

## ANALISIS FAKTOR HAMBURAN ATOM HIDROGEN

Inawati Tanto \*), Putranto Ilham \*), Mohtar \*\*)

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

\*\*\*) Pusat Penelitian Sains Materi - Badan Tenaga Atom Nasional

### ABSTRAK

ANALISIS FAKTOR HAMBURAN ATOM HIDROGEN. Telah dilakukan perhitungan faktor hamburan atom hidrogen secara eksak dan pendekatan. Perhitungan secara eksak dimungkinkan karena atom hidrogen sangat sederhana, yakni hanya memiliki satu elektron. Sedangkan secara pendekatan, dilakukan dengan metode Adaptive Simpson, untuk mengetahui sejauh mana perbedaan hasil dari perhitungan eksak dengan pendekatan. Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa perhitungan secara pendekatan dengan metode Adaptive Simpson cukup baik. Sehingga dapat disimpulkan bahwa pendekatan Adaptive Simpson dapat digunakan untuk menghitung faktor hamburan atom, termasuk atom dengan banyak elektron yang sulit dihitung secara eksak.

### ABSTRACT

ANALYSIS OF ATOMIC FORM FACTOR OF HYDROGEN. Atomic form factor of Hydrogen has been carried out by exact and approximate calculation. Exact calculation can be done cause by the simple structure of Hydrogen atom which has only one electron. While Simpson Adaptive metode is used to have an information about the differences between exact and approximation calculation. The result shows that approximation using Adaptive Simpson is good enough. It can be concluded that approximation of Adaptive Simpson could be used to calculate atomic form factor, including atom with many electrons which are difficult to solve using exact calculation.

### PENDAHULUAN

Dalam tahun 1912 Laue [1] mengajukan suatu gagasan bahwa sinar-X dapat didifraksi oleh sebuah kristal, seperti halnya cahaya yang bisa didifraksi oleh kisi. Gagasan itu dibuktikan kebenarannya secara eksperimental oleh Frederich dan Knipping [2]. Sejak penemuan gejala difraksi sinar-X telah banyak penelitian dilakukan, baik untuk mengetahui sifat-sifat sinar X maupun untuk menentukan struktur kristal. Salah satu penelitian dari Bragg [3] menyimpulkan, bahwa energi dari berkas yang di difraksikan dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E = \frac{C(1 + \cos 2\theta)}{\sin 2\theta} \exp \frac{(-B \sin 2\theta)}{\lambda}$$

Faktor C, tergantung pada struktur kristal, intensitas, dan panjang gelombang sinar X yang digunakan. Dapat diturunkan bahwa C mengandung suatu faktor yang tergantung pada struktur kristal, yakni faktor F. Dari pengukuran intensitas integral sinar X yang didifraksikan, dapat ditentukan  $|F|^2$ . Telah ditunjukkan oleh beberapa peneliti bahwa F tergantung pada  $(\sin \theta)/\lambda$ , sehingga faktor hamburan atomik  $f$  yang terkandung dalam F juga tergantung pada  $(\sin \theta)/\lambda$ . Faktor hamburan atomik merupakan besaran yang penting,

karena dari pengukuran  $f$  kita dapat menentukan distribusi elektron dalam atom-atom cuplikan yang diteliti. Tujuan dari penelitian ini ialah menghitung faktor hamburan atom hidrogen secara teoritik. Dan perhitungannya dilakukan secara eksak maupun pendekatan. Oleh karena sangat sulit menurunkan faktor hamburan atom secara eksak untuk atom dengan banyak elektron, kini telah terbukti bahwa pendekatan Adaptive Simpson dapat digunakan, termasuk untuk atom dengan banyak elektron tersebut.

### ANALISIS DAN PERHITUNGAN

Faktor hamburan F didefinisikan sebagai perbandingan dari amplitudo hamburan oleh sebuah atom terhadap amplitudo hamburan oleh sebuah elektron. Amplitudo gelombang yang dihamburkan oleh sebuah bilangan elektron sebanding dengan  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ ,  $k$  adalah bilangan gelombang yang dihamburkan, dan  $\vec{r}$  adalah posisi. Maka amplitudo gelombang yang dihamburkan oleh elektron-elektron dalam sebuah atom sebanding dengan  $f(\vec{r})$ . Selanjutnya faktor hamburan dapat dituliskan sebagai berikut:

$$f = \int f(\vec{r}) \exp(i\vec{S} \cdot \vec{r}) dV \quad (1)$$



( $r\hat{r}$ ) distribusi elektron,  $\vec{S}$  vektor hamburan. Karena hamburan elastik, maka panjang vektor  $\vec{S}$  adalah  $2k \sin\theta$ , dengan  $k = |\vec{k}| = |\vec{k}_0|$ ,  $|\vec{k}_0| =$  bilangan gelombang mula-mula. Apabila  $\phi$  ialah sudut antara  $\vec{S}$  dan  $\vec{r}$ , maka,  $\vec{S}\vec{r} = \vec{q}\vec{r} \cos\Phi$ , di mana  $\vec{q} = 4\pi \sin\theta/\lambda$ . Persamaan (1) dapat ditulis menjadi:

$$f = \int f(\vec{r}) \exp(i\vec{q}\vec{r} \cos\Phi) dV \quad (2)$$

$v$  ialah volume bola,  $f(\vec{r})$  rapat distribusi elektron,  $\psi(\vec{r})$  fungsi gelombang elektron. Karena distribusi awan elektron berbentuk sferik maka dapat diturunkan:

$$f = \int_0^\infty 4\pi r^2 f(\vec{r}) \frac{\sin(\vec{q}\vec{r})}{\vec{q}\vec{r}} \quad (3)$$

Dengan memasukkan harga  $f(\vec{r}) = e^{-|\psi(\vec{r})|^2}$ , dengan  $\psi(\vec{r})$  merupakan fungsi gelombang hidrogen, yang diperoleh dari perkalian antara fungsi gelombang radial dan fungsi gelombang angular. Untuk bilangan kuantum  $n = 1, l = 0,$

$m = 0$ , maka  $\psi(r) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{a}\right)^{3/2} \exp(-\frac{r}{a})$  [4], sehingga persamaan (3) dapat dituliskan menjadi:

$$f_H = \left[ \frac{\sin\theta}{\lambda} \right] \frac{1}{\pi a^3} \int_0^\infty r^2 \exp(-\frac{2r}{a}) \sin(\vec{b}\vec{r}) d\vec{r} \quad (4)$$

dengan  $a =$  jari-jari Bohr,  $b = 4 \sin(\theta)/\lambda$ . Pemecahan secara eksak menghasilkan persamaan sebagai berikut:

$$f_H = \frac{1}{[1 + 0,25 (16 \pi^2 a^2 \left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right)^2)]^2} \dots (5)$$

Hasil perhitungan berdasar persamaan (5), ditunjukkan pada tabel I.

Tabel 1. Harga faktor hamburan atom hidrogen secara eksak.

		$f_H$
1	0,0	1,0000
2	0,1	0,8109
3	0,2	0,4810
4	0,3	0,2514
5	0,4	0,1306
6	0,5	0,0707
7	0,6	0,0404
8	0,7	0,0243
9	0,8	0,0154
10	0,9	0,0101
11	1,0	0,0069
12	1,1	0,0048

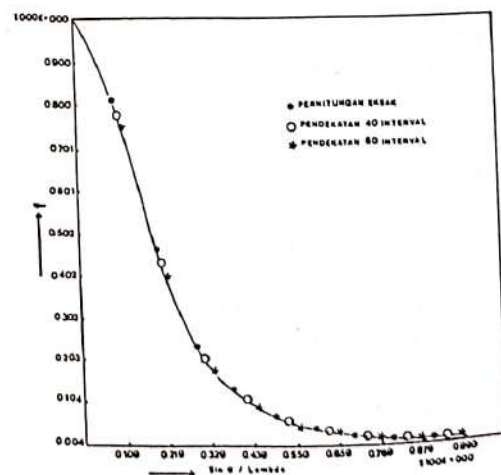
**Menghitung faktor hamburan atom H dengan metode Adaptive Simpson:**

Untuk menghitung faktor hamburan atom sesuai dengan persamaan (4), digunakan metode Adaptive Simpson. Pemilihan batas integrasi antara 0 sampai  $13.a (= 6.88 \text{ Angstrom})$ , disesuaikan dengan perhitungan Berghius [5]. Hasil perhitungan dengan pendekatan metode Adaptive Simpson ditunjukkan pada tabel 2.

Tabel 2. Harga faktor hamburan atom hidrogen secara pendekatan dengan metode adaptive Simpson.

No.	$\frac{\sin\theta}{\lambda}$	f (40 interval)	f (60 interval)
1	0,0	0,9999	0,9999
2	0,1	0,8109	0,8109
3	0,2	0,4810	0,4810
4	0,3	0,2514	0,2514
5	0,4	0,1306	0,1306
6	0,5	0,0707	0,0707
7	0,6	0,0404	0,0404
8	0,7	0,0243	0,0243
9	0,8	0,0153	0,0154
10	0,9	0,0101	0,0101
11	1,0	0,0069	0,0069
12	1,1	0,0048	0,0048

Kurva faktor hamburan atom Hidrogen yang diperoleh dengan perhitungan eksak dan pendekatan ditunjukkan pada Gambar 1



Gambar 1. Hasil Perhitungan Eksak dan Pendekatan Aditive Simpson dari Faktor Hamburan.

## **KESIMPULAN**

Dari hasil yang didapat, maka dapat disimpulkan bahwa metode pendekatan Adaptive Simpson sangat baik untuk menghitung faktor hamburan atom Hidrogen. Dan karena sifatnya

umum maka metode ini dapat juga dipakai untuk menghitung faktor hamburan atom-atom dengan banyak elektron yang tidak mungkin lagi untuk dihitung secara eksak.

## **DAFTAR PUSTAKA**

1. LAUE, M. SITZUNGSBER, d. Kgl. Boyer, Akad. d Wiss. 303, 1912.
2. FRIEDRICH, W., KNIPPING, P. and LAUE, M., Ann. d Phys. 41, 971, 1913.
3. BRAGG, W.H., Phil. Mag. 27, 881, 1914.
4. HARIADI SUPANGKAT, Catatan Kuliah Fisika Zat Padat.
5. BERGHIUS. J., et al., Acta Crystall., 8, 478, 1959.