

# Dasar Difraksi: Kristal dan Amorf

Agus Purwanto, Ph.D

PT. Cipta Mikro Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube channel: [cipta\\_mikro\\_material](#)



October 22, 2020

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)

IG & Youtube

channel:

[cipta\\_mikro\\_material](#)



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin

Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Table of Contents

Dualisme Partikel-Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan Reciprocal

Cincin Debye-Scherrer untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short Range Order

Kesimpulan

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)

IG & Youtube

channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Dualisme Partikel-Gelombang

- ▶ 1905 Albert Einstein photoelectric effect:  
 $E_{\text{photon}} = hf_{\text{photon}} \rightarrow$  1921 Nobel
- ▶ 1923 doctoral dissertation Louis Victor de Broglie:  
 $\lambda = h/p \rightarrow$  1929 Nobel (pertama untuk Ph.D thesis)
- ▶ 1927 Clinton Davisson and Lester Germer of Bell Lab:  
electron diffracted from crystalline nickel  $\rightarrow$   
experimental proof of de Broglie wavelength  $\rightarrow$  1937 Nobel
- ▶ baseball thrown has a de Broglie wavelength 20 orders of magnitude smaller than the diameter of a proton  $\rightarrow$   
wave aspect is so tiny to be observed

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

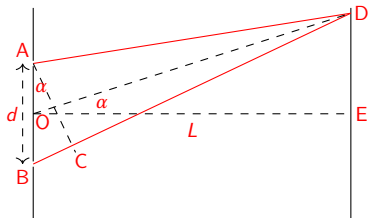
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Interferensi Celah Ganda



►  $\triangle CBA \cong \triangle EDO$

►  $\frac{ED}{DO} = \frac{CB}{BA}$

►  $\frac{ED}{DO} = \sin \alpha$

► Beda lintasan = CB

►  $CB = m\lambda$  agar  
interferensi maks

►  $d \sin \alpha = m\lambda$

► E terang pusat, bisa diberi indeks 0

► D terang pertama, bisa diberi indeks 1

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

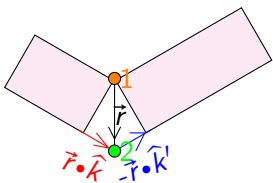
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Interferensi: Faktor Struktur



- Beda panjang lintasan

$$p = \vec{r} \cdot \hat{k} - \vec{r} \cdot \hat{k}'$$

- Beda fasa

$$\phi = \frac{2\pi}{\lambda} \times p = \vec{r} \cdot \vec{k} - \vec{r} \cdot \vec{k}' = \vec{Q} \cdot \vec{r}$$

- Amplitud hamburan

$$F = b_1 + b_2 \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r})$$

- Secara umum:

$$F = \sum_{j=1}^n b_j \exp(i\vec{Q} \cdot \vec{r}_j)$$

- $\vec{Q} = \vec{\tau}$  untuk struktur kristal

- $I \propto |F|^2 = FF^*$

- $\exp(i\beta) = \cos \beta + i \sin \beta$

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Latihan

- ▶ Hitung  $F$  untuk indeks (00), (01), (11), (10) jika atom berada pada setiap sudut sel satuan bujur sangkar
- ▶ Misalkan atom berada pada setiap sudut dan tengah sel satuan bujursangkar. Hitung  $F_{(00)}$ ,  $F_{(01)}$ ,  $F_{(11)}$ ,  $F_{(10)}$ ,  $F_{(02)}$ ,  $F_{(20)}$ .

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)

IG & Youtube

channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

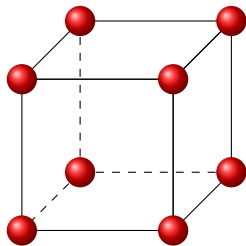
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

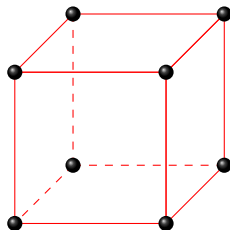
2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Simple Cubic



- ▶ Hanya ada 1 atom per sel satuan
- ▶  $F_{hkl} = 1$



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

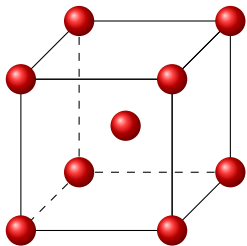
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

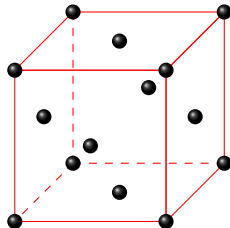
$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Base Centered Cubic



- ▶ Ada 2 atom per sel satuan
- ▶  $F_{(hkl)} = 1 + (-1)^{h+k+l}$



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)

IG & Youtube

channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

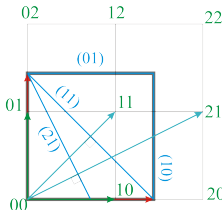
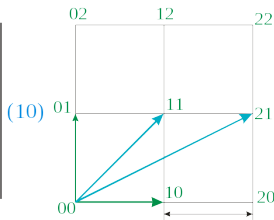
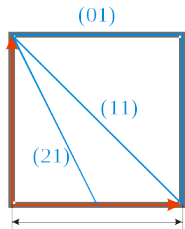
Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short



# Hubungan Kisi Langsung dg Reciproc



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciproc

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

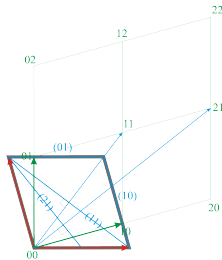
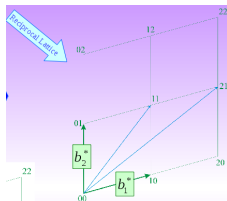
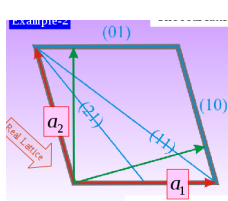
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Hubungan Kisi Langsung dg Reciproc



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciproc

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

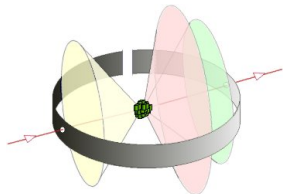
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

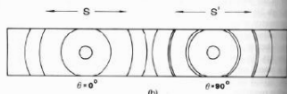
$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

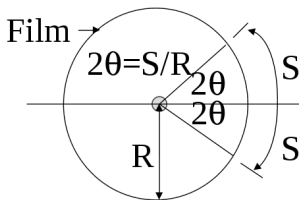
# Cincin Debye-Scherrer



(a)



(b)



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)  
IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

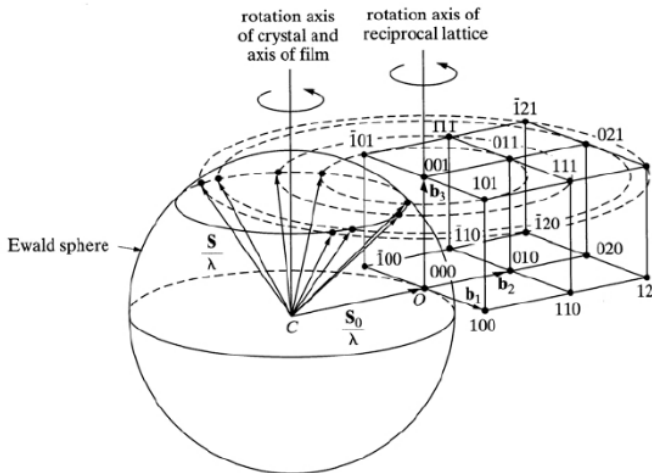
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Ewald Debye Scherrer



## Dasar Difraksi: Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

http://www.cipta-  
mikro-  
material.com/  
IG & Youtube  
channel:

cipta\_mikro\_materi



## Dualisme Partikel-Gelombang

## Gelombang Cahaya

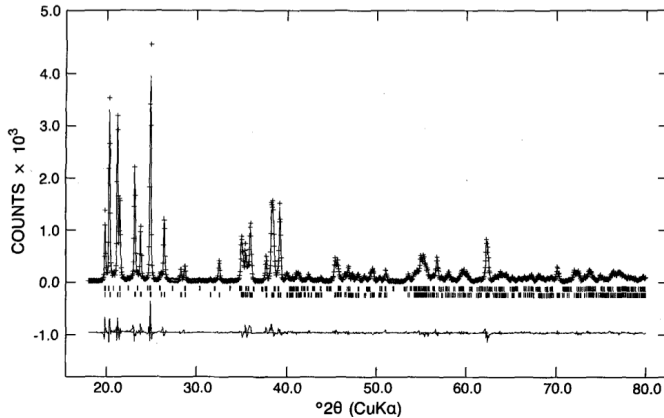
## Faktor Struktur

## Latihan

## Kisi Langsung dan Reciproc

### Cincin Debye-Scherrer untuk Powder

# Kaolin: Refinement



Clays and Clay Minerals, Vol. 37, No. 4, 289-296, 1989

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>  
IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

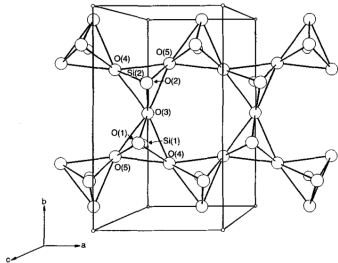
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

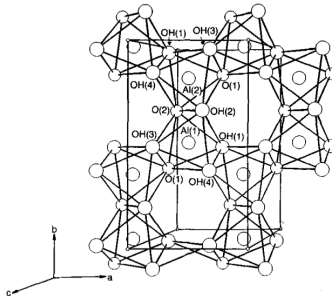
2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Kaolin: Struktur Kristal



(a) Tetrahedral



(b) Octahedral

Clays and CLay Minerals, Vol. 37, No. 4, 289-296, 1989

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>  
IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

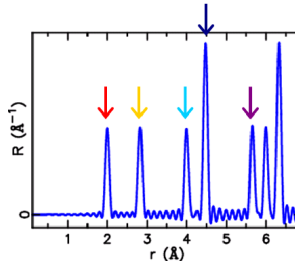
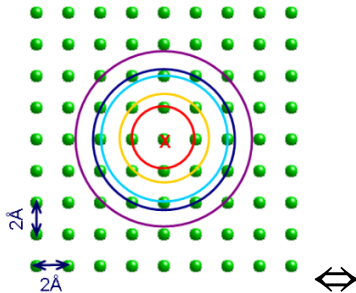
Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Pair Distribution Function

Pair Distribution Function (PDF) merupakan kemungkinan menemukan sebuah atom pada jarak  $r$  dari suatu atom acuan.



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

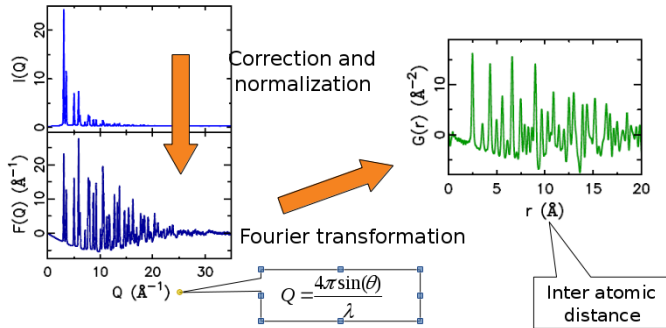
Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

## 2 $\theta$ scan ke $G(r)$



Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>

IG & Youtube  
channel:

ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

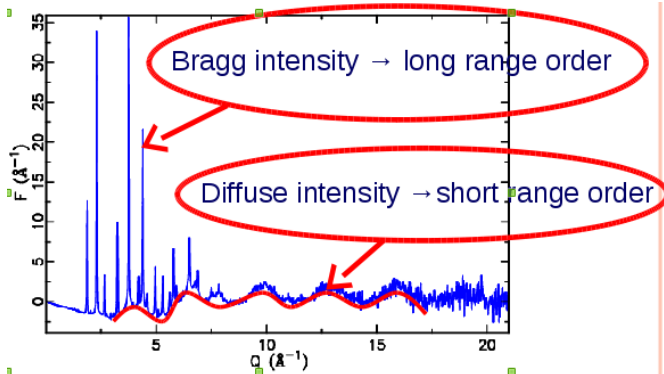
Pair Distribution  
Function

2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short



# Long dan Short Range Order



$$G(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} Q[S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ$$

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

<http://www.cipta-mikro-material.com/>  
IG & Youtube  
channel:  
ciptamikromaterial



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

2  $\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short

# Kesimpulan

1. Difraktometer Sinar-X merupakan alat yang sangat berguna untuk mengetahui fasa kristal dan amorf.
2. Informasi kristal dapat digunakan untuk identifikasi bahan atau pengembangan bahan untuk tujuan tertentu.

TERIMA KASIH

Dasar Difraksi:  
Kristal dan Amorf

Agus Purwanto,  
Ph.D

PT. Cipta Mikro  
Material

[http://www.cipta-mikro-](http://www.cipta-mikro-material.com/)

[material.com/](http://www.cipta-mikro-material.com/)  
IG & Youtube  
channel:

[ciptamikromaterial](#)



Dualisme Partikel-  
Gelombang

Gelombang Cahaya

Faktor Struktur

Latihan

Kisi Langsung dan  
Reciprocal

Cincin  
Debye-Scherrer  
untuk Powder

Contoh Refinement

Pair Distribution  
Function

$2\theta$  scan ke  $G(r)$

Long dan Short