

## BAB I – PRINSIP-PRINSIP DIFRAKSI SINAR-X

### I. PENDAHULUAN

Sejarah mengenai difraksi sinar-x telah berjalan hampir satu abad ketika tulisan ini disusun. Tahun 1912 adalah awal dari studi intensif mengenai difraksi sinar-x. Dimulai dari pertanyaan M. van Laue kepada salah seorang kandidat doktor P.P. Ewald yang dibimbing A. Sommerfeld, W. Friedrich (asisten riset Sommerfeld) menawarkan dilakukannya eksperimen mengenai 'difraksi sinar-x'. Pada saat itu eksperimen mengenai hamburan sinar-x sudah dilakukan oleh Barkla. Laue mengawasi pekerjaannya dengan menuliskan hasil pemikiran teoretiknya dengan mengacu pada hasil eksperimen Barkla. Laue berargumentasi, ketika sinar-x melewati sebuah kristal, atom-atom pada kristal bertindak sebagai sumber-sumber gelombang sekunder, layaknya garis-garis pada geritan optik (*optical grating*). Efek-efek difraksi bisa jadi menjadi lebih rumit karena atom-atom tersebut membentuk pola tiga dimensi. Eksperimen difraksi sinar-x yang pertama dilakukan oleh Herren Friedrich dan Knipping menggunakan kristal tembaga sulfat dan berhasil memberikan hasil pola difraksi pertama yang kemudian menjadi induk perkembangan difraksi sinar-x selanjutnya.

Difraksi sinar-x merupakan proses hamburan sinar-x oleh bahan kristal. Pembahasan mengenai difraksi sinar-x mencakup pengetahuan yang berhubungan dengan hal-hal berikut ini:

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

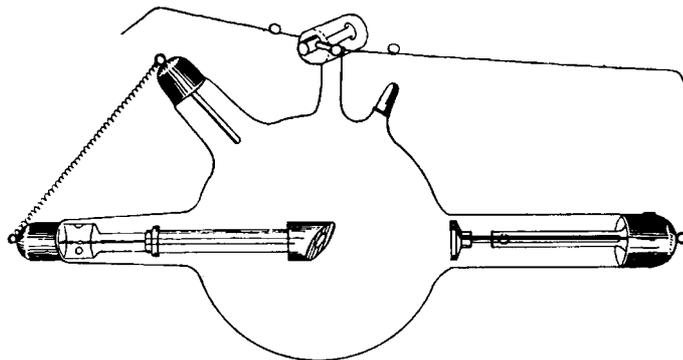
Dengan demikian, difraksi sinar-x adalah topik lanjut di bidang fisika (atau kimia) yang memerlukan pengetahuan dasar yang cukup banyak dan kompleks. Untuk itulah tulisan ini disusun menurut urutan tersebut di atas dengan asumsi bahwa pembaca sudah memiliki dasar yang cukup mengenai gelombang, optika dan fisika zat padat. Bahasan mengenai prinsip kristalografi diberikan secara ringkas mengingat penekanan pembahasan pada buku ini adalah pada difraksi sinar-x. Pembaca yang berminat disarankan membaca buku-buku mengenai kristalografi seperti *Introduction to Crystallography* karya Donald E. Sands.

### II. SINAR-X

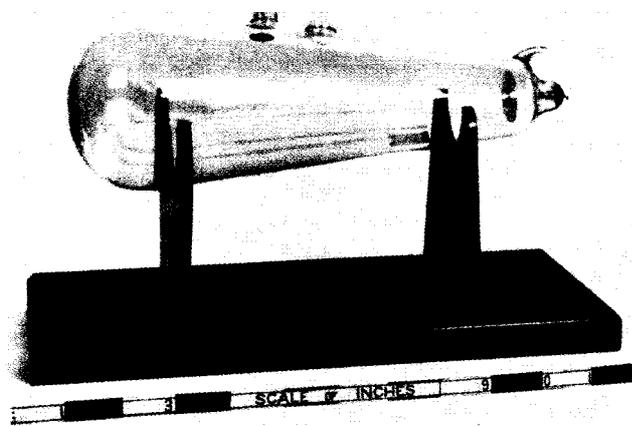
Penemuan sinar-x memiliki sejarah yang, tentu saja, lebih panjang. Tahun 1895, W.C. Röntgen menghasilkan penemuan yang sangat vital dalam perkembangan sains modern. Röntgen menemukan sejenis radiasi yang keluar dari sebuah tabung muatan (*discharge tube*), yang karena misteriusnya diberi nama **sinar-x**. Menariknya, sinar-x ditemukan sebelum ditemukannya elektron oleh J.J. Thomson. Skema tabung sinar-x pertama diperlihatkan pada

Gambar 1.1. Sedangkan Gambar 1.2 menunjukkan foto tabung sinar-x sebenarnya. Sinar-x pada tabung muatan ini terbentuk dengan cara pemberian beda tegangan pada elektroda-elektroda tabung yang menghasilkan 'sinar elektron' yang ditumbukkan ke bahan tertentu (pada masa itu dinamakan *anticathode*, anti-katoda). Anti-katoda menjadi sumber sinar-x, yang pada saat itu belum diketahui mekanisme sebab pembentukannya.

Sejalan perkembangan ilmu pengetahuan diketahui bahwa sinar-x adalah radiasi elektromagnetik transversal, seperti cahaya tampak, tetapi dengan panjang gelombang yang jauh lebih pendek. Jangkauan panjang gelombangnya tidak terdefinisi dengan jelas tetapi diperkirakan mulai dari panjang gelombang cahaya ungu hingga sinar gamma yang dipancarkan oleh bahan-bahan radioaktif. Pembaca dipersilakan mengacu pada buku-buku Fisika Modern. Dalam kristalografi, panjang gelombang yang digunakan berkisar antara 0.5 hingga  $2.5\text{\AA}$  (Guinier 1963). Penting untuk diketahui bahwa gelombang elektromagnetik memiliki interpretasi ganda: sebagai gelombang dan sebagai partikel. Pembahasan difraksi sinar-x banyak menggunakan sinar-x yang membawa sifat gelombang.



Gambar 1.1. Skema tabung pembentuk sinar-x (Bragg, Phillips & Lipson 1975).



Gambar 1.2. Tabung sinar-x pada awal pembuatannya (Bragg, Phillips & Lipson 1975).

Karena berupa gelombang elektromagnetik, sinar-x menjalar pada medium apapun dengan kecepatan yang hampir tetap, yaitu setara dengan kecepatan cahaya di dalam vakum ( $\approx 3.0 \times 10^8$  m/s); dengan perbedaan selalu kurang dari 0.01%. Dengan demikian, sinar-x, secara praktis, tidak terdeviasi oleh refraksi. Indeks refraksinya hanya sedikit lebih kecil daripada satu (0.99999, Guinier 1963).

Karena selalu menjalar sepanjang garis lurus, sinar-x tidak dapat dibelokkan oleh lensa. Namun, sinar-x dapat dipantulkan oleh cermin - sehingga ada cermin sinar-x. Dari teori mengenai optik geometri diketahui bahwa bila sebuah berkas menjalar yang di udara bertemu dengan permukaan sebuah medium padat dengan indeks  $n$  kurang dari satu, maka peristiwa pantulan sempurna (*total reflection*) bisa terjadi saat sudut datang cukup kecil. Sudut kritis untuk sinar-x berorde 10 - 30' (*tugas Anda untuk menghitungnya!*).

Awal ditemukannya difraksi sinar-x (secara teori maupun eksperimen - lihat Pengantar) memberikan ilustrasi bahwa secara prinsip sifat-sifat gelombang sinar-x dan interaksinya dengan material dapat dimanfaatkan untuk mengeksplorasi 'keadaan mikroskopik' material-material yang memiliki keteraturan susunan atom. Dari sinilah kemudian berkembang ilmu analisis sinar-x (*X-Ray Analysis*), yang meliputi spektroskopi, difraksi, refleksi, polarisasi dan sebagainya. Ada bagian di mana sinar-x menjadi objek eksperimen, ada pula bagian di mana sinar-x dimanfaatkan untuk membantu menunjukkan sifat-sifat material. Salah satu contoh dari yang terakhir adalah penggunaan sinar-x dalam difraksi yang bertujuan membantu menunjukkan sifat-sifat dasar material kristal. Oleh sebab itu, tidak mengherankan bila difraksi sinar-x merupakan salah satu metode standar dalam karakterisasi material.

### III. INTERAKSI SINAR-X DAN MATERIAL

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

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

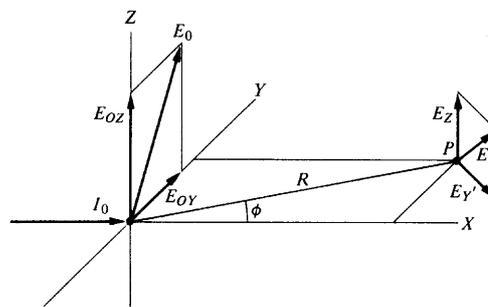
Dalam interaksinya dengan material, sinar-x juga dapat mengalami **polarisasi** linier (seperti halnya cahaya tampak), baik parsial maupun total. Dengan demikian berkas sinar-x terpolarisasi dapat diperoleh dengan cara hamburan dan untuk sudut hamburan  $90^\circ$ , polarisasi lengkap terjadi, yaitu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

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

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

#### IV. HAMBURAN SINAR-X

Perhatikan gambar 1.3.  $I_0$  adalah intensitas berkas datang tak terpolarisasi yang menjalar pada arah-X, dengan  $E_0$  adalah komponen vektor medan listriknya dan  $\nu$  adalah frekuensinya. Berkas sinar-x datang menumbuk *sebuah elektron bebas* pada posisi  $(0,0,0)$ . Yang akan ditentukan adalah intensitas radiasi terhambur pada titik P yang berjarak R dari elektron pada sudut  $\phi$  terhadap sumbu-X. Perhitungan dilakukan dengan menggunakan teori hamburan klasik. Titik P berada di bidang XY. Berkas datang memiliki komponen vektor medan listrik yang besarnya sama pada arah Y dan Z. Tumbukan oleh berkas sinar-x dengan elektron berakibat pada berpindahnya energi dari berkas sinar-x datang ke elektron sehingga elektron dipercepat. Akibat percepatan yang dialaminya, menurut teori elektromagnetik klasik, elektron memancarkan radiasi elektromagnetik. Medan listrik dari radiasi ini adalah (Warren 1969):



Gambar 1.3. Hamburan klasik oleh seberkas sinar-x tak-terpolarisasi oleh sebuah elektron.

$$\varepsilon = \frac{qa \sin \alpha}{c^2 R} \quad (1.1)$$

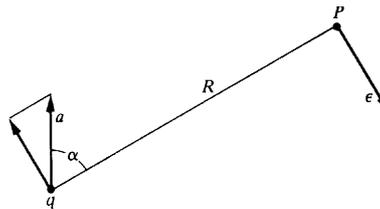
dengan  $q$  adalah muatan elektron,  $c$  kecepatan cahaya dan  $a \sin \alpha$  adalah komponen percepatan elektron yang menimbulkan medan listrik (Gambar 1.4). Dengan mempertimbangkan dua komponen medan listrik, dapat diketahui

$$\langle E^2 \rangle = \langle E_0^2 \rangle \frac{e^4}{m^2 c^4 R^2} \left( \frac{1 + \cos^2 \phi}{2} \right) \quad (1.2)$$

Intensitas berkas terhambur (dalam satuan cgs) adalah

$$I = \frac{c}{8\pi} \langle E^2 \rangle = I_0 \frac{e^4}{m^2 c^4 R^2} \left( \frac{1 + \cos^2 \phi}{2} \right) \quad (1.3)$$

Persamaan (1.3) dinamakan *Rumus Thomson*. Pada jarak beberapa sentimeter dari sebuah elektron, rasio  $I/I_0$  berorde  $10^{-26}$ ; kecil untuk bisa diukur. Namun, bila jumlah elektron pada sebuah sampel kira-kira  $10^{20}$ , maka radiasi terhambur bisa dikatakan 'lebih terukur'.



Gambar 1.4. Medan listrik  $\varepsilon$  yang dihasilkan oleh muatan  $q$  yang dipercepat dengan percepatan  $a$  menurut teori elektromagnetik klasik.

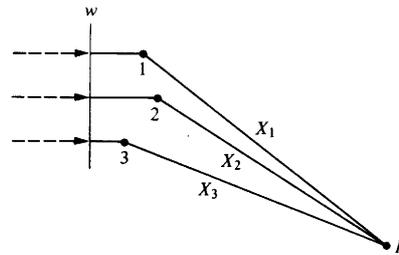
Bahasan berikut berkaitan dengan intensitas hamburan dari beberapa titik pusat. Untuk persoalan ini, perhatikan gambar 1.5. Berkas sejajar dengan komponen medan listrik  $E_1, E_2, E_3, \dots, E_n$  datang menuju beberapa titik hamburan 1, 2, 3, ...,  $n$ .  $X_i$  menyatakan jarak muka gelombang (*wave front*)  $w$  ke titik pengamatan P. Bila frekuensi radiasi dan panjang gelombangnya adalah  $\nu$  dan  $\lambda$ , medan listrik terhambur oleh pusat  $n$  adalah

$$\varepsilon_n = E_n \cos \left( 2\pi \nu t - \frac{2\pi X_n}{\lambda} \right) \quad (1.4)$$

Dengan mengambil bentuk kompleks persamaan (1.4), dapat diperlihatkan bahwa

$$\varepsilon \varepsilon^* = E^2 \quad (1.5)$$

Intensitas pada titik pengamatan adalah  $I = \frac{cE^2}{8\pi}$ .



Gambar 1.5. Hamburan berkas datang paralel oleh beberapa pusat hamburan.

Kenyataannya, hamburan yang terjadi di dalam material yang ditembaki dengan sinar-x bukan hanya hamburan koheren (dengan energi tidak berubah) seperti di atas, tetapi juga hamburan tak-koheren yang diakibatkan oleh Efek Compton. Perlu juga dicatat bahwa, menurut teori kuantum, hamburan oleh sebuah elektron bebas hanya terjadi melalui Efek Compton. Namun, hamburan oleh elektron pada sebuah atom tentu saja tidak mengikuti hukum ini; hamburan koheren masih mungkin terjadi. Berikut ini adalah beberapa aspek mengenai intensitas hamburan yang disimpulkan dari perhitungan mekanika kuantum:

- (1) hamburan koheren dan Compton terjadi bersama-sama;
- (2) Intensitas hamburan total per elektron diberikan oleh Rumus Thomson [persamaan (1.3)];
- (3) Intensitas hamburan koheren adalah

$$I_{koh} = f^2 I \quad (1.6)$$

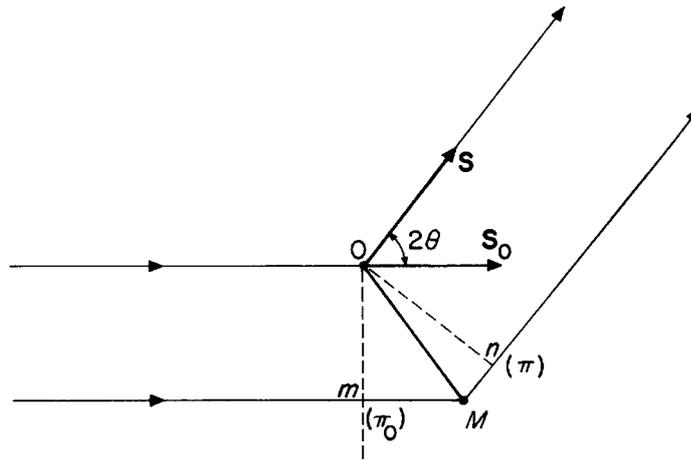
dengan  $f$  dinamakan *faktor struktur sebuah elektron*. Penjelasan mengenai faktor struktur ini akan diberikan pada bagian berikut ini.

## V. DIFRAKSI SINAR-X

Difraksi sinar-x oleh sebuah materi terjadi akibat dua fenomena: (1) hamburan oleh tiap atom dan (2) interferensi gelombang-gelombang yang dihamburkan oleh atom-atom tersebut. Interferensi ini terjadi karena gelombang-gelombang yang dihamburkan oleh atom-atom memiliki koherensi dengan gelombang datang dan, demikian pula, dengan mereka sendiri.

Perhitungan interferensi gelombang dapat dijelaskan sebagai berikut. Pandang seberkas sinar-x paralel dan sebuah pusat hamburan O (Gambar 1.6).

Bila  $E_0 \cos 2\pi vt$  adalah amplitudo komponen medan listrik pada O, amplitudo pada sebuah titik berjarak  $r$  dari O adalah



Gambar 1.6. Interferensi dua gelombang dari dua pusat hamburan.

$$E = fE_0 \cos\left[2\pi\nu\left(t - \frac{r}{c}\right) - \phi\right] \quad (1.7)$$

dengan  $f$  disebut faktor hamburan, yaitu rasio antara amplitudo terhambur dan amplitudo datang. Secara umum,  $f$  tergantung pada sudut  $2\theta$  antara kedua radiasi. Besaran  $\phi$  adalah pergeseran fase hamburan. Bila digunakan notasi kompleks,

$$\begin{aligned} E &= fE_0 \cos\left[2\pi\nu\left(t - \frac{r}{c}\right) - \phi\right] \\ &= [f \exp(-i\phi)] \cos\left[2\pi\nu\left(t - \frac{r}{c}\right)\right] \end{aligned} \quad (1.8)$$

Besaran

$$f \exp(-i\phi) \quad (1.9)$$

dinamakan *faktor hamburan kompleks*.

Bila pusat hamburan adalah sebuah elektron bebas, maka  $\phi = 90^\circ$ . Keadaan yang sama, secara umum, ditemukan pada hamburan dengan atom sebagai pusatnya. Gelombang terhambur memiliki fase yang berlawanan dengan gelombang datang.

Kembali ke Gambar 1.6, sekarang akan dibahas radiasi resultan yang terhambur oleh dua sumber hamburan O dan M. Diasumsikan bahwa pergeseran fase  $\phi$  oleh kedua atom sama. Bila kedua atom identik, memang demikian keadaannya, namun hal yang sama juga terjadi pada kebanyakan kasus di mana kedua atom berbeda. *Beda fase* antara kedua gelombang terpancar tergantung pada posisi O dan M. Muka-muka gelombang datang dan terhambur yang melewati O adalah  $(\pi_0)$  dan  $(\pi)$ . Panjang lintasan sinar yang melewati M lebih besar sebanyak  $\Delta = \overline{mM} + \overline{nM}$ , dengan  $m$  dan  $n$  adalah proyeksi O pada sinar datang dan terhambur yang melalui M. Arah sinar datang dan terhambur akan didefinisikan menggunakan vektor-vektor satuan  $\mathbf{S}$  dan  $\mathbf{S}_0$ . Panjang  $\overline{mM}$  dan  $\overline{nM}$  adalah

$$\overline{mM} = \mathbf{S}_0 \cdot \mathbf{OM}$$

$$\overline{nM} = -\mathbf{S} \cdot \mathbf{OM}$$

Sehingga  $\Delta = \overline{mM} + \overline{nM} = -\mathbf{OM} \cdot (\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)$ , dan beda fase keduanya adalah

$$\varphi = \frac{2\pi\Delta}{\lambda} = -2\pi \cdot \mathbf{OM} \cdot \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda} \quad (1.10)$$

Didefinisikan vektor  $\mathbf{s} = \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda}$  yang memiliki peran besar dalam teori hamburan.

Vektor ini akan dibahas lebih mendalam pada bagian berikut ini. Perhatikan Gambar 1.7. Vektor  $\mathbf{s}$  memiliki arah sama dengan  $\mathbf{ON}$  yang memotong sudut yang dibentuk oleh  $\mathbf{S}$  dan  $-\mathbf{S}_0$ . Panjangnya adalah  $s = \left(\frac{2}{\lambda}\right) \sin[(\mathbf{S}, \mathbf{S}_0)/2]$ . Bila sudut hamburan  $(\mathbf{S}, \mathbf{S}_0)$  sama dengan  $2\theta$ , maka

$$s = \frac{2 \sin \theta}{\lambda} \quad (1.11)$$

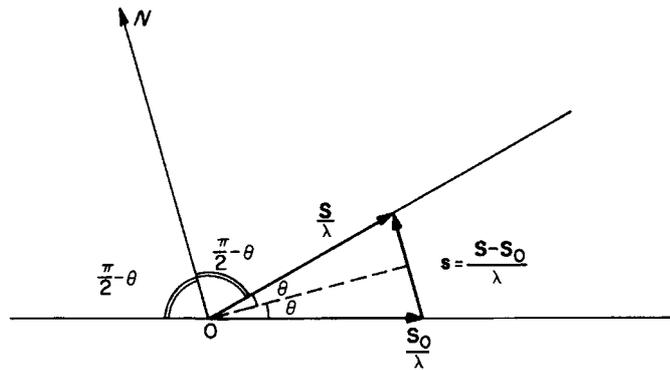


Figure 1.7. Definisi dari  $\mathbf{s} = \frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda}$ .

Karena beda fase hanya tergantung pada vektor  $\mathbf{s}$ , perhitungan interferensi tidak tergantung secara eksplisit pada  $\mathbf{S}$ ,  $\mathbf{S}_0$  dan  $\lambda$ , melainkan pada kombinasi  $\frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda} = \mathbf{s}$ . Pentingnya  $\mathbf{s}$  menjadikan lebih nyamannya membuat sebuah ruang baru yang dinamakan ruang resiprokal (*reciprocal space*) yang setiap titiknya berhubungan dengan sebuah vektor  $\mathbf{s}$  yang merupakan vektor posisi titik tersebut. Intensitas terhambur pun sekarang dapat dinyatakan sebagai  $I(\mathbf{s})$ .

## VI. SYARAT DIFRAKSI

Representasi matematis syarat terjadinya difraksi diberikan oleh Hukum Bragg

$$2d_{hkl} \sin \theta_B = n\lambda$$

dengan  $d_{hkl}$  adalah jarak antar-bidang (*interplanar spacing*) ( $hkl$ ) untuk sebuah kristal,  $\theta_B$  adalah sudut Bragg dan  $\lambda$  adalah panjang gelombang radiasi. Hukum Bragg dapat dikatakan sebagai representasi non-vektorial dua dimensi sebagai syarat terjadinya difraksi.

Di samping representasi dalam bentuk Hukum Bragg, terjadinya difraksi harus memenuhi 3 persamaan Laue yang dinyatakan dengan

$$\frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda} \cdot \mathbf{a}_1 = h'$$

$$\frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda} \cdot \mathbf{a}_2 = k'$$

$$\frac{(\mathbf{S} - \mathbf{S}_0)}{\lambda} \cdot \mathbf{a}_3 = l'$$

Tiga persamaan Laue bukan 'sesuatu yang lain' dalam konteks syarat terjadinya difraksi dipandang dari bahasan Hukum Bragg. Ketiga persamaan tersebut hanyalah representasi vektorial tiga dimensi dari syarat difraksi. (Tugas: buktikan bahwa tiga persamaan Bragg akan mereduksi menjadi Hukum Bragg untuk kristal bidang).

### Daftar Pustaka:

Bragg, L., Phillips, D. & Lipson, H. S. (1975), The development of x-ray analysis, Bell, London.

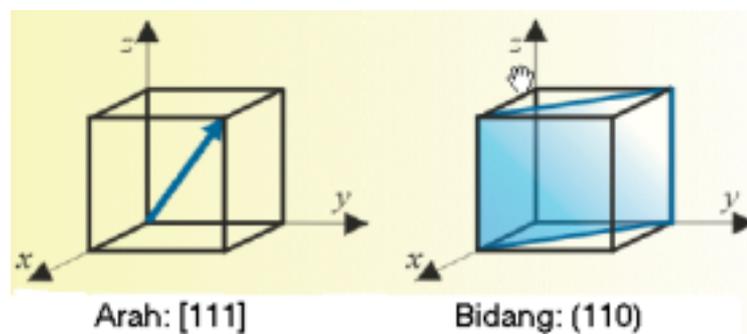
Guinier, A. (1963), X-ray diffraction in crystals, imperfect crystals and amorphous bodies, W.H. Freeman, San Francisco.

Warren, B. E. (1969), X-ray diffraction, Addison-Wesley Pub. Co, Massachusetts.

## DEMONSTRASI: SIMULASI DAN ANIMASI<sup>1</sup>

Untuk memahami difraksi, pertama perhatikan apa yang terjadi pada sebuah gelombang yang berinteraksi dengan sebuah partikel. Partikel menghamburkan berkas datang ke segala arah secara seragam (lihat video). Bila seberkas sinar diarahkan ke sebuah material kristal, berkas hamburan pada arah-arrah tertentu bisa dijumlahkan dan bisa jadi saling menguatkan sehingga menghasilkan berkas difraksi (lihat video).

Untuk mempelajari kristal diperlukan pengetahuan mengenai kristalografi. Salah satu komponen kristalografi adalah pengindeksan bidang dan arah kristal, yang wujudnya kemudian disebut indeks Miller. Salah satu contoh wujud indeks Miller untuk arah dan bidang kristal kubik ditunjukkan pada Gambar berikut.



*Arah dan bidang kristal.*

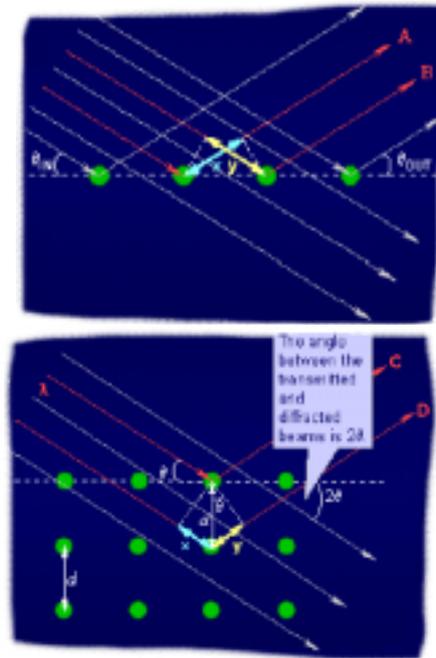
Pemahaman yang benar mengenai geometri difraksi memerlukan pengetahuan mengenai bagaimana gelombang-gelombang radiasi (sinar-x, elektron atau neutron) saling menjumlahkan bila terdapat beda fase antara gelombang-gelombang tersebut. Dua gelombang dengan amplitudo dan frekuensi yang **sama** dapat saling menambahkan dengan variasi penguatan yang tergantung pada beda fase antara keduanya. Peristiwa penambahan dua gelombang ini dinamakan superposisi. Animasi superposisi dua gelombang ditunjukkan oleh video.

Berikut adalah uraian mengenai difraksi oleh sekumpulan atom yang berada pada satu lapisan dengan susunan yang teratur (lihat gambar). Seberkas sinar koheren diarahkan ke atom-atom tersebut pada sudut  $\theta_{IN}$ . Sebagian sinar berinteraksi dengan atom-atom dan dihamburkan ke segala arah (kebanyakan sinar ditransmisikan). Pada gambar, perhatikan dua gelombang terhambur A dan B. Keduanya sefase, saling menguatkan untuk menghasilkan berkas difraksi hanya bila keduanya menempuh jarak yang sama, atau  $x = y$ . Ini terjadi hanya untuk gelombang-gelombang terhambur dengan sudut hamburan  $\theta_{OUT} = \theta_{IN}$ . Jadi berkas difraksi dari sebaris atom-atom dihasilkan oleh semua gelombang terhambur yang sudut hamburnya sama dengan sudut berkas datang. Hal ini terjadi untuk sembarang panjang gelombang.

Selanjutnya perhatikan baris-baris yang memuat atom-atom dengan penempatan yang teratur, yang menggambarkan keadaan material kristal sebenarnya. Telah diketahui sebelumnya bahwa berkas difraksi dari sebaris atom-atom memenuhi  $\theta_{OUT} = \theta_{IN}$ . Masalah yang dihadapi dalam hamburan oleh kristal adalah jarak antar baris berapa yang bisa menghasilkan gelombang

<sup>1</sup> dari berbagai sumber.

terhambur sefase ketika berinteraksi dengan baris-baris berisi atom-atom (bisa juga masalah yang diangkat adalah pada sudut berapa akan diperoleh hamburan sefase). Sebagai ilustrasi, perhatikan tiga baris atom-atom (dua dimensional) seperti ditunjukkan pada Gambar . Gelombang C dan D dihamburkan oleh atom-atom pada dua baris yang bersebelahan dan berjarak  $d$ . Kedua gelombang sefase hanya bila panjang lintasan tambahan gelombang D terhadap C ( $= x + y$ ) sama dengan kelipatan panjang gelombang.



Hamburan dan difraksi oleh (atas) sebaris dan (bawah) beberapa baris atom-atom.

Persamaan yang menyatakan selisih panjang lintasan ini menyatakan Hukum Bragg:

$$x + y = 2d \sin \theta = n\lambda$$

Syarat terjadinya berkas difraksi ini tergantung pada panjang gelombang  $\lambda$ ; jarak antar bidang atom-atom,  $d$ , dan sudut berkas datang,  $\theta$ . Syarat ini biasa dinamakan Hukum Bragg:

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

Untuk pasangan nilai  $d$  dan  $\lambda$  tertentu, ada beberapa nilai  $\theta$  yang memenuhi terjadinya difraksi.

Meninjau sebuah kristal dari kisinya, bisa ditunjukkan adanya banyak bidang berbeda dengan jarak antar bidang yang berbeda hanya pada satu kisi tersebut (lihat animasi dan Gambar). Sulit membayangkan bagaimana seberkas gelombang memasuki sebuah kristal dengan demikian banyak himpunan bidang berlainan yang sudut terhadap berkas datangnya juga beragam serta jarak antar bidangnya pun berbeda-beda. Mana di antara bidang-bidang tersebut yang, kalau ada, memenuhi Hukum Bragg? Untuk menjelaskan hal ini diperlukan pengetahuan mengenai *reciprocal lattice*, yang merupakan sebuah 'besaran panjang' yang dibangun di ruang resiprokal (*reciprocal space*). Rincian penjelasan mengenai ruang ini diberikan pada kuliah Fisika Zat Padat.