

PENENTUAN DISTRIBUSI ELEKTRON DALAM KRISTAL NaCl DAN CsCl DENGAN SINTESA FOURIER DIFRAKSI SINAR-X

Inawati Tanto *, Tatang Mulyana *, Wellem D. Wenur **

* Pusat Penelitian Teknik Nuklir - Badan Tenaga Atom Nasional

** Jurusan Fisika - Institut Teknologi Bandung

ABSTRAK

PENENTUAN DISTRIBUSI ELEKTRON DALAM KRISTAL NaCl DAN CsCl DENGAN SINTESA FOURIER DIFRAKSI SINAR-X. Telah dilakukan penentuan distribusi elektron pada sel satuan kristal *centrosymmetric* NaCl (Fm3m) dan CsCl (Pm3m) dengan sintesa Fourier, berdasarkan data faktor struktur $F(hkl)$ yang diperoleh dari percobaan difraksi sinar-x. Hasil kontur rapat elektron yang diperoleh menunjukkan hasil yang sesuai dengan struktur kristal NaCl dan CsCl yang telah dikenal, yaitu masing-masing kubus pusat muka (face centered cubic-fcc) dan kubus sederhana (simple cubic-sc).

ABSTRACT

DETERMINATION OF ELECTRON DISTRIBUTION ON NaCl AND CsCl USING FOURIER SYNTHESIS OF X-RAY DIFFRACTION. Electron distributions on unit cell crystallite *centrosymmetric* of NaCl (Fm3m) and CsCl (Pm3m) have been determined using Fourier synthesis of structure factor $F(hkl)$ data. These data were obtained from x-ray diffraction experiment. The resulted electron distribution contours show in accordance with crystal structures of NaCl and CsCl, which have facecentered cubic(fcc) and simple cubic(sc) structures.

PENDAHULUAN

Representasi rapat elektron dengan deret Fourier dalam difraksi sinar-x diprakarsai oleh W.H Bragg pada tahun 1915 berdasarkan pada sifat keberkalaan yang dimiliki oleh atom-atom di dalam kristal. Metode ini dikenal sebagai sintesa Fourier. Gagasan ini kemudian dikembangkan oleh Ewald pada tahun 1921, W. Duane, dan A.H Compton pada tahun 1924. Aplikasi dari perumusan ini pertama kali dikerjakan oleh R.J Havinghurst dan J.A Bearden [1] pada beberapa kristal sederhana, kemudian Robertson dkk pada sistem kristal organik. Penerapan pada sistem kristal yang lebih kompleks baru dapat dilakukan pada tahun 1934 oleh A.L Patterson dkk [2] yaitu sejak dikemukakannya representasi Fourier bentuk kedua yang dapat memecahkan persoalan fasa dari faktor struktur. Representasi Fourier bentuk kedua ini kemudian dikenal sebagai fungsi Patterson.

Fungsi Patterson ini, bersama-sama dengan metode sintesa Fourier lainnya seperti metode langsung (Direct Method of Phase Determination) ditunjang oleh sarana komputasi yang canggih, banyak memberikan kontribusi dalam kristalografi dengan sinar x.

Tujuan penelitian ini adalah menentukan distribusi elektron dalam sel satuan kristal ber-

struktur sederhana dengan metode sintesa Fourier melalui percobaan difraksi sinar-x.

Sebagai tahap awal dipilih kristal NaCl dan CsCl karena kristal ini memiliki struktur sederhana dan data pustakanya sudah lengkap. Kristal NaCl/CsCl memiliki tipe sel satuan kubik dengan grup ruang $m\bar{3}m$ dan bersifat *centrosymmetric*. Representasi Fourier untuk rapat elektron dalam sel satuan dari kristal ini, bentuknya sederhana sehingga perhitungan distribusi elektron terbebas dari masalah fasa. Dengan demikian hasil percobaan dan analisis datanya mudah untuk dievaluasi.

Perhitungan rapat elektron ini dilakukan dengan bantuan komputer. Rapat elektron hasil perhitungan ini disajikan dalam bentuk kontur pada bidang sel satuan kristal.

TEORI

Hamburan oleh sel satuan adalah kombinasi dari hamburan atom-atom yang menempati sel satuan. Besaran yang merepresentasikan hamburan oleh sel satuan adalah faktor struktur $F(hkl)$ yang dihitung dengan persamaan sebagai berikut :

$$|F(hkl)|^2 = \frac{I}{KLPj \exp(-2B \sin^2 \theta / \lambda^2)} \quad (1)$$

I adalah intensitas

LP adalah faktor Lorentz-Polarisasi

B adalah faktor suhu Debye-Waller

λ adalah panjang gelombang sinar-x

j adalah faktor multiplisitas

K adalah faktor skala

θ adalah sudut Bragg

Faktor skala K dan faktor suhu Debye-Waller B dapat ditentukan dengan :

$$\ln (I/I_c) = \ln K - 2 B (\sin \theta/\lambda)^2 \quad (2)$$

$I_c = LPj |F_c(hkl)|^2$ dan $F_c(hkl)$ adalah faktor struktur yang diperoleh dari teori.

Ungkapan untuk rapat elektron dapat dituliskan sebagai berikut :

$$\rho [x,y,z] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l \pm |F(hkl)| \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \cos 2\pi lz \quad (3)$$

dengan $V_c = a^3$ adalah volume sel satuan dimana a adalah parameter kisi. Dengan menggunakan persamaan (3) di atas dapat ditentukan rapat elektron di setiap tempat di dalam sel satuan. Namun demikian perhitungan ini tidak mudah untuk dilaksanakan karena menyangkut permasalahan 3 dimensi.

Prinsip dasar perhitungan dari metode ini adalah menyelesaikan perhitungan 3 dimensi menjadi perhitungan 2 dimensi. Selanjutnya perhitungan 2 dimensi ini diselesaikan melalui perhitungan 1 dimensi. Hal ini dilakukan dengan membagi-bagi sel satuan atas bidang-bidang. Kemudian rapat elektron pada bidang-bidang inilah yang dihitung. Selanjutnya setiap bidang dibagi-bagi atas rusuk-rusuk. Rusuk-rusuk inilah yang dihitung rapat elektronnya.

Ungkapan untuk rapat elektron pada bidang [x,y,0] adalah :

$$\rho [x,y,0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi hx \cos 2\pi ky \quad (4)$$

Rapat elektron dalam arah yang sejajar dengan sumbu x dengan harga y dari 0 sampai dengan 1 dengan selang 0,1 adalah sebagai berikut

$$\rho [x,0,0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi hx \quad (5a)$$

$$\rho [x,(0,1),0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi hx \cos 2\pi k(0,1) \quad (5b)$$

$$\rho [x,1,0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi hx \quad (5c)$$

Jadi rapat elektron sepanjang sumbu x dari 0 sampai dengan 1 dengan selang 0,1 adalah sebagai berikut :

$$\rho [0,0,0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \quad (6a)$$

$$\rho [0,(0,1),0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \cos 2\pi h(0,1) \quad (6b)$$

$$\rho [1,0,0] = (8/V_c) \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)| \quad (6c)$$

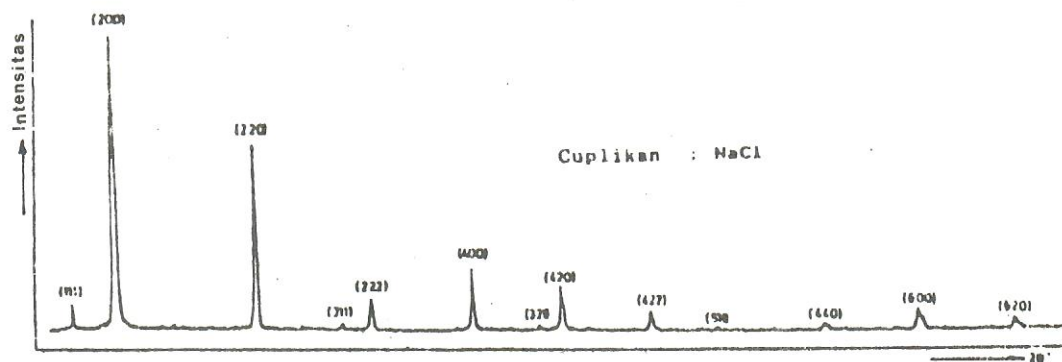
Rapat elektron dengan arah yang sejajar dan sepanjang sumbu y dapat diperoleh dengan cara seperti di atas. Secara teoritis, penjumlahan terhadap (hkl) dilakukan dari 0 sampai ∞ , namun pada kenyataannya perhitungan sintesa Fourier ini tidak dapat dilakukan sampai dengan (hkl) = ∞ , tetapi hanya sebanyak jumlah bidang (puncak) yang didapat dari percobaan.

PERCOBAAN DAN ANALISIS DATA

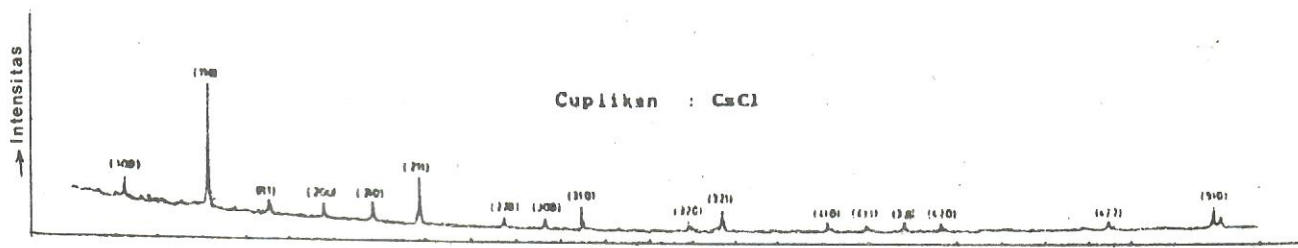
Cuplikan yang digunakan dalam penelitian ini berupa serbuk dari NaCl dan CsCl. Peralatan yang digunakan adalah difraktometer sinar-x buatan Szimadzu tipe XD-5A, sebagai sumber sasaran dipergunakan tembaga yang memberikan panjang gelombang sebesar 1,5405 Angstrom.

Pola difraksi yang diperoleh untuk NaCl dan CsCl diperlihatkan pada Gambar 1 dan 2. Sedangkan perhitungan faktor struktur untuk masing-masing cuplikan NaCl dan CsCl diperlihatkan pada Tabel 1 dan 2.

Perhitungan rapat elektron untuk masing-masing cuplikan NaCl dan CsCl pada bidang [x,y,0] dan [x,y,(0,5)] dengan selang 0,05 diper-



Gambar 1. Pola difraksi NaCl



Gambar 2. Pola difraksi CsCl

Tabel 1. Perhitungan faktor struktur NaCl

No	(hkl)	q	j	LP	Ic	Ir	F	Fc	(sinq/l)
1	111	13,70	8	32,81	5435	5,67	4,43	4,55	0,0236
2	200	15,87	6	23,96	62191	100,00	25,12	20,80	0,0315
3	220	22,74	12	10,82	32221	33,34	15,26	15,75	0,0630
4	311	26,95	24	7,36	1017	1,42	2,70	2,40	0,0866
5	222	28,25	8	6,61	9355	10,00	13,07	13,30	0,0944
6	400	33,13	6	4,65	3751	6,42	14,45	11,60	0,1259
7	331	36,55	24	3,80	462	0,14	1,18	2,25	0,1495
8	420	37,67	24	3,60	8988	9,17	9,81	10,20	0,1574
9	422	42,03	24	3,04	5836	2,33	5,39	8,95	0,1889
10	511	45,23	24	2,82	321	0,32	2,07	2,10	0,2124
11	440	50,63	12	2,74	1694	0,83	4,79	7,19	0,2518
12	600	55,08	6	2,91	781	2,08	10,40	6,69	0,2833
13	620	59,81	24	3,31	2890	1,74	4,46	6,03	0,3168

Faktor skala, $K = 0,2301$

Faktor suhu, $B = 3,37$

Reliabilitas, $R = 0,1865$

Tabel 2. Perhitungan faktor struktur CsCl

No	(hkl)	q	j	LP	I	I	F	F	(sinq/l)
1	100	10,73	6	54,79	407342	15,74	16,7	33,9	0,01
2	110	15,28	12	25,99	1104217	100,00	42,3	54,6	0,03
3	111	18,86	8	16,44	136389	19,64	28,3	28,1	0,04
4	200	21,89	6	11,79	198014	28,21	45,4	44,7	0,06
5	210	24,67	24	9,00	196952	35,71	28,6	24,3	0,07
6	211	27,22	24	7,19	399450	57,14	39,7	37,4	0,09
7	220	31,86	12	5,05	124999	17,85	36,0	32,7	0,12
8	221	34,04	24	3,50	77300	16,43	25,7	18,4	0,13
9	310	36,18	24	3,88	172250	19,29	29,1	28,6	0,15
10	311	38,26	24	3,50	55636	10,71	22,3	16,0	0,16
11	222	40,33	8	3,21	43020	7,86	33,9	25,0	0,18
12	320	42,34	24	3,01	42953	6,07	17,4	14,1	0,19
13	321	44,33	48	2,86	214489	30,36	27,7	22,4	0,21
14	400	48,32	6	2,73	23178	3,54	26,4	19,8	0,24
15	410	50,36	24	2,73	33211	4,29	14,2	11,2	0,25
16	411	52,42	24	2,78	88000	8,21	19,1	18,0	0,26
17	331	54,52	24	2,87	29529	2,61	10,4	10,0	0,28
18	420	56,68	24	3,02	86311	5,71	14,7	16,1	0,29
19	421	58,89	48	3,21	62322	5,00	9,3	9,0	0,31
20	332	61,20	24	3,48	93855	0,57	4,2	14,5	0,32
21	422	66,26	24	4,32	111519	8,57	13,9	13,1	0,35

Faktor skala, K = 0,0001
 Faktor suhu, B = 1,3367
 Reliabilitas, R = 0,1897

Tabel 3. Rapat elektron hasil perhitungan untuk NaCl pada bidang [x,y,0] dengan selang 0,05

17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17
13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13
5	3	1	1	1	0	1	1	0	3	5	3	0	1	1	0	1	1	3	5	
3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3
3	2	1	0	0	-1	0	0	0	2	4	2	0	0	0	-1	0	0	1	2	3
4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4
4	2	0	0	0	-1	0	0	1	2	3	2	1	0	0	-1	0	0	0	2	4
3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3
5	3	0	1	1	0	1	1	1	3	5	3	1	1	1	0	1	1	0	3	5
11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11
15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15
11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11
5	3	0	1	1	0	1	1	1	3	5	3	1	1	1	0	1	1	0	3	5
3	2	0	1	0	0	0	1	1	3	5	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3
4	2	0	0	0	-1	0	0	1	2	3	2	1	0	0	-1	0	0	0	2	4
4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4
3	2	1	0	0	-1	0	0	0	2	4	2	0	0	0	-1	0	0	1	2	3
3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3
5	3	1	1	1	0	1	1	0	3	5	3	0	1	1	0	1	1	1	3	5
13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13
17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17

Tabel 4. Rapat elektron hasil perhitungan untuk NaCl pada bidang [x,y,(0,5)] dengan selang 0,05

15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15
11	8	3	2	2	2	2	2	9	13	9	3	2	2	2	2	2	2	3	8	11
5	3	1	1	0	0	1	1	1	3	6	3	1	1	1	0	0	1	1	3	5
3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3
3	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	4	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	3
4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4
4	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	3	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	4
3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3
6	3	1	1	1	0	0	1	1	3	5	3	1	1	0	0	1	1	1	3	6
13	9	3	2	2	2	2	2	7	8	11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13
17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17
13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13
3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3
4	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	3	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	4
4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4	2	0	0	-1	-1	-1	0	0	2	4
3	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	4	2	1	0	0	-1	0	0	1	2	3
3	2	1	1	0	0	0	1	0	2	3	2	0	1	0	0	0	1	1	2	3
5	3	1	1	0	0	1	1	1	3	6	3	1	1	1	0	0	1	1	3	5
11	8	3	2	2	2	2	2	3	9	13	9	3	2	2	2	2	2	3	8	11
15	11	5	3	3	4	4	3	5	13	17	13	5	3	4	4	3	3	5	11	15

Tabel 5. Rapat elektron hasil perhitungan untuk CsCl pada bidang [x,y,0] dengan selang 0,05

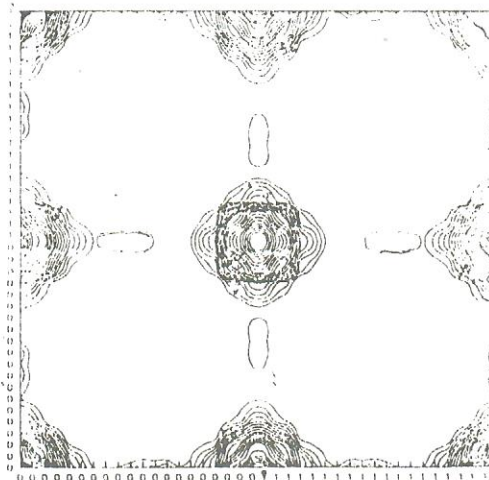
322	263	135	36	14	33	43	34	32	47	58	47	32	34	43	33	14	36	135	263	322
263	211	101	20	6	27	35	25	22	36	46	36	22	25	35	27	6	20	101	211	263
135	101	33-11	-6	15	18	5	1	13	22	13	1	5	18	15	-6-11	33	101	135		
36	20	-11-23-10	6	4	-8-11	0	7	0-11	-8	4	6-10-23	-11	20	36						
14	6	-6-10	-2	5	0	-8	-7	3	9	3	-7	-8	0	5	-2-10	-6	6	14		
33	27	15	6	5	5	2	0	2	9	12	9	2	0	2	5	5	6	15	27	33
43	35	18	4	0	2	5	5	6	7	7	6	5	5	2	0	4	18	35	43	
34	25	5	-8	-8	0	5	5	2	1	1	1	2	5	5	0	-8	-8	5	25	34
32	22	1-11	-7	2	6	2	0	3	5	3	0	2	6	2	-7-11	1	22	32		
47	36	13	0	3	9	7	1	3	13	19	13	3	1	7	9	3	0	13	36	47
58	46	22	7	9	12	7	1	5	19	27	19	5	1	7	12	9	7	22	46	58
47	36	13	0	3	9	7	1	3	13	19	13	3	1	7	9	3	0	13	36	47
32	22	1-11	-7	2	6	2	0	3	5	3	0	2	6	2	-7-11	1	22	32		
34	25	5	-8	-8	0	5	5	2	1	1	1	2	5	5	0	-8	-8	5	25	34
43	35	18	4	0	2	5	5	6	7	7	6	5	5	2	0	4	18	35	43	
33	27	15	6	5	5	2	0	2	9	12	9	2	0	2	5	5	6	15	27	33
14	6	-6-10	-2	5	0	-8	-7	3	9	3	-7	-8	0	5	-2-10	-6	6	14		
36	20	-11-23-10	6	4	-8-11	0	7	0-11	-8	4	6-10-23	-11	20	36						
135	101	33-11	-6	15	18	5	1	13	22	13	1	5	18	15	-6-11	33	101	135		
263	211	101	20	6	27	35	25	22	36	46	36	22	25	35	27	6	20	101	211	263
322	263	135	36	14	33	43	34	32	47	58	47	32	34	43	33	14	36	135	263	322

Tabel 6. Rapat elektron hasil perhitungan untuk CsCl pada bidang $[x,y,(0,5)]$ dengan selang 0,05

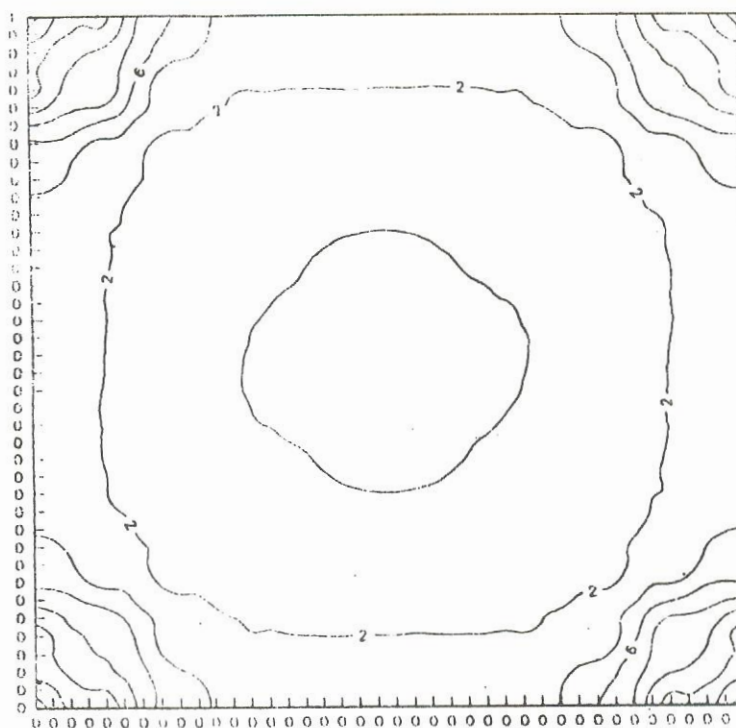
58	46	22	7	9	12	7	1	5	19	27	19	5	1	7	12	9	7	22	46	58
46	35	15	4	7	10	4	-3	1	15	23	15	1	-3	4	10	7	4	15	35	46
22	15	4	-1	3	5	-2	-9	-4	8	15	8	-4	-9	-2	5	3	-1	4	15	22
7	4	-1	-1	2	1	-5	-10	-5	7	13	7	-5	-10	-5	1	2	-1	-1	4	7
9	7	3	2	2	0	-4	-6	0	10	15	10	0	-5	-4	0	2	2	3	7	9
12	10	5	1	0	0	-2	-2	2	8	12	8	2	-2	-2	0	0	1	5	10	12
7	4	-2	-5	-4	-2	-2	-3	-1	2	4	2	-1	-3	-2	-2	-4	-5	-2	4	7
1	-3	-9	-10	-6	-2	-3	-5	-3	2	5	2	-3	-5	-3	-2	-6	-10	-9	-3	1
5	1	-4	-5	0	2	-1	-3	4	18	25	18	4	-3	-1	2	0	-5	-4	1	5
19	15	8	7	10	8	2	2	18	42	53	42	18	2	2	8	10	7	8	15	19
27	23	15	13	15	12	4	5	25	53	67	53	25	5	4	12	15	13	15	23	27
19	15	8	7	10	8	2	2	18	42	53	42	18	2	2	8	10	7	8	15	19
5	1	-4	-5	0	2	-1	-3	4	18	25	18	4	-3	-1	2	0	-5	-4	1	5
1	-3	-9	-10	-6	-2	-3	-5	-3	2	5	2	-3	-5	-3	-2	-6	-10	-9	-3	1
7	4	-2	-5	-4	-2	-2	-3	-1	2	4	2	-1	-3	-2	-2	-4	-5	-2	4	7
12	10	5	1	0	0	-2	-2	2	8	12	8	2	-2	-2	0	0	1	5	10	12
9	7	3	2	2	0	-4	-6	0	10	15	10	0	-6	-4	0	2	2	3	7	9
7	4	-1	-1	2	1	-5	-10	-5	7	13	7	-5	-10	-5	1	2	-1	-1	4	7
22	15	4	-1	3	5	-2	-9	-4	8	15	8	-4	-9	-2	5	3	-1	4	15	22
46	35	15	4	7	10	4	-3	1	15	23	15	1	-3	4	10	7	4	15	35	46
58	46	22	7	9	12	7	1	5	19	27	19	5	1	7	12	9	7	22	46	58

lihatkan pada Tabel 3 sampai dengan Tabel 6. Sebagai visualisasi dari hasil perhitungan rapat elektron dibuat kontur rapat elektron untuk sel satuan NaCl dan CsCl. Dari kontur ini dapat

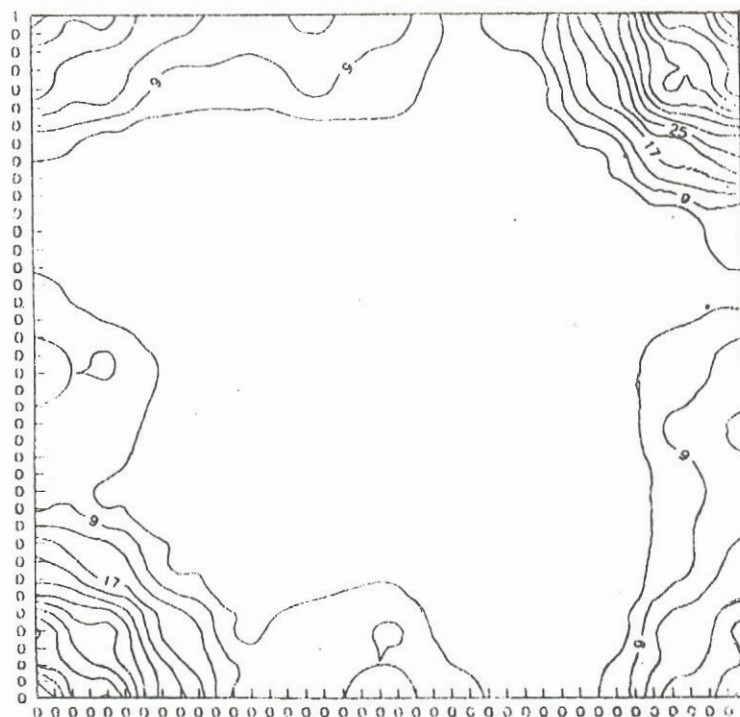
diperkirakan pola distribusi elektron di dalam sel satuan kristal NaCl dan CsCl. Kontur dibuat dengan Topo Contouring Program (Paket Program). Kontur distribusi elektron untuk cup-



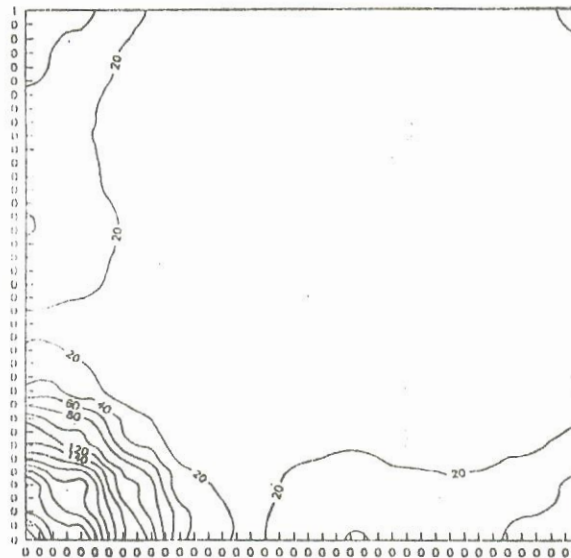
Gambar 3. Kontur distribusi elektron NaCl pada bidang $[x,y,0]$



Gambar 4. Kontur distribusi elektron NaCl pada 1/4 bagian bidang [x,y,(0,5)]



Gambar 5. Kontur distribusi elektron CsCl pada 1/4 bagian bidang [x,y,(0,5)]



Gamabr 6. Kontur distribusi elektron CsCl pada 1/4 bagian bidang [x,y,0]

likan NaCl dan CsCl untuk masing-masing bidang [x,y,0] dan [x,y,(0,5)] diperlihatkan pada Gambar 3 sampai dengan Gambar 6.

KESIMPULAN

Metode sintesa Fourier merupakan salah satu metode yang mempunyai kontribusi yang besar dalam penentuan struktur kristal dengan difraksi sinar-x. Walaupun dengan peralatan dan sarana komputasi yang masih sederhana, telah ditunjukkan di sini bahwa dengan metode ini, data percobaan yaitu intensitas dan sudut Bragg yang diperoleh dari difraksi sinar-x pada cuplikan kristal NaCl dan CsCl dapat memberikan informasi tentang distribusi elektron (dalam hal ini kerapatannya) pada sel satuan kristal tersebut.

Kontur rapat elektron yang diperoleh menunjukkan hasil yang sesuai dengan struktur kristal NaCl dan CsCl yang telah dikenal yaitu masing-masing kubus pusat muka (face centered cubic-fcc) dan kubus sederhana (simple cubic-sc).

Untuk menentukan distribusi elektron dengan sintesa Fourier difraksi sinar-x, diperlukan data faktor struktur $|F(hkl)|$ dan fasanya $\phi(hkl)$. Untuk kristal yang bersifat *centrosymmetric*, fasa $\phi(hkl)$ dapat dieliminasi, sedangkan

faktor struktur $|F(hkl)|$ dapat diperoleh dari besaran percobaan yaitu intensitas berkas yang terdifraksi dan sudut Bragg.

Cara yang dilakukan di sini, pada dasarnya dapat diterapkan pada beberapa kristal lain yang *centrosymmetric* dengan grup ruang $m\bar{3}m$. Pada kristal-kristal yang strukturnya sederhana ini, penggunaan fungsi Patterson tidak perlu dilakukan karena bentuk representasi rapat elektronnya dapat dikatakan terbebas dari persoalan fasa.

Dari hasil percobaan telah dilakukan perhitungan faktor struktur $|F(hkl)|$ dengan reliabilitas R di antara 16% dan 18%, sedangkan kriteria percobaan memberikan batas maksimum sebesar 5%. Hasil ini belum memadai sebab pengaruhnya terhadap rapat elektron masih cukup besar. Beberapa sumber kesalahan adalah :

- Pengukuran intensitas dan sudut Bragg tidak dapat dilakukan berulang kali sedemikian rupa sehingga konfigurasi instrumen dan preparasi cuplikan memberikan hasil yang optimal.
- Pengaruh impuritas dari cuplikan (tidak digunakan kristal dengan kadar kemurnian yang tinggi karena tidak tersedia di pasaran).
- Pengaruh cacat kristal dan faktor ketelitian alat tidak diperhitungkan.

DAFTAR PUSTAKA

1. R.J. Harvinghurst and J.A. Bearden, Phys. Rev. 29 (1927) 1.
2. A.L. Patterson, Phys. Rev. 46 (1934) 372.
3. International Tables for X-Ray Crystallography, Kynoch Press, England (1968).
4. D.W.J. Cruickshank, Fourier Synthesis and Structure Factors, Section 6 (1972).

DISKUSI

Gunanjar:

Penentuan ini sangat penting dalam membantu kontrol kualitas seperti di PEBN tentang kemurnian bahan bakar Uranium Silisida yang mempunyai banyak fasa. Kita mengharapkan bahan bakar U-silisida murni yang hanya terdiri dari 1 fasa U_3Si_2 . Mohon hal ini bisa dikembangkan ke arah tersebut. Terimakasih.

Inawati Tanto:

Fasa di sini maksudnya adalah besaran sudut. Fasa ada kaitannya dengan faktor struktur, yang merupakan bilangan kompleks.

$F = |F(hkl)| e^{i\varphi}$, φ adalah fasa.

Engkir Sukirman:

Apakah kira-kira metode ini dapat diterapkan untuk bahan yang sama sekali belum diketahui.

Inawati Tanto:

Dapat, kesulitan untuk struktur yang rumit ialah menghitung faktor fasanya yang membutuhkan perhitungan yang rumit.

Margono:

Apakah ada metode lain yang bisa menemukan struktur kristal, karena percobaan ini nampaknya belum menjawab persoalan dan R didapat terlalu jauh menyimpang.

Inawati Tanto:

Metode lain belum ada. R terlalu jauh menyimpang karena impuritas cuplikannya dan pengukuran hanya dilakukan satu kali.