

## BAB 2

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Sifat Dasar Neutron

Neutron yang dihasilkan dari reaktor nuklir biasanya merupakan neutron berenergi rendah. Secara umum, neutron energi rendah dapat diklasifikasikan dalam tiga jenis yaitu neutron dingin (*cold neutron*), neutron thermal (*thermal neutron*), dan neutron panas (*hot neutron*) (G.L. Squires, 1978). Selain itu, ada pula yang mengklasifikasikannya ke dalam empat jenis yaitu neutron dingin (*cold neutron*), neutron thermal (*thermal neutron*), neutron panas (*hot neutron*), dan neutron epithermal (*epithermal neutron*) (S.W. Lovesey, 1987). Perbedaan antara ketiga jenis neutron tersebut berdasarkan *range* energi, temperatur, serta panjang gelombang. Hal tersebut dapat dilihat dalam tabel 2.1.

Tabel 2.1. Perbedaan ketiga jenis neutron

Sumber	Energi(Mev)	Temperatur(K)	Panjang Gelombang( $10^{-10}$ m)
Cold	0.1-100	1-120	30 - 3
Thermal	5-100	60-1000	4 - 1
Hot	100-500	1000-6000	1 - 0.4

Sumber: G.L. Squires 1978, 5

Hamburan neutron merupakan salah satu teknik yang baik untuk mengamati struktur dan dinamika suatu material (T. Chatterji, 2006). Kegunaan teknik hamburan ini karena adanya sifat-sifat dasar yang dimiliki neutron sebagai salah satu partikel penyusun inti atom seperti dijelaskan dalam tabel 2.2.

Besarnya massa neutron yaitu  $1,674928 \times 10^{-27}$  kg. Hal ini menyebabkan panjang gelombang de Broglie dari neutron thermal bernilai sekitar  $1,8 \text{ \AA}$ , memiliki orde yang sama dengan jarak antar atom dalam suatu material, sehingga memungkinkan terjadinya efek interferensi. Hamburan neutron dalam hal ini dapat memberikan informasi mengenai struktur material.

Tabel 2.2. Sifat dasar neutron

Sifat	Nilai
Massa	$1.674928 \times 10^{-27}$ kg
Muatan	0
Spin	$\frac{1}{2}$
Momen Magnet	$-1.9130427 \mu\text{N}$

Sumber: Tapan Chatterji 2007, 3

Energi neutron thermal memiliki orde yang sama dengan kebanyakan energi eksitasi atom pada material terkondensasi. Hamburan tidak elastik antara neutron dengan suatu material akan memberikan informasi mengenai energi eksitasi atom dalam suatu material.

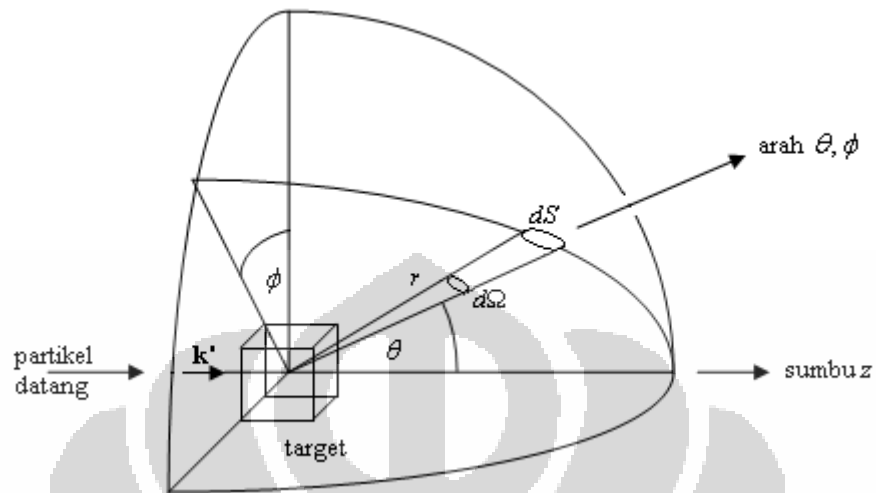
Neutron merupakan partikel yang tidak memiliki muatan listrik menyebabkan neutron dapat menembus suatu material cukup dalam tanpa mengalami interaksi Coulomb. Sehingga neutron dapat berada cukup dekat dengan inti atom sebelum akhirnya terhambur oleh gaya inti.

Neutron memiliki momen magnetik sehingga neutron dapat berinteraksi dengan elektron tidak berpasangan pada suatu atom magnetik. Hamburan neutron inelastik dalam hal ini dapat memberikan informasi mengenai energi eksitasi magnetik. Selain itu, hamburan elastik dari suatu material magnetik memberikan informasi mengenai struktur magnetik dari material tersebut.

## 2.2 Teori Hamburan Neutron

### 2.2.1 Definisi Penampang Lintang Hamburan

Untuk dapat mendiskripsikan penampang lintang hamburan, maka dapat dimisalkan suatu kasus seperti ini. Anggap terdapat suatu berkas neutron thermal datang menumbuk suatu target (gambar 2.1) dan menyebabkan neutron terhambur. Target dalam hal ini merupakan kumpulan atom, seperti kristal, amorph, cairan ataupun gas. Target ini biasa disebut juga sebagai sistem hamburan. Hasil hamburan dalam kasus seperti ini biasa dinyatakan dalam suatu besaran yang disebut penampang lintang (*cross-section*).



Gambar 2.1. Geometri Eksperimen Hamburan<sup>7</sup>  
Sumber: Squires 1978, 5

Anggap kita memiliki detektor (pencacah neutron) untuk menghitung jumlah neutron yang terhambur pada suatu arah sebagai fungsi energi. Dalam hal ini, detektor ditempatkan cukup jauh dari sistem hamburan, sehingga sudut ruang detektor dari sistem penghambur,  $d\Omega$  adalah cukup kecil. Misalkan arah neutron terhambur dinyatakan dalam  $\theta$  dan  $\phi$ , maka penampang lintang diferensial sebagian (*partial differential cross-section*) didefinisikan sebagai

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} = \text{(jumlah neutron yang terhambur per - detik dalam suatu sudut ruang } d\Omega \text{ pada arah } \theta, \phi \text{ dengan energi akhir antara } E' + dE) / \Phi d\Omega dE' \quad (2.1)$$

dengan  $\Phi$  merupakan flux dari neutron datang, yang dinyatakan sebagai jumlah neutron yang menumbuk suatu luasan/area per detik. Namun terdapat sumber lain yang menyebut penampang lintang ini sebagai penampang lintang diferensial ganda (*double differential cross section*)<sup>13</sup>.

Jika kita hanya ingin mengetahui jumlah neutron terhambur dalam suatu sudut ruang  $d\Omega$  pada arah  $\theta$  dan  $\phi$  tanpa menghitungnya sebagai fungsi energi maka penampang lintang yang berhubungan dengan kasus seperti ini disebut penampang lintang diferensial (*differential cross-section*), dan dinyatakan dengan

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \text{(jumlah neutron terhambur per detik dalam suatu sudut ruang } d\Omega \text{ pada arah } \theta, \phi) / \Phi d\Omega \quad (2.2)$$

Penampang lintang hamburan total dapat dinyatakan dengan

$$\sigma_{\text{tot}} = (\text{jumlah total partikel terhambur per satuan waktu})/\Phi \quad (2.3)$$

Jumlah total yang dimaksud merupakan jumlah neutron terhambur ke segala arah.

Dari ketiga definisi penampang lintang hamburan di atas, maka ketiganya dapat dihubungkan dengan persamaan sebagai berikut

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \int_0^{\infty} \left( \frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'} \right) dE', \quad (2.4)$$

$$\sigma_{\text{tot}} = \int_{\text{semua arah}} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega \quad (2.5)$$

Jika hamburan yang terjadi simetrik, dalam arti  $d\sigma/d\Omega$  hanya bergantung pada  $\theta$  dan tidak pada  $\phi$ , maka persamaan (2.5) menjadi

$$\sigma_{\text{tot}} = \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} 2\pi \sin \theta d\theta. \quad (2.6)$$

Penampang lintang yang diperoleh dalam eksperimen biasa dinyatakan dalam satuan per atom atau per molekul, sehingga persamaan penampang lintang di atas perlu dibagi oleh jumlah atom atau molekul

### 2.2.2 Hamburan Neutron Oleh Inti Atom

Untuk dapat menjelaskan penampang lintang hamburan secara teoritis, pertama-tama dapat diambil suatu kasus sederhana, yaitu hamburan neutron oleh satu inti atom yang berada pada posisi tetap. Perlu diperhatikan bahwa pada kasus ini diasumsikan inti atom berada pada posisi yang tetap, neutron tidak dapat memberikan energi kepada inti, sehingga besar nilai vektor gelombang neutron datang dan neutron terhambur adalah sama. Dengan kata lain hamburan dalam kasus ini adalah elastik, energi neutron serta nilai  $k$  adalah tetap. Setelah menjelaskan kasus yang paling sederhana tersebut, akan dibahas kasus yang lebih umum, yaitu kasus hamburan oleh

sekumpulan partikel. Pada kasus ini digunakan dua pendekatan untuk memperoleh rumusan teoritis dari penampang lintang hamburannya, yaitu:

1) Pendekatan statik (*static approximation*).

Pada pendekatan statik, dianggap perubahan energi neutron yang terjadi dapat diabaikan ( $k' \approx k$ ,  $k'$  dan  $k$  adalah besar vektor gelombang neutron setelah dan sebelum hamburan), sehingga hamburan yang terjadi seolah-olah elastik. Namun demikian, pendekatan ini tidaklah sama persis dengan hamburan elastik. Pada hamburan elastik, keadaan sistem hamburan sebelum dan setelah tumbukan adalah sama, sedangkan pada pendekatan statik, keadaan sistem hamburan sebelum dan setelah tumbukan dapat berbeda, asalkan perubahan energi neutron yang terjadi masih dapat diabaikan.

2) Hamburan hanya bergantung pada besar perubahan vektor gelombang neutron.

Artinya, hasil hamburan tidak bergantung pada orientasi sampel. Pendekatan ini berlaku untuk sistem hamburan yang isotropik, contohnya adalah bubuk kristalin (*crystalline powder*), zat cair, dan material amorph.

Pada bagian 2.1 telah disebutkan bahwa neutron dapat menembus suatu material cukup dalam, sebelum akhirnya terhambur oleh gaya inti. Gaya inti yang dapat menyebabkan terjadinya hamburan memiliki pengaruh pada jarak sekitar  $10^{-14}$  -  $10^{-15}$  m. Sementara panjang gelombang neutron thermal memiliki orde  $10^{-10}$  m, jauh lebih besar dibandingkan *range* pengaruh gaya inti tersebut. Dalam kasus seperti ini, berdasarkan teori difraksi, yaitu jika suatu gelombang dihamburkan oleh suatu objek yang jauh lebih kecil dibandingkan panjang gelombangnya, maka gelombang tersebut akan terhambur secara simetri bola.

Anggap geometri kasus tersebut dapat dideskripsikan seperti gambar 2.1, inti berada pada pusat koordinat, serta arah vektor gelombang neutron  $k$  datang berada pada sumbu polar. Fungsi gelombang neutron datang dapat dinyatakan dengan persamaan

$$\psi_{\text{inc}} = \exp(ikz). \quad (2.7)$$

Seperti telah disebutkan sebelumnya bahwa hamburan pada kasus ini bersifat simetri bola, maka fungsi gelombang neutron terhambur pada suatu titik  $r$  dapat dinyatakan dengan persamaan

$$\psi_{\text{sc}} = -\frac{b}{r} \exp(ikr) \quad (2.8)$$

dengan  $b$  adalah suatu konstanta yang tidak bergantung pada  $\theta$ ,  $\phi$ . Tanda negatif pada persamaan di atas digunakan agar nilai  $b$  positif untuk potensial yang menghasilkan gaya tolak.

Besaran  $b$  pada  $\psi_{\text{sc}}$  biasa disebut panjang hamburan (*scattering length*). Nilai panjang hamburan  $b$  berbeda untuk setiap jenis atom yang berbeda. Berdasarkan panjang hamburannya, terdapat dua jenis atom, yaitu atom dengan panjang hamburan berupa bilangan kompleks, dan atom dengan panjang hamburan berupa bilangan riil. Untuk atom-atom dengan panjang hamburan kompleks, nilai panjang hamburannya bergantung pada besar energi neutron datang. Bagian imajiner dari panjang hamburan terkait dengan penyerapan energi neutron akibat eksitasi. Contoh unsur dengan panjang hamburan kompleks adalah  $^{103}\text{Rh}$ ,  $^{113}\text{Cd}$ ,  $^{157}\text{Gd}$ , dan  $^{176}\text{Lu}$ . Sebagian besar unsur yang dikenal sampai saat ini memiliki panjang hamburan riil (atau hampir riil, dimana bagian imajinerinya sangat kecil dan dapat diabaikan). Untuk unsur jenis ini, panjang hamburannya tidak bergantung pada energi neutron yang datang.

Penampang lintang  $d\sigma/d\Omega$  untuk kasus hamburan oleh satu inti atom pada posisi tetap dapat diturunkan dari persamaan (2.7) dan (2.8). Jika  $v$  merupakan kecepatan neutron (bernilai sama untuk neutron datang maupun neutron terhambur), maka jumlah neutron yang melewati suatu luasan  $dS$  per detik adalah (lihat gambar 2.1)

$$v dS |\psi_{\text{sc}}|^2 = v dS \frac{b^2}{r^2} = v b^2 d\Omega \quad (2.8)$$

Fluks neutron datang dapat dinyatakan dengan

$$\Phi = v|\psi_{inc}|^2 = v \quad (2.9)$$

Dari definisi penampang lintang, maka diperoleh persamaan untuk kasus hamburan neutron tersebut sebagai berikut

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{vb^2 d\Omega}{\Phi d\Omega} = b^2 \quad (2.10)$$

serta

$$\sigma_{tot} = 4\pi b^2 \quad (2.11)$$

Berikutnya akan dibahas kasus yang lebih kompleks, yaitu kasus hamburan neutron oleh suatu sistem/ sekumpulan partikel. Kasus ini disederhanakan dengan mengabaikan spin dari neutron, sehingga keadaan neutron hanya dipengaruhi oleh momentumnya. Dengan kata lain hanya dipengaruhi oleh vektor gelombangnya saja.

Anggap terdapat neutron dengan vektor gelombang  $\mathbf{k}$  datang menuju sistem hamburan dengan keadaan yang ditandai dengan index  $\lambda$ . Fungsi gelombang neutron dapat dinyatakan dengan  $\psi_{\mathbf{k}}$  serta fungsi gelombang sistem hamburan dengan  $\chi_{\lambda}$ . Anggap pula bahwa neutron berinteraksi dengan sistem hamburan melalui suatu potensial  $V$ , kemudian terhambur. Sehingga vektor gelombang neutron akhir adalah  $\mathbf{k}'$  dan keadaan akhir sistem hamburan adalah  $\lambda'$ .

Pusat koordinat yang digunakan berada pada sembarang titik dalam sistem hamburan. Jika dalam sistem hamburan terdapat  $N$  jumlah atom, maka vektor posisi inti atom ke- $j$  dapat dinotasikan dengan  $\mathbf{R}_j$  ( $j = 1, \dots, N$ ), sedangkan vektor posisi neutron dapat dinotasikan dengan  $\mathbf{r}$ .

Penampang lintang hamburan diferensial ( $d\sigma/d\Omega$ ) <sub>$\lambda \rightarrow \lambda'$</sub>  dapat mewakili seluruh proses hamburan yang mengubah sistem hamburan dari  $\lambda$  ke  $\lambda'$ , dan vektor gelombang neutron dari  $\mathbf{k}$  ke  $\mathbf{k}'$ . Penjumlahan dilakukan untuk semua nilai  $\mathbf{k}'$  di dalam sudut ruang  $d\Omega$  pada arah  $\mathbf{n}$  dimana nilai  $\mathbf{k}$ ,  $\lambda$ , dan  $\lambda'$  diambil konstan. Dari definisi penampang lintang hamburan diferensial pada (2.2), maka diperoleh suatu persamaan

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} = \frac{1}{\Phi} \frac{1}{d\Omega} \sum_{k'} W_{k, \lambda \rightarrow k', \lambda'} \quad (2.12)$$

dengan  $W_{k, \lambda \rightarrow k', \lambda'}$  adalah jumlah transisi dari keadaan  $k, \lambda$  ke keadaan  $k', \lambda'$  per detik, dan  $\Phi$  adalah fluks neutron datang.

Pengerjaan suku kiri persamaan (2.12) menggunakan persamaan yang cukup terkenal dalam mekanika kuantum, yaitu aturan emas Fermi (*Fermi's golden rule*) yang dinyatakan dengan persamaan

$$\sum_{k'} W_{k, \lambda \rightarrow k', \lambda'} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho_{k'} \left| \langle k' \lambda' | \mathbf{V} | k \lambda \rangle \right|^2 \quad (2.13)$$

dimana  $\rho_{k'}$  adalah banyaknya keadaan momentum dalam sudut ruang  $d\Omega$  per satuan interval energi untuk neutron pada keadaan  $k'$ . Elemen matrix dinyatakan secara eksplisit dengan

$$\langle k' \lambda' | \mathbf{V} | k \lambda \rangle = \int \psi_{k'}^* \chi_{\lambda'}^* V \psi_k \chi_{\lambda} d\mathbf{R} dr \quad (2.14)$$

serta

$$d\mathbf{R} = d\mathbf{R}_1 d\mathbf{R}_2 \dots d\mathbf{R}_N, \quad (2.15)$$

$d\mathbf{R}_i$  merupakan elemen volume untuk inti atom ke- $j$  dan  $dr$  merupakan elemen volume neutron. Integral dikerjakan untuk masing-masing variabel untuk semua ruang.

Perlu diperhatikan bahwa suku pada sisi kiri persamaan (2.13) dijumlahkan untuk semua nilai  $k'$  dalam  $d\Omega$ , namun pada sisi kanan persamaan hanya dimasukkan satu nilai  $k'$ . Dalam penurunan aturan emas Fermi, penjumlahan dikerjakan untuk semua nilai  $|k'|$ . Dari penurunan tersebut terlihat bahwa untuk nilai-nilai  $k, \lambda$ , dan  $\lambda'$  yang tetap, probabilitas transisi dari keadaan  $k, \lambda$  ke keadaan  $k', \lambda'$  dapat diabaikan kecuali untuk nilai-nilai  $|k'|$  yang berada dalam suatu interval kecil tertentu. Pusat dari interval ini adalah nilai  $|k'|$  yang memenuhi kekekalan energi dari neutron dan sistem hamburan, nilai  $k'$  inilah yang dimasukkan ke sisi kanan persamaan (2.13).

Untuk penurunan lebih lanjut, digunakan metode yang umum digunakan dalam mekanika kuantum, yaitu normalisasi kotak (*box normalisation*), dengan



menganggap neutron dan sistem hamburan berada dalam suatu kotak yang besar. Metode ini memungkinkan kita untuk menghitung nilai  $\rho_{\mathbf{k}}$ , serta konstanta normalisasi fungsi gelombang neutron. Keadaan neutron yang diperbolehkan hanya keadaan dimana fungsi gelombang neutron periodik di dalam kotak normalisasi tersebut. Vektor gelombang dari keadaan-keadaan tersebut akan membentuk kisi pada ruang  $\mathbf{k}$  (kisi balik). Volume unit sel dari kisi tersebut dapat dinyatakan dengan

$$v_k = \frac{(2\pi)^3}{Y}, \quad (2.16)$$

dengan  $Y$  merupakan volume kotak normalisasi. Energi akhir neutron adalah

$$E' = \frac{\hbar^2}{2m} k'^2 \quad (2.17)$$

serta

$$dE' = \frac{\hbar^2}{2m} k' dk' \quad (2.18)$$

Dengan mendefinisikan  $\rho_{\mathbf{k}} \cdot dE'$  sebagai banyak keadaan dalam  $d\Omega$  dengan energi antara  $E'$  dan  $E'+dE'$ , yang merupakan jumlah titik vektor gelombang pada elemen volume  $k'^2 dk' d\Omega$  (gambar 2.3), maka

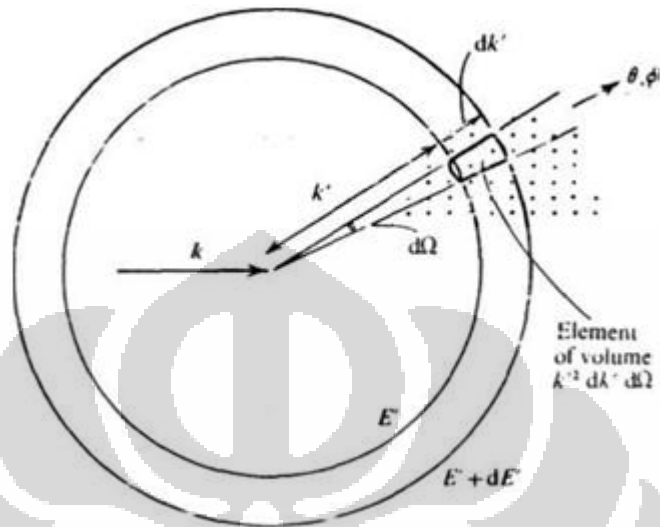
$$\rho_{\mathbf{k}} \cdot dE' = \frac{1}{v_k} k'^2 dk' d\Omega. \quad (2.19)$$

Dengan menggabungkan persamaan (2.16) sampai (2.19) maka diperoleh

$$\rho_{\mathbf{k}} = \frac{Y}{(2\pi)^3} k' \frac{m}{\hbar^2} d\Omega \quad (2.20)$$

Fungsi gelombang neutron  $\psi_{\mathbf{k}}$  merupakan gelombang berbentuk bidang dan dapat diwakili dengan  $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ . Dengan menggunakan metode normalisasi kotak dapat diperoleh bahwa terdapat satu neutron dalam kotak dengan volume  $Y$  tersebut, maka kerapatan neutron dalam kotak adalah  $1/Y$ , sehingga fungsi gelombang neutron beserta konstanta normalisasinya dapat dinyatakan dengan

$$\psi_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{Y}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (2.21)$$



Gambar 2.2 Perhitungan  $\rho_k$ .  
Titik-titik pada gambar mewakili nilai  $k'$  yang diperbolehkan dalam kotak normalisasi  
Sumber: Squires 1978, 11

Fluks neutron datang merupakan hasil kali antara kerapatan neutron dengan kecepataannya, yaitu

$$\Phi = \frac{1}{Y} \frac{\hbar}{m} k \quad (2.22)$$

Dengan menggabungkan persamaan (2.13), (2.20), (2.22) ke dalam persamaan (2.12), maka diperoleh persamaan untuk menghitung penampang lintang diferensial, yaitu

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} = \frac{k'}{k} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \langle \mathbf{k}' \lambda' | V | \mathbf{k} \lambda \rangle \right|^2. \quad (2.23)$$

Dengan melakukan pendekatan statik,  $k \approx k'$  sehingga  $\frac{k'}{k} \approx 1$ , maka persamaan (2.23)

dapat ditulis

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^2 \left| \langle \mathbf{k}' \lambda' | V | \mathbf{k} \lambda \rangle \right|^2. \quad (2.24)$$

dengan

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' \lambda' | V | \mathbf{k} \lambda \rangle &= \int \psi_{\mathbf{k}'}^* \chi_{\lambda'}^* V \psi_{\mathbf{k}} \chi_{\lambda} d\mathbf{R} d\mathbf{r} \\ &= \int \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \chi_{\lambda'}^* V \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \chi_{\lambda} d\mathbf{R} d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Untuk penurunan lebih lanjut, perlu diketahui bentuk potensial  $V$  dalam elemen matriks pada persamaan (2.25). Untuk memodelkan potensial tersebut, telah disebutkan pada bagian 2.2 bahwa neutron berinteraksi dengan inti atom melalui gaya inti. Gaya inti tersebut menimbulkan gangguan/ peturbasi pada neutron sehingga menyebabkan neutron terhambur. Oleh karena itu, potensial tersebut dapat dimodelkan dengan suatu potensial yang disebut *Fermi pseudopotential* yang dinyatakan dengan persamaan

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta(\mathbf{r}) \quad (2.26)$$

Namun karena elemen matrix harus dievaluasi dengan mengintegrasikan potensial terhadap  $\mathbf{r}$ , posisi neutron, maka potensial yang dialami neutron karena suatu inti atom yang berada pada posisi  $\mathbf{R}$  adalah

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\pi\hbar^2}{m} b\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \quad (2.27)$$

Delta Dirac dalam persamaan tersebut muncul karena potensial antara neutron dan inti atom bekerja pada jarak yang sangat dekat. Karena sistem hamburan adalah kumpulan atom, maka potensial interaksi antara neutron dengan sistem hamburan ditulis dalam persamaan

$$V(\mathbf{r}) = \sum_j V_j = \frac{2\pi\hbar^2}{m} \sum_j b_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \quad (2.28)$$

Dengan mensubstitusikan persamaan (2.28) ke dalam persamaan (2.24) dapat diperoleh

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} &= \left| \int \sum_j b_j \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \chi_{\lambda'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \chi_{\lambda} d\mathbf{R} d\mathbf{r} \right|^2 \\ &= \left| \sum_j b_j \langle \lambda' | \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_j) | \lambda \rangle \right|^2 \end{aligned} \quad (2.29)$$

dengan  $\kappa = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ . Setelah mengevaluasi elemen matriks dalam braket pada persamaan (2.29), dan dengan asumsi panjang hamburan setiap inti atom adalah riil maka diperoleh

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} = \sum_{jj'} b_j b_{j'} \langle \lambda | \exp(-i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{j'}) | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \exp(i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{R}_j) | \lambda \rangle \quad (2.30)$$

Namun pada kasus yang sesungguhnya, dalam hal ini pada eksperimen, besaran penampang lintang yang diperoleh bukan merupakan penampang lintang dari suatu proses yang mengubah keadaan suatu sistem dari  $\lambda$  ke  $\lambda'$ , namun penampang lintang yang sesuai dengan definisi pada persamaan (2.2). Untuk memperoleh penampang lintang sesuai dengan definisi pada persamaan (2.2), maka persamaan (2.30) harus dijumlahkan pada seluruh keadaan akhir  $\lambda'$ , lalu kemudian dilakukan rata-rata terhadap keadaan awal  $\lambda$ .

Langkah pertama dapat dilakukan dengan menggunakan suatu hubungan yang disebut *closure relation* yang dinyatakan dengan

$$\sum_{\lambda'} \langle \lambda | A | \lambda' \rangle \langle \lambda' | B | \lambda \rangle = \langle \lambda | AB | \lambda \rangle \quad (2.31)$$

sehingga persamaan (2.30) dapat disederhanakan menjadi

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} = \sum_{jj'} b_j b_{j'} \langle \lambda | \exp(i\mathbf{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{jj'}) | \lambda \rangle \quad (2.32)$$

Langkah berikutnya, yaitu melakukan rata-rata terhadap  $\lambda$  dapat dilakukan dengan mengalikan persamaan (2.32) dengan  $p_\lambda$ , probabilitas sistem hamburan berada pada keadaan  $\lambda$ , lalu dijumlahkan untuk semua keadaan  $\lambda$ .  $p_\lambda$  diperoleh dari distribusi Boltzmann yang dinyatakan dengan

$$p_\lambda = \frac{1}{Z} \exp(-E_\lambda \beta) \quad (2.33)$$

dengan  $Z$  merupakan fungsi partisi (dimasukkan untuk menjamin  $\sum_\lambda p_\lambda = 1$ )

$$Z = \sum_\lambda \exp(-E_\lambda \beta) \quad (2.34)$$

Untuk mempersingkat penulisan, rata-rata thermal besaran  $A$  pada temperatur  $T$ ,  $\sum_{\lambda} p_{\lambda} \langle \lambda | A | \lambda \rangle$  dituliskan sebagai  $\langle A \rangle$ . Sehingga rata-rata persamaan (2.32) terhadap  $\lambda$  dapat ditulis dalam persamaan sebagai berikut

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) &= \sum_{\lambda} p_{\lambda} \sum_{jj'} b_j b_{j'} \langle \lambda | \exp(i\kappa \cdot \mathbf{R}_{jj'}) | \lambda \rangle \\ &= \sum_{jj'} b_j b_{j'} \langle \exp(i\kappa \cdot \mathbf{R}_{jj'}) \rangle \end{aligned} \quad (2.35)$$

Untuk menunjukkan rata-rata terhadap variasi isotop dan spin, maka persamaan (2.35) dinyatakan dengan

$$\left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right) = \sum_{jj'} \overline{b_j b_{j'}} \langle \exp(i\kappa \cdot \mathbf{R}_{jj'}) \rangle \quad (2.36)$$

### 2.3 Fungsi Distribusi Pasangan (*Pair Distribution Function*)

Pada material kristalin, semua posisi atom dapat didefinisikan apabila telah ditetapkan beberapa parameter seperti posisi dan jarak antar atom, namun hal tersebut tidak mungkin dilakukan pada material amorph, cairan ataupun gas (Y. Waseda, 1980). Oleh karena itu, perlu cara lain untuk dapat menjelaskan struktur pada sistem bukan kristal. Penjelasan mengenai distribusi atom pada material bukan kristal biasanya memenuhi suatu fungsi distribusi, dalam hal ini fungsi distribusi pasangan (*pair distribution function*), yang merupakan rata-rata kerapatan atom lain pada jarak  $r$  dari atom acuan (pada  $r = 0$ ).

### 2.4 Hubungan Fungsi Distribusi Pasangan Dengan Hamburan Neutron

Berkaitan dengan kasus hamburan neutron, maka persamaan (2.36) perlu sedikit diubah agar diperoleh suatu hubungan antara penampang lintang hamburan dan fungsi distribusi pasangan.

Persamaan (2.36) bisa diubah menjadi

$$\begin{aligned} \left( \frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\lambda \rightarrow \lambda'} &= \sum_{jj'} b_j b_{j'} \langle \exp(i\kappa \cdot \mathbf{R}_{jj'}) \rangle \\ &= I_1 + I_2 \end{aligned} \quad (2.37)$$

dengan

$$I_1 = \sum_j \overline{b_j^2} \quad (2.38)$$

$$I_2 = \sum_{j \neq j'} \overline{b_j} \overline{b_{j'}} \langle \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{jj'}) \rangle \quad (2.39)$$

$I_1$  dikenal dengan hamburan tidak koheren (*incoherent scattering*) serta  $I_2$  dikenal dengan hamburan koheren (*coherent scattering*).

Dimisalkan jumlah atom dalam sistem hamburan adalah  $N$  dan jumlah jenis atom dalam sistem ini adalah  $n$ . Indeks  $j$  dan  $j'$  akan digunakan untuk menunjukkan individu atom, dan indeks  $\mu$  dan  $\nu$  untuk menunjukkan jenis atom. Jadi, indeks  $j(\mu)$  akan menunjukkan atom ke- $j$  dari atom jenis ke- $\mu$ , sedangkan  $N_\mu$  menunjukkan jumlah total atom berjenis  $\mu$ . Konsentrasi atom jenis  $\mu$  ditulis sebagai  $c_\mu = \frac{N_\mu}{N}$ .

Untuk mempermudah perhitungan pada sistem multikomponen, dimana terdapat lebih dari satu jenis atom, persamaan (2.38) dan (2.39) dapat disederhanakan dengan menggunakan  $\sum_j = \sum_\nu \sum_{j(\nu)}$ ;  $\sum_{j(\nu)} \overline{b_{j(\nu)}^2} = N_\nu \overline{b_\nu^2}$  serta  $N_\nu = N c_\nu$ . Persamaan (2.38) menjadi

$$I_1 = N \sum_\nu c_\nu \overline{b_\nu^2} \quad (2.39)$$

dengan menggunakan  $\sum_{j \neq j'} = \sum_j \sum_{j'}'$  serta beberapa perubahan, maka persamaan (2.39) menjadi

$$I_2 = \sum_{\nu\mu} \overline{b_\nu} \overline{b_\mu} \sum_{j(\nu)} \sum_{j'(\mu)}' \langle \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{jj'}) \rangle \quad (2.41)$$

dimana tanda aksen menunjukkan bahwa saat  $\nu = \mu$  maka sumasi  $j=j'$  dapat diabaikan.

Untuk mempermudah perhitungan berikutnya, besaran eksponensial dalam matriks elemen bisa diubah menjadi

$$\exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{R}_{j\nu}) = \int d\mathbf{r} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}) \quad (2.42)$$

setelah dilakukan penurunan, maka persamaan (2.41) menjadi

$$I_2 = \int d\mathbf{r} \exp(i\boldsymbol{\kappa} \cdot \mathbf{r}) \sum_{\nu\mu} \overline{b_\nu} \overline{b_\mu} \sum_{j(\nu)j'(\mu)} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}) \rangle \quad (2.43)$$

Dengan asumsi bahwa distribusi atom yang terbentuk isotropik, maka dapat didefinisikan suatu fungsi distribusi

$$g_{\nu\mu}(r) = \frac{V}{N_\nu N_\mu} \sum_{j(\nu)j'(\mu)} \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}) \rangle. \quad (2.44)$$

Persamaan (2.44) belum memiliki makna fisis karena  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}) = \infty$  untuk

$\mathbf{r} = \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}$ . Namun setelah diintegrasikan terhadap  $\int_r^{r+dr}$  serta dengan menggunakan  $V = 4\pi R^3/3$ , maka persamaan (2.44) menjadi

$$g_{\nu\mu}(r) = \frac{R^3}{3} \frac{n_{\nu\mu}(r)}{N_\nu r^2 dr} \quad (2.45)$$

dengan

$$n_{\nu\mu}(r) = \frac{\left\langle \int_r^{r+dr} \sum_{j(\nu)j'(\mu)} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j(\nu)j'(\mu)}) dr \right\rangle}{N_\mu} \quad (2.46)$$

$n_{\nu\mu}(r)$  merupakan rata-rata jumlah inti atom jenis  $\nu$  pada jarak antara  $r$  dan  $r+dr$  dari inti atom jenis  $\mu$ . Besaran ini biasa disebut bilangan koordinasi (*coordination number*) sebagai fungsi jarak.

Dengan menggunakan  $N_\nu = \rho_\nu 4\pi R^3/3$ , maka persamaan (2.45) bisa dinyatakan dengan bentuk lain menjadi

$$g_{\nu\mu}(r) = \frac{n_{\nu\mu}(r)}{4\pi r^2 dr \rho_\nu} \quad (2.47)$$

Persamaan (2.47) menyatakan bahwa  $g_{\nu\mu}(r)$  merupakan perbandingan antara jumlah

rata-rata kerapatan inti atom jenis  $\nu$  pada jarak antara  $r$  dan  $r+dr$  di sekitar suatu inti atom jenis  $\mu$ , dengan kerapatan rata-rata inti atom jenis  $\nu$  dalam sampel. Persamaan (2.47) dikenal dengan fungsi distribusi pasangan (D.A. Keen, 2001) atau fungsi distribusi radial (S.W. Lovesey, 1987).

Dengan mensubstitusi persamaan (2.45) ke dalam persamaan (2.41) serta dengan melakukan beberapa penurunan, maka diperoleh hubungan antara hamburan koheren dengan fungsi distribusi pasangan, yaitu

$$I_2 = N \sum_{\nu\mu} \bar{b}_\nu \bar{b}_\mu c_\nu c_\mu \rho_0 [(2\pi)^3 \delta(\kappa) + \int dr \exp(i\kappa \cdot \mathbf{r}) \{g_{\nu\mu}(r) - 1\}] \quad (2.48)$$

Namun, suku  $\delta(\kappa)$  merupakan kasus tidak terjadi hamburan sama sekali, sehingga suku pertama dalam kurung siku dapat diabaikan, sehingga persamaan (2.48) menjadi

$$I_2 = N \sum_{\nu\mu} \bar{b}_\nu \bar{b}_\mu c_\nu c_\mu \rho_0 \int dr \exp(i\kappa \cdot \mathbf{r}) \{g_{\nu\mu}(r) - 1\} \quad (2.49)$$

Setelah beberapa penurunan, dengan asumsi bahwa  $g_{\nu\mu}(r)$  bersifat isotropik dan dengan menggunakan faktor struktur parsial Faber-Ziman (T. Faber & J.M. Ziman, 1965)  $A_{\nu\mu}(Q)$ , maka diperoleh suatu hubungan

$$A_{\nu\mu}(Q) - 1 = \rho_0 \int_0^\infty 4\pi r^2 [g_{\nu\mu}(r) - 1] \frac{\sin(Qr)}{Qr} dr \quad (2.50)$$

atau

$$I_2 = N \sum_{\nu\mu} \bar{b}_\nu \bar{b}_\mu c_\nu c_\mu (A_{\nu\mu}(Q) - 1) \quad (2.51)$$

Persamaan (2.50) merupakan hubungan transformasi Fourier yang menghubungkan faktor struktur parsial dengan fungsi distribusi pasangan parsial. Namun karena hasil difraksi yang diperoleh merupakan hasil hamburan total, maka perlu didefinisikan fungsi struktur serta fungsi distribusi pasangan total.

Jika faktor struktur total,  $F(Q)$  serta fungsi distribusi pasangan total,  $G(r)$  didefinisikan sebagai

$$F(Q) = \sum_{\nu\mu} \bar{b}_\nu \bar{b}_\mu c_\nu c_\mu [A_{\nu\mu}(Q) - 1]$$



$$(2.52)$$

$$G(r) = \sum_{\nu\mu} \overline{b_\nu} \overline{b_\mu} c_\nu c_\mu [g_{\nu\mu}(r) - 1] \quad (2.53)$$

maka sesuai dengan persamaan (2.50) akan diperoleh suatu hubungan transformasi Fourier sebagai berikut

$$F(Q) = \rho_0 \int_0^\infty 4\pi r^2 G(r) \frac{\sin(Qr)}{Qr} dr \quad (2.54)$$

serta transformasi baliknya

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3 \rho_0} \int_0^\infty 4\pi Q^2 F(Q) \frac{\sin(Qr)}{Qr} dQ \quad (2.55)$$

## 2.5 Optimasi Global dengan Algoritma Evolusi Differensial

Evolusi diferensial (*differential evolution*) merupakan salah satu algoritma optimasi global yang berbasis evolusi. Algoritma ini diperkenalkan oleh Price dan Storn pada tahun 1996 (R. Storn & K. Price, n.d). Dasar pemikiran dari algoritma ini adalah menganggap individu sebagai vektor, modifikasi individu pada mutasi dan rekombinasi dilakukan dengan operasi penjumlahan dan pengurangan vektor. Optimasi yang dikerjakan dengan evolusi diferensial adalah minimalisasi. Pada banyak kasus, evolusi diferensial terbukti lebih handal dibanding algoritma-algoritma evolusi lainnya, namun sampai saat ini evolusi diferensial belum dapat dibuktikan kekonvergenannya.

Untuk menggambarkan proses algoritma evolusi diferensial, dimisalkan fungsi objektif yang ingin dikerjakan adalah  $f(C)$ , dimana  $C$  adalah argumen yang berupa array satu dimensi (vektor) dengan panjang  $np$ . Untuk evolusi diferensial,  $C$  dan  $f(C)$  harus bernilai riil. Dimisalkan juga jumlah individu dalam populasi adalah  $nc$ ,  $nc$  harus lebih atau sama dengan empat. Dalam proses mutasi evolusi diferensial akan dibutuhkan suatu konstanta yang disebut faktor mutasi (*mutation factor*). Faktor mutasi biasa dilambangkan dengan  $F$  dan bernilai  $[0,2]$ . Selanjutnya dalam proses rekombinasi juga dibutuhkan suatu konstanta yang dinamakan probabilitas rekombinasi. Probabilitas rekombinasi ini biasa dilambangkan dengan  $cr$  dan bernilai

[0,1]. Nilai kedua parameter ini dimasukkan di awal program dan biasanya selalu tetap selama program dijalankan.

Secara umum, proses-proses dalam evolusi diferensial sama seperti algoritma evolusi lainnya, yaitu:

1) inisialisasi

Pada proses ini, dibuat populasi awal secara acak. Dimisalkan masing-masing parameter dalam suatu individu dilambangkan dengan  $p$ , bentuk individu yang dibuat adalah:

$$C_{i,1} = [p_{1,i,1}, p_{2,i,1}, \dots, p_{np,i,1}] \quad i = 1, \dots, nc$$

Indeks pertama dari  $C$  menunjukkan urutan individu di dalam populasi, dan indeks kedua menunjukkan generasi. Indeks pertama pada  $p$  menunjukkan urutan parameter dalam individu, indeks kedua menunjukkan urutan individu penampung parameter di dalam populasi, dan indeks ketiga menyatakan generasi. Setiap individu yang dibuat harus berada dalam domain fungsi objektif yang dikerjakan.

2) mutasi

Pada proses ini, untuk setiap individu dalam  $C$  dibentuk suatu individu baru, individu baru ini disebut **vektor donor** (*donor vector*). Langkah-langkah proses mutasi adalah:

a) untuk setiap individu  $C_{i,G}$ , pilih 3 indeks lain secara acak, dimisalkan indeks-indeks tersebut adalah  $r_1$ ,  $r_2$ , dan  $r_3$ . Indeks  $i$ ,  $r_1$ ,  $r_2$ , dan  $r_3$  tidak boleh ada yang sama.

b) untuk setiap individu  $C_{i,G}$ , vektor donor  $D_{i,G+1}$  didefinisikan dengan aljabar vektor sebagai berikut:

$$D_{i,G+1} = C_{r_1,G} + F(C_{r_2,G} - C_{r_3,G})$$

dimana:

$$D_{i,G+1} = [D_{1,i,G+1}, D_{2,i,G+1}, \dots, D_{np,i,G+1}] \quad i = 1, \dots, nc$$

## 3) rekombinasi

Pada proses ini, dibentuk individu-individu baru yang disebut **vektor percobaan** (*trial vector*). Langkah-langkah pembentukan vektor-vektor ini adalah:

a) pilih satu indeks parameter yang akan selalu direkombinasi. Hal ini dikerjakan agar vektor percobaan yang terbentuk tidak persis sama dengan vektor dalam populasi. Misalkan indeks ini adalah  $I_{\text{rand}}$ .

b) notasikan vektor percobaan yang terbentuk dengan  $E_{i,G+1}$ , dimana:

$$E_{i,G+1} = [E_{1,i,G+1}, E_{2,i,G+1}, \dots, E_{np,i,G+1}] \quad i = 1, \dots, nc$$

kemudian definisikan:

$$E_{j,i,G+1} = \begin{cases} D_{j,i,G+1} & \text{jika } \text{rand}_{j,i} \leq cr \text{ atau } j = I_{\text{rand}} \\ p_{j,i,G+1} & \text{jika } \text{rand}_{j,i} > cr \text{ dan } j \neq I_{\text{rand}} \end{cases}$$

dimana  $\text{rand}_{j,i}$  adalah bilangan acak dalam  $[0,1]$  yang didefinisikan untuk setiap pasangan  $i,j$ .

c) periksa kembali apakah  $E_{i,G+1}$  masuk dalam domain fungsi objektif. Jika  $E_{i,G+1}$  berada di luar domain, gantikan  $E_{i,G+1}$  dengan individu yang dibuat secara acak.

## 4) seleksi

Pada proses ini dilakukan pemilihan individu-individu yang akan masuk ke dalam generasi selanjutnya. Langkah-langkah proses ini adalah:

a) bandingkan setiap vektor percobaan dengan setiap individu yang berindeks sama dalam populasi sekarang.

b) vektor yang menghasilkan nilai fungsi objektif lebih rendah masuk ke populasi generasi selanjutnya:

$$C_{i,G+1} = \begin{cases} E_{i,G+1} & \text{jika } f(E_{i,G+1}) \geq f(C_{i,G}) \\ C_{i,G} & \text{jika } f(E_{i,G+1}) < f(C_{i,G}) \end{cases}$$

Setelah seleksi, diperiksa apakah solusi yang didapat telah memenuhi kriteria penghenti, jika belum memenuhi, proses akan dilanjutkan kembali ke proses mutasi.

Proses-proses ini terus dikerjakan sampai kriteria penghenti terpenuhi. Kriteria penghenti dapat berupa toleransi tertentu pada nilai fungsi objektif, atau jumlah generasi maksimum.

