

BAB I STRUKTUR KRISTAL

Sebagian besar materi fisika zat padat adalah kristal dan elektron di dalamnya, fisika zat padat mulai dikembangkan awal abad ke 20, mengikuti penemuan difraksi sinar-x oleh kristal.

Sebuah kristal ideal disusun oleh satuan-satuan struktur yang identik secara berulang-ulang yang tak hingga di dalam ruang.

Semua struktur kristal dapat digambarkan atau dijelaskan dalam istilah-istilah *lattice* (kisi) dan sebuah basis yang ditempelkan pada setiap titik *lattice* (kisi).

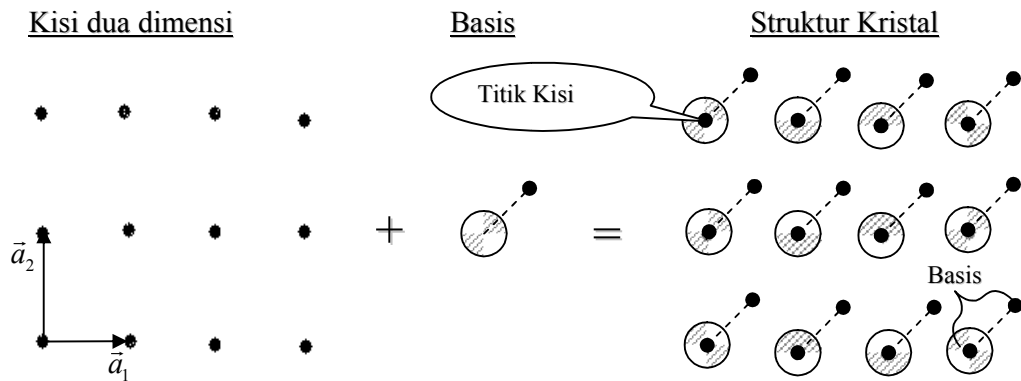
Lattice (kisi) : Sebuah susunan titik yang teratur dan periodik di dalam ruang
Sebuah abstraksi matematik

Basis : Sekumpulan atom-atom

Jumlah atom dalam sebuah basis : satu buah atom atau lebih.

$$\text{Struktur kristal} = \text{Kisi} + \text{Basis}$$

Contoh :



Jarak antar kisi dalam arah sumbu X = \vec{a}_1

Jarak antar kisi dalam arah sumbu Y = \vec{a}_2

Jarak dari titik yang satu ke titik yang lain boleh sama atau berbeda, jika sama (dalam kisi dua dimensi) akan berbentuk bujur sangkar dan jika berbeda akan berbentuk 4 persegi panjang.

Contoh : $\text{H}_2\text{O} = 1$ basis (ada 3 atom)

$\text{H}_2\text{SO}_4 = 1$ basis (ada 7 atom)

Untuk kristal monoatomik dalam 1 basis hanya 1 atom.

Sebuah operasi translasi kisi didefinisikan sebagai perpindahan dari sebuah kristal oleh sebuah vektor translasi kristal (\vec{T})

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

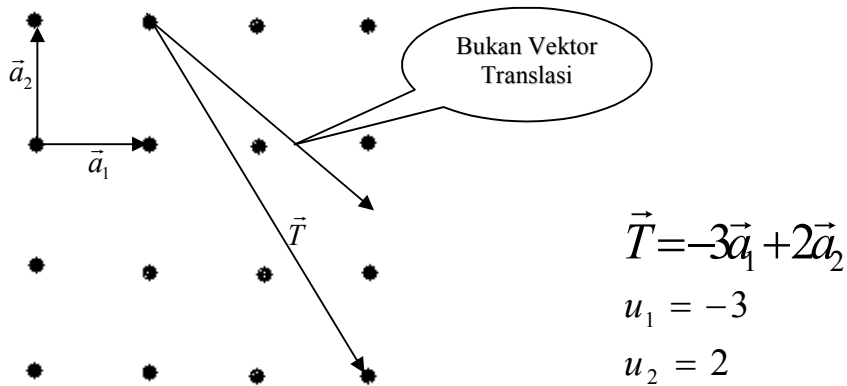
Dimana :

u = Bilangan bulat

\vec{a} = Vektor translasi primitif (jarak antar titik kisi)

= Sumbu-sumbu kristal

Contoh :

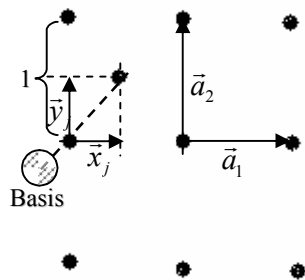


Posisi dari sebuah pusat atom j dari sebuah basis relative terhadap titik *lattice* dimana basis diletakkan adalah:

$$\vec{r}_j = x_j\vec{a}_1 + y_j\vec{a}_2 + z_j\vec{a}_3$$

Dengan : $0 \leq x_j, y_j, z_j \leq 1$

Contoh:



Cell Lattice Primitif

= Sebuah sel yang mempunyai luas atau volume terkecil

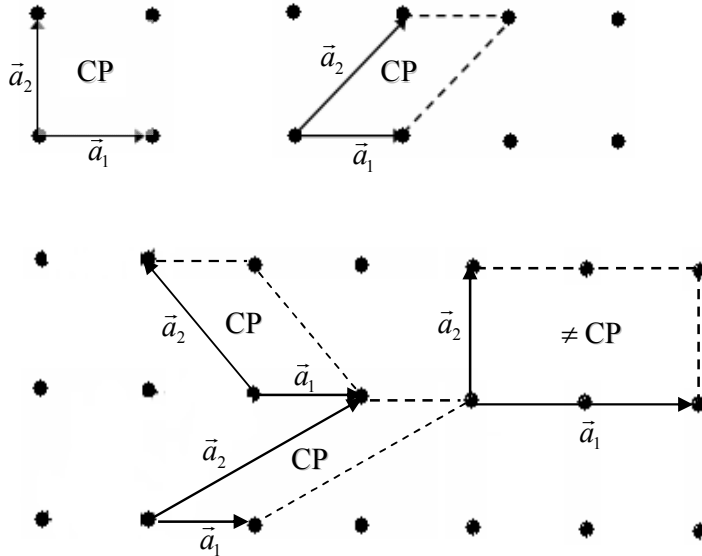
= Lawan dari sel konvensional, yaitu sel yang mempunyai luas atau volume terbesar

= Sel yang mempunyai 1 titik kisi

= Sebuah paralelepiped yang dibentuk oleh sumbu-sumbu. $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$

Sel epipid = sebuah bangun yang sisinya sejajar / bidang yang dibatasi oleh garis-garis Sejajar.

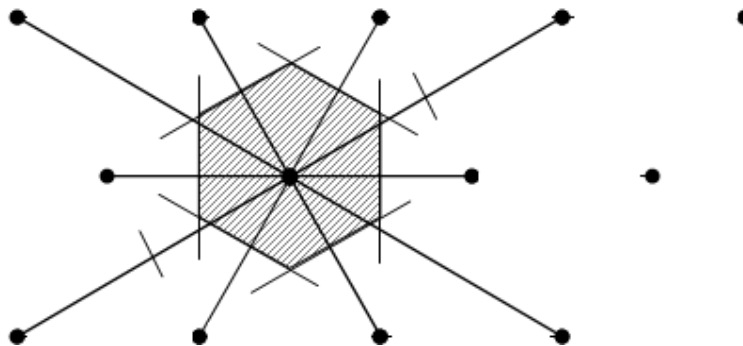
Cara Menentukan sel primitif (Sumbu-sumbu primitif)



Cara lain untuk memilih sel primitif : Metode Wigner Seitz.

1. Hubungkan sebuah titik lattice dengan titik lattice di sekitarnya.
2. di tengah-tengah dan tegak lurus terhadap garis penghubung ini, lukislah garis-garis atau bidang-bidang. Luas terkecil atau volume terkecil yang dilingkupi oleh garis-garis atau bidang-bidang ini disebut dengan sel primitif Wigner seitz.

Contoh:



Tipe-tipe lattice dasar

Lattice (kisi) dua dimensi : ada lima (5) jenis, yaitu

- 1 Kisi miring
- 2 Kisi bujur sangkar
- 3 Kisi heksagonal
- 4 Kisi segi panjang
- 5 Kisi segi panjang berpusat

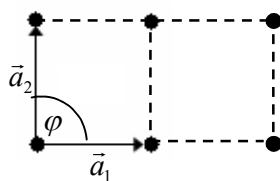
Catatan :

Jenis kisi no 1 : jenis kisi umum

Jenis kisi no 2, 3, 4 dan 5 merupakan jenis kisi khusus

Contoh :

Kisi Bujur Sangkar



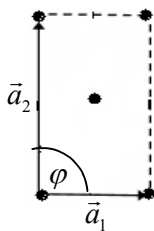
$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|; \varphi = 90^\circ$$

Jumlah titik lattice pada :

$$\text{Cel konvensional} = 4 \times 1/4 = 1 \text{ buah}$$

$$\text{Cel primitif} = 1/4 \times 4 = 1 \text{ buah}$$

Kisi segi panjang berpusat



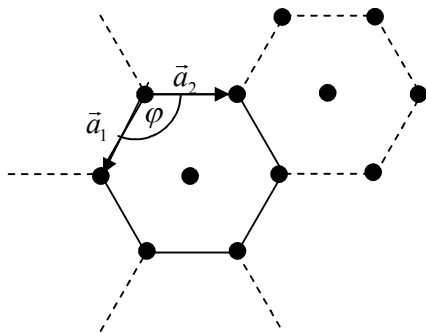
$$|\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|; \varphi = 90^\circ$$

Jumlah titik lattice pada :

$$\text{Cel konvensional} = (4 \times 1/4) + 1 = 2 \text{ buah}$$

$$\text{Cel primitif} = 4 \times 1/4 = 1 \text{ buah}$$

Kisi Heksagonal



$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|; \varphi = 120^\circ$$

Jumlah titik lattice pada :

$$\text{Cel konvensional} = (6 \times 1/6) + 1 = 2 \text{ buah}$$

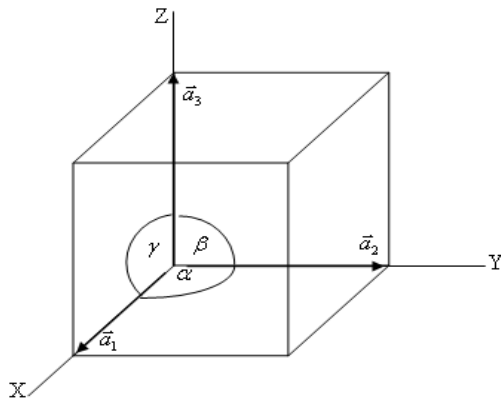
$$\text{Cel primitif} = 6 \times 1/6 = 1 \text{ buah}$$

Lattice Tiga dimensi : ada 14 jenis, yaitu

SISTEM	JUMLAH KISI	SUMBU KONVENSIONAL	SUDUT
Triklinik	1	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoklinik	2	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ortorombik	4	$ \vec{a}_1 \neq \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Kubus	3	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3 $	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trogonal	1	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 = \vec{a}_3 $	$\alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
Heksagonal	1	$ \vec{a}_1 = \vec{a}_2 \neq \vec{a}_3 $	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Jumlah Kisi			14 Buah

Contoh : Kisi Kubus (3 Jenis)

a. Kubus Sederhana / Simple Cubic (SC)



Sel Primitif = Sel Konvensional

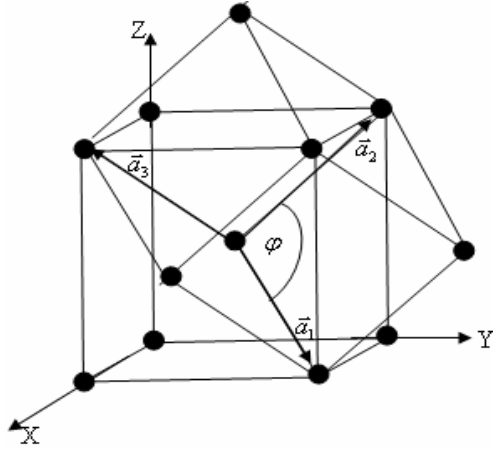
Jumlah titik lattice = $8 \times 1/8 = 1$ buah (Pada setiap sudut dipakai 8 kubus sel)

$$\vec{a}_1 = a\hat{x}$$

$$\vec{a}_2 = a\hat{y}$$

$$\vec{a}_3 = a\hat{z}$$

b. Kubus Pusat Badan / Body Center Cubic (BCC)



Sel Primitif \neq Sel Konvensional

Jumlah titik lattice pada:

sel primitif = $8 \times 1/8 = 1$ buah

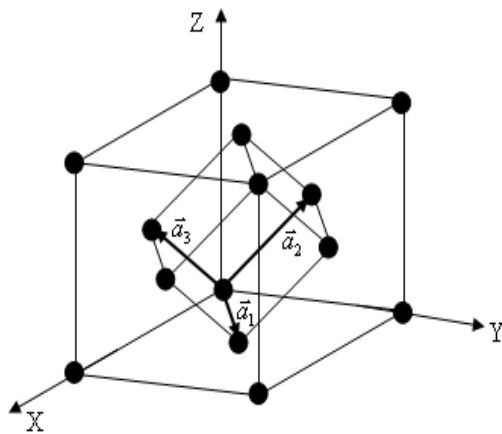
sel konvensional = $(8 \times 1/8) + 1 = 2$ buah

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z}) ; \vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$$

$$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$$

$\varphi = 109,28^\circ$ (sudut antara sumbu-sumbu)

c. Kubus Pusat Muka / Face Center Cubic (FCC)



Sel Primitif \neq Sel Konvensional

Jumlah titik lattice pada:

sel primitif = $8 \times 1/8 = 1$ buah

sel konvensional = $(8 \times 1/8) + (6 \times 1/2)$
= 4 buah

$$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z}) ; \vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$$

$\varphi = 60^\circ$ (sudut antara sumbu-sumbu)

Volume sel primitif

$$V_c = |\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{a}_3| \text{ atau,}$$

$$V_c = |\vec{a}_2 \cdot \vec{a}_3 \times \vec{a}_1| \text{ atau,}$$

$$V_c = |\vec{a}_3 \cdot \vec{a}_1 \times \vec{a}_2|$$

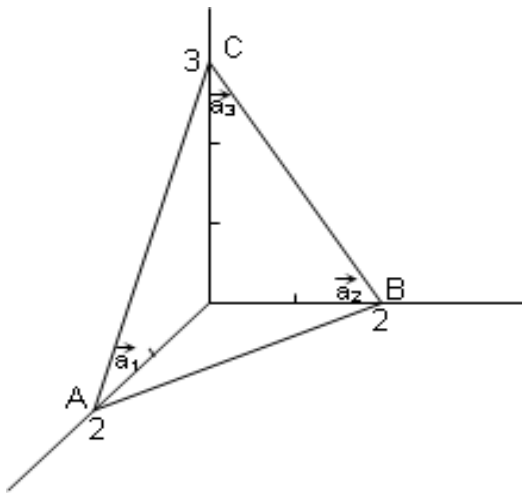
Sistem Indeks (Indeks Miller)

Digunakan untuk menyatakan bidang kristal (indeks bidang)

Aturan :

1. Tentukan titik potong antara bidang yang bersangkutan dengan sumbu-sumbu ($\bar{a}_1, \bar{a}_2, \bar{a}_3$) / sumbu-sumbu primitif atau konvensional dalam satuan konstanta lattice (a_1, a_2, a_3).
2. Tentukan kebalikan (reciprok) dari bilangan-bilangan tadi, dan kemudian tentukan tiga bilangan bulat (terkecil) yang mempunyai perbandingan yang sama. Indeks (h k l).

Contoh :



Bidang ABC memotong sumbu-sumbu :

$$\bar{a}_1 \text{ di } 2a_1$$

$$\bar{a}_2 \text{ di } 2a_2$$

$$\bar{a}_3 \text{ di } 2a_3$$

Kebalikannya adalah $\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}$

Jika ketiga bilangan bulat yang mempunyai perbandingan yang sama seperti di atas adalah 3, 3, 2. dengan demikian indeks bidang ABC tersebut adalah (3 3 2).

Perhatikan bahwa dalam penulisan indeks kita tidak menggunakan tanda koma.

Misal:

$$\begin{array}{ccc} (3 & 3 & 2) \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ (h & k & l) \end{array}$$

Jika salah satu dari h k l negatif, maka indeks bidang tersebut ditulis (\bar{h} k l), artinya h bertanda negatif.

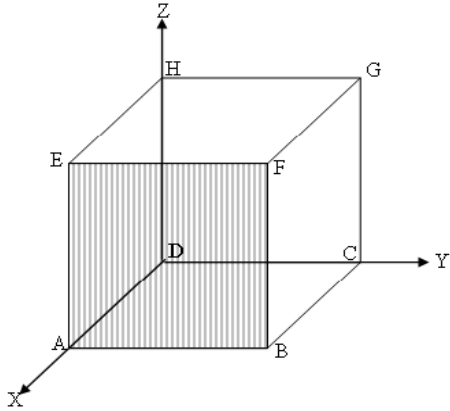
Untuk Sel kubus, jarak antar bidang hkl dapat ditulis sebagai berikut :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

Contoh-contoh Indeks Miller untuk sel kubus primitif maupun konvensional :

Kubus Sederhana : sel konvensional = sel primitif

Bidang ABFE



Perpotongan bidang ABFE dengan sumbu:

X di $1a\hat{x}$

Y di $\sim a\hat{y}$

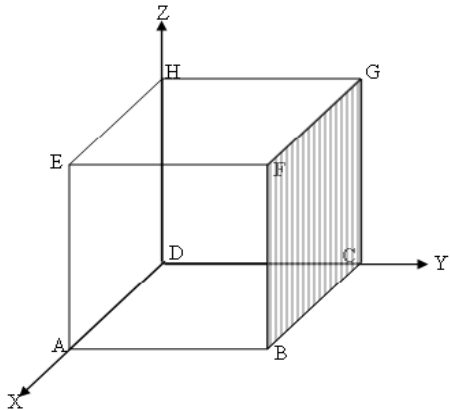
Z di $\sim a\hat{z}$

Kebalikannya : $\frac{1}{1}, \frac{1}{\sim}, \frac{1}{\sim}$

Jadi, indeks bidang ABFE adalah

(1 0 0)

Bidang BCGF



Perpotongan bidang BCGF dengan sumbu:

X di $\sim a\hat{x}$

Y di $1a\hat{y}$

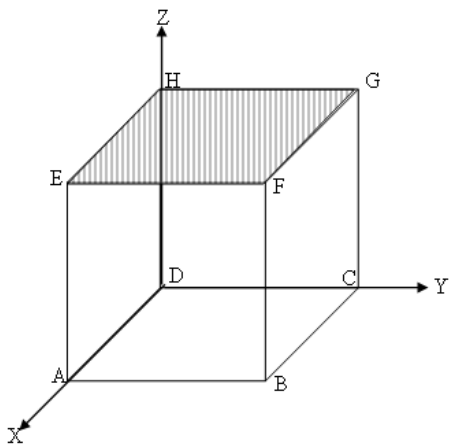
Z di $\sim a\hat{z}$

Kebalikannya : $\frac{1}{\sim}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\sim}$

Jadi, indeks bidang BCGF adalah

(0 1 0)

Bidang EFGH



Perpotongan bidang EFGH dengan sumbu:

X di $\sim a\hat{x}$

Y di $\sim a\hat{y}$

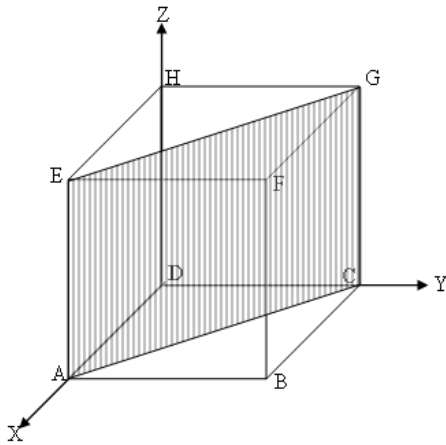
Z di $1a\hat{z}$

Kebalikannya : $\frac{1}{\sim}, \frac{1}{\sim}, \frac{1}{1}$

Jadi, indeks bidang EFGH adalah

(0 0 1)

Bidang ACGE



Perpotongan bidang ACGE dengan sumbu:

X di $1a\hat{x}$

Y di $1a\hat{y}$

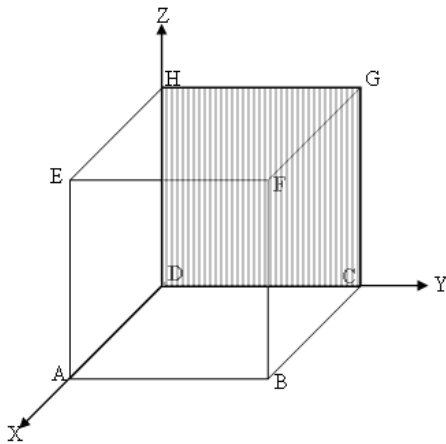
Z di $\sim a\hat{z}$

Kebalikannya : $\frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{\sim}$

Jadi, indeks bidang ACGE adalah

$(1 \ 1 \ 0)$

Bidang DCGH



Bidang DCGH sejajar dengan bidang ABFE,

dan menempel di sumbu Y dan Z, artinya

bidang tersebut tidak hanya satu tetapi lebih

dari satu, maka indeks bidang DCGH adalah :

$\{1 \ 0 \ 0\}$

Tanda $\{1 \ 0 \ 0\}$ menyatakan kumpulan bidang-

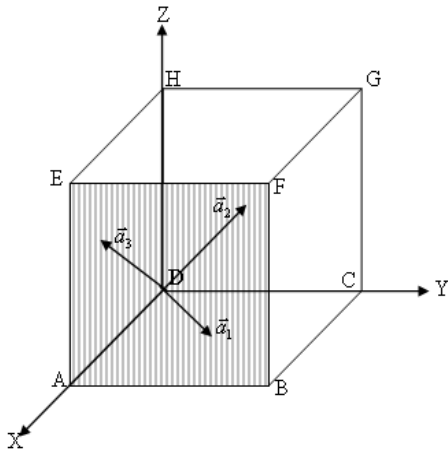
bidang yang sejajar dengan bidang $(1 \ 0 \ 0)$.

Sama halnya dengan Bidang ADHE yang sejajar dengan bidang BCGF, maka indeks bidang ADHE adalah $\{1 \ 0 \ 0\}$ begitu juga dengan bidang ABCD sejajar dengan bidang EFGH, maka bidang ABCD adalah $\{0 \ 0 \ 1\}$, dan seterusnya.

Jadi, apabila bidangnya menempel di sumbu, indeksnya akan sama dengan indeks bidang yang sejajar dengannya.

Kubus Pusat Muka (FCC) : sel konvensional \neq sel primitif

Bidang ABEF



Perpotongan bidang ABEF dengan sumbu primitif :

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 2\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } \sim \hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 2\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{2}, \frac{1}{\sim}, \frac{1}{2}$$

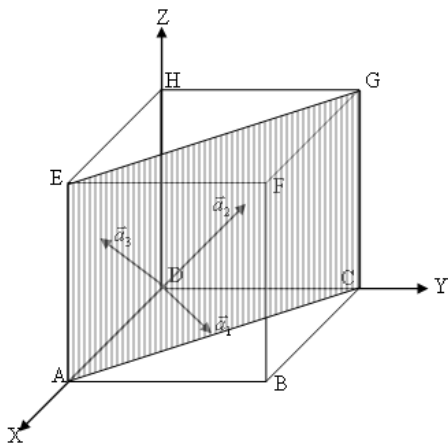
Maka, indeks bidang ABEF pada sel primitif adalah $(1\ 0\ 1)_P$

Sedangkan pada sumbu konvensional bidang ABEF berpotongan pada:

$$\left. \begin{array}{l} X \text{ di } 1a\hat{x} \\ Y \text{ di } \sim a\hat{y} \\ Z \text{ di } \sim a\hat{z} \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{1}, \frac{1}{\sim}, \frac{1}{\sim}$$

Jadi, indeks bidang ABEF pada sel konvensional adalah $(1\ 0\ 0)_K$

Bidang ACGF



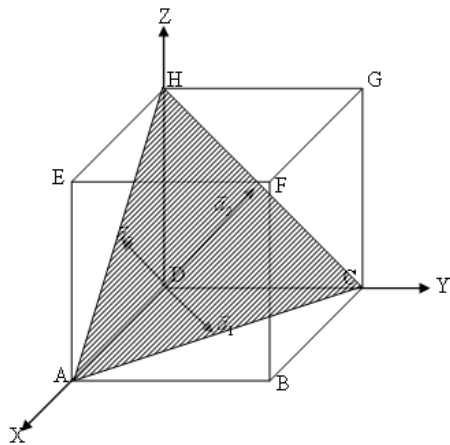
Dengan menggunakan sumbu konvensional pada kubus FCC, bidang ACGF mempunyai indeks $(1\ 1\ 0)_K$

Sedangkan pada sumbu primitif bidang ACGF berpotongan dengan

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 1\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } 2\hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 2\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{1}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$$

Maka, indeks bidang ACGF pada sel primitif adalah $(2\ 1\ 1)_P$

Bidang ACH



Dengan menggunakan sumbu konvensional pada kubus FCC, bidang ACH mempunyai indeks $(1\ 1\ 1)_K$

Sedangkan pada sumbu primitif bidang ACH berpotongan dengan

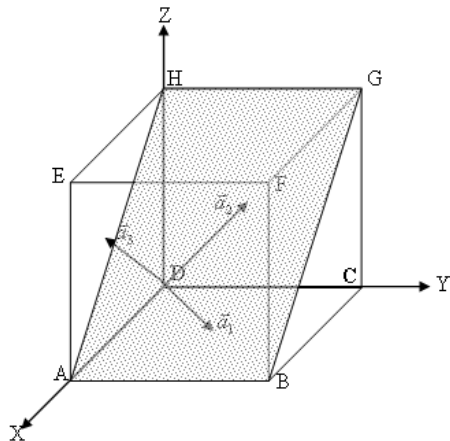
$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 1\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } 1\hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 1\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{1}$$

Maka, indeks bidang ACH pada sel primitif adalah $(1\ 1\ 1)_P$

Jadi, indeks bidangnya sama baik pada sel

konvensional maupun pada sel primitif.

Bidang ABGH



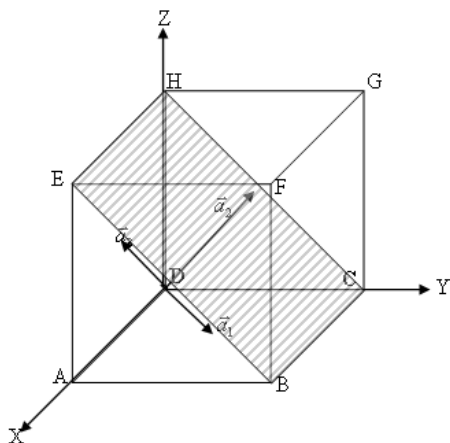
Dengan menggunakan sumbu konvensional pada kubus FCC, bidang ABGH mempunyai indeks $(1\ 0\ 1)_K$

Sedangkan pada sumbu primitif bidang ABGH berpotongan dengan

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 2\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } 2\hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 1\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}$$

Maka, indeks bidang ABGH pada sel primitif adalah $(1\ 1\ 2)_P$

Bidang BCEH

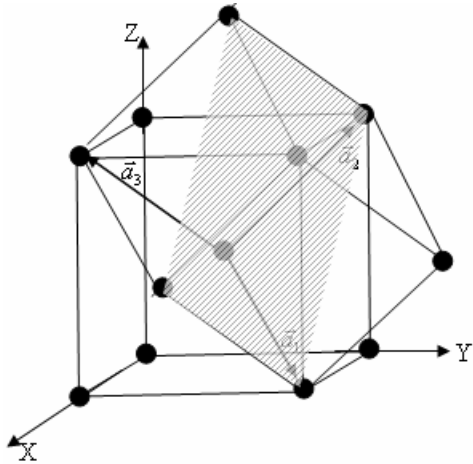


Dengan menggunakan sumbu konvensional pada kubus FCC, bidang ABGH mempunyai indeks $(1\ 0\ 1)_K$. Sedangkan pada sumbu primitif bidang ABGH berpotongan dengan

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 2\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } 2\hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 1\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{1}$$

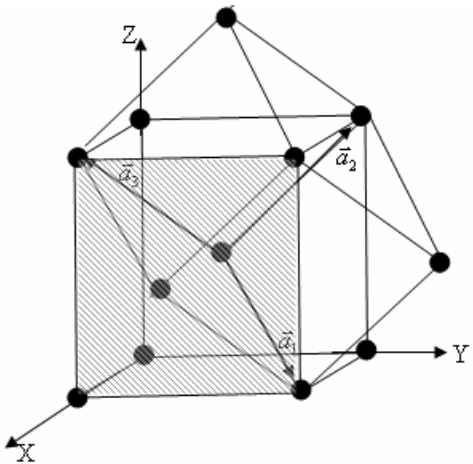
Maka, indeks bidang ABGH pada sel primitif adalah $(1 \ 1 \ 2)_P$. Begitu juga dengan bidang-bidang yang lainnya, pada kubus FCC.

Kubus Pusat Badan (BCC) : sel konvensional \neq sel primitif



Dengan menggunakan sumbu primitif pada kubus BCC, bidang yang mempunyai indeks $(1 \ 1 \ 0)_P$ seperti gambar di samping, berpotongan pada sumbu konvensional dengan

$$\left. \begin{array}{l} X \text{ di } 1\hat{x} \\ Y \text{ di } 1\hat{y} \\ Z \text{ di } -1\hat{z} \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{1}, \frac{1}{1}, \frac{1}{-1}$$
 Maka, indeks bidang ABGH pada sel konvensional adalah $(1 \ 1 \ \bar{1})_K$



Dengan menggunakan sumbu konvensional pada kubus BCC, bidang yang mempunyai indeks $(1 \ 0 \ 0)_K$ seperti gambar di samping, berpotongan pada sumbu primitif dengan

$$\left. \begin{array}{l} \bar{a}_1 \text{ di } 1\hat{a}_1 \\ \bar{a}_2 \text{ di } -1\hat{a}_2 \\ \bar{a}_3 \text{ di } 1\hat{a}_3 \end{array} \right\} \text{Kebalikannya : } \frac{1}{1}, \frac{1}{-1}, \frac{1}{1}$$
 Maka, indeks bidang ABGH pada sel konvensional adalah $(1 \ \bar{1} \ 1)_P$