

## ANALISIS GETARAN MOLEKUL DAN ENERGI KOHESIF NaCl DENGAN TEKNIK DIFRAKSI

Mohtar, Gunawan, Inawati Tanto \*).

Pusat Penelitian Sains Materi - Badan Tenaga Atom Nasional

\*) Pusat Penelitian Teknik Nuklir - Badan Tenaga Atom Nasional.

### ABSTRAK

ANALISIS GETARAN MOLEKUL DAN ENERGI KOHESIF NaCl DENGAN TEKNIK DIFRAKSI. Telah dilakukan analisis getaran molekul dan energi kohesif NaCl dari struktur kristal dan parameter kisi, dengan metode difraksi sinar x dan difraksi neutron. Dari analisis struktur kristal dan parameter kisi NaCl, ditentukan potensial minimum, dengan sinar x,  $E_{ox} = -7,97$  eV, dengan neutron,  $E_{on} = -8,01$  eV. Dengan model massa pegas dihitung tetapan pegas, dengan sinar x,  $f_{nx} = 145,2$  N/m, dengan neutron  $k_n = 147,57$  N/m. Frekuensi alami dengan sinar x,  $f_{nx} = 1,26 \cdot 10^{13}$  Hz, dengan neutron,  $f_{nn} = 1,27 \cdot 10^{13}$  Hz. Energi kohesif dengan sinar x,  $E_{koh-x} = -3,22$  eV, dengan neutron,  $E_{koh-n} = -3,24$  eV. Hasil frekuensi alami dengan sinar x dan neutron tersebut masing-masing menyimpang 1,6 % dan 2,4 % terhadap teori yakni  $1,24 \cdot 10^{13}$  Hz. Harga frekuensi alami getaran molekul NaCl, untuk gelombang elektro-magnetik adalah daerah infra merah, sebagaimana kebanyakan getaran molekul. Hasil analisis energi kohesif tersebut jika dibandingkan dengan pengukuran menggunakan kalor penguapan, energi disosiasi dan energi tukar elektron ( $E_{koh} = -3,28$  eV), berbeda sebesar 1,8 % dengan sinar x dan 1,2 % dengan neutron.

### ABSTRACT

THE ANALYSIS OF MOLECULE VIBRATION AND COHESIVE ENERGY OF NaCl BY DIFFRACTION METHOD. The analysis of the molecule vibration of NaCl, by crystallite structure and lattice spacing, has been carried out using x-ray and neutron diffraction method. From the crystallite structure and lattice spacing analysis, can be determined minimum potential, by x-ray,  $E_{ox} = -7.97$  eV, by neutron,  $E_{on} = -8.01$  eV. With the mass-spring model, a result may be obtained; spring constant, by x-ray,  $k_x = 145.2$  N/m, by neutron,  $k_n = 147.57$  N/m. Natural frequency, by x-ray,  $f_{nx} = 1.26 \cdot 10^{13}$  Hz, by neutron,  $f_{nn} = 1.27 \cdot 10^{13}$  Hz. The result of that natural frequency, differs 1.6 % by x-ray, and 2.4 % by neutron, being compared with the theory, that is  $1.24 \cdot 10^{13}$  Hz. The natural frequency of the NaCl molecule vibration corresponding to the electromagnetic wave motion, is located in the infra-red region, conforming to conventional molecule vibration. Cohesive Energy, by x-ray,  $E_{koh-x} = -3.22$  eV, by neutron,  $E_{koh-n} = -3.24$  eV. The direct measurement of the cohesive energy of NaCl with evaporation calor, dissociation energy and electron exchange was  $E_{koh} = -3.28$  eV, with the differ 1.8 % by x-ray, and 1.2 % by neutron.

### PENDAHULUAN

Dalam membentuk ikatan, molekul senantiasa bergetar pada tempat keseimbangannya, karena adanya gaya pulih dari bentuk potensial ikatannya yang tersusun dari gaya tarik dan gaya tolak [1]. Khususnya untuk senyawa organik frekuensi getaran ini digunakan sebagai salah satu sarana, identifikasi gugus-gugus yang dikandung oleh senyawa tersebut, dengan teknik spektroskopi serapan infra merah [2].

Teknik difraksi memiliki kemampuan yang baik untuk penentuan struktur dan parameter kisi suatu kristal. Sehingga dengan kedua data tersebut dapat ditentukan jarak keseimbangan dari sebuah ikatan yang membentuk kristal. Untuk kristal ionik, sebagai contoh dalam penelitian ini

adalah NaCl, memiliki ikatan dari gaya tarik Coulomb dan gaya tolak dari prinsip eksklusi. Potensial Coulomb untuk NaCl, dari interaksi antara sebuah ion dengan ion yang lain adalah berbentuk:

$$E_{coul} = -\alpha \left( \frac{e^2}{4\pi \epsilon_0 r} \right) \quad (1)$$

Dengan  $\alpha = 1,748$  = tetapan Madelung,  $e$  = muatan elektron,  $\epsilon_0$  = permitivitas hampa, dan  $r$  jarak ion dengan tetangga terdekatnya. Sedangkan potensial tolak berbentuk:

$$E_{tolak} = B/r^9 \quad (2)$$

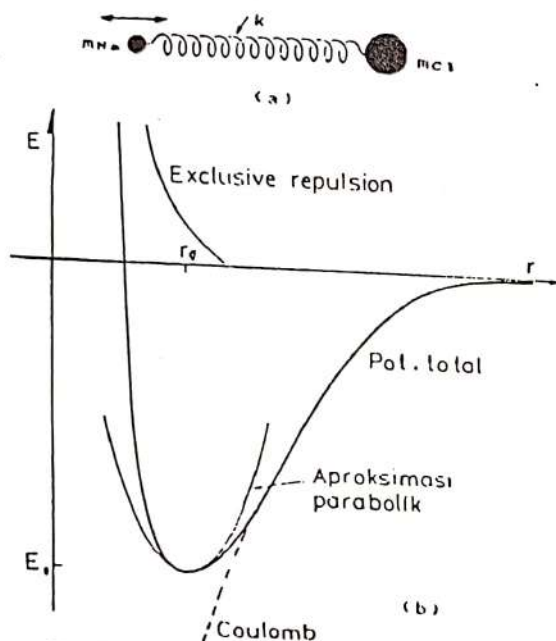
Pangkat 9 ditentukan dari kompresibilitas kristal ionik [1] dan  $B$  adalah tetapan yang ditentukan dari syarat batas keseimbangan potensial

potensial total. Untuk jarak keseimbangan  $r_0$ , maka :

$$B = (1,748 c^2/44\pi \epsilon_0) r_0^8 \quad (3)$$

Dari sini potensial total bisa ditentukan dan energi potensial minimum  $E_0$  bisa dihitung.

Sebagai pendekatan untuk analisis getaran digunakan model pegas-massa, dimana massa ion  $Na^+$  dan  $Cl^-$  terikat oleh pegas dengan kekakuan  $k$  (gambar 1.a.), sehingga potensial pendekatannya berbentuk parabola (gambar 1.b.).



Gambar 1.  
(a) Model pendekatan ikatan  $Na^+ - Cl^-$   
(b) Potensial ikatan NaCl

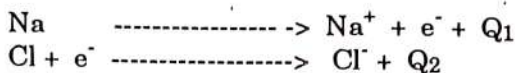
Potensial eksak dari kondisi ini tidak simetri pada sebelah menyebelah jarak keseimbangan, makin jauh dari titik keseimbangan, kesalahan makin besar. Untuk itu tetapan keseimbangan dihitung sebagai berikut :

$$k = \lim_{r \rightarrow r_0} \frac{-2(E - E_0)}{(r - r_0)^2} = \frac{\alpha e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{a}{r_0^3} \right) \quad (5)$$

Massa ion  $Na^+$  dan  $Cl^-$  tidak sama, maka NaCl bergetar pada pusat massanya, sehingga perhitungan frekuensi alami getarannya menggunakan massa tereduksi  $m^*$ , yang besarnya,  $m^* = (m_{Na} \cdot m_{Cl}) / (m_{Na} + m_{Cl})$ . Dari model tersebut frekuensi alami getarannya adalah :

$$f_n = \frac{1}{2\pi} (k/m^*)^{1/2} \quad (6)$$

Dalam pembentukan ikatan ionik NaCl, terlihat juga energi transfer atom-ion sebagai berikut:



Dengan:

$$Q_1 = \text{energi ionisasi Na} = + 5,14 \text{ eV}$$

$$Q_2 = \text{afinitas elektron Cl} = - 3,61 \text{ eV}$$

$$E_{\text{transfer}} = + 1,53 \text{ eV.}$$

$$\text{Energi kohesif Na Cl} = (E_0 + E_{\text{transfer}}) / 2$$

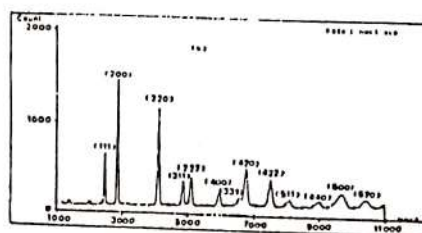
Pengukuran dengan kalor penguapan, energi disosiasi dan energi tukar elektron, didapat  $E_{\text{kohesif}} = - 3,26 \text{ eV}$  [3]

## BAHAN DAN TATA KERJA

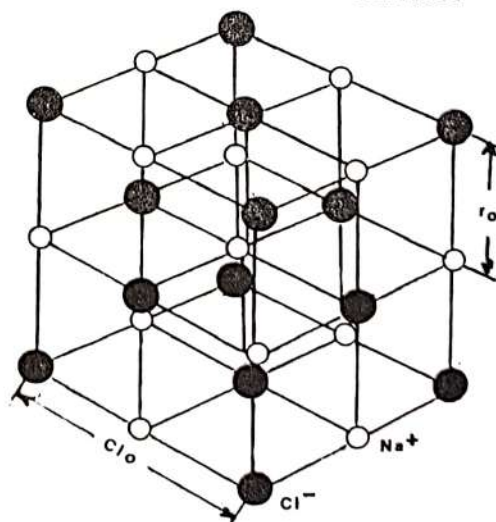
Bahan cuplikan adalah NaCl pa ( pure analysis), berupa serbuk, disiapkan untuk teknik difraksi sinar x dan difraksi neutron. Difraksi sinar x, sebagai sumber digunakan radiasi sinar x dari Cuka  $\alpha$ , pada tegangan 30 kV, arus 40 mA. Difraksi neutron dilakukan pada daya 13,3 MW, panjang gelombang 1,412 angstrom, cacah batas 60.000, sapuan sudut  $10^\circ - 110^\circ$  dengan langkah  $0,1^\circ$ .

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Pola difraksi neutron, dan struktur kristal NaCl ditunjukkan pada gambar 2 dan 3.



Gambar 2. Pola difraksi neutron NaCl



Gambar 3. Selsatuan struktur NaCl

Dari difraksi sinar x dan neutron didapat hasil seperti yang terlihat pada tabel 1 dan 2.

Tabel 1. Hasil analisis difraksi sinar x NaCl

2θ	hkl	θ	cos <sup>2</sup> (θ)	angstrom
27,40	111	13,70	0,944	5,6330
31,74	200	15,87	0,925	5,6334
45,46	220	22,73	0,851	5,6383
53,90	311	26,95	0,794	5,6367
56,50	222	28,25	0,776	5,6372
66,26	400	33,13	0,703	5,6373
73,12	331	36,56	0,645	5,6365
75,34	420	37,67	0,626	5,6367
84,06	422	42,03	0,552	5,6360
90,46	514	45,23	0,496	5,6376
101,26	440	50,63	0,402	5,6362
110,16	600	55,08	0,327	5,6363
119,62	620	59,81	0,253	5,6359

Analisis hasil tersebut menunjukkan bahwa struktur NaCl adalah kubus berpusat muka. Parameter kisi terbaik dihitung dengan ekstrapolasi parameter kisi terhadap Cos<sup>2</sup>(θ) untuk Cos<sup>2</sup>(θ) = 0 menggunakan kuadrat terkecil.

Dengan sinar x, parameter kisi terbaik didapat sebesar a<sub>0</sub> = 5,6375 angstrom. Deviasi standar = 0,0015 angstrom, dan tangen arah ekstrapolasi = -0,0019.

Tabel 2. Hasil analisis difraksi neutron NaCl

2θ	hkl	θ	cos <sup>2</sup> (θ)	angstrom
24,80	111	12,40	0,9539	5,6946
28,80	200	14,40	0,9381	5,6778
41,20	220	20,60	0,8762	5,6755
48,60	311	24,30	0,8306	5,6900
51,00	222	25,50	0,8147	5,6808
59,80	400	29,90	0,7515	5,6651
65,60	331	32,80	0,7065	5,6809
67,80	420	33,90	0,6889	5,6609
75,60	422	37,80	0,6243	5,6431
81,00	514	40,50	0,5782	5,6486
89,80	440	44,90	0,5017	5,6579
96,66	600	48,50	0,4425	5,6734
104,00	620	52,00	0,3790	5,5951

Dengan difraksi neutron parameter kisi terbaik didapat sebesar a<sub>0</sub> = 5,5924 angstrom, deviasi

standar = 0,026 angstrom, dan koefisien arah ekstrapolasi = 0,1037.

Dari perhitungan data di atas, didapat hasil seperti tertera pada tabel 3.

Tabel 3. Hasil analisis getaran NaCl dengan teknik difraksi

	r <sub>0</sub> (angs.)	B (d.m <sup>9</sup> )	E <sub>0</sub> (eV)	k (N/m)	f <sub>n</sub> (Hz)
sinar-x	2,8187	1,46 . 10 <sup>-105</sup>	-7,97	145,2	1,26 . 10 <sup>13</sup>
neu- tron	2,7962	1,37 . 10 <sup>-105</sup>	-8,01	147,6	1,27 . 10 <sup>13</sup>

V.KONDRATYEV [3] menghitung secara teoritis mendapatkan f<sub>n</sub> = 1,24 .10<sup>13</sup> Hz. Jadi hasil di atas berbeda masing-masing 1,6 % dengan sinar x dan 2,4 % dengan neutron.

Dengan E" = -3,26 eV = energi kohesif pengukuran dengan kalor penguapan energi disosiasi dan energi tukar elektron. (lihat tabel 4).

Tabel 4. Hasil analisis energi kohesif NaCl dengan teknik difraksi

	E <sub>koh</sub>	$\frac{E - E_{koh}}{E} .100\%$
sinar-x	-3,22 eV	1,8 %
neutron	-3,24 eV	1,2 %

## KESIMPULAN

Frekuensi alami getaran NaCl ditentukan dengan teknik difraksi sinar x adalah 1,26.10<sup>13</sup> Hz, dan dengan neutron adalah 1,27.10<sup>13</sup> Hz. Untuk gelombang elektro-magnetik harga ini ada di daerah infra merah, sebagaimana kebanyakan getaran molekul. Energi kohesif NaCl diukur dengan teknik difraksi sinar x adalah - 3,22 eV dan dengan neutron adalah - 3,24 eV.

Teknik difraksi sinar x dan neutron cukup baik untuk analisis getaran molekul dan energi kohesif, tampak dari penyimpangannya, masing-masing 1,6 % dan 2,4 % terhadap perhitungan teoritis getaran molekulnya serta 1,6 % dan 1,2 % untuk perbedaan pengukuran energi kohesif dengan metode lain.

## **PUSTAKA**

1. BEISERA., THE HOW LONG, Konsep Fisika Modern, Penerbit ERLANGGA, Jakarta, 1983.
2. SURJADI, Penentuan Struktur Senyawa Organik, Fak. Farmasi UGM, Yogyakarta, 1983.
3. KONDRATYEV. V., The Structure of Atoms and Molecule, Foreign Languages Publishing House, Moscow.