

6552 P.A  
IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN  
DIREKTORAT JENDERAL PENDIDIKAN TINGGI  
UNIVERSITAS AIRLANGGA

**PENENTUAN POSISI ATOM DAN STRUKTUR KRISTAL  
BAHAN HASIL DATA DIFRAKTOMETER SINAR X JDX-3530  
DENGAN PROGRAM PASCAL DAN AUTOCAD 12**

**SELESAI PAMERAN**

**01 OCT 1997**

Ketua Peneliti :

**DYAH HIKMAWATI, S.Si.**

**Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



**LEMBAGA PENELITIAN UNIVERSITAS AIRLANGGA**

Dibiayai Oleh : DIP OPF Unair 1996/1997

SK.Rektor Nomor : 6229/J03/PL/1996

Nomor : 69

- FISIKA - EKSPERIMEN

IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN  
DIREKTORAT JENDERAL PENDIDIKAN TINGGI  
UNIVERSITAS AIRLANGGA

100-c  
kk  
530.072  
Pen

**PENENTUAN POSISI ATOM DAN STRUKTUR KRISTAL  
BAHAN HASIL DATA DIFRAKTOMETER SINAR X JDX-3530  
DENGAN PROGRAM PASCAL DAN AUTOCAD 12**

3000042973141 - 1

**Ketua Peneliti :**

**DYAH HIKMAWATI, S.Si.**

**Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



MILIK  
PERPUSTAKAAN  
"UNIVERSITAS AIRLANGGA"  
SURABAYA



30000429731411

**LEMBAGA PENELITIAN UNIVERSITAS AIRLANGGA**

**Dibiayai Oleh : DIP OPF Unair 1996/1997  
SK.Rektor Nomor : 6229/J03/PL/1996  
Nomor : 69**

SELESAI

IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN

DIREKTORAT JENDERAL PENDIDIKAN TINGGI

UNIVERSITAS AIRLANGGA

**PENENTUAN POSISI ATOM DAN STRUKTUR KRISTAL  
BAHAN HASIL DATA DIFRAKTOMETER SINAR X JDX-3530  
DENGAN PROGRAM PASCAL DAN AUTOCAD 12**

3000042973141

**TIM PENELITI**

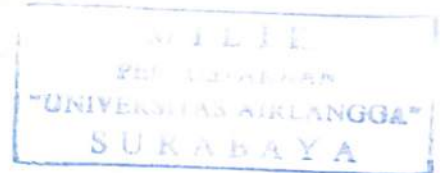
**KETUA** : Dyah Hikmawati, S.Si.

**ANGGOTA** : Dr. H. Redjani

Drs. Bambang Suprijanto

Drs. Edi Winarko

Siti Wafiroh, S.Si.



LEMBAGA PENELITIAN UNIVERSITAS AIRLANGGA

DIBIYAI OLEH : DIP OPF UNAIR 1996/1997

SK. REKTOR NOMOR 6229/P3/PL/1996 NO. URUT : 69

TANGGAL 1 AGUSTUS 1996



DEPARTEMEN PENDIDIKAN DAN KEBUDAYAAN  
IR-PERPUSTAKAAN UNIVERSITAS AIRLANGGA  
**UNIVERSITAS AIRLANGGA**  
**LEMBAGA PENELITIAN**

- |                                    |                                 |  |
|------------------------------------|---------------------------------|--|
| 1. Puslit dan Pembangunan Regional | 4. Puslit Lingkungan Hidup      | 8. Puslit Kependudukan dan Pembangunan |
| 2. Puslit Obat Tradisional         | 5. Puslit dan Pengembangan Gizi | 9. Puslit Bioenergi                    |
| 3. Puslit Pengembangan Hukum       | 6. Puslit/Studi Wanita          | 10. Puslit/Studi Kesehatan Reproduksi  |
|                                    | 7. Puslit Olahraga              |  |

Jl. Darmawangsa Dalam No. 2 Telp. (031) 5342322 Fax. (031) 5342322 Surabaya 60286

IDENTITAS DAN PENGESAHAN  
LAPORAN AKHIR HASIL PENELITIAN

1. a. Judul Penelitian : Penentuan Posisi Atom Dan Struktur Kristal Bahan Hasil Data Difraktometer Sinar X JDX-3530 Dengan Program Pascal Dan Autocad 12
- b. Macam Penelitian : (V) Fundamental, ( ) Terapan, ( ) Pengembangan
2. Kepala Proyek Penelitian
- a. Nama Lengkap Dengan Gelar : Dyah Hikmawati, S.Si.
- b. Jenis Kelamin : W a n i t a
- c. Pangkat/Golongan dan NIP : Penata Muda/IIIa/132 087 867
- d. Jabatan Sekarang : Staf Pengajar
- e. Fakultas/Jurusan/Puslit : FMIPA/Fisika
- f. Univ./Inst./Akademi : Universitas Airlangga
- g. Bidang Ilmu Yang Diteliti : Fisika Eksperimental
3. Jumlah Tim Peneliti : 5 (lima) orang
4. Lokasi Penelitian : 1. Lab. Fisika Komputasi FMIPA Unair  
2. Lab. Dasar Bersama Unair
5. Kerjasama dengan Instansi Lain
- a. Nama Instansi : -
- b. A l a m a t : -
6. Jangka Waktu Penelitian : 6 (enam) Bulan
7. Biaya Yang Diperlukan : Rp 3.000.000,00
8. Hasil Seminar Penelitian :
- a. Dilaksanakan Tanggal : 17 Maret 1997
- b. Hasil Penilaian : ( ) Baik Sekali ( V ) B a i k  
( ) S e d a n g ( ) K u r a n g

Surabaya, 17 Maret 1997



Mengetahui/ Mengesahkan :  
a.n. Rektor  
Ketua Lembaga Penelitian,

Prof. Dr. Noor Cholies Zaini  
NIP. 130 355 372

## KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, segala puji bagi Allah. Hanya atas berkat rahmad dan hidayahNya penelitian dengan judul “ Penentuan Posisi Atom dan Struktur Kristal Bahan Hasil Data Difraktometer Sinar X JDX-3530 dengan Program Pascal dan Autocad 12 “ ini dapat terselesaikan.

Ucapan terima kasih kepada semua pihak yang telah membantu terselesaikannya penelitian ini terutama segenap dosen dan karyawan di lingkungan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, segenap staf dan karyawan di Lembaga Penelitian Universitas Airlangga dan segenap staf di Laboratorium Dasar Bersama Universitas Airlangga. Semoga segala bantuan yang diberikan diterima Allah Subhanahu Wata'ala, sebagai amal ibadah.

Penelitian ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu kritik dan saran dari pembaca sangat diharapkan.

Surabaya, Pebruari 1997

Tim Peneliti

## RINGKASAN PENELITIAN

<b>Judul Penelitian</b>	: Penentuan posisi atom dan struktur kristal bahan hasil data difraktometer Sinar X JDX-3530 dengan Program Pascal dan Autocad 12
<b>Ketua Peneliti</b>	: Dyah Hikmawati, S.Si
<b>Anggota Peneliti</b>	: Dr. H. Redjani Drs. Bambang Suprijanto Drs. Edi Winarko Siti Wafiroh, S.Si
<b>Fakultas/Puslit</b>	: Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
<b>Sumber Biaya</b>	: Daftar Isian Proyek Operasional Perawatan dan Fasilitas Universitas Airlangga Tahun 1996/1997 SK. Rektor Nomor 6229/J03/PI/1997 Tanggal 1 Agustus 1996

Penelitian ini dilatar belakangi oleh adanya alat Difraktometer sinar X di Laboratorium Dasar Bersama Universitas Airlangga yang belum dilengkapi dengan unit penganalisis. Di samping itu penelitian ini juga diharapkan menjadi kelanjutan penelitian sebelumnya yang telah mampu menginterpretasikan struktur kristal kubik, tetragonal dan heksagonal (Aminatun 1995).

Tujuan yang hendak dicapai dari penelitian ini adalah membuat program dengan bahasa Pascal untuk menganalisis struktur 7 sistem kristal bahan yang terdiri atas 14 kisi Bravais. Dan dengan program yang ini juga diharapkan dapat ditentukan posisi atom didalam strukturnya dan menggambarkannya dengan Autocad 12.

Bahasa Pascal dipilih dalam pembuatan Program mengingat Pascal sangat cocok untuk perhitungan Matematika yang rumit. Sedangkan pemakaian Autocad 12 memang bahasa yang cocok untuk untuk penggambaran obyek-obyek tiga dimensi. Masukan program berupa data d dan I/Io dari difraktometer sinar X.

Setelah pemrosesan data akan dihasilkan keluaran berupa struktur kristal, konstanta kisi, konstanta sudut, bidang hkl dan koordinat posisi atom. Dari koordinat posisi atom ini dimasukkan kedalam program Autocad 12 untuk penggambaran struktur tiga dimensinya.

Hasil pemrosesan dicocokkan dengan kartu Hanawalt sebagai prosesan program dan kartu Hanawalt menunjukkan keakuratan program yang dibuat. Baik struktur kristal, bidang hkl menunjukkan keakuratan program. Sedangkan penentuan konstanta kisi dan konstanta sudut menunjukkan perbedaan masing-masing  $0,3 \text{ \AA}$  dan  $0,3^\circ$ . Perbedaan ini dapat ditoleransi selama tidak menghasilkan harga hkl yang cocok. Struktur kristal yang mampu dianalisis meliputi struktur kristal Kubik, Tetragonal, Ortorombik, Rhombohedral, Monoklinik dan Triklinik.

Jadi kesimpulannya program Pascal ini cukup akurat untuk penentuan 7 sistem kristal yang meliputi 14 kisi kristal Bravais. Penggunaan Autocad 12 untuk penggambaran tiga dimensi dari posisi atom dalam dalam struktur kristal cukup akurat terutama untuk struktur yang tersusun atas atom-atom yang sejenis.

Dari penelitian ini diharapkan program ini dapat dipakai untuk menganalisis struktur kristal yang kompleks.

**DAFTAR ISI**

	<b>hal</b>
KATA PENGANTAR.....	i
RINGKASAN PENELITIAN.....	ii
DAFTAR ISI.....	iii
DAFTAR TABEL.....	iv
DAFTAR GAMBAR.....	v
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	2
1.3 Batasan Masalah .....	3
1.4 Hipotesis.....	3
1.5 Tujuan Penelitian.....	3
1.6 Manfaat Penelitian.....	3
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Struktur Kristal.....	5
2.2 Difraksi Sinar X.....	7
2.2.1 Hamburan oleh sebuah atom.....	9
2.2.2 Hamburan oleh sebuah sel satuan.....	9
2.2.3 Intensitas difraksi sinar X.....	11



	hal
2.2.4 Faktor multisiplitas.....	11
2.2.5 Faktor polarisasi- Lorentz.....	12
2.3 Deret Fourier dalam Bentuk Eksponensial.....	13
2.3.1 Penggambaran struktur kristal dengan deret Fourier....	14
2.3.2 Fungsi Petterson.....	15
2.3.3 Posisi dan nilai puncak fungsi Patterson.....	16
<b>BAB III METODE PENELITIAN.....</b>	<b>18</b>
3.1 Tempat Penelitian.....	18
3.2 Alat Penelitian.....	18
3.3 Prosedur Kerja.....	18
3.3.1 Pengambilan data.....	18
3.3.2 Pembuatan program dengan bahasa Pascal.....	19
3.3.3 Metode intelegensia buatan.....	20
3.3.4 Pembuatan program.....	21
3.3.5 Penggambaran dengan program Autocad 12.....	27
<b>BABIV HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>29</b>
4.1 Hasil Penelitian.....	29
4.1.1 Struktur kristal kubik Al.....	30
4.1.2 Struktur kristal kubik GaAs.....	32
4.1.3 Struktur kristal ortorombik $MgY_2S_4$ .....	34

	hal
4.1.4 Struktur kristal monoklinik $\text{Rb}_2\text{V}_6\text{O}_{16}$ .....	36
4.1.5. Struktur kristal triklinik $\text{Cd}_2\text{B}_2\text{O}_5$ .....	38
4.1.6 Struktur kristal tetragonal $\text{BPO}_4$ .....	40
4.1.7 Struktur kristal heksagonal $\text{LiAl}_5\text{S}_8$ .....	42
4.1.8 Struktur kristal rombohedral $\text{B}_{13}\text{P}_2$ .....	44
4.2 Pembahasan.....	46
BABV KESIMPULAN.....	48
5.1 Kesimpulan.....	48
5.2 Saran.....	48
DAFTAR PUSTAKA	
LAMPIRAN	

## DAFTAR TABEL

	hal
Tabel 1.7 Sistem kristal. kristal Bravais, konstanta kisi dan konstanta sudut....	5
Tabel 3.1 Konstanta d dari 7sistem kristal.....	19
Tabel 4.1.1 Data hasil Al.....	30
Tabel 4.1.2 Koordinat posisi atom Al.....	30
Tabel 4.1.3 Data hasil GaAs.....	32
Tabel 4.1.4 Posisi atom GaAs.....	32
Tabel 4.1.5 Data hasil MgY <sub>2</sub> S <sub>4</sub> .....	34
Tabel 4.1.6 Koordinat posisi atom MgY <sub>2</sub> S <sub>4</sub> .....	34
Tabel 4.1.7 Data hasil Rb <sub>2</sub> V <sub>6</sub> O <sub>16</sub> .....	36
Tabel 4.1.8 Koordinat posisi atom Rb <sub>2</sub> V <sub>6</sub> O <sub>16</sub> .....	36
Tabel 4.1.9 Data hasil Cd <sub>2</sub> B <sub>2</sub> O <sub>5</sub> .....	38
Tabel 4.1.10 Koordinat posisi atom Cd <sub>2</sub> B <sub>2</sub> O <sub>5</sub> .....	38
Tabel 4.1.11 Data hasil BPO <sub>4</sub> .....	40
Tabel 4.1.12 Koordinat posisi atom BPO <sub>4</sub> .....	40
Tabel 4.1.13 Data hasil LiAl <sub>5</sub> S <sub>8</sub> .....	42
Tabel 4.1.14 Koordinat posisi atom LiAl <sub>5</sub> S <sub>8</sub> .....	42
Tabel 4.1.15 Data hasil B <sub>13</sub> P <sub>2</sub> .....	44
Tabel 4.1.16 Koordinat posisi atom B <sub>13</sub> P <sub>2</sub> .....	44

## DAFTAR GAMBAR

	<b>hal</b>
Gambar 2.1 14 sel satuan Bravais.....	6
Gambar 2.2 Difraksi sinar X.....	7
Gambar 3.1 Diagram alir program Utama .....	21
Gambar 3.2 Diagram alir penentuan konstanta kisi A.....	23
Gambar 3.3 Diagram alir penentuan konstanta kisi B.....	23
Gambar 3.4 Diagram alir penentuan konstanta kisi C.....	23
Gambar 3.5 Diagram alir penentuan hkl.....	24
Gambar 3.6 Jangkauan uji 2 konstanta kisi A.....	25
Gambar 3.7 Jangkauan uji 2 konstanta kisi B.....	25
Gambar 3.8 Jangkauan uji 2 konstanta kisi C.....	26
Gambar 3.9 Diagram alir penentuan struktur kristal.....	26
Gambar 4.1 Kubik pusat muka Al.....	31
Gambar 4.2 Struktur Kristal GaAs.....	33
Gambar 4.3 Struktur kistal ortorombik $MgY_2S_4$ .....	35
Gambar 4.4 Struktur kristal monoklinik $Rb_2V_6O_{16}$ .....	37
Gambar 4.5 Struktur kristal triklinik $Cd_2B_2O_5$ .....	39
Gambar 4.6 Struktur kristal tetragonal $BPO_4$ .....	41

Gambar 4.7 Struktur kristal heksagonal $\text{LiAl}_5\text{S}_8$ .....	43
Gambar 4.8 Struktur kristal rombohedral $\text{B}_{13}\text{P}_2$ .....	45

## BAB I

### PENDAHULUAN

#### 1.1 Latar Belakang Penelitian

Beberapa bulan yang lalu Laboratorium Dasar Bersama di Universitas Airlangga dilengkapi dengan Difraktometer sinar X JDX-3530. Fungsi utama alat ini adalah untuk mengetahui struktur kristal suatu bahan. Difraktometer sinar X yang di Laboratorium Dasar Bersama belum dilengkapi dengan unit penganalisis struktur kristal bahan akibatnya data yang diperoleh kurang dapat memberikan informasi yang diharapkan. Agar fungsi Difraktometer ini dapat dioptimalkan, maka penelitian yang mengarah pada cara menganalisis data Difraktometer ini sangat perlu dilakukan. Difraktometer sinar X JDX-3530 menghasilkan data sudut difraksi dan intensitas sinar X terdifraksi yang berupa data puncak-puncak spektrum. Data tersebut bersifat unik untuk setiap sampel yang diamati, karena setiap bahan memiliki unsur penyusun tertentu dengan bentuk kristal tertentu.

Ada 7 struktur kristal yang mungkin dimiliki oleh suatu bahan. Interpretasi struktur kristal bahan dapat dilakukan dengan membuat perhitungan-perhitungan yang mengkaitkan data-data hasil pengamatan dengan difraktometer sinar X. Dengan bantuan program Pascal data sudut difraksi dan intensitas sinar X terdifraksi tersebut diolah untuk interpretasi struktur kristal kubik sebagai struktur yang paling sederhana. Bila syarat yang ada tidak memenuhi, diinterpretasikan untuk struktur tetragonal, heksagonal, dan seterusnya sampai struktur kristal yang paling rumit. Hasil lain dari pengolahan data ini adalah penentuan konstanta kisi dan posisi atom penyusunnya,

sehingga dapat digambarkan bentuk tiga dimensinya. Penelitian sebelumnya telah berhasil menginterpretasi struktur kristal kubik, tetragonal dan heksagonal. Karena keterbatasan pemrograman, waktu dan kemampuan penggambaran bentuk tiga dimensinya masih perlu pembenahan. Untuk itu perlu penelitian lebih lanjut untuk interpretasi struktur kristal yang lebih rumit, misalnya ortorombik, rombohedral, monoklinik dan triklinik sebagai salah satu langkah awal yang akan sangat berguna dalam melengkapi hasil analisa kuantitatif dan kualitatif suatu bahan. Lebih jauh lagi diharapkan akan dapat dilakukan interpretasi struktur yang kompleks sehingga analisis dengan Difraktometer sinar X ini dapat menjadi analisis utama dan bukan sekedar analisis penunjang.

## 1.2 Rumusan Masalah

Dari uraian latar belakang di atas dapat dibuat rumusan masalah sebagai berikut

- 1.2.1. Bagaimana mengembangkan program yang ada agar dapat digunakan untuk menginterpretasi struktur kristal yang lebih rumit dari kubik, tetragonal dan heksagonal.
- 1.2.2. Bagaimana mengembangkan program yang ada untuk menentukan posisi atom dalam kristal setelah struktur kristalnya diketahui.
- 1.2.3. Bagaimana menggunakan program Autocad 12 untuk menggambarkan posisi atom di dalam struktur kristal agar tampilannya dapat diamati dengan jelas.

### 1.3 Batasan Masalah

Penelitian ini kami batasi untuk 7 sistem kristal yang terdiri atas 14 kristal Bravais.

### 1.4 Hipotesis

$H_0$  : Program Pascal dan Autocad 12 tidak dapat menganalisis 7 sistem kristal yang terdiri atas 14 kristal Bravais dengan gambaran 3 dimensinya.

$H_1$  : Program Pascal dan Autocad 12 dapat menganalisis 8 sistem kristal yang terdiri atas 14 kristal Bravais dengan gambaran 3 dimensinya.

### 1.5 Tujuan Penelitian

Membuat program Pascal yang lebih lengkap untuk analisis struktur kristal yang lebih rumit dari kubik, tetragonal dan heksagonal. Membuat tampilan gambar tiga dimensi dari struktur kristal dan posisi atom hasil pengolahan data Pascal dengan program Autocad 12.

### 1.6 Manfaat Penelitian

Membuat alternatif pengolahan data difraktometer sinar X JDX-3530 di Laboratorium Dasar Bersama menjadi bentuk informasi yang lebih berarti, agar pemakaiannya lebih optimal. Langkah awal otomatisasi difraktometer sinar X menuju satu kesatuan alat pengambil data hingga penganalisa data. Dengan mengetahui



struktur kristal bahan akan diketahui sifat fisis dan kimia agar dapat dikembangkan pemanfaatannya.

## BAB II

### TINJAUAN PUSTAKA

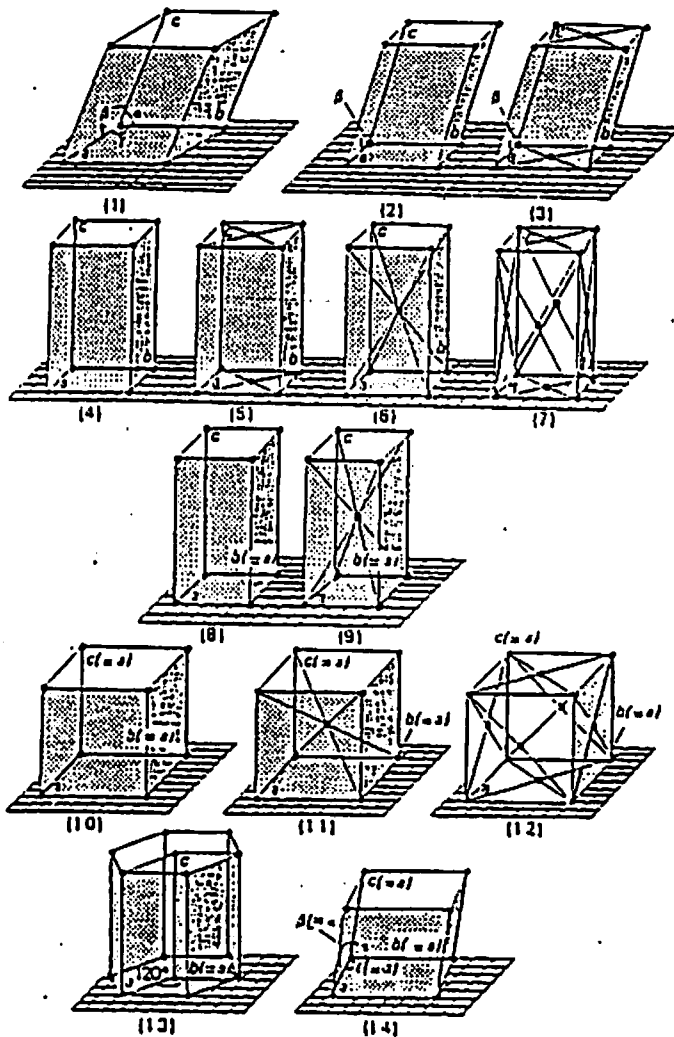
#### 2.1 Struktur Kristal

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	$A \neq B \neq C$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
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

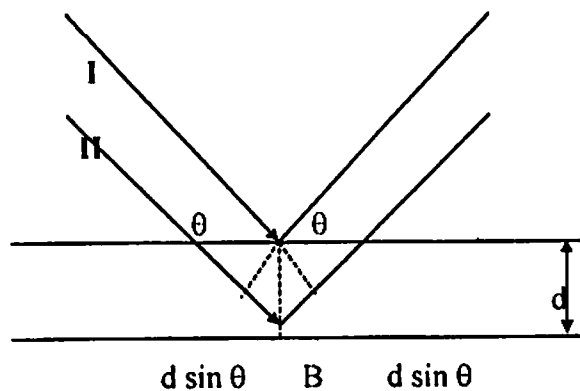
1. Triklinik, P
2. Monoklinik P
3. Monoklinik C
4. Orthorombik P
5. Orthorombik C
6. Orthorombik I
7. Orthorombik F
8. Tetragonal P
9. Tetragonal I
10. Kubik P
11. Kubik I
12. Kubik F
13. Heksagonal P
14. Rhombohedral P

(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  $\lambda$  jatuh pada kristal dengan sudut  $\theta$  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  $\theta$  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

$\theta$  = Sudut difraksi

$n$  = Orde difraksi

$\lambda$  = 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

fraksional  $u_1v_1w_1, u_2v_2w_2, u_3v_3w_3, \dots$  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  $f$ ,  $|F|$  didefinisikan sebagai perbandingan amplitudo :

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

### 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 pembanding 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 :

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

(Cullity, 1959)

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

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

dengan mengabaikan faktor konstata  $1/8$

(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 :

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

atau

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

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

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

(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  $\infty$ , 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 tranformasi 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 ( $\rho$ ) yang biasanya mempunyai satuan elektron per  $\text{\AA}^3$ . 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 :

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

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 :

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

sehingga diambil untuk bagian realnya sebagai berikut :

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

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 dilakukan di Laboratorium Dasar Bersama dan Laboratorium Komputer Fisika Universitas Airlangga.

#### **3.2 Alat Penelitian**

Seperangkat Difraktometer sinar-X JDX-3530 dan seperangkat komputer dengan monitor super VGA.

#### **3.3 Prosedur Kerja**

##### **3.3.1 Pengambilan data**

Data diperoleh dengan mendifraksikan sampel dengan difraktometer sinar-X JDX-3530. Hasilnya berupa spektrum pada sudut difraksi  $2\theta$  sebagai fungsi intensitas (cps). Dari data ini difraktometer sinar-X JDX-3530 telah dilengkapi dengan seperangkat komputer yang memproses data tersebut dalam bentuk tabel yang mencantumkan harga  $d$  dan intensitas relatifnya. Secara umum semua data  $d$  atau  $\theta$  dan intensitas dapat diproses dengan program ini.

(Burger, 1970)

Sistem	$d^2(hkl)$	
Triklinik	$h^2a^2+k^2b^2+l^2c^2+2klb^2 \cos \alpha + 2lhc^2 \cos \beta + 2hka^2 \cos \gamma$	
Monoklinik	$h^2a^2+k^2b^2+l^2c^2+2lhc^2 \cos \beta$	
Orthorombik	$h^2a^2+k^2b^2+l^2c^2$	$\left[ \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2} + \frac{c^2}{l^2} \right]$
Tetragonal	$(h^2+k^2)a^2+l^2c^2$	$\left[ \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2} + \frac{c^2}{l^2} \right]$
Heksagonal	$(h^2+k^2+hk)a^2+l^2c^2$	$\left[ \frac{3a^2}{4(h^2+k^2+hk)} + \frac{c^2}{l^2} \right]$
Rhombohedral	$[h^2+k^2+l^2+2(hk+kl+hl)(\cos \alpha)]a^2$	$\left[ \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2} \right]$
Kubik	$(h^2+k^2+l^2)a^2$	$\left[ \frac{a^2}{h^2+k^2+l^2} \right]$

Tabel 3.1 Konstanta d dari 7 sistem kristal

Bahasa Pascal merupakan bahasa tingkat tinggi dengan tampilan yang luwes yang tepat untuk perhitungan-perhitungan yang rumit dan panjang. Dari ke 8 struktur kristal yang ada masing-masing mempunyai perumusan harga d yang berbeda-beda. Tabel berikut menunjukkan perumusan harga d untuk masing-masing struktur kristal.

3.3.2 Pembuatan program dengan bahasa Pascal



Dengan beragamnya perumusan struktur kristal ini program Pascal diharapkan dapat memproses data d dan intensitas yang dimasukkan hingga dapat memilih perumusan yang paling tepat untuk 8 struktur kristal yang mungkin. Dengan bantuan AI (Artificial Intelengensia) pemrosesan data semakin banyak seperti ini d menjadi mungkin dilakukan dengan lebih cepat dan akurat.

### 3.3.3 Metoda Intelegensia Buatan (AI)

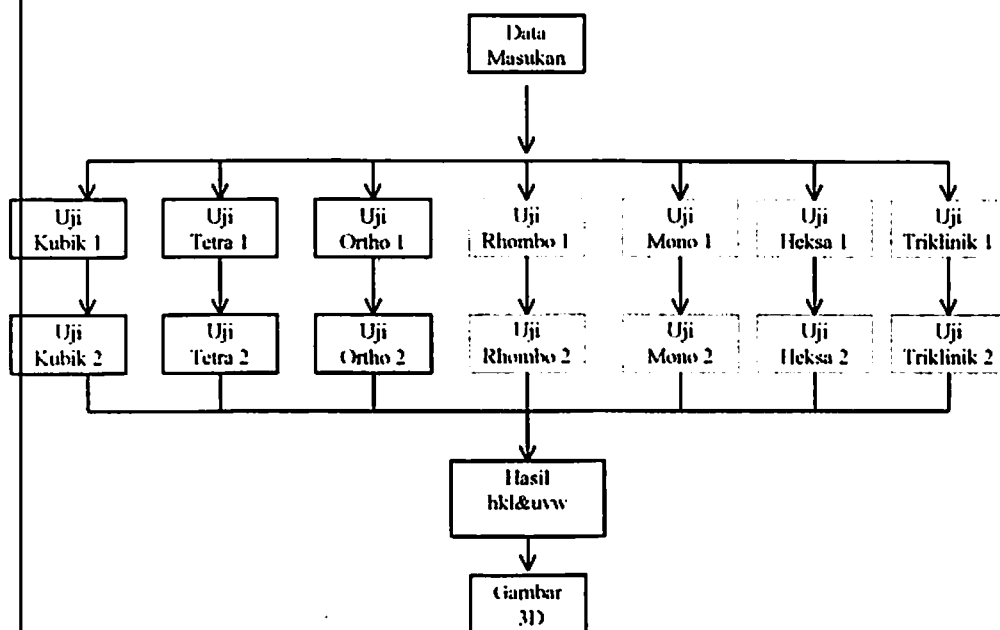
Dalam penelitian ini, proses menemukan jawabnya dilakukan dengan metoda intelegensia buatan, pemilihan metoda ini adalah karena ruang masalah dari penentuan konstata kisi serta jenis struktur kristal cukup banyak, meskipun jumlah ruang masalah relatif tetap (ide dasar dari AI adalah jumlah ruang masalah yang dapat berkembang).

Konsep tentang intelegensia buatan sebenarnya dimulai saat orang mulai mengembangkan komputer pertama kali. Yaitu suatu konsep untuk memecahkan persoalan dimana ruang masalahnya menjadi besar dan ruang masalah tersebut masi dapat diperbesar lagi. Dari konsep intelegensia buatan tersebut muncullah teknik untuk mempercepat mencapai jawaban diantaranya. Menuju kedalaman dahulu, Menuju kelebaran dahulu, Memilih berdasarkan kira-kira (Heuristik), sedangkan pada penelitian ini tidak dipakai satu teknik saja, tetapi gabungan dari ketiganya.

### 3.3.4 Pembuatan program

Umumnya untuk membuat program intelegensia buatan dipakai software (perangkat lunak) mesin inferensi yang sudah berkembang (mis. Prolog). Tetapi karena untuk masalah yang dihadapi dalam penelitian ini adalah ruang masalah yang dapat dianggap konstan, maka dipergunakan bahasa Pascal untuk membuat mesin inferensi serta data utamanya.

Algoritma dari program yang dibuat pada penelitian ini adalah :



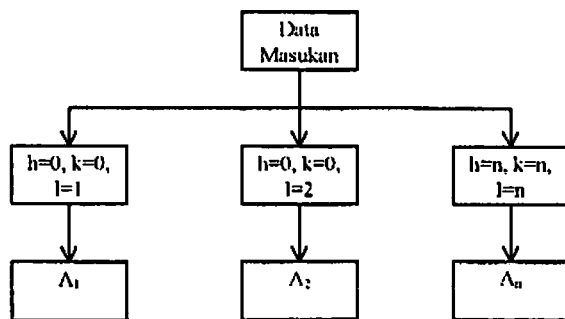
Gambar 3.1 Diagram alir program utama

Pada saat program menerima data masukan akan diuji untuk uji 1 kubik jika benar masuk ke uji 2 kubik dan jika salah masuk ke uji 1 tetra dan demikian seterusnya sampai ditemukan struktur kristal yang diperkirakan dari data tersebut.

Algoritma dari uji 1 kubik adalah seperti pada gambar di bawah, hal ini dikarenakan perumusan kubik adalah :

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

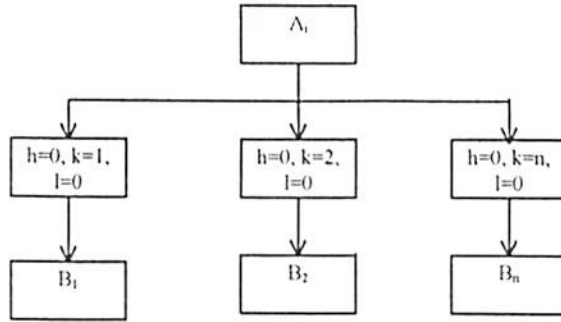
yaitu hanya terdapat sebuah nilai konstanta kisi.



Gambar 3.2 Diagram alir penentuan konstanta kisi A

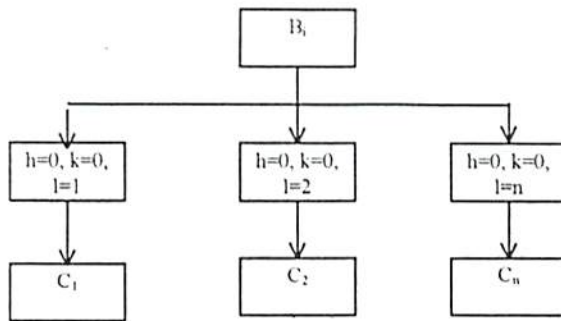
karena dari data masukan dapat hanya diperoleh harga d maka dicoba masukan untuk nilai h,k dan l, sehingga akan diperoleh beberapa nilai A.

Apabila dari perumusan terdapat beberapa nilai konstanta seperti nilai konstanta kisi dan konstanta sudut maka setelah harga sebuah nilai A akan diteruskan dengan algoritma dari masing-masing nilai B tersebut diteruskan dengan algoritma.



Gambar 3.3 Diagram alir penentuan konstanta kisi B

Dari masing-masing nilai B tersebut dengan nilai dengan algoritma

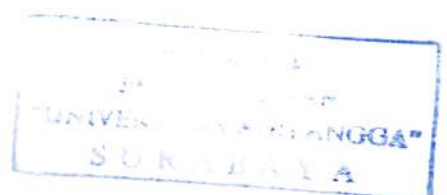


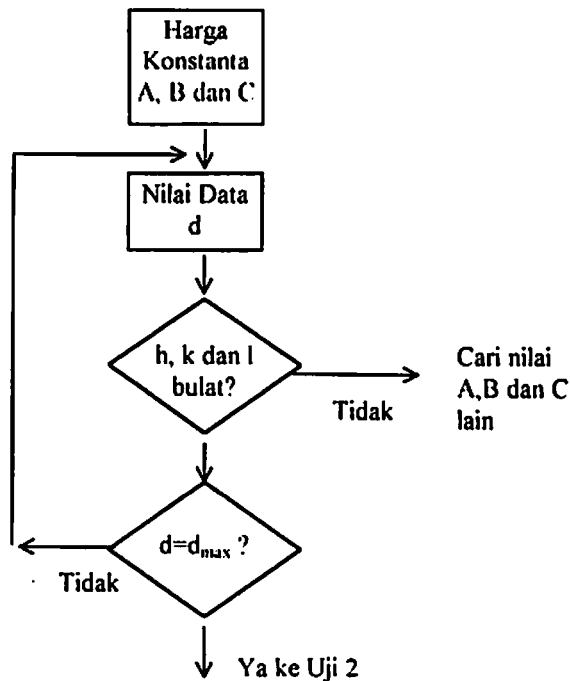
Gambar 3.4 Diagram alir penentuan konstanta kisi C

demikian seterusnya jika ada hanya konstanta sudut  $\alpha, \beta$  dan  $\gamma$ .

Jadi untuk proses penelusuran nilai A, B dan C serta  $\alpha, \beta$  dan  $\gamma$  (tergantung perumusan dari struktur kristal) teknik yang dipakai adalah DFS.

Setelah mendapatkan nilai A, B dan C (untuk kubik hanya A saja) maka dilanjutkan dengan menguji nilai konstanta tersebut. Algoritmanya





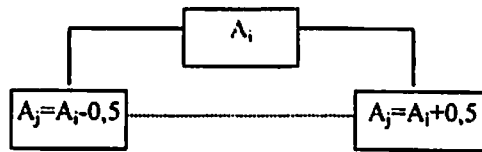
Gambar 3.5 Diagram alir penentuan hkl

Apabila diuji ternyata sebelum semua data  $d$  mempunyai data  $h, k$  dan  $l$  yang bulat maka akan dipilih nilai  $A, B$  dan  $C$  (kubik hanya  $A$ ) tertentu dulu, misal  $C$  sampai semua  $C$  pernah dicoba. Jika tak sesuai juga baru cari  $B$  baru, demikian seterusnya.

Jika untuk semua nilai  $A, B$  dan  $C$  tersebut tidak ada yang menghasilkan harga  $h, k$  dan  $l$  yang bulat untuk semua data  $d$  masukan maka pengujian akan dilanjutkan untuk struktur kristal yang lain. Secara lengkap penulisan programnya dalam bahasa Pascal dapat dilihat di Lampiran I.

Sedangkan untuk harga konstanta kisi yang menghasilkan nilai  $h, k$  dan  $l$  yang bulat untuk semua data  $d$  maka akan dilanjutkan dengan uji 2.

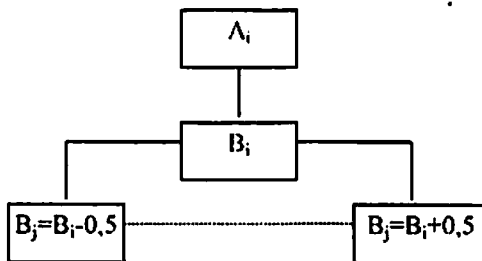
Untuk konstanta kisinya  $A, B$  dan  $C$  algoritmanya :



Gambar 3.6 Jangkauan uji 2 konstanta kisi A

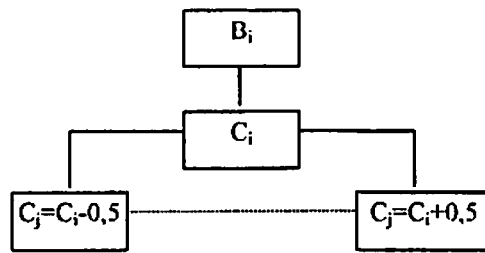
Proses ini adalah proses untuk mendapatkan nilai A yang cukup halus, hal ini dikarenakan ketelitian dari data masukan d tidak bisa dijamin 100%, demikian pula jika kesalahan mengambil data d sangat besar. Hal ini akan diinterpretasikan oleh program secara salah. Jadi sebaiknya kesahihan nilai d dari data masukan diusahakan sesahih mungkin.

Untuk konstanta kisinya A,B dan C maka pada masing-masing  $A_j$  tersebut diteruskan dengan algoritma.



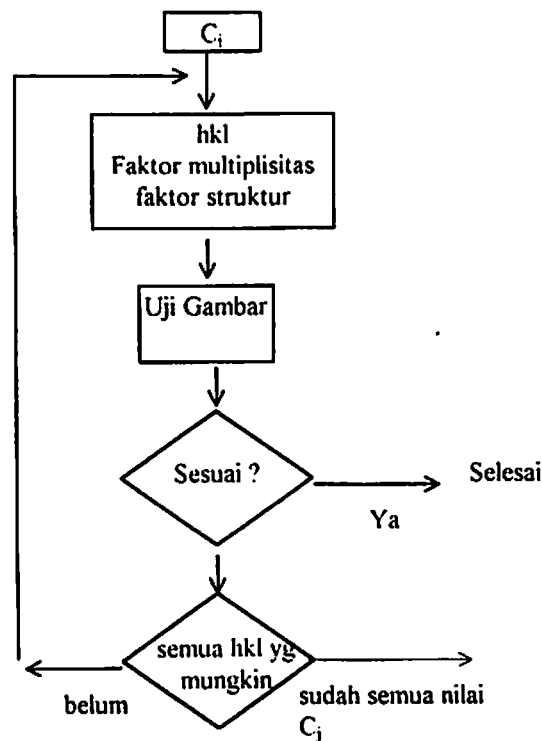
Gambar 3.7 Jangkauan uji 2 konstanta kisi B

untuk masing-masing  $B_j$  dilanjutkan



Gambar 3.8 Jangkauan uji 2 konstanta kisi C

untuk penentuan konstanta sudut diperlukan uji ini dilanjutkan untuk penentuan  $\alpha$ ,  $\beta$  dan  $\gamma$  jika tidak dari masing-masing  $C_j$  dilakukan uji gambar



Gambar 3.9 Diagram alir penentuan struktur kristal

Dengan melakukan perhitungan faktor multisiplisitas dan faktor struktur serta dengan menggunakan fungsi Patterson akan diperoleh nilai  $uvw$ , yaitu posisi atom

yang diinginkan, dengan harga untuk  $uvw$  yang berbeda menunjukkan atom yang berbeda.

Uji gambar seperti yang dituliskan dalam gambar di atas maksudnya adalah jumlah atom dan jumlah puncak yang berbeda pada fungsi Patterson harus sama, harus memenuhi syarat simetri, harus sesuai dengan posisi atom pada model kisi Bravais.

Apabila ketiga syarat tersebut dipenuhi maka diharapkan harga konstanta kisi, macam struktur kristal dan gambar atomnya adalah yang terakhir dihitung. Untuk memperjelas, koordinat posisi atom dimasukkan dalam program Autocad.

### 3.3.5. Penggambaran dengan Program Autocad 12

Autocad mempunyai sistem koordinat yang berlaku pada semua gambar yang dibuat, yang disebut Word Coordinate System (WCS). Sistem koordinat ini bersifat tetap dan berlaku untuk semua sistem koordinat misalnya sistem koordinat Kartesian, koordinat Polar, koordinat bola dan koordinat silinder. Sistem ini sangat tepat untuk menggambarkan posisi atom yang konstanta sudutnya  $90^\circ$ , seperti posisi atom untuk kristal kubik, tetragonal dan orthorombik. Koordinat  $uvw$  yang diperoleh tinggal dimasukkan saja.

Selain WCS yang bersifat tetap, dapat juga dibuat sistem koordinat sendiri untuk mempermudah pembuatan gambar. Sistem koordinat ini disebut User Coordinate System (UCS). Kita dapat meletakkan pusat sumbu di mana saja di dalam



WCS dan dapat memutar sumbunya sesuai dengan arah yang dikehendaki. Dalam satu gambar tidak ada pembatasan jumlah UCS, sehingga UCS dapat ditempatkan pada beberapa posisi. Sistem koordinat inilah yang digunakan untuk menggambarkan posisi atom dari struktur kristal yang mempunyai beberapa harga konstanta sudut, seperti kristal heksagonal, monoklinik, rombohedral dan triklinik.

Dari hasil gambar baik dengan sistem koordinat WCS ataupun UCS, hasil gambar dapat ditampilkan dalam beberapa sudut pandang. Dengan demikian diharapkan dapat memberi gambaran penyusunan atom dalam suatu struktur kristal.

## BAB IV

### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 4.1 Hasil Penelitian

Dari data difraktometer sinar-X diperoleh data pola difraksi, jarak bidang  $d$  dan intensitas relatif. Data ini dimasukkan dalam program yang dibuat. Pemasukkan data akan meliputi panjang gelombang sumber sinar-X, jumlah atom, jumlah data dan harga-harga dengan intensitas relatifnya.

Data-data ini akan diproses untuk dihitung bidang-bidang pendifraksi hkl, faktor polarisasi Lorentz, faktor pengali dan faktor strukturnya. Dari sini akan diperoleh fungsi Fouriernya. Dari fungsi Fourier ini ditransfer ke fungsi Patterson untuk mendapatkan koordinat posisi atom  $uvw$ -nya.

Pada akhir pemrosesan data akan diperoleh hasil berupa konstanta-konstanta kisi A, B, C, konstanta-konstanta sudut  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , bidang pendifraksi hkl dan koordinat posisi atom  $uvw$ . Dari koordinat  $uvw$  yang diperoleh kemudian dimasukkan program Autocad untuk digambarkan gambaran 3 dimensinya.

Berikut ini diberikan beberapa contoh data dan hasil pemrosesan untuk beberapa struktur kristal bahan.

## 4.1.1 Struktur Kristal Kubik Al

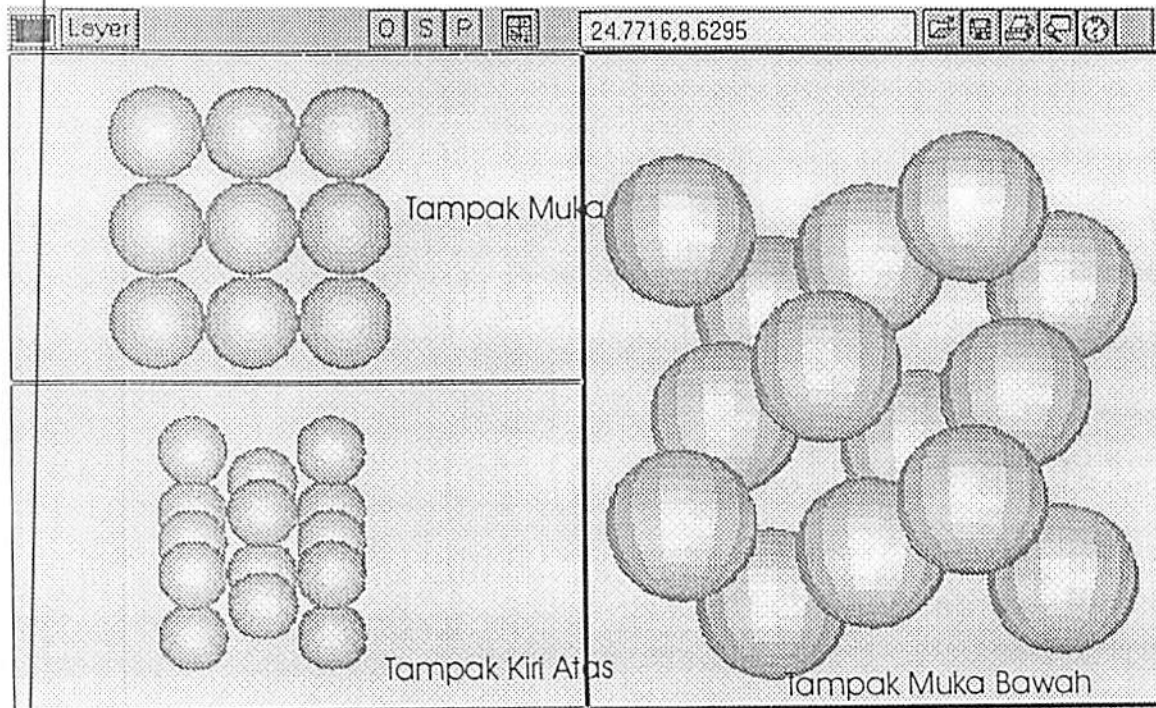
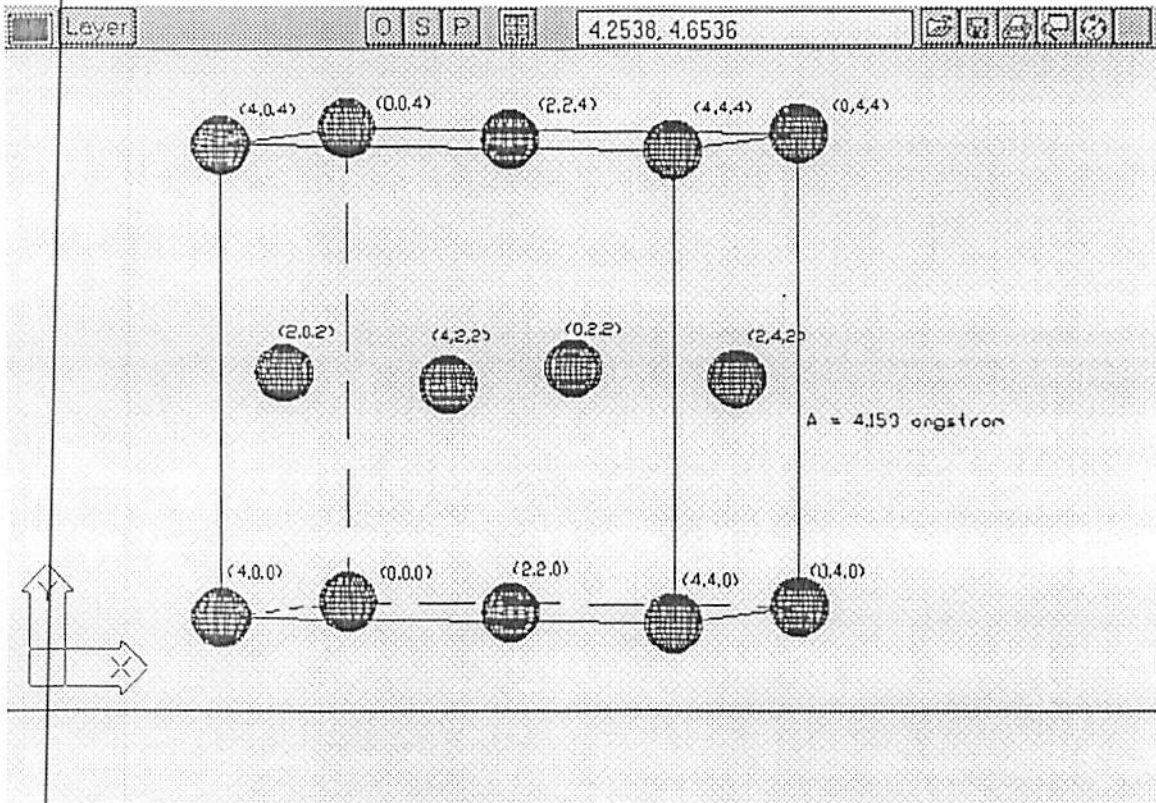
Tabel 4.1.1 Data Hasil Al

No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	2,335	34	111	6	1,430	39	406
2	2,241	3	002	7	1,220	57	331
3	2,056	2	220	8	1,012	5	024
4	2,023	100	311	9	0,906	6	242
5	1,991	2	222				

Tabel 4.1.2 Koordinat posisi atom

Atom 1	044 444 440 422 404 400 242 224 220 202 040 022 000 004
--------	---

Konstanta Kisi Kubik Al      $A = 4,153\text{Å}$



Gambar 4.1 Kubik pusat muka (AI)

## 4.1.2 Struktur Kristal Kubik GaAs

Tabel 4.1.3 Data Hasil Kristal GaAs

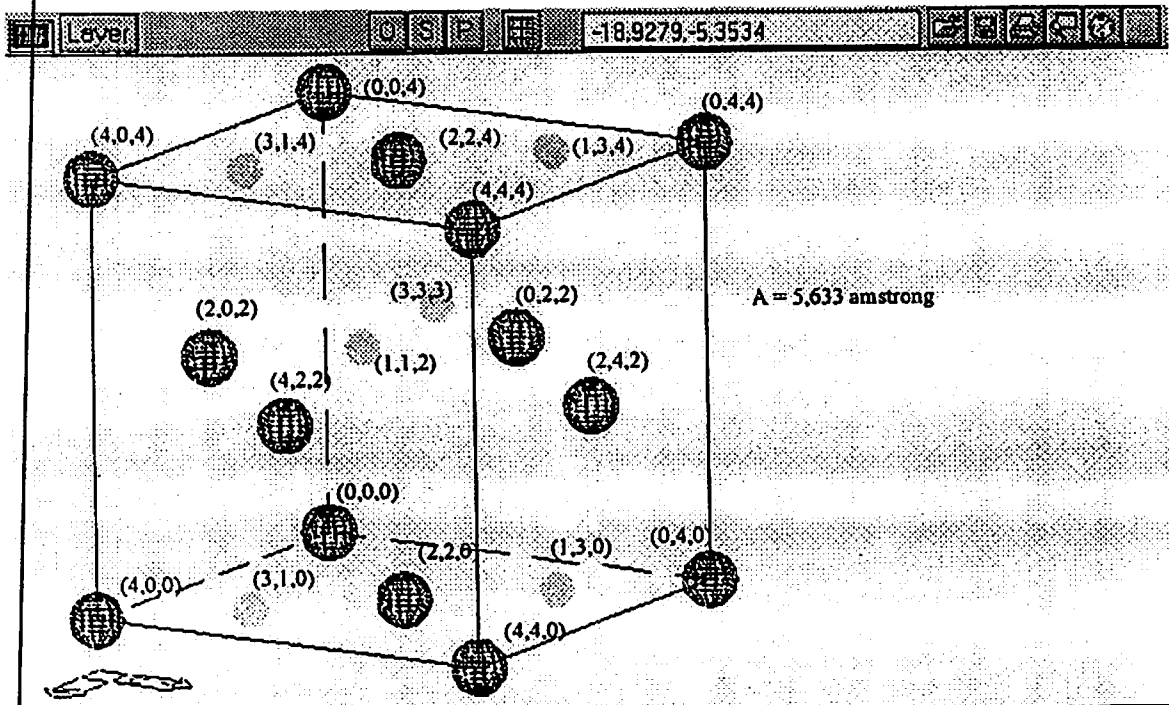
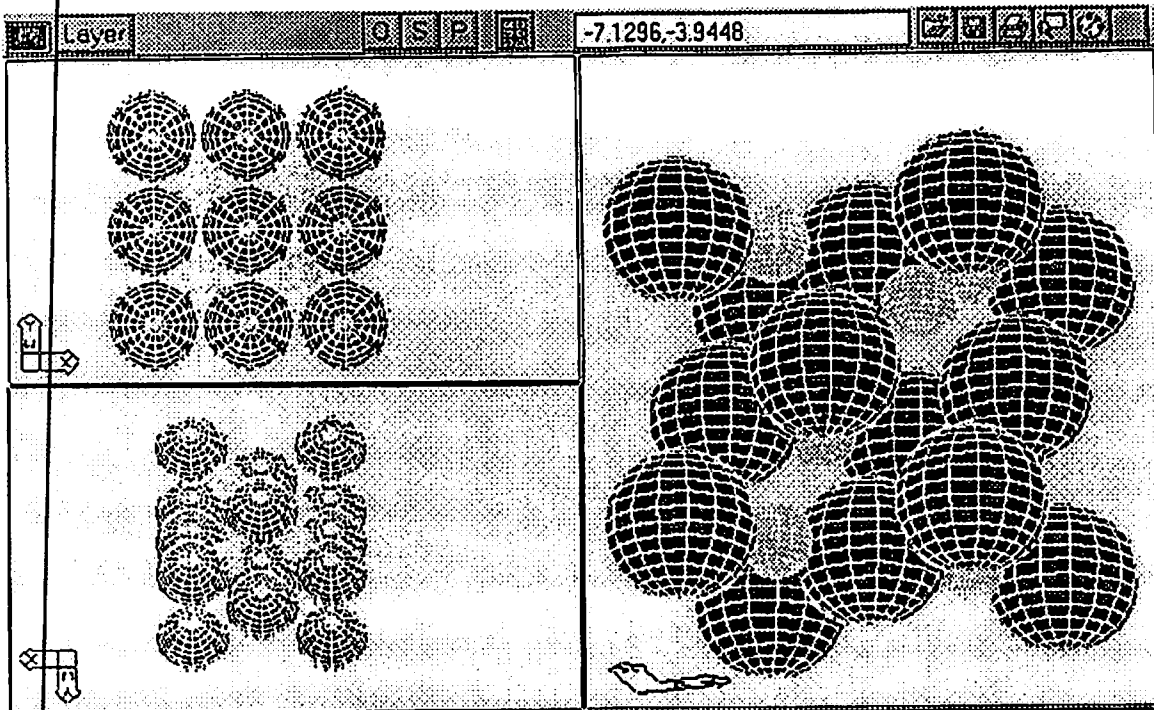
No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	3,260	100	111	8	1,088	4	333
2	2,832	4	200	9	0,999	2	440
3	1,999	35	220	10	0,956	2	531
4	1,704	35	311	11	0,894	4	620
5	1,413	6	400	12	0,862	2	533
6	1,297	8	331	13	0,816	4	444
7	1,154	6	422	14	0,792	2	711

Koordinat uvw yang diperoleh

Tabel 4.1.4 Posisi Atom GaAs

Atom 1	004 000 444 440 422 404 400 242 224 220 202 044 040 022
Atom 2	333 314 310 134 130 112

Konstanta kisi Kubik yang diperoleh 5,633 Å



Gambar 4.2 Struktur kristal kubik GaAs

4.1.3 Struktur Kristal Ortorombik  $MgY_2S_4$ Tabel 4.1.5 Data Hasil  $MgY_2S_4$ 

No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	5,675	20	120	8	2,237	10	440
2	3,531	100	230	9	2,078	40	151
3	3,153	20	400	10	1,991	60	521
4	2,838	60	420	11	1,885	100	351
5	2,743	100	131	12	1,760	20	460
6	2,570	100	231	13	1,664	40	322
7	2,392	20	141	14	1,620	20	511

Tabel 4.1.6 Koordinat posisi atom

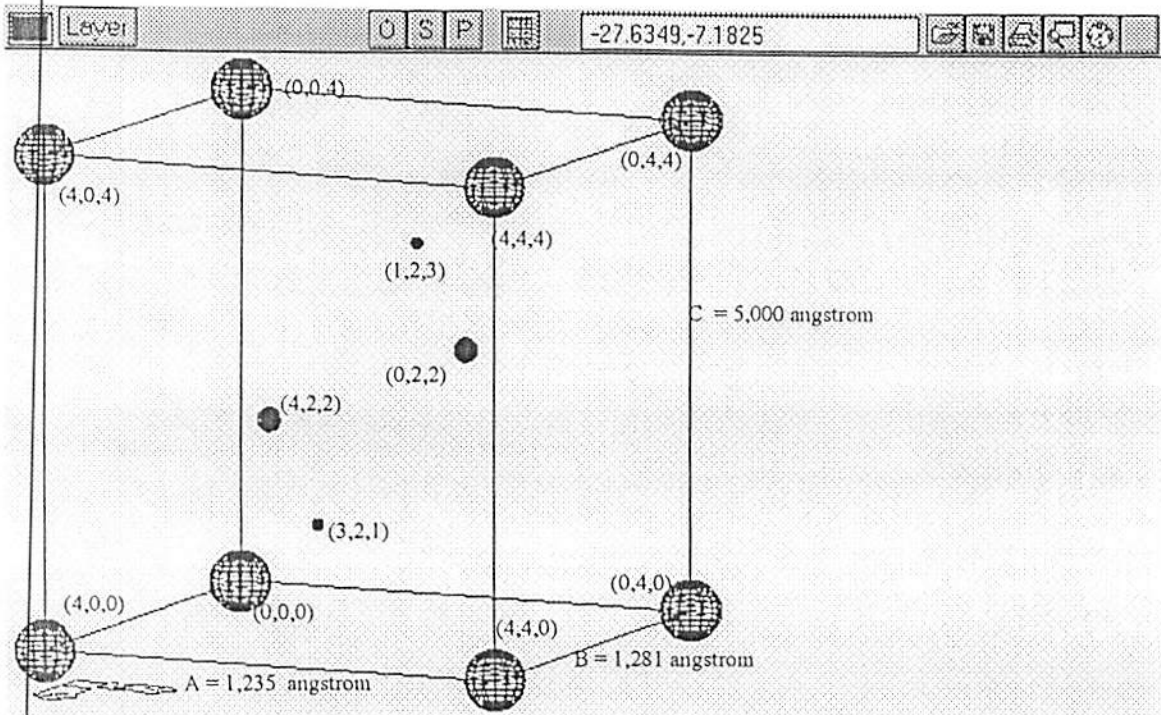
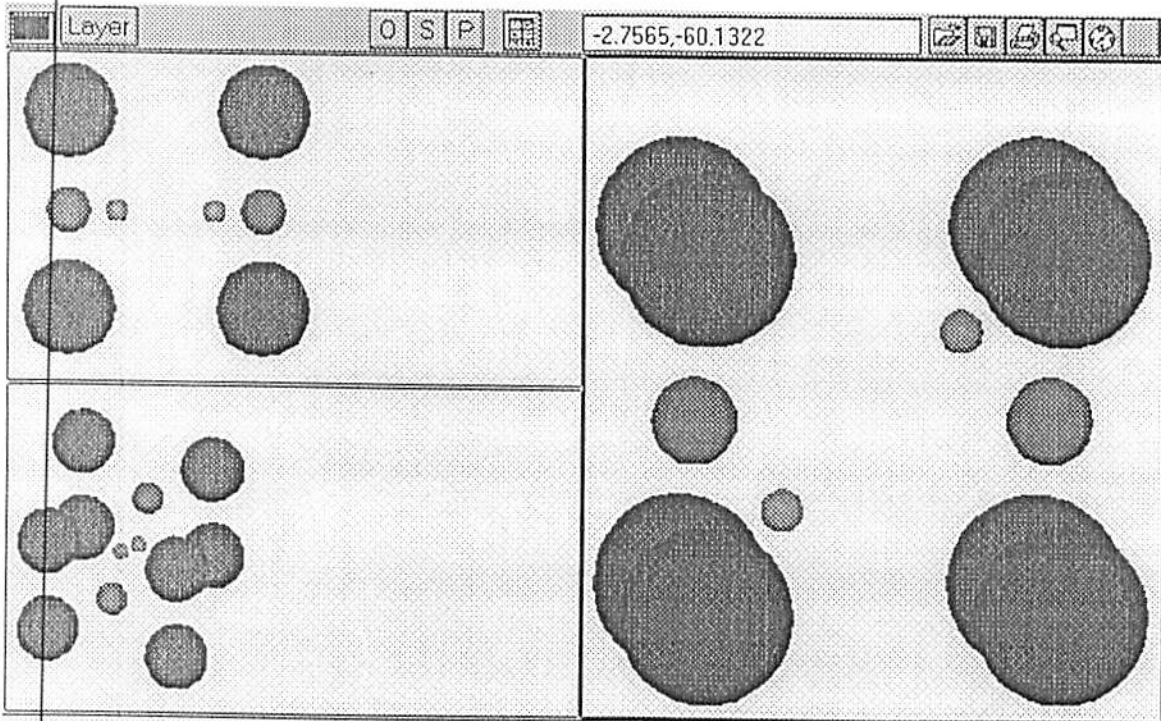
Atom 1	000 444 440 400 044 040 004 404
Atom 2	422 022
Atom 3	321 123

Konstanta kisi Ortorhombik

$$A = 1,235 \text{ \AA}$$

$$B = 1,281 \text{ \AA}$$

$$C = 5,000 \text{ \AA}$$



Gambar 4.3 Struktur kristal orthorombik  $\text{MgY}_2\text{S}_4$



4.1.4 Struktur Kristal Monoklinik  $\text{Rb}_2\text{V}_6\text{O}_{16}$ Tabel 4.1.7 Data Hasil  $\text{Rb}_2\text{V}_6\text{O}_{16}$ 

No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	7,82	100	100	8	3,02	100	021
2	5,72	75	110	9	2,92	75	211
3	4,22	75	020	10	2,87	100	-201
4	3,99	75	-101	11	2,49	100	220
5	3,54	25	210	12	2,40	100	002
6	3,24	25	210	13	1,80	75	-221
7	3,21	75	201				

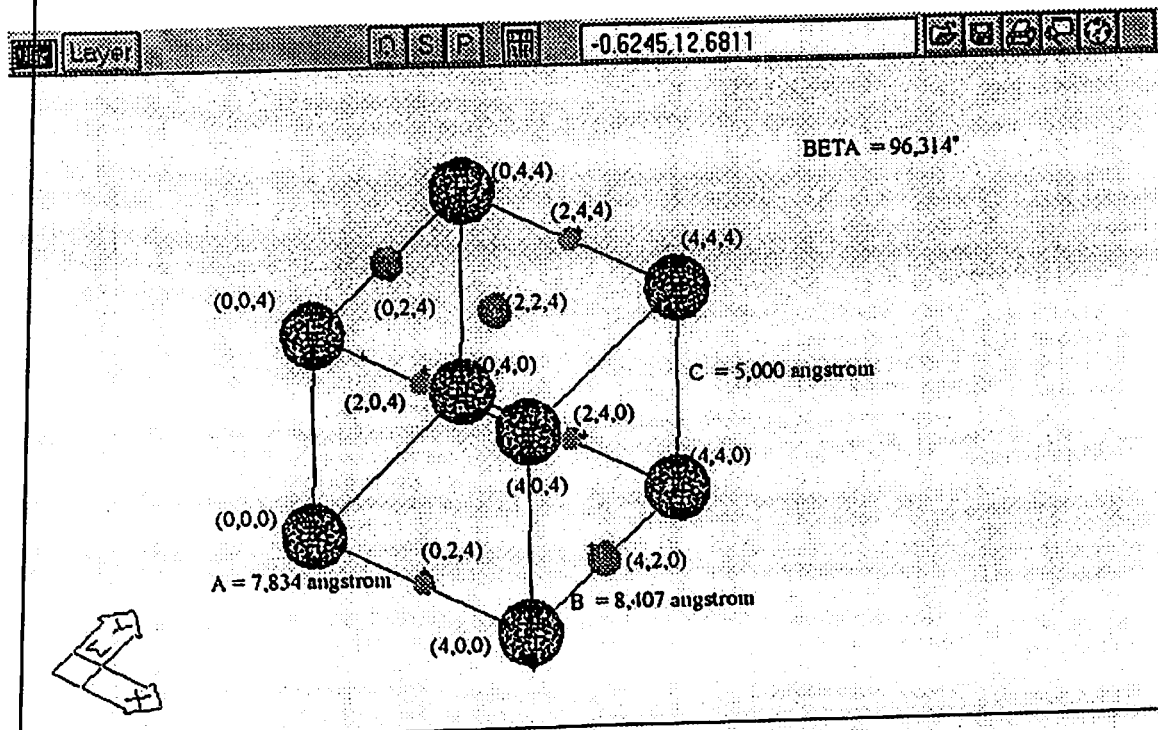
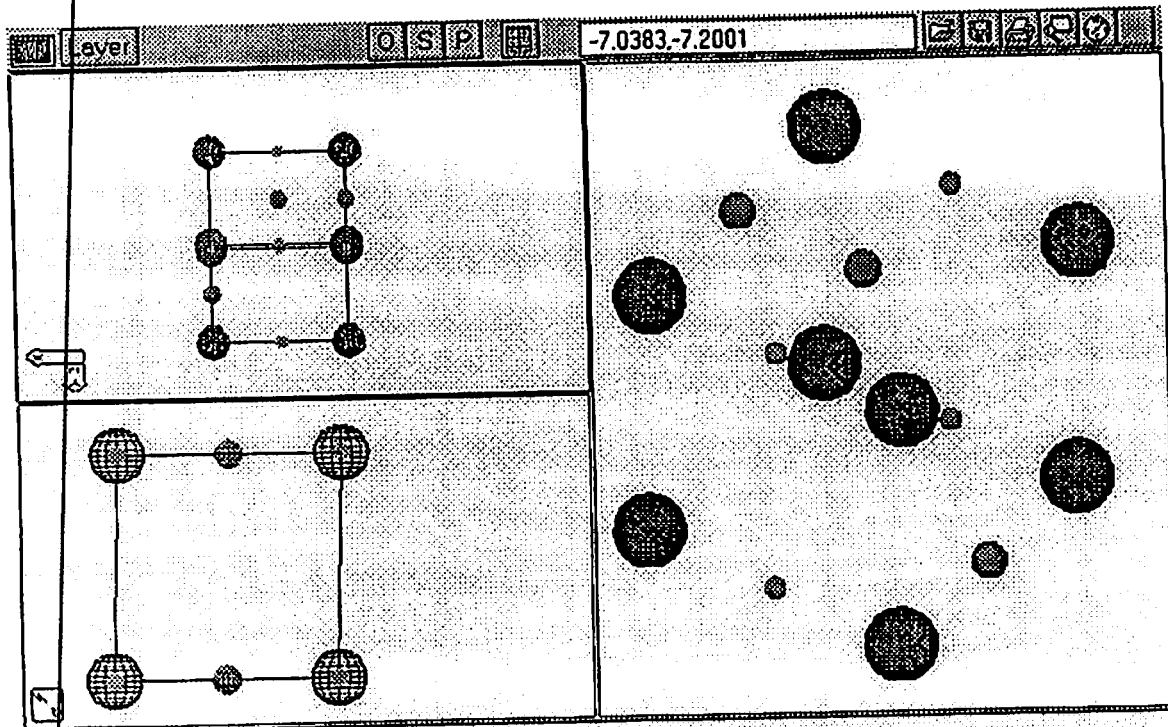
Tabel 4.1.8 Koordinat posisi atom

Atom 1	440 400 040 000 444 404 044 004
Atom 2	420 224 024
Atom 3	240 200 244 204

## Konstanta Kisi Monoklinik

$$A = 7,834\text{Å} \quad B = 8,407\text{Å} \quad C = 5,000\text{Å}$$

$$\text{Konstanta Sudut} \quad \beta = 96,314^\circ$$



Gambar 4.4 Struktur kristal monoklinik  $Rb_2V_6O_{16}$

4.1.5 Struktur Kristal Triklinik  $\text{Cd}_2\text{B}_2\text{O}_5$ Tabel 4.1.9 Data Hasil  $\text{Cd}_2\text{B}_2\text{O}_5$ 

No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	9,56	5	001	10	2,97	35	110
2	6,12	20	010	11	2,95	10	0-22
3	5,94	20	0-11	12	2,84	90	10-2
4	4,79	5	002	13	2,78	80	102
5	4,63	100	011	14	2,72	30	1-12
6	4,38	20	0-12	15	2,59	25	0-23
7	3,21	35	0-13	16	2,57	30	013
8	3,07	30	020	17	2,47	5	0-14
9	3,01	30	111	18	2,38	20	110

Tabel 4.1.10 Koordinat posisi atom

Atom 1	000 444 440 404 400 400 040 004
Atom 2	223 221
Atom 3	231 213

## Konstanta Kisi Triklinik

$A = 3,450\text{Å}$

$B = 6,429\text{Å}$

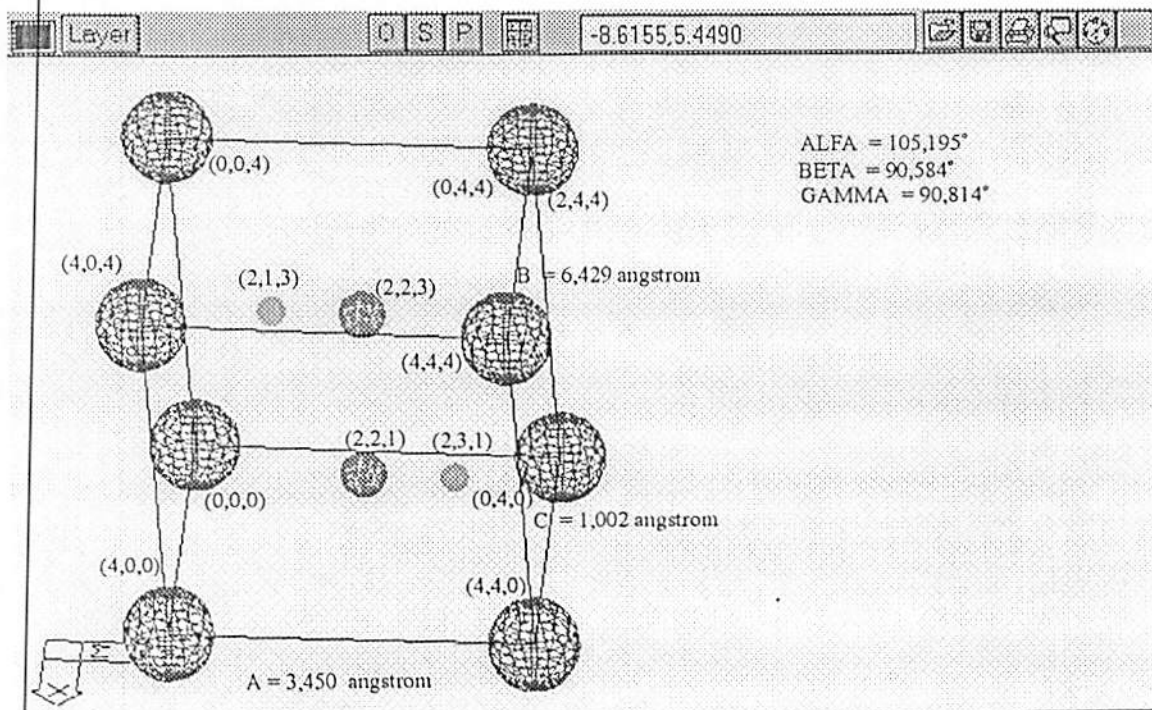
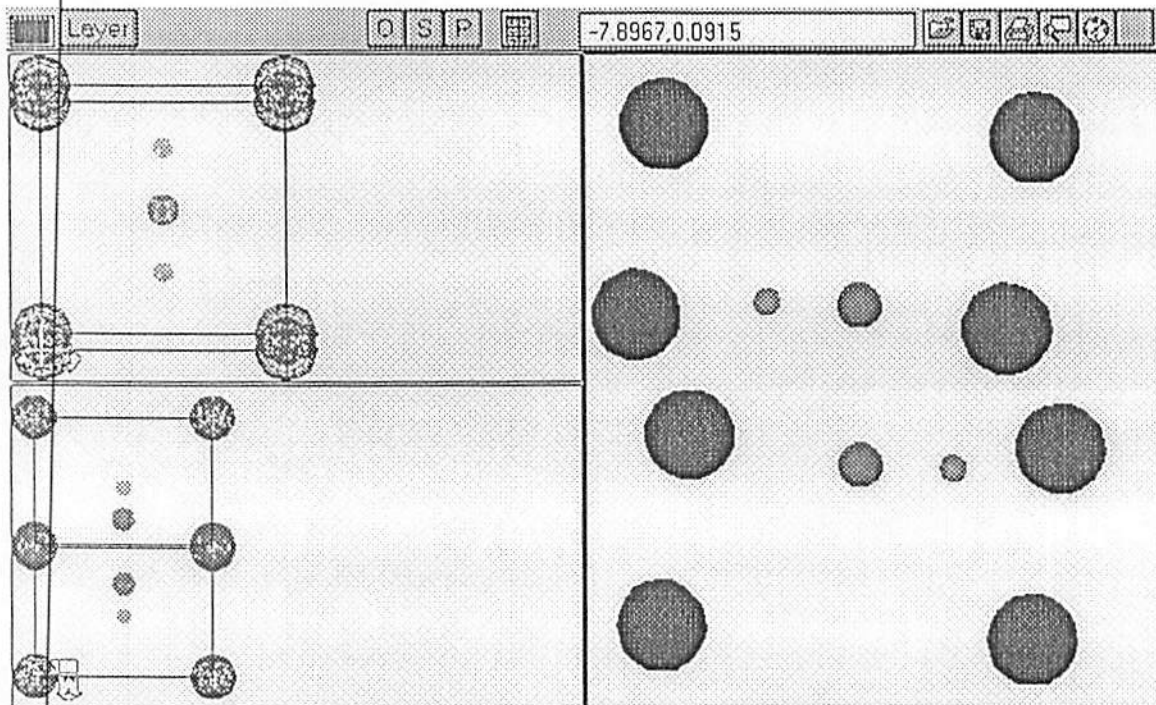
$C = 1,002\text{Å}$

## Konstanta Sudut

$\alpha = 105,195^\circ$

$\beta = 90,584^\circ$

$\gamma = 90,814^\circ$



Gambar 4.5 Struktur kristal triklinik  $Cd_2B_2O_7$ ,

4.1.6 Struktur Kristal Tetragonal  $\text{BPO}_4$ Tabel 4.1.11 Data Hasil  $\text{BPO}_4$ 

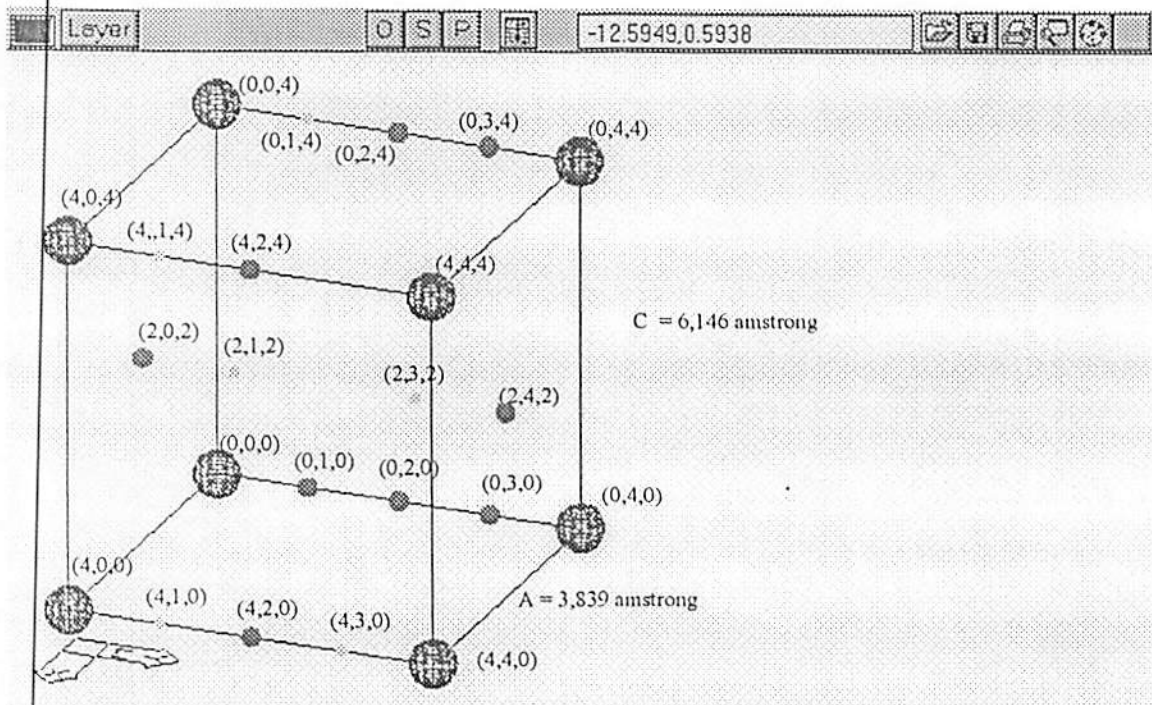
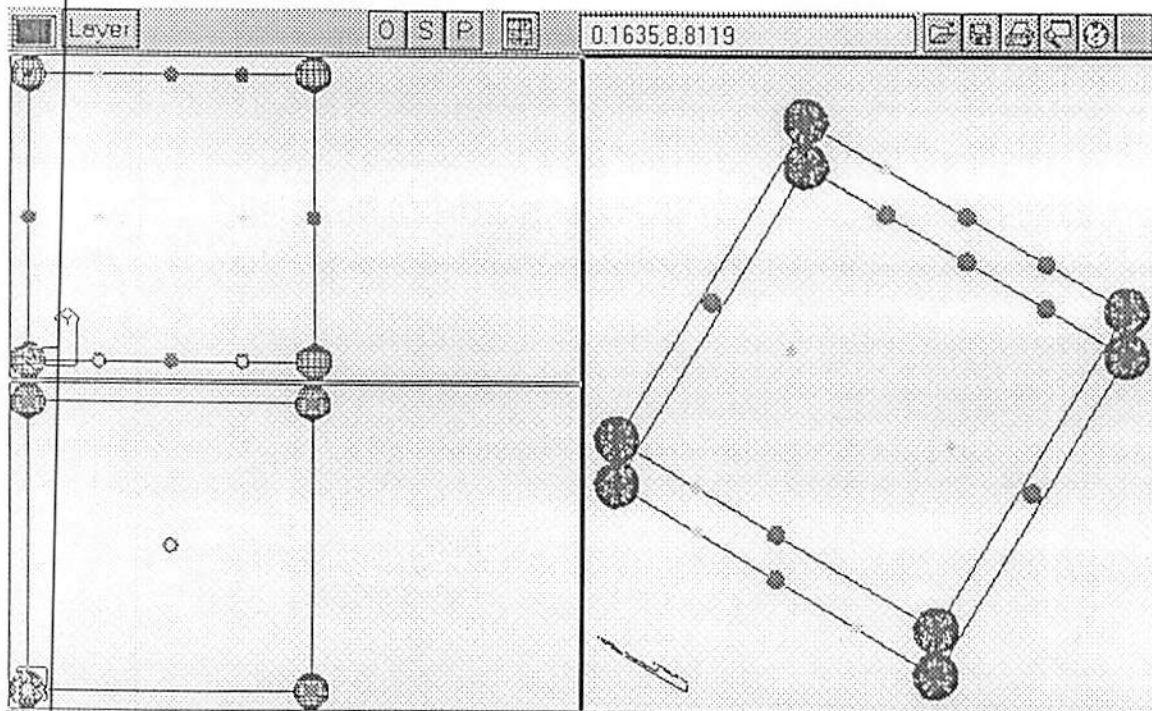
No	$d(\text{Å})$	$I/I_0$	hkl	No	$d(\text{Å})$	$I/I_0$	hkl
1	3,632	100	101	10	1,460	8	213
2	3,322	4	002	11	1,413	1	301
3	3,067	4	110	12	1,393	1	222
4	2,254	30	112	13	1,372	2	310
5	1,973	2	013	14	1,319	4	204
6	1,852	8	121	15	1,271	1	105
7	1,816	4	202	16	1,268	2	132
8	1,661	1	004	17	1,211	2	303
9	1,534	2	220	18	1,184	2	321

Tabel 4.1.12 Koordinat posisi atom

Atom 1	000 004 040 044 444 400 404 440
Atom 2	020 024 202 242 420 424 030 010 034
Atom 3	430 014 212 232 410 414 404

## Konstanta Kisi Tetragonal

$$A = 3,839\text{Å} \quad C = 6,146\text{Å}$$



Gambar 4.3 Struktur kristal tetragonal BPO<sub>4</sub>

4.1.7 Struktur Kristal Heksagonal  $\text{LiAl}_5\text{S}_8$ Tabel 4.1.13 Data Hasil  $\text{LiAl}_5\text{S}_8$ 

No	d(Å)	I/I <sub>o</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>o</sub>	hkl
1	4,001	20	0	7	2,270	10	1.0.11
2	3,105	80	102	8	2,082	10	1.0.13
3	2,878	40	105	9	1,812	100	110
4	2,682	60	107	10	1,760	80	1.0.17
5	2,581	20	108	11	1,653	30	119
6	2,369	20	1.0.10				

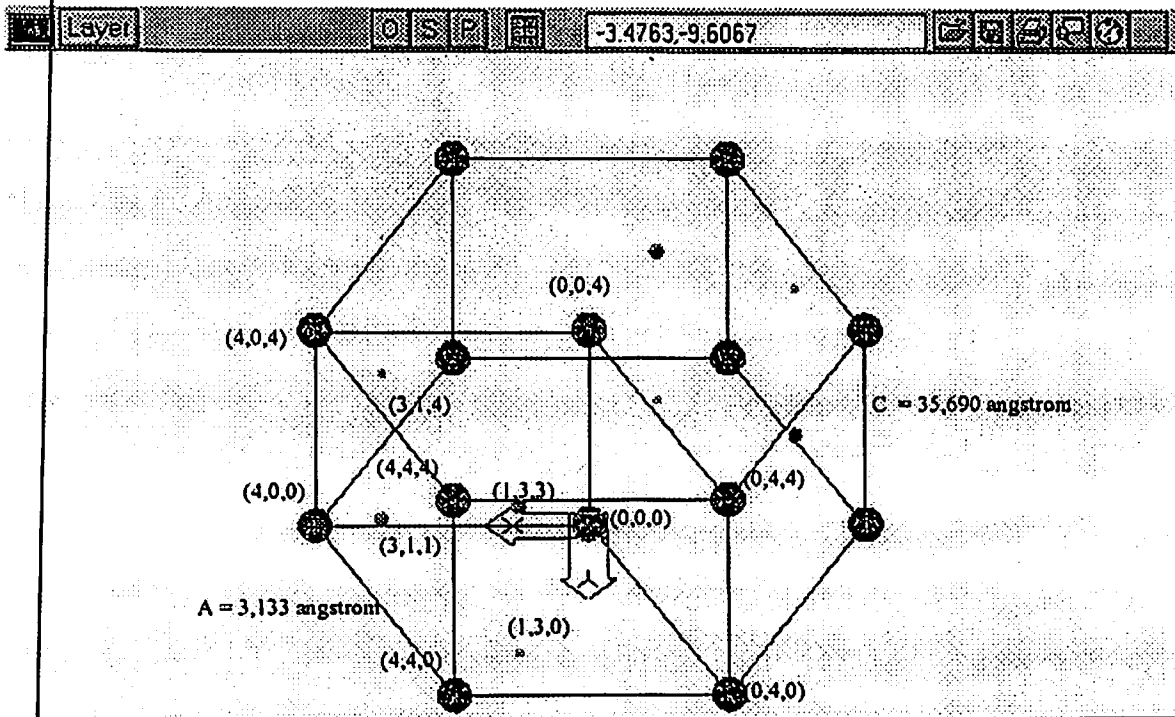
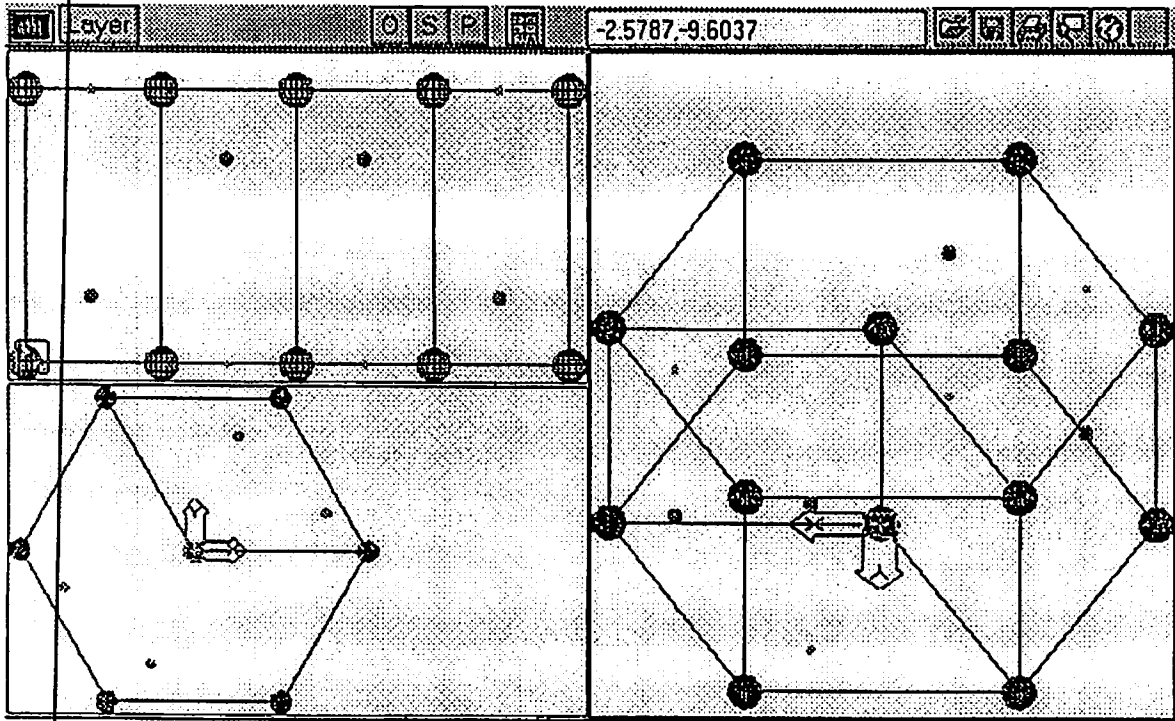
Tabel 4.1.14 Koordinat posisi atom

Atom 1	000 444 440 404 400 044 040 004
Atom 2	311 133
Atom 3	130 314

Konstanta Kisi Heksagonal

$$A = 3,133\text{Å}$$

$$C = 35,690\text{Å}$$



Gambar 4.7 Struktur kristal heksagonal  $\text{LiAl}_2\text{S}_2$



4.1.9 Struktur Kristal Rhombohedral  $B_{13}P_2$ Tabel 4.1.15 Data Hasil  $B_{13}P_2$ 

No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl	No	d(Å)	I/I <sub>0</sub>	hkl
1	4,740	1	101	16	1,509	90	125
2	3,880	60	012	17	1,495	50	220
3	2,978	60	110	18	1,426	50	311
4	2,569	80	104	19	1,417	30	027
5	2,522	100	021	20	1,397	50	223
6	2,149	40	015	21	1,299	60	306
7	1,971	5	006	22	1,293	20	134
8	1,946	5	204	23	1,287	30	208
9	1,927	50	121	24	1,265	1	402
10	1,854	1	122	25	1,229	60	135
11	1,722	5	030	26	1,205	20	119
12	1,645	70	116	27	1,193	20	226
13	1,632	20	124	28	1,106	10	232
14	1,607	10	107	29	1,155	20	10-10
15	1,582	10	303				

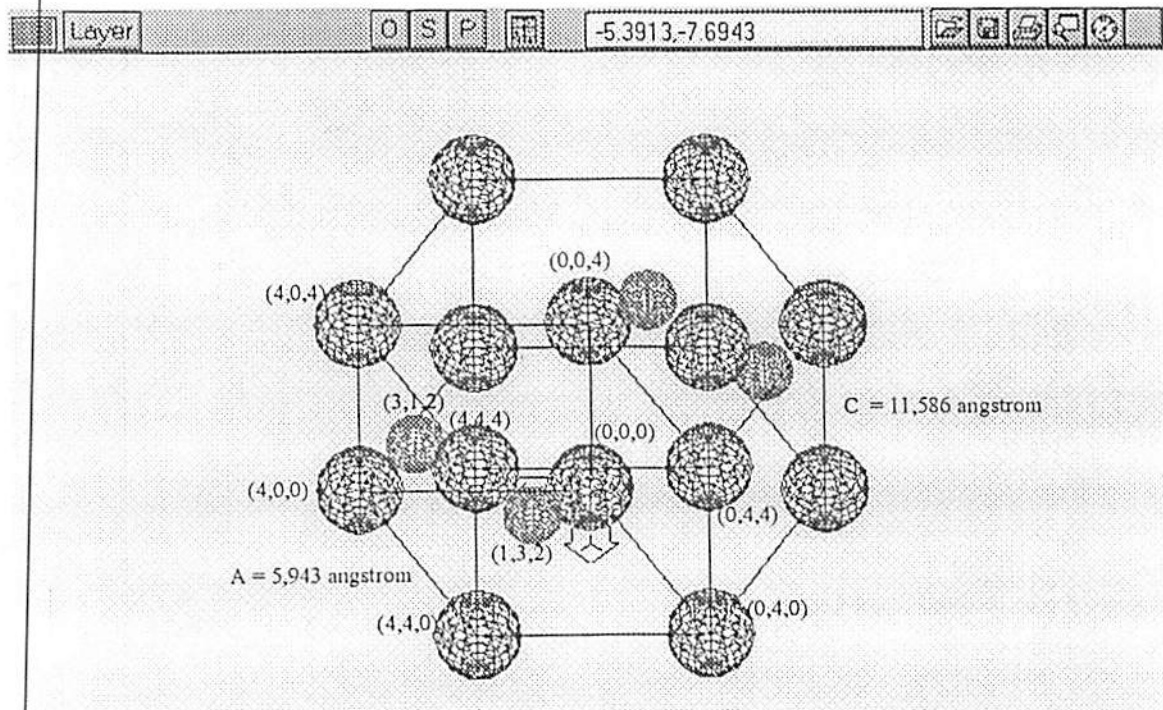
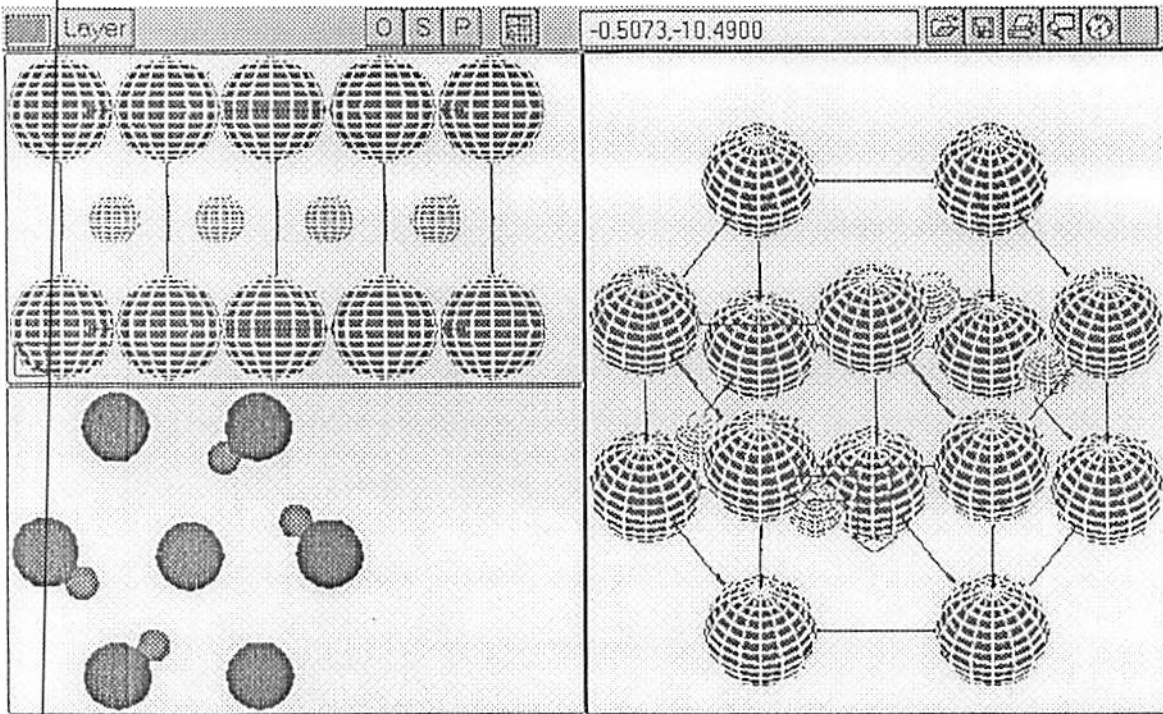
Tabel 4.1.16 Koordinat posisi atom

Atom 1	444 440 404 400 044 040 004 000
Atom 2	312 132

Konstanta Kisi Rhombohedral

$$A = 5,943 \text{ \AA}$$

$$C = 11,586 \text{ \AA}$$



Gambar 4.8 Struktur kristal heksagonal (rhombohedral)  $B_{13}P_2$

## 4.2 Pembahasan

Dari tabel hasil penelitian di atas dapat dilihat kemampuan program Pascal yang dibuat mampu memproses data hasil difraktometer sinar X untuk seluruh sistem kristal. Dengan membandingkan hasil tersebut dengan kartu Hanawalt dapat diketahui kevalitannya. Untuk penentuan struktur kristal kubik, tetragonal, heksagonal, monoklinik, dan triklinik menunjukkan kecocokan 100%. Hanya pada uji data untuk data  $B_{13}P_2$  ternyata program memberikan hasil bahwa strukturnya adalah heksagonal, terbukti dengan tidak terdapatnya konstanta sudut alfa dan adanya konstanta kisi C yang merupakan ciri perbedaan struktur heksagonal dengan rhombohedral.

Pencocokan bidang difraksi hkl hasil perhitungan dengan kartu Hanawalt untuk masing masing struktur kristal menunjukkan kecocokan. Jadi untuk setiap data diperoleh harga hkl yang tepat sama dengan kartu Hanawalt. Tetapi ada perbedaan harga konstanta sudut dan konstanta kisi antara perhitungan dengan kartu Hanawalt. Perbedaan harga kurang lebih 0,3 Angstrom dan  $0,3^\circ$  ini masih dapat ditoleransi selama tidak menimbulkan ketidakcocokan harga hkl-nya dengan kartu Hanawalt.

Dari hkl yang diperoleh perhitungan dilanjutkan untuk mendapatkan koordinat posisi atom uvw melalui transformasi Fourier ke fungsi Peterson. Dan penggambaran posisi atom dengan program Autocad cukup memberi gambaran tentang keadaan struktur kristal bahan. Penggambaran dilakukan untuk menunjukkan posisi atom yang diwakili oleh tiap-tiap koordinat, kemudian dari beberapa sudut pandang dapat dilihat

kedudukan atom-atom dalam struktur kristal. Dengan penggambaran inilah diharapkan akan dapat dibuat suatu koreksi terhadap program yang telah dibuat.

Secara matematis program ini telah dibuat sedemikian hingga dapat memproses setiap masukan data. Sejauh ini program dapat menghitung bidang pendifraksi, konstanta kisi, konstanta sudut untuk seluruh sistem kristal. Akan tetapi dari hasil penggambaran sangat perlu pengkoreksian atas kemungkinan-kemungkinan bagaimana atom berikatan, bilangan koordinasi, dan sebagainya yang akan memberi kemungkinan terbesar suatu atom akan membentuk struktur kristal tertentu. Oleh karena itu perlu suatu syarat batas kimia atau fisika agar program ini dapat disempurnakan.

Terlepas dari hal tersebut di atas penggambaran yang berhasil dilakukan belum diperoleh suatu literatur pembandingan. Dan sangat disadari adanya beberapa kejanggalan posisi atom. Oleh karena itu pengujian dengan banyak data untuk masing-masing sistem kristal akan dapat memberi masukan kearah penyempurnaan program ini. Kendala selama ini sangat sulit diperoleh sampel dengan kemurnian tinggi untuk beberapa struktur kristal agar diperoleh data yang cukup akurat. Kristalinitas yang rendah, ketakmurnian sampel dan cacat pada bahan juga mengurangi keakuratan sampel.

## BAB V

### KESIMPULAN

#### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian di atas dapat disimpulkan :

1. Program Pascal yang dibuat mampu menentukan struktur kristal bahan, konstanta kisi, konstanta sudut, bidang pendifraksi hkl dan koordinat posisi atom uvw dari 7 sistem kristal yang terdiri atas 14 kisi Bravais.
2. Program Autocad 12 dapat menggambarkan posisi atom uvw yang dihasilkan oleh program Pascal menjadi bentuk tiga dimensi dengan pengamatan posisi atom dari beberapa sudut pandang.

#### 5.2. Saran

1. Untuk menyempurnakan program perlu memasukkan kaidah-kaidah ilmu kimia dan fisika dan dicoba untuk banyak data dari masing-masing sistem kristal agar hasilnya lebih akurat.
2. Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk struktur kristal yang kompleks dari data difraktometer sinar X dari sampel yang tidak murni.

## 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 I, 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.

LAMPIRAN I  
PROGRAM PASCAL  
PENENTUAN POSISI ATOM KRISTAL BAHAN

```

Program Awal;
Uses Crt,Dos,KeduaTMP;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real ;
    Nan,Data : Integer;
    Lmd : Real;
  end;
Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileMax,K,I,J,
  JumlahAtom,I,Jumlah,Panjang,X,Y : Integer;
  DD,Int : Array[1..100] of real;
  PjgG : Real;
  Perintah : String[100];
  Jawab : Char;

Procedure layar;
Begin
  For K:=1 to 2 do
  begin
  if K=1 then TextColor(3);if K=2 then TextColor(11);
  For J:=1 to 40 do
  begin
  If K=1 then begin X:=81-J;Y:=J;end;
  If K=2 then begin X:=40+J;Y:=41-J;end;
  For I:=1 to 5 do
  begin
  GotoXY(Y,I);Write('U');GotoXY(X,I);Write('U');
  end;
  For I:=6 to 24 do
  begin
  GotoXY(Y,I);Write('*');GotoXY(X,I);Write('*');
  end;
  gotoXY(2,1);Write("Program Penentuan Kristal, Jurusan Fisika 1997");
  Sound(450*J*K);delay(200);
  end;
end;nosound;
end;
Procedure Bawah;
begin
  TextBackGround(1);For I:=1 to 79 do begin GotoXY(I,25);Write(' ');end;
  TextColor(14); GotoXY(1,25);
end;
Procedure Bayangan;
begin
  If Y < 15 then K:=3 Else K:=7;
  TextBackGround(1);
  For I:=1 to K do
  For J :=0 to panjang do
  begin
  GotoXY(X+J.Y+I);Write(' ');
  end;
end;
end;
Procedure SimpanSemu;
begin
  Assign(FileInput,'c:\turbo\pas\Masukan');
  Rewrite(FileInput);
  Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
  FileMax := FileSize(FileInput);
  With RecordInput do
  begin
  Data:= Jumlah;Nan:=JumlahAtom;Lmd:=PjgG;
  For I:=1 to Jumlah do
  begin
  Intensitas[I]:=Int[I];
  If (Jawab='d') or (jawab='D') then InputAwal[I]:=DD[I];
  If (Jawab='t') or (jawab='T') then
  begin

```



```

DD[I]:=(DD[I]/360)*pi;
InputAwal[I]:=PjgG/(2*Sin(DD[I]));
end;
end;
write(FileInput,RecordInput);
end;
end;
Procedure suara;
begin
For I:=1 to 100 do
begin
Sound(100*I);delay(20);
end;
For I:=1 to 60 do
begin
Sound(100-I);delay(30);
end;
nosound;
end;
Procedure Masukan;
begin
suara;X:=18;Panjang:=46;Y:=7;bayangan;
TextBackGround(7);TextColor(0);
GotoXY(16,7);Write('UAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA');
GotoXY(16,8);Write(' Panjang gelombang yg. dipakai : ');
GotoXY(16,9);Write('AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAU');
bawah;Write(' Masukkan data panjang gelombangnya dalam angstrom !!');
TextBackGround(7);TextColor(0);
GotoXY(49,8);readln(PjgG);
suara;X:=25;Panjang:=19;Y:=8;bayangan;
TextBackGround(8);GotoXY(25,9);writeln(' ');
TextBackGround(3);TextColor(15);
GotoXY(23,8);Write('UAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA');
GotoXY(23,9);Write(' Jumlah atom : ');
GotoXY(23,10);Write('AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAU');
bawah;Write(' Masukkan jumlah atom yg. utama !!!! ');
TextBackGround(3);TextColor(15);
GotoXY(38,9);readln(JumlahAtom);
suara;X:=5;Panjang:=19;Y:=11;bayangan;
TextBackGround(7);TextColor(0);
GotoXY(3,11);Write('UAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA');
GotoXY(3,12);Write(' Jumlah data : ');
GotoXY(3,13);Write('AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAU');
bawah;Write(' Masukkan jumlah data ');
TextBackGround(7);TextColor(0);
GotoXY(18,12);readln(Jumlah);
suara;X:=48;Panjang:=29;Y:=11;bayangan;
TextBackGround(7);TextColor(0);
GotoXY(46,11);Write('UAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA');
GotoXY(46,12);Write('Data dalam d atau 2Teta : ');
GotoXY(46,13);Write('AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAU');
bawah;Write(' Tekan "d" bila data dlm. d atau "t" bila data dalam 2 x teta !!');
TextBackGround(7);TextColor(0);
Repeat;GotoXY(73,12);readln(Jawab);Until (jawab='d') or (jawab='D') or (jawab='t') or (jawab='T') ;
suara;X:=8;Panjang:=68;Y:=16;bayangan;
TextBackGround(0);TextColor(15);

GotoXY(6,16);Write('UAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA
AA');
If (Jawab='d') or (Jawab='D') then begin
GotoXY(6,17);Write(' No. Harga d (mulai terbesar) Intensitas ');end;
If (Jawab='t') or (Jawab='T') then begin
GotoXY(6,17);Write(' No. Harga (mulai terkecil) Intensitas ');end;
GotoXY(6,18);Write(' ');
GotoXY(6,19);Write(' ');
GotoXY(6,20);Write(' ');
GotoXY(6,21);Write(' ');

```

```

GotoXY(6,22);Write('AAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAAA
ÄÜ');
If (Jawab='d') or (Jawab='D') then begin
bawah;Write(' Masukkan data d terbesar dahulu !!');end;
If (Jawab='l') or (Jawab='L') then begin
bawah;Write(' Masukkan data teta terkeci dahulu ( dalam derajat ) !!');end;
Il:=0;
TextBackGround(0);TextColor(11);
For l:=1 to Jumlah do
begin
Il:=Il+1;
GotoXY(26,Il+17);writeln(' ');GotoXY(56,Il+17);writeln(' ');
GotoXY(10,Il+17);write(l.'. ');GotoXY(26,Il+17);readln(DD[l]);GotoXY(56,Il+17);
readln(IN[l]);
IF (Il mod 3)=0 then Il :=0;
end;
end;
Procedure Eksekusi;
begin
SwapVectors;
Exec(GetEnv('COMSPEC'), '%C ' + perintah);
SwapVectors;
end;

begin
Clrscr;TextBackGround(1);
Layar:masukan;
SimpanSemu;writeln('DDDDDDDDDDDDDD');readln;
Close(FileInput);
RangkaUtama;
perintah:='dificubic';eksekusi;
perintah:='difetra';eksekusi;
perintah:='difhexa';eksekusi;
perintah:='D_Ortho';eksekusi;
perintah:='D_Monoc';eksekusi;
perintah:='D_Tricin';eksekusi;
perintah:='D_Trigo';eksekusi;
readln;
perintah:='Gambar';eksekusi;
end.

```

```
Program Difraktometer_Cubic;
```

```
Uses Crt,Koord;
```

```
Type
```

```
Input = record
```

```
  Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
```

```
  Nan,Data : Integer;
```

```
  lmd : real;
```

```
end;
```

```
Info = record
```

```
  Ambil : Integer
```

```
end;
```

```
Var
```

```
FileInput : File of Input;
```

```
RecordInput : Input;
```

```
FileInfo : File of Info;
```

```
RecordInfo : Info;
```

```
H,K,L,J,J1,Sudah,Betul,selesai,HH,KK,LL,J2,dk,kks,
```

```
nn,Nlama,Benar,terus,DataTransfer,J3,bukan : Integer;
```

```
SinTeta,CosTeta,Cos2Teta,Lamda,A1,
```

```
tmb,Filter,P,SS,Kecil,AHasil,D ,A,s,bb : Real;
```

```
mp,H1,K1,L1 : Array[0..100] of Integer;
```

```
mm : Array[1..50] of real;
```

```
Procedure Model_Kubik;
```

```
begin
```

```
  Kecil := 500;
```

```
  For H := 1 to 9 do
```

```
    For K := 0 to 9 do
```

```
      For L := 0 to 9 do
```

```
        begin
```

```
          S := Sqr(H) + Sqr(K) + Sqr(L);
```

```
          D := A/Sqr(S);
```

```
          If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000) <= kecil then
```

```
            begin
```

```
              Sudah := 1;
```

```
              H1[J1] := H;K1[J1]:=K;L1[J1]:=L;
```

```
              mm[J1] := Sqr(h)+Sqr(k)+Sqr(L);
```

```
              Kecil := (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000) ;
```

```
              If J1 > 1 Then
```

```
                For J2 := 1 to J1 - 1 do
```

```
                  If mm[J1] = mm[J2] Then sudah := 0;
```

```
            end;
```

```
          end;
```

```
          If sudah = 1 then betul:= betul + 1;
```

```
        end;
```

```
Procedure Multiplisitas;
```

```
begin
```

```
  If (H1[I] <> K1[I]) and (L1[I] <> K1[I]) and (H1[I] <> L1[I]) then mp[I] :=48;
```

```
  If ((H1[I] = K1[I]) and (L1[I] <> K1[I])) or ((H1[I] = L1[I]) and (H1[I] <>L1[I]))
```

```
  or ((K1[I] = L1[I]) and (H1[I] <> K1[I])) then mp[I] := 24;
```

```
  If ((H1[I]=0) or (K1[I]=0)) or (L1[I]=0) then
```

```
  If (H1[I] <> K1[I]) and (L1[I] <> K1[I]) and (H1[I] <> L1[I])
```

```
  then mp[I]:=24 else mp[I]:=12;
```

```
  If (H1[I]=K1[I]) and (H1[I]=L1[I]) then mp[I] := 8;
```

```
  If ((H1[I]=0) and (K1[I]=0)) or
```

```
  ((L1[I]=0) and (K1[I]=0))
```

```
  or ((L1[I]=0) and (H1[I]=0)) then mp[I]:= 6;
```

```
end;
```

```
Procedure Ambildata;
```

```
begin
```

```
  Assign(FileInput,'Masukan');
```

```
  Reset(FileInput);
```

```
  Read(FileInput,RecordInput);
```

```
  Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
```

```
end;
```

```
procedure satu;
```

```
Begin
```

```
  Selesai := 0;
```

```

AmbilData;
HH := 0 ;
For I :=1 to 5 do
If selesai = 0 then
For KK := 0 to 4 do
If selesai = 0 then
For LL := 1 to 4 do
If selesai = 0 then
begin
SS := Sqr(HH) + Sqr(KK) + Sqr(LL);
A := RecordInput.InputAwal[I]*Sqr(SS);
TextBackGround(0);TextColor(15);
J3:=0;Ahasil :=A;
Repeat;
J3:=J3+1;A:=Ahasil;
GotoXY(30,22);write(' A: 'A.' ',HH.' ',KK.' ',LL);readln;
If A > 12 then A := 0;
Betul := 0;terus := 1;
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
If terus = 1 then
begin
Sudah := 0;
Model_Kubik;
If sudah = 0 then terus := 0;
end;
If betul = RecordInput.Data then
begin
selesai := 1; Ahasil := 0;
For l := 1 to RecordInput.Data do
begin
SS := Sqr(H1[l]) + Sqr(K1[l]) + Sqr(L1[l]);
A1 := RecordInput.InputAwal[l]*Sqr(SS);
Ahasil := Ahasil + A1;
end;
Ahasil := Ahasil/RecordInput.Data;
end;
Until (ABS(Ahasil-A) <= 0.01) or ( J3 = 10 );
end;
end;
end;
end;
end;
end;

```

```

Var
bt,M,IKM,Tb,kecil3,I,Jn,Kn,Inn,
B1,C1,I5,masuk,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,tengah,sudahselesai,ganti,
I1,batas,bn,
IJ,IK,I2,terus2,I0,terus3 : Integer;
kecil2,aa.
B,SL,C : Real;
U,V,W : Ar;
T : Br;
H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
T1,Lp,F2,P1,Puncak : array[-1..65] of real;
Simpan : Array[1..801,1..25] of integer;
TbMax : array[1..50] of Integer;

```

Procedure Trigonometri;

```

begin
SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
Cos2Teta := Sqr(CosTeta)-Sqr(SinTeta);
end;

```

Procedure faktorStruktur;

```

begin
lamda := RecordInput.lmd;
For l := 1 to RecordInput.Data do
begin
Trigonometri;
Lp[l] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
F2[l] := RecordInput.Intensitas[l]/(Mp[l]*Lp[l]);
end;
end;

```

```

end;
Procedure NilaiPuncak;
begin
  For J1 := 1 to RecordInput.Data do
    begin
      I:=J1;Multiplisitas;
      if mpj[1] = 0 then masuk:=0;
      end;
    If masuk=1 then
      begin
        sudahselesai := 1;
        faktorStruktur;
        JA := 0;JM:=4;
        P1[-1]:=-1;
        For I:= 0 to JM do
          For J:=0 to Jm do
            For K :=0 to JM do
              begin
                P1[Jm+1]:=-1;sudah :=0;
                P := 0;
                For L := 1 to RecordInput.Data do
                  P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*(H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
                    (L1[L]*K/Jm));
                P1[K] := P;
                If ( K = Jm ) And (P1[K] >= P1[K-1]) and ( sudah=0) then
                  begin
                    JA := JA + 1;
                    Puncak[JA] := P1[K];
                    I2i[JA] := I;
                    J2i[JA] := J;
                    K2i[JA] := K;sudah := 1;
                  end
                Else
                  If ( P1[K] <= P1[K-1]) and (K-1 <> -1 ) and (P1[K-1] > P1[K-2])
                    and ( sudah = 0 ) then
                      begin
                        JA := JA + 1;
                        Puncak[JA] := P1[K-1];
                        I2i[JA] := I;
                        J2i[JA] := J;
                        K2i[JA] := K-1;
                      end;
                end;
            end;
          Balas1 := JA;N:=0;NN:=0;
          J3:=0;tengah :=0;T[0]:=0;
          Repeat
            J3 := J3 + 1;
            Puncak[I3] := -1;
            Filter := 0;
            For JA := 1 to Batas1 do
              If ( Puncak[JA] >= Filter) then
                begin
                  T[J3] := Puncak[JA];
                  U[J3] := I2i[JA];
                  V[J3] := J2i[JA];
                  W[J3] := K2i[JA];
                  Filter := Puncak[JA];
                  I3 := JA;
                end;
              If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
                begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
                If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
                if N=Nlama then NN:=NN+1;
                If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
                  then begin N:=NA+1;end;
                If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
                  then begin N:=NA+1;end;
                If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
                  then begin N:=NA+1;end;
                If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else

```

```

If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
Until N >= NA+1;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
bt := 0;
For M:=1 to J3-1 do
If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
begin
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1)
and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
bt := 0;
if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
For M:=1 to J3-1 do
If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
begin
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
and (M<>I ) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (M<>I) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
J:=0;N:=0;I1:=5;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
J:=J+1;
If (Abs(T[I]-1)-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
GotoXY(I1,J+2);
write(N,' ',U[I],' ',V[I],' ',W[I]);
If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;
end;

Procedure Model_Cubic1;
begin
sudah := 0;Tb := -1;
For H := 0 to batas do
For K := 0 to batas do
For L := 0 to batas do
begin
SL := Sqr(H) + Sqr(K) + Sqr(L);
if SL <> 0 then D := A/Sqr(SL) Else D:=1e-12;
If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 < kecil) then
begin
Sudah := 1;
Tb := Tb + 1;
TbMax[J1] := Tb;
H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
end;
end;
end;
If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
end;
procedure Dua;

```

```

Begin
Kecil := 20;batas := 9;AA:=Ahasil;NA:=RecordInput.nan;dk:=0;
sudahselesai:=0;
For I0:= 0 to 100 do
  If (sudahselesai=0) then
    Begin
      Terus:= 1;
      A := AA-0.5 +(1/100)*I0;
      TextBackGround(0);TextColor(15);A:=5.6534;
      GotoXY(30,22);write(' A: ',A);
      H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
      betul := 0;
      For J1 :=1 to RecordInput.Data do
        If terus = 1 then
          begin
            Model_Cubic1;
            If sudah = 0 then terus := 0;
          end;
          If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
            begin
              masuk:=1;
              AHasil := A
            end;
            if masuk = 1 then
              begin
                For Jn := 1 to 801 do
                  For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
                  Kn := 0;
                  Repeat
                    Repeat
                      Kn := Kn + 1;BT:=0;
                      Repeat
                        benar :=1;
                        bt:=BT+1;
                        For J1 := 1 to RecordInput.Data do
                          If benar=1 then
                            begin
                              Inn:=-1;
                              Repeat
                                Inn := Random(Tbmax[J1]);
                                simpan[kn,J1]:=Inn;
                                H1[J1] := H11[J1,Inn];
                                K1[J1] := K11[J1,Inn];
                                L1[J1] := L11[J1,Inn];
                                mm[J1]:=Sqr(H1[J1])+Sqr(K1[J1])+Sqr(L1[J1]);
                                benar:=1;
                                If J1 > 1 then
                                  begin
                                    For J2 :=1 to J1-1 do
                                      If mm[J1]= mm[J2] then benar:=0;
                                    end;
                                    until (benar=1) or (Inn=Tbmax[J1]);
                                  end;
                                Until (benar=1) OR (BT=100);
                                If kn >= 2 then
                                  begin
                                    For Jn := 1 to Kn-1 do
                                      begin
                                        bn:=0;
                                        For J1 := 1 to RecordInput.Data do
                                          If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then bn := bn+1;
                                          If bn= RecordInput.Data then benar:=0;
                                        end;
                                      end;
                                    if (kn=800) and (sudahselesai<>1) then dk:=dk+1;
                                    Until (benar=1) or (dk=2);
                                    if (Kn<>800) then NilaiPuncak;
                                  Until (sudahselesai=1) or (kn=800) ;
                                end; J:=0;I:=6;
                              end;

```

```

If sudahselesai=1 then
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
begin
  J:=J+1;
  GotoXY(1,J+14);Write(J1,':',H1[J1],',',K1[J1],',',L1[J1]);
  If ((J + 14 ) =19) then begin J:=0;I:=I+10;end;
end;
If sudahselesai=1 then
begin
TextColor(0);TextBackGround(7);
GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Cubic ');
sound(1000);delay(2000);nosound;
end;
Close(FileInput);
end;
{Program Utama}
Begin clrscr;
Satu;randomize;writeln('      sudah ');readln;
If selesai=1 then Dua
Else begin
TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan Cubic ');
end;
Assign(FileInfo,'Masukan2');
Rewrite(FileInfo);
Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;
write(FileInfo,RecordInfo);
Close(FileInfo);
end.

```



Program Difraktometer\_Tetragonal;

Uses Crt,koord;

Type

Input = record

Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;

Nan,Data : Integer;

lmd : Real;

end;

Info = record

Ambil : Integer

end;

Var

FileInput : File of Input;

RecordInput : Input;

FileInfo : File of Info;

RecordInfo : Info;

HH1, KK1, LL1, HH, KK, Sudah, betul, benar, J2, I1, H, K, L, I, J, J1, batas, terus,

NN, Nlama, DataTransfer, IKK, Terus2, IK, IKJ, I0, selesai : Integer;

Kecil, SL, C, AHasil, D, A, s, bb, Chasil, LL, SS : Real;

Mp, H1, K1, L1 : Array[0..200] Of Integer;

Alama, Clama : Array[1..100] of real;

Procedure Multiplisitas;

begin

If (H1[J1] <> K1[J1]) and (L1[J1] <> 0) then Mp[J1] := 16;

If (H1[J1] = K1[J1]) and (L1[J1] <> H1[J1]) then Mp[J1] := 8;

If ((H1[J1] <> L1[J1]) or (L1[J1] <> K1[J1])) and ((H1[J1] = 0) or (K1[J1] = 0)) then Mp[J1] := 8;

If (H1[J1] = K1[J1]) and (H1[J1] = 0) then Mp[J1] := 2;

If (H1[J1] <> K1[J1]) and (L1[J1] = 0) then Mp[J1] := 8;

If (H1[J1] = K1[J1]) and (L1[J1] = 0) then Mp[J1] := 4;

If ((H1[J1] = 0) or (K1[J1] = 0)) and (L1[J1] = 0) then Mp[J1] := 4;

end;

Procedure Model\_Tetragonal;

begin

Kecil := 50;

sudah := 0;

For L := 0 to batas do

For K := 0 to batas do

For H := 0 to batas do

begin

S := Sqr(H) + Sqr(K);

SL := (S/Sqr(A)) + Sqr(L/C);

If SL <> 0 then D := 1/Sqr(SL) Else D := 1e12;

If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)\*1000 < kecil) then

begin

H1[J1] := H; K1[J1] := K; L1[J1] := L;

Kecil := Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)\*1000;

Sudah := 1;

If J1 <> 1 then

For J2 := 1 to J1-1 do

begin

benar := 0;

If H1[J1] = H1[J2] Then benar := benar + 1;

If K1[J1] = K1[J2] Then benar := benar + 1;

If L1[J1] = L1[J2] Then benar := benar + 1;

If benar = 3 then sudah := 0;

benar := 0;

If H1[J1] = K1[J2] Then benar := benar + 1;

If K1[J1] = H1[J2] Then benar := benar + 1;

If L1[J1] = L1[J2] Then benar := benar + 1;

If benar = 3 then sudah := 0;

end;

end;

end;

If sudah = 1 Then betul := betul + 1;

end;

Procedure satu;

Begin

Assign(FileInput, 'Masukan');

```

Reset(FileInput);
Read(FileInput,RecordInput);
Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
Selesai := 0;
batas := 9;
For IKK:= 1 to 100 do
  Alama[IKK] := 0;
IKK := 0;
For l := 6 downto 1 do
  For HH := 0 to 2 do
    For KK := 1 to 2 do
      If Selesai = 0 Then
        begin
          lkK := IKK + 1;
          Sudah := 0;terus2 := 1;
          SS := Sqr(HH)+Sqr(KK);
          LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[l]))*(1/SS) ;
          A := Sqrt(1/LL);
          TextBackGround(0);TextColor(15);
          GotoXY(6,22);write(" A: ",A);
          If A >= 20 then terus2 := 0;
          For IKJ:= 1 to 100 do if (Abs(A -Alama[IKJ])<=0.05) then terus2 := 0;
          Alama[IKK] := A;
        end;
      For lk := 1 to 100 do
        Clama[lk] := 0;
        lk := 0;
        If Terus2 = 1 then
          For l0 := 1 to 5 do
            For KK1 := 0 to 2 do
              For HH1 := 0 to 2 do
                For LL1 := 1 to 2 do
                  If Selesai = 0 Then
                    Begin
                      IK := lk + 1;terus := 1;
                      SS:= Sqr(HH1)+Sqr(KK1);
                      LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[l0])) - (SS/Sqr(A)) ;
                      If LL > 0 Then
                        Begin
                          C := LL1/Sqrt(LL);
                          TextBackGround(0);TextColor(15);
                          GotoXY(30,22);write(" C: ",C);
                          For lkJ := 1 to 100 do
                            If C = Clama[lkJ] Then terus := 0;
                            Clama[lk] := C;
                            If (C <= 0) or (C>=15) then terus := 0;
                            H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
                            betul := 0;
                            For J1 :=1 to RecordInput.Data do
                              If terus = 1 then
                                begin
                                  Model_Tetragonal;
                                  If sudah = 0 then terus := 0;
                                end;
                              If betul = RecordInput.Data then
                                begin
                                  Selesai := 1;
                                  For J1 :=1 to RecordInput.Data do
                                    begin
                                      SS:= Sqr(H1[J1])+Sqr(K1[J1]);
                                      LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[J1])) - (SS/Sqr(A)) ;
                                      If LL < -0.1 then selesai := 0;
                                      LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[J1])) - Sqr(L1[J1]/C);
                                      If LL < -0.1 then selesai := 0;
                                    end;
                                  AHasil := A;
                                  Chasil := C;
                                end;
                              end;
                            end;
                          end;
                        end;
                      end;
                    end;
                  end;
                end;
              end;
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
end;
end;
end;

```

end;

Var

bt,M,IKM,Tb,Inn,Jn,Kn,Hn,Knn,Ln,Inn1,kecil3,Il,max,  
 A1,B1,C1,I5,masuk,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,tengah,sudahselesai,ganti,  
 J3,HH2,  
 IJ,I2,terus3 : Integer;  
 lamda,P,Filter,kecil2,ch,ah,  
 SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B : Real;  
 U,V,W,TBMax : Ar;  
 T : Br;  
 H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;  
 I2i,J2i,K2i : Array[0..126] Of Integer;  
 puncak :array[1..126] of real;  
 T1,Lp,F2,mm,mm2 : array[-1..65] of real;  
 Inpulp : Array[1..192] Of Real;  
 Simpan : Array[1..601,1..25] of integer;

Procedure Trigonometri;

begin

SinTeta := Lamda/(2\*RecordInput.InputAwal[I]);

Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));

Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);

end;

Procedure faktorStruktur;

begin

lamda := RecordInput.lmd;

For I := 1 to RecordInput.Data do

begin

Trigonometri;

Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)\*CosTeta);

F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]\*Lp[I]);

end;

end;

Procedure NilaiPuncak;

begin

For J1 := 1 to RecordInput.Data do Multiplisitas;

sudahselesai := 1;

faktorStruktur;

JA := 0;JM:=4;

For I:= 0 to JM do

For J:=0 to Jm do

For K :=0 to JM do

begin

sudah :=0;

P := 0;

For L := 1 to RecordInput.Data do

P := P + F2[L]\*Cos((2\*pi)\*((H1[L]\*I/Jm) + (K1[L]\*J/Jm) +  
 (L1[L]\*K/Jm)));

JA := JA + 1;

Puncak[JA] := P;

I2i[JA] := I;

J2i[JA] := J;

K2i[JA] := K;

end;

Batas1 := JA;

J3:=0;N:=0;tengah :=0;T[0]:=0;

Repeat

J3 := J3 + 1;

Puncak[I3] := -1;

Filter := 0;

For JA := 1 to Batas1 do

If ( Puncak[JA] > Filter) then

begin

T[J3] := Puncak[JA];

U[J3] := I2i[JA];

V[J3] := J2i[JA];

W[J3] := K2i[JA];

Filter := Puncak[JA];

```

I3 := JA;
end;
If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
if N=Nlama then NN:=NN+1;
If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
then begin N:=NA+1;end;
If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
then begin N:=NA+1;end;
If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
then begin N:=NA+1;end;
If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
Until N >=NA+1;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
bt := 0;
For M:=1 to J3-1 do
If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
begin
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1)
and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
bt := 0;
if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
For M:=1 to J3-1 do
If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
begin
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
and (M<>1 ) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
and (M<>1) then bt:=1;
end;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
J:=J+1;
If (Abs(T[I-1]-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
GotoXY(I1,J+2);
write(N,':','U[I]','V[I]','W[I]);
If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;

```

#### Procedure Model\_Tetragonal1;

```

begin
sudah := 0;Tb := -1;
For H := 0 to batas do
For K := 0 to batas do
For L := 0 to batas do
begin
S := Sqr(H) + Sqr(K);

```

```

SL := (S/Sqr(A)) + Sqr(L)/Sqr(C);
If SL <> 0 then D := Sqr(1/SL) Else D := 1e12;
If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 <= kecil) then
begin
  Tb := Tb + 1;
  TbMax[J1] := Tb;
  H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
  Sudah := 1;
end;
end;
if tbMax[j1] <> 0 then Max := Max*TbMax[J1];
If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
end;

```

**Procedure Dua;**

```

Begin
  ch:=6.645;ah:=4.338;
  Ch:=Chasil;Ah:=Ahasil;
  Kecil := 100;Jm:=4;NA :=RecordInput.Nan;
  batas := 9;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
  Inputp[I] := RecordInput.InputAwal[I];
  sudahselesai:=0;IK:=0;
  Repeat
  IK := IK+1;
  For I2 := 0 to 20 do
  If (sudahselesai=0)then
  begin
    Terus2:=1;
    Sudah := 0;
    C:= Ch - 0.5 + (1/20)*I2;
    TextBackGround(0);TextColor(15);
    GotoXY(30,22);write(' C: ',C);
  Selesai :=0;ganti:=0;
  If terus2 = 1 then
  For I0:= 0 to 20 do
  If ((selesai = 0) and (sudahselesai=0)) then
  Begin
    Terus:= 1;
    A := Ah - 0.5+ (1/20)*I0;
    TextBackGround(0);TextColor(15);
    GotoXY(6,22);write(' A: ',A);
    H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
    betul := 0;max:=1;
    For J1 :=1 to RecordInput.Data do
    If terus = 1 then
    begin
      Model_Tetragonal1;
      If sudah = 0 then terus := 0;
    end;
    writeln;
    If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
    begin
      masuk:=1;
      If masuk=1 then
      begin
        Chasil := C;
        AHasil := A;
      end;
    end;
    if masuk = 1 then
    begin
      For Jn := 1 to 601 do
      For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
      Kn := 0;
      Repeat
      Repeat
      Kn := Kn + 1;
      I1:=0;
      Repeat
      I1 := I1 + 1;tb:=0;

```

```

For J1 := 1 to RecordInput.Data do
begin
  randomize;
  Inn := Random(TbMax[J1]);
  simpan[kn,J1]:=Inn;
  H1[J1] := H11[J1,Inn];
  K1[J1] := K11[J1,Inn];
  L1[J1] := L11[J1,Inn];
  mm[J1] := Sqr(H1[J1])+Sqr(K1[J1]);
  mm2[J1] := L1[J1];
  If J1 > 1 then
    For J2:=1 to J1-1 do
      If (mm[J2]=mm[J1]) and (mm2[J2]=L1[J1]) then tb := 1;
    end;
  until (tb=0) or (I=100);
  If I=100 then benar:=0 else benar :=1;
  If kn > 2 then
  begin
    For Jn := 1 to Kn-1 do
      For J1 := 1 to RecordInput.Data do
        If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
      end;
    Until (benar=1) or (Kn=600) or (Kn=Max);
    If benar=1 then NilaiPuncak;
    Until (sudahselesai=1) or (kn=600) or (Kn=Max);
  end;
end;
end;
Until (sudahselesai=1) or ((A>=Ah+0.4) and (C>=Ch+0.4));
J:=0;I:=6;
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
begin
  J:=J+1;
  GotoXY(I,J+14);Write(J1,':',H1[J1],',',K1[J1],',',L1[J1]);
  If ((J +14 ) =19) then begin J:=0;I:=I+10;end;
end;
If sudahselesai=1 then
begin
  TextColor(0);TextBackGround(7);
  GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Tetragonal ');
  sound(1000);delay(2000);nosound;
end;
Close(FileInput);
end;

(Program Utama)
Begin
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Reset(FileInfo);
  Read(FileInfo,RecordInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));RecordInfo.ambil:=1;
  If RecordInfo.ambil=1 then
  begin
    clrscr;Satu;randomize;
    If selesai=1 then Dua
    Else begin
      TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan Tetragonal');
    end;
    Assign(FileInfo,'Masukan2');
    Rewrite(FileInfo);
    Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
    If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;
    write(FileInfo,RecordInfo);
  end;
  Close(FileInfo);
end.

```

```

Uses Cri,koord;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
    Nan,Data : Integer;
    Lmd : Real;
  end;
  Info = record
    Ambil : Integer
  end;
Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileInfo : File of Info;
  RecordInfo : Info;
  HH1,KK1,LL1,HH,KK,Sudah,betul,benar,J2,I1,H,K,L,I,J,J1,terus,
  Nlama,NN,I0,selesai : Integer;
  Ah,Ch,Kecil,SL,C,AHasil,D ,A,s,bb,Chasil,LL,SS : Real;
  Mp,H1,K1,L1 : Array[0..200] Of Integer;
Procedure Multiplisistas;
begin
  If (H1[J1]<>K1[J1]) and (L1[J1]<>0) then Mp[J1] := 24;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (L1[J1]<>H1[J1]) then Mp[J1] := 12;
  If ((H1[J1]=0) or (K1[J1]=0)) and ((L1[J1]<>H1[J1]) or (L1[J1]<>K1[J1]))
  then Mp[J1] := 12;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (H1[J1]=0) then Mp[J1] := 2;
  If (H1[J1]<>K1[J1]) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 12;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 6;
  If ((H1[J1]=0) or (K1[J1]=0)) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 6;
end;

```

```

Procedure Model_Hexagonal;
begin
  Kecil := 10;
  sudah := 0;
  For L := 0 to 9 do
    For K := 0 to 9 do
      For H := 0 to 9 do
        begin
          S := Sqr(H) + Sqr(K) + H*K;
          SL := (4/3)*(S/Sqr(A)) + Sqr(L)/Sqr(C);
          If SL <> 0 then D := Sqr(1/SL) Else D := 1e12;
          If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 <= kecil) then
            begin
              H1[J1] := H;K1[J1] := K;L1[J1] := L;
              Kecil := Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000;
              Sudah := 1;
              If J1 <> 1 then
                For J2:= 1 to J1-1 do
                  begin
                    benar := 0;
                    If H1[J1] = H1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If K1[J1] = K1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If L1[J1] = L1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If benar = 3 then sudah := 0;
                    benar := 0;
                    If H1[J1] = K1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If K1[J1] = H1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If L1[J1] = L1[J2] Then benar := benar + 1;
                    If benar = 3 then sudah := 0;
                  end;
                end;
              If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
            end;
        end;
      end;
    end;
  end;
Procedure satu;
Begin
  Assign(FileInput,'Masukan');
  Reset(FileInput);
  Read(FileInput,RecordInput);

```

```

Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
Selesai := 0;

For HH := 0 to 2 do
For KK := 1 to 2 do
For I := 1 to 5 do
If Selesai = 0 Then
begin
Sudah := 0;terus := 1;
SS := Sqr(HH)+Sqr(KK)+HH*KK;
LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[I]))*(3/4)*(1/SS) ;
A := Sqr(1/LL);
If A > 25 Then terus := 0;
If terus <> 0 Then
For I0 := 1 to 5 do
For KK1 := 0 to 3 do
For HH1 := 0 to 3 do
For LL1 := 1 to 3 do
If Selesai = 0 Then
Begin
SS:= Sqr(HH1)+Sqr(KK1)+(HH1*KK1);
LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[I0])) -(4/3)*(SS/Sqr(A)) ;
terus := 1;
If LL > 0 Then C := LL1/Sqr(LL) Else terus := 0;
If C > 25 then terus := 0;
H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
betul := 0;
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
If terus = 1 then
begin
Model_Hexagonal;
If sudah = 0 then terus:= 0;
end;
If betul = RecordInput.Data then
begin
Selesai := 1;
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
begin
SS:= Sqr(H1[J1])+Sqr(K1[J1])+(H1[J1]*K1[J1]);
LL := (1/Sqr(RecordInput.InputAwal[J1])) -(4/3)*(SS/Sqr(A)) ;
If LL < -0.1 then selesai := 0;
If ss <= 0 then
LL:=(1/Sqr(RecordInput.InputAwal[J1]))*(3/4)*(1/SS) ;
If LL < -0.1 then selesai := 0;
end;
AHasil := A;
Chasil := C;
end;
end;
end;
end;
end;

Var
bt,M,IKM,Tb,Inn,Jn,Kn,Hn,Knn,Ln,Inn1,kecil3,II,IK,max,
A1,B1,C1,I5,masuk,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,tengah,sudahselesai,ganti,
J3,batas,HH2,
IJ,I2,terus2,terus3 : Integer;
lamda,P,Filter,kecil2,
SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B : Real;
U,V,W,TBMax : Ar;
T : Br;
H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
T1,Lp,F2,P1,Puncak,mm,mm2 : array[-1..65] of real;
Inputp : Array[1..192] Of Real;
Alama : Array[1..80] of Real;
Simpan : Array[1..601,1..25] of integer;

Procedure Trigonometri;

```



```

begin
  SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
  Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
  Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
end;
Procedure faktorStruktur;
begin
  lamda := RecordInput.lmd;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
    begin
      Trigonometri;
      Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
      if mP[i]<>0 then F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]*Lp[I]) eLSE
      f2[i]:=0;
    end;
  end;
  Procedure NilaiPuncak;
  begin
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do Multiplisistas;
    sudahselesai := 1;
    faktorStruktur;
    P1[-1]:=-1;
    JA := 0;JM:=4;
    For I:= 0 to JM do
      For J:=0 to Jm do
        For K :=0 to JM do
          begin
            P1[I]:=-1;sudah :=0;
            P := 0;
            For L := 1 to RecordInput.Data do
              P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*((H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
              (L1[L]*K/Jm)));
            P1[K] := P;
            If (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 )) or
            (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = JM )) or
            (( K = JM ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 ))
            then
              begin
                JA := JA + 1;
                Puncak[JA] := P1[K];
                I2i[JA] := I;
                J2i[JA] := J;
                K2i[JA] := K;sudah :=1;
              end
            Else
              If ( K = Jm ) And ( P1[K] >= P1[K-1] ) and ( sudah=0) then
                begin
                  JA := JA + 1;
                  Puncak[JA] := P1[K];
                  I2i[JA] := I;
                  J2i[JA] := J;
                  K2i[JA] := K;sudah := 1;
                end
              Else
                If ( P1[K] <= P1[K-1] ) and ( K-1 <> -1 ) and ( P1[K-1] > P1[K-2] )
                and ( sudah = 0 ) then
                  begin
                    JA := JA + 1;
                    Puncak[JA] := P1[K-1];
                    I2i[JA] := I;
                    J2i[JA] := J;
                    K2i[JA] := K-1;
                  end;
                end;
            end;
          end;
        end;
      end;
    end;
    Batas1 := JA;
    J3:=0;N:=0;tengah :=0;T[0]:=0;
  Repeat
    J3 := J3 + 1;
    Puncak[J3] := -1;
    Filter := 0;
  
```

```

For JA := 1 to Batas1 do
  If ( Puncak[JA] >= Filter) then
    begin
      T[J3] := Puncak[JA];
      U[J3] := I2i[JA];
      V[J3] := J2i[JA];
      W[J3] := K2i[JA];
      Filter := Puncak[JA];
      I3 := JA;
    end;
  If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
    begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
  If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
  If N=Nlama then NN:=NN+1;
  If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
  If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
  If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
  If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
  If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
  If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
  If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
Until N >=NA+1;
If sudahselesai = 1 then
For l:=1 to J3-1 do
begin
  bt := 0;
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[l])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  If (Abs(U[M]-U[l])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[l])*1000 <=0.1)
    and (W[M]+W[l] = JM ) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[l])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[l])*1000 <=0.1)
    and (U[M]+U[l] = JM ) then bt:=1;
  If (Abs(U[M]-U[l])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[l])*1000 <=0.1)
    and (V[M]+V[l] = JM ) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For l:=1 to J3-1 do
begin
  bt := 0;
  If (U[l]=Round(JM/2)) and (V[l]=Round(JM/2)) and (W[l]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[l])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  If (Abs(U[M]-U[l])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[l])*1000 <=0.1)
    and (M<>l ) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[l])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[l])*1000 <=0.1)
    and (M<>l) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For l:=1 to J3-1 do
begin
  J:=J+1;
  If (Abs(T[l-1]-T[l])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
  GotoXY(I1,J+2);
  write(N,' ',U[l], ' ',V[l], ' ',W[l]);
  If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;

```

```

Procedure Model_hexagonal1;
begin
  sudah := 0; Tb := -1;
  For H := 0 to batas do
    For K := 0 to batas do
      For L := 1 to batas do
        begin
          S := Sqr(H) + Sqr(K) + H*K;
          SL := (4/3)*(S/Sqr(A)) + Sqr(L)/Sqr(C);
          If SL <> 0 then D := Sqrt(1/SL) Else D := 1e12;
          If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 <= kecil) then
            begin
              Tb := Tb + 1;
              TbMax[J1] := Tb;
              H11[J1,Tb] := H; K11[J1,Tb] := K; L11[J1,Tb] := L;
              Sudah := 1;
            end;
          end;
        end;
      if TbMax[j1] <> 0 then Max := Max* TbMax[J1];
      If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
    end;
  Procedure Dua;
  Begin
    Ah:=Ahasil;Ch:=Chasil;Ah:=5.92;ch:=6.96;
    Kecil := 100;Jm:=4;NA:=RecordInput.Nan;
    batas := 9;
    For l := 1 to RecordInput.Data do
      Inputp[l] := RecordInput.InputAwal[l];
      sudahselesai:=0;
    Repeat
      For l2 := 0 to 100 do
        If (sudahselesai=0)then
          begin
            Terus2:=1;
            Sudah := 0;
            C:= Ch-0.5 +(1/50)*l2;
            TextBackGround(0);TextColor(15);
            GotoXY(35,22);write(' C: ',C);
          Selesai :=0;ganti:=0;
          If terus2 = 1 then
            For l0:= 0 to 50 do
              If (sudahselesai=0) then
                Begin
                  Terus:= 1;
                  A := Ah - 0.5 +(1/50)*l0;
                  TextBackGround(0);TextColor(15);
                  GotoXY(10,22);write(' A: ',A);
                  H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
                  betul := 0;max:=1;
                  For J1 :=1 to RecordInput.Data do
                    If terus = 1 then
                      begin
                        Model_hexagonal1;
                        If sudah = 0 then terus := 0;
                      end;
                    end;
                  If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
                    begin
                      masuk:=1;
                      If masuk=1 then
                        begin
                          Chasil := C;
                          AHasil := A;
                        end;
                      end;
                    end;
                  if masuk = 1 then
                    begin
                      For Jn := 1 to 601 do
                        For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
                        Kn := 0;
                      Repeat

```

```

Repeat
  Kn := Kn + 1;
  ll:=0;
  Repeat
    ll := ll + 1;tb:=0;
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do
      begin
        randomize;
        Inn := Random(TbMax[J1]);
        simpan[kn,J1]:=Inn;
        H1[J1] := H11[J1,Inn];
        K1[J1] := K11[J1,Inn];
        L1[J1] := L11[J1,Inn];
        mm[J1] := Sqr(H1[J1])+Sqr(K1[J1]) + H1[J1]*K1[J1];
        mm2[J1] := L1[J1];
        If J1 > 1 then
          For J2:=1 to J1-1 do
            begin
              If (mm[J2]=mm[J1]) and (mm2[J2]=L1[J1]) then tb := 1;
            end;
          end;
        until (tb=0) or (ll=100);
        If ll=100 then benar:=0 else benar :=1;
        If (kn > 2) and (benar=1) then
          begin
            For Jn := 1 to Kn-1 do
              For J1 := 1 to RecordInput.Data do
                If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
              end;
            Until (benar=1) or (Kn=600) or (Kn=Max);
            If (benar=1) then NilaiPuncak;
            Until (sudahselesai=1) or (kn=600) or (Kn=Max);
          end;
        end;
      end;
    Until (sudahselesai=1) or ((A>=ah+0.4) and (C>=ch+0.4));
  J:=0;I:=6;
  For J1 :=1 to RecordInput.Data do
    begin
      J:=J+1;
      GotoXY(I,J+14);Write(J1,':',H1[J1],',',K1[J1],',',L1[J1]);
      If ((J + 14 ) =19) then begin J:=0;I:=I+10;end;
    end;
  If sudahselesai=1 then
    begin
      TextColor(0);TextBackGround(7);
      GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Hexagonal ');
      sound(1000);delay(2000);nosound;
    end;
  end;
end;

```

```

{Program Utama}
Begin
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Reset(FileInfo);
  Read(FileInfo.RecordInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));RecordInfo.ambil:=1;
  If RecordInfo.ambil = 1 then
    begin
      clrscr;
      Assign(FileInput,'Masukan');
      Reset(FileInput);
      Read(FileInput,RecordInput);
      Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
      {Satu;
      If selesai=1 then begin} Dua:{if sudahselesai=1 then readln;end
      Else begin
      TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan Hexagonal');
      end;}
    end;

```

```
Assign(FileInfo,'Masukan2');  
Rewrite(FileInfo);  
Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));  
If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;  
write(FileInfo,RecordInfo);  
end;  
Close(FileInfo);  
end.□
```

```

Program Orthorhombic;
Uses Crt,koord;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
    Data : Integer;
    Lmd : real;
  end;
  Info = record
    Ambil : Integer
  end;
Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileInfo : File of Info;
  RecordInfo : Info;
  bt,M,IKM,Tb,Inn,Jn,Kn,Hn,Knn,Ln,Inn1,kecil3,Il,max,NN,Nlama,
  A1,B1,C1,I5,masuk,selesai,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,tengah,sudahselesai,ganti,
  HH1,J3,KK1,LL1,HH,KK,Sudah,betul,benar,J2,I1,H,K,L,I,J,J1,batas,HH2,
  DataTransfer,IJ,IK,I2,terus,terus2,I0,terus3 : Integer;
  lamda,P,Filter,kecil2,
  SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B,Kecil,SL,C,D ,A.s.bb.LL,SS : Real;
  Ahasil,BHasil,Chasil : Real;
  U,V,W,MP,H1,K1,L1,TBMax : Ar;
  T : Br;
  H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
  I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
  T1,Lp,F2,P1,Puncak : array[-1..65] of real;
  Inputp : Array[1..192] Of Real;
  Alama : Array[1..80] of Real;
  Simpan : Array[1..601,1..25] of integer;

Procedure Multiplisitas;
begin
  If (H1[J1]<>0) and (L1[J1]<>0) and (K1[J1]<>0) then Mp[J1]:=8;
  If (H1[J1]=0) and (L1[J1]<>0) and (K1[J1]<>0) then Mp[J1]:=4;
  If (K1[J1]=0) and (L1[J1]<>0) and (H1[J1]<>0) then Mp[J1]:=4;
  If (L1[J1]=0) and (K1[J1]<>0) and (H1[J1]<>0) then Mp[J1]:=4;
  If (K1[J1]=L1[J1]) and (L1[J1]=0) and (H1[J1]<>0) then Mp[J1]:=2;
  If (H1[J1]=L1[J1]) and (L1[J1]=0) and (K1[J1]<>0) then Mp[J1]:=2;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (H1[J1]=0) and (L1[J1]<>0) then Mp[J1]:=2;
end;
Procedure Trigonometri;
begin
  SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
  Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
  Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
end;
Procedure faktorStruktur;
begin
  lamda := RecordInput.Lmd;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
  begin
    Trigonometri;
    Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
    F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]*Lp[I]);
  end;
end;
Procedure NilaiPuncak;
begin
  For J1 := 1 to RecordInput.Data do Multiplisitas;
  sudahselesai := 1;
  faktorStruktur;
  P1[-1]:=-1;
  JA := 0;JM:=4;
  For I:= 0 to JM do
  For J:=0 to Jm do
  For K :=0 to JM do
  begin
    P1[I]:=-1;sudah :=0;

```

```

P := 0;
For L := 1 to RecordInput.Data do
  P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*((H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
    (L1[L]*K/Jm)));
  P1[K] := P;
  If (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 )) or
  (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = JM )) or
  (( K = JM ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 ))
  then
  begin
    JA := JA + 1;
    Puncak[JA] := P1[K];
    I2i[JA] := I;
    J2i[JA] := J;
    K2i[JA] := K;sudah :=1;
  end
  Else
  If ( K = Jm ) And ( P1[K] >= P1[K-1]) and ( sudah=0) then
  begin
    JA := JA + 1;
    Puncak[JA] := P1[K];
    I2i[JA] := I;
    J2i[JA] := J;
    K2i[JA] := K;sudah := 1;
  end
  Else
  If ( P1[K] <= P1[K-1]) and (K-1 <> -1 ) and (P1[K-1] > P1[K-2] )
  and ( sudah = 0 ) then
  begin
    JA := JA + 1;
    Puncak[JA] := P1[K-1];
    I2i[JA] := I;
    J2i[JA] := J;
    K2i[JA] := K-1;
  end;
end;
end;
Batas1 := JA;
J3:=0;N:=0;tengah :=0;T[0]:=0;
Repeat
  J3 := J3 + 1;
  Puncak[I3] := -1;
  Filter := 0;
  For JA := 1 to Batas1 do
    If ( Puncak[JA] >= Filter) then
    begin
      T[J3] := Puncak[JA];
      U[J3] := I2i[JA];
      V[J3] := J2i[JA];
      W[J3] := K2i[JA];
      if (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then tengah :=1;
      Filter := Puncak[JA];
      I3 := JA;
    end;
    If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
    begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Niama:=N;
    If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
    if N=Niama then NN:=NN+1;
    If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
    If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
    If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
    then begin N:=NA+1;end;
    If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
    if (N<>Niama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
    If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
    if (N<>Niama) and (N<>1) then NN:=0;
  Until N >=NA+1;
  If sudahselesai = 1 then
  For I:=1 to J3-1 do

```

```

begin
  bt := 0;
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1)
  and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
  If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
  end;
  If sudahselesai = 1 then
  For I:=1 to J3-1 do
  begin
  bt := 0;
  if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
  and (M<>I ) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (M<>I) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
  end;
  J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
  If sudahselesai = 1 then
  For I:=1 to J3-1 do
  begin
  J:=J+1;
  If (Abs(T[I-1]-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
  GotoXY(I1,J+2);
  write(N,' ',U[I],' ',V[I],' ',W[I]);
  If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
  end;
  if N<>Na then sudahselesai:=0;
  If sudahselesai = 1 then PosisiU'V'W(J3,U,V,W,T);
  end;
Procedure Uji;
begin
  masuk := 1;
  For J3 :=1 to RecordInput.Data do
  begin
  I1 := 0;
  For Tb := 1 to Tbmaj[J3] do
  begin
  IKM := 1;
  H1[J3] := H1[J3,Tb];K1[J3]:=K11[J3,Tb];L1[J3]:=L11[J3,Tb];
  LL := (1/Sqr(Inputp[J3])) - Sqr(H1[J3]/A) - Sqr(K1[J3]/B) ;
  if LL < -0.01 then IKM := 0;
  LL := (1/Sqr(Inputp[J3])) - Sqr(L1[J3]/C) - Sqr(K1[J3]/B) ;
  if LL < -0.01 then IKM := 0;
  LL := (1/Sqr(Inputp[J3])) - Sqr(L1[J3]/C) - Sqr(H1[J3]/A) ;
  if LL < -0.01 then IKM := 0;
  If IKM = 1 then
  begin
  I1 := I1 + 1;
  H11[J3,I1]:=H1[J3];K11[J3,I1]:=K1[J3];L11[J3,I1]:=L1[J3];
  end;
  end;
  TbMax[J3]:=I1;
  end;
end;
end;

Procedure Model_Orthorhombic;
begin

```



```

sudah := 0; Tb := -1;
For H := 0 to batas do
  For K := 0 to batas do
    For L := 0 to batas do
      begin
        SL := Sqr(H/A) + Sqr(L/C) + Sqr(K/B);
        if SL <> 0 then D := Sqr(1/SL) Else D:=1e-12;
        If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 < kecil) then
          begin
            Tb := Tb + 1;
            TbMax[J1] := Tb;
            H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
            Sudah := 1;
          end;
        end;
      end;
    if TbMax[j1] <> 0 then Max := Max*TbMax[J1];
    If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
  end;
Procedure satu;
Begin
  Kecil := 50;Jm:=4;NA :=4;
  Assign(FileInput,'Masukan');
  Reset(FileInput);
  Read(FileInput,RecordInput);
  Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
  batas := 9;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
    Input[I] := RecordInput.InputAwal[I];
    sudahselesai:=0;IKM := 0;
    For I5 := 2 to 1000 do
      If (sudahselesai=0) then
        begin
          Sudah := 0; terus3 := 1;
          A := 3+(1/50)*I5;
          TextBackGround(0);TextColor(15);
          GotoXY(10,22);write(' A: ',A);
          IK := 0;ganti := 0;
          If terus3 = 1 Then
            For I2 := 0 to 1000 do
              If (sudahselesai=0) and (ganti <> 2 ) then
                begin
                  IK := IK + 1;
                  Terus2:=1;
                  Sudah := 0;
                  If (IK > 2) and (ganti <> 2) then B:= 3+(1/50)*I2;
                  If Ik = 1 then B:= 5;
                  If Ik = 2 then B:= 10;
                  TextBackGround(0);TextColor(15);
                  GotoXY(30,22);write(' B: ',B);
                end;
              Selesai :=0;
              If terus2 = 1 then
                For I0:= 0 to 650 do
                  If ((selesai = 0) and (sudahselesai=0)) then
                    Begin
                      Terus:= 1;
                      IKM:=IKM+1;
                      C := 5+(1/50)*I0;
                      If Ik <= 3 then C:=5;
                      TextBackGround(0);TextColor(15);
                      GotoXY(50,22);write(' C: ',C);
                      H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
                      betul := 0;max:=1;
                      For J1 :=1 to RecordInput.Data do
                        If terus = 1 then
                          begin
                            Model_Orthorhombic;
                            If sudah = 0 then terus := 0;
                          end;
                        If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
                          begin

```

```

Uji;
If masuk=1 then
begin
  Chasil := C;
  AHasil := A;
  BHasil := B;
end
Else selesai := 1;
end
Else selesai := 1;
If (IK < 3) and (selesai=1) THEN Ganti := ganti + 1;
If ((IK = 2) and (selesai=0)) or (masuk= 1) THEN begin IK := IK+1;end;
if masuk = 1 then
begin
  For Jn := 1 to 601 do
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
  Kn := 0;
  Repeat
    Repeat
      Kn := Kn + 1;
      For J1 := 1 to RecordInput.Data do
        begin
          randomize;
          Inn := Random(TbMax[J1]);
          simpan[kn,J1]:=Inn;
          H1[J1] := H11[J1,Inn];
          K1[J1] := K11[J1,Inn];
          L1[J1] := L11[J1,Inn];
        end;
        benar :=1;
        If kn > 2 then
          begin
            For Jn := 1 to Kn-1 do
              For J1 := 1 to RecordInput.Data do
                If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
              end;
            Until (benar=1) or (Kn=600) or (Kn=Max);
            NilaiPuncak;
            Until (sudahselesai=1) or (kn=600) or (Kn=Max);
          end;
        end;
      end;
    end;
  J:=0;I:=6;
  For J1 :=1 to RecordInput.Data do
    begin
      J:=J+1;
      GotoXY(I,J+14);Write(J1,',' ,H1[J1],',' ,K1[J1],',' ,L1[J1]);
      If ((J +14 ) =19) then begin J:=0;I:=I+10;end;
    end;
  If sudahselesai=1 then
    begin
      TextColor(0);TextBackGround(7);
      GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Orthorhombic');
      sound(1000);delay(2000);nosound;
    end;
  end;
end;

```

{Program Utama}

```

Begin
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Reset(FileInfo);
  Read(FileInfo,RecordInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));recordInfo.ambil:=1;
  If recordInfo.ambil=1 then
    begin
      Satu;
      If Sudahselesai<>1 then
        begin
          TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan Cubic ');
        end;
      end;
    end;
  end;
end;

```

```
end;  
Assign(FileInfo,'Masukan2');  
Rewrite(FileInfo);  
Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));  
If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;  
write(FileInfo,RecordInfo);  
end;  
Close(FileInfo);  
end.
```

```
::
```

```

Uses Crt,Koord;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
    Nan,Data : Integer;
    Lmd : real;
  end;
  Info = record
    Ambil : Integer
  end;
Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileInfo : File of Info;
  RecordInfo : Info;
  bt,M,JKM,Tb,Inn,Jn,Kn,Hn,Knn,Ln,Inn1,kecil3,II,IX,ganti,sel,max,
  A1,B1,C1,I5,masuk,selesai,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,th,sudahselesai,NN,Niama,
  HH1,J3,KK1,LL1,HH,KK,Sudah,betul,benar,J2,I1,H,K,L,I,J,J1,batas,HH2,
  Datatransfer,IJ,IK,I2,terus,terus2,I0,terus3 : Integer;
  lamda,P,Filter,kecil2,beta,Betahasil,
  SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B,Kecil,SL,C,D ,A,s,bb,LL,SS : Real;
  Alama,Blama,Clama,Ahasil,BHasil,Chasil : Real;
  U,V,W,MP,H1,K1,L1,TBMax : Ar;
  T : Br;
  H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
  I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
  T1,Lp,F2,P1,Puncak : array[-1..65] of real;
  Inputp : Array[1..192] Of Real;
  Simpan : Array[1..601,1..25] of integer;

Procedure Multiplisitas;
begin
  If (H1[J1]<>0) and (L1[J1]<>0) and (K1[J1]<>0) then Mp[J1]:=4
  Else Mp[J1]:=2;
end;
Procedure Trigonometri;
begin
  SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
  Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
  Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
end;
Procedure faktorStruktur;
begin
  lamda := RecordInput.lmd;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
  begin
    Trigonometri;
    Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
    F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]*Lp[I]);
  end;
end;
Procedure NilaiPuncak;
begin
  For J1 := 1 to RecordInput.Data do Multiplisitas;
  sudahselesai := 1;
  faktorStruktur;
  P1[-1]:=-1;
  JA := 0;JM:=4;
  For I:= 0 to JM do
  For J:=0 to Jm do
  For K :=0 to JM do
  begin
    P1[I]:=-1;sudah :=0;
    P := 0;
    For L := 1 to RecordInput.Data do
      P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*((H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
      (L1[L]*K/Jm)));
    P1[K] := P;
    If (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 )) or
    (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = JM )) or

```

```

(( K = JM ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 ))
then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K;sudah :=1;
end
Else
If ( K = Jm ) And ( P1[K] >= P1[K-1] ) and ( sudah=0) then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K;sudah := 1;
end
Else
If ( P1[K] <= P1[K-1] ) and ( K-1 <> -1 ) and ( P1[K-1] > P1[K-2] )
and ( sudah = 0 ) then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K-1];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K-1;
end;
end;
Batas1 := JA;
J3:=0;N:=0;T[0]:=0;
Repeat
  J3 := J3 + 1;
  Puncak[I3] := -1;
  Filter := 0;th:=25;
  For JA := 1 to Batas1 do
    If ( Puncak[JA] >= Filter) then
      begin
        T[J3] := Puncak[JA];
        U[J3] := I2i[JA];
        V[J3] := J2i[JA];
        W[J3] := K2i[JA];
        If ( U[J3]=2) and ( V[J3]=2) and ( W[J3]=2) then th:=100;
        Filter := Puncak[JA];
        I3 := JA;
      end;
    If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
      begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
      If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
      if N=Nlama then NN:=NN+1;
      If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
      If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
      If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
      If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
      If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
      If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
      If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
  Until N >=NA+1;
  If sudahselesai = 1 then
  For I:=1 to J3-1 do
  begin
    bt := 0;
    For M:=1 to J3-1 do
      If (Abs(T[M]-T[I])* 1000 <= 0.1) Then
      begin
        If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])* 1000 <=0.1)
        and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;

```

```

If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
bt := 0;
if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
For M:=1 to J3-1 do
If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
begin
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
  and (M<>I) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (M<>I) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
J:=J+1;
If (Abs(T[I-1]-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
GotoXY(I1 ,J+2);
write(N,' ',U[I], ' ',V[I], ' ',W[I]);
If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;

```

Procedure Model\_Monoclinic;

```

begin
sudah := 0;Tb := -1;
For H := 0 to batas do
  For K := 0 to batas do
    For L := 0 to batas do
      begin
SL:=(1/Sqr(sin(beta)))*(Sqr(H/A)+Sqr(L/C)-(2*H*L*cos(beta)/(A*C)))+Sqr(K/B);
if SL <> 0 then D := Sqr(1/SL) Else D:=1e-12;
If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 < kecil) then
begin
Tb := Tb + 1;
TbMax[J1] := Tb;
H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
Sudah := 1;
end;
end;
if tbMax[j1] <> 0 then Max := Max*TbMax[J1];
If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
end;

```

Procedure Satu;

```

Begin
Kecil := 50;Jm:=4;NA :=RecordInput.Nan;
Assign(FileInput,'D:Masukan');
Reset(FileInput);
Read(FileInput,RecordInput);
Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
batas := 9;
For I := 1 to RecordInput.Data do
  Inputp[I] := RecordInput.InputAwal[I];
sudahselesai:=0;IKM:=11;A:=2;
For I5 := 0 to 500 do
If (sudahselesai=0) then
begin

```

```

Sudah := 0; terus3 := 1; IK := 0;
if (IK= 0) and (IKM=11) then begin A:= A+1;Alama:= A;end
Else A := Alama+(1/50)*15;
TextBackGround(0);TextColor(15);
GotoXY(10,22);write(' A: ',A);
ganti := 0;th:=0;
If terus3 = 1 Then
For I2 := 0 to 500 do
If (sudahselesai=0) and (ganti=0) then
begin
IK := IK + 1;
Terus2:=1;
Sudah := 0;
If (IK > 10) then B:= Blama-1+(1/50)*I2;
If Ik <= 10 then begin B:=IK+2;Blama:=B;end;
TextBackGround(0);TextColor(15);
GotoXY(30,22);write(' B: ',B);
Selesai :=0;IKM:=0;
If terus2 = 1 then
For I0:= 0 to 500 do
If ((selesai = 0) and (sudahselesai=0)) then
Begin
Terus:= 1;
IKM:=IKM+1;
IF IKM >10 then C := Clama+(1/50)*I0;
If Ikm <= 10 then begin C:= IKM+2;Clama:=C;end;
TextBackGround(0);TextColor(15);
GotoXY(50,22);write(' C: ',C);
H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
betul := 0;max:=1;
For IX:=1 to 50 do
If (sudahselesai=0) then
begin
beta:= pi/18 + ((16/18)*(pi/50))*IX;
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
If terus = 1 then
begin
Model_monoclinic;
If sudah = 0 then terus := 0;
end;sel:=0;masuk:=0;
If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
begin
masuk:=1;
If masuk=1 then
begin
Chasil := C;
AHasil := A;
BHasil := B;
BetaHasil:=Beta;
end
Else sel:=1;
end
Else sel:=1;
If (IKM = 11) and (sel=1) then selesai:=1;
if (sel=0) and (IKM>=12) then IKM:=IKM+1;
If (IK = 11) and (selesai=1) THEN begin Ganti := 1;IK:=0;end;
If (masuk=1) THEN begin th:=1;
If (masuk=0) and (th=1) THEN IK:=IK+1;if IK>=1000 then IK:=100;end;
if masuk = 1 then
begin
For Jn := 1 to 601 do
For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
Kn := 0;
Repeat
Repeat
Kn := Kn + 1;tb:=0;
Repeat
tb:=tb+1;sel:=1;
For J1 := 1 to RecordInput.Data do
begin

```

```

randomize;
Inn := Random(TbMax[J1]);
simpan[kn,J1]:=Inn;
H1[J1] := H11[J1,Inn];
K1[J1] := K11[J1,Inn];
L1[J1] := L11[J1,Inn];
If J1 > 1 then
  For J2 := 1 to J1-1 do
    If (H1[J2]=H1[J1]) and (K1[J2]=K1[J1]) and (L1[J2]=L1[J1])
      then sel:=0;
  end;
Until (sel=1) or (Ib=100);
if sel = 1 then
begin
benar :=1;
If kn > 2 then
begin
  For Jn := 1 to Kn-1 do
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do
      If simpan[Jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
    end;
  end Else Kn:=600;
Until (benar=1) or (Kn=600) or (Kn=Max);
if (sel=1) and (benar=1) then NilaiPuncak;
Until (sudahselesai=1) or (kn=600) or (Kn=Max);
end;
end;
end;
end;
J:=0;I:=6;
If sudahselesai=1 then
For J1 :=1 to RecordInput.Data do
begin
  J:=J+1;
  GotoXY(I,J+14);Write(J1,':',H1[J1],',',K1[J1],',',L1[J1]);
  If ((J +14 ) =19) then begin J:=0;I:=I+10;end;
end;
If sudahselesai=1 then
begin
TextColor(0);TextBackGround(7);
GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Monoclinic ');
GotoXY(70,25);Write(' Beta :',betahasil);
sound(1000);delay(2000);nosound;
end;
end;

Procedure MonoUtama;
Begin
Assign(FileInfo,'Masukan2');
Reset(FileInfo);
Read(FileInfo,RecordInfo);
Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
If RecordInfo.ambil=1 then
begin
  Satu;if Sudahselesai=1 then readln;
  If Sudahselesai<>1 then
  begin
  TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan monoclinic');
  end;
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Rewrite(FileInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
  If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;
  write(FileInfo,RecordInfo);
  end;
  Close(FileInfo);
end;
end;
begin
  MonoUtama;end.

```



```

Uses Crt,koord;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
    Nan,Data : Integer;
    Lmd : real;
  end;
  Info = record
    Ambil : Integer
  end;

Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileInfo : File of Info;
  RecordInfo : Info;
  ly,lz,NN,Nlama,
  bt,M,IKM,Tb,Inn,Jn,Kn,Hn,Knn,Ln,Inn1,kecil3,II,IX,ganti,sel,max,
  A1,B1,C1,I5,masuk,selesai,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,th,sudahselesai,
  HH1,J3,KK1,LL1,HH,KK,Sudah,betul,benar,J2,I1,H,K,L,I,J,J1,batas,HH2,
  Datatransfer,IJ,IK,I2,terus,terus2,I0,terus3 : Integer;
  lamda,P,Filter,kecil2,beta,Betahasil,alfa,alfahasil,gama,gamahasil,
  SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B,Kecil,SL,C,D,A,s,bb,LL,SS : Real;
  Alama,Blama,Clama,Ahasil,BHhasil,Chasil : Real;
  U,V,W,MP,H1,K1,L1,TBMax : Ar;
  T : Br;
  H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
  I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
  T1,Lp,F2,P1,Puncak : array[-1..65] of real;
  Inputp : Array[1..192] Of Real;
  Simpan : Array[1..601,1..25] of integer;

Procedure Multiplisitas;
begin
  Mp[J1]:=2;
end;
Procedure Trigonometri;
begin
  SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
  Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
  Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
end;
Procedure faktorStruktur;
begin
  lamda := RecordInput.lmd;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
  begin
    Trigonometri;
    if (Sqr(SinTeta)*CosTeta) <> 0 then
      Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
    if (Mp[I]*Lp[I]) <> 0 then
      F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]*Lp[I]);
    end;
  end;
end;
Procedure NilaiPuncak;
begin
  For J1 := 1 to RecordInput.Data do Multiplisitas;
  sudahselesai := 1;
  faktorStruktur;
  P1[-1]:=-1;
  JA := 0;JM:=4;
  For I:= 0 to JM do
  For J:=0 to Jm do
  For K :=0 to JM do
  begin
    P1[I]:=-1;sudah :=0;
    P := 0;
    For L := 1 to RecordInput.Data do
      P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*((H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
      (L1[L]*K/Jm)));
    P1[K] := P;
  end;
  end;
  end;
  end;

```

```

If (( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 )) or
(( K = 0 ) And ( I = 0 ) and ( J = JM )) or
(( K = JM ) And ( I = 0 ) and ( J = 0 ))
then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K;sudah :=1;
end
Else
If ( K = Jm ) And ( P1[K] >= P1[K-1]) and ( sudah=0) then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K;sudah := 1;
end
Else
If ( P1[K] <= P1[K-1]) and (K-1 <> -1 ) and ( P1[K-1] > P1[K-2] )
and ( sudah = 0 ) then
begin
  JA := JA + 1;
  Puncak[JA] := P1[K-1];
  I2i[JA] := I;
  J2i[JA] := J;
  K2i[JA] := K-1;
end;
end;
Batas1 := JA;
J3:=0;N:=0;T[0]:=0;
Repeat
  J3 := J3 + 1;
  Puncak[J3] := -1;
  Filter := 0;th:=25;
  For JA := 1 to Batas1 do
    If ( Puncak[JA] >= Filter) then
      begin
        T[J3] := Puncak[JA];
        U[J3] := I2i[JA];
        V[J3] := J2i[JA];
        W[J3] := K2i[JA];
        If (U[J3]=2) and (V[J3]=2) and (W[J3]=2) then th:=100;
        Filter := Puncak[JA];
        I3 := JA;
      end;
    If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
      begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
    If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
    if N=Nlama then NN:=NN+1;
    If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
    If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
    If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
      then begin N:=NA+1;end;
    If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
    If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
    If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
    If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
  Until N >=NA+1;
  If sudahselesai = 1 then
  For I:=1 to J3-1 do
  begin
    bt := 0;
    For M:=1 to J3-1 do
      If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
        begin

```

```

If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1)
  and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
  bt := 0;
  if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
    and (M<>I ) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
    and (M<>I) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
  J:=J+1;
  If (Abs(T[I-1]-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
  GotoXY(I1,J+2);
  write(N,' ',U[I], ' ',V[I], ' ',W[I]);
  If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;
Procedure Model_Triclinic;
begin
sudah := 0;Tb := -1;
For H := 0 to batas do
  For K := 0 to batas do
    For L := 0 to batas do
      begin
        SS:= Sqr(H*(1/A))+Sqr(K*(1/B))+Sqr(L*(1/C))+2*K*L*(1/c)*Cos(Alfa);
        SL := SS+2*L*H*(1/C)*(1/A)*cos(Beta)+2*H*K*(1/A)*(1/B)*cos(gama);
        if SL <> 0 then D := K*Sqr(1/SL) Else D:=1e-12;
        If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 < kecil) then
          begin
            Tb := Tb + 1;
            TbMax[J1] := Tb;
            H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
            Sudah := 1;
          end;
        end;
      end;
    If tbMax[j1] <> 0 then Max := Max*TbMax[J1];
  If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
end;
Procedure Satu;
Begin
  Kecil := 50;Jm:=4;NA :=RecordInput.Nan;
  Assign(FileInput,'D:Masukan');
  Reset(FileInput);
  Read(FileInput,RecordInput);
  Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
  batas := 9;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
    Inputp[I] := RecordInput.InputAwal[I];
  sudahselesai:=0;IKM:=11;A:=2;
  For I5 := 0 to 500 do

```

```

If (sudahselesai=0) then
  begin
    Sudah := 0; terus3 := 1; IK := 0;
    if (IK= 0) and (IKM=11) then begin A:= A+1;Alama:= A;end
    Else A := Alama+(1/50)*I5;
    TextBackGround(0);TextColor(15);
    GotoXY(10,22);write(' A: ',A);
  ganti := 0;th:=0;
  If terus3 = 1 Then
  For I2 := 0 to 500 do
  If (sudahselesai=0) and (ganti=0) then
  begin
    IK := IK + 1;
    Terus2:=1;
    Sudah := 0;
    If (IK > 10) then B:= Blama-1+(1/50)*I2;
    If Ik <= 10 then begin B:=IK+2;Blama:=B;end;
    TextBackGround(0);TextColor(15);
    GotoXY(30,22);write(' B: ',B);
  Selesai :=0;IKM:=0;
  If terus2 = 1 then
  For I0:= 0 to 500 do
  If ((selesai = 0) and (sudahselesai=0)) then
  Begin
    Terus:= 1;
    IKM:=IKM+1;
    IF IKM >10 then C := Clama+(1/50)*I0;
    If IkM <= 10 then begin C:= IKM+2;Clama:=C;end;
    TextBackGround(0);TextColor(15);
    GotoXY(50,22);write(' C: ',C);
    H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
    betul := 0;max:=1;
    For IX:=1 to 50 do
    If (sudahselesai=0) then
    begin
      alfa:= pi/18 + ((16/18)*(pi/50))*IX;
      For IY:=1 to 50 do
      If (sudahselesai=0) then
      begin
        beta:= pi/18 + ((16/18)*(pi/50))*IY;
        For IZ:=1 to 50 do
        If (sudahselesai=0) then
        begin
          gama:= pi/18 + ((16/18)*(pi/50))*IZ;
          For J1 :=1 to RecordInput.Data do
          If terus = 1 then
          begin
            Model_Triclinic;
            If sudah = 0 then terus := 0;
          end;sel:=0;masuk:=0;
          If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
          begin
            masuk:=1;
            If masuk=1 then
            begin
              Chasil := C;
              AHasil := A;
              BHasil := B;
              Alfahasil := alfa;
              BetaHasil:=Beta;
              gamahasil:=gama
            end
            Else sel:=1;
          end
          Else sel:=1;
          If (IKM = 11) and (sel=1) then selesai:=1;
          if (sel=0) and (IKM>=12) then IKM:=IKM+1;
          If (IK = 11) and (selesai=1) THEN begin Ganti := 1;IK:=0;end;
          If (masuk=1) THEN begin th:=1;
          If (masuk=0) and (th=1) THEN IK:=IK+1;if IK>=1000 then IK:=1000;end;

```

```

if masuk = 1 then
begin
  For Jn := 1 to 601 do
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
  Kn := 0;
  Repeat
  Repeat
    Kn := Kn + 1;tb:=0;
  Repeat
    tb:=tb+1;sel:=1;
    For J1 := 1 to RecordInput.Data do
    begin
      randomize;
      Inn := Random(TbMax[J1]);
      simpan[kn,J1]:=Inn;
      H1[J1] := H11[J1,Inn];
      K1[J1] := K11[J1,Inn];
      L1[J1] := L11[J1,Inn];
      If J1 > 1 then
        For J2 := 1 to J1-1 do
          If (H1[J2]=H1[J1]) and (K1[J2]=K1[J1]) and (L1[J2]=L1[J1])
            then sel:=0;
        end;
      Until (sel=1) or (tb=100);
      if sel = 1 then
        begin
          benar :=1;
          If kn > 2 then
            begin
              For Jn := 1 to Kn-1 do
                For J1 := 1 to RecordInput.Data do
                  If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
                end;
              end Else Kn:=600;
            Until (benar=1) or (Kn=600) or (Kn=Max);
            if (sel=1) and (benar=1) then NilaiPuncak;
            Until (sudahselesai=1) or (kn=600) or (Kn=Max);
          end;
        end;
      end;
    end;
  end;
  end;
  end;
  J:=0;l:=6;
  If sudahselesai=1 then
  For J1 :=1 to RecordInput.Data do
  begin
    J:=J+1;
    GotoXY(1,J+14);Write(J1,',',H1[J1],',',K1[J1],',',L1[J1]);
    If ((J +14 ) =19) then begin J:=0;l:=l+10;end;
  end;
  If sudahselesai=1 then
  begin
    TextColor(0);TextBackGround(7);
    GotoXY(3,25);Write(' Insy Allah kristalnya Monoclinic ');
    GotoXY(3,1);Write('Alfa :',alfahasil,' Beta :',betahasil,' gama:',gamahasil);
    sound(1000);delay(2000);nosound;
  end;
end;

{Program Utama}
Begin
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Reset(FileInfo);
  Read(FileInfo,RecordInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
  If RecordInfo.ambil=1 then
  begin
    Satu;

```

```
If Sudahselesai<>1 then
begin
TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan monoclinic');
end;
Assign(FileInfo,'Masukan2');
Rewrite(FileInfo);
Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;
write(FileInfo,RecordInfo);
end;
Close(FileInfo);
end.
```

□

```

Program Trigonol;
Uses Crt,Koord;
Type
  Input = record
    Intensitas,InputAwal : Array[1..100] of Real;
    Nan,Data : Integer;
    Lmd : real;
  end;
  Info = record
    Ambil : Integer
  end;
Var
  FileInput : File of Input;
  RecordInput : Input;
  FileInfo : File of Info;
  RecordInfo : Info;
  bt,M,IKM,Tb,kecil3,Il,max,Jn,Kn,Inn,IX,
  A1,B1,C1,I5,masuk,Jm,Na,Ja,batas1,N,I3,tengah,sudahselesai,ganti,
  J3,betul,benar,J2,I1,H,K,L,I,J,J1,batas,sudah,NN,Nlama,
  Datatransfer,IJ,IK,I2,terus,terus2,I0,terus3 : Integer;
  lamda,P,Filter,kecil2,Alfa,Alfahasil,
  SinTeta,CosTeta,Cos2teta,B,Kecil,SL,C,D .A,s,bb,LL,SS : Real;
  Ahasil : Real;
  U,V,W,MP,H1,K1,L1 : Ar;
  T : Br;
  H11,K11,L11 : Array[0..50,0..50] of Integer;
  I2i,J2i,K2i : Array[0..65] Of Integer;
  T1,Lp,F2,P1,Puncak,mm : array[-1..65] of real;
  Inputp : Array[1..50] Of Real;
  Simpan : Array[1..501,1..25] of integer;
  TbMax : array[1..1000] of Integer;
Procedure Multiplisitas;
begin
  If (H1[J1]<>K1[J1]) and (L1[J1]<>0) then Mp[J1] := 24;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (L1[J1]<>H1[J1]) then Mp[J1] := 12;
  If ((H1[J1]=0) or (K1[J1]=0)) and ((L1[J1]<>H1[J1]) or (L1[J1]<>K1[J1]))
  then Mp[J1] := 12;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (H1[J1]=0) then Mp[J1] := 2;
  If (H1[J1]<>K1[J1]) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 12;
  If (H1[J1]=K1[J1]) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 6;
  If ((H1[J1]=0) or (K1[J1]=0)) and (L1[J1]=0) then Mp[J1] := 6;
end;
Procedure Trigonometri;
begin
  SinTeta := Lamda/(2*RecordInput.InputAwal[I]);
  Costeta := Sqrt(1-Sqr(SinTeta));
  Cos2Teta := Sqr(CosTeta)+Sqr(SinTeta);
end;
Procedure faktorStruktur;
begin
  lamda := RecordInput.Lmd;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
  begin
    Trigonometri;
    Lp[I] := (1+Sqr(Cos2Teta))/(Sqr(SinTeta)*CosTeta);
    F2[I] := RecordInput.Intensitas[I]/(Mp[I]*Lp[I]);
  end;
end;
Procedure NilaiPuncak;
begin
  For J1 := 1 to RecordInput.Data do
  begin
    Multiplisitas;
    if mp[I] = 0 then masuk:=0;
  end;
  If masuk=1 then
  begin
    sudahselesai := 1;
    faktorStruktur;
    P1[-1]:=-1;
  end;
end;

```

```

JA := 0; JM:=4;
For I:= 0 to JM do
  For J:=0 to Jm do
    For K :=0 to JM do
      begin
        P1[I]:=-1;sudah :=0;
        P := 0;
        For L := 1 to RecordInput.Data do
          P := P + F2[L]*Cos((2*pi)*((H1[L]*I/Jm) + (K1[L]*J/Jm) +
            (L1[L]*K/Jm)));
          P1[K] := P;
          If ( K = Jm ) And (P1[K] >= P1[K-1]) and ( sudah=0) then
            begin
              JA := JA + 1;
              Puncak[JA] := P1[K];
              I2i[JA] := I;
              J2i[JA] := J;
              K2i[JA] := K;sudah := 1;
            end
          Else
            If ( P1[K] <= P1[K-1]) and (K-1 <> -1 ) and (P1[K-1] > P1[K-2] )
              and ( sudah = 0 ) then
                begin
                  JA := JA + 1;
                  Puncak[JA] := P1[K-1];
                  I2i[JA] := I;
                  J2i[JA] := J;
                  K2i[JA] := K-1;
                end;
            end;
        end;
      Batas1 := JA;
      J3:=0;N:=0;tengah :=0;T[0]:=0;
      Repeat
        J3 := J3 + 1;
        Puncak[I3] := -1;
        Filter := 0;
        For JA := 1 to Batas1 do
          If ( Puncak[JA] >= Filter) then
            begin
              T[J3] := Puncak[JA];
              U[J3] := I2i[JA];
              V[J3] := J2i[JA];
              W[J3] := K2i[JA];
              Filter := Puncak[JA];
              I3 := JA;
            end;
          If ((T[J3] < 1E-6) or (T[J3] > 100)) and (N < NA+1) then
            begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;Nlama:=N;
            If (sudahselesai=1) and (Abs(T[J3-1]-T[J3])*1000 >= 0.1) and (sudahselesai=1) Then N := N + 1;
            if N=Nlama then NN:=NN+1;
            If (U[J3] <> Round(Jm/2)) and (U[J3]<>Jm) and (U[J3]<>0)
              then begin N:=NA+1;end;
            If (V[J3] <> Round(Jm/2)) and (V[J3]<>Jm) and (V[J3]<>0)
              then begin N:=NA+1;end;
            If (W[J3] <> Round(Jm/2)) and (W[J3]<>Jm) and (W[J3]<>0)
              then begin N:=NA+1;end;
            If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
              If (N<>Nlama) and (N<>1) and (NN<6) then begin sudahselesai:=0;N:=NA+1;end;
              If (U[J3]=Round(JM/2)) and (V[J3]=Round(JM/2)) and (W[J3]=Round(JM/2)) then Else
                If (N<>Nlama) and (N<>1) then NN:=0;
            Until N >=NA+1;
            If sudahselesai = 1 then
              For I:=1 to J3-1 do
                begin
                  bt := 0;
                  For M:=1 to J3-1 do
                    If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
                      begin
                        If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1)
                          and (W[M]+W[I] = JM ) then bt:=1;
                      end;
                    end;
                end;
            end;

```



```

If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (U[M]+U[I] = JM ) then bt:=1;
If (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-W[I])*1000 <=0.1)
  and (V[M]+V[I] = JM ) then bt:=1;
end;
If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
  bt := 0;
  if (U[I]=Round(JM/2)) and (V[I]=Round(JM/2)) and (W[I]=Round(JM/2)) then bt:=1 else
  For M:=1 to J3-1 do
  If (Abs(T[M]-T[I])*1000 <= 0.1) Then
  begin
  if (Abs(U[M]-U[I])*1000 <=0.1) and (Abs(W[M]-V[I])*1000 <=0.1)
    and (M<>I) then bt:=1;
  If (Abs(V[M]-V[I])*1000 <=0.1) and (Abs(U[M]-W[I])*1000 <=0.1)
    and (M<>I) then bt:=1;
  end;
  If bt= 0 then sudahselesai:=0;
end;
end;
J:=0;N:=0;I1:=6;TextBackGround(0);TextColor(15);
If sudahselesai = 1 then
For I:=1 to J3-1 do
begin
  J:=J+1;
  If (Abs(T[I-1]-T[I])*1000 >= 0.1) Then N := N + 1;
  GotoXY(I1,J+2);
  write(N,' ',U[I],' ',V[I],' ',W[I]);
  If (J = 9) then begin J:=0;I1:=I1+13;end;
end;
if N<>Na then sudahselesai:=0;
If sudahselesai = 1 then PosisiUVW(J3,U,V,W,T);
end;
end;
Procedure Model_Trigonal;
begin
sudah := 0;Tb := -1;
For H := 0 to batas do
  For K := 0 to batas do
    For L := 0 to batas do
      begin
        S:=Sqr(H)+Sqr(K)+Sqr(L)+2*(H*K+K*L+H*L)*(Sqr(cos(alfa))-cos(alfa))/
          Sqr(sin(alfa));
        SL := Sqr(sin(alfa))/(1-3*Sqr(cos(Alfa))+2*Sqr(cos(Alfa)));
        if (SL <> 0) or (S<>0) then D := A/sqrt(S*SL) Else D:=1e-12;
        If (Abs(RecordInput.InputAwal[J1]-D)*1000 < kecil) then
          begin
            Sudah := 1;
            Tb := Tb + 1;
            TbMax[J1] := Tb;
            H11[J1,Tb] := H;K11[J1,Tb] := K;L11[J1,Tb] := L;
          end;
        end;
      end;
    if tbMax[j1] <> 0 then Max := Max*TbMax[J1];
    If sudah = 1 Then betul := betul + 1;
  end;
end;
Procedure satu;
Begin
  Kecil := 50;Jm:=4;NA :=RecordInput.Nan;
  Assign(FileInput,'D:masukan');
  Reset(FileInput);
  Read(FileInput,RecordInput);
  Seek(FileInput,FileSize(FileInput));
  batas := 9;
  For I := 1 to RecordInput.Data do
    Inputp[I] := RecordInput.InputAwal[I];
  sudahselesai:=0;
  For I0:= 0 to 1000 do

```

```

If (sudahselesai=0) then
Begin
  Terus:= 1;
  A := 2+(1/50)*10;
  TextBackGround(0);TextColor(15);
  GotoXY(30,22);write( ' A: ',A);
  H1[0] := 0;K1[0] := 0;L1[0] := 0;
  betul := 0;max:=1;
  For IX := 1 to 50 do
  begin
    Alfa := (pi/18)+((16/18)*(pi/50))*IX;
    For J1 :=1 to RecordInput.Data do
    If terus = 1 then
    begin
      Model_Trigonal;
      If sudah = 0 then terus := 0;
    end;
    If (betul = RecordInput.Data) and (terus = 1) then
    begin
      masuk:=1;
      AHasil := A;
      Alfahasil := Alfa;
    end;
    if masuk = 1 then
    begin
      For Jn := 1 to 501 do
      For J1 := 1 to RecordInput.Data do simpan[jn,J1] := 0;
      Kn := 0;
      Repeat
      Repeat
      Kn := Kn + 1;BT:=0;
      Repeat
      benar :=1;bt:=BT+1;
      For J1 := 1 to RecordInput.Data do
      If benar=1 then
      begin
        randomize;
        Inn := Random(TbMax{J1});
        simpan[kn,J1]:=Inn;
        H1[J1] := H11{J1,Inn};
        K1[J1] := K11{J1,Inn};
        L1[J1] := L11{J1,Inn};
        mm{J1}:=Sqr(H1{J1})+Sqr(K1{J1})+Sqr(L1{J1});
        If J1 > 1 then
        begin
          For J2 :=1 to J1-1 do
            If mm{J1}= mm{J2} then benar:=0;
          end;
        end;
        Until (benar=1) OR (BT=100);
        If kn > 2 then
        begin
          For Jn := 1 to Kn-1 do
            For J1 := 1 to RecordInput.Data do
              If simpan[jn,J1] = simpan[kn,J1] then benar := 0;
            end;
          Until (benar=1) or (Kn=500) or (Kn=Max);
          if (benar=1) then NilaiPuncak;
          Until (sudahselesai=1) or (kn=500) or (Kn=Max);
        end;
      end;
      end;
      J:=0;l:=6;
      For J1 :=1 to RecordInput.Data do
      begin
        J:=J+1;
        GotoXY(1,J+14);Write(J1,',',H1{J1},',',K1{J1},',',L1{J1});
        If ((J + 14 ) = 19) then begin J:=0;l:=l+10;end;
      end;
      If sudahselesai=1 then

```

```
begin
  TextColor(0);TextBackGround(7);
  GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya Trigonal');
  GotoXY(60,25);Write(' Alfa : ',Alfahasil);
  sound(1000);delay(2000);nosound;
end;
Close(FileInput);
end;
(Program Utama)
Begin
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Reset(FileInfo);
  Read(FileInfo,RecordInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
  If RecordInfo.ambil=1 then
  begin
    Satu;
    If sudahselesai<>1 then
    begin
      TextColor(0);GotoXY(3,25);Write(' Insya Allah kristalnya bukan Trigonal');
    end;
  Assign(FileInfo,'Masukan2');
  Rewrite(FileInfo);
  Seek(FileInfo,FileSize(FileInfo));
  If sudahselesai=1 then RecordInfo.ambil:=0 Else RecordInfo.ambil:=1;
  write(FileInfo,RecordInfo);
  end;
  Close(FileInfo);
end.□
```

```

Program Gambar;
Uses Crt,graph;
Type
  Posisi = record
    Jumlah : Integer;
    At,Ug,Vg,Wg : Array[1..50] of Integer;
  end;
  Ar = Array[-1..50] Of Integer;
  Br = Array[0..50] of Real;
Var
  FilePosisi : File of Posisi;
  RecordPosisi : Posisi;
  Dg,Mg,N,I,A,I3,Xm,Ym :Integer;
  Um,Vm,Wm,U,V,W : Array[1..50] of Integer;
  Tm : Array[0..50] of Real;

Procedure Gambar3D;
begin
  N:=1;
  with recordPosisi do
  For I:=1 to Jumlah do
  begin
    Xm := Round(((150/4) * Vg[I]) + 100 + ((300/4)*Ug[I]));
    Ym := Round(410 - ((270/4)*Wg[I]) - ((90/4)*Vg[I]));
    setFillStyle(At[I]*N,1);
    Fillellipse(Xm,Ym,(25-(At[I]*2)),(25-(At[I]*2)));
    setFillStyle(Vg[I]-1,1);
    Fillellipse(Xm,Ym,10,10);
  end;
  SetColor(1);
end;
Procedure bacadata;
Begin
  clrscr;
  Assign(FilePosisi,'UVW');
  Reset(FilePosisi);
  Read(FilePosisi,RecordPosisi);
  Seek(FilePosisi,FileSize(FilePosisi));
end;

{Program Utama}
Begin
  bacadata;
  Dg:=0;Mg:=0;
  Initgraph(Dg,Mg,"");SetGraphMode(Mg);setColor(1);
  Line(100,140,100,410);Line(400,140,400,410);Line(100,140,400,140);
  Line(100,410,400,410);
  Line(250,50,250,320);Line(550,50,550,320);Line(250,50,550,50);
  Line(250,320,550,320);
  Line(250,50,100,140);Line(550,50,400,140);Line(550,320,400,410);
  Line(100,410,250,320);
  Gambar3D;
  readln;
end.

```

11

**LAMPIRAN II**  
**Tabel Hanawalt Kristal Al dan GaAs**

d	2.34	2.02	1.22	2.34	Al
$I/I_1$	100	47	24	100	Aluminium
Rad. $CuK\alpha_1$	$\lambda$ 1.5405	Filter Ni	Dia		
CutOff	$I/I_1$ Diffractometer				
Ref. Swanson and Tatge, JC F & Report NBS 1950					
Sys. Cubic		S.G. $O_H^5 - F_M3_M$			
$a_0$ 4.0494	$b_0$	$c_0$	$\Lambda$	$C$	
$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$Z$ 4		
Ref. IBID					
$\epsilon\alpha$	$n\omega\beta$	$\epsilon\gamma$		Sign	
2V	$D_x$ 2.697			color	
Ref. IBID					
Sample Prepared at NBS 99.9% Al at 23° C					
to Replace 1-1176, 1-1180, 2-1109, 3-00932					
dÅ	$I/I_1$	hkl	dÅ	$I/I_1$	hkl
2.338	100	111			
2.024	47	200			
1.431	22	220			
1.221	24	311			
1.1690	7	222			
1.0124	2	400			
0.9289	8	331			
0.9055	8	420			
0.8266	8	422			

d	3.26	2.00	1.70	3.26	GaAs
$I/I_1$	100	35	35	100	Gallium Arsenide
Rad. $CuK\alpha_1$	$\lambda$ 1.5405	Filter Ni	Dia		
CutOff	$I/I_1$ Diffractometer				
Ref. Shirley R. Abrams, Polytechnic Inst. of Brooklyn, New York (1962)					
Sys. Cubic		S.G. $F43_M$ (216)			
$a_0$ 5.6534	$b_0$	$c_0$	$A$	$C$	
$\alpha$	$\beta$	$\gamma$	$Z$ 4	$D_x$	
Ref. Giesecke And Mister, Acta Cryst. 11 369 (1958)					
$\epsilon\alpha$	$n\omega\beta$	$\epsilon\gamma$		Sign	
2V	$D_x$ 5.307 mp			color	
Ref. IBID					
dÅ	$I/I_1$	hkl	dÅ	$I/I_1$	hkl
3.260	100	111			
2.832	<1	200			
1.999	35	220			
1.704	35	311			
1.413	6	400			
1.297	8	331			
1.154	6	422			
1.088	4	333			
0.9993	2	440			
0.9556	2	531			
0.8939	4	620			
0.8622	2	533			
0.8160	4	444			
0.7916	2	711			

LAMPIRAN III  
Tabel Hanawalt Kristal  $MgY_2S_4$  dan  $Rb_2V_6O_{16}$

d	3.53	2.74	2.57	5.68	$MgY_2S_4$					
I/I <sub>1</sub>	100	100	100	20	MAGNESIUM YTRIUM SULFIDE					
Rad. CuK $\alpha$	$\lambda$ 1.5418	Filter Ni	Dis. 2400 $\mu$	d $\text{\AA}$	I/I <sub>1</sub>	hkl	d $\text{\AA}$	I/I <sub>1</sub>	hkl	
Cut off	I/I <sub>1</sub> VISUAL			5.675	20	120				
Ref. FLAHAUT ET AL., BULL. SOC. CHIM. FRANCE, 1937 (1961)				3.531	100	230,320				
				3.153	20	400				
				2.838	60	240,420				
				2.743	100	311,331				
				2.570	100	231				
				2.392	20	141				
				2.237	10	440				
				2.078	40	610,151				
				1.991	60	521				
1 $\alpha$	n $\omega$ $\beta$	l $\gamma$	Sign	1.895	100	351				
2V	D 3.62	mp	Color	1.760	20	460				
Ref. 1810.				1.664	40	322				
				1.620	20	551				

14-349 MINOR CORRECTION

d	7.82	3.21	2.92	7.92	$Rb_2V_6O_{16}$					
I/I <sub>1</sub>	100	100	100	100	RUBIDIUM VANADIUM OXIDE					
Rad.	$\lambda$	Filter	Dis.	d $\text{\AA}$	I/I <sub>1</sub>	hkl	d $\text{\AA}$	I/I <sub>1</sub>	hkl	
Cut off	I/I <sub>1</sub> VISUAL			7.82	100	100				
Ref. KELWENS, J. INORG. NUCL. CHEM. 21 48 (1961)				5.72	75	110				
				4.22	75	020				
				3.99	75	161				
				3.54	25	210				
				3.24	75	201				
				3.21	100	021				
				3.02	75	211				
				2.92	100	201				
				2.87	100	220				
1 $\alpha$	n $\omega$ $\beta$	l $\gamma$	Sign	2.49	100	062				
2V	D	mp	Color	2.40	75	221				
Ref.				1.80	75	222				

LAMPIRAN IV  
Tabel Hanawalt Kristal  $Cd_2B_2O_5$  dan  $BPO_4$

14-696

d	3.63	2.25	1.86	3.63	BPO <sub>4</sub>	★			
I/I <sub>1</sub>	100	30	6	100			BORON PHOSPHATE		
Rad. CuKα <sub>1</sub>	λ 1.5405	Filter	DIS. GUINIER	d Å	I/I <sub>1</sub>	hkl	d Å	I/I <sub>1</sub>	hkl
Cut off	50 Å	I/I <sub>1</sub> PHOTOMETER	CAUENA 114.6μW	3.632	100	101			
Ref.	DE WOLFF, TECHN. PHYS. DIENST, DELFT, HOLLAND.			3.322	4	002			
				3.067	4	110			
Sys. Tetragonal		S.G. $I \bar{4} (82)$		2.254	30	112			
a	4.338	b	6.645	A	1.973	2	103		
c		γ	2 2	D <sub>2</sub>	1.852	8	211		
Ref.	IBID.			D <sub>2</sub>	1.816	4	202		
					1.661	1	004		
					1.534	2	220		
					1.460	8	114, 213		
tc		n <sub>D</sub>	mp	γ	Color	Sign			
2V	D								
Ref.									
					1.413	1	301		
					1.393	1	222		
					1.372	2	310		
					1.319	4	204		
					1.271	1	102		
					1.268	2	312		
					1.211	2	303		
					1.184	2	221		

14-153

d	4.63	2.84	2.78	9.56	Cd <sub>2</sub> B <sub>2</sub> O <sub>5</sub>	Cd <sub>2</sub> B <sub>2</sub> O <sub>5</sub>			
I/I <sub>1</sub>	100	90	80	5			CADMIUM BORATE		
Rad. CuKα	λ 1.5405	Filter	DIS. GUINIER	d Å	I/I <sub>1</sub>	hkl	d Å	I/I <sub>1</sub>	hkl
Cut off		I/I <sub>1</sub> VISUAL		9.56	5	001			
Ref.	HARD AND ROSS-MOE, J. AM. CER. SOC. 45 197 (1962)			6.12	20	010			
				5.94	20	011			
Sys. Triclinic		S.G.		4.79	5	002			
a	3.47	b	6.35	c	10.06	A	0.546	C	1.562
α	105°36'	β	90°55'	γ	791°23'	Z	2	D <sub>2</sub>	5.24
Ref.	IBID.								
					3.07	30	020		
					3.01	30	111		
					2.97	35	110		
					2.95	10	022		
					2.84	90	102		
					2.78	80	102		
					2.72	30	112		
					2.59	25	023		
					2.57	30	013		
					2.47	5	014		
					2.38	20	103, 112		
tc		n <sub>D</sub>	mp	γ	Color	Sign			
2V	D								
Ref.									

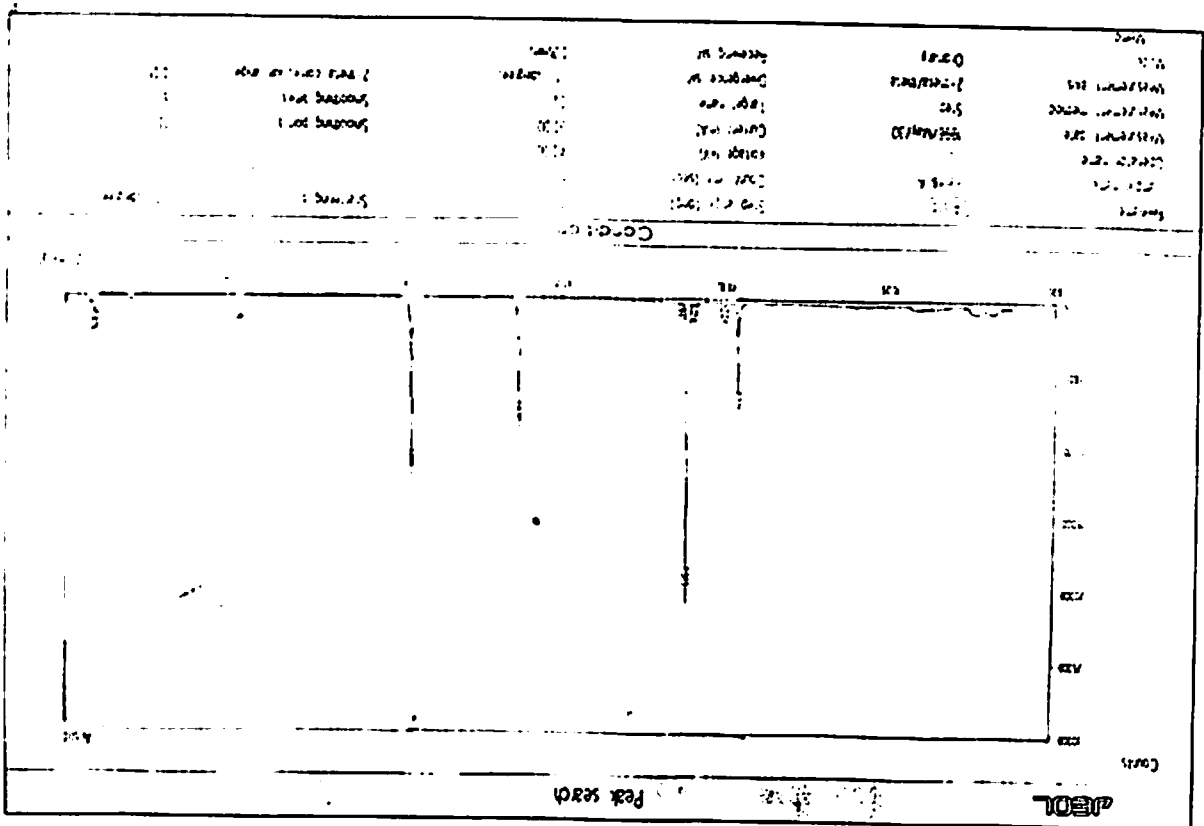
LAMPIRAN V  
Tabel Hanawalt Kristal  $LiAl_2Si_2$  dan  $B_{13}P_2$

d	2.52	1.51	2.57	4.74	$B_{13}P_2$
1/1	100	90	Bu	:	Basic phosphate
Rad. C <sub>Kα</sub>	λ 2.2909 Filter V Dia.				
Cut off	1/1				
Ref. Hanawalt	ACTA Cryst. 13 53 (1965)				
Sys. Hexagonal (Rhombohedral)	SG. $R\bar{3}m$ (166), C 1.986				
a	5.984	b	5.985	A	Z 3° D <sub>1</sub>
Ref. 1810.					
$d_0$	n <sub>h</sub> / $D \cdot 2.74$ mp $l_1$ Color Sign				
3V					
Ref.					
UNIT CELL DIMENSIONS LISTED ARE THOSE OF THE THINEST PRIMITIVE RHOMBOHEDRAL CELL					
	d A	1/1	Li.	d A	Li.
	4.74	1	100	2.2977	100
	3.80	60	100	2.2930	100
	2.918	60	100	2.2987	100
	2.559	80	100	2.2950	100
	2.222	100	100	2.2899	100
	2.149	60	100	2.2254	100
	1.951	1	100	2.1924	100
	1.748	5	100	2.1624	100
	1.582	10	100	2.1352	100
	1.434	1	100		
	1.222	5	100		
	1.035	70	100		
	1.432	20	100		
	1.607	10	100		
	1.502	10	100		
	1.509	80	100		
	1.495	50	100		
	1.426	50	100		
	1.413	30	100		
	1.3970	50	100		

14-470 MIND CORRECTION

d	1.51	3.11	1.76	4.60	Li <sub>2</sub> SiO <sub>3</sub>
1/1	100	80	60	21	Common phosphate
Rad. C <sub>Kα</sub>	λ 2.2919 Filter V Dia.				
Cut off	1/1 Visual				
Ref. Hanawalt	ACTA Cryst. 13 53 (1965)				
Sys. Hexagonal	SG				
a	3.63	b	3.61	A	C 9.52
β		γ		Z 3/2	10 2.41
Ref. 1810.	(Rhombohedral) SG. $R\bar{3}m$ (166), C 1.986				
$d_0$	n <sub>h</sub> / $D \cdot 2.74$ mp $l_1$ Color Sign				
3V					
Ref. 1810.					
HIGH TEMPERATURE					
	d A	1/1	Li.	d A	Li.
	3.11	1	100	2.2977	100
	2.57	60	100	2.2930	100
	2.632	80	100	2.2987	100
	2.581	20	100	2.2950	100
	2.317	20	100	2.2254	100
	2.270	10	100	2.1924	100
	2.062	10	100	2.1624	100
	1.912	100	100	2.1352	100
	1.760	60	100		
	1.633	30	100		





LAMPIRAN VI  
Contoh Data Diffraktometer  
Sinar - X JDX-3530

**LAMPIRAN VII**  
**Faktor Multiplisitas**

Kubik	$\frac{hkl}{48}$	$\frac{hhl}{24}$	$\frac{0kl}{24}$	$\frac{0kk}{12}$	$\frac{hhh}{8}$	$\frac{00l}{6}$	
Heksagonal dan Rhombohedral	$\frac{hk.l}{24}$	$\frac{hh.l}{12}$	$\frac{0k.l}{12}$	$\frac{hk.0}{-12}$	$\frac{hh.0}{6}$	$\frac{0k.0}{6}$	$\frac{00.l}{2}$
Tetragonal	$\frac{hkl}{16}$	$\frac{hhl}{8}$	$\frac{0kl}{8}$	$\frac{hk0}{8}$	$\frac{hh0}{4}$	$\frac{0k0}{4}$	$\frac{00l}{2}$
Orthorombik	$\frac{hkl}{8}$	$\frac{0kl}{4}$	$\frac{h0l}{4}$	$\frac{hk0}{4}$	$\frac{h00}{2}$	$\frac{0k0}{2}$	$\frac{00l}{2}$
Monoklinik	$\frac{hkl}{4}$	$\frac{h0l}{2}$	$\frac{0k0}{2}$				
Triklinik	$\frac{hkl}{2}$						

SELESAI

PAMERAN

01 OCT 1997