

STRUKTUR DAN IKATAN KRISTAL



[Handwritten signature]

MILIK PERPUSTAKAAN IKIP PADANG

DITERIMA TGL : 22-12-'98

SUMBER / HARGA : H /

KOLEKSI : KI

NO. INVENTARIS : 1221/K/98-31/2

Oleh : KLASIFIKASI : 530.41 Suu S:1

Drs. Ibnu Suud, M.Pd

Drs. Hufri, M.Si

JURUSAN PENDIDIKAN FISIKA

FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT KEGURUAN DAN ILMU PENDIDIKAN PADANG

1998

MILIK PERPUSTAKAAN
IKIP PADANG

KATA PENGANTAR

Syukur Alhamdulillah kami panjatkan kehadiran Tuhan Yang Maha Kuasa, karena dengan Ridho-Nya kami dapat menyelesaikan tulisan ini yang diberi judul "STRUKTUR DAN IKATAN KRISTAL". Adapun tujuan penulisan buku ini adalah untuk menambah referensi tentang buku-buku yang membahas tentang struktur dan ikatan gas di jurusan Pendidikan Fisika FPMIPA IKIP Padang. Mengingat masih terbatasnya buku-buku tersebut di Jurusan Pendidikan Fisika FPMIPA IKIP Padang yang di tulis dalam bahasa Indonesia, diharapkan buku ini dapat digunakan sebagai rujukan tambahan bagi mahasiswa yang mengambil mata kuliah Pendahuluan Fisika Zat Padat.

Bab satu dari buku ini membahas tentang keadaan kristal dan difinisi-difinisi Pokok yang meliputi kisi kristal, vektor-vektor dasar, unit sel dan sel primitif dan tidak primitif. Bab dua membahas tentang struktur kristal yang meliputi sistem kristal, jumlah atom tiap unit sel, bilangan koordinasi, massa jenis, daya jelajah (packing fraction), unsur-unsur simetris (yang terdiri dari pusat invers, bidang cermin, sumbu rotasi), grup-grup titik, grup-grup ruang dan kisi-kisi bravias, tata nama, arah dan bidang kristal serta indeks Miller (arah-arah kristal, bidang kristal dan indeks Miller, jarak antara bidang-bidang yang berindeks Miller sama), contoh-contoh struktur kristal yang sederhana dan zat padat yang tidak berbentuk dan zat cair. Sedangkan bab III membahas tentang ikatan kristal yang meliputi gaya interaksi dan klasifikasi dalam zat padat dan bentuk-bentuk ikatan kristal (yang terdiri dari ikatan ionik, ikatan kovalen, ikatan metal, ikatan Van der Waals-London dan ikatan tingkat dua). Disamping itu juga diberikan beberapa pertanyaan dan soal, guna untuk lebih memahami isi dari buku ini.

Ucapan terima kasih kami sampaikan kepada Bapak Drs. Masril, M.Si, yang telah bersedia meluangkan waktu untuk memeriksa seluruh isi buku ini. Saran-saran dari beliau merupakan masukan yang berharga demi perbaikan.

Kami menyadari bahwa buku ini masih terdapat kekurangan disana-sini, oleh karena itu tegur sapa dan kritik saran dari para pembaca akan kami terima dengan hati terbuka. Semoga buku ini ada manfaatnya.

Padang, Nopember 1998

Penulis

DAFTAR ISI

KATA PENGANTAR	ii
DAFTAR ISI	iii
BAB I. PENDAHULUAN	
1.1. Keadaan Kristal	2
1.2. Definisi-Definisi Pokok	4
1.2.1. Kisi kristal	4
1.2.2. Vektor-vektor dasar	7
1.2.3. Unit sel	8
1.2.4. Sel primitif dan tidak primitif	10
BAB II. STRUKTUR KRISTAL	13
2.1. Sistem Kristal	13
2.2. Jumlah Atom Tiap Unit Sel	17
2.3. Bilangan Koordinasi	19
2.4. Massa Jenis	20
2.5. Daya Jelajah (Packing Fraction)	21
2.6. Unsur-Unsur Simetris	22
2.6.1. Pusat invers	23
2.6.2. Bidang cermin	23
2.6.3. Sumbu rotasi	23
2.7. Grup-Grup Titik, Grup-Grup Ruang dan Kisi-Kisi Bravias	24
2.8. Tata Nama, Arah dan Bidang Kristal Serta Indeks Miller	26
2.8.1. Arah-arrah kristal	26
2.8.2. Bidang kristal dan indeks Miller	28
2.8.3. Jarak antara bidang-bidang yang berindeks Miller sama ..	30
2.9. Contoh-Contoh Struktur Kristal Yang Sederhana	32
2.9.1. Kubus berpusat muka dan berpusat badan	32
2.9.2. Struktur sodium klorida	33
2.9.3. Struktur cesium klorida	34
2.9.4. Struktur intan	36

2.9.5. Struktur seng sulfida (Zincblende) simbol ZnS	37
2.9.6. Struktur hexagonal close packed	37
2.10. Zat Padat Yang Tidak Berbentuk Dan Zat Cair	38
BAB III. IKATAN KRISTAL	46
3.1. Gaya Interaksi dan Klafikasi Dalam Zat Padat	46
3.2. Bentuk-Bentuk Ikatan Kristal	50
3.2.1. Ikatan ionik	51
3.2.1.1. Anggapan-anggapan dasar teori Born	52
3.2.1.1. Menghitung harga m dari data kompresibilitas ..	56
3.2.2. Ikatan kovalen	58
3.2.3. Ikatan metal	60
3.2.4. Ikatan Van der Waals-London	63
3.2.4.1. Gaya tolak	66
3.2.4.2. Konstanta keseimbangan kisi	68
3.2.4.3. Energi kohesif	70
3.2.5. Ikatan tingkat dua	70
DAFTAR PUSTAKA	75

BAB.I PENDAHULUAN

Dengan mata biasa, zat padat kelihatan seperti benda yang kontinu, dan percobaan sudah membuktikan bahwa semua zat padat tersusun dari unit-unit dasar tertentu dari atom-atom atau molekul-molekul. Atom-atom ini tidak tersebar secara random (acak) tetapi tersusun sangat teratur, susunan grup atom yang sedemikian disebut dengan kristal. Jadi kristal dapat didefinisikan sebagai susunan yang padat dari atom-atom, yang tersusun dalam pola yang berulang (periodik) dalam ruang tiga dimensi. Perbedaan yang mendasari kristal dengan gas dan zat cair, adalah disebabkan oleh susunan atom-atom dalam gas dan cairan tidak memiliki persyaratan tentang keperiodikannya.

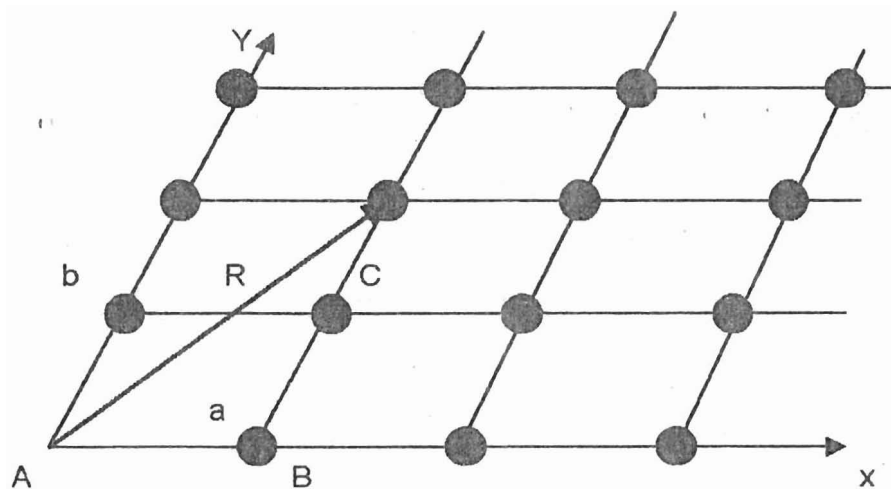
Namun demikian tidak semua zat padat adalah kristal, karena pada beberapa zat padat atom-atomnya ada yang tersebar secara acak dengan kata lain dikatakan kristal tak berstruktur (amorphous). Salah satu dari amorphous ini adalah gelas, yang mempunyai sedikit ketidakteraturan susunan atom di bagian dalamnya. Dalam kenyataannya tidak ada perbedaan yang mendasar antara benda-benda amorphous ini dengan zat cair, dan yang pertama dia sering berkelakuan seperti "zat cair dalam keadaan membeku (undercooled liquid)".

Struktur kristal mempunyai beberapa tipe yang tergantung pada geometri dari susunan atomnya, pengetahuan tentang geometri dari susunan atom ini sangat penting dalam fisika zat padat, sebab struktur ini biasanya mempengaruhi sifat-sifat zat padat. Bagian pertama bab ini akan memaparkan arti dari struktur kristal, dan dimulai dengan beberapa definisi pokok mengenai matematik dasar yang berguna untuk menjelaskannya. Kemudian disebutkan satu persatu jenis struktur kristal yang

mungkin ada, diteruskan dengan konsep Miller dan selanjutnya dikemukakan beberapa contoh struktur kristal yang sederhana (khas).

1.1. Keadaan Kristal

Zat padat disebut kristal jika atom-atom tersusun sedemikian rupa, sehingga posisinya betul-betul berulang (periodik) seperti yang diilustrasikan dalam gambar 1.1. Dimana jarak antara tetangga terdekatnya sepanjang sumbu X adalah a , dan sepanjang sumbu Y adalah b (X dan Y adalah sumbu yang boleh saling tegak lurus dan boleh tidak). Suatu kristal benar-benar memelihara keberulangannya ini dalam arah X, dan Y ini dari (-) sampai (+). Menurut keberulangannya ini maka atom-atom A, B, C dan seterusnya adalah sama, dengan kata lain kristal kelihatan benar-benar sama lokasinya jika diamati dari sembarang kedudukan atom.



Gambar 1.1. Kristal zat padat satu dimensi, semua atom-atom tersusun secara periodik

Ide yang sama sering diungkapkan dengan perkataan bahwa suatu kristal memiliki translasi simetris, ini berarti bahwa jika kristal ditranslasikan oleh suatu vektor yang menghubungkan dua atom katakanlah R (dalam gambar 1.1) kristal kelihatan benar-benar sama dengan sebelum dia ditranslasikan. Dengan kata lain kristal tetap tidak berubah karena beberapa translasi yang sedemikian rupa, dan bagian dari buku ini tidak akan memfokuskan pada translasi ini.

Pada hakekatnya tidak satupun kristal yang dapat dikualifikasikan sebagai kristal murni, contoh pertama permukaan kristal merupakan salah satu jenis yang membatasi keterulangan susunan atom-atom dalam kristal. Lingkungan atom-atom pada permukaan terlihat berbeda, dari lingkungan atom-atom yang berada di tengah-tengah kristal. Contoh yang lain adalah mengenai getaran termal atom-atom, di sekitar titik keseimbangannya pada suhu $T > 0^{\circ}$. Makin tinggi suhu makin besar penyimpangan dari titik keseimbangan, dan akibatnya makin tinggi tingkat ketidakteraturannya. Contoh yang ketiga perlu dicatat bahwa kebanyakan kristal, selalu berisi atom-atom lain dengan kata lain dicampuri (dikotori). Pemberian campuran dengan dosis 10^{12} atom / cm³ merupakan dosis yang terbaik untuk menimbulkan gangguan pada struktur kristal murni.

Dengan tidak memikirkan permasalahan ini, dapat dilihat bahwa efek dari penyimpangan tersebut (ketidakseimbangan ini) pada wujudnya sudah diteliti, dan sangat sedikit sekali pengaruhnya. Misalnya adalah kristal sodium yang terisolasi volumenya (1 cm kubik) perbandingan jumlah atom yang ada pada permukaan dengan jumlah atom dalam kristal sangat sedikit, dan kristal bisa dianggap murni karena campurannya (pengotorannya) dapat diabaikan. Pada suhu yang cukup rendah getaran kisi-kisi lemah, begitu lemahnya maka lemah pulalah semua efek

penyimpangan ini. Karena alasan tersebut di atas boleh dikatakan, bahwa yang dibicarakan adalah benar-benar kristal murni.

Ketidaktepurnaan ini sering menjadi obyek yang menarik, seperti getaran termal atom menimbulkan tahanan listrik dalam bermacam-macam metal. Pada keadaan ini hal tersebut tidak dapat dilepaskan dari konsep kristal sama sekali, tetapi ketidaktepurnaan ini merupakan hal yang menarik sebagai suatu gangguan yang kecil dalam kristal. Banyak fenomena menarik dalam zat padat berkaitan dengan pengotoran ini.

1.2. Diferinisi-Diferinisi Pokok

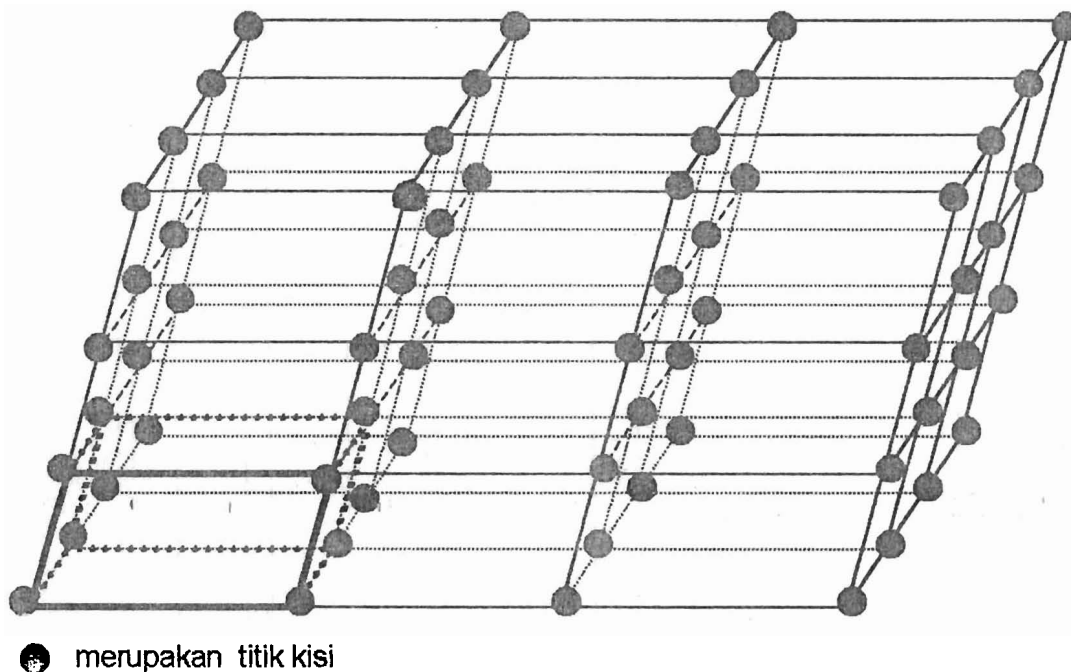
Dalam usaha untuk menjelaskan dengan baik struktur kristal, kita harus memulai terlebih dahulu dengan beberapa diferinisi pokok yang dapat memberikan penjelasan tentang gambaran bermacam-macam kristal. Diferinisi ini dapat diaplikasikan pada kristal satu, dua dan tiga dimensi, meskipun banyak contoh yang diberikan dalam bentuk dua dimensi namun hasilnya dapat diaplikasikan pada kasus tiga dimensi.

1.2.1. Kisi kristal

Dalam mempelajari kristal, hanya sifat-sifat geometrinya yang lebih menarik daripada bentuk bangunan atom-atom tertentu yang ada dalam kristal. Karena itu sering diperjanjikan untuk mengabaikannya di dalam ruang, sebagai pengganti atom-atom dalam kristal digunakan kumpulan titik-titik yang diimanjinasikan mempunyai hubungan yang tetap di dalam ruang dan dapat dilihat seperti rupa kerangka dimana kristal yang sebenarnya dibentuk.

Susunan titik-titik ini dapat dibentuk sebagai berikut bayangkan ruangan dibagi atas tiga kumpulan bidang-bidang, bidang-bidang pada masing-masing set (kum-

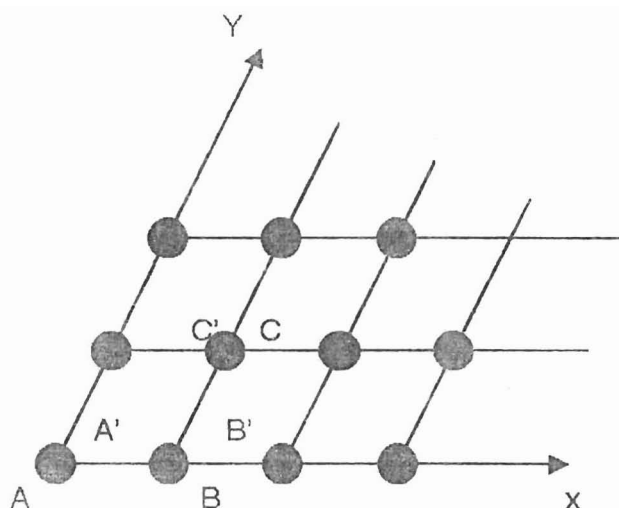
pulan) sejajar dan sama jaraknya. Pembagian dari ruangan ini akan menghasilkan suatu kumpulan sel-sel yang tiap-tiapnya identik ukurannya, bentuknya dan orientasinya terhadap tetangga terdekat. Setiap sel bentuknya belah ketupat, karena permukaan yang berhadapan sejajar dan masing-masing mukanya jajaran genjang. Bidang-bidang yang membagi ruangan ini akan berpotongan dan ini merupakan suatu kumpulan garis seperti terlihat pada gambar 1.2, garis-garis ini akan berpotongan dan membentuk sekumpulan susunan titik-titik yang berkaitan.



Gambar 1.2. Titik- titik kisi dalam kristal

Suatu kumpulan titik-titik yang dibentuk memiliki sifat-sifat yang tertentu, dia merupakan titik-titik kisi yang didefinisikan sebagai suatu titik-titik dalam ruang yang sedemikian rupa susunannya sehingga setiap titik dikelilingi oleh tetangga yang identik. Dengan keidentikkannya ini jika ditinjau dari suatu arah tertentu dari suatu titik kisi, akan memiliki penampilan yang sama bila dipandang dari arah yang sama dari beberapa titik kisi yang lain.

Ada dua jenis kisi yaitu kisi Bravais dan nonBravais, pada kisi Bravais semua titik kisi adalah sama sehingga diperlukan semua atom dalam kristal sama (sejenis). Dalam kisi nonBravais beberapa titik kisi tidak sama (ekuivalen). Gambar 1.3 memperlihatkan hal ini dengan jelas.



Gambar 1.3. Suatu kisi tidak Bravais

Di sini kedudukan kisi-kisi A, B, C adalah ekuivalen satu sama lainnya, dan juga kedudukan A', B' dan C' sesamanya, tetapi dua kedudukan A dan A' tidaklah ekuivalen. Kisi nonBravais kadang-kadang kelihatan seperti kisi dengan suatu basis, basis dihubungkan dengan suatu set atom yang berada di dekat tiap-tiap kedudukan dari suatu kisi Bravais. Seperti dalam gambar 1.3 basis adalah dua atom A dan A', atau beberapa set atom lainnya yang ekuivalen

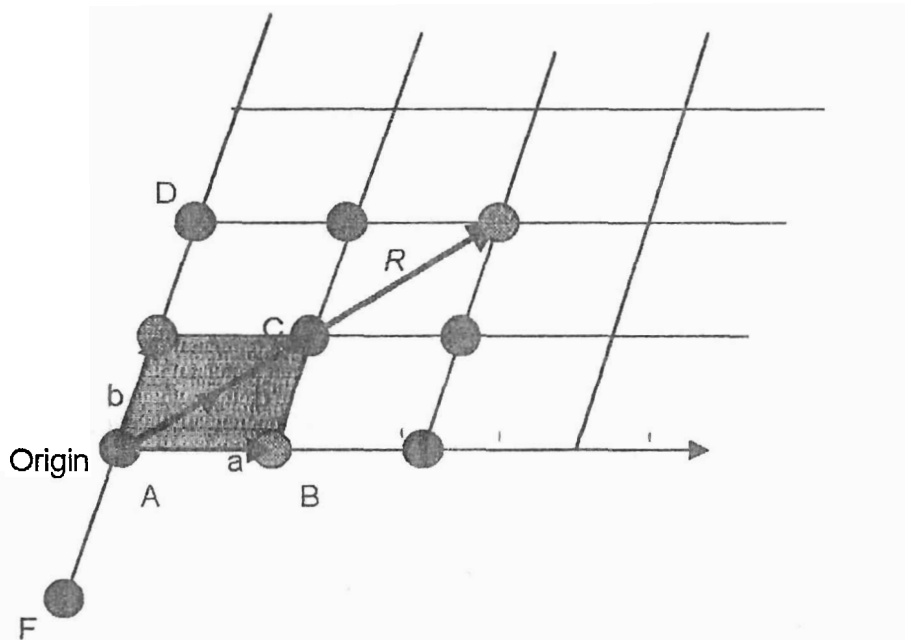
Kisi nonBravais dapat dianggap sebagai kombinasi dari dua atau lebih kisi Bravais yang saling menetralkan dengan orientasi yang relatif tetap satu sama lainnya. Titik A, B, C dan seterusnya membentuk suatu kisi, sedangkan titik-titik A', B', C', dan seterusnya membentuk kisi-kisi yang lainnya.

1.2.2. Vektor-vektor dasar

Kisi yang akan dibicarakan seperti dalam gambar 1.4. Marilah dipilih koordinat awal pada suatu titik kisi, katakanlah titik A. Sekarang vektor-vektor dari beberapa titik kisi dapat ditulis sebagai berikut :

$$R_n = n_1 a + n_2 b \quad (1-1)$$

a dan b merupakan dua vektor, dan (n_1, n_2) adalah pasangan kelipatan yang diambil yang harganya tergantung pada letak titik kisi. Untuk titik D; $(n_1, n_2) = (0, 1)$; titik B : $(n_1, n_2) = (1, 0)$ dan untuk titik F ; $(n_1, n_2) = (0, -1)$.



Gambar 1.4. Vektor-vektor a dan b adalah vektor dasar kisi
Daerah hitam merupakan luas daerah unit sel untuk
Vektor-vektor yang berkaitan

Dua vektor a dan b (yang harus tidak segaris) membentuk kumpulan vektor-vektor dasar kisi, dalam hubungan dimana posisi dari semua titik kisi dapat ditetapkan oleh pernyataan persamaan (1-1). Ini sering dikatakan dengan cara lain, bahwa kisi

memiliki translasi simetris dalam semua penyimpangan yang tertentu oleh vektor kisi R_n .

Pemilihan vektor-vektor dasar tidaklah terlalu unik atau tertentu. Sehingga dapat saja sama baiknya jika kita ambil vektor-vektor a dan b' ($a+b$) sebagai vektor-vektor dasar (gambar 1.4). Kemungkinan yang lain juga dibolehkan. Pemilihan ini biasanya juga ditetapkan dengan kesepakatan, seperti yang ada dalam buku teks ini, merupakan hasil kesepakatan yang sudah ditetapkan.

1.2.3. Unit sel

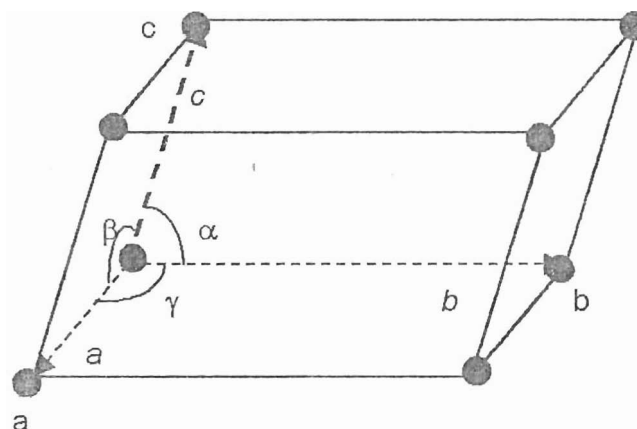
Luas jajaran genjang yang sisi-sisinya vektor-vektor dasar a dan b disebut dengan unit sel kisi (gambar 1.4), dalam hal ini jika sel ditranslasikan oleh semua vektor kisi dari persamaan (1-1), luas keseluruhannya adalah satu dan hanya satu. Unit sel ini merupakan luas yang paling kecil, yang dihasilkan oleh cakupan ini. Karena itu kisi boleh dipandang sebagai susunan sejumlah besar unit sel yang susunannya sama, letaknya berdampingan satu sama lainnya, seperti tumpukan keping batu bata.

Pemilihan satu unit sel untuk kisi yang sama tidaklah tertentu (unik), karena itu pemilihan vektor-vektor dasar tidaklah khusus pula. Sehingga bentuk jajaran genjang yang dibentuk oleh vektor-vektor a dan b dalam gambar 1.4 dapat juga diterima sebagai unit sel, karena suatu pemilihannya ditentukan oleh perjanjian. Beberapa penjelasan berikut dapat membantu dalam memahami pengertian unit sel.

- i). Semua unit sel memiliki luas yang sama. Sehingga sel yang dibentuk oleh vektor a dan b memiliki luas $S = (a \times b)$ sama dengan luas sel yang dibentuk oleh vektor a dan b' luas $S' = (a \times b') = a \times (a + b) = (a \times b) = S$. Karena itu luas unit sel tertentu meskipun bentuknya tidak tertentu

ii). Banyak titik kisi yang dimiliki unit sel, yang berkaitan dengan gambar 1.4 dapat dihitung. Unit sel yang dibentuk vektor $a \times b$ mempunyai empat titik kisi pada sudut-sudutnya, tetapi tiap-tiap titik ini memiliki bersama oleh empat sel-sel yang berbatasan. Sehingga tiap-tiap unit sel memiliki hanya satu titik kisi

Untuk tiga dimensi contohnya adalah suatu garis tebal yang diperlihatkan dalam gambar 1.2, karena semua sel kisi diperlihatkan adalah identik maka kita boleh memilih salah satu sebagai suatu unit sel. Ukuran dan bentuk unit sel dapat digambarkan dengan tiga vektor \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} yang ditarik dari salah satu sudut sel yang diambil tadi (gambar 1.5). Vektor-vektor ini membatasi sel dan disebut dengan "sumbu-sumbu struktur" unit sel, dia dapat digambarkan dalam panjang (a , b dan c) dan sudut-sudut antaranya yaitu (α , β dan γ). Panjang dan sudut-sudut ini disebut tetapan kisi atau parameter kisi dari unit sel



Gambar 1.5. Satu unit sel dalam tiga dimensi

Perhatikan bahwa vektor-vektor \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} , tidak hanya menetapkan unit sel, tetapi juga keseluruhan titik kisi melalui translasi vektor-vektor ini. Dengan kata lain semua kumpulan titik-titik dalam kisi dapat dibuat lagi dengan mengulang membuat

vektor-vektor \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} , pada salah satu titik kisi yang berada pada titik awal atau

pada salah satu titik yang dipilih. Koordinat vektor untuk sembarang titik dalam kisi adalah Pa , Qb dan Rc , dimana P , Q dan R adalah bilangan bulat. Hal ini membolehkan bahwa susunan titik-titik adalah benar-benar periodik dalam tiga dimensi, titik-titik diulang dengan interval yang teratur sepanjang sembarang garis yang dipilih digambar melalui kisi.

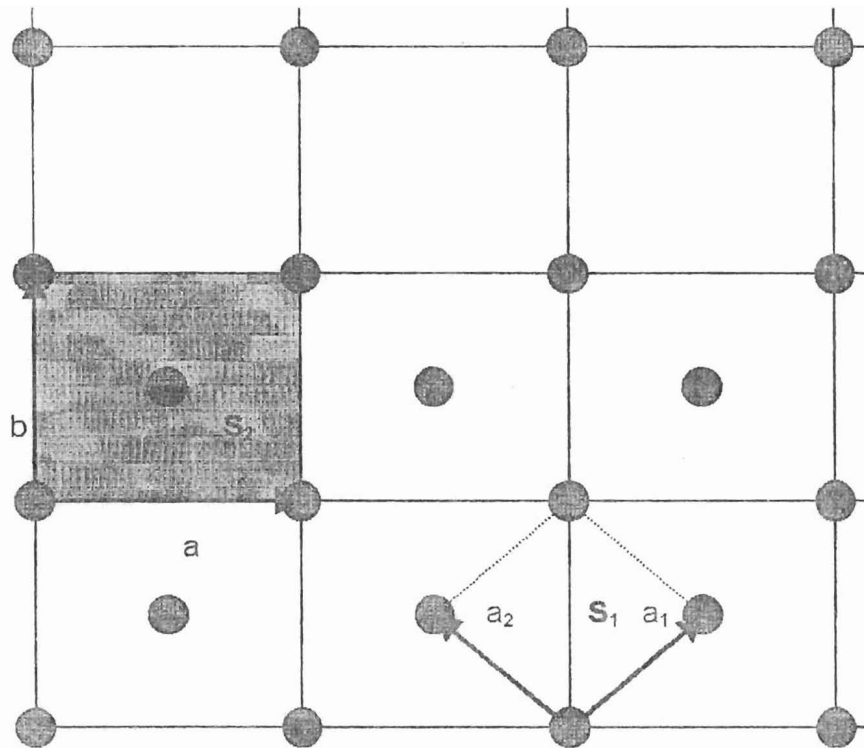
1.2.4. Sel primitif dan tidak primitif

Unit sel yang sudah dibicarakan di atas disebut dengan sel primitif. Kadang-kadang sel primitif di tetapkan, meskipun untuk unit sel yang lebih besar kelihatan kesimetrisan kisi lebih jelas. Ide ini diilustrasikan oleh kisi Bravais dalam gambar 1.6. Disini jelas vektor a_1 dan a_2 dapat dipilih sebagai set vektor dasar, khususnya pada hal ini unit selnya adalah jajaran genjang S_1 . Namun kisi dapat juga dipandang sebagai kumpulan kumpulan dari empat persegi panjang yang bersisian, pada keadaan ini diambil vektor-vektor a dan b sebagai vektor dasar, maka luas unit sel S_2 adalah luas yang dibentuk oleh vektor ini. Sel ini mempunyai satu titik kisi ditengahnya dan ditambah dengan titik-titik kisi yang berada pada sudut-sudutnya, dan sel ini tidak primitif.

Alasan untuk pemilihan sel tidak primitif S_2 , bahwa dia memperlihatkan kesimetrisan persegi empat yang sangat jelas, meskipun kesimetrisan ini ada juga pada sel primitif S_1 (ini juga harus ada, karena keduanya kisi yang sama). Yang penting diperhatikan adalah sebagai berikut :

- i). Luas sel tidak primitif merupakan kelipatan sel primitif. Dalam gambar 1.6 faktor pengalinya adalah 2.
- ii). Tidak ada hubungan (kaitan) antara sel non primitif dengan kisi tidak Bravais. Pada bagian (i) berkaitan dengan pemilihan yang tertentu vektor-vektor dasar

kisi Bravais, dan yang terakhir berkaitan dengan keadaan dari kedudukan yang tidak ekuivalen.

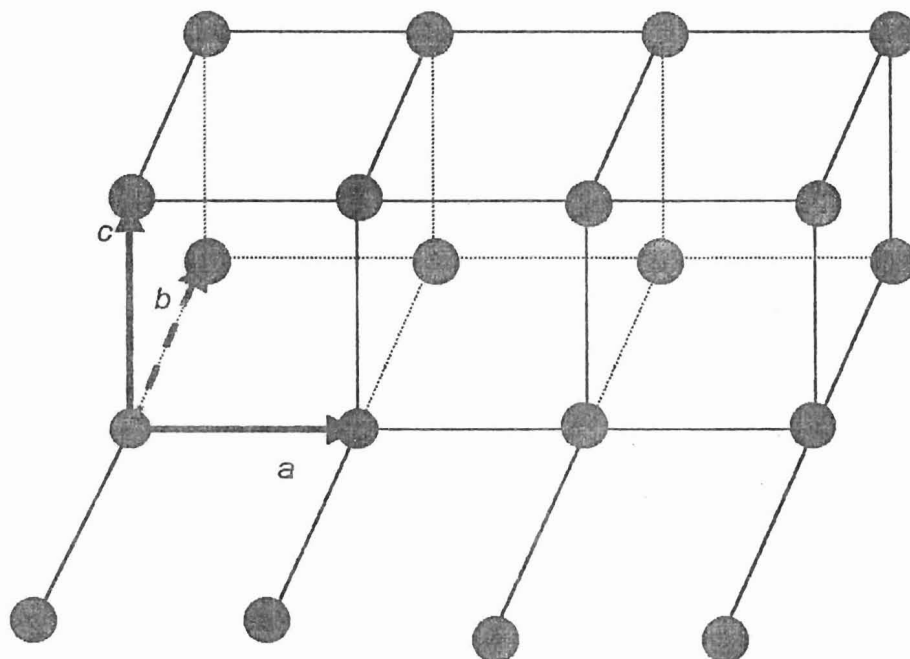


Gambar 1.6. Luas bidang S_1 merupakan luas unit sel primitif
Dan S_2 untuk unit sel tidak primitif dalam kisi dua dimensi

Semua pernyataan terdahulu dapat dikembangkan untuk kisi tiga dimensi dengan cara yang sama. Jika ini kita lakukan maka vektor-vektor kisi untuk kisi tiga dimensi dapat dinyatakan dalam bentuk :

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (1-2)$$

a , b dan c adalah vektor-vektor yang tidak segaris yang menghubungkan titik kisi asal dengan tetangga terdekatnya (gambar 1.5) dan n_1 , n_2 , dan n_3 merupakan bilangan bulat $0, \pm 1, \pm 2, \dots$ harganya tergantung pada titik kisi yang diambil



Gambar 1.7. Kisi tiga dimensi, vektor a , b dan c adalah kisi dasar kisi

Tiga vektor a , b dan c adalah vektor-vektor dasar, dan belah ketupat yang sisi-sisinya a , b dan c disebut dengan unit sel. Disini kembali dapat dilihat bahwa pemilihan sel primitif tidaklah tetap, meskipun semua sel primitif memiliki volume yang sama. Juga kadang-kadang ditetapkan bahwa sel-sel tidak primitif memiliki satu titik tambahan dalam unit sel atau dipermukaannya. Kisi-kisi tidak Bravais dibangun dari dua, atau lebih kisi-kisi Bravais yang saling menetralsir.

BAB.II STRUKTUR KRISTAL

2.1. Sistem Kristal

Dalam pembagian ruang oleh tiga kumpulan bidang-bidang tentu saja akan menghasilkan unit sel yang bermacam-macam bentuknya, tergantung kepada bagaimana bidang-bidang tersebut tersusun. Misalnya jika bidang-bidang dalam ketiga kumpulan semua jaraknya sama dan saling tegak lurus, maka unit sel yang dihasilkan akan berbentuk kubus. Dalam hal ini vektor-vektor \vec{a} , \vec{b} dan \vec{c} adalah sama dan membentuk tiga salib sumbu satu sama lainnya, atau $a = b = c$ dan $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Dengan memberikan harga-harga tertentu pada panjang sumbu dan besar sudut, maka dapat dibuat bermacam bentuk unit sel dan bermacam-macam jenis dari kisi-kisi tertentu karena titik-titik kisi berada pada sudut sel. Bentuk ini menghasilkan hanya tujuh macam jenis, perbedaan unit sel yang penting mencakup semua kisi-kisi yang mungkin. Jadi hanya ada tujuh sistem kristal, dan semua kristal dapat dikelompokkan ke dalam sistem ini. Sistem-sistem ini dapat dilihat dalam tabel 2.1.

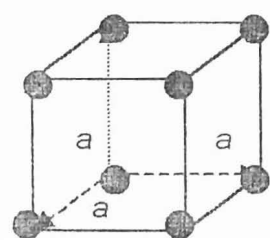
Ada 14 jenis kisi-kisi Bravais yang berbeda. Landasan penjenisan yang relatif kecil ini jumlahnya adalah sebagai konsekuensi dari translasi simetri yang dituntut dari kisi. Untuk melihat bagaimana cara mendapatkan ini kita kembali pada kasus dua dimensi, dengan mudah dapat ditetapkan bahwa contoh tidak mungkin untuk menggambarkan suatu kisi yang unit selnya merupakan segi lima yang teratur. Segi lima dapat digambarkan seperti suatu gambar yang terpisah, tetapi tidak dapat disusun bersama supaya mereka bersentuhan dengan rapat satu dengan yang lainnya (dapat berdempet). Kenyataan ini dapat memperlihatkan bahwa persyaratan

translasi simetri pada kisi dua dimensi, akan membatasi jumlah kisi yang mungkin ada untuk dua dimensi jumlah kisi hanya ada lima.

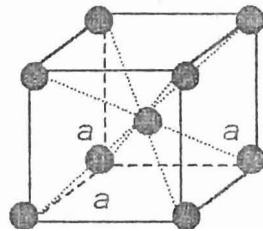
Tabel 2.1. Tujuh Sistem Kristal Dibagi Dalam 14 Kisi-Kisi Bravias

NO	Sistem	Kisi Bravias	Karakteristik Unit sel	Karakteristik Unsur simetri
1	Triklin	Sederhana P	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Tidak ada sama sekali
2	Monoklin	Sederhana P Berpusat alas C	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$	Satu sumbu rotasi kelipatan 2
3	Orthorombik	Sederhana P Berpusat alas C Berpusat badan I Berpusat muka F	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Tiga sumbu saling tegak lurus kelipatan 2
4	Tetragonal	Sederhana P Berpusat badan I	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Satu sumbu rotasi kelipatan 4
5	Kubus	Sederhana P Berpusat badan I Berpusat muka F	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Empat sumbu rotasi kelipatan 3
6	Trigonal (rom Bohedral)	Sederhana P	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	Satu sumbu rotasi kelipatan 3
7	Hexagonal	Sederhana P	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 120^\circ$	Satu sumbu rotasi kelipatan 3

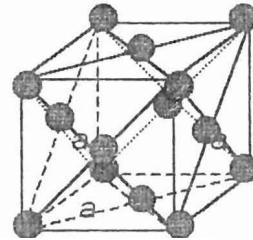
Dalam hal kisi tiga dimensi sebagaimana sudah dijelaskan sebelumnya jumlah kisi Bravais sebanyak 14, sedangkan jumlah kisi tidak Bravais sangat banyak (230), tetapi itu juga terbatas.



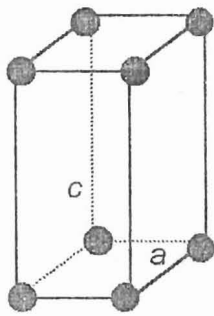
Kubus sederhana (P)



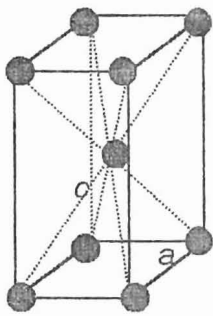
Kubus berpusat badan (I)



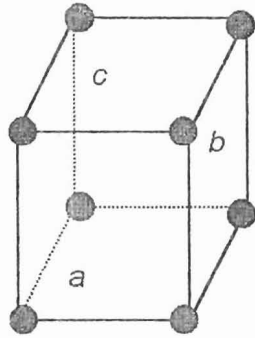
Kubus berpusat muka (F)



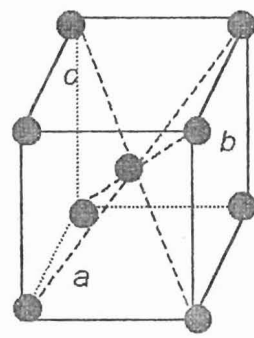
Tetragonal sederhana (P)



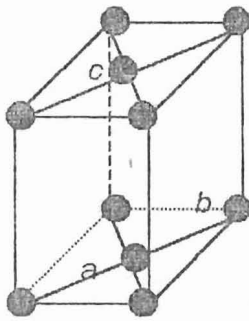
Tetragonal berpusat badan (I)



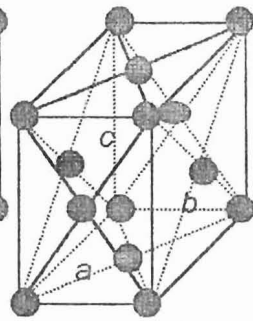
Orthorhombik sederhana (P)



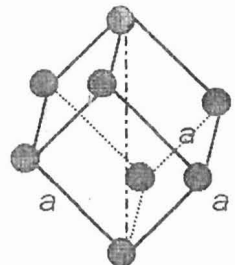
Orthorhombik berpusat badan (I)



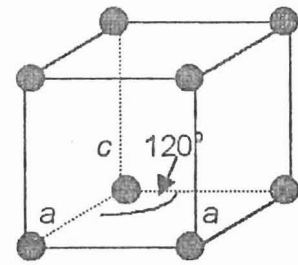
Orthorhombik berpusat alas (C)



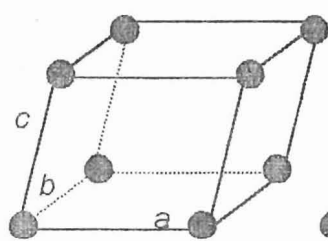
Orthorhombik berpusat muka (F)



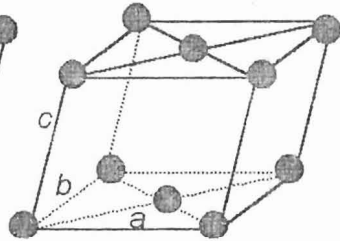
Rhombohedral (R)



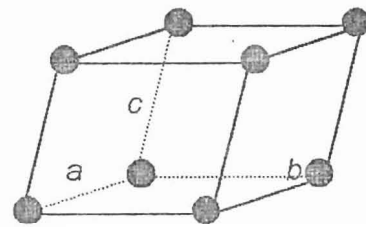
Heksagonal (P)



Monoklinik sederhana (P)



Monoklinik berpusat alas (C)



Triklinik (P)

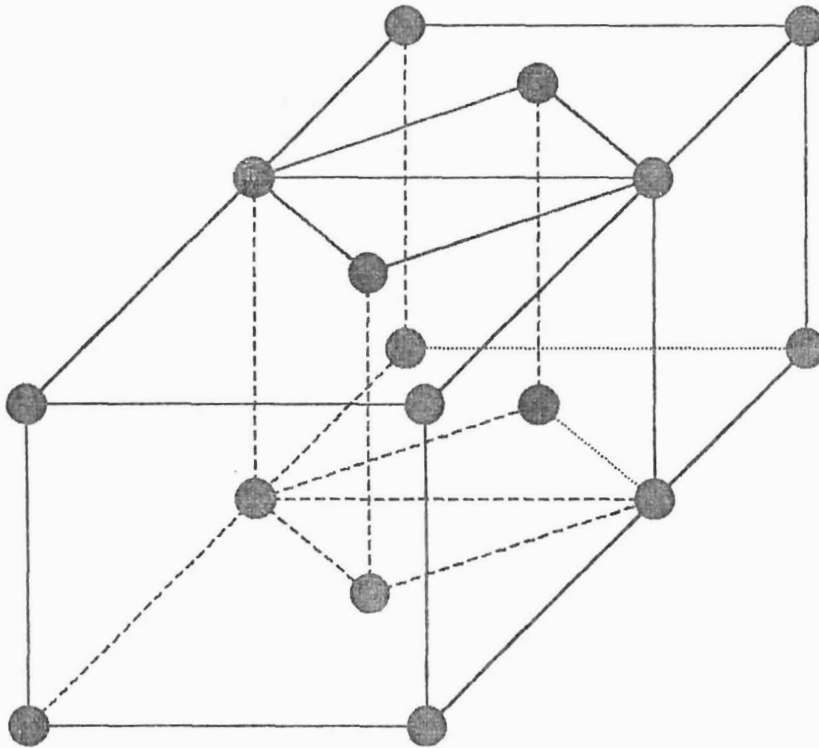
Gambar 2.1. Empat belas kisi Bravias

Empat belas kisi-kisi dapat digrupkan menjadi tujuh sistem kristal, masing-masing dicirikan oleh ; bentuk dan simetrisan unit selnya. Tujuh sistem itu adalah, Triklin, Monoklin, Ortorombik, Tetragonal, Kubus, Hexagonal dan Trigonal atau Rombohedral. Bentuk masing-masing sel ini adalah belah ketupat, yang sisi-sisi utamanya adalah a , b dan c . Sudut-sudut yang berhadapan dengan sisi-sisinya ini disebut dengan sudut α , β dan γ , seperti terlihat pada gambar 1.5. Gambar 2.1 memperlihatkan ke 14 kisi Bravais dan tabel 2.1 menjelaskan satu persatu tentang sistem kisi-kisinya, dan harga yang kira-kira mendekati untuk a , b , c dan α , β dan γ . Dari gambar 2.1 dan tabel 2.1, dapat memberikan informasi mengenai berapa jumlah titik kisi yang dimiliki oleh sebuah unit sel. Kolom yang dalam tabel berkaitan dengan elemen simetris yang akan dipelajari pada bagian berikutnya.

Perlu diperhatikan bahwa kisi primitif (sederhana) hanya memiliki titik-titik pada sudut-sudutnya, kisi berpusat badan memiliki satu tambahan titik kisi pada tengah-tengah unit sel, dan kisi berpusat muka memiliki enam tambahan titik kisi yaitu satu titik kisi pada masing-masing pertengahan permukaannya.

Empat belas kisi yang dicirikan satu persatu dalam tabel 2.1 ini, sudah merupakan hasil kesepakatan. Pembagian di atas sangat hati-hati serta jelimet, ini dapat dilihat bahwa tetragonal berpusat alas juga termasuk dalam tabel tetapi dengan jelas dan cermat kisi tersebut merupakan suatu penyederhanaan kisi tetragonal sederhana (primitif) dengan suatu pilihan yang lain dari unit sel (gambar 2.2). Kasus yang lain dapat diberikan alasannya dengan cara yang serupa.

Sistem yang paling sering dibicarakan dalam buku ini yaitu sistem kubus, khususnya kubus berpusat badan (b.c.c) dan berpusat muka (f.c.c), dan kadang-kadang hexagonal.



Gambar 2.2. Tetragonal berpusat alas identik dengan tetragonal yang sederhana dengan pengambilan unit sel yang berbeda

2.2. Jumlah Atom Tiap Unit Sel

Pada kisi primitif atom-atom hanya ada pada tiap-tiap sudut unit sel. Tiap atom yang berada pada tiap sudut unit sel dimiliki (kepunyaan) delapan unit sel. Besarnya bagian atom yang dimiliki masing-masing unit sel, tergantung pada besarnya sudut. Sebagai contoh jika sudut $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, maka masing-masing unit sel akan memiliki atom $\frac{1}{8}$ bagian dari tiap-tiap sudut unit sel. Tetapi jika $\alpha = \beta = 90^\circ$ dan $\gamma = 120^\circ$, maka atom yang dimiliki unit sel pada sudut yang besarnya 120° dapat dicari dengan menggunakan persamaan berikut. Sumbangan atom pada satu sudut

adalah $= \frac{\text{besar sudut}}{360} \times \frac{1}{2} \text{ atom}$, Jadi sumbangan atom pada sudut unit sel 120°

adalah $= \frac{120}{360} \times \frac{1}{2} \text{ atom} = \frac{1}{6} \text{ atom}$. Bila strukturnya kubus orthorombik tetragonal

dimana $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, maka sumbangan atom yang berada di sudut-sudut unit sel pada unit sel itu besarnya $\frac{1}{8}$. Jumlah atom yang dimiliki unit sel, berbentuk primitif

adalah $8 \times \frac{1}{8} = 1 \text{ atom}$. Untuk semua sel walaupun sudut-sudutnya tidak 90° semua, namun secara umum jumlah sumbangan atom dari kedelapan sudut untuk unit sel tersebut adalah satu.

Untuk sel yang berpusat alas, disamping atom-atom ada pada titik-titik sudut unit sel atom juga ada di tengah-tengah bidang alas unit sel atau yang berada di setiap alas unit sel dimiliki secara bersama oleh dua unit sel. Masing-masing unit sel memiliki $\frac{1}{2} \text{ atom}$, tiap unit sel mempunyai dua alas yaitu satu alas bawah dan alas

atas. Sumbangan atom-atom yang berada pada alas ini pada unit selnya adalah

$2 \times \frac{1}{2} \text{ atom} = 1 \text{ atom}$, kisi yang berpusat alas memiliki atom tiap unit selnya sebesar

$1 \text{ atom} + (2 \times \frac{1}{2} \text{ atom}) = 2 \text{ atom}$. Dengan kata lain jumlah atom yang dimiliki kisi berpusat alas, tiap unitnya adalah 2.

Kisi yang lain adalah kisi berpusat badan, pada kisi ini disamping atom-atom ada pada tiap-tiap titik sudut unit sel satu atom lagi ada di tengah-tengah unit sel. Atom yang berada di tengah-tengah adalah milik unit sel itu sendiri. Jumlah atom tiap unit sel kisi berpusat badan adalah $1 \text{ atom} + 1 \text{ atom} = 2 \text{ atom}$, satu atom berasal dari sumbangan atom-atom yang berada di delapan sudut unit sel dan satu lagi yang berada di tengah-tengah unit sel.

Bentuk kisi yang lain adalah kisi berpusat muka, kisi ini disamping memiliki atom di tiap-tiap titik sudut unit sel dia juga memiliki atom di masing-masing pertengahan muka unit sel. Setiap unit sel memiliki 6 muka, atom yang berada pada muka unit sel dimiliki secara bersama oleh dua unit sel yaitu masing-masing unit sel memiliki setengah atom. Dengan demikian jumlah atom yang dimiliki setiap unit sel yaitu, $1 \text{ atom} + (6 \times \frac{1}{2} \text{ atom}) = 4 \text{ atom}$, jadi unit sel kisi berpusat muka memiliki atom 4 buah. Secara umum dapat dirumus-kan jumlah atom yang dimiliki unit sel sebagai berikut.

$$N = \frac{N_e}{8} + \frac{N_f}{2} + N_i \quad (2-1)$$

dimana,

N = Jumlah atom tiap unit sel,

N_e = Jumlah atom yang berada pada tiap sudut unit sel,

N_f = Jumlah atom yang berada pada muka unit sel,

N_i = Jumlah atom yang berada di dalam unit sel,

2.3. Bilangan Koordinasi

Ditinjau satu atom dalam kristal, di sekitar atom ini tersebar atom lain dalam ruang mulai yang terdekat sampai jauh tidak berhingga. Atom-atom yang terdekat disebut tetangga terdekat, dan atom-atom tersebut sangat besar pengaruhnya pada atom ini. Jumlah tetangga terdekat dari suatu atom disebut dengan bilangan koordinasi. Untuk struktur kubus sederhana tetangga terdekatnya 6 buah pada jarak

sama dengan panjang sisi kubus atom a . Dua buah pada sumbu \vec{a} , dua sepanjang sumbu \vec{b} dan dua buah lagi sepanjang sumbu \vec{c} . Bilangan koordinasi untuk

kubus sederhana adalah 6. Kubus berpusat badan mempunyai tetangga terdekat 8, hal ini mudah dipahami dengan meninjau atom yang berada ditengah-tengah unit sel. Delapan tetangga terdekatnya adalah atom-atom yang berada pada sudut-sudut unit sel, jaraknya setengah diagonal ruang atau $\frac{1}{2}a\sqrt{3}$ jadi kubus pusat badan mempunyai bilangan koordinasi delapan. Kubus berpusat muka mempunyai tetangga terdekat 12 buah, untuk memahaminya ditinjau atom yang berada titik sudut unit sel. Empat buah tetangga terdekatnya terletak pada bidang melalui vektor \vec{a} \vec{b} dan luasannya, empat pada bidang melalui vektor \vec{a} \vec{c} dan luasannya, dan empat lagi terletak pada bidang \vec{b} \vec{c} dan luasannya. Jarak tetangga terdekatnya ini setengah diagonal bidang $\frac{1}{2}a\sqrt{2}$. Bilangan koordinasi struktur kubus berpusat muka (fcc) dua belas.

2.4. Massa Jenis

Secara makro penentuan massa jenis suatu zat sudah dipelajari sejak di SLTP. Massa jenis suatu zat adalah massa tiap satuan volume ($\rho = \frac{m}{V}$), massa jenis kristal dapat ditentukan secara mikro, jika diketahui struktur, panjang sisi dan nomor massanya. Massa disini dicari massa tiap unit sel dan volumenya, volume unit sel (Ω) yaitu.

$$\Omega = \vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c}) \quad (2-2)$$

Sehingga persamaan untuk massa jenis dapat dituliskan dalam bentuk

$$\rho = \frac{N \times BM \times 1 \text{ amu}}{\Omega} \quad (2-3)$$

dengan ρ merupakan massa jenis dan N adalah jumlah atom tiap unit sel, ini ditentukan oleh struktur kristal. BM merupakan nomor massa unsur, besarnya tergantung pada jenis unsur, $1 \text{ amu} = \text{atom massa unit yang harganya } 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Sebagai contoh kristal Cu terstruktur fcc , panjang sisinya $3,61 \text{ \AA}$ dan nomor massanya $63,55$, dari contoh ini diketahui $N = 4$ karena struktur fcc , $BM = 63,55$ dan $a = 3,61 \text{ \AA}$ maka massa jenis Cu adalah.

$$\rho = \frac{4 \times 63,55 \times 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{(3,61 \cdot 10^{-10} \text{ m})^3}$$

$$\rho = \frac{4,245 \cdot 10^{-25} \text{ kg}}{4,7 \cdot 10^{-29} \text{ m}^3}$$

$$\rho = 9,0234 \cdot 10^3 \text{ kg/m}^3$$

$$\rho = 9,0234 \text{ kg/l}$$

2.5. Daya Jelajah (Packing Fraction)

Daya jelajah didefinisikan sebagai bagian ruang yang terisi oleh atom dalam unit sel, atau perbandingan volume atom dalam unit sel dengan volume unit sel. Untuk mencari daya jelajah ini perlu diperjanjikan. Pertama bentuk atom seperti bola, hal ini berguna untuk mencari volume atom. Kedua atom yang berdekatan bersinggungan, sehingga jari-jari atom sama dengan setengah jarak terdekat. Simbol daya jelajah (η), daya jelajah suatu kristal dapat ditentukan dengan menggunakan rumus.

$$\eta = \frac{N \times V_{\text{atom}}}{\Omega} \quad (2-4)$$

Dengan η merupakan daya jelajah dan $V_{\text{atom}} = \frac{4}{3} \pi R^3$ dan Ω adalah volume unit sel.

Sebagai contoh dicari daya jelajah struktur kristal kubus sederhana, jumlah atom tiap unit sel satu. Jarak tetangga terdekatnya a , dengan jari-jari atom adalah setengah jarak terdekat $\left(\frac{1}{2}a\right)$. Dengan menggunakan rumus daya jelajah maka diperoleh yaitu.

$$\eta = \frac{1 \times \frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{1}{2}a\right)^3}{a^3}$$

$$\eta = \frac{\frac{4}{3} \pi \cdot \left(\frac{1}{2}a\right)^3}{a^3}$$

$$\eta = 6 \cdot \pi = \pm 0,53$$

Didapatkan daya jelajah struktur kubus sederhana yaitu 0,53, biasanya daya jelajah ini dinyatakan dalam prosentasi. Daya jelajah struktur kubus sederhana adalah $\pm 0,53 \%$, artinya 53 % dari volume unit sel ditempati atom dan sisanya 47 % adalah kosong. Dengan menggunakan persamaan (2-4) dapat dicari daya jelajah untuk struktur kristal yang lain. Kubus berpusat badan jumlah atom tiap unit sel dua, dan jarak terdekatnya $\frac{1}{2}a\sqrt{3}$, sehingga diperoleh daya jelajahnya sebesar $\pm 68 \%$.

Struktur kubus berpusat muka memiliki atom tiap unit sel 4, dan jarak terdekatnya $\frac{1}{2}a\sqrt{2}$ maka berdasarkan data ini didapatkan gaya jelajahnya $\pm 74 \%$. Kalau dibandingkan ketiga struktur kubus ini, maka struktur kubus berpusat muka berisi atom yang paling padat ruang yang tersisa hanya $\pm 26 \%$.

2.6. Unsur-Unsur Simetris

Tiap-tiap unit sel dari ke 14 kisi Bravais memiliki satu atau lebih tipe sifat simetris seperti, invers, pemantulan dan rotasi. Berikut ini dibicarakan pengertian persyaratan dari sifat-sifat simetris tersebut.

2.6.1. Pusat invers

Suatu sel memiliki pusat invers jika ada suatu titik, terhadap titik ini sel tetap tidak berubah bila dilakukan transformasi matematik r ke $-r$. Semua kisi Bravais adalah simetris jika dibalik, hal ini adalah satunya dapat dilihat pada gambar 2.1 atau gambar lain dari itu dengan tiap-tiap vektor kisi maka dari persamaan 1-2 yaitu :

$$R_n = n_1a + n_2b + n_3c$$

ini berkaitan dengan suatu invers vektor kisi :

$$R_n = -R_n = -n_1a - n_2b - n_3c \quad (2-5)$$

Kisi tidak Bravais ada yang memiliki pusat invers, dan ada yang tidak tergantung kepada kesimetrisan basisnya.

2.6.2. Bidang cermin

Bidang cermin adalah suatu bidang dalam sel yang letaknya sedemikian rupa, jika suatu cermin diletakan pada bidang tersebut maka bayangan kisi-kisi di depannya akan berhimpit dengan kisi-kisi dibelakangnya atau dengan kata lain sel tetap tidak berubah. Berkaitan dengan gambar 2.1 dapat dilihat bahwa Triklin tidak memiliki bidang cermin (pantul), Monoklin memiliki satu bidang cermin di tengah-tengahnya dan sejajar dengan alas dan seterusnya. Sel kubus memiliki sembilan bidang cermin tiga sejajar dengan permukaannya dan enam dengan yang lainnya, masing-masing melalui dua tepi atau pinggir yang berhadapan.

2.6.3. Sumbu rotasi

Sumbu rotasi adalah suatu sumbu yang sedemikian rupa, jika sel diputar melalui sumbu ini sebesar sudut tertentu maka sel tetap tidak berubah. Sumbu disebut kelipatan n jika sumbu diputar dengan besar sudut sebesar $(2\pi / n)$, sel tetap tidak berubah. Jika kembali kita lihat gambar 2.1 kelihatan bahwa Triklin tidak

memiliki sumbu rotasi (tidak mungkin $n = 1$), dan Monoklin memiliki sumbu kelipatan 2 ($Q = \pi$) yaitu sumbu yang sejajar dengan alasnya. Unit sel kubus mempunyai tiga sumbu kelipatan 4 yang sejajar dengan permukaan dan empat sumbu kelipatan 3, masing-masing melalui dua titik sudut yang berhadapan.

Kita sudah membicarakan unsur simetris yang sederhana, salah satu yang sering dijumpai. Unsur Simetris yang lebih komplis (rumit) juga ada seperti, sumbu-rotasi-pantul, bidang luncur dan seterusnya. Tetapi kita tidak membicarakannya di sini, karena belum dibutuhkan dalam buku teks ini.

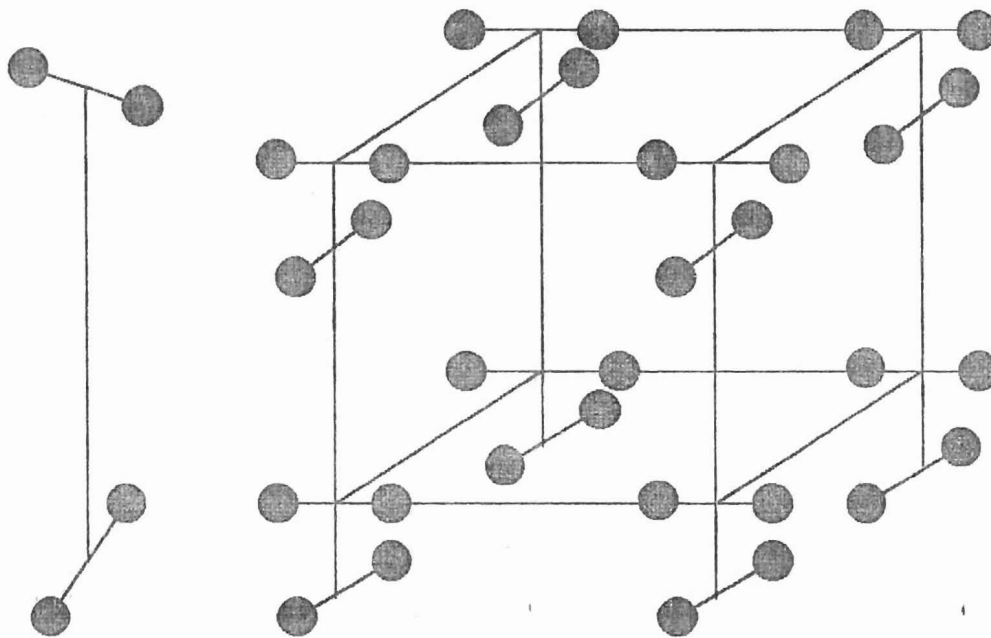
Dapat diperhatikan bahwa unsur simetris boleh tidak bebas, contohnya yang sederhana dapat dilihat bahwa pusat invers ditambah bidang pantul (cermin) menyatakan secara tidak langsung adanya sumbu kelipatan 2 melalui pusat dan sejajar bidang.

2.7. Grup-Grup Titik, Grup-Grup Ruang dan Kisi-Kisi Tidak Bravais

Kisi tidak Bravais salah satu kisi, yang kedudukan kedudukan kisinya berkaitan dengan tumpukan atom-atom. Unsur-unsur yang membentuk kristal seperti atom-atom, molekul-molekul disebut juga dengan basis. Karena penggambaran kesimetrisan dari kisi dicirikan juga oleh kesimetrisan basisnya, disamping kesimetrisan kisi-kisi Bravaisnya dimana basis itu dideretkan.

Kesimetrisan dari basis disebut dengan "grup titik simetris", berkaitan dengan semua kemungkinan rotasi (termasuk invers dan pemantulan) yang menyebabkan basis tidak berubah, diperjanjikan bahwa dalam semua operasi ini salah satu titik dalam basis harus tetap. Pengujian dalam hal ini mengungkapkan hanya 32 grup titik yang berbeda, yang dapat ada yang konsisten dengan persyaratan kesimetrisan transisi untuk semua kisi. Salah satu yang dapat dipahami mengenai keterbatasan jumlah grup titik simetris, alasan fisiknya adalah sebagai berikut ; bentuk atau struktur

basis tidak dapat sembarang, seperti bentuk kentang. Ini akan bertentangan dengan kesimetrisan gaya antara atom-atom, antara basis dan basis lainnya pada kisi yang berdekatan. Bagaimana juga inilah yang memegang peranan utama dalam menentukan struktur kristal. Dengan demikian rotasi simetris yang mungkin untuk semua basis, haruslah pada dasarnya sama dengan rotasi simetris unit sel ke 14 kisi Bravais yang sudah diuraikan satu persatu pada bagian 2.1



Gambar 2.3. a). Suatu basis yang mempunyai grup titik simetri D_{2d} (dua sumbu mendatar kelipatan 2 ditambah dua bidang cermin yang tegak lurus). b). Kisi tetragonal sederhana dengan basis mempunyai grup titik simetri D_{2d}

Jika rotasi simetris grup titik-titik kisi digabungkan dengan translasi simetris, kita dapatkan grup ruang yang simetris. Dengan cara ini dapat diturunkan sejumlah grup-grup-ruang, ada 72 buah banyaknya. Namun disamping itu masih ada beberapa grup-grup ruang yang tidak dapat dibentuk dari grup titik yang sederhana dengan grup translasi, seperti grup elemen simetris sumbu baut, bidang luncur dan

sebagainya. Jika dimasukkan grup ruang terakhir ini maka ada semuanya 230 grup ruang berbeda.

2.8. Tata Nama, Arah dan Bidang Kristal serta Indeks Miller

Untuk menjelaskan fenomena fisik dalam kristal, kita harus mencirikan arah tertentu atau bidang-bidang kristal karena pada umumnya kristal tidak sama kesegala arah (anisotropik). Beberapa hukum yang baku sudah ditetapkan dan digunakan dalam mencirikannya.

2.8.1. Arah-arrah kristal

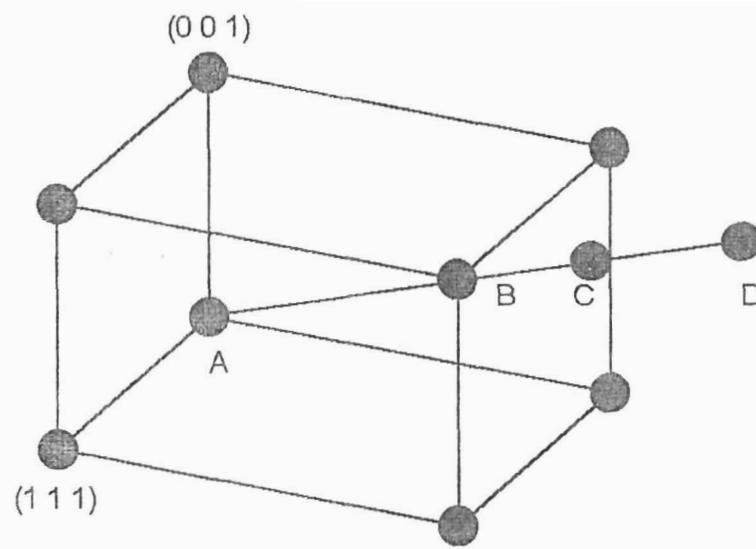
Ambillah garis-garis lurus melalui titik-titik kisi A, B, C dan seterusnya, dalam gambar 2.4. Untuk menentukan arahnya dilakukan sebagai berikut, kita pilih salah satu titik kisi pada garis sebagai titik asalnya, kemudian dipilih vektor kisi yang menghubungkan A dengan suatu titik pada garis katakanlah titik B. Vektornya ini ditulis seperti pada persamaan 1-2 sebagai berikut :

$$R_n = n_1 a + n_2 b + n_3 c$$

Arahnya sekarang ditentukan oleh kelipatan tiga bilangan (n_1, n_2, n_3). Jika bilangan n_1, n_2, n_3 memiliki faktor biasa, faktor ini digeser dengan kata lain ketiganya adalah kelipatan paling kecil dengan perbandingan yang relatif sama. Sehingga dalam gambar 2.4, arah yang diperlihatkan adalah arah [111].

Perhatikan bahwa jika membicarakan suatu arah, ini tidak berarti suatu garis lurus yang tertentu, tetapi merupakan sekumpulan garis lurus yang sejajar (gambar 2.4). Jika unit sel memiliki beberapa simetris rotasi, maka akan ada beberapa arah yang tidak sejajar akan ekuivalen oleh sifat-sifat simetris. Oleh karena sifat simetris tadi, maka dalam suatu kristal kubus arah-arrah [100], [010], [001] adalah ekuivalen.

Bila hal ini terjadi maka kumpulan semua arah yang ekuivalen terhadap (n_1, n_2, n_3) disimbolkan dengan $\langle n_1 n_2 n_3 \rangle$, digunakan kurung sudut.



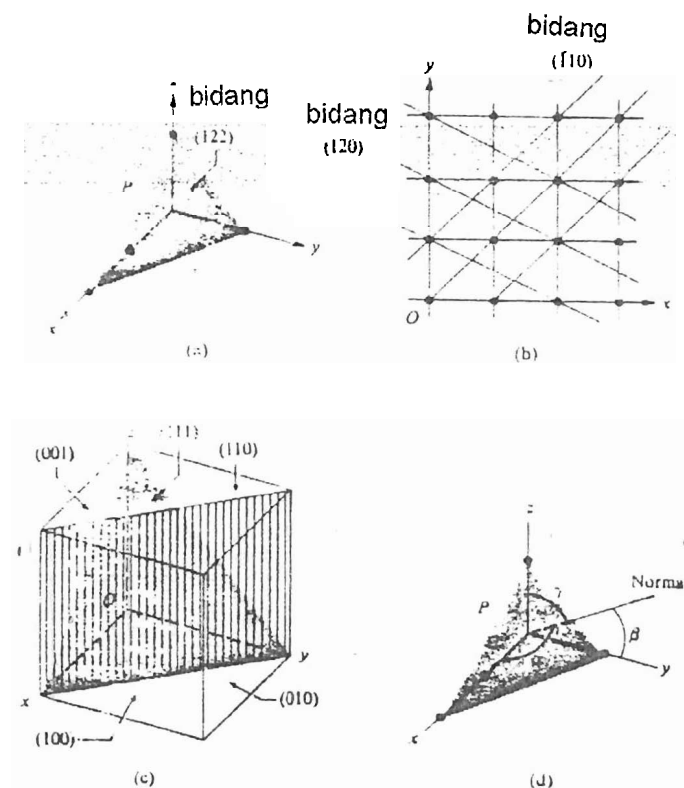
Gambar 2.4. Arah (111) dalam suatu kisi kubus

Sehingga dalam sistem kubus $\langle 100 \rangle$ menunjukkan semuanya ada enam arah yaitu, $\langle 100 \rangle$, $\langle 010 \rangle$, $\langle 001 \rangle$, $\langle \bar{1}00 \rangle$, $\langle 0\bar{1}0 \rangle$ dan $\langle 00\bar{1} \rangle$. Tanda negatif di atas bilangan menunjukkan harga n negatif, simbol yang serupa $\langle 111 \rangle$ berkaitan dengan semua arah diagonal ruang (badan) kubus. Tentu saja arah $\langle 100 \rangle$ dan $\langle 111 \rangle$ tidak sama.

Perlu dicatat bahwa suatu arah dengan indeks yang lebih besar [157] memiliki jumlah atom persatuan panjang yang lebih banyak dibandingkan dengan arah yang mempunyai indeks yang lebih kecil [111].

2.8.2. Bidang kristal dan indeks Miller

Orientasi bidang dalam suatu kisi ditentukan oleh pemberian indeks Millernya, yang cara mencarinya sebagai berikut. Untuk menentukan indeks bidang P dalam gambar 2.5a, mula-mula dicari titik perpotongan bidang dengan sumbu-sumbu vektor dasar a, b dan c.



Gambar 2.5. a) Bidang 1 2 2. b) Beberapa bidang yang sama, bidang yang sejajar sama indeks Millernya. c) Beberapa bidang dalam kristal kubus. d) Cara mendapatkan jarak antara bidang dalam ruang. (Omar, 1975, hal. 14).

Jarak potong dengan sumbu a terhadap titik 0 disimbolkan dengan x, sumbu b terhadap 0 disimbolkan dengan y dan sumbu c terhadap 0 disimbolkan dengan z. Biasanya x adalah kelipatan a, y kelipatan b dan z kelipatan c. Kemudian kita bentuk bagian kelipatan ketiganya.

$$\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c} \right)$$

sesudah itu dibalikan yaitu ;

$$\left(\frac{a}{x}, \frac{b}{y}, \frac{c}{z} \right)$$

dan kemudian disederhanakan kumpulan ini dengan kelipatan terkecil, yaitu mengalikannya dengan bilangan tertentu. Set yang terakhir (hasilnya) ini disebut dengan "Indeks Miller", dari bidang dan disimbolkan dengan (hkl). Marilah diambil suatu contoh, titik-titik potong dengan bidang sumbu $x = 2a$, dengan sumbu $y = \frac{3}{2}b$ dan sumbu $z = c$. Pertama dibentuk setnya yaitu :

$$\left(\frac{x}{a}, \frac{y}{b}, \frac{z}{c} \right) = \left(2, \frac{3}{2}, 1 \right)$$

kebalikannya adalah $\left(\frac{1}{2}, \frac{2}{3}, 1 \right)$, dan akhirnya dikalikan dengan angka yang sama, disini 6 dan didapatkan indeks Millernya adalah (3 4 6).

Kalau kita perhatikan bahwa bidang-bidang yang sejajar memiliki indeks miller yang sama. Bidang-bidang yang titik potongnya adalah : x, y, z ; $-3x, -3y, -3z$; $2x, 2y, 2z$ dan seterusnya dapat diwakili oleh suatu set indeks Miller. Kita dapat membuktikan contoh diatas dengan mencarinya seperti sudah dilakukan mula-mula. Karena itu set indeks Miller tidaklah hanya mencirikan suatu bidang, tetapi suatu kumpulan bidang-bidang yang tidak terbatas banyaknya seperti ditunjukkan oleh

gambar 2.5b. Gambar 2.5c memperlihatkan beberapa bidang yang penting dalam kristal bersistem kubus.

Alasan dalam membalikkan titik potong dalam mendefinisikan indeks Miller, karena lebih ringkas dan dapat diterima. Cara lain dalam penandaan bidang dalam kisi yaitu yang disebut dengan kisi-kisi balik (reciprocal lattice), dan tidak dibicarakan dalam buku ini.

Kadang-kadang pada unit sel yang memiliki rotasi simetris, beberapa bidang yang tidak sejajar dapat ekuivalen atau sama karena sifat-sifat simetri ini. Untuk itu ditetapkan untuk menyatukan semua bidang-bidang tersebut dalam indeks Miller yang sama, yang ditandai dengan tanda kurung bergerigi. Dengan demikian $(h\ k\ l)$ mewakili semua bidang-bidang yang sama dengan bidang $(h\ k\ l)$ melalui rotasi simetri. Sebagai contohnya dalam sistem kubus, indeks (100) berkaitan dengan enam bidang yaitu : (100) , (010) , (001) , $(\bar{1}00)$, $(0\bar{1}0)$ dan $(00\bar{1})$

2.8.3. Jarak antara bidang-bidang yang berindeks Miller sama

Dalam kaitannya dengan difraksi sinar X oleh kristal, salah satu yang perlu diketahui adalah jarak antara bidang-bidang yang ditandai oleh indeks Miller yang sama katakanlah $(h\ k\ l)$. Marilah kita simbolkan jaraknya tersebut dengan d_{hkl} . Rumusannya sebenarnya tergantung tergantung kepada struktur kristal, dan disini kita batasi diri kita hanya membicarakan kristal yang memiliki sumbu-sumbu yang saling tegak lurus. Kita dapat menghitungnya dengan menggunakan gambar 2.5d. Jarak antara bidang yang diperlihatkan adalah d_{hkl} , yang merupakan panjang garis tegak lurus bidang tadi dengan sumbu-sumbu kristal adalah α , β dan γ dan jarak antar titik potong bidang dengan sumbu-sumbu kristal ke titik asal 0 adalah x , y dan z . Dari gambar 2.5d jelas bahwa :

$$d_{hkl} = x \cos \alpha = y \cos \beta = z \cos \gamma \quad (2-6a)$$

Tetapi hubungan langsung yang lain antara $\cos \alpha$, $\cos \beta$ dan $\cos \gamma$, adalah

$$\cos^2 \alpha + \cos^2 \beta + \cos^2 \gamma = 1. \quad (2-6b)$$

Jika kita masukkan harga-harga $\cos \alpha$, $\cos \beta$ dan $\cos \gamma$, dari persamaan (2-6a) ke dalam persamaan (2-6b), dan seterusnya diselesaikan dan disederhanakan akan didapatkan harga d_{hkl} dalam bentuk x , y dan z yaitu :

$$d_{hkl} = \frac{1}{\left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} + \frac{1}{z^2} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2-6c)$$

Sekarang x , y dan z dikaitka dngan indeks Miller ($h k l$). Jika kita tinjau kembali proses pendefinisian indeks Miller, dengan mudah didapatkan hubungan :

$$h = n \frac{a}{x}; \quad k = n \frac{b}{y} \quad \text{dan} \quad l = n \frac{c}{z} \quad (2-7)$$

n adalah faktor kelipatan yang biasa digunakan untuk memudahkan indeks-indeks dengan kelipatan paling kecil. Dengan mengganti harga x , y dan z dalam persamaan (2-7) dan kemudian diselesaikan, maka persamaan (2-6c) akan menjadi :

$$d_{hkl} = \frac{n}{\left(\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2-8)$$

Untuk kubus $a = b = c$ mempunyai bentuk .

$$d_{hkl} = \frac{n a}{\left(h^2 + k^2 + l^2 \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (2-9)$$

Jika digunakan rumus dalam persamaan (2-9) untuk mencari jarak antara bidang yang berindeks Miller ($1 1 1$) dalam sistem kubus akan didapatkan,

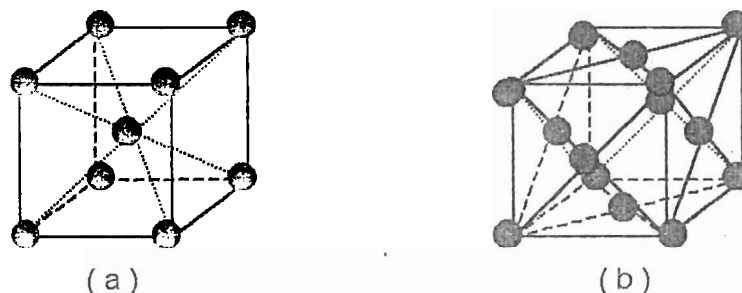
$$d_{hkl} = \frac{na}{\sqrt{3}}, \text{ dimana } a \text{ adalah sisi kubus.}$$

2.9. Contoh-Contoh Struktur Kristal Yang Sederhana

Dalam usaha untuk memperoleh pengertian tentang kristal yang sebenarnya, marilah kita biasakan diri kita mengenal dengan baik beberapa struktur kristal serta ukuran-ukuran unit-unit selnya. Hasil-hasil penyelidikan yang sudah dilakukan selama ini mengenai kristal, menemukan sangat banyak jenis-jenis struktur kristal, tetapi disini kita akan mempelajari hanya beberapa struktur yang sederhana yang banyak ditemukan dan dibahas dalam pelajaran berikutnya. Adapun struktur-struktur yang akan dibicarakan adalah sebagai berikut :

2.9.1. Kubus berpusat muka dan berpusat badan

Kebanyakan yang memiliki struktur kubus berpusat muka (f c c), dan berpusat badan (b c c) adalah keluarga metal. Unsur-unsur Ag, Al, Au, Cu, Co(), Ni(), Pb dan Pt berstruktur kubus berpusat muka (f c c), seperti dalam gambar 2.6b unit sel berisi empat atom. Satu dari delapan sudut yang dipakai secara bersama dengan sel lainnya, dan tiga dari enam permukaan yang dipakai secara bersama dengan unit sel lainnya.

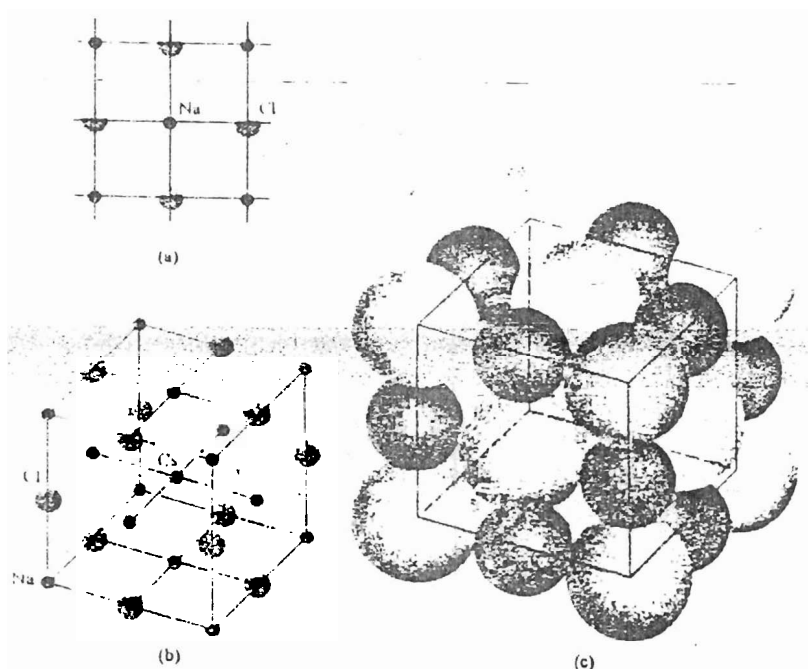


Gambar 2.6. a) Suatu kubus berpusat badan (f c c).
b) Suatu kubus berpusat muka (b c c).

Beberapa metal yang berstruktur kubus berpusat badan atau (b c c) adalah, Li, Na, K, Rb dan Cs yang strukturnya seperti terlihat dalam gambar 2.6a. Disini tiap unit sel memiliki dua atom, satu dari delapan sudut yang dipakai bersama dengan unit sel yang lainnya dan satu di dalam unit sel itu sendiri.

2.9.2. Struktur sodium clorida

Inilah Struktur yang biasa disebut garam dapur (NaCl). Strukturnya berbentuk kubus dan sepanjang ketiga sumbu utamanya terdapat secara bergantian atom Na dan Cl, seperti terlihat pada gambar 2.7a. Dalam tiga dimensi unit sel kelihatan seperti gambar 2.7b.



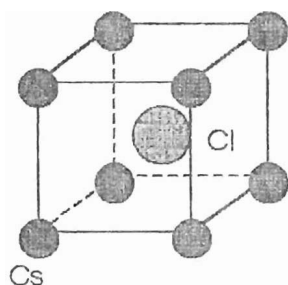
Gambar 2.7. a) Struktur NaCl dalam dua dimensi. B) Struktur kristal NaCl dalam tiga dimensi, atom-atom Na yang berstruktur kubus berpusat muka saling mengunci dengan atom-atom Cl yang berstruktur kubus berpusat muka pula. c) Struktur NaCl mendekati skala perbandingannya, dengan ion-ionnya saling oersentuhan. (Omar, 1975, hal. 17).

Tempat kedudukan empat atom Na pada $(0\ 0\ 0)$, $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$, $(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2})$, $(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$ dan empat atom Cl pada posisi $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$, $(0\ 0\ \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\ 0\ 0)$ dan $(0\ \frac{1}{2}\ 0)$.

Dapat disimpulkan bahwa struktur NaCl tersusun dari dua bagian sub kisi berstruktur fcc (berpusat muka) yang saling bersilang (menetralsisir), yang satu tersusun dari atom Na dan satu lagi dari atom Cl, dan dua sub kisi ini berjarak $\frac{1}{2}a$ satu sama lainnya. Banyak kristal ionik seperti KCl, dan PbS berstruktur sama dengan NaCl.

2.9.3. Struktur cesium chlorida

Bentuknya kubus, tetapi disini atom cesium dan chlorida bergantian terdapat di diagonal keempat kubus. Sehingga unit sel berbentuk struktur kubus berpusat badan (bcc) seperti terlihat pada gambar 2.8. Dalam satu unit sel ada dua atom, satu atom Cs posisinya pada $(0\ 0\ 0)$ dan satuatom Cl posisinya di $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$. Karena itu struktur CsCl tersusun dari dua kisi kubus sederhana yang bergeser relatif satu sama lainnya sepanjang diagonal sebesar $\frac{1}{2}$ panjang diagonalnya. Beberapa struktur kristal ionik seperti CsCl ini dapat dilihat dalam tabel 2.2.



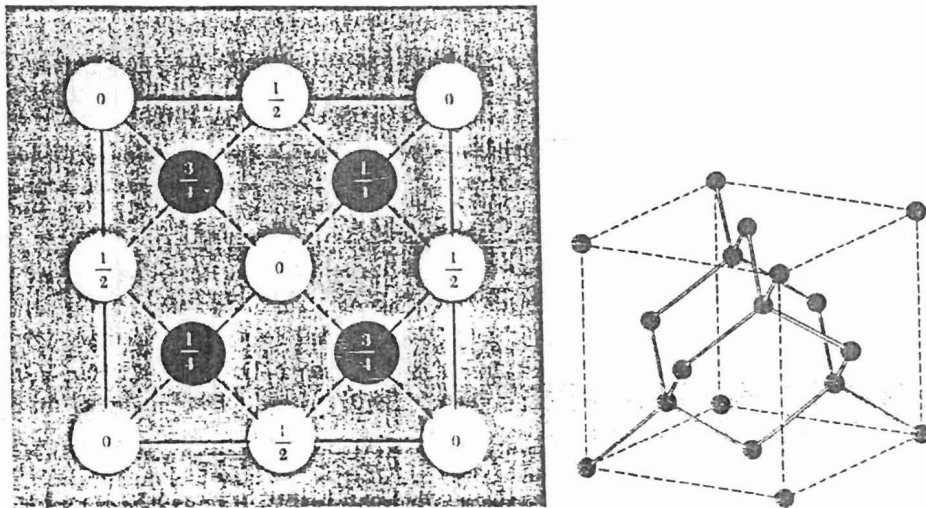
Gambar 2.8. Struktur Cesium Clorida, atom-atom Cs yang berstruktur kubus sederhana saling mengunci dengan atom-atom Cl yang berstruktur kubus sederhana pula

Tabel 2.2. Dimensi dari sel dan struktur beberapa elemen dan campuran

Elemen atau Campuran	Struktur	a A°	c A°	
Al	Fcc	4,04	3,59	
He	Hcp	2,27		
Ca	Fcc	5,56		
C	Intan	3,56		
Cr	Bcc	2,88		
Co	Hcp	2,51		4,07
Cu	Fcc	3,61		
Ge	Intan	5,65		
Au	Fcc	4,07		
Fe	Bcc	2,86		
Kr	Fcc	3,92	4,94	
Si	Intan	5,43		
Ag	Fcc	4,08		
Na	Bcc	4,28		
Zu	Hcp	2,66		
LiH	Sodium Chlorida	4,08		
NaCl	Sodium Chlorida	5,63		
AgBr	Sodium Chlorida	5,77		
MnO	Sodium Chlorida	4,43		
CsCl	Sodium Chlorida	4,11		
TlBr	Sodium Chlorida	3,97		
CuZn (β -brass)	Sodium Chlorida	2,94		
CuF	Zincblende	4,26		
AgL	Zincblende	6,47		
ZnS	Zincblende	5,41		
CdS	Zincblende	5,82		

2.9.4. Struktur intan

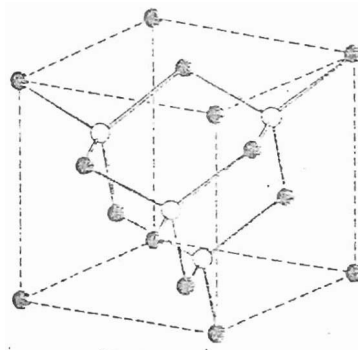
Struktur dasar unit selnya kubus berpusat muka (fcc), ditambah empat atom yang berada di dalam unit selnya masing-masing pada jarak $\frac{1}{4}$ diagonal ruang dari empat titik sudutnya sepanjang diagonal ruang. Jadi ada delapan atom setiap unit sel. Kelihatan pada struktur ini atom-atomnya berada pada posisi-posisi : $(0\ 0\ 0)$, $(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$, $(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$, $(\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4})$ dan $(\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4})$. Strukturnya dapat dilihat seperti dalam gambar 2.9. Tiap-tiap atom memiliki empat tetangga terdekat pertama, dan dua belas tetangga terdekat kedua. Unsur lain yang memiliki struktur seperti intan ini 'antara lain' Ge, Si dan Sn dan banyak struktur semikonduktor seperti ini.



Gambar 2.9. Struktur Intan. (Kittel, 1986, hal. 19).

2.9.5. Struktur seng sulfida (Zincblende) simbol ZnS

Strukturnya sama dengan struktur intan, perbedaannya karena dia bentuk dari dua jenis atom Zn dan S. Setiap unit sel berisi empat molekul ZnS atau empat atom Zn, dan empat atom S. Empat atom Zn pada posisi : $(0\ 0\ 0)$, $(0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2})$, $(\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\ 0)$ sedangkan atom S pada posisi $(\frac{1}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{3}{4})$, $(\frac{3}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{3}{4})$ dan $(\frac{3}{4}\ \frac{3}{4}\ \frac{1}{4})$ dan $(\frac{1}{4}\ \frac{1}{4}\ \frac{1}{4})$. Bentuk Strukturnya seperti dalam gambar 2.10. Unsur lain yang memiliki struktur seperti ini antara lain InSb, GaSb dan GaAs.

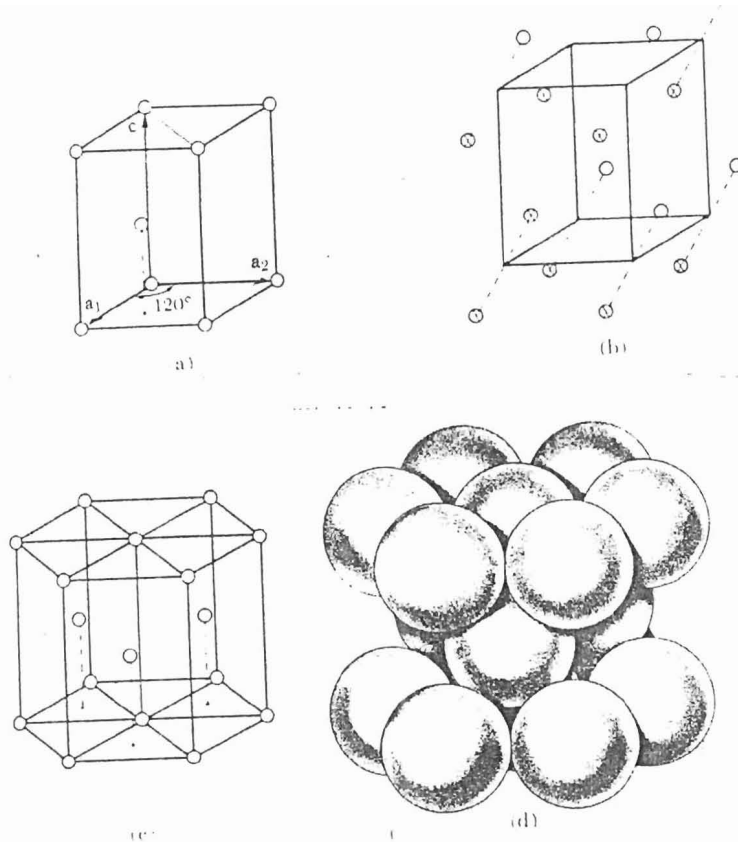


Gambar 2.10. Struktur Seng Sulfida. (Kittel, 1986, hal. 21).

2.9.6. Struktur hexagonal close packed

Bentuk ini merupakan bentuk lain dari struktur metal. Strukturnya seperti dalam gambar 2.11. Disamping dua lapisan atom yang terdapat pada lapisan atas dan bawah dari struktur hexagonal, terdapat juga lapisan atom diantara lapisan atas dan bawah ini. Masing-masing atom dibagian tengah itu terletak diantara tiga atom sebelah bawah dan tiga atom lapisan sebelah atas. Atom-atom dalam struktur

hexagonal close packed (hcp) ini tersusun secara rapat sekali sesamanya, contoh yang memiliki struktur hcp ini adalah Be, Mg, Zn dan Hg.



Gambar 2.11. Struktur Hexagonal. (Cullity, 1956, hal. 44).

2.10. Zat Padat Yang Tidak Berbentuk dan Zat Cair

Zat padat yang tidak berbentuk (Amorphous solid) mendapat perhatian beberapa tahun terakhir ini, terutama karena ditemukannya sifat-sifat listrik semikonduktor amorphous. Karena itu perlu dipelajari secara ringkas struktur zat padat ini.

Kebanyakan contoh zat padat amorphous adalah keluarga gelas yang digunakan untuk jendela. Bahan kimianya adalah silikon oksida, dan strukturnya

tidak semuanya menyerupai kristal dimana silikon dan oksigen tersebar secara acak (random). Keluarga struktur amorphous yang lain adalah zat cair, pada zat cair ini sistem tidak memiliki struktur, atom-atomnya tersebar secara acak. Dari saat ke saat zat cair mengalir dari suatu tempat ke tempat lain, dan dia tersebar secara acak.

Ini memperlihatkan (mendorong) bahwa zat padat amorphous sangat serupa dengan zat cair, meskipun atom-atom dalam zat padat amorphous tetap dalam ruang dan tidak mengalir seperti yang dilakukan zat cair. Dan ini jugalah yang menyebabkan kenapa zat padat amorphous, seperti gelas kadang-kadang dia bersifat seperti zat cair "supercooled". Bahkan jika suatu saat struktur zat cair dapat digambarkan, hasilnya akan sama dengan struktur amorphous dan tidak dapat dibedakan antara struktur zat cair dengan zat padat amorphous. Perumusan matematik yang sama dapat digunakan untuk menjelaskan kedua bentuk zat ini.

Kenyataannya sembarang zat cair mempunyai bermacam jenis "urutan" atau struktur, meskipun struktur ini tidak berbentuk kristal. Marilah kita tinjau zat cair air raksa, kristal metalnya berstruktur hcp. Bila air raksa ini dalam keadaan padat dibawah titik cairnya, semua atom tersusun secara teratur dan masing-masing atom dikelilingi oleh sejumlah tetangga terdekat berikutnya dan seterusnya. Dan semuanya mempunyai posisi dan berjarak tertentu dari atom pusat. Bila zat padat ini dipanaskan dan melebur, atom-atom tidak selalu tetap teratur pada posisinya dan struktur kristal menjadi rusak. Masih kita pandang sistem dari tempat atom yang mula-mula (atom pusat) kita menemukan bahwa jumlah tetangga yang paling dekat dan tetangga terdekat kedua pada jarak yang tertentu, keadaan zat dalam keadaan cair pada pokoknya sama seperti zat berada pada keadaan padat. Tentu saja jika membicarakan "jumlah tetangga paling dekat" dalam keadaan cair, ini berarti jumlah reratanya karena sebenarnya jumlah tetap berubah disebabkan gerak atom-atom.

Jelas kelihatan bahwa zat cair mempunyai struktur, dan bahwa struktur ini memang ada dan jelas kelihatan dari gambar difraksi sinar X oleh zat cair. Hal ini sangat penting meskipun keteraturan struktur dalam zat cair terbatas hanya sampai pada beberapa sel tetangga terdekat dari atom pusat. Bertambah jauh jarak atom dari atom pusat sebaran relatif bertambah acak (random), dan inilah yang menyebabkan kenapa dikatakan bahwa zat cair hanya memiliki susunan yang teratur dalam jangkauan yang pendek. Keteraturan dalam jangkauan yang panjang tidak ada, yang berlawanan dengan kristal ideal yang strukturnya teratur dalam jangkauan tidak berhingga. Dalam kristal posisi dari atom (termasuk atom yang paling jauh sekalipun), secara tepat dapat diketahui atau ditentukan posisinya relatif terhadap satu pusat yang ditetapkan. Karena kristal memiliki keduanya yaitu keteraturan berjangkauan pendek dan keteraturan berjangkauan panjang, dengan kata lain kristal benar-benar teratur.

Keadaan ini tidaklah mengherankan kita bahwa keteraturan akan ada, sekalipun dalam keadaan cair. Bagaimanapun juga gaya antara atom-atom tetap ada walaupun dalam keadaan cair, karena waktu mencair perubahan volumenya tidak seberapa (kecil) dari volume padat, maka jarak antara atom-atomnya tetap. Sehingga gaya antara atom-atomnya tetap sama sebelum zat itu mencair. Yang menghalangi supaya atom teratur adalah energi termal atom-atomnya (karena zat tadi dipanaskan), tetapi gaya antara atom-atomnya masih kuat sehingga sebagian dari atom-atomnya dalam keadaan cair masih tetap teratur.

Sekarang kita membicarakan matematikanya, kita pilih sebuah atom tertentu dan digunakan sebagai atom acuan atau atom pusat susunan untuk mempelajari sebaran atom-atom lainnya dalam sistem relatif terhadap atom pusat tadi. Kemudian ditarik

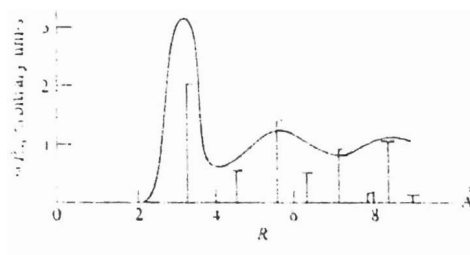
sebuah selimut bola dengan atom pusat tadi sebagai titik pusatnya, dengan jari-jari R dengan tebal dR , jumlah atom dalam sel yang tipis ini diberikan oleh persamaan.

$$dN(R) = n(R) 4 \pi R^2 dR \quad (1-10)$$

$n(R)$ adalah banyak atom persatuan volume dalam sistem. Kuantitas $4 \pi R^2 dR$ merupakan volume selimut bola, jika dikalikan dengan jumlah atom persatuan volume maka hasilnya sama dengan jumlah atom dalam selimut bola. Perlu dicatat bahwa zat cair bersifat sama ke segala arah dalam ruang, maka tidak perlu dirisaukan jumlah atom persatuan volumenya hanya tergantung kepada jarak dari pusat atau jari-jarinya R .

Sifat-sifat struktur zat cair sekarang sama sekali tergantung kepada rapat atom persatuan volume $n(R)$. Jika variasi kuantitas $n(R)$ terhadap R ditentukan, maka struktur zat cair dapat ditemukan atau dicari. Kaitan rapat atom persatuan volume $n(R)$ dengan R untuk cairan air raksa yang diperlihatkan oleh difraksi sinar X seperti dalam gambar 2.12, kurva mempunyai puncak pertama pada $R = 3 \text{ \AA}$ dan dia akan berubah (bergetar) beberapa kali sebelum mencapai harga tetap (tertentu). Harga $n(R)$ akan menjadi nol pada harga R kecil dari $2,2 \text{ \AA}$.

Inilah sebagai suatu ciri yang dapat dijadikan alasan yang masuk akal, sebagai dasar adanya gaya antara atom-atom. Bertambah kecilnya harga rapat atom, sampai menjadi nol pada harga R yang kecil dengan mudah dapat dipahami. Semakin dekatnya atom-atom lain mendekati atom pusat maka gaya tolak menolak yang kuat terjadi, yang akan menolak atom-atom sehingga saling menjauhi lagi. Gaya tolak akan mencegah atom-atom lain yang berkedudukan relatif sama dengan atom pusat, dan inilah sebabnya rapat atom persatuan volume $n(R) = 0$ pada harga R kecil. Harapan adalah harga rapat atom persatuan volume $n(R) = 0$ saat dimana harga R hampir sama dengan diameter atom.



Gambar 2.12. Kosentrasi atom $n(R)$ dalam cairan air raksa, Garis-garis vertikal menunjukkan distribusi atom Dalam kristal air raksa. (Omar, 1975, hal. 22).

Puncak utama dalam gambar 2.12, adalah erat hubungannya dengan gaya tarik antara atom-atom. Kecuali pada jarak yang sangat dekat sekali, atom-atom pada dasarnya mengadakan gaya tarik menarik satu sama lainnya. Gaya ini cenderung menarik atom-atom lain untuk mengarah (mendekati) atom pusat, hasilnya menimbulkan rapat atom persatuan volume $n(R)$ mempunyai harga yang paling besar pada jarak tertentu. Alunan pada kurva ditimbulkan oleh pengaruh gaya atom pusat dengan gaya dari atom, yang dekat yang bekerja pada tetangga-tetangga yang masih jauh darinya.

Pada harga R yang sangat besar, rapat atom persatuan volume $n(R)$ mendekati harga yang tetap yaitu n_0 , yang kenyataannya sama dengan rapat atom merata dalam sistem. Dari hasil ini dapat dilihat bahwa zat cair tidak memiliki susunan

yang teratur dalam jangkauan panjang, sehingga pada R yang besar sebaran atom-atom benar-benar acak dan tidak tergantung pada jaraknya ke atom pusat R .

Sebagai pengganti $n(R)$, biasa juga dinyatakan hubungan antara-atom-atom yang dikenal dengan sebutan "pasangan fungsi sebaran" (pair distribution function) $g(R)$, yang didefinisikan sebagai berikut :

$$g(R) = \frac{n(R)}{n_0} \quad (1-11)$$

Sehingga fungsi ini mempunyai arti kepadatan relatif, atau peluang. Karena harga n_0 tetap maka bentuk fungsi $g(R)$ sama dengan $n(R)$, karena itu bentuknya sama dengan yang ada pada gambar 2.12. Pada keadaan khusus dimana harga $g(R) = 1$, saat harga $r = \infty$ tak berhingga, pada keadaan ini tidak ada hubungan antara atom-atom.

Pertanyaan

- 1). Coba jelaskan tentang kristal ideal.
- 2). Kristal yang ditemui dalam kehidupan sehari-hari, dapatkah disebut kristal ideal jelaskan.
- 3). Apakah perbedaan antara kristal dengan amorphus.
- 4). Sebutkan definisi-definisi kristal ?, kisi bravias ?.
- 5). Apa yang disebut dengan basis.
- 6). Sebutkan pengertian sumbu putar pada kristal ?.
- 7). Coba jelaskan urutan cara menentukan indeks Muller dari suatu bidang.
- 8). Satu harga indeks Miller apakah kepunyaan satu bidang ?, jelaskan.

Soal

- 1). Kristal Al terstruktur fcc dengan panjang sisi $a = 4,05 \text{ \AA}$ dan nomor massanya 27. Carilah,
 - a). Jumlah dan jarak tetangga terdekat pertamanya.
 - b). Massa jenisnya.
- 2). Buktikan bahwa struktur hcp yang atom-atomnya saling bersentuhan satu sama lainnya mempunyai perbandingan c dan a sebesar $1 : 1,633$.
- 3). Carilah daya jelajah dari kristal yang terstruktur kubus sederhana, kubus berpusat badan dan kubus berpusat muka. Diantara ketiga struktur kubus ini mana yang paling besar daya jelajahnya.
- 4). Kristal Li terstruktur bcc dengan panjang sisi $a = 3,49$.
 - a). Carilah jarak antara bidang yang berindeks Miller $(1\ 0\ 0)$ $(1\ 1\ 0)$.
 - b). Buktikan secara geometris bahwa jarak itu benar adanya.

- 5). Pada kristal yang Orthorombik, gambarkanlah bidang-bidang yang berindeks Miller (1 1 0) (1 1 1) dan (1 0 0) sedari satu sampai tiga.
- 6). Buktikan bahwa pada Kristal terstruktur hcp ideal daya jelajahnya $\eta = 74 \%$.
- 7). Suatu Kristal terstruktur fcc, kemudian dibuat sel primitif di dalam sel fcc ini.
 - a). Bandingkan volume kedua sel ini.
 - b). Berapa jumlah atom dalam sel primitif ini.
 - c). Carilah jumlah atom tiap satuan volume dalam masing-masing sel, bagaimana hasilnya
- 8). Suatu Kristal terstruktur fcc, bidang yang berindeks Miller berapakah yang paling banyak atom tiap satuan luasnya ?. Hitunglah harga ini untuk Cu terstruktur fcc dan panjang sisi $3,61 \text{ \AA}$.
- 9). Kristal Si terstruktur intan.
 - a). Berapakah jumlah dan jarak tetangga terdekatnya ?.
 - b). Berapakah daya jelajahnya.
- 10). Buktikanlah konstanta Modelung Kristal ionik satu dimensi tersusun dari $- \sim$ ke $+ \sim$ besarnya $A = 2 \ln 2$.

BAB.III IKATAN DALAM KRISTAL

3.1. Gaya Interaksi dan Klasifikasinya Dalam Zat Padat

Disini ditinjau secara kualitatif tentang gaya yang bekerja antara atom-atom dan molekul-molekul dalam zat padat. Secara umum dapat disimpulkan ada dua macam gaya yang harus ada, untuk menjaga keadaan (keutuhan) zat padat. Pertama harus adanya gaya tarik menarik antara atom-atom atau molekul-molekul dalam zat padat yang menjaga supaya atom-atom itu terikat bersama. Gaya tarik ini sebagai pengikat atom-atom, sehingga tidak lepas satu sama lainnya. Jika tidak ada gaya pengikat ini, atom-atom akan bebas satu sama lainnya sehingga tidak terdapat kristal dari zat tersebut.

Kedua adalah gaya tolak, gaya ini bekerja sedemikian rupa sehingga atom-atom dalam kristal membentuk pola-pola bangunan tertentu. Pola-pola bangunan ini nanti membentuk unit-unit tertentu. Dari unit-unit ini membentuk struktur kristal, dengan kata lain gaya tolak berfungsi sebagai penjaga supaya struktur kristal tidak rubuh atau hancur. Hal ini sama fungsinya sebagai tonggak-tonggak yang menyanggah bangunan sehingga bangunan tersebut tidak runtuh. Adanya gaya tolak ini juga yang menyebabkan diperlukan gaya yang besar untuk memampatkan (memperkecil) volume zat padat.

Zat padat merupakan struktur yang stabil, kristal NaCl lebih stabil daripada tumpukan atom-atom Na dan Cl yang bebas. Begitu juga kristal Ge lebih stabil dari tumpukan atom-atom yang bebas. Hal ini memperlihatkan bahwa atom-atom Ge mengadakan tarikan satu sama lainnya bila dia berdekatan, dengan kata lain adanya gaya tarik menarik yang mengakibatkan utuhnya ikatan atom-atom. Gaya tarik inilah yang merupakan salah satu gaya yang bertanggung jawab dalam pembentukan

kristal. Karena adanya gaya tarik menarik antara atom-atom maka energi kristal lebih kecil dari energi masing-masing atom-atom bebas, kekurangan energi ini sama dengan energi yang diperlukan untuk membebaskan atom-atom dalam kristal menjadi atom-atom bebas.

Sebagai ilustrasi sederhana diambil sepasang atom A dan B yang ikatannya stabil tanpa mengkaji asal gaya antara dua atom, marilah dianggap bahwa energi potensial atom B disebabkan kekuatan atom A yang diberikan oleh persamaan.

$$E(r) = -\frac{\alpha}{r^n} + \frac{\beta}{r^m} \quad (3-1)$$

dimana r adalah jarak antara inti atom α, β, m dan n adalah konstanta-konstanta yang harganya tergantung kepada atom-atom yang membentuk molekul A B, dan

disebut konstanta karakteristik molekul. Suku pertama dari energi ($-\frac{\alpha}{r^n}$) bertanda

negatif, ini merupakan energi yang dihasilkan oleh gaya tarik. Dan suku kedua

($+\frac{\beta}{r^m}$) ini, merupakan energi yang ditimbulkan oleh gaya tolak. Gaya antara dua

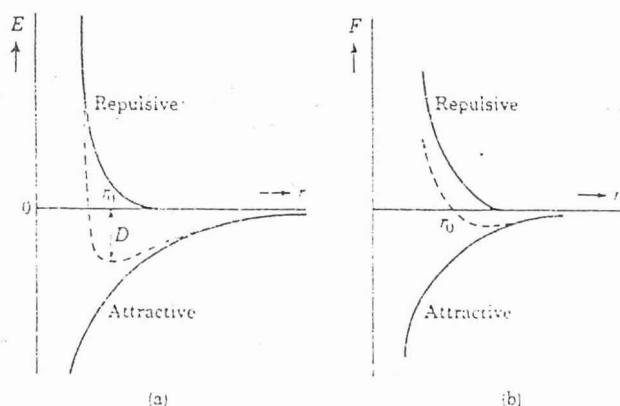
atom merupakan fungsi dari jarak (r) yang ditunjukkan oleh persamaan.

$$F(r) = -\frac{dE}{dr} \quad (3-2)$$

dan dengan mensubsitusikan persamaan (3-1) ke dalam persamaan (3-2), maka diperoleh.

$$F(r) = -\frac{n\alpha}{r^{n+1}} + \frac{m\beta}{r^{m+1}} \quad (3-3)$$

Energi dan gaya antara dua atom, A dan B merupakan ikatan kimia yang dapat dilihat dari gambar 3.1.



Gambar 3.1. a) Grafik hubungan antara energi (E) dan jarak (r)
 b) Hubungan antara gaya (F) dengan jarak (r)
 (Dekker, 1975, hal. 24)

Sistem dalam keadaan setimbang energi minimum (E_{\min}) dan jarak antar atom disimbolkan dengan r_0 , energi minimum disimbolkan pula dengan $E(r_0)$ dan harganya negatif. Energi Dissosiasi adalah energi yang diperlukan (diberikan) untuk memisahkan molekul menjadi atom-atom pembentuknya, dan disimbolkan dengan D dan harganya positif yaitu :

$$D = -E(r_0) \quad (3-4)$$

Dissosiasi dapat terjadi pada suhu tinggi, atau sebagai hasil dari proses dimana dalam proses molekul menyerap energi. Energi dissosiasi mempunyai harga beberapa elektron volt (ev).

Dalam keadaan setimbang energi $E(r_0)$ dan harganya tidak nol, seperti terlihat dalam grafik gambar 3.1a, sedangkan jumlah gaya sama dengan nol ($\Sigma F = 0$) Pada kondisi setimbang ini persamaan (3-3), dapat dituliskan menjadi.

$$0 = -\frac{n\alpha}{r^{n+1}} + \frac{m\beta}{r^{m+1}}$$

atau

$$\beta = \frac{n}{m} \alpha r_0^{m-n} \quad (3-5)$$

Dengan mensubsitusikan persamaan (3-5) ke dalam persamaan (3-1), maka didapatkan energi dalam keadaan setimbang.

$$E(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^n} + \frac{\beta}{r_0^m}$$

$$E(r_0) = -\frac{\alpha}{r_0^n} \left(1 - \frac{n}{m}\right) \quad (3-6)$$

Meskipun gaya tarik dan gaya tolak sama dalam keadaan seimbang, namun energi tarik dan energi tolak tidak nol selama $n \neq m$. Pada kenyataannya $m > n$, energi ikat total pada dasarnya ditentukan oleh energi dari gaya tarik $\left(-\frac{\alpha}{r_0^n}\right)$.

Salah satu aspek dapat dilihat dalam gambar (3-1), suatu harga minimum energi dalam grafik pada gambar (3-1a) hanya mungkin jika $m > n$. Dengan demikian susunan dalam ikatan kimia, mempersyaratkan bahwa gaya tolak lebih pendek jangkauannya dari gaya tarik. Hal ini dapat dibuktikan dengan memberikan kondisi.

$$\left(\frac{d^2E}{dr^2}\right)_{r=r_0} > 0 \quad (3-7)$$

jika $E(r)$ harus mempunyai harga minimum pada r_0 , keadaan ini akan memberikan.

$$-n(n+1)\frac{\alpha}{r_0^{n+2}} + m(m+1)\frac{\beta}{r_0^{m+2}} > 0 \quad (3-8a)$$

Dan dengan mensubsitusikan persamaan (3-5), ke dalam persamaan (3-8a) maka diperoleh.

$$-n(n+1)\frac{\alpha}{r_0^{n+2}} + m(m+1)\frac{\left(\frac{n\alpha}{m}\right)r_0^{m-n}}{r_0^{m+2}} > 0$$

$$-n(n+1) + m(m+1) > 0$$

$$m > n \quad (3-8b)$$

Meskipun energi yang didapatkan secara umum, kurang tepat dari persamaan (3-1), pernyataan di atas dapat membuktikan beberapa kesimpulan secara kualitatif yang dapat dikembangkan dalam zat padat.

Gaya yang bekerja antara atom-atom dalam zat padat, adalah gaya elektrostatis alami. Gaya ini pada dasarnya ditentukan oleh susunan elektron-elektron terluar atom-atom dalam ruang. Sifat-sifat fisik zat padat, pada dasarnya ditentukan oleh distribusi elektron terluarnya.

3.2. Bentuk-Bentuk Ikatan Kristal

Adanya gaya tarik antara atom-atom, menimbulkan ikatan dalam kristal. Dalam bahasa kimianya dapat dikatakan gaya ini yang membentuk ikatan antara atom-atom dalam zat padat, dan gaya ini yang bertanggung jawab untuk menstabilkannya.

Ada beberapa bentuk ikatan, tergantung kepada asal mula dan hakekat fisik gaya yang menimbulkan ikatan. Pada umumnya bentuk ikatan secara garis besar sebagai berikut yaitu : ikatan ionik, ikatan kovalen, ikatan metal (logam) dan ikatan Van Der Walls. Marilah sekarang dijelaskan satu persatu dan juga akan dibicarakan tipe ikatan tingkat kedua yang juga perlu untuk hal-hal tertentu.

3.2.1. Ikatan ionik

Salah satu masalah yang utama dalam zat padat, adalah menghitung energi ikat kristal. Grup yang sederhana dari kristal adalah kristal ionik, penghitungan energi kohesifnya dilakukan oleh Born dan Madelung pada tahun 1910.

Asumsi dasar teori energi kohesif kristal ionik, adalah zat padatnya dapat dipertimbangkan sebagai suatu sistem yang terdiri dari ion-ion muatan positif dan negatif. Contohnya dalam Natrium Clorida, dianggap unit ini adalah ion $_{11}\text{Na}^+$, dengan susunan elektron pada kulitnya adalah $1s^2, 2s^2, 2p^6$ dan ion $_{17}\text{Cl}^-$ dengan susunan elektronnya adalah $1s^2, 2s^2, 2p^6, 3s^2, 3p^6$ setelah satu elektron atom Na pindah ke atom Cl yaitu $3s^1$ dari Na ke $3p^5$, sehingga menjadi $3p^6$ pada Cl.

Kalau kita selidiki gaya yang bekerja antara pasangan ion Na^+ dan ion Cl^- adalah gaya elektrostatik Coulomb, yang saling tarik menarik karena muatannya berlawanan. Gaya inilah yang bertanggung jawab penyebab ikatan NaCl, dalam kristal. Untuk memahami asal gaya tolak pada jangkauan jarak pendek memang agak sulit. Anggap ion-ion ada NaCl sangat dekat satu sama lainnya, gaya tolak mulai bekerja pada jarak yang dekat ini.

Suatu gambaran kualitatif asal gaya tolak, dapat dijelaskan sebagai berikut. Jika ion Na^+ dan ion Cl^- cukup dekat, sehingga orbit elektronnya berdempetan satu sama lainnya dalam kristal, maka elektron-elektron mulai mengadakan gaya tolak karena sifat gaya elektrostatik coulomb. Dengan bertambah dekatnya ion-ion maka bertambah besar gaya tolaknya, ini merupakan kuantitas yang cocok dengan gambar 3.1b dalam daerah $r < r_0$.

Sumber lain yang memberikan sumbangan terhadap gaya tolak ini adalah "Prinsip Larangan Pauli". Makin dekat ion-ion satu sama lainnya, orbit elektronnya mulai berdempet dengan kata lain beberapa elektron berusaha menduduki orbit yang

sudah ditempati elektron lain. Tetapi kejadian seperti ini tidak boleh menurut prinsip larangan Pauli, sebab kedua ion Na^+ dan Cl^- berisi penuh elektron pada sub sel yang paling luar. Untuk mencegah pelanggaran prinsip Larangan Pauli ini, maka energi potensial sistem bertambah besar dengan cepat kembali, ini cocok dengan gambar 3.1a pada daerah $r < r_0$.

Ikatan ionik sangat kuat jika dibandingkan dengan ikatan logam (metal), energi ikat pasangan atom-atom kira-kira 5 eV. Kekuatan ini mencirikan kuatnya gaya coulomb yang mengikatnya, kekuatan ikatan ini dicirikan oleh tingginya titik lebur kristal ionik. Contohnya adalah titik lebur kristal NaCl yaitu 801 °C, sedangkan titik lebur Na sebagai metal hanya 97,8 °C.

3.2.1.1. Anggapan-anggapan dasar teori Born

Teori Born mengenai energi ikat kisi didasarkan bahwa kristal yang dibicarakan, adalah disusun dari ion-ion positif dan negatif. Bila dianggap muatan tersebar berbentuk bola simetris, maka energi antara ion hanya tergantung kepada jarak antaranya dan tidak tergantung kepada arahnya. Sebagai contoh diambil NaCl, kita katakan jarak ion yang terdekat r (jarak pada satu saat). Sebuah atom Na^+ yang kita tinjau dikelilingi oleh 6 ion Cl^- pada jarak r , 12 ion Na^+ pada jarak $r\sqrt{2}$, 8 ion Cl^- pada jarak $r\sqrt{3}$, 6 ion Na^+ pada jarak $r\sqrt{4}$, 24 ion Cl^- pada jarak $r\sqrt{5}$ dan seterusnya. Energi coulomb dari ion Na ini, dalam medan ion-ion lainnya adalah.

$$E_c = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \left\{ \left(\frac{6}{\sqrt{1}}\right) - \left(\frac{12}{\sqrt{2}}\right) + \left(\frac{8}{\sqrt{3}}\right) - \left(\frac{6}{\sqrt{4}}\right) + \left(\frac{24}{\sqrt{5}}\right) + \dots \right\} \quad (3-9)$$

dimana q adalah muatan tiap ion (exvalensi). Dari persamaan (3-9) kelihatan energi coulomb berkurang secara lambat dengan bertambahnya jarak (r), maka

diambil sama atau di sekitar ion Na^+ tadi sampai jauh. Jelas kelihatan oleh kita bahwa koefisien dari

$$\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ yaitu } \left\{ \left(\frac{6}{\sqrt{1}}\right) - \left(\frac{12}{\sqrt{2}}\right) + \left(\frac{8}{\sqrt{3}}\right) - \left(\frac{6}{\sqrt{4}}\right) + \left(\frac{24}{\sqrt{5}}\right) + \dots \right\}$$

merupakan bilangan mumi, yang hanya ditentukan oleh struktur kristal. Harga batas dari koefisien untuk beberapa kristal sudah dihitung oleh Madelung, Ewald dan Ewyen. Untuk struktur NaCl besarnya $A = 1,747558$ sehingga persamaan (3-9) menjadi.

$$E_c = -\left(\frac{A q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) \quad (3-10)$$

Bilangan tetap A disebut dengan tetapan Madelung.

Untuk kristal-kristal lainnya yang tersusun dari ion positif dan negatif yang mempunyai valensi sama, tetapan Madelungnya adalah.

Cesium Chlorida (CsCl) yaitu $A = 1,72670$

Zinc blende (ZnS) yaitu $A = 1,6381$

Wurtzite (ZnS) yaitu $A = 1,641$

Perlu diingat bahwa q dalam persamaan (3-10) secara umum mewakili muatan elektron kali dengan valensi ion-ion yang membentuk kristal (energi elektron x valensi yaitu $q = 1,6021 \cdot 10^{-19} \text{ C} \times \text{valensi}$).

Tanda minus (-) dalam persamaa (3-2) menunjukkan energi total dari semua ion-ion disekeliling ion Na yang ditinjau, yang ditimbulkan oleh gaya coulomb yang merupakan gaya tarik. Untuk menjaga kisi supaya jangan ambruk, harus ada gaya tolak antara ion-ion. Gaya tolak kelihatan dengan nyata bila sel-sel elektron ion saling tindih (berdempetan), dan bertambah dengan cepat dengan berkurangnya jarak

antara ion-ion. Gaya-gaya ini seperti gaya bertindihan lainnya dibicarakan dalam mekanika kuantum, karena tidak dalam skop klasik.

Born memulai pekerjaan dengan memberikan anggapan yang sederhana bahwa energi tolak antara dua ion, merupakan fungsi jarak yang dapat dirumuskan dalam bentuk $\left(\frac{B}{r^m}\right)$. Dimana B dan m merupakan tetapan yang belum diketahui,

dan merupakan karakteristik ion-ion kristal yang tertentu.

Kembali ditinjau suatu ion Na^+ , energi tolak yang ditimbulkan ion-ion disekitarnya adalah.

$$E_{rep} = \left(\frac{B}{r^m}\right) \quad (3-11)$$

Mengingat dari kenyataan (hasil eksperimen), bahwa kekuatan gaya tolak bergantung kepada jarak antara ion-ion. Energi tolak dalam persamaan (3-11), sebagian besar disumbangkan oleh ion-ion yang paling dekat dengannya.

Energi total ion Na^+ disebabkan oleh adanya ion-ion disekitarnya, didapatkan dengan menjumlahkan persamaan (3-10) dan (3-11) hasilnya diperoleh sebagai berikut.

$$E(r) = -\left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) + \left(\frac{B}{r^m}\right) \quad (3-12)$$

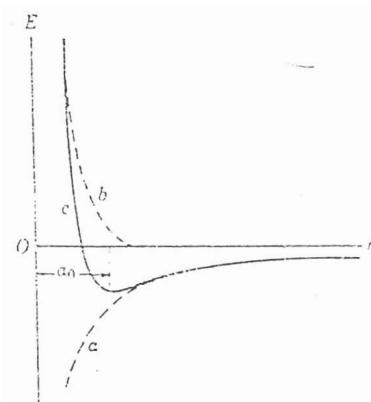
Untuk N Pasangan ion positif dengan ion negatif, energi totalnya adalah.

$$E(r) = N \left\{ -\left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right) + \left(\frac{B}{r^m}\right) \right\} = N E(r) \quad (3-13)$$

Pengalian dengan N , bukan dengan $2N$ disebabkan energi antara tiap-tiap pasangan ion dalam kristal cukup dihitung satu kali (karena energi bersama). Kedua

sumbangan energi ini pada $E(r)$ skemanya dapat dilihat pada gambar (3.2). Pada keadaan kristal dalam suhu 0 mutlak ($T = 0$), dan dalam keadaan setimbang $r = r_0$, r_0 adalah jarak paling dekat antara ion pada suhu $T = 0$, energi E mencapai minimum. Pada keadaan minimum ini.

$$\left(\frac{d^2E}{dr^2}\right)_{r=r_0} = 0 \quad (3-14)$$



Gambar 3.2. Skema yang menggambarkan energi interaksi
(Dekker, 1975, hal. 119)

Dengan menurunkan persamaan (3-13) terhadap r pada $r = r_0$, dan kemudian disesuaikan dengan persamaan (3-14) maka diperoleh.

$$B = \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 m}\right) r_0^{m-1} \quad (3-15)$$

Harga B dalam persamaan (3-15) dimasukkan ke dalam persamaan (3-13), sehingga diperoleh energi kisi yaitu.

$$E(r) = -\left(\frac{N A q^2}{4\pi\epsilon_0 r}\right)\left(1 - \frac{1}{m}\right) \quad (3-16)$$

Dimana jarak antara atom dapat dihitung dari difraksi sinar X pada kristal, muatan per-ion (valensi $\times e = q$) diketahui dan energi kisi dapat dihitung bila bilangan pangkal m diketahui. Tetapan m dapat dihitung, antara lain dengan kompresibilitas K_0 .

3.2.1.2. Menghitung harga m dari data kompresibilitas

Born mendapatkan harga m dari pengukuran-pengukuran kompresibilitas kristal sebagai berikut. Kompresibilitas K_0 pada suhu nol mutlak $T = 0$, diberikan oleh persamaan.

$$\frac{1}{K_0 V_0} = \left(\frac{d^2 E}{dV^2}\right)_{V=V_0} \quad (3-17)$$

dimana V_0 adalah volume kristal pada waktu dalam keadaan setimbang pada $r = r_0$. Harga volume V berhubungan dengan r , hubungan antara volume dengan jarak antara ion-ion dalam bentuk persamaan,

$$V = c N r^3 \quad (3-18a)$$

dimana c adalah tetapan kisi, ditentukan oleh bentuk kisi (atom per kisi), misalnya untuk NaCl mempunyai harga $c = 2$.

$$dV = 3 c N r^2 dr \quad (3-18b)$$

$$\frac{dE}{dV} = \frac{1}{3cN r^2} \frac{dE}{dr}$$

dan

$$\frac{d^2 E}{dV^2} = \frac{1}{9c^2 N^2 r^2} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r^2} \frac{dE}{dr} \right) \quad (3-19)$$

Dari persamaan (3-13)

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dr} &= \frac{d}{dr} \left\{ N \left(- \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) + \left(\frac{B}{r^m} \right) \right) \right\} \\ &= N \left(-(-1) \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) + (-m) \left(\frac{B}{r^{m+1}} \right) \right) \\ &= N \left(\left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \right) - \left(\frac{mB}{r^{m+1}} \right) \right) \end{aligned}$$

dan

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left\{ \frac{1}{r^2} N \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} - \frac{mB}{r^{m+1}} \right) \right\} \\ &= N \frac{d}{dr} \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^4} - \frac{mB}{r^{m+3}} \right) \\ &= N \left((-4) \frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} - \left(\frac{-(m+3)mB}{r^{m+4}} \right) \right) \end{aligned}$$

Untuk keadaan setimbang $r = r_0$, maka,

$$B = \left(\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 m} \right) r_0^{m-1}$$

sehingga.

$$\frac{d^2E}{dr_0^2} = N \left(-4 \frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} + (m+3)m \left(\frac{\frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 m} r_0^{m-1}}{r^{m+4}} \right) \right)$$

$$\frac{d^2E}{dr_0^2} = N \left(-4 \frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} + \left(\frac{(m+3)Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} \right) \right)$$

$$\frac{d^2E}{dr_0^2} = N \frac{Aq^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} (-1 + m)$$

Pada keadaan setimbang $V = V_0$, $r = r_0$ dan $K = K_0$ maka.

$$\frac{1}{K_0 V_0} = \frac{1}{K_0 c N r_0^3} = \frac{d^2 E}{dV^2} (v=v_0) = \frac{1}{9c^2 N^2 r_0^2} \left\{ N \frac{A q^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} (-1+m) \right\}$$

$$\frac{1}{K_0 c N r_0^3} = \frac{1}{9c^2 N^2 r_0^2} \frac{N A q^2}{4\pi\epsilon_0 r^5} (m-1)$$

$$\frac{1}{K_0} = \frac{1}{9c} \left(\frac{A q^2}{4\pi\epsilon_0 r^4} \right) (m-1)$$

$$\frac{1}{K_0} = \frac{A q^2 m}{9c 4\pi\epsilon_0 r^4} - \frac{A q^2}{9c 4\pi\epsilon_0 r^4}$$

$$\frac{A q^2 m}{9c 4\pi\epsilon_0 r^4} = \frac{A q^2}{9c 4\pi\epsilon_0 r^4} + \frac{1}{K_0}$$

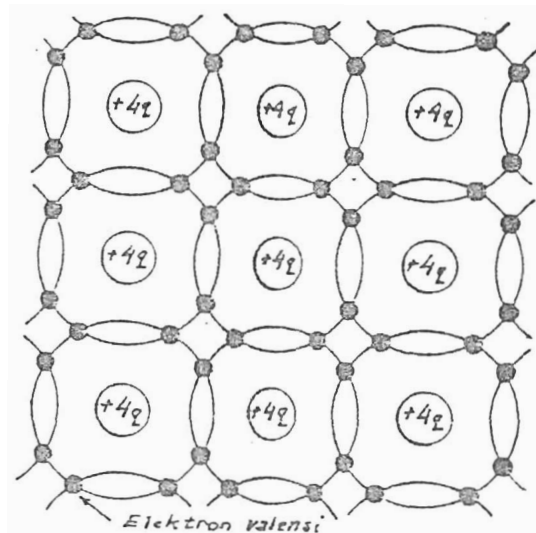
$$m = 1 + \frac{9c 4\pi\epsilon_0 r^4}{A q^2 K_0} \quad (3-20)$$

Dengan mengetahui harga c, ϵ_0, r_0, A, q dan K_0 maka harga m dapat dicari.

3.2.2. Ikatan kovalen

Sebelum masuk pada ikatan ini, sebaiknya kita membicarakan terlebih dulu zat padat yang kovalen, antara lain adalah intan. Intan yang terbentuk dari unsur atom carbon, yang tersusun dengan cara tertentu dan memiliki tipe dasar fcc dan tiap-tiap atom dikelilingi oleh empat atom lainnya dengan membentuk tetrahedron yang teratur. Kita dapat menggunakan ikatan ionik untuk menjelaskan ikatan intan ini sebab tiap-tiap atom menyimpan elektron-elektronnya sendiri dengan kata lain disini tidak ada pemindahan elektron antara suatu atom dengan atom yang lainnya.

Berdasarkan kenyataan bahwa semua atom adalah sama (carbon), maka tidak logis terjadi pemindahan suatu elektron dari atom ke atom lainnya.



Gambar 3.3. Ikatan Kovalen dalam kristal elemen bervalensi 4 (Si, Ge, C) dalam gambar dua dimensi (Darmawan. Dkk, 1987, hal. 4.8)

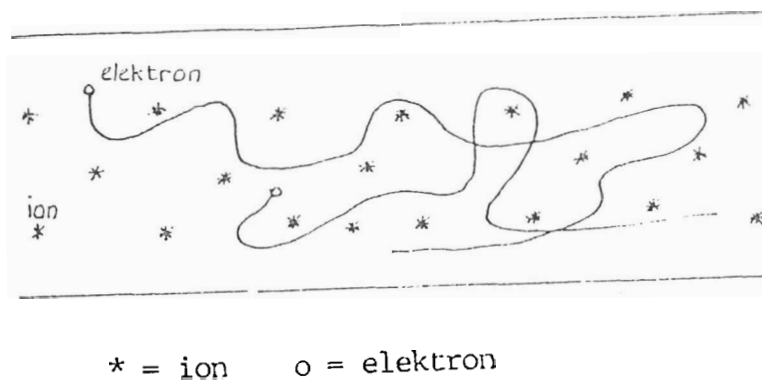
Ikatan antara atom-atom intan adalah sebagai berikut. Masing-masing atom memiliki empat elektron valensi, dan membentuk empat ikatan dengan tetangga terdekatnya seperti pada gambar 3.3. Ikatan disini akibat susunan dua elektron yang masing-masingnya disumbangkan oleh dua atom. Ikatan elektron ganda ini sudah dikenal dalam kimia fisika, yang disebut juga dengan ikatan kovalen. Kita lihat pada kristal intan bahwa sebagian elektron yang dipunyai secara bersama, maka tiap-tiap atom carbon sekarang mempunyai 8 elektron yang mengelilinginya. Sehingga sub sel p penuh berisi elektron dan atomnya menjadi stabil. Ikatan kovalen ini dapat dijelaskan dengan mekanika kuantum. Contoh sederhana ikatan kovalen adalah molekul hidrogen (H_2), dimana dua atom terikat bersama karena ikatan kovalen dengan kata lain dia memiliki secara bersama kedua elektronnya. Ikatan kovalen ini juga sangat kuat, terbukti dengan sangat kerasnya unsur ini dan mempunyai titik lebur

yang tinggi (3000 °C). Energi ikatnya ada beberapa elektron volt per ikatan (pasangan).

Selain intan unsur lain yang memiliki ikatan kovalen antara lain adalah Si, Ge dan Sn, semua unsur yang mempunyai struktur seperti intan memiliki ikatan kovalen. Kristal kovalen cenderung keras dan rapuh, dan tidak mampu dalam ikatan yang besar. Dalam membicarakan ikatan disini yang mumi saja, mumi ikatan ionik atau kovalen. Namun demikian ada kristal yang ikatannya tidak murni, campuran ikatan ionik dan ikatan kovalen seperti pada semikonduktor GaAs.

3.2.3. Ikatan metal

Kebanyakan unsur ini adalah metal, metal dicirikan oleh daya hantar listrik yang tinggi, sangat kuat serta daya elastisitas yang tinggi. Disini akan dibicarakan mekanisasi ikatannya, dan sifat-sifat dari ikatan metal ini. Untuk memahami ikatan metal ini, marilah diambil satu contohnya yaitu sodium. Bagaimana cara-cara atom sodium terikat dalam kristal supaya tarik-menarik sesamanya, sehingga membentuk kristal yang stabil. Penjelasannya adalah sebagai berikut, yaitu tiap-tiap atom Na yang bebas memiliki satu elektron valensi yang mempunyai ikatan lemah dari atomnya. Bila kristal metal ini terbentuk maka elektron valensi ini lepas dari ikatan atomnya dan menjadi elektron bebas, yang dapat bergerak kemana-mana dalam kristal. Gambaran elektron valensi bebas ini betul-betul dratis perbedaannya dengan elektron valensi pada kristal berikatan ionik dan kovalen, dimana elektron-elektron betul-betul terikat pada atomnya dan inilah perbedaan yang utama antara ikatan metal dengan ionik dan kovalen.



Gambar 3.4. Sejumlah elektron dimiliki bersama oleh sejumlah ion
(Darmawan. Dkk, 1987, hal. 1.47)

Model yang kita bicarakan adalah sodium, yang dirakit dari ion-ion Na^+ , berstruktur bcc diselimuti oleh gas elektron. Pertanyaan yang menarik bagi kita sekarang adalah, kenapa energinya (dalam beberapa sistem) lebih rendah daripada energi atom-atom Na yang bebas? Pertama jelas bahwa ion-ion Na^+ akan cenderung untuk saling tolak menolak sesamanya, sebagai hasil dari gaya elektrostatik coulombnya. Tetapi gaya coulomb ini pulalah yang bekerja menstabilkannya, yaitu gaya dari awan-awan elektron bebas yang berfungsi sebagai penyekat (merekat) ion-ion satu sama lainnya. Penurunan energi ikatan metal ini dapat dijelaskan dengan mekanika kuantum, menurut mekanika kuantum jika suatu partikel dibatasi gerakannya dalam volume yang kecil hal ini mengharuskannya bergerak lebih cepat atau dengan kata lain energi kinetiknya bertambah besar. Energinya ini sebanding dengan volume pangkat minus dua pertiga $(V)^{-2/3}$

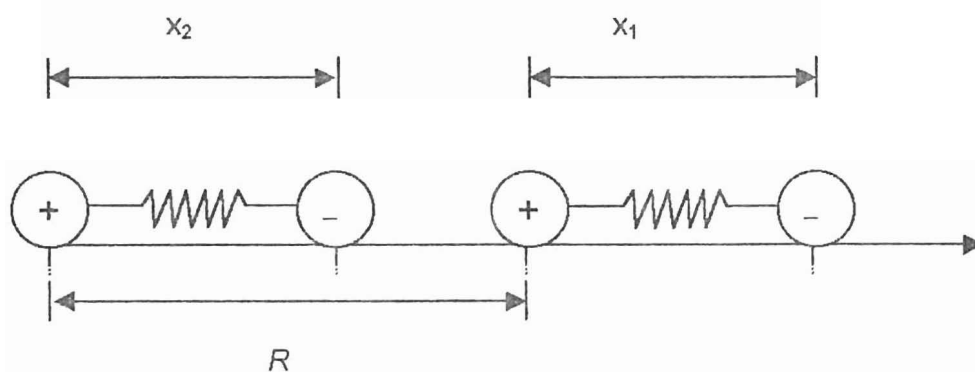
Sekarang diaplikasikan ide kuantum di atas pada ikatan metal, bila atom-atom Na dalam keadaan bentuk gas elektron valensinya memiliki energi kinetik yang besar karena volume elektron terbatas pada volume atomnya. Tetapi jika dalam bentuk kristal, elektron valensi ini bebas bergerak kesemua tempat dalam volume kristal dengan arti kata volume elektron bertambah besar. Hal ini menyebabkan energi kinetik elektron menurun secara dratis, sehingga energi sistem menurun pula.

Ikatan metal lebih lemah dari ikatan ionik dan ikatan kovalen (contoh Na yang mempunyai titik lebur pada suhu $97,8\text{ }^{\circ}\text{C}$), tetapi tidak pula dapat diabaikan begitu saja. Daya hantar listrik yang tinggi dalam ikatan metal ini, disebabkan oleh elektron valensi sangat mudah bergerak jika dipengaruhi oleh medan listrik dan gerakkannya searah dengan arah medan. Penjelasan yang serupa dapat juga diberikan untuk daya hantar panas yang baik dari ikatan metal ini, kerapatannya yang tinggi disebabkan oleh karena ion-ion metal dapat berdempet sesamanya dengan rapat. Tingginya sifat elastisitas ikatan metal ini merupakan konsekuensi dari ketidakterarah ikatannya, sehingga jika ada suatu momen dari yang bekerja padanya dapat membengkokkan batang (metal). Posisi ion-ion berubah menurut arah momen ini, dan elektron-elektron dengan cepat bergerak menyesuaikan diri dengan perubahan baru ini.

Alkali merupakan contoh dari ikatan metal yang sederhana, contoh yang lebih komplis antara lain adalah Ni dan Fe yang merupakan unsur-unsur peralihan. Dalam unsur Fe dan Ni elektron pada sub kulit $3d$ memiliki lokasi yang baik dan cenderung untuk membentuk ikatan kovalen dengan tetangganya. Disamping itu unsur Ni dan Fe yang berikatan kovalen tadi, elektron pada sub kulit $4s$ merupakan elektron valensi yang membentuk ikatan metal.

3.2.4. Ikatan Van der Waals - London

Ditinjau dua atom gas mulia yang sama berjarak yang sama berjarak R , dimana $R_0 \gg$ dibandingkan jari-jari atom. Apakah ada interaksi antara kedua atom netral ini? Jika distribusi muatan atom tetap maka interaksi antara atom ini tidak ada (nol), sebab potensial listrik oleh sebaran elektron disekitarnya dihapuskan oleh potensial muatan inti. Kemudian atom-atom gas mulia ini dapat dibuktikan tidak ada gaya tarik sesamanya dan tidak dapat mengembun (mencair). Kenapa gas mulia ini bisa mencair?, untuk itu dapat dijelaskan sebagai berikut. Gas mulia ini atom-atomnya memiliki elektron lengkap pada kulit terluarnya, elektron beredar disekeliling intinya. Pada suatu saat tertentu mungkin saja terjadi pemusatan elektron disalah satu sisi inti, terpusatnya elektron pada salah satu sisi ini menimbulkan dipole listrik dimana elektron bermuatan negatif dan inti bermuatan positif. Dipole listrik yang terjadi pada atom ini akan menginduksi atom-atom disekitarnya, sehingga membentuk dipole listrik pula. Dipole-dipole listrik ini akan melakukan gaya tarik satu sama lainnya, dan terjadilah ikatan dan membentuk kristal. Gaya ikatannya dapat ditinjau sebagai berikut.



Gambar 3.5. Dua atom gas mulia berjarak R dan jarak dipole x_1 dan x_2

Sebagai model ikatannya, diambil atom-atom ini bersifat sebagai osilator harmonis. Ditinjau dua atom sebagai dua osilator harmonis seperti pada gambar 3.5, yang berjarak satu sama lainnya adalah R . Masing-masing osilator muatannya $\pm e$ dengan masing-masing jaraknya x_1 dan x_2 , momentumnya p_1 dan p_2 dan konstanta gayanya C . Kemudian Hamiltonian sistem adalah.

$$H_0 = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{1}{2} C x_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{1}{2} C x_2^2 \dots \quad (3-21)$$

Masing-masing osilator terlepas satu sama lainnya dengan frekuensi resonansi

$$\omega_0 = \left(\frac{C}{m}\right)^{\frac{1}{2}}, \text{ tepat seperti osilator harmonis sederhana. Umpamakan } H_1 \text{ energi}$$

interaksi yang disebabkan gaya coulomb antara kedua osilator seperti pada,

$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R+x_1-x_2} - \frac{e^2}{R+x_1} - \frac{e^2}{R-x_2} \dots \quad (3-22)$$

dengan pendekatan dimana $|x_1|, |x_2| \ll R$, dikembangkan persamaan dan didapatkan order paling rendah.

$$H_1 \equiv -\frac{e^2 x_1 x_2}{R^3} \quad (3-23)$$

Total hamiltonian dengan persamaan (3-21) untuk H_1 , diarahkan (diagonalized) dengan model transformasi normal.

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + x_2) \quad ; \quad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 - x_2) \quad (3-24)$$

atau dalam bentuk x_1 dan x_2 .

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_s + x_a) \quad ; \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_s - x_a) \quad (3-25)$$

Subscrip s dan a merupakan model simetris dan anti simetris gerak, sehingga demikian dimiliki momentum p_1 dan p_2 yang berkaitan dengan kedua model.

$$p_1 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s + p_a) \quad ; \quad p_2 \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(p_s - p_a) \quad (3-26)$$

Jumlah hamiltonian $H_1 + H_2$ setelah ditransformasikan pada persamaan (3-25) dan (3-26) adalah,

$$H = \left[\frac{1}{2m} p_s^2 + \frac{1}{2} \left(c - \frac{2e^2}{R^3} \right) x_s^2 \right] + \left[\frac{1}{2m} p_a^2 + \frac{1}{2} \left(c + \frac{2e^2}{R^3} \right) x_a^2 \right] \quad (3-27)$$

Kedua frekuensi dari kedua osilator yang terkait (terkopel) ini didapatkan dengan menyelesaikan (menyelidiki) persamaan (3-27) yaitu.

$$W = \left[\left(\frac{c \pm \frac{2e^2}{R^3}}{m} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cong W_0 \left[1 \pm \frac{1}{2} \left(\frac{2e^2}{cR^3} \right) - \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{cR^3} \right)^2 + \dots \right] \quad (3-28)$$

dengan W_0 diberikan oleh $\left(\frac{C}{m} \right)^{\frac{1}{2}}$, dalam persamaan (3-28) dikembangkan akar kuadrat. Energi pada titik terendah (titik nol) dari sistem adalah $\frac{1}{2} \eta (w_s + w_a)$,

dari jumlah interaksi lebih rendah dari $2 \cdot \frac{1}{2} \eta w_0$ dengan,

$$\Delta E = \frac{1}{2} \eta (\Delta w_s + \Delta w_a) = -\eta w_0 \frac{1}{8} \left(\frac{2e^2}{cR^3} \right)^2 = -\frac{A}{R^6} \quad (3-29)$$

dengan

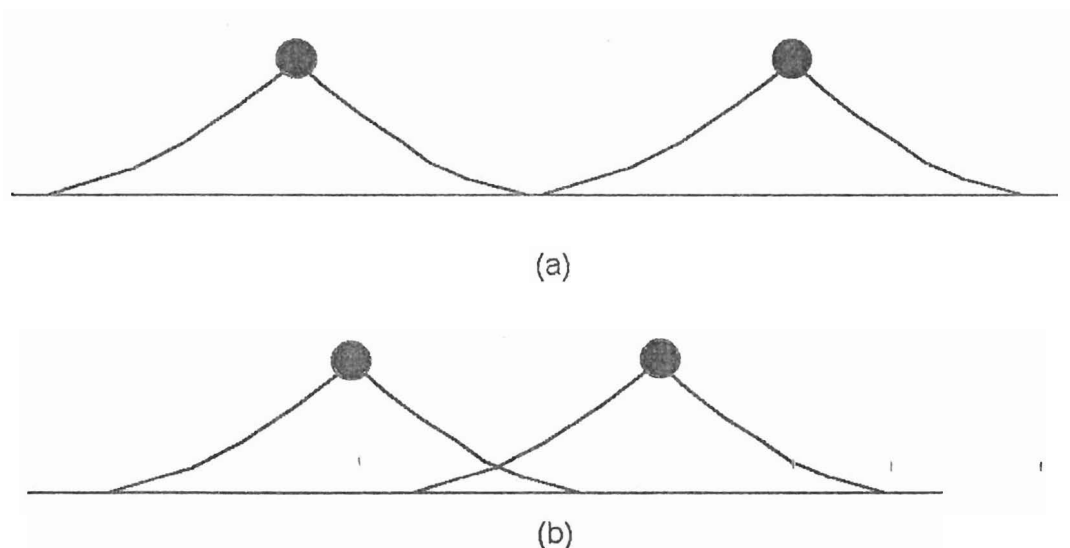
$$A = \frac{\eta w_0 4e^4}{8} = \frac{\eta w_0 e^4}{2}$$

Ini adalah interaksi gaya tarik yang negatif, dan berbanding terbalik dengan pangkat enam jarak antara kedua atom. Interaksi ini disebut dengan interaksi Van der Waals, dan dikenal juga sebagai interaksi London atau interaksi disebabkan induksi dipole-dipole listrik. Inilah yang mendasari interaksi gaya tarik dalam kristal gas mulia, dan

kebanyakan molekul organik. Interaksi efek kuantum memperlihatkan bahwa $\Delta E \rightarrow 0$ jika $\eta \rightarrow 0$, hingga demikian energi pada titik nol dari sistem adalah paling rendah dengan dipole-dipole berpasangan.

3.2.4.1. Gaya tolak

Dua atom membawa bersama distribusi muatan elektron saling berhimpitan (overlap) gambar 3.6, dengan cara demikian akan merubah energi elektrostatik sistem.



Gambar 3.6. Muatan elektron terdistribusi saling berdempet karena atom berdekatan

Pada jarak yang cukup dekat energi saling bertindihan ini adalah energi tolak, dalam harga yang besar Karena "prinsip larangan Pauli". Pada dasarnya prinsip ini menyatakan bahwa dua elektron, tidak bisa mempunyai semua bilangan kuantumnya sama. Bila distribusi muatan dua atom saling berhimpit (overlap), ada kecenderungan elektron dari atom B menempati bagian tingkat energi dari atom A yang sudah

ditempati oleh elektron atom A sendiri dan sebaliknya. Prinsip larangan Pauli mencegah rangkapnya pemilikan, dan distribusi elektron suatu atom dengan bertambah dekatnya sel dapat overlap hanya jika disertai oleh promosi (perpindahan) elektron ke tingkat yang lebih tinggi yang tidak ditempati elektron lain dalam atom. Dengan demikian elektron yang overlap meningkatkan energi total sistem, dan memberikan gaya tolak dalam interaksi. Contoh yang lengkap mengenai yang overlap ini, dapat dilihat pada gambar 3.6. Kita tidak berusaha disini untuk mengkaji secara teliti interaksi gaya tolak; data hasil percobaan pada gas mulia dapat dinyatakan dengan baik oleh energi potensial gaya tolak dalam bentuk $\frac{B}{r^{12}}$. Dengan B adalah bilangan konstan positif yang dapat digunakan secara bersama dengan potensial, yang disebabkan gaya tarik dalam persamaan (3-29). Bilangan konstan A dan B adalah parameter yang ditentukan secara empirik dari pengukuran-pengukuran yang bebas (saling tidak terkait) dalam phase gas data yang digunakan termasuk koefisien varial dan kekentalan. Biasanya dapat ditulis energi potensial dua atom yang berjarak R sebagai berikut.

$$E(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3-30)$$

dimana ε dan σ adalah parameter baru, dengan pengambilan $4\pi\sigma^6 \equiv A$ dan $4\pi\sigma^{12} \equiv B$.

Energi potensial dalam persamaan (3-30), dikenal sebagai potensial Lennard - Jones. Persamaan gaya antara dua atom $F = -\frac{dE}{dr}$, harga-harga ε dan σ dicari oleh Bernarde dan dapat dilihat dalam tabel 3.1 berikut.

Tabel 3.1. Tabel Bernade mengenai beberapa parameter gas mulia

Unsur	Jarak Terdekat (Å)	Energi Kohesif (Eksperimen) (eV / atom)	Titik Lebur (°K)	Potensial Ionisasi Atom Bebas (eV)	Parameter Lennard-Jones (Potensial)	
					ϵ (10^{-16} erg)	σ (°Å)
He	Zat Cair	Pada tekanan nol	-	24,58	14	2,56
Ne	3,13	0,02	24	21,56	50	2,74
Ar	3,76	0,08	84	15,76	167	3,40
Kr	4,01	0,116	117	14,00	225	3,65
Xe	4,35	0,17	161	12,13	320	3,48

Harga-harganya didapatkan dari data phase gas, sehingga perhitungan pada sifat-sifat dari zat padat tidak melibatkan (terlibat) suatu persamaan yang dapat dibuang.

3.2.4.2. Konstanta keseimbangan kisi

Jika energi kristal atom gas mulia diabaikan, energi kohesif kristal gas mulia didapatkan dari penjumlahan potensial Lennard-Jones pada persamaan (3-30) mencakup semua pasangan atom-atom dalam kristal. Jika ada N atom dalam kristal, energi potensial totalnya adalah.

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} N(4\epsilon) \left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}r} \right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{p_{ij}r} \right)^6 \right] \quad (3-31)$$

dimana $p_{ij}r$ adalah jarak antara atom acuan i dengan atom lain j , dinyatakan

dalam bentuk jarak yang paling dekat r . faktor $\frac{1}{2}$ timbul karena untuk menghindari perhitungan dua kali untuk tiap-tiap pasangan. Jumlah dalam persamaan (3-31), sudah dihitung dan untuk struktur fcc.

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 12,13188 \quad \text{dan} \quad \sum_j p_{ij}^{-6} = 14,45292 \quad (3-32)$$

Struktur fcc mempunyai 12 tetangga terdekat, kita lihat bahwa deret cepat menuju harga tertentu dan mempunyai tidak terlalu jauh dari 12. Sumbangan atom-atom terdekat paling utama untuk energi kristal gas mulia. Bila digunakan E_{tot} dalam persamaan (3-32) sebagai energi total kristal, pada keadaan setimbang $r = r_0$ dapat dicari hubungan r_0 dengan σ dengan menurunkan.

$$F = \left(\frac{dE}{dr} \right)_{r_0} = 0 = -2N \epsilon \left[(12)(12,3) \frac{\sigma^{12}}{r_0^{13}} - 6(14,45) \frac{\sigma^6}{r_0^7} \right] \quad (3-33)$$

Sehingga didapatkan.

$$\frac{r_0}{\sigma} = 1,09 \quad (3-34)$$

adalah sama untuk semua unsur dengan struktur fcc. Harga-harga dari pengamatan $\frac{r}{\sigma}$, pengamatan tidak tergantung pada penentuan harga σ diberikan tabel 3.1 adalah.

	Ne	Ar	Kr	Xe
$\frac{R}{\sigma}$	1,14	1,11	1,10	1,19

Ini cocok dengan persamaan (3-34), sedikit penyimpangan dari harga biasa $\frac{r_0}{\sigma}$ dari harga murni 1,09 yang sudah diprediksi dari gas mulia dapat dijelaskan oleh efek kuantum. Hasil pengukuran phase gas dapat diprediksi konstanta kisi kristal.

3.2.4.3. Energi kohesif

Untuk mendefinisikan energi kohesif, dibandingkan energi total zat padat (energi kinetik tambah energi potensial) dengan energi sejumlah atom yang sama dalam keadaan bebas dan berjarak satu sama lainnya jauh tak terhingga. Suatu kristal bisa stabil jika energi totalnya lebih rendah dari energi total atom-atom atau molekul-molekul dalam keadaan bebas. Perbedaan energi atom dalam keadaan bebas dengan energi kristal disebut dengan energi kohesif.

Energi kohesif kristal gas mulia pada suhu nol mutlak dan tekanan nol didapatkan dengan mensubstitusikan persamaan (3-32), (3-34) kedalam persamaan (3-31).

$$E_{\text{tot}}(r) = 2N \varepsilon \left[(12,13) \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - (14,45) \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (3-35)$$

dan pada $r = r_0$, maka ;

$$E_{\text{tot}}(r) = -(2,15)(4N\varepsilon) \quad (3-36)$$

Harga ini sama untuk semua gas mulia, ini adalah perhitungan energi kohesif jika energi kinetiknya nol. Bernades menghitung secara kuantum dan memasukkan sumbangan energi kinetik-kinetiknya dan memberikan koreksi tambahan, dan hasilnya berkurang energi ikatnya dalam prosentase ; 28 % ; 10 % ; 6 % dan 4 % dari persamaan (3-36) untuk Ne, Ar, Kr dan Xe.

3.2.5. Ikatan tingkat dua

Disamping ketiga ikatan utama yang sudah dibicarakan di atas (ikatan ionik, kovalen dan metal) ada jenis ikatan lain yang sering digunakan untuk menjelaskan beberapa sifat-sifat ikatan "berskala kecil" yang lemah contoh ikatan ini adalah ikatan kristal es (H_2O). Mula-mula kita lihat ikatan sebuah molekul air, ikatan

kovalen yang dibentuk tiap-tiap atom oksigen dengan dua atom hidrogen (gambar 3.7a). Pemilikan elektron secara bersama yang dapat dibentuk memungkinkan atom oksigen mempunyai 8 elektron valensi, sehingga sub selnya stabil. Inilah yang menyebabkan atom-atom dalam molekul H_2O sangat kuat ikatannya.



Gambar 3.7. a). Molekul air. b). Susunan molekul air sebagai hasil ikatan hidrogen. Tanda panah menyatakan momen dipol listrik Molekul-molekul. (Omar, 1975, hal. 29).

Tetapi jika yang kita bicarakan ikatan antara molekul air itu sendiri waktu pembentukan es, kita jumpai kekuatan ikatannya menjadi lemah titik lebur air hanya $0\text{ }^{\circ}\text{C}$. Penjelarasannya adalah sebagai berikut, meskipun tiap-tiap molekul H_2O secara keseluruhan muatan listriknya netral, namun sebaran muatan di dalamnya sedemikian rupa sehingga menimbulkan interaksi antara molekul-molekulnya. Dalam pemilikan secara bersama elektron-elektron pada ikatan $H - O$, kenyataannya elektron-elektron benar-benar ditarik lebih kuat menuju arah atom oksigen, akibatnya kumpulan muatan negatif pada atom oksigen dan kumpulan muatan positif pada atom hidrogen (gambar 3.7b). Hasil ini disebut dengan dipole listrik pada molekul air, yang ditunjukkan oleh arah vektor pada gambar. Dan dipole listrik ini mengadakan gaya tarik menarik satu

sama lainnya, dan molekul air mengadakan gaya tarik menarik pula dan membentuk kristal (gambar 3.7). Ikatan yang digambarkan disini disebut juga dengan "ikatan hidrogen yang kadangkala dikenal dengan jembatan hidrogen", sebab disini yang memegang peranan penting adalah inti atom hidrogen yang kecil (protonnya).

Pertanyaan

- 1). Apa fungsi gaya tolak dan gaya tarik antara atom-atom dalam kristal, jelaskan.
- 2). Kenapa dalam keadaan setimbang energi total inti tidak nol, sedangkan jumlah gaya sama dengan nol ?, jelaskan.
- 3). Kenapa terbentuk ion Na dan Cl jika atom Na dan Cl berdekatan ?, jelaskan.
- 4). Titik lebur suatu kristal dapat mencirikan kuat lemahnya ikatan kristal, lalu jelaskan kenapa ?.
- 5). Jelaskan dengan singkat terjadinya ikatan kovalen.
- 6). Logam memiliki daya hantar listrik dan panas yang baik kenapa ?.
- 7). Elektron pada kulit terluar gas mulia terisi penuh oleh elektron, kenapa masih bisa terjadi ikatan antara atom-atom gas mulia ini ?.

Soal

- 1). Untuk kristal ionik satu dimensi satu dimensi yang tersusun dari $- \sim ke + \sim$, dimana ion positif dan negatif saling bergantian dan berjarak satu sama lainnya R , buktikan konstanta Madelungnya $A = 2 \ln 2$.
- 2). Kristal ionik yang tersusun seperti soal (1), buktikan energi dalam keadaan setimbang

$$E(r_0) = - \frac{2 N q^2 \ln 2}{4 \pi \epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{m} \right)$$

- 3). Carilah harga tetapan m untuk kristal NaCl yang panjang sisinya $a = 5,63 \text{ \AA}$, dan $A = 1,75$ serta energi ikatnya sebesar $1,83 \text{ (cal / mol)}$.

4). Gunakan persamaan potensial Lennard Jones, hitunglah perbandingan energi kohesif neon dalam struktur bcc dengan struktur fcc. Diketahui untuk neon struktur bcc

$$\sum_j p_{ij}^{-12} = 9,1142$$

$$\sum_j p_{ij}^{-6} = 12,2533$$

DAFTAR PUSTAKA

- Cullity. B.D, 1956, *Elements of X – Ray Diffraction*, Addison Wesley, London.
- Darmawan, dkk, 1987, *Fisika Zat Padat*, Kurnika Universitas Terbuka, Jakarta.
- Dekker. A. J, 1957, *Solid State Physics*, Prentice-Hall International Inc, 70 Fifth, Avenue, New York.
- Kittel. C. 1986, *Introduction to Solid Physics (Sixth Edition)*, Wiley, New Delhi.
- Nyoman Suwitra, 1989, *Pengantar Fisika Zat Padat*, PPLPTK DIKTI Depdikbud, Jakarta.
- Omar, MA, 1978, *Elementary to Solid State Physics Principle and Aplication*, Addison Wesley Publishing Co, Tokyo.
- Sudirman, R, 1994, *Fisika Zat Padat Pendahuluan*, UGM, Yokyakarta.