

## DIFRAKSI SINAR-X

Menentukan Parameter kisi dengan metode analitik Cohen's

Pengukuran yang presisi dari konstanta kisi  $a$  dan jarak antar bidang pendifraksi  $d$  bergantung pada keakuratan nilai  $\sin \theta$   
contoh untuk kristal [sistem kubik](#)

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

merupakan nilai  $\sin \theta$  sebenarnya, sedangkan nilai  $\sin \theta$  pengamatan memenuhi persamaan :

$$\sin^2 \theta_{(\text{pengamatan})} - \sin^2 \theta_{(\text{sebenarnya})} = D \sin^2 2\theta$$

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

$$\sin^2 \theta_{(\text{pengamatan})} = A\alpha + C\delta$$

$$\sin^2\theta_{\text{(pengamatan)}} = A\alpha + C\delta$$

$$A = (\lambda^2/4a^2)$$

$$\alpha = (h^2 + k^2 + l^2)$$

$$C = D/10$$

$$\delta = 10\sin^2 2\theta$$

Dengan menggunakan metoda kuadrat terkecil maka :  
Konstanta minimum  $= \Sigma(A\alpha + C\delta - \sin^2\theta_{\text{(pengamatan)}})^2$

Diferensialkan persamaan di atas terhadap A dan C  
diperoleh persamaan normal:

$$\Sigma\alpha\sin^2\theta = A\Sigma\alpha^2 + C\Sigma\alpha\delta$$

$$\Sigma\delta\sin^2\theta = A\Sigma\alpha\delta + C\Sigma\delta^2$$

### Contoh untuk Alumunium

No	$\theta$	$\sin^2\theta$	$\alpha$	$\delta$	$\alpha^2$	$\alpha\delta$	$\delta^2$	$\alpha\sin^2\theta$	$\delta\sin^2\theta$
1	56,017	0,68758	19	8,6	361	163,4	73,96	13,06402	5,91319
2	56,232	0,69105	19	8,5	361	161,5	72,25	13,06497	5,84486
3	58,291	0,72374	20	8,0	400	160	64	14,47700	5,79080
4	58,523	0,72735	20	7,9	400	158	62,41	14,47500	5,71763
5	68,735	0,86846	24	4,6	576	110,4	21,16	20,84280	3,99487
6	69,107	0,87282	24	4,4	576	105,6	19,36	20,84760	3,82206
$\Sigma$					2674	858,9	313,14	96,77139	31,08341

Substitusikan nilai-nilai dari tabel tersebut pada persamaan normal, akan diperoleh:

$$2674A + 858,9C = 96,77139$$

$$858,9A + 313,14C = 31,08341$$

kedua persamaan tersebut akan memberikan nilai

$$A=0,0361895$$

$$C = 7,8 \times 10^{-7}$$

$$a = \lambda / 2\sqrt{A} = 0,40491 \text{ nm}$$

konstanta drift  $D = 10C = 7,8 \times 10^{-6}$  → menggambarkan nilai  $a$  yang presisi

## Menentukan Grain Size dan Lattice Strain

lebar FWHM akan dipengaruhi oleh efek ukuran kristal dan regangan kisi.

kombinasi dari kedua efek tersebut dirumuskan mengikuti profile gaussian

$$B_r^2 = B_0^2 - B_i^2$$

$B_0$  = FWHM awal sebelum efek instrumen

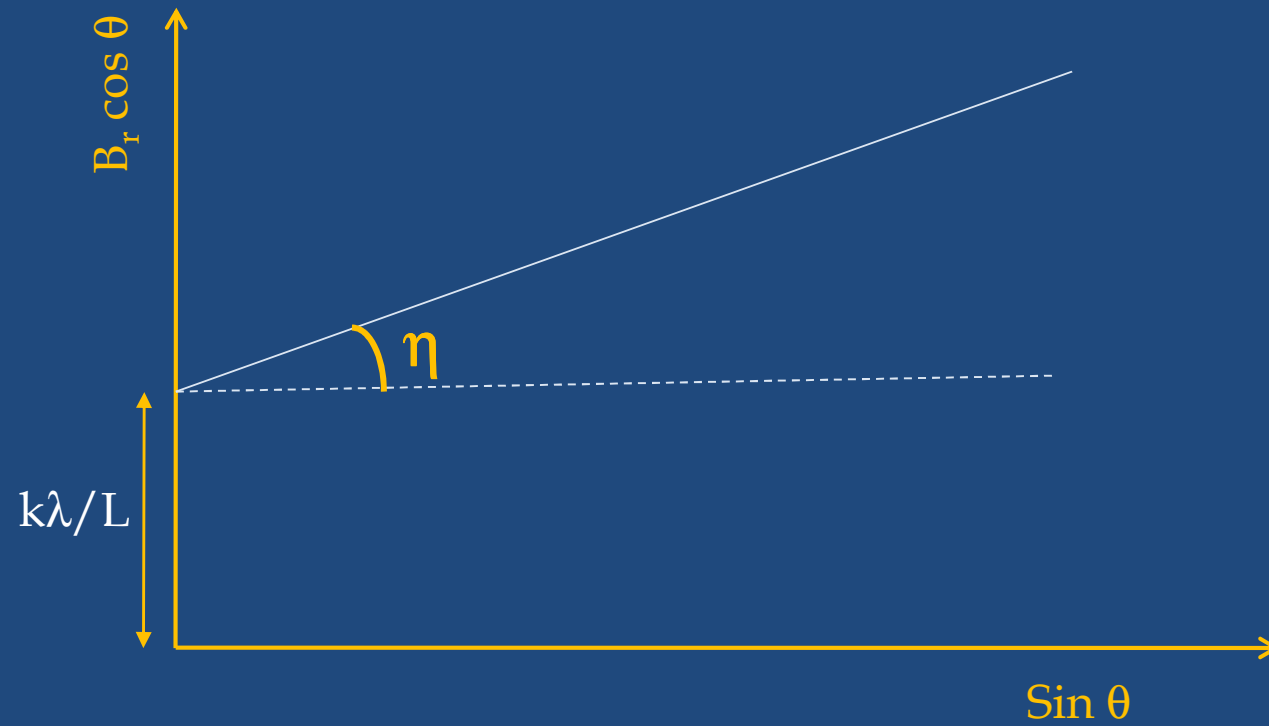
$B_i$  = FWHM efek instrumen

$$B_r = k\lambda/L \cos \theta + \eta \tan \theta$$

Efek ukuran kristal

Efek regangan kisi

$$B_r \cos \theta = k\lambda/L + \eta \sin \theta$$

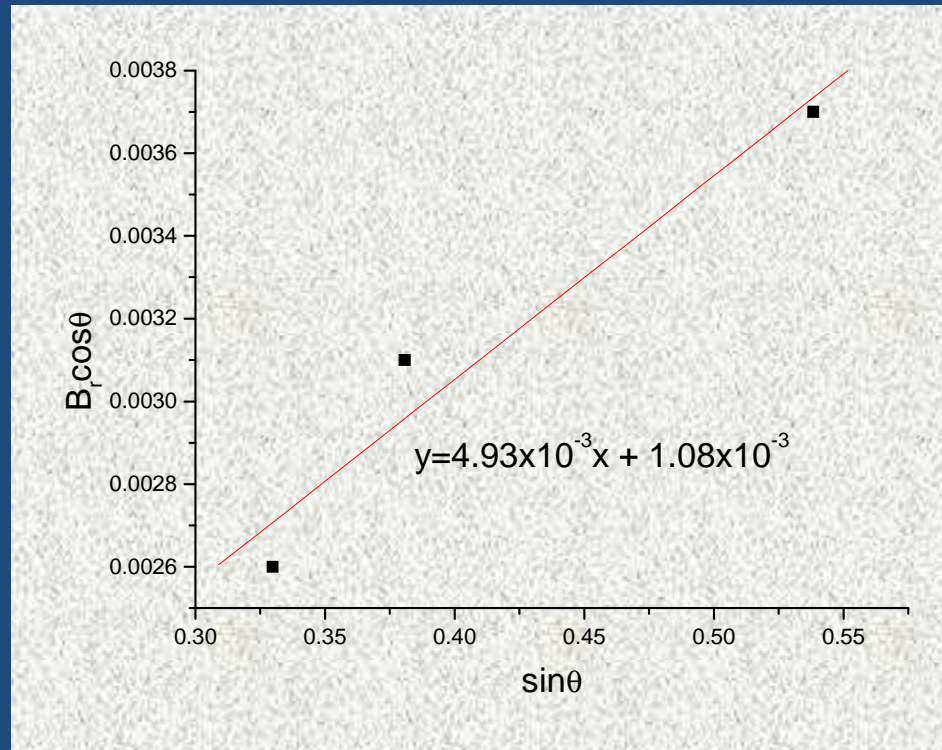


## Contoh untuk Bulk Aluminium

Material Aluminium (annealing)			$\lambda=0,154056 \text{ nm}$	
Puncak	$2\theta$	hkl	FWHM( $^{\circ}$ )	$B_i(\text{rad})$
1	38,52	111	0,103	$1,8 \times 10^{-3}$
2	44,76	200	0,066	$1,2 \times 10^{-3}$
3	65,13	220	0,089	$1,6 \times 10^{-3}$

Aluminium (tanpa annealing)				$\lambda=0,154056 \text{ nm}$			
Puncak	$2\theta$	hkl	$\sin\theta$	$B_o(^{\circ})$	$B_o(\text{rad})$	$B_r^2=B_o^2-B_i^2$	$B_r\cos\theta$
1	38,51	111	0,3298	0,187	$3,3 \times 10^{-3}$	$2,8 \times 10^{-3}$	$2,6 \times 10^{-3}$
2	44,77	200	0,3808	0,206	$3,6 \times 10^{-3}$	$3,4 \times 10^{-3}$	$3,1 \times 10^{-3}$
3	65,15	220	0,5384	0,271	$4,7 \times 10^{-3}$	$4,4 \times 10^{-3}$	$3,7 \times 10^{-3}$

Plot grafik  $B_r \cos\theta$  terhadap  $\sin\theta$



Regangan kisi  $\eta = 4,93 \times 10^{-3}$

Grain size =  $L = 0,154056 / 1,08 \times 10^{-3} = 142,6 \text{ nm}$