

TRANSFORMASI FOURIER, LANGSUNG, RIETVELD: PENENTUAN STRUKTUR KRISTAL OPTIMAL SEBAGAI MATERIAL PERTAHANAN

[Fourier Transform, Direct, Rietveld:
Determination Of Optimal Crystal Structure As Defense Material]

Alexcandro Hibertus^{1)*}, Lidya Ananda²⁾, Sovian Aritonang³⁾

^{1,2)} Mahasiswa Sarjana Prodi Matematika, ³⁾ Dosen Prodi Fisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Militer, Universitas Pertahanan, Bogor, Indonesia

alexandrohs@gmail.com (corresponding)

ABSTRAK

Penentuan struktur kristal optimal merupakan aspek penting dalam pengembangan material pertahanan, di mana sifat fisik dan mekanis suatu material dipengaruhi oleh struktur kristalnya. Penelitian ini menggunakan pendekatan matematika untuk menganalisis struktur kristal melalui tiga metode utama: Transformasi Fourier, metode langsung (Direct Methods), dan metode Rietveld. Transformasi Fourier memungkinkan analisis data difraksi yang dihasilkan oleh interaksi sinar-X dengan atom dalam kristal, mengubahnya menjadi distribusi elektron untuk mengidentifikasi posisi atom. Metode langsung memanfaatkan hubungan probabilistik antar-fase untuk memperkirakan posisi atom secara akurat, bahkan ketika data difraksi tidak lengkap. Metode Rietveld, berbasis optimasi, menyempurnakan model struktur kristal dengan membandingkan data difraksi eksperimen dan hasil simulasi, meminimalkan perbedaan antar keduanya. Hasil analisis menunjukkan bahwa kombinasi ketiga metode ini efektif dalam menentukan struktur kristal yang optimal. Implementasi teknik ini diharapkan dapat mendukung pemilihan material yang unggul untuk aplikasi di bidang pertahanan.

Kata kunci: Struktur kristal; Transformasi Fourier; metode langsung; metode Rietveld

ABSTRACT

Determining the optimal crystal structure is essential in the development of defense materials, as its crystal structure influences the physical and mechanical properties of a material. This study employs a mathematical approach to analyze crystal structures through three primary methods: Fourier Transformation, Direct Methods, and the Rietveld method. Fourier Transformation enables the analysis of diffraction data generated by the interaction of X-rays with atoms in a crystal, converting it into electron distribution to identify atomic positions. The Direct Method utilizes probabilistic phase relationships to accurately estimate atomic positions, even when diffraction data is incomplete. The Rietveld method, based on optimization, refines the crystal structure model by comparing experimental diffraction data with simulated results, minimizing differences between them. The analysis results show that the combination of these three methods effectively determines the optimal crystal structure. The implementation of these techniques is expected to support the selection of superior materials for defense applications.

Keywords: Crystal structure; Fourier Transformation; Direct methods; Rietveld method

PENDAHULUAN

Struktur kristal merupakan susunan periodik atom, ion, atau molekul dalam material padat yang memengaruhi sifat fisik, kimia, dan mekanis suatu material. Studi tentang sifat fisik bahan kristal sangat penting untuk aplikasi teknologi. Setelah penumbuhan suatu bahan material kristal, sangat penting untuk mengkarakterisasi sifat fisiknya (Didik, 2020). Struktur kristal dapat menentukan kekuatan dan kekerasan material, konduktivitas termal, sifat optik, serta kemampuan material untuk berinteraksi. Kristal terbentuk dari unit sel yang mengulang secara teratur dalam tiga dimensi yang membentuk berbagai struktur kristal seperti kubik, tetragonal, ortorombik, heksagonal, monoklinik, triklinik, dan trigonal. Unit sel merupakan kelompok partikel terkecil di dalam material yang membentuk pola berulang dalam sumbu x , y , z . Panjang lengan sumbu x , y , z pada unit cell disebut dengan konstanta kisi (Hook & Courtney, 2010) dan (Hill, 1992).

Pendekatan Matematika dapat digunakan untuk menganalisis struktur kristal, pendekatan yang dapat digunakan ialah transformasi fourier. Metode transformasi fourier dapat menganalisis dan menentukan struktur kristal dari data difraksi tentang susunan atom dalam kristal seperti yang telah digunakan pada penelitian sebelumnya (Ricky Julianto & Derry Alamsyah, 2021), (Fadlisyah, Zarkasyi, Yasir Amani, 2022), (Ricky Julianto & Derry Alamsyah, 2021), dan (Azhar et al., 2021). Pola difraksi yang diperoleh dari sinar-X, neutron, atau elektron pada dasarnya merupakan data frekuensi yang bisa dikonversi kembali menjadi gambar distribusi elektron didalam kristal melalui Transformasi Fourier (Izumi, 1989). Ketika sinar-X ditembakkan pada suatu kristal menghasilkan interaksi terhadap atom-atom dalam kristal menciptakan pola difraksi, pola ini berada di ruang reciprocal (ruang frekuensi) yang merupakan representasi dari interferensi konstruktif dan destruktif gelombang yang dipantulkan. Beberapa penelitian terakhir diantaranya (Mapasha, 2011) dan (Lin, 2011). Akan tetapi ada acara lain yaitu menggunakan metode langsung.

Metode langsung (Direct Methods) juga merupakan metode penentuan struktur kristal yang digunakan untuk menentukan fase dari faktor struktur ketika data difraksi hanya memberikan informasi tentang intensitas nilai modulus dari faktor struktur tanpa fase seperti yang telah digunakan dalam penelitian (Wahyuni, 2016) dan (Sutrisno, 2012). Fase $\phi(h, k, l)$ merupakan data yang digunakan untuk menghitung densitas elektron. Namun dalam eksperimen difraksi, yang diukur hanyalah intensitas (atau kuadrat dari modulus) dari faktor struktur, bukan fasenya. Metode ini memanfaatkan prinsip probabilistic dan hubungan antara fase dan faktor struktur seperti triplet atau kuadriplet fase yang mencerminkan hubungan simetri dalam kristal. Hubungan ini menghubungkan fase beberapa refleksi yang berbeda melalui hubungan seperti $\phi(h) + \phi(k) + \phi(-h - k) \approx 0$ atau beberapa kombinasi lain yang dihasilkan dari simetri kristal (Irzaman et al., 2000). Metode terakhir ialah Metode Rietveld dikembangkan oleh Hugo Rietveld dimana metode ini merupakan teknik optimasi untuk menyempurnakan model struktur kristal berdasarkan data difraksi, terutama untuk sampel dalam bentuk serbuk seperti pada penelitian (Illahi et al., 2023), (Abror & Ermawati, 2023), (Andalus & Ermawati, 2023), dan (Dewi et al., 2021).

Rietveld adalah metode berbasis simulasi dan penyempurnaan yang berupaya meminimalkan perbedaan antara pola difraksi eksperimental dan pola difraksi yang dihitung dari model struktural hipotetis, Hugo M. Rietveld menemukan teknik pemrograman yang disebut metode Rietveld pada tahun 1967 yang menggunakan database difraksi sinar-X dan difraksi neutron. Meskipun program Rietveld awalnya digunakan untuk data difraksi neutron, Willes dan Young memodifikasi program Rietveld untuk data difraksi sinar-X. Li dan Li (1991) mengadaptasi program Rietveld untuk digunakan pada PC dengan nama PCRTV (Suminta & Las, 2018), (Hibertus, 2025), (Aritonang, 2023a), (Aritonang & Murniati, 2024), (Suhirwan et al., 2021), (Aritonang, 2023b).

METODE PENELITIAN

Penelitian ini menggunakan tiga metode mencakup metode pertama yaitu metode Transformasi Fourier memiliki rumus dasar sebagai berikut:

$$\rho(r) = \frac{1}{V} \sum_{h,k,l} F(h,k,l) \cdot e^{-2\pi i(hx+ky+lz)}$$

Di mana:

- $\rho(r)$: densitas elektron pada posisi r ,
- V : volume sel satuan
- $F(h,k,l)$: faktor struktur pada indeks (h,k,l) ,
- h,k,l : index Miller
- x,y,z : koordinat posisi

Metode kedua ialah langsung (Direct Methods) dengan rumus dasar sebagai berikut:

$$\phi(h) + \phi(k) + \phi(-h - k) \approx 0$$

Di mana:

$\phi(h), \phi(k), \phi(-h - k)$: fase faktor struktur untuk refleksi dengan indeks $h, k, -h - k$.

Metode terakhir adalah metode Metode Riedveld yang dapat menyempurnakan struktur kristal berdasarkan profil difraksinya, dengan fungsi sebagai berikut:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(y_{obs,i} - y_{calc,i})^2}{\sigma_i^2}$$

Di mana:

- χ^2 : fungsi kesalahan yang akan diminimalkan,
- $y_{obs,i}$: intensitas yang diamati pada titik i ,
- $y_{calc,i}$: intensitas yang dihitung pada titik i ,
- σ_i : standar deviasi pada titik i .

Analisis presisi menggunakan program RIETAN dilakukan dengan memasukkan dua jenis data: data parameter struktural dan intensitas difraksi sinar-X. Data parameter struktural merupakan data masukan model perhitungan dan diperoleh dari referensi. Data intensitas diperoleh dari intensitas difraksi sinar-X sampel zeolit alam dan mordenit standar. Selanjutnya data parameter struktur dan data intensitas difraksi sinar-X sampel dianalisis menggunakan metode Rietveld dan program RIETAN. Pemuluan dilakukan dengan menggunakan fitting kuadrat terkecil nonlinier dengan metode Maquardt.

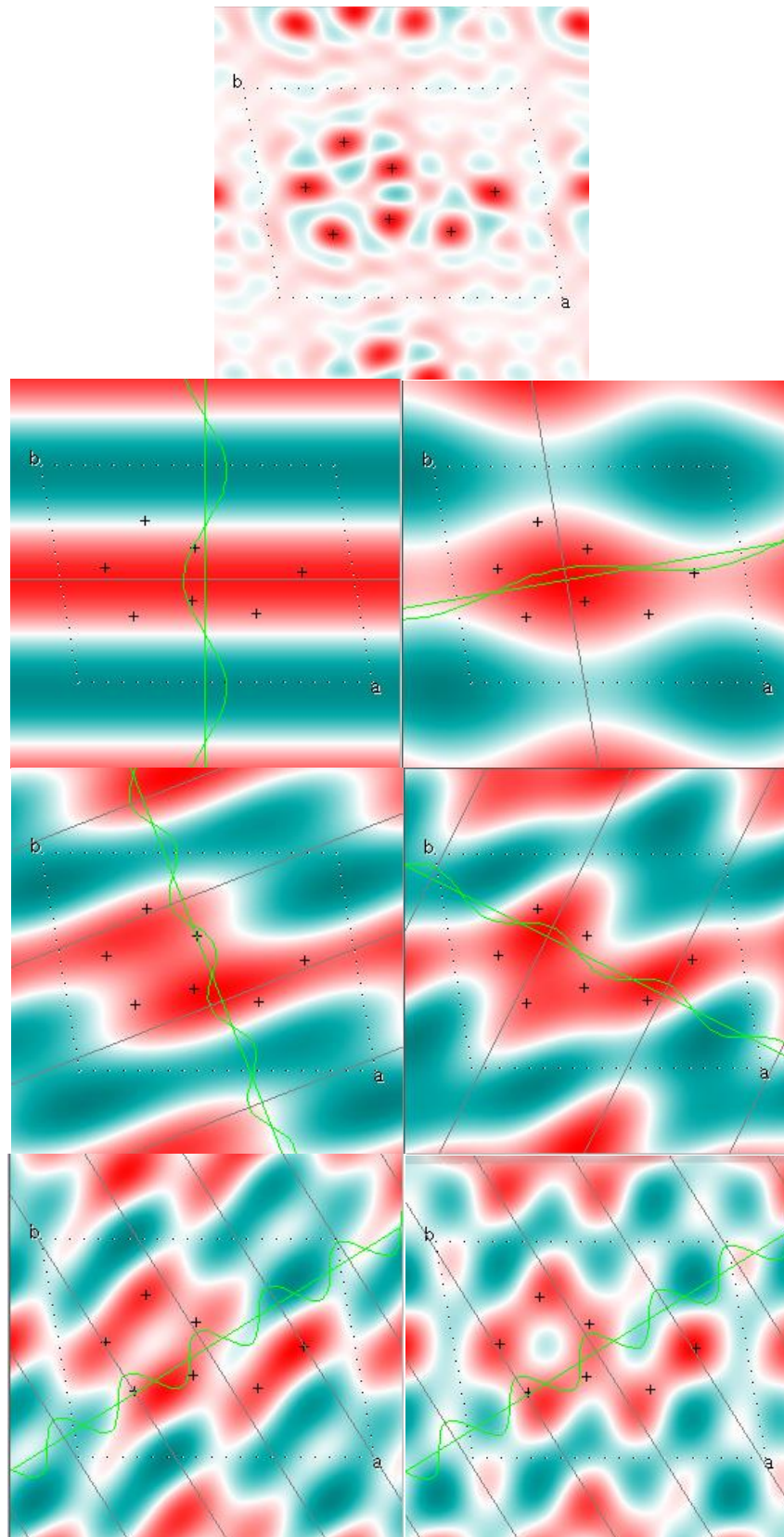
HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil penelitian dan pembahasan meliputi deskripsi data hasil penelitian serta diskusi hasil penelitian yang dilakukan dengan teori dan penelitian relevan yang diacu pada bagian pendahuluan. Untuk rumus matematika diberi penomoran apabila akan diacu. Apabila ada tabel dan grafik, Keterangan tabel dituliskan di atasnya dan rata tengah (*centered*), keterangan grafik/gambar ditulis dibawahnya dan *centered*. Keterangan tabel dimulai dengan nomor 1 dan seterusnya, begitupun juga dengan keterangan grafik/gambar. Keterangan tabel, isi tabel, dan Keterangan grafik/Gambar menggunakan size 11 pt dan cetak tebal (bold). Contohnya:

Telah dilakukan penelitian terkait metode yang digunakan dalam analisis data hasil didapatkan pada metode Transformasi Fourier simulasi Cowtan menggambarkan transformasi fourier dari target dengan tujuh faktor struktur terbesar sesuai dengan nilai berikut:

$$(h,k) = (0,1), (1,0), (-1,2), (-2,1), (1,2), (3,-2), (3,1).$$

Transformasi terus berlanjut setiap kali menambahkan faktor struktur seperti gambar dibawah ini yang merupakan sel satuan (*not orthorhombic*) yang di uraikan dalam titik-titik.



Gambar 1. Struktur Interaktif kevin Cowtan

Gambar diatas menunjukan seberapa cepat faktor struktur dengan fase-fasenya menyatu dengan struktur target, Fungsi kerapatan terlihat seperti gambar diatas didapat dengan pendekatan tranformasi fourier sebagai berikut:

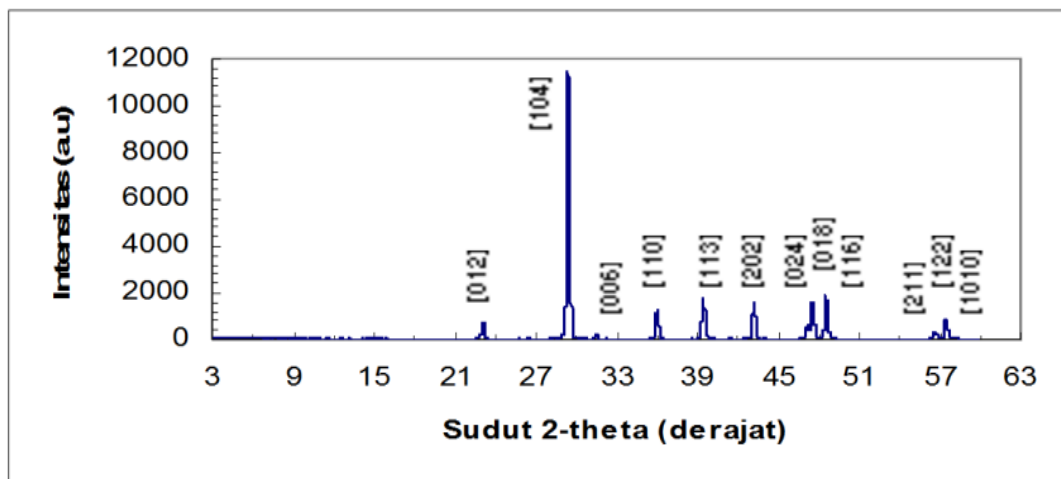
$$\rho(X) = \sum_{h=-\infty}^{\infty} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \sum_{l=-\infty}^{\infty} F(h,k,l)e^{2\pi i X \cdot (h,k,l)}$$

Yang dapat dibandingkan dengan deret fourier untuk $\rho(x, y, z)$ yang didapatkan didata awal.

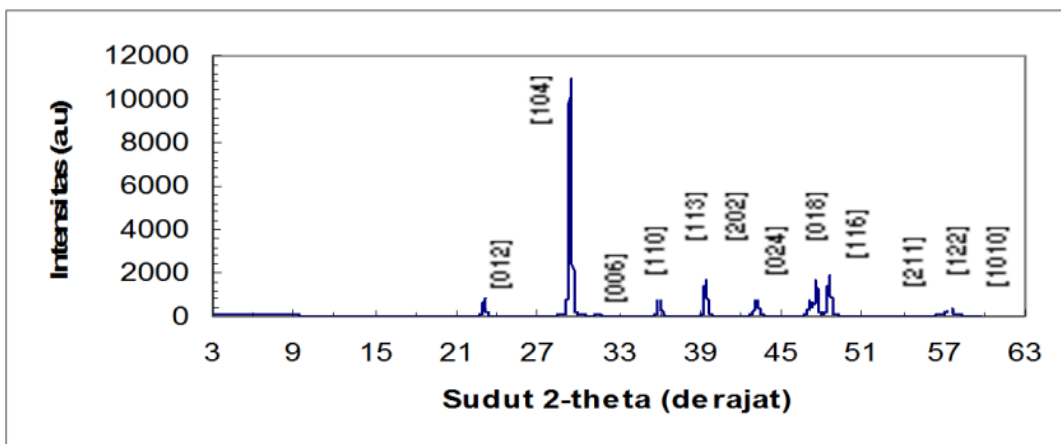
Metode Rietveld yang menganalisis data membentuk kurva teoritis (kalkulasi) mencakup informasi struktur kristal, multiplisitas, (FWHM), arah kecenderungan orientasi.

Tabel 1. Perhitungan Ukuran Kristal berdasarkan dengan Metode Rietveld

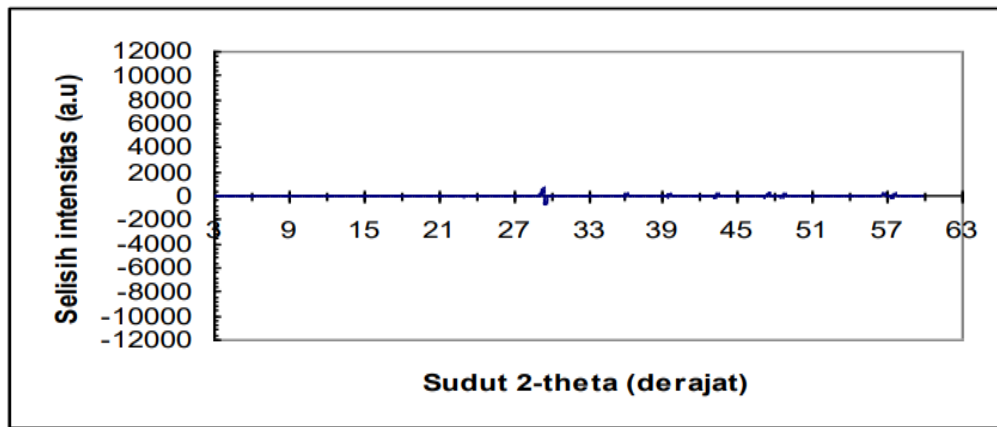
No	Sudut 2 θ (derajat)	Indeks Miller h k l	FWHM		Ukuran Kristal
			Eksperimen (XRD) (derajat)	Teoritis (Rietveld) (derajat)	
1	23,061	0 1 2	0,22	0,213	422,9
2	29,418	1 0 4	0,22	0,213	428,4
3	31,471	0 0 6	0,22	0,213	430,5
4	35,973	1 1 0	0,22	0,212	437,8
5	39,419	1 1 3	0,22	0,211	444,4
6	43,165	2 0 2	0,21	0,209	454,2
7	47,129	0 2 4	0,21	0,206	467,5
8	47,551	0 1 8	0,21	0,206	468,2
9	48,532	1 1 6	0,21	0,205	472,3
10	56,569	2 1 1	0,20	0,198	506,2
11	57,407	1 2 2	0,20	0,197	510,9
12	58,140	1 0 10	0,20	0,196	515,3
Rata-rata					463,2



Gambar 2. Kurva XRD Hasil Eksperimen Bahan Kristal

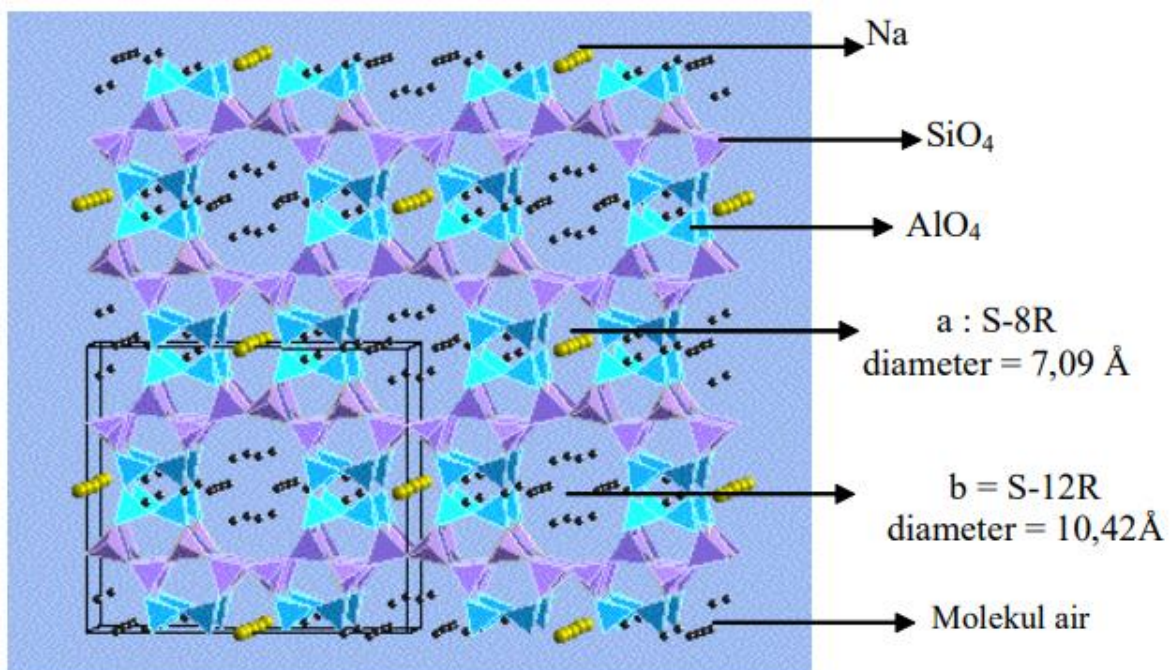


Gambar 3. Kurva XRD Hasil Teoritis menggunakan Metode Rietveld



Gambar 4. Selisih Kurva XRD antara data eksperimen dengan hasil Rietveld

Gambar 2 menunjukkan kurva XRD hasil eksperimen, Gambar 3 menunjukkan kurva XRD hasil teoritis menggunakan metode rietveld dan gambar 4 menunjukkan selisih kurva eksperimen dengan kurva teoritis yang tampak relatif. Hasil analisis menunjukkan bahwa struktur kristal adalah seperti pada gambar 5. dengan grup ruang (*space group*) dan fungsi bentuk puncak intensitas FWHM adalah $H = (-0,0716 \text{ tg}^2\theta + 0,0344 \text{ tg}\theta + 0,04124)^{\frac{1}{2}}$



Gambar 5. Struktur kristal sangkar mordenit dalam ruang tiga dimensi

PENUTUP

Simpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan dapat dibuktikan bahwa analisis struktur kristal dapat dilakukan dengan pendekatan matematika melalui metode transformasi Fourier, metode langsung, dan metode Rietveld yang dimana difraksi sinar-X pada kristal yang di pancarkan menghasilkan pola interferensi yang dapat digunakan untuk menentukan distribusi elektron dalam ruang, transformasi Fourier mengubah data difraksi dari domain spasial menjadi informasi frekuensi yang menggambarkan struktur atom dalam kristal kemudian metode langsung dengan pendekatan probabilistik untuk menebak fase yang mungkin yang dapat mengidentifikasi posisi atom dalam unit sel kristal yang belum terbaca oleh transformasi Fourier lalu struktur kristal disempurnakan dengan kompleks dengan menggunakan algoritma optimasi untuk meminimalkan perbedaan antara data eksperimen dengan model yang diusulkan. Melalui

analisis tersebut dapat mengetahui bagaimana struktur dan keadaan dalam suatu kristal, dengan mengetahui keadaan kristal diharapkan dapat berkontribusi dalam pemilihan material kristal yang terbaik yang dapat digunakan sebagai bahan material kuat yang dapat diterapkan dalam alutsista dibidang pertahanan negara.

Saran

Metode yang digunakan dalam penelitian ini memiliki keterbatasan error yang mungkin lebih besar dari pada penggunaan sistem terkait analisis struktur kristal, oleh karena itu penggunaan metode yang terbaik dalam menganalisis kristal masih perlu terus dikembangkan sehingga dapat mengatasi keterbatasan error tersebut serta dapat menganalisis seluruh struktur kristal.

DAFTAR PUSTAKA

- Abror, M. D. Z., & Ermawati, F. U. (2023). ANALISIS RIETVELD POLA XRD SERBUK $\text{Mg}(\text{Ti}_{0,98}\text{Sn}_{0,02})\text{O}_3$ HASIL SINTESIS DENGAN METODE PENCAMPURAN LARUTAN. *Jurnal Inovasi Fisika Indonesia (IFI)*, 12(3), 26–34. <https://doi.org/https://doi.org/10.26740/ifi.v12n3.p26-34>
- Andalus, A., & Ermawati, F. U. (2023). KARAKTERISASI STRUKTUR DAN DISTRIBUSI UKURAN PARTIKEL SERBUK $\text{Mg}(\text{Ti}_{0,96}\text{Sn}_{0,04})\text{O}_3$ HASIL SINTESIS DENGAN METODE PENCAMPURAN LARUTAN SEBAGAI AKIBAT VARIASI WAKTU TAHAN KALSINASI. *Jurnal Inovasi Fisika Indonesia*, 12(3), 1–9. <https://doi.org/https://doi.org/10.26740/ifi.v12n3.p1-9>
- Aritonang, S. (2023a). *DASAR-DASAR ILMU DAN TEKNIK MATERIAL: Pada Sektor Pertahanan*. CV. AKSARA GLOBAL AKADEMIA.
- Aritonang, S. (2023b). *MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING: Implementation of Cases within the Defense Sector*. CV. AKSARA GLOBAL AKADEMIA.
- Aritonang, S., & Murniati, R. (2024). *MATERIAL PERTAHANAN*. CV. AKSARA GLOBAL AKADEMIA.
- Azhar, A. H., Sugiyanto, S., Musthofa, M. W., & Riyanto, M. Z. (2021). Transformasi Fourier Multiplikatif Dan Aplikasinya Pada Persamaan Diferensial Multiplikatif. *Jurnal Derivat: Jurnal Matematika Dan Pendidikan Matematika*, 8(2), 149–160. <https://doi.org/10.31316/j.derivat.v8i2.1996>
- Dewi, S. H., Mulyawan, A., Winatapura, D. S., Zulys, A., & Adi, W. A. (2021). Analisis Mikrostruktur Dan Sifat Magnetik Terhadap Pengaruh Suhu Sintering Pada Yttrium Iron Garnet Disintesis Menggunakan Metode Solgel. *Jurnal Riset Teknologi Industri*, 15(2), 403. <https://doi.org/10.26578/jrti.v15i2.7049>
- Didik, L. A. (2020). PENENTUAN UKURAN BUTIR KRISTAL $\text{CuCr}_{0,98}\text{Ni}_{0,02}\text{O}_2$ DENGAN MENGGUNAKAN X-RAY DIFFRACTION (XRD) DAN SCANNING ELECTRON MICROSCOPE (SEM). *Indonesian Physical Review*, 3(1), 6–14. <https://doi.org/10.29303/ipr.v3i1.37>
- Fadlisyah, Zarkasyi, Yasir Amani, K. (2022). PENGENALAN LAFADZ SALAM MELALUI SUARA MENGGUNAKAN TRANSFORMASI FOURIER DAN MELLIN. *Jurnal Teknologi Terapan and Sains*, 3(2), 757–774. <https://doi.org/https://doi.org/10.29103/tts.v3i2.8159>
- Hibertus, A. (2025). Penentuan Model Terbaik dalam Pengaruh Lapangan Usaha dan Nilai Ekspor Terhadap Pertumbuhan Ekonomi di Indonesia. *Jurnal Sains Ekonomi Dan Edukasi*, 2(1), 1–11. <https://doi.org/https://doi.org/10.62335/m058dk21>
- Hill, R. J. (1992). International union of crystallography commission on powder diffraction rietveld refinement round Robin. I. Analysis of standard x-ray and neutro n data for PbSO_4 . *Journal of Applied Crystallography*, 25(pt 5), 589–610. <https://doi.org/10.1107/S0021889892003649>
- Hook, J. L., & Courtney, M. (2010). Employment of former foster youth as young adults: evidence from the Midwest Study. *Chapin Hall Issue Brief, March*, 1–13.
- Illahi, R. R., Budianto, A., Mubarakah, Z. R., Kurniawidi, D. W., & Alaa, S. (2023). Workshop Analisis Kristalografi Dengan Metode Rietveld Menggunakan Aplikasi X ' Pert High score. *Jurnal Pengabdian Magister Pendidikan IPA Original*, 6(2), 350–354. <https://doi.org/10.29303/jpmp.v6i2.4463>
- Irzaman, Sudiana, Y., Hikam, M., Loeksanto, W., & Barmawi, M. (2000). Analisis Struktur Kristal dan Full Width Half Maximum (FWHM) dengan Metode Rietveld (Studi Kasus: Kalsit (CaCO_3)). *Jurnal Kontribusi Fisika Indonesia*, 11(2), 41–48.

- Izumi, F. (1989). Rietan: a Software Package for the Rietveld Analysis and Simulation of X-Ray and Neutron Diffraction Patterns. *The Rigaku Journal*, 6(1), 10–20.
- Lin, L. (2011). Density functional theory and nuclear quantum effects. *Princeton University*.
- Mapasha, R. E. (2011). Theoretical studies of graphene and graphene-related materials involving carbon and silicon. *University of Pretoria (South Africa)*, 1–137.
- Ricky Julianto, & Derry Alamsyah. (2021). Pengenalan Ekspresi Wajah Menggunakan Metode Svm Dengan Transformasi Fourier Dan Pca. *Klik - Jurnal Ilmu Komputer*, 2(1), 1–12. <https://doi.org/10.56869/klik.v2i1.282>
- Suhirwan, Prihantoro, K., Prakoso, L. Y., Aritonang, S., Pramono, B., Toruan, T., & Yusuf. (2021). *NATIONAL DEFENSE STRATEGY* (A. Pawar & M. Kusmiati (eds.)). CV. AKSARA GLOBAL AKADEMIA.
- Suminta, S., & Las, T. (2018). PENGHALUSAN STRUKTUR SANGKAR KRISTAL MORDENIT DAN KLINOPTILOLIT ALAM DENGAN METODE RIETVELD. *Jurnal Sains Materi Indonesia*, 7(2), 73–78. <https://doi.org/https://doi.org/10.17146/jsmi.2006.7.2.5004>
- Sutrisno, H. (2012). TRANSFORMASI POLIMORFIK DAN KARAKTERISASI MIKROSTRUKTUR FASA TiO₂ YANG DIHASILKAN MELALUI KALSINASI NANOPITA HIDROGEN TITANAT. *Jurnal Sains Dasar*, 1(1), 18–32.
- Wahyuni, S. (2016). PROFIL DENSITAS MODEL THOMAS-FERMI-DIRAC-VON WEIZSACKER. *Jurnal Sains Dan Teknologi*, 14(1), 59–65.