

BAB II

DASAR TEORI

2.1 *Semiconductor Quantum Dot*

Semiconductor quantum dot (SQD) adalah material semikonduktor berukuran nano. SQD mempunyai keunikan respons optiknya yang muncul dari efek pengurungan kuantum (*quantum confinement*). Material berukuran besar memiliki rapat keadaan yang kontinu karena elektron bebas bergerak ke segala arah tanpa adanya efek pengurungan. Efek pengurungan kuantum adalah efek yang menciptakan suatu keadaan yang mencegah elektron bergerak bebas karena daerah di sekitarnya mempunyai energi yang besar. Struktur quantum yang dihasilkan dari efek pengurungan kuantum ada tiga yaitu *quantum dot*, *quantum wires*, dan *quantum well*. *Quantum well* memiliki elektron yang terperangkap dalam dua dimensi. *Quantum wire* memiliki elektron yang hanya dapat bergerak dalam satu dimensi. Sedangkan, *quantum dot* memiliki elektron yang pergerakannya dibatasi ke segala arah. *Quantum dot* mempunyai fungsi keadaan diskrit yang dipengaruhi oleh efek pengurungan kuantum. Efek pengurungan kuantum dapat diamati saat ukuran material direduksi menjadi beberapa nanometer dan merekayasa dengan mengubah bentuk dan ukuran material (Abdullah, 2012).

SQD adalah material semikonduktor berbentuk bola berukuran nanometer yang terdiri dari inti, kulit, dan lapisan pembungkus. Inti SQD yang sering dipakai dalam penelitian adalah CdSe (kadmium selenide) atau CdTe (kadmium telurium). Lapisan semikonduktor berfungsi untuk menstabilkan inti serta meningkatkan sifat optis dan fisis. Sifat dasar SQD dipengaruhi oleh material awal pembentuk SQD dan ukuran SQD memberikan dampak pada celah pita energi (*bandgap*). Material yang sama tetapi memiliki ukuran yang berbeda akan menghasilkan emisi warna yang berbeda. Selain itu, SQD memiliki karakteristik unik yaitu celah pita energi material yang bisa diatur. Ketika material berukuran besar (*bulk*), material tersebut diubah ukurannya menjadi material berukuran nanometer terjadi pelebaran jarak antar tiap energi termasuk terjadi pelebaran celah pita energi. Ukuran SQD memengaruhi celah pita energi. Semakin kecil ukuran SQD menyebabkan celah

pita energi akan melebar atau sebaliknya. Ukuran SQD memengaruhi celah pita energi dan hal tersebut memiliki keuntungan bahwa jumlah energi dan panjang gelombang cahaya yang dapat diserap dan dipancarkan oleh material dapat diatur sesuai yang diinginkan. Celah pita energi (*bandgap*) berpengaruh pada konduktivitas listrik material tersebut, karena makin kecil lebar celah pita energi maka konduktivitas umumnya makin besar (Abdullah, 2012).

2.2 Formalisme *Density Matrix*

Formalisme *density matrix* berguna untuk menyelesaikan fungsi keadaan yang tidak diketahui secara pasti dalam suatu sistem. Formalisme tersebut dijelaskan dalam mekanika kuantum yang diwakilkan oleh vektor ket $|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle$, yang merupakan bentuk superposisi dari basis orthonormal $\{|\varphi_n\rangle\}$ maka, $\langle\varphi_m|\varphi_n\rangle = \delta_{mn}$, dan dalam ruang Hilbert dari Hamiltonian. Keadaan *pure state* atau ketika fungsi keadaan diketahui ditunjukkan sebagai berikut:

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle \quad (2.1)$$

$$c_n(t) = \langle\varphi_n(\mathbf{r})|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle \quad (2.2)$$

$\mathbf{r}$ dan t adalah variabel ruang dan waktu dari keadaan vektor. $c_n(t)$ merupakan koefisien ekspansi terhadap waktu. Kondisi normalisasi vektor keadaan yaitu $\langle\Psi(\mathbf{r}, t)|\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle = \sum_n |c_n(t)|^2 = 1$. Jika vektor keadaan pada persamaan (2.1) bernilai, nilai ekspektasi dari observabel diwakili sebagai operator yang dapat dihitung sebagai:

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}\rangle &= \langle\Psi(\mathbf{r}, t)| \hat{O} |\Psi(\mathbf{r}, t)\rangle \\ &= \langle\Psi(\mathbf{r}, t)| \hat{O} \sum_n c_n(t) |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle \\ &= \sum_n \langle\Psi(\mathbf{r}, t)| c_n(t) \hat{O} |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle \\ &= \sum_n \sum_m c_m^*(t) \langle\varphi_m(\mathbf{r})| c_n(t) \hat{O} |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle \\ &= \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) \langle\varphi_m(\mathbf{r})| \hat{O} |\varphi_n(\mathbf{r})\rangle \end{aligned}$$

$$= \sum_{m,n} c_m^*(t) c_n(t) O_{mn} \quad (2.3)$$

operator $\hat{O}$ merupakan rata-rata kuantum mekanis. Operator $\hat{O}$ dideskripsikan sebagai $O_{mn} = \langle \varphi_m(r) | \hat{O} | \varphi_n(r) \rangle$. Jika nilai keadaan dari sistem tidak diketahui maka ensembel keadaan menjadi $|\Psi^s\rangle = |\Psi^1\rangle, |\Psi^2\rangle, |\Psi^3\rangle, \dots, |\Psi^N\rangle$, dengan probabilitas $p_s = p_1, p_2, p_3, \dots, p_N$, sistem ini disebut *mixed state*. p_s adalah probabilitas mekanika kuantum, sehingga:

$$p_1 + p_2 + p_3 \dots + p_N = \sum_{s=1}^N p_s = 1 \quad (2.4)$$

fungsi ekspektasi dari operator *mixed state* merupakan rata-rata dari ensembel. Ini dapat diperoleh dengan merata-ratakan persamaan (2.3) pada semua keadaan yang mungkin dari sistem:

$$\langle \bar{O} \rangle = \sum_{m,n} \sum_{s=1}^N p_s c_m^{s*}(t) c_n^s(t) O_{mn} = \sum_{m,n} \rho_{nm} O_{mn} \quad (2.5)$$

Operator $\langle \bar{O} \rangle$ menunjukkan rata-rata dari ensembel, dan ρ_{nm} sebagai:

$$\rho_{nm} = \sum_s p_s c_m^{s*}(t) c_n^s(t) = \overline{c_m^*(t) c_n(t)} \quad (2.6)$$

persamaan ini menggambarkan elemen matriks dari operator:

$$\hat{\rho} = \sum_{s=1}^N p_s |\Psi(r, t)\rangle \langle \Psi(r, t)| \quad (2.7)$$

persamaan (2.7) merupakan operator *density*, $\hat{\rho}$ adalah operator Hermitian dengan $\rho_{nm} = \rho_{nm}^*$. Elemen diagonal matriks, $\rho_{nn} = \overline{c_n^*(t) c_n(t)}$, disebut populasi. Populasi merupakan probabilitas menemukan sistem pada keadaan n . Konsekuensi dari kondisi normalisasi vektor keadaan menyatakan bahwa $\sum_n \rho_{nn} = 1$. Sementara itu, elemen nondiagonal yaitu $\rho_{nm} = \overline{c_m^*(t) c_n(t)}$ yang menunjukkan koherensi antara level n dan m yang berarti bahwa elemen ini akan menjadi tidak nol jika sistem ini berisi fase hubungan antara keadaan n dan m . Penjumlahan pada persamaan (2.5) dapat disederhanakan sebagai:

$$\langle \bar{O} \rangle = \sum_{m,n} \rho_{nm} O_{mn} = \sum_n \left(\sum_m \rho_{nm} O_{mn} \right) = \sum_n (\hat{\rho} \hat{O})_{nn} = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{O}) \quad (2.8)$$

Tr atau disebut *trace* adalah penjumlahan dari diagonal matrix. Persamaan tersebut menunjukkan rata-rata ensembel dari nilai ekspektasi, dapat dihitung menggunakan *trace density matrix*. Dinamika nilai ekspektasi dapat diketahui dengan evolusi waktu, hal tersebut diatur dalam persamaan *Schrodinger*:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} &= \hat{H} |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \\ \frac{\partial |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} &= -i \frac{\hat{H} |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle}{\hbar} \end{aligned} \quad (2.9)$$

operator $\hat{H}$ menunjukkan Hamiltonian sistem. Persamaan evolusi waktu *density matrix* dapat diturunkan dari persamaan (2.7):

$$\frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \dot{\hat{\rho}} = \sum_s p_s \left(\frac{\partial |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle}{\partial t} \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| + |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \frac{\partial \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)|}{\partial t} \right) \quad (2.10)$$

asumsikan p_s adalah tidak bergantung waktu, sehingga persamaan tersebut menghasilkan turunan terhadap waktu bernilai nol. Persamaan (2.10) dan pertimbangan Hermitian dari $\hat{H}$ yang dapat diturunkan:

$$\begin{aligned} \dot{\hat{\rho}} &= \sum_s p_s \left(-i \frac{\hat{H} |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle}{\hbar} \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| + |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \right. \\ &\quad \left. -i \frac{\hat{H} \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)|}{\hbar} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_s p_s (\hat{H} |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| + |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| \hat{H}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_s p_s (\hat{H} |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| - |\Psi^s(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \Psi^s(\mathbf{r}, t)| \hat{H}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \end{aligned} \quad (2.11)$$

kurung siku menunjukkan komutator yang didefinisikan sebagai $[\hat{H}, \hat{\rho}] = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}$. Persamaan (3.11) dikenal sebagai persamaan *Liouville-von Neumann*, yang menjelaskan *density matrix* sebagai hasil interaksi yang termasuk dalam fungsi Hamiltonian. Persamaan (3.11) melibatkan efek redaman ke persamaan *density matrix*. Persamaan gerak *density matrix* dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\dot{\rho}_{mn} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_{mn} - \gamma_{mn} (\rho_{mn} - \rho_{mn}^{eq}) \quad (2.12)$$

γ_{mn} merupakan konstanta redaman (*damping*). Dengan mengasumsikan $p_{mn}^{eq} = 0$, $n \neq m$ dan $p_{nn}^{eq} \neq 0$; itu diberikan oleh faktor *Boltzmann* yang dikontrol oleh keadaan energi n (Nugroho, 2016).

2.3 Spektrum Serapan Quantum Dimer

Spektrum serapan suatu material dapat diperoleh melalui energi yang diserap oleh material pada rentang frekuensi tertentu. Energi serapan saat SQD disinari oleh cahaya sinar datang bersumber dari energi konservatif elektromagnetik. Nilai rata-rata dari energi serapan SQD per satuan volume dapat dituliskan sebagai berikut:

$$Q = \langle \frac{P}{V} \rangle_{time} = \langle \vec{E} \cdot \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \rangle_{time} \quad (2.13)$$

tanda kurung sudut menotasikan rata-rata terhadap waktu. Polarisasi hubungan dengan medan listrik yang menghasilkan $P(t) = \epsilon_0 \chi E(t)$, maka:

$$Q_{SQD} = \langle \vec{E}(t) \cdot \frac{\partial \vec{P}(t)}{\partial t} \rangle_{time} \quad (2.14)$$

$$= \langle \frac{1}{2} (E_0 e^{-i\omega_0 t} + c.c.) \cdot \left(\frac{1}{2} (-i\omega P e^{-i\omega t} + c.c.) \right) \rangle_{time} \quad (2.15)$$

$$= \frac{1}{2} \omega \epsilon_0 \text{Im}[\chi] |E_0|^2 \quad (2.16)$$

sehingga persamaan dari spektrum serapan *quantum dimer*:

$$Q = \frac{1}{2} \omega \epsilon_0 \text{Im}[\chi] |E_0|^2 \quad (2.17)$$

persamaan (2.17) mendeskripsikan nilai energi serapan SQD yang ditunjukkan oleh Q . ω merupakan frekuensi sudut sistem. Persamaan tersebut juga menunjukkan penyerapan energi memerlukan bagian imajiner dari suseptibilitas (χ) SQD (Nugroho, 2016).

Suseptibilitas (χ) dihitung menggunakan polarisasi momen dipole. Polarisasi SQD dapat dihitung dengan jumlah momen dipol persatuan volume sebagai berikut.

$$P = \frac{1}{V_{SQD}} \text{Tr}[\hat{\rho} \cdot \hat{\mu}] \quad (2.18)$$

$$= \frac{1}{V_{SQD}} \sqrt{2} \mu [\rho_{sg} + \rho_{sg}^* + \rho_{es} + \rho_{es}^*] \quad (2.19)$$

$\text{Tr}[\hat{\rho} \cdot \hat{\mu}]$ didapatkan dengan menjumlahkan diagonal matriks untuk penjelasan lebih detail pada Lampiran 2. Persamaan (2.19) disubstitusikan dengan $P = \frac{1}{2} P_0 (e^{-i\omega t} + e^{i\omega t})$ sehingga menjadi:

$$P_0 = \frac{2\sqrt{2}\mu}{V_{SQD}} [R_{sg} + R_{es}] \quad (2.20)$$

Kemudian, persamaan (2.20) disubstitusi dengan $P_0 = \varepsilon_0 \chi E$ sehingga persamaan suseptibilitas menjadi sebagai berikut:

$$\chi = \frac{2\sqrt{2}\mu}{\varepsilon_0 E_0 V_{SQD}} [R_{sg} + R_{es}] \quad (2.21)$$

R_{sg} dan R_{es} merupakan bagian yang berosilasi lambat dan komponen *off-diagonal density matrix* (Nugroho, 2016).