

PERHITUNGAN NILAI KISI KRISTAL HEXAGONAL BERDASARKAN POLA DIFRAKSI SINAR-X MENGGUNAKAN SUB ROUTINE BISECTION

Erwin⁽¹⁾, Defrianto⁽¹⁾, Adhy Pryayitno⁽²⁾ dan Fikri Aldi⁽¹⁾

⁽¹⁾Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Riau

⁽²⁾Jurusan Mesin Fakultas Teknik Universitas Riau

Kampus Bina Widya Pekanbaru, 28293, Indonesia

erwin_amiruddin@yahoo.com

ABSTRAK

Penelitian tentang komputasi terhadap parameter-parameter kisi kristal dengan struktur hexagonal melibatkan computer telah dilakukan. Dalam penelitian ini dibuat 2 buah program komputer yaitu program menu dan program utama ditulis menggunakan software (MatLab) versi 8.3.0.532 (R2014a). Program menu digunakan untuk menginput parameter-parameter yang diperlukan dalam perhitungan parameter kisi kristal hexagonal. Program kedua yaitu program utama, digunakan untuk menentukan parameter kisi kristal hexagonal (a dan c). Pola difraksi sinar-X yang digunakan dalam penelitian ini adalah pola difraksi sinar-X dari elemen cobalt. Dari pola difraksi ini ditentukan sudut 2θ , kemudian data ini diinputkan kedalam program menu. Data yang telah diinputkan kedalam program menu ini selanjutnya akan dimanfaatkan oleh program utama untuk melakukan perhitungan terhadap jarak antar bidang d_{hkl} . Kemudian, program komputer akan menghitung nilai batas atas dan bawah dari parameter kisi a dan c untuk seluruh bidang yang mungkin muncul dalam sistem kristal. Selanjutnya, dengan menggunakan metode bisection maka computer akan menghitung nilai a dan c berdasarkan hasil metode bisection dan akhirnya dipilih nilai a dan c yang sama atau hampir sama untuk indek Miller yang berbeda. Hasil perhitungan parameter kisi a dan c untuk elemen cobalt adalah $a = 2.5032 \text{ \AA}$ dan c adalah 4.0602 \AA dan hasil perhitungan ini sesuai dengan yang diharapkan.

Kata kunci: Sinar-X, pola difraksi, struktur hexagonal, parameter kisi dan subroutine bisection

ABSTRACT

Numerical computation of lattice parameters of crystal with hexagonal structure has been performed using computer. In this research, two computer programs have been written using a software called MATLAB version R2014a. The first program called *Program Menu* is used to write the input data from the user. The second program called *Main Program* is used to determine the hexagonal parameters (a and c). The X-ray diffraction data was obtained from cobalt element. From X-Ray diffraction pattern of cobalt element, it can be obtained the angle of reflected beam (2θ). The Main program will calculate the upper and lower limit of lattice parameters for all possible planes in the unit cell of the crystal. Next, computer will calculate the value of lattice parameters of hexagonal structure of crystal. Finally, computer will select the value of lattice parameters (a and c) that has the same values for different crystal planes (hkl). The result of the lattice parameter's average of cobalt are $a = 2.5032 \text{ \AA}$ and $c = 4.0602 \text{ \AA}$. In this result, the values of lattice parameters are comparable with the values of lattice parameters in literature and this result can be accepted.

Keywords: X-Ray, diffraction pattern, hexagonal structure, lattice parameters and bisection subroutine



PENDAHULUAN

Media penyimpanan data secara magnetic pada saat ini terus mengalami improvisasi terutama dalam kapasitas penyimpanan data. Salah satu upaya peningkatan kapasitas dari media ini diantaranya penggunaan bahan dasar cobalt, (Coey, 2010 dan Cullity, 2009) dalam bentuk lapisan tipis. Penggunaan cobalt sebagai bahan dasar media penyimpan data ini disebabkan karna sifat magnetic dari campuran cobalt dengan bahan non magnetic seperti samarium dalam bentuk lapisan ultra tipis dengan ketebalan beberapa nanometer memiliki sifat magnetic yang berbeda dibandingkan dengan material yang sama tetapi dalam bentuk bulk. Sebagai akibat dari ini maka sifat magnetic dari lapisan tipis ini sangat sensitive terhadap struktur dan mikrostrukturnya. Struktur dari lapisan tipis ini dapat menampilkan dua sifat penting seperti sifat extrinsic dan intrinsic. Sifat extrinsic dari lapisan tipis adalah seperti magnetocrystalline anisotropy terinduksi dan coercivity sedangkan sifat instrinsiknya adalah seperti magnetisasi.

Satu aplikasi penting dari lapisan tipis ini, khususnya lapisan campuran yang material dasarnya seperti cobalt adalah sebagai media penyimpan data magnetik berkapasitas tinggi. Menurut Doerner, 2000 media penyimpan data magnetic longitudinal yang berkapasitas tinggi dengan noise yang kecil memerlukan material yang memiliki butiran magnetic yang kecil yaitu <10 nm

Struktur campuran (alloy) yang bahan dasarnya cobalt seperti SmCo, (Wang, 2007 dan Cui, 2010) Co_5Pr , Co_5Sm dan nanoflake (Shen, 2010, Cui, 2011 dan Knutson, 2011). dapat ditentukan berdasarkan pola difraksi baik itu pola difraksi sinar x ataupun difraksi elektron. Untuk pola difraksi sinar-x, dengan puncak-puncak pola difraksi tertentu, maka perhitungan terhadap jarak antar bidang dalam kristal dengan menggunakan hukum Bragg dapat dilakukan, kemudian untuk menentukan struktur dari material tersebut biasanya peneliti membandingkan hasilnya dengan data American Standard for Testing Material (ASTM) atau struktur data base untuk material. Alternatif lain untuk menentukan struktur dari kristal dapat dilakukan dengan membuat program komputer untuk melakukan perhitungan terhadap parameter kisi kristal secara khusus dan struktur kristal suatu material secara umum. Tujuan dari penelitian ini adalah melakukan perhitungan numeris melalui pembuatan program komputer untuk menentukan parameter kisi kristal berbasis hexagonal berdasarkan hasil difraksi sinar-X dengan menggunakan metode *bisection*.

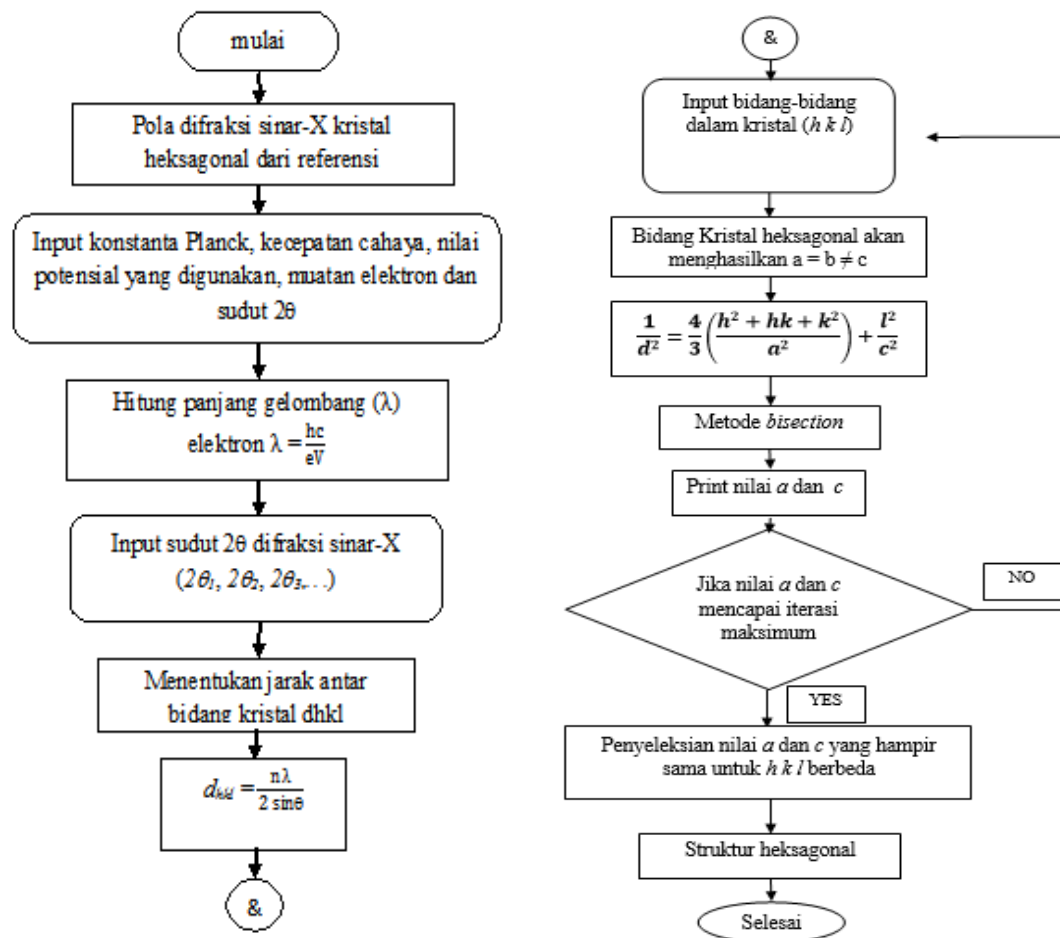
METODOLOGI PENELITIAN

Untuk menentukan nilai parameter kisi kristal berstruktur hexagonal, maka dibuat 2 buah program komputer yaitu program menu dan program utama dengan menggunakan software (MatLab) versi 8.3.0.532 (R2014a). Langkah pertama adalah pembuatan program menu yang merupakan program untuk menginput data yang diperlukan dalam perhitungan parameter kisi dari material dengan struktur hexagonal. Keluaran dari program utama ini berupa file yang namanya adalah *datafile*. Tahap berikutnya dilakukan pembuatan program utama. Program ini digunakan untuk melakukan perhitungan terhadap struktur kristal dengan memanfaatkan data yang telah diinputkan melalui datafile.

Dalam program utama dilakukan perhitungan terhadap bidang kristal dengan menggunakan pola difraksi sinar-X dari cobalt. Untuk difraksi sinar-x, sudut-sudut hamburan sinar x konstruktif dapat ditentukan dari pola difraksi yang dihasilkan oleh XRD, panjang gelombang sinar-x dapat ditentukan dari jenis tabung sinar-x yang digunakan serta tegangan operasi dari XRD tersebut. Dengan data ini komputer akan melakukan perhitungan terhadap jarak antar bidang-bidang dalam kristal dan selanjutnya melakukan perhitungan terhadap parameter parameter kisi a dan c dengan menginput seluruh indeks Millar yang mungkin muncul dalam kristal. Selanjutnya computer akan memilih nilai nilai a dan c yang sama atau



hampir sama untuk setiap indeks Miller yang berbeda. Gambar berikut ini menampilkan diagram alir perhitungan parameter kisi kristal berstruktur hexagonal.



Gambar 1. Diagram alir program komputer untuk untuk menentukan kisi kristal berstruktur hexagonal

HASIL DAN DISKUSI

Hasil penelitian ini berupa dua buah program komputer yang ditulis menggunakan *software* Matrix Laboratory (MatLab) versi 8.3.0.532 (R2014a). Dua program komputer tersebut adalah program menu dan program utama, program ini ditulis untuk menghitung parameter kisi kristal berstruktur hexagonal berdasarkan pola difraksi sinar-X dengan menggunakan metode *bisection*.

Program Menu

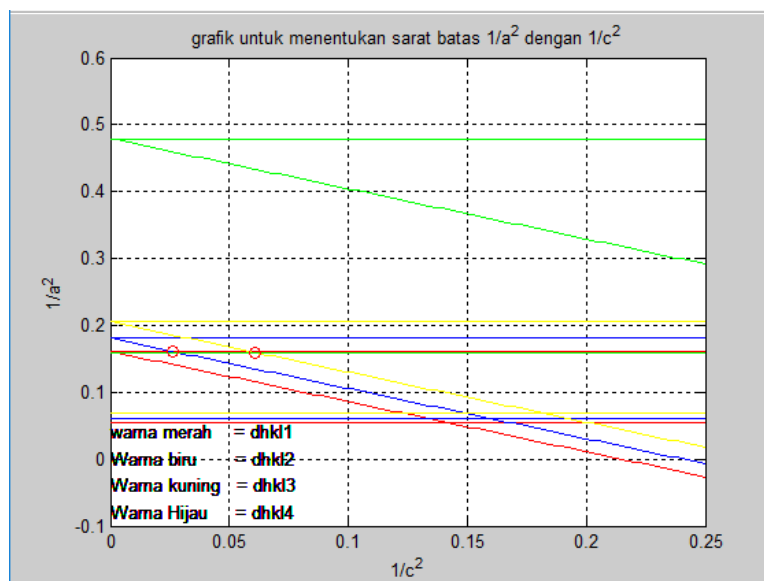
Program menu merupakan visualisasi yang dibuat dengan menggunakan perangkat lunak Matrix Laboratory (MatLab) versi 8.3.0.532 (R2014a), berfungsi untuk perekaman data yang diinput oleh pengguna (*user*). Data yang diinput dan direkam dalam program menu selanjutnya digunakan oleh program utama untuk menghitung parameter kisi kristal cobalt berstruktur hexagonal. Dalam program menu ini ditampilkan batas awal dan batas akhir parameter *c* untuk melakukan perhitungan menggunakan metode *subroutine bisection* (Giordano, 2012 and Landau, 2012). Tampilan dari program menu dapat dilihat pada Gambar 2 dibawah ini.



Gambar 2 Tampilan program menu perhitungan parameter kisi kristal cobalt berstruktur hexagonal

Program Utama

Perhitungan yang dilakukan oleh program utama menggunakan data yang telah di input pada program menu seperti ditunjukkan pada Gambar 2 diatas. Langkah pertama yang dilakukan oleh program utama adalah melakukan perhitungan terhadap panjang gelombang. Selanjutnya program utama akan melakukan perhitungan terhadap jarak antar bidang dalam kristal yang disimbolkan dengan d_{hkl} , program utama akhirnya akan melakukan perhitungan dan iterasi terhadap parameter kisi a dan c untuk kristal heksagonal yang dalam penelitian ini adalah cobalt. Dalam program utama, perhitungan yang dilakukan yaitu menghitung nilai panjang gelombang (λ) dan jarak antara bidang (d_{hkl}), kemudian dengan menggunakan program utama didapatkan nilai $h k l$ dari masing masing sudut difraksi (2θ) untuk elemen cobalt (Co) berdasarkan nilai parameter kisi a dan c yang hampir sama.



Gambar 3 Keluaran dari program utama untuk menentukan syarat batas parameter kisi a dan c .

Dalam melakukan perhitungan terhadap parameter kisi kristal a dan c seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2, maka langkah awal yang dilakukan oleh program utama adalah menentukan syarat batas dari nilai parameter kisi a dan c dengan menggunakan metode *subroutine graph*. Hasil perhitungan ini ditampilkan pada Gambar 3. Nilai batas parameter kisi a dan c ini merupakan batasan yang digunakan agar komputer dapat melakukan perhitungan terhadap parameter a dan c menggunakan metode biseksi (*bisection method*).

Keluaran dari program ini berupa titik potong antara dua nilai hkl yang berbeda, titik potong tersebut diambil dari garis merah dan biru yang bersinggungan dengan garis hijau dan kuning yang bersinggungan, kemudian pertemuan titik potong antara dua garis yang bersinggungan dengan nilai hkl yang berbeda tersebut akan menjadi syarat batas sebagai syarat utama dilakukannya perhitungan nilai a dan c kristal hexagonal dengan menggunakan metode biseksi. Keluaran dari program utama berupa nilai hkl yang mungkin untuk mendapatkan nilai parameter kisi a dan c yang hampir sama dan hasilnya ditampilkan pada Tabel 1 dibawah ini.

Tabel 1 Hasil seleksi nilai nilai bidang hkl untuk perhitungan parameter a dan c dari elemen cobalt untuk sudut difraksi $2\theta_1, 2\theta_2, 2\theta_3$ dan $2\theta_4$.

Nilai bidang hkl yang memungkinkan pada $2\theta_1 = 41.8^\circ$			Nilai bidang hkl yang memungkinkan pada $2\theta_2 = 44.4^\circ$		
h	k	l	h	K	l
0	0	0	0	0	0
0	0	1	0	0	1
0	0	2	0	0	2
0	1	0	0	1	0
0	1	1	0	1	1
0	1	2	0	1	2
0	2	0	0	2	0
0	2	1	0	2	1
0	2	2	0	2	2
1	0	0	1	0	0
1	0	1	1	0	1
1	0	2	1	0	2
1	1	0	1	1	0
1	1	1	1	1	1
1	1	2	1	1	2
1	2	0	1	2	0
1	2	1	1	2	1
1	2	2	1	2	2
2	0	0	2	0	0
2	0	1	2	0	1
2	0	2	2	0	2
2	1	0	2	1	0
2	1	1	2	1	1
2	1	2	2	1	2
2	2	0	2	2	0
2	2	1	2	2	1
2	2	2	2	2	2

hasil seleksi bidang hkl untuk nilai a dan c yang hampir sama			hasil seleksi bidang hkl untuk nilai a dan c yang hampir sama		
h	k	l	a	c	
0	1	0	2.4933	4.0441	
1	0	0	2.4933	4.0441	

hasil seleksi bidang hkl untuk nilai a dan c yang hampir sama			hasil seleksi bidang hkl untuk nilai a dan c yang hampir sama		
h	k	l	a	c	
0	0	2	2.5137	4.0773	



Nilai bidang h k l yang memungkinkan pada $2\theta_3 = 47.5^\circ$		
h	k	l
0	0	0
0	0	1
0	0	2
0	1	0
0	1	1
0	1	2
0	2	0
0	2	1
0	2	2
1	0	0
1	0	1
1	0	2
1	1	0
1	1	1
1	1	2
1	2	0
1	2	1
1	2	2
2	0	0
2	0	1
2	0	2
2	1	0
2	1	1
2	1	2
2	2	0
2	2	1
2	2	2

hasil seleksi bidang h k l untuk nilai a dan c yang hampir sama				
h	k	l	a	c
0	1	1	2.5035	4.0607
1	0	1	2.5035	4.0607

Nilai bidang h k l yang memungkinkan pada $2\theta_3 = 47.5^\circ$		
h	k	l
0	0	0
0	0	1
0	0	2
0	1	0
0	1	1
0	1	2
0	2	0
0	2	1
0	2	2
1	0	0
1	0	1
1	0	2
1	1	0
1	1	1
1	1	2
1	2	0
1	2	1
1	2	2
2	0	0
2	0	1
2	0	2
2	1	0
2	1	1
2	1	2
2	2	0
2	2	1
2	2	2

hasil seleksi bidang h k l untuk nilai a dan c yang hampir sama				
h	k	l	a	c
0	1	1	2.5035	4.0607
1	0	1	2.5035	4.0607

Hasil iterasi parameter kisi a dan c kristal berstruktur hexagonal berdasarkan pola difraksi sinar-X dengan menggunakan metode *subroutine bisection* adalah sebagai berikut: untuk parameter kisi hexagonal a pada iterasi ke 1,2,3 dan 99 adalah masing masing 2.4981, 2.5007, 2.5019 dan 2.5032. Sedangkan untuk parameter kisi hexagonal c pada iterasi ke 1,2,3 dan 52 adalah masing masing 5.1232, 4.5916, 4.3259 dan 4.0602. Hasil keluaran dari iterasi yang dilakukan oleh program utama dengan jumlah iterasi lebih dari 50 dan menghasilkan nilai parameter kisi a dan c masing masing adalah 2.5032 Å dan 4.0602 Å. Nilai yang diperoleh ini hampir sama dengan nilai yang terdapat dalam referensi sistem basis data (Smith, 2004).

KESIMPULAN

Dua buah program komputer menggunakan *software* Matrix Laboratory (MatLab) versi 8.3.0.532 (R2014a) untuk menentukan parameter kisi kristal hexagonal dan h k l dari elemen cobalt telah berhasil dibuat dan dijalankan (*run*). Hasil perhitungan parameter kisi hexagonal a dan c yang memiliki nilai hampir sama untuk h k l yang berbeda adalah a = 2.5032 Å dan c = 4.0602 Å dimana nilai parameter kisi a dan c yang diperoleh dengan menggunakan metode *suroutine bisection* sama dengan nilai rata-rata dari parameter kisi a dan c pada keempat indeks Miller (h k l). Perbandingan parameter kisi a dan c dengan nilai referensi menggunakan index reliabilitas yaitu a = 0.151 % dan c = 0.216% artinya nilai a dan c yang diperoleh memiliki nilai yang hampir sama dengan nilai referensi yaitu a = 2.5070 Å dan c = 4.0690 Å.



DAFTAR PUSTAKA

- J.M. D. Coey, 2010, *Magnetism and Magnetic Materials* Cambridge University Press, Cambridge.
- Cullity, B.D. and Graham, C.D. 2009, *Introduction to Magnetic Materials*. 2nd Edition. Hoboken: John Wiley & Sons.
- M.F. Doerner, K. Tang, T. Arnoldussen, H. Zeng, M.F. Toneyand, D. Weller, 2000, IEEE Trans. Magn., 36, 43.
- Y. Wang, Y. Li, C. Rong, and J. P. Liu, 2007, Nanotechnology 18, 465701.
- B. Z. Cui, A. M. Gabay, W. F. Li, M. Marinescu, J. F. Liu, and G. C. Hadjipanayis, 2010, J. Appl. Phys. 107, 09A721.
- Y. Shen, M. Q. Huang, A. K. Higgins, S. Liu, J. C. Horwath, and C. H. Chen, 2010, J. Appl. Phys. 107, 09 A 722.
- B. Z. Cui, W. F. Li, and G. C. Hadjipanayis, 2011, Acta Mater. 59(2), 563.
- S. J. Knutson, Y. Shen, J. C. Horwath, P. Barnes, and C. H. Chen, 2011, J. Appl. Phys. 109, 07A762.
- N.J. Giordano and H Nakanishi, 2012, *Computational Physics Using MATLAB*, Kevin Berwick West Lafayette, Indiana, USA.
- R.H. Landau, M. J. Paez, C. C. Bordeianu, 2012, *Computational Physics Problem Solving with Computers*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- Smith, W.F. 2004. *Foundation of Material Science and Engineering*. McGraw-Hill Higher Education: University of Central Florida.

