



**ANALISIS PENENTUAN TITIK LELEH PADA BAJA
PADUAN FeNi MENGGUNAKAN METODE KOEKSISTENSI
DUA FASA DENGAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR**

SKRIPSI

Oleh

**Muhammad Davan Fernanda
NIM 191810201003**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2023**



**ANALISIS PENENTUAN TITIK LELEH PADA BAJA
PADUAN FeNi MENGGUNAKAN METODE KOEKSISTENSI
DUA FASA DENGAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan studi pada Program Studi Fisika (S-1)
dan mencapai gelar Sarjana Sains (S.Si)

Oleh

Muhammad Davan Fernanda
NIM 191810201003

JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2023

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan dengan penuh rasa terima kasih yang sebesar-besarnya untuk:

1. Kedua orang tua tercinta, Ayah Suwarto dan Ibu Suyanti, kata-kata tidak mampu mengungkapkan betapa berharganya doa dan semangat yang selalu Anda berikan kepada saya. Terima kasih atas cinta tanpa batas dan kepercayaan yang telah Anda berikan selama ini. Semoga Allah SWT membalas segala kasih sayang-Nya kepada kalian.
2. Untuk semua adik-adikku, Adinda Melysiana Putri dan Davvin Rendy Zaerama, terima kasih atas dukungan dan motivasi kalian dalam menyelesaikan tugas akhir ini.
3. Kepada seluruh dewan guru, mulai dari taman kanak-kanak hingga perguruan tinggi, terima kasih atas ilmu yang kalian berikan selama perjalanan pendidikan saya. Terima kasih atas pengajaran yang tak ternilai dan dedikasi kalian dalam membimbing saya. Ilmu yang kalian berikan menjadi fondasi penting dalam menyelesaikan skripsi ini.
4. Kepada almamater saya, Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember. Terima kasih atas lingkungan akademik yang mendukung dan fasilitas yang disediakan. Saya berterima kasih telah diberi kesempatan untuk belajar dan tumbuh di lingkungan yang luar biasa ini.

MOTTO

“Bukan tentang apa yang menjadi tujuan, melainkan tentang peran yang kita
sampaikan kepada lingkungan sekitar”

(Penulis)



PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan di bawah ini:

Nama : Muhammad Davan Fernanda

NIM : 191810201003

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular” merupakan karya sendiri, pengecualian apabila terdapat kutipan yang telah saya sebutkan beserta dengan sumbernya. Karya tulis ini belum pernah saya ajukan ke berbagai instansi manapun dan merupakan hasil karya saya. Saya bertanggung jawab atas keaslian dan kebenaran isinya yang disesuaikan dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Penelitian yang dilakukan merupakan penelitian bersama dengan dosen dan mahasiswa, sehingga apabila ingin mempublikasikan harus dicantumkan dengan nama dosen pembimbing.

Demikian pernyataan yang telah saya buat, tanpa ada unsur paksaan maupun tekanan dari semua pihak. Saya bersedia mendapat sanksi akademik apabila terdapat ketidaksesuaian dengan pernyataan yang telah saya buat.

Jember, ... Juni 2023

Yang Menyatakan

Muhammad Davan F

NIM 191810201003

SKRIPSI

**ANALISIS PENENTUAN TITIK LELEH PADA BAJA
PADUAN FeNi MENGGUNAKAN METODE KOEKSISTENSI
DUA FASA DENGAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR**

Oleh:

Muhammad Davan Fernanda
191810201003

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.

Dosen Pembimbing Anggota : Dr. Lutfi Rohman, S.Si, M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular”, karya Muhammad Davan Fernanda telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal :
tempat : Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan
Alam Universitas Jember

Tim Penguji :

Ketua,

Anggota I,

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.
NIP. 196112251999031001

Dr. Lutfi Rohman, S.Si, M.Si.
NIP. 197208201998021001

Anggota II,

Anggota III,

Agung Tjahjo Nugroho, S.Si., M.Phil., Ph.D.
NIP. 196812191994021001

Dr. Ratna Dewi Syarifah S.Pd., M.Si.
NIP. 198803202019032011

Mengesahkan,
Dekan,

Drs. Achmad Sjaifullah, M.Sc., Ph.D.
NIP. 195910091986021001

RINGKASAN

Analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular; Muhammad Davan Fernanda, 191810201003; 2023; 51 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

Titik leleh merupakan salah satu faktor penting dalam pembuatan bahan baru. Pada suatu bahan, titik leleh digunakan untuk membentuk suatu bahan dengan tingkat kekuatan bahan terhadap panas yang dapat ditentukan. Titik leleh suatu bahan memiliki nilai yang berbeda-beda, tergantung pada bahan penyusunnya. Baja paduan juga memiliki nilai titik leleh yang berbeda-beda, tergantung jenis bahan penyusunnya, dimana pada penelitian ini menggunakan bahan penyusun besi (Fe) dengan titik leleh senilai 1811 K dan nikel (Ni) dengan titik leleh 1728 K. Pada baja paduan FeNi, yang merupakan campuran antara besi (Fe) dan nikel (Ni), penambahan nikel meningkatkan kekuatan dan ketahanan panas baja terhadap korosi pada suhu tinggi. Penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi dapat dilakukan melalui metode eksperimental maupun simulasi komputer. Penggunaan simulasi komputer memungkinkan peneliti untuk memodelkan dan mensimulasikan proses kimia fisika terkait sehingga dapat memudahkan dalam penemuan bahan baru sebelum melakukan sintesis langsung atau eksperimen.

Tujuan dari penelitian yang dilakukan ini adalah untuk mengetahui titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode simulasi komputer yaitu simulasi dinamika molekular dengan teknik koeksistensi dua fasa. Pada penelitian ini, dilakukan untuk mengetahui nilai titik leleh berdasarkan perubahan struktur atom pada fasa padat dan cair yang terjadi pada suhu tertentu. Metode ini dilakukan dengan menggabungkan struktur pada kondisi padat (*solid*) dan cair (*liquid*) dan dilanjutkan dengan simulasi NPT pada aplikasi LAMMPS. Penentuan titik leleh dengan metode koeksistensi dua fasa memiliki nilai keakuratan yang tinggi jika dibandingkan dengan metode perubahan fasa.

Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan file input berupa nilai koordinat struktur atom baja paduan feni. Hasil simulasi menggunakan metode koeksistensi dua fasa pada simulasi dinamika molekular berupa file output xyz yang berisikan struktur atom yang berubah atau terjadi setelah dilakukan simulasi NPT pada suhu tertentu. Output tersebut akan ditampilkan melalui OVITO untuk dianalisis dengan melihat nilai CNA yang terjadi pada setiap struktur atom. Nilai CNA dengan struktur sebelum dan setelah dilakukan simulasi memiliki nilai yang sama, maka diperkirakan menjadi titik leleh.

Hasil dari penelitian yang dilakukan, metode koeksistensi dua fasa digunakan untuk menentukan titik leleh baja paduan FeNi. Metode ini memberikan hasil titik leleh sebesar 1850 K, yang lebih akurat dibandingkan dengan metode perubahan fasa yang menghasilkan nilai titik leleh antara 2600 K hingga 2900 K. Meskipun belum ada penelitian eksperimental yang mengkaji perhitungan titik leleh pada baja paduan FeNi, nilai titik leleh 1850 K yang diperoleh dalam penelitian ini tetap relevan. Peningkatan titik leleh baja paduan FeNi disebabkan oleh efek campuran nikel dan besi. Nikel memiliki titik leleh yang relatif tinggi, sedangkan besi memiliki titik leleh yang lebih rendah. Dalam struktur kristal besi, pencampuran nikel dengan besi mengakibatkan penguatan ikatan antar atom, sehingga nilai titik leleh yang dihasilkan tidak jauh berbeda dari titik leleh besi (Fe) sebesar 1811 K dan nikel (Ni) yaitu 1728 K. Oleh karena itu, metode koeksistensi dua fasa dalam simulasi dinamika molekular menunjukkan hasil yang lebih akurat dalam penentuan titik leleh baja paduan feni.

PRAKATA

Puji Syukur atas kehadiran Allah SWT atas segala rahmat, hidayah, serta karunia-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S-1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terimakasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Utama (DPU) dan Dr. Lutfi Rohman, S.Si, M.Si. selaku Dosen Pembimbing Anggota (DPA) yang telah meluangkan waktu, pikiran dan mengarahkan penulis untuk menyusun skripsi;
2. Agung Tjahjo Nugroho, S.Si., M.Phil., Ph.D. selaku Dosen Penguji I dan Dr. Ratna Dewi Syarifah S.Pd., M.Si. selaku Dosen Penguji II yang telah memberikan arahan dan bimbingannya serta masukan untuk kesempurnaan skripsi ini;
3. Drs. Imam Rofi'i., M.Sc selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah meluangkan waktunya untuk bimbingan dan memberikan arahan berupa saran maupun masukan selama masa perkuliahan;
4. Seluruh Dosen Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember yang telah memberikan ilmu dan bimbingan sehingga penulis dapat menyelesaikan Pendidikan strata satu (S-1) di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember;
5. Seluruh staff dan karyawan FMIPA Universitas Jember yang telah membantu dalam proses administrasi maupun lainnya;
6. Sahabat-sahabat PMIII Rayon MIPA secara khusus dan PMII Jember secara umum yang telah memberikan ruang berproses dan belajar kepada saya;

7. Rekan-rekan BPM FMIPA UNEJ 2022 yang telah memberikan wadah bagi saya untuk melanjutkan pengabdian dan mengimplementasikan ilmu saya kepada almamater FMIPA tercinta;
8. Teman satu angkatan PION 2019 telah memberikan kesan yang luar biasa serta memberikan banyak pelajaran berharga selama menempuh studi di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember;
9. Kawan-kawan Ikatan Mahasiswa Lamongan yang ada di Jember yang juga telah memberikan dukungan dan doa kepada saya untuk menyelesaikan skripsi ini;
10. Semua pihak yang tidak disebutkan satu persatu, dan turut membantu dalam menyelesaikan skripsi ini.

Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi semua pihak yang telah membaca.

Jember, Juni 2023

Muhammad Davan Fernanda

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Ilmu pengetahuan dan teknologi ini telah berkembang dengan sangat pesat. Kemajuan ilmu pengetahuan dan teknologi ditandai dengan penemuan-penemuan baru di segala bidang sains dan teknologi. Berkembangnya ilmu pengetahuan dan teknologi menjadikan segala pekerjaan manusia semakin lebih mudah. Upaya untuk meningkatkan kemajuan di bidang sains dan teknologi terus dilakukan melalui berbagai riset unggul. Penelitian dalam ilmu fisika bahan merupakan hal yang sangat penting untuk dilaksanakan karena banyak berhubungan dengan berbagai aspek kehidupan. Hal ini ditandai dengan banyaknya pemanfaatan logam terutama baja di berbagai sektor industri, seperti industri manufaktur, industri otomotif, elektronika, industri pembuatan badan kendaraan bermotor, konstruksi bangunan, industri pembuatan peralatan rumah tangga dan lain-lain. Material baja yang dimanfaatkan pada industri tersebut dipilih berdasarkan kualitas bahan dengan sifat-sifat bahan untuk sesuai dengan penggunaannya. Berbagai sifat bahan baru yang memungkinkan aplikasi yang lebih luas terus dicari dan diteliti baik dari segi teori maupun eksperimen. Seperti halnya, sifat sebuah bahan baru yang berhubungan dengan tingkat kekuatan bahan terhadap panas, yaitu titik leleh. Pada titik leleh, suatu bahan mencapai titik kesetimbangan antara kondisi padat dan kondisi cair (Britannica, 2022), sehingga studi titik leleh suatu bahan sangat penting pada pembuatan bahan baru yang tahan terhadap panas dengan suhu yang tinggi. Secara umum, titik leleh dapat dilakukan secara eksperimental, namun dalam hal lain dapat dilakukan dengan simulasi komputer. Penggunaan simulasi komputer dapat memudahkan untuk menemukan bahan baru dengan proses-proses kimia fisika yang terkait dapat dimodelkan dan disimulasikan terlebih dahulu sebelum dilakukan sintesis bahan secara langsung atau eksperimen.

Simulasi dinamika molekul merupakan sebuah metode yang dapat digunakan untuk melakukan prediksi terhadap sifat-sifat statik maupun dinamik yang dapat diturunkan secara langsung melalui interaksi pada tingkat atom dan

molekul. Berdasarkan interaksi antar atom dan molekul, dapat diketahui sifat bahan yang akan diteliti. Secara umum, metode MD (*Molecular Dynamics*) memerlukan informasi koordinat awal atom pada bahan, kondisi simulasi (molekul, tekanan, rapat partikel, dan lain-lain), fungsi potensial interaksi antar atom untuk objek yang akan disimulasikan dan spesifikasi objek yang akan disimulasikan (massa, muatan, jumlah atom, dan lain-lain) (Widiasih dkk., 2013). Pada metode dinamika molekul, bahan yang akan disimulasikan memerlukan input energi potensial material. Metode tersebut dipengaruhi oleh bahan apa yang akan di simulasi dan diprediksi, serta jenis energi potensial yang digunakan akan menentukan hasil simulasi. Perhitungan titik leleh dengan metode simulasi MD, dapat menggunakan beberapa cara, antara lain: 1) Teknik kurva perubahan fasa (*Phase change curve method*), 2) Teknik koeksistensi dua fasa (*Two phases coexistence method*), dan 3) Teknik Z (*Z-method*) (Arkundato dkk., 2022).

Baja paduan (*alloys*) merupakan material terbuat dari campuran beberapa unsur logam yang termasuk jenis bahan yang pada umumnya memiliki sifat keras dan kuat dibandingkan dengan jenis bahan yang lain. Bahan baja merupakan salah satu bahan yang paling sering digunakan dalam kehidupan sehari-hari. Penelitian menggunakan simulasi dinamika molekul banyak dilakukan bertujuan untuk mengetahui dan memperkirakan sifat bahan logam. Pada penelitian (Maulana dkk., 2020), karakteristik sifat mekanik besi (Fe), nikel (Ni) dan paduan FeNi dapat dipengaruhi oleh perlakuan variasi suhu, dimana semakin tinggi suhu yang diberikan, maka semakin rendah modulus elastisitas, serta sifat kekuatan dan kekakuan bahan semakin menurun. Pada penelitian tersebut menggunakan *software* LAMMPS dengan metode dinamika molekul.

Pada penelitian tugas akhir ini akan dilakukan penentuan titik leleh pada bahan baja paduan FeNi atau *ferronickel* menggunakan simulasi dinamika molekul dengan metode koeksistensi dua fasa (*Two-phases coexistence method*). Baja paduan FeNi merupakan logam baja dengan jenis yang sering dijumpai dan dimanfaatkan dalam kehidupan sehari-hari. Jenis logam ini sering dimanfaatkan untuk membuat perkakas dan peralatan rumah tangga karena sifatnya yang tahan terhadap korosi. Selain itu, baja paduan FeNi merupakan paduan yang sangat

menarik dan umumnya digunakan dalam rekayasa komunikasi yang disyaratkan memiliki kondisi permeabilitas tinggi (Smallman dan Bishop, 1999). Perhitungan titik leleh dilakukan dengan simulasi dinamika molekul dengan metode koeksistensi dua fasa dilakukan karena metode ini adalah salah satu metode dengan tingkat keakuratan yang tinggi. Hasil dari penelitian simulasi ini adalah dapat menentukan titik leleh pada baja paduan FeNi atau *ferronickel* melalui perbedaan koeksistensi fasa antara *solid* dan *liquid*.

Metode simulasi dinamika molekul memerlukan input energi potensial material. Sehingga, pada bahan apa saja yang akan disimulasikan dan diselidiki, jenis energi potensial yang akan digunakan itu akan mempengaruhi dalam penentuan hasilnya. Pada penelitian (Maghfiroh dkk., 2020), melaporkan bahwa titik leleh sebuah logam dapat ditentukan dan diprediksi melalui parameter potensial dengan menggunakan energi potensial *Lennard-Jones*. Jenis potensial interaksi interatomik material yang luas dan paling sesuai adalah potensial *Lennard-Jones*. Peningkatan akurasi dalam perhitungan logam paduan, (Arkundato dkk., 2022) telah mengusulkan formula pencampuran baru untuk perhitungan MD (*Molecular Dynamics*) dengan memanfaatkan metode koeksistensi dua fasa.

Pada simulasi dinamika molekular diperlukan input berupa data energi potensial interaksi antar atom penyusun kristal logam. Penelitian dalam penentuan titik leleh yang memerlukan kesetimbangan atom yang dinamis, maka potensial *embedded-atom method* (EAM) lebih cocok untuk digunakan daripada potensial *Lennard-Jones* (Wu dkk., 2017). Pada penelitian ini digunakan program LAMMPS, OVITO dan ATOMSK yang dapat diunduh secara gratis melalui internet. Program LAMMPS dibutuhkan untuk integrasi persamaan gerak newton pada simulasi dinamika molekular. Penyusunan struktur kristal bahan logam menggunakan aplikasi ATOMSK. Hasil output dari program ATOMSK tersebut digunakan sebagai data *input* untuk mensimulasikan dengan atom menggunakan *Software* LAMMPS dalam penentuan titik leleh, yaitu pada simulasi ansambel NVT maupun ansambel NPT. Perubahan yang terjadi pada setiap perlakuan suhu

yang diperintahkan dapat dilihat dan dipantau dengan visualisasi yang ada pada aplikasi program OVITO.

1.2 Rumusan Masalah

Dalam mendukung keberhasilan penelitian, maka diperlukan formulasi permasalahan dalam simulasi dinamika molekul, yaitu berapa nilai titik leleh pada baja paduan FeNi yang didapat melalui hasil simulasi dinamika molekul dengan metode koeksistensi dua fasa?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian studi simulasi titik leleh FeNi menggunakan metode dinamika molekul adalah penelitian ini hanya membahas, antara lain:

1. Struktur kisi yang digunakan adalah FCC (*Face-Centered Cubic*) untuk bahan FeNi.
2. Struktur bahan dievaluasi dan dilakukan visualisasi menggunakan *software* OVITO.
3. Simulasi metode dinamika molekul menggunakan *software* LAMMPS dengan simulasi NPT dan NVT
4. Penyusunan struktur kristal pada bahan logam menggunakan *software* ATOMSK.
5. Struktur FeNi yang digunakan dalam simulasi diasumsikan merupakan struktur kristal murni dari Fe dan Ni sehingga ikatan antar atom lebih kuat.

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan utama dari studi simulasi menggunakan metode dinamika molekul adalah memperoleh nilai titik leleh pada baja paduan FeNi dengan simulasi dinamika molekul dengan metode koeksistensi dua fasa.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang dari kegiatan ini secara umum adalah memprogramkan metode simulasi dinamika molekul untuk berbagai macam permasalahan fisika. Salah satu pemanfaatan dari dinamika molekul yaitu untuk memprediksi nilai titik

leleh suatu bahan melalui model potensial dan model struktur untuk bahan tersebut. Titik leleh yang dapat diprediksi melalui metode tersebut, akan dapat dilakukan sebagai acuan dalam perolehan data eksperimental dan bermanfaat pada penelitian yang lebih lanjut.



BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Baja

Baja dapat diartikan sebagai suatu bahan campuran dari besi dan unsur bahan yang lainnya, dimana pada umumnya baja mengandung unsur karbon (C) menjadi bahan dasar dalam penyusunannya. Selain karbon (C), dalam penyusunan baja juga dapat dimasukkan unsur lain seperti sulfur (S), fosfor (P), silikon (Si), dan mangan (Mn). Pada sebuah baja, kandungan karbon penyusunnya sekitar 0,1 – 1,7 %. Sedangkan unsur lainnya diberikan dosis persentase tertentu. Paduan yang dicampurkan tersebut akan membuat baja bereaksi terhadap panas yang diberikan dan menghasilkan sifat-sifat khusus yang lain (Amanto, 1999).

Logam baja dapat diklasifikasikan menjadi berbagai macam, salah satu faktor yang menjadi klasifikasi pada logam baja yaitu berdasarkan komposisi kimia, seperti kadar karbon dan paduan yang digunakan. Komposisi kimia tersebut diklasifikasikan lebih detail berdasarkan komposisi kimia yang terdapat pada bahan penyusunnya. Adapun klasifikasi baja berdasarkan komposisi kimianya adalah sebagai berikut:

2.1.1 Baja Karbon

Baja karbon adalah paduan antara besi dan karbon dengan tambahan (*doping*) berupa Si, Mn, P, S, dan Cu. Sifat baja karbon sangat tergantung pada kadar karbon, bila kadar karbon naik, maka bahan memiliki tingkat kekuatan dan kekerasan yang akan semakin tinggi. Sehingga, baja karbon dapat dikelompokkan berdasarkan kadar karbon di dalamnya. Baja karbon rendah adalah baja dengan kadar karbon kurang dari 0,30%, baja karbon sedang mengandung 0,30% sampai 0,45% karbon, dan baja karbon tinggi yaitu baja karbon yang memiliki kandungan karbon antara 0,45 hingga 1,70% (Harsono dan Toshie, 2000).

2.1.2 Baja Paduan

Baja paduan merupakan suatu baja yang dicampur dengan lebih dari satu unsur campuran seperti nikel, mangan, molibdenum, kromium, vanadium dan wolfram. Unsur campuran tersebut berguna untuk memperoleh sifat-sifat baja

yang diharapkan, seperti kekuatan, kekerasan dan keuletan pada bahan. Paduan yang diberikan oleh unsur yang berbeda akan memberikan sifat khas dari baja. Misalnya baja yang dipadu dengan Ni dan Cr akan menghasilkan baja yang memiliki sifat keras dan ulet (Amanto, 1999).

2.1.3 Besi (Fe)

Besi merupakan logam yang berasal dari bijih besi (tambang) yang paling beragam penggunaannya. Hal itu disebabkan oleh beberapa hal seperti kelimpahan besi di kulit bumi yang cukup besar, pengolahannya relatif lebih mudah dan murah, serta memiliki sifat-sifat yang menguntungkan dan mudah dimodifikasi. Besi memiliki nilai ekonomis yang tinggi terutama dalam bidang industri. Besi memiliki simbol Fe dengan nomor atom 26. Besi memiliki massa jenis sebesar 7,9 gr/cm³. Besi murni memiliki struktur BCC (*Body-Centered Cubic*) pada suhu dibawah 910°C dan di atas 1400°C, namun pada suhu menengah terdapat pula yang berstruktur FCC (*Face-Centered Cubic*) (Talbot, 1998).

Besi adalah salah satu material logam yang memiliki beberapa sifat seperti dapat berubah menjadi magnet, dapat menghantarkan listrik, dapat dengan cepat mengalami korosi dan beberapa sifat lainnya. Besi murni bersifat agak lunak dan kenyal. Oleh karena itu, dalam industri besi selalu dipadukan menjadi baja. Baja adalah berbagai macam paduan logam yang dibuat dari besi tuang yang ke dalamnya ditambahkan unsur-unsur lain tergantung keperluannya. Besi terlebih dahulu ditempa kemudian dilelehkan pada suhu yang relatif tinggi yaitu sekitar suhu 1535°C, kemudian besi dapat dicampurkan dengan berbagai logam lain seperti nikel, kromium, mangan atau titanium. Percampuran ini dapat menjadikan baja bersifat lebih kuat, tidak mudah korosi dan dapat menghantarkan listrik. Selain dapat diaplikasikan dalam pembuatan baja, besi juga dapat dibentuk menjadi benda-benda yang dapat digunakan dalam kehidupan sehari-hari (Australian Geological Survey Organization, 1999).

2.1.4 Nikel (Ni)

Nikel merupakan salah satu jenis unsur kimia metalik yang tahan karat. Nikel mempunyai simbol Ni pada tabel periodik unsur dan mempunyai nomor atom 28. Struktur kubik dari logam Nikel adalah FCC, Nikel mempunyai massa jenis 8.9 g/cm^3 dan memiliki titik leleh sebesar $1455 \text{ }^\circ\text{C}$. Nikel pertama kali ditemukan oleh Axel Cronstedt pada tahun 1751, merupakan logam berwarna putih keperak-perakan (*silvery white*), mengkilap (*lustrous*), keras dan melur, juga tergolong ke dalam logam peralihan. Nikel mempunyai karakteristik yang tidak berubah jika terkena udara, tahan terhadap oksidasi dan memiliki kemampuan mempertahankan karakteristik aslinya dibawah temperatur ekstrim (Cotton et al., 1989). Nikel mempunyai karakteristik lembek dalam keadaan murni, tetapi jika dipadukan dengan unsur-unsur lain seperti besi, krom, dan logam lainnya dapat membentuk baja tahan karat yang keras. Perpaduan nikel, krom, dan besi menghasilkan baja tahan karat (*stainless steel*) yang banyak diaplikasikan pada peralatan dapur (sendok dan peralatan memasak), komponen industri, dan lain-lain (Carnes dkk., 2009).

2.1.5 Baja Paduan FeNi

Nikel merupakan unsur yang memiliki sifat fisis dan mekanik yang baik seperti ketahanan terhadap oksidasi, membentuk larutan padat yang ulet dan kuat, serta memiliki ketahanan yang tinggi terhadap korosi pada temperatur tinggi. Penambahan nikel pada baja mampu meningkatkan ketahanan temperatur dengan menurunkan temperatur transformasi yang menghasilkan struktur austenit (Indiyanto, 2008). Kemampuan nikel beroperasi pada temperatur tinggi menjadikan nikel menjadi salah satu komponen penting pembuatan perangkat nuklir seperti sistem pendingin nuklir (Lister dkk., 2014)

Nikel sebagai salah satu unsur paduan baja mampu menghambat korosi dengan konsentrasi nikel rendah untuk baja tahan karat ferritic dan penambahan nikel di atas 20% untuk baja super austenit (Wessman, 2013). Nikel mampu menghambat korosi dengan mempertahankan Fasa austenit pada baja serta membentuk lapisan pelindung pasif pada baja (Marimuthu, 2016). Menurut

(Zhang, 2009) menjelaskan bahwa baja yang mengandung nikel dan mangan mampu menghambat korosi ketika diletakkan dalam logam cair bismut karena memiliki kelarutan yang cukup tinggi. Penambahan nikel dalam paduan baja pernah diteliti secara simulasi sebelumnya oleh (Maulana dkk., 2008) yang menunjukkan bahwa penambahan nikel dengan konsentrasi atomik 10% mampu menghambat kedalaman penetrasi logam cair PbBi ke dalam baja sedalam $1,66\text{\AA}$.

2.2 Metode Koeksistensi Dua Fasa (*Solid-Liquid*)

Simulasi dinamika molekul dengan metode koeksistensi dua Fasa menggunakan perubahan pada Fasa padat-cair (*solid-liquid*) untuk menganalisis titik kritis yang diwujudkan dalam bentuk titik leleh. Dalam metode koeksistensi dua Fasa yaitu terdapat fasa padatan (*solid*) dan fasa cair (*liquid*) yang akan disimulasikan dalam kotak area yang sama, biasanya dipisahkan oleh sebuah antarmuka. Metode koeksistensi dua fasa merupakan metode lanjutan dari perhitungan titik leleh pada simulasi dinamika molekular dengan mengamati perubahan fasa pada suatu bahan. Ide utama dari metode ini adalah melakukan simulasi secara langsung pada koeksistensi dua fasa, yakni padatan dan cair dalam suhu dan tekanan tertentu (ansambel NPT) (Arkundato dkk., 2022).

Keuntungan dari metode dinamika molekular adalah mudah diimplementasikan bahkan untuk molekul kompleks. Namun, penentuan sifat fasa padat dan cair dapat menjadi tantangan dalam penerapan metode koeksistensi dua fasa, karena komplikasi yang disebabkan oleh adanya antarmuka dan kesulitan dalam menentukan ke fasa mana molekul-molekul tersebut berada. Teknik telah diusulkan untuk mengidentifikasi kepadatan fasa yang disimulasikan secara berdampingan dalam kotak simulasi yang sama (Holcomb dkk., 1992). Metode ini sedikit didesain dengan kotak simulasi dibagi menjadi dua bagian sel, satu diisi dengan atom yang disusun dalam struktur padat dan yang lainnya dengan atom dari simulasi cair dari sistem yang sama, tetapi keduanya harus memiliki kerapatan yang sama (Arkundato dkk., 2022).

2.2.1 Perubahan Fasa

Titik leleh pada suatu zat atau bahan adalah suhu yang terjadi pada saat fasa padatan dan cair dapat berproses atau terbentuk secara berdampingan dalam suatu kesetimbangan. Pada suhu titik leleh tersebut, materi atau bahan padatan akan berubah dari bentuk padat menjadi cair. Titik leleh pada bahan tergantung pada tekanan yang diberikan. Ketika panas diberikan ke dalam zat padat, maka suhunya dapat meningkat sampai titik leleh pada bahan itu tercapai. Sehingga, mayoritas panas yang diberikan membentuk titik leleh untuk diterapkan dalam mengubah padatan menjadi Fasa cair. Selanjutnya, ketika bahan padatan yang telah meleleh sepenuhnya akan mengalami panas tambahan. Panas tambahan yang terjadi kemudian akan menaikkan suhu cairan, sehingga titik leleh tersebut dapat digunakan untuk mengkarakterisasi zat (Britannica, 2022).

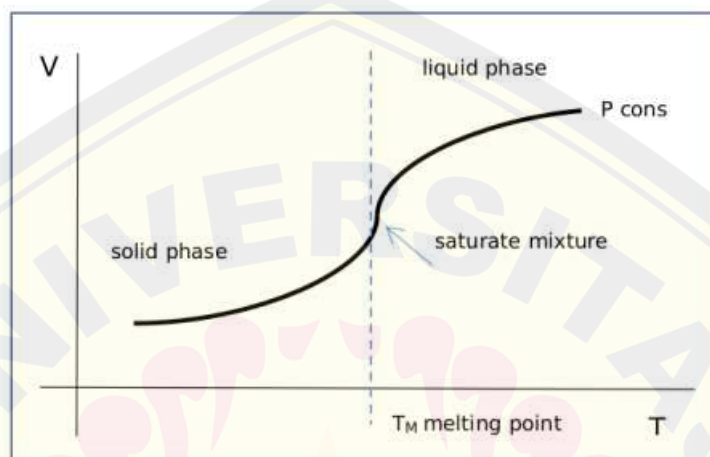


Gambar 2.1 Tiga bentuk fasa zat (Arkundato dkk., 2022)

Secara umum kita mengenal 3 jenis Fasa zat seperti Gambar 2.1 Zat padat diketahui memiliki ikatan molekul paling kuat, sedangkan gas memiliki ikatan molekul paling lemah antar molekul penyusun zat. Fasa padat juga memiliki persiapan molekul yang sangat berbeda dimana molekul-molekulnya tertahan di tempatnya dan tidak bergerak. Namun, mereka akan bergetar di tempat sebagai osilator, dan ketika suhu padatan meningkat, getaran setiap molekul juga akan meningkat hingga terjadi perubahan fasa, dan padatan meleleh menjadi cairan. Secara umum, potensial *embedded-atom method* (EAM) lebih cocok digunakan sebagai potensial interatomik pada logam, termasuk baja paduan (Wu dkk., 2017).

Pada penelitian (Arkundato dkk., 2022) bahwa saat kondisi suhu dalam waktu yang sama dapat digunakan secara bersama-sama oleh lebih dari satu Fasa. Kondisi kemungkinan tersebut dinamakan campuran jenuh (*saturated mixture*). Ketika suatu zat menjadi campuran jenuh, itu berarti zat tersebut telah mencapai tahap perubahan fasa, cair atau mengembun. Jika perubahan Fasa ini terjadi,

campuran jenuh suatu zat akan tetap pada suhu yang sama sampai perubahan Fasa telah selesai. Selama proses perubahan fasa, kalor tetap keluar atau masuk ke dalam zat sebagai energi (*latent heat*). Zat tertentu membutuhkan lebih banyak *latent heat* untuk masuk atau keluar agar perubahan Fasa selesai. Langkah-langkah perubahan fasa dapat kita gambarkan seperti Gambar 2.2



Gambar 2.2 Diagram (kurva) perubahan fasa suatu zat (Arkundato dkk., 2022)

2.3 Simulasi Dinamika Molekular

Dinamika molekul (*Molecular Dynamic/MD*) merupakan metode simulasi komputer yang sangat powerful untuk melakukan prediksi dan perhitungan besaran kimia-fisika. Metode dinamika molekul pertama kali dikenal sebagai salah satu metode simulasi dari aplikasi dinamika zat cair oleh Adler dkk pada akhir tahun 1950 dan oleh A. Rahman pada awal tahun 1960. Perkembangan revolusioner teknologi komputer dan metode algoritma pemrograman menyebabkan metode MD lahir menjadi salah satu alat komputasi yang dapat diterapkan dalam area luas penelitian fisika, kimia, biologi, dan terapannya (Arkundato dkk., 2016).

Menurut Aral (2003), simulasi dinamika molekul merupakan simulasi atomistik karena simulasi ini dapat menggambarkan struktur dalam skala atom dan mampu menganalisa sifat mekanik. Simulasi dinamika molekul merupakan salah satu metode yang handal untuk mengeksplorasi interaksi atomik bahan uji. Simulasi atomistik terdiri dari beberapa prosedur yaitu mempersiapkan model struktur, deformasi model, analisis sifat dan perubahan molekul akibat proses

deformasi, dan membandingkan hasil simulasi dengan beberapa konsep mengenai mekanisme deformasi.

Metode dinamika molekul memiliki beberapa hal penting dalam proses pelaksanaannya antara lain menetapkan dan mendefinisikan potensial interaksi antar atom yang sesuai untuk objek (sistem material) yang diteliti. Interaksi akan terjadi antar atom atau molekul dalam periode waktu yang telah ditentukan untuk memberikan gambaran evolusi dinamik dari sistem. Lintasan atom dan molekul yang sering disebut sebagai *trayektori* dihitung dengan menggunakan konsep-konsep mekanika statistik dari interaksi partikel. Dalam metode dinamika molekul *trayektori* biasanya diperoleh dari solusi persamaan gerak klasik partikel seperti hukum gerak Newton. Secara matematis persamaan gerak Newton dapat dituliskan sebagai berikut:

$$F_i = -\nabla_{r_i} U \quad (2.1)$$

Metode dinamika molekul menggunakan persamaan gerak Newton hukum kedua yaitu gaya merupakan minus gradien potensial untuk sistem konservatif. Dalam simulasi dinamika molekul, persamaan Newton digunakan untuk menemukan pergerakan atom. Persamaan gerak Newton diterapkan dengan asumsi, semua atom atau molekul didalam sistem dan lokasi serta kecepatan yang akan dihitung secara numerik mengintegrasikan persamaan Newton. Hal ini merupakan cara yang efektif untuk menganalisis berbagai sifat sistem pada tingkat makroskopik (Widiasih dkk., 2013). Asumsi mikroskopis terdiri dari pemahaman, penjelasan hasil eksperimen, perkiraan semikuantitatif hasil eksperimen, dan kemampuan untuk mengeksplorasi data eksperimental. Tujuan utama simulasi dinamika molekul adalah menghitung perilaku makroskopik dari interaksi mikroskopik. Menurut Kumar (2014) pada simulasi dan pemodelan dinamika molekular juga memiliki beberapa keterbatasan yaitu cara mengkonfigurasi ruang yang cukup untuk membentuk molekul pada wilayah energi rendah yang akan digunakan oleh sistem molekular dalam kesetimbangan termal. Keterbatasan lainnya adalah perhitungan fungsi energi interaksi yang kurang akurat akibat asumsi yang diberikan.

Pada simulasi dinamika molekul beberapa parameter termodinamika sistem (temperatur, tekanan, volume, dan energi total) dapat dikontrol sesuai kebutuhan simulasi. Parameter termodinamika yang dapat digunakan pada simulasi dinamika molekul adalah rangkaian NVT dan rangkaian NPT. Rangkaian NVT merupakan proses adiabatik sehingga tidak ada perpindahan panas. Dalam rangkaian ini jumlah atom (N), volume sistem (W) dan energi pada sistem (E) tetap konstan selama proses simulasi. Sedangkan rangkaian NPT merupakan proses isothermal-isobarik. Dalam rangkaian ini jumlah atom (N), tekanan pada sistem (P), dan temperatur dalam sistem (T) tetap konstan selama proses simulasi (Kumar, 2014). Volume dan tekanan merupakan aspek saling berhubungan. Perubahan volume akan merubah tekanan seketika sehingga menyebabkan rata-rata tekanan akan berada pada sekitaran nilai yang diinginkan (Midori dkk., 2020)

Menurut (Arkundato dkk., 2016) Simulasi dinamika molekul berfokus untuk mencari metode solusi persamaan gerak Newton untuk gaya yang bersesuaian. Metode numerik digunakan pada simulasi dinamika molekul untuk menyelesaikan solusi persamaan diferensial. Solusi numerik dapat diperoleh dari berbagai pilihan algoritma integrasi. Proses running data simulasi dinamika molekul hampir 90% waktu komputasi CPU dihabiskan untuk menghitung gaya-gaya yang bekerja pada setiap atom. Pemilihan algoritma integrasi yang tepat dapat memangkas waktu running data. Penelitian ini menggunakan aplikasi LAMMPS dalam pengolahan data. Algoritma integrasi *Verlet* merupakan integrasi numerik yang digunakan oleh aplikasi LAMMPS dalam proses pengolahan data simulasi. Algoritma ini dikembangkan dengan menuliskan dua buah fungsi posisi $r(t)$ diekspansi ke dalam deret Taylor satu untuk waktu mundur dan satu untuk waktu maju. Jika v adalah kecepatan, a adalah percepatan, b adalah turunan ketiga dari r terhadap waktu, maka didapatkan persamaan sebagai berikut:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + 0\Delta t^4 \quad (2.2)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}b(t)\Delta t^3 + 0\Delta t^4 \quad (2.3)$$

Jika kedua persamaan tersebut dijumlahkan, maka akan diperoleh persamaan:

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 + 0\Delta t^4 \quad (2.4)$$

Persamaan 2.4 merupakan bentuk dasar algoritma Verlet. Jika ingin mengintegrasikan persamaan Newton, maka percepatan sesaat $a(t)$ adalah g dibagi massa partikel, dan gaya itu sendiri adalah fungsi posisi, khususnya sistem konservatif (Arkundato dkk., 2016).

Material yang disimulasikan dapat mengandung 10^3 sampai 10^6 bush atom. Banyaknya atom dalam simulasi untuk menggambarkan material bergantung pada kompleksitas masalah dan kemampuan penyimpanan serta kecepatan proses dari komputer yang digunakan untuk menjalankan simulasi (Arkundato dkk., 2016). Beberapa hal yang sangat penting untuk melakukan riset menggunakan metode dinamika molekul adalah sebagai berikut (Arkundato dkk., 2016):

- a Menentukan fungsi potensial interaksi yang tepat,
- b Menentukan algoritma integrasi numerik persamaan gerak,
- c Menentukan rumus perhitungan fisis dari informasi *trayektori*,
- d Menyiapkan sumber daya komputasi yang cukup.

Simulasi dinamika molekul memerlukan informasi fungsi potensial untuk menggambarkan interaksi atom-atom yang menyusun material. Fungsi potensial pada dinamika molekul terdapat berbagai macam jenis, tergantung pada model interaksinya. Informasi fungsi potensial diperlukan untuk menggambarkan interaksi antar atom yang menyusun material. Salah satu fungsi potensial yang sering digunakan pada simulasi MD adalah parameter potensial *embedded-atom method* (EAM) (Arkundato dkk., 2016).

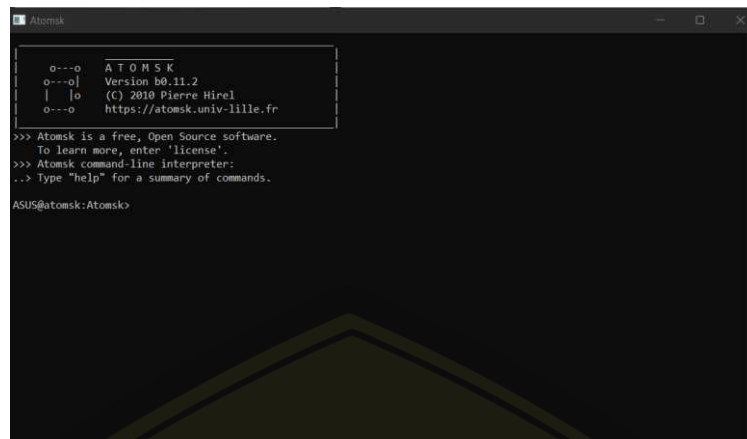
2.3.1 Simulasi pada Metode Koeksistensi dua fasa

Penentuan titik leleh suatu zat dapat digunakan salah satu metode dengan pendekatan umum dan sederhana yang disebut teknik atau metode koeksistensi dua fasa. Ide utama dalam metode atau teknik koeksistensi dua fasa adalah simulasi langsung antara fasa padat dan cair (*solid-liquid*), pada suhu dan tekanan tertentu (ansambel NPT). Proses simulasi didesain dengan menjadikan dua bagian sel, dimana satu sel diisi oleh atom yang disusun dalam struktur padat dan satu atom lain yang disusun dalam struktur cair pada sistem yang sama, tetapi keduanya harus memiliki kerapatan yang sama. Pada simulasi dengan

memanfaatkan ansambel NVT, dilakukan untuk melakukan simulasi dinamika molekul NPT pada sistem *solid-liquid* dalam waktu yang cukup lama, langkah ini umumnya dilakukan titik leleh pada suatu tekanan tertentu. Jika suhu yang diterapkan pada simulasi NPT lebih rendah dari T_M (titik leleh), maka Fasa padatan akan mulai tumbuh, sehingga akan melakukan pengisian terhadap Fasa cair (setengah padatan akan meleleh). Pada teknik atau metode ini diperlukan banyak simulasi NPT dengan suhu yang berbeda sampai kita menemukan titik leleh T_M dari suatu bahan tersebut (Arkundato dkk., 2022).

2.4 Program ATOMSK

ATOMSK adalah singkatan dari *Atom, Molecule, Material Software Kit*. Program ini merupakan salah satu *software* dengan kode yang ditulis dalam Fortran 90, dan dikembangkan melalui operasi GNU. *Software* ini digunakan sebagai pembuatan file data atom yang akan dilakukan simulasi atau visualisasi dalam bentuk apapun. ATOMSK dapat menyediakan alat baris perintah dan data *Open Source* untuk memanipulasi sistem atom, dan menghasilkan file data atom untuk simulasi atomistic kalsik, dan visualisasi yang dibantu pada *software* lain. ATOMSK dapat bekerja tanpa hambatan dengan sistem logam, kovalen, atau ionik. Meskipun program ini mungkin tidak menghilangkan semua kebutuhan untuk mengembangkan skrip untuk aplikasi tertentu, ATOMSK dapat berguna untuk melakukan tugas yang paling sederhana dan rutin, serta membangun struktur kompleks seperti dislokasi dalam media isotropik atau anisotropik, desain polikristal, atau mempelajari bahan ferroelektrik (Hirel, 2015).



```
ATOMSK
Version b0.11.2
(C) 2010 Pierre Hirel
https://atomsk.univ-lille.fr

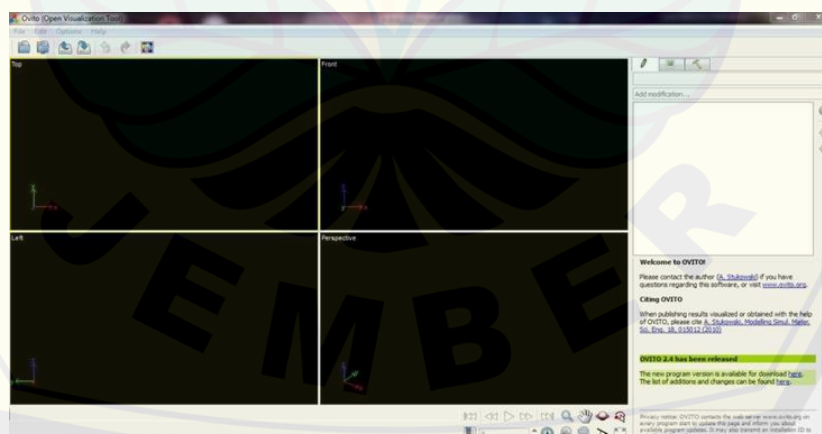
>>> Atomsk is a free, Open Source software.
    To learn more, enter 'license'.
>>> Atomsk command-line interpreter:
    ..> Type "help" for a summary of commands.

ASUS@atomsk:Atomsk>
```

Gambar 2.3 Layar monitor program ATOMSK (Hirel, 2015)

2.5 Program OVITO

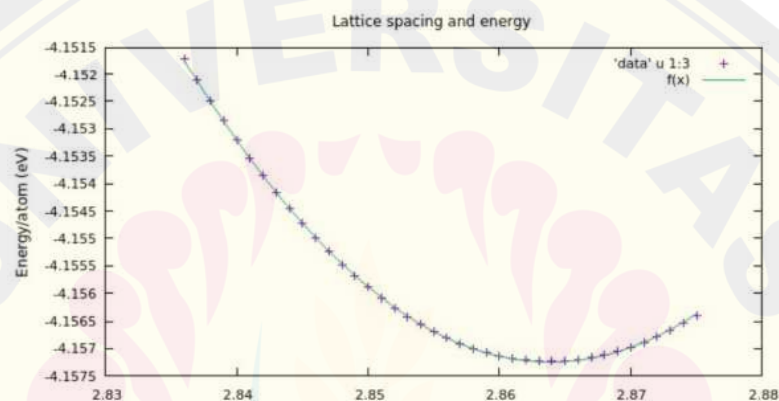
OVITO merupakan salah satu program pendukung tambahan yang dapat digunakan dalam analisis data dinamika molekul. OVITO misalnya dapat memfasilitasi visualisasi dan perhitungan suatu struktur kristal. OVITO tersedia secara gratis dalam bentuk perangkat lunak. OVITO menerjemahkan koordinat atom kemudian mempresentasikan dalam bentuk grafis atomik sebagai outputnya (Stukowski, 2010). Dalam tugas akhir ini OVITO digunakan untuk analisis struktur bahan hasil data simulasi LAMMPS untuk mengetahui apakah bahan benar benar sudah meleleh atau belum berdasarkan data nilai CNA yang akan dibahas pada bab pembahasan.



Gambar 2.4 Layar monitor program OVITO (Stukowski, 2010)

2.6 Program LAMMPS

Pada penelitian ini akan digunakan kode komputer LAMMPS untuk menjalankan simulasi dinamika molekul. Besaran-besaran fisis yang akan dihitung banyak yang fasilitasnya sudah disediakan oleh LAMMPS, termasuk perhitungan titik leleh meskipun tidak secara langsung. Untuk dapat menentukan titik leleh dengan metode koeksistensi dua fasa harus mengetahui perubahan struktur atom pada kondisi padatan (*solid*) dan cairan (*liquid*). Perubahan struktur atom dapat dipantau dengan melihat nilai pada CNA dan RDF yang dapat diketahui menggunakan aplikasi OVITO.



Gambar 2.5 Kurva energi konstanta kisi (Arkundato dkk., 2022)

Program LAMMPS dapat diunduh di alamat <http://lammps.sandia.gov/>. diunduh secara gratis.

LAMMPS is a classical molecular dynamics code with a focus on materials modeling. It's an acronym for Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator.

LAMMPS has potentials for solid-state materials (metals, semiconductors) and soft matter (biomolecules, polymers) and coarse-grained or mesoscopic systems. It can be used to model atoms or, more generically, as a parallel particle simulator at the atomic, meso, or continuum scale.

LAMMPS runs on single processors or in parallel using message-passing techniques and a spatial-decomposition of the simulation domain. Many of its models have versions that provide accelerated performance on CPUs, GPUs, and Intel Xeon Phi. The code is designed to be easy to modify or extend with new functionality.

LAMMPS is distributed as an [open source code](#) under the terms of the [GPLv2](#). The current version can be downloaded [here](#). Links are also included to older versions. All LAMMPS development is done via [GitHub](#), so all versions can also be accessed there.

The main authors of LAMMPS are listed on [this page](#) along with contact info and other contributors. Funding for LAMMPS development has come primarily from the US Department of Energy (OASCR, OBER, ASCI, LDRD, Genomes-to-Life) and is [acknowledged here](#).

Gambar 2.6 Situs web LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>)

2.6.1 Simulasi Koeksistensi Dua Fasa *Solid-liquid*

Simulasi dinamika molekul pada metode koeksistensi dua fasa *solid-liquid* menggunakan potensial *embedded-atom method* (EAM). Perhitungan dinamika molekular untuk analisis titik leleh dengan metode koeksistensi Dua Fasa *Solid-liquid* akan digunakan *embedded-atom method* (EAM). EAM potensial adalah metode perhitungan potensial antar atom (*interatomic*) yang paling sering digunakan untuk logam dan paduannya. Secara konsep umum, distribusi elektron dari setiap atom yang digunakan tidak merespon lingkungan pada atom di dalam EAM. Pada kenyataannya, distribusi atom bergantung pada kondisi lingkungan atom. Potensial antar-atom adalah pondasi dari simulasi mekanika molekular klasik (termasuk simulasi statis dan dinamis), termasuk dalam penentuan titik leleh atau *melting point* (Alavi dan Thompson, 2006).

Kontribusi *embedded-atom* adalah jumlah dari pasangan potensial (ϕ_{ij}) dan sebuah tarikan *embedding energi* (F_i). Bentuk persamaan atau formulasi *embedded-atom method* (EAM) dalam (Alavi dan Thompson, 2006) adalah:

$$U_{\text{eam}}(\{r\}) = \sum_{i < j} \phi_{ij}(R_{ij}) - \sum^N F_i[P_i] \quad (2.5)$$

Dimana ϕ_{ij} adalah potensial interatomik berpasangan yang meliputi interaksi elektrostatis dan tumpang tindih atom yang akan menghasilkan ikatan kovalen. Sedangkan $F_i[P_i]$ adalah penyisipan total beda potensial pada atom yang digunakan (energi penyisipan atom di lokasi i dalam densitas muatan elektron lokal P_i). R_{ij} adalah pemisahan interatomik antara atom i dan j (Belonoshko dan Ahuja, 1997).

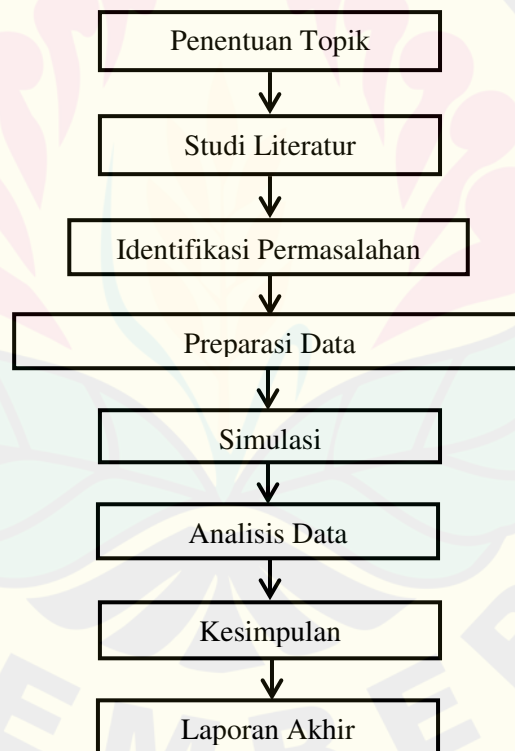
Simulasi dinamika molekul yang klasik dalam menyelesaikan persamaan gerak kedua newton $F=ma$, menggunakan fungsi energi potensial. Dalam hal ini kita menggunakan potensial *embedded-atom model* (EAM) untuk mendukung interaksi atom pada logam dan paduan, khususnya paduan FeNi. Selama simulasi pada T (suhu), P (tekanan) dan V (volume) tertentu, semua atom akan dikondisikan untuk bergerak mengikuti persamaan Newton. Solusi dari persamaan tersebut adalah lintasan semua atom yang dari sini kita dapat menghitung semua variabel fisik yang dibutuhkan sebagai titik leleh T_M . Semua kebutuhan tersebut difasilitasi oleh fitur-fitur pada *software* LAMMPS (Thompson dkk., 2022).

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Rancangan Penelitian

Penelitian dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi, Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember. Kegiatan penelitian dilakukan mulai bulan November 2022 sampai dengan selesai. Adapun alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah sebuah Laptop dengan spesifikasi *Core™ i5 @2,4 GHz*, RAM 8GB, *system type 64-bit Operating System*, dengan sistem operasi menggunakan Windows 11. Laptop yang digunakan juga dilengkapi dengan GPU Card NVIDIA GEFORCE.

Berikut adalah rancangan penelitian yang ditampilkan pada Gambar 3.1 berikut:



Gambar 3.1 Rancangan Penelitian

Penelitian ini dilakukan dengan melalui beberapa tahapan. Penelitian ini dimulai penentuan topik, studi literatur, identifikasi permasalahan, preparasi, simulasi, analisis data untuk mendapat kesimpulan, serta hasil dari kesimpulan akan dilanjutkan dengan penyusunan hasil dari penelitian.

Langkah awal dalam penelitian ini adalah penentuan topik. Selanjutnya, dilaksanakan studi literatur dari penelitian sebelumnya yang didapatkan dari berbagai sumber seperti jurnal, buku, skripsi, dokumentasi program dan internet. Permasalahan dapat diidentifikasi dari penelitian-penelitian yang sudah pernah dilakukan sebelumnya dan dilaksanakan pengembangan pada penelitian ini. Tahapan pengumpulan data yang dibutuhkan dari topik dengan mendapatkan nilai yang digunakan sebagai nilai input pada baja paduan FeNi. Data-data yang digunakan merupakan file-file koordinat dari besaran fisis yang akan digunakan sebagai file input pada simulasi. File input berupa structural Kristal (Posisi) dan konstanta kisi, massa atom, suhu simulasi dan energi potensial.

Preparasi dilakukan dengan aplikasi ATOMSK dan OVITO. ATOMSK digunakan untuk membuat supercell kristal FCC (*Face-Centered Cubic*) pada baja paduan FeNi. OVITO digunakan untuk memastikan material yang akan disimulasikan dengan nilai yang terdapat pada geometri sistem, yaitu nilai *Radial Distribution Function* (RDF) dan *Common Neighbor Analysis* (CNA). Hasil preparasi yang dilakukan selanjutnya digunakan sebagai inputan untuk simulasi. Simulasi dilakukan menggunakan aplikasi LAMMPS. Data hasil simulasi merupakan file lintasan yang akan dianalisis. Tahapan analisis dengan percobaan simulasi yang dilakukan beberapa kali untuk mendapatkan suatu kesimpulan yang menjawab permasalahan dari penelitian ini. Sekian banyak tahapan yang sudah dilaksanakan dengan menghasilkan kesimpulan dilakukan proses penyusunan laporan akhir untuk menyempurnakan penelitian ini.

3.2 Jenis dan Sumber Data

Data yang digunakan dalam penelitian ini adalah data sekunder berupa data inputan pada material FeNi yang akan digunakan. Data dilakukan dengan pembuatan supercell kristal FCC FeNi menggunakan kode ATOMSK (Hirel, 2015). Material tersebut dapat dipastikan dengan melakukan cek pada kode OVITO pada geometri sistem, yaitu nilai *Radial Distribution Function* (RDF) dan *Common Neighbor Analysis* (CNA).

3.3 Definisi Operasional Variabel

Variabel penelitian adalah sesuatu yang memiliki variasi nilai atau memiliki nilai yang berbeda dan dapat diukur. Deskripsi pada variabel tersebut bertujuan untuk menghindari terjadinya perbedaan persepsi atau timbulnya penafsiran ganda. Variabel yang diamati dalam penelitian ini antara lain adalah:

a. Variabel Bebas

Variabel bebas merupakan variabel yang dapat dilakukan variasi untuk mengetahui pengaruhnya terhadap hasil yang diteliti. Variabel bebas dalam penelitian ini adalah material baja paduan FeNi. Baja paduan FeNi digunakan sebagai bahan uji untuk melakukan analisis penentuan titik leleh.

b. Variabel Terikat

Variabel terikat adalah variabel yang dipengaruhi oleh variabel bebas yang akan diamati dalam penelitian. Variabel terikat pada penelitian ini adalah perubahan bentuk fasa yaitu *liquid* dan *solid*.

c. Variabel Kontrol

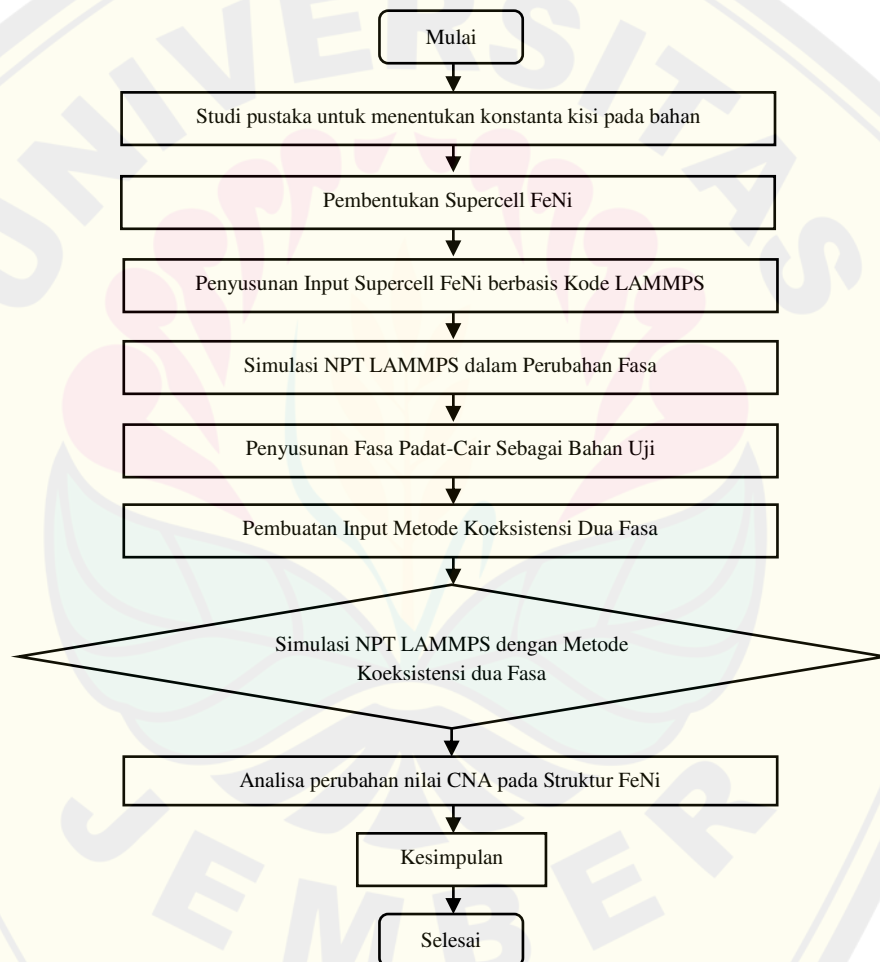
Variabel kontrol merupakan variabel yang sifatnya konstan. Variabel kontrol dalam penelitian ini meliputi massa, volume, tekanan, suhu, konstanta kisi atau *lattice*, potensial energi FeNi.

3.4 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian dalam penentuan titik leleh baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa padat-cair dilakukan dengan mengamati struktur penyusun dari baja paduan FeNi, yaitu atom Fe dan atom Ni pada sebelum dan sesudah simulasi pada temperatur tertentu. Simulasi dilakukan pada beberapa kondisi, yaitu menggunakan ansambel NPT dan ansambel NVT. Struktur baja paduan FeNi dapat diamati melalui nilai CNA dan RDF dengan kode OVITO. Pada prosedur penelitian ini, titik leleh dapat diketahui dengan beberapa aturan berikut, dengan T_M adalah titik leleh, sedangkan T_{SIM} adalah nilai suhu atau temperatur pada simulasi:

- a Jika $T_M > T_{SIM}$ setelah simulasi NPT, maka terdapat proses solidifikasi atau pembekuan dengan persentase kristal pada FeNi akan meningkat
- b Jika $T_M < T_{SIM}$ setelah simulasi NPT, maka terdapat proses pencairan dengan persentase kristal pada FeNi akan berkurang
- c Jika $T_M = T_{SIM}$ setelah simulasi NPT, maka persentase kristal pada FeNi relatif tidak berubah

Prosedur penelitian yang digunakan akan dijelaskan pada diagram alir yang memuat dari rincian mengenai tahapan dalam menjalankan penelitian untuk mendapatkan nilai besaran fisis titik leleh untuk baja paduan FeNi.



Gambar 3.2 Diagram Alir

Diagram alir pada Gambar 3.2 menjelaskan mengenai tahapan dan langkah yang akan dilakukan dalam mendapatkan nilai titik leleh pada logam baja paduan FeNi, adalah sebagai berikut:

3.4.1 Studi Pustaka untuk menentukan Konstanta Kisi pada Bahan

Tahap Studi pustaka dilakukan sebelum membentuk supercell pada FeNi untuk menentukan kecocokan konstanta kisi pada baja paduan tersebut. Dalam tahap ini, parameter potensial EAM disesuaikan dengan FeNi untuk mendapatkan konstanta kisi yang sesuai. Potensial EAM digunakan untuk memodelkan interaksi atom dalam logam dan paduan. Langkah-langkah meliputi pengumpulan data eksperimental atau teoritis tentang konstanta kisi FeNi, serta penggunaan teknik optimasi untuk menyesuaikan parameter potensial EAM. Setelah nilai konstanta kisi yang diperlukan ditemukan, supercell FeNi dibentuk menggunakan aplikasi ATOMSK, dengan memperhatikan ukuran yang memadai, kondisi batas periodik yang sesuai, dan aspek relevan lainnya. Studi pustaka ini memberikan dasar yang kuat untuk pembuatan struktur atom untuk dilakukan simulasi.

3.4.2 Pembentukan Supercell/ FeNi

Pembentukan Supercell Kristal FCC FeNi dilakukan dengan menggunakan *software* ATOMSK. ATOMSK adalah salah satu perangkat lunak yang digunakan dalam komputasi material untuk membuat dan menyusun material dengan jenis kisi yang telah ditentukan sebelumnya. Pada sub bab ini, akan dijelaskan tentang proses pembentukan supercell kristal FCC pada baja paduan FeNi.

Proses pembentukan supercell dilakukan dengan menggunakan kode pada *software* ATOMSK guna mendapatkan perhitungan yang lebih akurat. Metode dinamika molekul yang diterapkan dalam *software* ATOMSK membutuhkan banyak atom untuk memodelkan struktur kristal secara detail. Oleh karena itu, dengan memanfaatkan fitur pada aplikasi ATOMSK, komposisi atom penyusun dalam baja paduan FeNi dapat diatur sesuai kebutuhan.

Untuk melakukan pembentukan supercell baja paduan FeNi, perintah berikut dapat dimasukkan melalui terminal windows:

```
atomsk --create fcc 3.52 FeNi -duplicate 10 10 10 FeNi.xsf
```

Perintah tersebut akan menjalankan proses pembentukan supercell dengan struktur kristal FCC (*Face-Centered Cubic*) pada baja paduan FeNi dengan

ukuran sebesar 3.52 unit sel. Selain itu, perintah ``-duplicate 10 10 10`` digunakan untuk menduplikasi struktur kristal secara periodik sebanyak 10 kali dalam tiga arah sumbu x, y, dan z. Hasil dari proses ini akan disimpan dalam file dengan format .xsf dengan nama *FeNi.xsf*. Dengan menggunakan perintah tersebut, pembentukan supercell FeNi dapat dilakukan dengan presisi dan keakuratan yang lebih tinggi menggunakan *software* ATOMSK. Proses ini merupakan langkah awal dalam penelitian dan pemodelan material paduan FeNi untuk analisis dan aplikasi lebih lanjut.

3.4.3 Penyusunan Input supercell FeNi berbasis Kode LAMMPS

Setelah melakukan pembentukan supercell FeNi menggunakan *software* ATOMSK, langkah selanjutnya dalam metode dinamika molekul adalah menggunakan *software* LAMMPS. Dalam proses ini, diperlukan kode LAMMPS (Imp) untuk menjalankan simulasi dinamika molekul pada supercell FeNi. Untuk menggunakan kode Imp, perlu dilakukan konversi format hasil kode dari ATOMSK (xsf) ke dalam format yang dapat dibaca oleh LAMMPS (Imp).

Konversi ini dapat dilakukan menggunakan aplikasi OVITO. Dengan menggunakan OVITO, hasil konversi dari file xsf dapat dihasilkan dalam bentuk file *FeNi_supercell.lmp*. File *FeNi_supercell.lmp* yang dihasilkan merupakan input untuk perintah *read_data* pada LAMMPS. File ini berisi informasi tentang struktur kristal, tipe atom, dan parameter-parameter lain yang dibutuhkan dalam simulasi dinamika molekul. Selain itu, penggunaan *software* OVITO juga dapat digunakan untuk memantau data sebelum dilakukan konversi format. Dengan menggunakan OVITO, nilai RDF (*Radial Distribution Function*) dan CNA (*Common Neighbor Analysis*) dapat dipantau terlebih dahulu sebelum melakukan perubahan format file. Hal ini berguna untuk memastikan bahwa struktur supercell FeNi telah terbentuk dengan baik sebelum dimasukkan ke dalam simulasi LAMMPS.

3.4.4 Simulasi NPT dalam Metode Perubahan Fasa

Simulasi NPT (*constant Number of particles, constant Pressure, constant Temperature*) merupakan metode yang sering digunakan untuk mengetahui titik

leleh suatu material dengan memanfaatkan kurva perubahan fasa. Pada sub bab ini, akan dijelaskan mengenai simulasi NPT yang dilakukan untuk menentukan titik leleh material pada sistem FeNi. Simulasi NPT dilakukan pada suhu tertentu, dimulai dari $T=300$ K hingga 5000 K, menggunakan input file *FeNi_supercell.lmp* yang telah disusun sebelumnya. Proses ini bertujuan untuk memberikan tebakan awal dalam menentukan titik leleh material pada sistem FeNi. Dalam simulasi NPT, suhu dan tekanan dipertahankan konstan, sedangkan volume sistem dapat berubah sesuai dengan kondisi yang diberikan. Hasil dari simulasi NPT ini kemudian digunakan untuk memperkirakan titik leleh yang lebih akurat menggunakan metode koeksistensi dua fasa.

3.4.5 Penyusunan Fasa Padat-Cair sebagai Bahan Uji

Dalam penelitian ini, penyusunan fasa padat-cair dilakukan sebagai bahan uji dalam simulasi menggunakan kode LAMMPS. Terdapat dua keadaan yang diperhatikan, yaitu kode LAMMPS *liquid* dan kode LAMMPS *Solid-liquid*.

a) Kode LAMMPS *Liquid*

Pada metode koeksistensi dua fasa untuk perhitungan titik leleh, penting untuk menganalisis perubahan fasa dari padat ke cair. Dalam penyusunan kode LAMMPS *liquid*, dibuat file *FeNi_liquid.lmp*. Langkah ini melibatkan simulasi NVT pada suhu $T=4700$ K untuk menghasilkan fasa cair pada baja paduan FeNi. Dengan menggunakan simulasi NVT, densitas sistem FeNi dalam bentuk padat dan cair menjadi serupa atau homogen. Pada tahap ini, nilai CNA (*Common Neighbor Analysis*) dapat diketahui dengan bantuan *software* OVITO. Nilai CNA digunakan untuk memastikan bahwa semua bagian dalam FeNi berada dalam keadaan cair. Selain itu, visualisasi nilai RDF (*Radial Distribution Function*) juga digunakan untuk memastikan grafik yang ditampilkan sesuai dengan keadaan fasa cair.

b) Kode LAMMPS *Solid-liquid*

Penyusunan kode LAMMPS *Solid-liquid* merupakan tahap persiapan terakhir sebelum melakukan simulasi sistem dengan metode dinamika molekul

pada koeksistensi dua fasa. Dalam tahap ini, fasa padat dan fasa cair digabungkan secara manual menggunakan Excel. Untuk memvisualisasikan penggabungan fasa padat dan cair, dapat menggunakan fasilitas yang disediakan oleh *software* OVITO. Visualisasi ini akan menampilkan kondisi *liquid-solid-liquid*, yang memudahkan pemantauan perubahan hasil simulasi dinamika molekular menggunakan metode koeksistensi padat-cair.

Penyusunan fasa padat-cair sebagai bahan uji ini penting dalam memahami perubahan fasa pada material FeNi. Dengan melibatkan simulasi NVT dan penggabungan fasa padat dan cair, dapat memperoleh informasi yang berguna untuk analisis lebih lanjut terkait dengan perubahan struktur dan sifat material pada kondisi padat dan cair.-cair.

3.4.6 Pembuatan Input Metode Koeksistensi Dua Fasa berbasis Kode LAMMPS

Pembuatan input untuk metode koeksistensi dua fasa menggunakan kode LAMMPS melibatkan langkah-langkah seperti persiapan input, definisi fasa, dan pengaturan sistem. Dalam persiapan input, file *FeNi_liquid.lmp* (fasa cair) dan file *FeNi_supercell.lmp* (fasa padat) digabungkan untuk membentuk sistem yang terdiri dari kedua fasa. Setelah itu, tipe atom yang berbeda diberikan pada setiap fasa untuk membedakan partikel dalam simulasi. Pengaturan sistem melibatkan penyesuaian parameter dan kondisi awal yang sesuai dengan tujuan simulasi. Dengan melakukan langkah-langkah ini, input metode koeksistensi dua fasa dapat disiapkan untuk menjalankan simulasi LAMMPS yang mempelajari perubahan fasa antara fasa padat dan fasa cair pada material FeNi.

3.4.7 Simulasi NPT LAMMPS dengan Metode Koeksistensi Dua Fasa

Setelah dilakukan penggabungan data *solid-liquid*, simulasi NPT dapat dilakukan pada sistem dengan menerapkan metode koeksistensi dua fasa. Simulasi ini bertujuan untuk memperoleh hasil simulasi cuplikan pada berbagai suhu dan nilai CNA (*Common Neighbor Analysis*) masing-masing fasa padat dan fasa cair. Metode koeksistensi dua fasa dianggap lebih akurat dibandingkan metode perubahan fasa karena membutuhkan lebih banyak data atom dalam material. Pada simulasi ini, suhu yang akan digunakan telah diperkirakan berdasarkan hasil

simulasi NPT pada metode perubahan fasa sebelumnya. Dengan demikian, hasil simulasi ini dapat memberikan nilai keakuratan yang lebih mudah untuk dianalisis dan dipahami. Simulasi NPT LAMMPS dengan metode koeksistensi dua fasa merupakan tahap penting dalam mempelajari perubahan fasa pada material FeNi dan memberikan wawasan yang lebih mendalam mengenai sifat-sifat termal serta transisi fasa dalam material tersebut.

3.4.8 Analisa perubahan nilai CNA pada Struktur FeNi

Analisis dalam penelitian ini didasarkan pada perubahan nilai *Common Neighbor Analysis* (CNA) pada struktur FeNi. Pada setiap perlakuan pada berbagai suhu, dari proses pemadatan mulai dari keadaan cair, akan menghasilkan nilai CNA yang berbeda. Penentuan titik leleh dapat dilakukan melalui perubahan nilai CNA pada setiap input suhu yang diberikan. Analisis perubahan nilai CNA pada struktur FeNi merupakan salah satu pendekatan penting untuk memahami perubahan fasa dan sifat material dalam konteks koeksistensi dua fasa. Dengan menganalisis perubahan nilai CNA, dapat diperoleh wawasan yang lebih mendalam mengenai perubahan struktur atomik, transisi fasa, dan karakteristik material FeNi pada rentang suhu yang relevan.

3.4.9 Kesimpulan

Kesimpulan dalam penelitian ini merupakan hasil dari analisis yang telah dilakukan. Penelitian ini melibatkan penyusunan kesimpulan berdasarkan hasil praktikum dan analisis data yang dilakukan secara digital menggunakan simulasi komputer. Analisis data-data tersebut menjadi dasar dalam menyusun kesimpulan penelitian ini. Kesimpulan akhir ini mencerminkan hasil dan temuan yang diperoleh dari penelitian yang telah dilaksanakan. Dalam kesimpulan ini, disajikan rangkuman yang komprehensif mengenai temuan, implikasi, dan relevansi penelitian terhadap tujuan awal serta kontribusi penelitian ini terhadap pemahaman dan perkembangan bidang yang diteliti.

3.5 Metode Analisis Data

3.5.1 Visualisasi Bahan Uji

Metode analisis data yang dapat dilakukan adalah visualisasi struktur bahan uji setelah dilakukan simulasi pada suhu tertentu. Dalam metode koeksistensi dua fasa, struktur bahan sebelum dan setelah simulasi dapat dibandingkan untuk memahami perubahan yang terjadi pada bahan pada suhu tersebut. Visualisasi struktur bahan dapat dilakukan menggunakan perangkat lunak seperti OVITO. Berikut langkah-langkah metode analisis ini dapat mencakup:

- a Melakukan simulasi dinamika molekul pada bahan uji menggunakan metode koeksistensi dua fasa.
- b Setelah simulasi selesai, memperoleh struktur bahan uji sebelum dan setelah simulasi.
- c Menggunakan perangkat lunak OVITO untuk memvisualisasikan struktur bahan uji pada suhu yang ditentukan.
- d Membandingkan visualisasi struktur bahan sebelum dan setelah simulasi untuk mengidentifikasi perubahan yang terjadi.

Visualisasi dapat memberikan informasi visual yang berguna tentang perubahan dalam struktur bahan pada suhu tertentu, seperti pertumbuhan atau pencairan fasa padatan, formasi fasa setengah padatan, atau perubahan lainnya yang terkait dengan suhu. Dengan mengamati perubahan ini, peneliti dapat mendapatkan wawasan tentang sifat material pada suhu tertentu dan melihat apakah bahan telah mencapai titik leleh yang diinginkan.

3.5.2 Analisa Perubahan Nilai CNA

Metode analisis yang selanjutnya yaitu analisis perubahan nilai Common Neighbor Analysis (CNA). CNA adalah metode untuk mengidentifikasi jenis-jenis tetangga yang ada di sekitar setiap atom dalam bahan. Dalam analisis CNA, perubahan dalam jenis-jenis tetangga yang ditemukan di sekitar atom-atom dalam bahan dapat diamati. Berikut langkah-langkah metode analisis ini dapat mencakup:

- a Melakukan simulasi dinamika molekul pada bahan uji menggunakan metode koeksistensi dua fasa.
- b Setelah simulasi selesai, memperoleh struktur bahan uji pada suhu yang berbeda.
- c Menggunakan *software* OVITO atau alat analisis CNA lainnya, menghitung nilai CNA untuk setiap struktur bahan pada suhu tertentu.
- d Membandingkan nilai CNA antara struktur bahan pada suhu yang berbeda untuk melihat perubahan dalam jenis-jenis tetangga yang ditemukan di sekitar atom-atom.
- e Menganalisis perubahan nilai CNA untuk menentukan struktur yang terbentuk pada suhu tertentu dan apakah bahan telah mencapai titik leleh yang diinginkan.

Analisis perubahan nilai CNA dilakukan untuk peneliti dapat memahami hubungan antara perubahan struktur bahan dan suhu. Pada suhu di bawah titik leleh, bahan cenderung memiliki pola tetangga yang berhubungan dengan struktur padatan, sementara pada suhu di atas titik leleh, bahan cenderung memiliki pola tetangga yang lebih berhubungan dengan struktur cair. Dengan demikian, analisis nilai CNA dapat membantu dalam menentukan apakah bahan telah mencapai titik leleh yang diinginkan.

BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Bab 4 ini membahas mengenai hasil dan diskusi dari penelitian yang berjudul analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular. Pada bagian ini berisi hasil dari simulasi dinamika molekular yang telah dilakukan, meliputi pembuatan struktur atom pada baja paduan FeNi, simulasi NPT kurva perubahan fasa, pembuatan struktur padat-cair pada FeNi, simulasi NPT dinamika molekular pada metode koeksistensi dua fasa hingga analisis terhadap simulasi dinamika molekular yang sudah dijalankan. Selain itu terdapat tampilan dari hasil visualisasi dari simulasi yang telah dilakukan.

4.1 Struktur FeNi

Struktur atom baja paduan FeNi atau *ferronickel* dilakukan dengan menggunakan aplikasi ATOMSK. Pada penggunaan *software* ATOMSK diperlukan beberapa perintah atau *argument* yang diperlukan untuk menjadi sebuah atom yang diinginkan. Struktur atom baja paduan FeNi menggunakan ATOMSK dapat dibentuk dengan memasukan perintah atau *argument* yaitu kisi yang cocok dalam pembuatan FeNi. Kisi yang cocok ini digunakan untuk memperoleh struktur atom FeNi yang kuat dan mendapatkan hasil yang akurat dalam simulasi dinamika molekular. Pembuatan struktur atom FeNi dilakukan beberapa kali untuk menentukan kisi kristal yang cocok pada atom baja paduan FeNi. Selain itu, dalam pembentukan struktur atom baja paduan FeNi menggunakan *software* ATOMSK, diperlukan struktur atom penyusunnya yaitu besi (Fe) dan nikel (Ni). Sebelum melakukan *running* pada *software* ATOMSK, untuk pembuatan struktur atom FeNi wajib untuk mencantumkan output dengan nama dan format tertentu yang ingin dihasilkan.

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Penelitian tentang analisis penentuan titik leleh pada baja paduan FeNi menggunakan metode koeksistensi dua fasa dengan simulasi dinamika molekular. menghasilkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Berdasarkan penelitian yang dilakukan, pembentukan struktur atom baja paduan FeNi menggunakan aplikasi ATOMSK. Penggunaan *software* ATOMSK memerlukan perintah dan argumen yang tepat untuk mendapatkan struktur atom yang diinginkan. Dalam pembentukan struktur atom FeNi, digunakan kisi kristal yang cocok untuk memastikan kekuatan dan akurasi hasil simulasi dinamika molekular.
2. Metode Koeksistensi dua fasa digunakan untuk menentukan titik leleh dengan menggabungkan kondisi antara fasa padat dan cair. Penyusunan struktur fasa cair melibatkan simulasi NVT dan dianalisis melalui nilai CNA dan grafik RDF untuk memastikan struktur yang terbentuk. Proses penggabungan fasa padat dan cair menjadi fasa padat-cair dilakukan menggunakan fitur pada OVITO dan secara manual menggunakan Excel atau *Spreadsheet*.
3. Titik leleh adalah suatu sifat penting dari suatu bahan yang berhubungan dengan tingkat kekuatan bahan terhadap panas. Pada titik leleh, suatu bahan mencapai titik kesetimbangan antara kondisi padat dan kondisi cair. Penentuan titik leleh bahan dapat dilakukan menggunakan simulasi dinamika molekular dengan berbagai macam metode, pada penelitian ini, dilakukan dengan metode koeksistensi dua fasa. Berdasarkan penelitian yang dilakukan, metode koeksistensi dua fasa memberikan hasil titik leleh sebesar 1850 K.
4. Metode koeksistensi dua fasa memberikan hasil titik leleh baja paduan FeNi sebesar 1850 K, yang lebih akurat dibandingkan dengan metode perubahan fasa yang menghasilkan nilai titik leleh antara 2600 K hingga 2900 K. Dalam penelitian ini, meskipun belum ada penelitian eksperimental mengenai perhitungan titik leleh pada baja paduan FeNi, nilai titik leleh yang diperoleh

DAFTAR PUSTAKA

- Alavi, S. dan D. L. Thompson. 2006. Molecular dynamics simulations of the melting of aluminum nanoparticles. *Journal of Physical Chemistry A*. 110(4):1518–1523.
- Amanto, H. D. 1999. *Ilmu Bahan*. Jakarta: Bumi Aksara.
- Aral, G. 2003. Parallel molecular dynamics simulations of dynamics of oxidation and reactive wetting in metal/ceramic systems. *Ph.D. Thesis*. 120.
- Arkundato, A., M. Hasan, dan Z. Su'ud. 2016. *Simulasi Dinamika Molekul Dan Aplikasinya*. Jember: UPT Penerbitan Universitas Jember.
- Arkundato, A., W. Maulina, L. Rohman, dan R. D. Syarifah. 2022. Rigid procedure to calculate the melting point of metal using the solid- liquid phase (coexistence) method. 14(2):132–140.
- Australian Geological Survey Organization. 1999. Iron
- Belonoshko, A. B. dan R. Ahuja. 1997. Embedded-atom molecular dynamic study of iron melting. *Physics of the Earth and Planetary Interiors*. 102(3–4):171–184.
- Britannica, T. E. of E. 2022. Melting Point
- Carnes, M., D. Buccella, J. Y. C. Chen, A. P. Ramirez, N. J. Turro, C. Nuckolls, dan M. Steigerwald. 2009. A stable tetraalkyl complex of nickel(iv). *Angewandte Chemie - International Edition*. 48(2):290–294.
- Harsono, W. dan O. Toshie. 2000. *Teknologi Pengelasan Logam*. Jakarta: PT. Pradnya Paramita.
- Hirel, P. 2015. AtomsK: a tool for manipulating and converting atomic data files. *Computer Physics Communications*. 197:212–219.

Holcomb, C. D., P. Clancy, S. M. Thompson, dan J. A. Zollweg. 1992. A critical study of simulations of the lennard-jones liquid-vapor interface. *Fluid Phase Equilibria*. 75(C):185–196.

Indiyanto, R. 2008. Pengantar pengetahuan bahan teknik. *Jurnal Teknik Industri*

Kumar, N. 2014. Diffusivity studies in fe-cr alloys by molecular dynamics simulasi. *National Institute of Technology*. (May):91.

Lister, D. H., N. B. Summary, dan N. Applications. 2014. 14 - nucmatcorr - september 2014new.docx | enhanced reader. (September)

Maghfiroh, C. Y., A. Arkundato, Misto, dan W. Maulina. 2020. Parameters (σ , ϵ) of lennard-jones for fe, ni, pb for potential and cr based on melting point values using the molecular dynamics method of the lammps program. *Journal of Physics: Conference Series*. 1491(1)

Marimuthu, V. 2016. Corrosion behaviour of high chromium white iron hardfacing alloys based on chromium carbides varmaa marimuthu (b . tech – mechanical engineering) (mba – operations and logistics) this thesis is submitted in fulfilment of the requirements for the degree

Maulana, A., A. Arkundato, Sutisna, dan H. Trilaksana. 2020. Mechanical properties of fe, ni and fe-ni alloy: strength and stiffness of materials using lammps molecular dynamics simulation. *AIP Conference Proceedings*. 2314:0–10.

Maulana, A., Z. Su'ud, K. D. Hermawan, dan Khairurrijal. 2008. Simulation study of steels corrosion phenomenon in liquid lead–bismuth cooled reactors using molecular dynamics methods. *Progress in Nuclear Energy*. 50(2):616–620.

Midori, S., D. Hikmawati, dan A. Supardi. 2020. Molecular dynamics study of mechanical properties of zn-xmg alloy for metal biomaterial. *AIP Conference Proceedings*. 2314(December)

Smallman, R. E. dan R. J. Bishop. 1999. Ceramics and glasses. *Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering*. 320–350.

Stukowski, A. 2010. Visualization and analysis of atomistic simulation data with

ovito-the open visualization tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 18(1)

Talbot, J. 1998. *Corrosion Science and Technology - by David Talbot 1998*. USA: CRC Press LLC.

Thompson, A. P., H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, dan S. J. Plimpton. 2022. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*. 271:108171.

Wessman, S. 2013. *Applications of Computational Thermodynamics and Kinetics on Transformations in Stainless Steels*

Widiasih, Herawati, H. Safitri, dan A. Arkundato. 2013. Penerapan metode dinamika molekul untuk pembelajaran: konsep titik leleh dan perubahan wujud. *JURNAL Teori Dan Aplikasi Fisika*. 1(2):171–175.

Wu, C., B. J. Lee, dan X. Su. 2017. Modified embedded-atom interatomic potential for fe-ni, cr-ni and fe-cr-ni systems. *Calphad: Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*. 57(November 2016):98–106.

Zhang, J. 2009. A review of steel corrosion by liquid lead and lead–bismuth. *Corrosion Science*. 51:1207–1227.

