BAB III
IKATAN KRISTAL

- Pertanyaan yang haruis dijawab dalam bab ini adalah : apakah yang menyebabkan sebuah kristal tetap besatu ?
- Disebabkan oleh interaksi paling besar yang bertanggung jawab untuk terjadinya kohesi.
- Pada zat padat adalah interaksi tarik menarik elektrostatik antara muatan-muatan positif pada inti dengan muatan-muatan negatif dari elektron.

- Energi kohesi dari sebuah kristal didefenisikan sbg :
- Energi yang harus diberikan kepada kristal untuk memisahkan komponen-komponennya menjadi atom-atom bebas yang netral pada keadaan diam dan pada jarak tak hingga untuk kristal yang bersifat ionik, lazim digunakan istilah energi lattice
- Energi lattice didefenisikan sbg : Energi yang harus diberikan kepada kristal untuk memisahkan komponen-komponennya menjadi ion-ion bebas yang netral pada keadaan diam dan pada jarak tak hingga

Interaksi Van der Wall-london

Hamiltonian untuk sistem sebelum berinteraksi

$$H_0 = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{1}{2} C x_1^2 + \frac{P_2^2}{2m} + \frac{1}{2} C x_2^2$$

$$H_1 = \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{R + x_1 - x_2} - \frac{e^2}{R - x_2} - \frac{e^2}{R + x_1} \cong -\frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3}$$

$$\text{hamiltonian total} : H = H_0 + H_1$$

- Syarat Hamiltonian

$$x_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2) \qquad x_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 - x_2)$$

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s + x_a) \qquad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_s - x_a) \qquad \text{.... 1}$$

$$\rho_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_1 + \rho_2) \qquad \rho_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_1 - \rho_2)$$

$$\rho_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_s + \rho_a) \qquad \rho_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\rho_s - \rho_a) \qquad \text{.... 2}$$

$$H = H_0 + H_1$$

$$H = \frac{\rho_1^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_1^2 + \frac{\rho_2^2}{2m} + \frac{1}{2}Cx_2^2 - \frac{2e^2 x_1 x_2}{R^3} \ldots - \ldots \qquad \text{.... 3}$$

- Dari persamaan 1&2 → 3

$$H = \frac{\rho_s^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(C - \frac{2e^2}{R^3}\right)x_s^2 + \frac{\rho_2^2}{2m} + \frac{1}{2}\left(C + \frac{2e^2}{R^3}\right)x_a^2$$

$$\omega_a = \sqrt{\frac{\left(C + \frac{2e^2}{R^3}\right)}{m}} \qquad \omega_s = \sqrt{\left(C - \frac{2e^2}{R^3}\right)/m}$$

$$karena \quad \omega_0 = \sqrt{\frac{C}{m}}$$

$$H = \hbar\,\omega_0 = 2 \cdot \frac{1}{2}\hbar\,\omega_0$$

Maka

$$= \left(\frac{C}{m}\right)^{1/2} \left(1 \mp \frac{2e^2}{CR^3}\right)^{1/2}$$

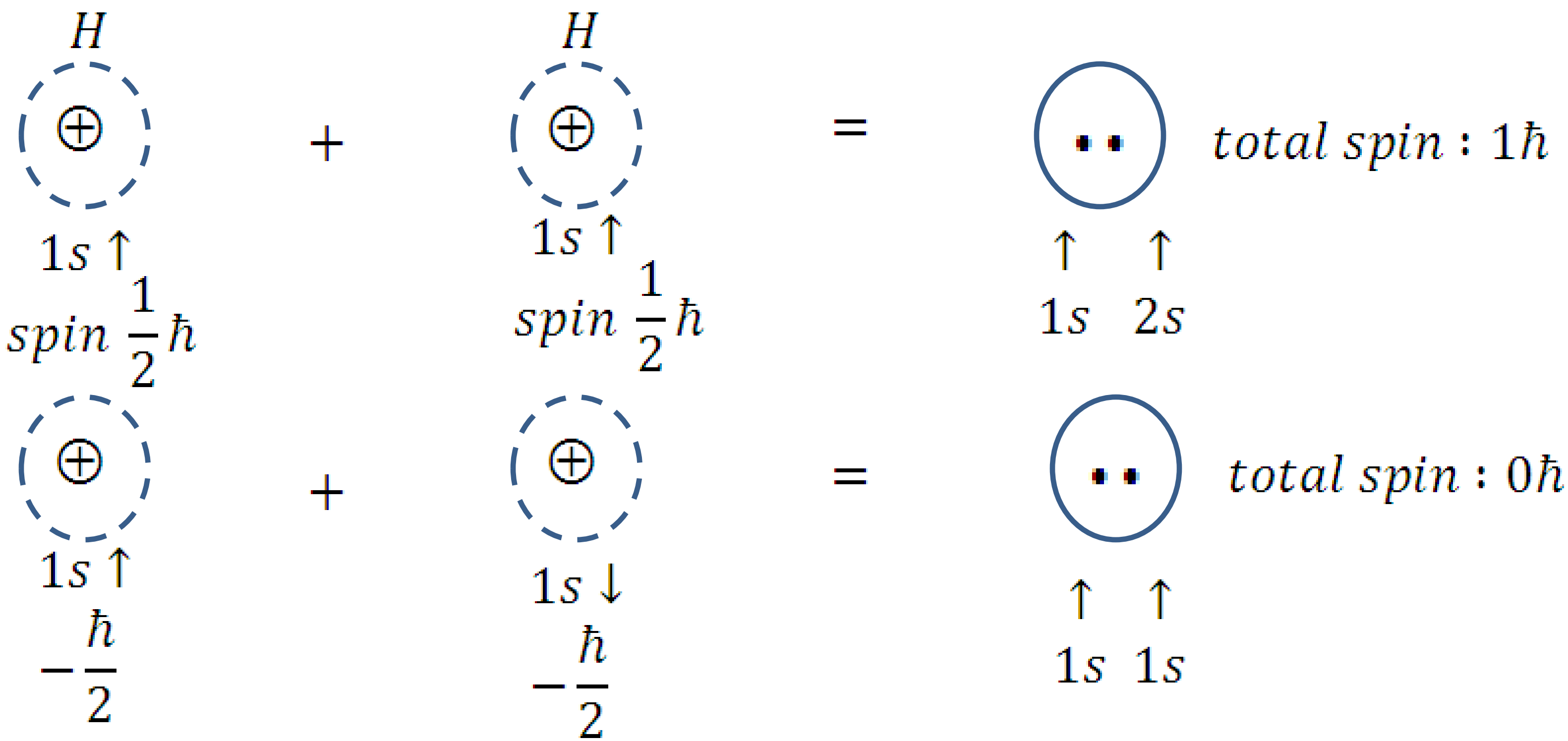
$$= \quad \omega_0 \left[1 \mp \frac{1}{2}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right) - \frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2 + \cdots\right]$$

$$(1 \pm X)^{1/2} = \left(1 \pm \frac{x}{2} - \frac{1}{8}x^2 + \cdots\right)$$

Jadi sistem pada T= 0K adalah $\frac{1}{2}\hbar(\omega_s + \omega_a)$

$$\Delta u = u_2 - u_0 = -\hbar\,\omega_0 \left[\frac{1}{8}\left(\frac{2e^2}{CR^3}\right)^2\right]$$

$$\Delta u = -\frac{A}{R^6} \rightarrow A = \frac{\hbar\,\omega_0}{8}\left(\frac{2e^2}{C}\right)^2$$



- Energi dari interaksi tolak menolak ditulis dengan persamaan $\frac{B}{R^{12}}$ → diperolah secara empiris .... 1 konstanta2 parameter empiris :

$$U = 4\epsilon\left\{\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{6}\right\} \quad \rightarrow A = 4\epsilon\sigma^{6}$$

$$B = 4\epsilon\sigma^{12}$$

$$\sigma = parameter\ dari\ percobaan$$

- Bentuk lain dari persamaan diatas

$$U = \lambda exp\left(-\frac{R}{\rho}\right) \; dimana\; \rho = rentang\; interaksi$$

$$U_t \equiv energi\; potensial\; lenard - jones$$

Jika ada N buah atom, maka :

$$U_t(R) = \frac{1}{2}N(4\epsilon)\left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{6}\right]$$

$$R_{ij} = \sum_j \rho_{ij}\, R \;\rightarrow R_{ij} = jarak\; dari\; atom\; i\; ke\; atom\; j$$

$$R = jarak\; dari\; atom\; tetangga\; yang\; terdekat$$

$$U_t(R) = \frac{1}{2}N(4\epsilon)\left[\sum_j \left(\frac{\sigma}{\rho_{ij}}\right)^{12} - \sum_j \left(\frac{\sigma}{\rho_{ij}}\right)^{6}\right] \qquad \text{...... 2}$$

Untuk fcc :

$$\sum_j \rho_{ij}^{-12} = 12{,}13188 \qquad \sum_j \rho_{ij}^{-6} = 14{,}45392$$

Untuk hcp :

$$\sum_j \rho_{ij}^{-12} = 12{,}13229 \qquad \sum_j \rho_{ij}^{-6} = 14{,}45481$$

Pada keadaan equilibrium : $R = R_0$

$$F = \frac{dU_t(R)}{dR} = 0 \rightarrow F = gaya\ antar\ 2\ atom$$

Dari pers 2

$$\frac{dU_t(R)}{dR} = -2N\epsilon\left[(12)(12{,}13)\left(\frac{\sigma^{12}}{R_0^{13}}\right) - (6)(14{,}45)\left(\frac{\sigma^{6}}{R_0^{7}}\right)\right]$$

$$\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^6 = \frac{14{,}45}{24{,}26} \rightarrow \frac{\sigma}{R_0} = \frac{1}{1{,}09} \rightarrow R = R_0$$

$$\frac{R_0}{\sigma} = 1{,}09$$

Energi kohesi pada 0º K

$$U_t(R) = 2N\epsilon\left[(12,13)\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^{12} - (14,45)\left(\frac{\sigma}{R_0}\right)^{6}\right]$$

$$\frac{R_0}{\sigma} = 1,09$$

maka :

$$U_t(R_0) = 2N\epsilon[(12,13)(1,09)^{12} - (14,45)(1,09)^{6}]$$

$$= -(2,15)(4N\epsilon)$$

KRISTAL IONIK

Energi elekstatis Ξ energi Modelung

Energi ini merupakan penyumbang utama untuk energi ikat pada kristal ionik.

Interaksi antara atom i (atom acuan) dengan atom2 j yang lain (i≠j) biasa dinyatakan dengan energi interaksi Ξ U_i

$$U_i = \sum_i U_{ij} \rightarrow U_i = intaraksi\ antara\ atom\ i\ dan\ atom\ j$$

U_{ij}= jml antara interaksi Coulomb dengan interaksi tolak menolak

$$U_{ij} = \lambda e^{-R/\rho} \pm \frac{q^2}{R_{ij}}$$

$R_{ij} = jarak\ antara\ atom\ i\ dan\ atom\ j$

Misalkan jumlah molekul N buah, maka jumlah ion 2N

Misalkan energi tolak menolak hanya terjadi antara ion acuan dengan ion tetangga terdekat saja, dan $R_{ij} = \rho_{ij} R$

Jadi jarak antara dua ion yang berdekatan :

$$R_{ij} = \rho_{ij} R \rightarrow utk\ interaksi\ tolak\ menolak$$

$$\therefore U_{ij} = \lambda e^{-R/\rho} - \frac{q^2}{R_{ij}} \quad (atom\ terdekat)$$

$$U_{total} = N \cdot u_i = N \sum_j U_{ij}$$

$$U_{total} = N \left(\sum_j U_{ij} \right)$$

$$u_i = Z\lambda e^{-R/\rho} = \sum_j \frac{\pm q^2}{\rho_{ij} R}$$

$$Z = jml\ atom\ terdekat$$

$$\alpha = \sum_j \frac{\pm}{\rho_{ij} R} \Rightarrow konstanta\ Modelung$$

$$u_i = \left(Z\lambda e^{-R/\rho} + \alpha \frac{q^2}{R} \right)$$

$$u_i = N \left(Z\lambda e^{-R/\rho} + \alpha \frac{q^2}{R} \right) \Rightarrow energi\ ionik$$

Pada jarak seimbang (equilibrium) $(R = R_0) \Rightarrow T = 0°K$

$$\frac{dU_{total}}{dR} = 0 = N\frac{du_i}{dR}$$

$$0 = N\left(-\frac{Z\lambda}{\rho}e^{-R/\rho} + \alpha\frac{q^2}{R}\right)$$

$$R = R_0 \Rightarrow \frac{Z\lambda}{\rho}e^{-R/\rho} = \alpha\frac{q^2}{R}$$

$$R_0^2 e^{-R/\rho} = \frac{\alpha\rho q^2}{Z\lambda} \Rightarrow Z\lambda e^{-R/\rho} = \frac{\alpha\rho q^2}{R_0^2}$$

Jadi pada T = 0K

$$u_t = N\left(Z\lambda e^{-R_0/\rho} - \alpha\frac{q^2}{R_0}\right)$$

$$= N\left(\frac{\alpha\rho q^2}{R_0^2} - \frac{\alpha q^2}{R_0}\right)$$

$$= \frac{N\alpha q^2}{R_0}\left(\frac{\rho}{R_0} - 1\right)$$

$$u_t = -\frac{N\alpha q^2}{R_0}\left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$

Energi modelung : $-\frac{N\alpha q^2}{R_0}$

Konstanta modelung : $\alpha = \sum_j \pm \frac{i}{\rho_{ij} R}$

$$R_{ij} = \rho_{ij} R$$

$$\rho_{ij} = \frac{R_{ij}}{R} \rightarrow \alpha = \sum_j \pm \frac{R}{R_{ij}}$$

$$\therefore \frac{\alpha}{R} = \sum_j \frac{\pm}{R_{ij}} \ldots\ldots \ominus \oplus \ominus \oplus \ominus \oplus \ominus \oplus \ominus \rightarrow \sim$$

$$\frac{\alpha}{R} = 2\left(\frac{1}{R} - \frac{1}{2R} + \frac{1}{3R} - \frac{1}{4R} + \cdots\right)$$

$$\alpha = 2\left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \cdots\right)$$

Maka

$$l_n(1+x) = \left(x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} - \cdots\right)$$

$$untuk\ (x=1) \Rightarrow l_n(2) = \left(1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \frac{1}{5} - \cdots\right)$$

$$\alpha = 2l_n2$$

Jadi nilai energi ikat ionik :

$$U_t = 2l_n2\ \frac{Nq^2}{R_0}\left(1 - \frac{\rho}{R_0}\right)$$