiswa undergraduate menjelang tingkat akhir atau mahasiswa graduate tanpa latar belakang fisika zat padat.
2. Penjelasan Mata kuliah: tujuan perkuliahan ini adalah untuk memberikan pendahuluan fisika zat padat. Perkuliahan ini dibuat untuk memberi konsep dasar sekaligus tinjauan menyeluruh mengenai fisika zat padat.
3. Prasyarat perkuliahan: mekanika kuantum dasar.
4. Buku teks: Introduction to solid state physics, Charles Kittel, John Willey & Sons, Inc.
5. Pengajar: Agus Purwanto Ph.D,
   `purwanto_agus@yahoo.com`,
   `http://purwanto.freeservers.com`
6. Grading: PR 30 %, UTS 30 %, UAS 40 %

Tabel 0.1: Silabus Pendahuluan Fisika Zat Padat (diluar ekskursi dan ujian)

Minggu	Topik	Subtopik
1	Struktur Kristal	
2	Difraksi	
3	Ikatan dalam kristal	
4	Dinamika kristal	vibrasi kisi
5		sifat termal
6	Elektron dalam zat padat	model elektron bebas
7		pengaruh potensial periodik
8		struktur pita dan permukaan Fermi
9		hantaran listrik pada logam
10	Kristal semikonduktor	elektron dan lubang
11		sifat transport
12	Magnetisme	diamagnetisme
13		paramagnetisme
14		feromagnetisme
15		antiferomagnetisme

Bab 1

Struktur Kristal

Fisika zat padat banyak berkenaan dengan kristal dan elektron dalam kristal. Pemahaman mengenai fisika zat padat dimulai pada awal abad ke 20 setelah penemuan difraksi sinar-X oleh kristal dan sederet publikasi mengenai perhitungan sederhana dan prediksi yang sukses mengenai sifat kristal.

Jika kristal ditumbuhkan dalam lingkungan yang konstan, blok yang identik akan berkembang secara teratur. Masing-masing blok tersebut merupakan atom atau sekelompok atom yang tersusun secara periodik dalam 3 dimensi. Hal ini sesuai dengan penemuan pada abad ke 18 mengenai bilangan indeks berupa bilangan bulat berkenaan dengan arah bidang kristal sebagaimana akan dibahas pada bab ini.

Penemuan tersebut membuktikan bahwa kristal terdiri dari atom-atom yang tersusun secara periodik. Model atom periodik tersebut memungkinkan fisikawan berpikir lebih jauh mengenai sifat bahan kristal. Studi diperluas hingga mencakup bahan amorf (=nonkristalin=glass). Bidang yang lebih luas adalah fisika zat mampat dimana bahan cair juga dipelajari.

1.1 Susunan Atom Periodik

Suatu kristal yang idela tersusun dari satuan struktur yang identik yang berulang tak-hingga. Pada kristal sederhana, satuan struktural tersebut berupa atom tunggal, seperti pada tembaga, perak, emas, besi, alumunium dan logam alkali. Pada kristal tidak sederhana, satuan struktural tersebut dapat terdiri dari banyak atom atau molekul.

Struktur kristal dapa digambarkan melalui kisi dengan atom atau kelompok atom berada pada titik kisi tertentu. Kelompok atom tersebut di sebut sebagai basis, jika berulang dalam ruang membentuk struktur kristal.

1.1.1 Vektor Translasi Kisi

Kisi didefinisikkan sebagai 3 vektor translasi dasar $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$ dan $\mathbf{a}_3$ sedemikian sehingga susunan atom terlihat sama dalam segala hal ketika dilihat dari titik $\mathbf{r}$ ataupun dari titik

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3, \tag{1.1}$$

dengan u_1, u_2, u_3 berupa bilangan bulat. Sekumpulan titik $\mathbf{r}'$ sesuai dengan Pers. (1.1) mendefinisikan kisi.

Kisi adalah susunan kelompok atom yang tersusun secara periodik dalam ruang. Kisi merupakan abstraksi matematis; struktur kristal tersusun ketika basis atom secara identik terletak pada titik kisi. Hubungan logisnya adalah:

$$\text{kisi} + \text{basis} = \text{struktur kristal}. \tag{1.2}$$

Kisi dan vektor translasi $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ dikatakan primitif jika susunan atom yang memenuhi Pers. (1.1) menghasilkan volume yang terkecil. Kita biasa menggunakan vektor translasi primitif untuk mendefinisikan sumbu kristal. Namun demikian, sumbu kristal nonprimitif terkadang digunakan untuk memudahkan hubungan simetri kristal. Sumbu kristal $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ membentuk *parallelepiped*. Jika titik kisi hanya terletak di sudut *parallelepiped*, maka ia disebut sebagai *parallelepiped* primitif.

Operasi translasi kisi didefinisikan sebagai pergeseran melalui vektor translasi:

$$\mathbf{T} = u_1\mathbf{a}_1 + u_2\mathbf{a}_2 + u_3\mathbf{a}_3. \tag{1.3}$$

Dua titik kisi terhubung melalui vektor sesuai Pers. (1.3).

Untuk menggambarkan struktur kristal, terdapat beberapa pertanyaan penting untuk dijawab: Apa kisinya ? Bagaimana pemilihan sumbu kristal $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ yang kita pilih ? Apa basisnya ?

Lebih dari satu kisi selalu dimungkinkan untuk struktur tertentu, dan lebih dari satu set sumbu dapat digunakan untuk kisi tertentu. Basis ditentukan setelah pilihan-pilihan tersebut diambil. Semua (termasuk pola difraksi) konsisten asalkan Pers. (1.3) dipenuhi.

Operasi simetri pada kristal membawa kristal tersebut ke dirinya sendiri. Hal ini mencakup pula operasi translasi kisi. Terdapat pula operasi rotasi dan refleksi, yang disebut sebagai operasi titik. Lebih lanjut, operasi simetri translasi dapat dikombinasikan dengan simetri titik. Buku teks kristalografi banyak membahas hal tersebut.

1.1.2 Basis dan Struktur Kristal

Suatu basis atom terikat pada setiap titik kisi, dimana setiap basis adalah identik dalam komposisi, susunan dan arah.

Jumlah atom dalam basis bisa saja satu, atau lebih dari satu. Posisi atom ke-j (di dalam basis) relatif terhadap titik kisinya adalah

$$\mathbf{r}_j = x_j\mathbf{a}_1 + y_j\mathbf{a}_2 + z_j\mathbf{a}_3. \tag{1.4}$$

Kita selalu dapat memilih pusat koordinat sebagai titik kisi sehingga $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$.

1.1.3 Sel Kisi Primitif

Parallelepiped yang didefinisikan dengan sumbu primitif $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ disebut sebagai sel primitif. Sebuah sel primitif adalah sel terkecil yang berulang secara periodik dalam 3 dimensi.

Terdapat banyak cara untuk memilih sumbu primitif yang mendefinisikan sel primitif untuk setiap kisi. Banyak atom dalam seuatu sel primitif atau basis primitif selalu sama untuk setiap struktur kristal.

Sel primitif selalu mengandung 1 titik kisi. Jika sel primitif adalah *parallelepiped* dengan titik kisi di setiap ujungnya (ada 8 ujung), maka jumlah total titik kisi dari sel tersebut adalah $8 \times \frac{1}{8} = 1$.

Volume dari parallelepiped dengan sumbu $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ adalah

$$V_c = |\mathbf{a}_1 \bullet \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3|, \tag{1.5}$$

yang diperoleh dengan analisis vektor dasar. Basis berkenaan dengan sel primitif disebut sebagai basis primitif. Tidak ada basis yang mengandung atom kurang dari atom yang berada dalam basis primitif.

1.2 Jenis Dasar Kisi

Kisi kristal dapat di petakan ke dirinya sendiri dengan translasi kisi $\mathbf{T}$ dan berbagai operasi simetri lain. Operasi simetri lain tersebut antara lain adalah operasi simetri rotasi dengan sumbu melalui titik kisi. Besar sumbu rotasi adalah $2\pi, 2\pi/2, 2\pi/3, 2\pi/4, 2\pi/6$ radian dan kelipatan bilangan bulatnya. Rotasi dengan besar sudut tersebut di atas, masing-masing di sebut sebagai rotasi lipat satu, dua, tiga, empat dan enam dan biasanya diberi simbol 1, 2, 3, 4, dan 6.

Grup titik kisi adalah sekumpulan operasi simetri yang bila diaplikasikan pada titik kisi akan memetakan kisi tersebut pada dirinya. Rotasi yang mungkin telah dibahas di atas. Dalam grup tersebut bisa terdapat simetri cermin m. Operasi simetri inversi terdiri dari operasi simetri rotasi lipat 2 diikuti dengan operasi simetri refleksi terhadap bidang yang tegak lurus sumbu rotasi; efeknya adalah mengganti $\mathbf{r}$ dengan $-\mathbf{r}$.

1.2.1 Jenis Kisi 2-D

Jumlah kisi yang mungkin adalah tak terbatas untuk 2 dimensi karena tidak ada batasan alamiah dari panjang vektor translasi kisi atau sudut di antaranya. Namun kisi khusus berjenis *oblique* invariant dalam rotasi $2\pi/3$, $2\pi/4$ atau $2\pi/6$ atau dalam refleksi cermin. Kita harus memberi kondisi batas pada $\mathbf{a}_1$ dan $\mathbf{a}_2$, jika kita ingin membangun kisi yang invariant dalam satu atau lebih operasi ini. Ada 4 jenis batasan yang berbeda dan masing-masingnya menghasilkan jenis kisi khusus. Jadi secara keseluruhan terdapat 5 jenis kisi yang berbeda dalam 2-D: kisi *oblique* dan 4 kisi khusus. Jenis kisi yang berbeda sering disebut sebagai kisi Bravais; kita katakan terdapat 5 kisi Bravais atau *net* dalam 2-D.

1.2.2 Jenis Kisi 3-D

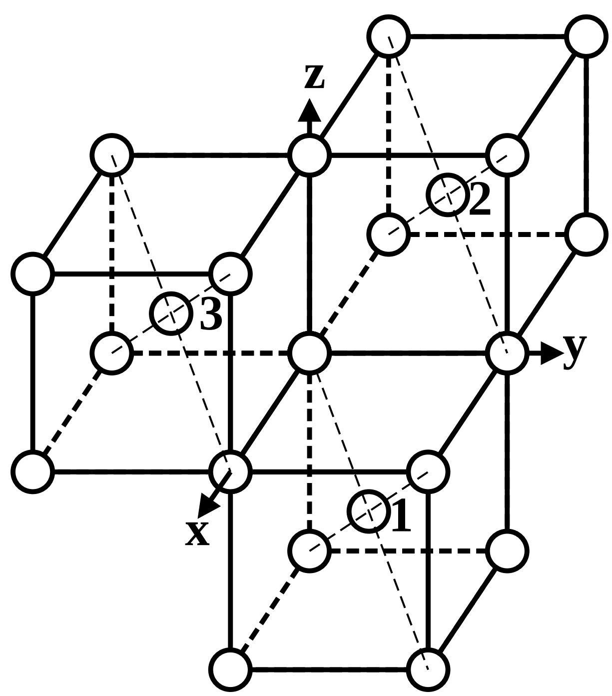
Grup simetri titik dalam 3-D membutuhkan 14 jenis kisi yang berbeda seperti tertera pada Tabel 1.1.

Tabel 1.1: 14 jenis kisi dalam 3 dimensi

Sistem	jumlah kisi	batasan dalam sel konvensional
Triklinik	1	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoklinik	2	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \gamma = 90^0 \neq \beta$
Ortorombik	4	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Tetragonal	2	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Kubus	3	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^0$
Trigonal	1	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha = \beta = \gamma < 120^0 \neq 90^0$
Hexagonal	1	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = 90^0; \gamma = 120^0$

1.3 Sistem Indeks untuk Bidang Kristal

Arah kristal ditentukan dengan 3 titik tak kolinear pada bidang. Jika masing-masing titik terletak pada sumbu kristal yang berbeda, bidang dapat dinyatakan dengan koordinat titik-titik tersebut dalam konstata kisi a_1, a_2, a_3. Namun akan lebih berguna untuk analisis struktur untuk menyatakan arah sebuah bidang dengan indeks yang ditentukan berdasarkan aturan berikut:



1.4 Kisi

Periodisitas secara translasi dalam kristal dapat dengan mudah dipelajari dengan melihat geometri pengulangan yang terjadi. Jika motif tersebut berulang dengan interval a, b dan c sepanjang tiga arah yang ko-planar (tidak sebidang), pengulangan tersebut dapat digambarkan dengan urutan periodik dari titik dengan interval a, b, c sepanjang tiga arah yang ko-planar tersebut. Kumpulan titik ini disebut sebagai kisi.

Jika suatu titik kisi dipilih sebagai pusat dari kisi, posisi pada sembarang titik lain dapat dinyatakan secara unik dengan vektor:

$$\mathbf{Q}_{u,v,w} = u\mathbf{a} + v\mathbf{b} + w\mathbf{c} \tag{1.6}$$

Ketiga vektor basis $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ dan $\mathbf{c}$ mendefinisikan suatu bangun parallelepiped yang disebut sebagai sel satuan jika volume dari sel tersebut adalah yang terkecil dari semua pilihan sel yang ada. Arah yang ditentukan oleh vektor $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ dan $\mathbf{c}$ tersebut masing-masing berkaitan sumbu kristal dengan arah x, y dan z; sementara sudut-sudutnya adalah α, β, γ dengan arah masing-masing berhadapan dengan vektor $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ dan $\mathbf{c}$.

1.5 Sifat berkaitan dengan bilangan rational

Karena titik kisi dapat selalu ditentukan oleh bilangan rational, sifat kisi berhubungan dengannya dikatakan rational. Arah dan bidang yang memenuhi hal tersebut adalah arah dan bidang kristalografi.

1.5.1 Arah Kristalografi

Karena kristal adalah anisotropik, diperlukan cara sederhana untuk menyatakan arah dan bidang kristalografi yang pada akhirnya akan berguna untuk membahas sifat kristal tersebut.

Dua titik kisi mendefinisikan arah kristalografi. Misalkan kita telah memilih suatu sel satuan primitif. Dua vektor $\mathbf{Q}_{u,v,w}$ dan $\mathbf{Q}_{nu,nv,nw}$ dengan u, v, w bilangan bulat merupakan dua vektor yang berbeda, namun berarah sama. Arah tersebut dinyatakan sebagai $[u\ v\ w]$.

Jika sel bukan merupakan sel yang primitif, u, v, w dan n merupakan bilangan rational. Oleh karenanya $\mathbf{Q}_{1/2,3/2,-1/3}$ dan $\mathbf{Q}_{5/2,15/2,-5/3}$ mendefinisikan arah yang sama. Indeks dari $\mathbf{Q}_{1/2,3/2,-1/3}$ dapat difaktorkan untuk memperoleh penyebut yang sama sehingga: $\mathbf{Q}_{1/2,3/2,-1/3} = \mathbf{Q}_{3/6,9/6,-2/6} \rightarrow [3\ 9\ \ -2] = [3\ 9\ \overline{2}]$ yang dibaca sebagai "tiga sembilan minus dua".

1.5.2 Bidang Kristal

Teorema Geometri Bidang

Berikut ini adalah dua teorema mengenai geometri bidang yang relevan dengan bidang dalam kristal

1. **Teorema:**
   Jika $P_0(x_0, y_0, z_0)$ adalah suatu titik pada bidang dan $N\langle a, b, c\rangle$ adalah vektor normal terhadap bidang tersebut, maka persamaan bidangnya adalah:

$$a(x - x_0) + b(y - y_0) + c(z - z_0) = 0 \tag{1.7}$$

   Bukti:
   Misalkan $P(x, y, x)$ merupakan sembarang titik pada suatu bidang dan $\mathbf{V}(P_0\ P)$ adalah vektor:

$$\mathbf{V}(P_0\ P) = \langle x - x_0, y - y_0, z - z_0\rangle \tag{1.8}$$

   Sesuai dengan definisi ortogonalitas antara dua vektor, maka:

$$\mathbf{V}(P_0\ P) \bullet \mathbf{N} = 0 \tag{1.9}$$

   Substitusi $\mathbf{N} = \langle a, b, c\rangle$ dan Pers. (1.8) pada Pers. (**??**Pers:ortogonalitas)) menghasilkan Pers. (1.7), yaitu:

$$a(x - x_0) + b(y - y_0) + c(z - z_0) = 0 \tag{1.10}$$

2. **Teorema:**
   Jika a, b dan c tidak satupun berharga nol, maka grafik persamaan:
$$ax + by + cz + d = 0 \tag{1.11}$$
   adalah berbentuk bidang dan $\langle a, b, c\rangle$ adalah vektor normal terhadap bidang tersebut.

   Bukti:
   Misalkan $b \neq 0$, maka titik $(0, -d/b, 0)$ terletak pada bidang dengan Pers. (1.11) karena Pers. (1.7) menghasilkan
$$a(x-0) + b(y + \frac{d}{b}) + c(z-0) = 0 \tag{1.12}$$
   sehingga Pers. 1.11 terpenuhi. Prosedur serupa berlaku jika $a \neq 0$ atau $c \neq 0$.

Pers. (1.7) dan Pers. (1.11) disebut sebagai persamaan Catersian untuk bidang. Pers. (1.7) analog dengan bentuk persamaan garis 2-D. Pers. (1.11) adalah persamaan tingkat satu umum untuk tiga variabel dan juga disebut sebagai persamaan garis (namun untuk 3-D).

Suatu bidang dapat dibentuk dari :

1. tiga titik non-kolinear
2. sebuah garis dan sebuah titik yang tidak terletak pada garis tersebut
3. dua garis yang saling bersinggungan
4. dua garis paralel

Untuk menggambar bidang dari persamaannya, proses biasa dimulai dari penentuan titik-titik yang memotong masing-masing sumbu. Setelah itu, ketiga titik tersebut dihubungkan sehingga membentuk bagian dari bidang yang dimaksud.

Misalkan kita hendak men-sketsa bidang dengan persamaan:
$$2x + 4y + 3z = 8 \tag{1.13}$$
Dengan mensubstitusi nol untuk y dan z, diperoleh $x = 4$. Dengan cara serupa, diperoleh perpotongan terhadap sumbu y dan z, masing-masing $y = 2$ dan $z = \frac{8}{3}$. Setelah ketiga titik tersebut diplot dalam sistem koordinat, ketiganya dihubungkan dengan garis sehingga bagian dari bidang yang dimaksud dapat di sketsa.

Kaitan Indeks Miller dengan Bidang Kristal

Proses difraksi yang digunakan dalam kristalografi sangat tergantung pada bidang kristal yang memenuhi hukum Bragg. Dalam kristalografi, indeks Miller h, k, l sering digunakan untuk mengindeks bidang. Dalam sel satuan kristal, persamaan untuk itu dapat ditulis sebagai:
$$hx + ky + lz = 1 \tag{1.14}$$
Sketsa bidang tersebut dapat dimulai dengan menentukan titik perpotongan bidang tersebut dengan ketiga sumbu Cartesian. Perpotongan di sumbu x, y dan z masing-masing adalah $x = \frac{1}{h}, y = \frac{1}{k}$ dan $z = \frac{1}{l}$.

Bidang Sekeluarga

Bidang dengan keluarga yang sama akan mempunyai arah normal (tegak lurus) yang sama. Misalkan terdapat bidang dengan persamaan:
$$\frac{x}{9} + \frac{y}{6} + \frac{z}{15} = 1 \tag{1.15}$$
Persamaan tersebut dapat pula ditulis sebagai
$$10x + 15y + 6z = 90 \tag{1.16}$$
Bidang yang sama dapat pula diperoleh jika ruas kanan dari Pers. (1.16) diganti menjadi faktor kelipatan terkecil dari 10, 15 dan 6, yaitu 30:
$$10x + 15y + 6z = 30 \tag{1.17}$$
Pers. (1.17) dapat pula ditulis sebagai
$$\frac{x}{3} + \frac{y}{2} + \frac{z}{5} = 1 \tag{1.18}$$
Oleh karenanya, dapat disimpulkan bahwa bidang kristal yang sekeluarga dapat ditentukan melalui persamaan bidang. Dalam hal ini, bidang $(9\ 6,\ 15)$ sekeluarga dengan bidang $(3\ 2\ 5)$ dan $(\frac{1}{10}\ \frac{1}{15}\ \frac{1}{6})$.