BAB – II
DIFRAKSI SINAR-X OLEH KRISTAL

Pendahuluan

Sejarah mengenai difraksi sinar-x telah berjalan hampir satu abad ketika tulisan ini disusun. Tahun 1912 adalah awal dari studi intensif mengenai difraksi sinar-x. Dimulai dari pertanyaan M. van Laue kepada salah seorang kandidat doktor P.P. Ewald yang dibimbing A.Sommerfeld, W. Friedrich (asisten riset Sommerfeld) menawarkan dilakukannya eksperimen mengenai 'difraksi sinar-x'. Pada saat itu eksperimen mengenai hamburan sinar-x sudah dilakukan oleh Barkla.

Laue mengawali pekerjaannya dengan menuliskan hasil pemikiran teoretiknya dengan mengacu pada hasil eksperimen Barkla. Laue berargumentasi, ketika sinar-x melewati sebuah kristal, atom-atom pada kristal bertindak sebagai sumber-sumber gelombang sekunder, layaknya garis-garis pada geritan optik (*optical grating*). Efek-efek difraksi bisa jadi menjadi lebih rumit karena atom-atom tersebut membentuk pola tiga dimensi. Eksperimen difraksi sinar-x yang pertama dilakukan oleh Herren Friedrich dan Knipping menggunakan kristal *tembaga sulfat* dan berhasil memberikan hasil pola difraksi pertama yang kemudian menjadi induk perkembangan difraksi sinar-x selanjutnya Difraksi sinar-x merupakan proses hamburan sinar-x oleh bahan kristal.

Pembahasan mengenai difraksi sinar-x mencakup pengetahuan yang berhubungan dengan hal-hal berikut ini:

1. pembentukan sinar-x
2. hamburan (*scattering*) gelombang elektromagnetik
3. sifat kekristalan bahan (kristalografi)

Dengan demikian, difraksi sinar-x adalah topik lanjut di bidang fisika (atau kimia) yang memerlukan pengetahuan dasar yang cukup banyak dan komplek.

Interaksi Sinar X dengan Material

Ada dua proses yang terjadi bila seberkas sinar-x ditembakkan ke sebuah atom yaitu:

(1) Energi berkas sinar-x terserap oleh atom, atau

(2) sinar-x dihamburkan oleh atom.

Dalam proses yang pertama, berkas sinar-x terserap atom melalui *Efek Fotolistrik* yang mengakibatkan tereksitasinya atom dan/atau terlemparnya elektron-elektron dari atom. Atom akan kembali ke keadaan dasarnya dengan (1) memancarkan elektron (melalui *Auger effect*), atau (2) memancarkan sinar-x floresen yang memiliki panjang gelombang karakteristik atom tereksitasinya. Pada proses yang kedua, ada bagian berkas yang mengalami hamburan *tanpa* kehilangan kehilangan energi (panjang gelombangnya tetap) dan ada bagian yang terhambur dengan kehilangan sebagian energi (*Hamburan Compton*).

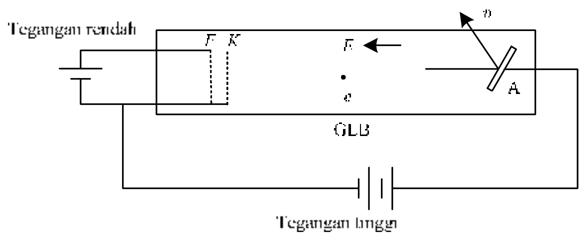
Jadi serapan total sinar-x terjadi karena efek fotolistrik dan hamburan Compton. Namun, hamburan Compton memiliki efek menyeluruh yang dapat diabaikan, kecuali untuk radiasi dengan panjang gelombang pendek yang mengenai material dengan berat atom rendah.

Dalam interaksinya dengan material, sinar-x juga dapat mengalami *polarisasi* linier (seperti halnya cahaya tampak), baik parsial maupun total. Dengan demikian berkas sinar-x terpolarisasi dapat diperoleh dengan cara hamburan dan untuk sudut hamburan 90°, polarisasi lengkap terjadi, yaitu komponen vektor medan listrik tegaklurus bidang yang dibentuk berkas datang dan berkas terhambur.

Berkas hamburan sinar-x oleh material yang dapat diukur adalah intensitas. *Intensitas* berkas sinar-x yang mendekati paralel adalah fluks energi yang melewati satu satuan luasan tertentu per satuan waktu. Untuk gelombang planar monokromatik, intensitas sebanding dengan kuadrat amplitudo getaran. Intensitas radiasi yang dihasilkan oleh sumber titik (atau sumber kuasi-titik) pada arah tertentu adalah energi yang dipancarkan per detik per satuan sudut ruang pada arah itu. Dalam pengukuran intensitas mutlak, cara termudah adalah dengan menentukan jumlah foton teremisi atau tertangkap (detektor) per satuan waktu, bisa per satuan luas atau per satuan sudut ruang.

Berikut ini uraian ringkas mengenai penentuan intensitas hamburan yang dihitung dari hamburan oleh *sebuah* elektron. Intensitas total dari sebuah *sampel* adalah perkalian jumlah elektron dalam sampel dengan intensitas hamburan per elektron.

Generator sinar-x :



Spektrum sinar-X :

- Kontinyu
- Diskrit

Hubungan antara frekuensi maksimum dengan beda potensial V dapat dituliskan sebagai berikut :

$$eV = h\upsilon_0 + Q$$

$$\upsilon_0 = \frac{eV}{h}$$

Dimana :

e : muatan elektron

V : beda potensial

eV : Energi kinetik

h : Konstanta Planck

Panjang gelombang (λ) sinar-X $\approx 1\acute{\text{Å}}$

Energinya $(E) = h\frac{c}{\lambda}$

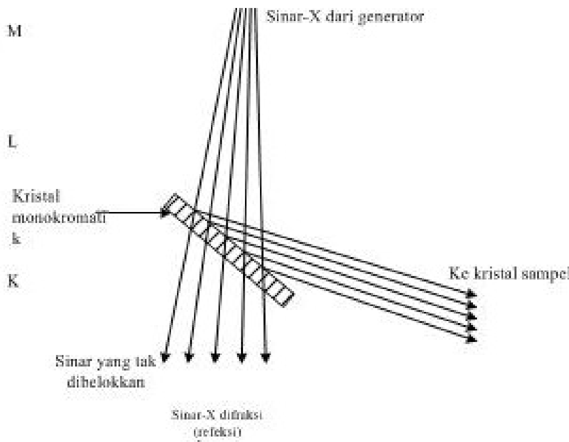
$(E) = \frac{6{,}6 \times 10^{-27}\, erg.\det}{10^{-8}\, cm} \times 3 \times 10^{10}\, cm/\det$

$(E) = 19{,}8 \times 10^{-9}\, erg$

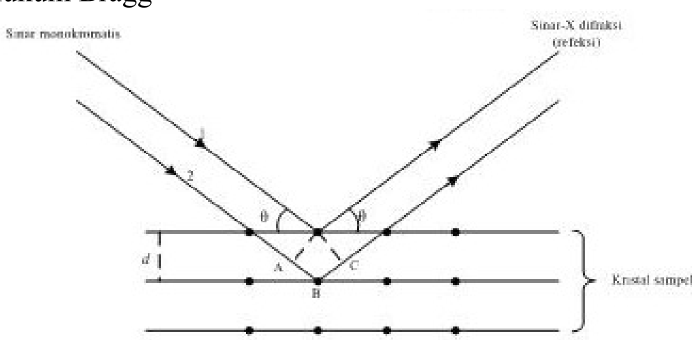
atau

$(E) \cong 10^4\, eV$

Cara memonokromatisasi sinar-X



Hukum Bragg



Selisih lintasan (Δ) :

$$\Delta = AB + BC$$

$$\Delta = d \sin\theta + d \sin\theta$$

$$\Delta = 2d \sin\theta$$

Hasil interferensi pada detektor adalah bergantung pada beda fase (δ) antara dua sinar difraksi yang berurutan.

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} \bullet \Delta$$

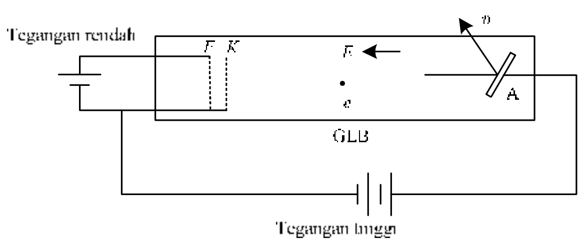
$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} 2d \sin\theta$$

Hasil dari interferensi akan maksimum jika $\delta = 2\pi\, n$

Sifat-sifat sinar X

a. Tidak dapat dilihat oleh mata, bergerak dalam lintasan lurus dan dapat mempengaruhi film fotografi sama seperti cahaya tampak
b. Daya tembusnya lebih tinggi daripada cahaya tampak dan dapat menembus tubuh manusia, kayu, dan beberapa lapis logam tebal
c. Dapat digunakan untuk membuat gambar bayangan sebuah objek pada film fotografi (radiograf)
d. Sinar X merupakan gelombang elektromagnetik dengan energi E = h f
e. Orde panjang gelombang sinar X adalah 0,5 Å – 2,5 Å
(sedangkan orde panjang gelombang ubtuk cahaya tampak = 6000 Å, jadi letak sinar X dalam diagram spektrum gelombang elektromagnetik adalah antara sinar ultraviolet dan sinar gamma)
f. Satuan panjang gelombang sinar X sering dinyatakan dalam dua jenis satuan yaitu angstrom (Å) dan satuan sinar X (X unit = XU)
1 kXU = 1000 XU = 1,00202 Å
g. Persamaan gelombang untuk medan listrik sinar X yaitu terpolarisasi bidang adalah $E = A \sin 2\Pi \left(\frac{x}{\lambda} - ft \right) = A \sin (kx\text{-}\omega t)$
Intensitas sinar X adalah dE/dt (rata-rata aliran energi per satuan waktu), nilai rata-rata intensitas sinar X ini berbanding lurus dengan A^2
Satuan intensitas adalah ergs/dt.cm^2

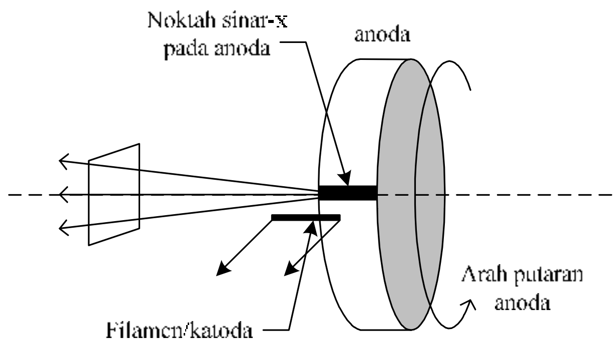
Sumber-sumber sinar X



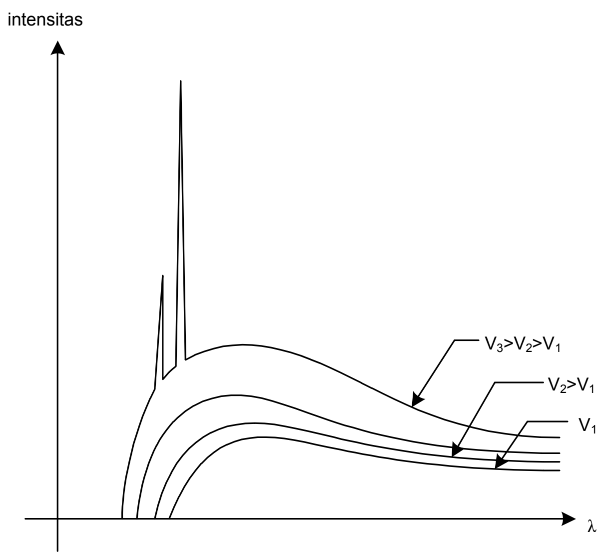
Komponen utama

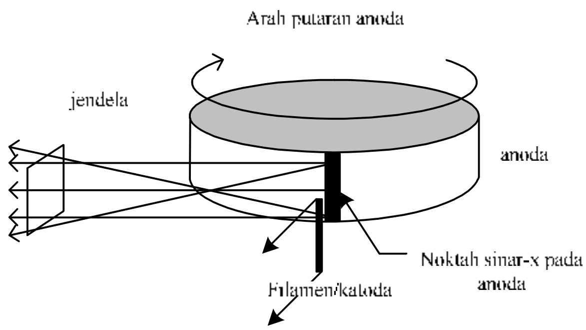
- Filamen : sumber e yang dihubungkan ke kutub (-) tegangan tinggi
- Penarik e
- Disatukan dengan filamen

Munculnya sinar X karena adanya perubahan energi kinetik yang dihentikan anoda menjadi cahaya (gelombang elektromagnetik)

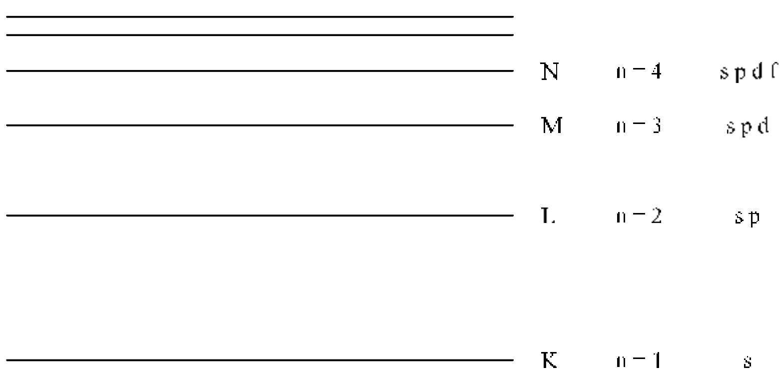


Grafik intensitas foton terhadap panjang gelombangnya :

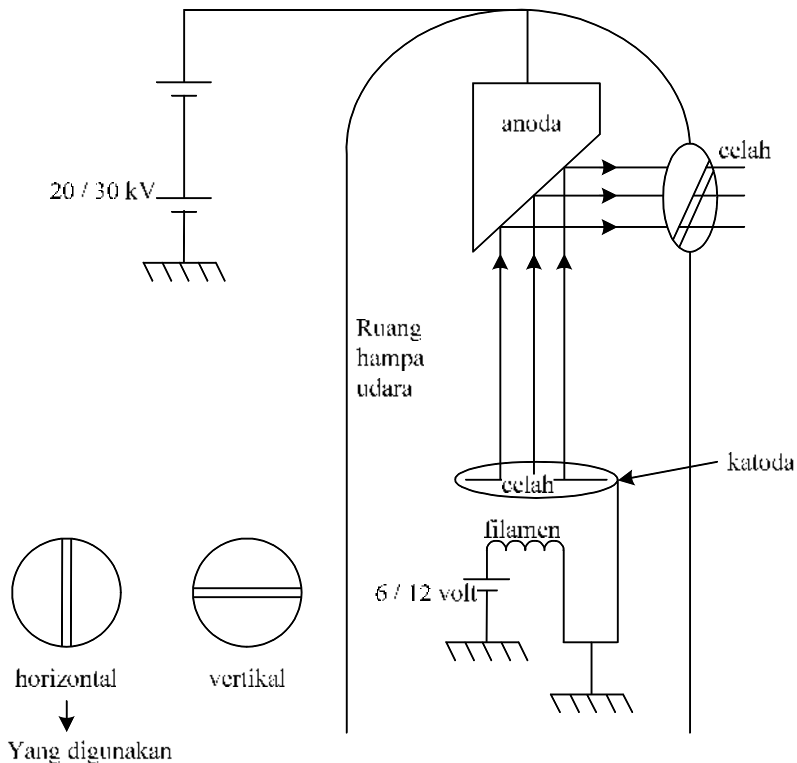




Tingkat energi menurut teori atom Bohr :



Alat dalam eksperimen sinar X (bagian utama)



Sinar yang keluar dari sumber sinar X bersifat polikromatik (terdiri dari bermacam-macam λ)

Proses terjadinya sinar X dalam anoda dijelaskan dengan menggunakan mekanika kuantum.

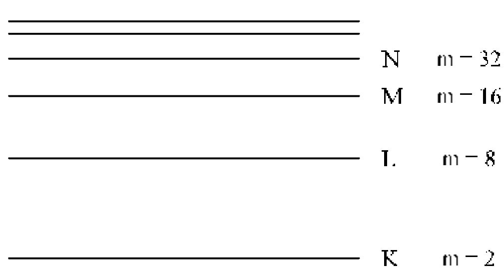
Kaitan n dengan l adalah l = 0, 1, 2, 3, ... (n-1)

Dengan n = bilangan kuantum utama

L = bilangan kuantum orbital

s = bilangan kuantum spin ($\pm\frac{1}{2}$)

m = bilangan kuantum magnetik (-L, 0, L)

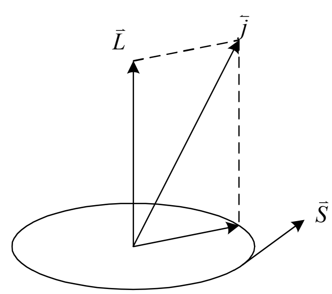


Menurut mekanika kuantum kulit k, L memiliki 3 garis / 3 tingkat energi karena elektron disamping bergerak sendisri elektron tersebut melekukan spin

$\vec{L}$ = momentum sudut orbital

$\vec{s}$ = momentum sudut intrinsic (akibat putaran electron relatif terhadap sumbu electron sendiri

$\vec{j}$ = momentum sudut total



$$\left|\vec{j}\right| = \left|\vec{L}+\vec{s}\right|, \left|\vec{L}+\vec{s}\right|-1, \left|\vec{L}+\vec{s}\right|-2, \ldots \left|\vec{L}-\vec{s}\right|$$

Contoh 1

Untuk kulit M

n = 3

L = 0, 1, 2

s = ½

untuk L = 2, maka $\left|\vec{j}\right| = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{5}{2} \longrightarrow$ m = $-\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{3}{2} \longrightarrow$ m = $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

Untuk L = 1, maka $\left|\vec{j}\right| = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{3}{2} \longrightarrow$ m = $-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2} \longrightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Untuk L = 0, maka $\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2} \longrightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Maka nilai m berjumlah 8 macam

Contoh 2

Untuk kulit L

n = 2

L = 0, 1

S = ½

Untuk L = 1, maka $\left|\vec{j}\right| = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$

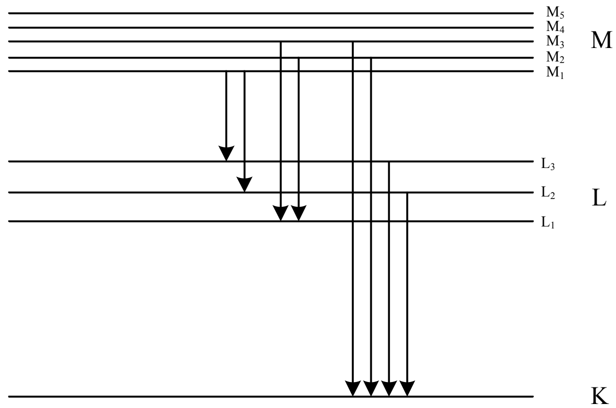
$\left|\vec{j}\right| = \frac{3}{2} \longrightarrow m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2} \longrightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Untuk L = 0, maka $\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2}$

$\left|\vec{j}\right| = \frac{1}{2} \longrightarrow m = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$

Maka nilai m berjumlah 8 macam



Sinar X terjadi akibat adanya perlambatan / pengereman elektron, perubahan energi menjadi gelombang elektromagnetik. Sinar X merupakan peristiwa eksitasi elektron dalam logam anoda oleh elektron yang mempunyai energi kinetik tinggi. Besar atau kecilnya λ atau energi hanya bergantung pada jenis bahan anoda (sinar x karakteristik).

Hasil interferensi pada detektor adalah bergantung pada beda fase (δ) antara 2 sinar difraksi yang berurutan

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda}.\Delta \;= 2d\,\sin\theta$$

hasil interferensi maksimum jika $\delta = 2\pi n$, n = bilangan bulat

$$2\pi n = \frac{2\pi}{\lambda}2d\sin\theta$$

$$2d\sin\theta = n\lambda \longrightarrow \text{Hk. Bragg}$$

Intensitas gelombang terdifraksi adalah bergantung pada distribusi elektron dalam setiap sel

Kerapatan jumlah elektron = $n(\vec{r}) \longrightarrow$ fungsi periodik

$$n(\vec{r}) = n(\vec{r} + \vec{T})$$

$$\vec{T} = \text{vektor translasi kristal}$$

$$= u_1\overrightarrow{a_1} + u_2\overrightarrow{a_2} + u_3\overrightarrow{a_3}$$

Soal

Kristal dengan jarak antar bidang (d) = 2Ǻ, Kα dari logam tembaga. Energi = 8 kev, berapa sudutnya?

Solusi

$$E = \frac{h.c}{\lambda} = \frac{6,6.10^{-34}.3.10^{8}}{\lambda}$$

$$8.10^{3}.1,602.10^{-19} = \frac{6,6.10^{-34}.3.10^{8}}{\lambda}$$

$$\lambda = 1,5449.10^{-10}\,m$$

λ = 1,54 Ǻ

2d sin θ = nλ

Sin θ = $\frac{1,54}{2,2}$

θ = 22,64 Ǻ

berapa λ minimal bremstahlung jika V = 20 kV dan V = 30 kV

solusi

$$\lambda \text{ minimal} = \frac{hc}{eV} = \frac{6,634.10^{-34}.3.10^{8}}{1,602.10^{-19}.20.10^{3}} = 6,21.10^{-11}\,m = 0,6\text{ Ǻ}$$

atau

$$\lambda \text{ minimal} = \frac{4,125.10^{-15}\,ev.dt.3.10^{8}\,ms^{-1}}{20000ev}$$

= 0,6 Ǻ

$$\lambda \text{ minimal} = \frac{4,125.10^{-15}\,ev.dt.3.10^{8}\,ms^{-1}}{30000ev}$$

= 0,4 Ǻ

Jumlah elektron menuju luar dari inti ternyata tidak sama, semakin dekat ke inti maka semakin banyak elektron.

Jumlah elektron pada x_1 dan x_1 + a adalah sama

n (x) = n (x+a), a = perioda

bukti = misalkan $ŋ_p = e^{i\alpha}$ = cos α + I sin α

$ŋ^*_p = e^{-i\alpha}$ = cos α - I sin α untuk fungsi periodik 3 dimensi n ($\vec{r}$), deret fourier dapat ditulis dengan cara yang sama, yaitu:

$$n(\vec{r}) = \sum n_G \exp(i G \vec{r})$$

tugas kita adalah menentukan vektor G sedemikian rupa sehingga persamaan diatas tidak berubah oleh vektor translasi kristal

Vektor Kisi Resiprok

$$\vec{G} = V_1 \vec{b_1} + V_2 \vec{b_2} + V_3 \vec{b_3}$$

V = bilangan bulat

Untuk menentukan $\vec{G}$ terlebih dahulu kita definisikan sumbu-sumbu vektor lattice resiprok $\vec{b_1}, \vec{b_2}, \vec{b_3}$

$$\vec{b_1} = 2\pi \frac{\vec{a_2} \times \vec{a_3}}{\vec{a1} \bullet \vec{a_2} \times \vec{a_3}}$$

$$\vec{b_2} = 2\pi \frac{\vec{a_3} \times \vec{a_1}}{\vec{a1} \bullet \vec{a_2} \times \vec{a_3}}$$

$$\vec{b_3} = 2\pi \frac{\vec{a_1} \times \vec{a_2}}{\vec{a1} \bullet \vec{a_2} \times \vec{a_3}}$$

Dari persamaan (3)

$$n(x+a) = n_0 + \sum_{P>0} \left[c_P \cos\left(\frac{2\pi px}{a} + 2\pi p \right) + c_p \sin\left(2\pi p \frac{x}{a} \right) \right]$$

$$= n_0 + \sum_{P>0} \left[c_P \cos 2\pi p \frac{x}{a} + c_P \sin 2\pi p \frac{x}{a} \right] = n(x)$$

n (x+a) = n (x)

persamaan (2) dapat ditulis dalam bentuk

$$n(x) = \sum \eta_P \exp\left(i2\pi p \frac{x}{a} \right) \text{.................} \quad \textbf{(4)}$$

Dimana $\exp\left[i2\pi p \frac{x}{a} \right] = \cos\left(2\pi p \frac{x}{a} \right) + i \sin\left(2\pi p \frac{x}{a} \right)$

P = semua bilangan bulat

η_P = koefisien fourier = bilangan kompleks untuk menjadikan n(α)= fungsi riil, syaratnya adalah:

Bukti

Misalkan $: \varphi = 2\pi p \frac{x}{a}$

Untuk p dan –p, persamaan (4) menjadi

$$\eta_P(\cos\varphi + r\sin\varphi) + \eta_P(\cos\varphi - r\sin\varphi) = (\eta_P + \eta_{-P})\cos\varphi + i(\eta_P - \eta_{-P})\sin\varphi$$

Jika $\eta^*{}_{-P} \;\; = \eta_P$

$$(\eta^*{}_P + \eta_{-P})\cos\varphi + i(\eta^*{}_P - \eta_{-p})\sin\varphi = riil$$

Dari persamaan (7) kita perolah

$\vec{b_1} \bullet \vec{a_j} = 2\pi\delta_{ij}$ dimana δ_{ij} = fungsi kroneker

= 1, jika i = j

= 0, jika i ≠ j

Contoh

$\vec{b_1} = 2\pi \dfrac{\vec{a_1}}{\left|\vec{a_1}\right|}$, misal $\left|\vec{a_1}\right| = \left|\vec{a_2}\right| = \left|\vec{a_3}\right| = 1$

$$\vec{b_1} \bullet \vec{a_1} = 2\pi \vec{a_1} \bullet \vec{a_1} = 2\pi \rightarrow i = j$$

Atau $\quad 2\pi \dfrac{\vec{a_1} \bullet \vec{a_2} \times \vec{a_3}}{\vec{a_1} \bullet \vec{a_2} \times \vec{a_3}} = 2\pi$

$$\overrightarrow{b_1} \bullet \overrightarrow{a_2} = 2\pi \overrightarrow{a_1} \bullet \overrightarrow{a_2} = 0 \rightarrow i \neq j$$

$$= 2\pi \frac{\overrightarrow{a_1} \bullet \overrightarrow{a_2} \times \overrightarrow{a_3}}{\overrightarrow{a_1} \bullet \overrightarrow{a_2} \times \overrightarrow{a_3}} = 0$$

Kita dapat menandai setiap titik dalam ruang resiprok oleh sebuah vektor lattice resiprok $\vec{G}$, yang didefinisikan:

$$\vec{G} = v_1 b_1 + v_2 b_2 + v_3 b_3 \text{ .... (8)}$$

Sebuah struktur kristal mempunyai dua jenis lattice yaitu

- Lattice kristal
- Lattice reciprok

Jadi $\vec{G}$ pada persamaan 6 didefinisikan oleh persamaan 8

Bukti bahwa persamaan 6 tidak berubah oleh $\vec{T}$

$$n(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_G n_G \exp i(\vec{G} \bullet \vec{r}) \exp i(\vec{G} \bullet \vec{T}) \text{ .... (9)}$$

$$\exp i(\vec{G} \bullet \vec{T}) = \exp\left[i\left(v_1 \overrightarrow{b_1} + v_2 \overrightarrow{b_2} + v_3 \overrightarrow{b_3}\right) \bullet \left(u_1 \overrightarrow{a_1} + u_2 \overrightarrow{a_2} + u_3 \overrightarrow{a_3}\right)\right]$$

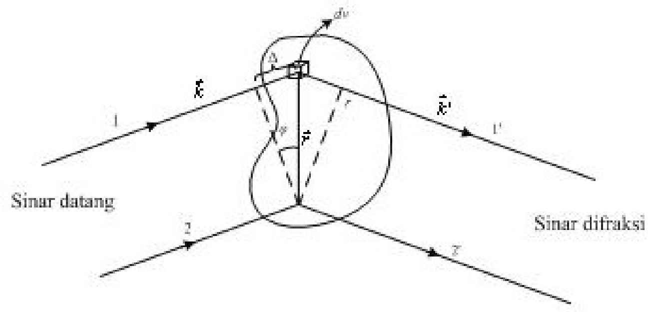
$$= \exp \text{ i} \left(2\pi\left(v_1 u_1 + v_2 u_2 + v_3 u_3\right)\right)$$

Jadi persamaan (9) menjadi $n(\vec{r} + \vec{T}) = n(\vec{r})$

Kondisi difraksi

Teorema : sebuah vektor-vektor lattice resiprok untuk menentukan kemungkinan arah pantulan sinar X

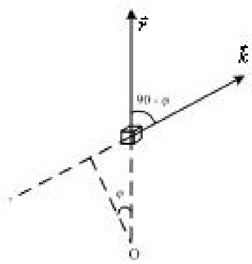
Perhatikan gambar berikut



Selisih lintasan Δ antara kedua sinar datang a adalah Δ = r sin φ

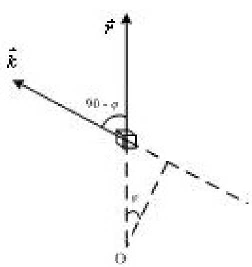
Beda sudut fase antara kedua sinar datang adalah

$$\delta = k\Delta = \frac{2\pi}{\lambda} r \sin\varphi$$



$$\vec{k} \bullet \vec{r} = kr\cos\left(90^\circ - \varphi\right)$$
$$\vec{k} \bullet \vec{r} = \frac{2\pi}{\lambda} r\cos\left(90^\circ - \varphi\right)$$
$$\cos\left(90^\circ - \varphi\right) = \sin\varphi$$
$$\vec{k} \bullet \vec{r} = \frac{2\pi}{\lambda} r\sin\varphi = \delta$$
$$\therefore \delta = \vec{k} \bullet \vec{r}$$

Dengan cara yang sama, beda sudu faseuntuk kedua sinar difraksi (sinar-sinar 1 dan 2) adalah



$$\delta' = \vec{k}' \cdot \Delta = +\vec{k}' \cdot r\sin\kappa = \frac{2\pi}{\lambda} r\sin\varphi$$
$$-\vec{k}' - \vec{r}' = -k \cdot r \cdot \cos\left(90^\circ - \varphi\right) = \frac{2\pi}{\lambda} r\sin\varphi$$
$$\therefore \delta = -\vec{k} \cdot \vec{r}$$

Beda sudut fase total antara kedua berkas sinar adalah

$$\beta = \delta + \delta^1 = \vec{k} \bullet \vec{r} + \left(- \overrightarrow{k^1} \bullet \vec{r} \right)$$

$$\beta = \left(\vec{k} - \vec{k}' \right) \vec{r}$$

Sehingga gelombang / sinar difraksi dari elemen volume dv mempunyai factor fase : exp iβ = exp $\left\{ i \left(\vec{k} - \overrightarrow{k^1} \right) \bullet \vec{r} \right\}$

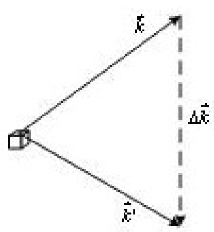
Relatif terhadap sinar difraksi dari titik 0

Amplitude gelombang yang terdifraksi dari element volume dv adalah berbanding lurus dengan konsentrasi e local n$\left(\vec{r}\right)$ dan elemen volume dv.

Amplitudo total (F) dari gelombang terdifraksi dalam arah $\overrightarrow{k^1}$ adalah

F = $\int dvn\left(\vec{r}\right) \exp\left[i \left(\vec{k} - \overrightarrow{k^1} \right) \bullet \vec{r} \right]$ ……………. (10)

Jika $\Delta\vec{k} = \overrightarrow{k^1} - \vec{k}$, maka :



Substitusi persamaan 6 ke persamaan 10

$$F = \int dv \left\{ \sum_G \eta_G \exp\left(i\vec{G} \bullet \vec{r} \right) \right\} \exp\left(- i\Delta\vec{k} \bullet \vec{r} \right)$$

$$= \sum_G \int dv \eta_G \exp\left\{ i\left(\vec{G} - \Delta\vec{k} \right) \bullet \vec{r} \right\} \text{………… (11)}$$

Jika vector hamburan (ΔK) sama dengan vector kisi resiprok,

$\vec{G} = \Delta\vec{K}$ …….. (12)

Maka F = $\sum_G \int dv \eta_G \exp(0) = \eta_G V$

Dimana V = volume kristal

Untuk hamburan / difraksi elastic, energi foton (ħω) dating sama dengan energi foton terdifraksi ($\hbar\omega^1$)

$$\left| \vec{k} \right|^2 = \left| \overrightarrow{k^1} \right|^2$$

Dengan demikian kondisi difraksi dapat ditulis

$\Delta\vec{K} = \vec{G} \Rightarrow \vec{G} = \vec{k^1} - \vec{k}$

Sehingga $\left(\vec{G} + \vec{k}\right)^2 = \vec{K}^2$

Catatan:

$\left|\vec{G}\right|^2 + K^2 + 2\vec{K} \bullet \vec{G} = \left|\vec{K^1}\right|^2$

$2\vec{K} \bullet \vec{G} = \left|\vec{G}\right|^2 \Rightarrow$ kondisi difraksi

Apabila didalam suatu kristal terdapat N buah cell dan kondisi difraksi $\left(\Delta\vec{K} = \vec{G}\right)$

Tercapai, maka amplitudo sinar difraksi dapat ditulis

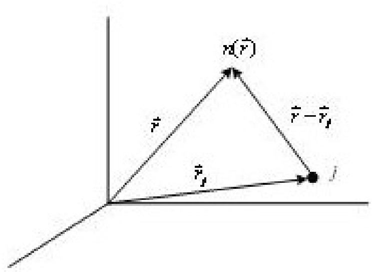
$$F = N \int_{cell} dvn\left(\vec{r}\right)\exp\left(-i\Delta\vec{k} \bullet \vec{r}\right)$$

$$F = N \int_{cell} dvn\left(\vec{r}\right)\exp\left(-i\vec{G} \bullet \vec{r}\right)$$

Jika $S_G = \int_{cell} dvn\left(\vec{r}\right)\exp\left(-i\vec{G} \bullet \vec{r}\right)$ maka

F = N S_G, dimana S_G = factor struktur

n(r) dapat dituliskan sebagai berikut:



Jika $\vec{j}$ = vektor posisi dari atom j, maka atom j akan menyumbang konsentrasi e ke konsentrasi e di titik r sebesar $\eta_j\left(\vec{r} - \vec{r_j}\right)$ yang merupakan suatu fungsi

Sehingga konsentrasi e total di titik $\vec{r}$, $n\left(\vec{r}\right)$ adalah jumlah sumbangan konsentrasi e dari semua atom (s) dalam cell tersebut

$$n(\vec{r}) = \sum_{j=1} n_j(\vec{r} - \vec{r_j}) = \sum n_G \exp i(\vec{G} \bullet \vec{r})$$

Dimana s = jumlah atom dalam sebuah basis

Factor struktur (S_G) dapat ditulis sebagai berikut:

$$S_G = \int_{cell} dvn(\vec{r})\exp(-i\vec{G} \bullet \vec{r}) = dv\left\{\sum_{j=i}^{s} \eta_j(\vec{r} - \vec{r_j})\right\}\exp(-i\vec{G} \bullet \vec{r})$$

Jika kita definisikan $\vec{\rho} = \vec{r} - \vec{r_j}$, maka

$$S_G = \sum_j \int \underbrace{dvn(\vec{p})\exp\{-i\vec{G} \bullet \vec{r}(\vec{r} - \vec{r_j})\}}\exp(-i\vec{G} \bullet \vec{r_j})$$

F_j = faktor struktur atom

$$S_G = \sum_j \exp(-i\vec{G} \bullet \vec{r_j}) \bullet f_j$$

Dimana $f_j = \int dvn(\vec{\rho})\exp(-i\vec{G} \bullet \vec{\rho})$ = faktor bentuk atom

Karena $\vec{r_j} = x_j\vec{a_1} + y_j\vec{a_2} + z_j\vec{a_3}$, maka

$$\vec{G} \bullet \vec{r_j} = (v_1\vec{b_1} + v_2\vec{b_2} + v_3\vec{b_3}) \bullet \ \ x_j\vec{a_1} + y_j\vec{a_2} + z_j\vec{a_3}$$

Karena $\vec{a_1} \bullet \vec{b_j} = 2\pi\delta_{ij}$, maka

$$\vec{G} \bullet \vec{r}_j = \left(v_1 x_j \cdot 2\pi + v_2 y_j \cdot 2\pi + v_3 z_j \cdot 2\pi\right)$$
$$\vec{G} \bullet \vec{r}_j = 2\pi\left(v_1 x_j + v_2 y_j + v_3 z_j\right)$$

Sehingga $S_G = \sum_j f_j \exp\left[-i2\pi\left(v_1 x_j + v_2 y_j + v_3 z_j\right)\right]$

Atau $S_G = \sum_j f_j \exp\left[-2\pi\left(hx_j + ky_j + lz_j\right)\right]$

Contoh :

Kristal bcc mempunyai atom-atom identik pada koordinat-koordinat $(x_1, y_1, z_1) = (0,0,0)$ dan $(x_2, y_2, z_2) = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$

Sehingga :

$$S_G = f\left\{e^{\circ} + e^{-i2\pi\left(\frac{v_1}{2}+\frac{v_2}{2}+\frac{v_3}{2}\right)}\right\}$$

$$S_G = f\left\{1 + e^{-1\pi(v_1+v_2+v_3)}\right\}$$

Jika $v_1 + v_2 + v_3 =$ bilangan ganjil, $S_G = 0 \rightarrow$ tidak terdifraksi

$v_1 + v_2 + v_3 =$ bilangan genap, $S_G = 2f \rightarrow$ terdifraksi

Aplikasi Metode difraksi sinar-x dalam bentuk pola difraksi karakteristik

- Penentuan struktur kristal, fase-fase atau senyawa yang ada dalam suatu bahan atau campuran seperti batuan, lempung, bahan keramik, paduan logam, produk korosi dll.

- Dalam bidang kimia, metode ini dapat digunakan untuk mengidentifikasi fasa-fasa atau senyawa dalam campuran. Analisis kualitatif dengan mengidentifikasi pola difraksi, analisis kuantitatif dengan menentukan intensitas puncaknya dimana intensitas lebih tinggi menunjukkan konsentrasi lebih tinggi.

- Bahan logam antara lain analisis struktur kristal produk korosi, tegangan sisa dan tekstur.

- Dalam bahan polimer, dapat memberikan informasi untuk menentukan derajat kristalinitas, orientasi dan menentukan aditif secara kualitatif dan kuantitatif.