Tugas 14

1. Uraikan lagi tentang solusi LCAO untuk Li_3. Jelaskan mana konfigurasi yang lebih stabil antara bentuk segitiga dan garis lurus.

   Jawaban :

   Untuk bagian ini, dengan diketahui aproksimasi berupa $t < 0$ dan $s = 0$ maka hamiltonian dari Li_3 adalah

   - Rantai linear

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & 0 \\ t & 0 & t \\ 0 & t & 0 \end{pmatrix}$$

Maka untuk mendapatkan nilai eigen energi E didapat dengan

$$H\vec{C} = E\vec{C}$$

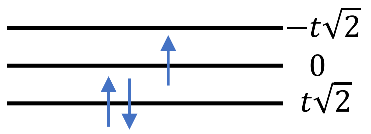
$$\det(H - EI) = 0$$

$$\left|\begin{matrix} -E & t & 0 \\ t & -E & t \\ 0 & t & -E \end{matrix}\right| \begin{matrix} -E & t \\ t & -E \\ 0 & t \end{matrix} = 0$$

$$-E^3 + 0 + 0 - 0 + 2Et^2 = 0$$

$$E(E^2 - 2t^3) = 0$$

Jadi kemungkinan nilai E berupa $E = 0$, $E = t\sqrt{2}$, dan $E = -t\sqrt{2}$. Untuk pengisian elektron dalam tingkat energi di atas dapat di buat seperti



Gambar 1. Konfigurasi elektron terisi untuk tingkat energi dalam Li_3 bentuk rantai linear

Maka energi total dari gambar di sebelah kiri adalah $E_{total} = 2t\sqrt{2}$

   - Segitiga

$$H = \begin{pmatrix} 0 & t & t \\ t & 0 & t \\ t & t & 0 \end{pmatrix}$$

Maka untuk mendapatkan nilai eigen energi E didapat dengan

$$H\vec{C} = E\vec{C}$$

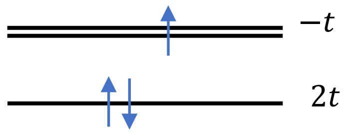
$$\det(H - EI) = 0$$

$$\left|\begin{matrix} -E & t & t \\ t & -E & t \\ t & t & -E \end{matrix}\right| \begin{matrix} -E & t \\ t & -E \\ t & t \end{matrix} = 0$$

$$E^3 - 2t^3 - 3Et^2 = 0$$

$$(E + t)(E + t)(E - 2t) = 0$$

Jadi kemungkinan nilai E berupa $E = 2t,\ E = -t$, dan $E = -t$. Untuk pengisian elektron dalam tingkat energi di atas dapat di buat seperti



Gambar 2. Konfigurasi elektron terisi untuk tingkat energi dalam Li_3 bentuk segitiga

Maka energi total dari gambar di sebelah kiri adalah $E_{total} = 4t - t = 3t$

Oleh karena itu, dapat disimpulkan untuk energi yang lebih stabil dari molekul Li_3 saat $t < 0$ adalah konfigurasi segitiga dengan $E = 3t$.

2. Dapatkan vektor-vektor kisi resiprok untuk graphene.

Jawaban :

Dengan $\boldsymbol{a}_i \,.\, \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ dan diketahui $\boldsymbol{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) a$, $\boldsymbol{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right) a$ maka nilai **b** didapat dengan

$$\begin{pmatrix} b_{x1} & b_{y1} \\ b_{x2} & b_{y2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{x1} & a_{y1} \\ a_{x2} & a_{y2} \end{pmatrix} = 2\pi \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_{x1} & b_{y1} \\ b_{x2} & b_{y2} \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{a_{x1}a_{y2} - a_{y1}a_{x2}} \begin{pmatrix} a_{y2} & -a_{x2} \\ -a_{y1} & a_{x1} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_{x1} & b_{y1} \\ b_{x2} & b_{y2} \end{pmatrix} = \frac{2\pi}{\frac{\sqrt{3}}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)a^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{1}{2}\right)a^2} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}a & -\frac{\sqrt{3}}{2}a \\ -\frac{1}{2}a & \frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} b_{x1} & b_{y1} \\ b_{x2} & b_{y2} \end{pmatrix} = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}$$

Maka untuk masing-masing kisi resiprok adalah

$$\boldsymbol{b}_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)\frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \text{ dan } \boldsymbol{b}_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right)\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$$