

DIFRAKSI SINAR-X

- ✚ Difraksi sinar-X merupakan fenomena fisis yang sering digunakan untuk analisis bahan baik berupa serbuk, bulk maupun film tipis.
- ✚ Analisis bahan dengan menggunakan difraksi sinar-X pada umumnya untuk menentukan :
 - ✓ Struktur Kristal
 - ✓ Parameter kisi
 - ✓ Crystallite Size (ukuran butiran) dan Lattice Strain

I. Menentukan Struktur kristal dari struktur kubik

Fenomena difraksi sinar-X terjadi bila memenuhi aturan (hukum Bragg):

$$2d \sin \theta = \lambda$$

Dimana d adalah jarak antar bidang pendifraksi yang dapat ditentukan dengan persamaan :

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

Atau
$$\frac{1}{d^2} = \frac{4 \sin^2 \theta}{\lambda^2}$$

$$\sin^2 \theta = \left(\frac{\lambda^2}{4a^2} \right) (h^2 + k^2 + l^2)$$

Untuk menentukan Kisi Bravais dari struktur kubik dapat digunakan aturan seleksi dari nilai $h^2 + k^2 + l^2$ yaitu :

SC : 1,2,3,4,5,6,8,9,10,11,12,13,14,16,...

BCC : 2,4,6,8,10,12,14,16,...

FCC : 3,4,8,11,12,16,19,20,24,...

Rasio dari $\frac{\sin^2 \theta}{\sin^2 \theta_{\min}}$ dikali bilangan pertama dari aturan seleksi harus mendekati bilangan bulat

Contoh cara pertama

Material Aluminium

Puncak 2θ	$\sin^2 \theta$	$\sin^2 \theta / \sin^2 \theta_{\min}$	$(\sin^2 \theta / \sin^2 \theta_{\min}) \times 3$	$h^2 + k^2 + l^2$	hkl
1	38.52	0.1088	1.000	3.000	111
2	44.76	0.1450	1.333	3.999	200
3	65.14	0.2898	2.664	7.992	220

Contoh cara kedua

Dari hubungan

$$\sin^2 \theta = \left(\frac{\lambda^2}{4a^2} \right) (h^2 + k^2 + l^2)$$

$$(\sin^2 \theta) / A = (h^2 + k^2 + l^2) \quad \text{dimana } A = \left(\frac{\lambda^2}{4a^2} \right)$$

Bagi $\sin^2 \theta$ dengan bilangan $h^2 + k^2 + l^2$ untuk SC dan dari hasil pembagian tersebut tentukan bilangan terkecil yang paling sering muncul dan bilangan tersebut adalah nilai dari A. Kemudian tentukan nilai dari $(\sin^2 \theta) / A$

sehingga akan diperoleh harga $h^2+k^2+l^2$

Puncak	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/2$	$\sin^2\theta/3$	$\sin^2\theta/4$	$\sin^2\theta/5$	$\sin^2\theta/6$	$\sin^2\theta/8$	$\sin^2\theta/A$	$h^2+k^2+l^2$	hkl
1	38.52	0.1088	0.0544	0.0363	0.0272	0.0218	0.0181	0.0136	2.997	3	111
2	44.76	0.1450	0.0725	0.0483	0.0363	0.0290	0.0242	0.0181	3.995	4	200
3	65.14	0.2898	0.1449	0.0966	0.0725	0.0580	0.0483	0.0363	7.983	8	220

II. Menentukan struktur kristal dari struktur heksagonal

Untuk struktur heksagonal jarak antar bidang pendifraksi dapat ditentukan dengan persamaan

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2}$$

Dengan mengkombinasikan dengan persamaan Bragg maka dapat diperoleh:

$$\sin^2\theta = A(h^2+hk+k^2) + Cl^2$$

$$\text{Dimana } A = \lambda^2/3a^2 \quad \text{dan } C = \lambda^2/4a^2$$

Nilai (h^2+hk+k^2) yang mungkin 0,1,3,4,7,9,12,....

Nilai l^2 yang mungkin 0,1,4,9,...

Langkah pertama tentukan tentukan nilai A dengan menganggap $l^2=0$ kemudian tentukan rasio $\sin^2\theta$ dengan nilai (h^2+hk+k^2) yang mungkin. Tentukan nilai rasio yang sering muncul, nilai tersebut adalah harga dari A

Puncak	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta/3$	$\sin^2\theta/4$	$\sin^2\theta/7$	$\sin^2\theta/9$	hkl
1	36.31	0.0970	0.0323	0.0242	0.0139	0.0108	
2	38.98	0.1113	0.0371	0.0279	0.0159	0.0124	100
6	70.64	0.3342	0.1113	0.0846	0.0478	0.0371	110
9	83.72	0.4453	0.1486	0.1113	0.0637	0.0495	200

$$A=0.1113$$

Tentukan nilai dari $Cl^2 = \sin^2\theta - A(h^2+hk+k^2)$ dan tetapkan nilai yang sering muncul adalah nilai dari 4C sehingga diperoleh harga dari C

Puncak	2θ	$\sin^2\theta$	$\sin^2\theta - A$	$\sin^2\theta - 3A$	hkl
1	36.31	0.0970			002
4	54.32	0.2084	0.0971		102
7	77.04	0.3879	0.2766	0.0540	004
8	82.09	0.4312	0.3199	0.0973	112
4C=0.0970 C=0.0243		16C=0.3879			