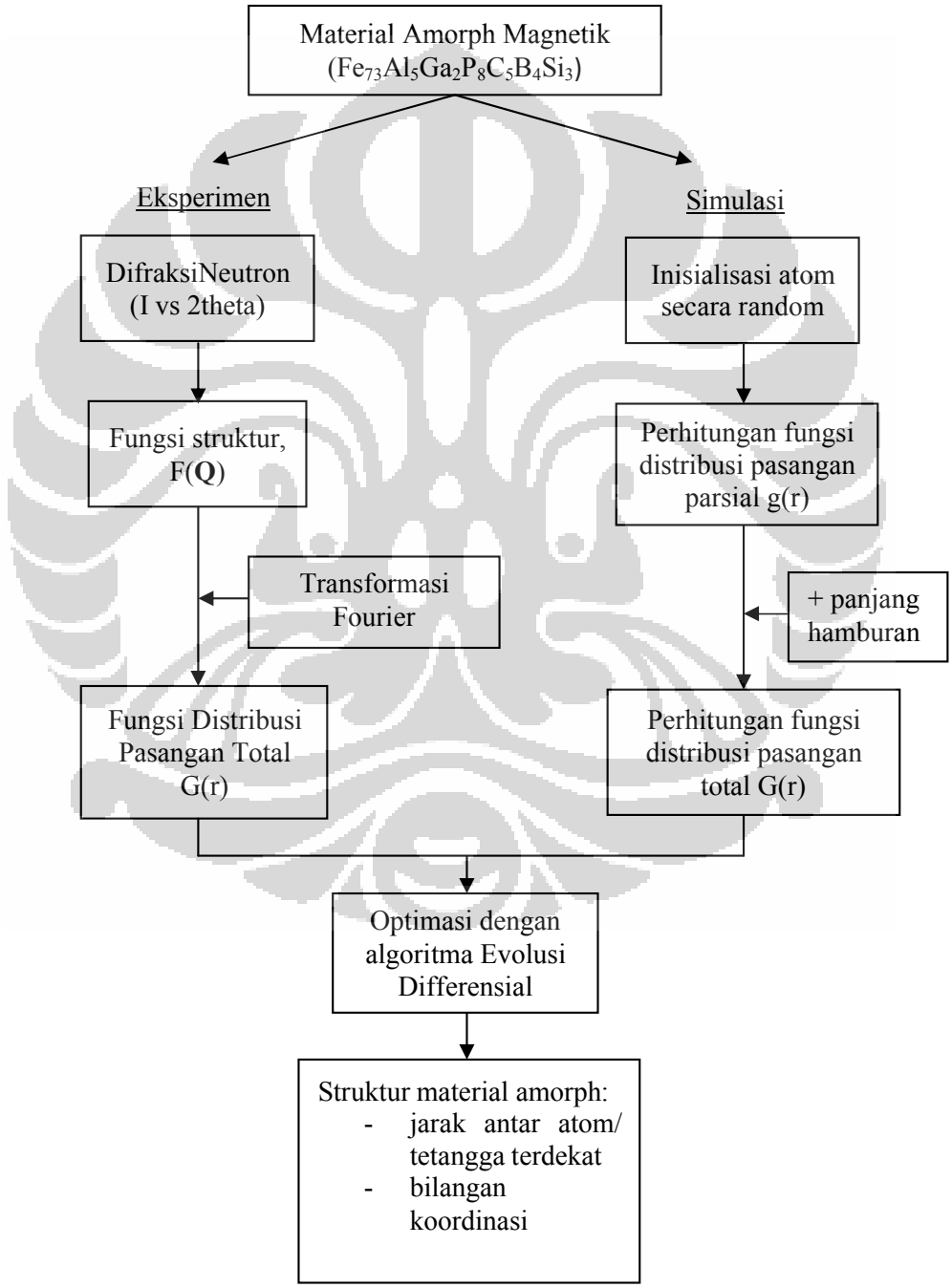
# BAB 3
# METODE PENELITIAN

## 3.1 Diagram Alir Penelitian




Gambar 3.1 Diagram alir penelitian


Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

Penelitian kali ini diklasifikasikan dalam 2 metode, yaitu eksperimen serta simulasi pemrograman. Eksperimen digunakan untuk mendapatkan data yang akan dianalisa, berupa penampang lintang hamburan, yang kemudian direduksi hingga diperoleh fungsi distribusi pasangan total hasil eksperimen. Sementara itu, simulasi digunakan untuk memodelkan struktur atom pada material amorph tersebut, yang kemudian digunakan untuk menghitung fungsi distribusi pasangan simulasi. Algoritma evolusi differensial, yang merupakan algoritma yang meniru prinsip dasar evolusi biologis untuk menyelesaikan problem optimasi global, digunakan untuk mencari konfigurasi atom permodelan yang mendekati dengan struktur atom yang sesungguhnya dengan cara menghitung selisih antara fungsi distribusi pasangan eksperimen dengan simulasi melalui metode kuadrat terkecil (*least square*). Hasil selisih yang kecil diharapkan akan memberikan model struktur atom yang mendekati dengan struktur atom material tersebut.

### 3.2 Metode Eksperimen

Sampel yang diamati merupakan material amorph *soft magnetic* $Fe_{73}Al_5Ga_2P_8C_5B_4Si_3$ berbentuk pita, yang dibentuk di *Ins. of Solid State Physics Technical*, *University of Vienna, Austria*. Pembuatan pita tersebut dilakukan dengan menggunakan metode *melt-spinning* dalam sebuah tabung yang kemudian diisi dengan gas argon. Material alloy kemudian dilebur dalam wadah pelebur yang terbuat dari quartz yang memiliki lubang injeksi 0.6-0.8 mm. Tekanan injeksi yang digunakan adalah 5 Psi. Preparasi dengan metode ini menghasilkan pita alloy $Fe_{73}Al_5Ga_2P_8C_5B_4Si_3$ dengan lebar rata-rata 5mm, dan tebal rata-rata 40 μm (Mustain, 2004).

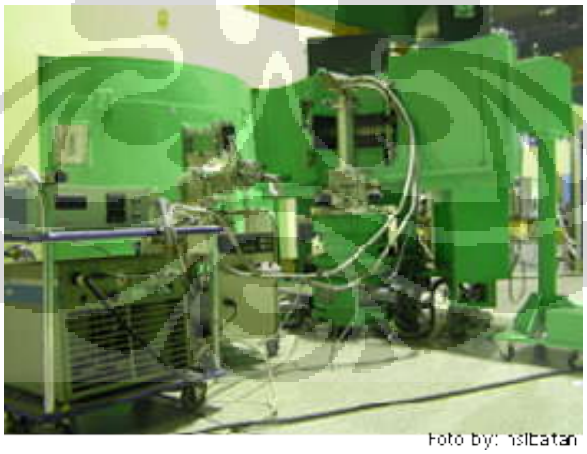
Difraksi neutron dilakukan dengan menggunakan *Triple Axis Spectrometer* (TAS) yang terdapat di *Neutron Scattering Laboratory* (NSL), BATAN, Kawasan Puspiptek, Serpong. Namun karena sinyal sampel yang terlalu kecil serta sinyal *background* TAS yang cukup tinggi maka pengambilan data diulangi dengan menggunakan *High Resolution Powder Diffraction* (HRPD) yang memiliki sinyal *background* lebih rendah dibandingkan TAS. HRPD ini bertempat di lokasi yang



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

sama dengan TAS. Adapun alat TAS dan HRPD diperlihatkan oleh gambar 3.2 dan 3.3.

Gambar 3.2 Triple Axis Spectrometer (TAS)
Sumber: http://centrin.net.id/~nslbatan/




Gambar 3.3. High Resolution Powder Diffraction (HRPD)
Sumber: http://centrin.net.id/~nslbatan/

Sampel diletakkan berdiri/ tegak lurus dengan arah vektor hamburan seperti terlihat pada gambar 3.4. Panjang gelombang neutron sumber yang digunakan sebesar 1,822 Å. Data mentah hasil difraksi kemudian dikoreksi untuk menghilangkan pengaruh *background,* hamburan *Compton*, serta absorpsi oleh sampel.



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

Gambar 3.4 Posisi sampel pada saat pengambilan data

Data yang telah dikoreksi lalu dinormalisasi sesuai persamaan

$$F(Q) = I^{coh} - \sum_{i=1}^{n} c_i \overline{b_i^2} \tag{3.1}$$

agar diperoleh fungsi struktur, *F(Q)*. *Q* merupakan nilai dari vector hamburan, dimana untuk kasus hamburan elastik bernilai $Q = 4\pi \sin\theta / \lambda$ dengan $2\theta$ adalah sudut hamburan, serta λ adalah panjang gelombang neutron yang digunakan. Adapun fungsi distribusi pasangan eksperimen diperoleh melalui transformasi Fourier sinus yaitu

$$G(r) = \frac{1}{(2\pi)^3 \rho_0} \int_0^{\infty} 4\pi Q^2 F(Q) \frac{\sin(Qr)}{Qr} dQ \tag{3.2}$$

### 3.3 Dasar Pemrograman (Simulasi)

#### 3.3.1 Inisialisasi Atom

Sampel dalam hal ini dimodelkan dalam bentuk bola. Jari-jari bola model ini didapat dari data fungsi distribusi pasangan hasil eksperimen. Misalkan selisih dari dua data jarak yang berurutan adalah *dr*, dan jarak terjauh dalam data adalah $r_{max}$, jari-jari bola sampel adalah $r_{max}+dr$. Rumus ini dipilih dengan asumsi data diskrit jarak dalam eksperimen didapat dengan pembulatan ke bawah.



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

Proses inisialisasi atom dilakukan secara random dalam suatu bola model. Hal tersebut dilakukan untuk memodelkan distribusi atom pada material amorph, dengan asumsi atom-atom dalam material tersebut terdistribusi secara *uniform*. Oleh karena itu, sebagai konfigurasi awal, atom-atom tersebut harus teracak dan terdistribusi secara *uniform* dalam ruang 3 dimensi (koordinat bola) sesuai persamaan

$$\begin{aligned} 0 &\le s \le 4\pi R^3/3 \\ -1 &\le \cos\theta \le 1 \\ 0 &\le \phi \le 2\pi \end{aligned} \tag{3.3}$$

Sehingga diperoleh parameter random yang perlu dilakukan untuk membentuk konfigurasi awal atom, yaitu

$$\begin{aligned} r &= (3/4\pi)(\text{rand}(s))^{1/3} \\ \theta &= arc\cos[\text{rand}(2)-1] \\ \varphi &= \text{rand}(2\pi) \end{aligned} \tag{3.4}$$

dengan rand($x$) merupakan bilangan acak yang bernilai antara 0 sampai $x$. Kemudian posisi atom yang terbentuk dapat dinyatakan dalam koordinat kartesian, dengan menggunakan hubungan:

$$\begin{aligned} x &= r\sin\theta\cos\varphi \\ y &= r\cos\theta\cos\varphi \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \tag{3.5}$$

Selain itu, dengan menggunakan persamaan (3.5), dapat diperoleh besar jarak antara atom acuan dengan atom tetangga sebagai berikut

$$R_{ij} = r_i^2 + r_j^2 - 2r_i r_j[\sin\theta_i \sin\theta_j \cos(\phi_j - \phi_i) + \cos\theta_i \cos\theta_j] \tag{3.6}$$

### 3.3.2 Perhitungan Fungsi Distribusi Pasangan

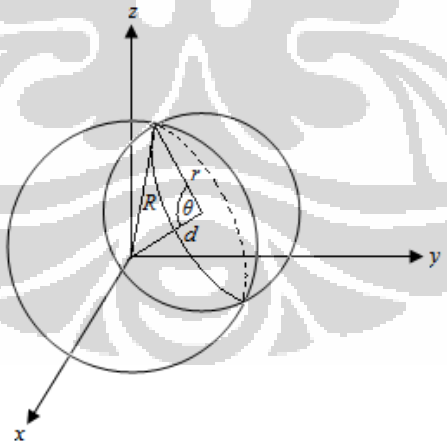
Perhitungan fungsi distribusi pasangan simulasi diawali dengan menghitung fungsi distribusi pasangan parsial sesuai persamaan (2.45). Setelah itu, dengan



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

menjumlahkan seluruh pasangan jenis atom yang terdapat dalam sampel, serta dengan menambahkan besaran panjang hamburan (*scattering length*) sesuai persamaan (2.53), maka akan diperoleh fungsi distribusi pasangan total yang akan digunakan untuk proses optimasi yang akan dijelaskan berikutnya.

Beberapa pendekatan dilakukan untuk mempermudah serta mempercepat proses perhitungan fungsi distribusi pasangan parsial, pertama, atom dimisalkan sebagai titik. Hal tersebut dilakukan dengan anggapan bahwa neutron dihamburkan oleh gaya inti seperti disebutkan pada bab 2. Jari-jari atom akan diperhitungkan pada saat menghitung fungsi distribusi pasangan total, yang akan diwakili oleh besaran panjang hamburan (*scattering length*). Kedua, atom tetangga (*neighboring atoms*) yang akan diikutkan dalam perhitungan fungsi distribusi pasangan parsial adalah atom yang hanya berada pada jarak yang lebih kecil atau sama dengan jari-jari bola model. Dengan pembatasan tersebut, maka perlu dilakukan koreksi perhitungan jumlah atom tetangga.




Gambar 3.5 Geometri koreksi perhitungan atom tetangga

Misalkan inti atom yang sedang menjadi pusat dalam perhitungan fungsi distribusi pasangan berada pada jarak *d* dari pusat bola model (Gambar 3.5). Maka akan terdapat kekurangan jumlah atom yang terhitung pada jarak antara *r* dan *r* + *dr* dengan jumlah atom yang seharusnya berada pada jarak *r* dan *r* + *dr* (untuk volume



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

model tidak terbatas), atau dengan kata lain, terjadi "kehilangan" jumlah atom tetangga. Untuk mengatasi hal tersebut, proses inisialisasi atom yang disebutkan pada bagian sebelumnya dilakukan dengan cara mengacak koordinat atom dalam bola yang berjari-jari $2R$, namun atom acuan yang digunakan tetap berada dalam bola berjari-jari $R$. Dengan pendekatan ini, maka atom-atom tetangga dapat terhitung dengan seharusnya, namun di sisi lain, pendekatan ini menyebabkan terdapat perbedaan jumlah atom acuan dengan jumlah atom yang diacak sebagai konfigurasi awal, sebab atom acuan yang digunakan hanya yang berada pada jarak $R$ dari pusat bola model. Oleh karena itu, akan terdapat perbandingan jumlah atom acuan dengan jumlah atom keseluruhan sebagai berikut

$$V_1 : V_2 = \frac{4}{3}\pi R^3 : \frac{4}{3}\pi (2R)^3 \approx 1:8 \tag{3.6}$$

atau dengan kata lain, jumlah atom acuan hanya akan berjumlah $\approx 1/8$ kali dari jumlah atom keseluruhan.

### 3.3.3 Proses Optimasi dengan Algoritma Evolusi Differensial (*Differential Evolution*)

Evolusi diferensial (*differential evolution*) merupakan salah satu algoritma optimasi global yang berbasis evolusi, seperti telah dijelaskan pada bagian 2.5. Algoritma ini diperkenalkan oleh Price dan Storn pada tahun 1996. 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 penelitian kali ini, penulis menggunakan kode sumber algoritma evolusi differensial yang dibuat oleh Olli Niemitalo dan Magnus Jonsson (O. Niemitalo & M. Jonsson, 2006). Individu pada kasus kali ini adalah posisi-posisi atom yang pada awalnya dibuat secara acak, yang kemudian mengalami proses evolusi seperti telah disebutkan pada bagian 2.5, sehingga diperoleh individu terbaik (posisi atom) yang akan meminimalkan fungsi objektif. Fungsi objektif yang dimaksud adalah selisih



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008

antara fungsi distribusi pasangan eksperimen dengan simulasi, sehingga diharapkan semakin kecil selisih antara keduanya maka konfigurasi atom permodelan yang diperoleh semakin mendekati konfigurasi atom sebenarnya (sampel). Adapun untuk mencari selisih antara fungsi distribusi pasangan eksperimen dengan simulasi digunakan metode kuadrat terkecil (*least square*) yang dapat dinyatakan dengan

$$f = \sqrt{\sum_{r=0}^{ng} (G(r)^{\exp} - G(r)^{fit})^2} \tag{3.7}$$

dengan ng merupakan jumlah data fungsi distribusi pasangan eksperimen, $G(r)^{exp}$ merupakan fungsi distribusi pasangan eksperimen serta $G(r)^{fit}$ adalah fungsi distribusi pasangan optimasi.



Studi Difraksi..., Resta Agung Susilo, FMIPA UI, 2008