

## PENENTUAN DENSITAS ELEKTRON 3-DIMENSI BAHAN KRISTALIN

R.S Lasijo dan Inawati Tanto  
Puslitbang Teknik Nuklir - BATAN, Bandung.

### ABSTRAK

**PENENTUAN DENSITAS ELEKTRON 3-DIMENSI BAHAN KRISTALIN.** Densitas elektron bahan kristalin dalam 3-dimensi telah ditentukan dengan menggunakan data eksperimental difraksi sinar-x dan metode analisis numerik Fourier. Sebagai contoh dilakukan penentuan densitas elektron pada kristal yang berbentuk kubik, yaitu NaCl yang berbentuk kubik pusat bidang (FCC = *Face Centered Cubic*) dan CsCl yang berbentuk kubik pusat benda (BCC = *Body Centered Cubic*). Pada kristal NaCl diperoleh densitas 3-dimensi yang sesuai dengan posisi atom-atom dalam kristal tersebut secara lengkap. Pada kristal CsCl sinar x seolah-olah melihat dua buah kubus sederhana yang serupa dengan atom-atom Cs dan Cl masing-masing pada titik-titik sudutnya, sehingga karena dari kedua kubus sama maka puncak-puncak difraksi terletak pada sudut-sudut  $2\theta$  yang sama pula, jadi difraksi sinar x tidak dapat membedakan mana yang Cs dan mana yang Cl.

**Kata kunci :** densitas elektron, bahan kristalin, kristal kubik, sinar-x, analisis Fourier.

### ABSTRACT

**THREE-DIMENSIONAL ELECTRON DENSITY DETERMINATION OF CRYSTALLINE MATERIALS.** Electron densities of crystalline materials in 3-dimension have been determined using experimental data of x-ray diffraction and Fourier numerical analysis method. As examples electron densities of cubic crystals have been determined, i.e NaCl, a face centered cubic (FCC) crystal, and CsCl, a body centered cubic (BCC) crystal. For NaCl crystal, a 3-dimensional electron density appropriate with complete positions of all atoms in the unit crystal was obtained. For CsCl crystal the x-ray seems to see two similar simple cubic crystals with Cs and Cl atoms respectively occupying the vertices, and because of the same  $d$  for both cubes the diffraction peaks appear at the same angles of  $2\theta$ , so that the x-ray diffraction measurement is unable to distinguish which is Cs or Cl.

**Key words :** electron density, crystalline materials, cubic crystal, x-ray, Fourier analysis.

---

## PENDAHULUAN

Rapat elektron dari suatu bahan kristalin dapat ditentukan dengan menggunakan kombinasi data pengukuran eksperimental difraksi sinar-x dengan metode analisis numerik Fourier. Sebelum komputer digital berkembang, orang pada umumnya melakukan cara pendekatan dalam menentukan densitas elektron dalam 3-dimensi, yaitu mengubah bentuk 3-dimensi menjadi 2-dimensi, misalnya mengambil bidang XY saja dengan mengambil harga Z tertentu [1], dan 1-dimensi pada suatu garis lurus yang sejajar dengan sumbu Z, sehingga kombinasi keduanya dapat dipakai untuk menggambarkan densitas elektron 3-dimensi. Kenyataan bahwa kristal sebenarnya mempunyai struktur 3-dimensi, maka penggambaran yang demikian dianggap kurang memuaskan. Pendekatan demikian ditempuh karena untuk melakukan perhitungan langsung dalam 3-dimensi akan memerlukan waktu yang sangat lama yang melelahkan. Dengan perkembangan komputer digital dan metodologi perhitungan numerik yang makin efisien pada waktu ini dimungkinkan untuk dilakukan perhitungan 3-dimensi secara langsung dalam menentukan densitas elektron dari suatu bahan kristalin.

Analisis dan transformasi Fourier adalah salah satu metode yang sangat cocok untuk penentuan rapat elektron 3-dimensi ini, sedangkan data eksperimental yang dapat dipakai adalah data difraksi sinar-x., karena data difraksi sinar-x merupakan manifestasi dari hamburan sinar-x oleh elektron-elektron yang berada dalam kulit atom-atom yang membentuk kristal bahan yang diteliti.

Sinar-x merupakan salah satu anggota gelombang elektromagnetik yang mempunyai panjang gelombang yang ordenya sama dengan jarak atom-atom dalam bahan-bahan kristalin, yaitu dalam orde Ångström ( $10^{-10}$  meter), sehingga pola difraksinya oleh suatu kristalin dapat diamati dengan jelas dan dapat dipergunakan untuk menentukan struktur maupun sifat-sifat lain dari bahan tersebut. Pola difraksi

sinar x oleh suatu bahan kristalin mengikuti hukum yang ditemukan oleh Bragg [2] yaitu :

$$\lambda = 2d \sin \theta \quad (1)$$

di mana  $\lambda$  panjang gelombang sinar-x,  $d$  jarak antar bidang dalam kisi kristal, dan  $\theta$  sudut difraksi. Jarak antar bidang  $d$  merupakan fungsi dari indeks bidang (hkl) yang dikenal dengan nama indeks Miller [3] dan konstanta kisi kristal ( $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$ ). Misalkan untuk kristal kubik dimana  $a = b = c$  dan  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , hubungan antara  $d$  dan parameter-parameter tersebut dapat ditulis :

$$d = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}} \quad (2)$$

Bila persamaan (2) dimasukkan ke dalam persamaan (1) didapat :

$$\sin \theta = \frac{\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a} \quad (3)$$

Dari persamaan (3) dapat dilihat bahwa spektrum sinar-x yang dihamburkan oleh kristal pada arah tertentu akan bergantung pada panjang gelombang sinar-x yang dipergunakan, pada indeks Miller, dan juga pada bentuk kristalnya atau parameter kisinya. Difraksi sinar-x adalah akibat hamburan koheren sinar-x oleh elektron-elektron yang berada dalam kulit atom-atom yang berada di dalam kristal, sehingga intensitas difraksinya akan bergantung pada posisi atom-atom dalam kristal tersebut.

Menurut J.J Thomson, sinar-x yang dihamburkan oleh sebuah elektron mempunyai intensitas :

$$I = I_0 \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4} \sin^2 \alpha \quad (4)$$

di mana  $I$  intensitas terhambur dan  $I_0$  intensitas sinar-x yang datang,  $e$  muatan listrik dan  $m$  massa elektron,  $c$  kecepatan cahaya dalam vakum, dan  $\alpha$  sudut antara arah hamburan dan arah percepatan elektron.

Misalkan sinar-x datang dengan arah sejajar sumbu-X dari arah negatif menuju ke sebuah elektron yang berada di titik asal O. Sebuah titik pengamat P misalkan berada dalam bidang XZ dengan garis PO membuat sudut  $2\theta$  dengan sumbu-X. Berkas sinar-x yang tidak terpolarisasi dapat diuraikan dalam sumbu-Y dan sumbu-Z sebagai :

$$E^2 = E_y^2 + E_z^2 \quad (5)$$

Secara rata-rata komponen  $\bar{E}$  kearah y akan sama dengan komponen  $\bar{E}$  kearah z, sehingga dapat ditulis :

$$1/2 \cdot E^2 = E_y^2 = E_z^2 \quad (6)$$

dan intensitas gelombang dapat ditulis :

$$1/2 \cdot I_0 = I_{0y} = I_{0z} \quad (7)$$

Maka intensitas gelombang pada titik P berdasarkan persamaan (4) dapat ditulis :

$$\begin{aligned} I &= I_y + I_z \\ &= I_{0y} \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4} + I_{0z} \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4} \cos^2 2\theta = I_0 \frac{e^4}{r^2 m^2 c^4} \left( \frac{1 + \cos^2 2\theta}{2} \right) \quad (8) \end{aligned}$$

di mana  $\alpha$  pada arah-Y sama dengan  $90^\circ$  dan pada arah-Z sama dengan  $90^\circ - 2\theta$ . Persamaan (8) dikenal sebagai persamaan hamburan Thomson, yang menggambarkan hamburan sinar-x oleh sebuah elektron. Semua besaran dalam persamaan (8) merupakan konstanta, kecuali  $\frac{1}{2}(1 + \cos^2 2\theta)$

yang disebut faktor polarisasi. Sebenarnya proton-proton di dalam inti atom dalam kristal juga dapat mengadakan hamburan koheren pada sinar-x, yang berarti juga dapat mengadakan hamburan Thomson, tetapi karena proton mempunyai massa yang sangat besar dibanding dengan massa elektron maka kontribusinya dapat diabaikan. Hamburan sinar-x oleh sebuah atom dapat dinyatakan dalam hamburan oleh sebuah elektron, dalam faktor hamburan atom  $f$  yang didefinisikan

$$f = \frac{\text{amplitudo gelombang yang terhambur oleh atom}}{\text{amplitudo gelombang yang terhambur oleh sebuah elektron}}$$

Karena pada suatu atom terdapat  $Z$  elektron, maka untuk  $2\theta = 0$  didapat  $f = Z$ . Bila  $\theta$  bertambah besar maka banyaknya gelombang yang terhambur oleh sebuah elektron akan semakin kecil yang berarti  $f$  semakin kecil. Ternyata bahwa faktor hamburan atom  $f$  ini juga bergantung pada panjang gelombang sinar-x yang datang, sehingga ketergantungan ini dapat ditulis sebagai fungsi  $\sin\theta/\lambda$ , yaitu

$$f = f\left(\frac{\sin\theta}{\lambda}\right) \quad (9)$$

Besaran  $f$  sebagai fungsi dari  $\sin\theta/\lambda$  ini untuk atom-atom hidrogen sampai dengan californium telah dibuat tabelnya [4]. Hamburan oleh sel satuan suatu kristal adalah resultante gelombang yang terhambur oleh atom-atom yang berada dalam sel satuan tersebut yang dinyatakan dalam faktor struktur  $F$

$$F(hkl) = \sum_{n=1}^N f_n e^{2\pi i(hu_n + kv_n + lw_n)} \quad (10)$$

di mana  $(h, k, l)$  indeks Miller,  $(u_n, v_n, w_n)$  posisi dan  $f_n$  faktor hamburan atom yang ke- $n$  dalam sel satuan tersebut. Faktor struktur  $F$  pada umumnya berbentuk besaran kompleks yang menggambarkan baik amplitudo maupun faktor fase dari gelombang

resultante. Harga absolut dari F yaitu  $|F|$  menggambarkan amplitudo gelombang resultante yang didefinisikan sebagai :

$$|F| = \frac{\text{amplitudo gelombang yang terhambur oleh atom - atom dalam sel satuan}}{\text{amplitudo gelombang yang terhambur oleh sebuah elektron}} \quad (11)$$

Intensitas berkas yang didifraksikan oleh atom-atom dalam sel satuan pada arah yang diramalkan oleh hukum Bragg adalah sesuai dengan besaran  $|F|^2$  yaitu :

$$|F|^2 = F \cdot F^* \quad (12)$$

dimana  $F^*$  pasangan kompleks dari F. Intensitas difraksi sinar-x oleh sampel kristalin yang berbentuk serbuk dapat ditulis :

$$I = |F|^2 p \left( \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \right) \quad (13)$$

di mana F faktor struktur, p faktor multiplisitas,  $\theta$  sudut Bragg,  $1 + \cos^2 2\theta$  faktor polarisasi dan  $\sin^2 \theta \cos \theta$  faktor Lorentz. Kedua faktor polarisasi dan faktor Lorentz sering disebut juga faktor polarisasi Lorentz (LP)

Densitas elektron 3-dimensi dalam suatu bahan kristalin dapat dinyatakan dalam bentuk deret Fourier [5]

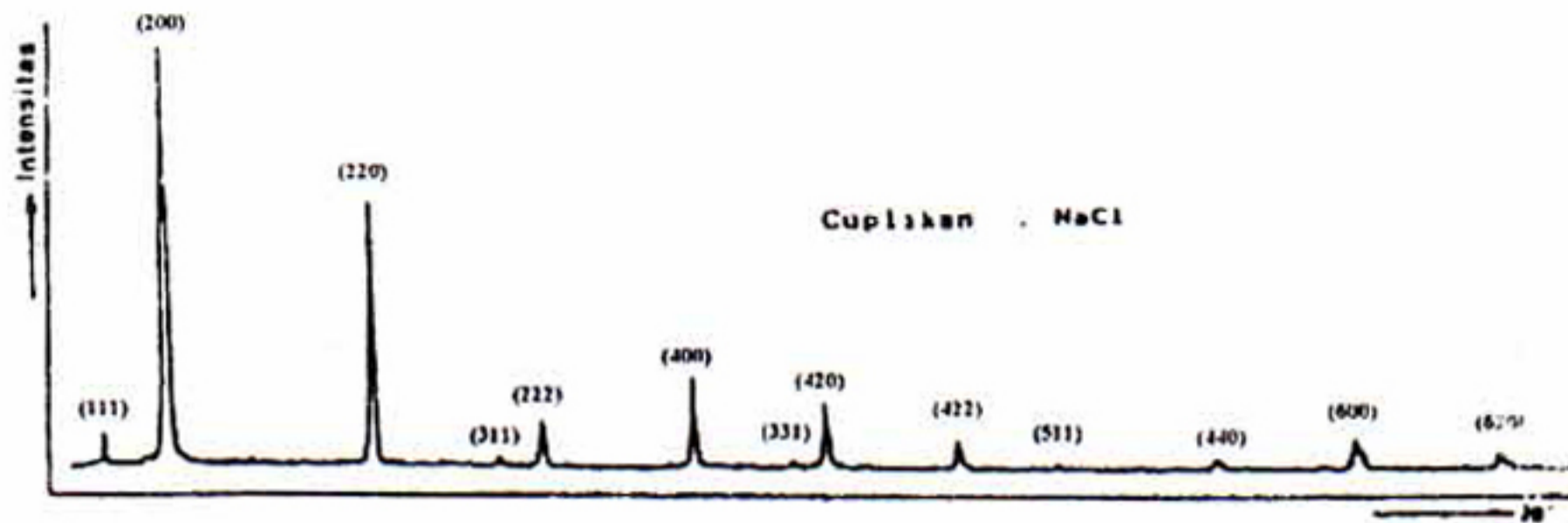
$$\rho(XYZ) = \frac{1}{V_C} \sum_{h=-\infty}^{+\infty} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} F(hkl) \exp[-2\pi i(hX+kY+lZ)] \quad (14)$$

di mana  $F(hkl)$  adalah faktor spektroskopi atau faktor struktur seperti yang dinyatakan dalam persamaan (11).  $V_C$  volume sel satuan,  $(XYZ)$  koordinat fraksional tanpa dimensi. Bila sel satuan dinyatakan dalam satuan Å (Angström), maka  $V_C$  dinyatakan dalam Å<sup>3</sup> dan densitas elektron  $\rho(XYZ)$  dalam elektron per Å<sup>3</sup>. Untuk perhitungan pada umumnya disederhanakan dengan diubahnya persamaan (14) dalam bentuk 2-dimensi dengan diambil misalnya harga Z tertentu dalam bentuk 1-dimensi dengan

menentukan densitas elektron sepanjang suatu garis lurus yang sejajar dengan salah satu bidang kristal, sehingga kombinasi dari kedua cara tersebut dapat digambarkan bentuk densitas elektron dalam 3-dimensi secara tidak langsung. Hal demikian dilakukan karena untuk menghitung langsung dalam 3-dimensi akan diperlukan usaha dan waktu yang cukup besar, sehingga orang condong untuk mengambil cara yang lebih sederhana. Dengan perkembangan komputer digital yang diikuti oleh perkembangan metodologi perhitungan numerik yang makin efisien, maka perhitungan 3-dimensi secara langsung dapat dilakukan. Untuk menentukan densitas elektron pada persamaan (14) yang disesuaikan dengan data eksperimental dari difraksi sinar x, tidak semua harga  $(h, k, l)$  dari  $-\infty$  sampai  $+\infty$  pada somasi perlu dimasukkan, tetapi dapat diambil harga-harga  $(h, k, l)$  tertentu di mana terdapat puncak-puncak difraksinya, yang merupakan bilangan-bilangan bulat. Bila bentuk dan struktur kristal bahan telah diketahui, maka harga  $(h, k, l)$  yang menimbulkan puncak-puncak difraksi pada sudut-sudut tertentu dapat diramalkan. Demikian pula sebaliknya, bila data puncak-puncak difraksi dapat diperoleh dari pengukuran, maka dapat ditentukan bentuk dan struktur kristal bahan, walaupun hal yang terakhir ini tidak selalu dapat dilakukan dengan mudah.

## **DATA, PERHITUNGAN DAN DISKUSI**

Perhitungan densitas telah dilakukan untuk sampel yang berbentuk kubus yaitu NaCl yang berbentuk FCC dan CsCl yang berbentuk BCC. Pola difraksi NaCl yang didapat dari pengamatan menggunakan sinar x dengan target tembaga yang mempunyai panjang gelombang  $\lambda(\text{CuK}\alpha) = 1.5405 \text{ \AA}$  tertera pada Gambar 1



Gambar 1 : Pola difraksi sinar x untuk cuplikan NaCl

Tiga belas puncak yang didapat mempunyai parameter-parameter dari hasil analisis seperti tertera pada Tabel 1.

**Tabel 1. Parameter puncak-puncak difraksi sinar x NaCl  $a=4.2906 \text{ \AA}$ ,  $K=0.2301$   
 $B=3.37$**

| No | hkl | $\theta$ | $\text{Sin } \theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$ | $f(\text{Na})$ | $f(\text{Cl})$ |
|----|-----|----------|---|----------------|----------------|
| 1  | 111 | 13.70    | 0.1537  | 8.28926        | 13.13288       |
| 2  | 200 | 15.87    | 0.1775  | 7.93127        | 12.55160       |
| 3  | 220 | 22.74    | 0.2509  | 6.92032        | 10.91377       |
| 4  | 311 | 26.95    | 0.2942  | 6.38589        | 10.05035       |
| 5  | 222 | 28.25    | 0.3072  | 6.23295        | 9.80359        |
| 6  | 400 | 33.13    | 0.3548  | 5.70630        | 8.95510        |
| 7  | 331 | 36.55    | 0.3866  | 5.37906        | 8.42887        |
| 8  | 420 | 37.67    | 0.3967  | 5.2789         | 8.26798        |
| 9  | 422 | 42.03    | 0.4346  | 4.91997        | 7.69199        |
| 10 | 511 | 45.23    | 0.4608  | 4.68596        | 7.31705        |
| 11 | 440 | 50.63    | 0.5018  | 4.64255        | 6.76770        |
| 12 | 600 | 55.08    | 0.5323  | 4.10389        | 6.38655        |
| 13 | 620 | 59.81    | 0.5611  | 3.88993        | 6.04534        |



Harga-harga (hkl) yang sesuai dengan puncak-puncak difraksi yang teramati yang dimasukkan ke dalam somasi pada persamaan (14). Dari tabel faktor hamburan atom, Appendix 8 [4] diketahui hubungan  $\sin\theta/\lambda$  dengan f untuk Na, Cs dan Cl seperti tertera pada Tabel 2.

**Tabel 2. Faktor hamburan atom f untuk Na, Cs dan Cl pada berbagai harga  $\sin\theta/\lambda$ .**

| $\sin\theta/\lambda(\text{\AA}^{-1})$ | 0.0 | 0.1  | 0.2  | 0.3  | 0.4  | 0.5  |
|---------------------------------------|-----|------|------|------|------|------|
| Na                                    | 11  | 9.65 | 8.2  | 6.7  | 5.25 | 4.05 |
| Cl                                    | 17  | 14.6 | 11.3 | 9.25 | 8.05 | 7.25 |
| Cs                                    | 55  | 50.7 | 43.8 | 37.6 | 32.4 | 28.7 |

Dari data pada Tabel 2 dapat ditulis hubungan antara f dan  $\sin\theta/\lambda$  berbentuk :

$$f = C_1 e^{-C_2 \frac{\sin\theta}{\lambda}} \quad (15)$$

di mana  $C_1$  dan  $C_2$  dapat diperoleh dengan cara "least squares fit" persamaan (15).

Hasilnya adalah untuk : Na :  $C_1 = 11.02872$        $C_2 = 1.85730$

Cl :  $C_1 = 17.60056$        $C_2 = 1.90459$

Sehingga diperoleh f untuk Na dan Cl seperti terlihat pada kolom 5 dan 6 pada Tabel 1.

Posisi Na dan Cl di dalam kristal NaCl adalah :

Atom Na : (0,0,0), (0.5 , 0.5, 0), (0.5 , 0, 0.5), (0, 0.5, 0.5)

Atom Cl : (0.5, 0.5, 0.5), (0, 0, 0.5), (0, 0.5, 0), (0.5, 0, 0)

Harga relatif densitas elektron 3 dimensi  $\rho(x, y, z)$  yang didapat tertera pada Tabel 3 dan Tabel 4.

**TABEL 3 DENSITAS ELEKTRON 3-DIMENSI  $\rho(X,Y,Z)$ KRISTAL**

**NaCl**

| Z = .00 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | Z = .10 |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X\Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0     | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
| .00     | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17      | .00  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  |
| .10     | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11      | .10  | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  |
| .20     | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3       | .20  | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   |
| .30     | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3       | .30  | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   |
| .40     | 11  | 8   | 2   | 3   | 8   | 11  | 8   | 2   | 3   | 8   | 11      | .40  | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   |
| .50     | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17      | .50  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  |
| .60     | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11      | .60  | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  |
| .70     | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3       | .70  | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   |
| .80     | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3       | .80  | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   |
| .90     | 11  | 8   | 2   | 3   | 8   | 11  | 8   | 2   | 3   | 8   | 11      | .90  | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   |
| 1.00    | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17      | 1.00 | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  |

| Z = .20 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | Z = .30 |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---------|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X\Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0     | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
| .00     | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10      | .00  | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  |
| .10     | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7       | .10  | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   |
| .20     | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1       | .20  | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   |
| .30     | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2       | .30  | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   |
| .40     | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5       | .40  | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   |
| .50     | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10      | .50  | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  |
| .60     | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7       | .60  | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   |
| .70     | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1       | .70  | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   |
| .80     | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2       | .80  | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   |
| .90     | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5       | .90  | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   |
| 1.00    | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10      | 1.00 | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  |

| Z = .40 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | Z = .50 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X\Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0     | X/Y | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
| .00     | 15  | 12  | 6   | 1   | 9   | 15  | 12  | 6   | 1   | 9   | 15      | .00 | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17  | 12  | 4   | 4   | 12  | 17  |
| .10     | 8   | 6   | 5   | 2   | 5   | 8   | 6   | 5   | 2   | 5   | 8       | .10 | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11  | 8   | 3   | 2   | 8   | 11  |
| .20     | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3       | .20 | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   |
| .30     | 2   | 4   | 2   | 1   | 2   | 2   | 4   | 2   | 1   | 2   | 2       | .30 | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 2   | 3   |

|      |    |    |   |   |   |    |    |   |   |   |    |      |    |    |   |   |    |    |    |   |   |    |    |
|------|----|----|---|---|---|----|----|---|---|---|----|------|----|----|---|---|----|----|----|---|---|----|----|
| .40  | 10 | 8  | 4 | 1 | 6 | 10 | 8  | 4 | 1 | 6 | 10 | .40  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 |
| .50  | 15 | 12 | 6 | 1 | 9 | 15 | 12 | 6 | 1 | 9 | 15 | .50  | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 |
| .60  | 8  | 6  | 5 | 2 | 5 | 8  | 6  | 5 | 2 | 5 | 8  | .60  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 |
| .70  | 3  | 3  | 3 | 3 | 4 | 3  | 3  | 3 | 3 | 4 | 3  | .70  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  |
| .80  | 2  | 4  | 2 | 1 | 2 | 2  | 4  | 2 | 1 | 2 | 2  | .80  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  |
| .90  | 10 | 8  | 4 | 1 | 6 | 10 | 8  | 4 | 1 | 6 | 10 | .90  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 |
| 1.00 | 15 | 12 | 6 | 1 | 9 | 15 | 12 | 6 | 1 | 9 | 15 | 1.00 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 |

Z = .60

Z = .70

|      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |   |    |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---|----|
| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 |   |    |
| .90  | 1.0 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | .00  | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8 | 10 |
| .00  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | .10  | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7   | 3   | 3   | 4   | 6 | 7  |
| .10  | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | .20  | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3 | 1  |
| .20  | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | .30  | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4 | 2  |
| .30  | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | .40  | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3 | 5  |
| .40  | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | .50  | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8 | 10 |
| .50  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | .60  | 7   | 3   | 3   | 4   | 6   | 7   | 3   | 3   | 4   | 6 | 7  |
| .60  | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | 6   | 1   | 4   | 8   | 10  | .70  | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3 | 1  |
| .70  | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 2   | .80  | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4 | 2  |
| .80  | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | .90  | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3 | 5  |
| .90  | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | 5   | 2   | 5   | 6   | 8   | 1.00 | 10  | 5   | 4   | 6   | 8   | 10  | 5   | 4   | 6   | 8 | 10 |
| 1.00 | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  | 9   | 1   | 6   | 12  | 15  |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |   |    |

Z = .80

Z = .90

|      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |   |    |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---|----|
| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 |   |    |
| .90  | 1.0 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | .00  | 15  | 12  | 6   | 1   | 9   | 15  | 12  | 6   | 1   | 9 | 15 |
| .00  | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | .10  | 8   | 6   | 5   | 2   | 5   | 8   | 6   | 5   | 2   | 5 | 8  |
| .10  | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | .20  | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4 | 3  |
| .20  | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | .30  | 2   | 4   | 2   | 1   | 2   | 2   | 4   | 2   | 1   | 2 | 2  |
| .30  | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | .40  | 10  | 8   | 4   | 1   | 6   | 10  | 8   | 4   | 1   | 6 | 10 |
| .40  | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | .50  | 15  | 12  | 6   | 1   | 9   | 15  | 12  | 6   | 1   | 9 | 15 |
| .50  | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | .60  | 8   | 6   | 5   | 2   | 5   | 8   | 6   | 5   | 2   | 5 | 8  |
| .60  | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | 3   | 5   | 3   | 3   | 5   | .70  | 3   | 3   | 3   | 3   | 4   | 3   | 3   | 3   | 3   | 4 | 3  |
| .70  | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 3   | 2   | .80  | 2   | 4   | 2   | 1   | 2   | 2   | 4   | 2   | 1   | 2 | 2  |
| .80  | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | 3   | 1   | 3   | 3   | 1   | .90  | 10  | 8   | 4   | 1   | 6   | 10  | 8   | 4   | 1   | 6 | 10 |
| .90  | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | 6   | 4   | 3   | 3   | 7   | 1.00 | 15  | 12  | 6   | 1   | 9   | 15  | 12  | 6   | 1   | 9 | 15 |
| 1.00 | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  | 8   | 6   | 4   | 5   | 10  |      |     |     |     |     |     |     |     |     |     |   |    |

Z = 1.00

|     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| X\Y | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|

|      |    |    |   |   |    |    |    |   |   |    |    |
|------|----|----|---|---|----|----|----|---|---|----|----|
| .00  | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 |
| .10  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 |
| .20  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  |
| .30  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  |
| .40  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 |
| .50  | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 |
| .60  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 | 8  | 3 | 2 | 8  | 11 |
| .70  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  | 2  | 2 | 3 | 5  | 3  |
| .80  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  | 5  | 3 | 2 | 2  | 3  |
| .90  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 | 8  | 2 | 3 | 8  | 11 |
| 1.00 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 | 12 | 4 | 4 | 12 | 17 |

**TABEL 4 DENSITAS ELEKTRON 3-DIMENSI  $\rho(X,Y,Z)$  KRISTAL**

**CsCl**

| Z = .00 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | Z = .10 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |    |    |
|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|
| X\Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 |    |    |
| .00     | 24  | 21  | 13  | 6   | 2   | 2   | 2   | 6   | 13  | 21  | 24  | .00     | 22  | 17  | 9   | 3   | 2   | 2   | 2   | 8   | 16  | 21 | 22 |
| .10     | 19  | 15  | 8   | 3   | 2   | 2   | 3   | 7   | 13  | 18  | 19  | .10     | 17  | 11  | 5   | 1   | 2   | 1   | 3   | 8   | 14  | 18 | 17 |
| .20     | 8   | 5   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 4   | 8   | 9   | 8   | .20     | 6   | 3   | 1   | 1   | 1   | 2   | 5   | 8   | 8   | 6  |    |
| .30     | 3   | 3   | 3   | 1   | 1   | 2   | 2   | 3   | 5   | 5   | 3   | .30     | 3   | 3   | 2   | 1   | 2   | 2   | 2   | 5   | 5   | 4  | 3  |
| .40     | 8   | 6   | 4   | 2   | 5   | 6   | 5   | 5   | 7   | 8   | 8   | .40     | 6   | 5   | 2   | 3   | 5   | 5   | 4   | 6   | 8   | 7  | 6  |
| .50     | 8   | 8   | 6   | 5   | 6   | 7   | 6   | 5   | 6   | 8   | 8   | .50     | 7   | 6   | 4   | 4   | 6   | 6   | 4   | 5   | 7   | 7  | 7  |
| .60     | 8   | 8   | 7   | 5   | 5   | 6   | 5   | 2   | 4   | 6   | 8   | .60     | 7   | 7   | 5   | 4   | 5   | 5   | 2   | 3   | 5   | 7  | 7  |
| .70     | 3   | 5   | 5   | 3   | 2   | 2   | 1   | 1   | 3   | 3   | 3   | .70     | 3   | 4   | 4   | 1   | 2   | 2   | 0   | 3   | 4   | 3  | 3  |
| .80     | 8   | 9   | 8   | 4   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 5   | 8   | .80     | 8   | 8   | 6   | 3   | 1   | 1   | 2   | 2   | 3   | 6  | 8  |
| .90     | 19  | 18  | 13  | 7   | 3   | 2   | 2   | 3   | 8   | 15  | 19  | .90     | 18  | 15  | 9   | 4   | 2   | 2   | 1   | 4   | 11  | 16 | 18 |
| 1.00    | 24  | 21  | 13  | 6   | 2   | 2   | 2   | 6   | 13  | 21  | 24  | 1.00    | 22  | 17  | 9   | 3   | 2   | 2   | 2   | 8   | 16  | 21 | 22 |

| Z = .20 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     |     | Z = .30 |     |     |     |     |     |     |     |     |     |    |    |
|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|---------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|
| X\Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y     | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 |    |    |
| .00     | 16  | 10  | 5   | 1   | 1   | 1   | 3   | 9   | 15  | 18  | 16  | .00     | 10  | 6   | 4   | 1   | 2   | 3   | 4   | 8   | 11  | 12 | 10 |
| .10     | 12  | 7   | 2   | 0   | 1   | 0   | 3   | 8   | 13  | 14  | 12  | .10     | 7   | 4   | 2   | 1   | 2   | 2   | 4   | 7   | 9   | 9  | 7  |
| .20     | 4   | 1   | 1   | 1   | 1   | 0   | 2   | 5   | 7   | 6   | 4   | .20     | 1   | 0   | 0   | 1   | 1   | 0   | 2   | 4   | 5   | 3  | 1  |
| .30     | 2   | 3   | 1   | 2   | 2   | 1   | 3   | 5   | 4   | 3   | 2   | .30     | 3   | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 3   | 4   | 3   | 2  | 3  |
| .40     | 4   | 3   | 0   | 3   | 4   | 3   | 4   | 6   | 6   | 5   | 4   | .40     | 4   | 3   | 2   | 2   | 1   | 1   | 4   | 4   | 3   | 3  | 4  |
| .50     | 5   | 3   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 4   | 5   | 5   | 5   | .50     | 3   | 2   | 1   | 2   | 2   | 0   | 3   | 4   | 3   | 2  | 3  |

|      |    |    |   |   |   |   |   |   |    |    |    |      |    |   |   |   |   |   |   |   |    |    |    |
|------|----|----|---|---|---|---|---|---|----|----|----|------|----|---|---|---|---|---|---|---|----|----|----|
| .60  | 5  | 5  | 3 | 2 | 4 | 2 | 1 | 4 | 5  | 5  | 5  | .60  | 3  | 3 | 1 | 1 | 2 | 1 | 3 | 5 | 4  | 3  | 3  |
| .70  | 3  | 4  | 2 | 1 | 2 | 1 | 2 | 4 | 4  | 2  | 3  | .70  | 3  | 2 | 1 | 1 | 1 | 1 | 3 | 4 | 3  | 2  | 3  |
| .80  | 7  | 6  | 3 | 1 | 1 | 1 | 2 | 1 | 3  | 5  | 7  | .80  | 4  | 3 | 2 | 2 | 1 | 2 | 2 | 0 | 2  | 4  | 4  |
| .90  | 14 | 10 | 5 | 2 | 1 | 2 | 1 | 5 | 10 | 14 | 14 | .90  | 8  | 5 | 3 | 1 | 2 | 3 | 3 | 5 | 8  | 10 | 8  |
| 1.00 | 16 | 10 | 5 | 1 | 1 | 1 | 3 | 9 | 15 | 18 | 16 | 1.00 | 10 | 6 | 4 | 1 | 2 | 3 | 4 | 8 | 11 | 12 | 10 |

Z = .40

Z = .50

| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| .00  | 7   | 6   | 3   | 1   | 4   | 6   | 5   | 5   | 6   | 7   | 7   | .00  | 7   | 5   | 3   | 2   | 5   | 6   | 5   | 2   | 3   | 5   | 7   |
| .10  | 5   | 4   | 2   | 1   | 4   | 4   | 4   | 4   | 5   | 5   | 5   | .10  | 5   | 4   | 1   | 2   | 4   | 5   | 3   | 1   | 3   | 5   | 5   |
| .20  | 1   | 1   | 0   | 1   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | 1   | .20  | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   |
| .30  | 3   | 2   | 1   | 1   | 1   | 2   | 3   | 2   | 1   | 2   | 3   | .30  | 3   | 2   | 1   | 2   | 2   | 2   | 2   | 1   | 2   | 3   | 3   |
| .40  | 4   | 3   | 2   | 0   | 2   | 3   | 4   | 2   | 1   | 3   | 4   | .40  | 4   | 3   | 0   | 2   | 4   | 4   | 3   | 0   | 2   | 4   | 4   |
| .50  | 4   | 3   | 2   | 0   | 1   | 3   | 4   | 3   | 0   | 2   | 4   | .50  | 4   | 3   | 1   | 1   | 3   | 4   | 3   | 1   | 1   | 3   | 4   |
| .60  | 3   | 3   | 2   | 1   | 1   | 3   | 4   | 4   | 2   | 2   | 3   | .60  | 4   | 4   | 2   | 0   | 3   | 4   | 4   | 2   | 0   | 3   | 4   |
| .70  | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 3   | 3   | 2   | 2   | 2   | .70  | 3   | 3   | 2   | 1   | 2   | 2   | 2   | 2   | 1   | 2   | 3   |
| .80  | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | .80  | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   |
| .90  | 5   | 5   | 3   | 1   | 3   | 4   | 4   | 4   | 4   | 5   | 5   | .90  | 5   | 5   | 3   | 1   | 3   | 5   | 4   | 2   | 1   | 4   | 5   |
| 1.00 | 7   | 6   | 3   | 1   | 4   | 6   | 5   | 5   | 6   | 7   | 7   | 1.00 | 7   | 5   | 3   | 2   | 5   | 6   | 5   | 2   | 3   | 5   | 7   |

Z = .60

Z = .70

| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| .00  | 7   | 7   | 6   | 5   | 5   | 6   | 4   | 1   | 3   | 6   | 7   | .00  | 10  | 12  | 11  | 8   | 4   | 3   | 2   | 1   | 4   | 6   | 10  |
| .10  | 5   | 5   | 4   | 4   | 4   | 4   | 3   | 1   | 3   | 5   | 5   | .10  | 8   | 10  | 8   | 5   | 3   | 3   | 2   | 1   | 3   | 5   | 8   |
| .20  | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | .20  | 4   | 4   | 2   | 0   | 2   | 2   | 1   | 2   | 2   | 3   | 4   |
| .30  | 2   | 2   | 2   | 3   | 3   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | .30  | 3   | 2   | 3   | 4   | 3   | 1   | 1   | 1   | 1   | 2   | 3   |
| .40  | 3   | 2   | 2   | 4   | 4   | 3   | 1   | 1   | 2   | 3   | 3   | .40  | 3   | 3   | 4   | 5   | 3   | 1   | 2   | 1   | 1   | 3   | 3   |
| .50  | 4   | 2   | 0   | 3   | 4   | 3   | 1   | 0   | 2   | 3   | 4   | .50  | 3   | 2   | 3   | 4   | 3   | 0   | 2   | 2   | 1   | 2   | 3   |
| .60  | 4   | 3   | 1   | 2   | 4   | 3   | 2   | 0   | 2   | 3   | 4   | .60  | 4   | 3   | 3   | 4   | 4   | 1   | 1   | 2   | 2   | 3   | 4   |
| .70  | 3   | 2   | 1   | 2   | 3   | 2   | 1   | 1   | 1   | 2   | 3   | .70  | 3   | 2   | 3   | 4   | 3   | 1   | 1   | 2   | 2   | 2   | 3   |
| .80  | 1   | 2   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 1   | 0   | 1   | 1   | .80  | 1   | 3   | 5   | 4   | 2   | 0   | 1   | 1   | 0   | 0   | 1   |
| .90  | 5   | 5   | 5   | 4   | 4   | 4   | 4   | 1   | 2   | 4   | 5   | .90  | 7   | 9   | 9   | 7   | 4   | 2   | 2   | 1   | 2   | 4   | 7   |
| 1.00 | 7   | 7   | 6   | 5   | 5   | 6   | 4   | 1   | 3   | 6   | 7   | 1.00 | 10  | 12  | 11  | 8   | 4   | 3   | 2   | 1   | 4   | 6   | 10  |

Z = .80

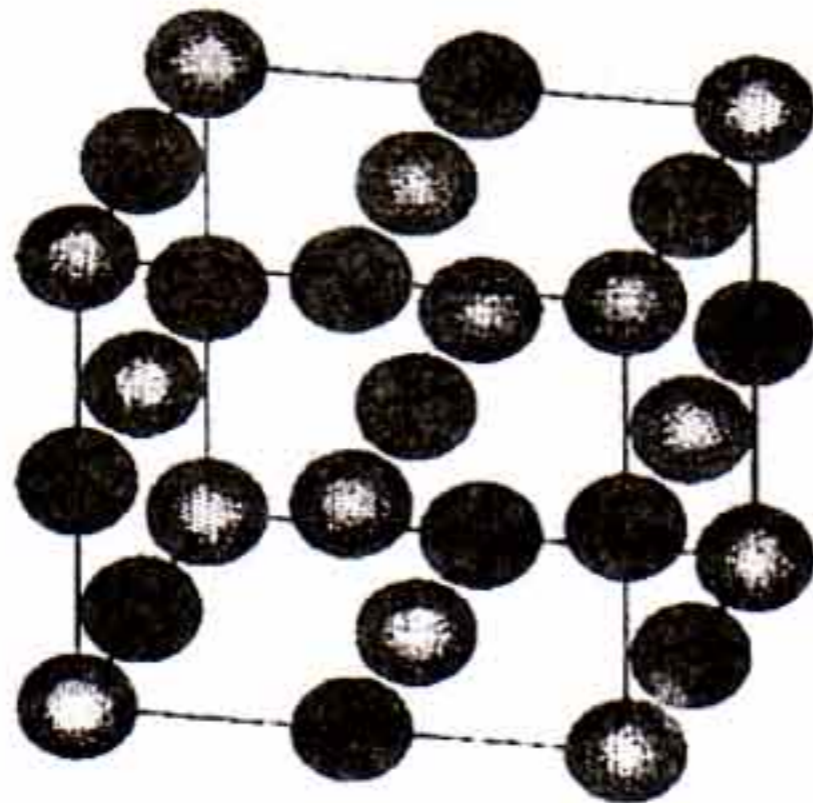
Z = .90

| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 | X/Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| .00  | 16  | 18  | 15  | 9   | 3   | 1   | 1   | 1   | 5   | 10  | 16  | .00  | 22  | 21  | 16  | 8   | 2   | 2   | 2   | 3   | 9   | 17  | 22  |
| .10  | 14  | 14  | 10  | 5   | 1   | 2   | 1   | 2   | 5   | 10  | 14  | .10  | 18  | 16  | 11  | 4   | 1   | 2   | 2   | 4   | 9   | 15  | 18  |
| .20  | 7   | 5   | 3   | 1   | 2   | 1   | 1   | 1   | 3   | 6   | 7   | .20  | 8   | 6   | 3   | 2   | 2   | 1   | 1   | 3   | 6   | 8   | 8   |
| .30  | 3   | 2   | 4   | 4   | 2   | 1   | 2   | 1   | 2   | 4   | 3   | .30  | 3   | 3   | 4   | 3   | 0   | 2   | 2   | 1   | 4   | 4   | 3   |
| .40  | 5   | 5   | 5   | 4   | 1   | 2   | 4   | 2   | 3   | 5   | 5   | .40  | 7   | 7   | 5   | 3   | 2   | 5   | 5   | 4   | 5   | 7   | 7   |
| .50  | 5   | 5   | 5   | 4   | 2   | 3   | 5   | 3   | 2   | 3   | 5   | .50  | 7   | 7   | 7   | 5   | 4   | 6   | 6   | 4   | 4   | 6   | 7   |
| .60  | 4   | 5   | 6   | 6   | 4   | 3   | 4   | 3   | 0   | 3   | 4   | .60  | 6   | 7   | 8   | 6   | 4   | 5   | 5   | 3   | 2   | 5   | 6   |
| .70  | 2   | 3   | 4   | 5   | 3   | 1   | 2   | 2   | 1   | 3   | 2   | .70  | 3   | 4   | 5   | 5   | 2   | 2   | 2   | 1   | 2   | 3   | 3   |
| .80  | 4   | 6   | 7   | 5   | 2   | 0   | 1   | 1   | 1   | 1   | 4   | .80  | 6   | 8   | 8   | 5   | 2   | 1   | 1   | 1   | 1   | 3   | 6   |
| .90  | 12  | 14  | 13  | 8   | 3   | 0   | 1   | 0   | 2   | 7   | 12  | .90  | 17  | 18  | 14  | 8   | 3   | 1   | 2   | 1   | 5   | 11  | 17  |
| 1.00 | 16  | 18  | 15  | 9   | 3   | 1   | 1   | 1   | 5   | 10  | 16  | 1.00 | 22  | 21  | 16  | 8   | 2   | 2   | 2   | 3   | 9   | 17  | 22  |

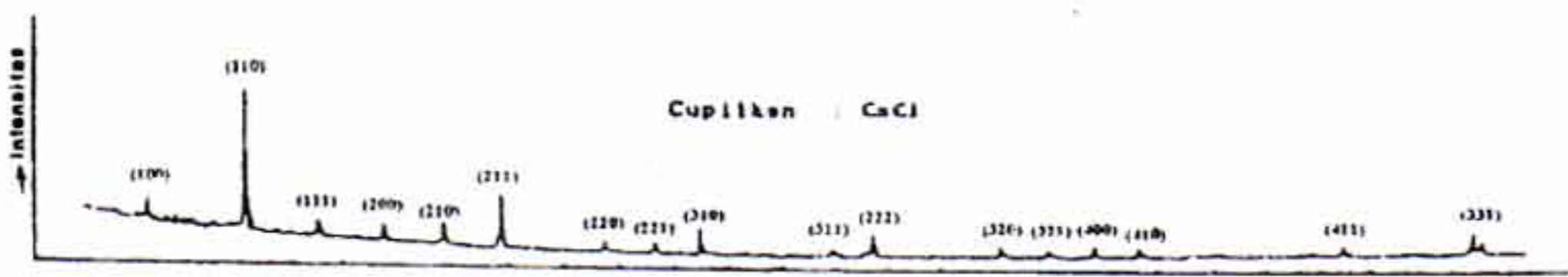
$$Z = 1.00$$

| X\Y  | .00 | .10 | .20 | .30 | .40 | .50 | .60 | .70 | .80 | .90 | 1.0 |
|------|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| .00  | 24  | 21  | 13  | 6   | 2   | 2   | 2   | 6   | 13  | 21  | 24  |
| .10  | 19  | 15  | 8   | 3   | 2   | 2   | 3   | 7   | 13  | 18  | 19  |
| .20  | 8   | 5   | 2   | 2   | 1   | 1   | 2   | 4   | 8   | 9   | 8   |
| .30  | 3   | 3   | 3   | 1   | 1   | 2   | 2   | 3   | 5   | 5   | 3   |
| .40  | 8   | 6   | 4   | 2   | 5   | 6   | 5   | 5   | 7   | 8   | 8   |
| .50  | 8   | 8   | 6   | 5   | 6   | 7   | 6   | 5   | 6   | 8   | 8   |
| .60  | 8   | 8   | 7   | 5   | 5   | 6   | 5   | 2   | 4   | 6   | 8   |
| .70  | 3   | 5   | 5   | 3   | 2   | 2   | 1   | 1   | 3   | 3   | 3   |
| .80  | 8   | 9   | 8   | 4   | 2   | 1   | 1   | 2   | 2   | 5   | 8   |
| .90  | 19  | 18  | 13  | 7   | 3   | 2   | 2   | 3   | 8   | 15  | 19  |
| 1.00 | 24  | 21  | 13  | 6   | 2   | 2   | 2   | 6   | 13  | 21  | 24  |

Dari tabel terlihat bahwa densitas elektron yang tinggi menunjukkan posisi-posisi atom-atom yang terdapat di dalam kristal tersebut, posisi atom yang terdapat di dalam unit kristal dapat terlihat pada tabel tersebut. Bila digambarkan di dalam tiga dimensi, posisi atom-atom tersebut seperti terlihat pada Gambar 2



Gambar 2 Atom NaCl yang digambarkan didalam 3-dimensi, di mana bola berwarna terang untuk atom Na dan yang berwarna gelap untuk atom Cl.  
Data difraksi sinar x untuk CsCl tertera pada Gambar 3



**Gambar 3 : Pola difraksi sinar-x CsCl**

Dari Tabel 2 dan persamaan (15) dengan “least squares fit” didapat

$$\text{untuk Cl : } C_1 = 11.02872 \quad C_2 = 1.85730;$$

$$\text{untuk Cs : } C_1 = 56.54155 \quad C_2 = 1.35660$$

Hasil analisis didapat parameter seperti tertera pada Tabel 5

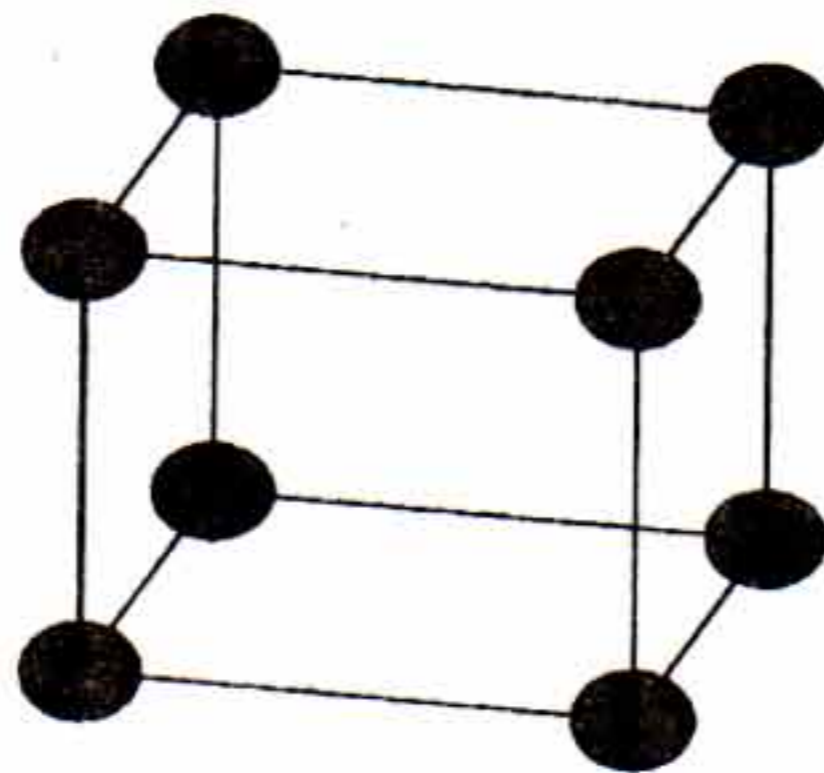
**Tabel 5 : Parameter puncak-puncak difraksi sinar-x CsCl**

| No | hkl | $\theta$ | $\text{Sin } \theta/\lambda$ | f(Cs)    | f(Cl)    |
|----|-----|----------|------------------------------|----------|----------|
| 1  | 100 | 10.73    | .121                         | 47.99139 | 13.98169 |
| 2  | 110 | 15.28    | .171                         | 44.83104 | 12.70647 |
| 3  | 111 | 18.86    | .210                         | 42.53426 | 11.80209 |
| 4  | 200 | 21.89    | .242                         | 40.71752 | 11.10053 |
| 5  | 210 | 24.67    | .271                         | 39.15050 | 10.50546 |
| 6  | 211 | 27.22    | .297                         | 37.79487 | 9.99835  |
| 7  | 220 | 31.86    | .343                         | 35.52175 | 9.16449  |
| 8  | 221 | 34.04    | .363                         | 34.53698 | 8.80980  |
| 9  | 310 | 36.18    | .383                         | 33.62015 | 8.48324  |
| 10 | 311 | 38.28    | .402                         | 32.77511 | 8.18541  |
| 11 | 222 | 40.33    | .420                         | 31.94803 | 7.90231  |
| 12 | 320 | 42.34    | .437                         | 31.24483 | 7.65396  |
| 13 | 321 | 44.33    | .454                         | 30.55745 | 6.41861  |
| 14 | 400 | 48.32    | .485                         | 29.29064 | 6.99047  |
| 15 | 410 | 50.36    | .500                         | 28.69835 | 6.79283  |
| 16 | 411 | 52.42    | .514                         | 28.13694 | 6.60701  |
| 17 | 331 | 54.52    | .529                         | 27.60155 | 6.43119  |
| 18 | 420 | 56.68    | .542                         | 27.08871 | 6.26406  |
| 19 | 421 | 58.89    | .556                         | 26.60264 | 6.10683  |
| 20 | 332 | 61.20    | .569                         | 26.13522 | 5.95673  |
| 21 | 422 | 66.26    | .594                         | 25.25120 | 5.67580  |

Dalam unit kristal CsCl hanya ada dua atom, masing-masing satu atom Cs pada posisi(0,0,0) dan satu atom Cl pada posisi(0.5,0.5,0.5). Hasil perhitungan densitas relatif 3-dimensi menggunakan persamaan (14) tertera pada Tabel 4. Berbeda dengan kristal NaCl, pada Tabel 4 hanya menunjukkan adanya atom-atom yang berada pada titik-titik sudut kubus saja, sedangkan atom yang berada pada pusat kubus tidak terlihat. Hal ini terjadi karena data difraksi sinar-x untuk kristal BCC hanya dapat memperlihatkan pola seperti kristal kubik sederhana baik untuk atom-atom yang berada pada titik-titik sudut kubus maupun yang berada di pusat kubus karena atom



yang berada di pusat kubus ini juga terlihat oleh sinar-x pada peristiwa difraksinya seperti berada pada titik sudut dari kubus yang lain yang serupa sehingga akan menghasilkan pola yang persis sama. Bila Tabel 4 dibuat gambar 3-dimensinya, maka posisi atom-atom seperti tertera pada Gambar 4. Atom-atom yang terdapat pada titik-titik sudut tersebut tidak dapat dibedakan apakah atom Cs atau atom Cl, karena sebenarnya kedua atom menghasilkan pola yang sama.



**Gambar 4 Atom CsCl yang digambarkan dalam 3 dimensi**

## **KESIMPULAN DAN SARAN**

Dari pembahasan pada bab-bab yang terdahulu dapat disimpulkan bahwa dengan menggunakan komputer mikro digital (PC) dengan microprocessor yang cepat, yang dikombinasikan dengan metode numerik Fourier, perhitungan densitas elektron dalam suatu kristal 3-dimensi dapat dilakukan secara langsung dengan hasil yang cukup baik. Kelemahan menggunakan difraksi sinar-x adalah bahwa kita tidak dapat memperoleh pola difraksi kristal BCC yang dapat membedakan antara pola yang disebabkan oleh

---

atom-atom yang berada pada titik-titik sudut dan atom-atom yang berada di pusat kubus, sehingga untuk kristal semacam ini kita perlu mencari metode yang lain.

## **DAFTAR PUSTAKA**

1. BAKRIE, FAUZI, Tesis, Program Pasca Sarjana, Fisika, I.T.B., 1998.
2. BRAGG, W.H., *Phil. Mag.* 27, 881, 1914
3. CULLITY, B.D., "Elements of X-Ray Diffraction", Add.-Wesley Publ. Company, 1956, p 42
4. CULLITY, B.D., "Elements of X-Ray Diffraction", Add.-Wesley Publ. Coy., 1956, p.474
5. CRUICKSHANK, D.W.J., "Fourier Synthesis and Structure Factors", Section 6(1972)