BAB I

Geometri dan Prinsip Dasar Kristal

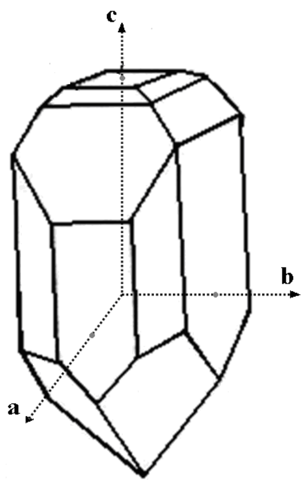
1

Geometri dan Prinsip Dasar Kristal

1.1. Geometri analitik

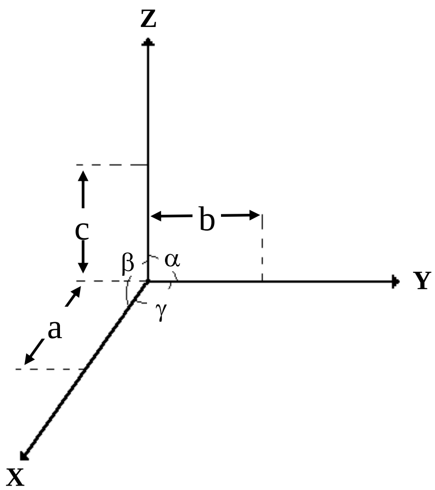
1.1.1. Sistem koordinat

Tiga sumbu diperlukan untuk menggambarkan suatu kristal (Gambar 1.1). Kita harus melihat kemudian bahwa arah tersebut (tepi kristal) dihubungkan secara erat pada simetri kristal, dalam beberapa kasus, suatu pilihan sumbu segi empat kemudian muncul secara natural. Bentuk kristal dinyatakan dengan perpotongan penampang kristal pada sumbu kristalografi dan sudut antar sumbu.



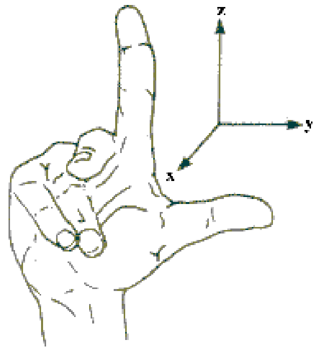
Gambar 1.1. Kristal ortorombik ideal dengan sumbu kristalografi

Geomteri kristal dinyatakan dengan seperangkat tiga sumbu yang disebut sumbu kristalografi dan sudut-sudut antara sumbu (Gambar 1.2). Sumbu-sumbu dapat berimpit atau sejajar dengan rusuk penampang kristal.



Gambar 1.2. Sumbu kristalografi dan sudut antar sumbu

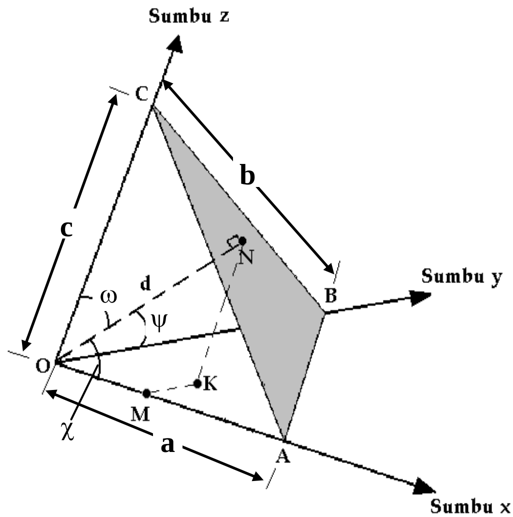
Untuk menyatakan ke tiga sumbu kristalografi dengan mudah melalui **aturan tangan kanan**, seperti pada Gambar 1.2. Sumbu X, Y, dan Z secara berturut-tutrut digambarkan sebagai jari tengah, ibu jari dan jari telunjuk. Sudut α merupakan sudut antara sumbu Y dan Z, β merupakan sudut antara sumbu Z dan X, sedangkan γ merupakan sudut antara sumbu X dan Y. Pernyataan sudut antar sumbu dinyatakan secara matematis: $\alpha = \{ b,c \}$, $\beta = \{ a,c \}$, dan $\gamma = \{ a,b \}$.



Gambar 1.2. Penggunaan aturan tangan kanan sebagai sumbu kristalografi

1.1.2. Persamaan bidang

Gambar 1.3 menunjukkan bidang ABC memotong sumbu x, y, dan z secara berturut-turut pada A, B, dan C. Garis ON merupakan suatu garis yang tegak lurus pada bidang ABC dengan panjang d. Garis OA, OB, dan OC memiliki panjang secara berturut-turut a, b, dan c. Hubungan d terhadap a, b, dan c dinyatakan sebagai: $d = a \cos \chi$ atau $d = b \cos \psi$ atau $d = c \cos \omega$.



Gambar 1.3. Bidang ABC pada ruang tiga dimensi

Titik N merupakan suatu titik dengan koordinat (X,Y,Z) berada pada bidang ABC. Dibuat suatu garis dari N yang sejajar OC, maka akan memotong bidang AOB pada K membentuk garis NK, selanjutnya dari titik K dibuat garis yang sejajar OB maka akan memotong OA pada titik M. Panjang OM, MK, dan KN secara berturut-turut sebesar X, Y, dan Z. Panjang ON merupakan penjumlahan OM, MK dan KN, maka :

$$d = X \cos \chi + Y \cos \psi + Z \cos \omega \quad \text{............} \quad (1.1)$$

Dalam ΔOAN, $d = OA \cos \alpha = a \cos \chi$ atau $\cos \chi = d/a$

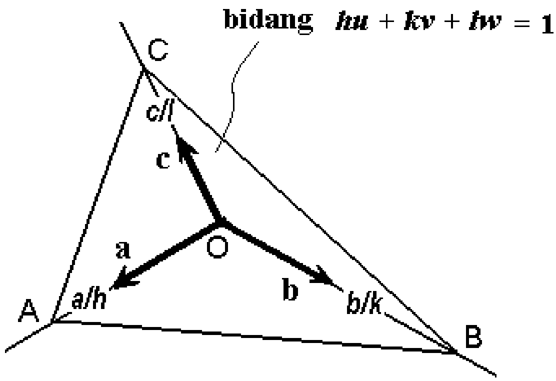
$$d = OB \cos \psi = b \cos \psi \text{ atau } \cos \psi = \delta/\beta$$

$$d = OC \cos \omega = c \cos \omega \text{ atau } \cos \omega = d/c$$

maka persamaan (1.1) di atas menjadi :

$$X \cos \chi + Y \cos \psi + Z \cos \omega = d$$
$$X (d/a) + Y (d/b) + Z (d/c) = d$$
$$d\{(X/a) + (Y/b) + (Z/c)\} = d$$
$$(X/a) + (Y/b) + (Z/c) = 1 \qquad \text{...........} \quad (1.2)$$

Persamaan (1.2) merupakan bentuk persamaan bidang ABC.

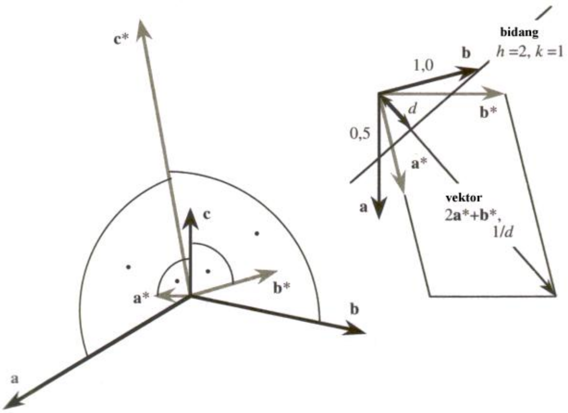


Gambar 1.4.

Persamaan bidang (1.2), (X/a) + (Y/b) + (Z/c) = 1 dapat dinyatakan sebagai *hu* + *kv* + *lw* = 1, dimana a = a/h, b = b/k dan c/l, maka persamaan (1.2) menjadi (Xh/a) + (Yk/b) + (Zl/c) = 1, dengan besaran skalar dari vektor tersebut yaitu (*u*,*v*,*w*) = (X/a,Y/b,Z/c) dan (*h*,*k*,*l*).

1.1.3. Sistem koordinat resiprok

Pengenalan sistem koordinat resiprok yang muncul secara rekaan, tidak dibutuhkan dalam geometri kristalografi tetapi penggunaannya secara sederhana sering muncul pada perhitungan. Apabila sistem koordinat langsung dinyatakan sebagai a, b, dan c, maka sistem koordinar resiprok didefinisikan sebagai a^*, b^*, dan c^*. Dengan kata lain bahwa panjang a^*, b^*, dan c^* merupakan resiprok dari panjang a, b, dan c. Jika a, dan c dinyatakan dengan meter, maka a^*, b^*, dan c^* berdimensi meter^{-1}. Vektor resiprok a^*, b^*, dan c^* tidak secara umum sejajar a, b, dan c, serta memiliki harga tidak sama dengan 1/a, 1/b,dan 1/c.



Gambar 1.5. Sumbu kristalografi dan resiprok

Secara matematis hubungan besaran skalar a, b, c dengan a^*, b^*, c^* sebagai: $a^*\cdot a = b^*\cdot b = c^*\cdot c = 1$; $a^*\cdot b = a^*\cdot c = b^*\cdot a = b^*\cdot c = c^*\cdot a = c^*\cdot b = 0$
Berdasarkan hal ini, defenisi matematis a^*, b^*, dan c^* :

$$a^* = (b \text{ x } c)/(a\ b\ c),$$
$$b^* = (c \text{ x } a)/(a\ b\ c), \text{ dan}$$
$$c^* = (a \text{ x } b)/(a\ b\ c)$$

dimana, (a b c) = a·(b x c) = b·(a x c) = c·(a x b), merupakan volume ....

1.1.4. Perbandingan aksial

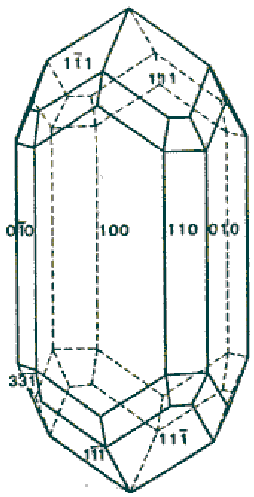
Apabila kedua sisi pada persamaan (1.3) dikalikan dengan b, maka akan diperoleh persamaan baru :

$$\frac{h \quad X}{a/b} + kY + \frac{l \quad Z}{c/b} = 0$$

Harga a/b dan c/b diistilahkan sebagai perbandingan aksial yang dapat disimpulkan dari morfologi kristal.

1.1.5. Zona dan sumbu zona

Kebanyakan kristal yang terbentuk baik memiliki permukaan teratur dalam kelompok dari dua atau lebih dengan mematuhi arah pasti dalam kristal. Dengan kata lain, kristal menunjukkan simetri, ciri-ciri ini merupakan perwujudan keadaan luar dari keteraturan susunan atom dalam kristal. Gambar 1.6 merupakan kristal zirkon ($ZrSiO_4$) dan menunjukkan contoh kristal yang memiliki simetri tinggi. kristal tersebut jelas menunjukkan beberapa permukaan memiliki arah bersamaan. Masing-maing permukaan dikatakan terletak dalam suatu zone, dan arah yang sama disebut sumbu zona. Dengan demikian zona dibentuk oleh kumpulan bidang kisi langsung yang memotong sesuai dengan garis potong sejajar, sedangkan sumbu zona merupakan arah garis potong tersebut.



Gambar 1.6. Zirkon ($ZrSiO_4$): suatu kristal dengan simetri tinggi

Dua permukaan,($h_1k_1l_1$) dan ($h_2k_2l_2$) didefinisikan sebagai zona, sedangkan sumbu zona adalah garis perpotongan dua bidang dan dinyatakan melalui penyelesain dengan persamaan berikut :

$$(h_1X/a) + (k_1Y/b) + (l_1Z/c) = 0$$

dan

$$(h_2X/a) + (k_2Y/b) + (l_2Z/c) = 0$$

$$\frac{X}{a(k_1l_2 - k_2l_1)} = \frac{Y}{b(l_1h_2 - l_2h_1)} = \frac{Z}{c(h_1k_2 - h_2k_1)}$$

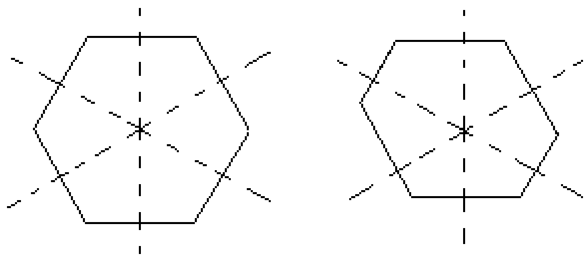
$$X/(aU) = Y/(bV) = Z/cW)$$

dimana [UVW] merupakan simbol zona

1.2. Hukum dan postulat kristalografi

1.2.1. Hukum konstanta sudut

Hukum konstanta sudut diajukan oleh ahli berkebangsaan Denmark yang bernama Nils Steensen (1669) untuk kristal kwarsa.



Gambar 1.... Penggambaran bagian kanan dari prisma dua kristal kuarsa

Untuk semua sampel kuarsa yang dipelajari ditemukan bahwa sudut diedre antara dua muka selalu sama dengan 120^o.

Hukum tersebut di atas diberlakukan untuk kristal secara umum oleh ahli berkebangsaan Italia, Domenico Guglielmini (1688) dan berkebangsaan Swis, Moritz Anton Cappeler (1723).Selanjutnya, Jean Bantiste Louis de l'Isle (1978) dari Perancis membuat rumusan pendapat ahli-ahli di atas :

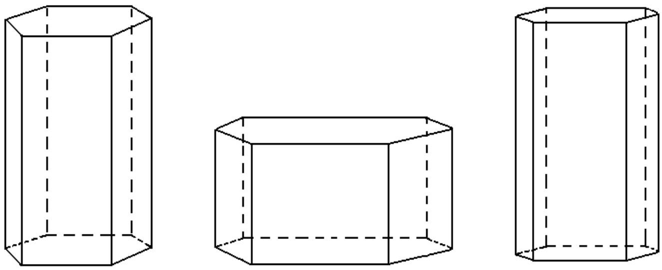
- Sudut antara dua permukaan tidak akan berubah akibat pertumbuhan kristal, dengan demikian sudut tersebut tidak bergantung dari jarak permukaan ke suatu titik tertentu
- Sudut-sudut antar permukaan berkaitan dari dua individu yang memiliki

jenis kristal yang sama adalah sama (pada temperatur dan tekanan sama)

- Pada kondisi fisik tertentu, sudut-sudut antar permukaan merupakan karakteristik untuk satu jenis kristalin

(Perlu dicatat bahwa konstanta sudut untuk individu yang jenisnya sama tidak berarti bahwa kristal yang jenisnya berbeda harus ditunjukkan dengan sudut yang berbeda)

Princip Bernhardi (1890): jumlah dan dimensi permukaan kristal tidak khas, masing-masing kristal memiliki kekhasan yang asli (*habitus*), yang terpenting adalah arah dan orientasi yaitu arah garis potong dan *normales de faces* (Gambar 1.7).



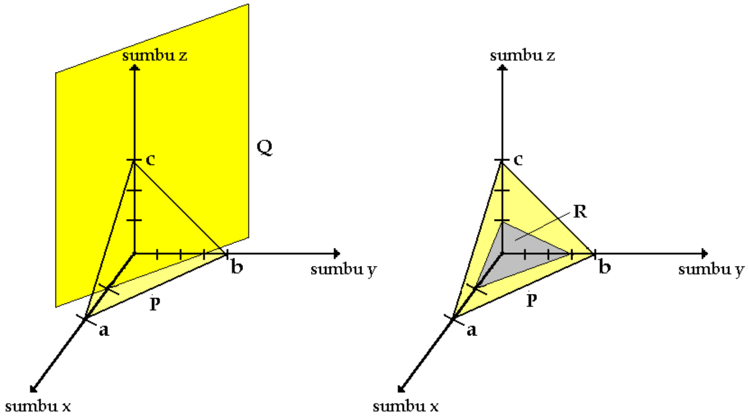
Gambar 1.7. Prinsip Bernhardi : tiga polihedral dengan sudut yang sama pada 60° dan 90° antar permukaan normal

1.2.2. Hukum indeks rasional

Hukum kristal ini menjelaskan bahwa permukaan suatu kristal tidak membentuk suatu polihedral arbiter. Hukum ini ekuivalen dengan hukum stokiometri dalam kimia, dirumuskan oleh René Just Hauy (1743-1826), juga oleh Ch. S. Weiss, F. Neumann dan W.H. Miller (awal pertengahan abad XIX).

1.2.2.1. Indeks Weiss

Gambar 1.8 menunjukkan tiga bidang yang berbeda yaitu P, Q, dan R. Bidang P disebut bidang 1,1,1 karena memotong sumbu x, y dan z secara berturut-turut sepanjang a, b, dan c, bidang Q disebut bidang ½,¾,∞, karena memotong sumbu x, y dan z secara berturut-turut sepanjang ½a, ¾b, dan ∞ (sejajar sumbu z), sedangkan bidang R disebut bidang ½,¾, $\frac{1}{3}$, karena memotong sumbu x, y dan z secara berturut-turut sepanjang ½a,¾b,1/3c. Cara menyatakan bidang-bidang sebagaimana cara di atas merupakan cara indeksasi Weiss atau sistem indeks Weiss. Dengan demikian, indeks Weiss bidang P : (1,1,1), bidang Q :(½,¾,∞), sedangkan bidang R : (½,¾, ⅓).



Gambar 1.8. Perpotongan bidang kristalografi

Sistem indeks Weiss mengandung kelemahan, karena mempunyai besaran tak hingga untuk bidang yang sejajar dengan sumbu, oleh karena itu indeks Weiss tidak digunakan untuk menggambarkan bidang.

1.2.2.2. Indeks Miller

Untuk menghindari besaran tak hingga pada indeks Weiss di gunakan indeks Miller. Dalam gambar 1.5, perpotongan bidang-bidang dengan sumbu kristalografi secara umum semuanya sama, dan perpotongan itu secara sebarang di beri nama a, b, dan c berturut-turut sepanjang sumbu x, y dan z. Indeks Miller dapat didefinisikan suatu bidang parameter sebagai a/h, b/k, c/l, yang direduksi menjadi bilangan utuh yang paling sederhana. Lambang h, k, dan l mewakili perpotongan bidang yang ditinjau berturut-turut dengan sumbu x, y, dan z relatif terhadap terhadap perpotongan bidang parameter. Dengan demikian, bidang parameter (bidang P pada gambar 1.5) akan mempunyai indeks Miller $\frac{a}{a}\ \frac{b}{b}\ \frac{c}{c}$ atau (111). Tentu saja indeks untuk bidang parameter selalu 111 karena perpotongannya selalu dipilih a, b, dan c.

Dalam gambar 1.5, bidang Q memiliki indeks Miller $\frac{a}{h}\ \frac{b}{k}\ \frac{c}{l}$ atau

$\frac{1}{½}\ \frac{1}{¾}\ \ \frac{1}{\infty}$, yang dapat ditata ulang menjadi 2, 4/3 ,0 dan dengan jalan menghilangkan pecahan indeks tersebut berubah menjadi (640). Disinilah kita dapat melihat mengapa perpotongan (*hkl*) disebut sebagai perpotongan kebalikan (*reciprocal intercepts*). Bidang R memiliki indeks Miller Miller $\frac{a}{h}\ \frac{b}{k}\ \frac{c}{l}$ atau $\frac{1}{1/2}\ \frac{1}{¾}\ \frac{1}{1/3}$, yang dapat ditata ulang menjadi 2, $4/3$,3 dan dengan jalan menghilangkan pecahan akan menjadi (649). Dalam praktek, tidak biasa mendapatkan indeks sampai sebesar 6.

Dari persamaan (1.2) tentang persamaan bidang, persamaan perpotongan bidang (*hkl*) dapat ditulis sebagai :

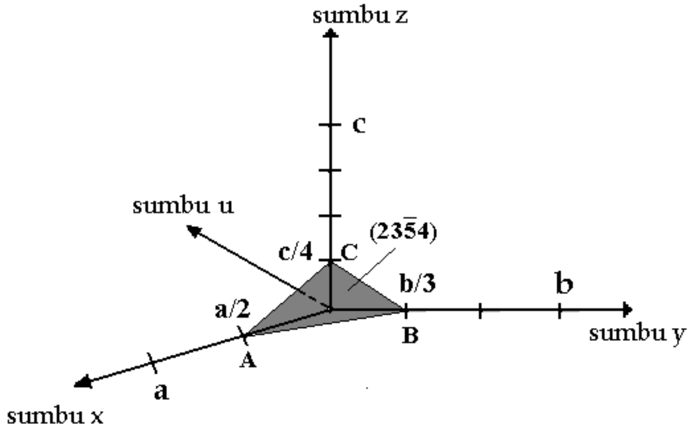
$$(hX/a) + (kY/b) + (lZ/c) = 1 \tag{1.2}$$

Persamaan dari bidang sejajar melewati the origin yaitu

$$(hX/a) + (kY/b) + (lZ/c) = 0 \tag{1.3}$$

1.2.2.3. Indeks Miller-Bravais

Dalam kristal yang mempertunjukkan simetri kelipatan enam (*sixfold symetry*), empat sumbu koordinat harus digunakan. Sumbu-sumbu tersebut dinyatakan sebagai X, Y, U, dan Z. Sumbu-sumbu X, Y, dan U terletak pada satu bidang, pada .., dan sumbu Z tegak lurus terhadap bidang XYU (gambar 1.8). Dengan demikian, bidang-bidang dalam kristal ini digambarkan oleh empat bilangan, yang disebut indeks Miller-Bravais *h*, *k*, *i*, dan *l*.



Gambar 1.9. Indeks Miller-Bravais (*hkil*). Sumbu-sumbu kristalografik dinyatakan X,Y,U,Z dan penggambaran bidang

(23 $\bar{5}$ 4), bidang parameter yaitu (11 $\bar{2}$ 1)

Indeks i bergantung dari h dan k. Apabila bidang ABC dalam gambar 1.9 memotong sumbu X dan Y pada a/2 dan b/3, kemudian misalnya memotong sumbu U pada –u/5, dan memotong sumbu Z pada c/4, maka bidang dinyatakan sebagai (23 $\bar{5}$ 4). Secara umum, i = -(h+k) dan bidang parameter yaitu (11 $\bar{2}$ 1).

Kita dapat membuktikan bahwa i = -(h+k) dengan menggunakan gambar 1.9. Dari definisi indeks Miller,

$$OA = a/h,\ OB = b/k,\ \angle AOD = 60°$$

$$OD = DE = OE = p$$

Segitiga EBD dan OBA merupakan segitiga yang setipi/mirip, maka:

$$\frac{EB}{ED} = \frac{OB}{OA} = \frac{b/k}{a/h}$$

tetapi

$$EB = b/k - p$$

maka,

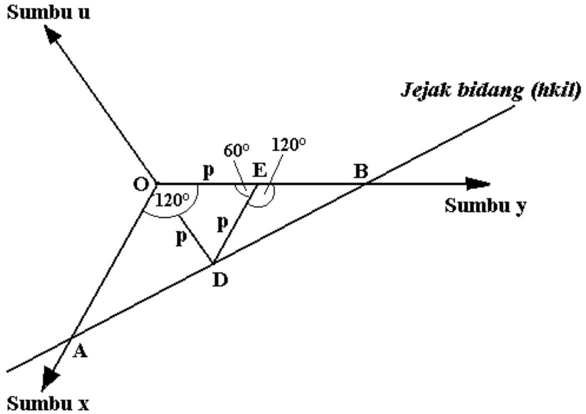
$$\frac{b/k - p}{p} = \frac{b/k}{a/h}$$

atau

$$p = \frac{ab}{bh+ak}$$

karena a=b=u dalam kristal dengan *sixfold symetry* (heksagonal), maka : p = u/(h+k), penulisan sebagai –u/i, maka diperoleh :i = -(h+k)

Alternatif lain, pendekatan dilakukan melalui penggambaran traces bidang (hkil) dari +u, akan dapat dibuktikan juga bahwa i = -(h+k).



Gambar 1.10. Indeks Miller-Bravais (*hkil*)

1.2.3. Postulat kristalografi

Hukum indeks rasional telah dirumuskan oleh Bravais dalam bentuk yang lebih umum sebagai berikut :

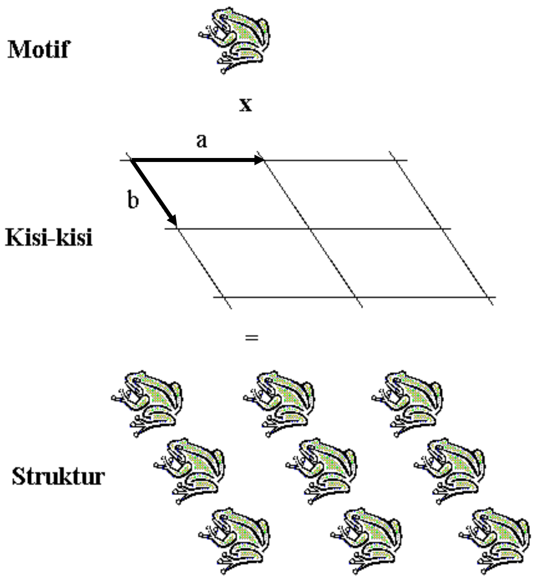
1.2.3.1. Postulat Bravais

Akhir abad ke XIX, postulat ini dilengkapi dan diformulasikan ulang hampir secara bersamaan dengan cara tidak saling berhubungan satu sama lain oleh Schonflies dan Fedorov :

1.2.3.2. Postulat Schonflies dan Fedorov

1.3. Kisi, Motif dan Struktur

Suatu kristal ideal disusun oleh atom yang teratur dan berulang.



Gambar 1.11. Motif, kisi dan struktur

1.4. Definisi Kristal

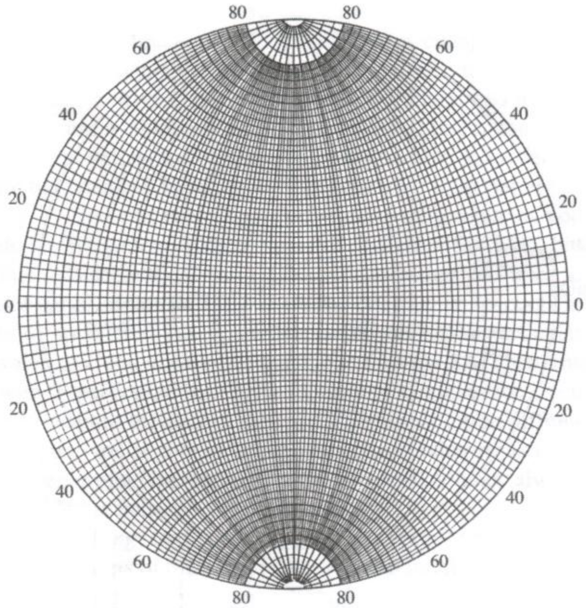
1.4.1. Struktur kuasi periodik dan aperiodik

1.4.2. Struktur nyata, teratur dan tidak teratur

1.5. Proyeksi Stereografi

Keadaan umum tentang ciri-ciri keadaaan luar suatu kristal disebut morfologi kristal. Penjelasan secara analistis tentang bidang dan zona yang diberikan di atas tidak mencukupi untuk suatu pengetahuan serempak dari banyak permukaan ditunjukkan oleh suatu kristal. Penggambaran kristal dalam dua dimensi sangat perlu. Untuk suatu kajian morfologi kristal, sudut antar permukaan, yang merupakan ciri-ciri fundamental suatu kristal harus digambarkan dalam proyeksi bidang, dan proyeksi stereografi merupakan bermanfaat untuk tujuan ini. Selanjutnya, pada kristal yang terbentuk dengan tidak sempurna, simetri sesungguhnya tidak mungkin jelas melalui pengamatan, sebaliknya untuk kristal yang baik, simetri mungkin secara lengkap terungkap oleh proyeksi stereografi.

Gambar 1.12..... Proyeksi bentuk bola dari kristal kubik



Gambar 1.13. Diagram Wuff