

SIMULASI *DYNAMIC LIGHT SCATTERING* UNTUK MENYELIDIKI PENGARUH PANJANG GELOMBANG TERHADAP AKURASI PENGUKURAN UKURAN PARTIKEL

NOWO RIVELI*

Departemen Fisika, FMIPA, Universitas Padjadjaran Jl. Raya Jatinangor KM 21, Jatinangor, Kabupaten Sumedang, 45363,

Abstrak. Dynamic Light Scattering (DLS) adalah metode standar untuk pengukuran ukuran partikel. Konsep pengukuran DLS melibatkan gerak Brownian yang pada dasarnya bersifat acak, mengakibatkan hasil pengukuran DLS akan dipengaruhi oleh statistik. Akurasi pengukuran DLS dapat dipengaruhi oleh faktor-faktor antara lain panjang gelombang cahaya, sudut hamburan, maupun distribusi ukuran partikel itu sendiri. Untuk menyelidiki pengaruh dari faktor-faktor tersebut, dalam penelitian ini telah dibuat simulasi DLS, yang terdiri dari simulasi gerak Brownian dan simulasi interferensi hamburan cahaya. Telah diperoleh bahwa panjang gelombang dari cahaya sumber serta ukuran partikel mempengaruhi akurasi pengukuran ukuran partikel, dimana efek paling dominan datang dari ukuran partikel.

Kata kunci: *zinc oxide, nanorod, self-assembly, penumbuhan dalam lingkungan asam*

Abstract. Dynamic Light Scattering (DLS) is a standard method for particle size measurement. The concept of DLS measurement involves Brownian motion, which is fundamentally random, resulting in DLS measurement outcomes being influenced by statistics. The accuracy of DLS measurements can be affected by various factors, including the wavelength of the light source, scattering angle, and the particle size distribution itself. To investigate the impact of these factors, this study has conducted DLS simulations, which consist of simulating Brownian motion and light scattering interference. It has been found that the wavelength of the light source as well as size of the particles affects the accuracy of particle size measurement, in which the dominant effect comes from the size of particles.

keywords: *Dynamic Light Scattering, Brownian motion, simulation, scattering, wavelength.*

1. Pendahuluan

Dynamic Light Scattering (DLS) merupakan teknik pengukuran terhadap distribusi ukuran partikel suspensi dalam larutan pada wilayah submikron sampai nanometer [1]. DLS menggunakan efek perubahan hamburan cahaya dan gerak Brown dalam mengestimasi distribusi ukuran partikel. Instrumentasi DLS saat ini telah tersedia dengan cukup luas dan bervariasi dengan pemanfaatan lintas bidang mulai dari energi sampai kedokteran. DLS dapat dimanfaatkan untuk mengetahui sebaran ukuran partikel, mendeteksi aglomerasi, hingga menganalisa kestabilan suatu larutan [2].

Dalam teknik pengukuran DLS, berkas cahaya, biasanya berupa sinar laser, dilewatkan pada koloid yang mengandung molekul-molekul yang kita ingin ketahui ukurannya. Setiap partikel pada larutan akan menghamburkan cahaya yang datang. Jika ukuran partikel jauh lebih kecil dari panjang gelombang cahaya, maka cahaya akan terhambur secara isotropik ke segala arah, disebut dengan hamburan Rayleigh [3]. Cahaya hamburan kemudian dideteksi dengan detektor cahaya dan intensitas total hamburan dapat diukur dengan laju pengukuran tertentu. Fluktuasi nilai intensitas terhadap waktu muncul karena partikel dalam larutan mengalami difusi gerak Brown. Laju difusi

*Email: nowo@phys.unpad.ac.id

sendiri dipengaruhi salah satunya oleh ukuran partikel. Sehingga perbedaan fluktuasi intensitas yang diperoleh di detektor akan dapat memberikan informasi terhadap ukuran partikel yang ada.

Perpindahan secara acak dari setiap partikel akan mengakibatkan perilaku stokastik pada intensitas total berkas hamburan. Oleh karena itu akurasi dari estimasi ukuran partikel akan sangat dipengaruhi oleh banyaknya pengambilan data serta fluktuasi statistik. Faktor konfigurasi eksperimen kemungkinan dapat mempengaruhi fluktuasi statistik [4], yaitu panjang gelombang cahaya yang digunakan maupun sudut penempatan detektor cahaya.

Dalam penelitian ini, untuk mengeksplorasi efek dari panjang gelombang cahaya terhadap akurasi pengukuran, dibuat program simulasi DLS secara sederhana. Terdapat dua bagian dari simulasi, yaitu pensimulasian gerak Brownian, lalu pensimulasian hamburan cahaya. Perhitungan ukuran partikel diperoleh dari fitting fungsi autokorelasi [5-7]. Tujuan dari penelitian ini adalah mengetahui pengaruh dari panjang gelombang, ukuran partikel, maupun rasio dari kedua besaran tersebut terhadap akurasi pengukuran, yaitu berupa nilai kesalahan relatif. Kedepannya informasi tersebut dapat digunakan untuk merancang konfigurasi pengukuran yang lebih efektif.

2. Teori

2.1 Gerak Brown

Gerak Brown adalah gerakan partikel yang berdifusi di dalam suatu larutan secara acak ke berbagai arah. Lebih tepatnya gerak acak yang dimaksud adalah gerak Gaussian dengan besar deviasi yang ditentukan oleh suhu, viskositas larutan serta ukuran partikel. Deviasi tersebut terkandung dalam suatu besaran yang disebut dengan tetapan difusi yaitu

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta r} \quad (1)$$

k_B adalah konstanta Boltzmann, T adalah suhu, η adalah viskositas, dan r adalah diameter dari partikel (dianggap berbentuk bola sempurna). Nilai konstanta difusi digunakan sebagai deviasi gerak Brown dengan hubungan

$$pos_{baru} = pos_{lama} + w\sqrt{2D}\Delta t \quad (2)$$

Dimana w adalah bilangan acak berdistribusi normal dan Δt adalah satuan interval waktu.

2.2 Hamburan Cahaya

Gelombang elektromagnetik yang datang dan dihamburkan oleh masing-masing partikel diwakili oleh vektor gelombangnya yaitu \vec{k}_{in} dan \vec{k}_{out} . Vektor hamburan didefinisikan dengan Pers. (3) berikut

$$\vec{q} = \vec{k}_{out} - \vec{k}_{in} \quad (3)$$

dengan

$$|q| = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (4)$$

Intensitas total dari hamburan oleh semua partikel adalah penjumlahan dari masing-masing berkas gelombang hamburan. Di asumsikan bahwa setiap berkas memiliki bilangan gelombang yang sama (paralel) dan amplitudo yang sama, maka superposisi gelombang adalah penjumlahan fase-fase gelombang. Dalam eksperimen intensitas total hamburan diukur setiap interval waktu tertentu. Gerak brownian akan mengakibatkan fluktuasi perubahan intensitas total.

2.3 Fungsi Autokorelasi

Pada prinsipnya informasi ukuran partikel terkandung dalam fluktuasi intensitas total hamburan. Fungsi autokorelasi [5] diperoleh dari nilai rata-rata produk dari dua nilai intensitas dengan selisih waktu τ .

$$G(\tau) = \frac{\langle I(t)I(t + \tau) \rangle}{\langle I(t)^2 \rangle} \quad (5)$$

Secara teori, fungsi autokorelasi dapat di fit dengan fungsi berikut:

$$G(\tau) = 1 + \alpha e^{-2Dq^2\tau} \quad (6)$$

Sehingga ukuran partikel akan dapat diperoleh.

3. Metode Simulasi

Pada penelitian ini disimulasikan sebanyak 50 buah partikel identik, dengan ukuran yang ditentukan pada tiga variasi yaitu 100 nm, 500 nm dan 1000 nm, tersebar dalam volume 3 dimensi dengan panjang sisi $1,2 \times \text{jumlah partikel} \times \text{diameter}$. Gerak Brownian disimulasikan dengan membangkitkan bilangan acak Gaussian untuk setiap partikel, kemudian menggunakan Pers. (2) untuk memperoleh posisi yang baru. Simulasi rentang waktu yang digunakan adalah $\tau = 500 \text{ ms}$, dan total pengukuran selama $N_t = 5000$ titik waktu. Pada simulasi ini tidak diperhitungkan bila dua buah partikel saling berhimpit, dan tidak ada batasan volume yang ditempati seluruh partikel.

Dalam mensimulasi hamburan, digunakan sudut hamburan sebesar 90° dengan dengan variasi panjang gelombang yang digunakan adalah 400 nm, 490 nm, 575 nm dan 600 nm. Nilai-nilai panjang gelombang tersebut mewakili spektrum cahaya tampak. Dalam menghitung intensitas total, dihitung amplitudo total yaitu superposisi setiap gelombang yang dihamburkan dari masing-masing posisi partikel. Vektor gelombang didapatkan dari Pers. (3). Intensitas total lalu diperoleh dari $I_{total} = E_{total}^2$.

Setelah fluktuasi intensitas total diperoleh, berikutnya dilakukan prosedur analisa yang biasa digunakan dalam eksperimen, yaitu perhitungan fungsi autokorelasi dan ekstraksi ukuran partikel. Fungsi korelasi dibatasi sampai $N_t = 500$ titik waktu. Untuk mendapat fungsi yang baik untuk dilakukan fitting, diambil rata-rata dari sebanyak 90 data fungsi autokorelasi, untuk setelah itu lalu dilakukan prosedur fitting. Kemudian dikumpulkan sebanyak 100 nilai ukuran partikel untuk melihat sebaran statistik.

4. Hasil dan Pembahasan

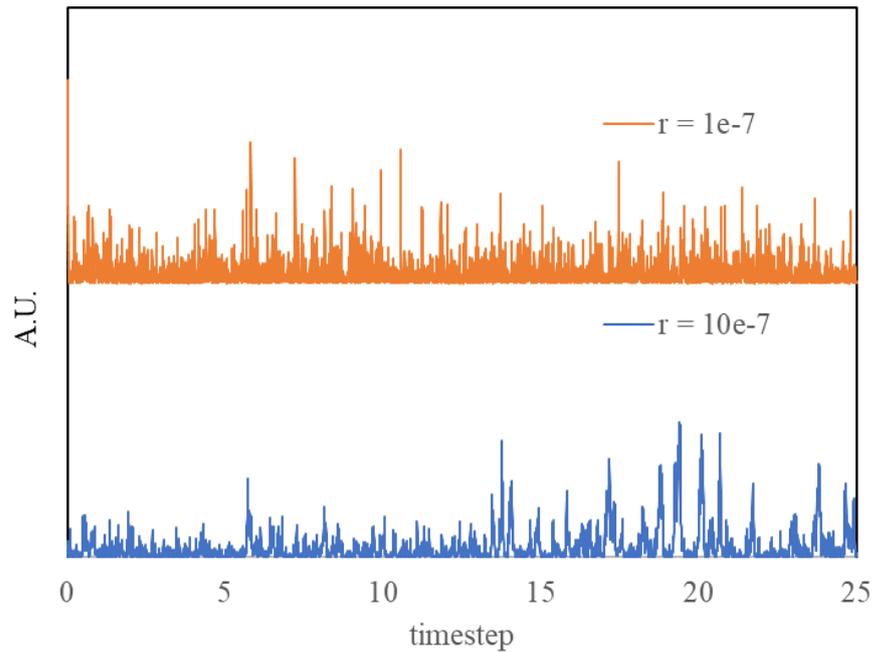
Salah satu cuplikan dari fluktuasi intensitas cahaya ditunjukkan pada Gambar 1. Kemudian fungsi autokorelasi yang sudah dirata-rata dengan fungsi fittingnya ditampilkan untuk tiga ukuran yang

berbeda pada Gambar 2. Tampak perbedaan titik waktu ketika mulai terjadi perubahan eksponensial dari nilai korelasi.

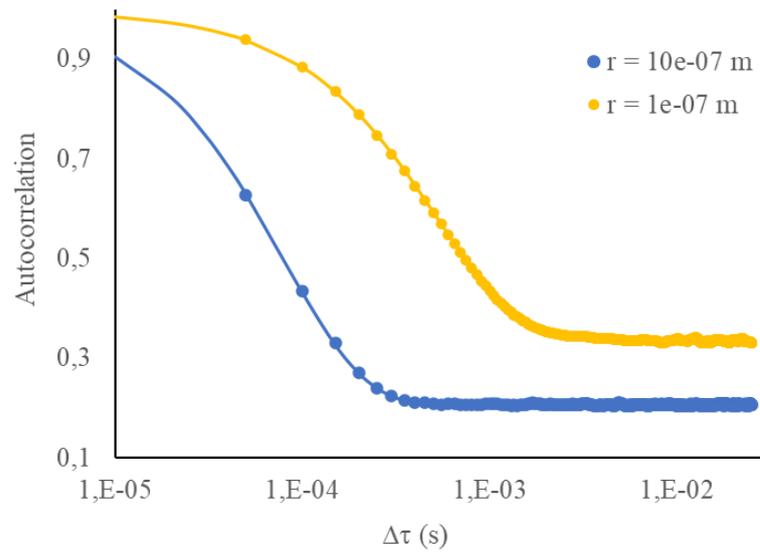
Hasil pengukuran nilai ukuran dengan variasi panjang gelombang ditampilkan pada Tabel 1. Nilai kesalahan relatif yang dinyatakan sebagai % error dapat diperoleh dari Pers. (7). Grafik untuk membandingkan besar nilai kesalahan ditampilkan pada Gambar 3.

$$\% - error = \frac{|r_{sim} - r_{true}|}{r_{true}} \times 100\% \quad (7)$$

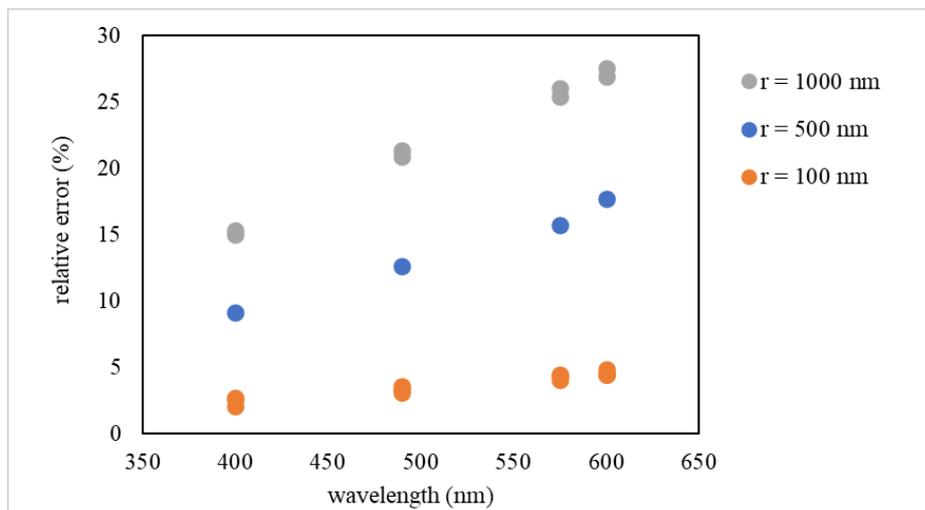
Dari Tabel 1 dan Gambar 3 dapat dilihat bahwa kesalahan relatif lebih dipengaruhi oleh ukuran partikel dibandingkan oleh panjang gelombang. Ukuran partikel akan menentukan kecepatan difusi partikel di dalam larutan, yang pada akhirnya akan menentukan lebar dari fungsi autokorelasi (Gambar 2). Semakin lebar fungsi autokorelasi akan mengakibatkan prosedur fitting menjadi kurang akurat, kecuali bila rentang waktu korelasi ($\Delta\tau$) juga diperbesar. Perilaku dari fungsi autokorelasi ini menyebabkan semakin besar ukuran partikel akan mengurangi akurasi pengukuran.



Gambar 1. Fluktuasi intensitas pada dua sistem dengan ukuran partikel yang berbeda. Semakin besar ukuran partikel semakin kecil laju perubahan intensitas.



Gambar 2. Fungsi autokorelasi pada dua sistem dengan ukuran partikel yang berbeda.



Gambar 3. Perbandingan nilai kesalahan relatif pengukuran ukuran partikel.

Tabel 1. Hasil pengukuran ukuran partikel dan nilai kesalahannya untuk setiap variasi ukuran simulasi dan panjang gelombang.

Diameter Simulasi ($\times 10^{-7} m$)	1,00		5,00		10,0	
Panjang Gelombang (nm)	$r_{exp} \times 10^{-7} m$	%-err	$r_{exp} \times 10^{-7} m$	%-err	$r_{exp} \times 10^{-7} m$	%-err
400	0,98	2,0	4,54	9,1	8,46	15,4
490	0,98	3,4	4,37	12,6	7,91	20,9
575	0,96	4,4	4,21	15,7	7,46	25,4
600	0,95	4,8	4,12	17,7	7,31	26,9

Tabel 1 dan Gambar 3 memperlihatkan bahwa panjang gelombang juga memberikan pengaruh pada akurasi pengukuran, meskipun efeknya lebih kecil dibanding efek dari ukuran partikel. Secara umum, semakin besar panjang gelombang maka semakin besar kesalahan relatif, berlaku pada semua ukuran simulasi. Hal ini menunjukkan rasio antara panjang gelombang dengan ukuran partikel bukanlah besaran yang dapat menentukan akurasi pengukuran.

5. Kesimpulan

Simulasi Dynamic Light Scattering telah dilakukan. Simulasi dilakukan dengan variasi tiga nilai panjang gelombang, dan tiga nilai ukuran partikel. Diperoleh bahwa panjang gelombang memberikan efek yang kecil terhadap akurasi pengukuran, sedangkan ukuran partikel sebenarnya memberikan efek yang dominan terhadap akurasi pengukuran ukuran partikel. Selain itu, ditemukan bahwa pengaruh panjang gelombang maupun ukuran partikel bekerja dengan saling independen..

Daftar Pustaka

- [1] Goldberg, WI. (1999). *Dynamic Light Scattering*, Am. J. Phys. 67, 1152.
- [2] Minton AP. *Recent applications of light scattering measurement in the biological and biopharmaceutical sciences*. Anal Biochem. 501, 4–22.
- [3] Barnett CE. (2016). *Some applications of wave-length turbidimetry in the infrared*. J Phys Chem. 46 (1942) 69–75.
- [4] Ruf H. (1993). *Data accuracy and resolution in particle sizing by dynamic light scattering*. Adv Coll Interface Sci. 46, 333–342.
- [5] Mueller PK, Givens RG. (1961). *Dynamic calibration and data interpretation of a light-scattering instrument*. J Air Pollut Control Assoc. 11, 576–580.
- [6] Cummins HZ, and Knable N, Yeh Y. (1964). *Observation of diffusion broadening of Rayleigh scattered light*. Phys Rev Lett. 12 150–153.
- [7] Chu B. (1970). *Laser Light Scattering*. Annu Rev Phys Chem. 21, 145–174