

PERHITUNGAN PARAMETER KISI KRISTAL BERSTRUKTUR HEXAGONAL BERDASARKAN POLA DIFRAKSI ELEKTRON DENGAN BANTUAN KOMPUTER

Erwin, Salomo, Defrianto, Mbantun Ginting dan M. Rasyid Ridho

Jurusan Fisika FMIPA Universitas Riau Kampus Bina Widya Tampan Pekanbaru 28293

Email : erwin_amiruddin@yahoo.com

ABSTRAK

Pola difraksi electron yang diperoleh melalui mikroskop electron untuk kristal berstruktur hexagonal seperti lapisan tipis cobalt sulit untuk dilakukan secara manual. Oleh karena itu, perlu dilakukan perhitungan terhadap parameter kisi cobalt dengan menggunakan komputer. Dalam penelitian ini, telah dibuat dua buah program komputer yang ditulis dengan menggunakan Matrix Laboratory (Matlab) versi R2008b. Program pertama disebut program menu yang digunakan untuk menulis data yang diperlukan dalam perhitungan. Program kedua disebut program utama yang dibuat untuk melakukan perhitungan terhadap parameter kisi a dan c dengan memanfaatkan data pada program menu. Data yang digunakan dalam penelitian ini adalah pola difraksi elektron cobalt dalam bentuk lapisan tipis dari transmission electron microscope (TEM). Jari-jari dari masing masing cincin pola difraksi cobalt diukur dengan menggunakan jangka sorong. Nilai ini diinputkan kedalam program menu. Program utama akan menghitung nilai dari jarak antar bidang (d_{hkl}) dalam kristal. Langkah berikutnya, program utama akan melakukan perhitungan terhadap nilai-nilai parameter kisi untuk semua kemungkinan bidang dari sistem kristal heksagonal dengan memanfaatkan subroutine bisection. Pada langkah akhir, program utama akan memilih untuk semua kemungkinan bidang bidang kristal dari sistem kristal heksagonal untuk mana nilai parameter kisi a dan c yang hampir sama. Hasil penelitian menunjukkan bahwa perhitungan parameter kisi a dan c untuk $h k l$ berbeda adalah $a=2.4998 \text{ \AA}$ dan $c=4.0545 \text{ \AA}$.

Kata kunci: parameter kisi, difraksi elektron, bidang kristal, hexagonal dan komputasi numeric

ABSTRACT

Electron diffraction pattern of crystal with the structure of hexagonal especially cobalt in the form of thin films is difficult to analyze manually. Therefore, it is necessary to utilize a computer to do the calculation. In this article, in order to do the calculation, then we have developed two computer programs using Matrix Laboratory (MatLab) version R2008b. The first program called menu program to store the input data that is required in the calculation of the lattice parameters (a and c). The second program called main program. This program was developed to perform calculations of the lattice parameters according to input data from menu. The data used in this research is electron diffraction pattern of cobalt which was obtained from transmission electron microscope (TEM). The radius of each ring of the diffraction pattern was measured using a vernier caliper. These value were input into the program menu. The main program will calculate the value of distance between the plane in the crystal (d_{hkl}). Next, the main program keep continue to

calculate the lattice parameters for all possible planes in the hexagonal crystal system using bisection subroutine. In the final step, main program will select for all possible planes in hexagonal crystal system that have the same value of the lattice parameters a and c . The results show that the a computer calculation of the lattice parameters a and c for different hkl is $a = 2,4998 \text{ \AA}$ and $c = 4,0545 \text{ \AA}$.

Keyword: *lattice parameters, electron diffraction, crystal plane, hexagonal and numerical computation*

PENDAHULUAN

Permintaan terhadap media penyimpan data secara magnetic berkapasitas tinggi terus meningkat pada hari ini. Banyak penelitian yang dilakukan dalam upaya peningkatan kapasitas dari media ini diantaranya penggunaan bahan dasar cobalt,^[1,2] dalam bentuk lapisan tipis. Penggunaan cobalt sebagai bahan dasar media penyimpan data ini dikarenakan sifat magnetic dari campuran cobalt 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. Pengaruh mikrostruktur (ukuran butiran) akan lebih dominan ketika ukuran butiran mendekati 5-100 nm. 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. Sifat extrinsic dari material khususnya magnetocrystalline anisotropy dapat dimodifikasi melalui variasi dimensi, komposisi, mikrostruktur dan metode pembuatannya.

Menurut Doerner *et al.*^[3] media penyimpan data magnetic longitudinal yang berkapasitas tinggi dengan noise yang kecil memerlukan material yang memiliki butiran magnetic yang kecil yaitu <10 nm dan memiliki anisotropy magnetocrystalline yang tinggi. Campuran cobalt dan samarium dengan komposisi tertentu katakanlah SmCo_5 memiliki energi anisotropy paling tinggi^[4] diantara seluruh material magnetik yaitu $1.1 \times 10^8 \text{ erg/cm}^3$. Tingginya nilai anisotropy ini dapat menghindari fluktuasi thermal magnetisasi yang cenderung untuk membuat magnetisasi dari bits perekam data menjadi tidak stabil.^[5] Banyak usaha yang telah dilakukan untuk dapat mengurangi ukuran partikel dari partikel magnetik yang bahan dasarnya adalah cobalt seperti nanopartikel SmCo_5 ,^[6,7] Co_5Pr , Co_5Sm dan nanoflake.^[8-10]

Struktur campuran (alloy) yang bahan dasarnya cobalt 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 struktur dari material khususnya parameter kisi kristal berbasis hexagonal berdasarkan hasil difraksi elektron.

METODE PENELITIAN

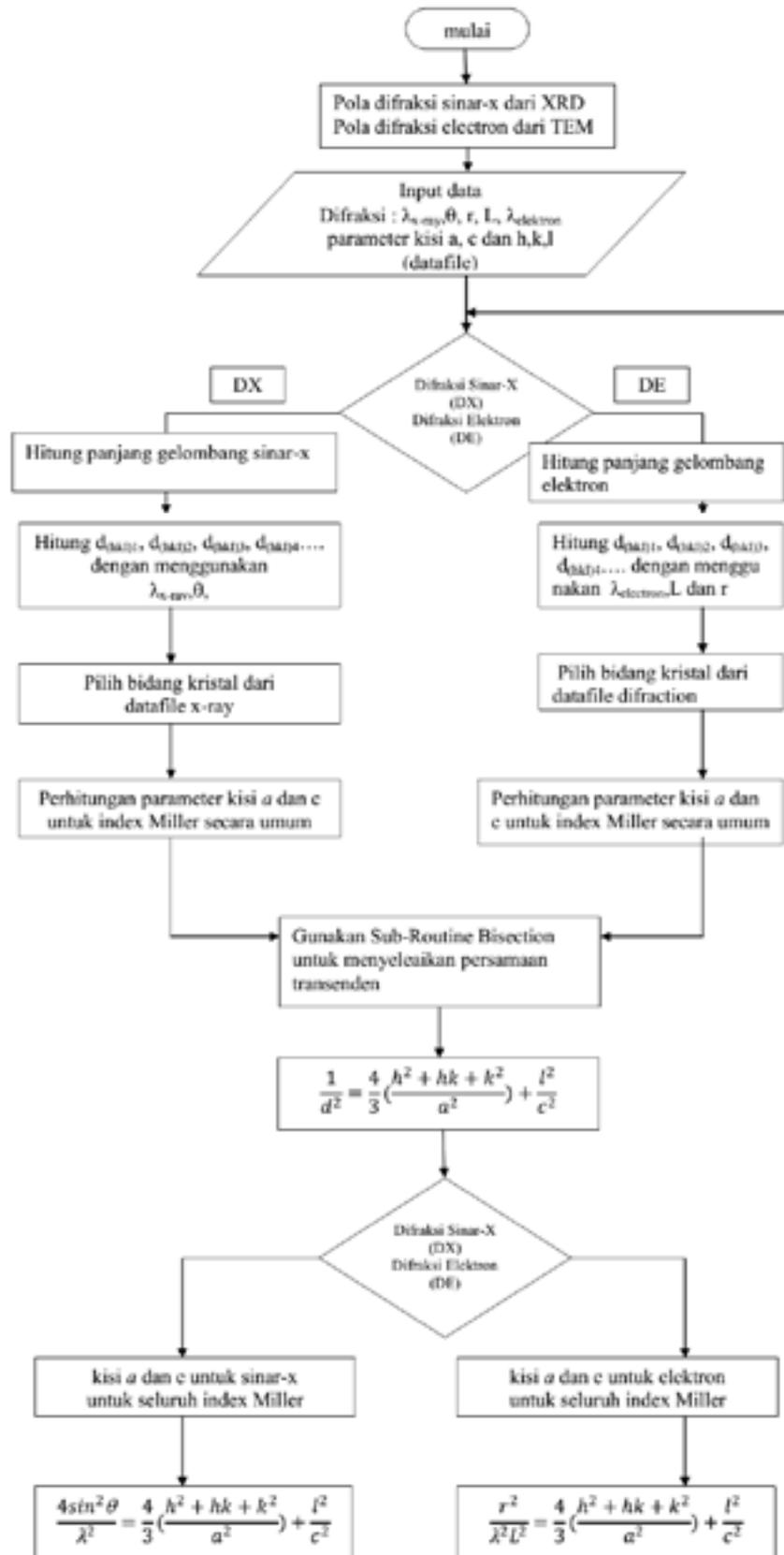
Rancangan penelitian yang akan dilakukan adalah berupa komputasi numerik melalui bantuan komputer. Pada tahap awal dilakukan pembuatan program

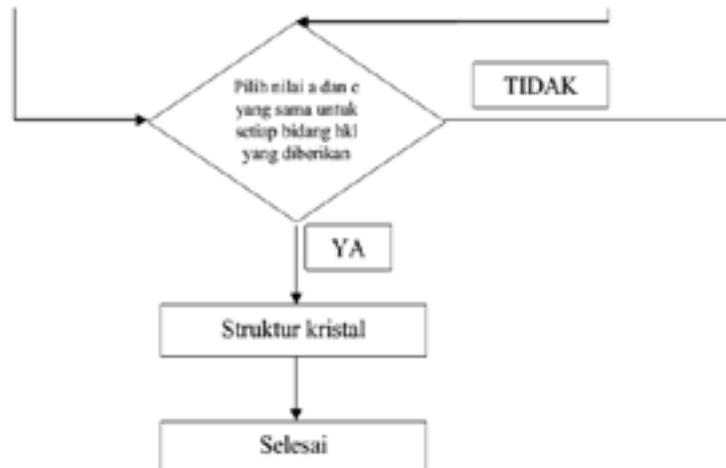
menu. Program ini merupakan program untuk menginput data yang diperlukan dalam perhitungan struktur dari material khususnya struktur hexagonal. Keluaran dari program utama ini berupa file yang namanya adalah *datafile*. Tahap berikutnya dilakukan pembuatan program utama. Program ini digunakan untuk melakukan perhitungan terhadap struktur kristal dengan memanfaatkan data yang telah diinputkan melalui *datafile*.

Dalam program utama tersebut dilakukan perhitungan terhadap bidang kristal baik melalui difraksi sinar-x maupun difraksi electron. 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 index Miller berdasarkan aturan seleksi (memberikan harga parameter parameter kisi a dan c yang sama untuk bidang yang berbeda). Dalam kasus difraksi electron, maka nilai r diukur langsung dari micrograph dan λL dapat diperoleh dengan mengkalibrasikan TEM dengan sampel standar (dalam kasus ini

adalah silicon) selanjutnya komputer akan melakukan perhitungan dengan cara yang sama dengan metode dalam difraksi sinar-

x. Berikut ini ditampilkan diagram alir dari penelitian ini.



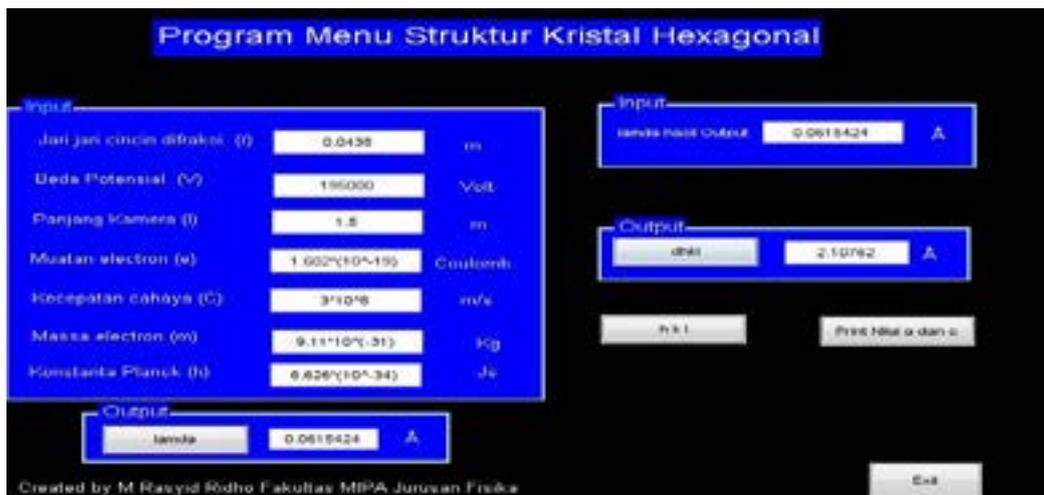


Gambar 1. Diagram alir program komputer untuk menentukan struktur kristal berbentuk hexagonal

PEMBAHASAN

Hasil dari penelitian ini berupa dua buah program komputer dan keluarannya terdiri dari program menu dan program utama. Program ini ditulis dengan menggunakan software Matrix Laboratory

(MATLAB) versi R2008. Program menu berfungsi untuk menulis data yang diinput dan nantinya diperlukan dalam perhitungan lanjutan. Tampilan dari program menu dapat dilihat pada Gambar 2 dibawah ini.



Gambar 2. Tampilan program menu untuk menentukan parameter kisi untuk kristal Heksagonal

Program utama yaitu program yang ditulis dengan menggunakan software MATLAB versi R2008b dan digunakan untuk melakukan perhitungan. Perhitungan pada program utama merupakan proses perhitungan dari data yang telah di input pada program menu. Ketika program utama dijalankan maka program utama akan melakukan perhitungan terhadap panjang gelombang elektron yang disimbulkan dengan *lamda*, yaitu

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0 eV}} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{eV}{2m_0 c^2}}} \quad (1)$$

dimana faktor kedua berasal dari factor koreksi relativitas,^[13] *h* adalah konstanta Planck, *e* adalah muatan electron dan *m₀* adalah masa diam dari electron. Dalam transmission electron microscope (TEM) maka panjang gelombang electron untuk *V=200kV* adalah sekitar 2.5×10^{-12} m dengan kecepatan hampir sama dengan kecepatan cahaya *c*^[14].

Bidang kristal dari material dapat ditentukan dengan mengindexkannya berdasarkan pola difraksi electron yang diperoleh dari pola SAD dalam TEM. Dengan menggunakan persamaan (6) diatas dan dengan mengambil nilai θ yang kecil seperti ditunjukkan pada gambar 3,

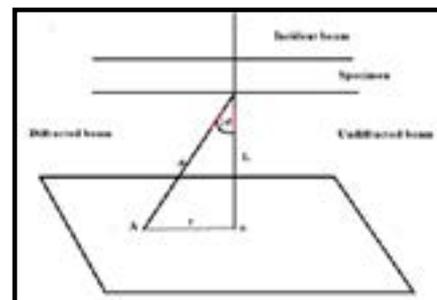
maka diperoleh hubungan bahwa

$$r = \frac{\lambda L}{d} \quad (2)$$

Jika *D* adalah diameter dari cincin difraksi pada pola difraksi maka persamaan 2 dapat ditulis menjadi^[16]

$$D = \frac{2\lambda L}{d} \quad (3)$$

dimana λ adalah panjang gelombang electron, *L* adalah panjang kamera (jarak efektif dari sampel ke layar TEM) dan *d* jarak antara bidang dalam kristal.



Gambar 3. Difraksi electron oleh sampel dalam TEM dari Referensi^[17]

Dalam kasus ini *r* dapat diukur langsung dari film (hasil TEM) dan λL dapat diperoleh dengan cara mengkalibrasikan TEM dengan sampel standar. Jarak antara bidang dalam kristal dapat juga ditentukan dengan membandingkan diameter cincin dari pola difraksi dari sampel dan pola difraksi standar seperti silicon, maka

$$\frac{d_1}{d_2} = \frac{D_1}{D_2}, \quad (4)$$

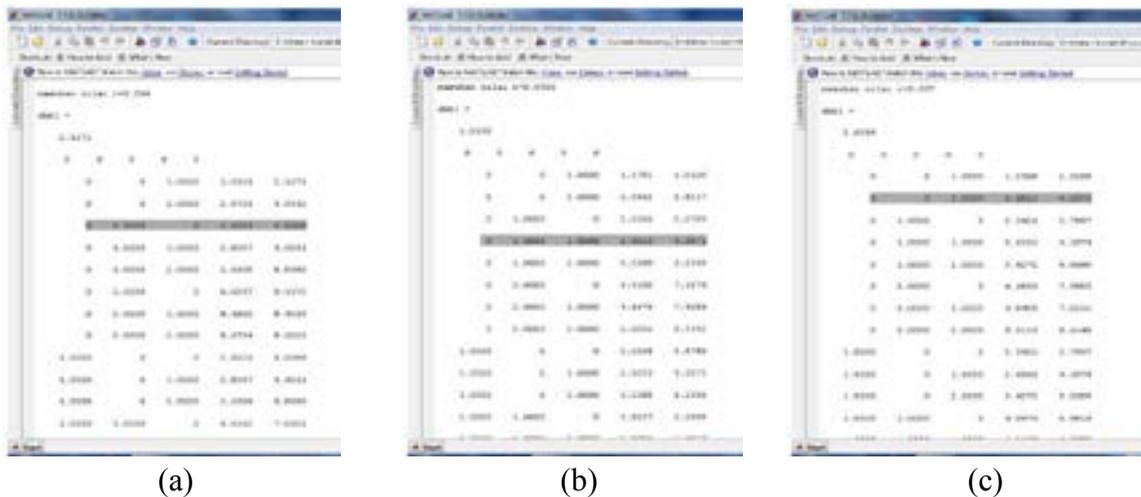
dimana *d₁* dan *D₁* adalah jarak antar bidang dan jarak antar titik dari sampel

berturut turut dalam hal sampel standar ini adalah silicon) dan d_2 and D_2 adalah jarak antar bidang dan diameter cincin berturut turut.

Hukum Bragg^[11] yang merupakan hubungan antara panjang gelombang, sudut difraksi dan jarak antara bidang dala kristal dapat digunakan untuk menentukan jarak antar bidang kisi (d) dari system hexagonal melalui hubungan^[12]

$$\frac{1}{d^2} = \frac{4}{3} \left(\frac{h^2+hk+k^2}{a^2} \right) + \frac{l^2}{c^2} \quad (5)$$

dimana a dan c adalah parameter kisi sel satuan dalam kristal dan h, k dan l adalah index Miller dari bidang Bragg. Gambar 4 merupakan hasil keluaran dari program utama dalam menentukan parameter kisi a, c dan $h k l$ dari elemen Cobalt. Dari hasil keluaran program ini jelas bahwa didapatkan tiga nilai parameter kisi a dan c yang hampir sama dari setiap jari-jari elemen Cobalt untuk $h k l$ yang berbeda. Hasil program utama ini ditampilkan pada gambar berikut ini.



Gambar 4 Tampilan dari keluaran program utama untuk mendapatkan parameter kisi $h k l$ dan a dan c dari elemen cobalt untuk (a) r_1 , (b) r_2 dan (c) r_3

Untuk menentukan nilai parameter a dan c dari sel kristal hexagonal digunakan metode bisection. Dari hubungan antara d_{hkl} terhadap a dan c maka jelas hubungan ini memiliki tiga parameter yang belum diketahui yaitu, hkl dan a serta c . Langkah awal dari program utama adalah melakukan perhitungan terhadap a dan c untuk lebih mudah maka

dipilih nilai a konstan sehingga sehingga nilai c akan dihitung dengan menggunakan subroutine dalam sebuah looping (iterasi). Setelah variabel c memenuhi criteria yang diberikan maka selanjutnya variabel c digunakan untuk menentukan nilai variabel a . Subroutine ini akan berhenti melakukan perhitungan setelah mendapatkan nilai yang mendekati

hasil referensi. Dengan menggunakan persamaan 2 dan persamaan 5 maka dapat ditentukan bidang-bidang (index Miller) dan nilai a dan c dalam kristal melalui aturan seleksi. Hasil perhitungan nilai parameter kisi a dan c kristal

heksagonal khususnya cobalt berdasarkan pola difraksi elektronnya menggunakan program komputer ditunjukkan pada Gambar 4. Hasil perhitungan jarak antar bidang kristal untuk tiga cincin difraksi ditampilkan pada tabel 1 dibawah ini.

Tabel 1. Keluaran (output) dari program utama dalam menghitung nilai jarak antar bidang kristal (d_{hkl}) untuk setiap jari-jari pola difraksi Cobalt.

No	Jari-jari cincin difraksi (m)	Lamda (λ) (Å)	Jarak antar bidang kristal (d_{hkl}) (Å)
1	0.0440	0.06360	2.1671
2	0.0470	0.06360	2.0288
3	0.0499	0.06360	1.9109

Dari Tabel 1 dapat dilihat bahwa hasil jarak antar bidang bergantung terhadap jari-jari pola difraksi Cobalt, sehingga didapatkan hubungan antar jari-jari (r) dan jarak antar bidang (d_{hkl}). Semakin besar jari-jari maka jarak antar bidang semakin kecil. Selanjutnya

keluaran dari program computer untuk ketiga cincin difraksi ini, maka komputer selanjutnya akan menyeleksi nilai parameter kisi a dan c yang hampir sama untuk bidang $h k l$ berbeda seperti ditampilkan pada Tabel 2 dibawah ini.

Tabel 2. Keluaran (output) program utama untuk perhitungan parameter a , c dan $h k l$.

No	a (Å)	c (Å)	Bidang $h k l$
1	2,5024	4,0588	0 1 0
2	2,5016	4,0576	0 0 2
3	2,5013	4,0571	0 1 1

Hasil perhitungan parameter kisi a dan c yang didapatkan dengan menggunakan program komputer nilainya hampir sama dengan nilai literatur, yaitu

untuk struktur heksagonal (Co) nilai a dan c adalah 2,5070 Å dan 4,0690 Å (**Smith, 2004**)

KESIMPULAN

Dari penelitian ini dapat ditulis beberapa kesimpulan yaitu sebagai berikut:

1. Dua buah program komputer ditulis dengan menggunakan software MatLab versi R2008b untuk menentukan parameter kisi dan bidang–bidang hkl dari elemen dengan struktur hexagonal seperti cobalt telah berhasil dibuat dan telah dijalankan (Run) dengan baik.
2. Program menu telah dibuat untuk menyimpan data input berupa parameter parameter seperti masa electron, muatan electron, tegangan operasional dari TEM, kecepatan cahaya, dan konstanta Planck dimana data ini diperlukan dalam proses perhitungan terhadap parameter kisi a dan c
3. Hasil perhitungan parameter kisi a dan c melalui program utama untuk hkl yang berbeda adalah $a = 2,5018 \text{ \AA}$ dan $c = 4,0578 \text{ \AA}$. Nilai ini dihitung oleh komputer melalui program utama dengan menggunakan subroutine bisection. Hasil yang diperleh selanjutnya dibandingkan dengan nilai referensi yaitu $a = 2.5070 \text{ \AA}$ dan $c = 4.0690 \text{ \AA}$. Nilai ini hampir bersesuaian.

DAFTAR PUSTAKA

- [1]J.M. D. Coey, 2010, *Magnetism and Magnetic Materials* Cambridge University Press, Cambridge.
- [2]Cullity, B.D. and Graham, C.D. 2009, *Introduction to Magnetic Materials*. 2nd Edition. Hoboken : John Wiley & Sons.
- [3]M.F. Doerner, K. Tang, T. Arnoldussen, H. Zeng, M.F. Toneyand, D. Weller, 2000,IEEE Trans. Magn., **36**.
- [4]D. Weller, A. Moser, L. Folks, M. Best, W. Lee, M. Toney, M. Schwickert,J. Thiele, and M. Doerner, 2000. IEEE Trans. Magn.36,10
- [5]S.H. Charap, P.-L. Lu, Y. He, 1997. IEEE Trans. Magn., **33**, 978,
- [6]Y. Wang, Y. Li, C. Rong, and J. P. Liu, 2007.Nanotechnology 18, 465701
- [7]B. Z. Cui, A. M. Gabay, W. F. Li, M. Marinescu, J. F. Liu, and G. C. Hadjipanayis,2010 .J. Appl. Phys. 107, 09A721
- [8]Y. Shen, M. Q. Huang, A. K. Higgins, S. Liu, J. C. Horwath, and C. H. Chen, J.Appl. Phys. 107, 09A722 (2010).
- [9]B. Z. Cui, W. F. Li, and G. C. Hadjipanayis, 2011 Acta Mater. 59(2), 563.
- [10]S. J. Knutson, Y. Shen, J. C. Horwath, P. Barnes, and C. H Chen, (2011). J. Appl.Phys. 109, 07A762
- [11]Gould, H. 1996, *An Introdution to Computer Simulation Method*, Addison Wesley Publishing Company, NewYork,.
- [12]Cullity, B.D. and Stock, S.R. 2001. *Elements of X-Ray Diffraction*. Upper Saddle River, NJ : Prentice Hall,
- [13]B.D. Cullity, 1972.,*Introduction to Magnetic Materials*', Addition-Wesley Publishing Company,
- [14]Feynman, Richard P. 1963. *The Feynman Lectures on Physics, Vol. I*. Addison-Wesley. pp. 16-10, 17-5.
- [15]Champness, P. E. 2001. *Electron Diffraction in the Transmission*

- Electron Microscope*. Garland Science.
ISBN 1-85996-147-
9.ISSN 9781859961476.
- [16]Le Pole J.B, 1947, Philips Tech.
Rundsch, **9**, 93,
- [17] P. Hirsch, '*Electron Microscopy of
Thin Crystals*', Krieger Publishing,
1977.
- [18]Goodhew, P.J., Humphreys, J. dan
Beanland, R. 2004. Mikroskopi dan
Analisis dengan Elektron.
Terjemahan Rahmat Saptono.
Penerbit Departemen Metalurgi dan
Material Universitas Indonesia,
Jakarta.
- [19]Smith, W.F. 2004. *Foundation of
Material Science and Engineering*.
McGraw-Hill Higher Education:
University of Central Florida.