Development of Data Acquisition and Control Software for High Resolution Powder Diffractometer

Pengembangan Perangkat Lunak Akuisisi Data dan Kontrol Difraktometer Serbuk Resolusi Tinggi

Bharoto *, Andon Insani

Pusat Sains dan Teknologi Bahan Maju
Badan Tenaga Nuklir Nasional

PSTBM-BATAN, Gd. 40 Kawasan Puspipetek Serpong, Tangerang Selatan, Banten
Indonesia

Abstract

In this paper, we present a new data acquisition and control system for a High Resolution Powder Diffractometer (HRPD). Our system consists of two parts: instrument control system such as motion system, position encoder system, and neutron counting system and the second part is the data acquisition that control the instrument automatically according to measurement mode to be run. According to the evaluation, the system is user friendly and makes users easier to run the experiment since the measurement would be run automatically without user intervention during the experiment. The system is evaluated according to software testing methodology. The results show that the software run well. This claim is verified by experiment/measurement results.

keywords: Software, data acquisition, control, neutron, diffractometer

Abstrak

Pada tulisan ini, dipresentasikan sebuah sistem akuisisi data dan kendali untuk difraktometer serbuk resolusi tinggi (*High Resolution Powder Diffractometer*, HRPD). Sistem terdiri dari dua bagian yaitu bagian kontrol instrumen seperti sistem penggerak, sistem pembaca posisi, dan sistem pencacah pulsa neutron, dan bagian akuisisi data yang mengendalikan instrumen secara otomatis sesuai dengan mode pengukuran yang diinginkan. Tampilan perangkat lunak ini dibuat sedemikian rupa sehingga tampak lebih *user friendly*, dan memudahkan pengguna dalam melakukan eksperimen karena perangkat lunak ini akan melakukan pengukuran secara otomatis tanpa ada intervensi lebih lanjut dari pengguna sesuai dengan parameter yang dimasukkan pengguna. Hasil pengujian menunjukkan bahwa perangkat lunak ini telah berjalan dengan baik dibuktikan dengan pengukuran kinerja dengan menggunakan peralatan difraktometer serbuk resolusi tinggi.

kata kunci: Perangkat lunak, akuisisi data, kontrol, neutron, difraktometer

1. PENDAHULUAN

Pada tahun 1992, beberapa peralatan hamburan neutron telah dipasang di laboratorium hamburan neutron (*Neutron Scattering Laboratory*, NSL), Badan Tenaga Nuklir Nasional (BATAN), Serpong untuk penelitian ilmu bahan. Salah satu peralatan tersebut adalah difraktometer serbuk resolusi tinggi (*High Resolution Powder Diffractometer*,

HRPD), yang merupakan difraktometer multiguna untuk mempelajari kristalografi dan struktur magnetik pada sampel serbuk. Namun beberapa tahun kemudian, eksperimen menggunakan peralatan tersebut tidak dapat dilakukan, karena komputer utama untuk akuisisi data dan kontrol instrumen tidak berfungsi. Untuk mengatasi masalah tersebut telah dilakukan upaya perbaikan seperti penggantian kontroler menggunakan PIC16C84 untuk mengendalikan motor penggerak difraktometer neutron[1], pembuatan penganalisis kanal tunggal (*Single Channel Analyser*) yang digunakan pada sistem pencacah pulsa neutron[2], dan penggantian pembaca posisi sumbu alat menggunakan antarmuka buatan sendiri dengan

*Corresponding Author. Tel: +62-21-7560922

Email: bharoto@batan.go.id

Received: 29 Apr 2014; revised: 15 May 2014; accepted: 20 May 2014

Published online: 30 May 2014

© 2014 INKOM 2014/14-NO306

komponen utama *Programmable Peripheral Interface* (PPI8255)[3][4], serta upaya peningkatan kualitas data dengan perangkat lunak buatan sendiri[5].

Dengan upaya tersebut di atas, HRPD dapat digunakan lagi untuk penelitian bahan. Namun demikian, seiring dengan semakin banyaknya pengguna difraktometer tersebut, maka pada tahun 2012 telah dilakukan improvisasi difraktometer dengan menambahkan kartu antarmuka pencacah pulsa menggantikan sistem yang lama, dan antarmuka pembaca posisi *absolute encoder*, serta pengembangan perangkat lunak akuisisi data dan kontrol yang lebih mudah digunakan (*user friendly*) menggunakan bahasa pemrograman *Visual Basic*. Pada tulisan ini akan disajikan berbagai upaya dalam memecahkan masalah yang terjadi, beserta pengembangan perangkat lunak akuisisi data dan kontrol pada peralatan difraktometer.

Tulisan ini diorganisasikan sebagai berikut pada Bagian 2 dibahas tentang difraktometer serbuk beresolusi tinggi. Sedangkan, pada Bagian 3 dijelaskan metodologi pengembangan sistem kendali yang diusulkan. Sistem perangkat lunak dan sistem kendali untuk difraktometer disajikan pada Bagian 4. Unjuk kerja sistem yang diusulkan disajikan pada Bagian 5. Tulisan ini ditutup oleh kesimpulan pada Bagian 6.

2. DIFRAKTOMETER SERBUK RESOLUSI TINGGI

Gambar 1. Difraktometer Serbuk Resolusi Tinggi

Difraktometer adalah peralatan untuk menganalisis struktur material dari pola hamburan yang dihasilkan ketika sinar radiasi atau partikel (sinar-X, neutron) berinteraksi dengan bahan. Salah satu difraktometer neutron untuk analisis kristalografi dan struktur magnetik pada bahan serbuk di BATAN Serpong adalah difraktometer

serbuk resolusi tinggi yang terpasang di gedung pemandu neutron (*Neutron Guide Hall*, NGH) berjarak 71 meter dari teras reaktor, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 1. Komponen utama peralatan ini adalah (1) Meja monokromator untuk menempatkan monokromator yang berfungsi sebagai penyaring panjang gelombang berkas neutron, (2) Kolimator yang meluruskan berkas neutron, (3) Penutup yang berfungsi untuk menutup berkas neutron apabila tidak dilakukan pencacahan neutron, (4) *Beam narrower* yang berfungsi untuk mempersempit berkas neutron, (5) Meja sampel untuk menempatkan sampel yang akan dikarakterisasi, (6) Kolimator yang meluruskan berkas neutron yang terhambur oleh sampel, dan (7) Detektor yang berjumlah 32 buah untuk menangkap neutron yang terhambur oleh sampel, seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2. Meja sampel dan detektor yang berat dapat digerakkan dengan mudah menggunakan motor stepper setelah diangkat oleh bantalan udara di atas lantai yang sangat licin.

Spesifikasi difraktometer ini ditunjukkan pada Tabel I[6].

Tabel I. Spesifikasi Difraktometer Serbuk Resolusi Tinggi

Source	S5 (radial) beam port
Monochromator	hot-pressed Ge(331)
Take off angle	89°
Wavelength (λ)	1.8223 Å
Neutron flux	$\sim 4 \times 10^4 \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$
Beam Narrower	$\sim 100 \text{ mm (h)} \times \sim 40 \text{ mm (w)}$
Collimators	Soller type, Gd ₂ O ₃ , mylar
Scattering angle	$-170^\circ < 2\theta < 10^\circ$
Main detectors	³ He detectors (32 units)

HRPD ini merupakan difraktometer standar dua sumbu dengan resolusi tinggi yang mana resolusinya dicapai dengan pemilihan kolimator ketiga dengan divergensi 6' dan sudut *take-off* monokromator mendekati 90°. Detektor utama berupa *multicounter* yang terdiri dari 32 pencacah ³He berjarak 5° dan dilengkapi kolimator di depannya.

3. METODOLOGI PENGEMBANGAN SISTEM KENDALI

Pada awal difraktometer ini terpasang, pengendalian sistem dilakukan dengan modul kontroler buatan Rigaku Co., Ltd. melalui *serial port* RS232C menggunakan komputer IBM PS2/70 dengan sistem operasi AIX. Namun setelah komputer utama pengendali difraktometer ini mengalami masalah sehingga sama sekali tidak dapat mengendalikan seluruh sistem kontrol, maka dilakukan penggantian sistem kontrol lama dengan sistem kontrol berbasis *Programmable Peripheral Interface* (PPI) 8255

Gambar 2. Skema Alat Difraktometer Serbuk Resolusi Tinggi

(a)

(b)

Gambar 3. a. Skema Sistem Kontrol Modifikasi Pertama (2005-2010), b Skema Sistem Kontrol Modifikasi Terakhir (2011-2013)

dan *Programmable Interval Timer* (PIT) 8253[4] seperti ditunjukkan pada Gambar 3a. Bagian yang

digerakkan dari difraktometer serbuk resolusi tinggi ini adalah meja monokromator yang terdiri dari

4 sumbu (ω , X, Y, Rx, Ry), meja sampel yang terdiri dari 6 sumbu (θ , 2θ , X, Y, Rx, Ry), dan 2 bantalan udara untuk mengangkat meja sampel dan meja detektor. Pada sistem yang telah dimodifikasi tersebut, kontrol penggerak semua motor tidak lagi menggunakan *serial port* melainkan menggunakan kartu antarmuka buatan sendiri melalui *Industry Standard Architecture (ISA) BUS* pada komputer pengendali dengan sistem operasi MS Windows. Akan tetapi, karena komunikasi antara kontroler dan komputer masih menggunakan *ISA BUS*, maka ada kendala ketika akan meng-*upgrade* komputer di mana komputer saat ini tidak memiliki *ISA slot* dalam *motherboard* nya. Kemudian, sistem baru dibuat untuk menggantikan sistem kontrol sebelumnya seperti ditunjukkan pada Gambar 3b. Pada sistem kontrol modifikasi terakhir ini, semua sumbu kembali digerakkan menggunakan modul kontroler yang dibuat oleh Rigaku Co, Ltd., yang dikendalikan melalui serial port RS232C. Sedangkan untuk pembacaan posisi sumbu θ dan 2θ dilakukan dengan memasang *absolute encoder* pada kedua sumbu tersebut. Pulsa dari *encoder* tersebut kemudian dibaca oleh antar muka *digital input/output (DIO)* berbasis *Peripheral Component Interconnect (PCI) BUS* buatan JS Automation Co, Ltd[7]. Adapun neutron yang terhambur yang ditangkap oleh detektor yang jumlahnya mencapai 32 buah dicacah secara bersamaan menggunakan kartu antar muka *multicounter (MC)* berbasis *PCI BUS* buatan Tedia, Co, Ltd[8].

Gambar 4. Skema penentuan titik datum

Pada sistem kontrol yang baru ini, modul kontroler Rigaku menyimpan posisi awal motor sesuai dengan *command syntax* yang diberikan oleh komputer saat perangkat lunak akuisisi data dan kontrol

dijalankan pertama kali. Untuk sumbu yang tidak terpasang *absolute encoder*, dilakukan pencarian titik *datum*, yaitu sebuah titik acuan posisi awal. Pada gerakan motor dengan kecepatan tetap saat inisialisasi, titik datum adalah pada saat masuk atau keluar dari sinyal datum. Sedangkan pada gerakan motor dengan kecepatan berbentuk trapesium saat inisialisasi, motor akan berhenti sebanyak pulsa deselerasi setelah masuk atau keluar dari sinyal datum, seperti ditunjukkan pada Gambar 4. Kontrol penempatan sumbu alat dilakukan dengan menggerakkan motor menggunakan parameter inisialisasi seperti kecepatan akselerasi, kecepatan maksimum dan kecepatan deselerasi yang berbentuk trapesium, yang selanjutnya akan dihitung kembali kekurangan atau kelebihan posisinya oleh perangkat lunak akuisisi data dan kontrol ketika semua pulsa sudah terkirim oleh kontroler Rigaku.

4. PERANGKAT LUNAK AKUISISI DATA DAN KONTROL YANG DIUSULKAN

Gambar 5 menunjukkan diagram alir perangkat lunak akuisisi data dan kontrol difraktometer serbuk resolusi tinggi. Perangkat lunak dimulai dengan pembacaan parameter alat seperti alamat kontroler Rigaku, alamat masing-masing sumbu, parameter motor (kecepatan awal, kecepatan maksimal, akselerasi, deselerasi, pulsa per derajat, posisi terakhir), dan parameter *encoder (Card ID, Port No, nilai encoder pada posisi nol, pulsa per derajat)*, kemudian dilanjutkan dengan inisialisasi ketiga kontroler yaitu Rigaku, DIO, dan kartu antarmuka *multicounter*. Setelah semua kontroler berhasil diinisialisasi, perangkat lunak akan mencacah neutron pada detektor monitor selama 10 detik untuk menghitung cacahan neutron per detik (cps). Selanjutnya, perangkat lunak akan membaca posisi setiap saat dalam waktu nyata dan ditampilkan pada tampilan utama.

Pada perintah menggerakkan sumbu, perangkat lunak akan mengidentifikasi sumbu yang akan digerakkan, bila sumbu 2θ yang digerakkan maka bantalan udara pada meja detektor akan dihidupkan dan *roller* pada meja detektor diturunkan dengan mengirim *command syntax* pada kontroler Rigaku, dan bila sumbu θ yang digerakkan maka bantalan udara pada meja sampel yang dihidupkan dan *roller* pada meja sampel diturunkan. Setelah bantalan udara sudah dipastikan hidup dan *roller* sudah dipastikan turun, maka perangkat lunak akan mengirim *command syntax* untuk menggerakkan motor pada kontroler Rigaku. Selanjutnya perangkat lunak membaca sinyal dari kontroler Rigaku yang menandakan pengiriman pulsa listrik ke penggerak motor sudah selesai. Pada sumbu yang terpasang *encoder*, hasil pembacaan *encoder* pada sumbu

Gambar 5. Diagram Alir Perangkat Lunak

yang bersangkutan dibandingkan dengan posisi yang dituju untuk memastikan apakah sumbu sudah benar berada dalam posisi yang dituju atau tidak. Apabila tidak tepat, maka perangkat lunak akan menuliskan posisi nyata sumbu ke kontroler Rigaku dan menggerakkan lagi sumbu ke posisi yang dituju. Untuk sumbu yang tidak terpasang *encoder* perangkat lunak hanya mengirimkan *command syntax* dan menunggu sampai semua pulsa listrik telah terkirim pada penggerak motor.

Pada eksperimen untuk menghitung efisiensi detektor, perangkat lunak membaca parameter eksperimen seperti detektor yang akan dihitung efisiensinya, daerah scan (*scanning area*), dan mode preset. Kemudian, sumbu 2θ digerakkan pada posisi

scan, neutron yang tertangkap pada detektor dicacah dan disimpan dalam sebuah file. Setelah data untuk semua detektor sudah didapatkan, maka efisiensi detektor dihitung dan posisi sumbu dikoreksi menggunakan *Gaussian fitting*. Data efisiensi dan koreksi posisi sumbu 2θ disimpan ke dalam file yang nantinya akan digunakan untuk mengoreksi hasil eksperimen karakterisasi bahan.

Untuk eksperimen karakterisasi bahan, posisi sumbu 2θ dan hasil cacahan neutron dikoreksi menggunakan data efisiensi yang didapatkan pada eksperimen menghitung efisiensi detektor tersebut di atas, kemudian disimpan dalam format *comma separated value* (csv), dan selanjutnya dapat diolah menggunakan perangkat pengolah data *Fullprof*

Gambar 6. Tampilan Perangkat Lunak Akuisisi Data dan Kontrol

Suite, General Structure Analysis System (GSAS), dan lain-lain.

5. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil eksperimen menggunakan perangkat lunak akuisisi data dan kontrol difraktometer serbuk resolusi tinggi ditunjukkan pada Gambar 6. Tampak pada gambar tersebut, perangkat lunak ini terdiri dari 6 bingkai, yaitu bingkai judul perangkat lunak, bingkai tampilan status alat, bingkai kontrol alat, bingkai eksperimen untuk menghitung efisiensi detektor, bingkai eksperimen untuk karakterisasi bahan, dan bingkai grafik data hasil eksperimen. Pada bingkai tampilan status alat, posisi semua sumbu ditampilkan setiap saat dalam waktu nyata. Sedangkan pada bingkai kontrol alat, terdapat pilihan goniometer dan sumbu yang akan digerakkan, dan masukan posisi yang diinginkan. Pada bingkai eksperimen untuk menghitung efisiensi, terdapat masukan detektor yang akan dihitung efisiensinya, daerah pergerakan detektor, pilihan mode preset, dan masukan nilai preset. Bingkai eksperimen untuk karakterisasi bahan terdiri dari masukan informasi pengguna dan asal institusi, nama sampel, pilihan goniometer dan sumbu yang akan di-scan, masukan daerah scanning, pilihan mode preset, dan masukan nilai

preset. Selain itu tampak pada bingkai tersebut nomor eksperimen dan nomor pelaksanaan (*running no*) yang akan memudahkan pengguna untuk melacak file hasil eksperimen, karena nama file hasil eksperimen diambil dari nomor tersebut (contoh nama file data eksperimen untuk eksperimen ini adalah E242R004.txt). Pada bingkai grafik hasil eksperimen, terdapat notifikasi berwarna merah dengan tulisan berwarna kuning yang menandakan bahwa eksperimen sedang berjalan, progress bar berwarna biru yang menampilkan proses pencacahan neutron, cacahan neutron per detik, cacahan neutron pada detektor monitor, dan grafik hasil eksperimen. Tampak pada gambar tersebut, eksperimen dengan nama sampel LiPO 1:4 sedang berjalan dan hasil pencacahan neutron ditampilkan secara nyata.

6. KESIMPULAN

Dari uraian tersebut di atas, dapat ditarik kesimpulan bahwa perangkat lunak akuisisi data dan kontrol yang dikembangkan telah dapat diimplementasikan pada difraktometer serbuk resolusi tinggi di laboratorium hamburan neutron BATAN Serpong.

Perangkat lunak ini lebih mudah digunakan karena lebih *user-friendly*, dengan menampilkan status alat setiap waktu dan eksperimen dapat dilakukan tanpa

ada intervensi dari pengguna selama eksperimen berlangsung sehingga lebih efektif dan efisien. Data hasil eksperimen disimpan dalam format yang dapat diolah dengan perangkat lunak pengolah data baik buatan sendiri maupun komersial sesuai dengan keinginan pengguna.

Karena perangkat lunak ini dibuat menyesuaikan keinginan pengguna alat, maka pengembangan yang lebih jauh lagi dapat dilakukan dengan mudah sesuai dengan perkembangan penelitian sains materi yang menggunakan peralatan hamburan neutron.

Ucapan Terima Kasih

Ucapan terima kasih penulis sampaikan kepada operator dan teknisi difraktometer/spektrometer neutron atas bantuan desain dan pembuatan perangkat keras kontrol peralatan, dan kepala Pusat Sains dan Teknologi Bahan Maju, Badan Tenaga Nuklir Nasional atas dukungan dana penelitian melalui Daftar Isian Pelaksanaan Anggaran (DIPA) 2011-2013.

Daftar Pustaka

- [1] D. Kurnia, "Aplikasi mikrokontroler pic16c84 untuk pengendalian motor stepper pada difraktometer neutron dan sinar-x," in *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 2*, Agustus 1999, pp. 20–22.
- [2] H. Mugirahardjo and E. Santoso, "Rancang bangun penganalisis kanal tunggal," in *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 4*, December 2001, pp. 154–158.
- [3] E. Santoso and A. Fajar, "Rancang bangun antarmuka antara absolute encoder difraktometer neutron resolusi tinggi (hrpd) dengan komputer," in *Prosiding Pertemuan Ilmiah Ilmu Pengetahuan dan Teknologi Bahan 2004*, September 2004, pp. 371–375.
- [4] E. Santoso, "Design and construction of the alternative control system for neutron diffractometers and spectrometers at ptbin," *Urania*, vol. 14, no. 2, pp. 84–96, 2008.
- [5] T. H. Priyanto, Supandi, Bharoto, and H. Mugirahardjo, "Perancangan perangkat lunak untuk meningkatkan kualitas data difraksi neutron pada difraktometer neutron serbuk resolusi tinggi (hrpd)," in *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 4*, December 2001, pp. 105–108.
- [6] A. Fajar, Gunawan, A. Maulana, and et al, "Neutron scattering in indonesia: The facility and activity," *Hamon*, vol. 20, no. 4, pp. 292–301, 2010.
- [7] J. S. Automation, *DIO-3248B Digital I/O Card User's Manual (V1.0)*.
- [8] Tedia. Pct-7424. [Online]. Available: www.tedia.eu/products/pct7424.html