



Hak Cipta Dilindungi Undang-Undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber:

- Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah.
- Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar Unand.

2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin Unand.

SINTESIS DAN ANALISIS STRUKTUR PIEZOELEKTRIK BISMUTH NATRIUM TITANAT BARIUM TITANAT (BNT-BT) DENGAN METODE REITVELD

SKRIPSI



**HAMDI PUTRA
07135019**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG 2012**

**Sintesis dan Analisis Struktur Piezoelektrik Bismuth Natrium Titanat
Barium Titanat(BNT-BT) dengan Metode Rietveld
ABSTRAK**

Penentuan struktur kristal piezoelektrik yang berbahan dasar BNT-BT (Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat) telah dilakukan dengan metode Rietveld. Data difraksi dari bahan BNT-BT (Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat) diukur dengan difraktometer sinar-X (*phillips*). Sintesis bahan BNT-BT (Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat) dilakukan dengan metode *solid state reaction* yang disintering pada temperatur 1000⁰C yang selanjutnya dianalisis dengan menggunakan program RIETAN didapatkan hasil bahwa BNT-BT (Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat) berstruktur kristal *perovskite* Tetragonal pada penambahan 7% mol dan 20% mol BT (Barium Titanat) ke dalam bahan BNT (Bismuth Natrium Titanat). Hasil penghalusan (*refinement*) dari program RIETAN untuk bahan 93% mol BNT-7% mol BT yang konstanta kisi $a=b=5,75 \text{ \AA}$ $c=7,17 \text{ \AA}$ dan sudut $\alpha=\beta=\gamma=90^0$ dan untuk bahan 80% mol BNT-20% mol BT memiliki konstanta kisi $a=b=4,48 \text{ \AA}$ $c=4,69 \text{ \AA}$ dan sudut $\alpha=\beta=\gamma=90^0$

Kata Kunci :

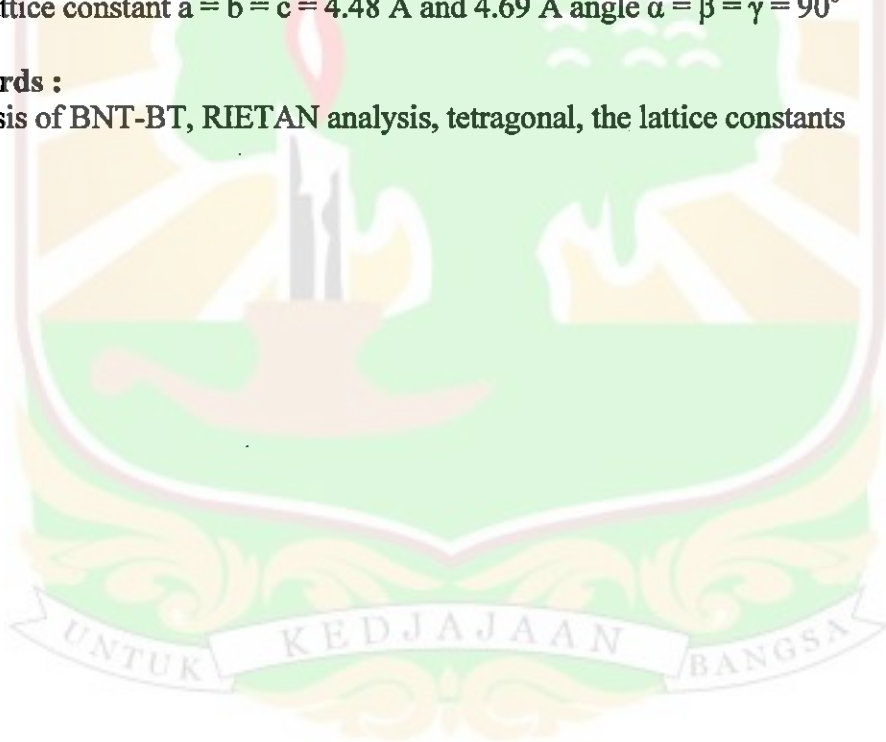
Sintesis BNT-BT, Analisis Rietan, tetragonal, konstanta kisi

**Synthesis and Piezoelectric Bismuth Sodium Titanate Barium Titanate
(BNT-BT) Structure Analysis with the Rietveld method
ABSTRACT**

Piezoelectric crystal structure determination based on BNT-BT (Bismuth Sodium Titanate-Barium Titanate) has been performed by Rietveld method. Diffraction data of BNT-BT (Bismuth Sodium Titanate-Barium Titanate) materials measured by X-ray diffractometer (Phillips). Synthesis of BNT-BT material (Bismuth Sodium Titanate-Barium Titanate) is done by solid state reaction method at sintering temperature of 1000°C which further analyzed using RIETAN program showed that BNT-BT (Bismuth Sodium Titanate-Barium Titanate) is tetragonal perovskite the crystal structure of addition of 7% mol and 20% mol BT (Barium Titanate) into the material BNT (Bismuth Sodium Titanate). The results of refinement (refinement) of the program for the ingredient RIETAN, 93 % mol BNT-7% mol BT of the lattice constants $a = b = c = 5.75 \text{ \AA}$ and $7.17 \text{ \AA}$ angle $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ and 80% mol for materials BNT - 20 % mol BT has a lattice constant $a = b = c = 4.48 \text{ \AA}$ and $4.69 \text{ \AA}$ angle $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

Keywords :

Synthesis of BNT-BT, RIETAN analysis, tetragonal, the lattice constants



DAFTAR ISI

Halaman

HALAMAN JUDUL

HALAMAN PERSETUJUANi

KATA PENGANTAR..... ii

ABSTRAKv

ABSTRACTvi

DAFTAR ISI..... vii

DAFTAR TABELix

DAFTAR GAMBARx

DAFTAR LAMPIRANxi

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar belakang 1

1.2 Tujuan Penelitian3

1.3 Manfaat Penelitian3

1.4 Batasan Masalah4

BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Tinjauan Pustaka5

2.2 Landasan Teori6

2.2.1 Piezoelektrik 6

2.2.2 Bismut Natrium Titanat dan Barium Titanat 7

2.2.3 Struktur Kristal 10

2.2.4 Bidang Kristal 12

2.2.5 Kristal Perovskite 13

2.3 Difraksi Sinar-X	15
2.4 Metode Analisis Rietveld	19
2.4.1 Program RIETAN (<i>Rietveld Analysis System</i>)	22
BAB III METODE PENELITIAN	
3.1 Waktu dan Lokasi Penelitian	27
3.2 Alat dan Bahan	27
3.3 Tatalaksan Penelitian	29
3.4 Sintesis Bahan	30
3.5 Analisis RIETAN	32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	
4.1. Hasil dan Pembahasan Data Hasil XRD (X-ray Diffraktometer)	34
4.3 Hasil dan Pembahasan Data Hasil Program RIETAN (<i>Rietveld Analysis</i>)	36
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	
5.1 Kesimpulan	45
5.2 Saran	46
DAFTAR KEPUSTAKAAN	
LAMPIRAN	

DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2.1 : Sel satuan konvensional dan 14 kisi Bravais	11
Tabel 3.1 : Perbandingan Mol	30
Tabel 3.2: Komposisi BNTBT (Bismut Natrium Titanat dan Barium Titanat)	30
Tabel 4.1: Faktor-Reabilitas keberhasilan dari penghalusan Rietan dari bahan BNT-BT	39
Tabel 4.2: Puncak-puncak yang muncul pada bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dari hasil penghalusan Rietan	40
Tabel 4.3: Puncak-puncak yang muncul pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dari hasil penghalusan Rietan.....	41
Tabel 4.4: Konstanta kisi, dan grup ruang dari bahan BNT-BT	43
Tabel 4.5: Koordinat fraksional atom(x,y,z), faktor hunian (penempatan) atom (g) dari bahan B.....	43

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 : (A) Sebelum diberi tekanan atau medan listrik. (B) Ketika diberi medan listrik, material memanjang. (C) Diberi medan listrik berlawanan, material memendek. (D) Ketika diberi tekanan, induksi polarisasi dan tegangan luar terjadi.....	7
Gambar 2.2: Vektor posisi tiga dimensi	10
Gambar 2.3: Struktur Perovskite	14
Gambar 3.1: Peralatan penelitian.....	28
Gambar 3.2: Diagram alir sintesis bahan-bahan BNTBT.....	29
Gambar 3.3: Diagram pewaktuan proses sintering	31
Gambar 4.1: Pola difraksi Literatur (Saxena, 2010) dengan bahan 92% mol BNT-8% mol BT dibandingkan dengan penambahan 93% mol BNT-7% mol BT dan 80% mol BNT-20% mol BT	35
Gambar 4.2: Pola difraksi hasil program RIETAN-94 untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT	37
Gambar 4.3: Pola difraksi hasil program RIETAN-94 untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT	38

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Data hubungan intensitas dengan sudut 2θ dalam bentuk data numerik dan disusun dengan format data.INT

Lampiran 2. Data input parameter variabel kuadrat terkecil non linier dengan format data.INS

Lampiran 3. Data Pola difraksi hasil program RIETAN-94 untuk bahan BNT BT dalam format data. LST

Lampiran 4. Foto Bahan Penelitian

Lampiran 5. Foto Peralatan Penelitian

Lampiran 6. Konversi Satuan Tekanan Psi ke N/m^2 dan Daftar Sinkgkatan



BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penelitian bidang fisika material dalam beberapa tahun belakangan ini mengalami perkembangan yang cukup pesat. Salah satunya adalah material piezoelektrik. Material piezoelektrik merupakan bahan yang sangat menarik untuk diteliti dan dikembangkan karena memiliki sifat yang reversibel yaitu apabila apabila mendapatkan tekanan, akan memberikan respon berupa tegangan listrik, namun sebaliknya, apabila tegangan listrik diaplikasikan pada bahan maka akan terjadi perubahan dimensi mekanik (Sharma, 2006).

Sifat reversibel dari material piezoelktrik tersebut menjadikan material piezoelektrik memiliki cakupan aplikasi yang luas, menurut Sharma (2006) antara lain digunakan pada sistem sonar bawah air, detektor asap buzzers yang bersifat aktif dan pasif untuk bidang olahraga, kedirgantaraan dan sektor otomotif. Material Piezoelektrik juga dapat diaplikasikan pada pembangkit daya motor kecil, serta alat-alat berteknologi tinggi. Dibidang kesehatan, material piezoelektrik berperan sebagai *probe* dari peralatan USG (Ultasonography) yang pada bahan piezoelektriknya dapat menjadi konverter antara energi listrik dan gerakan mekanis bahan.

Penggunaan bahan piezoelektrik dalam pengaplikasiannya selama ini bergantung kepada material *Lead Zinconium Titanat* (PZT). Karena memiliki sifat piezoelektrik yang kuat yaitu dengan nilai konstanta pizoelektrik $d_{33} = 460 \text{ pC/N}$, dan suhu Curie yang tinggi yaitu $450 \text{ }^{\circ}\text{C}$ (Donnelly, dkk, 2007). Akan tetapi

dampak negatif jangka panjang yang ditimbulkannya sangatlah berbahaya, PZT tersebut mengandung timbal (Pb) lebih dari 60% (Hussain dkk, 2009). Timbal merupakan bahan yang mengandung racun dan sangat berbahaya karena dapat menyebabkan kerusakan pada ginjal, otak dan sistem tubuh lainnya. Pada bidang industri berupa limbah hasil produksi yang pada akhirnya mencemari lingkungan.

Oleh sebab itu maka banyak peneliti mulai mengembangkan bahan piezoelektrik yang ramah lingkungan (bebas timbal, Pb). Salah satunya adalah Bismut Natrium Titanat (BNT), keluarga keramik berstruktur bismuth telah menjadi pilihan yang tepat untuk alternatif pengganti PZT karena mempunyai sifat piezoelektrik kuat. Dilihat dari Bismut Natrium Titanat (BNT) yang memiliki konstanta piezoelektrik $d_{33} = 73 \text{ pC/N}$ (Aksel and Jones, 2010) serta memiliki sifat *ferroelectricity* kuat pada suhu kamar dengan suhu Curie T_c 320 °C (Smolenskii, 1961; Hagiyeve, 1984; Takenaka, dkk, 1991). Sintesis Bismut Natrium Titanat (BNT) yang dilakukan dewasa ini di laboratorium PTBIN-BATAN telah menunjukkan terbentuknya sistem kristal perovskite dengan menggunakan metode *solid state reaction*, sebagaimana dilaporkan oleh S.Ahda dkk, 2010. Bahan piezoelektrik Bismut Sodium Titanat (BNT) inilah terus dikembangkan dan diteliti, agar dapat meningkatkan performa dari aplikasinya nanti.

Bismut Sodium Titanat (BNT) yang ramah lingkungan tanpa timbal (Pb) sebagai generasi baru pengganti *Lead Zirconium Titanat* (PZT). Sintesa yang dilakukan adalah menggunakan metode *solid state reaction* dan kemudian dilakukan studi struktur kristal dengan variasi penambahan Barium Titanat (BT). Penambahan Barium Titanat (BT) ini diharapkan sebagai bahan *dopant* dari

Bismut Sodium Titanat (BNT) sehingga akan meningkatkan performa dari bahan Bismut Sodium Titanat (BNT) itu sendiri.

Dalam hal mengidentifikasi Bismut Sodium Titanat (BNT) yang dilakukan penambahan Barium Titanat (BT) kemudian digunakan difraktometer sinar-X, yang merupakan salah satu alat untuk mengidentifikasi fasa bahan kristalin. Dalam mengidentifikasi fasa kristalin tersebut, data difraksi dianalisis dengan suatu metode yang disebut metode Rietveld (Rietveld, 1967; Rietveld, 1969). Dalam penelitian ini, analisis data difraksi tersebut dilakukan dengan bantuan perangkat lunak RIETAN. Sebuah program analisis data difraksi yang dibuat berdasarkan metode Rietveld yang dikembangkan Fujio Izumi pada tahun 1987 (Izumi, 1993).

1.2 Tujuan Penelitian

Tujuan yang ingin dicapai dari penelitian ini adalah :

1. Mensintesis bahan piezoelektrik Bismut Sodium Titanat-Barium Titanat (BNT-BT) dengan metoda *solid-state reaction*.
2. Mengidentifikasi fasa bahan Bismut Sodium Titanat-Barium Titanat (BNT-BT) dengan metode analisis Rietveld menggunakan *software* RIETAN.

1.3 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah:

1. Diperoleh ilmu pengetahuan dan keterampilan dalam mengolah data difraksi sinar-X menggunakan perangkat lunak RIETAN.
2. Didapat tambahan pengetahuan (informasi) tentang bahan piezoelektrik ramah lingkungan.

3. Menambah referensi baru bagi pengembangan bahan piezoelektrik, sehingga diharapkan bermanfaat untuk pengembangan dan aplikasi bahan piezoelektrik di kemudian hari di Indonesia.

1.3 Batasan Masalah

Dalam penelitian ini, disintesis bahan Bismut Sodium Titanat (BNT) dengan penambahan (doping) Barium Titanat (BT). Metode sintesis yang digunakan adalah metode *solid state reaction*. Identifikasi fasa bahan dilakukan teknik difraksi sinar-X dengan metode analisis Rietveld; dalam hal ini digunakan perangkat lunak RIETAN karya Fujio Izumi.



BAB II TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Tinjauan Pustaka

Penelitian terdahulu yang telah melatar belakangi penelitian tentang sintesis material piezoelektrik BNT-BT bebas timbal adalah :

- Penelitian yang dilakukan oleh Saxena (2010), sebagai Tesis pada Jurusan Teknik Material, Institut Teknologi Nasional Rourkela, Orissa, Hindia. Tesis ini tentang penambahan bahan Barium Titanat (BT) kedalam bahan Bismut Sodium Titanat (BNT). Sintesis dilakukan dengan metode *solid state reaction*, suhu sintering digunakan sebesar 1150°C . Struktur yang diperoleh pada penambahan 8% mol BT kedalam bahan 92% mol BNT adalah rombohedral.
- Penelitian tentang sintesis dan karakterisasi material piezoelektrik BNT-BT yang dilakukan oleh Nofitriana (2010) di Jurusan Fisika Universitas Andalas. Menggunakan metoda *solid state reaction* dalam mensintesis bahan. Suhu sintering yang didapatkannya 1000°C . Identifikasi fasa material dilakukan dengan cara membandingkan data difraksi sinar-X hasil dari penelitian terhadap data pada Tabel Hanawalt.

Pada penelitian ini dilakukan sintesis Bismuth Natrium Titanat (BNT) dengan variasi penambahan Barium Titanat (BT). Penambahan $x\text{BaTiO}_3$, kedalam $1-x\text{Bi}_{0,5}\text{Na}_{0,5}\text{TiO}_3$ dengan nilai x adalah 0,07 dan 0,2. Proses homogenisasi dilakukan dengan pencampuran dan penggerusan sampel dengan menggunakan mortar selama 4 jam, kemudian dikompaksi dan dilanjutkan dengan

proses kalsinasi pada suhu 300 °C selama 1 jam dan proses sintering pada suhu 1000 °C selama 4 jam. Pada penelitian ini juga dilakukan karakterisasi dengan XRD (*x-ray diffraction*) dan hasil dari XRD tersebut dilanjutkan dengan analisis data difraksi dengan menggunakan software Rietan-94.

2.2 Landasan Teori

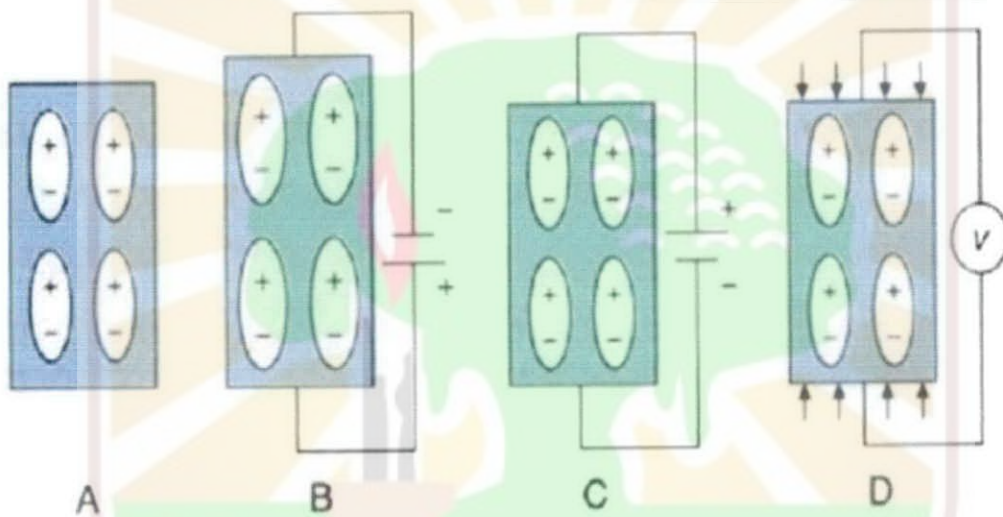
2.2.1 Piezoelektrik

Kata piezoelektrik berasal bahasa Latin, *piezein* yang berarti diperas atau ditekan dan *piezo* yang bermakna didorong. Material piezoelektrik ditemukan pertama kali pada tahun 1880-an oleh Jacques dan Pierre Curie. Kata *piezo* berarti tekanan, sehingga terbentuknya medan listrik ketika material dikenai tekanan mekanik. Sebuah fenomena disaat sebuah gaya yang diterapkan pada suatu segment material menimbulkan muatan listrik pada permukaan segmen material tersebut yang disebabkan oleh adanya distribusi muatan listrik pada sel-sel kristal atau dinamakan dengan Piezoelektrisitas.

Material piezoelektrik adalah kristal yang bersifat isolator, yang memproduksi medan listrik ketika diberikan tekanan mekanis. Sebaliknya, jika medan listrik diterapkan, maka material tersebut akan mengalami regangan mekanis. Material Piezoelektrik terbentuk oleh keramik yang terpolarisasi sehingga beberapa bagian molekul bermuatan positif dan sebagian yang lain bermuatan negatif membentuk elektroda-elektroda yang menempel pada dua sisi yang berlawanan dan menghasilkan medan listrik material yang dapat berubah akibat gaya mekanik.

Pada saat medan listrik melewati material, molekul yang terpolarisasi akan menyesuaikan dengan medan listrik, dihasilkan dipole yang terinduksi dengan molekul atau struktur kristal materi. Penyesuaian molekul akan mengakibatkan material berubah dimensi. Fenomena ini disebut *electrostriction* (efek piezoelektrik).

Fenomena efek piezoelektrik dapat digambarkan sebagai berikut:



Gambar 2.1 : (A) Sebelum diberi tekanan atau medan listrik. (B) Ketika diberi medan listrik, material memanjang. (C) Diberi medan listrik berlawanan, material memendek. (D) Ketika diberi tekanan, induksi polarisasi dan tegangan luar terjadi. (sumber : Moharana, 2009)

Sifat reversibel dari bahan piezoelektrik dapat dimanfaatkan untuk transduser, sinyal listrik yang terjadi pada transduser diubah menjadi getaran mekanik dan mengubah kembali getaran mekanik menjadi energi listrik.

2.2.2 Bismut Natrium Titanat (BNT) dan Barium Titanat (BT)

Material piezoelektrik yang banyak diproduksi dan diaplikasikan pada saat ini adalah PZT (*Lead Zirconium Titanat*), karena material ini memiliki sifat-sifat

piezoelektrik yang sangat baik (Lee dkk, 2007). Semakin baik sifat piezoelektrik dari suatu bahan maka akan semakin baik pula dalam pengaplikasiannya.

Polemik yang muncul dikalangan peneliti, PZT (*Lead Zirconium Titanate*) itu mengandung timbal (Pb) lebih dari 60% (Hussain dkk, 2009). Timbal merupakan bahan yang mengandung racun dan sangat berbahaya karena dapat menyebabkan kerusakan pada ginjal, otak dan sistem tubuh lainnya.

Oleh sebab itu, maka dikembangkanlah material piezoelektrik PZT (*Lead Zirconium Titanate*) yang bebas timbal dan ramah lingkungan, alternatif terbaik dimiliki oleh Bismuth Natrium Titanat (BNT).

Bismut Natrium titanat, $\text{Bi}_{0,5}\text{Na}_{0,5}\text{TiO}_3$, (disingkat BNT), adalah senyawa ferroelektrisitas yang kuat. Material ini pertama kali ditemukan oleh Smolenskii pada tahun 1960 (G.A. Smolensky, V.A .1961). $\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{TiO}$ berbasis tiga keramik adalah material piezoelektrik yang bebas timbal.

Struktur kristal material piezoelektrik tanpa timbal ini telah ditemukan pada tahun 1960 oleh Smolenskii. Pada suhu kamar, keramik Bismut Natrium titanat (BNT) berstruktur kristal rombohedral (Jones dan Thomas, 2002) dengan rumus standar perovskit ABO_3 .

Barium Titanat mempunyai struktur kristal yang *perovskite* yang sederhana yang bersifat mekanis dan kimia yang stabil. Barium Titanat menurut Tri (2010) memiliki 5 struktur kristal yaitu kubik, hexagonal, tetragonal, rombohedral dan orthorombik. Struktur kristal hexagonal dan struktur kristal kubik dari Barium Titanat mempunyai Sifat material paraelektrik, sedangkan

struktur kristal tetragonal, rombohedral dan orthorombik dari Barium Titanat mempunyai sifat material ferroelektrik.

Kelebihan lain yang dimiliki dari Bismuth Natrium Titanat (BNT) ini adalah, serbuknya sangat stabil di lingkungan yang lembab dan dapat disimpan selama sebulan tanpa ada perubahan (Isupov dkk, 2005).

Informasi yang umum beredar saat ini, adalah BNT dan keramik piezoelektrik bebas timbal (Pb) lainnya memiliki konstanta piezoelektrik dan suhu Curie (T_c) yang lebih rendah dibandingkan dengan kelas piezoelektrik berbasis timbal seperti PZT. Keunggulan dari PZT adalah memiliki konstanta piezoelektrik $d_{33} = 460$ pC/N, dengan suhu Curie 450°C (Donnelly dkk, 2007) sedangkan BNT hanya memiliki konstanta piezoelektrik $d_{33} = 73$ pC/N (Aksel and Jones, 2010) dan suhu Curie 320°C (Smolenskii dkk, 1961 ; Takenaka dkk, 1991) sehingga rentang suhu aplikasi PZT lebih lebar apabila dibandingkan dengan BNT.

Dalam pencapaian hasil yang terbaik untuk BNT, maka peneliti berusaha mencari bahan campuran yang dapat melebihi ataupun mengimbangi dari PZT tersebut. Solusi saat ini yang menjadi pusat perhatian peneliti yaitu Barium Titanat. Barium Titanat (BT) adalah bahan yang menjanjikan karena suhu Curie dan konstanta piezoelektrik yang hampir sama dengan BNT. Penambahan Barium Titanat (BT) meningkatkan suhu Curie sampai sekitar 150°C (Saxena, K. 2009).

2.2.3 Struktur Kristal

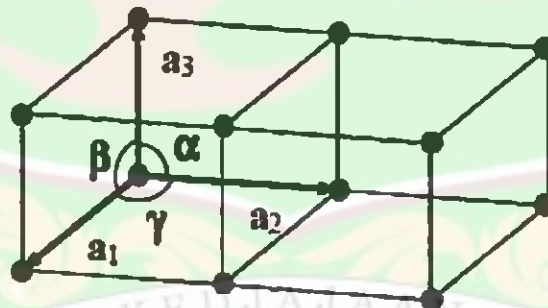
Kristal merupakan zat padat, yang memiliki atom-atom penyusun tertata secara teratur dan periodik. Kristal adalah benda padat yang strukturnya terdiri



atas gugus-gugus atom yang tersusun dalam kesetangkupan ruang yang tinggi di seluruh volume kristal. Dilihat dari bidang kristal, permukaannya yang datar dan rata dengan mengikuti pola-pola tertentu.

Kisi kristal memiliki sifat geometri. Kisi yang memiliki titik-titik kisi yang ekuivalen disebut kisi Bravais, sehingga titik-titik kisi tersebut dalam kristal akan ditempati oleh atom-atom yang sejenis. Titik-titik kisi Bravais dapat ditempati oleh atom atau sekumpulan atom yang disebut basis.

Setiap struktur kristal memiliki sel unit konvensional yang biasanya dipilih agar kisi yang dihasilkan sesimetris mungkin. Meski begitu, sel unit konvensional tidak selalu pilihan terkecil yang mungkin. Suatu sel unit primitif dari suatu struktur kristal merupakan sel unit terkecil yang mungkin yang dapat dibangun, sehingga, ketika disusun, akan mengisi spasi/ruang secara sempurna. Pada kisi tiga dimensi, vektor posisi untuk titik-titik kisi yaitu:



Gambar 2.2: Vektor posisi tiga dimensi, dimana a_1 , a_2 dan a_3 adalah vektor translasi primitif α , β dan γ adalah sudut yang dibentuk vektor a_1 , a_2 dan a_3 .
(sumber : Wiendartun, 2005)

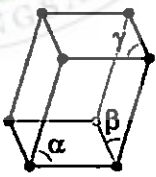
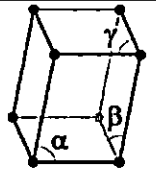
Konstanta kisi, diberi simbol a . Suatu konstanta kisi kristal yang terbentuk dalam bentuk 3 dimensi diberi simbol dengan a , b dan c . Sudut antara ketiga konstanta kisi tersebut diberi simbol dengan α , β dan γ . Misalnya, untuk kristal yang berbentuk kubik, konstanta kisinya sama dalam ketiga arah koordinat ($a = b$

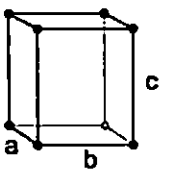
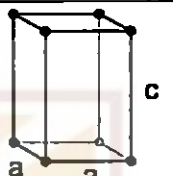
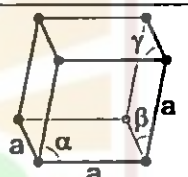
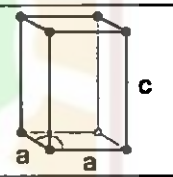
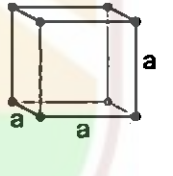
= c) dan sudut antara ketiga sisinya sama besar yaitu 90° ($\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$) ,
sedangkan untuk kristal yang bukan kubik konstanta kisinya berbeda dalam ketiga
arah koordinat. Volume sel satuan ditetapkan oleh 3 kisi (a, b dan c) dan 3 sudut
(α, β dan γ).

Dalam kristalografi, *space group* (atau kelompok kristalografi, atau kelompok Fedorov) dari sebuah kristal adalah deskripsi dari simetri dari kristal, dan dapat memiliki salah satu dari 230 jenis.

Elemen dari *space group* ini dalam tiga dimensi yang dibuat dari kombinasi dari 32 grup titik kristalografi dengan 14 kisi Bravais, masing-masingnya memiliki salah satu dari 7 sistem kisi. Hal ini menghasilkan *space group* yang beberapa kombinasi dari simetri translasi dari sebuah sel unit termasuk pusat kisi, kelompok operasi simetri titik refleksi, rotasi dan rotasi yang tidak tepat. Kombinasi dari semua hasil simetri operasi yang unik menggambarkan simetri kristal tersebut di 230 *space group*.

Tabel 2.1: Sel satuan konvensional dan 14 kisi Bravais.

Sistem kristalografi	Panjang sumbu dan sudut	Kisi Bravais	Simbol kisi	Skema tiga-dimensi Simple
Triklinik	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	- Simple	P	
Monoklinik	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$ atau $a \neq b \neq c$ $\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	- Simple - Base-centered	P C	

Ortorombik	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	- Simple - Base-centered - Face-centered - Body-centered	P C F I	
Tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	- Simple - Body-centered	P I	
Trigonal Rhombohedral	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ < 120	- Simple	P	
Hexagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120$	- Simple	P	
Kubus	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	- Simple - Face-centered - Body-centered	P F I	

2.2.4 Bidang kristal

Bidang dalam sebuah kristal dapat ditentukan dengan menggunakan aturan-aturan sebagai berikut:

1. Menentukan titik-titik potong dari setiap sumbu kristal tiga dimensi.
2. Membalikkan nilai titik-titik potong tersebut dengan menjadikan penyebut suatu pecahan yang memiliki nilai pembilang 1.
3. Nilai dari ketiga bilangan tersebut dibuat dalam bentuk $\langle hkl \rangle$, yang disebut dengan indeks Miller. Melalui titik-titik kisi suatu kristal dapat dibentuk suatu bidang datar. Masing-masing bidang datar memiliki orientasi yang berbeda

kecuali pada bidang yang sejajar orientasinya adalah identik. Untuk menentukan orientasi bidang tersebut digunakan sistem indeks.

Jarak bidang kristal diperlukan dalam menganalisis sebuah kristal. Jarak bidang kristal merupakan panjang garis yang diambil secara tegak lurus antara 2 bidang kristal yang sama dalam sebuah kristal. Penentuan jarak antara bidang kristal bergantung pada sistem kristal, karena setiap sistem kristal memiliki rumus jarak bidang kristal yang berbeda. Bismut Sodium Titanat-Barium Titanat (BNT-BT) memiliki struktur kristal rombohedral (Moharana, 2009, Jones and P.A. Thomas. 2002), sehingga jarak bidang kristal dengan persamaannya sebagai berikut:

$$d_{hkl}^2 = \frac{a^2 (1 - 3 \cos^2 x + 2 \cos^2 x)}{(h^2 + k^2 + l^2) \sin^2 x + 2(hk + kl + hl)(\cos^2 x - \cos x)} \quad (2.1)$$

Dengan: d_{hkl} = jarak bidang kristal

a dan c = parameter kisi

h , k dan l = indeks Miller bidang Kristal.

Wada dkk, (2001) memperoleh material PZT dengan memiliki struktur kristal tetragonal, sehingga jarak bidang kristal dengan persamaan berikut :

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2}} + \frac{c}{l} \quad (2.2)$$

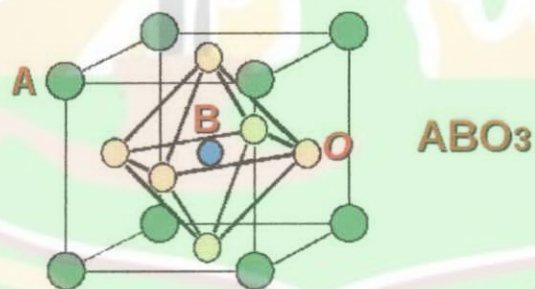
2.2.5 Kristal perovskite

Bahan piezoelektrik memiliki rumus ABO_3 yang memiliki 1 (satu) anion dan 3 (tiga) kation (Damjanovic, 2001). Struktur kristal perovskite digambarkan sebagai gabungan struktur FCC (Face Centered Cubic) dan BCC (Body Centered



Cubic). Terdiri dari delapan ion besar A^{a+} , satu ion kecil B^{b+} , dan enam ion O^{2-} dimana ion A^{a+} berada pada sudut sel satuan, ion O^{2-} berada pada permukaan sel satuan dan ion B^{b+} menduduki lokasi di pusat diagonal ruang dari struktur kristal tersebut.

Karakteristik struktur *perovskite* ABO_3 dapat dipengaruhi dengan mengontrol keberadaan kation B dan kation A, sehingga berdampak pada sifat-sifat spesifiknya. Kepiezoelektrisitas suatu bahan dipengaruhi oleh peranan posisi B dari pada posisi A (Woodward, 1997). Dengan kata lain posisi A dapat berkontribusi dalam penentuan sifat piezoelektrik yang kuat, akan tetapi peranan posisi B jauh lebih kuat. Dalam hal ini, pada struktur BNT posisi B ditempati oleh Ti^{4+} , sedangkan posisi A ditempati oleh Bi^{3+} dan Na^{+} .



Gambar 2.3: Struktur Perovskite
(sumber : Moharana, 2009)

Jika suhu material dinaikkan melebihi suhu Curie, struktur *perovskite* menjadi kubik, ketika material diaplikasikan pada suhu kamar dan di atasnya hingga mencapai suhu Curie terjadi perubahan fase dari kubik ke tetragonal atau rhombohedral, dan lain-lain (Jones and Thomas, 2002).

2.3 Difraksi Sinar-X

Metode sinar-X dapat digunakan salah satunya untuk menentukan struktur kristal. Digunakannya XRD karena panjang gelombang sinar-X memiliki orde jarak yang sedikit lebih kecil atau sama dengan konstanta kisi kristalnya, sehingga sinar-X dapat digunakan dalam analisis struktur kristal. Difraksi sinar-X pada kristal pertama kali ditemukan oleh Max Van Laue pada tahun 1912. Kemudian difraksi sinar-X dipelajari secara eksperimental oleh W.L. Bragg dengan mengamati refleksi sinar-X dari bidang-bidang didalam kisi kristal.

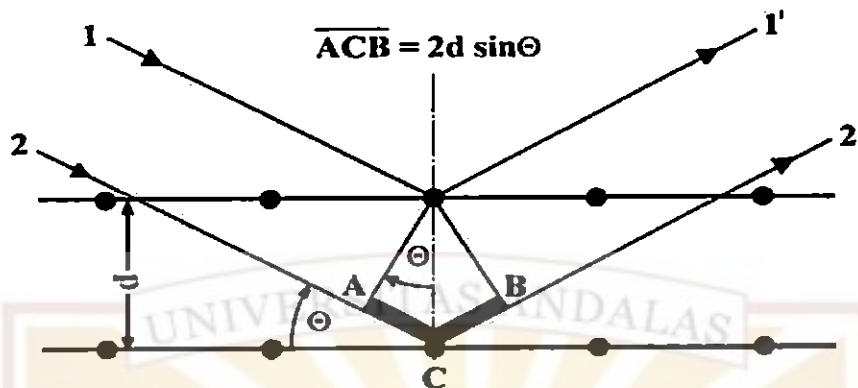
Bila seberkas sinar-X dengan panjang gelombang λ menumbuk suatu permukaan suatu bahan dengan sudut datang θ , maka sebagian besar sinar akan dihamburkan oleh bidang pertama dan bidang-bidang berikutnya yang dikarakterisasi dengan indeks Miller hkl. Masing-masing bidang (hkl) menghamburkan sebagian berkas tersebut dalam satu arah tertentu. Interferensi konstruktif (saling menguatkan) hanya terjadi antara sinar terhambur yang sejajar dengan beda lintasan $\lambda, 2\lambda, 3\lambda, \dots n\lambda$. Jadi beda lintasan adalah $n\lambda$ dengan n menyatakan bilangan bulat. Berkas cahaya yang dihamburkan oleh bidang-bidang yang sejenis yang memenuhi adalah yang bertanda I dan II dalam gambar 2.4. Persyaratan yang harus dipenuhi pertama adalah sudut datang sama dengan sudut pantul. Persyaratan yang kedua adalah :

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad (2.3)$$

dimana : n = bilangan bulat, 1, 2, 3.....

d = jarak antar bidang abstrak yang sejenis

a = parameter kisi



Gambar 2.4 Difraksi sinar-X oleh bidang kristal

Kemudian berkas sinar-X yang dihamburkan dalam arah-arrah tertentu yang sesuai dengan syarat batas kristalografi akan menghasilkan puncak-puncak difraksi yang dapat diamati dengan peralatan difraktometer sinar-X.

Intensitas berkas sinar-X bergantung pada berbagai faktor yang harus diperhitungkan faktor tersebut antara lain :

a. Faktor hamburan / faktor struktur

- Hamburan oleh elektron

Sinar-X berasal dari tumbukan elektron dengan logam target. Tumbukan tersebut menyebabkan elektron-elektron bergetar dan selama waktu tersebut akan terjadi perlambatan atau percepatan elektron. Akibat dari percepatan atau perlambatan elektron tersebut maka, elektron akan memancarkan sinar-X

- Hamburan oleh atom

Intensitas sinar yang dihamburkan oleh atom dipengaruhi oleh intensitas sinar yang dihamburkan oleh elektron. Perbandingan intensitas sinar yang dihamburkan oleh atom terhadap intensitas sinar yang dihamburkan oleh elektron disebut sebagai faktor hamburan atom. Faktor hamburan atom dapat

juga dinyatakan dengan perbandingan antara amplitudo gelombang yang dihamburkan oleh atom dengan amplitudo gelombang yang dihamburkan oleh elektron.

- Hamburan oleh sel satuan

Setiap atom dalam sel satuan yang disinari oleh sinar-X akan bergetar dengan amplitudo yang sebanding dengan faktor hamburan atom, jika berkas sinar yang dihamburkan oleh suatu atom berbentuk sinusoida dengan amplitudo dan fasa tertentu, maka gelombang berkas sinar yang didefraksikan oleh sel satuan dapat diperoleh dengan menjumlahkan semua gelombang yang ada.

b. Faktor Polarisasi

Seperti diketahui bahwa sinar-X yang datang pada bidang kristal pada umumnya tidak terpolarisasi. Akan tetapi setelah sinar-X ini mengenai atom-atom bahan, ternyata sinar-X yang dihamburkan menjadi terpolarisasi. Berdasarkan adanya hal tersebut maka timbullah apa yang disebut dengan faktor polarisasi, yang mengakibatkan adanya pengurangan intensitas terhambur dibandingkan dengan intensitas semula.

c. Faktor Perkalian (Multiplisitas)

Dalam suatu kisi kristal terdapat beberapa bidang kristal dengan hkl yang berbeda akan tetapi jarak antar bidangnya sama. Misalkan pada kristal kubik, bidang (100) mempunyai d_{hkl} yang sama dengan bidang (010) dan bidang (001), sehingga apabila terjadi puncak-puncak difraksi, maka bidang-bidang tersebut akan menghamburkan sinar-X pada sudut yang sama. Sehingga pengaruh superposisi intensitas didefinisikan sebagai jumlah bidang kristal

yang berbeda, tetapi mempunyai jarak antar bidang yang sama. Harga faktor multiplisitas bergantung pada sistem kristal.

d. Faktor Lorentz

Pada difraksi sinar-X intensitas yang diperoleh akan membentuk garis lurus bila dipenuhi keadaan ideal antara lain adalah sumber yang digunakan benar-benar monokromatis dan sejajar dan susunan kristal bahan harus sempurna. Pada kenyataannya kedua hal tersebut sangat sulit dipenuhi, karena sinar yang menumbuk atom-atom dalam bidang kristal arahnya tidak benar-benar sejajar dan monokromatis, demikian pula susunan kristalnya tidak begitu sempurna. Akibat adanya ketidaksempurnaan di atas menyebabkan pelebaran puncak difraksi yang dihasilkan. Berdasarkan keadaan tersebut di atas ditambah dengan faktor-faktor geometri lainnya.

e. Faktor Absorpsi

Apabila seberkas sinar-X mengenai suatu bahan kristal, maka sebagian dari sinar yang datang akan diabsorpsi oleh bahan tersebut. Adanya efek absorpsi ini menyebabkan intensitas sinar-X yang dihamburkan menjadi berkurang.

f. Faktor Temperatur (suhu)

Kenaikan temperatur akan menyebabkan semakin kuatnya vibrasi atom-atom. Akibat dari bertambahnya vibrasi atom-atom yang disebabkan oleh kenaikan temperatur yaitu perubahan ukuran sel satuan yang berakibat terhadap berubahnya posisi sudut difraksi 2θ . Penyimpangan posisi atom ini mengakibatkan sinar-X yang datang tidak dihamburkan dengan sempurna, sehingga intensitas sinar-X yang dihamburkan oleh bahan akan berkurang.

Pengaruh suhu ini akan semakin jelas terlihat bahkan dapat meniadakan pola difraksi, jika suhu mendekati titik leleh kristal.

2.4 Metode Analisis Rietveld

Metode penghalusan profil (*profile refinement method*) suatu data intensitas difraksi ditemukan oleh H.M. Rietveld pada tahun 1967. Oleh karena itu metode ini dikenal dengan metode Rietveld. Metode Rietveld ini sangat handal dalam menganalisa suatu pola difraksi dengan puncak-puncak Bragg yang saling bertumpuk, oleh karena itu metode Rietveld ini sering digunakan (Irzaman. 1997). Dengan kemampuan tersebut metode ini dianggap lebih unggul dibandingkan dengan metode intensitas terintegrasi yang sering digunakan sebelumnya. Metode Rietveld digunakan untuk menganalisa data difraksi dari cuplikan berupa serbuk. Hal tersebut terutama disebabkan sulitnya membuat cuplikan dalam bentuk kristal tunggal, sehingga hanya dibuat cuplikan polikristal. Namun demikian jika cuplikan polikristal dianalisa, dapat menimbulkan resiko hilangnya sebagian informasi, akibat orientasi polikristal yang acak. Informasi yang hilang tersebut diharapkan dapat diperoleh kembali jika digunakan metoda Rietveld.

Metode Rietveld memiliki prinsip utama yaitu bagaimana mengatasi adanya puncak-puncak refleksi yang bertumpuk, yang mana setiap titik pada pola refleksi dianggap sebagai pengamatan tunggal yang kemungkinan mengandung kontribusi dari sejumlah refleksi puncak Bragg yang berbeda. Untuk keperluan tersebut diperlukan suatu fungsi untuk memodelkan puncak-puncak yang muncul.

Secara garis besar yang dilakukan metode Rietveld adalah mencoba membuat model kurva intensitas, kemudian mencocokkannya dengan hasil pengamatan. Intensitas observasi $Y_i(o)$ pada titik ke-i dimodelkan oleh intensitas perhitungan $Y_i(c)$ sebagai (Izumi,1993) :

$$Y_{i(c)} = \sum_k s |F_k|^2 m_k p_k AL(\Delta\theta_{ik}) \Phi(\Delta 2\theta) + Y_{ib(c)} \quad (2.4)$$

Dengan :

s = faktor skala

k = jumlah refleksi Bragg

F_k = faktor struktur

m_k = faktor multiplisitas

p_k = faktor koreksi (kecendrungan berorientasi)

A = faktor absorpsi / penyerapan

$L\Delta\theta_{ik}$ = faktor Lorentz dan faktor polarisasi

$\Phi(\Delta 2\theta)$ = fungsi bentuk profil

$Y_{ib(c)}$ = intensitas latar belakang (*background*)

θ_i = sudut pada pengukuran ke-i

θ_k = sudut bragg

$\Delta\theta_{ik}$ = $\theta_i - \theta_k$

$\Delta 2\theta_{ik}$ = $2\theta_i - 2\theta_k$

Kesuksesan metode penghalusan profil ini ditentukan oleh cocok atau tidaknya profil data perhitungan dengan data pengamatan (Izumi. 1993). Oleh

karena itu fungsi bentuk profil mungkin merupakan hal yang paling penting. Bentuk puncak-puncak intensitas dari difraksi sinar-X lebih kompleks, menyimpang dari bentuk Gaussian. Ada beberapa model yang diajukan seperti bentuk puncak Lorentzian, modifikasi Lorentzian, lorentzian lanjutan, pseudo-voight serta bentuk lainnya (Izumi, 1993). Meskipun pada kenyataannya model-model yang diajukan di atas belum ada yang menyerupai data observasi. Model pseudo-voight merupakan bentuk yang terbaik (engkir dan irzaman.1997).

$$\Phi(\Delta 2\theta) = \eta \frac{2}{\pi H_k} \left[1 + 4 \left(\frac{\Delta 2\theta}{H_k} \right)^2 \right]^{-1} + (1-\eta) \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi} H_k} \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{\Delta 2\theta}{H_k} \right)^2 \right] \quad (2.5)$$

Sebagaimana halnya fungsi pseudo-voight konvensional, fungsi yang dimodifikasi juga merupakan penjumlahan antara fraksi Gaussian dan fraksi Lorentzian yang masing-masing mempunyai tinggi puncak serta lebar di setengah tinggi puncak maksimum (*Full width at half maximum/ FWHM*) yang berbeda-beda pada setiap puncak. Dirumuskan dengan :

$$g(\Delta \theta_{ik}) = C \left\{ \gamma \exp \left[-4 \ln 2 \left(\frac{\Delta \theta_{ik}}{H_k(G)} \right)^2 \right] + (1-\gamma) \left[1 + 4 \left(\frac{2\Delta \theta_{ik}}{H_k(L)} \right)^2 \right]^{-1} \right\} \quad (2.6)$$

dengan.

$$C = \left[\left(\frac{\pi}{4 \ln 2} \right)^{1/2} \gamma H_k(G) + \frac{\pi(1-\gamma)H_k(L)}{2} \right]^{-1} \quad (2.7)$$

$$H_k(G) = \left[U(\tan \theta_k - c_s)^2 + V(\tan \theta_k - c_s) + W \right]^{1/2} \quad (2.8)$$

$$H_k(L) = \frac{H_k(G)}{\delta} \quad (2.9)$$

Dari persamaan diatas

C = konstanta normalisasi

γ = fraksi komponen Gauss

$H_k(G)$ = FWHM komponen Gauss

$H_k(L)$ = FWHM komponen Lorentz

δ = rasio $H_k(G)$ terhadap $H_k(L)$

U, V, W = parameter FWHM

c_s = 0 atau 6 (Penghalusan lebih stabil jika $c_s = 0,6$)

Faktor hunian atom untuk posisi kisi kristal sama dengan m/M yang mana m adalah multiplisitas posisi yang bersangkutan. Sedangkan M adalah multiplisitas posisi umum grup ruang yang saling berhubungan (Izumi, 1993).

Untuk mengetahui sejauh mana keberhasilan suatu penghalusan dengan metoda Rietveld maka Izumi (1993) mengatakan, diperlukan parameter yang mengukur kesesuaian antara data pengamatan dengan hasil observasi. Parameter tersebut dinamakan indeks reliabilitas. Semakin kecil nilai indeks berarti semakin tinggi tingkat kesesuaian antara model perhitungan dengan data pengamatan.

2.4.1 Program RIETAN (*Rietveld Analysis System*)

Salah satu program analisis data difraksi yang dibuat berdasarkan metoda Rietveld adalah RIETAN. Penelitian ini menggunakan program RIETAN (*Rietveld Analysis System*) yang dikembangkan oleh Fujio Izumi versi keluaran 1994. Program RIETAN ditulis dengan bahasa Fortran 77 yang memenuhi standar

ANSI X3.9-1978. Program ini terdiri satu program utama dan lebih dari seratus sub program sepanjang sekitar sembilan ribu baris perintah. Program Rietan merupakan suatu teknik pemecahan yang menggunakan proses optimisasi, dengan meminimumkan fungsi objektif profil sebagai berikut :

$$F_{obj} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{Y_{i(o)}} [Y_{i(o)} - Y_{i(c)}]^2 \quad (2.10)$$

Dimana :

F_{obj} = fungsi objektif

$Y_{i(o)}$ = intensitas pengamatan/observasi pada step ke-i

$Y_{i(c)}$ = intensitas perhitungan/kalkulasi pada step ke-i

N = jumlah total titik dalam puncak Bragg

Program ini mampu menganalisa suatu material yang mengandung banyak fasa. Kemudian program ini menggunakan fungsi pseudo-vioght yang berarti cukup menjamin akan adanya kesesuaian antara profil pengamatan dengan bentuk perhitungan(Izumi,1993). Keunggulan, RIETAN menyediakan tiga pilihan prosedur kuadrat terkecil non linear yaitu : Gauss, Newton, Marquadt yang dimodifikasi serta metode arah konjugate. Adanya tiga prosedur kuadrat terkecil non linier ini akan memberikan peluang pada *user* (pengguna) agar dapat menentukan mana prosedur yang cocok untuk mendapatkan hasil yang memuaskan dalam perhitungan. Jadi tidak terpaku pada satu prosedur saja.

Parameter-parameter yang digunakan dalam perhitungan program Rietan terbagi dalam beberapa kelompok yaitu :

a. Parameter Global

Z (zero point error) : merupakan parameter untuk memperbaiki
pergeseran titik nol dari detektor

$b_0, \dots, b_8$ (*background parameter*) : memperbaiki parameter intensitas
pada latar belakang

b. Parameter yang tergantung fasa

- Parameter untuk menghitung intensitas yang digabungkan

s : faktor skala

p_1, p_2 : faktor orientasi

- Parameter profil

$U, V, W,$: Parameter lebar puncak

A : Parameter Asimetri

- Parameter untuk menentukan posisi puncak

$a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$: parameter kisi

- Parameter struktur kristal

x, y, z : koordinat fraksional atom (posisi atom)

g : faktor hunian (penempatan) atom

Q : parameter suhu keseluruhan

Dalam proses pencocokan, parameter-parameter dicocokkan/diperbaiki sampai didapatkan selisih yang terkecil antara hasil percobaan melalui difraksi sinar-X dengan hasil kalkulasi permodelan. Setelah terlebih dahulu dipilih bentuk puncak yang paling sesuai, dan bentuk ukuran yang menunjukkan kecocokan antara pola

difraksi hasil perhitungan dengan hasil penelitian yang dinyatakan dalam faktor R sebagai berikut:

- Selisih statistik antara intensitas observasi dengan intensitas kalkulasi dari setiap langkah pengukuran intensitas dapat dihitung dengan persamaan bobot pola indeks Rwp (*R weighted pattern*)

$$R_{wp} = \left\{ \frac{\sum_i W_i [Y_i(0) - Y_i(c)]^2}{\sum_i W_i [Y_i(0)]^2} \right\}^{1/2} \quad (2.11)$$

- Penyimpangan intensitas terukur dari intensitas terhitung dapat diperoleh dari pola indeks Rp (*R pattern*)

$$R_p = \frac{\sum_i |Y_i(0) - Y_i(c)|}{\sum_i Y_i(0)} \quad (2.12)$$

- Faktor R yang menyatakan standar deviasi dalam analisis kristal tunggal sinar-X yang dikenal dengan R faktor Bragg ($R_i = R \text{ Bragg faktor}$)

$$R_i = \frac{\sum_k |I_k(O') - I_k(c)|}{\sum_k I_k(O')} \quad (2.13)$$

- Faktor R yang digunakan dalam analisis struktur kristal tunggal sinar-X dapat dihitung dengan persamaan indeks $R_f = R\text{-struktur faktor}$.

$$R_F = \frac{\sum_k \left| [I_k(O')]^{1/2} - [I_k(c)]^{1/2} \right|}{\sum_k [I_k(O')]^{1/2}} \quad (2.14)$$

dimana :

$I_k('o')$ = intensitas yang dihitung dari penjumlahan kontribusi puncak ke-k dari intensitas yang diamati.

$I_k(c)$ = intensitas yang dihitung dari parameter struktur yang dihaluskan.

➤ Sedangkan nilai rata-rata Rwp secara statistik dihitung dengan persamaan

$R_e = R\text{-expected}$

$$R_c = \left(\frac{N_p - N_r - N_c}{\sum_i w_i [y_i(0)]^2} \right)^{1/2} \quad (2.15)$$

dimana : N_p = jumlah titik data

N_r = jumlah parameter yang dihaluskan

N_c = jumlah iterasi

Rwp dan Rp merupakan penjumlahan seluruh titik data difraksi, sedangkan Ri dan Rf merupakan penjumlahan titik-titik pada data refleksi Bragg. Selama proses penghalusan sedang berjalan, Rwp merupakan hal yang penting karena pembilangnya berupa harga-harga yang sedang diminimalisasikan.

Semakin kecil faktor R semakin baik pula pencocokan antara pola difraksi hasil observasi dengan hasil kalkulasi, namun hal ini tidak mutlak karena masih ada faktor S sebagai ukuran kesesuaian antara model dengan hasil pengamatan, yaitu jika $S \leq 1,5$ maka hasil analisis Rietveld sudah memiliki kesesuaian yang baik.

Harga S adalah :

$$S = R_{wp} / R_e \quad (2.16)$$

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Lokasi Penelitian

Penelitian ini berlangsung pada tahun 2011, analisis percobaan dilakukan di Pusat Penelitian dan Pengembangan Ilmu Pengetahuan dan Teknologi Bahan Badan Tenaga Nuklir Nasional, kawasan Puspiptek Serpong, Tangerang, Propinsi Jawa Barat.

3.2 Alat dan Bahan

3.2.1 Alat Penelitian

1. Timbangan *electronic* OHAUS GALAXY™160 dengan ketelitian 0,0001g, fungsinya untuk menimbang berapa gram sampel yang diperlukan.
2. Mortar, fungsinya sebagai tempat penggerus bahan-bahan uji dalam proses homogenisasi.
3. Spatula, fungsinya sebagai sendok dan pengaduk bahan-bahan.
4. *Dies*, fungsinya sebagai pencetak pellet dengan ukuran diameter 1 cm pada saat pengkompaksian.
5. *Hydraulic Press* CARVER, fungsinya sebagai alat penekan pelet yang memiliki kemampuan tekanan mencapai 15000 *psi*.
6. *Electric Furnace (advantec KL-600)*, fungsinya untuk mensintering bahan material yang sudah berbentuk pellet dalam proses sintering.

7. XRD (*Philips x-ray diffraction*) fungsinya untuk mengkarakterisasi sampel dengan melihat pola difraksi.



NERACA DIGITAL



MORTAR



Dies



PENEKAN HIDROLIK



FURNACE



X-RAY diffraction

Gambar 3.1: Peralatan penelitian

3.2.2 Bahan Penelitian

Bahan-bahan yang digunakan dalam penelitian ini adalah:

Bi_2O_3 , Na_2CO_3 , TiO_2 dan BaCO_3 . Senyawa yang akan dianalisa pada penelitian ini adalah $1-x[\text{Ba}_{0,5}\text{Na}_{0,5}]\text{Ba}_x\text{TiO}_3$, dengan harga x bernilai 0,07 dan 0,2.

1. Bi_2O_3 (Bismuth Oksida), merek dagang merck no ABCR, Puratrem AB106142, kemurnian 99,999%
2. Na_2CO_3 (Natrium Karbonat), $M = 105,99$ gram/mol merck KgaA 64271 Darmstadt Germany, kemurnian 99%

3. TiO_2 (Titanium Oksida), kemurnian 99,99% merk KgaA 64271 Darmstadt Germany, kemurnian 99%
4. BaCO_3 (Barium Karbonat), $M = 197,34$ gram/mol merk KgaA 64271 Darmstadt Germany, kemurnian 99%.

3.3 Tata Laksana Penelitian

Tahapan kegiatan yang dilakukan dalam penelitian ini ditunjukkan secara skematis pada Gambar 3.1 berikut ini:



Gambar 3.2: Diagram alir sintesis dan analisis Rietan bahan-bahan BNTBT

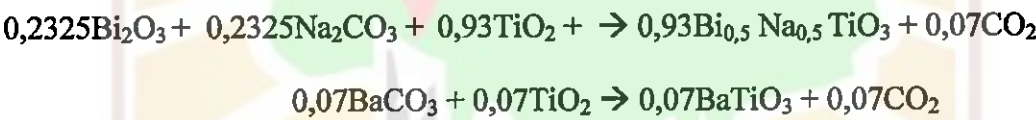
3.4 Sintesis Bahan

Sintesis bahan dibagi dalam 4 kelompok sampel yaitu Bi₂O₃, Na₂CO₃, TiO₂, BaCO₃ yang disintesis dengan perbandingan mol sebagai berikut:

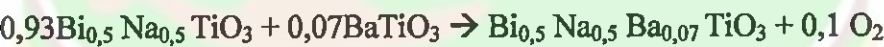
Tabel 3.1: Perbandingan Mol

Sampel	Mol			
	Bi ₂ O ₂	Na ₂ CO ₂	TiO ₂	BaCO ₃
BNTBT (BT7%)	0,465	0,465	1	0,07
BNTBT BT(20%)	0,4	0,4	1	0,2

Dengan rumus reaksinya adalah :



Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat (BNT-BT) yang terbentuk dengan reaksinya adalah :



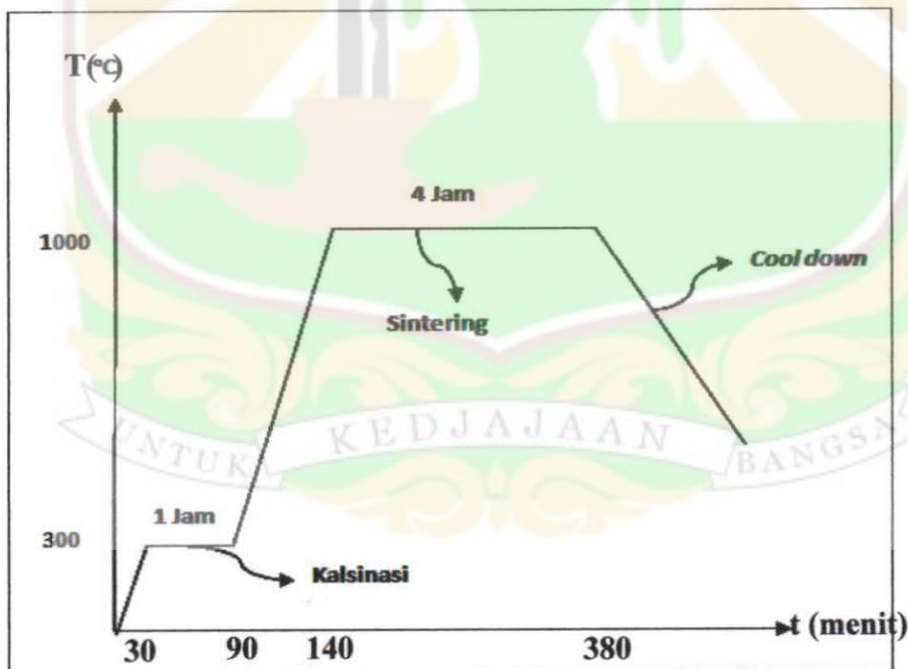
Langkah-langkah sintesis BNTBT dengan metode *solid-state reaction* yaitu :

1. Bahan-bahan Bismuth Natrium Titanat-Barium Titanat (BNTBT) ditimbang dengan menggunakan neraca digital *electronic* OHAUS GALAXY™160 (ketelitian ± 0,0001 gr) dengan komposisi pada Tabel 3.2 berikut :

Tabel 3.2: Komposisi BNTBT

Sampel	Gram				Total (gram)
	Bi ₂ O ₂	Na ₂ CO ₂	TiO ₂	BaCO ₃	
BNTBT 7%	2,2426	0,5101	1,9613	0,2860	5
BNTBT 20%	1,9936	0,4535	1,7086	0,8443	5

2. Semua bahan yang telah ditimbang kemudian dicampur dalam mortar AGATE dan dilakukan proses homogenisasi bahan dengan digerus selama 4 jam agar tercampur secara homogen dan ukuran partikel semakin mengecil.
3. Bahan dikompaksi dengan menggunakan dies berdiameter 1 cm sebagai pencetak peletnya yang memakai penekan *Hydraulic Press* CARVER dengan tekanan 3500psi.
4. Setelah pemeletan, sampel BNTBT dimasukkan ke dalam *Electric Furnace* (*advantec KL-600*), Agar terjadi tranformasi bahan dasar ke bahan BNT-BT, maka dilakukan proses sinterring pada suhu 1000 °C selama 4 jam. Akan tetapi sebelum sinterring, terlebih dahulu dilakukan kalsinasi pada suhu 300 °C selama 1 jam, diagram pewaktuan pada proses sinterring dilihat pada **Gambar 3.3**



Gambar 3.3: Diagram pewaktuan proses sinterring

5. Kedua sampel yang telah di sinterring dilanjutkan dengan XRD untuk dikarakterisasi agar dapat dilihat pola difraksinya.

6. Hasil dari XRD (Philips *x-ray diffraction*) tersebut dilanjutkan dengan identifikasi fasa bahan menggunakan teknik difraksi sinar-x metode analisis Rietveld.

3.5 Analisis RIETAN

Data BNT-BT yang didapatkan dari XRD dengan metoda *solid state reaction*, berupa data sudut 2θ dan data intensitas. Untuk dapat menggunakan program Rietan diperlukan dua file masukkan yaitu :

1. File data percobaan berisikan data-data intensitas hasil eksperimen dan sudut 2θ dengan menggunakan XRD yang telah dikonversi. Jumlah data, sudut awal interval sudut pada pengukuran XRD ditulis pada baris pertama, kemudian diikuti oleh besarnya intensitas disetiap sudut pada baris-baris berikutnya. File masukkan data intensitas difraksi ini diklarifikasikan dengan nama file.INT (Lampiran 1)
2. File masukkan berupa parameter-parameter yang diajukan. Isinya terbagi atas dua jenis data yakni, data-data yang tidak dihaluskan dan data-data yang dihaluskan. Data-data yang tidak dihaluskan misalnya metoda difraksi yang digunakan, jumlah fasa, grup ruang dan sebagainya. Sedangkan data yang dihaluskan merupakan parameter-parameter awal dan terdiri atas parameter global dan parameter fasa. Walaupun demikian, parameter yang dihaluskan ini bisa saja ditetapkan pada harga tertentu sesuai kebutuhan pengguna. File masukkan parameter ini diklarifikasikan dengan nama file.INS(Lampiran 2).

Setelah semua harga parameter struktur BNT-BT dimasukkan kedalam program Rietan, kemudian diproses melalui software Rietan maka akan keluar teks “RIETAN” Teks ini merupakan hasil keluaran proses Rietan yang disebut file sampler.LST (Lampiran 3). Analisis Rietan dilakukan berulang-ulang hingga pencocokan terjadi, antara perhitungan dan percobaan diperoleh hasil yang baik dan sesuai. Kemudian sample.LST diproses melalui software diplot untuk menampilkan profil pola difraksi (lampiran 3).



BAB IV

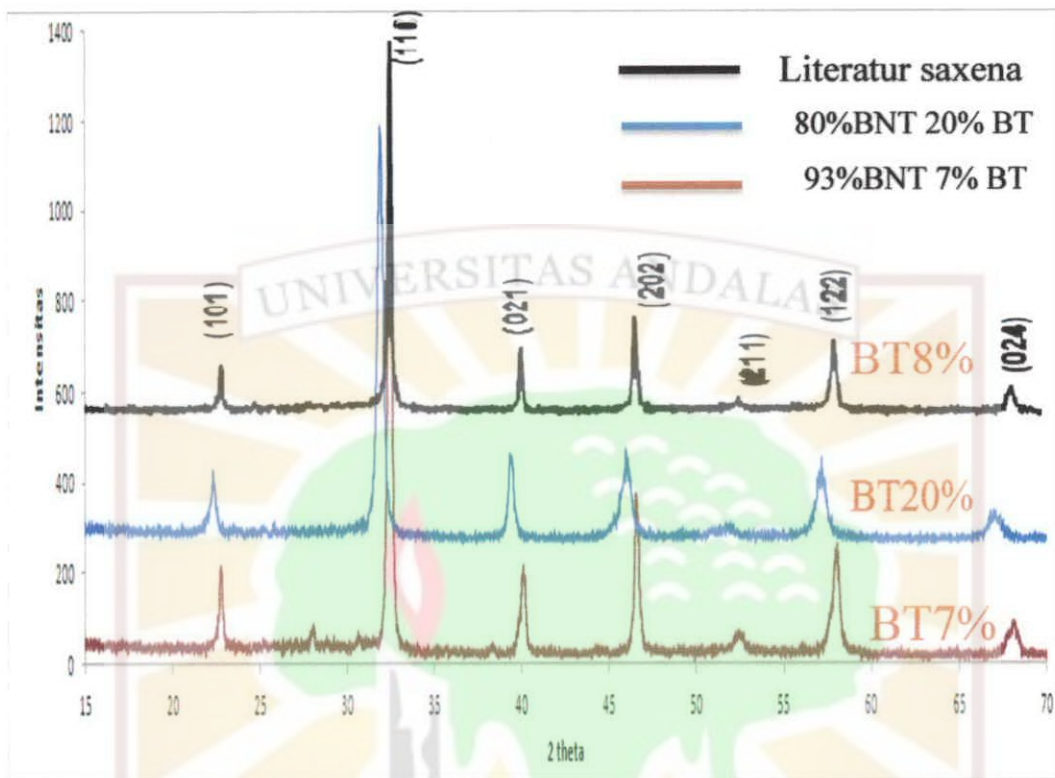
HASIL DAN PEMBAHASAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, dapat dijelaskan mengenai sintesis dan analisis struktur bahan piezoelektrik. Sintesis Bismut Natrium Titanat - Barium Titanat (BNT-BT) dilakukan dengan metode *solid state reaction*. Penambahan Barium Titanat ke dalam bahan Bismuth Natrium Titanat, komposisi mol dari BNT-BT yang sudah ditentukan dengan tujuan untuk meningkatkan hasil yang terbaik.

4.1 Hasil dan pembahasan data hasil XRD (X-ray Diffraktometer)

Bahan dasar yang digunakan dalam sintesis BNT-BT adalah Bi_2O_3 , TiO_2 , Na_2CO_3 dan BaCO_3 yang berbentuk serbuk dengan kemurnian cukup tinggi (99,99%). Hasil pola difraksi sinar-X dibandingkan dengan literatur (Saxena, 2010), sehingga akan terlihat bahan BNT-BT yang berhasil dibuat. Perbandingan penambahan BT kedalam bahan BNT juga dilakukan oleh Saxena (2010) dengan hasil yang terbaiknya pada 92% mol BNT- 8% mol BT metode yang dipakai *solid state reaction* dengan menggunakan suhu sintering 1150°C selama 2 jam. Dalam proses homogenisasi, Saxena (2010) menggunakan grinding and mixing. Struktur yang diperoleh saxena(2010) pada bahan 92% mol BNT- 8% mol BT adalah *rhombohedral*.

Diperoleh hasil dalam bentuk grafik perbandingan antara intensitas dengan sudut 2θ . Eksperimen dari difraksi sinar-X pada bahan BNT-BT dengan X-ray Diffraktometer (XRD) , dapat dilihat pada gambar 4.1 berikut:



Gambar 4.1: Pola difraksi Literatur (Saxena, 2010) dengan bahan 92% mol BNT-8% mol BT dibandingkan dengan penambahan 93% mol BNT-7% mol BT dan 80% mol BNT-20% mol BT

Dari Gambar 4.1 dapat dilihat perbandingan sintesis 93% mol BNT-7% mol BT dengan literatur 92% mol BNT- 8% mol BT. Terlihat pola difraksi yang sangat identik antara hasil dari sintesis yang dilakukan pada penelitian ini dengan pola difraksi dari literatur. Sintesis BNT-BT yang dihasilkan pada penelitian ini relatif lebih baik dibandingkan literatur, dikarenakan suhu sinteringnya (1000°C) lebih rendah dibandingkan dengan literatur Saxena (1150°C), dilihat dari suhu yang relatif lebih rendah sudah mencapai penghomogenisasian yang baik dilihat pada puncak-puncak perovskite yang sudah terbentuk dan dalam pengaplikasiannya memudahkan dalam memproduksi bahan dalam jumlah besar

lebih mudah. Puncak pada sudut $52,26^{\circ}$ untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT sangat jelas terlihat dengan intensitas yang relatif tinggi dibandingkan dengan literatur. Puncak pada literatur dan pada 80% mol BNT-20% mol BT pada sudut $51,34^{\circ}$ memiliki intensitas yang kecil, sehingga puncak yang terbentuk sangat kecil.

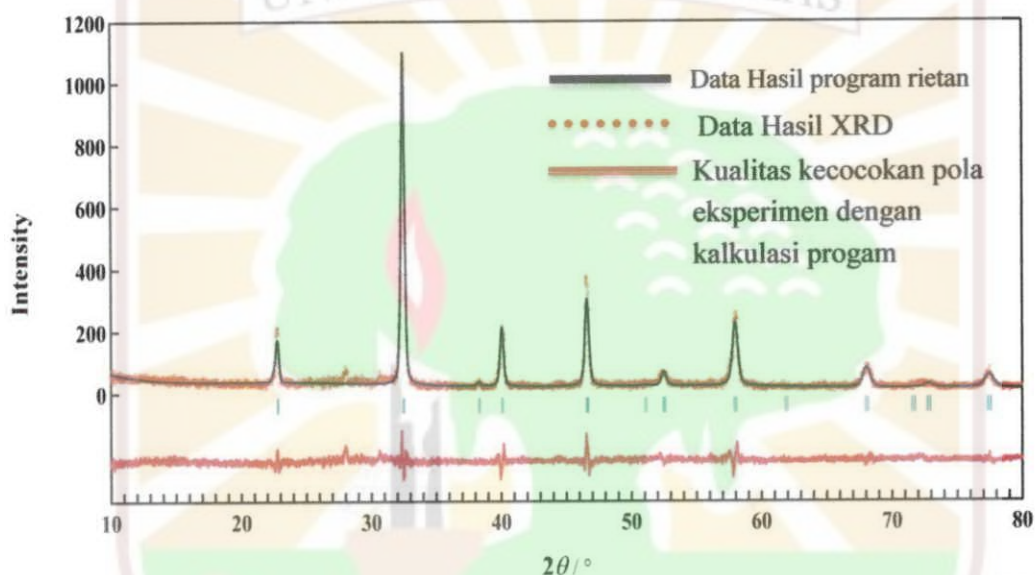
Pada penambahan 7% mol BT ke dalam 93% mol BNT, muncul puncak-puncak bahan asing yang terlihat pada sudut $27,36^{\circ}$ dan 38° . Puncak-puncak asing itu dihipotesa / diduga strukturnya masih dalam tahap pembentukan *perovskite* atau adanya terjadi kontaminasi terhadap udara disaat penghomogenisasian berlangsung. Sedangkan pada penambahan 20% mol BT pola difraksi *clear* menunjukkan struktur *perovskite* dan tidak memiliki puncak asing maupun puncak dari bahan dasar, Puncak-puncak yang telah terbentuk dari hasil pola difraksi.

4.2 Hasil dan pembahasan data hasil program RIETAN (Rietveld Analysis)

Setelah dilakukannya eksperimen dengan menggunakan XRD pada bahan BNT-BT kemudian dilanjutkan dengan menganalisis bahan BNT-BT dengan metode rietveld yang menggunakan program RIETAN, dari hasil program RIETAN didapatkan grafik intensitas terhadap 2θ yang terdapat pada gambar 4.2 dengan bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dan gambar 4.3 dengan bahan 80% mol BNT- 20% mol BT, data perbandingan antara data intensitas terhadap 2θ .

Pada umumnya parameter yang dihaluskan program RIETAN adalah parameter global yaitu parameter *background* (latar belakang), faktor skala,

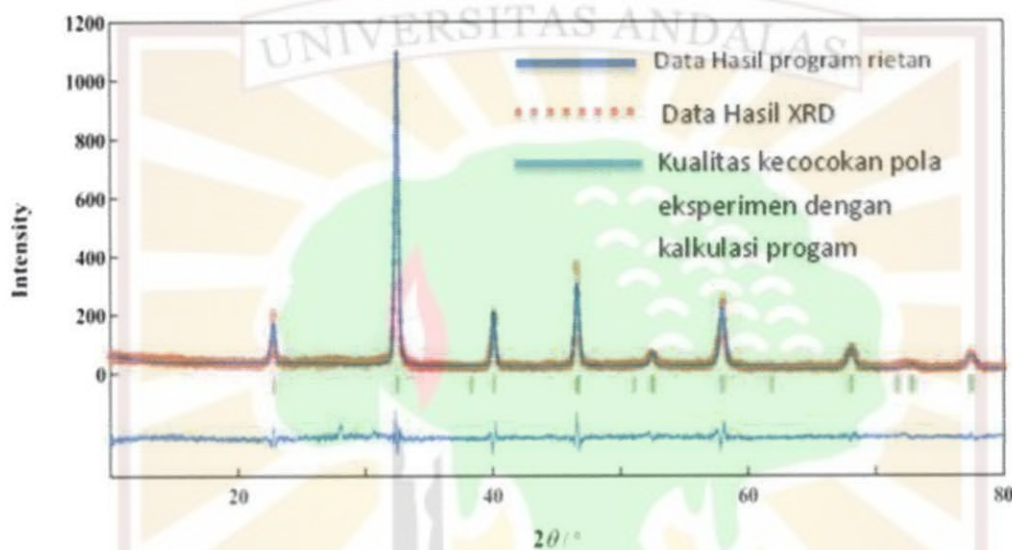
Parameter lebar puncak, parameter profil, parameter kisi, faktor hunian (penempatan) atom, parameter suhu keseluruhan dan parameter lainnya. Penghalusan bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dan bahan 80% mol BNT- 20% mol BT digunakan fungsi pseudo-voight konvensional (dengan persamaan 2.5). hasil dari program digambarkan dalam bentuk gambar grafik 4.2 dan 4.3 berikut:



Gambar 4.2: Pola difraksi hasil program RIETAN untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT

Untuk grafik pola difraksi hasil program RIETAN untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dapat dilihat pada gambar 4.2, dimana dengan intensitas observasi ditampilkan dengan titik-titik merah dan intensitas hasil kalkulasi Rietan ditunjukkan dengan garis hitam. Dilihat dari grafik 4.2 yang diperoleh terlihat adanya puncak yang muncul diantara sudut 2θ yaitu antara 30° - 40° . Dari tabel 4.2 dapat dilihat nilai puncak asing yang memiliki intensitas dengan sudut 2θ yaitu 38.26° (Lampiran 3) dengan intensitas observasinya 2237 dan intensitas kalkulasinya 2461 pada hkl (111). Puncak asing ini dapat memberikan pengetahuan kepada kita, bahwa dengan penggunaan program RIETAN ini

menampilkan puncak-puncak intensitas observasi yang hilang selama XRD. Puncak asing yang terlihat pada bahan 93% mol BNT- 7% mol BT adanya hipotesa bahwa pada struktur tetragonal dengan *spacegroup* $I4/mcm$ memiliki puncak pada hkl (111).



Gambar 4.3: Pola difraksi hasil program RIETAN untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT

Untuk hasil pola difraksi pada 80% mol BNT- 20% mol BT memiliki perovskite yang tepat, tidak terlihatnya ada puncak seperti yang ada pada gambar 4.2, dapat disimpulkan dari hasil XRD yang telah dilakukan tepat sesuai dengan hasil kalkulasi dari program RIETAN.

Penghalusan dengan metode Rietveld dilakukan dengan mengasumsikan bahwa pada panduan ini terdiri dari srtuktur kristal yang *perovskite*. Struktur kristal *perovskite* yang berhasil dalam penggunaan software RIETAN untuk penghalusan bahan BNT-BT dengan komposisi bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dan gambar 4.3 dengan bahan 80% mol BNT- 20% mol BT, dengan struktur

Tetragonal dengan nomor 140 *space group* I4/mcm dengan parameter-parameter yang telah diketahui pada data lampiran 2 kemudian dihaluskan dengan program RIETAN.

Seperti yang telah disebutkan pada teori sebelumnya, dalam hasil program RIETAN ini sangat bergantung dari faktor-faktor reabilitas. Hasil selisih statistik antara intensitas observasi dengan intensitas kalkulasi (faktor-faktor reabilitas) dapat dilihat pada tabel 4.1 berikut:

Tabel 4.1: Faktor-Reabilitas keberhasilan dari penghalusan Rietan dari bahan BNT-BT

BNT-xBT	Faktor Reabilitas (%)						
	Rwp	R _i	R _p	R _f	R _R	Re	S
7% mol	19,73	9,18	14,87	7,4	34,68	15,56	1,2711
20% mol	15,31	9,34	11,93	5,9	32,21	14,65	1,0446

Hasil dengan faktor Rwp = 19,73% untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT, hasil yang lebih baik diperoleh dari bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dengan Rwp = 15,31%, dengan nilai persen yang rendah dibawah 20% berarti pola intensitas pengamatannya sudah bisa dikatakan sudah mendekati secara statistik dengan baik oleh program RIETAN, namun hal ini tidak mutlak karena masih ada faktor S sebagai ukuran kesesuaian antara model dengan hasil pengamatan. Untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT memperoleh faktor S = 1,2711% dan untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dengan nilai faktor S = 1,0446%. Jadi dapatlah disimpulkan yaitu jika $S \leq 1,5$, maka hasil analisis Rietveld

sudah memiliki kesesuaian yang baik. Dan ini didapatkan yang terbaik pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT.

Tabel 4.2: Puncak-puncak yang muncul pada bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dari hasil penghalusan Rietan

2θ awal	2θ	Intensitas	Intensitas	hkl
	Rietan	Observasi	Kalkulasi	
22,78°	22,79°	14344	18063	110
32,48°	32,47°	100000	95269	112
-	38,26°	2237	2461	111
40,1°	40,04°	32494	34283	202
46,58°	46,55°	49007	46149	220
52,26°	52,45°	8167	4329	222
57,04°	57,90°	44436	40948	312
67,96°	68,01°	18686	14291	224
77,14°	77,34°	10370	8981	420

Pada bahan 93% mol BNT- 7% mol BT, pergeseran sudut 2θ terjadi pada hasil dari XRD dengan hasil program RIETAN, yaitu sudut 22,78° ke sudut 22,79° dengan intensitas juga bertambah, untuk sudut 2θ pada 32,48° juga terjadi pergeseran, namun pergeseran ini lebih mengecil, dari 32,48° menjadi 32,47°, pergeseran sudut pada 40,1° dan 46,58° juga terjadi pengecilan sudut berturut-turut ke sudut 40,04° dan 46,54°. Pada sudut 2θ dengan nilai 52,26° terjadi pergeseran sudut 2θ yang lebih besar, diikuti dengan sudut pada 57,04°, 67,96° dan 77,14° dengan nilai pergeseran berturut-turut 52,45°, 57,9°, 68,01°, 77,34°.

Perbedaan bidang hkl literatur dengan bahan 93% mol BNT- 7% mol BT sangat terlihat dan tidak ada hasil yang sama, bidang hkl pada literatur (101), pada bahan 7% mol BT (110), bidang hkl pada literatur (110), sedangkan pada bahan 7% mol BT (112), bidang hkl pada literatur (021), pada bahan 7% mol BT (202),

bidang hkl pada literatur (202), pada bahan 7% mol BT (220), bidang hkl pada literatur (211), pada bahan 7% mol BT (222), bidang hkl pada literatur (122), pada bahan 7% mol BT (312), bidang hkl pada literatur (024), pada bahan 7% mol BT (224). Hasil perbedaan ini sangat dipengaruhi oleh perbedaan struktur kristal yang terbentuk, adanya bidang yang muncul pada hasil Rietan 7% mol BT tidak ada pada literatur Saxena, (2010), yaitu pada bidang (111) sudut 2θ $38,26^\circ$

Tabel 4.3: Puncak-puncak yang muncul pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dari hasil penghalusan RIETAN

2θ awal	2θ Rietan	Intensitas Observasi	Intensitas Kalkulasi	hkl
$22,34^\circ$	$22,61^\circ$	13402	15906	110
$31,9^\circ$	$32,04^\circ$	100000	92878	112
$39,36^\circ$	$39,58^\circ$	30107	34283	202
$45,96^\circ$	$46,18^\circ$	49007	37898	220
$51,34^\circ$	$51,91^\circ$	5384	3809	222
$57,16^\circ$	$57,31^\circ$	32803	32659	312
$66,98^\circ$	$67,02^\circ$	15136	12820	224
$76,52^\circ$	$76,65^\circ$	7169	6016	420

Pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT, pergeseran sudut 2θ terjadi pada hasil dari XRD dengan hasil program RIETAN, yaitu dari sudut $22,34^\circ$ ke sudut $22,61^\circ$, untuk sudut $31,9^\circ$ menjadi $32,04^\circ$, pergeseran sudut pada $39,36^\circ$ menjadi sudut $39,58^\circ$, dari sudut $45,96^\circ$ menjadi sudut $46,18^\circ$. Pada sudut 2θ dengan nilai

51,34⁰ menjadi sudut 51,91⁰, dari sudut 57,16⁰ menjadi sudut 57,31⁰, dari sudut 66,98⁰ menjadi sudut 67,02⁰, dan dari sudut 76,52⁰ menjadi sudut 76,65⁰. Dari hasil yang telah dilihat, maka semua sudut pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT hasil dari program RIETAN, semuanya sudut 2 θ nya bertambah besar.

Perbedaan bidang hkl literatur dengan bahan 80% mol BNT- 20% mol BT sangat terlihat dan tidak ada hasil yang sama hal yang serupa seperti bahan 93% mol BNT- 7% mol BT, bidang hkl pada literatur (101), pada bahan 20% mol BT (110), bidang hkl pada literatur (110), pada bahan 20% mol BT (112), bidang hkl pada literatur (021), pada bahan 20% mol BT (202), bidang hkl pada literatur (202), pada bahan 20% mol BT (220), bidang hkl pada literatur (211), pada bahan 20% mol BT (222), bidang hkl pada literatur (122), pada bahan 20% mol BT (312), bidang hkl pada literatur (024), pada bahan 20% mol BT (224). Hasil perbedaan ini sangat dipengaruhi oleh perbedaan struktur kristal yang terbentuk, adanya bidang (111) yang muncul pada hasil RIETAN bahan 93% mol BNT-7% mol BT tidak ada pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT. Dalam hal ini diduga hasil penghomogenisasian yang diperoleh pada bahan 93% mol BNT-7% mol BT belum sempurna seperti bahan 80% mol BNT- 20% mol BT. Namun pengujian pada bahan ini haruslah dilanjutkan pada tahap berikutnya. Agar mendapatkan kepastian sifat-sifat piezoelektrik yang dimiliki masing-masing bahan.

Tabel 4.4: Konstanta kisi, dan grup ruang dari bahan BNT-BT

BNT- xBT	Konstanta Kisi			Grup ruang
	a=b (Å)	C (Å)	$\alpha = \beta = \gamma$	
7%mol	5.75	7.17	90 ⁰	I4/mcm No.140
20% mol	4.84	4.69	90 ⁰	I4/mcm No.140

Tabel 4.5: Koordinat fraksional atom(x,y,z), faktor hunian (penempatan) atom (g) dari bahan BNT-BT

BNT7% BT	g	x	y	z	BNT20 %BT	g	x	y	z
Bi3+	0,465	0	0,5	0,25	Bi3+	0,4	0	0,5	0,25
Na+	0,465	0	0,5	0,25	Na+	0,4	0	0,5	0,25
Ba2+	0,07	0	0	0,25	Ba2+	0,2	0	0	0,25
Ti3+	1	0	0	0	Ti3+	1	0	0	0
O- (1)	1	0	0	0,25	O- (1)	1	0	0	0,25

Pada tabel 4.4 diperoleh hasil penghalusan dari program Rietan dengan parameter kisi untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT adalah a=b 5,75Å dan c=7.17 Å. Hasil yang lebih kecil didapatkan oleh bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dengan parameter kisi a=b 4.84 Å dan c=4.69 Å. Dilihat dari hasil ini, struktur kristal tetragonal dari bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dan bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dengan koordinat fraksional atom(x, y, z), dan faktor hunian / penempatan atom (g) dapat dilihat pada tabel 4.5.

Koordinat fraksional atom (x, y, z) dapat dilihat dari data yang sudah ada (*Crystallography Open Database (COD)*, <http://www.crystallography.net>), dalam

penelitian ini tidak diperhalus (refinement). Demikian juga dengan faktor hunian / penempatan atom (g) juga tidak di atur untuk diperhalus. Faktor hunian BNT-BT dengan nilai yang didapat dari nilai fraksi molnya yang sudah stoikiometri.

Dari hasil semua karakterisasi dan analisis, perbedaan antara bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dengan 80% mol BNT-20% mol BT dapat terlihat jelas pada hasil program RIETAN. Hasil dari program merupakan tahap awal, dan belum menunjukkan bahan dari 80% BNT-20% mol BT lebih baik daripada 93% mol BNT-7%mol BT. Tahap dalam pencapaian sifat piezoelektrik yang baik dan dalam mewujudkan bahan yang ramah lingkungan tanpa bahan timbal ini perlu diteliti dan dikembangkan lagi. Banyak perlakuan yang harus diberikan terhadap material piezoelektrik ini seperti mengukur konstanta dielektrikunya, kemudian pemolangan dalam mengukur kurva histerisisnya, dan yang terpenting mengukur konstanta piezoelektrik BNT-BT.

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian yang telah dilakukan, yaitu sintesis BNT-BT dengan penambahan % mol BT, kemudian dilanjutkan dengan analisis RIETAN. Sehingga berdasarkan penelitian didapatkan kesimpulan sebagai berikut :

1. *Performance* yang ditingkatkan pada bahan BNT dengan penambahan % mol BT yaitu 7% dan 20% mendapatkan struktur yang *perovskite*. Dalam penelitian ini dimaksudkan dengan pengoptimalan dari karakteristik yang dimiliki bahan BNT dengan penambahan bahan doping BT. Dalam penelitian ini dapat dilihat dengan hasil dari sintesis yang sesuai dengan literatur. Pada tahap awal ini (sintesis) dimulai dengan menghasilkan proses penghomogenisasian dan sintering yang tepat dan sesuai dengan pembuktian menggunakan program RIETAN.
2. Dari hasil metode Rietveld dengan menggunakan program RIETAN pada bahan 93% mol BNT-7% mol BT dan bahan 80% mol BNT-20% BT mendapatkan struktur kristal tetragonal dengan grup ruang $I4/mcm$ No.140.
3. Pencocokan antara hasil kalkulasi dengan observasi dalam penghalusan Rietan dengan hasilnya dapat dilihat pada harga *Reabilitas* (kualitas kecocokan antara hasil penelitian dengan hasil kalkulasi program). Untuk indikator reliabilitas dari bahan 93% mol BNT- 7% mol BT adalah *Rwp* 19,73%. Harga *Reabilitas* yang lebih baik didapat pada bahan 80% mol

BNT- 20% mol BT dengan Rwp adalah 15,31%. Semakin kecil faktor R semakin baik pula pencocokan antara pola difraksi hasil observasi dengan hasil kalkulasi, namun hal ini tidak mutlak karena masih ada faktor S sebagai ukuran kesesuaian antara model dengan hasil pengamatan, yaitu jika $S \leq 1,5$ maka hasil analisis Rietveld sudah memiliki kesesuaian yang baik. Untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dengan faktor $S = 1,2711\%$ dan pada bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dengan nilai faktor $S = 1,0446\%$.

4. Dari penelitian ini disimpulkan secara keseluruhan dari bahan BNT-BT adalah mengindikasikan bahwa cuplikan (pola) merupakan bahan kristalit yang memiliki struktur piezoelektrik dilihat pada kesesuaian dari data XRD dengan program RIETAN.

5.2 Saran

1. Dalam melakukan penghomogenisasian bahan, sebaiknya dilakukan dalam kotak desikator dengan tujuan untuk menjaga kemurnian bahan pada saat penghomogenisasian berlangsung, bahan tidak terkontaminasi dengan udara ataupun zat-zat lain disekitar.
2. Pada tahap pengkompaksian, sebaiknya dilakukan dengan menentukan waktu pada saat tekanan diberikan, kemudian ditahan pada tekanan yang diinginkan (pada penelitian ini ditahan selama 3 menit pada tekanan 3500 psi) dan disaat tekanan dilepaskan pada bahan. Waktu yang berikan pada setiap pelet, pada penelitian ini dilakukan selama 5 menit atau lebih lama lebih baik, sehingga partikel-partikel dari bahan dapat tersusun secara optimal.

3. Pada saat sintering berlangsung, sebaiknya dilakukan kalsinasi terlebih dahulu, pada penelitian ini dilakukan selama satu jam dengan temperatur yang digunakan 300°C , bertujuan untuk menghilangkan zat-zat pengotor pada bahan.
4. Dalam menentukan bahan BNT-BT yang bersifat piezoelektrik yang lebih baik, disarankan untuk penelitian selanjutnya, melanjutkan mengukur konstanta dielektrikum, melakukan pemolangan, suhu Curie, pengukuran kurva histerisis dan konstanta piezoelektrik dari BNT-BT serta analisis posisi atom-atomnya.



DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Ahda and Mardiyanto. 2010. *Synthesis of Lead Free Piezoelectric BNT Ceramics by Use of Solid State Reactionn Method*. Batan. Tangerang
- Damjanovic, 2001, *piezoelctric properties of perovskite ferroelectrics; unsolved problems and future research*, Annales de chimic science des materiaux
- Donnelly, Harada, and Yamashita. 2007. *Crystal Growth and Elecrical Properties of Lead-Free Piezoelectric Material $(\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5})\text{TiO}_3\text{-BaTiO}_3$* . Japanese Journal of Applied Physics
- Hussain dkk, 2009, *Anisotropic electrical properties of $\text{Bi}_{0.5}(\text{Na}_{0.75}\text{K}_{0.25})_{0.5}\text{TiO}_3$ ceramics fabricated by reactive templated grain growth (RTGG)*, Applied Physics, Japan
- Izumi, F. , “*Software package for The Rietveld Analysis and Simulation of X-Ray and Neutron Diffraction Pattern*”, Rigaku
- Izumi, F. 1993. *ÔThe Rietveld Method,Ô* ed. by R. A. Young, Oxford University Press
- Jones and P.A. Thomas. 2002, *Investigation of the Structure and Phase Transitions in the Novel A-site Substituted Distorted Perovskite Compound $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$* . Acta Crystallogr
- Lee dkk, 2007, *Chemical Composition and Tolerance Factor at the Morphotropic Phase Boundary in $(\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{TiO}_3\text{-Based}$ Piezoelectric Ceramics*, Science Direct, Taiwan
- Moharana. 2009. *Synthesis Of Low Loss Lead Free Piezoelectric BNTBT Ceramics*. Department Of Ceramic Engineering National Institute Of Technology: Rourkella. India

Nofitriana. 2010. *Sintesis dan Karakterisasi Bahan Piezoelektrik BNT dengan Penambahan BT*. Skripsi Sarjana Fisika Universitas Andalas : Padang.

Rietveld, H. M. 1967. *Acta Crystallogr.* Japan

Rietveld, H. M. 1969. *J. Appl. Crystallogr.* Japan

Rusdiana, D.2010. *Struktur Kristal [Compatibility Mode]*. Fisika Universitas Indonesia : Jakarta.

Saxena, K. 2010. *Synthesis and characterisation of lead free piezoelectric nbt-bt ceramic*. Department Of Ceramic Engineering National Institute Of Technology: Rourkella. India

Sharma, 2006, *Studies on structural dielectric and Piezoelectric properties of doped PCT ceramics*, Deemed University, Punjabi

Smolenskii et al. 1961. *Synthesis and dielectric properties of substituted barium titanate ceramics*. Sov. Phys. Solid State

Smolenskii, V. A. Isupov, A. I. Agranovskaya, and N. N. Krainik, 1961. *Dielectric Properties of Bismuth Doped Barium Titanate (BaTiO₃) Ceramics*. Sov. Phys. Solid State 2, 2651.

Takenaka, K. Maruyama, and K. Sakata. 1991. *Bismuth Sodium Titanate ((Bi^{1/2}Na^{1/2})TiO₃)-Barium Titanate System for Lead-free Piezoelectric Ceramics*. Jpn. J. Appl. Phys

Triwahyuni, 2010, *Sintesis Dan Karakterisasi Bahan Piezoelektrik Bi_{0,5}Na_{0,5}TiO₃ (BNT) Dengan Metoda Molten Salt*, Universitas Andalas, Padang

Wiendartun.2005. *Pendahuluan Fisika Zat Padat*. Bahan ajar Pendidikan Fisika Universitas Indonesia : Jakarta.

LAMPIRAN



Lampiran 1

Untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT

Ada 3500 data intensitas hasil XDR

55	56	48	61	46	46	49	44	59	42	32	56
62	64	50	49	53	49	48	48	44	29	37	53
55	53	58	58	40	66	44	62	49	35	55	38
53	46	64	59	48	56	48	44	49	50	38	38
76	66	55	45	55	49	56	46	44	50	35	35
66	66	62	40	48	53	49	45	53	53	48	48
44	61	64	48	44	64	44	38	44	44	53	56
45	53	58	56	56	50	50	53	40	45	48	46
49	59	56	50	59	53	48	53	48	45	48	48
79	49	53	52	50	48	56	44	53	49	44	44
44	72	59	58	49	50	46	44	46	59	38	40
56	53	53	44	66	44	56	53	50	36	37	46
53	50	44	55	59	50	37	38	38	55	46	49
37	48	62	44	45	53	52	50	34	50	32	38
56	66	55	62	53	44	35	44	53	52	56	32
61	66	59	55	62	44	56	45	48	52	48	53
56	44	62	48	62	56	48	50	52	45	50	30
69	50	56	55	49	48	40	53	58	46	56	37
50	55	44	42	48	56	62	52	36	37	53	45
66	59	55	67	55	64	44	38	44	64	38	38
50	50	58	44	55	52	52	38	46	46	34	38
61	50	56	58	53	52	52	53	52	38	48	38
56	45	52	49	49	53	44	48	48	35	48	40
55	64	64	50	53	50	45	44	49	55	38	45
61	52	61	48	53	46	52	53	61	38	35	35

40	34	44	36	38	32	32	27	32	42	37	48
31	32	44	41	26	38	27	37	37	23	38	61
38	35	37	37	35	37	37	26	32	35	31	53
44	48	48	34	31	38	38	35	35	40	28	56
41	44	37	44	30	44	48	28	31	45	32	66
38	27	40	42	38	32	26	32	40	37	20	61
40	36	42	41	38	32	38	40	26	34	35	58
36	34	38	32	28	32	35	36	29	32	38	77
44	38	37	38	35	34	38	30	26	26	34	79
38	44	32	48	38	32	40	29	37	28	45	62
40	38	48	36	32	32	42	37	40	28	35	67
42	24	34	28	41	29	32	49	30	32	48	104
40	38	44	38	41	44	45	34	30	41	36	104
44	31	24	37	32	44	41	41	28	41	34	94
48	44	35	36	35	41	32	44	42	23	41	119
38	32	29	44	28	31	28	35	32	32	36	135
45	34	34	34	40	46	38	44	35	26	37	161
37	50	44	36	42	40	25	38	29	40	38	188
41	32	41	48	45	25	36	35	32	41	38	202
49	46	41	38	44	30	46	46	34	32	49	193
48	44	41	36	41	30	26	40	27	21	44	213
38	34	38	48	38	37	38	32	38	36	42	210
50	34	41	36	24	34	44	30	32	40	48	196
50	48	44	35	29	26	38	35	46	36	50	159
42	38	35	29	32	27	30	42	32	31	44	142
31	40	36	32	38	40	34	24	44	32	34	102
30	31	35	35	41	42	30	36	40	42	34	114
42	53	42	40	28	34	31	42	38	32	50	88
42	42	45	36	30	32	38	34	34	35	49	71

67	38	38	36	49	40	38	50	36	44	49	44
61	31	31	37	46	32	41	53	32	37	38	41
55	24	34	46	38	42	38	38	49	35	49	36
67	34	36	34	50	37	38	44	44	37	58	37
53	37	32	28	42	36	36	41	35	41	50	37
35	46	40	29	40	45	48	52	35	31	40	36
56	26	38	36	37	41	40	46	40	50	48	50
41	38	22	45	28	34	44	35	55	49	38	40
46	38	38	38	26	41	32	35	48	42	48	45
44	45	30	30	32	44	44	28	30	35	50	40
38	38	31	42	35	48	38	41	34	42	48	32
44	38	31	34	44	40	40	41	50	29	34	29
41	31	30	44	36	35	50	28	58	32	38	29
53	48	35	44	36	32	41	41	46	34	30	46
45	38	44	36	35	32	38	35	69	38	30	45
32	35	26	40	35	41	56	28	56	42	37	44
44	41	25	38	31	41	41	38	69	42	44	40
36	46	25	38	36	34	28	56	67	50	40	46
42	32	27	37	41	28	34	29	71	46	32	31
44	44	30	32	42	38	21	46	66	37	44	45
40	38	27	29	38	18	44	32	72	44	42	41
49	30	32	36	38	44	36	42	86	38	34	45
48	40	32	32	37	45	35	42	66	32	29	45
32	35	36	44	37	52	37	34	74	44	46	44
46	36	35	42	37	42	30	49	67	29	59	36
44	32	42	52	41	28	31	38	79	37	38	46
34	40	35	38	49	42	45	50	67	37	35	36
48	34	37	40	37	24	50	34	72	50	36	35
52	26	38	44	36	35	31	44	42	38	46	27

38	38	53	56	376	94	48	35	30	23	37	24
34	46	40	44	437	76	38	28	31	25	34	22
37	48	50	41	511	69	36	24	26	31	32	22
38	53	50	56	557	86	32	42	20	15	28	22
21	53	53	46	681	76	38	29	25	37	14	22
41	45	46	56	812	74	44	32	41	21	32	20
34	71	53	35	864	58	27	32	25	20	25	24
35	55	50	56	876	62	38	26	24	18	23	22
38	58	41	53	967	56	37	35	27	27	21	32
32	58	44	56	1018	55	23	22	21	34	17	29
48	52	48	44	1063	34	32	31	20	29	21	28
32	52	48	55	1043	58	19	27	22	31	25	21
36	50	38	72	1089	48	24	26	23	24	27	31
35	61	38	53	1050	53	37	19	30	28	26	26
25	45	50	58	986	38	30	28	25	20	30	22
38	44	50	72	888	50	30	16	26	21	21	31
41	52	46	72	864	42	30	19	20	23	27	23
41	36	41	74	734	45	32	21	28	29	29	27
44	42	50	88	660	32	32	25	21	27	29	22
38	44	50	104	586	37	27	21	24	20	34	14
36	52	49	117	484	38	38	23	29	20	24	15
34	34	59	121	384	35	35	32	35	28	22	30
41	35	46	128	313	38	25	20	29	26	21	19
37	48	44	149	286	32	20	15	21	32	23	18
32	34	49	151	207	42	27	30	28	26	27	23
45	48	44	213	185	31	18	15	26	31	22	16
45	32	44	225	174	41	32	22	27	34	34	16
42	42	46	256	117	30	36	29	40	28	21	27
44	59	56	299	119	35	29	29	15	32	18	19

22	16	21	21	34	67	38	32	36	25	27	19
19	22	27	13	22	76	53	20	16	29	19	24
21	24	24	26	21	96	45	23	19	32	26	19
21	24	19	15	24	96	31	24	26	23	30	20
32	20	31	31	26	83	37	27	25	23	25	18
19	28	29	17	24	90	34	28	26	26	20	18
17	29	30	19	15	121	34	27	32	23	20	23
21	23	27	22	18	114	37	23	20	24	30	18
21	23	27	21	28	94	37	28	38	14	21	19
28	15	38	22	32	137	36	23	25	14	23	17
23	20	34	22	27	151	34	27	27	17	23	19
28	23	30	28	24	151	21	26	22	25	21	26
20	26	32	16	25	188	32	24	24	23	19	20
24	25	40	24	28	196	36	32	20	17	18	18
24	25	46	22	26	193	28	28	17	21	26	20
17	19	38	17	28	188	24	24	22	28	20	24
30	27	27	27	20	216	29	30	28	18	23	23
17	21	40	25	27	202	26	18	26	19	28	18
24	24	27	17	44	185	26	31	22	21	19	18
27	21	32	16	23	193	26	23	32	22	17	21
25	22	29	24	38	174	26	28	27	28	17	27
28	24	32	23	35	190	16	17	21	20	26	21
21	14	32	20	42	172	18	20	19	22	16	19
25	17	21	21	46	128	23	23	23	26	29	23
23	25	35	19	44	117	34	17	25	21	21	25
22	28	19	22	40	85	18	19	20	17	24	19
20	19	21	23	67	85	20	27	17	29	14	24
23	36	20	18	62	59	27	29	19	20	16	18
27	17	25	26	69	56	20	23	20	27	16	25

23	20	25	21	42	161	34	27	26	25	26	22
25	32	14	19	42	164	29	26	22	29	31	19
26	27	24	35	53	139	32	25	24	22	23	22
23	21	23	37	62	117	32	27	28	28	31	23
30	17	23	35	48	100	19	24	18	36	24	38
24	25	18	25	64	114	30	34	27	29	26	34
20	29	19	28	71	88	27	31	24	22	17	26
15	36	24	27	86	90	26	24	24	27	24	22
12	25	17	26	102	71	35	29	23	28	26	28
23	34	24	22	98	71	30	25	24	18	36	21
26	36	28	31	106	50	26	23	36	37	28	18
23	29	25	30	112	62	25	32	28	20	32	18
29	30	25	30	121	53	22	35	29	21	23	29
29	22	23	29	154	32	21	17	26	29	18	14
29	29	18	40	207	46	32	21	30	25	10	28
26	30	24	35	231	34	32	25	21	24	21	28
26	30	30	32	276	42	37	23	21	29	31	23
22	30	20	38	286	29	26	26	21	30	24	30
37	20	23	31	353	38	23	28	21	18	27	23
26	29	25	23	376	29	41	30	23	27	27	29
31	31	23	26	365	28	23	20	21	21	20	35
24	28	18	21	369	38	24	20	26	23	19	26
28	28	27	26	350	34	22	29	28	30	22	29
26	25	30	29	342	31	26	22	25	27	30	25
23	34	29	27	310	34	26	26	38	20	32	29
31	28	26	36	324	37	22	25	30	28	19	30
25	29	20	35	266	44	29	21	31	25	17	29
17	22	28	48	269	34	24	27	22	27	26	31
38	23	23	34	202	30	35	15	31	27	32	22

36	30	38	58	32	34	25	18	22	28	27	32
26	37	38	66	24	30	19	22	31	24	21	36
30	32	30	62	24	32	19	31	18	22	25	50
15	37	38	64	35	30	27	22	21	44	21	25
38	36	31	56	32	32	32	25	29	17	25	32
27	26	37	50	30	32	24	26	21	34	23	44
18	30	37	50	26	29	34	36	21	32	32	44
31	35	42	64	23	20	29	16	24	25	25	45
18	21	48	56	37	26	24	25	19	17	24	48
19	30	52	53	28	16	24	24	30	23	26	50
32	27	56	44	32	16	27	23	29	21	23	44
41	30	44	36	23	25	27	14	25	38	26	59
32	28	59	41	31	36	35	26	19	32	23	50
35	26	58	42	29	19	23	34	29	24	30	56
20	36	56	45	30	19	22	22	28	29	23	67
37	27	66	27	28	22	27	25	23	24	41	77
32	28	53	35	20	29	29	30	24	23	24	62
25	27	49	32	34	27	23	29	25	27	42	79
31	28	59	46	31	28	25	29	23	29	14	77
29	34	56	32	37	23	29	26	24	36	30	92
21	28	66	34	34	27	30	29	23	26	22	85
21	34	71	32	31	21	29	22	18	17	34	88
29	30	67	38	30	22	28	23	20	18	41	104
28	38	71	21	24	23	26	26	35	17	29	110
32	31	67	44	34	24	22	17	35	16	34	100
26	37	62	29	29	23	18	24	25	34	34	100
32	41	53	29	29	26	22	13	38	20	32	104
26	31	64	31	24	27	20	26	29	26	40	125
34	32	59	30	24	20	15	23	26	22	36	114

130	64	22	28	10	20	21	15	13	25	19	17
149	56	23	20	17	16	20	12	21	13	22	12
114	72	31	21	13	22	20	20	21	19	21	15
154	62	34	20	19	26	21	23	20	16	17	23
161	49	21	27	25	19	23	21	22	12	13	17
182	41	25	29	23	19	22	17	17	16	17	16
177	67	31	20	23	13	20	14	16	21	19	12
225	42	23	17	12	16	23	11	21	14	12	25
202	41	25	23	17	13	21	12	14	21	18	16
228	48	29	20	23	13	17	20	13	25	21	17
237	38	27	28	19	20	18	13	22	15	20	18
253	40	24	22	14	18	20	20	20	18	17	14
240	36	21	15	15	16	27	22	19	12	22	15
237	32	24	21	7	30	12	20	22	10	16	27
259	30	24	15	22	16	17	28	16	14	14	28
240	42	26	19	13	14	17	19	20	16	22	27
222	30	25	17	12	15	17	16	17	20	16	21
243	28	34	9	16	23	14	17	14	9	22	14
237	34	28	19	15	15	21	11	22	20	13	14
185	24	25	16	19	17	20	11	20	18	17	21
207	25	26	28	16	16	21	13	15	15	27	26
177	28	20	16	20	18	19	20	14	16	17	12
144	30	30	13	19	18	13	16	17	14	18	18
117	31	34	18	17	12	32	15	15	19	23	16
132	35	24	18	24	23	18	13	16	15	25	18
112	22	14	23	16	22	21	17	25	13	14	25
94	27	10	19	22	16	23	14	18	16	11	20
86	27	25	11	16	24	14	18	10	17	14	19
86	31	15	20	20	17	18	16	18	12	17	20

24	20	14	9	26	36	85	26	22	19	16	20
26	14	22	17	24	37	88	27	24	14	18	17
16	8	25	25	24	53	77	16	22	16	15	14
15	22	15	11	18	40	62	25	16	23	16	16
18	24	18	13	12	59	56	19	14	10	16	16
25	18	23	14	23	59	64	16	20	13	15	14
19	16	12	20	14	53	67	24	20	19	18	19
32	19	20	9	17	53	64	24	18	20	22	19
21	22	19	13	24	56	61	18	18	17	16	21
15	20	17	24	25	62	71	15	23	26	24	27
28	24	12	14	31	64	48	13	15	12	11	21
22	21	18	12	27	55	52	23	19	22	16	20
16	24	19	18	23	72	44	16	19	14	12	20
13	6	25	20	16	59	56	19	23	16	19	19
23	26	15	22	24	62	52	21	20	16	18	14
19	17	18	22	30	66	37	30	17	7	22	11
9	18	20	16	25	58	32	18	15	17	14	17
22	22	17	20	31	72	31	30	23	23	19	17
19	23	26	18	18	72	38	28	21	22	17	20
16	24	17	17	38	71	36	16	20	23	12	27
16	23	15	11	29	71	15	20	18	11	18	18
13	23	12	16	37	88	24	13	22	19	22	31
19	13	18	17	24	66	32	25	16	12	18	21
11	17	17	14	29	72	28	22	23	19	13	17
17	19	21	15	38	90	17	28	22	13	10	27
18	14	19	19	34	83	21	13	13	27	15	18
25	19	17	24	25	79	22	18	16	21	20	17
19	18	30	25	34	86	21	20	17	17	19	10
18	20	14	21	38	88	19	22	18	19	21	12

21	24	21	13	21	13	15	19	24	30	53	25
19	28	25	16	22	18	15	11	16	24	81	23
19	24	27	11	7	12	15	16	23	21	59	20
21	34	24	23	15	11	9	13	16	27	61	17
18	28	23	20	10	17	23	19	10	27	59	20
20	32	22	20	9	18	20	13	18	29	53	20
22	25	29	23	13	17	14	25	21	32	52	22
28	36	32	19	12	22	15	10	19	31	50	21
20	29	16	12	16	14	23	14	21	24	44	21
31	28	30	15	14	18	16	11	16	31	46	17
24	19	23	12	17	25	20	19	18	35	36	20
26	18	21	19	11	23	22	19	30	45	50	16
21	23	21	19	13	21	19	15	25	53	49	19
18	29	21	17	14	12	13	16	13	41	46	19
16	28	26	21	17	10	23	14	24	41	35	21
18	17	30	8	10	22	14	20	26	44	38	19
17	21	18	8	14	17	11	16	17	48	32	14
22	28	28	12	15	21	14	9	16	45	36	19
31	29	21	11	17	15	21	12	21	48	31	14
25	35	20	19	11	15	14	19	16	44	22	9
25	28	19	26	14	14	22	23	17	62	31	18
34	31	21	22	20	17	15	17	24	48	32	18
22	18	25	19	17	19	17	11	32	48	29	13
30	27	17	16	8	13	13	14	18	67	30	15
24	19	21	15	12	24	24	15	22	58	31	15
26	23	20	17	18	17	13	12	19	62	30	8
25	28	22	15	12	18	23	13	24	59	22	24
26	26	20	17	19	20	14	20	19	64	25	13
24	22	27	11	14	15	22	25	32	61	21	10

21	11	19	14	13	11	12	15	15	19	15	12
17	20	23	23	20	22	19	15	14	16	17	13
24	12	21	16	10	15	12	11	12	13	19	
12	15	14	5	12	11	16	15	17	14	21	
12	22	13	17	13	11	18	16	13	17	13	
24	15	14	16	14	16	19	24	20	13	22	

Untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT

Ada 3500 data intensitas hasil XDR

55	54	62	55	58	55	65	47	56	56	43	52
59	68	59	65	67	59	62	54	55	52	48	48
65	73	62	72	56	64	54	56	50	56	56	50
56	65	65	62	56	65	62	50	42	51	61	54
72	68	68	67	59	52	54	55	38	50	48	56
59	75	62	59	78	50	56	58	59	50	52	52
72	77	72	56	65	70	56	46	56	62	41	56
80	56	62	62	52	54	42	55	59	51	54	61
77	56	56	56	77	50	50	46	62	50	54	72
72	68	62	61	67	73	51	73	50	51	61	61
68	65	68	62	92	54	65	61	56	56	54	44
85	67	58	62	68	65	56	54	50	52	65	54
56	62	65	54	70	50	38	48	59	64	54	54
67	68	56	56	72	50	59	64	56	64	50	43
80	61	65	72	56	61	46	61	52	52	56	62
80	65	65	54	68	73	55	48	59	52	47	52
65	59	72	72	56	67	62	68	59	54	56	46
68	68	65	59	59	50	65	50	43	43	59	40
68	56	62	64	67	59	46	55	44	59	64	54

59	48	40	50	37	46	48	38	38	37	42	37
44	50	46	42	56	34	42	38	58	46	35	40
48	54	59	44	55	32	41	46	44	40	34	41
47	44	50	41	47	54	38	50	44	44	43	41
54	62	41	32	40	43	38	41	55	38	35	44
56	41	54	62	43	44	44	40	50	41	40	38
44	40	54	36	54	46	36	41	27	54	50	46
52	50	50	50	44	42	54	50	43	36	41	32
72	38	44	37	52	42	37	40	34	41	38	44
44	54	44	44	48	46	37	36	42	30	48	41
52	44	58	33	47	38	48	43	46	38	56	46
54	52	47	56	50	36	44	50	43	41	34	38
44	52	48	44	44	33	46	41	37	44	54	46
56	64	51	43	43	44	38	34	42	42	38	40
50	54	52	43	54	51	38	48	40	38	40	40
50	52	50	59	50	38	41	48	48	38	46	40
44	42	44	56	50	43	38	44	44	41	43	54
44	54	55	44	42	47	38	51	42	37	43	38
42	50	37	44	56	47	42	38	37	38	38	44
42	44	47	44	48	50	44	42	36	38	38	38
61	44	54	47	55	44	44	43	52	31	41	42
42	55	51	50	44	47	41	35	55	42	46	46
56	47	44	37	38	41	33	41	31	42	44	47
56	58	59	52	50	38	47	43	44	32	38	36
38	58	46	46	50	50	40	43	50	41	41	42
51	56	48	50	47	44	54	38	38	47	34	40
44	56	43	38	46	37	54	44	44	38	36	48
50	47	44	38	59	43	36	51	42	36	47	51
47	51	47	38	46	42	43	38	54	44	40	43

73	56	52	50	36	42	34	38	36	36	33	52	50
73	59	29	50	37	35	38	36	46	44	33	33	54
61	73	37	46	38	35	38	43	42	35	50	51	
82	68	43	41	43	44	38	38	52	43	47	38	
67	68	40	46	30	42	33	44	35	38	44	51	
70	92	46	38	31	41	42	50	38	44	41	48	
72	85	37	38	41	41	44	44	40	42	46	35	
67	96	41	34	47	34	40	34	34	41	34	33	
72	106	38	50	38	44	48	41	42	30	35	48	
73	92	47	41	43	34	42	44	38	38	44	47	
56	114	38	50	41	36	44	43	41	44	44	43	
51	134	48	46	38	38	44	46	29	51	44	40	
43	138	31	42	38	48	43	37	35	47	43	38	
67	141	38	51	36	35	46	42	42	44	38	46	
46	152	44	44	26	35	40	35	48	38	33	44	
54	143	44	44	37	50	52	61	37	44	34	44	
65	175	44	52	32	44	41	43	46	50	41	44	
54	143	36	43	37	44	43	46	47	41	54	44	
51	143	54	56	33	48	42	56	54	37	40	43	
40	145	64	38	44	34	41	41	48	37	37	37	
48	125	38	44	36	38	42	47	47	44	44	51	
42	116	47	43	38	33	42	41	34	42	48	42	
42	104	47	38	50	46	51	35	42	48	50	38	
48	104	51	46	41	38	44	32	46	51	42	38	
51	98	44	50	46	38	44	40	50	40	50	38	
47	100	50	48	35	37	34	33	44	43	50	40	
50	98	55	48	46	41	50	33	46	50	37	42	
54	92	50	38	44	46	36	34	36	37	44	46	
42	80	52	48	50	40	37	38	44	38	40	38	

36	40	44	54	54	114	906	78	38	42	32	36
44	38	33	46	68	98	796	73	46	29	35	32
48	56	37	54	68	127	824	67	29	40	36	30
31	46	42	46	38	106	719	59	40	33	23	28
41	46	33	46	56	136	730	51	36	36	32	37
40	38	48	50	51	143	621	56	36	37	36	25
36	41	50	55	58	162	582	68	38	34	33	40
44	42	46	40	54	172	503	68	25	34	36	27
38	44	54	38	72	162	443	54	33	32	38	33
43	55	40	52	62	216	410	56	38	38	26	24
44	51	38	54	62	222	371	62	34	36	28	36
54	55	47	51	44	243	316	50	41	20	22	33
40	47	42	55	59	272	285	46	37	27	38	26
44	48	41	43	56	285	252	46	38	32	34	30
40	46	41	59	47	359	225	41	34	34	25	26
44	46	42	65	51	367	196	51	36	38	42	44
38	44	46	44	65	422	155	48	42	32	36	31
40	38	47	42	54	494	145	47	43	40	42	34
46	41	51	41	48	558	136	52	30	42	34	34
41	42	42	44	64	616	129	34	38	34	25	29
42	33	48	59	65	631	131	46	37	33	21	21
44	46	46	62	68	735	131	42	44	29	31	19
33	47	52	59	80	757	98	38	29	42	37	35
46	41	51	47	83	751	108	41	42	36	25	23
38	54	58	54	83	847	82	44	31	36	32	26
37	40	52	46	94	888	85	31	33	38	33	31
46	50	44	55	94	936	80	44	27	36	38	25
44	43	50	56	89	924	68	41	41	30	34	32
54	47	50	54	89	924	82	44	37	33	37	28

22	24	33	27	27	30	33	175	42	30	21	34
30	24	24	27	26	36	44	183	33	32	20	25
36	28	14	25	23	32	43	136	32	26	31	22
27	31	26	25	34	28	46	136	24	34	29	42
32	28	35	25	31	22	52	118	32	32	21	21
19	30	36	28	32	43	41	116	35	19	26	24
38	28	27	30	22	28	44	91	32	36	22	27
27	31	24	27	27	33	56	96	22	20	26	32
28	25	32	24	35	28	67	91	31	24	24	23
31	30	23	21	35	29	48	77	22	30	24	22
27	23	24	40	33	28	68	65	38	23	28	23
27	27	19	18	29	27	77	80	33	26	27	28
28	25	29	25	33	33	73	61	27	27	24	26
31	29	23	22	32	40	98	70	27	23	27	29
28	24	29	19	30	27	87	54	19	21	26	25
30	25	27	25	38	34	108	46	32	26	25	19
31	29	24	23	29	28	123	54	36	22	30	35
29	30	28	30	28	34	143	50	34	31	24	23
26	31	29	32	28	37	155	34	32	24	21	32
29	35	26	25	27	23	160	46	25	24	31	28
23	29	27	26	32	43	208	35	26	25	19	19
30	27	29	32	35	36	202	40	34	25	38	25
27	25	29	26	24	31	213	47	25	25	33	24
33	33	34	38	34	33	194	31	29	27	31	21
26	37	22	21	26	38	205	25	34	28	23	31
33	20	29	24	27	40	199	33	36	26	27	26
37	30	21	29	28	37	208	33	28	26	30	24
36	36	29	31	30	37	208	37	33	31	33	16
25	24	23	26	32	47	199	35	36	25	21	29

26	37	27	30	34	62	175	62	38	23	36	29
23	33	23	33	38	65	175	68	36	26	31	37
29	24	33	24	36	56	150	50	32	29	29	27
20	21	33	30	31	64	219	65	29	23	27	34
27	28	34	32	36	67	222	50	28	32	32	35
27	29	33	31	30	73	219	50	36	34	26	23
24	25	22	31	38	50	205	56	32	33	30	38
26	31	30	29	40	73	194	47	32	24	32	28
34	26	31	23	35	78	188	44	26	32	26	44
24	30	29	40	40	70	170	44	29	35	29	30
26	22	30	22	44	75	205	35	27	40	27	28
33	28	25	38	41	91	196	35	38	27	34	34
22	27	28	36	40	73	157	54	46	33	30	24
28	36	24	29	47	80	162	44	31	30	30	30
23	36	30	37	44	120	180	44	42	34	26	40
24	32	33	29	52	83	155	33	30	29	31	26
30	29	24	30	54	82	143	54	50	36	33	30
23	24	32	31	50	123	157	35	24	31	31	40
23	24	33	41	51	123	157	42	33	27	33	40
27	26	28	27	48	116	134	44	32	25	33	34
30	26	28	38	41	127	127	41	35	31	28	24
24	29	34	34	59	136	120	38	25	33	35	25
26	28	35	35	52	129	114	48	34	31	22	46
26	25	24	25	59	129	104	32	38	26	38	33
20	27	31	28	54	136	87	34	30	22	24	22
25	27	40	29	59	134	96	29	29	35	30	32
30	23	24	33	61	162	82	42	35	29	33	34
24	26	27	34	72	150	73	38	31	26	30	31
17	24	38	40	77	150	80	40	34	22	27	33

26	22	24	36	59	33	26	35	32	30	26	29
41	35	32	44	51	36	32	22	32	30	34	31
27	30	38	36	40	44	34	29	27	37	33	30
31	38	38	30	48	40	32	31	33	35	23	31
25	30	26	43	51	37	38	34	36	30	34	30
35	32	29	33	50	42	26	29	41	22	34	32
35	29	27	38	54	30	23	36	23	31	34	38
37	32	31	40	52	38	36	31	38	37	34	34
25	42	43	50	48	36	41	34	29	27	34	32
29	29	34	37	37	31	28	28	32	32	29	37
36	29	43	50	47	28	34	26	32	32	40	43
33	29	44	34	56	33	27	26	30	28	28	35
28	31	36	52	42	36	33	36	32	25	42	40
36	31	36	40	38	35	22	30	29	32	35	36
28	29	36	43	38	32	30	26	22	30	28	36
27	32	42	36	46	28	31	28	30	32	42	37
33	27	38	42	43	32	30	40	43	26	23	38
33	31	48	43	37	25	31	36	30	35	33	44
38	24	37	41	52	28	32	24	42	40	35	43
26	29	40	30	52	34	38	22	24	35	36	35
29	28	36	50	48	28	28	25	25	42	38	38
29	32	43	40	38	36	42	34	26	24	35	36
35	31	35	47	52	32	36	27	33	28	29	51
43	37	38	46	40	27	33	38	28	31	36	46
22	33	40	46	35	36	28	31	31	30	30	43
33	32	43	44	34	38	29	41	41	32	36	47
28	35	50	44	38	35	33	33	30	28	31	38
38	37	31	33	37	36	31	23	28	31	42	50
29	26	43	48	37	32	16	25	37	24	29	31

42	116	112	34	34	16	26	29	27	26	27	12
50	136	96	32	24	24	23	20	23	20	22	22
44	155	89	38	29	28	23	18	20	20	33	25
44	138	83	47	41	24	29	29	26	31	20	18
43	143	68	29	32	23	25	20	23	23	18	25
48	155	65	27	30	19	24	17	23	28	15	35
54	170	75	34	37	23	26	26	23	28	33	24
58	160	70	34	24	21	28	24	21	24	27	24
65	136	59	29	33	35	29	33	21	23	17	16
54	165	59	35	29	20	29	25	20	25	28	29
54	162	62	29	29	32	24	28	29	27	21	26
47	160	56	35	35	35	25	18	23	27	21	21
59	165	50	27	25	20	16	21	20	26	14	27
73	205	72	41	38	33	33	22	27	24	18	21
62	143	55	33	24	28	22	23	18	19	22	25
70	145	48	22	30	30	19	26	24	24	19	21
67	178	36	33	28	20	20	18	22	23	20	17
83	143	43	34	22	27	33	24	23	27	20	24
72	150	47	30	36	22	24	19	25	19	26	27
65	152	44	30	23	19	27	21	21	22	21	25
77	150	33	44	25	23	28	27	28	22	27	28
106	141	47	38	26	25	31	26	20	18	20	27
96	129	41	35	31	22	25	31	21	29	23	30
94	157	37	29	31	25	20	19	21	25	26	23
89	138	40	23	22	22	23	25	23	27	25	18
102	118	50	26	22	30	30	25	27	20	23	22
89	102	36	31	24	24	36	32	28	27	21	31
110	118	38	25	27	25	22	30	21	25	23	26
104	106	25	25	33	30	34	18	17	26	28	27

25	22	24	27	28	31	47	68	22	23	27	22
20	21	21	23	22	33	59	73	32	19	22	28
28	24	25	27	22	34	82	62	38	24	22	17
25	19	18	19	25	38	56	50	21	28	26	20
20	28	21	23	23	31	72	55	32	28	29	25
27	23	31	33	23	31	61	44	34	22	24	32
21	31	27	34	28	33	56	54	30	24	22	19
16	29	19	25	23	38	61	54	21	23	28	22
17	26	27	23	36	36	72	47	31	24	21	21
30	29	21	22	15	33	65	61	34	18	30	29
28	24	22	19	24	23	75	48	23	21	19	28
24	26	20	24	30	31	85	44	24	25	22	21
16	22	22	33	24	38	67	50	27	20	20	17
19	28	24	27	33	34	83	27	18	21	25	21
32	20	23	23	25	41	70	48	28	25	36	26
20	31	21	27	29	36	68	40	34	17	23	29
18	26	19	21	26	41	68	42	27	23	18	20
17	27	24	19	34	44	67	37	38	22	30	24
29	26	24	20	30	44	82	37	28	26	20	24
22	19	19	29	23	40	68	27	32	22	20	22
21	26	20	25	27	43	65	46	25	24	16	27
16	21	20	24	36	47	70	35	30	21	19	21
29	22	33	27	26	51	59	35	18	22	25	16
19	22	29	19	26	48	68	40	22	29	21	25
23	21	29	26	24	55	68	48	21	22	32	23
22	21	17	27	19	47	68	26	23	22	20	25
22	26	26	28	24	67	59	27	27	24	25	25
24	23	24	25	35	70	56	34	21	33	23	28
20	31	24	26	31	68	62	44	30	25	31	20

34	24	30	25	27	20	24	27	24	28	31	33	24	26	27	21	33	24	26	29	22	25	31	22	31	22	33	31	41
24	34	25	26	26	26	26	27	28	28	26	20	22	26	25	28	25	35	17	27	25	38	24	24	27	28	33	48	29
30	25	34	28	29	34	28	36	28	36	18	27	28	30	24	19	30	24	17	19	26	43	54	40	31	48	54	40	37
25	26	26	31	25	16	16	16	33	33	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
27	26	26	25	26	16	16	27	33	33	16	26	27	25	23	20	19	20	24	17	28	51	40	47	28	24	44	41	32
20	26	26	31	34	16	16	26	26	26	27	25	22	22	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32	
24	32	32	26	26	20	20	22	22	22	20	22	22	22	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32	
27	28	25	20	24	16	16	26	33	33	16	26	27	25	23	20	19	20	24	17	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	24	25	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
21	34	25	26	26	26	26	26	28	28	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
34	24	30	25	27	20	20	26	26	26	27	25	22	22	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	34	25	26	26	26	26	26	28	28	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
21	34	25	26	26	26	26	26	28	28	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25	25
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
26	28	18	20	24	16	16	26	33	33	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
29	28	19	24	24	26	26	26	25	25	19	20	22	22	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32	32
22	25	21	25	25	23	23	27	23	23	19	19	25	25	12	12	19	23	19	19	27	30	36	29	47	40	54	29	32
24	29	26	29	22	22	22	22	28	28	30	25	25	25	12	12	19	23	19	19	27	30	36	29	47	40	54	29	32
22	25	21	25	25	23	23	27	23	23	19	19	25	25	12	12	19	23	19	19	27	30	36	29	47	40	54	29	32
29	28	19	24	24	26	26	26	25	25	19	20	22	22	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32	32
26	28	18	20	24	16	16	26	33	33	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
24	21	37	31	25	25	25	25	16	16	16	26	27	25	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24	44	41	32
33	24	34	28	29	31	31	31	25	25	18	27	28	26	23	20	19	20	24	15	28	51	40	47	28	24			

35	25	24	23	19	21	20	26	16	22	19	18
35	26	19	34	25	31	26	23	23	32	23	24
30	25	19	27	13	25	19	17	25	18	30	15
32	35	24	24	18	24	20	17	22	19	19	22
30	18	30	25	18	21	20	16	27	15	21	25
37	30	26	26	21	20	17	24	19	26	22	27
31	19	26	20	17	25	21	19	21	30	20	23
23	18	22	29	29	25	22	28	18	18	23	15
25	25	23	21	20	19	13	22	25	19	16	
31	23	26	25	31	23	20	19	28	23	19	
22	28	28	28	21	25	15	16	19	19	24	
26	28	24	19	19	19	18	22	25	21	22	



Lampiran 2

Data input parameter variabel kuadrat terkecil non linier dengan format data.ins

Untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT

A template file for two-phase refinement of X-ray diffraction data

Title (CHARACTER*80)

BNT-BT7, DATA XRD (TARGET Cu)

NBEAM = 0! Neutron powder diffraction.

NBEAM = 1: Conventional X-ray powder diffraction (characteristic X rays).

NBEAM = 2! Synchrotron X-ray powder diffraction.

NMODE = 0: Rietveld analysis of powder diffraction data.

NMODE = 1! Calculation of powder diffraction intensities (plus simulation).

NPRINT = 0! Minimal output.

NPRINT = 1: Standard output.

NPRINT = 2! Detailed output.

If NBEAM = 1 then

TNAME = 'Cu': Radiation ('Cr', 'Fe', 'Co', 'Cu', 'Mo', or 'Ag').

R12 = 0.497: $I(K\text{-}\alpha_2)/I(K\text{-}\alpha_1)$.

CTHM = 0.8049: $(\cos(2\alpha))^2$ for the monochromator (α : Bragg angle).

NTRAN = 0: Reflection (Bragg-Brentano) geometry.

NTRAN = 1! Transmission geometry.

end if

If NBEAM $\neq$ 1 then

XLMD = 1.8232: Wavelength of neutrons or synchrotron X rays.

end if

If NBEAM = 0 then

RADIUS = 0.3: Radius of the cell/cm.

DENSTY = 0.6369: Density of the sample/g.cm⁻³.

Real chemical species, amounts of substances, plus '/'.

Names of 'real chemical species' are recorded in the database file asfdc.

Attach '*' to magnetic atoms if any, e.g., 'Fe*' and 'Mn*'.

'Ti' 1.0 'O' 2.0 /

Input LCMFF (= 0) and CMFF(I) (I = 1-7) for magnetic atoms,

if any. LCMFF and CMFF corresponds to 1 and seven coefficients in

Eq. (4.4.5.2) in International Tables, Vol. C, pp. 391-393.

The following two lines are input for Fe²⁺ (I = 0)

0 0.0263 34.960 0.3668 15.943 0.6188 5.594 -0.0119

end if

If NBEAM = 1 and NTRAN = 1 then

SABS = 1.0: (Linear absorption coefficient) x thickness.
end if

If NBEAM = 2 then

mur = 0.0: (Linear absorption coefficient) x radius.
end if

If NBEAM > 0 then

Real chemical species plus '/'
'Bi3+' 'Ba2+' 'Na+' 'Ti3+' 'O-' /
end if

If NBEAM = 2 then

Read pairs of anomalous dispersion corrections, Delta-f' and Delta-f".
READ(5,*) (DELTF1(J),DELTF2(J), J=1,NREAL)
NREAL: Number of real chemical species.
end if

Input one imaginary species plus '/' per line in the following way:

Imaginary species must be affixed "{" symbol here
'IS1' 'Zn2+' 0.9 'Nb5+' 0.1 /
'M2' 'Nd' 0.675 'Ce' 0.325 /}
'M1' and 'M2' are names of imaginary chemical species,
'Ba', 'Nd' and 'Ce' are names of real chemical species input above,
and numbers are mole fractions of constituent elements.
For the above species, cf. F. Izumi et al., Physica C 160 (1989) 235.

Information about phases {

Phase No. 1: Tetragonal

PHNAME1 = 'T-phase': Phase name (CHARACTER*25)

VNS1 = 'I-140': (Vol. No.)-(Space group No.)-(Setting No.) in Int. Tables.

LSPSYM1 = 0: Information on the space group is read from the data base.

LSPSYM1 = 1! In addition to LSPSYM = 0, reflection conditions are specified.

LSPSYM1 = 2! A non-standard axes-setting method is adopted.

INDIV1 = 0: The overall isotropic thermal parameter (Q) is input.

INDIV1 = 1! Isotropic and/or anisotropic thermal parameters are input.

NPROR1 = 0! Preferred orientation is not corrected.

NPROR1 = 1! Plate crystals (Sasa-Uda function).

NPROR1 = 2! Needle-like crystals (Sasa-Uda function).

NPROR1 = 3: March-Dollase function.

IH1 = 0:

IK1 = 0: --> Preferred-orientation vector, hp, kp, lp.

IL1 = 1:

LSUM1 = 0! No summation when calculating the March-Dollase function.

LSUM1 = 1: Summation when calculating the March-Dollase function.

IHA1 = 0: \

IKA1 = 0: --> Anisotropic-broadening axis, ha, ka, la.

ILA1 = 1: /

Phase No. 2: Rombohedral

PHNAME2 = 'R-phase': Phase name (CHARACTER*25)

VNS2 = 'T-161':(Vol. No.)-(Space group No.)-(Setting No.) in Int. Tables.

LSPSYM2 = 0: Information on the space group is read from the data base.

LSPSYM2 = 1! In addition to LSPSYM = 0, reflection conditions are specified.

LSPSYM2 = 2! A non-standard axes-setting method is adopted.

INDIV2 = 0: The overall isotropic thermal parameter (Q) is input.

INDIV2 = 1! Isotropic and/or anisotropic thermal parameters are input.

NPROR2 = 0! Preferred orientation is not corrected.

NPROR2 = 1! Plate crystals (Sasa-Uda function).

NPROR2 = 2! Needle-like crystals (Sasa-Uda function).

NPROR2 = 3: March-Dollase function.

IH2 = 0:

IK2 = 0: --> Preferred-orientation vector, hp, kp, lp.

IL2 = 1:

LSUM2 = 0! No summation when calculating the March-Dollase function.

LSUM2 = 1: Summation when calculating the March-Dollase function.

IHA2 = 0: \

IKA2 = 0: --> Anisotropic-broadening axis, ha, ka, la.

ILA2 = 1: /

} Information about phases

Labels, A(I)'s, and ID(I)'s {

Global parameters

Peak-shift parameters, Z, Ds, and Ts

SHIFT 0.0 0.0 0.0 100

Background parameters, bj (j = 0-11)

BKGD 27.679 -7.39458E1 28.6786 -3.08787E1 14.3977 -1.53523E1

25.3519 -3.25156E1 0.0 0.0 0.0 0.0 111111110000

Parameters for phase No. 1 (T-phase)

Scale factor, s

SCALE1 3.29875E-5 1

Gaussian profile parameters, U, V, W, and P

GAUSS1 0.368902 -3.19168E-1 7.17694E-2 0.0 1110

Lorentzian profile parameters, X, Xe, Y, and Ye

LORENTZ1 -1.99022E-2 0.0 0.346733 0.0 1010

Asymmetry parameter, As

ASYM1 -4.16691E-2 1

Unused parameters (dummy)
 VACANT1 0.0 0.0 00
 # Preferred-orientation parameters, r or (p1 and p2)
 PREF1 0.774867 0.0 10
 # Lattice parameters and overall isotropic thermal parameter, Q
 CELQ1 5.47719 5.47719 7.75902 90.0 90.0 90.0 1.0 1010001
 # Label/species, g, x, y, z, B, and refinement identifiers (ID)
 Bi1/Bi3+ 0.465 0.0 0.5 0.25 0000
 Na1/Na+ 0.465 0.0 0.5 0.25 0000
 Ba1/Ba2+ 0.07 0.0 0.5 0.25 0000
 Ti1/Ti3+ 1.0 0.0 0.0 0.0 0000
 O1/O- 1.0 0.0 0.0 0.25 0000
 O2/O- 1.0 0.2 0.7 0.0 0110

Parameters for phase No. 2 (R-phase)
 # Scale factor, s
 SCALE2 1.68322E-9 1
 # Gaussian profile parameters, U, V, W, and P
 GAUSS2 0.368902 -3.19168E-1 7.17694E-2 0.0 2220
 # Lorentzian profile parameters, X, Xe, Y, and Ye
 LORENTZ2 -1.99022E-2 0.0 0.346733 0.0 2020
 # Asymmetry parameter, As
 ASYM2 -4.16691E-2 2
 # Unused parameters (dummy)
 VACANT2 0.0 0.0 00
 # Preferred-orientation parameters, r or (p1 and p2)
 PREF2 0.774867 0.0 20
 # Lattice parameters and overall isotropic thermal parameter, Q
 CELQ2 3.86628 3.86628 3.86628 90.0 90.0 90.0 1.0 1001001
 # Label/species, g, x, y, z, B, and refinement identifiers (ID)
 Bi2/Bi3+ 0.465 0.0 0.0 0.25 0000
 Na2/Na+ 0.465 0.0 0.0 0.25 0000
 Ba2/Ba2+ 0.07 0.0 0.0 0.25 0000
 Ti2/Ti3+ 1.0 0.0 0.0 1.0E-2 0001
 O3/O- 1.0 0.16 0.3 8.3E-2 0111
 } end of labels, A(I)'s, and ID(I)'s

Linear constraints for parameters with ID(I) = 2 {

A(GAUSS2,1)=A(GAUSS1,1)
 A(GAUSS2,2)=A(GAUSS1,2)
 A(GAUSS2,3)=A(GAUSS1,3)
 A(LORENTZ2,1)=A(LORENTZ1,1)
 A(LORENTZ2,3)=A(LORENTZ1,3)
 A(ASYM2,1)=A(ASYM1,1)
 A(PREF2,1)=A(PREF1,1)
 #A(Na2,z)=A(Bi2,z)

} end of linear constraints

NEXC = 0: Use all the intensity data.

NEXC = 1! Skip some intensity data.

If NEXC = 1 then

Excluded 2-theta regions {

30.0 31.0

}

end if

If NMODE = 0 then

NRANGE = 0: Refine the background.

NRANGE = 1: Fix the background.

NPAT = 0: Do not create any file storing diffraction intensities.

NPAT = 1: Create a PostScript file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 2: Create a Macplot/RietPlot file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 3: Create a DMPLLOT file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 4: Create a SigmaPlot file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 5: Create an Igor Pro file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 5

end if

If NMODE = 0 or NPAT > 0 then

PC = 9.0: Profile cut-off.

end if

If NMODE = 0 then

NLESQ = 0: Marquardt method (recommended in most cases).

NLESQ = 1: Gauss-Newton method.

NLESQ = 2: Conjugate-direction method.

NESD = 0: Standard deviations are estimated by the conventional method.

NESD = 1: Standard deviations are estimated by Scott's method.

end if

If NLESQ <= 1 then

NAUTO = 0: Refine all the variable parameters simultaneously.

NAUTO = 1: Refine incrementally (specify variable parameters).

NAUTO = 2: Refine incrementally (automatic; recommended in most cases).

NAUTO = 3: In addition to NAUTO = 2, check convergence to the global min.

NAUTO = 2

NCYCL = 1: Maximum number of cycles.

CONV = 0.0001: Small positive number used for convergence judgement.

NCONV = 3: Number of cycles used for convergence judgement.

NC = 0: No nonlinear constraints are imposed.

NC = 1: Nonlinear constraints are imposed.

TK = 5000.0: Penalty parameter.

FINC = 20.0: Factor by which TK is multiplied when TK is increased.

end if

If NLESQ <= 1 and NAUTO = 1 then

Parameters to be refined in each cycle plus '/' {

BKGD,1 BKGD,2 BKGD,3 BKGD,4 BKGD,5 BKGD,6, BKGD,7 BKGD,8 /

CELLQ,1 /

}

end if

If NLESQ = 2 then

MITER = 6: Maximum number of iterations.

STEP = 0.02: Coefficient to calculate the initial step interval.

ACC = 1.0E-6: Small positive number used for convergence judgement.

NC = 0: No nonlinear constraints are imposed.

NC = 1: Nonlinear constraints are imposed.

TK = 5000.0: Penalty parameter.

end if

If NC = 1 then

Nonlinear constraints imposed on interatomic distances and bond angles

For Series numbers of distances/angles, refer to outputs of ORFFE.

Nonlinear constraints {

Ser.No. Expctd.val. Deviation

}

end if

NUPDT = 0: Variable parameters in the input file remain unchanged.

NUPDT = 1: Variable parameters are updated in the packing mode.

NUPDT = 2: Variable parameters are updated in the overwriting mode.

NUPDT = 1

NFR = 0: No file is created which stores FOURIER data.

NFR = 1: File #21 is created which stores FOURIER data for phase #1.

NFR = 2: File #21 is created which stores FOURIER data for phase #2.

NDA = 0: No file is created which store ORFFE data.

NDA = 1: File #9 is created which store ORFFE data for phase #1.

NDA = 2: File #9 is created which store ORFFE data for phase #2.

If NDA > 0 then

ORFFE instructions {

201 2 28

}

end if

If NMODE = 0 and NPAT = 1 then

X0 = 6.5: X coordinate of the origin.

Y0 = 7.0: Y coordinate of the origin.

FACFIG = 0.35: Magnification factor for graphic output (0.35 for ND).

INC = 0: Increase per scale division of the ordinate (0 for default).

end if

Please cite the following references when publishing papers that report the
results of Rietveld refinements with RIETAN-94:

F. Izumi, "The Rietveld Method," ed. by R.A. Young, Oxford University Press,
Oxford (1993).

If you like RIETAN-94, please send me a postcard of your home town.
Is that too much to ask?

Fujio IZUMI
National Institute for Research in Inorganic Materials
1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305, Japan
TEL: 0298-51-3351
FAX: 0298-52-7449
E-mail: izumi@nirim.go.jp

Data input parameter variabel kuadrat terkecil non linier dengan format data.ins

Untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT

A template file for two-phase refinement of X-ray diffraction data

Title (CHARACTER*80)
BNT3 (Bi,Na-Ti-O), DATA XRD (TARGET Cu)

NBEAM = 0! Neutron powder diffraction.
NBEAM = 1: Conventional X-ray powder diffraction (characteristic X rays).
NBEAM = 2! Synchrotron X-ray powder diffraction.

NMODE = 0: Rietveld analysis of powder diffraction data.
NMODE = 1! Calculation of powder diffraction intensities (plus simulation).

NPRINT = 0! Minimal output.
NPRINT = 1: Standard output.
NPRINT = 2! Detailed output.

If NBEAM = 1 then
TNAME = 'Cu': Radiation ('Cr', 'Fe', 'Co', 'Cu', 'Mo', or 'Ag').
R12 = 0.497: $I(K\text{-}\alpha_2)/I(K\text{-}\alpha_1)$.
CTHM = 0.8049: $(\cos(2*\alpha))^2$ for the monochromator (alpha: Bragg angle).

NTRAN = 0: Reflection (Bragg-Brentano) geometry.
NTRAN = 1! Transmission geometry.
end if

If NBEAM $\neq$ 1 then
XLMD = 1.8232: Wavelength of neutrons or synchrotron X rays.
end if

If NBEAM = 0 then
RADIUS = 0.3: Radius of the cell/cm.
DENSITY = 0.6369: Density of the sample/g.cm⁻³.
Real chemical species, amounts of substances, plus '/'.
Names of 'real chemical species' are recorded in the database file asfde.
Attach '*' to magnetic atoms if any, e.g., 'Fe*' and 'Mn*'.
'Ti' 1.0 'O' 2.0 /

Input LCMFF (= 0) and CMFF(I) (I = 1-7) for magnetic atoms,
 # if any. LCMFF and CMFF corresponds to l and seven coefficients in
 # Eq. (4.4.5.2) in International Tables, Vol. C, pp. 391-393.
 # The following two lines are input for Fe²⁺ (l = 0)
 # 0 0.0263 34.960 0.3668 15.943 0.6188 5.594 -0.0119
 end if

If NBEAM = 1 and NTRAN = 1 then
 SABS = 1.0: (Linear absorption coefficient) x thickness.
 end if

If NBEAM = 2 then
 mur = 0.0: (Linear absorption coefficient) x radius.
 end if

If NBEAM > 0 then
 # Real chemical species plus '/'
 'Bi3+' 'Na+' 'Ba2+' 'Ti3+' 'O-' /
 end if

If NBEAM = 2 then
 # Read pairs of anomalous dispersion corrections, Delta-f and Delta-f'.
 # READ(5,*) (DELTF1(J),DELTF2(J), J=1,NREAL)
 # NREAL: Number of real chemical species.
 end if

Input one imaginary species plus '/' per line in the following way:

Imaginary species must be affixed "{" symbol here
 # 'IS1' 'Zn2+' 0.9 'Nb5+' 0.1 /
 # 'M2' 'Nd' 0.675 'Ce' 0.325 /}
 # 'M1' and 'M2' are names of imaginary chemical species,
 # 'Ba', 'Nd' and 'Ce' are names of real chemical species input above,
 # and numbers are mole fractions of constituent elements.
 # For the above species, cf. F. Izumi et al., Physica C 160 (1989) 235.

Information about phases {

Phase No. 1: (Bi,Na)TiO₃

PHNAME1 = 'BNT3-phase': Phase name (CHARACTER*25)

VNS1 = 'I-140':(Vol. No.)-(Space group No.)-(Setting No.) in Int. Tables.

LSPSYM1 = 0: Information on the space group is read from the data base.
 LSPSYM1 = 1! In addition to LSPSYM = 0, reflection conditions are specified.
 LSPSYM1 = 2! A non-standard axes-setting method is adopted.

INDIV1 = 0: The overall isotropic thermal parameter (Q) is input.
 INDIV1 = 1! Isotropic and/or anisotropic thermal parameters are input.

NPROR1 = 0! Preferred orientation is not corrected.
 NPROR1 = 1! Plate crystals (Sasa-Uda function).
 NPROR1 = 2! Needle-like crystals (Sasa-Uda function).
 NPROR1 = 3: March-Dollase function.

IH1 = 0:
IK1 = 0: → Preferred-orientation vector, hp, kp, lp.
IL1 = 1:

LSUM1 = 0! No summation when calculating the March-Dollase function.
LSUM1 = 1: Summation when calculating the March-Dollase function.

IHA1 = 0:\
IKA1 = 0: → Anisotropic-broadening axis, ha, ka, la.
ILA1 = 1: /

} Information about phases

Labels, A(I)'s, and ID(I)'s {

Global parameters
Peak-shift parameters, Z, Ds, and Ts
SHIFT 0.0 0.0 0.0 100
Background parameters, bj (j = 0-11)
BKGD 9.38191 -7.79465 5.40366 -3.87689 2.9802 -2.07639 2.51527
-3.24368 0.0 0.0 0.0 0.0 111111110000

Parameters for phase No. 1
Scale factor, s
SCALE1 1.03233E-8 1
Gaussian profile parameters, U, V, W, and P
GAUSS1 7.72123E-2 -6.92063E-2 2.51202E-2 0.0 1110
Lorentzian profile parameters, X, Xe, Y, and Ye
LORENTZ1 7.21238E-2 0.0 3.15212E-2 0.0 1010
Asymmetry parameter, As
ASYM1 -4.16691E-2 1
Unused parameters (dummy)
VACANT1 0.0 0.0 00
Preferred-orientation parameters, r or (p1 and p2)
PREF1 0.665146 0.0 10
Lattice parameters and overall isotropic thermal parameter, Q
CELQ1 5.4769 5.4769 7.7539 90.0 90.0 90.0 1.0 1010001
Label/species, g, x, y, z, B, and refinement identifiers (ID)
Bi/Bi3+ 0.4 0.0 0.5 0.25 0000
Na/Na+ 0.4 0.0 0.5 0.25 0000
Ba/Ba2+ 0.2 0.0 0.5 0.25 0000
Ti/Ti3+ 1.0 0.0 0.0 0.0 0000
O(1)/O- 1.0 0.0 0.0 0.25 0000
O(2)/O- 1.0 0.2818 0.7818 0.0 1110
} end of labels, A(I)'s, and ID(I)'s

Linear constraints for parameters with ID(I) = 2 {

#A(GAUSS2,1)=A(GAUSS1,1)
#A(GAUSS2,2)=A(GAUSS1,2)
#A(GAUSS2,3)=A(GAUSS1,3)
#A(LORENTZ2,1)=A(LORENTZ1,1)
#A(LORENTZ2,3)=A(LORENTZ1,3)
#A(ASYM2,1)=A(ASYM1,1)
#A(CELQ2,7)=A(CELQ1,7)

} end of linear constrains

NEXC = 0: Use all the intensity data.

NEXC = 1! Skip some intensity data.

If NEXC = 1 then

Excluded 2-theta regions {

22.00 24.00

39.00 41.00

}

end if

If NMODE = 0 then

NRANGE = 0: Refine the background.

NRANGE = 1! Fix the background.

NPAT = 0! Do not create any file storing diffraction intensities.

NPAT = 1! Create a PostScript file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 2! Create a Macplot/RietPlot file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 3! Create a DMPLOT file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 4! Create a SigmaPlot file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 5! Create an Igor Pro file for Rietveld-refinement patterns.

NPAT = 5

end if

If NMODE = 0 or NPAT > 0 then

PC = 9.0: Profile cut-off.

end if

If NMODE = 0 then

NLESQ = 0: Marquardt method (recommended in most cases).

NLESQ = 1! Gauss-Newton method.

NLESQ = 2! Conjugate-direction method.

NESD = 0! Standard deviations are estimated by the conventional method.

NESD = 1: Standard deviations are estimated by Scott's method.

end if

If NLESQ <= 1 then

NAUTO = 0! Refine all the variable parameters simultaneously.

NAUTO = 1! Refine incrementally (specify variable parameters).

NAUTO = 2! Refine incrementally (automatic; recommended in most cases).

NAUTO = 3! In addition to NAUTO = 2, check convergence to the global min.

NAUTO = 2

NCYCL = 20: Maximum number of cycles.

CONV = 0.0001: Small positive number used for convergence judgement.

NCONV = 3: Number of cycles used for convergence judgement.

NC = 0: No nonlinear constraints are imposed.

NC = 1! Nonlinear constraints are imposed.

TK = 5000.0: Penalty parameter.

FINC = 20.0: Factor by which TK is multiplied when TK is increased.

end if

If NLESQ <= 1 and NAUTO = 1 then

Parameters to be refined in each cycle plus ' ' {

BKGD,1 BKGD,2 BKGD,3 BKGD,4 BKGD,5 BKGD,6, BKGD,7 BKGD,8 /
CELLQ,1 /

}

end if

If NLESQ = 2 then

MITER = 6: Maximum number of iterations.

STEP = 0.02: Coefficient to calculate the initial step interval.

ACC = 1.0E-6: Small positive number used for convergence judgement.

NC = 0: No nonlinear constraints are imposed.

NC = 1! Nonlinear constraints are imposed.

TK = 5000.0: Penalty parameter.

end if

If NC = 1 then

Nonlinear constraints imposed on interatomic distances and bond angles

For Series numbers of distances/angles, refer to outputs of ORFFE.

Nonlinear constraints {

Ser.No. Expctd.val. Deviation

}

end if

NUPDT = 0! Variable parameters in the input file remain unchanged.

NUPDT = 1! Variable parameters are updated in the packing mode.

NUPDT = 2! Variable parameters are updated in the overwriting mode.

NUPDT = 0

NFR = 0: No file is created which stores FOURIER data.

NFR = 1! File #21 is created which stores FOURIER data for phase #1.

NFR = 2! File #21 is created which stores FOURIER data for phase #2.

NDA = 0: No file is created which store ORFFE data.

NDA = 1! File #9 is created which store ORFFE data for phase #1.

NDA = 2! File #9 is created which store ORFFE data for phase #2.

If NDA > 0 then

ORFFE instructions {

201 2 28

}

end if

If NMODE = 0 and NPAT = 1 then

X0 = 6.5: X coordinate of the origin.

Y0 = 7.0: Y coordinate of the origin.

FACFIG = 0.35: Magnification factor for graphic output (0.35 for ND).

INC = 0: Increase per scale division of the ordinate (0 for default).

end if

Please cite the following references when publishing papers that report the

results of Rietveld refinements with RIETAN-94:

F. Izumi, "The Rietveld Method," ed. by R.A. Young, Oxford University Press,
Oxford (1993).

If you like RIETAN-94, please send me a postcard of your home town.
Is that too much to ask?

Fujio IZUMI

National Institute for Research in Inorganic Materials

1-1 Namiki, Tsukuba, Ibaraki 305, Japan

TEL: 0298-51-3351

FAX: 0298-52-7449

E-mail: izumi@nirim.go.jp



Lampiran 3

Data Pola difraksi hasil program RIETAN-94 untuk bahan 93% mol BNT- 7% mol BT dalam format data. LST

*** R factors, final parameters, and their estimated standard deviations ***

NESD = 1				
OF = 5619.69				
Rwp = 19.78 Rp = 14.89 RR = 34.63 Re = 15.56 S = 1.2711 d = 1.2889				
RI = 10.10 RF = 7.55				
No.	A	SIGMA	DELTA.A/SIGMA	
1	-3.514393E-02	3.796130E-07	103.256	Zero-point shift, Z
2	0.000000E+00			Specimen-displacement parameter, Ds
3	0.000000E+00			Specimen-transparency parameter, Ts
4	25.8034	1.120316E-02	3.166668E-02	Background parameter, b1
5	-16.6506	3.411635E-02	4.623523E-02	Background parameter, b2
6	5.96895	4.723696E-02	1.366806E-02	Background parameter, b3
7	-3.89670	6.768725E-02	1.550189E-02	Background parameter, b4
8	1.12034	8.178303E-02	3.027495E-03	Background parameter, b5
9	-0.490894	9.935798E-02	5.572152E-03	Background parameter, b6
10	5.31330	0.115461	4.295044E-04	Background parameter, b7
11	-7.00208	0.122394	7.748957E-03	Background parameter, b8
12	0.000000E+00			Background parameter, b9
13	0.000000E+00			Background parameter, b10
14	0.000000E+00			Background parameter, b11
15	0.000000E+00			Background parameter, b12
16	9.090618E-06	1.410051E-07	8.772115E-03	Scale factor, s
17	0.178063	5.392524E-04	1.01844	Gaussian FWHM parameter, U
18	-0.133056	4.010772E-04	1.86567	Gaussian FWHM parameter, V
19	3.018067E-02	7.704333E-05	2.11792	Gaussian FWHM parameter, W
20	0.000000E+00			Scherrer coefficient for Gaussian broadening, P
21	-9.570621E-02	3.309073E-03	0.130784	Lorentzian Scherrer broadening X
22	0.000000E+00			Anisotropic Scherrer broadening, Xe
23	0.677635	1.059379E-02	0.123572	Strain broadening, Y
24	0.000000E+00			Anisotropic strain broadening, Ye
25	0.147363	7.503136E-04	4.158665E-02	Asymmetry parameter, As
26	0.000000E+00			Reserved for future extension
27	0.000000E+00			Reserved for future extension
28	1.16950	2.484976E-02	5.823322E-02	Preferred-orientation parameter, r
29	0.000000E+00			Not used when NPROR = 3
30	5.51314	1.110586E-03	5.753376E-02	Lattice parameter, a

31	5.51314			Lattice parameter, b
32	7.78563	3.696668E-03	7.171903E-02	Lattice parameter, c
33	90.0000			Lattice parameter, alpha
34	90.0000			Lattice parameter, beta
35	90.0000			Lattice parameter, gamma
36	2.07181	0.685238	2.242096E-03	Overall isotropic atomic displacement parameter, Q
37	0.500000			Bi3+ Occupation factor, g
38	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
39	0.500000			Fractional coordinate, y
40	0.250000			Fractional coordinate, z
41	0.500000			Na+ Occupation factor, g
42	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
43	0.500000			Fractional coordinate, y
44	0.250000			Fractional coordinate, z
45	1.00000			Ti3+ Occupation factor, g
46	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
47	0.000000E+00			Fractional coordinate, y
48	0.000000E+00			Fractional coordinate, z
49	1.00000			O- (1) Occupation factor, g
50	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
51	0.000000E+00			Fractional coordinate, y
52	0.250000			Fractional coordinate, z
53	1.00000			O- (2) Occupation factor, g
54	0.294129	1.348481E-02	1.812254E-04	Fractional coordinate, x
55	0.776666	4.243633E-02	2.272588E-03	Fractional coordinate, y
56	0.000000E+00			Fractional coordinate, z

Dimensions of the reciprocal cell for BNT3-phase

a* = 0.18138 b* = 0.18138 c* = 0.12844 alpha* = 90.000 beta* = 90.000
gamma* = 90.000
V* = 4.225797E-03 (V = 236.642)

Lattice parameters (Angstrom or degree) and unit-cell volume (Angstrom**3) in BNT3-phase

a	b	c	alpha	beta	gamma	V
5.51314	5.51314	7.78563	90.0000	90.0000	90.0000	236.642
0.00111	-	0.00370	-	-	-	0.131

g, x, y, and z in BNT3-phase

	neq	* g	= n	x	y	z	
Bi3+	4	0.5000	2.0000	0.00000	0.50000	0.25000	-
-	-	-	-	-	-	-	-
Na+	4	0.5000	2.0000	0.00000	0.50000	0.25000	-
-	-	-	-	-	-	-	-
Ti3+	4	1.0000	4.0000	0.00000	0.00000	0.00000	-
-	-	-	-	-	-	-	-
O- (1)	4	1.0000	4.0000	0.00000	0.00000	0.25000	-
-	-	-	-	-	-	-	-
O- (2)	8	1.0000	8.0000	0.29413	0.77667	0.00000	-
-	-	-	0.01348	0.04244	-	-	-

neq: multiplicity of the Wyckoff position (number of equivalent points per unit cell)
n: number of equivalent atoms per unit cell

Number and weight of each species in the unit cell, and density for BNT3-phase

Atom	N *	At.wt. / 6.02214E23 =	Wt.
Bi3+	2.00000	208.98038	6.940406E-22 g
Na+	2.00000	22.98977	7.635086E-23 g
Ti3+	4.00000	47.86700	3.179403E-22 g
O-	12.00000	15.99940	3.188118E-22 g

Total = 1.407143E-21 g

$$d = \text{Total}/V = 1.407143\text{E-}21 / 2.366418\text{E-}22 = 5.946302 \text{ g/cm}^3$$

NUPDT = 0 NFR = 0 NDA = 0

*** Summary of possible reflections (based on the refined parameters) ***

No.	Phase	h	k	l	Code	2O	d	Iobs	Ical	F(nucl)	F(magn)	POF
FWHM	m											
1	1	1	1	0	1	22.792	3.89838	14344	18063	62.8456	0.0000	1.265
0.2634	4											
2	1	0	0	2	1	22.825	3.89282	3300	4098	60.2996	0.0000	0.625
0.2633	2											
3	1	1	1	0	2	22.850	3.89838	7224	8930	62.8456	0.0000	1.265
0.2632	4											
4	1	0	0	2	2	22.883	3.89282	1654	2026	60.2996	0.0000	0.625
0.2631	2											
5	1	2	0	0	1	32.453	2.75657	81818	77939	189.9618	0.0000	1.265
0.2468	4											
6	1	1	1	2	1	32.477	2.75460	100000	95269	180.9672	0.0000	0.853
0.2468	8											
7	1	2	0	0	2	32.536	2.75657	40391	38523	189.9618	0.0000	1.265
0.2468	4											
8	1	1	1	2	2	32.560	2.75460	49328	47086	180.9672	0.0000	0.853
0.2468	8											
9	1	2	1	1	1	38.260	2.35050	2237	2461	20.9993	0.0000	1.168
0.2554	16											
10	1	2	1	1	2	38.358	2.35050	1111	1216	20.9993	0.0000	1.168
0.2557	16											
11	1	2	0	2	1	40.046	2.24966	32494	34283	128.3873	0.0000	0.962
0.2617	8											
12	1	2	0	2	2	40.150	2.24966	16077	16943	128.3873	0.0000	0.962
0.2622	8											
13	1	2	2	0	1	46.554	1.94919	49007	46149	216.7222	0.0000	1.265
0.3004	4											
14	1	0	0	4	1	46.625	1.94641	12807	12039	223.0209	0.0000	0.625
0.3009	2											
15	1	2	2	0	2	46.677	1.94919	24264	22804	216.7222	0.0000	1.265
0.3013	4											

0.3019	16	1	0	0	4	2	46.748	1.94641	6321	5949	223.0209	0.0000	0.625
0.3404	17	1	2	1	3	1	51.053	1.78749	1022	536	15.5949	0.0000	0.869
0.3417	18	1	2	1	3	2	51.189	1.78749	504	265	15.5949	0.0000	0.869
0.3546	19	1	3	1	0	1	52.441	1.74341	6884	3643	49.0597	0.0000	1.265
0.3548	20	1	2	2	2	1	52.457	1.74291	8167	4329	58.2468	0.0000	1.067
0.3553	21	1	1	1	4	1	52.505	1.74142	4592	2434	53.8743	0.0000	0.702
0.3561	22	1	3	1	0	2	52.581	1.74341	3386	1800	49.0597	0.0000	1.265
0.3563	23	1	2	2	2	2	52.597	1.74291	4026	2139	58.2468	0.0000	1.067
0.3568	24	1	1	1	4	2	52.646	1.74142	2245	1203	53.8743	0.0000	0.702
0.4182	25	1	3	1	2	1	57.908	1.59113	44436	40948	139.0968	0.0000	1.096
0.4188	26	1	2	0	4	1	57.954	1.58999	15579	14358	139.6862	0.0000	0.763
0.4202	27	1	3	1	2	2	58.066	1.59113	21922	20233	139.0968	0.0000	1.096
0.4208	28	1	2	0	4	2	58.111	1.58999	7687	7095	139.6862	0.0000	0.763
0.4694	29	1	3	2	1	1	61.779	1.50041	58	56	5.2047	0.0000	1.224
0.4718	30	1	3	2	1	2	61.949	1.50041	28	28	5.2047	0.0000	1.224
0.5606	31	1	4	0	0	1	67.955	1.37828	12696	9657	148.3404	0.0000	1.265
0.5615	32	1	2	2	4	1	68.010	1.37730	18686	14291	155.4853	0.0000	0.853
0.5636	33	1	4	0	0	2	68.147	1.37828	6242	4773	148.3404	0.0000	1.265
0.5645	34	1	2	2	4	2	68.203	1.37730	9255	7064	155.4853	0.0000	0.853
0.6185	35	1	4	1	1	1	71.536	1.31784	536	437	16.7821	0.0000	1.233
0.6190	36	1	3	2	3	1	71.563	1.31741	28	23	4.2085	0.0000	1.020
0.6199	37	1	2	1	5	1	71.617	1.31655	110	90	9.8532	0.0000	0.741
0.6219	38	1	4	1	1	2	71.741	1.31784	259	216	16.7821	0.0000	1.233
0.6224	39	1	3	2	3	2	71.768	1.31741	13	11	4.2085	0.0000	1.020
0.6233	40	1	2	1	5	2	71.822	1.31655	53	45	9.8532	0.0000	0.741
0.6382	41	1	3	3	0	1	72.708	1.29946	1118	980	50.3581	0.0000	1.265
0.6385	42	1	4	0	2	1	72.721	1.29925	2330	2045	53.9927	0.0000	1.148

43	1	3	1	4	1	72.761	1.29863	2129	1871	41.5628	0.0000	0.887
0.6392	16											
44	1	0	0	6	1	72.828	1.29761	207	183	43.7818	0.0000	0.625
0.6403	2											
45	1	3	3	0	2	72.917	1.29946	550	485	50.3581	0.0000	1.265
0.6418	4											
46	1	4	0	2	2	72.931	1.29925	1148	1011	53.9927	0.0000	1.148
0.6421	8											
47	1	3	1	4	2	72.971	1.29863	1051	925	41.5628	0.0000	0.887
0.6427	16											
48	1	0	0	6	2	73.038	1.29761	103	90	43.7818	0.0000	0.625
0.6439	2											
49	1	4	2	0	1	77.340	1.23277	10370	8981	114.5622	0.0000	1.265
0.7203	8											
50	1	3	3	2	1	77.353	1.23260	7076	6135	98.9458	0.0000	1.159
0.7205	8											
51	1	1	1	6	1	77.458	1.23119	4437	3856	103.9678	0.0000	0.662
0.7224	8											
52	1	4	2	0	2	77.568	1.23277	5097	4430	114.5622	0.0000	1.265
0.7245	8											
53	1	3	3	2	2	77.581	1.23260	3478	3026	98.9458	0.0000	1.159
0.7247	8											
54	1	1	1	6	2	77.687	1.23119	2179	1901	103.9678	0.0000	0.662
0.7266	8											
55	1	4	1	3	1	80.787	1.18864	18	18	13.9398	0.0000	1.059
0.7856	16											
56	1	4	1	3	2	81.030	1.18864	7	7	13.9398	0.0000	1.059
0.7903	16											
57	1	4	2	2	1	81.903	1.17525	147	141	61.5506	0.0000	1.168
0.8076	16											
58	1	2	0	6	1	82.006	1.17403	50	48	68.0501	0.0000	0.695
0.8096	8											
59	1	4	2	2	2	82.150	1.17525	62	60	61.5506	0.0000	1.168
0.8125	16											
60	1	2	0	6	2	82.254	1.17403	21	20	68.0501	0.0000	0.695
0.8146	8											

*** End of job ***

Elapsed time = 0 min 1 s

--- RIETAN-94. Copyright (C) 1994, by F. Izumi. All rights released. ---

Data Pola difraksi hasil program RIETAN-94 untuk bahan 80% mol BNT- 20% mol BT dalam format data. LST

*** R factors, final parameters, and their estimated standard deviations ***

NESD = 1

OF = 3794.24

Rwp = 15.31 Rp = 11.93 RR = 32.21 Re = 14.65 S = 1.0446 d = 1.5922

RI = 9.34 RF = 5.90

No.	A	SIGMA	DELTA.A/SIGMA	
1	0.128689	8.239148E-07	333.538	Zero-point shift, Z
2	0.000000E+00			Specimen-displacement parameter, Ds
3	0.000000E+00			Specimen-transparency parameter, Ts
4	31.2478	1.712438E-02	1.715284E-02	Background parameter, b1
5	-16.2198	4.695958E-02	0.112671	Background parameter, b2
6	7.71075	5.981999E-02	0.165522	Background parameter, b3
7	-5.29686	8.288544E-02	7.134829E-02	Background parameter, b4
8	1.81275	0.101928	0.104741	Background parameter, b5
9	-0.351416	0.124352	9.623756E-02	Background parameter, b6
10	4.22218	0.143825	5.142200E-02	Background parameter, b7
11	-6.56340	0.161434	0.140794	Background parameter, b8
12	0.000000E+00			Background parameter, b9
13	0.000000E+00			Background parameter, b10
14	0.000000E+00			Background parameter, b11
15	0.000000E+00			Background parameter, b12
16	8.934956E-06	1.337560E-07	0.133028	Scale factor, s
17	0.273335	9.835437E-04	1.242339E-03	Gaussian FWHM parameter, U
18	-0.113306	5.467336E-04	0.119908	Gaussian FWHM parameter, V
19	1.243607E-02	7.846797E-05	0.268295	Gaussian FWHM parameter, W
20	0.000000E+00			Scherrer coefficient for Gaussian broadening, P
21	6.212932E-02	4.824467E-03	6.221497E-02	Lorentzian Scherrer broadening X
22	0.000000E+00			Anisotropic Scherrer broadening, Xe
23	0.429982	1.622441E-02	7.678898E-02	Strain broadening, Y
24	0.000000E+00			Anisotropic strain broadening, Ye
25	0.187070	7.978204E-04	0.420950	Asymmetry parameter, As
26	0.000000E+00			Reserved for future extension
27	0.000000E+00			Reserved for future extension
28	1.12244	1.333766E-02	4.800491E-02	Preferred-orientation parameter, r
29	0.000000E+00			Not used when NPROR = 3
30	5.55504	9.060423E-04	4.841829E-02	Lattice parameter, a
31	5.55504			Lattice parameter, b
32	7.92962	1.781107E-03	4.685093E-02	Lattice parameter, c
33	90.0000			Lattice parameter, alpha
34	90.0000			Lattice parameter, beta
35	90.0000			Lattice parameter, gamma
36	2.53321	0.372956	3.976629E-02	Overall isotropic atomic displacement parameter, Q
37	0.400000			Bi3+ Occupation factor, g
38	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
39	0.500000			Fractional coordinate, y
40	0.250000			Fractional coordinate, z
41	0.400000			Na+ Occupation factor, g
42	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
43	0.500000			Fractional coordinate, y
44	0.250000			Fractional coordinate, z
45	0.200000			Ba2+ Occupation factor, g
46	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
47	0.500000			Fractional coordinate, y
48	0.250000			Fractional coordinate, z
49	1.00000			Ti3+ Occupation factor, g
50	0.000000E+00			Fractional coordinate, x
51	0.000000E+00			Fractional coordinate, y
52	0.000000E+00			Fractional coordinate, z

53 1.00000 O- (1) Occupation factor, g
 54 0.000000E+00 Fractional coordinate, x
 55 0.000000E+00 Fractional coordinate, y
 56 0.250000 Fractional coordinate, z
 57 0.895920 7.297879E-02 1.823452E-02 O- (2) Occupation factor, g
 58 0.240703 2.733260E-02 0.125138 Fractional coordinate, x
 59 0.772999 6.645025E-02 0.490177 Fractional coordinate, y
 60 0.000000E+00 Fractional coordinate, z

Dimensions of the reciprocal cell for BNT3-phase
 $a^* = 0.18002$ $b^* = 0.18002$ $c^* = 0.12611$ $\alpha^* = 90.000$ $\beta^* = 90.000$
 $\gamma^* = 90.000$

$V^* = 4.086698E-03$ ($V = 244.696$)

Lattice parameters (Angstrom or degree) and unit-cell volume (Angstrom**3) in BNT3-phase

a	b	c	alpha	beta	gamma	V
5.55504	5.55504	7.92962	90.0000	90.0000	90.0000	244.696
0.00091	-	0.00178	-	-	-	0.079

g, x, y, and z in BNT3-phase

	neq	* g	= n	x	y	z	
Bi3+	4	0.4000	1.6000	0.00000	0.50000	0.25000	-
Na+	4	0.4000	1.6000	0.00000	0.50000	0.25000	-
Ba2+	4	0.2000	0.8000	0.00000	0.50000	0.25000	-
Ti3+	4	1.0000	4.0000	0.00000	0.00000	0.00000	-
O- (1)	4	1.0000	4.0000	0.00000	0.00000	0.25000	-
O- (2)	8	0.8959	7.1674	0.24070	0.77300	0.00000	-
	-	0.0730	0.5838	0.02733	0.06645	-	-

neq: multiplicity of the Wyckoff position (number of equivalent points per unit cell)
 n: number of equivalent atoms per unit cell

Number and weight of each species in the unit cell, and density for BNT3-phase

Atom	N	*	At.wt. / 6.02214E23 =	Wt.
Bi3+	1.60000		208.98038	5.552325E-22 g
Na+	1.60000		22.98977	6.108069E-23 g
Ba2+	0.80000		137.32700	1.824296E-22 g
Ti3+	4.00000		47.86700	3.179403E-22 g
O-	11.16736		15.99940	2.966904E-22 g

Total = 1.413374E-21 g
 $d = \text{Total}/V = 1.413374E-21 / 2.446963E-22 = 5.776032 \text{ g/cm}^{**3}$

NUPDT = 0 NFR = 0 NDA = 0

*** Summary of possible reflections (based on the refined parameters) ***

No.	Phase	h	k	l	Code	2θ	d	I _{obs}	I _{cal}	F(nucl)	F(magn)	POF
FWHM	m											
1	1	0	0	2	1	22.405	3.96481	4804	5779	72.2183	0.0000	0.707
0.1727	2											
2	1	0	0	2	2	22.462	3.96481	2397	2857	72.2183	0.0000	0.707
0.1728	2											
3	1	1	1	0	1	22.618	3.92801	13402	15906	65.9788	0.0000	1.189
0.1732	4											
4	1	1	1	0	2	22.675	3.92801	6598	7865	65.9788	0.0000	1.189
0.1733	4											
5	1	1	1	2	1	32.048	2.79044	100000	92878	186.6937	0.0000	0.899
0.2459	8											
6	1	1	1	2	2	32.130	2.79044	49459	45914	186.6937	0.0000	0.899
0.2468	8											
7	1	2	0	0	1	32.201	2.77752	68529	63692	191.0395	0.0000	1.189
0.2477	4											
8	1	2	0	0	2	32.284	2.77752	33838	31482	191.0395	0.0000	1.189
0.2486	4											
9	1	2	1	1	1	37.922	2.37067	76	79	4.1268	0.0000	1.126
0.3183	16											
10	1	2	1	1	2	38.019	2.37067	38	39	4.1268	0.0000	1.126
0.3196	16											
11	1	2	0	2	1	39.584	2.27485	30107	32481	132.3113	0.0000	0.982
0.3405	8											
12	1	2	0	2	2	39.687	2.27485	14939	16054	132.3113	0.0000	0.982
0.3419	8											
13	1	0	0	4	1	45.730	1.98240	13229	11838	220.0326	0.0000	0.707
0.4269	2											
14	1	0	0	4	2	45.850	1.98240	6558	5849	220.0326	0.0000	0.707
0.4287	2											
15	1	2	2	0	1	46.183	1.96400	42715	37898	216.9924	0.0000	1.189
0.4335	4											
16	1	2	2	0	2	46.304	1.96400	21226	18729	216.9924	0.0000	1.189
0.4353	4											
17	1	2	1	3	1	50.366	1.81023	22	19	3.0450	0.0000	0.911
0.4963	16											
18	1	2	1	3	2	50.500	1.81023	11	9	3.0450	0.0000	0.911
0.4984	16											
19	1	1	1	4	1	51.601	1.76979	3527	2444	54.4441	0.0000	0.775
0.5154	8											
20	1	1	1	4	2	51.739	1.76979	1740	1207	54.4441	0.0000	0.775
0.5176	8											
21	1	2	2	2	1	51.912	1.75991	5384	3809	58.5900	0.0000	1.057
0.5203	8											
22	1	3	1	0	1	52.015	1.75666	5197	3768	55.0670	0.0000	1.189
0.5219	8											
23	1	2	2	2	2	52.051	1.75991	2565	1882	58.5900	0.0000	1.057
0.5224	8											
24	1	3	1	0	2	52.154	1.75666	2439	1862	55.0670	0.0000	1.189
0.5241	8											
25	1	2	0	4	1	57.028	1.61357	13404	13404	137.5781	0.0000	0.827
0.6023	8											
26	1	2	0	4	2	57.183	1.61357	6627	6623	137.5781	0.0000	0.827
0.6049	8											

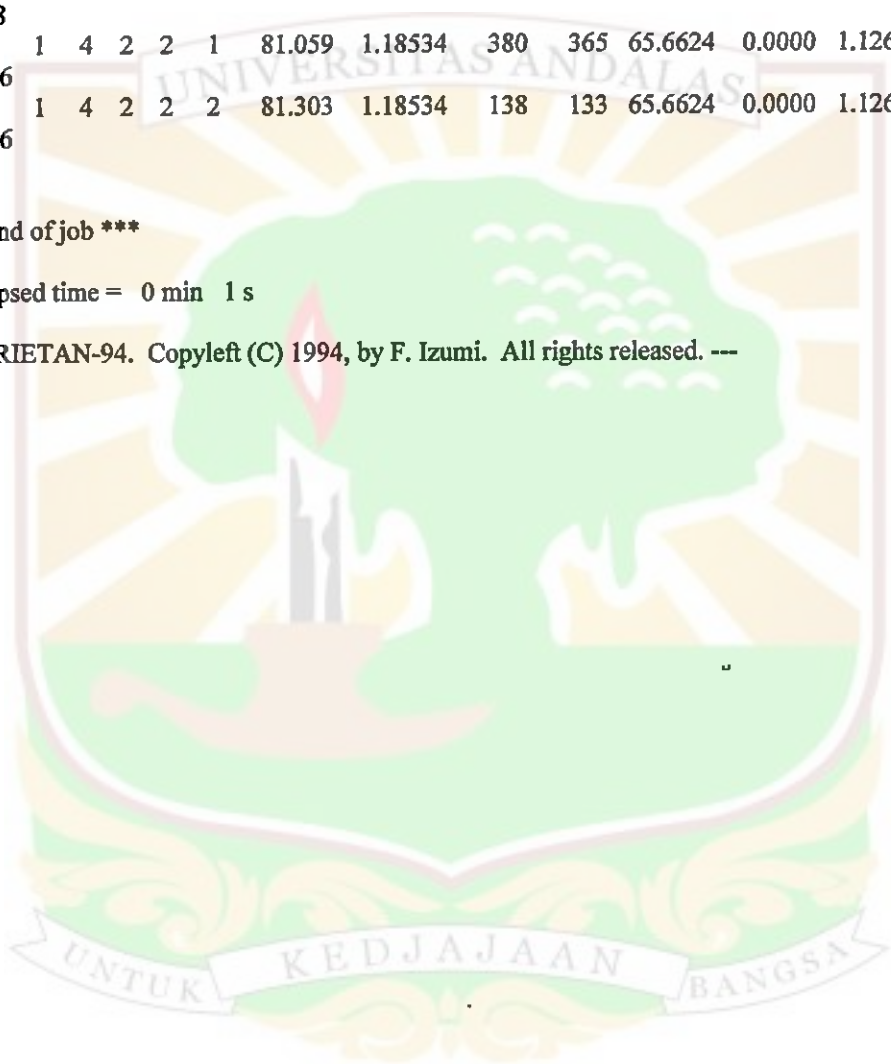
27	1	3	1	2	1	57.319	1.60608	32803	32659	133.7344	0.0000	1.077
0.6071	16											
28	1	3	1	2	2	57.475	1.60608	16349	16138	133.7344	0.0000	1.077
0.6097	16											
29	1	3	2	1	1	61.235	1.51241	57	55	5.6865	0.0000	1.163
0.6734	16											
30	1	3	2	1	2	61.404	1.51241	28	27	5.6865	0.0000	1.163
0.6763	16											
31	1	2	2	4	1	67.020	1.39522	15136	12820	152.5600	0.0000	0.899
0.7768	8											
32	1	2	2	4	2	67.209	1.39522	7516	6336	152.5600	0.0000	0.899
0.7803	8											
33	1	4	0	0	1	67.374	1.38876	9959	8333	152.0132	0.0000	1.189
0.7834	4											
34	1	4	0	0	2	67.564	1.38876	4955	4119	152.0132	0.0000	1.189
0.7869	4											
35	1	2	1	5	1	70.372	1.33676	4	3	1.8874	0.0000	0.808
0.8402	16											
36	1	2	1	5	2	70.572	1.33676	2	2	1.8874	0.0000	0.808
0.8440	16											
37	1	3	2	3	1	70.717	1.33108	27	23	4.5565	0.0000	1.024
0.8468	16											
38	1	4	1	1	1	70.889	1.32826	20	18	3.7054	0.0000	1.169
0.8502	16											
39	1	3	2	3	2	70.919	1.33108	13	12	4.5565	0.0000	1.024
0.8508	16											
40	1	4	1	1	2	71.092	1.32826	10	9	3.7054	0.0000	1.169
0.8541	16											
41	1	0	0	6	1	71.301	1.32160	232	205	46.2057	0.0000	0.707
0.8582	2											
42	1	0	0	6	2	71.505	1.32160	115	102	46.2057	0.0000	0.707
0.8622	2											
43	1	3	1	4	1	71.730	1.31475	2260	1977	44.5516	0.0000	0.925
0.8666	16											
44	1	3	1	4	2	71.936	1.31475	1124	978	44.5516	0.0000	0.925
0.8707	16											
45	1	4	0	2	1	71.987	1.31068	1463	1273	46.2436	0.0000	1.113
0.8717	8											
46	1	3	3	0	1	72.073	1.30934	669	583	42.8581	0.0000	1.189
0.8734	4											
47	1	4	0	2	2	72.194	1.31068	722	629	46.2436	0.0000	1.113
0.8758	8											
48	1	3	3	0	2	72.280	1.30934	330	288	42.8581	0.0000	1.189
0.8775	4											
49	1	1	1	6	1	75.896	1.25260	4316	3725	102.0562	0.0000	0.740

54	1	4	2	0	2	76.875	1.24215	3511	2971	103.3698	0.0000	1.189
0.9714	8											
55	1	4	1	3	1	79.839	1.20036	7	6	3.0471	0.0000	1.052
1.0353	16											
56	1	4	1	3	2	80.077	1.20036	3	2	3.0471	0.0000	1.052
1.0406	16											
57	1	2	0	6	1	80.399	1.19339	510	475	67.1413	0.0000	0.769
1.0477	8											
58	1	2	0	6	2	80.640	1.19339	150	142	67.1413	0.0000	0.769
1.0531	8											
59	1	4	2	2	1	81.059	1.18534	380	365	65.6624	0.0000	1.126
1.0625	16											
60	1	4	2	2	2	81.303	1.18534	138	133	65.6624	0.0000	1.126
1.0680	16											

*** End of job ***

Elapsed time = 0 min 1 s

--- RIETAN-94. Copyleft (C) 1994, by F. Izumi. All rights released. ---



Lampiran 4

Foto Alat



Neraca digital OHAUS
GALAXY™160



Mortar



Electric Furnace dengan
merk THERMOLYNE
48000 FURNACE



Hydraulic Press CARVER,



Difraktometer sinar-X merk
PHILIPS tipe APD 3520



Lampiran 5

Foto Bahan



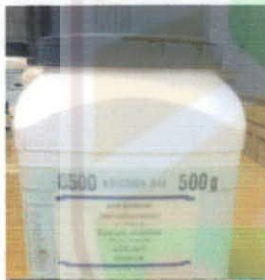
Bismuth Oksida (Bi_2O_3)
merek ABCR

Kemurnian 99,999 %



Natrium Karbonat
(Na_2CO_3) merek ABCR

Kemurnian 99,999 %



Bismuth Oksida
(BaCO_3) merek ABCR

Kemurnian 99,999 %



Titanium Oksida (TiO_2)
merek Stream Chemicals

Kemurnian 99,99 %

Lampiran 6

Konversi satuan tekanan Psi ke N/m^2

$$\begin{aligned} 1 \text{ kg/cm}^2 &= 14,221 \text{ Psi} \\ 1 \text{ Psi} &= 0,0703 \text{ kg/cm}^2 \end{aligned}$$

Dimana : Tekanan (P) = $F/A = \text{N/m}^2$ $F = \text{Newton} = \text{kg m/s}^2$
 $A = \text{m}^2$

$$\text{Sehingga } P = \text{kg /m s}^2 = \text{kg/100 cm s}^2$$

$$\begin{aligned} \text{Kg/100 cm s}^2 \times 1 \text{ s}^2/\text{cm} &= 0,01 \text{ kg/cm}^2 \\ 1 \text{ N/m}^2 &= 0,01 \text{ kg/cm}^2 \end{aligned}$$

Sehingga didapat

$$\begin{aligned} 1 \text{ Psi} &= 0,0703 \times 100 \text{ N/m}^2 \\ &= 7,03 \text{ N/m}^2 \end{aligned}$$

a (percepatan) merupakan nilai percepatan alat, dan dianggap konstan(1cm/s^2)

DAFTAR SINGKATAN

BNT = Bismut Natrium Titanat

BT = Barium Titanat

PZT = Lead Zirconium Titanat