

BAB II

DASAR TEORI

2.1 Nanopartikel

Nanoteknologi menjadi perhatian besar dalam perkembangan ilmu pengetahuan khususnya pada bidang ilmu material. Kemajuan dalam fabrikasi dan sintesis material membuka kemungkinan pembuatan struktur desain nano dalam bentuk dan ukuran tertentu (Nugroho, 2016). Nanopartikel merupakan materi yang berukuran 1-100 nanometer. Ukuran materi yang kecil tersebut dipakai dalam menciptakan dan memanipulasi suatu material sehingga menghasilkan material baru dengan fungsi dan sifat yang berbeda dari sebelumnya. Pengaplikasian nanoteknologi menyebar luas dalam kehidupan di era sekarang, nanoteknologi dimanfaatkan dalam bidang elektronik, kesehatan, industri, teknologi komunikasi, dan lain-lain (Clunan dan Kirsten, 2014).

Perkembangan pada bidang nanomaterial memungkinkan pengembangan berbagai struktur nano seperti SQD dan MNP (He dan Zhu, 2017). Interaksi materi cahaya diantara keduanya digambarkan secara klasik dan kuantum. Efek interaksi inilah yang menjadi keunggulan struktur hibridisasi SQD-MNP dibandingkan dengan struktur hibridisasi lainnya. SQD merupakan partikel semikonduktor yang mempunyai sifat optis dan elektronik yang berlainan dengan partikel berukuran besar. Saat cahaya yang mengenai SQD menghasilkan interaksi, maka muncul osilasi Rabi yang merupakan proses eksitasi dan deeksitasi periodik dari keadaan yang bertransisi (Elfriana *et al.*, 2018). Eksitasi SQD adalah eksiton dengan keadaan elektroniknya dimodelkan *two-level system*. Penyesuaian sifat optis SQD dilakukan dengan mengatur bentuk, ukuran, dan struktur materialnya (Zielenski *et al.*, 2011). MNP merupakan logam berukuran nano dengan rentang ukuran 1-100 nanometer. Eksitasi MNP ialah LSP (*localized surface plasmon*) yang terjadi ketika MNP disinari oleh gelombang elektromagnetik dan elektron bebas pada logam inilah yang menghasilkan osilasi tersebut (Alharbi *et al.*, 2019). *Surface plasmon* dapat menginduksi ikatan dipol-dipol pada eksiton dan plasmon (Kosionis *et al.*, 2013).

2.2 Formalisme *Density Matrix*

Density matrix merupakan matriks yang digunakan untuk menentukan komponen-komponen besaran fisis pada besaran fisis. Besaran fisis yang akan dilihat pada penelitian ini adalah bagaimana suseptibilitas sistem dipengaruhi oleh faktor geometri. Oleh karena itu, untuk menentukan suseptibilitas sistem diperlukan persamaan *density matrix*. Persamaan gerak *density matrix* $\hat{\rho}$ yang merefleksikan dinamika respons SQD diformulasikan oleh persamaan Liouville-von Neumann (Nugroho dan Arman, 2018).

Mekanika kuantum meninjau sistem dalam *pure state* atau fungsi keadaan yang diketahui secara pasti. Secara umum, fungsi keadaan dideskripsikan dengan fungsi gelombang Schrödinger (Meystre dan Sargent, 2007).

$$\Psi(r, t) = C_n(t)\varphi_n(r) + C_m(t)\varphi_m(r) \quad (2.1.a)$$

$$|\Psi(r, t)\rangle = \sum_n C_n(t)|\varphi_n(r)\rangle \quad (2.1.b)$$

$$\langle\Psi(r, t)| = \sum_m \langle\varphi_m(r)|C_m^*(t) \quad (2.1.c)$$

Nilai ekspektasi dari suatu sistem diberikan oleh suatu operator \hat{O} .

$$\langle\hat{O}\rangle = \langle\Psi(r, t)|\hat{O}|\Psi(r, t)\rangle = \sum_{m,n} C_m^*(t) C_n(t)\langle\varphi_m(r)|\hat{O}|\varphi_n(r)\rangle \quad (2.2)$$

Operator \hat{O} tersebut memiliki elemen-elemen matriks yaitu $O_{mn} = \langle\varphi_m(r)|\hat{O}|\varphi_n(r)\rangle$. Sehingga, nilai ekspektasi suatu sistem dituliskan sebagai berikut:

$$\langle\hat{O}\rangle = \sum_{m,n} C_m^*(t) C_n(t)O_{mn} \quad (2.3)$$

Jika suatu fungsi keadaan dimisalkan Ψ tidak diketahui secara pasti, maka *ensemble* keadaan sistem ialah $|\Psi^s\rangle = |\Psi^1\rangle, |\Psi^2\rangle, |\Psi^3\rangle, \dots, |\Psi^N\rangle$. Masing-masing Ψ mempunyai probabilitas munculnya yang disebut sebagai P_s . Probabilitas $P_s = P_1, P_2, P_3, \dots, P_N$ yang menunjukkan bahwa sistem ini *mixed state*. Sehingga nilai ekspektasi rata-rata oleh *ensemble* dituliskan

$$\overline{\langle \hat{O} \rangle} = \sum_{m,n} \sum_{s=1} P_s C_m^{s*}(t) C_n^s(t) O_{mn} = \sum_{m,n} \rho_{nm} O_{mn} \quad (2.4)$$

probabilitas P_s pada sistem menunjukkan sistem dalam keadaan s . Kuantitas probabilitas P_s dapat diartikan sebagai probabilitas klasik, yang ketentuannya mendefinisikan elemen-elemen dari sistem *density matrix* (Boyd, 2007) dan $C_m^{s*}(t) C_n^s(t)$ menyatakan nilai ekspektasi.

$$\rho_{mn} = \sum_s P_s C_m^{s*}(t) C_n^s(t) = \overline{C_m^*(t) C_n(t)} \quad (2.5)$$

ρ_{mn} mendefinisikan elemen *density matrix* pada sistem dari operator $\hat{\rho}$.

$$\hat{\rho} = \sum_{s=1} P_s |\Psi(r, t)\rangle \langle \Psi(r, t)| \quad (2.6)$$

Persamaan (2.4) yang disederhanakan dapat dituliskan

$$\overline{\langle \hat{O} \rangle} = \sum_{m,n} \rho_{mn} O_{mn} = \sum_n \left(\sum_m \rho_{mn} O_{mn} \right) = \sum_n (\hat{\rho} \hat{O})_{nn} = \text{Tr} (\hat{\rho} \hat{O}) \quad (2.7)$$

notasi $\hat{\rho}$ menyatakan operator *density matrix*, notasi $\hat{\rho} \hat{O}$ menyatakan produk dari $\hat{\rho}$ dengan operatornya \hat{O} sedangkan $(\hat{\rho} \hat{O})_{nn}$ menyatakan komponen n yang merepresentasikan matriks pada sistem.

Sistem berkaitan dengan fungsi keadaan $\Psi(r, t)$, sehingga fungsi ini menggunakan persamaan Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi^s(r, t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi^s(r, t)\rangle \quad (2.8)$$

dengan mendeskripsikan persamaan (2.8) ke persamaan (2.6), maka diperoleh persamaan Liouville-von Neumann (penurunan secara detail ada di lampiran 1).

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}] \quad (2.9)$$

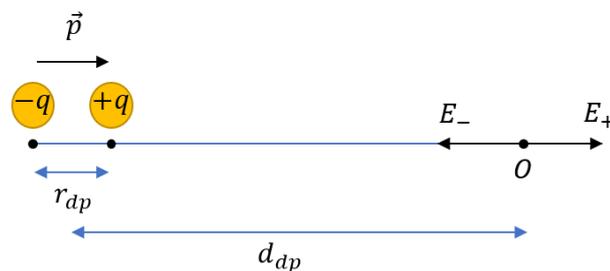
Tanda kurung persegi dari persamaan (2.9) menotasikan komutator oleh operator \hat{H} dan $\hat{\rho}$ yaitu $[\hat{H}, \hat{\rho}] = \hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H}$. Pada sistem kuantum, *density matrix* yang mengalami peluruhan dituliskan sebagai berikut (Nugroho, 2016):

$$\dot{\rho}_{mn} = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\rho}]_{mn} - \gamma_{mn} (\rho_{mn} - \rho_{mn}^{eq}) \quad (2.10)$$

Persamaan (2.10) menunjukkan adanya penambahan efek fenomenologis pada persamaan gerak *density matrix*. Hal ini terjadi karena ada beberapa interaksi spesifik yang tidak bisa dicantumkan dalam definisi Hamiltonian. Elemen *off-diagonal* ρ_{mn} disebut sebagai koheren dan menjelaskan koherensi antara keadaan $|1\rangle$ dan keadaan $|2\rangle$, γ_{mn} merupakan konstanta *damping* antara keadaan $|1\rangle$ dan $|2\rangle$, ρ_{mn} merupakan elemen *density matrix* dan \hat{H} merupakan operator Hamiltonian sistem.

2.3 Medan Listrik Akibat Dipol Listrik

Dipol listrik dapat direpresentasikan sebagai dua muatan yang terpisah oleh jarak r_{dp} dan memiliki besar yang sama namun polaritasnya berlawanan (Young dan Freedman, 2012). Momen dipol didefinisikan sebagai vektor hasil kali muatan dengan jarak $\vec{p} = qr_{dp}$. Arah vektor \vec{p} ialah dari muatan negatif menuju muatan positif di sepanjang garis antar muatan.



Gambar 2.1 Dipol-dipol dan medan yang dihasilkannya.

Gambar 2.1 menunjukkan dipol dan medan yang dihasilkannya pada titik yang terletak di sumbu dipol. Pada titik O , penjumlahan vektor medan yang dihasilkan oleh muatan E_+ dan E_- merupakan besar medan listrik total. Medan listrik E adalah gaya per satuan muatan yang dihasilkan oleh sebuah muatan uji q . Persamaan untuk memperoleh medan dari dipol di sepanjang sumbunya dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E_+ = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{d_+^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{\left(d_{dp} - \frac{r_{dp}}{2}\right)^2} \quad (2.11)$$

$$E_- = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{d_-^2} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{\left(d_{dp} + \frac{r_{dp}}{2}\right)^2} \quad (2.12)$$

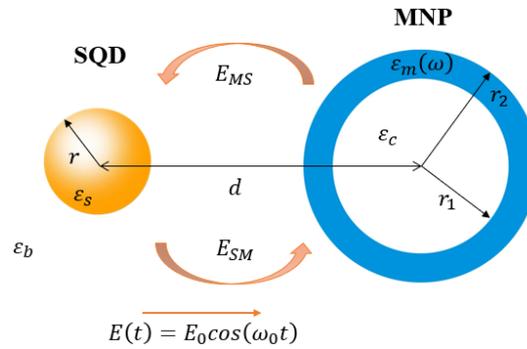
Melalui persamaan (2.11) dan (2.12), medan yang dihasilkan oleh dipol dituliskan sebagai berikut:

$$E = E_+ - E_- = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2p}{(d_{dp})^3} \quad (2.13)$$

Persamaan (2.13) memberikan informasi bahwa persamaan tersebut merupakan medan yang dihasilkan oleh dipol (penurunan secara detail ada di lampiran 2).

2.4 Interaksi Dipol-Dipol pada SQD-MNP Hybrid

Interaksi antara SQD dan MNP dilakukan dengan aproksimasi dipol-dipol. Jika merujuk pada aproksimasi, maka interaksi dipol-dipol merupakan interaksi dari dua dipol yang diletakan pada jarak tertentu dan keduanya diberlakukan sebagai dipol titik untuk menghitung energi interaksi. Pada kasus SQD-MNP, interaksi dipol-dipol diantara keduanya dideskripsikan oleh Gambar 2.2.



Gambar 2.2 Skematik interaksi dipol-dipol pada SQD-MNP.

Pada sistem ini, nanopartikel SQD diasumsikan sebagai dipol yang dieksitasi oleh medan eksternal E_0 . Medan eksternal tersebut mempolarisasikan dipol momen SQD. Polarisasi pada SQD ini disebut P_{SQD} yang kemudian menghasilkan medan E_{SM} . E_{SM} merupakan medan yang dihasilkan oleh SQD.

$$E_{SM} = \frac{P_{SQD}}{2\pi\epsilon_0\epsilon_b d^3} \quad (2.14)$$

Pada peristiwa ini, medan yang berkerja pada SQD dan MNP adalah $E_{MNP} = E_0 + E_{SM}$. Setelah itu, E_{MNP} menyebabkan polarisasi kembali sehingga menghasilkan P_{MNP} .

$$P_{MNP} = \varepsilon_0 \varepsilon_b \alpha(\omega) \left(E_0 + \frac{P_{SQD}}{2\pi \varepsilon_0 \varepsilon_b d^3} \right) \quad (2.15)$$

$\alpha(\omega)$ menyatakan polarisabilitas (Nugroho *et al.*, 2020).

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) = & 4\pi r_2^3 \frac{[\varepsilon_c + 2\varepsilon_m(\omega)][\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_b]}{[\varepsilon_m(\omega) + 2\varepsilon_b][\varepsilon_c + 2\varepsilon_m(\omega)]} \\ & + \frac{\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^3 [\varepsilon_c - \varepsilon_m(\omega)][\varepsilon_b + 2\varepsilon_m(\omega)]}{+ 2\left(\frac{r_1}{r_2}\right)^3 [\varepsilon_m(\omega) - \varepsilon_b][\varepsilon_c - \varepsilon_m(\omega)]} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Kemudian, medan ini akan mempolarisasikan MNP sehingga terbentuk hubungan medan \vec{E} dengan momen dipol \vec{p} yang persamaannya dituliskan sebagai berikut:

$$\vec{p} = \alpha \vec{E} \quad (2.17)$$

P_{MNP} di persamaan (2.15) kemudian menghasilkan medan lagi yaitu E_{MS} , medan yang dirasakan SQD akibat keberadaan MNP. Sehingga, persamaan (2.14) pada P_{SQD} digantikan dengan P_{MNP} . Pada peristiwa ini, medan yang berkerja pada SQD dan MNP adalah $E_{SQD} = E_0 + E_{MS}$.

$$E_{SQD} = \frac{1}{\varepsilon_s'} \left[1 + \frac{\alpha(\omega)}{2\pi d^3} \right] E_0 + \frac{\alpha(\omega)}{4\pi d^6 \varepsilon_0 \varepsilon_b \varepsilon_s'} P_{SQD} \quad (2.18)$$

Persamaan (2.18) menyatakan medan total yang dihasilkan oleh interaksi dipol-dipol dan efek penting akibat hibridisasi SQD-MNP (penurunan secara detail ada di lampiran 3). Suku pertama menyatakan renormalisasi amplitudo medan eksternal E_0 , suku kedua menyatakan medan induksi dari MNP, sedangkan suku ketiga menyatakan terbentuknya *self-action* SQD melalui MNP. Medan yang dialami SQD bergantung amplitudo momen dipol P_{SQD} .

2.5 Suseptibilitas

Suseptibilitas merupakan respons medan listrik yang berhubungan dengan polarisasi dielektrik. Untuk menghasilkan polarisasi yang sama, suseptibilitas

menunjukkan seberapa mudah atau seberapa sulit suatu materi terpolarisasi. Suseptibilitas listrik disebut juga suseptibilitas dielektrik dan berbanding lurus dengan polarisasi P_0 serta medan listrik E_0 . Persamaan suseptibilitas dituliskan sebagai berikut:

$$\chi = -\frac{i}{V_{QD}\epsilon_0 E_0} R\mu \quad (2.19)$$

V_{QD} adalah volume SQD, ϵ_0 adalah permitivitas vakum suatu medium, dan R adalah amplitudo dari elemen *off-diagonal density matrix*. Karena suseptibilitas bernilai kompleks, maka suseptibilitas memiliki nilai bagian real dan imajiner, $\chi = \chi_R + i\chi_I$.