

Hari Sutrisno
A. K. Prodjosantoso
Dyah Purwaningsih

UNY
PRESS



FUNDAMENTAL KRISTALOKIMIA

FUNDAMENTAL KRISTALOKIMIA

UNDANG-UNDANG REPUBLIK INDONESIA
NOMOR 28 TAHUN 2014
TENTANG HAK CIPTA

Pasal 2

Undang-Undang ini berlaku terhadap:

- a. semua Ciptaan dan produk Hak Terkait warga negara, penduduk, dan badan hukum Indonesia;
- b. semua Ciptaan dan produk Hak Terkait bukan warga negara Indonesia, bukan penduduk Indonesia, dan bukan badan hukum Indonesia yang untuk pertama kali dilakukan Pengumuman di Indonesia;
- c. semua Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait dan pengguna Ciptaan dan/atau produk Hak Terkait bukan warga negara Indonesia, bukan penduduk Indonesia, dan bukan badan hukum Indonesia dengan ketentuan:
 1. negaranya mempunyai perjanjian bilateral dengan negara Republik Indonesia mengenai perlindungan Hak Cipta dan Hak Terkait; atau
 2. negaranya dan negara Republik Indonesia merupakan pihak atau peserta dalam perjanjian multilateral yang sama mengenai perlindungan Hak Cipta dan Hak Terkait.

BAB XVII
KETENTUAN PIDANA

Pasal 112

Setiap Orang yang dengan tanpa hak melakukan perbuatan sebagaimana dimaksud dalam Pasal 7 ayat (3) dan/atau Pasal 52 untuk Penggunaan Secara Komersial, dipidana dengan pidana penjara paling lama 2 (dua) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp300.000.000,00 (tiga ratus juta rupiah).

- (1) Setiap Orang yang dengan tanpa hak melakukan pelanggaran hak ekonomi sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf i untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 1 (satu) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp100.000.000 (seratus juta rupiah).
- (2) Setiap Orang yang dengan tanpa hak dan/atau tanpa izin Pencipta atau pemegang Hak Cipta melakukan pelanggaran hak ekonomi Pencipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf c, huruf d, huruf f, dan/atau huruf h untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 3 (tiga) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp500.000.000,00 (lima ratus juta rupiah).
- (3) Setiap Orang yang dengan tanpa hak dan/atau tanpa izin Pencipta atau pemegang Hak Cipta melakukan pelanggaran hak ekonomi Pencipta sebagaimana dimaksud dalam Pasal 9 ayat (1) huruf a, huruf b, huruf e, dan/atau huruf g untuk Penggunaan Secara Komersial dipidana dengan pidana penjara paling lama 4 (empat) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp1.000.000.000,00 (satu miliar rupiah).
- (4) Setiap Orang yang memenuhi unsur sebagaimana dimaksud pada ayat (3) yang dilakukan dalam bentuk pembajakan, dipidana dengan pidana penjara paling lama 10 (sepuluh) tahun dan/atau pidana denda paling banyak Rp4.000.000.000,00 (empat miliar rupiah).

FUNDAMENTAL KRISTALOKIMIA

Hari Sutrisno
A. K. Prodjosantoso
Dyah Purwaningsih



FUNDAMENTAL KRISTALOKIMIA

Cetakan I, Januari 2024

Penyusun :
Hari Sutrisno
A. K. Prodjosantoso
Dyah Purwaningsih

Tata Letak :
PeTeWe

Desain Sampul :
Ngadimin

ISBN :
978-602-498-641-4

Diterbitkan oleh :

UNY Press

Jl. Gejayan, Gg. Alamanda, Kompleks Fakultas Teknik UNY
Kampus UNY Karangmalang Yogyakarta 55281

Telp: 0274 – 589346

Mail: unypenerbitan@uny.ac.id

Anggota Ikatan Penerbit Indonesia (IKAPI)
Anggota Asosiasi Penerbit Perguruan Tinggi Indonesia (APPTI)

Prakata

Puji syukur kehadirat Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga buku teks dan buku referensi yang berjudul "**Fundamental Kristalokimia**" dapat diselesaikan dengan sangat baik. Buku ini merupakan buku teks dan referensi yang berguna sebagai acuan para mahasiswa dari berbagai bidang keahlian kimia anorganik, kimia zat padat, kristalokimia, kimia material, mineralogi dll. Isi buku ini diambil dari literatur jurnal, review, buku, dan hasil-hasil penelitian.

Kristalografi merupakan ilmu yang mempelajari tentang kristal. Kristalografi merupakan subjek yang sangat tua, namun pada abad ini, kristalografi berkembang menjadi ilmu pengetahuan modern, setelah ditemukannya sinar-X dan fenomena, prinsip serta konsep difraksinya pada kristal. Dalam beberapa tahun terakhir, kristalografi dianggap sebagai peran yang semakin penting dalam ilmu-ilmu modern karena sifatnya yang interdisipliner, yang telah bertindak sebagai jembatan antara, dan seringkali sebagai stimulus untuk berbagai disiplin ilmu yang berkembang pesat. Ilmu kimia, fisika, ilmu bumi, biologi, matematika, dan ilmu material, telah memberikan rangsangan untuk pengembangan minat dan teknik kristalografi baru. Pada gilirannya, kristalografi telah memberikan kontribusi signifikan terhadap kemajuan ilmu-ilmu ini. Jadi, sementara di satu sisi kristalografi telah diperkaya, di sisi lain menulis buku teks yang menjelaskan semua aspeknya menjadi lebih sulit.

Baru-baru ini, permintaan akan buku ringkas yang memberikan penjelasan komprehensif tentang mata perkuliahan kristalografi modern telah meningkat. Oleh karena itu, buku ini diharapkan menjadi buku teks dan referensi yang berguna untuk perkuliahan di universitas yang mencakup kimia struktur anorganik, kimia zat padat, kristalografi, seluruhnya atau hanya sebagian. Ini juga diharapkan berguna pada tingkat yang lebih tinggi yang diperlukan untuk studi magister dan doktoral serta untuk peneliti berpengalaman.

Dengan ide-ide tersebut di atas, penulis mengkoordinasikan pada tahun 2023 untuk menulis sebuah buku teks dalam bahasa Indonesia “**Fundamental Kristalokimia**”. Jelas bagi penulis bahwa (a) buku ini ditulis oleh beberapa penulis yang memiliki keahlian khususnya, dan (b) bab-bab yang berbeda harus diselaraskan atau disinkronkan dengan hati-hati agar sesuai dengan rencana terpadu. Tampak bagi penulis bahwa kedua persyaratan ini dilakukan dengan sungguh-sungguh dan sevalid mungkin agar terlaksana kerjasama kreatif dari rekan penulis buku ini. Penulis ingin mengucapkan terima kasih atas kontribusi mereka yang berharga untuk edisi ini.

Penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada semua pihak yang telah memberikan banyak masukan kepada penulis. Tulisan ini masih jauh dari sempurna, untuk itu diharapkan kritik dan saran ke arah perbaikan buku ini. Semoga buku ini dapat memberi manfaat bagi para peneliti dan semua pihak yang membutuhkan.

Yogyakarta, 9 Oktober 2023

Penulis



Ucapan Terima Kasih

Penulis mengungkapkan rasa terima kasih kami kepada Rektor UNY, Dekan FMIPA dan Ketua Departemen Pendidikan Kimia, FMIPA Universitas Negeri Yogyakarta yang telah mendorong kami untuk menulis buku ini melalui Program Penulisan Buku Tahun 2023 dari dana DIPA Bidang Akademik dan Kemahasiswaan Universitas Negeri Yogyakarta Tahun 2023. Penulis juga berterima kasih kepada banyak pihak dan kolega yang telah mengomentari naskah atau memberikan dukungan teknis.



Daftar Isi

PRAKATA.....	v
UCAPAN TERIMA KASIH.....	vii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xv

BAB 1

PERTUMBUHAN DAN MORFOLOGI KRISTAL	1
1.1. Pendahuluan	1
1.2. Tinjauan Sejarah Fundamental Kristal	4
1.3. Metode Pertumbuhan Kristal	8
1.3.1. Pertumbuhan kristal dari lelehan	8
1.3.2. Pertumbuhan kristal dari larutan	25
1.3.3. Pertumbuhan kristal dari fasa uap.....	36
1.4. Morfologi Kristal.....	52

BAB 2

SIMETRI DAN GRUP MOLEKUL.....	59
2.1. Pendahuluan	59
2.2. Unsur dan Operasi Simetri Molekul	61
2.2.1. Unsur simetri	62
2.2.2. Operasi simetri	63
2.3. Grup Titik (<i>Point Group</i>) Molekuler	73
2.3.1. Klasifikasi grup titik.....	74
2.3.2. Identifikasi grup titik molekululer.....	86

BAB 3

GEOMETRI KRISTALOGRAFI.....	91
3.1. Pendahuluan	91
3.2. Kristal	92

3.3. Geometri Analitik	93
3.3.1. Sistem koordinat.....	93
3.3.2. Persamaan bidang.....	95
3.3.3. Sistem koordinat resiprok.....	97
3.3.4. Perbandingan aksial.....	98
3.3.5. Zona dan sumbu zona.....	99
3.4. Hukum dan Postulat Kerystalografi.....	100
3.4.1. Hukum konstanta sudut.....	100
3.4.2. Hukum indeks rasional	102
3.4.3. Postulat kristalografi	106
3.5. Pola dan Motif.....	107
3.6. Proyeksi Stereografi.....	108

BAB 4

SIMETRI DAN KLASIFIKASI KRISTAL.....	117
4.1. Pendahuluan.....	117
4.2. Prinsip simetri dalam kimia kristal.....	119
4.3. Unsur dan Operasi Simetri Kristalografi.....	121
4.4. Simetri Titik dan Simetri Ruang	122
4.4.1. Simetri titik.....	122
4.4.2. Simetri ruang.....	126
4.5. Kisi-Kisi Kristal.....	131
4.5.1. Konsep kisi-kisi dan sel satuan	131
4.6. Klasifikasi Kristal	133
4.6.1. Tujuh sistem kristal	134
4.6.2. Empat belas kisi-kisi Bravais.....	137
4.6.3. Sebelas Kelas Laue.....	138
4.6.4. Tiga puluh dua kelas kristal: grup aksial.....	139
4.6.5. Grup titik non-kristallografi.....	143
4.6.6. 230 grup ruang.....	144

BAB 5

STRUKTUR KRISTAL	153
5.1. Pendahuluan.....	153

5.2. Sel Satuan (<i>Unit Cell</i>)	154
5.3. Kisi-Kisi Kristal	154
5.4. Kisi Kristal Satu Dimensi.....	156
5.5. Kisi Kristal Dua Dimensi	159
5.6. Kisi Kristal Tiga Dimensi	162
5.7. Faktor Pengisian	164
5.8. Notasi Pearson dan Struktur Prototipe	164
5.9. Material Tipe Struktur Sederhana	166
5.9.1. Struktur kristal logam.....	167
5.9.2. Struktur kristal biner sederhana.....	185
5.9.3. Struktur kristal biner: logam transisi dioksida.....	196

BAB 6

DIFRAKSI SINAR-X	205
6.1. Pendahuluan.....	205
6.2. Sinar-X.....	206
6.3. Produksi Sinar-X	208
6.4. Difraksi Sinar-X	217
6.5. Superposisi gelombang.....	219
6.6. Geometri Difraktometer Sinar-X	221
6.7. Komponen Difraktometer Sinar-X.....	223
6.7.1. Sumber sinar-X	223
6.7.2. Spesimen	225
6.7.3. Optik.....	227
6.7.4. Detektor.....	231
6.8. Pemeriksaan Pola Difraksi Sinar-X Standar.....	239
6.9. Sumber Informasi	243
6.10. Keamanan Sinar-X	249

BAB 7

ANALISIS STRUKTUR KRISTAL DARI DATA XRD SERBUK.....	251
7.1. Pendahuluan	251
7.2. Hukum Bragg dan Hukum Ortogonalitas.....	252
7.3. Faktor Struktur	255

7.4. Bidang-bidang Kristal (<i>hkl</i>) pada Struktur Kubik	257
7.4.1. Struktur Kubik Primitif (<i>P</i>).....	257
7.4.2. Struktur Kubik Pusat Badan (<i>I</i>).....	258
7.4.3. Struktur Kubik Pusat Muka (<i>F</i>)	259
7.5. Bidang-bidang Kristal (<i>hkl</i>) Heksagonal Kemas rapat (<i>hcp</i>).....	261
7.6. Penggunaan Data Difraksi Sinar-X.....	263
7.6.1. Analisis fasa kristal secara kualitatif.....	263
7.6.2. Kemurnian fasa.....	265
7.6.3. Penentuan struktur kristal: struktur kubik.....	266
7.6.4. Penentuan struktur kristal: struktur heksagonal.....	271
7.6.5. Indeksasi pola difraksi	272
7.6.6. Perhitungan parameter kisi.....	275
7.6.7. Pemurnian struktur	276
7.6.8. Ukuran kristalit.....	276

DAFTAR PUSTAKA	279
-----------------------------	------------

Daftar Tabel

Tabel 2.1.	Unsur dan Operasi Simetri	63
Tabel 2.2.	Grup titik yang sangat simetris: (a). linier ($D_{\infty h}$ dan $C_{\infty v}$) dan (b). polihedral (T_d , O_h , dan I_h)	79
Tabel 2.3.	Grup titik dengan simetri rendah	81
Tabel 2.4.	Grup titik dengan sumbu rotasi n (C_n)	83
Tabel 2.5.	Grup titik dihedral	85
Tabel 2.6.	Grup titik dengan unsur simetrinya	86
Tabel 4.1.	Operasi simetri: simbol Hermann–Mauguin dan Schoenflies	122
Tabel 4.2.	Simbol dan vektor luncuran	130
Tabel 4.3.	Karakteristik Tujuh sistem kristal	136
Tabel 4.4.	Tujuh jenis kelas kristal aksial.....	139
Tabel 4.5.	230 grup ruang	148
Tabel 5.1.	Lima kisi kristal dua-dimensi.....	162
Tabel 5.2.	Empat belas kisi Bravais.....	163
Tabel 5.3.	Nomenklatur sel satuan (<i>unit cell</i>)	163
Tabel 5.4.	Simbol Pearson sesuai dengan 14 kisi Bravais	165
Tabel 5.5.	<i>Strukturbericht</i> : simbol and nama tipe strukur kristal sederhana.....	166
Tabel 5.6.	Parameter kisi (\AA) diperoleh pada kondisi normal untuk senyawa golongan III-V mengkristal dalam tipe struktur <i>zinc blende</i>	187
Tabel 5.7.	Parameter kisi (\AA) diperoleh pada kondisi normal untuk senyawa Be-VI and Logam Transisi-VI mengkristal dalam tipe struktur <i>zinc blende</i>	187
Tabel 5.8.	Parameter kisi (\AA) diperoleh pada kondisi normal untuk senyawa Logam Transisi-VII mengkristal dalam tipe struktur <i>zinc blende</i>	187
Tabel 5.9.	Parameter kisi (\AA) diperoleh dalam kondisi normal untuk senyawa II-VII dan hidrida, silisida, oksida, dan fluorida dari beberapa logam transisi, semuanya mengkristal dalam struktur fluorit. Selain itu, ditampilkan $\beta\text{-PbF}_2$ dan $\alpha\text{-PoO}_2$	189
Tabel 5.10.	Parameter kisi dihasilkan dibawah kondisi normal senyawa biner yang mengkristal dengan strukur wurtzite	195

Tabel 5.11.	Perbandingan antara jarak atom tetangga terdekat untuk struktur <i>zinc blende</i> dan struktur wurtzite dari beberapa senyawa biner	196
Tabel 5.12.	Parameter kisi berbagai alotrop TiO ₂ dan berat jenis.....	198
Tabel 6.1.	Energi tingkat K, L _{II} , dan L _{III} Molibdenum	213
Tabel 6.2.	Beberapa Panjang Gelombang Sinar-x dengan K yang umum Digunakan (dalam nm)	215
Tabel 6.3.	Panjang Gelombang dan filter β	217
Tabel 6.4.	Detail Data yang Tersedia di File JCPDS-ICDD	248
Tabel 6.5.	Kelompok <i>d spacings</i> (dalam Å) di Manual Pencarian FDF (Metode Hanawalt)	248
Tabel 7.1.	Rumus untuk jarak <i>d</i> dan volume sel satuan dari semua sistem kristal	254
Tabel 7.2.	Bidang-bidang (<i>hkl</i>) yang muncul pada struktur kristal kubik primitive (<i>P</i>), kubik pusat badan (<i>I</i>), dan kubik pusat muka (<i>F</i>)	261
Tabel 7.4.	Aturan Seleksi untuk Kemunculan dan Ketidakhadiran Refleksi.....	269
Tabel 7.5.	Indeksasi data difraksi serbuk	270
Tabel 7.6.	Nilai $\sin^2\theta$ dari garis yang terobservasi.....	271
Tabel 7.7.	Nilai $\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2)$	273
Tabel 7.8.	Harga $l^2/(c/a)^2$ untuk zink (<i>c/a</i> = 1,8563)	273
Tabel 7.9.	Harga $\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + l^2/(c/a)^2$ untuk berbagai bidang <i>hkl</i>	274

Daftar Gambar

Gambar	1.1.	Struktur nyata kristal dan pola difraksi.....	3
Gambar	1.2.	(a). Metode Verneuil dan (b). Diagram skema alat pertumbuhan kristal dengan metode Verneuil	10
Gambar	1.3.	Metode Czochralski untuk pertumbuhan kristal.....	11
Gambar	1.4.	(a) Metode Stockbarger. T_m = titik leleh kristal (b) Metode Bridgman. Pengulangan: T_1 , T_2 dan T_3 ditampilkan.....	12
Gambar	1.5.	Metode pelelehan zona	14
Gambar	1.6.	(A) Gambar peralatan Nacken yang mengilustrasikan pertumbuhan kristal dengan menggunakan "bibit kristal" yang dimasukkan ke dalam permukaan lelehan. (B) Diagram skema dari pengaturan eksperimental Kyropoulous dengan tanpa "bibit kristal"	16
Gambar	1.7.	Diagram skema dari autoklaf kuarsa hidrotermal...	32
Gambar	1.8.	Diagram fasa P–T pada bomb hidrotermal dengan Tekanan dikontrol baik secara eksternal.....	33
Gambar	1.9.	Berbagai bentuk kristal. (a) Kristal polihedral; (b) kristal hopper; (c) kristal dendritik (kristal salju)...	53
Gambar	1.10.	Morfologi kristal tunggal (polihedral, hopper, dendritik) dan agregat polikristalin (sperulitik dan fraktal) dalam kaitannya dengan laju pertumbuhan R , kekuatan pendorong, kekasaran antarmuka (halus dan kasar) dan mekanisme pertumbuhan	54
Gambar	1.11.	Morfologi internal yang diharapkan dalam kristal tunggal karena perubahan parameter pertumbuhan selama pembentukan kristal tunggal. Panah di masing-masing diagram R vs. $\Delta\mu/kT$ menunjukkan rute perubahan kondisi kekuatan pendorong selama proses pertumbuhan.	56
Gambar	1.12.	Berbagai batas sektor pertumbuhan: Tiga angka di atas menunjukkan batas-batas sektor pertumbuhan yang diharapkan dalam kaitannya dengan tingkat pertumbuhan relatif RA dan RB . Dua angka yang lebih rendah menunjukkan batas-batas sektor pertumbuhan yang benar-benar diamati.....	57

Gambar	2.1.	Simetri dari bunga dan tumbuhan.....	60
Gambar	2.2.	Simetri dari hewan: kupu-kupu dan formasi burung terbang	61
Gambar	2.3.	Simetri dari bangunan: Taj Mahal dan gedung MPR-DPR	61
Gambar	2.4.	Molekul CHBrFCl yang hanya memiliki operasi identitas.....	64
Gambar	2.5.	Sumbu C_2 dalam H_2O	66
Gambar	2.6.	Sumbu C_3 dalam NH_3	66
Gambar	2.7.	Dua pandangan SF_6 menunjukkan C_4 dan Sumbu C_3 Pada gambar di sebelah kanan, C_3 sumbu tegak lurus terhadap kertas dan melewati atom S	67
Gambar	2.8.	Dua pandangan sikloheksana menunjukkan sumbu utama C_3 (tegak lurus terhadap kertas pada gambar di sebelah kanan) dan tiga sumbu C_2 sekunder.....	67
Gambar	2.9.	Dua bidang vertikal (σ_v) dalam H_2O	69
Gambar	2.10.	Bidang molekular σ_h dalam (a). trans- N_2F_2 dan (b). trans-1,5,9 siklododekatriene.....	70
Gambar	2.11.	Sumbu simetri C_2 dan sumbu C_2 dalam DIH_4	71
Gambar	2.12.	Operasi S_6 pada etena	73
Gambar	2.13.	Dua orientasi CH_4 menunjukkan arah sumbu C_3 dan C_2	73
Gambar	2.14.	Objek yang dibangun untuk grup titik: (a) C_{3v} dan (b) D_{3h}	76
Gambar	2.15.	(a) Sistem sumbu yang digunakan untuk molekul tetrahedral: metana (CH_4), menunjukkan posisi sumbu simetri. (b) Salah satu dari 6 bidang cermin σ_d dalam grup titik T_d	77
Gambar	2.16.	Contoh molekul dengan grup titik T_1 atau T_h : (a) $[Fe(C_5H_5N)_6]^{2+}$ dan $[M(NO_2)_6]^{n-}$ ($M = Co$ dengan $n = 3$; $M=Ni$ dengan $n=4$) yang dilihat pada arah sumbu C_3	77
Gambar	2.17.	Dua tampilan SF_6 menunjukkan sumbu C_4 dan C_3 . Pada gambar di sebelah kanan, sumbu C_3 tegak lurus dengan kertas dan melewati atom S.....	78
Gambar	2.18.	Perspektif C_{60} (I_h): arah sumbu C_2 , C_3 dan C_5	78
Gambar	2.19.	Tionil halida (SOX_2) dan amina sekunder (R_2NH): contoh simetri C_3	80
Gambar	2.20.	Contoh molekul dengan simetri C_i	81

Gambar 2.21.	Kation $[\text{Cr}(\text{en})_3]^{3+}$ merupakan representatif senyawa kompleks logam tris-chelated dengan grup titik D_3	84
Gambar 2.22.	Contoh molekul yang termasuk dalam grup titik D_{2h} , D_{3h} , D_{5h} dan D_{6h}	84
Gambar 2.23.	Bagan alir untuk identifikasi sistematis grup titik molekul.....	87
Gambar 2.24.	Tiga sumbu simetri C_2 pada allene.....	89
Gambar 3.1.	Sel satuan struktur kristal natrium klorida.....	91
Gambar 3.2.	Kristal ortorombik ideal dengan sumbu kristalografi.....	94
Gambar 3.3.	Sumbu kristalografi dan sudut antar sumbu.....	94
Gambar 3.4.	Penggunaan aturan tangan kanan sebagai sumbu kristalografi.....	95
Gambar 3.5.	Bidang ABC pada ruang tiga dimensi.....	96
Gambar 3.6.	Basis non-kesatuan (<i>non-unitary</i>), koordinat titik ...	97
Gambar 3.7.	Persamaan sebuah bidang berbasis non-kesatuan..	97
Gambar 3.8.	Sumbu kristalografi dan resiprok.....	98
Gambar 3.9.	Zirkon (ZrSiO_4): suatu kristal dengan simetri tinggi	99
Gambar 3.10.	Representasi muka dari kristal vertikal heksagonal	101
Gambar 3.11.	Penggambaran bagian kanan dari prisma dua kristal kuarsa.....	101
Gambar 3.12.	Prinsip Bernhardt: tiga polihedral dengan sudut yang sama pada 60° dan 90° antar permukaan normal.....	102
Gambar 3.13.	Perpotongan bidang kristalografi.....	103
Gambar 3.14.	Indeks Miller-Bravais (<i>hkil</i>). Sumbu-sumbu kristalografik.....	105
Gambar 3.15.	Indeks Miller-Bravais (<i>hkil</i>).....	106
Gambar 3.16.	(a). Motif yang sama dengan pola yang sempurna dan (b). Susunan teratur motif acak tetapi bukan pola.....	108
Gambar 3.17.	Proyeksi stereografik.....	109
Gambar 3.18.	Proyeksi stereografik kelas kristal (grup titik): $\bar{4}$	110
Gambar 3.19.	Kristal kubik menunjukkan tiga bentuk bidang: kubus-b, e, d, dan bidang muka sejajar; oktahedron-r, m, n, q, dan bidang muka sejajar; rombik dodekahedron-f, g, p, 0, c, a, dan bidang muka sejajar.....	

		111
Gambar	3.20. Proyeksi bentuk bola dari kristal kubik	112
Gambar	3.21. Stereogram kristal pada Gambar 3.19. Lingkaran zona (lingkaran besar) $G_1G'_1$ simbol sumbu zona [101], melewati e, q, a, n, e', q', a', n'; lingkaran zona $G_2G'_2$ simbol sumbu zona [110], melewati f, r, d, q', i', r', d', q.	113
Gambar	3.22. Jaring-jaring Wuff	114
Gambar	3.23. Stereogram pada Gambar 3.21 yang telak di indeks Miller.....	115
Gambar	3.24. Kristal pada Gambar 3.19 dengan menampilkan indeks Miller	115
Gambar	4.1. Operasi dan unsur simetri rotasi.....	123
Gambar	4.2. Operasi dan unsur simetri refleksi dan inversi	124
Gambar	4.3. Operasi dan unsur simetri translasi.....	126
Gambar	4.4. Operasi dan unsur simetri rotoinversi	127
Gambar	4.5. Operasi dan unsur simetri rotorefleksi (S_n) dan rotoinversi (I_n)	127
Gambar	4.6. Operasi dan unsur simetri sekrup: 2_1	128
Gambar	4.7. Operasi dan unsur simetri sekrup: $4_1, 4_2$, dan 4_3	129
Gambar	4.8. Operasi dan unsur simetri bidang lancur atau bidang gelincir.....	130
Gambar	4.9. Bidang lancur atau bidang gelincir.....	131
Gambar	4.10. Baris, jaring, dan kisi	132
Gambar	4.11. (a) Kisi dua dimensi menunjukkan pilihan sel satuan yang berbeda. (b) Sel satuan primitif untuk kisi tiga dimensi	132
Gambar	4.12. Klasifikasi kristal	134
Gambar	4.13. Dua sel rombohedral ditampilkan dalam satu sel heksagonal	135
Gambar	4.14. Empat belas kisi Bravais	137
Gambar	4.15a. Representasi tiga dimensi dari 32 kelas kristal	142
Gambar	4.15b. Representasi tiga dimensi dari 32 kelas kristal (lanjutan).....	143
Gambar	4.16. Lima grup urutan tak terbatas yang berisi sumbu rotasi unik	144
Gambar	4.17. Penjelasan simbol-simbol pada Tabel Internasional: grup Cc.....	151
Gambar	5.1. Bagian kisis-kisi.....	154

Gambar 5.2.	Struktur yang lebih kompleks di mana motif terdiri dari empat molekul berorientasi berbeda $(C_5H_5)_3Sb$	155
Gambar 5.3.	Pembentukan jaring: (a) Baris (kisi satu dimensi) dari titik-titik yang berjarak sama. (b) Tumpukan baris yang teratur membentuk jaring	156
Gambar 5.4.	Tiga struktur kristal satu dimensi yang berbeda: (a). pengulangan periodik atom identik, (b). pengulangan periodik dari sebuah blok bangunan yang terdiri dari dua atom yang berbeda, dan (c). pengulangan periodik dari blok bangunan yang terdiri dari dua atom identik	157
Gambar 5.5.	Dua susunan titik kisi yang berbeda terhadap atom struktur kristal, untuk struktur dari Gambar 5.2. Dalam kedua kasus, susunan atom dalam struktur kristal terlihat sama dari titik kisi mana pun.....	158
Gambar 5.6.	Berbagai pilihan sel unit primitif dalam kisi.....	159
Gambar 5.7.	Pilihan sel: kisi primitif (1 & 2) dan pusat kisi (no. 3).....	160
Gambar 5.8.	Jaring persegi panjang dengan sel unit p.....	161
Gambar 5.9.	Jaring persegi panjang dengan sel unit p dan c	162
Gambar 5.10.	Struktur logam yang paling umum.....	168
Gambar 5.11.	Model bola yang mengisi ruang dalam pola kubik sederhana	169
Gambar 5.12.	(a). Sel satuan dari struktur kubik pusat badan. (b). Sebuah bidang yang dibatasi dua diagonal badan kubus yang ditunjukkan pada (a)	170
Gambar 5.13.	Sel satuan kubik dari A2: prototipe struktur tungsten (W)	172
Gambar 5.14.	(a) Sel satuan dari struktur fcc. (b) Bidang muka depan kubus dari (a) dengan penampang 5 atom dianggap bola keras. Titik kontak antara atom tetangga terdekat ditemukan di bidang ini	172
Gambar 5.15.	Sel satuan kubik dari A1: prototipe struktur tembaga (Cu).....	174
Gambar 5.16.	Lapisan bola kemas rapat yang merupakan struktur dua dimensi dari heksagonal kemas rapat	174
Gambar 5.17.	Pusat bola lapisan pertama dan proyeksi pusat bola lapisan kedua dalam susunan bola yang sama.....	175

Gambar 5.18.	(a) dan (b) menunjukkan dua susunan bola yang sama besar. Kasus yang dijelaskan dalam (a) berbeda dari kasus di (b) dalam posisi bola dari lapisan ketiga sehubungan dengan bola dari lapisan pertama dan kedua	176
Gambar 5.19.	Struktur <i>fcc</i> dipandang sebagai struktur yang rapat (kubik kemas rapat). Tiga lapisan berturut-turut dari struktur ini ditandai sebagai A , B , dan C	178
Gambar 5.20.	ABAB ... susunan lapisan atom dalam struktur <i>hcp</i> ..	178
Gambar 5.21.	Sel satuan konvensional dari struktur <i>hcp</i> ditentukan oleh basis vektor: \vec{a} , \vec{b} , \vec{c}	179
Gambar 5.22.	Posisi dua atom dalam sel satuan heksagonal dari struktur <i>hcp</i> . Koordinat dinyatakan dalam satuan <i>a</i> dan <i>c</i>	180
Gambar 5.23.	Sel satuan heksagonal dari struktur magnesium A3: (a) tampilan perspektif; (b) proyeksi ke bawah sumbu <i>c</i>	181
Gambar 5.24.	Sebanyak 6 atom dari 12 atom tetangga terdekat bertanda 4 (yang bertanda 1-3, dan 5-7) terletak di simpul sel satuan heksagonal. Vektor \vec{r} memberikan posisi atom yang ditandai sebagai 4 ..	181
Gambar 5.25.	Struktur heksagonal ganda kemas rapat dengan urutan lapis atom ABACABAC.....	183
Gambar 5.26.	Prisma heksagonal untuk tiga dari empat struktur padat yang dibahas: <i>hcp</i> , <i>dhcp</i> , dan tipe α -Sm dengan urutan lapis atom <i>hcp</i> dua dimensi ditampilkan	184
Gambar 5.27.	Prisma heksagonal untuk struktur ccp (<i>fcc</i>) (rasio parameter sel adalah $c/a = \sqrt{6}$). Terlihat jelas urutan lapis atom A, B, dan C.....	185
Gambar 5.28.	Dua sel satuan kubik untuk struktur campuran seng ZnS: satu dengan kation Zn^{2+} dan satu lagi dengan anion S^{2-} pada ujung sel satuan	186
Gambar 5.29.	Sel satuan kubik untuk struktur CaF_2 . Dalam kubus ujung sel satuan ditempati kation Ca^{2+} di (a) dan anion F^- di (b)	188
Gambar 5.30.	(a) Tetrahedron reguler yang ditentukan oleh atom tetangga terdekat dari anion F^- dalam CaF_2 ,	

	dan (b) Kubus didefinisikan oleh atom tetangga terdekat dari kation Ca^{2+} dalam CaF_2	188
Gambar 5.31.	Sel satuan kubik Li_2O yang mengkristal dalam struktur anti-fluorit. Pada ujung kubus ditempatkan anion O^{2-} di (a) dan kation Li^+ di (b) ..	191
Gambar 5.32.	(a) Tetrahedron reguler yang ditentukan oleh atom tetangga terdekat dari kation Li dalam Li_2O , dan (b) Kubus ditentukan oleh atom tetangga terdekat dari anion O^{2-} dalam Li_2O	191
Gambar 5.33.	Prisma heksagonal untuk ZnS dalam struktur wurtzite, dengan kation Zn^{2+} di ujung atau simpul (a) dan anion S^{2-} di ujung atau simpul (b)	192
Gambar 5.34.	Dua sel satuan konvensional untuk ZnS dalam struktur wurtzite: (a) kation Zn^{2+} di ujung sel satuan (simpul) dan (b) anion S^{2-} di ujung sel satuan (simpul)	193
Gambar 5.35.	(a) dan (b) menunjukkan posisi ion milik sel satuan dari Gambar 5.34(a) dan Gambar 5.34(b)	193
Gambar 5.36.	(a) Tetrahedron yang ditentukan oleh atom tetangga terdekat dari anion S^{2-} dalam $\alpha\text{-ZnS}$. (b) Tetrahedron yang ditentukan oleh atom tetangga terdekat dari kation Zn^{2+} dalam $\alpha\text{-ZnS}$	194
Gambar 5.37.	Struktur rutile.....	199
Gambar 5.38.	Struktur rutile: (a) rantai linier arah sumbu c dan dan (b) lorong segiempat	200
Gambar 5.39.	Struktur anatas: (a) unie sel, (b) rantai zig-zag, (c) ikatan dua rantai zig-zag arah sumbu b, dan (d) bidang [010]	202
Gambar 5.40.	Struktur brookite dalam proyeksi: (a). [001] dan (b). [100]	203
Gambar 6.1.	(a). Produkdi sinar-X dari sumber target logam Cu K_{α} , dan (b). Spektrum emisi sinar-X dari sumber target logam Cu.....	207
Gambar 6.2.	Skema yang menunjukkan komponen penting dari t\abung sinar-x modem. Berilium digunakan untuk jendela karena sangat transparan terhadap sinar-x	208

Gambar 6.3.	Spektrum sinar-X molibdenum pada potensial yang berbeda. Perbedaan potensial mengacu pada yang diterapkan antara anoda dan katoda. (Lebar garis radiasi karakteristik tidak berskala).....	209
Gambar 6.4.	Diagram tingkat energi untuk ransisi sinar-X.....	209
Gambar 6.5.	Ilustrasi asal mula radiasi kontinu dalam spektrum sinar-x. Setiap elektron dengan energi awal E_0 kehilangan sebagian atau seluruh energinya melalui tumbukan dengan atom-atom target. Energi dari foton yang dipancarkan sama dengan energi yang hilang dalam tumbukan	210
Gambar 6.6.	Ilustrasi proses ionisasi kulit dalam dan emisi a selanjutnya sinar-x karakteristik: (a) elektron yang datang mengeluarkan elektron kulit K dari atom, (b) meninggalkan lubang di kulit K; (c) terjadi penataan ulang elektron, menghasilkan emisi foton sinar-x.....	211
Gambar 6.7.	Transisi elektron dalam sebuah atom, yang menghasilkan sinar-x karakteristik $K\alpha$, $K\beta$, dan $L\alpha$	212
Gambar 6.8.	Spektrum sinar-X molibdenum pada 35 kV. Skala yang diperluas di sebelah kanan menunjukkan penyelesaian garis $K\alpha_1$ dan $K\alpha_2$	214
Gambar 6.9.	Diagram tingkat energi yang menunjukkan semua transisi elektron yang diizinkan dalam atom molybdenum	215
Gambar 6.10.	(a). Absorpsi (μ) dan emisi (I) dari sinar-X, dan (b). spektrum emisi yang dihasilkan dengan menggunakan filter β	216
Gambar 6.11.	Penghamburan sinar-x oleh atom	218
Gambar 6.12.	Ilustrasi superposisi gelombang.....	219
Gambar 6.13.	Variasi faktor hamburan atom tembaga, aluminium, dan oksigen dengan $(\sin \theta)/\lambda$	220
Gambar 6.14.	Geometri Difraktometer Sinar-X.....	222
Gambar 6.15.	Susunan celah pada difraktometer.....	228
Gambar 6.16.	Puncak khas dalam pola difraksi sinar-x	229
Gambar 6.17.	Skema difraktometer dengan kristal monokromatis dalam berkas terdifraksi	230
Gambar 6.18.	Berkas sinar-x yang mengalami total refleksi dalam kapiler kaca berongga.....	230

Gambar 6.19.	Skema cermin multilayer	231
Gambar 6.20.	Detektor Proporsional	233
Gambar 6.21.	Detektor Kilau	234
Gambar 6.22.	Kurva distribusi tinggi pulsa untuk tiga detektor...	234
Gambar 6.23.	Detektor keadaan padat.....	236
Gambar 6.24.	Pola difraksi sinar-x aluminium.....	240
Gambar 6.25.	Pola difraksi sinar-X aluminium di mana intensitas puncak relatif telah ditingkatkan dengan memotong ketinggian puncak dari puncak yang paling intens.....	240
Gambar 6.26.	Perbandingan pola difraksi sinar x dari bahan dengan struktur kristal kubik yang berbeda	241
Gambar 6.27	Kartu JCPDS-ICDD untuk Silikon	246
Gambar 7.1.	XRD pada bidang parallel	252
Gambar 7.2.	Kisi Bravais kubik primitif (P), kubik pusat badan (I)	257
Gambar 7.3.	Kisi-kisi resiprok untuk struktur kristal kubik pusat badan (I) (Titik-titik kisi sesuai dengan ketidakhadiran sistematis telah dihilangkan, susunan titik sebenarnya merupakan kisi-kisi kubik pusat muka (F)).....	258
Gambar 7.4.	Kisi-kisi resiprok untuk struktur kristal kubik pusat muka (F). (Titik-titik kisi sesuai dengan ketidakhadiran sistematis (tidak muncul) telah dihilangkan, susunan titik sebenarnya yaitu kisi-kisi kubik pusat badan (I)	260
Gambar 7.5.	Unit sel untuk struktur kristal heksagonal kemas rapat (<i>hcp</i>) menunjukkan empat sumbu dalam sistem indeks Miller-Bravais. Tiga sumbu bidang dasar yaitu x, y dan u yang semuanya setara dengan kristalografi dan sumbu z tegak lurus terhadap bidang dasar	262
Gambar 7.6.	Pola XRD senyawa TiO ₂ dengan dua fasa: anatase dan rutile.....	266

ari Sutrisno, dkk.