

## Simulasi Terbentuknya Struktur *Icosahedral* Pada Peristiwa Perubahan Fase Padat-Cair-Padat Menggunakan Metode Dinamika Molekul

### *Simulation of Formation of Icosahedral Structure in Solid-Liquid-Solid Phase Change Using Molecular Dynamics Methods*

Nikodemus Umbu Janga Hauwali<sup>\*)</sup>, Artoto Arkundato, Lutfi Rohman  
Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember, Jember  
<sup>\*)</sup>Email: nico.hauwali@gmail.com

#### ABSTRACT

It has successfully conducted research to study the structure of the icosahedral formation in the event of change of the solid phase - liquid-solid using molecular dynamics method . The result showed that the percentage of the maximum icosahedral structure (1,4%) is obtained when the simulation is run at the start of the cooling temperature of 2875 K at a rate of temperature decrease of 0.064 K /step and with .

**Keywords:** icosahedral, phase change, molecular dynamics

#### PENDAHULUAN

Material memiliki pengaruh yang sangat besar dalam kehidupan manusia. Perkembangan dan kemajuan masyarakat dari setiap generasi sangat berkaitan erat dengan kemampuan manusia untuk menghasilkan atau memanipulasi material untuk memenuhi kebutuhan mereka. Di era nanoteknologi, metode analisis mikroskopis sangat diperlukan untuk menghasilkan desain material yang bermanfaat untuk menunjang kehidupan manusia. Hal ini dapat dilakukan dengan menyelidiki fenomena fisik pada tingkat molekuler (Satoh, 2011).

Kuasikristal merupakan kelas baru dalam zat padat, setelah bahan kristal klasik dan bahan amorf. Kuasikristal pertama kali ditemukan oleh Daniel Shechtman *et al.*, pada tahun 1984 (Jansen, 2007). Kuasikristal memiliki beberapa sifat yang menarik, diantaranya: kekerasan yang tinggi, konduktivitas listrik dan termal rendah, energi permukaan rendah, koefisien gesek rendah, dan ketahanan korosi yang kuat. Kuasikristal dibedakan menjadi 4 jenis, yaitu kuasikristal octagonal, decagonal, dodecagonal, dan icosahedral (Gögebakan *et al.*, 2009). Eksperimen menunjukkan bahwa sejumlah besar logam dapat membentuk struktur icosahedral dalam keadaan cair (Zetterling, 2003).

Penelitian mengenai struktur icosahedral banyak dilakukan secara eksperimen pada

logam paduan. Seperti yang dilakukan oleh Saida dalam paduan Zr-Pt (Saida *et al.*, 2001), Jiang dalam paduan Zr-Al-Ni-Cu-Ag (Jiang *et al.*, 2001) dan Hennig dalam paduan Ti-Zr-Ni (Hennig *et al.*, 2008). Penggunaan logam paduan dalam penelitian tersebut dapat dipahami karena secara eksperimen, cukup sulit untuk menemukan satu material dalam keadaan yang benar-benar murni. Peneliti icosahedral untuk logam murni mudah dilakukan secara komputasi/simulasi. Penelitian mengenai struktur icosahedral secara simulasi juga dilakukan untuk material paduan. Seperti yang dilakukan oleh Wu dalam paduan  $\text{Cu}_{80}\text{Si}_{20}$  dengan menggunakan Ab Initio Molecular Dynamics (Wu *et al.*, 2012), dan Guo-Jian dalam paduan Cu-Co menggunakan metode Dinamika Molekul (Guo-Jian *et al.*, 2008).

Pada penelitian ini dipelajari fenomena terbentuknya struktur icosahedral pada perubahan fase padat ke cair kemudian kembali ke padat secara simulasi menggunakan metode dinamika molekul. Besi (Fe) murni yang berstruktur BCC (*Body Centered Cubic*) dipanaskan dari suhu ruang (300 K) hingga mencapai suhu di atas suhu kritis, lalu kemudian didinginkan secara cepat (*quenching*) hingga mencapai 0 K. Pada fase ini akan muncul struktur icosahedral. Melalui penelitian ini, diteliti karakteristik-karakteristik penting pada pembentukan struktur icosahedral dengan menggunakan simulasi dinamika molekul. Program yang digunakan dalam

simulasi ini adalah LAMMPS (*Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*).

## METODE

Penelitian ini menggunakan metode dinamika molekul. Terdapat beberapa komponen mekanika statistik yang diperlukan dalam simulasi dinamika molekul, yaitu termostat, integrator, dan fungsi potensial. Potensial yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial EAM (*Embedded Atomic Method*). Potensial EAM merupakan potensial yang biasa digunakan untuk sistem logam. Energi potensial dari atom-atom  $i$  pada potensial EAM dapat dituliskan:

$$E = \sum_i E_i = \sum_i F(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij(i \neq j)} \phi(r_{ij}) \quad (1)$$

Dari persamaan tersebut dijelaskan bahwa energi total sistem dalam potensial EAM bergantung pada fungsi *embedding*  $F(\bar{\rho}_i)$  dan energi interaksi pasangan antara atom  $i$  dan atom  $j$ ,  $\phi(r_{ij})$  (Zhou, 2013). Fungsi potensial EAM yang digunakan dalam penelitian ini menggunakan tabel potensial EAM yang sudah ada dan dapat diunduh dari website NIST yang dapat *digoogle* melalui internet.

Program dinamika molekul yang digunakan dalam penelitian ini adalah program LAMMPS. Program ini dapat memodelkan sebuah ensemble partikel pada keadaan padat, cair atau gas dan juga atom atau logam. Fitur yang menarik adalah bahwa LAMMPS dapat menangani simulasi sistem dengan jutaan bahkan miliaran partikel, tapi dalam waktu yang sama juga akurat untuk sistem yang lebih kecil (Camprubi, 2011). Program LAMMPS dipilih untuk simulasi ini karena merupakan program dinamika molekul klasik yang sangat handal dan banyak digunakan peneliti dunia.

Data hasil simulasi kemudian dianalisis dengan menggunakan metode CNA (*Common Neighbor Analysis*). Metode CNA digunakan untuk mengkarakterisasi lingkungan atom lokal dalam material yang disimulasikan. Dengan mengarakterisasi lingkungan atom lokal, maka dapat diketahui atom-atom yang masih berbentuk kristal dan atom-atom yang mengalami cacat kristal (Cleveland *et al*, 1999). Dalam penelitian ini, tidak dibahas mengenai CNA secara teori, namun hanya menggunakan fasilitas CNA yang sudah terdapat dalam program OVITO untuk menganalisis hasil simulasi. OVITO (*Open Visualization Tool*) merupakan salah satu program pendukung dalam simulasi dinamika molekul. OVITO merupakan

program untuk memvisualisasikan dan menganalisis data hasil simulasi atomik berskala besar dalam ilmu dan rekayasa material (Stukowski, 2010). Dengan menggunakan program OVITO, dapat dihitung struktur kristal dalam suatu material yang telah disimulasikan. Dalam program OVITO terdapat fasilitas CNA yang dapat digunakan untuk melihat jumlah struktur yang terbentuk.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Pada penelitian ini, dilakukan variasi suhu dan jumlah step simulasi. Jumlah step simulasi berhubungan dengan pengaturan laju penurunan suhu pada proses quenching yang akan terjadi. Simulasi dijalankan dengan suhu awal pendinginan 2500K, 2625K, 2750K, 2875K, dan 3000K. Pada masing-masing suhu tersebut dilakukan variasi laju penurunan suhu yang diwakili oleh jumlah step simulasi. Simulasi dilakukan juga untuk variasi jumlah step: 25000 step, 30000 step, 35000 step, 40000 step, 45000 step, dan 50000 step.

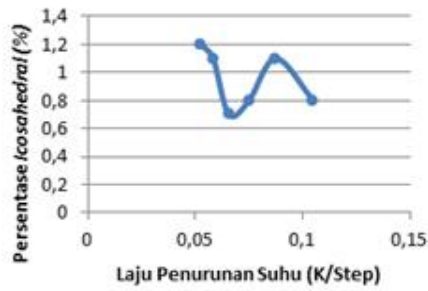
Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diperoleh hasil-hasil sebagai berikut:

Jika kita amati pengaruh laju penurunan maka untuk 2500K terlihat prosentase jumlah struktur icosahedral (%ico) yang dihitung dengan metode CNA yang ada dalam program Ovito terlihat bahwa %ico tertinggi pada saat laju penurunan sekitar 0,083% (Gambar 1).



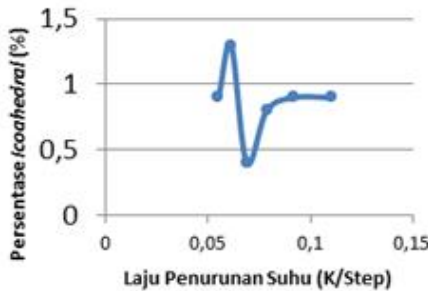
Gambar 1. Grafik pengaruh laju penurunan suhu terhadap persentase struktur icosahedral pada suhu awal pendinginan 2500 K

Pada suhu awal 2625K setelah simulasi terlihat %ico tertinggi pada saat laju penurunan sekitar 0,0875% (Gambar 2).



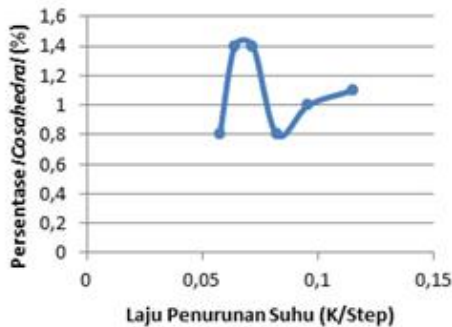
Gambar 2. Grafik pengaruh laju penurunan suhu terhadap persentase struktur icosahedral pada suhu awal pendinginan 2625 K

Pada suhu 2750K setelah simulasi terlihat %ico tertinggi pada saat laju penurunan sekitar 0,0611% (Gambar 3).



Gambar 3. Grafik pengaruh laju penurunan suhu terhadap persentase struktur icosahedral pada suhu awal pendinginan 2750 K.

Pada suhu 2875K setelah simulasi terlihat %ico tertinggi pada saat laju penurunan sekitar 0,0638% (Gambar 4).



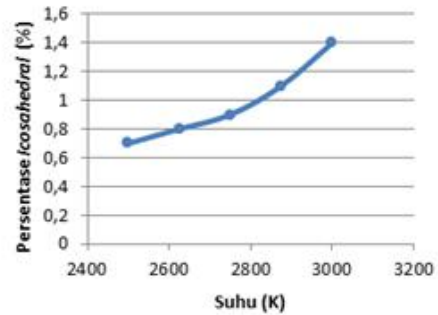
Gambar 4. Grafik pengaruh laju penurunan suhu terhadap persentase struktur icosahedral pada suhu awal pendinginan 2875 K

Pada suhu 3000 setelah simulasi terlihat %ico tertinggi pada saat laju penurunan sekitar 0,12% (Gambar 5).



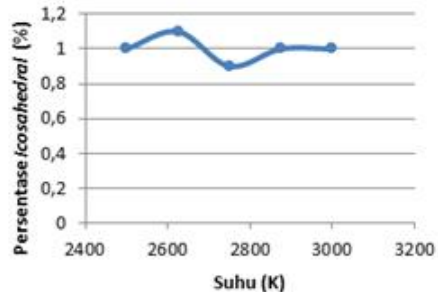
Gambar 5. Grafik pengaruh laju penurunan suhu terhadap persentase struktur icosahedral pada suhu awal pendinginan 3000 K.

Jika kita amati pengaruh suhu awal pendinginan terhadap %ico maka dapat kita lihat pada grafik bahwa untuk suhu awal yang tinggi 3000K maka %ico terlihat yang tertinggi 1.4% untuk 25000 integrasi (Gambar 6).



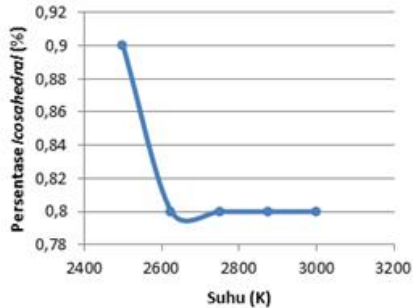
Gambar 6. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 25000 step.

Untuk 30000 step maka suhu awal 3000K menghasilkan %ico yang tertinggi 1,1% (Gambar 7).



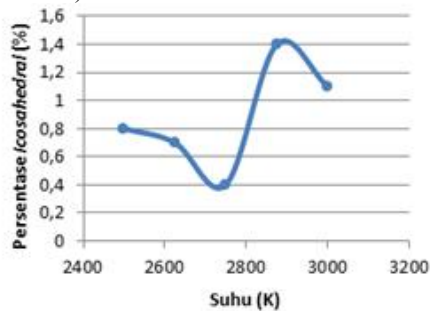
Gambar 7. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 30000 step

Untuk 35000 step maka suhu awal 2500K menghasilkan %ico yang tertinggi 0,9% (Gambar 8).



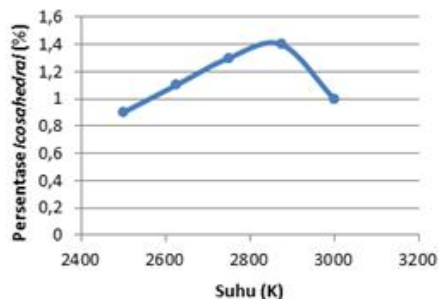
Gambar 8. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 35000 step.

Untuk 40000 step maka suhu awal 2875K menghasilkan %ico yang tertinggi 1,4% (Gambar 9).

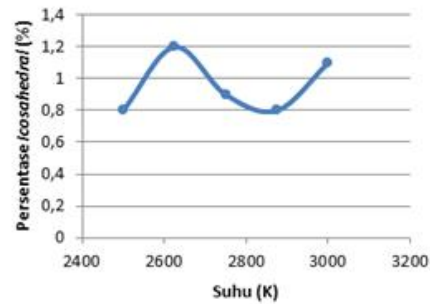


Gambar 9. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 40000 step

Untuk 45000 step maka suhu awal 2875K menghasilkan %ico yang tertinggi 1,4% (Gambar 10).



Gambar 10. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 45000 step



Gambar 11. Grafik pengaruh suhu awal pendinginan terhadap persentase struktur icosahedral pada 50000 step.

Jika kita perhatikan dari kedua perlakuan di atas, yaitu a) laju penurunan dan b) jumlah step maka nampaknya jumlah step tidak mempengaruhi hasil meskipun suhu awal pendinginan berbeda yaitu sekitar %ico = 1,4%. Nampaknya yang lebih berpengaruh adalah laju penurunan. Laju penurunan nampaknya diharapkan cukup lambat sehingga ini berarti suhu awal pendinginan harus cukup tinggi sehingga waktu relaksasi dari suhu tinggi ke suhu rendah cukup optimal untuk menghasilkan %ico yang besar. Jika kita perhatikan dari grafik hasil simulasi di atas maka suhu awal pendinginan 2875 K dengan laju penurunan suhu 0,064 K/step adalah cukup baik untuk memulai proses quenching yang akan menghasilkan %ico yang besar yang dari perhitungan kami adalah 1,4%.

## KESIMPULAN

BERDASARKAN PENELITIAN YANG TELAH DILAKUKAN, DIPEROLEH HASIL BAHWA STRUKTUR ICOSAHEDRAL MAKSIMUM DIPEROLEH KETIKA SIMULASI DIJALANKAN PADA SUHU AWAL PENDINGINAN 2875 K DENGAN LAJU PENURUNAN SUHU 0.064 K/STEP DENGAN HASIL %ICO ADALAH 1,4% TERHADAP SELURUH STRUKTUR AWAL LOGAM.

## Ucapan Terima Kasih

Terima kasih pada website NIST yang telah menyediakan database potensial EAM yang dapat digunakan dalam penelitian ini.

## DAFTAR PUSTAKA

Camprubi, G. (2011). *Mechanical properties at nano-level*. Sweden: Lund University

- Cleevand, C. L., Luedtke, W. D., Landman, U. (1999). *Melting of Gold Clusters..* Georgia Institut of Technolgy, Atlanta. Georgia. Physical Review B
- Guo-Jian, L., Qiang, W., Tie, L., Dong-Gang, L., Xiao, L., dan Ji-Cheng, H. (2008). *Molecular Dynamics Simulation of Icosahedral transformation in Solid Cu-Co Clusters.* China Physics Letter
- Göğebakan, M., Avar, B., dan Uzun, O. (2009). *Quasicrystalline phase formation in the conventionally solidified Al-Cu-Fe system.* Turkey.
- Hennig, R., Kelton, K., Carlsson, A., dan Henley, C. (2008). *Structure of the Icosahedral Ti-Zr-Ni Quasicrystals*
- Jansen, T., Chapuis, G., Boissieu, M. (2007). *Aperiodic Crystals.* England: Oxford University Press
- Jiang, J., Saksl, K., dan Rasmussen, H. (2001). *High-pressure X-ray diffraction of Icosahedral Zr-Al-Ni-Cu-Ag quasicrystals.* Applied Physics Letters
- Saida, J., Matsushita, M., dan Inoue., A. (2001). *Structural Change from Amorphous to Nano Icosahedral Quasicrystalline Phase with Quenching Rate in Zr-Pt Binary Alloy.* Japan Institute of Metals
- Satoh, A. (2011). *Introduction to Practice of Molecular Simulation.* Japan: Akita Prefectural University
- Stukowski, A. (2010). *Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – The Open Visualisation Tool.* Germany
- Wu, S., Kramer, M., Fang, X., Wang, S., Wang, C., Ho, K., Ding, Z., dan Chen, L., (2012). *Icosahedral short-range order in amorphous Cu<sub>80</sub>Si<sub>20</sub> by Ab Initio Molecular Dynamics Simulation Study.* Elsevier
- Zetterling, F. (2003). Dissertation: *Phase Transformations in Computer Simulated Icosahedrally Ordered Phases.* Stockholm: Royal Institute of Technolgy
- Zou, L. dan Huang, H. (2013). *A Response Embedded Atom Method in Interatomic Potentials.* Storrs: University of Connecticut. Physical Review B

