

Simulasi Interaksi Elektron dengan Bahan Berbasis *Single Scattering Model*

Robi Dany Riupassa^{1,a)} dan Khairul Basar^{2,b)}

¹Sekolah Tinggi Teknologi Bandung,
Jl. Soekarno Hatta no. 378 Bandung, Indonesia, 40235

²Kelompok Keilmuan Fisika Nuklir dan Biofisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesha no. 10 Bandung, Indonesia, 40132

^{a)} robiriu@gmail.com (corresponding author)

^{b)} khbasar@fi.itb.ac.id

Abstrak

Interaksi berkas elektron dengan bahan merupakan hal yang cukup kompleks untuk ditinjau. Hamburan elektron oleh inti atom bahan terjadi berkali-kali sampai elektron mencapai energi minimumnya. Informasi tentang kemungkinan keberadaan elektron pada energi minimum tersebut seringkali penting dalam studi tentang bahan, fisika medis, sel surya, dan baterai nuklir (betavoltaic). Beberapa pendekatan atau model telah dikembangkan untuk merekam jejak elektron selama berinteraksi dengan bahan. Salah satu model yang paling sederhana yaitu single scattering model yang didalamnya memanfaatkan metode simulasi monte carlo. Pada penelitian ini dilakukan simulasi lintasan elektron dalam bahan yang keluarannya berupa posisi elektron saat mencapai energi minimumnya. Single scattering model disini diselesaikan dengan menggunakan Visual Basic Application pada Microsoft Excel.

Kata-kata kunci: Lintasan elektron, Single Scattering Model, Metode Monte Carlo, VBA

PENDAHULUAN

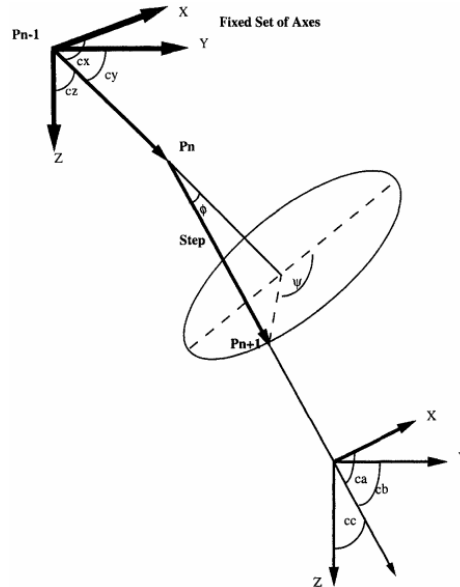
Interaksi antar partikel dalam bahan seringkali terjadi ketika atom bahan tersebut mengalami gangguan dari luar. Gangguan diberikan misalnya untuk kebutuhan rekayasa sifat bahan atau pemanfaatan energi yang dipancarkan akibat atom bahan yang terganggu. Hamburan elektron merupakan salah satu bentuk interaksinya. Sebagai bentuk fenomena fisis yang sifatnya probabilistik, elektron yang terhambur cukup kompleks untuk ditinjau mulai dari awal tumbukan sampai mencapai energi minimumnya. Mempelajari fenomena ini dapat dilakukan secara eksperimen maupun simulasi komputer. Salah satu metode yang sering digunakan dalam simulasi kasus probabilistik yaitu metode monte carlo. Dengan metode monte carlo dikembangkan beberapa model untuk simulasi hamburan elektron. Model yang cukup sederhana yang dikembangkan yaitu *single scattering model*. Dengan model ini dapat direkam jejak elektron sejak tumbukan pertama sampai tumbukan terakhir pada kondisi energi minimumnya. Keluaran simulasi dengan model ini yang berupa posisi dan energi elektron merupakan informasi penting dalam penelitian tentang bahan.

Posisi elektron terjauh dalam bahan atau jangkauan maksimum elektron menentukan bentuk atau desain dari bahan untuk banyak sekali tujuan penelitian. Misalkan saja dalam penelitian sel surya dan baterai nuklir, daerah deplesi dan ketebalan lapisan bahan ditentukan berdasarkan jangkauan maksimum elektron [2]. Dalam bidang kedokteran, hidrogel yang digunakan sebagai pembalut luka diperoleh dari interaksi berkas elektron dengan bahan polimer melalui proses ikatan silang [3]. Pada penelitian ini, dilakukan simulasi interaksi elektron dengan bahan menggunakan *single scattering model* untuk melihat distribusi jangkauan

maksimumnya. Algoritma perhitungannya diselesaikan dengan menggunakan *Visual Basic Application* pada *Microsoft Excel 2013*. Sebagai perbandingan maka digunakan beberapa bahan untuk uji simulasinya.

SINGLE SCATTERING MODEL

Defenisi posisi elektron terhadap koordinat acuan untuk setiap tumbukan seperti yang terlihat pada gambar 1. Titik P_n menyatakan posisi elektron saat terjadi tumbukan ke- n . kondisi untuk tumbukan sebelum dan sesudah ke- n dinyatakan dengan $n-1$ dan $n+1$. Arah kosinus dari vektor posisi elektron dinyatakan dengan $c_x, c_y,$ dan c_z untuk tumbukan ke- n , dan $c_a, c_b,$ dan c_c untuk tumbukan ke- $n+1$.



Gambar 1. Posisi elektron terhadap koordinat acuan pada setiap tumbukan [1]

Bahan yang didalamnya elektron datang akan berinteraksi didefinisikan berdasarkan nomor atom (Z), nomor massa (A), densitas (ρ), dan ketebalan bahan. Energi potensial ionisasi (J) dari bahan diberikan oleh hubungan

$$J = \left[9.76Z + \frac{58.5}{Z^{0.19}} \right] \cdot 10^{-3} \tag{1}$$

J dalam KeV. Jarak bebas rerata, λ (*mean free path*) yang menyatakan jarak yang mungkin untuk terjadi satu tumbukan dengan tumbukan berikutnya diberikan oleh

$$\lambda = \frac{A}{N_a \rho \sigma_E} \tag{2}$$

N_a merupakan bilangan Avogadro (6×10^{23}).

Dalam model ini, hanya tumbukan elastik yang diperhitungkan dalam perhitungan. *Total screened Rutherford elastic cross section* (dalam cm^2/atom) yang bergantung pada *screening factor* α dinyatakan dengan

$$\sigma_E = 5.21 \times 10^{-21} \frac{Z^2}{E^2} \frac{4\pi}{\alpha(1+\alpha)} \left(\frac{E+511}{E+1024} \right)^2 \tag{3}$$

Sedangkan α diberikan oleh hubungan

$$\alpha = 3.4 \times 10^{-3} \frac{Z^{0.67}}{E} \tag{4}$$

E adalah energi elektron (dalam KeV).

Variabel acak (*random variable*) yang menjadi ciri khas metode monte carlo dalam *single scattering model* digunakan untuk menghitung jarak antar tumbukan (step), sudut hamburan ϕ dan ψ . Masing-masing dinyatakan oleh

$$step = -\lambda \ln(RND) \tag{5}$$

$$\cos \phi = 1 - \frac{2\alpha RND}{(1 + \alpha - RND)} \tag{6}$$

$$\psi = 2\pi RND \tag{7}$$

Dengan *RND* adalah variabel acak yang bernilai antara 0 dan 1.

Posisi pada titik P_{n+1} untuk tumbukan ke- $n+1$ yang dinyatakan dengan X_{n+1} , Y_{n+1} , dan Z_{n+1} dihitung dengan

$$X_{n+1} = x_n + step.ca \tag{8}$$

$$Y_{n+1} = y_n + step.cb \tag{9}$$

$$Z_{n+1} = z_n + step.cc \tag{10}$$

ca, *cb*, dan *cc* adalah sudut hamburan untuk posisi yang baru terhadap sumbu X,Y, dan Z. masing-masing diperoleh dengan hubungan

$$ca = (cx \cdot \cos \phi) + (V1.V3) + (cy.V2.V4) \tag{11}$$

$$cb = (cy \cdot \cos \phi) + (V4.(cz.V1 - cx.V2)) \tag{12}$$

$$cc = (cz \cdot \cos \phi) + (V2.V3) - (cy.V1.V4) \tag{13}$$

V1, *V2*, *V3*, dan *V4* pada persamaan (11), (12), dan (13) dihitung berdasarkan hubungan

$$V1 = AN \cdot \sin \phi \tag{14}$$

$$V2 = AN \cdot AM \cdot \sin \phi \tag{15}$$

$$V3 = \cos \psi \tag{16}$$

$$V4 = \sin \psi \tag{17}$$

AN dan *AM* masing-masing merupakan hubungan yang menyatakan bentuk berikut

$$AN = -(cx / cz) \tag{18}$$

$$AM = \frac{1}{\sqrt{(1 + AN \cdot AN)}} \tag{19}$$

Besar energi pada titik yang merupakan posisi baru elektron dihitung dengan hubungan

$$E' = E - step * \rho * (dE / dS) \tag{20}$$

dE/dS pada persamaan (20) adalah *stopping power* yang dihitung dengan *Bethe equation* yang dimodifikasi dan dinyatakan dengan

$$\frac{dE}{dS} = -78500 * \frac{Z}{AE} * \ln \left(\frac{1.166(E + 0.85J)}{J} \right) \tag{21}$$

Single scattering model yang digunakan dalam penelitian ini akan melakukan iterasi untuk terus menghitung setiap posisi, sudut hamburan, dan energi elektron pada titik yang baru setelah terjadi tumbukan. Iterasi baru akan dihentikan jika energi elektron telah mencapai energi minimumnya (0,5 KeV).

PARAMETER SIMULASI

Beberapa bahan yang digunakan untuk uji simulasi pada penelitian ini seperti pada tabel 1. Untuk semua bahan yang diuji ditetapkan ketebalannya sebesar 10^7 nm.

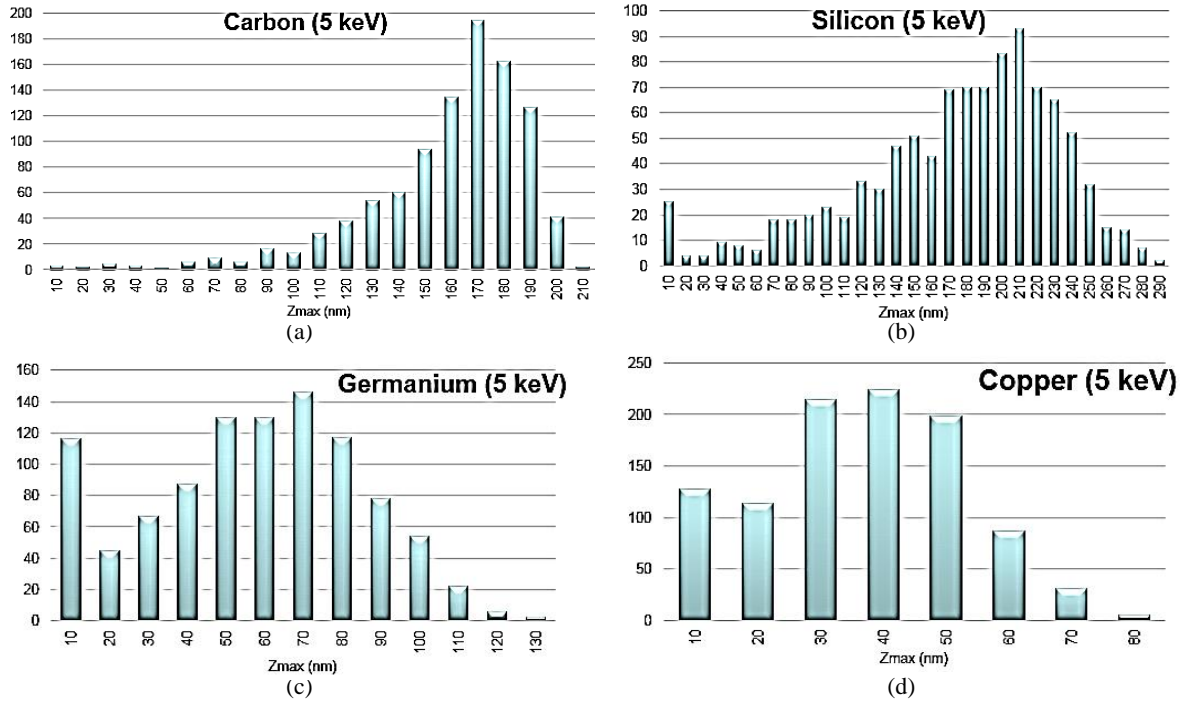
Tabel 1. Nomor atom, nomor massa, dan densitas beberapa bahan yang diuji

| Bahan | Nomor Atom, Z | Nomor Massa, A | Densitas, ρ (gr/cm ³) |
|----------------|---------------|----------------|--|
| Carbon (C) | 6 | 12 | 3.51 |
| Silicon (Si) | 14 | 28 | 2.33 |
| Germanium (Ge) | 32 | 72.64 | 5.32 |
| Tembaga (Cu) | 29 | 63.54 | 8.92 |

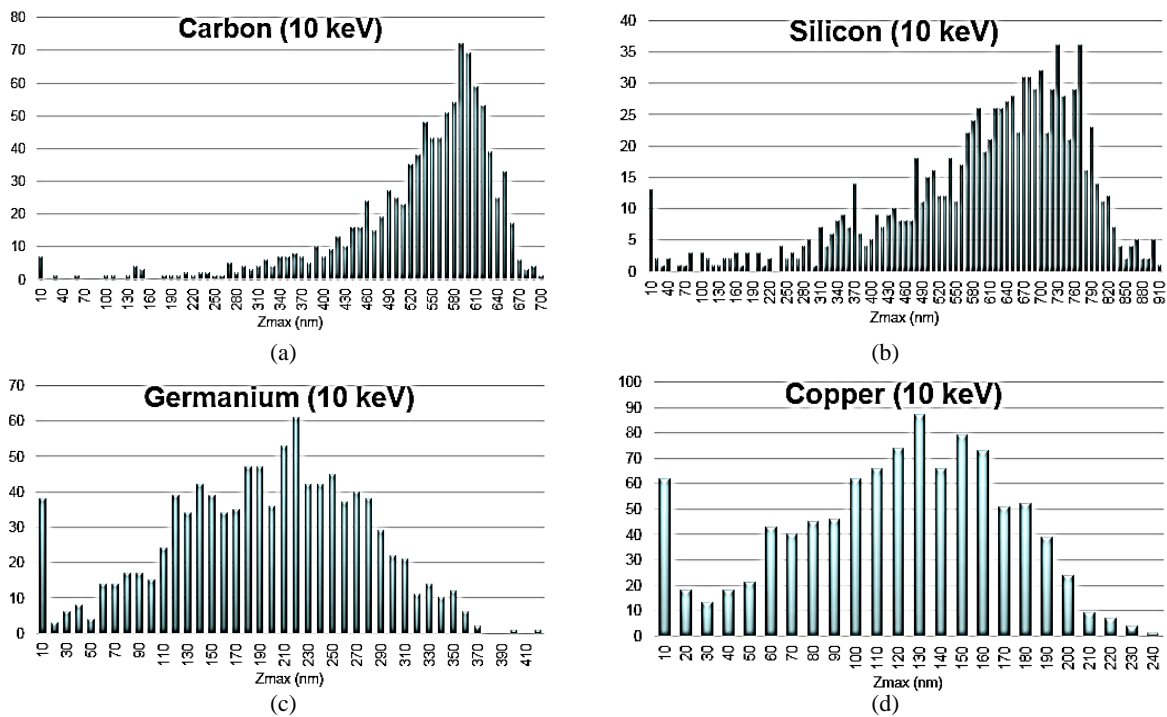
Distribusi jangkauan maksimum dari elektron yang masuk ke bahan akan memberikan hasil yang baik jika semakin banyak elektron yang ditembakkan. Elektron yang digunakan dalam penelitian ini sejumlah 1000 elektron dengan besar energi datang divariasikan pada 5, 10 dan 20 KeV. Simulasi ini tidak untuk tinjauan *backscattered electron*.

HASIL DAN DISKUSI

Hasil simulasi memberikan distribusi jangkauan maksimum elektron (Z_{max}) untuk beberapa bahan seperti pada gambar 2, 3, dan 4. Gambar 2 menampilkan hasil simulasi untuk energi elektron datang 5 KeV, gambar 3 untuk energi elektron datang 10 KeV, dan gambar 4 untuk energi elektron datang 20 KeV.

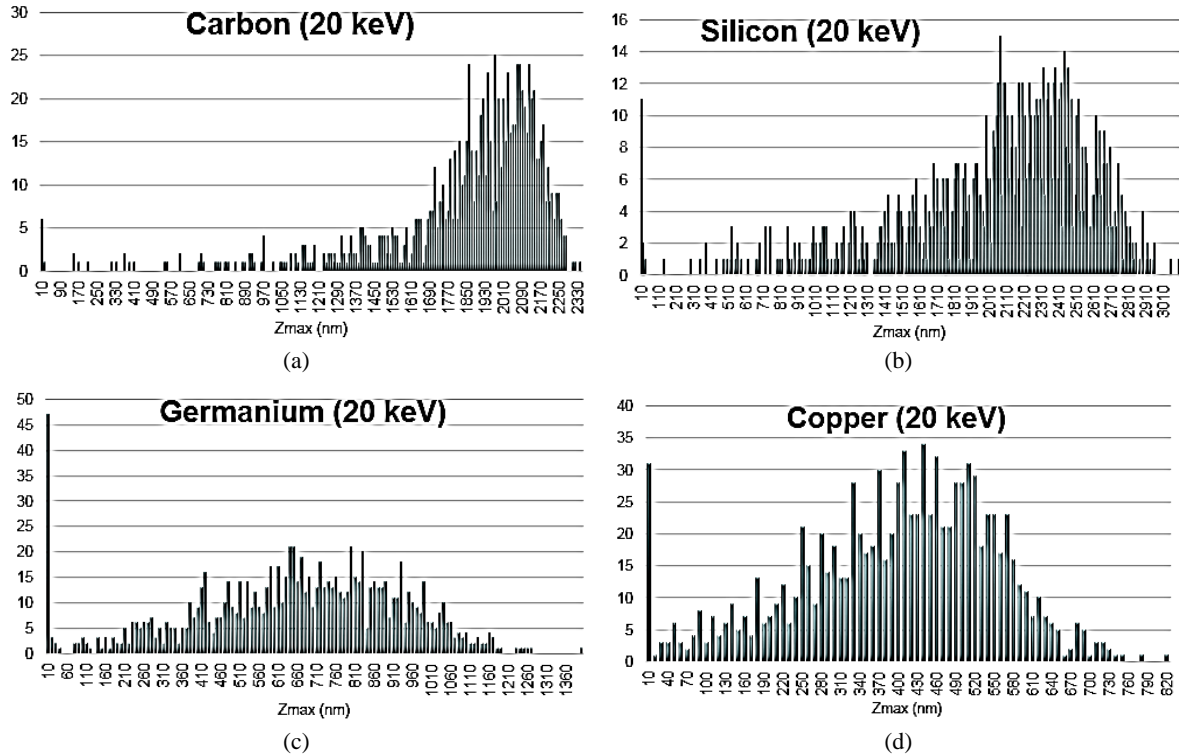


Gambar 2. Distribusi Z_{max} untuk energi elektron datang 5 KeV



Gambar 3. Distribusi Z_{max} untuk energi elektron datang 10 KeV

Pada dasarnya iterasi monte carlo untuk *single scattering model* yang dilakukan ini dapat memperoleh data baik energi maupun posisi untuk setiap tumbukan. Namun yang disajikan pada gambar 2, 3, dan 4 merupakan keadaan pada saat elektron yang ditembakkan mencapai energi minimumnya. Hal ini berkaitan dengan tujuan penelitian ini yaitu untuk meninjau jangkauan maksimum elektron. Selain itu, hasil yang ditampilkan pada gambar 2, 3, dan 4 diambil untuk posisi sudut elektron datang yaitu tegak lurus dengan bidang permukaan bahan (arah kosinus $\epsilon_z = 1$).



Gambar 4. Distribusi Z_{max} untuk energi elektron datang 20 KeV

Informasi penting dari distribusi jangkauan maksimum Z_{max} bukanlah terletak pada seberapa jauh elektron dapat masuk ke bahan. Tetapi yang dilihat adalah jumlah terbanyak elektron yang dapat mencapai jarak tertentu. Secara kuantitatif jumlahan elektron dari total 1000 elektron yang ditembakkan beserta jarak tempuhnya dapat dilihat seperti pada tabel berikut.

Tabel 2. Jumlah elektron terbanyak dan jarak tempuhnya didalam bahan.

| Bahan | Energi Elektron Datang (keV) | Jumlah Elektron | Jarak Maksimum, Z_{max} (nm) |
|----------------|------------------------------|-----------------|--------------------------------|
| Carbon (C) | 5 | 195 | 170 |
| | 10 | 72 | 590 |
| | 20 | 25 | 1970 |
| Silicon (Si) | 5 | 93 | 210 |
| | 10 | 36 | 730 |
| | 20 | 15 | 2070 |
| Germanium (Ge) | 5 | 146 | 70 |
| | 10 | 61 | 220 |
| | 20 | 21 | 800 |
| Tembaga (Cu) | 5 | 224 | 40 |
| | 10 | 87 | 130 |
| | 20 | 34 | 440 |

Nilai jangkauan maksimum Z_{max} pada tabel 2 inilah yang dipakai sebagai nilai hasil simulasi. Nilai ini diharapkan dapat menjawab persoalan probabilistik interaksi elektron pada beberapa bahan yang diuji. Perbedaan jumlah elektron dan jarak maksimumnya tentu bergantung pada karakteristik bahan dan energi elektron datang.

Untuk bahan yang sama tetapi energi elektron datang yang berbeda akan menunjukkan hasil bahwa semakin besar energi elektron datang maka distribusi Z_{max} akan semakin bervariasi. Artinya bahwa untuk kondisi ini, energi elektron datang yang semakin besar maka semakin besar pula kemungkinan Z_{max} yang dapat ditempuh. Selanjutnya untuk bahan yang berbeda tetapi energi elektron datangnya sama, densitas bahan berbanding terbalik dengan Z_{max} yang ditempuh. Semakin besar densitas bahan maka semakin pendek jangkauan maksimumnya. Hal ini sesuai dengan teori karena pada kondisi ini elektron datang akan mengalami lebih banyak tumbukan sehingga energinya cepat berkurang dan mencapai energi minimumnya. Sehingga dari hasil ini terlihat bahwa untuk energi elektron datang berapapun silikon selalu memiliki Z_{max} lebih besar dari bahan yang lain. Sebaliknya dengan tembaga, karena memiliki densitas yang lebih besar maka Z_{max} untuk energi elektron datang berapapun cenderung lebih kecil. Beberapa kondisi seperti terlihat pada distribusi untuk semua bahan juga menunjukkan adanya sejumlah elektron yang mengalami *backscattering* pada daerah dekat permukaan bahan.

Jangkauan maksimum elektron merupakan parameter penting dalam penerapannya pada beberapa kajian ilmu. Misalkan saja dalam penentuan ketebalan lapisan (layer) pada sel betavoltaic. Sifat probabilistik dari interaksi elektron dengan bahan harus dapat diselesaikan dengan baik dan tepat agar tidak terjadi kesalahan pada tahap fabrikasi. Terkait hal ini maka semua parameter penting dalam simulasi harus diperhitungkan. Dalam penelitian ini, secara teori kondisi fisis untuk tinjauan tumbukan elastik yang dialami elektron ketika masuk ke bahan telah terpenuhi. Namun seberapa besar nilai tepat dari jangkauan maksimum elektron yang diperoleh dapat digunakan masih perlu kajian lebih lanjut. Hal ini dikarenakan beberapa aspek dari sistem fisis yang tidak ditinjau dalam simulasi ini. *Single scattering model* yang digunakan hanya meninjau hamburan elastik serta juga terbatas pada persoalan *backscattered electron*. Uji coba dengan lebih banyak elektron yang ditembakkan juga masih perlu dilakukan. Sumber elektron yang ditembakkan dalam simulasi ini masih berupa sumber titik sedangkan pada kenyataannya seringkali digunakan sumber yang memiliki luas permukaan.

KESIMPULAN

Simulasi interaksi elektron dengan *single scattering model* menunjukkan bahwa jangkauan maksimum tempuh elektron bergantung pada densitas bahan. Secara berurutan densitas bahan dari terkecil sampai terbesar berbanding terbalik dengan jangkauan maksimum yang dicapai. Mengingat bahwa model ini merupakan model yang sederhana dan terbatas pada beberapa asumsi fisis, maka perlu dikembangkan lagi untuk kajian lebih lanjut. Pengembangan yang bisa dilakukan salah satunya yaitu dengan uji coba pada penentuan cross section yang lain misalnya dengan Mott cross section serta tetap meninjau elektron yang terpantul pada permukaan bahan. Selain itu, validasi hasil simulasi melalui eksperimen sangat penting mengingat kompleksitas keacakan dari hamburan elektron tersebut.

UCAPAN TERIMA KASIH

Ucapan terima kasih disampaikan kepada pembimbing penulis sewaktu kuliah di Magister Fisika ITB, MENRISTEK DIKTI melalui program beasiswa Pra S2 – S2 3T, dan semua pihak atas dukungan berupa diskusi terkait topik penelitian ini.

REFERENSI

1. Joy, D C, *Monte Carlo Modelling for Electron Microscopy and Microanalysis*. Oxford University Press (1995)
2. R.D. Riupassa dan Khairul Basar, *Study on design of betavoltaic nuclear battery based on Si and GaN semiconductor*, THE 5th INTERNATIONAL CONFERENCE ON MATHEMATICS AND NATURAL SCIENCES, di Bandung, Indonesia (2015)
3. Suharni, dkk, *Kajian penentuan kedalaman penetrasi berkas elektron 350 keV pada hidrogel untuk pembalut luka*, Prosiding PPI-PDIPTN, ISSN : 0216-3128 (2007)