

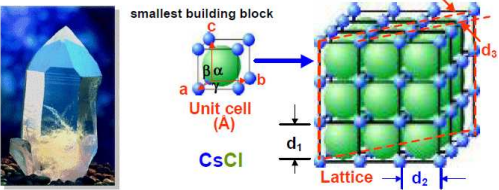
Pertemuan ke-4  
DASAR-DASAR KRISTALOGRAFI  
(GEOMETRI KRISTAL)

NURUN NAYIROH, M.Si

DIFRAKSI SINAR-X

## MATERI

- Kisi kristal dan sel satuan
- Parameter-parameter kisi
- Koordinat fraksional
- Indeks Miller, Bidang Kristal dan Arah Kristal
- Sistem Kristal



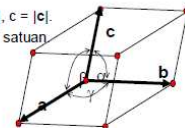
Sebuah kristal terdiri dari susunan sel satuan (unit cell) yang periodik di dalam sebuah kisi. Unit cell dapat mengandung atom tunggal atau atom-atom dalam susunan yang tetap.

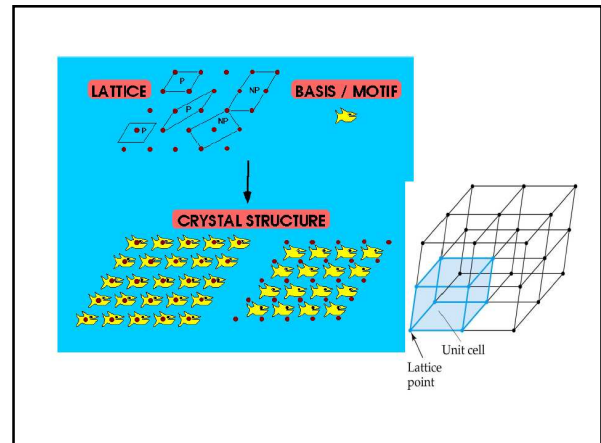
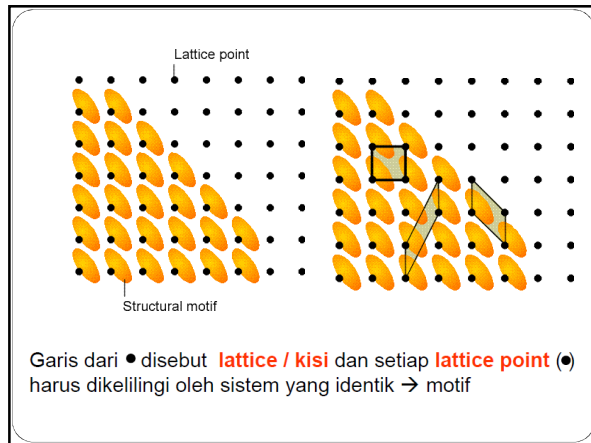
Kristal-kristal itu terdiri dari bidang-bidang atom yang menempati suatu jarak  $d$  tertentu, tetapi dapat dipecah ke dalam beberapa bidang atom, tiap jarak  $d$  yang berbeda.

$a, b$  dan  $c$  (panjang) dan sudut  $\alpha, \beta$ , dan  $\gamma$  diantara  $a, b$  dan  $c$  adalah konstanta kisi atau parameter-parameter yang dapat ditentukan dengan XRD.

## Kisi dan Sel Satuan

- Setiap kristal diturunkan dari “*building block*” dasar yang berulang ke segala arah. “*Building block*” ini dikenal sebagai **unit sel (sel satuan)**.
- Sebuah kristal memiliki simetri translasi - menurut definisi.
  - Jika  $\rho(\mathbf{r})$  adalah rapat elektron dalam kristal di  $\mathbf{r}$  maka ada 3 vektor  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  &  $\mathbf{c}$  sed.rupa shg:
 
$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r} + u \cdot \mathbf{a} + v \cdot \mathbf{b} + w \cdot \mathbf{c})$$
 dengan  $u, v$  &  $w$  integer.
- Setiap bentuk identik dinamakan *unit cell*.
- $\mathbf{a}, \mathbf{b}$  &  $\mathbf{c}$  = vektor sel satuan.
- Panjang vektor sel satuan  $a = |\mathbf{a}|, b = |\mathbf{b}|, c = |\mathbf{c}|$ .
- $\alpha, \beta$  &  $\gamma$  = sudut-sudut antara vektor2 sel satuan
- *Right handed coordinate system*.





## Fraksi Koordinat Atomik

Posisi satu atom dalam unit sel biasanya digambarkan dengan fraksi koordinat

$x \times a \rightarrow \text{paralel } a$   
 $y \times b \rightarrow \text{paralel } b$   
 $z \times c \rightarrow \text{paralel } c$

} Fraksi koordinat  $(x, y, z)$ .

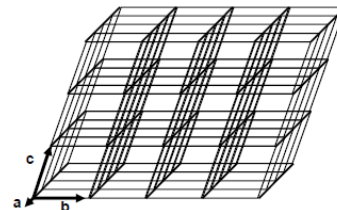
## Koordinat Fraksional

• Sembarang posisi di dalam kristal dapat dinyatakan:

$$\mathbf{r} = (u + x) \cdot \mathbf{a} + (v + y) \cdot \mathbf{b} + (w + z) \cdot \mathbf{c}$$

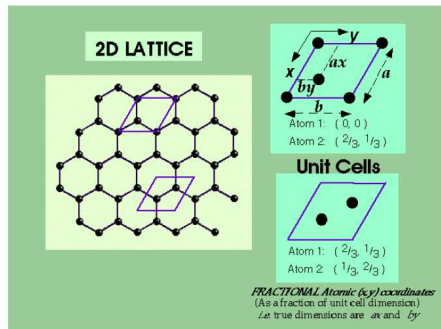
dengan  $u, v$  &  $w$  integer &  $0 < x, y, z < 1$ .

•  $x, y$  &  $z$  disebut "fractional coordinates" & menyatakan posisi di dalam sel satuan.



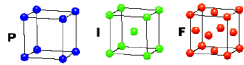
**2D LATTICES**

contoh pola heksagonal dari lapisan tunggal pada GRAFIT

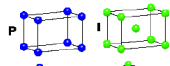
**7 Sistem Kristal**

Crystal class	Axis system
Cubic	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Hexagonal	$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Rhombohedral	$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Orthorhombic	$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Monoclinic	$a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$
Triclinic	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

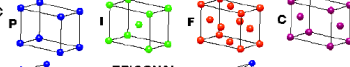
**CUBIC**  
 $a = b = c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



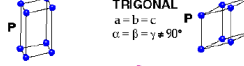
**TETRAGONAL**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



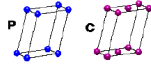
**ORTHORHOMBIC**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$



**HEXAGONAL**  
 $a = b \neq c$   
 $\alpha = \beta = 90^\circ$   
 $\gamma = 120^\circ$



**MONOCLINIC**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha = \gamma = 90^\circ$   
 $\beta \neq 120^\circ$



**TRICLINIC**  
 $a \neq b \neq c$   
 $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

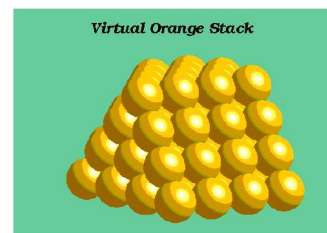


**4 Types of Unit Cell**  
P = Primitive  
I = Body-Centred  
F = Face-Centred  
C = Side-Centred

**7 Crystal Classes**  
 $\rightarrow$  14 Bravais Lattices

**Close packing of Spheres**

1926: Goldschmidt mengusulkan atom-atom dapat dianggap terusun dalam padatan itu sebagai bola-bola

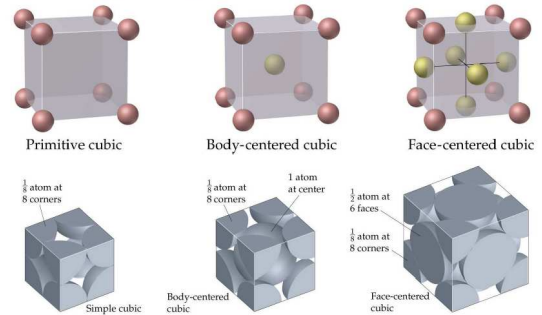


### Menghitung atom dalam unit sel 3D

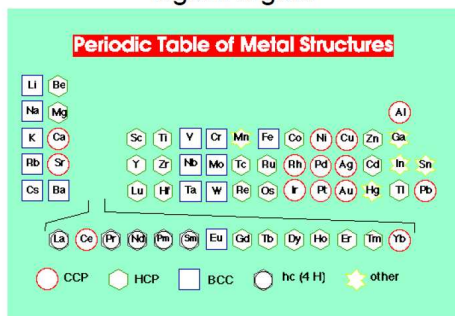
FRAKSI ATOM YANG MENEMPATI SATU UNIT SEL  
UNTUK BEBERAPA POSISI DALAM UNIT SEL

Position in Unit Cell	Fraction in Unit Cell
Center (PUSAT)	1
Face (MUKA)	$\frac{1}{2}$
Edge (TEPI)	$\frac{1}{4}$
Corner (SUDUT)	$\frac{1}{8}$

### Menghitung atom dalam unit sel 3D

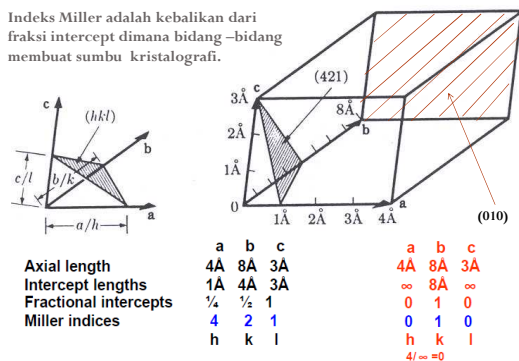


### Tipe penyusunan atom pada logam-logam

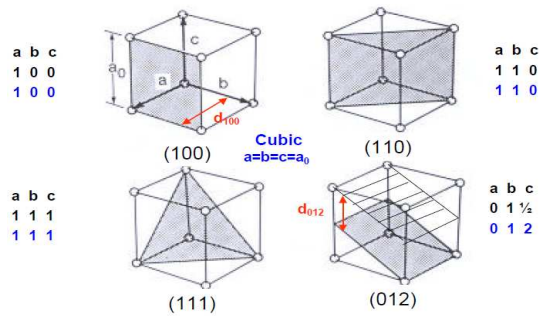


### Indeks Miller:hkl

Indeks Miller adalah kebalikan dari fraksi intercept dimana bidang-bidang membuat sumbu kristalografi.



Beberapa bidang atom dan jarak d-nya dalam simple cubic



Bilangan warna hitam adalah fraksi intercept, bilangan warna biru adalah indeks-Miller

## Indeks Bidang: Kristal Kubik

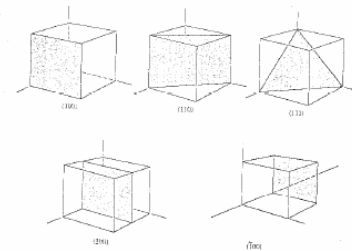
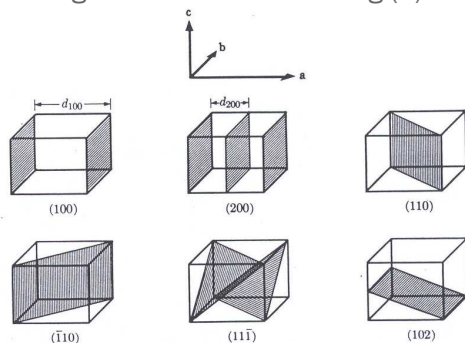
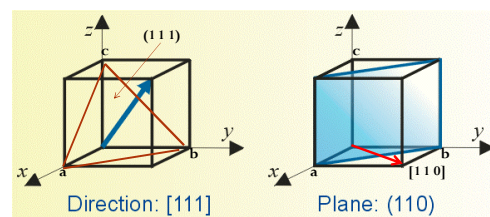


Figure 16 Indices of important planes in a cubic crystal. The plane (002) is parallel to (100) and to (200).

## Bidang dan Jarak antar Bidang (d)



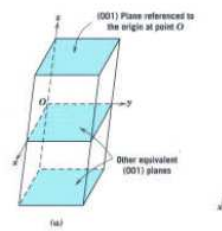
## Pengindeksian Bidang dan Arah



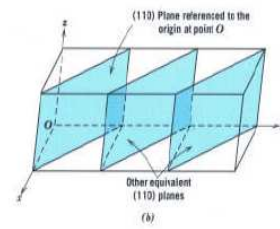
simbol arah:  $[uvw]$   
 $\langle uvw \rangle$ : suatu set sama dengan arah.

Sebuah bidang:  $(hkl)$   
 $\{hkl\}$ : suatu set sama dengan bidang

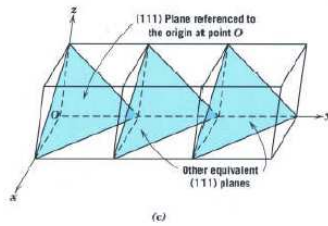
## Bidang 001



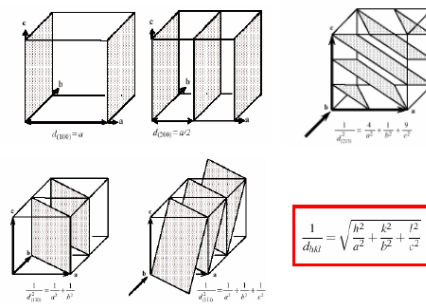
## Bidang-bidang 110

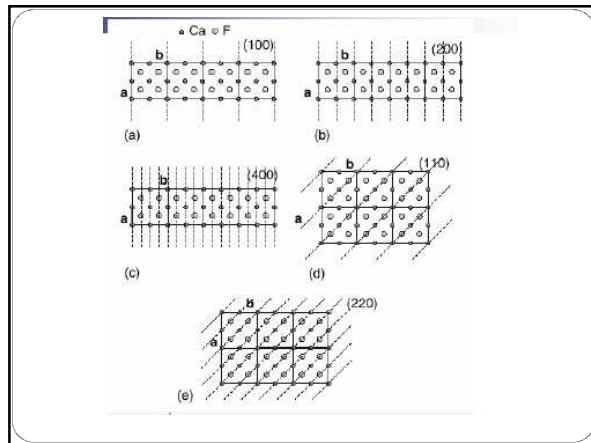


## Bidang-bidang 111



## JARAK ANTAR BIDANG KRISTAL KUBIK





## Jarak antar bidang

Table 2.4 Interplanar spacing  $d_{hkl}$

System	$1/(d_{hkl})^2$
cubic	$[h^2 + k^2 + l^2]/a^2$
tetragonal	$[(h^2 + k^2)/a^2] + [l^2/c^2]$
orthorhombic	$[h^2/a^2] + [k^2/b^2] + [l^2/c^2]$
monoclinic	$[h^2/a^2 \sin^2 \beta] + [k^2/b^2] + [l^2/c^2 \sin^2 \beta] - [(2hkl \cos \beta)/(ac \sin^2 \beta)]$
triclinic*	$[1/V^2] \{ [S_{11}h^2] + [S_{22}k^2] + [S_{33}l^2] + [2S_{12}hk] + [2S_{23}kl] + [2S_{13}hl] \}$
hexagonal	$[4/3] [(h^2 + hk + k^2)/a^2] + [l^2/c^2]$
rhombohedral	$\{ [(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 \alpha + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 \alpha - \cos \alpha)] / [a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha)] \}$

\*  $V$  = unit cell volume.

$$S_{11} = b^2c^2 \sin^2 \alpha \quad S_{22} = a^2c^2 \sin^2 \beta \quad S_{33} = a^2b^2 \sin^2 \gamma$$

$$S_{12} = abc^2 (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma) \quad S_{23} = a^2bc (\cos \beta \cos \gamma - \cos \alpha)$$

$$S_{13} = ab^2c (\cos \gamma \cos \alpha - \cos \beta)$$

## Latihan

Calculate the interplanar spacing,  $d_{hkl}$ , for:  
 (a) (111), cubic,  $a = 0.365 \text{ nm}$ ; (b) (210), tetragonal,  $a = 0.475 \text{ nm}$ ,  $c = 0.235 \text{ nm}$ ;  
 (c) (321) orthorhombic,  $a = 1.204 \text{ nm}$ ,

$b = 0.821 \text{ nm}$ ,  $c = 0.652 \text{ nm}$ ; (d) (222), monoclinic,  $a = 0.981 \text{ nm}$ ,  $b = 0.365 \text{ nm}$ ,  $c = 0.869 \text{ nm}$ ,  $\beta = 127.5^\circ$ ; (e) (121), hexagonal,  $a = 0.693 \text{ nm}$ ,  $c = 1.347 \text{ nm}$ .

## Volume sel satuan

Table 2.5 Unit cell volume,  $V$

System	$V$
Cubic	$a^3$
tetragonal	$a^2c$
orthorhombic	$abc$
monoclinic	$abc \sin \beta$
triclinic	$abc \sqrt{1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma}$
hexagonal	$[\sqrt{3}/2] [a^2c] \approx 0.866a^2c$
rhombohedral	$a^3 \sqrt{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^3 \alpha}$

## Sudut antar bidang

Table 2.6 Interplanar angle  $\phi$

System	$\cos \phi$
cubic	$[(h_1b_2 + k_1k_2 + l_1l_2) / (h_1^2 + k_1^2 + l_1^2)(h_2^2 + k_2^2 + l_2^2)]^{1/2}$
orthogonal	$\left[ \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\left( \frac{a^2}{b^2} + \frac{c^2}{a^2} \right) \left( \frac{b^2}{a^2} + \frac{c^2}{a^2} \right)} \right]^{1/2}$
orthorhombic	$\left[ \frac{h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2}{\left( \frac{a^2}{b^2} + \frac{c^2}{a^2} \right) \left( \frac{b^2}{c^2} + \frac{a^2}{c^2} \right)} \right]^{1/2}$
monoclinic*	$\frac{d_1d_2 \left( \frac{h_1h_2}{a^2 \sin^2 \beta} + \frac{k_1k_2}{b^2} + \frac{l_1l_2}{c^2 \sin^2 \beta} + \frac{(h_1b_2 + l_1b_2) \cos \beta}{a^2 \sin^2 \beta} \right)}{d_1^2 d_2^2}$
triclinic*	$\frac{d_1d_2}{V^2} [S_{11}h_1h_2 + S_{22}k_1k_2 + S_{33}l_1l_2 + S_{12}(h_1k_2 + k_1h_2) + S_{13}(h_1l_2 + l_1h_2) + S_{23}(k_1l_2 + l_1k_2)]$
hexagonal	$\frac{h_1h_2 + k_1k_2 + \frac{3}{2}(k_1l_2 + l_1k_2)}{\left( \frac{h_1^2 + k_1^2 + h_1k_2}{a^2} + \frac{3l_1^2}{4c^2} \right) \left( \frac{h_2^2 + k_2^2 + h_2k_2}{a^2} + \frac{3l_2^2}{4c^2} \right)}^{1/2}$
rhombohedral*	$\frac{d_1d_2 [(h_1h_2 + k_1k_2 + l_1l_2) \sin^2 \alpha + (h_1k_2 + k_1h_2 + l_1l_2 + l_1k_2) \cos \alpha \cos 2\alpha - \frac{1}{2}]}{a^2(1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^4 \alpha)}$

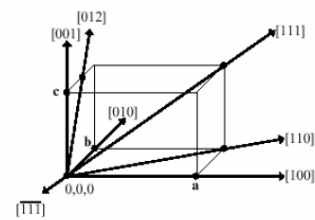
\*  $V$  = unit cell volume,  $d_i$  is the interplanar spacing of  $(h_1k_1l_1)$  and  $d_2$  is the interplanar spacing of  $(h_2k_2l_2)$  and

$S_{11} = \frac{1}{a^2 \sin^2 \alpha}$ ,  $S_{22} = \frac{1}{b^2 \sin^2 \alpha}$ ,  $S_{33} = \frac{1}{c^2 \sin^2 \alpha}$

$S_{12} = \frac{1}{ab^2} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$ ,  $S_{13} = \frac{1}{ac^2} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$

$S_{23} = \frac{1}{ab^2 c^2} (\cos \alpha \cos \beta - \cos \gamma)$

## ARAH BIDANG KRISTAL KUBIK



## Bilangan Koordinasi (CN)

**Bilangan Koordinasi (CN):** Jumlah ion atau atom yang langsung mengelilingi atom pusat bergantung pada ukuran relatif dari satu ion.

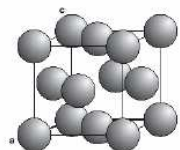
Atau angka yang menyatakan banyaknya atom-atom tetangga terdekat.

Bilangan koordinasi pada struktur padat terjejal (Close Packed structures)

	CN
• hcp	12
• ccp	12
• bcc	8
• sc / pc	6

## A1 (FCC/CCP, Struktur Cu)

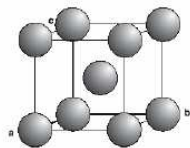
Atom positions: 0, 0, 0;  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0$ ;  
0,  $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ ;  $\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}$ ;



Berapa:  
-Z?  
-Jumlah atom terdekat?  
-Fraksi okupansi atom

### A2 (BCC, Struktur W)

Atom positions:  $0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$



Berapa:

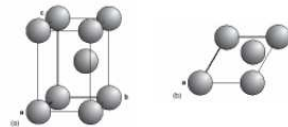
-Z?

-Jumlah atom terdekat?

-Fraksi okupansi atom

### A3 (HCP, Struktur Mg)

Atom positions:  $0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}$



Berapa:

-Z?

-Jumlah atom terdekat?

-Fraksi okupansi atom

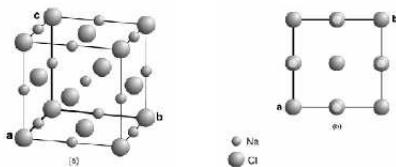
### B1 (Struktur Halite)

Atom positions: Na:  $\frac{1}{2}, 0, 0; 0, 0, \frac{1}{2}$

$0, \frac{1}{2}, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Cl:  $0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0;$

$\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}; 0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$



### C2 (Struktur Rutile)

Atom positions: Ti:  $0, 0, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

O:  $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0; \frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{2}$

$\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0; \frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2}$

