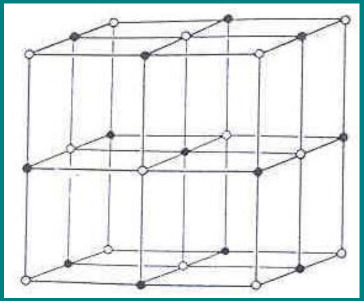
KEKRISTALAN ZAT PADAT

1.1 Pengertian

Bahan padat

Dibentuk berdasarkan keteraturan susunan atom-atom atau ion-ion penyusunnya



Bahan yang tersusun oleh deretan atom-atom yang teratur letaknya dan berulang (periodik)

KRISTAL

keteraturan atom berjangkauan panjang

zat padat yang tidak memiliki keteraturan letak atom-atom

AMORF

keteraturan atom berjangkauan pendek

Ilustrasi

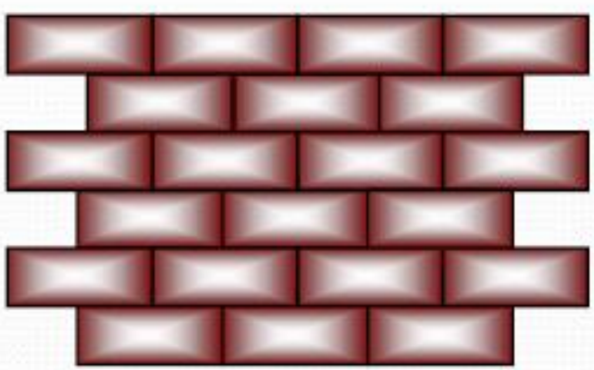
Kristal

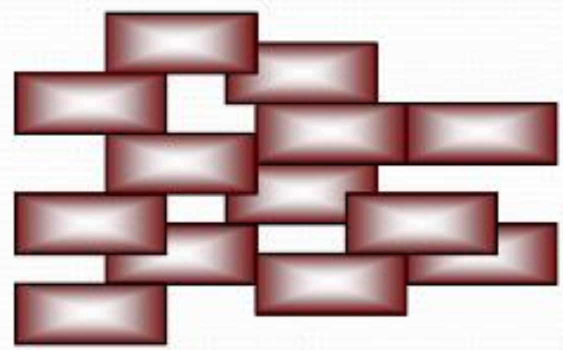
Amorf

Batu bata

kristal diibaratkan sebagai dinding bata yang terdiri dari susunan batu – bata yang teratur dan berkala serta bahan- bahan tadi memiliki keteraturan jangka panjang

amorf diibaratkan sebagai tumpukan batu bata. Sekumpulan batu bata memiliki sifat yang jelas, relatif kokoh (meskipun tak sekokoh dinding bata).





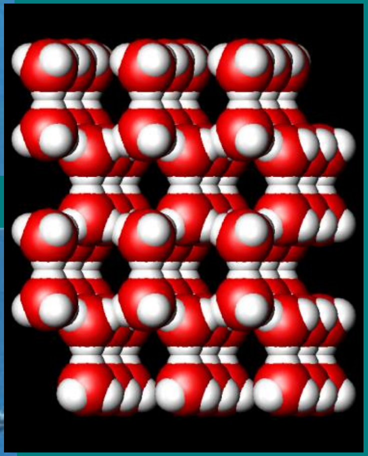
kristal ← dibentuk dari larutan, lelehan, uap, atau gabungan dari ketiganya

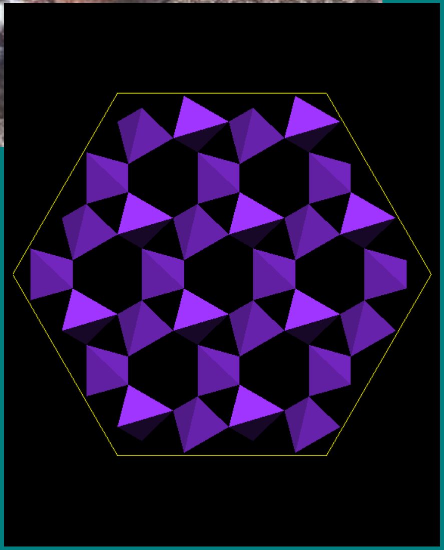
↓

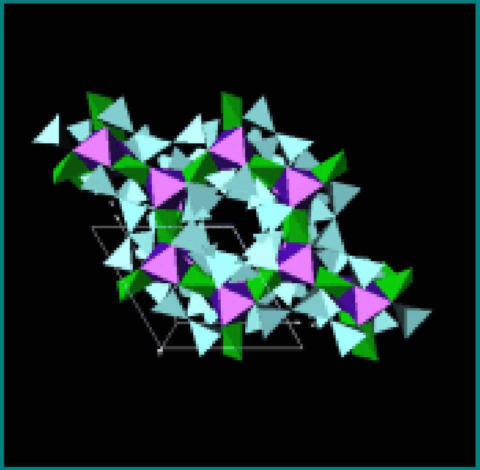
atom-atom atau pertikel penyusun zat padat dapat menata diri ← proses pertumbuhan lambat → energi potensialnya minimum

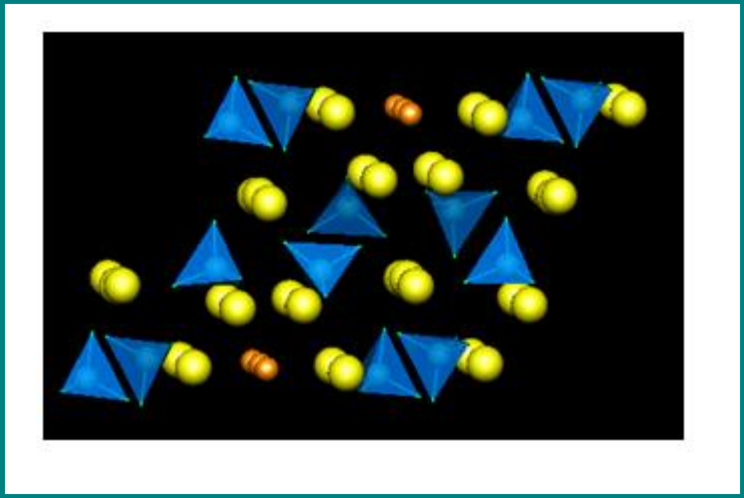
atom-atom atau pertikel penyusun zat padat tidak dapat menata diri ← proses pembentukan berlangsung cepat → memiliki tingkat energi yang lebih tinggi

Kristal Ada Dimana Saja!









kristal sempurna ← ***polikristal*** → omorf

kristal-kristal kecil → ***(microcrystalline)*** ***(nanocrystalline)***

kristal (amorf),
bahan gelas, dan
bahkan bahan cair

fisika materi terkondensasi
(condensed matter physics),

Dasar-Dasar Struktur Kristal

1. **KISI DAN BASIS KRISTAL**

- Kisi adalah sebuah susunan titi-titik yang teratur dan periodik di dalam ruang. Sebuah kristal ideal disusun oleh satuan-satuan kristal yang identik secara berulang-ulang yang tak hingga dalam ruang.

- Basis didefinisikan sebagai sekumpulan atom, dengan jumlah atom dalam sebuah basis dapat berisi satu atom atau lebih.

Lattice (kisi) :

- Sebuah susunan titik –titik yang teratur dan periodik di dalam ruang

- Sebuah abstraksi matematik

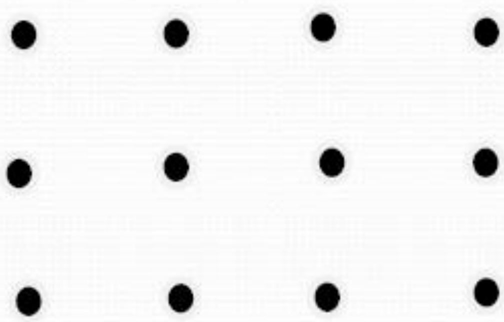
Basis : Sekumpulan atom-atom

Jumlah atom dalam sebuah basis = 1 buah atom atau lebih.

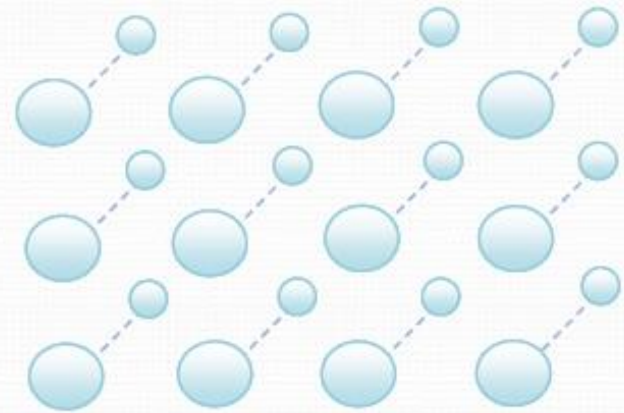
Sehingga gabungan antara :

Struktur kristal → Kisi + Basis

Struktur Kristal



Kisi

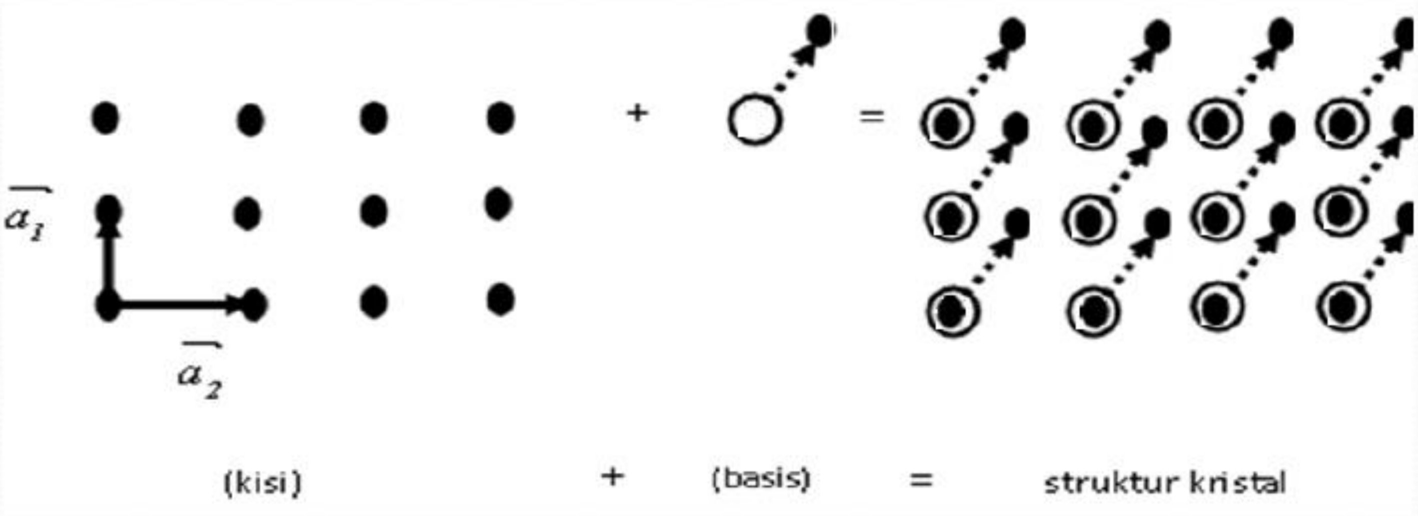


Basis

Struktur Kristal

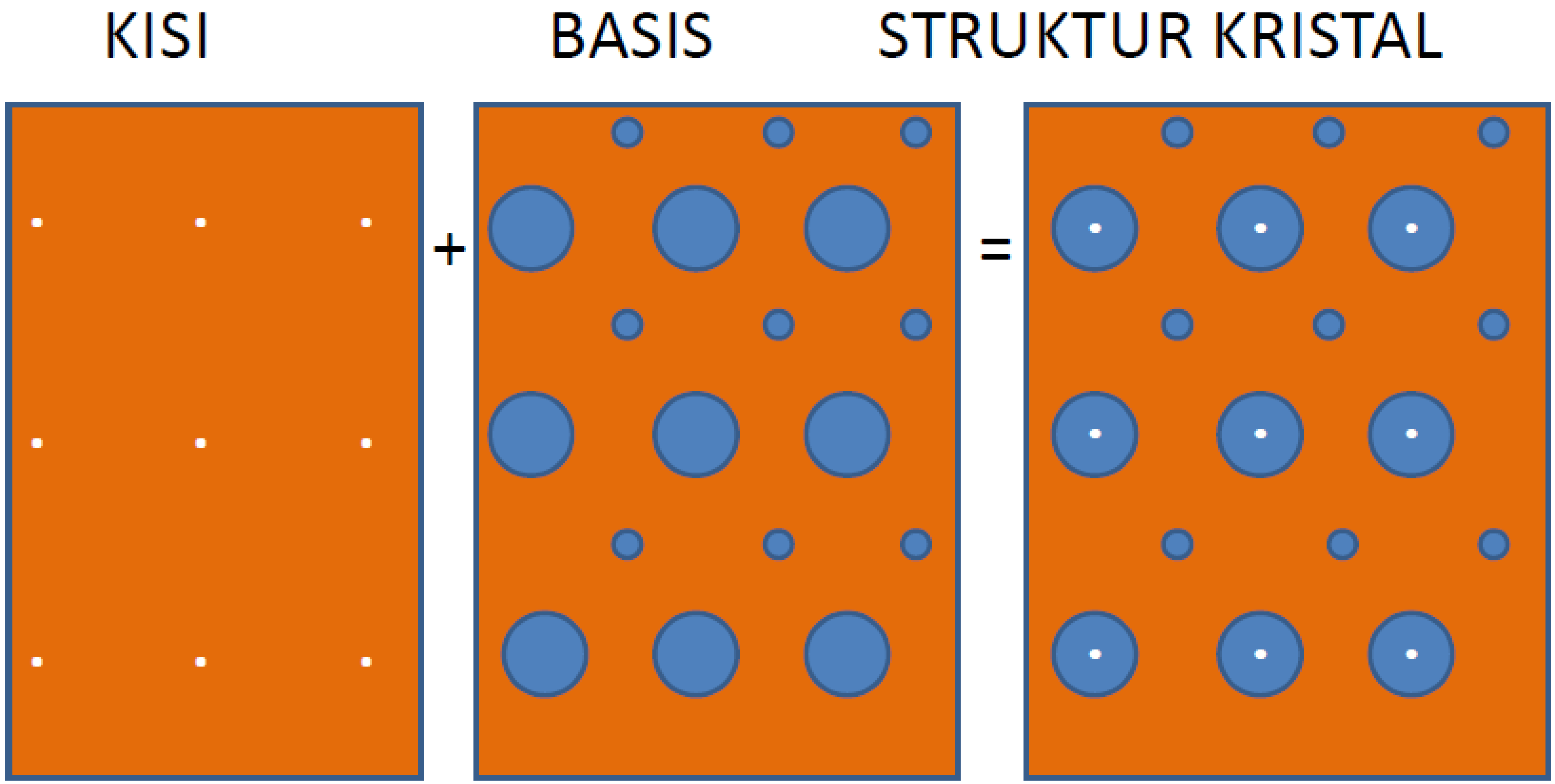
- Bahan yang tersusun oleh deretan atom-atom yang teratur letaknya dan berulang (periodik) yang tidak berhingga dalam ruang disebut bahan kristal. Kumpulan yang berupa atom atau molekul dan sel ini terpisah sejauh 1 Å atau 2 Å
- Sebaliknya, zat padat yang tidak memiliki keteraturan demikian disebut bahan amorf atau bukan-kristal

Struktur kristal akan terjadi bila ditempatkan suatu basis pada setiap titik kisi sehingga struktur kristal merupakan gabungan antara kisi dan basis. Apabila dinyatakan dalam hubungan dua dimensi adalah sebagai berikut.



Gambar Bagan struktur kristal

STRUKTUR KRISTAL



1.2 Simetri dan Kisi

1.2.1 Simetri Translasi dan Basis

Suatu kristal yang ideal terdiri dari satuan susunan yang *identik* dan *berulang* dalam ruang tiga dimensi yang tak terbatas. Satuan susunan tersebut, yang disebut *basis*, atau kumpulan molekul. Basis mengisi “wadah” (volume atau ruang) dengan ukuran tertentu, yang dapat ditranslasikan sepanjang jarak yang diskrit sehingga dapat *mengisi seluruh ruang*. Wadah yang bersangkutan disebut sel satuan *(unit cell).*

“Translasi sepanjang jarak yang diskrit” memberikan sifat simetri translasi pada kristal, artinya apabila sel satuan ditranslasikan dengan vektor translasi **T** akan diperoleh sel satuan yang identik. Vektor translasi T adalah berbentuk :

$$\mathbf{T} = u_1\mathbf{a} + u_2\mathbf{b} + u_3\mathbf{c}$$

- Didalam kristal terdapat kisi-kisi yang ekivalen yang sesuai dengan lingkungannya dan diklasifisikan menurut simetri translasi.

  Operasi translasi kisi didefinisikan sebagai *perpindahan dari sebuah kristal oleh sebuah vektor translasi kristal* , maka persamaannya

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

- Dimana u1,u2,u3 = bilangan bulat.
- a1, a2, a3 = vektor translasi primitive
- ≈ sumbu-sumbu kristal

✓ Operasi Translasi Kisi :

Perpindahan dari sebuah kristal oleh sebuah vektor translasi kristal

$$\vec{T} = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$

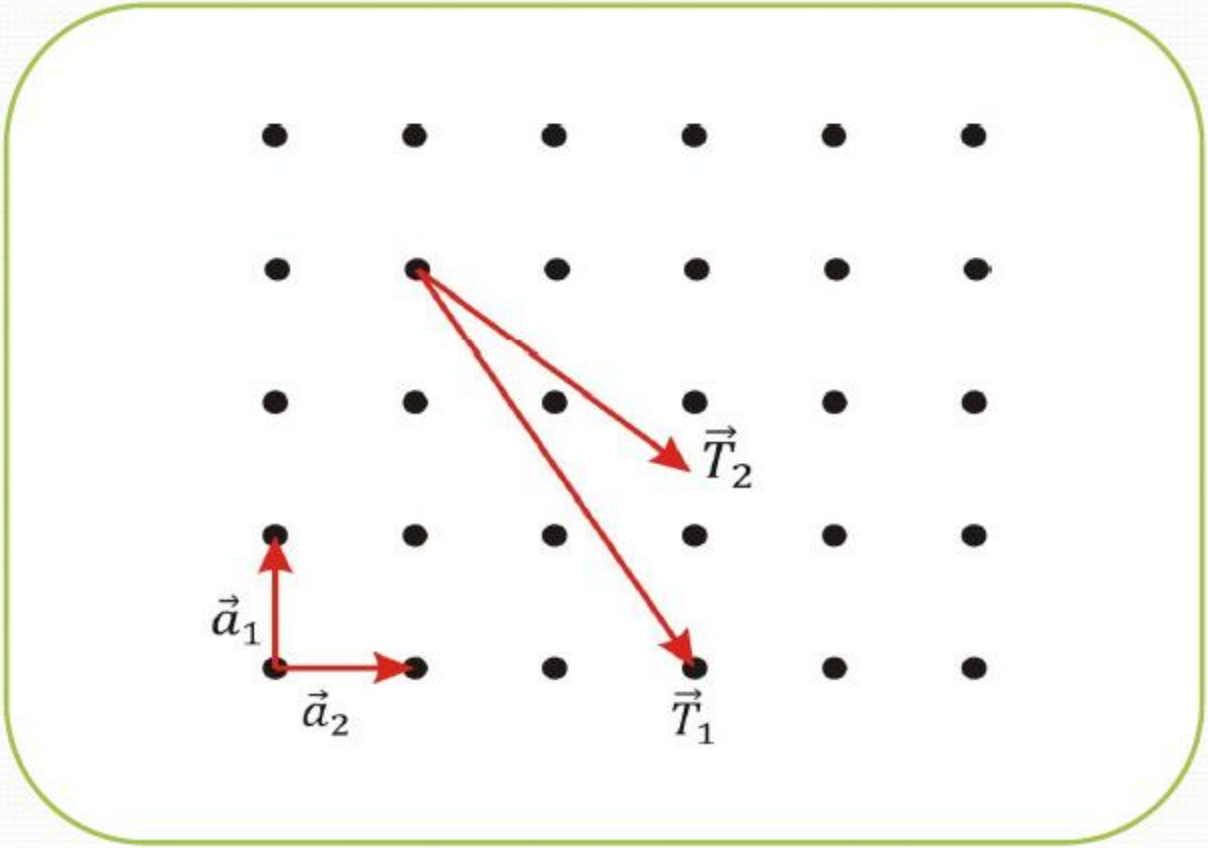
Keterangan :

$\vec{T}$ = vektor translasi kristal

u = Bilangan bulat

$\vec{a}$ = vektor translasi primitif/sumbu-sumbu kristal

Contoh Operasi Translasi Kisi



- Untuk $\vec{T}_1$

$$\vec{T}_1 = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$
$$\vec{T}_1 = -3\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2 + 0\vec{a}_3$$
$$\vec{T}_1 = -3\vec{a}_1 + 2\vec{a}_2$$

Jadi:

$u_1 = -3$ *dan* $u_2 = 2$

- Untuk $\vec{T}_2$

$$\vec{T}_2 = u_1\vec{a}_1 + u_2\vec{a}_2 + u_3\vec{a}_3$$
$$\vec{T}_1 = -1{,}5\ \vec{a}_1 + 1{,}5\ \vec{a}_2 + 0\vec{a}_3$$
$$\vec{T}_1 = -1{,}5\ \vec{a}_1 + 1{,}5\ \vec{a}_2$$

Jadi :

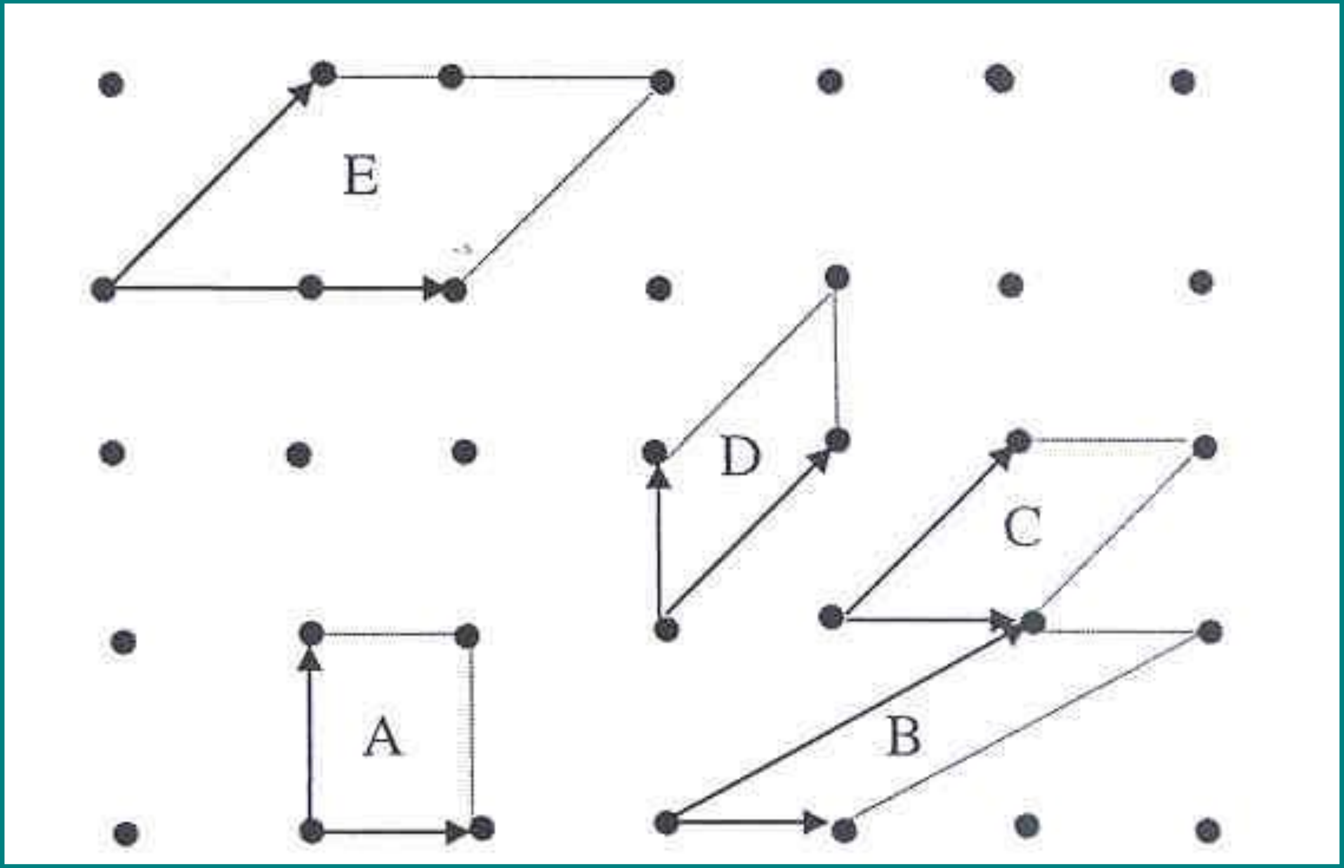
$u_1 = -1{,}5$ *dan* $u_2 = 1{,}5$

$\vec{T}_1$ **: vektor translasi (bilangan bulat)**

$\vec{T}_2$ **: bukan vektor translasi (bukan bilangan bulat)**

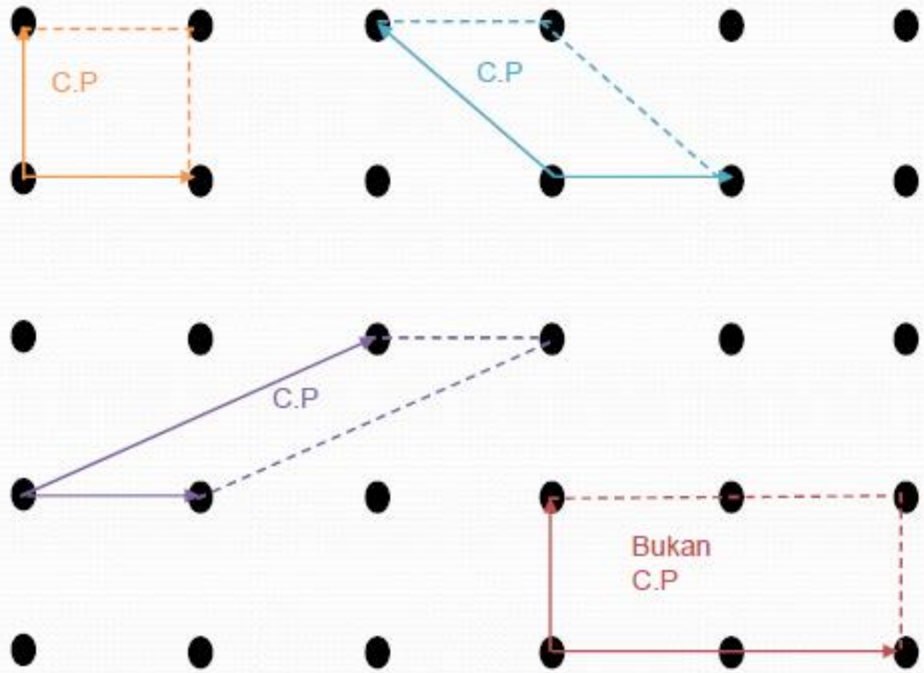
1.3.2 Sel Primitif dan Sel Satuan

Sel primitif adalah sel yang mempunyai luas atau volume terkecil .Sel primitif dibangun oleh vektor basis **a**, **b**, dan **c** yang disebut sel satuan (unit sel). Dalam ungkapan vektor-vektor ini, volume sel satuan dapat dituliskan sebagai perkalian vektor :



Kisi dua dimensi. Dapat dibentuk sel satuan sembarang

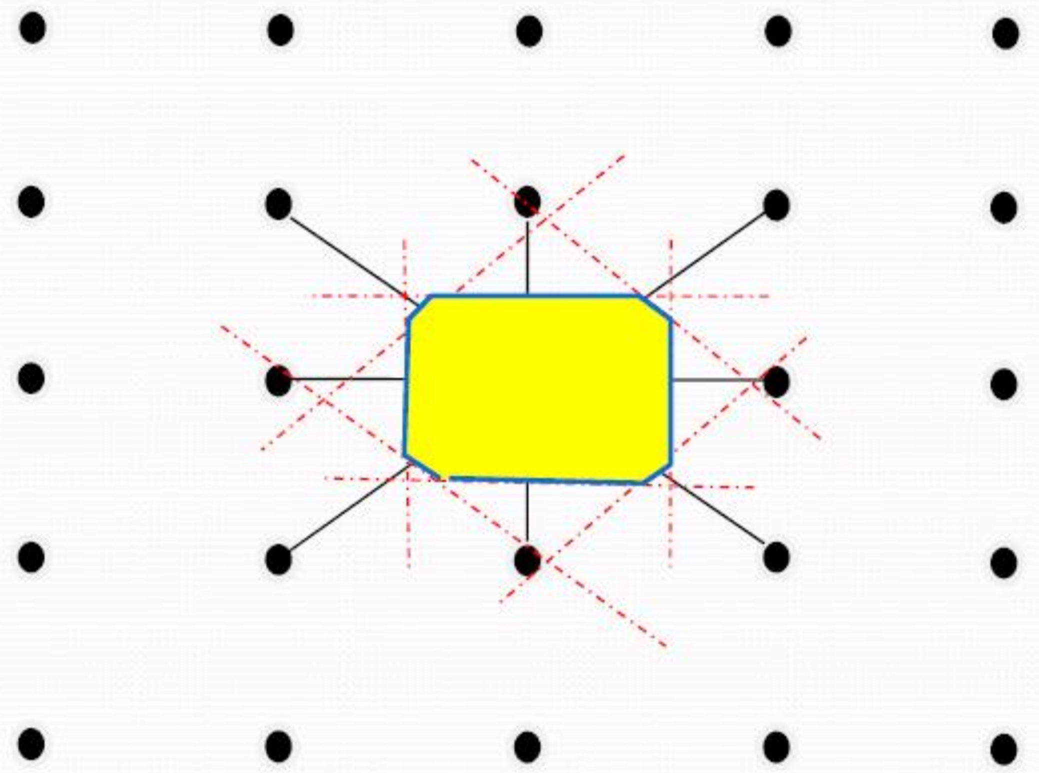
Cara menentukan sel primitif

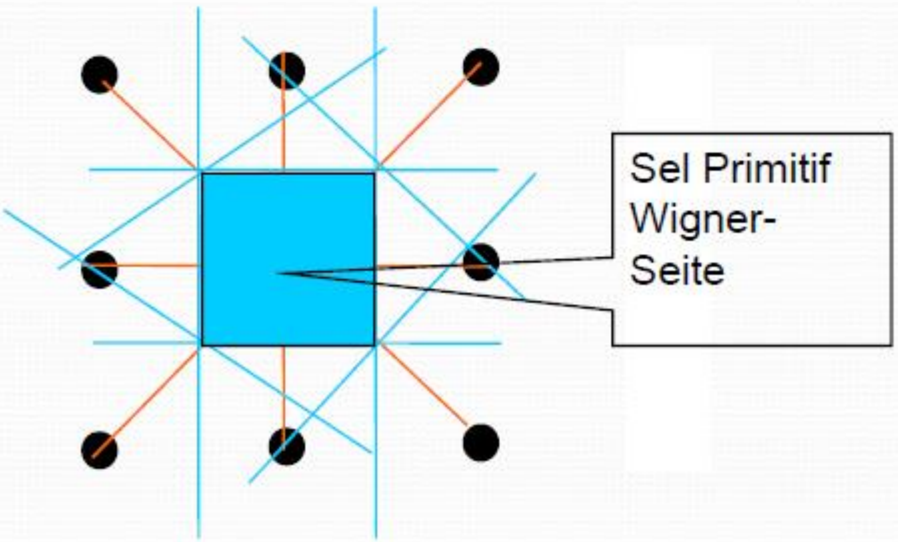


CARA LAIN UNTUK MEMILIH CEL PRIMITIF: METODA WIGNER – SEITZ :

- Ambilah salah satu titik kisi sebagai acuan (biasanya di tengah)
- Titik kisi yang anda ambil sebagai acuan dihubungkan dengan titik kisi terdekat disekitarnya.
- Di tengah-tengah garis penghubung, buatlah garis yang tegak lurus terhadap garis penghubung.
- Luas terkecil (2 dimensi) atau volume terkecil (3 dimensi) yang dilingkupi oleh garis-garis atau bidang-bidang ini yang disebut sel primitive Wigner-Seitz.

Cara menggambarkan sel primitif *Wigner-Seitz*




Sel Primitif
Wigner-
Seite

Sistem Kisi Kristal dan Kisi Bravais

1. Tipe-tipe Kisi Dasar

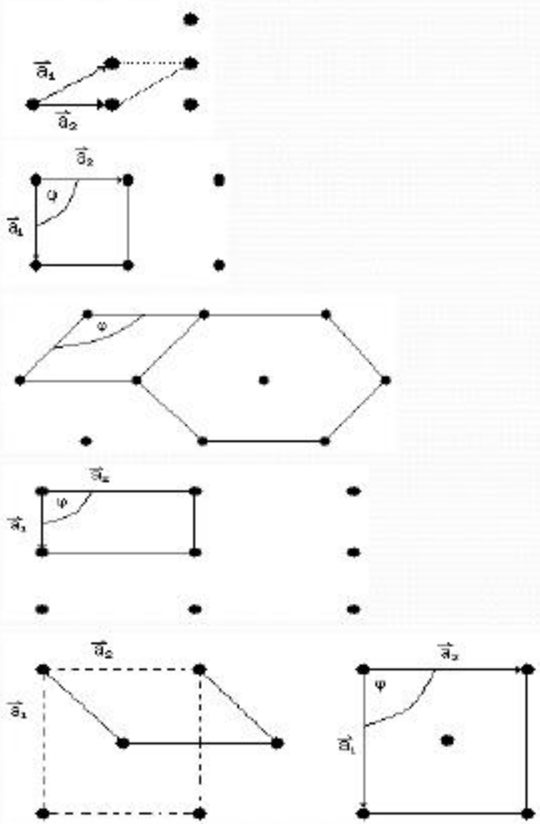
a. Kisi miring,

b. Kisi bujur sangkar

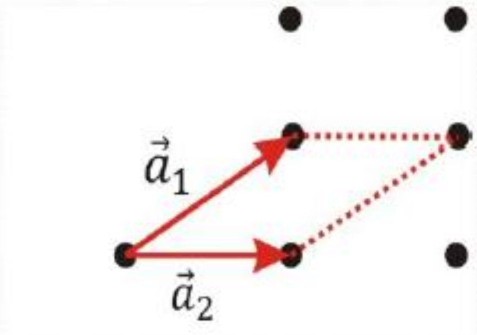
c. Kisi heksagonal

d. Kisi segi panjang

e. Kisi segi panjang berpusat



1. **Kisi Miring**

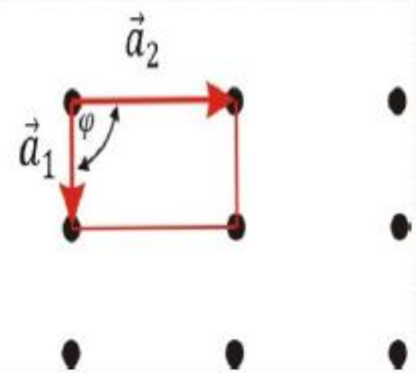


$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$

$\varphi \neq 90^0$

Sel satuannya berbentuk jajaran genjang

2. **Kisi Segi Panjang**

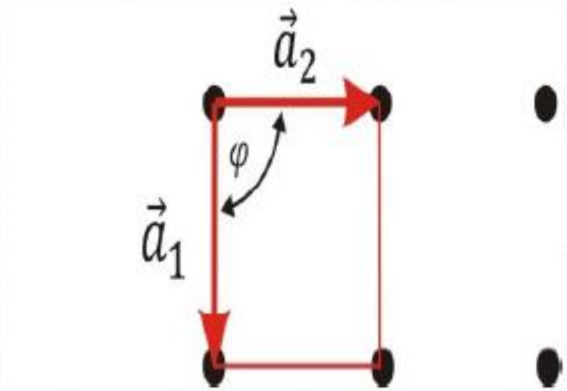


$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$

$\varphi = 90^0$

Sel satuannya berbentuk segi empat panjang

3. Kisi Bujur Sangkar



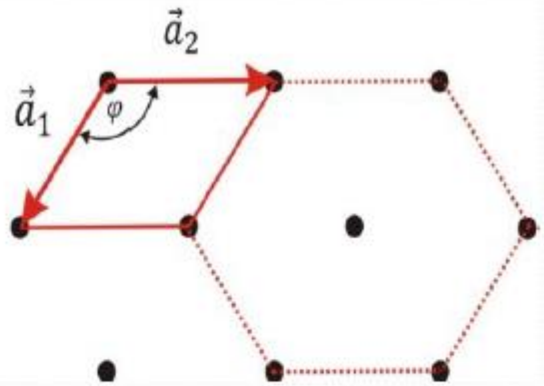
$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$$

$$\varphi = 90^0$$

Sel satuannya berbentuk bujur sangkar pada :

- **Sel primitif** : $(4 \times {}^1/_4)$ **: 1 buah**
- **Sel Konvensional** : $(4 \times {}^1/_4)$ **: 1 buah**

4. Kisi Heksagonal



$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$

$\varphi = 120^0$

Sel satuannya berbentuk belah ketupat.
Dengan jumlah titik kisi :

- **Sel primitif : (4 × 1/4) = 1 buah**
- **Sel Konvensional : (6 × 1/3) + 1 = 3 buah**

2. TIPE KISI 3 DIMENSI

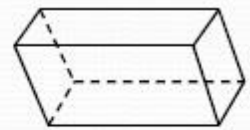
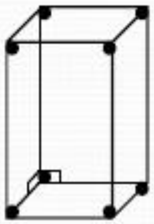
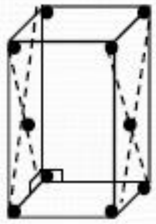
Untuk tipe kisi 3 dimensi terdapat 7 sistem kisi kristal, yaitu sebagai berikut:

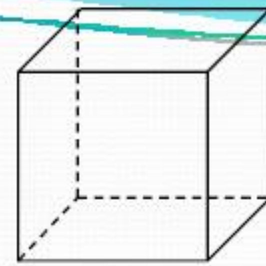
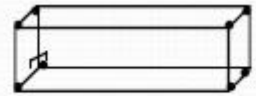
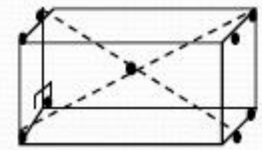
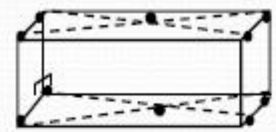
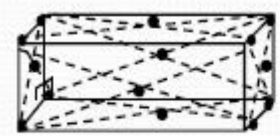
1. Triklinik
2. Monoklin
3. Orthorombik
4. Tetragonal
5. Kubus
6. Trigonal
7. Heksagonal

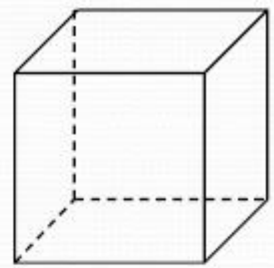
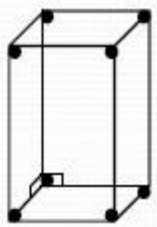
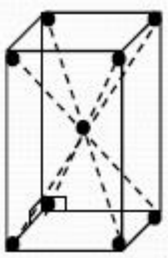
Tipe Lattice (kisi) 3D

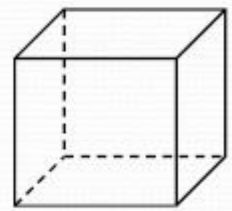
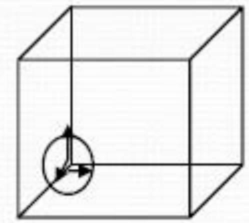
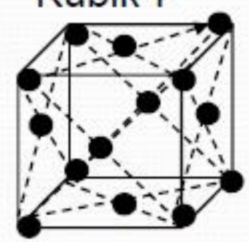
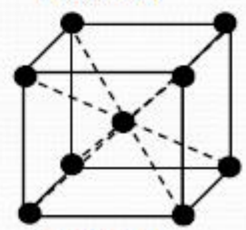
Terdapat 7 sisitem kisi kristal yakni:

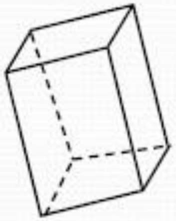
No	Sistem kristal	Sumbu kristal/ sudut kristal	Bentuk sel satuan	Kisi bravais	Jml kisi
1.	Triklinik	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma$	 Paralelopipedum miring	 Triklin-p	1

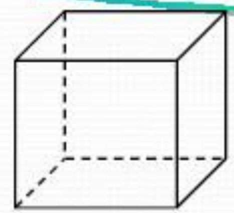
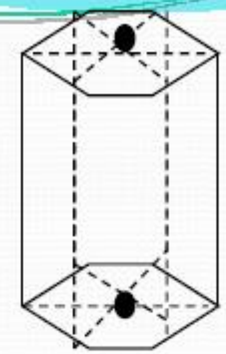
2	Minoklin	$a1 = a2 =$ $a3$ $\alpha = \beta =$ $90o \neq \gamma$	 Paralelopipedum miring	 Moniklin- P  Monoklin-B	2

3	Orthoromb ik	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$	 Balok siku-siku	 Orthorombik-P  Orthorombik-I  Orthorombik-C  Orthorombik-F	4

No	Sistem kristal	Sumbu kristal/ sudut kristal	Bentuk sel satuan	Kisi bravais	Jml kisi
4	Tetragona l	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$	 Balok siku-siku	 Tetragonal-P  Tetragonal-I	2

No	Sistem kristal	Sumbu kristal/ sudut kristal	Bentuk sel satuan	Kisi bravais	Jml kisi
5.	kubus	$a1 = a2 = a3$ $\alpha = \beta = \gamma = 90o$	 kubus	 Kubik-P  Kubik-F  Kubik-I	3

No	Sistem kristal	Sumbu kristal/ sudut kristal	Bentuk sel satuan	Kisi bravais	Jml kisi
6	Trigonal	$a1 \neq a2 \neq a3$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90o$	 Paralelopepidum muka-mukanya berupa belah ketupat	 Trigonal-R	1

7	Heksagonal	$a1 = a2 \neq a3$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma = 90o$	 Paralelopepidum tegak,bidang atas dan alas berupa belah ketupat 120^{o}	 Heksagonal-P	1

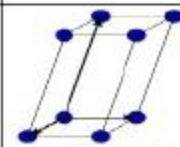
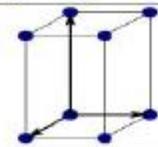
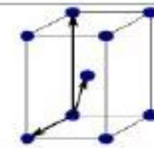
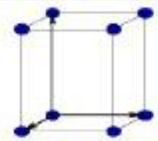
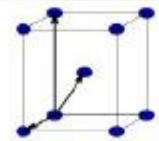
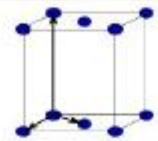
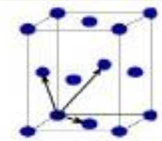
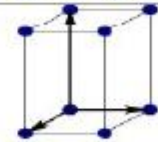
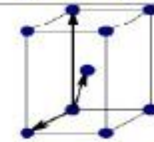
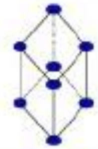
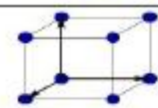
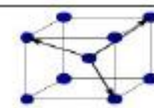
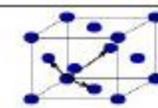
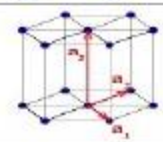
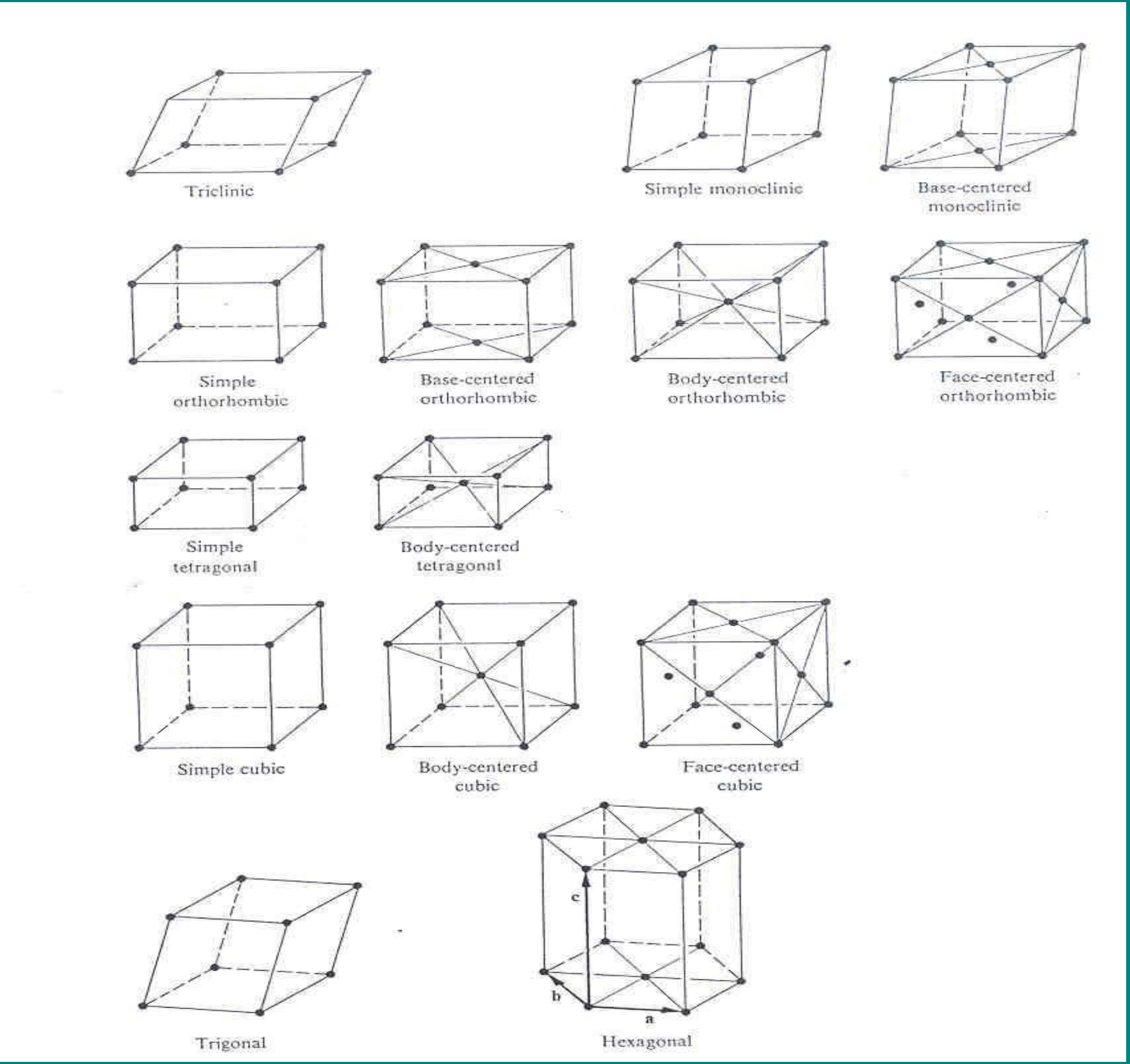
Bravais lattice	Parameters	Simple (P)	Volume centered (I)	Base centered (C)	Face centered (F)
Triclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} \neq \alpha_{23} \neq \alpha_{31}$				
Monoclinic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$ $\alpha_{12} \neq 90°$				
Orthorhombic	$a_1 \neq a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Tetragonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Trigonal	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} < 120°$				
Cubic	$a_1 = a_2 = a_3$ $\alpha_{12} = \alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				
Hexagonal	$a_1 = a_2 \neq a_3$ $\alpha_{12} = 120°$ $\alpha_{23} = \alpha_{31} = 90°$				

Table 1.1: Bravais lattices in three-dimensions.

Tujuh Sistem Kristal dan 14 Kisi Bravais

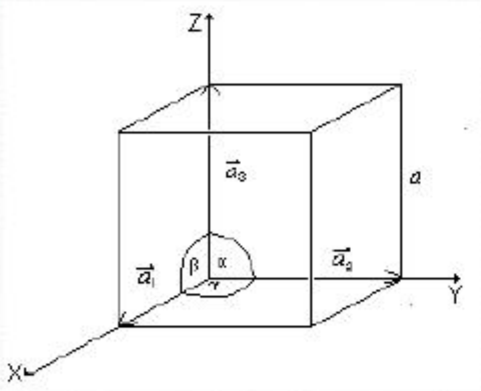


Struktur Kristal Kubik

Tiga jenis struktur kristal yang relatif sederhana dapat dijumpai pada kebanyakan logam, yaitu :

1. *kubus sederhana (simple cubic = SC).*
2. *kubus pusat bidang sisi (face-centered cubic = FCC),*
3. *kubus pusat ruang badan (body-centered cubic = BCC),*

1. Simple Cubic



kedudukan atom dalam sudut unit sel

Model simple cubic dalam 3 dimensi

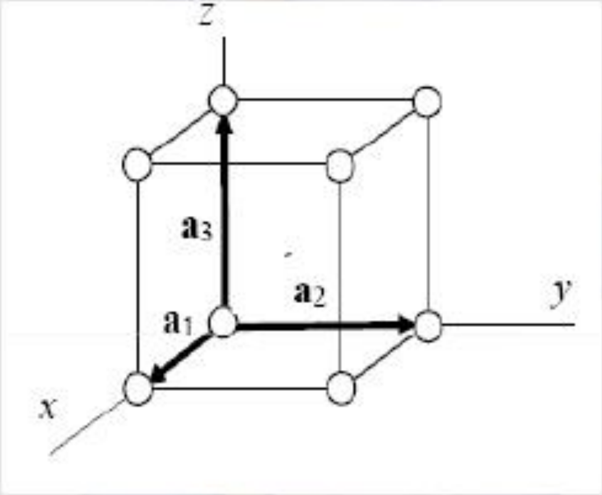
Sel Primitif = Sel konvensional.

Jumlah titik lattice = 8 X 1/8 = 1 buah

$a_1 = ax$
$a_2 = ay$
$a_3 = az$

Kisi Bravais kubik memiliki tiga bentuk kisi :

Simple Cubic (sc)



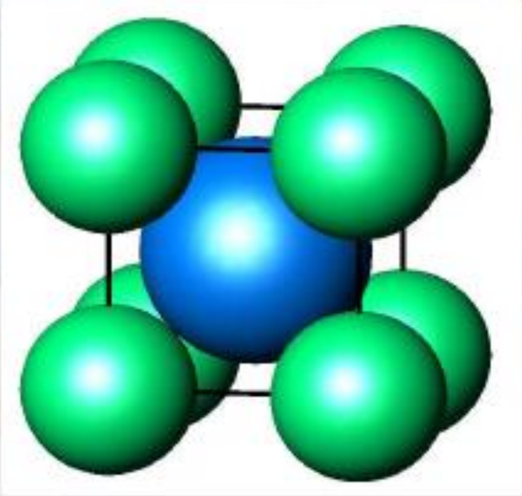
Volume sel satuan = a^3

Titik kisi persel = 8 x1/8 = 1

Jarak tetangga terdekat = a

Jml tetangga terdekat = 6

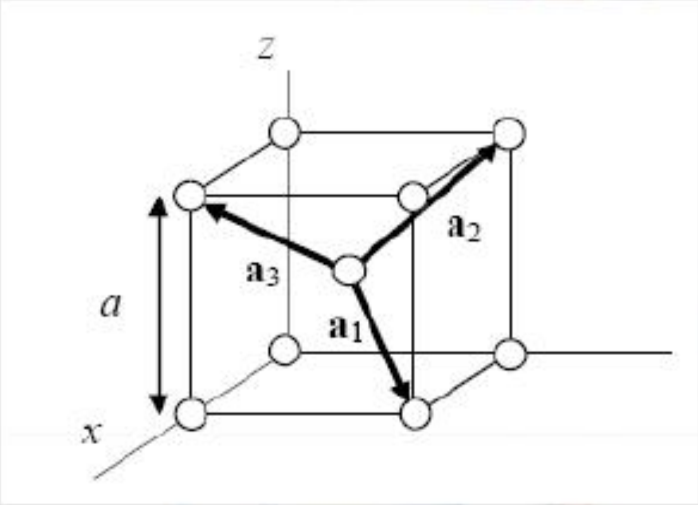
Contoh:
CsCl,CuZn,CsBr,LiAg



Vektor primitif :

$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{x}$
$\mathbf{a}_2 = a\mathbf{y}$
$\mathbf{a}_3 = a\mathbf{z}$

Body Centered Cubic (bcc)



Volume sel satuan = $a^3/2$

Titik kisi persel = $8 \times 1/8 + 1 = 2$

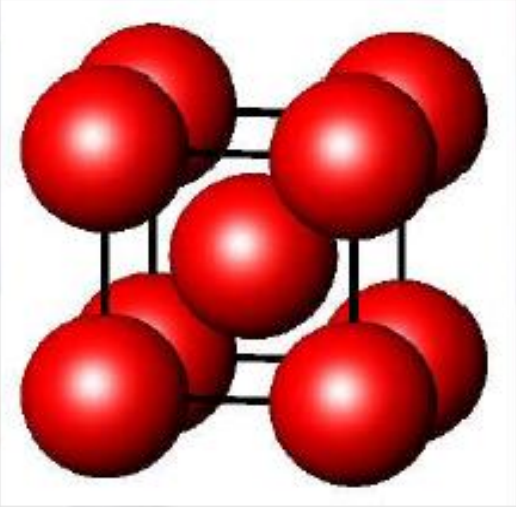
Jarak tetangga terdekat = $\sqrt{3}a/2$

Jml tetangga terdekat = 8

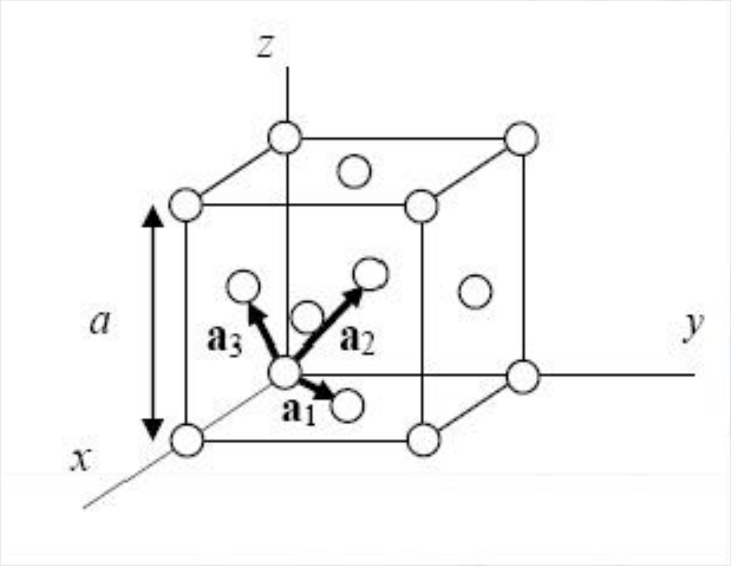
Contoh:
Na,Li,K,Rb,Cs,Cr,Fe,Nb

Vektor primitif :

$$\mathbf{a_1} = a/2\,(\mathbf{x} + \mathbf{y} - \mathbf{z})$$
$$\mathbf{a_2} = a/2\,(-\mathbf{x} + \mathbf{y} + \mathbf{z})$$
$$\mathbf{a_3} = a/2\,(\mathbf{x} - \mathbf{y} + \mathbf{z})$$



Face Centered Cubic (fcc)



Volume sel satuan = $a^3/4$

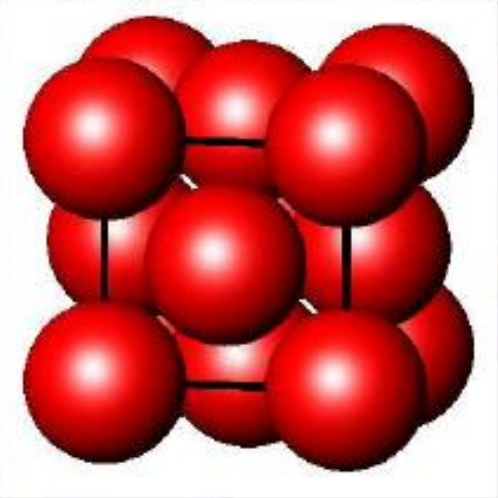
Titik kisi persel = $8 \times 1/8 + 6/2 = 4$

Jarak tetangga terdekat = $\sqrt{2}a/2$

Jml tetangga terdekat = 12

Contoh:

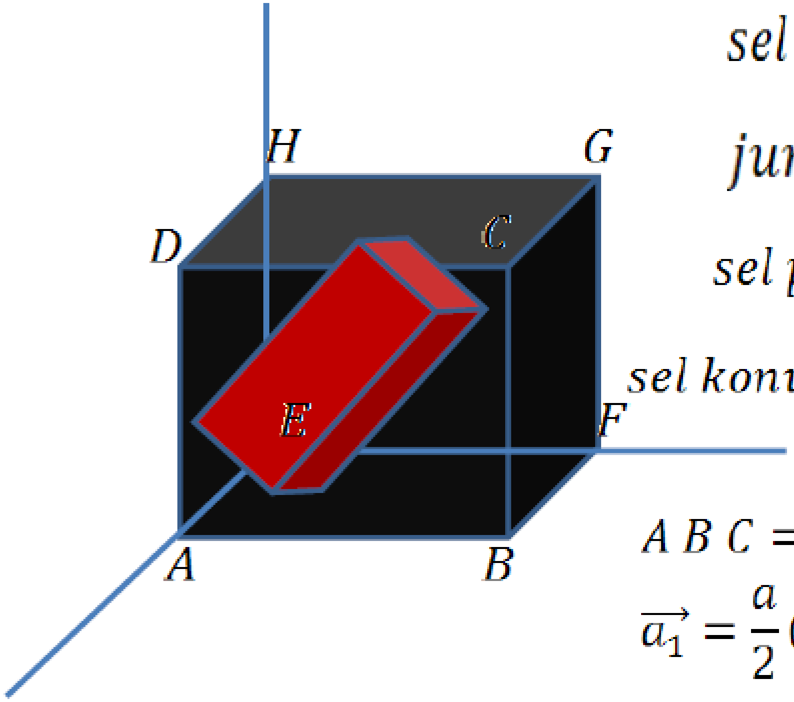
Cu,Ag,Au,Al,Pb,Ni,Fe,Nb



Vektor primitif :

$\mathbf{a}_1 = a/2\,(\mathbf{x} + \mathbf{y})$
$\mathbf{a}_2 = a/2\,(\mathbf{y} + \mathbf{z})$
$\mathbf{a}_3 = a/2\,(\mathbf{x} + \mathbf{z})$

- Kubus pusat muka (fcc = face centred cubic)



$$sel\ primitif \neq sel\ konvensional$$

$$jumlah\ titik\ lattice\ pada:$$

$$sel\ primitif: 8 \times \frac{1}{8} = 1\ buah$$

$$sel\ konvensional: \left(8 \times \tfrac{1}{8}\right) + \left(6 \times \tfrac{1}{2}\right) = 4\ buah$$

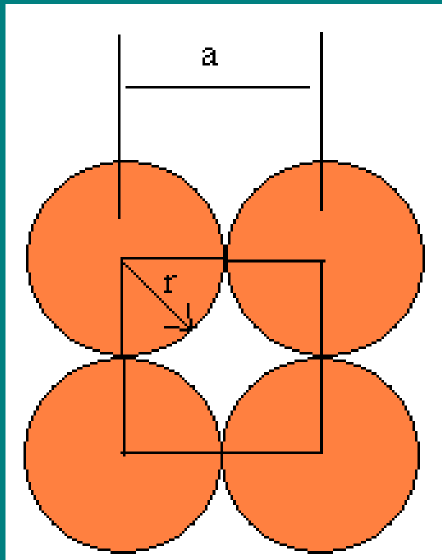
$$A\ B\ C = (100)$$

$$\overrightarrow{a_1} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{y}) \qquad \overrightarrow{a_2} = \frac{a}{2}(\hat{y} + \hat{z})$$

$$\overrightarrow{a_3} = \frac{a}{2}(\hat{x} + \hat{z})$$

$$\varphi = sudut\ antara\ sumbu2 = 60^\circ$$

Contoh Soal :



1. Kristal kubik sederhana tampak dari salah satu sisi, jika jarak antar inti atom adalah a dan jari-jari atom r, Tentukan volume bidang dan fraksi volume yang terbentuk.

   Jari-jari tiap bidang adalah:

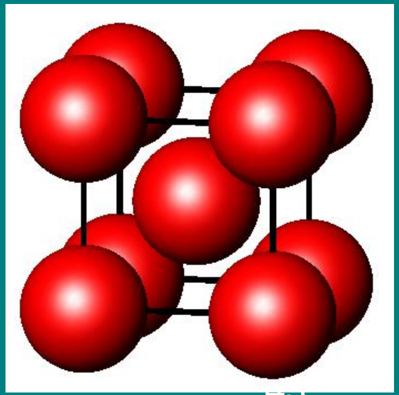
   $a = 2r$ atau $r = a/2$

   Setiap sudut berisi 1/8 bidang, jadi terdapat 8 x 1/8 = 1 bidang untuk struktur kubus sederhana

Maka volume bidang adalah:

$$V_{bidang} = 8[1/8(4/3\ \pi r^3) = 4/3\pi(a/2)^3 = 4/3\ \pi\ a^3/8$$

$$= \ \pi a^3/6$$



Fraksi Volume (f) :

$$f = V_{bidang}/\ V_{cubus} = (\pi a^3/6)/a^3 = \ \pi/6 = 0{,}52$$

TUGAS I :

1. Tentukan volume bidang dan fraksi volume kristal :

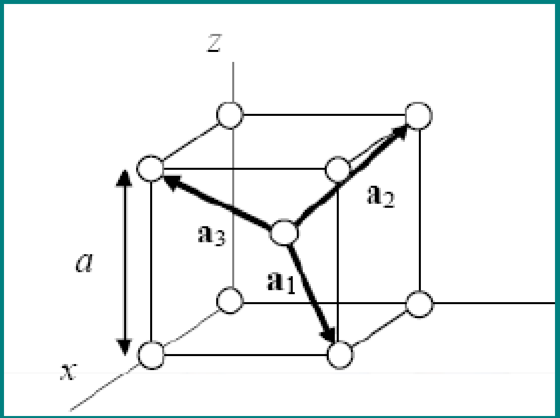
    a. Face-Centered Cubic (FCC)

    b. Body-Centered Cubic (BCC)

    c. Struktur Intan

    d. Hexagonal Close-Packed

2. Tentukan vektor translasi kristal BCC:



    a. Translasi ke sumbu X 2 sel satuan

    b. Translasi diagonal sumbu X 2 sel dan sumbu Z 1 sel

    c. Translasi diagonal sumbu Y 2 sel sumbu Z 3 sel dan sumbu X -3 sel

Selamat Belajar