

P3TIR/P.167/2003

PENGOLAHAN DATA HAMBURAN SINAR-X
SUDUT KECIL LARUTAN MAKROMOLEKUL
ENCER DAN INTERPRETASI HASILNYA

Krisna Lumbanraja

PENGOLAHAN DATA HAMBURAN SINAR-X SUDUT KECIL LARUTAN MAKROMOLEKUL EN CER DAN INTERPRETASI HASILNYA

Krisna Lumbanraja

Puslitbang Teknologi Isotop dan Radiasi, BATAN

ABSTRAK

PENGOLAHAN DATA HAMBURAN SINAR-X SUDUT KECIL MAKROMOLEKUL EN CER DAN INTERPRETASI HASILNYA. Telah dijalankan dengan benar paket program pengolahan data hamburan sudut kecil untuk larutan makromolekul encer dengan metoda transformasi tak langsung yaitu ITP-81 yang dikembangkan oleh Glatter. Perbedaan nilai karena beda *compiler* lebih kecil dari 0,02%. *Output* paket program ini antara lain adalah fungsi distribusi jarak partikel $p(r)$, intensitas hamburan partikel, $I(h)$, nilai jari-jari girasi, dan nilai intensitas hamburan pada sudut nol. Interpretasi dari data yang diolah menyimpulkan bahwa partikel yang diamati adalah berbentuk batang dengan jarak maksimum partikel, $D_{maks} = 250 \text{ \AA}$, jari-jari girasi $R_{gir} = 71,134 \text{ \AA}$ dan intensitas pada sudut nol, $I(0) = 11,687$. Untuk mendukung interpretasi diuraikan secara singkat latar belakang hamburan sinar-X sudut kecil sistim monodispers. Dibahas pula cara pemilihan nilai parameter stabilisasi, λ , dan parameter D_{maks} sebagai data input agar hasil pengolahan data mempunyai deviasi minimum.

ABSTRACT

THE SMALL ANGLE X-RAY SCATTERING DATA TREATMENT OF DILUTE MACROMOLECULE SOLUTION AND ITS OUTPUT INTERPRETATION. It has been successfully executed the software to treat the data of the small angle scattering for dilute macromolecule solutions using Indirect Transformation method that is ITP-81 developed by Glatter. The difference of the value caused by the compiler used is smaller than 0.02 %. The output of the software are the distance distribution function of the particle, $p(r)$, the scattering intensity function of the particle, $I(h)$, the radius of gyration, and the scattering intensity function at zero angle. The interpretation from the data treated summarizes that the particles observed are rod-like particle with the maximum distance of the particle, $D_{max} = 250 \text{ \AA}$, the radius of gyration, $R_{gir} = 71,134 \text{ \AA}$ and the intensity scattering at zero angle, $I(0) = 11,687$. In order to support the interpretation it is explained briefly the background of the small angle X-ray scattering of monodispers system. Also discussed how to determine the value of stabilization parameter, λ , and the D_{max} parameter which are function as the input data so that the result of the data treatment will have the minimum deviation.

PENDAHULUAN

Hamburan Sinar-X Sudut Kecil adalah suatu tehnik yang bermanfaat untuk mempelajari struktur molekul berukuran koloid. Salah satu contoh molekul dengan ukuran orde koloid adalah makromolekul biologi. Langkah awal untuk pendayagunaan

teknik ini adalah pemahaman tehniknya yang mencakup aspek pemahaman teori, aspek penguasaan pengambilan data eksperimen, aspek penguasaan pengolahan data, dan aspek interpretasi hasil pengolahan data. Makalah ini berhubungan dengan aspek penguasaan pengolahan data dan aspek interpretasi hasil pengolahan data.

Tersedia paket program ITP-81 untuk pengolahan data hamburan sudut kecil yang dibuat oleh Glatter [1] dengan *input* data beserta *output*nya. Makalah ini menyajikan hasil 'running' paket program tersebut dengan 'compiler' yang ada di laboratorium penulis. Selain itu juga menyajikan interpretasi *output* pengolahan data dari salah satu set data yang menyertai program tersebut. Dibahas pula sebanyak sepuluh pokok-pokok dalam bagian Teori yang diperlukan untuk membantu menjelaskan bagian Interpretasi yaitu sebagai latar belakang.

Tujuan dari makalah ini adalah: 1. untuk menginformasikan bahwa telah dilaksanakannya program pengolahan data hamburan sudut kecil untuk sistim monodispers secara benar sehingga dapat digunakan untuk pengolahan data secara rutin, 2. untuk menjelaskan cara menginterpretasi hasil pengolahan data yang diperoleh.

TEORI

Untuk menginterpretasi perolehan hasil (*output*) dari pengolahan data hamburan sudut kecil yang dilakukan dalam penelitian ini perlu diuraikan dahulu, secara singkat, latar belakang atau teori beberapa pokok yang menjadi pembahasan dalam bagian Interpretasi. Pokok-pokok tersebut tertuang dalam sub-judul dari nomor urut 1 sampai 10 bagian Teori berikut ini. [3]

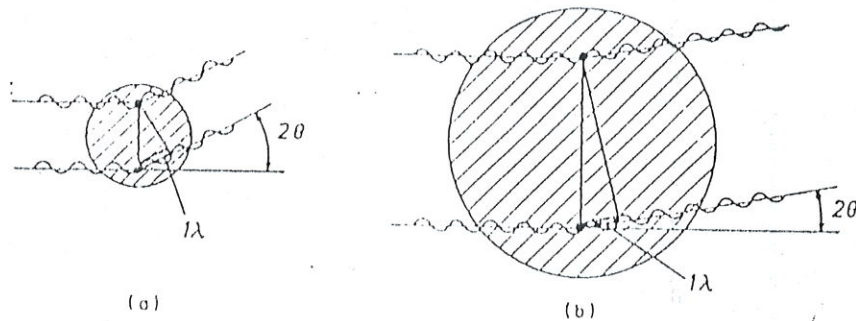
1. Hamburan Sudut Kecil

Setiap proses hamburan dicirikan dengan suatu hukum resiprokal yaitu memberikan hubungan terbalik antara ukuran partikel dan sudut hamburan. Dimensi koloid antara $10-10^3 \text{ \AA}$ adalah sangat besar bila dibandingkan dengan panjang gelombang sinar-X, sebagai contoh sinar-X yang paling sering digunakan adalah garis $\text{CuK}\alpha$ yaitu $1,54 \text{ \AA}$. Hal itu membuat daerah sudut hamburan yang sesuai dengan yang dapat diamati adalah kecil. Itu sebabnya analisa hamburan sudut kecil sinar-X digunakan untuk mempelajari struktur berukuran koloid. Karena sinar-X utamanya dihamburkan oleh

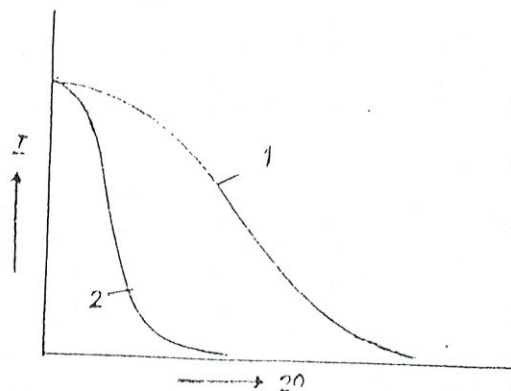
elektron-elektron, maka hamburan sinar-X sudut kecil selalu dan hanya diamati manakala ketidak-homogenan kerapatan elektron dari ukuran koloid ada dalam sampel. Pengamatan diijinkan hanya pada hamburan koheren mengingat hamburan inkoheren adalah lemah dan dapat diabaikan pada setiap sudut yang sangat kecil.

2. Visualisasi

Proses hamburan dapat divisualisasikan sebagai berikut. Elektron-elektron beresonansi dengan frekuensi sinar-X yang melewati objek dan memancarkan gelombang koheren sekunder, yang berinterferensi satu dengan lainnya. Sebuah contoh sederhana untuk mendiskusikan fenomena ini dijelaskan berikut ini.



Gambar (1): Ilustrasi hamburan sudut kecil oleh partikel bola (a) bola kecil, (b) bola yang lebih besar.



Gambar (2): Kurva intensitas hamburan sudut kecil

Gambar (1a) menunjukkan sebuah partikel bola. Diasumsikan bahwa gelombang-gelombang terhambur dari dua titik yang ditunjuk kepada sebuah sudut 2θ mempunyai beda lintasan 1λ . Jika dimasukkan hamburan dari semua titik (elektron-elektron), maka superposisi dari gelombang-gelombang dengan semua fasa yang mungkin akan pada dasarnya membawa kepada tidak ada hamburan pada arah 2θ sebagai hasil dari interferensi destruktif (saling melemahkan). Bila ditinjau sudut hamburan yang lebih kecil, perbedaan fasa menjadi lebih kecil dan gelombang-gelombang akan mulai saling menguatkan satu terhadap yang lain. Maksimum hamburan diamati dalam arah sudut hamburan nol, di mana seluruh gelombang akan sefasa.

Secara kualitatif, kurva hamburan yang dapat diamati akan seperti kurva 1, Gambar (2). Bila diterapkan gambaran di atas kepada bola yang jauh lebih besar, Gambar (1b) (untuk panjang gelombang yang sama): di sini beda lintasan 1λ terjadi pada sudut hamburan yang lebih kecil (kurva 2, Gambar (2)). Akhirnya untuk partikel-partikel yang sangat besar dibanding panjang gelombang, hamburan sinar-X sudut kecil terjadi.

3. Kurva Hamburan Partikel

Mengikuti alur pikiran di atas, adalah mungkin untuk menghitung kurva hamburan yang diharapkan untuk setiap bentuk partikel. Untuk partikel-partikel yang tidak isotropik harus dihitung hamburan untuk setiap orientasi dan merata-ratakan hasilnya. Salah satu tehnik yang berbeda untuk menghitung kurva hamburan melibatkan fungsi distribusi jarak elektron $p(r)$ yang diperoleh dari tinjauan geometri. Kurva hamburan $I(h)$ diperoleh dari $p(r)$ dengan invers Fourier

$$I(h) = 4\pi \int p(r) \frac{\sin hr}{hr} dr \quad (1)$$

$h = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}$, r = jarak antar elektron pada partikel. Satuan intensitas adalah banyaknya electron terhambur oleh sebuah molekul tunggal per sudut kerucut per satuan waktu.

4. Sistem Hamburan Partikel

Sejauh ini, yang dibicarakan adalah hamburan sudut kecil sinar-X dari partikel terisolasi, dikenal dengan sebutan 'hamburan partikel', yang di dalilkan oleh Guinier dalam tahun 1938. Sampel dengan kondisi sistem monodispers adalah sampel yang berupa

larutan encer. Molekulnya berukuran koloid dan disebut partikel. Partikel-partikel dalam larutan adalah identik. Tiap partikel mempunyai kerapatan elektron per satuan volume, ρ , konstan. Demikian juga halnya rapat elektron pelarut per satuan volume, ρ_0 , sama di seluruh sampel. Rapat elektron yang relevan pada hamburan adalah $\Delta\rho = (\rho - \rho_0)$. Selanjutnya karena larutannya encer berarti partikel-partikel terpisah jauh, akibatnya kontribusi terhadap hamburan tidak saling bergantung. Dengan demikian yang perlu diperhatikan hanyalah sebuah partikel tunggal. Untuk larutan seperti ini intensitas hamburan sistim adalah sekedar menjumlahkan intensitas hamburan dari individu partikel.

5. *Problema analisa*

Problema analisa hamburan sudut kecil terdiri atas menyimpulkan ukuran bentuk dan massa dan bahkan mungkin distribusi kerapatan elektron dari kurva hamburan. Seseorang harus mendapatkan suatu partikel model, yang 'ekivalen dalam hamburan' dengan partikel dalam larutan yaitu yang memiliki kesesuaian kurva hamburan dalam kesalahan eksperimental dengan kurva eksperimental. Semakin teliti yang terakhir ditentukan dan semakin besar daerah sudutnya, semakin menantang dan semakin berharga analisa problemanya. Ini terutama benar jika bukan hanya maksimum utama dari kurva hamburan, tetapi juga maksima tambahan yang teramati. Sebagai ilustrasi lihat Gambar (5b) yaitu kurva hamburan, $\log I(h)$, dengan maksima lebih dari satu. Maksima-maksima tambahan ini biasanya sangat lemah, tetapi posisi, tinggi, dan bentuk mereka adalah sensitif terhadap perubahan yang agak kecil dalam model. Solusi lengkap terhadap problema memperoleh sebuah model yang ekivalen dalam hamburan biasanya menghendaki beberapa siklus aproksimasi, bahkan kadang hanya coba-coba (*trial and error*).

6. *Parameter dari kurva hamburan*

Akan tetapi adalah mungkin untuk memperoleh sejumlah parameter dari kurva hamburan secara langsung tanpa dipersulit dengan coba-coba (*trial and error*). Parameter-parameter ini merupakan basis untuk analisis secara keseluruhan. Parameter pertama dari parameter-parameter tersebut adalah jari-jari girasi. Secara formal jari-jari girasi berkaitan terhadap jari-jari inersia dalam mekanika. Jari-jari girasi adalah akar

kuadrat rata-rata dari jarak seluruh elektron dari pusat gravitasi mereka. Karena itu jari-jari girasi merupakan ukuran intuisi untuk perluasan ruang dari partikel. Dalam suatu plot dari $\ln I$ vs $(2\theta)^2$ (plot Guinier), jari-jari girasi sebanding dengan akar kuadrat kemiringan tangensial dalam limit $2\theta \rightarrow 0$.

Voluma, V , parameter lain yang dapat diperoleh secara langsung, dapat dihitung untuk partikel-partikel dengan distribusi kerapatan elektron yang cukup homogen menurut

$$I = K \frac{I_0}{\int I(2\theta) \cdot (2\theta)^2 \cdot d(2\theta)} \quad (2)$$

$$K = \frac{\lambda^3 a^2}{4\pi}, \quad (a = \text{jarak sampel ke detektor}), \quad I_0 = \text{intensitas pada sudut } h = 0$$

Akhirnya orang dapat juga mengutip fungsi distribusi jarak, $p(r)$ dari antara parameter yang dapat diperoleh langsung. Ini didapat dengan inversi Fourier dari kurva hamburan

$$p(r) = \frac{1}{2\pi^2} \int I(h) \cdot hr \cdot \sinh r \cdot dh \quad (3)$$

7. Peta kurva hamburan + parameter \rightarrow aplikasi kepada makromolekul biologi.

Kembali ke masalah penentuan bentuk partikel. Telah diceritakan secara garis besar bagaimana kurva hamburan teoritis dapat dihitung untuk suatu model dengan bentuk tertentu. Sesungguhnya terdapat sebuah "atlas" kurva atau buku peta hamburan untuk sejumlah besar benda dengan tiga sumbu, seperti ellipsoid, parallel epipedum, silinder elip, silinder berlubang, bola berlubang dan sebagainya. Dengan menggunakan peta ini dan parameter-parameter di atas, adalah mungkin untuk mendapatkan pendekatan yang masuk akal bagi ukuran dan bentuk secara khusus makromolekul biologi. Sejumlah besar protein [4], nucleic acid, virus, dan ribosomes [5] telah diamati dengan sukses besar.

8. Fungsi $p(r)$ dan manfaatnya

Fungsi $p(r)$ berkaitan dengan $\rho(r)$ sehingga merepresentasikan bentuk partikel. Fungsi $p(r)$ ini (dikalikan dengan faktor 4π) dan untuk partikel homogen merepresentasikan banyaknya jarak di antara partikel, yaitu jumlah garis dengan panjang

r yang didapatkan dalam kombinasi dari setiap elemen kecil volume i dengan setiap elemen kecil volume yang lain.

Manfaat menggunakan fungsi $p(r)$ dapat dijelaskan sebagai berikut. Selain membandingkan kurva hamburan eksperimen dan teori, orang dapat juga membandingkan fungsi $p(r)$ teori dan eksperimen (dengan menggunakan persamaan (3)) untuk menghitung detail struktur partikel. Walaupun kedua pendekatan sama-sama ekuivalen, namun secara umum interpretasi fungsi hamburan dalam ruang resiprokal terhambat oleh sifat abstraknya yang tinggi dari domain ini. Sementara fungsi distribusi jarak $p(r)$ mempunyai definisi geometri yang lebih jelas dengan kata lain yang terakhir ini memiliki manfaat lebih dekat ke intuisi manusia.

Metoda baru Transformasi Fourier tak langsung mengijinkan penghitungan fungsi-fungsi $p(r)$ bahkan untuk situasi eksperimen non ideal. Kenyataannya, belakangan ini telah semakin biasa untuk mempublikasikan fungsi distribusi jarak bersamaan dengan kurva hamburan. Di antara manfaat lain, fungsi $p(r)$ mengijinkan membuat kesimpulan langsung terhadap sebuah parameter partikel yang penting yaitu nilai r pada $p(r)$ turun ke nol yang mengindikasikan dimensi maksimum.

Dalam makalah ini dibandingkan fungsi $p(r)$ teori atau analitis dengan fungsi $p(r)$ eksperimen yang telah diolah datanya oleh program pengolahan data hamburan sudut kecil ITP-81 yaitu pekerjaan dalam penelitian ini. Paragraf nomor 9 di bawah menguraikan fungsi $p(r)$ teoritis untuk partikel batang karena hasil pengolahan data dalam pekerjaan makalah ini menunjukkan fungsi $p(r)$ bentuk batang.

9. Fungsi $p(r)$ analitis partikel bentuk batang

Fungsi distribusi jarak, $p(r)$, beberapa bentuk partikel, dapat dihitung secara analitis. Kelas yang penting adalah partikel pemanjangan dalam satu arah yang mempunyai penampang lintang konstan dari sembarang bentuk (misalnya silinder panjang dan prisma). Penampang lintang A (dengan dimensi maksimum d) seharusnya kecil dibanding dengan panjang l dari keseluruhan partikel

$$d \ll l \quad l = (D^2 - d^2)^{\frac{1}{2}} \cong D \quad (4)$$

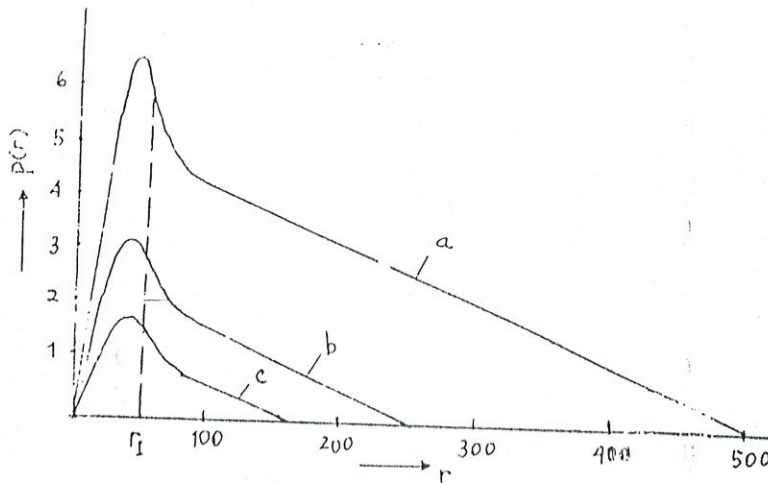
Untuk partikel demikian, $p(r)$ akan naik secara linier dengan menurunnya nilai r , mulai dari $r = l$. Fungsi $p(r)$ diberikan oleh

$$p(r) = \frac{2}{4\pi} \int_r^l \int_A \int_A \rho_c^2 \cdot df_1 \cdot df_2 \cdot dx = \frac{1}{2\pi} \cdot \rho_c^2 \cdot A^2 (l-r) \quad (5)$$

(lihat Gambar 3). Persamaan ini menunjukkan bahwa kemiringan dari bagian liniernya sebanding dengan kuadrat luas dari penampang lintangnya.

$$\tan \alpha = -\frac{dp}{dr} = \frac{A^2 \cdot \rho_c^2}{2} \quad (6)$$

Secara prinsip persamaan (4) dapat digunakan untuk menentukan luas penampang lintang A dari kemiringan bagian linier $p(r)$ untuk partikel bentuk batang bila kerapatan elektron partikel ρ_c diketahui.



Gambar (3): Distribusi jarak dari prisma homogen dengan panjang sisi: (a) 50:50:500

A ; (b) 50:50:250 A ; (c) 50:50:150 A

10. Grafik stabilitas

Dalam program ITP-81, untuk meminimalkan beda antara fungsi solusi $I_A(h)$ dan fungsi dari data eksperimen $I_{eksp}(h)$ dilakukan proses persamaan berikut

$$(M - N)L + \lambda \cdot N_c = \text{minimum} \quad (7)$$

M adalah jumlah titik data eksperimen, N_c , adalah norm turunan pertama koefisien solusi, c_v , N jumlah fungsi spline dan L rata-rata deviasi antara titik eksperimen dan fungsi solusi aproksimasi $I_A(h)$

$$L = \frac{1}{(M - N)} \sum_{i=1}^M \frac{(I_{\text{eksp}}(h_i) - \sum_{\nu=1}^N c_{\nu} \chi_{\nu}(h_i))^2}{\sigma^2(h_i)} \quad (8)$$

$\sigma(h_i)$ adalah standard deviasi data *input* $I_{\text{eksp}}(h)$, dan $\chi(h_i)$ adalah fungsi-fungsi yang dilakukan transformasi Fourier dan koreksi eksperimental. Parameter λ adalah parameter stabilisasi yaitu parameter yang dapat membuat seimbang L dan N_c untuk proses meminimalkan persamaan (7). Pada kenyataannya grafik antara $\log N_c$ terhadap $\log \lambda$ dan grafik L terhadap $\log \lambda$ yang disebut grafik stabilitas dapat menyuguhkan daerah nilai λ di mana N_c dan L bernilai konstan. Pada daerah tersebut dapat dipilih sebuah nilai λ yang optimum, λ_{opt} , sehingga memperoleh solusi dengan perbedaan yang kecil terhadap data eksperimen.

INTERPRETASI

Indikasi pelaksanaan program dinyatakan berhasil apabila kesamaan nilai *output* yang diperoleh dari pelaksanaan dengan komputer atau *compiler* yang digunakan penulis dengan *output* yang diberikan Glatter. *Compiler* yang digunakan Glatter adalah: Version 8-1982, Univac 1100, selanjutnya diberi kode *compiler* Glatter, sedangkan *compiler* yang digunakan penulis adalah: Microsoft ® Fortran Optimizing Compiler Version 4.10. Copyright © Microsoft Corp. 1987-1988, selanjutnya diberi kode *compiler* 1. Selain itu penulis menggunakan satu *compiler* lain lagi sebagai pembanding, yaitu Visual Fortran Professional Version 6.5, selanjutnya diberi kode *compiler* 2. Parameter yang dihitung oleh program ini adalah jari-jari girasi R_{gir} dan intensitas pada sudut nol $I(0)$. Tabel 1 memberikan nilai kedua parameter tersebut dari hasil perhitungan dengan tiga macam *compiler* komputer yang digunakan dan persentase perbedaan *compiler* 1 dan *compiler* 2 masing-masing terhadap *compiler* yang digunakan Glatter.

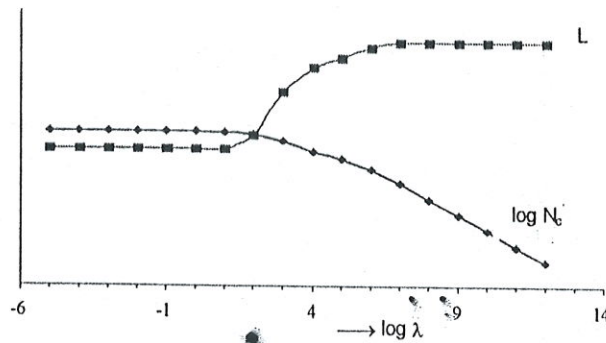
Perbedaan hasil yang kecil tidak lebih dari 0.02% karena perbedaan *compiler* bisa dianggap memberikan hasil yang sama dan dapat disimpulkan bahwa usaha membuat program dapat dilaksanakan dengan benar telah berhasil.

Parameter *input* untuk program ITP-81 selain data eksperimen adalah λ_{opt} dan D_{maks} yaitu parameter stabilisasi dan ukuran maksimum partikel. Gambar (4) adalah grafik stabilisasi

untuk pelaksanaan program ITP terhadap data set pertama. Deviasi rata-rata L tetap mendekati konstan dari $\log \lambda = 1$ ke -5 . $\log N_c$ relatif stabil dari $\log \lambda = 1$ ke -5 . Maka dalam daerah ini $\log \lambda = 1$ sampai -5 , λ_{opt} akan didapat.

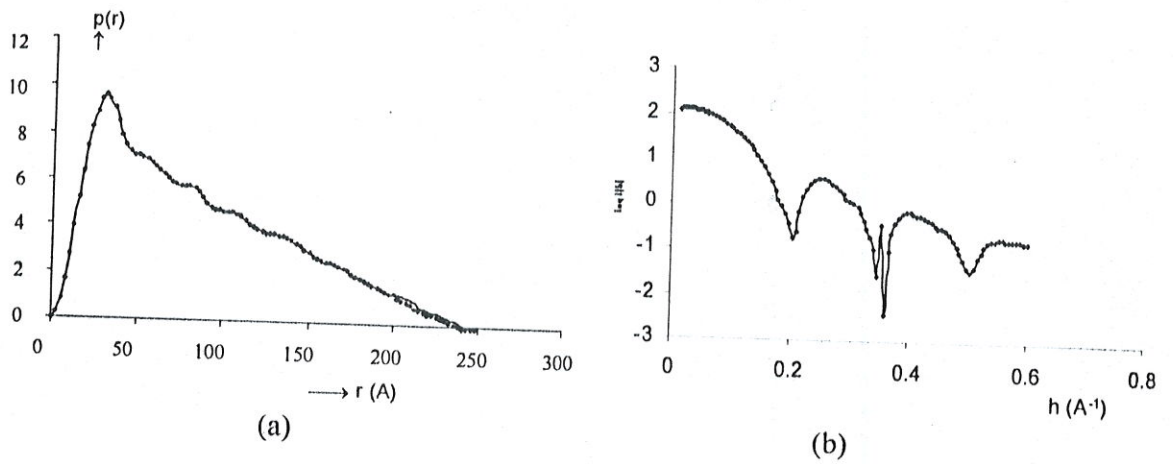
Tabel 1. Nilai jari-jari girasi, R_{gir} dan intensitas pada sudut hamburan nol, $I(0)$ dari tiga macam *compiler* dan persentase perbedaan nilai R_{gir} dan $I(0)$ yang dihitung *compiler* 1 dan *compiler* 2 terhadap nilai yang dihitung *compiler* Glatter.

<i>Compiler</i>	$R_{gir}(\text{Å})$	$\Delta R_{gir}(\%)$	$I(0)$	$\Delta I(0)(\%)$
Glatter	.71134E+02	0	.11687E+05	0
1	.71139E+02	.007	.11689E+05	0.017
2	.71141E+02	.017	.11688E+05	0.009



Gambar (4): Grafik Stabilisasi untuk data yang diolah. Kode ■ menyatakan deviasi rata-rata L dan kode ◆ menyatakan $\log N_c$.

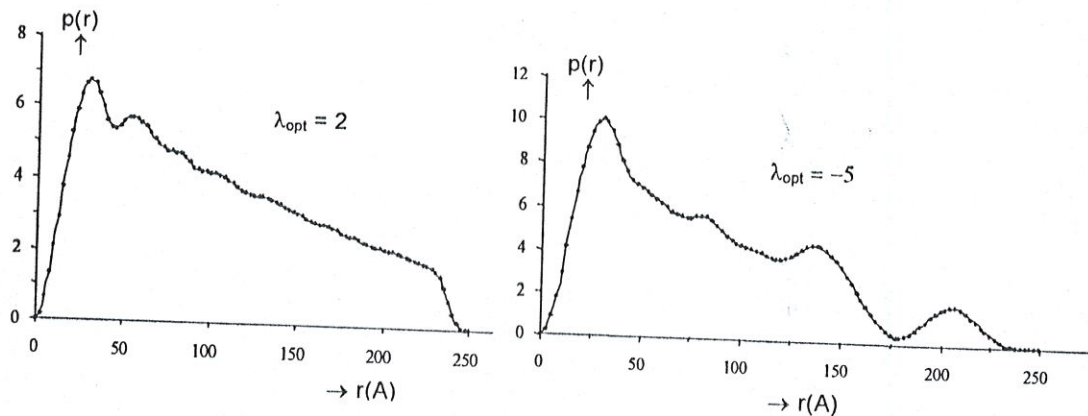
Output lain dari program ini adalah grafik fungsi $p(r)$. Gambar (5a) menunjukkan $p(r)$ untuk data yang diolah dengan pemilihan $\lambda_{opt}=1$. Dari bentuk fungsi tersebut dibandingkan dengan $p(r)$ teori atau analitik (Gambar (3)), dapat disimpulkan bahwa sistim partikel cuplikan yang diamati adalah partikel bentuk batang atau silinder. Ukuran maksimum partikel ini adalah 250 Å karena untuk $r > 250 \text{ Å}$, $p(r) = 0$. Pada $r = 42,5 \text{ Å}$ terjadi titik balik $p(r)$. Besaran ini dapat menjadi parameter *input* untuk D_{max}



Gambar (5): (a) Fungsi $p(r)$ dan (b) fungsi $\log I(h)$ dari data yang diolah dengan $input$ data $D_{maks} = 250 \text{ \AA}$ dan $\lambda_{opt} = 1$

pada pengolahan data cuplikan batangan [11]. Gambar (5b) menunjukkan fungsi $\log I(h)$ yang berkaitan dengan fungsi $p(r)$ pada Gambar (5a).

Gambar (6) menunjukkan fungsi solusi $p(r)$ untuk pemilihan λ terlalu tinggi, dan terlalu rendah. Tampak bahwa nilai λ_{opt} harus ditentukan dengan seksama untuk setiap pelaksanaan ITP terhadap data set individu.

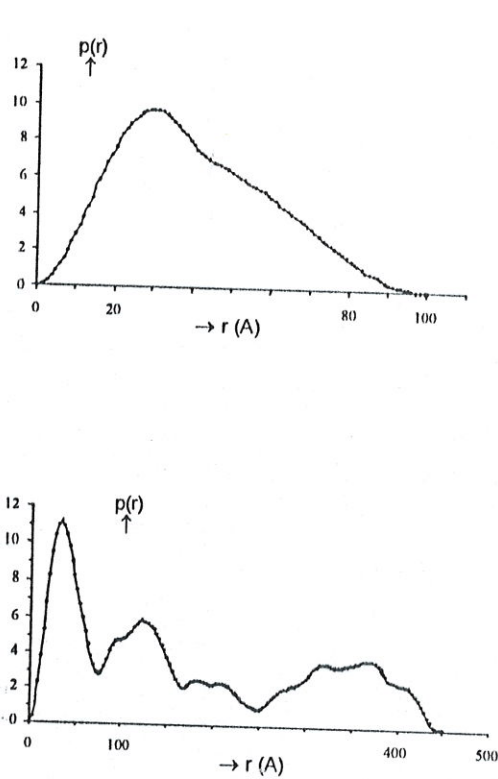


Gambar (6): Fungsi $p(r)$ dari data yang diolah untuk (a) $\lambda_{opt} = 2$ terlalu tinggi dan (b) $\lambda_{opt} = -5$ terlalu rendah.

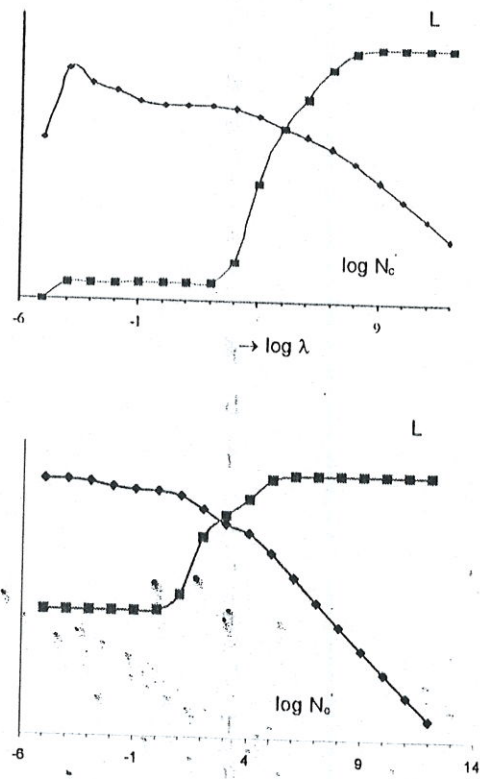
Gambar (7) menunjukkan bahwa estimasi terlalu kecil untuk D_{maks} memberi hasil yang salah pada $p(r)$. Sebaliknya estimasi terlalu besar juga membuat osilasi yang kuat. Keadaan ini dapat dilihat dari Grafik Stabilisasinya Gambar (8) yaitu tidak ada daerah

stabil pada grafik stabilitasnya untuk pemilihan D_{maks} yang terlalu kecil maupun terlalu besar. Dengan kata lain grafik stabilitas sangat membantu dalam mengevaluasi apakah data input D_{maks} terlalu besar atau terlalu kecil yaitu dengan melihat apakah ada daerah stabil pada kedua grafik tersebut.

Hal yang penting diperhatikan dalam pengolahan data adalah sistim sampel sumber data tersebut. Karena software atau program komputer pengolahan data dibuat untuk sistim tertentu. Seperti program ITP-81 ini dibuat untuk sistim sampel yang monodispers. Tentu saja hasil yang diperoleh tidak merepresentasikan sampel yang diamati bila sistim sampel tersebut berbeda. Sebagai contoh misalnya walaupun tersedia



Gambar (7): Fungsi $p(r)$ dari data yang diolah untuk
 (a) estimasi $D_{maks} = 100 \text{ \AA}$, terlalu kecil dan (b)
 estimasi $D_{maks} = 450 \text{ \AA}$, terlalu besar.



Gambar (8): Grafik Stabilitas dari data yang diolah
 untuk (a) $D_{maks} = 100 \text{ \AA}$, $\lambda_{opt} = 1$ dan untuk (b)
 $D_{maks} = 450 \text{ \AA}$, $\lambda_{opt} = 1$. Tidak ada daerah stabil
 pada kedua grafik tersebut untuk memilih λ_{opt} yang
 memadai.

data hamburan sudut kecil untuk sampel padat PS-PEP kopolimer blok (Polystyrene-block-Poly(Ethylene-alt-Propylene)), data tersebut mungkin saja bisa diolah dengan program ini, tapi hasilnya tidak merepresentasikan sampel tersebut karena sistim sampelnya tidak monodispers melainkan padat atau tidak larutan encer.

Besarnya jari-jari girasi hasil perhitungan adalah $R_{gir} = 71,134 \text{ \AA}$. Jadi ukuran intuisi untuk perluasan ruang dari partikel adalah sebesar $71,134 \text{ \AA}$. Besarnya nilai intensitas pada $h = 0$ adalah $I(0) = 11,687$. Manfaat mengetahui nilai besaran ini adalah untuk menghitung volume partikel seturut dengan rumus pada persamaan (2)

KESIMPULAN

1. Pelaksanaan program pengolahan data ITP-81 telah berhasil dijalankan dengan memberikan nilai *output* yang mendekati sama (beda 0,02 %) dengan hasil yang dijalankan *compiler* penulis program yaitu Glatter.
2. Interpretasi *output* dari data yang diolah menunjukkan bahwa cuplikan adalah partikel berbentuk batang dengan jarak maksimum partikel, $D_{maks} = 250 \text{ \AA}$, jari-jari girasi, $R_{gir} = 71,134 \text{ \AA}$ dan intensitas hamburan pada sudut nol, $I(0) = 11,687$.
3. Dengan mengamati grafik stabilitas dari hasil pengolahan data dapat diketahui apakah data *input* bagi program yaitu estimasi D_{maks} , sudah cukup baik.

UCAPAN TERIMAKASIH

Penulis menyampaikan penghargaan dan ucapan terimakasih atas pertolongan dan diskusi untuk kepastian keberhasilan menjalankan program dengan benar, kepada Dra. Yenny Khairina dari P2TIK-BATAN dan Ir. Tagor Malem Sembiring dari P2TRR-BATAN.

DAFTAR PUSTAKA

1. Otto Glatter; *Program System ITP-81, Fortran IV*
2. Otto Glatter; *Journal of Applied Crystallography*; **10**, 415-421, (1977)
3. Kratky O; *A Survey, Small Angle X-ray Scattering* (Otto Glatter ; Kratky, O., eds) Academic Press, (1982), Chapter 1.

4. Pilz I., *Proteins*, Small Angle X-ray Scattering (Otto Glatter ; Kratky, O., eds) Academic Press, (1982), Chapter 8.
5. Zipper P, *Nucleic Acid and Nucleo Proteins*, Small Angle X-ray Scattering (Otto Glatter ; Kratky, O., eds) Academic Press, (1982), Chapter 9.
6. Otto Glatter, *Interpretation*, Small Angle X-ray Scattering (Otto Glatter ; Kratky, O., eds) Academic Press, (1982), Chapter 5.
7. James N. Haag, *Comprehensive Standard Fortran Programming*, Hayden Book, New York, 1969.
8. Daniel D. Mc.Cracken, William S. Darn, *Numerical Methods and Fortran Programming*, John Wiley, New York, 1964.
9. Daniel D. Mc.Cracken, William S. Darn, *Studi Kasus Metoda Numerik Dengan Fortran IV*, (terjemahan), Erlangga, 1986
10. Karl Muller, Otto Glatter; *Makromol. Chem.*, **183**, 465-479 (1982)
11. Otto Glatter; *Journal of Applied Crystallography*; **13**; 577-584; (1980)