

KRC
KR.
548.83
Soe.
a-1



LAPORAN PENELITIAN
DIP UNIVERSITAS AIRLANGGA
TAHUN ANGGARAN 1999/2000

**ANALISIS STRUKTUR KRISTAL HASIL KELUARAN
DIFRAKTOMETER SINAR-X DENGAN PROGRAM
BERBASIS SISTEM PAKAR**

Peneliti :

**Ir. SOEGIANTO SOELISTIONO, M.Si.
KHUSNUL AIN, ST.**

MILIK
PERPUSTAKAAN
UNIVERSITAS AIRLANGGA
SURABAYA

SELESAI

LEMBAGA PENELITIAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

Dibiayai oleh : DIP Universitas Airlangga 1999/2000
Nomor SK. Rektor 8402/J03/PP/1999
Nomor Urut : 77

3000 04500 3141

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS AIRLANGGA

Februari, 2000

RINGKASAN PENELITIAN

ANALISIS STRUKTUR KRISTAL HASIL KELUARAN DIFRAKTOMETER SINAR-X DENGAN PROGRAM BERBASIS SISTEM PAKAR

(Soegianto Soelistiono, Khusnul Ain; 1999, 47 Halaman)

Penelitian ini adalah merupakan kelanjutan dari penelitian analisis struktur kristal sebelumnya, yaitu yang dilakukan oleh Ir. Aminatun, Msi dan Dyah Hikmawati, SSi, MSi dari Universitas Airlangga Surabaya serta Dr.Hikam dari Universitas Indonesia Jakarta. karena pada penelitian sebelumnya hanya menitik beratkan pada perhitungan matematis analitis untuk itu dalam penelitian ini diupayakan untuk menambah variabel fisis.

Karena keterbatasan peralatan yang dimiliki maka dalam penelitian ini hasil yang dirasa cukup baik adalah untuk struktur kristal kubik , tetragonal dan hexagonal sedangkan untuk struktur kristal orthorhombik diperoleh hasil yang kurang memuaskan hal ini dikarenakan syarat fisis yang diberikan masih kurang banyak. sedangkan untuk menambah variabel fisis lagi diperlukan penampilan fisis komputer yang lebih bagus. Hasil yang diperoleh dicoba untuk dibandingkan dengan hasil dari tabel Hanawalt, dan untuk ketiga struktur kristal yang telah disebutkan sebelumnya diperoleh perbedaan nilai konstanta kisi sekitar 0.05 A, hal ini dirasa merupakan hasil yang cukup baik.

(L.P. Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Airlangga;
SK. Rektor No. 8402/J03/PP/1999, Tanggal 6 September 1999)

KATA PENGANTAR

Segala puji bagi sang Maha pencipta alam materi maupun interaksi, karena dengan ijinNya maka penulis dapat menyelesaikan pembuatan program analisis struktur kristal ini, dan tentunya dengan beberapa keterbatasan karena kesempurnaan hanyalah milik Allah.

Ucapan terimakasih penulis sampaikan kepada semua pihak yang telah banyak membantu dalam penyelesaian program ini, terutama kepada mahasiswa fisika komputasi jurusan fisika FMIPA Universitas Airlangga Surabaya dan beberapa teman fisika teori dan komputasi jurusan fisika Institut Teknologi Bandung, semoga Allah membalasnya dengan berlipat ganda.

Terbersit keinginan dari penulis, bahwa meskipun program ini masih perlu banyak penyempurnaan tetapi setidaknya dapat dimanfaatkan di Laboratorium Dasar Bersama Universitas Airlangga Surabaya.

Surabaya, Januari 2000

Tim Penulis

DAFTAR ISI

	halaman
RINGKASAN PENELITIAN	ii
KATA PENGANTAR	iii
DAFTAR ISI	iv
BAB I : PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang Penelitian	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
BAB II : TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Struktur Kristal	4
2.2 Difraksi Sinar X	6
2.2.1 Hamburan oleh sebuah atom	8
2.2.2 Hamburan oleh sebuah sel satuan	8
2.2.3 Intensitas difraksi sinar X	10
2.2.4 Faktor multiplisitas	10
2.2.5 faktor polarisasi-Lorentz	11
2.3 Deret Fourier dalam Bentuk Eksponensial	12
2.3.1 Penggambaran struktur kristal dengan deret Fourier	13
2.3.2 Fungsi Peterson	14
2.3.3 Posisi dan nilai puncak fungsi Peterson	15

BAB III : METODE PENELITIAN	16
3.1 Tempat Penelitian	16
3.2 Peralatan Penelitian	16
3.3 Prosedur Penelitian	16
3.3.1 Pengambilan data	16
3.3.2 Bahasa pemrograman Delphi 5.0	17
3.3.3 Periodic table of element SE V 3.54	18
3.3.4 Metode sistem pakar (expert system)	18
3.3.5 Pembuatan program	18
3.3.5.1 Perhitungan konstanta kisi dan hkl	21
3.3.5.2 Perhitungan analitis matematis menentukan posisi atom	23
3.3.5.3 Analitis sifat fisis atom dalam sel satuan	24
BAB IV : HASIL DAN PEMBAHASAN	26
4.1 Keterbatasan Program	26
4.2 Hasil dan Analisisnya	26
BAB V : KESIMPULAN	44
5.1 Kesimpulan	44
Saran	45
DAFTAR PUSTAKA	
LAMPIRAN	

BAB I

PENDAHULUAN



1.1 Latar Belakang Penelitian

Laboratorium Dasar Bersama (LDB) milik Universitas Airlangga Surabaya telah dilengkapi dengan Diffraktometer sinar X JDX-3530. Fungsi utama dari alat tersebut adalah untuk mengetahui struktur kristal dari suatu bahan, tetapi dalam proses analisis struktur kristal dengan menggunakan alat tersebut masih bersifat manual (tidak dilengkapi dengan otomatisasi dengan menggunakan komputer) sehingga sebagai akibatnya data yang diperoleh kurang dapat memberikan informasi yang diperlukan. Berbagai upaya telah dilakukan untuk mengoptimalkan data difraktometer tersebut ditingkat nasional, sedangkan di Universitas Airlangga telah dilakukan dua kali penelitian dengan sumber dana OPF untuk melakukan otomatisasi analisis dari data hasil difraktometer. Penelitian yang dilakukan ini adalah dalam upaya untuk melakukan penyempurnaan penelitian sebelumnya baik yang dilakukan oleh Universitas Airlangga maupun oleh Universitas Indonesia, karena dalam penelitian sebelumnya analisis hanya didasarkan pada perhitungan matematis saja, sehingga dalam penelitian ini diupayakan memasukkan kaidah-kaidah Fisika dalam analisis tersebut, disamping itu program dibuat untuk bekerja dalam operating system windows 95 atau yang terbaru, sehingga dapat mempermudah proses pemasukan data dan akan dihasilkan tampilan grafis yang bagus.

Keinginan yang ingin dicapai dalam penelitian untuk melakukan optimalisasi dari alat difraktometer ini adalah sampai pada pembuatan perangkat kerasnya (hardware) bukan hanya pada perangkat lunaknya (software) sehingga alat difraktometer yang ada di LDB tersebut menjadi sangat optimal penggunaannya, tapi tentunya tujuan yang ingin dicapai tersebut perlu tahapan dalam pembuatannya agar benar-banar optimal. Dalam penelitian ini hanya bagian analisis software saja yang dilakukan.

1.2 Rumusan Masalah

rumusan masalah yang dihadapi dalam penelitian dapat diuraikan sebagai berikut :

- a) Konsep-konsep fisika apa sajakah yang diperlukan dalam analisis struktur kristal.
- b) Syarat batas-syarat batas fisis apa sajakah yang diperlukan dalam analisis struktur kristal.
- c) Bahasa pemrogram apa saja yang optimal untuk digunakan dalam analisis struktur kristal.
- d) Bagaimana mengembangkan program untuk menyempurnakan program sebelumnya.

1.3 Batasan Masalah

Penelitian ini adalah salah satu cabang dari pohon penelitian untuk melakukan otomatisasi alat difraktometer sinar X JDX-3530 yang dimiliki oleh Laboratorium Dasar Bersama (LDB) universitas Airlangga, sehingga penggunaan alat tersebut makin optimal. Tetapi tentunya karena beberapa keterbatasan maka yang dilakukan dalam penelitian ini hanya pada cabang pembuatan software analisis struktur kristal.

1.4 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk menghasilkan sebuah perangkat lunak yang dapat dimanfaatkan untuk melakukan analisis struktur kristal dari suatu alat difraktometer sinar X.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat penelitian ini adalah dapat mengoptimalkan penggunaan difraktometer sinar X yang dimiliki LDB dan juga sebagai pijakan dasar dari penelitian selanjutnya yaitu untuk melakukan penelitian dalam pembuatan perangkat keras dari otomatisasi difraktometer sinar X tersebut.

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

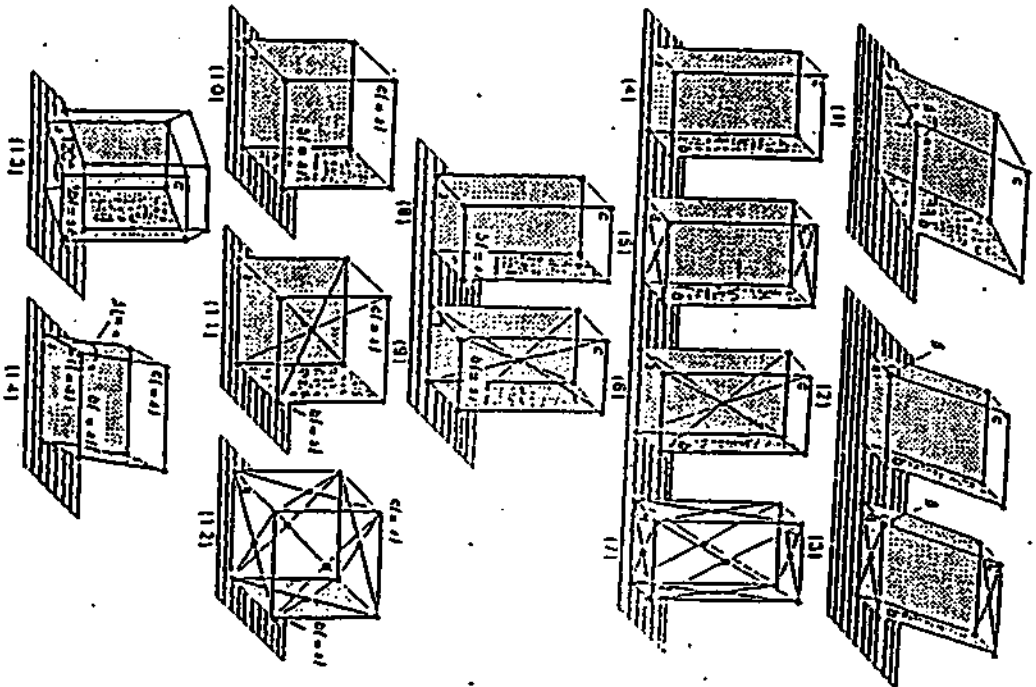
2.1 Struktur Kristal

Atom-atom bahan menyusun diri dalam pola periodik yang akan membentuk suatu sel satuan tertentu. Setiap sel satuan dari bahan bersifat unik dan menjadi ciri untuk bahan tersebut. Sel satuan ini ada keunikan bentuk yang berupa struktur kristal bahan tergabung dalam 7 sistem kristal (lihat Tabel 2.1) dan terdiri dari 14 struktur kristal Bravais, lihat Gambar 2.1

Tabel 2.1 7 Sistem kristal, kristal Bravais, konstanta kisi dan konstanta sudut

Sistem Kristal	Kristal Bravais	Konstanta Kisi	Konstanta Sudut
Kubik	P, I, F	$A=B=C$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Heksagonal	P	$A=B \neq C$	$\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$
Tetragonal	P, I	$A=B \neq C$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Rhombohedral	P	$A=B=C$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$
Orthorombik	P, C, I, F	$A \neq B \neq C$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Monoklinik	P, C	$A \neq B \neq C$	$\alpha = \gamma \neq 90^\circ \neq \beta$
Triklinik	P	$A \neq B \neq C$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$

(Cullity, 1959)



Gambar 2.1 14 Sel Satuan Kisi Bravais

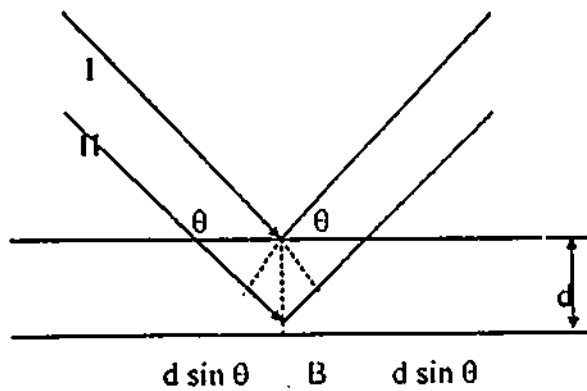
1. Triklinik, P
2. Monoklinik P
3. Monoklinik C
4. Orthorombik P
5. Orthorombik C
6. Orthorombik I
7. Orthorombik F
8. Tetragonal P
9. Tetragonal I
10. Kubik P
11. Kubik I
12. Kubik F
13. Heksagonal P
14. Rhombohedral P

(Buerger 1970)

Dalam sebuah kristal, bidang-bidang atom yang sejajar biasanya diberi indeks dengan tiga buah parameter yang dikenal dengan indeks Miller. Indeks Miller ini adalah kebalikan fraksional titik potong antara sumbu-sumbu kristal dengan bidang tersebut yang ditulis sebagai hkl.

2.2 Difraksi Sinar-X

Berkas sinar-X monokromatik yang jatuh pada sebuah kristal akan didifraksikan ke segala arah, tetapi keteraturan letak atom-atom pada arah tertentu gelombang hambur itu akan berinterferensi konstruktif sedangkan yang lain berinterferensi destruktif. Adapun syarat yang diperlukan supaya radiasi yang didifraksikan oleh atom kristal membentuk interferensi konstruktif dapat diperoleh dengan gambar berikut :



Gambar 2.2 Difraksi Sinar-X

Suatu berkas sinar-x yang panjang gelombangnya λ jatuh pada kristal dengan sudut θ terhadap permukaan himpunan bidang Bragg yang jarak antar bidangnya d . Berkas sinar-X yang didifraksikan oleh atom A dan B yang memenuhi persyaratan ialah sudut difraksi bersama-sama dengan sudut jatuh θ dari berkas semula terletak sebidang. Dan persyaratan lain yaitu :

$$2 d \sin \theta = n \lambda \quad (2.1)$$

dengan $n = 1, 2, 3, \dots$

yang dikenal dengan persamaan Bragg, dengan :

d = Jarak antar bidang

θ = Sudut difraksi

n = Orde difraksi

λ = Panjang gelombang sinar-X

(Cullity, 1959)

Pada difraksi sinar-X posisi atom-atom dari sebuah sel satuan mempengaruhi intensitas difraksi, tetapi tidak mempengaruhi arah difraksi. Perubahan kecil dalam posisi atom dapat menghilangkan sinar difraksi. Namun demikian pada umumnya intensitas sinar difraksi tidak berubah sampai nol dan dengan mengamati perbedaan perubahan intensitas sinar difraksi ini kita dapat menentukan posisi dari atom.

2.2.1 Hamburan oleh sebuah atom

Jika sinar-X dijatuhkan pada sebuah atom, maka setiap elektron pada atom menghamburkan sinar-X koheren. Sedang hamburan oleh inti atom dapat diabaikan karena massanya jauh lebih besar dibandingkan dengan massa elektron.

Sebuah kuantitas yang disebut *faktor hamburan* atom f , digunakan untuk menggambarkan efisiensi hamburan sebuah atom pada suatu arah. Faktor hamburan atom didefinisikan sebagai :

$$f = \frac{\text{amplitudo gelombang yang dihamburkan sebuah atom}}{\text{amplitudo gelombang yang dihamburkan sebuah elektron}}$$

2.2.2 Hamburan oleh sebuah sel satuan

Untuk sampai pada perumusan intensitas sinar difraksi yang lengkap, maka kita harus melihat hamburan koheren yang berasal dari seluruh atom yang membentuk kristal.

Jika persamaan Bragg terpenuhi kita dapat menentukan intensitas sinar difraksi oleh sebuah kristal sebagai fungsi posisi atom. Karena kristal adalah susunan teratur sel-sel satuan, maka kita cukup melihat efek susunan atom sebuah sel satuan terhadap intensitas sinar difraksi.

Gelombang hambur oleh atom-atom dalam satu sel satuan disebut sebagai *faktor struktur* F . Jika sebuah sel satuan terdiri dari n atom, dengan koordinat

raksional $u_1v_1w_1, u_2v_2w_2, u_3v_3w_3, \dots$ dan faktor hamburan atom f_1, f_2, f_3, \dots maka faktor struktur untuk refleksi hkl diberikan sebagai :

$$F = f_1 e^{2\pi i (hu_1 + kv_1 + lw_1)} + f_2 e^{2\pi i (hu_2 + kv_2 + lw_2)} + f_3 e^{2\pi i (hu_3 + kv_3 + lw_3)} + \dots \quad (2.2)$$

(Cullity, 1959)

Persamaan (2.2) dapat ditulis sebagai :

$$F_{hkl} = \sum_1^N f_n e^{2\pi i (hu_n + kv_n + lw_n)} \quad (2.3)$$

F adalah bilangan kompleks yang terdiri atas amplitudo dan fase yaitu :

$$F = |F| e^{i\theta} \quad (2.4)$$

dan $|F|^2 = FF^*$

Seperti faktor hamburan atom f , $|F|^2$ didefinisikan sebagai perbandingan amplitudo :

$$|F|^2 = \frac{\text{ampl.gel. yang dihamburkan oleh semua el.dlm.satu sel satuan}}{\text{amplitudo gelombang yang dihamburkan oleh sebuah elektron}}$$

2.2.3 Intensitas difraksi sinar-X

Dari tinjauan di atas diperoleh bahwa kuadrat faktor hamburan amplitudo gelombang sebanding dengan intensitas difraksi sinar-x, yang dapat dituliskan sebagai

$$I(hkl) \approx |F(hkl)|^2$$

Faktor perbandingan intensitas terhadap amplitudo kuadrat tergantung pada metode difraksi kita pakai. Dengan menggunakan difraktometer maka intensitas yang terukur mempunyai bentuk sebagai berikut :

$$I(hkl) = |F(hkl)|^2 m_p L_p(\theta) \quad (2.5)$$

(Cullity, 1959)

dengan :

$F(hkl)$ = faktor struktur

m_p = faktor multiplisitas

$L_p(\theta)$ = faktor Polarisasi-Lorentz

2.2.4 Faktor multiplisitas

Faktor multiplisitas (m_p) adalah banyaknya bidang-bidang yang berbeda tetapi mempunyai jarak d yang sama.

Nilai multisiplitas suatu harga (hkl) tergantung dari struktur kristal. Nilai mp sebagai fungsi hkl dan struktur kristal telah ditabelkan dalam internasional Table for X-Ray Crystallography dapat dilihat pada Lampiran VI.

2.2.5 Faktor polarisasi-lorentz

Faktor lorentz adalah faktor geometri yang mempengaruhi intensitas sinar difraksi. Untuk metode difraktometer faktor Lorentz dituliskan sebagai :

$$I(\theta) = \frac{1}{4 \sin^2 \theta \cos \theta} \quad (2.6)$$

(Cullity, 1959)

Bersama faktor polarisasi $\frac{1}{2} (1 + \cos^2 2\theta)$ maka faktor ini disebut Faktor Polarisasi Lorentz :

$$I_p(\theta) = \frac{1 + \cos^2 2\theta}{\sin^2 \theta \cos \theta} \quad (2.7)$$

dengan mengabaikan faktor konstanta $1/8$

(Cullity, 1959)



2.3 Deret Fourier Dalam Bentuk Eksponensial

Dengan menggunakan peralatan XRD yang kita lihat sebenarnya adalah distribusi kerapatan elektron atom-atom dalam kristal. Untuk mengetahui kerapatan elektron atom-atom kristal kita perlu memanfaatkan deret Fourier karena dengan deret Fourier kita dapat mengubah amplitudo gelombang sinar difraksi yang didapatkan dari data intensitas sinar difraksi dengan memperhitungkan faktor geometri dan faktor multisiplitas. Tempat yang mempunyai kerapatan elektron tinggi adalah diduga ada atomnya.

Menurut teorema Fourier, fungsi yang kontinyu, berharga tunggal dan periodik dapat digambarkan oleh suatu deret mengandung sinus dan cosinus. Sebuah fungsi yang mempunyai periode a dan berada pada sumbu x dapat ditulis sebagai :

$$\psi(x) = \frac{1}{a} \sum_{h=-\infty}^{\infty} [C(h)[e^{(i2\pi h x/a)} + e^{(-i2\pi h x/a)}] - S(h)[e^{(i2\pi h x/a)} - e^{(-i2\pi h x/a)}]] \quad (2.8)$$

atau

$$\psi(x) = \frac{1}{2a} \sum_{h=-\infty}^{\infty} [G(h)e^{(i2\pi h x/a)} + G(-h)e^{(-i2\pi h x/a)}] \quad (2.9)$$

$$\text{dengan } G(h) = C(h) + iS(h) \quad (2.10)$$

$$G(-h) = C(h) - iS(h) \quad (2.11)$$

(Cullity, 1959)

Indeks h suku ke h menunjukkan frekuensi atau bilangan gelombang yang menunjukkan berapa kali panjang gelombangnya berulang pada suatu periode. Karena

h mempunyai jelajah dari $-\infty$ sampai ∞ , maka kedua suku didalam jumlahan pada Persamaan 2.9 mempunyai harga yang sama pada daerah dengan variabel h , sehingga dapat ditulis sebagai :

$$\psi(x) = \frac{1}{a} \sum_{h=-\infty}^{\infty} [G(h) e^{i2\pi hx/a}] \quad (2.12)$$

dengan

$$G(h) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{i2\pi hx/a} dx \quad (2.13)$$

$\psi(x)$ dan $G(h)$ merupakan transformasi Fourier satu dengan lainnya. Persamaan (2.12) disebut sintesis Fourier, sedangkan Persamaan (2.13) disebut analisis Fourier bagi fungsi $\psi(x)$.

2.3.1 Penggambaran struktur kristal dengan deret Fourier

Pada peristiwa difraksi, sinar-X didifraksikan oleh elektron-elektron sebuah atom. Atom dengan nomor atom (Z) yang besar memiliki konsentrasi elektron yang lebih besar dari pada atom yang memiliki z kecil. Konsentrasi elektron dan distribusinya di sekitar atom disebut sebagai kerapatan elektron (ρ) yang biasanya mempunyai satuan elektron per \AA^3 . Pada umumnya kerapatan elektron adalah fungsi posisi sehingga biasanya ditulis sebagai $\rho(x,y,z)$.

Umumnya fungsi kerapatan elektron digambarkan dalam tiga dimensi. Dalam hal ini kita juga memakai koordinat fraksional ($x=x/a$) untuk mempermudah penulisannya. Fungsi tersebut kita tulis sebagai :

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{V_c} \sum_h \sum_k \sum_{l \dots} F(hkl) \exp\{-2\pi i(hx + ky + lz)\} \quad (2.14)$$

dengan V_c adalah volume sel satuan.

2.3.2 Fungsi patterson

Pada dasarnya fungsi Patterson adalah deret Fourier yang mempunyai koefisien kuadrat amplitudo. Dalam arti fisisnya fungsi Patterson bukan melihat posisi atom akan tetapi menggambarkan jarak antar atom.

Fungsi Patterson tiga dimensi sebagai distribusi kerapatan elektron didefinisikan sebagai berikut :

$$\rho(u, v, w) = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \rho(x, y, z) \rho(x + u, y + v, z + w) V dx dy dz \quad (2.15)$$

dan dapat ditunjukkan dalam deret Fourier sebagai berikut :

$$\rho(x, y, z) = \frac{1}{v_c} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)|^2 \exp[-2\pi i(hu + kv + lw)] \quad (2.16)$$

sehingga diambil untuk bagian realnya sebagai berikut :

$$\rho(x, y, z) = \frac{2}{v_c} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)|^2 \cos 2\pi(hu + kv + lw) \quad (2.17)$$

Persamaan ini adalah juga sebuah deret Fourier dengan koefisien $|F|^2$ dan fase nol.

Walaupun koordinat fraksional u, v, w menggantikan x, y, z akan tetapi mereka berada pada daerah yang sama yaitu sel satuan.

2.3.3 Posisi dan nilai puncak-puncak fungsi patterson

Posisi dari puncak-puncak fungsi Patterson dapat digambarkan dalam tiga dimensi. Seluruh vektor akan mempunyai ujung awal di titik $(0,0,0)$, sedangkan ujung akhir dari setiap vektor akan membentuk puncak-puncak fungsi Patterson.

Atom dengan nomor atom Z besar akan memiliki konsentrasi elektron yang lebih besar daripada atom yang memiliki nomor atom z kecil. Akibatnya atom dengan nomor atom yang besar mempunyai intensitas difraksi yang lebih besar dari pada atom yang memiliki atom yang lebih kecil.

Karena intensitas difraksi berbanding lurus dengan faktor struktur (Persamaan 2.5) maka pada perhitungan fungsi Patterson (Persamaan 2.17) akan diperoleh nilai

yang besar bila harga faktor strukturnya besar dan sebaliknya akan diperoleh nilai yang kecil bila harga faktor strukturnya kecil.

Dengan alasan tersebut dapat diduga bahwa pada komposisi vektor u, v, w yang mempunyai nilai puncak Patterson yang paling besar dimiliki oleh atom yang memiliki nomor atom paling besar.

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di laboratorium Fisika komputasi jurusan fisika fakultas MIPA Universitas Airlangga Surabaya.

3.2 Peralatan Penelitian

Peralatan penelitian ini terdiri dari dua bagian, yaitu :

a. Perangkat Keras

1. microprocessor Pentium MMX 233 Intel Corp.
2. RAM 32 Mbytes Visipro 100 Hz
3. VGA Card SIS 6202 4 Mbytes with 3 D accelerator
4. Monitor GTC Advantage 14"

b. Perangkat Lunak

1. Delphi 5.0 dari Inprise Corp. tahun 1999.
2. Periodic table SMI Corp. tahun 1997.
3. Windows 98 second edition tahun 1999

3.3 Prosedur Penelitian

3.3.1 Pengambilan data

Dalam penelitian ini data diambil langsung dari tabel Hanawald, hal ini dikarenakan dalam pembuatan program dibutuhkan data yang cukup tinggi nilai validitasnya, sedangkan diketahui bahwa tabel yang oleh Hanawald

adalah tabel yang diperoleh dari pengujian beberapa alat secara simultan, dengan demikian diharapkan program yang dihasilkan dalam penelitian ini mempunyai keakuratan yang cukup baik.

Pengambilan data tidak dapat langsung dilakukan dari data difraktometer sinar-X JDX-3530 yang dimiliki oleh Laboratorium Dasar Bersama Universitas Airlangga, meskipun alat difraktometer tersebut telah dilengkapi dengan seperangkat komputer yang memproses data intensitas sinar-X yang dihasilkan dalam bentuk harga d dan intensitas relatifnya, karena secara manual pun hasil data d yang diperoleh tersebut harus dicocokkan dulu dengan tabel Hanawald untuk menentukan nilai hkl dari data yang diperoleh, dengan demikian dirasa lebih aman kalau mengambil data langsung dari tabel Hanawald.

3.3.2 Bahasa pemrograman Delphi 5.0

Bahasa pemrograman dewasa ini telah mengalami perkembangan yang sangat pesat, khususnya untuk Delphi 5.0 yang tentunya diawali oleh Delphi 1.0 bahasa pemrograman ini dikembangkan oleh Borland dan mengacu pada ketangguhan bahasa pemrograman Pascal untuk versi DOS.

Delphi adalah program yang bekerja dengan menggunakan operating system windows, untuk Delphi 1.0 dibuat untuk beroperasi pada windows 3.1, sedangkan mulai Delphi 2.0 sampai Delphi 5.0 (diterbitkan pada pertengahan tahun 1999) beroperasi pada windows 95 atau yang lebih baru. Dengan beroperasi pada windows 95 memungkinkan Delphi ini memanfaatkan ketangguhan multitasking yang dimiliki oleh windows 95 tersebut.

Beberapa kelebihan dari Delphi 5.0 dibandingkan dengan bahasa pemrograman lain adalah, kecepatan dalam melakukan analisis kesalahan, kemudahan dalam melakukan link dengan internet, disamping itu pula tentunya tampilan visualnya yang mempermudah dan memperindah tampilan program yang dihasilkan.

3.3.3 Periodic Table of Elements SE V 3.54

Program tabel periodic ini adalah program shareware yang dihasilkan oleh " Association of Shareware professionals Member " yaitu SMI Corp. pada tahun 1991, dan yang dipakai pada penelitian ini ada versi 3.51 yang diterbitkan pada tahun 1997.

Dengan menggunakan program jadi ini memungkinkan untuk mengetahui banyak data tentang semua unsur, dan data ini sangat diperlukan dalam pembuatan program struktur kristal ini.

3.3.4 Metode system pakar (expert system)

Sistem pakar adalah sebuah metode yang digunakan untuk membuat sebuah mesin yang mampu untuk mengambil keputusan berdasarkan data-data kaidah –kaidah dan pengetahuan yang dimilikinya. Sistem pakar ini adalah bagian khusus dari metode kecerdasan buatan (artificial intelligence) yang menitik beratkan pada pemilihan pencabangan data pada kaidah-kaidah yang lebih ketat.

3.3.5 Pembuatan program

Langkah awal bagi setiap programmer untuk memulai membuat program adalah menentukan konstanta masukan awal dan aturan – aturan (kaidah-kaidah) yang digunakan, kaidah ini bisa dalam bentuk perumusan matematis analitis maupun berbentuk aturan

kualitatif.

Dalam penelitian ini data masukan awal adalah nilai d (jarak antar bidang pemantul), intensitas sinar X yang diterima dan panjang gelombang sinar-X yang digunakan, sedangkan diketahui bahwa perumusan d^2 untuk 8 macam struktur kristal adalah :

Kubik

$$d^2(hkl) = \frac{a^2}{h^2 + k^2 + l^2} \quad \dots (3.1)$$

Tetragonal

$$d^2(hkl) = \left[\frac{h^2 + k^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1} \quad \dots (3.2)$$

Hexagonal

$$d^2(hkl) = \left[\frac{4(h^2 + k^2 + hk)}{3a^2} + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1} \quad \dots (3.3)$$

Orthorhombik

$$d^2(hkl) = \left[\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} \right]^{-1} \quad \dots (3.4)$$

Monoklinik

$$d^2(hkl) = \left[\frac{1}{\sin \alpha} \left[\frac{h^2}{a^2} + \frac{l^2}{c^2} - \frac{2hl \cos \beta}{ac} \right] + \frac{k^2}{b^2} \right]^{-1} \quad \dots (3.5)$$

Triklinik

$$d^2(hkl) = k^2 \left[\frac{h^2}{a^2} + \frac{k^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2} + \frac{2kl}{bc \cos \alpha} + \frac{2lh}{ac \cos \beta} + \frac{2hk}{ab \cos \gamma} \right]^{-1} \quad \dots (3.6)$$

Rhombohedral

$$d^2(hkl) = a^2 \left[h^2 + k^2 + l^2 + 2(hk + kl + hl) \left[\frac{\cos^2 \alpha - \cos \alpha}{\sin^2 \alpha} \right] \right] \left[\frac{\sin^2 \alpha}{1 - 3 \cos^2 \alpha + 2 \cos^4 \alpha} \right]^{-1}$$

...(3.7)

Dengan hanya diketahui nilai d dari masing masing data untuk struktur kristal tertentu tentunya untuk masing-masing struktur kristal diperoleh banyak variable yang bebas, perincian variabel bebas untuk masing-masing struktur kristal adalah :

kubik : 4

a, h, k dan l

Tetragonal : 5

a, c, h, k dan l

Hexagonal : 5

a, c, h, k dan l

Orthorhombik : 6

a, b, c, h, k dan l

Monoklinik : 8

a, b, c, h, k, l, α dan β

Triklinik : 9

a, b, c, h, k, l, α , β dan γ

Rhombohedral : 9

a, b, c, h, k, l, α , β dan γ

dari data variabel bebas di atas terlihat kemungkinan untuk mengisi nilai dari variabel bebas tersebut menjadi sangat banyak meskipun dibatasi oleh aturan bahwa

syarat batas I : h, k dan l harus bernilai bulat sedangkan a, b, c, α, β dan γ bernilai real.

Berdasarkan pemikiran tentang banyaknya konstanta yang mungkin akan masuk secara matematis, maka perluy untuk dicarikan aturan-aturan lain yang akan menjadi filter bagi beberapa konstanta untuk diterima pada persamaan.

Dari penelitian yang telah dilakukan ternyata program yang bisa dibuat untuk tahap ini adalah hanya untuk 4 macam struktur kristal saja, hal ini dikeranakan ketidak mampuan komputer untuk melakukan analisis akibat banyaknya angka yang dihitung, meskipun komputer yang digunakan dalam penelitian ini cukup cepat yaitu dengan mikroprosesor 233 MMX dengan ram 32 Mbytes.

3.3.5.1. Penghitungan konstanta kisi dan hkl

Dalam penelitian ini langkah awal yang dilakukan adalah menentukan konstanta kisi (a, b dan c) dan nilai hkl untuk masing-masing data. Disadari bahwa nilai konstanta kisi bisa sangat banyak karena nilainya berharga bilangan real (pecahan) hal ini dapat dilihat pada syarat batas I, untuk mengatasi hal ini perlu dilakukan pemfilteran dengan :

Syarat batas II : nilai konstanta kisi minimal adalah 2 kali jejari atom yang terbesar.

Syarat batas III : nilai konstanta kisi maksimal adalah 10 kali jejari atom yang terbesar.

Pada syarat batas II ini diberikan agar untuk memulai mencari nilai konstanta kisisnya tidak terlalu jauh dari nilai sebenarnya. Sedangkan pada syarat batas III ini diberikan sebagai nilai lebih, maksudnya adalah bahwa pada program ini dibatasi panjang maksimal dari sisi struktur kristal adalah 10 kali jejari atom terbesar, pembatasan ini memang tidak terlalu valid karena struktur kristal dengan panjang salah satu sisinya lebih dari 10 kali jejari atom yang terbesar ternyata ada, tapi pembatasan ini perlu agar tidak terlalu banyak hitungan yang dilakukan dan angka yang dapat diterima dalam persamaan matematisnya.

Sedangkan dalam mencari nilai konstanta kisi pada program ini dilakukan dengan dua bertahap,

pertama dengan menggunakan persamaan :

$$a_{j+1} = a_j + \Delta a \quad \dots(3.8)$$

dengan

$$\Delta a = \frac{8 \times \text{jejari_atom_terbesar}}{50} \quad \dots(3.9)$$

angka 8 diperoleh dari nilai a maksimum dikurangi nilai a minimum, sedangkan angka 50 didasarkan bahwa untuk sekelompok data diperoleh 50 macam nilai a.

Untuk konstanta kisi yang lain b dan c dilakukan dengan rumus yang sama.

Setelah mendapatkan konstanta kisi yang cukup banyak maka langkah selanjutnya adalah menentukan nilai hkl dari sejumlah data yang ada.

Persamaan yang digunakan adalah :

$$d_i = \frac{a_j^2}{h_i^2 + k_i^2 + l_i^2} \quad \dots(3.10)$$

persamaan (3.10) adalah persamaan yang digunakan untuk kubik sedangkan untuk tetragonal, hexagonal dan orthorhombik dapat dilakukan dengan cara yang sama dengan menurunkan dari persamaan (3.2),(3.3) dan (3.4).Setelah mendapatkan nilai d yang banyak maka intyik menguji manakah yang benar diuji dengan menggunakan persamaan :

$$|d_{data} - d_i| \leq 10^{-5} \quad \dots(3.11)$$

Jika untuk semua data yang ada ternyata semuanya memenuhi syarat persamaan (3.11) di atas maka nilai a yang memenuhi tersebut disimpan.

Dari analisa secara matematis di atas, ternyata masih didapatkan nilai konstanta kisi yang memenuhi syarat cukup banyak. Untuk itu perlu dilakukaj penghalusan nilai dengan mengganti nilai $\Delta a = \frac{2}{50}$ untuk nilai a yang masuk,

Pada perhitungan tetragonal, hexagonal dan orthorhombik tentunya akan dilakukan dengan cara yang lebih kompleks tetapi pada dasarnya aturan dasarnya adalah sama seperti yang telah dijelaskan di atas.

3.3.5.1. Penghitungan analitis matematis menentukan posisi atom

Dari perhitungan konstanta kisi dan nilai hkl ternyata seringkali masih didapatkan nilai konstanta kisi yang tidak tunggal, untuk itu perlu dilakukan penyaringan kembali agar makin sedikit nilai konstanta kisi yang memenuhi syarat.Langkah selanjutnya yang dilakukan adalah dengan cara melakukan kajian matematis analitis untuk menentukan posisi atom.



Persamaan yang digunakan dalam menentukan nilai u, v dan w (posisi atom) adalah dengan menggunakan perumusan.

$$\rho(u, v, w) = \frac{2}{V_c} \sum_h \sum_k \sum_l |F(hkl)|^2 \cos 2\pi(hu + kv + lw) \quad \dots(3.12)$$

dengan

$$F(hkl) = \sqrt{\frac{I(hkl)}{mp \cdot Lp(\Theta)}} \quad \dots(3.13)$$

$$Lp(\Theta) = \frac{1 + \cos^2 2\Theta}{4 \sin^2 \Theta \cos \Theta} \quad \dots(3.14)$$

Dari persamaan (3.12) di atas dapat diperoleh harga kerapatan elektron untuk masing-masing nilai konstanta kisi dengan harga u, v dan w adalah $0, \frac{1}{4}, \dots, \frac{4}{4}$. Dengan nilai u, v dan w yang merupakan kelipatan $\frac{1}{4}$ tersebut dihitung jumlah atom yang kerapatan elektronnya terbesar dalam satu sel (untuk masing-masing atom mempunyai nilai kerapatan elektron yang berbeda dengan demikian dapat ditentukan jumlah atom penyusunnya dalam satu sel). Sedangkan apabila nilai u, v dan w diganti menjadi $0, 1/20, \dots, 20/20$ harus didapat jumlah atom dengan kerapatan elektron yang terbesar adalah sama, jika tidak sama maka nilai konstanta kisisnya dianggap salah.

Syarat batas IV : Dengan nilai u, v, w yang berbeda harus didapatkan jumlah atom dengan kerapatan elektron terbesarnya adalah sama.

3.3.5.1. Analitis sifat fisis atom dalam sel satuan.

Dalam penelitian yang dilakukan diketahui bahwa dengan keempat syarat batas yang telah diberikan yang dalam hal ini berfungsi sebagai filter dari nilai konstanta kisi yang masuk masih saja ditemui nilai konstanta kisi yang tidak tunggal untuk itu perlu untuk dibuatkan syarat batas tambahan yang

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Keterbatasan program

Sebelum membahas hasil yang telah diperoleh terlebih dahulu perlu untuk dibahas keterbatasan – keterbatasan yang dimiliki oleh program yang dibuat, keterbatasan – keterbatasan ini terjadi karena keterbatasan alat yang digunakan.

Program yang telah dibuat dicoba untuk diisi datanya, data yang dimasukkan adalah nilai d dari tabel Hanawalt, dalam pengisian data ini dibutuhkan pengisian harga jari-jari atom untuk masing masing atom penyusun, untuk itu pada saat mengisi data, program periodic table harus juga dijalankan untuk mengambil data jari-jari atom yang dibutuhkan. Dengan demikian program ini hanya bisa dijalankan bersamaan dengan program periodic table dan atom – atom penyusun kristal harus diketahui terlebih dahulu..

Program ini dibatasi hanya untuk nilai konstanta kisi maksimal berharga 10 angstrom, dengan demikian sangat dimungkinkan ada beberapa struktur kristal dari suatu kristal tertentu yang tidak dapat diprediksi. Struktur kristal yang mampu dideteksi program yang telah dibuat hanya : kubik, tetragonal, hexagonal dan orthorhombik.

4.2 Hasil dan analisisnya

Di dalam program yang dibuat semua data yang ada terlebih dahulu dianalisa dengan menggunakan struktur kristal kubik kemudian berturut-turut adalah tetragonal, hexagonal dan yang terakhir adalah orthorhombic.

Pengujian I:

Nama atom : Al

Jejari atom : 1,82 Å

Panjang gelombang sinar -X : 1,5405 Å

Data jarak antar bidang pemantul

d (Å)	l/lo
2,338	100
2,024	47
1,431	22
1,221	24
1,169	7
1,0124	2
0,9289	8
0,9055	8
0,8266	8

Nilai konstanta kisi yang yang diperoleh

Uji kubik : a = 4,0786 b = 0 c = 0

dari data tabel Hanawalt diperoleh :

a = 4,0494 b = 0 c = 0

1,92784692825296	8 8 8
1,92784692825296	0 0 0
1,92784692825296	0 0 8
1,92784692825296	4 4 0
1,92784692825296	8 0 8
1,92784692825296	8 4 4
1,92784692825296	8 0 0
1,92784692825296	0 4 4
1,92784692825296	8 8 0
1,92784692825296	4 8 4
1,92784692825296	0 8 8
1,92784692825296	0 8 0
1,92784692825296	4 0 4
1,92784692825296	4 4 8
Nilai kerapatan elektron	posisi atom

Nilai kerapatan elektron dan posisi atom

1 1 1	1 1 1
2 0 0	2 0 0
2 2 0	2 2 0
3 1 1	3 1 1
2 2 2	2 2 2
4 0 0	4 0 0
3 3 1	3 3 0
4 2 0	4 2 0
4 2 2	4 2 2
hkl pemrograman	hkl tabel Hanawalt

Nilai hkl yang dihasilkan :

Pembahasan:

Nilai konstanta kisinya berbeda sekitar 0.02, hasil ini dirasa cukup bagus. Perbedaan ini dikarenakan nilai Δa yang cukup besar, yaitu sekitar 0,05. Pada nilai hkl didapati sebuah nilai hkl yang berbeda, keadaan inipun dirasa cukup bagus, karena hal yang terpenting di dalam perhitungan struktur kristal adalah nilai konstanta kisi dan posisi atom dalam koordinat uvw maupun xyz.

Dari data posisi atom diperoleh bahwa untuk atom Al ternyata struktur kristalnya adalah kubik pusat muka..

Pengujian II:

Nama Molekul : GaAs

Nama atom : Ga Jejari atom : 1,81 Å

Nama atom : As Jejari atom : 1,33 Å

Panjang gelombang sinar -X : 1,5405 Å

Data jarak antar bidang pemantul

d (Å)	l/lo
3,260	100
2,832	1
1,999	35
1,704	35
1,413	6
1,297	8
1,154	6
1,088	4

0,9993	2
0,9556	2
0,8939	4
0,8622	2
0,8160	4
0,7916	2

Nilai konstanta kisi yang yang diperoleh

Uji kubik : $a = 5,625299999999999$ $b = 0$ $c = 0$

dari data tabel Hanawalt diperoleh :

$a = 5,6534$ $b = 0$ $c = 0$

Nilai hkl yang dihasilkan :

hkl pemrograman	hkl tabel Hanawalt
1 1 1	1 1 1
2 0 0	2 0 0
2 2 0	2 2 0
3 1 1	3 1 1
4 0 0	4 0 0
3 3 1	3 3 1
4 2 2	4 2 2
5 1 1	3 3 3
4 4 0	4 4 0
5 3 1	5 3 1

Nilai kerapatan elektron	posisi atom
1,08869154383892	8 8 8
1,08869154383892	0 0 0
1,08869154383892	0 0 8
1,08869154383892	4 4 0
1,08869154383892	8 0 8
1,08869154383892	8 4 4
1,08869154383892	8 0 0
1,08869154383892	0 4 4
1,08869154383892	8 8 0
1,08869154383892	4 8 4
1,08869154383892	0 8 8
1,08869154383892	0 8 0
1,08869154383892	4 0 4
1,08869154383892	4 4 8
0,739248849806359	0 1 7
0,739248849806359	8 5 3
0,739248849806359	8 7 1
0,739248849806359	4 3 1
0,739248849806359	4 7 5
0,739248849806359	4 5 7
0,739248849806359	0 7 1
0,739248849806359	4 1 3
0,739248849806359	8 1 7

Nilai kerapatan elektron dan posisi atom

6 2 0	6 2 0
5 3 3	5 3 3
4 4 4	4 4 4
7 1 1	7 1 1

0,739248849806359	0 5 3
0,739248849806359	8 3 5
0,739248849806359	0 3 5

Pembahasan:

Nilai konstanta kisinya berbeda sekitar 0.03, seperti pada pengujian pertama hasil ini dirasa cukup bagus. Perbedaan ini dikarenakan nilai Δa yang cukup besar, yaitu sekitar 0,05..

Pada nilai hkl didapati sebuah nilai hkl yang berbeda, keadaan inipun dirasa cukup bagus, karena hal yang terpenting di dalam perhitungan struktur kristal adalah nilai konstanta kisi dan posisi atom dalam koordinat uvw maupun xyz.

Dari data posisi atom diperoleh bahwa untuk molekul GaAs ternyata struktur kristalnya adalah kubik pusat muka..Dengan sudut-sudut dan pusat koordinat sisinya diisi oleh atom Ga sedangkan atom As mengisi sela-selanya.

Pengujian III:

Nama Molekul : BPO_4

Nama atom : B Jejari atom : 1,17 Å

Nama atom : P Jejari atom : 1,23 Å

Nama atom : O Jejari atom : 0,65 Å

Panjang gelombang sinar -X : 1,5405 Å

Data jarak antar bidang pemantul

d (Å)	I/I ₀
3,622	100
3,322	4
3,067	4
2,254	30
1,973	2
1,852	8
1,816	4
1,661	1
1,534	2
1,460	8
1,413	1
1,393	1
1,372	2
1,319	4
1,271	1
1,268	2
1,211	2
1,184	2

Nilai konstanta kisi yang yang diperoleh

Uji kubik : a = 0 b = 0 c = 0

Uji Tetragonal : a = 4,2804 b = 0 c = 6.6512

hkl pemrograman	hkl label Hanawali
101	101
002	002
110	110
112	112
103	103
211	211
202	202
004	004
203	220
114	114,213
300	300
301	301
222	222
204	204
105	105
105	105
105	312
115	303
320	221

Nilai hkl yang dihasilkan :

$$a = 4,338 \quad b = 0 \quad c = 6,645$$

dari data tabel Hanawali diperoleh :



Nilai kerapatan elektron dan posisi atom

Nilai kerapatan elektron	posisi atom
1,11965244089495	8 8 8
1,11965244089495	0 0 0
1,11965244089495	0 8 8
1,11965244089495	8 8 0
1,11965244089495	8 0 0
1,11965244089495	0 0 8
1,11965244089495	0 8 0
1,11965244089495	8 0 8
0,936596607441618	8 7 8
0,936596607441618	8 7 0
0,936596607441618	0 7 0
0,936596607441618	8 1 8
0,936596607441618	0 1 0
0,936596607441618	8 1 0
0,936596607441618	0 7 8
0,936596607441618	0 1 8
0,844593647167483	4 4 4

Pembahasan:

Nilai konstanta kisinya berbeda sekitar 0.04, seperti pada pengujian sebelumnya hasil ini dirasa cukup bagus. Perbedaan ini dikarenakan nilai Δa yang cukup besar, yaitu sekitar 0,08..

Pada pengujian kubik ternyata dihasilkan nilai a, b dan c yang semuanya 0 ini membuktikan bahwa kristal yang sedang dihitung tersebut bukanlah mempunyai struktur kristal kubik.

Pada nilai hkl didapati empat buah nilai hkl yang berbeda, keadaan inipun dirasa cukup bagus, karena hal yang terpenting di dalam perhitungan struktur kristal adalah nilai konstanta kisi dan posisi atom dalam koordinat uvw maupun xyz.

Dari data posisi atom diperoleh bahwa untuk molekul BPO_4 ternyata struktur kristalnya adalah tetragonal. pusat badan. Dengan sudut-sudut dan pusat koordinat sisinya diisi oleh atom P, atom B mengisi sela-selanya, sedangkan atom O berada pada pusat badan dari struktur kristal tetragonal.

Pengujian IV:

Nama Molekul : $B_{13}P_2$

Nama atom : B Jejari atom : 1,17 Å

Nama atom : P Jejari atom : 1,23 Å

Panjang gelombang sinar -X : 1,5405 Å

Data jarak antar bidang pemantul

d (Å)	I/I ₀
4,74	1
3,68	60
2,978	60
2,569	80
2,522	100
2,149	40
1,971	5
1,946	5
1,927	50

1,854	1
1,722	5
1,645	70
1,632	20
1,607	10
1,582	10
1,509	90
1,495	50
1,426	50
1,4173	30
1,3870	50
1,2799	60
1,2930	20
1,2867	30
1,2650	1
1,2288	60
1,2054	20
1,1926	20
1,1656	10
1,1552	20

Nilai konstanta kisi yang yang diperoleh

Uji kubik : $a = 0$ $b = 0$ $c = 0$

Uji Tetragonal : $a = 0$ $b = 0$ $c = 0$

Uji Hexagonal : $a = 5,904$ $b = 0$ $c = 11,808$

dari data tabel Hanawalt diperoleh :

$$a = 5,984 \quad b = 0 \quad c = 11,85$$

Nilai hkl yang dihasilkan :

hkl pemrograman	hkl tabel Hanawalt
101	101
102	102
004	110
104	104
201	201
105	105
006	006
204	204
210	211
115	122
213	300
116	116
302	214
107	107
303	303
215	215
215	220
222	222
310	310

311	311
306	306
306	134
306	401
401	402
315	315
119	119
307	226
411	202
10 1 0	1010

Nilai kerapatan elektron dan posisi atom

Nilai kerapatan elektron	posisi atom
8,03032175729506	8 8 8
8,03032175729506	0 0 0
8,03032175729506	0 8 0
8,03032175729506	8 8 0
8,03032175729506	8 0 8
8,03032175729506	8 0 0
8,03032175729506	0 8 8
8,03032175729506	0 0 8
6,76218889286319	0 7 8
6,76218889286319	0 1 0
6,76218889286319	0 1 8
6,76218889286319	8 7 8
6,76218889286319	8 7 0
6,76218889286319	8 1 8
6,76218889286319	8 1 0

6,76218889286319

0 7 0

Pembahasan:

Nilai konstanta kisi nya berbeda sekitar 0.08, seperti pada pengujian sebelumnya hasil ini dirasa cukup bagus. Perbedaan ini dikarenakan nilai Δa yang cukup besar, yaitu sekitar 0,1..

Pada pengujian kubik dan tetragonal ternyata dihasilkan nilai a, b dan c yang semuanya 0 ini membuktikan bahwa kristal yang sedang dihitung tersebut bukanlah mempunyai struktur kristal kubik.maupun tetragonal

Pada nilai hkl didapati beberapa nilai hkl yang berbeda, keadaan inipun dirasa cukup bagus, karena hal yang terpenting di dalam perhitungan struktur kristal adalah nilai konstanta kisi dan posisi atom dalam koordinat uvw maupun xyz.

Dari data posisi atom diperoleh bahwa untuk molekul B_3P_2 ternyata struktur kristalnya adalah Hexagonal. Dengan sudut-sudut dan pusat koordinat sisinya diisi oleh atom P, atom B mengisi sela-selanya,

Pengujian V:

Nama Molekul : MgY_2S_4

Nama atom : Mg Jejari atom : 1,72 Å

Nama atom : Y Jejari atom : 2,27 Å

Nama atom : S Jejari atom : 1,0 Å

Panjang gelombang sinar -X : 1,5405 Å

Data jarak antar bidang pemantul

d (Å)	l/lo
5,675	20
3,531	100
3,153	20
2,838	60
2,743	100
2,570	100
2,392	20
2,237	10
2,078	40
1,991	60
1,885	100
1,760	20
1,664	40
1,620	20

Nilai konstanta kisi yang yang diperoleh

Uji kubik : a = 0 b = 0 c = 0

Uji Tetragonal : a = 0 b = 0 c = 0

Uji Hexagonal : a = 0 b = 0 c = 0

Uji Orthorhombic : a = 11,6456 b = 12,8808 c = 3,8416

dari data tabel Hanawalt diperoleh :

a = 12,66 b = 12,72 c = 3,77

Nilai hkl yang dihasilkan :

hkl pemrograman	hkl tabel Hanawalt
120	120
111	230
121	400
410	420
131	131
231	231
430	141
241	440
341	151
251	251
540	351
222	460
322	322
720	551

Nilai kerapatan elektron dan posisi atom

Nilai kerapatan elektron	posisi atom
6,18862086040409	8 8 8
6,18862086040409	0 0 0
6,18862086040409	0 0 8
6,18862086040409	8 8 0
6,18862086040409	0 8 8
6,18862086040409	0 8 0
6,18862086040409	8 0 0

6,18862086040409	8 0 8
4,83231689369191	0 8 1
4,83231689369191	8 8 7
4,83231689369191	0 8 7
4,83231689369191	8 0 1
4,83231689369191	0 0 7
4,83231689369191	0 0 1
4,83231689369191	8 8 1
4,83231689369191	8 0 7
4,09375926106437	4 4 8
4,09375926106437	4 4 0

Pembahasan:

Nilai konstanta kisinya berbeda sekitar 0.1, seperti pada pengujian sebelumnya hasil ini dirasa kurang bagus. Perbedaan ini bukan hanya dikarenakan nilai Δa yang cukup besar, tetapi dirasa syarat batas fisis yang ada masih perlu untuk ditambah lagi. Syarat batas yang belum dilakukan dalam program ini adalah permasalahan analisis posisi atom dihubungkan dengan nilai konstanta kisi atom.

BAB V

KESIMPULAN

5.1 Kesimpulan

Kesimpulan yang dapat diambil pada penelitian ini adalah :

1. Dengan menggunakan program Delphi 5.0 dapat dibuat program untuk analisis struktur kristal dari data difraktometer sinar X
2. Dari penelitian diperoleh bahwa syarat fisis sangat membantu penyaringan nilai konstanta kisi yang masuk.
3. Pengambilan hasil untuk kedekatan dengan data nilai d ternyata cukup efektif dalam pengambilan hasil nilai konstanta kisi.
4. Syarat batas yang cukup efektif untuk digunakan adalah :

syarat batas I : h, k dan l harus bernilai bulat sedangkan a, b, c, α, β dan γ bernilai real.

Syarat batas II : nilai konstanta kisi minimal adalah 2 kali jejari atom yang terbesar.

Syarat batas III : nilai konstanta kisi maksimal adalah 10 kali jejari atom yang terbesar.

Syarat batas IV : Dengan nilai u, v, w yang berbeda harus didapatkan jumlah atom dengan kerapatan elektron terbesarnya adalah sama.

Syarat batas V : Untuk sisi yang berhadapan harus mempunyai jumlah yang sama untuk atom dengan kerapatan elektron yang sama.

Syarat batas VI : Untuk atom dengan kerapatan elektron yang tertentu jika berjumlah ganjil harus ada atom yang mengisi pusat diagonal sel satuan.

Saran yang dapat diberikan berdasarkan penelitian yang telah dilakukan adalah, untuk penelitian selanjutnya sebaiknya digunakan prosesor Pentium III dengan RAM lebih besar dari 64 MBytes, hal ini untuk kecepatan

SARAN

- dan hexagonal.
- ini. Penelitian ini hasilnya bagus untuk analisis struktur kristal kubik, tetragonal digunakan dengan menggunakan metode yang telah digunakan dalam penelitian ternyata kurang mampu untuk menyelesaikan analisis struktur kristal yang
6. Dengan menggunakan mikroprosesor MMX 233 MHz dan RAM 32 MBytes yang dihasilkan.
 5. Pada analisis orthorhombic didapat nilai yang kurang memuaskan hal ini diperkirakan karena syarat batas yang digunakan masih kurang, karena dengan makin lengkapnya syarat batas yang digunakan maka akan makin sah hasil yang dihasilkan.
- Orthorhombic : $a \neq b \neq c$.*
- Hexagonal : $a = b \neq c$.*
- Tetragonal : $a = b \neq c$.*
- kubik : $a = b = c$.*
- menenuhi kaidah aturan konstanta kisi .
- Syarat batas IX : Pada pengujian untuk struktur kristal yang tertentu harus harus berjumlah diantara angka berikut : 4, 8, 9, 14 dan 15.
- Syarat batas VIII : Untuk atom dengan kerapatan elektron yang terbesar berjumlah genap harus tidak ada atom yang mengisi pusat diagonal sel
- Syarat batas VII : Untuk atom dengan kerapatan elektron yang tertentu jika

dan kesahihan hasil yang akan diperoleh, dan dengan menggunakan komputer seaneh itu harapannya semua struktur kristal dapat dianalisis dengan hasil yang memuaskan.

DAFTAR PUSTAKA

1. Aminatun. *Analisis Struktur Kristal Bahan dengan Metode Simulasi Komputer*. DIP OPF, Lemlit Universitas Airlangga 1995.
2. Cullity B.D. *Element of X Ray Diffraction*, Addison Wisley Publishing Company Inc, USA, 1959
3. Lipson and H. Steeple, *Interpretation of X Ray Powder Diffraction Pattern*, MC Millan, London, ST. Martin Press, New York, 1970
4. Buerger, *Crystal Structure Analysis*, MC Millan, London, ST. Martin Press, New York, 1970
5. Jogiyanto H.M. *Teori dan Aplikasi Program Komputer Bahasa Pascal*, Jilid 1, Andi Offset, Yogyakarta, 1992
6. George Omura, *Menguasai Autocad Release 12*, Elek Media Komputindo, Kelompok Gramedia, Jakarta, 1994.
7. Callister, *Materials Science and Engineering*, John Wiley and Son, New York, 1991.

LISTING PROGRAM DELPHI 5.0

APENDIKS I

```
unit Sdimain;
```

```
interface
```

```
uses Windows, Classes, Graphics, Forms, Controls, Menus, sysutils,
    Dialogs, StdCtrls, Buttons, ExtCtrls, ComCtrls, ImgList, StdActns,
    ActnList, ToolWin, Math;
```

```
type
```

```
TSDIAppForm = class(TForm)
    OpenFileDialog: TOpenDialog;
    SaveDialog: TSaveDialog;
    ToolBar1: TToolBar;
    ToolButton9: TToolButton;
    ToolButton1: TToolButton;
    ToolButton2: TToolButton;
    ToolButton3: TToolButton;
    ToolButton4: TToolButton;
    ToolButton5: TToolButton;
    ToolButton6: TToolButton;
    ActionList1: TActionList;
    FileNew1: TAction;
    FileOpen1: TAction;
    FileSave1: TAction;
    FileSaveAs1: TAction;
    FileExit1: TAction;
    EditCut1: TEditCut;
    EditCopy1: TEditCopy;
    EditPaste1: TEditPaste;
    HelpAbout1: TAction;
    StatusBar: TStatusBar;
    ImageList1: TImageList;
    MainMenu1: TMainMenu;
    File1: TMenuItem;
    FileNewItem: TMenuItem;
    FileOpenItem: TMenuItem;
    FileSaveItem: TMenuItem;
    FileSaveAsItem: TMenuItem;
    N1: TMenuItem;
    FileExitItem: TMenuItem;
    Edit1: TMenuItem;
    CutItem: TMenuItem;
    CopyItem: TMenuItem;
    PasteItem: TMenuItem;
    Help1: TMenuItem;
    HelpAboutItem: TMenuItem;
    ToolButton7: TToolButton;
    View1: TMenuItem;
    Help2: TMenuItem;
    DataInput1: TMenuItem;
    DataOutput1: TMenuItem;
    Grafik3D1: TMenuItem;
    About1: TMenuItem;
    Help3: TMenuItem;
    Cetak1: TMenuItem;
    Mem1: TMemo;
    Edit2: TEdit;
    ToolButton8: TToolButton;
    ToolButton10: TToolButton;
    ToolButton11: TToolButton;
    Memo3: TMemo;
```

```

RichEdit1: TRichEdit;
procedure FileNew1Execute(Sender: TObject);
procedure FileOpen1Execute(Sender: TObject);
procedure FileSave1Execute(Sender: TObject);
procedure FileExit1Execute(Sender: TObject);
procedure HelpAbout1Execute(Sender: TObject);
procedure DataInput1Click(Sender: TObject);
procedure DataOutput1Click(Sender: TObject);
procedure Analisa(Sender: TObject);
procedure FormCreate(Sender: TObject);
private
  { Private declarations }
public
  Procedure Trigonometri;
  Procedure Kubik;
  Procedure Tetragonal;
  Procedure Hexagonal;
  Procedure Orthorhombic;
  procedure D2T;
  Procedure UVW;
  { Public declarations }
end;

Type
  Input = Record
    Intensitas, InputAwal : Array[1..100] of Real;
    N_Kristal : String[10];
    NamaAtom : Array [1..30] of String[5];
    NomorAtom : Array [1..30] of Integer;
    Nan, Data : Integer;
    Lmd : real;
  End;
  Output= Record
    Puncak,U,V,W: Real;
    Konst:Integer;
  End;
  Data_Hasil= Array[0..2000,0..2000] of Output;
  Larik = Array[1..50] of Real;

var
  FileData : File of Input;
  Data_Input : Input;
  NamaFile : String[50];
  m,n,J_Prob,Mp,ha,ka,la,Benar,h,k,l,i,j,jl: Integer;
  Kecil,Delta: Real;
  H1,K1,L1: Array[0..200] of Integer;
  Lamda,SinTeta,CosTeta,Cos2Teta: Real;
  Ak,Bk,Ck: Array[1..2000] of real;
  H11,K11,L11,hkl: Array[0..50,0..2000] of Integer;
  F2: Array[0..50,0..2000] of Real;
  Teta: Array[1..50] of Real;
  Konst: Array[0..1000] of integer;
  Hasil: Data_Hasil;
  Jumlah: Array[0..100,0..20] of Integer;
  awalA,awalB,awalC,nilaiAkhirA,nilaiAkhirB,nilaiAkhirC,
  jejari3,P,jejari1,jejari2 : real;
  nm,kubik_,Tetra_,Hexa_,Ortho_ : 0..2;

var
  SDIAppForm: TSDIAppForm;

implementation

```

```
uses About, Unit_Input, Unit_Output, Unit_Analisis;
```

```
{SR *.DFM}
```

```
procedure TSDIAppForm.FileNew1Execute(Sender: TObject);
begin
```

```
    Form1.Show;
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.FileOpen1Execute(Sender: TObject);
begin
```

```
    OpenDialog.Execute;
    NamaFile:= OpenDialog.FileName;
    If namaFile<>' ' Then
    Begin
        Edit2.Text:=NamaFile;
        AssignFile(FileData, NamaFile);
        Reset(FileData);
        Read(FileData, Data_Input);
        CloseFile(FileData);
    End;
```

```
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.FileSave1Execute(Sender: TObject);
```

```
begin
    SzveDialog.Execute;
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.FileExit1Execute(Sender: TObject);
```

```
begin
    Close;
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.HelpAbout1Execute(Sender: TObject);
```

```
begin
    AboutBox.ShowModal;
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.DataInput1Click(Sender: TObject);
```

```
begin
    Form2.Show;
end;
```

```
procedure TSDIAppForm.DataOutput1Click(Sender: TObject);
```

```
begin
    Form3.Show;
end;
```

```
Procedure TSDIAppForm.Trigonometri;
```

```
Begin
    SinTeta:= Lamda/(2* Data_Input.InputAwal[i]);
    CosTeta:= Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
    Cos2Teta:= Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
End;
```

```
procedure TSDIAppForm.D2T;
```

```
Begin
    For i:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
        Teta[i]:= Arcsin((i*Data_Input.Lmd)/(2*Data_Input.InputAwal[i]));
```



```

End;
End;

procedure TSDIAppForm.UVW;
Var Jv,Jm,a,b,c,J_UVW: Integer;
    nilai,konst,konst1: Real;
    total1,total2,total3,
    butir1,bitir2,bitir3,bitir12,bitir13,bitir22,bitir32,bitir23,bitir33,
    pilih,salah,kw,sisiu,SISIV,SISIW,ku : shortint;
    adatiga :array[0..100,0..100] of 0..1;
Procedure Qsort(var y:Data_Hasil;bawah,atas,indek :integer);
var simpan : Output;
begin
while atas > bawah do
begin
i:=bawah;
j:=atas;
simpan := y[Indek,bawah];
while i<j do
begin
while y[Indek,j].Puncak > simpan.Puncak do j:=j-1;
y[Indek,i] := y[Indek,j];
while (i<j) and (y[Indek,i].Puncak <= simpan.Puncak ) do i:=i+1;
y[Indek,j] := y[Indek,i];
end;
y[Indek,i] := simpan;
qsort(y,bawah,i-1,indek);
bawah :=i+1;
end;
end;

Begin
JV:=8;
J_UVW:=(JV+1)*(JV+1)*(JV+1);
jm:=0;
For j1:=1 to J_Prob do
Begin
i:=0;
For a:=0 to JV do
For b:=0 to JV do
For c:=0 to JV do
Begin
P:=0;
Inc(i);
For j:=1 to Data_Input.Data do
P:=P+F2[j,j1]*Cos(2*pi*(H11[j,j1]*a/JV+K11[j,j1]*b/JV+L11[j,j1]*c/JV));
With Hasil[j1,i] do
Begin
Puncak:=abs(P);
U:=a;
V:=b;
W:=c;
Konst:=j1;
End;
End;
QSort(Hasil,1,J_UVW,J1);
End;
nilaiAkhirA:= 0;
nilaiAkhirB:= 0;

```

```

    nilaiAkhirC:= 0;

For j1:=1 to J_Prob do
Begin
    i:=J_UVW;
    j:=0;
    k:=0;

    Hasil[j1,J_UVW+1].Puncak:=Hasil[j1,J_UVW].Puncak;
Repeat
    Delta:=Abs(Hasil[j1,i+1].Puncak-Hasil[j1,i].Puncak);
    adatiga[j1,J_uv-w-i+1]:=0;
    if (Hasil[j1,i].u= jv/2) and (Hasil[j1,i].v= jv/2) and (Hasil[j1,i].w
jv/2) then adatiga[j1,J_uv-w-i+1]:=1;
    If Delta <=1e-9 then
        Begin
            Inc(k);
        End
    Else
        Begin
            Inc(j);
            Jumlah[j1,j]:=k;
            k:=1;
        End;
    Dec(i);
Until j=Data_Input.Nan;
End;

konst:=5;
konst1:=15;
For i:=1 to j_Prob do
Begin
    salah:=0;
    {*****}
    if kubik_=1 then
    begin
        salah:=1;
        if (jumlah[i,1]=8) or (jumlah[i,1]=4) or (jumlah[i,1]=9) or
(jumlah[i,1]=14) then salah:=0;

        butir1:=0;
        butir2:=0;
        if salah = 0 then for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
        begin
            if (hasil[i,J_uv-w-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uv-w-kw+1].V=0) then
butir1:=butir1+1;
            if (hasil[i,J_uv-w-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uv-w-kw+1].W=0) then
butir2:=butir2+1;
        end;
        if (salah=0) and (butir1<>0) and (butir2<>0) then if (butir1=butir2) then
salah:=0 else salah :=1;

        butir1:=0;
        butir2:=0;
        if salah = 0 then for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
        begin
            if (hasil[i,J_uv-w-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uv-w-kw+1].V=0) then
butir1:=butir1+1;
            if (hasil[i,J_uv-w-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uv-w-kw+1].W=0) then
butir2:=butir2+1;
        end;
end;

```

```

if (salah=0) and (butir1<>0) and (butir2<>0) then if (butir1=butir2) then
salah:=0 else salah:=1;

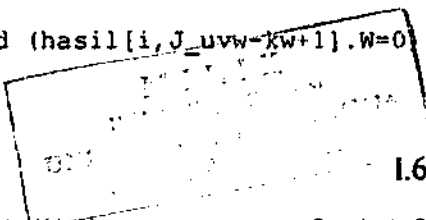
if (Jumlah[i,2]<>0) then if (Jumlah[i,2] mod 6 = 0) or ((Jumlah[i,2]-1)
mod 6 = 0) then salah:=0
else salah:=1;

butir1:=0;
butir2:=0;
if (salah = 0) and (Jumlah[i,2]<>0) then for kw:=Jumlah[i,1]+1 to
Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) then butir1:=butir1+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then butir2:=butir2+1;

end;
if (salah=0) and (Jumlah[i,2]<>0) and (butir1<>0) and (butir2<>0) then if
(butir1=butir2) then salah:=0
else salah:=1;
butir1:=0;
butir2:=0;
if (salah = 0) and (Jumlah[i,2]<>0) then for kw:=Jumlah[i,1]+1 to
Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) then butir1:=butir1+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then butir2:=butir2+1;

end;
if (salah=0) and (Jumlah[i,2]<>0) and (butir1<>0) and (butir2<>0) then if
(butir1=butir2) then salah:=0
else salah:=1;
end;
{*****}
if Tetra_1 then
begin
memo3.Lines.Add(' Tetra : '+inttostr(salah));
salah:=1;
butir1:=0;
butir2:=0;
butir3:=0;
for kw:=1 to Jumlah[i,1] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then
butir1:=butir1+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir2:=butir2+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir3:=butir3+1;
end;
butir12:=0;
butir22:=0;
butir32:=0;
for kw:=Jumlah[i,1]+1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then
butir12:=butir12+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir22:=butir22+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir32:=butir32+1;
end;
butir13:=0;

```



```

butir23:=0;
butir33:=0;
for kw:=Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3]
do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then
butir13:=butir13+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir23:=butir23+1;
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir33:=butir33+1;
end;
if ((butir1+butir12+butir13)=(butir2+butir22+butir23))and
((butir1+butir12+butir13)<>(butir3+butir32+butir33)) then
begin
if (butir1 <=2) or (butir2 <=2) then if (Abs(2*jejaril +
2*butir12*jejari2 + 2*butir13*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
if (butir1 > 2) or (butir2 > 2) then if (Abs(2*jejaril*(butir1-1) +
2*butir12*jejari2 + 2*butir13*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
end;
if ((butir1+butir12+butir13)=(butir3+butir32+butir33))and
((butir1+butir12+butir13)<>(butir2+butir22+butir23)) then
begin
if (butir1 <=2) or (butir2 <=2) then if (Abs(2*jejaril +
2*butir12*jejari2 + 2*butir13*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
if (butir1 > 2) or (butir2 > 2) then if (Abs(2*jejaril*(butir1-1) +
2*butir12*jejari2 + 2*butir13*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
end;
if ((butir3+butir32+butir33)=(butir2+butir22+butir23))and
((butir1+butir12+butir13)<>(butir3+butir32+butir33)) then
begin
if (butir3 <=2) or (butir2 <=2) then if (Abs(2*jejaril +
2*butir22*jejari2 + 2*butir23*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
if (butir3 > 2) or (butir2 > 2) then if (Abs(2*jejaril*(butir2-1) +
2*butir22*jejari2 + 2*butir23*jejari3)-Ak[Hasil[i,1].Konst])< 5 then salah:=0;
end;
end;
if (salah=0) and (tetra_=1) then
begin
salah:=1;
total1:=0;total2:=0;total3:=0;
for kw:=1 to Jumlah[i,1] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) then inc(total1);
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then inc(total2);
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then inc(total3);
end;
if (total1=4) and (total2=4) and (total3=4) then salah:=0;
end;
{*****}
if Hexa_=1 then
begin
salah:=1;
total1:=0;total2:=0;total3:=0;
for kw:=1 to Jumlah[i,1] do
begin
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) then inc(total1);
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then inc(total2);
if (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then inc(total3);
end;
if (total1=4) and (total2=4) and (total3=4) then salah:=0;

```

```

    if salah=0 then
    begin
        for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
            if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=JV/2) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=JV/2)
and(hasil[i,J_uvw-kw+1].W=JV/2) then salah:=1;
            end;
        end;
        {*****}
        if Ortho_=1 then
        begin
            salah:=1;
            if (jumlah[i,1]=8) or (jumlah[i,1]=9)or(jumlah[i,1]=14)or(jumlah[i,1]=10)
then salah:=0;
            if (salah=0) and (jumlah[i,2]<>0) then if (jumlah[i,2]=8) then salah:=0
else salah:=1;
            if (salah=0) and (jumlah[i,3]<>0) then if (jumlah[i,3]=2) then salah:=0
else salah:=1;

            butir1:=0;
            butir2:=0;
            if salah = 0 then for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
            begin
                if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then
butir1:=butir1+1;
                if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir2:=butir2+1;
                end;
                if (salah=0) and (butir1<>0) and (butir2<>0)then if (butir1<>butir2) then
salah:=0 else salah :=1;

            butir1:=0;
            butir2:=0;
            if salah = 0 then for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
            begin
                if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) then
butir1:=butir1+1;
                if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0) then
butir2:=butir2+1;
                end;
                if (salah=0) and (butir1<>0) and (butir2<>0) then if (butir1<>butir2)
then salah:=0 else salah:=1;
            end;
            {*****}

            if (Jumlah[i,1] mod 2 = 0) then
                for kw:-1 to Jumlah[i,1] do
                    if adatiga[i,kw]=1 then salah:=1;

            if (Jumlah[i,1] mod 2 <> 0) then
            begin
                salah:=1;
                for kw:=1 to Jumlah[i,1] do
                    if adatiga[i,kw]=1 then salah:=0;
            end;

            if (Jumlah[i,2] mod 2 = 0) then
                for kw:= Jumlah[i,1]+1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2] do
                    if adatiga[i,kw]=1 then salah:=1;

            if (Jumlah[i,2] mod 2 <> 0) then
            begin

```

```

do
  if (jumlah[1,3] mod 2 <> 0) then
    salah:=1;
    begin
      for kw:= jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]
      do
        if (jumlah[1,3] mod 2 = 0) then
          for kw:= jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]
          do
            if adatinga[1,kw]=1 then salah:=1;
            if (jumlah[1,3] mod 2 <> 0) then
              if adatinga[1,kw]=1 then salah:=1;
            end;
            if salah:=1;
            for kw:= jumlah[1,1]+1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2] do
              if adatinga[1,kw]=1 then salah:=0;
            end;
            if adatinga[1,kw]=1 then salah:=0;
            end;
            if salah:=0;
            sistu:=0; sistv:=0; sistw:=0;
            for kw:=1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3] do
              memoz.Lines.Add('Ke : '+Intostr(1)+' A : '+Floatostr(Ak[Hasil[1,1],Konst]))+' B : '+Floatostr(Bk[Hasil[1,1],Konst]))+' C : '+Floatostr(Ck[Hasil[1,1],Konst])));
              if !49 then
                for kw:=1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3] do
                  memoz.Lines.Add(floatostr(Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).V)+' '+floatostr(Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).W)+' '+floatostr(Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).Puncak));
                if sistu mod 2 <> 0 then salah:=1;
                if sistv mod 2 <> 0 then salah:=1;
                if sistw mod 2 <> 0 then salah:=1;
                begin
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).U=0 then sistu:=sistv+1;
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).V=0 then sistv:=sistv+1;
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).W=0 then sistw:=sistw+1;
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).U=J then sistu:=sistv+1;
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).V=J then sistv:=sistv+1;
                  if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).W=J then sistw:=sistw+1;
                end;
            end;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).U=0 then sistu:=sistv+1;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).V=0 then sistv:=sistv+1;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).W=0 then sistw:=sistw+1;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).U=J then sistu:=sistv+1;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).V=J then sistv:=sistv+1;
            if Hasil[1,1],J_uvw-kw+1).W=J then sistw:=sistw+1;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;

```

```

if sisiV mod 2 <> 0 then salah:=1;
if sisiW mod 2 <> 0 then salah:=1;

sisiU:=0;sisiV:=0;sisiW:=0;
for kw:=Jumlah[i,1]+1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
begin
  if hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0 then sisiU:=sisiU+1;
  if hasil[i,J_uvw-kw+1].U=jv then sisiU:=sisiU+1;

  if hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0 then sisiV:=sisiV+1;
  if hasil[i,J_uvw-kw+1].V=jv then sisiV:=sisiV+1;

  if hasil[i,J_uvw-kw+1].W=0 then sisiW:=sisiW+1;
  if hasil[i,J_uvw-kw+1].W=jv then sisiW:=sisiW+1;

end;

if sisiu mod 2 <> 0 then salah:=1;
if sisiV mod 2 <> 0 then salah:=1;
if sisiW mod 2 <> 0 then salah:=1;

for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
  if (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=JV) and
(hasil[i,J_uvw-kw+1].W=Jv) then
  begin
    if (kw <= Jumlah[i,1]) then nilai:= 2*Jejaril/sqrt(2);
    if (kw > Jumlah[i,1])and(kw <= Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]) then nilai:=
(Jejaril+jejar2)/sqrt(2);
    if (kw > Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2])and (kw <=
Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3]) then nilai:= (Jejaril+jejar3)/sqrt(2);

    for ku := 1 to Jumlah[i,2]+Jumlah[i,1]+Jumlah[i,3] do
      begin
        if (hasil[i,J_uvw-ku+1].V = JV/2) and (hasil[i,J_uvw-ku+1].W =
JV/2)and (hasil[i,J_uvw-ku+1].U = 0) then
          begin
            if ku <= Jumlah[i,1] then nilai:=nilai+2*jejar1/sqrt(2);
            if (ku > Jumlah[i,1])and (ku <= Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]) then
nilai:=nilai+2*jejar2/sqrt(2);
            if (ku > Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2])and (ku <=
Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3]) then nilai:=nilai+2*jejar3/sqrt(2);
          end;
        end;
      end;

    end;

if abs(nilai-Ak[Hasil[i,1].Konst])>= 5 then
for kw:=1 to Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3] do
  if (hasil[i,J_uvw-kw+1].V=0) and (hasil[i,J_uvw-kw+1].U=JV) and
(hasil[i,J_uvw-kw+1].W=Jv) then
  begin
    if (kw <= Jumlah[i,1]) then nilai:= 2*Jejaril/sqrt(2);
    if (kw > Jumlah[i,1])and(kw <= Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]) then nilai:=
(Jejaril+jejar2)/sqrt(2);
    if (kw > Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2])and (kw <=
Jumlah[i,1]+Jumlah[i,2]+Jumlah[i,3]) then nilai:= (Jejaril+jejar3)/sqrt(2);

    for ku := 1 to Jumlah[i,2]+Jumlah[i,1]+Jumlah[i,3] do
      begin
        if (hasil[i,J_uvw-ku+1].U = JV/2) and (hasil[i,J_uvw-ku+1].W =
JV/2)and (hasil[i,J_uvw-ku+1].V = 0) then

```

```

begin
  if ku <= jumlah[1,1] then nlat:=nlat+2*jejar1/sqrt(2);
  if ku < jumlah[1,1] and ku <= jumlah[1,2] then
    nlat:=nlat+2*jejar2/sqrt(2);
  if (kw < jumlah[1,1] and (kw <=
    jumlah[1,1]+jumlah[1,2]) and (kw <=
    jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]) then nlat:=
    (jejar1+jejar2)/sqrt(2);
  if (kw < jumlah[1,1]+jumlah[1,2]) and (kw <=
    jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]) then nlat:=
    (jejar1+jejar2+jejar3)/sqrt(2);
  for ku := 1 to jumlah[1,2]+jumlah[1,3] do
    begin
      if (hasil[V_uvw-kw+1].W=0) and (hasil[V_uvw-kw+1].U=
        JV/2) and (hasil[V_uvw-kw+1].V = JV/2) and (hasil[V_uvw-kw+1].U =
        JV/2) then
        begin
          for kw:=1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3] do
            if abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]) >= 5 then
              begin
                if kw <= jumlah[1,1] then nlat:= 2*jejar1/sqrt(2);
                if (kw < jumlah[1,1]) and (kw <= jumlah[1,1]+jumlah[1,2]) then
                  nlat:=nlat+2*jejar1/sqrt(2);
                if (kw < jumlah[1,1]+jumlah[1,2]) and (kw <=
                  jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]) then nlat:=
                  (jejar1+jejar2)/sqrt(2);
                if (kw < jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]) and (kw <=
                  jumlah[1,1]+jumlah[1,2]+jumlah[1,3]+jumlah[1,3]) then
                  nlat:=nlat+2*jejar3/sqrt(2);
              end;
            end;
          end;
        end;
      if ortho <= 1 then
        begin
          if abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]) >= 5 then salah:=1;
          if (abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]) < konst) and (salah=0) then
            begin
              konst:=abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]);
              nlatAkhtA:= Ak[hasil[1,1].konst];
              nlatAkhtB:= Bk[hasil[1,1].konst];
              nlatAkhtC:= Ck[hasil[1,1].konst];
            end;
          if ortho=1 then
            begin
              if abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]) >= 15 then salah:=1;
              if (abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]) < konst) and (salah=0) then
                begin
                  plih:=1;
                  konst:=abs(nlat-Ak[hasil[1,1].konst]);
                  nlatAkhtA:= Ak[hasil[1,1].konst];
                  nlatAkhtB:= Bk[hasil[1,1].konst];
                  nlatAkhtC:= Ck[hasil[1,1].konst];
                end;
            end;
        end;
    end;
  end;
  for kw:=jumlah[1,1]+1 to jumlah[1,1]+jumlah[1,2] do

```



```

memo3.Lines.Add(floattostr(hasil[i,J_uvw-kw+1].U)+'
'+floattostr(hasil[i,J_uvw-kw+1].V)+' '+floattostr(hasil[i,J_uvw-kw+1].W));
End;
memo3.Lines.Add('Ke : '+inttostr(pilih)+' A :
'+floattostr(nilaiAkhirA)+' B : '+floattostr(nilaiAkhirB)+' C :
'+floattostr(nilaiAkhirC));
memo3.Lines.Add(' Jumlah atom I : '+floattostr(Jumlah[pilih,1])+' atom
II : '+floattostr(Jumlah[pilih,2])+' atom III : '+floattostr(Jumlah[pilih,3]));
End;

```

```

procedure TSDIAppForm.Kubik;

```

```

Procedure Kubik1;

```

```

Var keluar,ada,cocok: ShortInt;
    at,konstanta,n,hk : integer;
    At1,Bt1,ctl,dt:real;

```

```

Begin

```

```

    i:=0;

```

```

    J1:=0;

```

```

    kubik_:=1;

```

```

    if mm=1 then

```

```

    begin

```

```

        at1:=jejaril;

```

```

        dt:=(4*jejaril-at1)/100;

```

```

    end;

```

```

    if mm=2 then

```

```

    begin

```

```

        at1:=awalA-1;

```

```

        dt:=2/100;

```

```

    end;

```

```

    For at:=1 to 100 do

```

```

    begin

```

```

        at1:=at1+ dt;

```

```

        Benar:=0;keluar:=0;

```

```

        Inc(j1);

```

```

        For j:=1 to Data_Input.Data do

```

```

        if keluar =0 then

```

```

        begin

```

```

            Kecil:=1;

```

```

            ada:=0;

```

```

            for la:=0 to 15 do

```

```

                for ka:=0 to 15 do

```

```

                    for ha:=0 to 15 do

```

```

                    begin

```

```

                        konstanta := sqr(ha)+sqr(ka)+Sqr(la);

```

```

                        if ((KONSTANTA/sqr(At1))> 0) then

```

```

                        begin

```

```

                            Delta:= abs(sqrt(1/(KONSTANTA/sqr(At1)))-

```

```

Data_Input.InputAwal[j]);

```

```

                            if Delta< 0.05 then

```

```

                            Begin

```

```

                                ada:=1;

```

```

                                If Delta<Kecil Then

```

```

                                Begin

```

```

                                    Kecil:= Delta;

```

```

                                    H1[j]:=ha;

```

```

                                    K1[j]:=ka;

```

```

                                    L1[j]:=la;

```

```

                                End;

```

```

        End;
        end;
    end;
    if ada=1 then Inc(Benar) else keluar:=1;
end;
If Benar = Data_Input.Data then
begin
    inc(i);
    Ak[i]:=At1;
    For j:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
        H11[j,i]:=h1[j];
        K11[j,i]:=k1[j];
        L11[j,i]:=l1[j];
        Memol.Lines.Add(inttostr(H11[j,i])+' '+inttostr(K11[j,i])+'
'+inttostr(L11[j,i]));
    End;
    Memol.Lines.Add(inttostr(i)+' A : '+Floattostr(At1));
    end;

    end;
    J_Prob:=i;
    Memol.Lines.Add('Selesai');
End;

```

Procedure Multiplisitas_Kubik;

Var Lp: Array[1..50]of Real;

```

begin
    For J:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
        SinTeta:= Data_Input.Lmd/(2* Data_Input.InputAwal[J]);
        CosTeta:= Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
        Cos2Teta:= Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
        Lp[j]:= (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
    End;
    For J1:=1 to J_Prob do
    Begin
        (Memo3.Lines.Add(' J1 :'+inttostr(j1)+' A :'+Floattostr(Ak[J1])+' C
'+floattostr(Ck[j1])));
        For J:=1 to Data_Input.Data do
        Begin
            If (H11[J,J1]<>K11[J,J1]) And (K11[J,J1]<>L11[J,J1]) And
(H11[J,J1]<>L11[J,J1]) then Mp:=48;
            If ((H11[J,J1]= K11[J,J1]) And (K11[J,J1]<>L11[J,J1])) Or
((H11[J,J1]=L11[J,J1]) And (H11[J,J1]<>K11[J,J1])) Or
((L11[J,J1]=K11[J,J1]) And (H11[J,J1]<>K11[J,J1])) then Mp:=24;
            If (H11[J,J1]=0) or (K11[J,J1]=0) or (L11[J,J1]=0) then
            If (H11[J,J1]<>K11[J,J1]) And (K11[J,J1]<>L11[J,J1]) And
(H11[J,J1]<>L11[J,J1]) then Mp:=24
            Else Mp:=12;
            If (H11[J,J1]=K11[J,J1]) And (L11[J,J1]=K11[J,J1]) then Mp:=8;
            If ((H11[J,J1]=0) And (K11[J,J1]=0)) Or ((K11[J,J1]=0) And (L11[J,J1]=0)) Or
((H11[J,J1]=0) And (L11[J,J1]=0)) then Mp:=6;
            {mp:=48;
            if
            ((H11[J,J1]=K11[J,J1]) or (K11[J,J1]=L11[J,J1]) or (H11[J,J1]=L11[J,J1])) and ((H11[J,
J1]<>0) and (K11[J,J1]<>0) And (L11[J,J1]<>0)) then mp:=24;
            if (H11[J,J1]=0) and (K11[J,J1]<>0) And (L11[J,J1]<>0) then
            if (K11[J,J1]<>L11[J,J1]) then mp:=24 else mp:=12;

```

```

if (K11{J,J1}=0) and (H11{J,J1}<>0)And(L11{J,J1}<>0) then
  if (H11{J,J1}<>L11{J,J1})then mp:=24 else mp:=12;
if (L11{J,J1}=0) and (K11{J,J1}<>0)And(H11{J,J1}<>0) then
  if (K11{J,J1}<>H11{J,J1})then mp:=24 else mp:=12;
if (H11{J,J1}=K11{J,J1}) And (L11{J,J1}=K11{J,J1}) then Mp:=8;
if (H11{J,J1}=0) and (K11{J,J1}=0)And(L11{J,J1}<>0) then MP:=6;
if (H11{J,J1}=0) and (K11{J,J1}<>0)And(L11{J,J1}=0) then MP:=6;
if (H11{J,J1}<>0) and (K11{J,J1}=0)And(L11{J,J1}=0) then MP:=6;)
F2{j,j1}:= Data_Input.Intensitas[J]/(Lp[j]*Mp);
{memo3.Lines.Add(' Data ke :'+inttostr(j)+' Mp :'+inttostr(Mp)+' F2
:'+floattostr(F2{j,j1}));)
End;
End;
end;

```

```

{#####}
}
Begin
  Memol.Lines.Add('Hasil proses uji kubik');
  Kubik1;
  Multiplisitas_Kubik;
  uvw;
End;

procedure TSDIAppForm.Tetragonal;
{Awal Procedure Tetragonal}
Procedure Tetragonal1;
Var at,ct,keluar,ada,cocok: ShortInt;
    konstanta,n,hk : integer;
    At1,Bt1,ct1,dt,dt2:real;
Begin
  i:=0;
  J1:=0;
  Tetra_:=1;
  if mm=1 then
  begin
    at1:=jejaril;
    dt:=4*jejaril/50;
  end;
  if mm=2 then
  begin
    at1:= AwalA-1;
    dt:=2/50;
  end;
  For at:=1 to 50 do
  begin
    at1:=at1+ dt;
    if mm=1 then
    begin
      ct1:=jejaril;
      dt2:=6*jejaril/50
    end;
    if mm=2 then
    begin
      ct1:=awalC-1;
      dt2:=2/50;
    end;
    For ct:=1 to 50 do
    begin
      ct1:=ct1+ dt2;

```

```

Benar:=0;keluar:=0;
Inc(j1);

For j:=1 to Data_Input.Data do
if keluar =0 then
begin

    Kecil:=1;
    ada:=0;
    for Ka:=0 to 15 do
    for ha:=0 to 15 do
    for La:=0 to 15 do
    begin
        konstanta := sqr(ha)+sqr(ka);
        if ((KONSTANTA/sqr(At1)+sqr(la/Ct1))> 0) then
        begin
            Delta:= abs(sqrt(1/(KONSTANTA/sqr(At1)+sqr(la/Ct1)))-
Data_Input.InputAwal[j]);
            if Delta< 0.05 then
            Begin
                ada:=1;
                If Delta<Kecil Then
                Begin
                    Kecil:= Delta;
                    H1[j]:=ha;
                    K1[j]:=ka;
                    L1[j]:=la;
                End;
                (Ak[j1]:=At;
                Ck[j1]:=Ct; )
                (Lreta(j, j1):=la;
                hk1[J, J1]:=konst[hk];

memo3.Lines.Add(floattostr(sqrt((1/(KONST[hk]/sqr(At1)+sqr(la/Ct1))))));
                memo3.Lines.Add(' '+floattostr(Data_Input.InputAwal[j]));
                memo3.Lines.Add(' A :'+floattostr(at1)+' C
:'+floattostr(ct1));)
            End;
            end;
        end;
        if ada=1 then Inc(Benar) else keluar:=1;
    end;
    If Benar = Data_Input.Data then
    begin
        inc(i);
        Ak[i]:=At1;
        Ck[i]:=Ct1;
        For j:=1 to Data_Input.Data do
        Begin
            H11[j, i]:=h1[j];
            K11[j, i]:=k1[j];
            L11[j, i]:=l1[j];

Memol.Lines.Add(inttostr(H11[j, i])+inttostr(K11[j, i])+inttostr(L11[j, i]));
        End;
        Memol.Lines.Add(inttostr(i)+' A : '+Floattostr(At1)+' C :
'+Floattostr(Ct1));
        end;
    end;
    end;
    J_Prob:=i;

```

```

Memor.Lines.Add('Selesai');
End;

Procedure Multiplisitas_TetraGonal;
Var Lp: Array[1..50] of Real;
begin
  For J:=1 to Data_Input.Data do
  Begin
    SinTeta:= Data_Input.Lmd/(2* Data_Input.InputAwal[J]);
    CosTeta:= Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
    Cos2Teta:= Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
    Lp[j]:= (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
  End;
  For J1:=1 to J_Prob do
  Begin
    For J:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
      mp:=16;

      if (H11[J, J1]<>K11[J, j1])And(L11[J, J1]<>0) then Mp:=16;
      if (H11[J, J1]=K11[J, j1])and(H11[J, J1]<>L11[J, j1]) then Mp:=8;
      if
      ((H11[J, J1]=0)or(K11[J, j1]=0))and((H11[J, J1]<>L11[J, j1])or(L11[J, J1]<>K11[J, j1]))
      ) then Mp:=8;
      if (H11[J, J1]=K11[J, J1]) and (H11[J, J1]=0) then Mp:=2;
      if (H11[J, J1]<>K11[J, j1])and (L11[J, J1]=0) then Mp:=8;
      if (H11[J, J1]=K11[J, j1])and (L11[J, J1]=0) then Mp:=4;
      if (L11[J, J1]=0)and((H11[J, J1]=0) or(K11[J, J1]=0)) then mp:=4;
      F2[j, j1]:= Data_Input.Intensitas[J]/(Lp[j]*Mp);
    End;
  End;
end;

{Akhir Procedure Tetragonal}
#####
}
Begin
  Memor.Lines.Add('Hasil proses uji Tetragonal');
  Tetragonal1;
  Multiplisitas_TetraGonal;
  UVW;

End;

procedure TSDIAppForm.Hexagonal;
{Awal Procedure Hexagonal}
Procedure HexGon_1;
Var at, ct, keluar, ada, cocok: ShortInt;
    konstanta, n, hk : integer;
    At1, ct1, dt, dt2: real;
Begin
  hexa_:=1;
  i:=0;
  J1:=0;
  if mm=1 then
  begin
    at1:=2*awalA;
    dt:= 4*awalA/50;
  end;

```

```

if mm=2 then
begin
  at1:=awalA-2;
  dt:= 4/50;
end;

For at:=1 to 50 do
begin
  at1:=at1+ dt;

  if mm=1 then
  begin
    ct1:=2*awalC;
    dt2:= 10*(awalC/50);
  end;
  if mm=2 then
  begin
    ct1:=awalC-2;
    dt2:= 4/50;
  end;
  For ct:=1 to 50 do
  begin
    ct1:=ct1+ dt2;
    Benar:=0;keluar:=0;
    Inc(j1);

    For j:=1 to Data_Input.Data do
    if keluar =0 then
    begin
      Kecil:=1;
      ada:=0;
      for Ka:=0 to 15 do
        for ha:=0 to 15 do
          for La:=0 to 15 do
            begin
              konstanta := 4*(sqr(ha)+sqr(ka)+(ha*ka));
              if ((KONSTANTA/(3*sqr(At1))+sqr(la/Ct1))> 0) then
                begin
                  Delta:= abs(sqrt(1/(KONSTANTA/(3*sqr(At1))+sqr(la/Ct1)))-
Data_Input.InputAwal[j]);
                  if Delta < 0.05 then
                    Begin
                      ada:=1;
                      If Delta < kecil then
                        Begin
                          Kecil:=Delta;
                          H1[j]:=ha;
                          K1[j]:=ka;
                          L1[j]:=la;
                        End;
                      End;
                    end;
                  end;
                end;
              if ada=1 then Inc(Benar) else keluar:=1;
            end;
          If Benar = Data_Input.Data then
            begin
              inc(i);
              Ak[i]:=At1;
              Ck[i]:=Ct1;
              For j:=1 to Data_Input.Data do

```

```

Begin
  H11[j,i]:=h1[j];
  K11[j,i]:=k1[j];
  L11[j,i]:=l1[j];

Memol.Lines.Add(inttostr(H11[j,i])+inttostr(K11[j,i])+inttostr(L11[j,i]));
  End;
  Memol.Lines.Add(inttostr(i)+' A : '+Floattostr(At1)+' C :
'+Floattostr(Ct1));
  end;
  end;
  end;
  J_Prob:=i;
end;
Procedure Multiplisitas_HexGon;
Var Lp: Array[1..50]of Real;
begin
  For J:=1 to Data_Input.Data do
  Begin
    SinTeta:= Data_Input.Lmd/(2* Data_Input.InputAwal[J]);
    CosTeta:= Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
    Cos2Teta:= Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
    Lp[j]:= (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
  End;
  For J1:=1 to J_Prob do
  Begin
    For J:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
      if (H11[J,J1]<>K11[J,J1]) and (L11[J,J1]<>0) then Mp:=24;
      if (H11[J,J1]=K11[J,J1]) and (L11[J,J1]<>H11[J,j1]) then Mp:=12;
      if ((H11[J,J1]<>L11[J,J1])or(K11[J,j1]<>L11[J,j1])) and ((H11[J,J1]=0) or
(K11[J,J1]=0)) then Mp:=12;
      if (H11[J,J1]=K11[J,J1]) and (H11[J,J1]=0) then Mp:=2;
      if (H11[J,J1]<>K11[J,J1]) and (L11[J,J1]=0) then Mp:=12;
      if (H11[J,J1]=K11[J,J1]) and (L11[J,J1]=0) then Mp:=6;
      if ((L11[J,J1]=0) or (H11[J,J1]=0)) and (L11[J,J1]=0) then Mp:=6;
      F2[j,j1]:= Data_Input.Intensitas[J]/(Lp[j]*Mp);
    End;
  End;
end;

(Akhir Procedure Hexagonal)
;#####
)
Begin
  Memol.Lines.Add('Hasil proses uji Hexagonal');
  HexGon_1;
  Multiplisitas_HexGon;
  UVW;
End;

procedure TSDIAppForm.Orthorhombic;
(Awal Procedure Orthorombic)
Procedure Orthorhombic_Satu;
Var at,ct,bt,keluar,ada,cocok: ShortInt;
  konstanta,n,hk,lost : integer;
  At1,ct1,bt1,dt,dt2,dt3: real;
  dd,di : array[0..100] of real;

Begin
  ortho_:=1;

```

```

i:=0;
Ji:=0;
if mm=1 then
begin
  ct1:=2*awalC;
  dt3:= 4*awalC/50;
end;
if mm=2 then
begin
  ct1:=awalC-1;
  dt3:= 0.12;
end;
if i <=50 then
For ct:=1 to 50 do
  begin
    ct1:=ct1+ dt3;
    if mm=1 then
begin
  bt1:=2*awalB;
  dt2:= 4*awalB/50;
end;
if mm=2 then
begin
  bt1:=awalB;
  dt2:= 0.12;
end;
if i <=50 then
  For bt:=1 to 50 do
  begin
    bt1:=bt1+ dt2;
    if mm=1 then
begin
  at1:=2*awalA;
  dt:= 4*awalA/50;
end;
if mm=2 then
begin
  at1:=awalA;
  dt:= 0.12;
end;
if i <=50 then
  For at:=1 to 50 do
  begin
    at1:=at1+ dt;
    Benar:=0;keluar:=0;
    Inc(j1);

    For j:=1 to Data_Input.Data do
    if keluar =0 then
    begin
      ada:=0;
      Kecil:=1;
      for Ka:=1 to 15 do
        for ha:=0 to 15 do
          for La:=0 to 15 do
            if ((1/(sqr(ha/at1)+sqr(ka/bt1)+sqr(la/Ct1))) > 0) then
              begin
                Delta:= abs(sqrt(1/(sqr(ha/at1)+sqr(ka/bt1)+sqr(la/Ct1))))-
Data_Input.InputAwal[j]);
                if Delta < 0.05 then
                  Begin

```



```

if Delta < keci1 then
  Begin
    Keci1:=Delta;
    H1[j]:=ha;
    K1[j]:=ka;
    L1[j]:=la;
  End;
  Inc(ada);
  dd[j]:=ada;
End;

if ada>0 then Inc(Benar) else kejuar:=1;
end;

if i <= 50 then
  If Benar = Data_Input.Data then
  begin
    Inc(i);
    Akt1:=Akt;
    Bk1:=Bt;
    Ck1:=Ct;
    For j:=1 to Data_Input.Data do
      Begin
        H1[j,1]:=h1[j];
        K11[j,1]:=k1[j];
        L11[j,1]:=l1[j];
        If i=49 then
          Memoi.Lines.Add(IntToStr(H11[j,1])+IntToStr(K11[j,1])+IntToStr(L11[j,1]));
        End;
        Memoi.Lines.Add(IntToStr(i)+' ==> A : '+FloatToStr(Akt)+' B : '+FloatToStr(Bt)+' C : '+FloatToStr(Ct));
      end;
    end;
    j_Prob:=i;
  end;
end;

Procedure Multiplicas_Orthombic;
Var lp: Array[1..50] of Real;
Begin
  For j:=1 to Data_Input.Data do
    Begin
      Sinteta:= Data_Input.Lmd/(2* Data_Input.InputAwal[j]);
      Costeta:= Sqr(1-Sqr(Sinteta));
      CosZeta:= Sqr(Costeta)+Sqr(Sinteta);
      lp[j]:= (1+Sqr(CosZeta))/(Sqr(Sinteta)+CosZeta);
    End;
  For j1:=1 to j_Prob do
    Begin
      For j:=1 to Data_Input.Data do
        If (H11[j,j1]>0) and (L11[j,j1]<>0) and (K11[j,j1]<>0) then Mp:=8;
        If (H11[j,j1]=0) and (L11[j,j1]<>0) and (K11[j,j1]<>0) then Mp:=4;
        If (L11[j,j1]=0) and (K11[j,j1]<>0) and (H11[j,j1]<>0) then Mp:=4;
        If (K11[j,j1]=0) and (H11[j,j1]<>0) and (L11[j,j1]<>0) then Mp:=4;
        If (H11[j,j1]=L11[j,j1]=0) and (K11[j,j1]<>0) then Mp:=2;
        If (H11[j,j1]=L11[j,j1]<>0) and (K11[j,j1]=0) then Mp:=2;
        If (H11[j,j1]=K11[j,j1]<>0) and (L11[j,j1]=0) then Mp:=2;
        If (H11[j,j1]=0) and (L11[j,j1]<>0) and (K11[j,j1]<>0) then Mp:=8;
      End;
    End;
  For j:=1 to Data_Input.Data do
    End;
  End;
  Var lp:= Array[1..50] of Real;
  Procedure Multiplicas_Orthombic;
end;

```

```

End;
end;

{Akhir Procedure Orthorombic}
{#####}
}
Begin
  {Memor.Lines.Add('Hasil proses uji Orthorhombic');}
  Orthorhombic_Satu;
  Multiplisitas_Orthorhombic;
  UVW;
End;

procedure TSDIAppForm.Analisa(Sender: TObject);
begin
  Memor.Lines.Clear;
  If Edit2.text <> 'No Data In Memory' Then
  Begin
    awalA:=jejaril;
    awalB:=jejaril;
    awalC:=jejaril;
    for mm:=1 to 2 do
    begin
      Orthorhombic;
      awalA:=NilaiAkhira;
      awalB:=NilaiAkhira;
      awalC:=NilaiAkhira;
    end;
  End
  Else
  Begin
    ShowMessage('Belum ada data yang dimuat di memory');
  End;
end;

procedure TSDIAppForm.FormCreate(Sender: TObject);
begin
  jejaril:=0;
  jejaril2:=0;
  jejaril3:=0;

  kubik_ :=0;
  Tetra_ :=0;
  Hexa_ :=0;
  Ortho_ :=0;

  jejaril:=2.27;
  jejaril2:=1.72;
  jejaril3:=1.09;
end;

end.

```

**DATA SIFAT-SIFAT ATOM YANG DIGUNAKAN DALAM
PEMROGRAMAN**

APENDIKS II

B Boron

Atomic number: 5
 Group: Non-Metal
 Lattice parm. a: 8.80 Å
 Lattice parm. c or axial angle: 5.05 Å
 Atomic volume: 4.6 cm³/mol
 Melting point: 2079°C
 Covalent radius: 0.82 Å
 Electronegativity: 2.04
 Oxydation states:
 First ionization potential: 8.2980 V
 Third ionization potential: 37.93 V
 Heat of fusion: 50.20 kJ/mol
 Electrical conductivity: 1.0e-12
 Density @ 293 K: 2.34 g/cm³
 Coefficient of therm. exp.: 4.7

Atomic weight: 10.811
 Crystal Structure: Rhombohedral
 Lattice parm. b:
 Shells: 2,3
 Orbitals: [He] 2s² 2p¹
 Boiling point: 4000°C
 Atomic radius: 1.17 Å
 Ionic radius: .23 (+3) Å
 Specific heat: 1.02 J/gK
 Second ionization potential: 25.154 V
 Heat of vaporization: 489.70 V
 Thermal conductivity: 0.270 W/cmK
 Valence: 3
 Modulus of elasticity: 441 10³ MPa
 Specific gravity 2.34 (20°C)
 User1:
 User2:

User3:

X-ray emission energy/wavelength:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	183.410	0	0	0	0	0
Å	67.6001	0	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	188	0	0	0	0	0	0	0	0
Å	65.9497	0	0	0	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	0.1%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: BO-ron

Name origin: From Arabic and Persian words for borax.

Description: Hard, brittle, lustrous black semimetal. Exists in the earth's crust at an average proportion of about 10 parts per million.

Discovered by: Sir H. Davy, J.L. Gay-Lussac, L.J. Thénard

Year: 1808

Location: England/France

Sources: Obtained from kernite, a kind of borax (Na₂B₄O₇·10H₂O). High purity boron is produced by electrolysis of molten potassium fluoborate and potassium chloride (KCl).

Uses: Used with titanium tungsten to make heat resistant alloys for jets ,rockets.

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
B10	19.7%	10.0129	3		Stable
B11	80.3%	11.0093	3/2		Stable

P Phosphorus**Atomic number:** 15**Group:** Non-Metal**Lattice parm. a:** 3.3137 Å**Lattice parm. c or axial angle:** 4.3765 Å**Atomic volume:** 17.0 cm³/mol**Melting point:** 44.1°C**Covalent radius:** 1.06 Å**Electronegativity:** 2.19**Oxydation states:** ±3,5,7**First ionization potential:** 10.4867 V**Third ionization potential:** 30.18 V**Heat of fusion:** 0.657 kJ/mol**Electrical conductivity:** 1.0e-17**Density @ 293 K:** 1.82 g/cm³**Coefficient of therm. exp.:** 127**User1:****User3:****X-ray emission energy/wavelength:**

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	2013.4	2136.28	0	0	0	0
Å	6.15801	5.8038	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	2146	0	132	0	0	0	0	0	0
Å	5.77751	0	93.9283	0	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
%	6%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: FOS-fer-es**Name origin:** Greek: phosphoros, (bringer of light).**Description:** Soft white waxy phosphorescent solid, brownish-red powder or black solid.**Discovered by:** Hennig Brand**Year:** 1669 **Location:** Germany**Sources:** Found most often in phosphate rock. Pure phosphorus is obtained by heating a mixture of phosphate rock, coke, and silica to about 1450 °C.**Uses:** Used in the production of fertilizers and detergents. Some is used in fireworks, safety matches, and incendiary weapons. Also some applications for it and some of its compounds which glow in the dark.**Element Nuclides:**

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
P31	100%	30.9938	1/2		Stable
P32	0%	31.9739	1	14.28d	β ⁻
P33	0%	32.9717	1/2	24.3d	β ⁻

O Oxygen

Atomic number: 8	Atomic weight: 15.9994
Group: Non-Metal	Crystal Structure: Cubic
Lattice parm. a: --	Lattice parm. b:
Lattice parm. c or axial angle:	Shells: 2,8
Atomic volume: 14.0 cm ³ /mol	Orbitals: [He] 2s ² 2p ⁴
Melting point: -218.4°C	Boiling point: -182.962°C
Covalent radius: 0.73 Å	Atomic radius: 0.65 Å
Electronegativity: 3.44	Ionic radius: 1.40 (-2) Å
Oxydation states:	Specific heat: 0.92 J/gK
First ionization potential: 13.6181 V	Second ionization potential: 35.117 V
Third ionization potential: 54.934 V	Heat of vaporization: 3.4099 V
Heat of fusion: 0.22259 kJ/mol	Thermal conductivity: 0.0002674 W/cmK
Electrical conductivity: --	Valence: 2
Density @ 293 K: 0.001429 g/cm ³	Modulus of elasticity: --
Coefficient of therm. exp.: 780	Specific gravity 1.14 (liquid, -182.96°C)
User1:	User2:
User3:	

X-ray emission energy/wavelength:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	524.917	0	0	0	0	0
Å	23.62	0	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	531.7	0	0	0	0	0	0	0	0
Å	23.3187	0	0	0	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

KA	KB	LA	LB	MA	MB
0.6%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: OK-si-jen

Name origin: Greek: oxys and genes, (acid former).

Description: Colorless, odorless, tasteless gas; pale blue liquid. Third most abundant element in the universe. It is the most abundant element in the earth's crust, and makes up almost 21% of the atmosphere.

Discovered by: Joseph Priestly, Carl Wilhelm Scheele

Year: 1774 **Location:** England/Sweden

Sources: Obtained primarily from liquid air by fractional distillation. Small amounts are made in the laboratory by electrolysis of water or heating potassium chlorate (KClO₃) with manganese dioxide (MnO₂) catalyst.

Uses: Used in steel making, welding, and supporting life. Naturally occurring ozone (O₃) in the upper atmosphere shields the earth from ultraviolet radiation.

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
O15	0%	15	1/2	122.2s	β ⁺ , ε
O16	99.759%	15.99949	0		Stable
O17	0.037%	16.9991	5/2		Stable

AS Arsenic**Atomic number:** 33**Group:** Non-Metal**Lattice parm. a:** 4.1319 Å**Lattice parm. c or axial angle:** a=54° 8'**Atomic volume:** 13.1 cm³/mol**Melting point:** 817°C @ 28 atmos.**Covalent radius:** 1.20 Å**Electronegativity:** 2.18**Oxydation states:** ±3,5**First ionization potential:** 9.8152 V**Third ionization potential:** 28.351 V**Heat of fusion:** --**Electrical conductivity:** 0.0345**Density @ 293 K:** 5.72 g/cm³**Coefficient of therm. exp.:** 15.4**User1:****User3:****X-ray emission energy/wavelength:**

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	10532.1	11726.6	1282.05	1317.02	0	0
Å	1.17721	1.0573	9.67087	9.41409	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	11867	1527	1359	1324	0	0	0	0	0
Å	1.04479	8.11954	9.12328	9.36446	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	56.8%	0%	1.2%	0%	0%	0%

Pronounced: AR-s'n-ik**Name origin:** Greek: arsenikon; Latin: arsenicum, (both names for yellow pigment).**Description:** Steel-gray, brittle semi-metal.**Discovered by:** Known to the ancients.**Year:** Unknown **Location:** Unknown**Sources:** Found in mispikkel (arsenopyrite)

Uses: Many of its compounds are deadly poison and used as weed killer and rat poison. Conducts electricity. Used in semiconductors. Some compounds, called arsenides, are used in the manufacture of paints, wallpapers, and ceramics.

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
As71	0%	71	5/2	2.72d	ϵ, β^+
As72	0%	72	2	26.0h	β^+, ϵ
As73	0%	73	3/2	80.3d	ϵ
As74	0%	73.924	2	17.78d	$\epsilon, \beta^+, \beta^-$
As75	100%	74.9216	3/2		Stable
As76	0%	75.922	2	26.3h	β^-

Al Aluminum

Atomic number: 13
 Group: Metal
 Lattice parm. a: 4.0497 Å
 Lattice parm. c or axial angle:
 Atomic volume: 10.0 cm³/mol
 Melting point: 660.37°C
 Covalent radius: 1.18 Å
 Electronegativity: 1.50
 Oxydation states:
 First ionization potential: 5.9858 V
 Third ionization potential: 28.447 V
 Heat of fusion: 10.790 kJ/mol
 Electrical conductivity: 0.377
 Density @ 293 K: 2.702 g/cm³
 Coeficient of therm. exp.: 23.1
 User1:
 User3:

Atomic weight: 26.981539
 Crystal Structure: Cubic. Face centered
 Lattice parm. b:
 Shells: 2,8,3
 Orbitals: [Ne] 3s² 3p¹
 Boiling point: 2519°C
 Atomic radius: 1.82 Å
 Ionic radius: .54 (+3) Å
 Specific heat: 0.90 J/gK
 Second ionization potential: 18.828 V
 Heat of vaporization: 293.40 V
 Thermal conductivity: 2.37 W/cmK
 Valence: 3
 Modulus of elasticity: 70.5 10³ MPa
 Specific gravity 2.699 (20°C)
 User2:

X-ray emission energy/wavelength:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	1486.61	1553.33	0	0	0	0
Å	8.34014	7.98191	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	1560	87.01	72.78	0	0	0	0	0	0
Å	7.94778	142.496	170.356	0	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	3.6%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: ah-LOO-men-em

Name origin: Latin: alumen, aluminis, (alum).

Description: Soft, lightweight, silvery-white metal. Third most abundant element in the earth's crust.

Discovered by: Hans Christian Oersted

Year: 1825 Location: Denmark

Sources: Never occurs in free form. Obtained by electrolysis from bauxite (Al₂O₃).

Uses: Used for many purposes from airplanes to beverage cans. Too soft in its pure form so less than 1% of silicon or iron is added, which hardens and strengthens it.

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
Al ²⁶	0%	25.9868	5	7.3E05y	β ⁺ , ε
Al ²⁷	100%	26.9815	5/2		Stable
Al ²⁸	0%	28	3	2.25m	β ⁻



Ga Gallium**Atomic number:** 31**Group:** Metal**Lattice parm. a:** 4.523 Å**Lattice parm. c or axial angle:** 4.524 Å**Atomic volume:** 11.8 cm³/mol**Melting point:** 29.78°C**Covalent radius:** 1.26 Å**Electronegativity:** 1.81**Oxydation states:****First ionization potential:** 5.9993 V**Third ionization potential:** 30.71 V**Heat of fusion:** 5.590 kJ/mol**Electrical conductivity:** 0.0678**Density @ 293 K:** 5.907 g/cm³**Coefficient of therm. exp.:** 19.7**User1:****User3:****X-ray emission energy/wavelength:**

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	9243.12	10264.6	1097.99	1124.79	0	0
Å	1.34138	1.20789	11.292	11.023	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	10367	1298	1143	1116	0	103.6	0	0	0
Å	1.19596	9.55203	10.8474	11.1098	0	119.677	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	51%	0%	0.9%	0%	0%	0%

Pronounced: GAL-i-em**Name origin:** Latin: Gallia (France).**Description:** Soft, blue-white metal.**Discovered by:** Paul Émile Lecoq de Boisbaudran**Year:** 1875**Location:** France**Sources:** Found throughout the crust in minerals like bauxite, germanite and coal.**Uses:** Used in semiconductor production. It is used in making LEDs (light-emitting diodes) and GaAs laser diodes.**Element Nuclides:**

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
Ga66	0%	66	0	9.5h	β^+ , ϵ
Ga67	0%	67	3/2	3.260d	ϵ
Ga68	0%	67.928	1	1.130h	β^+ , ϵ
Ga69	60.4%	68.9256	3/2		Stable
Ga71	39.6%	70.9247	3/2		Stable
Ga72	0%	72	3	14.10h	β^-

Mg Magnesium

Atomic number: 12
 Group: Alkali Earth Metal
 Lattice parm. a: 3.2095 Å
 Lattice parm. c or axial angle: 5.2107 Å
 Atomic volume: 13.97 cm³/mol
 Melting point: 648.8°C
 Covalent radius: 1.36 Å
 Electronegativity: 1.31
 Oxydation states:
 First ionization potential: 7.6462 V
 Third ionization potential: 80.143 V
 Heat of fusion: 8.954 kJ/mol
 Electrical conductivity: 0.226
 Density @ 293 K: 1.738 g/cm³
 Coefficient of therm. exp.: 24.8

User1:

User3:

X-ray emission energy/wavelength:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	1253.64	1295.59	0	0	0	0
Å	9.89003	9.5698	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	1305	62.84	49.73	49.45	0	0	0	0	0
Å	9.5008	197.303	249.317	250.729	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	2.7%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: mag-NEE-zih-em

Name origin: From Magnesia ancient city in district of Thessaly, Greece.

Description: Lightweight, malleable, silvery-white metal. Eighth most abundant element in the universe.
 Seventh most abundant element in the earth's crust.

Discovered by: Sir Humphrey Davy

Year: 1808 Location: England

Sources: Usually obtained by electrolysis of melted magnesium chloride (MgCl₂) found in sea water. Each cubic mile of seawater contains about 12 billion pounds of magnesium.

Uses: Used in alloys to make airplanes, missiles and other uses for light metals. Has structural properties similar to aluminium. But since it is flammable at temperatures of burning gasoline, its uses are limited.

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
Mg24	78.7%	23.985	0		Stable
Mg25	10.13%	24.9858	5/2		Stable
Mg26	11.17%	25.9826	0		Stable
Mg27	0%	27	1/2	9.45m	β ⁻
Mg28	0%	28	0	21.0h	β ⁻

S Sulfur

Atomic number: 16
 Group: Non-Metal
 Lattice parm. a: 10.4650 Å
 Lattice parm. c or axial angle: 24.4869 Å
 Atomic volume: 15.5 cm³/mol
 Melting point: 115.21°C
 Covalent radius: 1.02 Å
 Electronegativity: 2.58
 Oxydation states: ±2,4,6
 First ionization potential: 10.3600 V
 Third ionization potential: 34.83 V
 Heat of fuslon: 1.7175 kJ/mol
 Electrical conductivity: 0.5e-23
 Density @ 293 K: 2.07 g/cm³
 Coefficient of therm. exp.: 70
 User1:
 User3:

Atomic weight: 32.066
 Crystal Structure: Orthorhombic
 Lattice parm. b: 12.8665 Å
 Shells: 2,8,6
 Orbitals: [Ne] 3s² 3p⁴
 Boiling point: 444.6°C
 Atomic radius: 1.09 Å
 Ionic radius: .29 (+6) Å
 Specific heat: 0.71 J/gK
 Second ionization potential: 23.33 V
 Heat of vaporization: --
 Thermal conductivity: 0.00269 W/cmK
 Valence: 2,4,6
 Modulus of elasticity: 19 10⁹ MPa
 Specific gravity 2.07 (20°C rhombic)
 User2:

X-ray emission energy/wavelength:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
eV	2307.52	2464.14	0	0	0	0
Å	5.3731	5.03159	0	0	0	0

X-ray absorption energy/wavelength:

	K	L-I	L-II	L-III	M-I	M-II	M-III	M-IV	M-V
eV	2472	0	0	165	0	0	0	0	0
Å	5.01559	0	0	75.1427	0	0	0	0	0

X-ray fluorescent yield:

	KA	KB	LA	LB	MA	MB
	7.6%	0%	0%	0%	0%	0%

Pronounced: SUL-fer

Name origin: Latin: sulphur (brimstone).

Description: Tasteless, odorless, pale yellow, brittle solid. Tenth most abundant element in the universe.

Discovered by: Known to the ancients.

Year: Unknown Location: Unknown

Sources: Found in pure form and in ores like cinnabar, galena, sphalerite and stibnite. Pure form is obtained from underground deposits by the Frasch process.

Uses: Used in matches, gunpowder, medicines, rubber and pesticides, dyes and insecticides. Also for making sulfuric acid (H₂SO₄).

Element Nuclides:

Nuclide	Abundance	Weight	Spin	Half-life	Decay Modes
S32	95.02%	31.9721	0		Stable
S33	0.76%	32.9714	3/2		Stable
S34	4.22%	33.9679	0		Stable
S35	0%	34.969	3/2	87.2d	β ⁻
S36	0.014%	35.9671	0		Stable