



**STUDI PENGARUH SUHU AWAL *QUENCHING* TERHADAP
JUMLAH STRUKTUR *ICOSAHEDRAL* MATERIAL BESI
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh
NIKODEMUS UMBU JANGA HAUWALI
NIM 101810201017

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2015**



**STUDI PENGARUH SUHU AWAL *QUENCHING* TERHADAP
JUMLAH STRUKTUR *ICOSAHEDRAL* MATERIAL BESI
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan Program Studi Fisika (S1)
dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh
NIKODEMUS UMBU JANGA HAUWALI
NIM 101810201017

JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2015

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Bapa dan mama terkasih, Umu Mudi Jurumana dan Rambu Lubu Beba.
2. Opa dan Oma terkasih, Umu Janga Hauwali dan Rambu Loba Hawa, serta Umu Adji Takawada (Alm.) dan Rambu Wasak Lodang.
3. Guru SD Masehi Waiwakus, SD Masehi Lowa, SMP Kristen Waikabubak, SMA Kristen Waikabubak serta dosen Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.
4. Almamater tercinta Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

MOTO

Segala perkara dapat kutanggung di dalam Dia yang memberi kekuatan kepadaku
(Filipi 4:13)*)

atau

Belajar dan pencarian terhadap jawaban akan alam semesta merupakan proses tiada
akhir**)

atau

*Everything that is really great and inspiring is created by the individual who can
labor in freedom***)*

*⁾ Teks Alkitab Terjemahan Baru, Lembaga Alkitab Indonesia. 2009. Jakarta.

**⁾ Prinsip CERN. 2013 (<http://www.fisika.lipi.go.id/webfisika/content/mahasiswa-itb-menjadi-wakil-pertama-indonesia-di-cern>)

***⁾ Albert Einstein (http://www.goodreads.com/author/quotes/9810.Albert_Einstein)

PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan di bawah ini:

Nama : Nikodemus Umbu Janga Hauwali

NIM : 101810201017

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Studi Pengaruh Suhu Awal *Quenching* Terhadap Jumlah Struktur *Icosahedral* Material Besi Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” adalah benar-benar karya saya sendiri, kecuali kutipan-kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggungjawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Penelitian ini merupakan bagian dari penelitian bersama dosen dan mahasiswa, dan hanya dapat dipublikasikan dengan mencantumkan nama dosen pembimbing.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, Desember 2015

Yang menyatakan,

Nikodemus U. J. Hauwali

NIM 101810201017

SKRIPSI

**STUDI PENGARUH SUHU AWAL *QUENCHING* TERHADAP
JUMLAH STRUKTUR *ICOSAHEDRAL* MATERIAL BESI
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh

Nikodemus Umbu Janga Hauwali

NIM 101810201017

Pembimbing

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

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

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Studi Pengaruh Suhu Awal *Quenching* Terhadap Jumlah Struktur *Icosahedral* Material Besi Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal :

tempat : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Tim Penguji:

Ketua,

Sekretaris,

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si
NIP 196912251999031001

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

Anggota I,

Anggota II,

Puguh Hiskiawan, S.Si., M.Si
NIP 197412152002121001

Supriyadi, S.Si., M.Si
NIP 198204242006041003

Mengesahkan
Dekan,

Prof. Drs. Kusno, DEA., Ph.D
NIP 196101081986021001

RINGKASAN

Studi Pengaruh Suhu Awal *Quenching* Terhadap Jumlah Struktur *Icosahedral* Material Besi Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul; Nikodemus Umu Janga Hauwali, 101810201017, 2015: 41 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Material memiliki peranan yang sangat besar dalam kehidupan manusia, hal ini dapat diketahui karena perkembangan teknologi dewasa ini sangat berkaitan erat dengan perkembangan ilmu material. Oleh karena itu, maka penelitian tentang material menjadi sangat penting untuk dilakukan. Penelitian material yang dimaksud berkaitan dengan bagaimana memanipulasi material untuk memenuhi kebutuhan manusia. Pada era nanoteknologi, penelitian dalam ilmu material membawa manusia untuk meneliti pada skala mikroskopis. Hal ini karena sifat-sifat mekanis material sangat berkaitan erat dengan struktur atom penyusun material tersebut.

Pada penelitian ini, secara khusus dipelajari mengenai struktur *icosahedral* material besi. Struktur *icosahedral* merupakan salah satu jenis kuasikristal. Material yang disusun oleh kuasikristal memiliki beberapa sifat menarik, yaitu kekerasan tinggi, konduktivitas listrik dan thermal rendah, koefisien gesek rendah, dan tahan korosi. Oleh karena sifat ini, maka penting untuk dilakukan penelitian terkait dengan kuasikristal, khususnya kuasikristal *icosahedral*.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode simulasi dinamika molekul dengan menggunakan program LAMMPS. Terdapat 2 proses perlakuan panas yang dilakukan pada penelitian ini, yaitu pemanasan (*heating*) dan pendinginan cepat (*quenching*). Proses *heating* meliputi proses pemanasan material besi dari suhu ruang (300 K) hingga pada beberapa suhu berbeda di atas suhu kritis material besi.

Setelah dipanaskan, material besi kemudian didinginkan secara cepat (*quenching*) dengan laju *quenching* yang berbeda-beda untuk setiap suhu hingga mencapai suhu 273 K. Setelah simulasi dilakukan, kemudian dilanjutkan dengan menganalisis hasil simulasi untuk menghitung persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk.

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diperoleh hasil bahwa terdapat pengaruh antara suhu awal *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk pada material besi. Persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk cenderung mengalami penurunan ketika simulasi dilakukan dengan suhu awal *quenching* 2173 K, 2273 K, 2373 K, 2473 K, 2573 K, 2673 K, dan 2773 K. Namun persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk cenderung mengalami peningkatan ketika simulasi dilakukan dengan suhu awal *quenching* 2873 K, 2973 K, 3073 K, dan 3173 K.

Selain melakukan variasi suhu awal *quenching*, simulasi juga dilakukan dengan laju *quenching* berbeda untuk setiap suhu awal *quenching*. Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diperoleh hasil bahwa persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk cenderung mengalami penurunan ketika simulasi dilakukan dengan laju *quenching* 17,06 K/ps, 17,96 K/ps, 18,86 K/ps, 19,75 K/ps, 20,65 K/ps, 21,55 K/ps, dan 22,45 K/ps. Namun ketika laju *quenching* dipercepat, yaitu dengan laju 23,35 K/ps, 24,25 K/ps, 25,15 K/ps, dan 26,05 K/ps, persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk cenderung meningkat.

PRAKATA

Puji dan syukur hanya bagi TUHAN, atas segala kasih dan anugerah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Pengaruh Suhu Awal *Quenching* Terhadap Jumlah Struktur *Icosahedral* Material Besi Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) 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 terima kasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si, sebagai pembimbing utama dan Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si, sebagai dosen pembimbing anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran, dan perhatian dalam penulisan skripsi ini;
2. Puguh Hiskiawan, S.Si., M.Si, sebagai dosen penguji I dan Supriyadi, S.Si., M.Si, sebagai dosen penguji II yang telah memberikan, saran, kritikan, dan masukan dalam penulisan skripsi ini;
3. Supriyadi, S.Si., M.Si, sebagai dosen pembimbing akademik yang telah membimbing penulis selama menjadi mahasiswa;
4. Sutisna, S.Pd., M.Si., sebagai dosen pembimbing akademik sebelumnya yang telah membimbing penulis pada awal studi;
5. Bapak dan ibu dosen Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
6. Bapa dan mama terkasih yang telah mendukung penulis, baik dalam doa,

kasih, perhatian maupun semangat;

7. Bapak Agustinus Delu Danguraba, Bapak Yusuf Umbu Riada, Ibu Elisabet Rambu Baba Dora dan keluarga besar Manolang, yang telah mendukung penulis;
8. Adik-adikku terkasih Norbet Umbu Kaledi Lakupali, Nenti Rambu Wasak Lodang, Nimrod Umbu Rupa Bini Api, dan Nurdin Umbu Runga Ngujungara, untuk setiap kasih dan perhatiannya;
9. Opa dan Oma terkasih Umbu Janga Hauwali, Rambu Loba Hawa, dan Rambu Wasak Lodang;
10. Adik terkasih Tri Rianingsih, terima kasih untuk dukungan, doa, kasih, dan perhatiannya;
11. Teman-teman angkatan 2010 Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
12. Teman-teman perjuangan Laboratorium Komputasi Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
13. Rekan-rekan pelayanan siswa Perkantas Jember;
14. Rekan-rekan Gerakan Pemuda GPIB “Getsemani” Jember;
15. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Penulis juga bersedia menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan tulisan ini. Akhirnya penulis berharap semoga tulisan ini dapat bermanfaat.

Jember, Desember 2015

Penulis

DAFTAR ISI

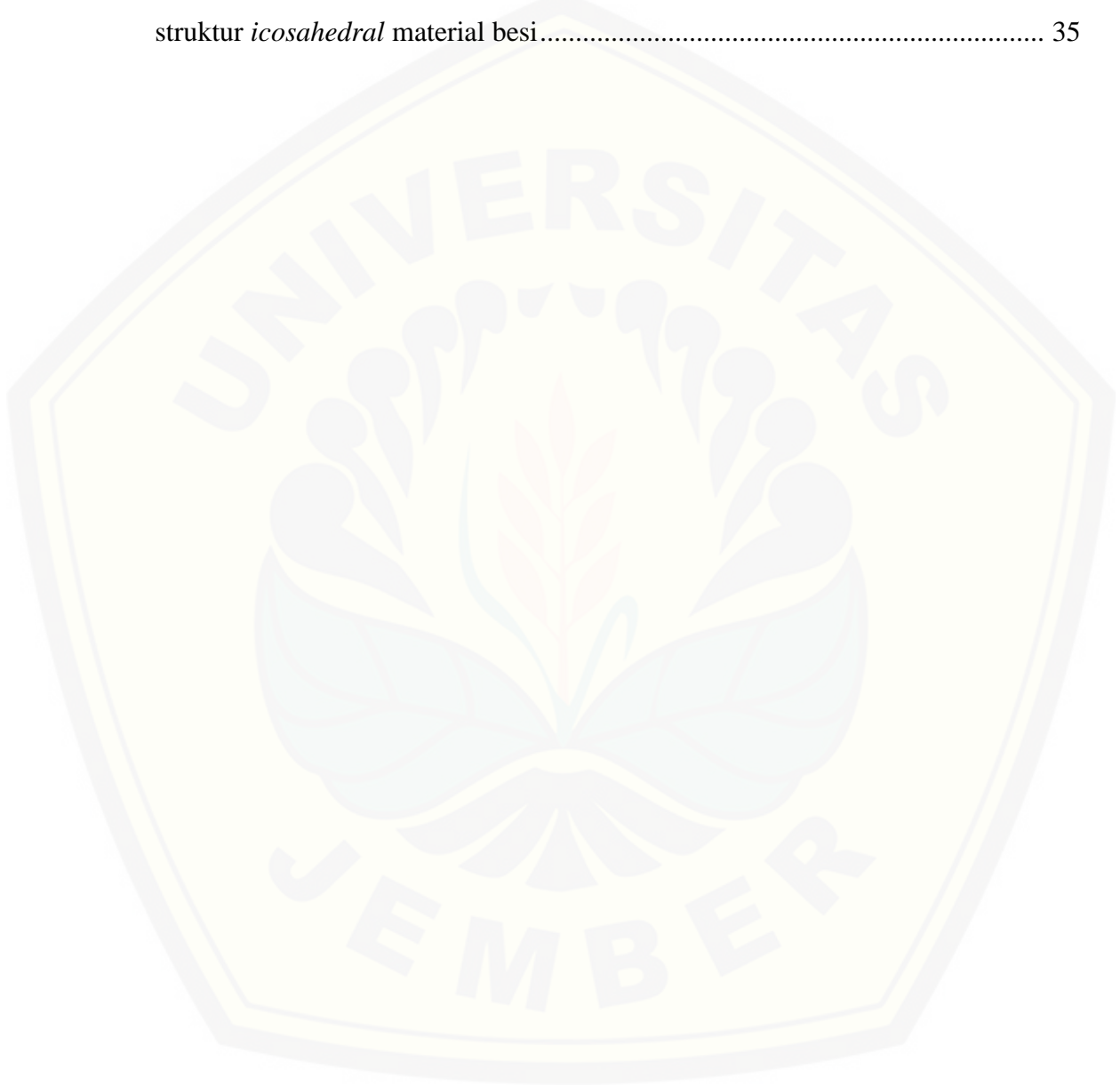
	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSEMBAHAN	ii
HALAMAN MOTO	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Batasan Masalah	3
1.4 Tujuan	3
1.5 Manfaat	3
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Perubahan Fase	4
2.2 Besi (Fe)	5
2.3 Perlakuan Panas	7
2.4 Kuasikristal <i>Icosahedral</i>	8
2.5 Simulasi Dinamika Molekul	11
2.5.1 Persamaan Gerak	12
2.5.2 Interaksi Antar Molekul	13

2.5.3 Potensial Lennard-Jones	14
2.5.4 Potensial Terpotong (<i>Cut-Off Potential</i>)	15
2.5.5 Potensial EAM (<i>Embedded Atomic Method</i>)	16
2.6 Program Dinamika Molekul LAMMPS	17
2.7 Program OVITO (<i>The Open Visualization Tool</i>)	18
2.8 Common Neighbor Analysis (CNA)	19
BAB 3. METODE PENELITIAN	20
3.1 Waktu dan Tempat	20
3.2 Alat dan Bahan	20
3.3 Prosedur Penelitian	20
3.3.1 Diagram Penelitian	21
3.3.2 Langkah Kerja	22
3.4 Analisis Data	24
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	25
4.1 Perubahan Fase Material	26
4.2 Struktur <i>Icosahedral</i> yang Terbentuk Pada Suhu Akhir	
Proses <i>Heating</i>	31
4.3 Pengaruh Suhu Awal <i>Quenching</i> Terhadap Persentase	
Struktur <i>Icosahedral</i>	32
4.4 Pengaruh Laju <i>Quenching</i> Terhadap Persentase	
Struktur <i>Icosahedral</i>	34
BAB 5. PENUTUP	37
5.1 Kesimpulan	37
5.2 Saran	37
DAFTAR PUSTAKA	38
LAMPIRAN	42

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Hubungan antara perubahan energi dan temperatur.....	5
2.2 Diagram fase besi murni	6
2.3 Struktur kuasikristal <i>icosahedral</i>	9
2.4 Kuasikristal <i>icosahedral</i> dengan difraksi sinar-X.....	9
2.5 Kuasikristal <i>octagonal</i> dengan difraksi sinar-X	10
2.6 Kuasikristal <i>decagonal</i> dengan difraksi sinar-X.....	10
2.7 Kuasikristal <i>dodecagonal</i> dengan difraksi sinar-X.....	11
2.8 Kurva Potensial Lennard-Jones.....	15
2.9 Tampilan Situs Web LAMMPS	17
2.10 Tampilan Program OVITO	18
2.11 Fasilitas CNA pada Program OVITO	19
3.1 Bagan tahapan-tahapan penelitian.....	21
4.1 Perubahan total energi sistem terhadap suhu material besi pada suhu tertinggi 2173 K.....	25
4.2 Struktur <i>icosahedral</i> material besi yang diperoleh dengan analisis CNA pada Program OVITO	26
4.3 Tampilan posisi atom material besi pada suhu 2173 K.....	27
4.4 Perubahan total energi sistem terhadap perubahan suhu pada suhu tertinggi 2073 K.....	28
4.5 Tampilan posisi atom material besi pada suhu 2073 K.....	29
4.6 Tampilan posisi atom material besi hasil <i>quenching</i> dengan suhu awal 2073 K.....	30

4.7 Pengaruh suhu awal <i>quenching</i> terhadap persentase rata-rata struktur <i>icosahedral</i> material besi.....	33
4.8 Pengaruh laju <i>quenching</i> terhadap persentase rata-rata struktur <i>icosahedral</i> material besi.....	35



DAFTAR LAMPIRAN

A. Koordinat struktur <i>icosahedral</i>	42
B. Tabel struktur material besi yang dihasilkan pada suhu akhir proses <i>heating</i>	43
C. Tabel pengaruh suhu awal <i>quenching</i> terhadap persentase struktur <i>icosahedral</i>	44
D. Tabel pengaruh suhu awal <i>quenching</i> dan laju <i>quenching</i> rata-rata terhadap persentase struktur <i>icosahedral</i>	50
E. Grafik perubahan total energi sistem terhadap suhu material besi	51
F. Grafik persamaan persentase struktur <i>icosahedral</i> untuk suhu 2173 K – 2773 K	57
G. Grafik persamaan persentase struktur <i>icosahedral</i> untuk suhu 2873 K – 3173 K	57
H. Script input untuk proses <i>heating</i>	58
I. Script input untuk proses <i>quenching</i>	59

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

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. Bahkan, perkembangan dalam peradaban manusia dikenal melalui tingkat pengetahuan manusia terhadap material. Dalam peradaban manusia kita mengenal adanya zaman batu, zaman perunggu, dan zaman besi. Saat ini pun, material memiliki peranan yang sangat penting dalam perkembangan teknologi (Sofyan, 2010).

Di era nanoteknologi, metode analisis mikroskopis sangat diperlukan untuk menghasilkan desain material yang bermanfaat untuk menunjang kehidupan manusia dan hal ini dapat dilakukan dengan menyelidiki fenomena fisik pada tingkat molekuler. Dalam banyak kasus, pemahaman dasar dari sifat material membutuhkan pengetahuan tentang informasi tingkat mikroskopis, karena sifat suatu material sangat ditentukan oleh struktur internal material tersebut. Hal ini melibatkan atom dan cara-cara atom tersebut berikatan dengan atom-atom di sekitarnya dalam kristal. Ada tiga pola kristal dasar paling umum yang terkait dengan logam yaitu: *body-centered cubic* (BCC), *face-centered cubic* (FCC) dan *hexagonal close-packed* (HCP) (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 (Avar *et al.*, 2008). Penemuan ini juga yang akhirnya menghantarkan Daniel Shechtman untuk mendapatkan penghargaan Nobel dalam bidang kimia pada tahun 2011 (Lidin, 2011). Kuasikristal diklasifikasikan menjadi 4 jenis, yaitu kuasikristal *octagonal*, *decagonal*, *dodecagonal*, dan *icosahedral*.

Penelitian mengenai struktur *icosahedral* biasanya dilakukan secara eksperimen dan material yang digunakan biasanya berupa paduan logam. Seperti

yang dilakukan oleh Saida dengan menggunakan paduan Zr-Pt (Saida *et al.*, 2001) dan Jiang dengan menggunakan paduan Zr-Al-Ni-Cu-Ag (Jiang *et al.*, 2001). Hal ini karena secara eksperimen, sangat sulit untuk menemukan satu material dalam keadaan murni. Penelitian mengenai struktur *icosahedral* juga sudah dilakukan secara simulasi, namun material yang digunakan masih berupa material paduan. Seperti yang dilakukan oleh Guo-Jian dalam paduan Cu-Co menggunakan metode Dinamika Molekul (Guo-Jian *et al.*, 2008) dan oleh Wu dalam paduan $\text{Cu}_{80}\text{Si}_{20}$ dengan menggunakan *Ab Initio Molecular Dynamics* (Wu *et al.*, 2012).

Pada penelitian ini akan dipelajari fenomena terbentuknya struktur *icosahedral* logam besi melalui proses *quenching* 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 suhu 273 K. Pada keadaan ini akan terbentuk struktur *icosahedral*. Melalui penelitian ini diteliti pengaruh suhu awal *quenching* terhadap jumlah struktur *icosahedral* yang terbentuk menggunakan simulasi dinamika molekul. Program yang digunakan dalam simulasi ini adalah LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*).

Data hasil simulasi kemudian dianalisis dengan menggunakan program OVITO (*The Open Visualisation Tool*). Program ini berfungsi untuk memvisualisasikan struktur material yang telah disimulasikan. Melalui analisa CNA (*Common Neighbor Analysis*) akan diketahui berapa banyak struktur *icosahedral* yang terbentuk dengan perlakuan panas yang telah dilakukan.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah yang akan dibahas dalam penelitian ini adalah:

1. Bagaimana cara menentukan persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk?
2. Bagaimanakah pengaruh suhu awal *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk?
3. Bagaimanakah pengaruh laju *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dari penelitian ini adalah:

1. Material besi yang digunakan dianggap sebagai besi murni dengan struktur kristal BCC (*Body-Centered Cubic*)
2. Simulasi metode dinamika molekul menggunakan program LAMMPS
3. Potensial yang digunakan adalah potensial EAM (*Embedded Atomic Method*) untuk material besi

1.4 Tujuan

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan:

1. Menentukan persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk
2. Mengetahui pengaruh suhu awal *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk
3. Mengetahui pengaruh laju *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk

1.5 Manfaat

Manfaat penelitian ini adalah dengan mengetahui suhu awal dan laju *quenching* yang menghasilkan persentase struktur *icosahedral* maksimum yang terbentuk, maka model awal simulasi ini dapat dikembangkan untuk memproduksi material-material baru yang kuat.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Perubahan Fase

Materi merupakan segala sesuatu yang menempati ruang dan memiliki massa. Secara umum materi diklasifikasikan menjadi 3 jenis, yaitu padat, cair, dan gas (Angelo, 2011). Zat padat memiliki susunan partikel yang selalu teratur, partikel penyusunnya tidak dapat bergerak dengan bebas, dan gaya tarik antar partikel penyusunnya sangat kuat. Dalam padatan, molekul bergerak di sekitar titik tertentu. Zat cair memiliki volume yang tetap, jarak antar partikel penyusunnya renggang, susunan partikelnya agak teratur, dan gaya tarik antar partikelnya lemah. Dalam cairan, jarak antara molekul umumnya hanya sedikit lebih besar dari fase padatan untuk material sejenis, namun molekul memiliki kebebasan gerak yang jauh lebih besar. Molekul gas memiliki susunan partikel yang tidak teratur, jarak antar partikel sangat jauh, dan gaya tarik antar partikel sangat lemah sehingga partikelnya dapat bergerak dengan sangat bebas (Young dan Freedman, 2000).

Materi dapat mengalami perubahan fase jika menerima atau melepaskan energi dalam bentuk kalor. Semakin besar energi yang diserap oleh material, maka suhu material tersebut cenderung meningkat. Jika material tersebut melepaskan energi, maka suhu material tersebut cenderung menurun. Penyerapan dan pelepasan energi yang ditunjukkan oleh perubahan suhu inilah yang menyebabkan berubahnya fase material. Namun terdapat fase khusus di mana perubahan energi tidak berpengaruh terhadap perubahan temperatur, yaitu pada fase laten. Energi yang diserap material pada fase laten tidak digunakan untuk menaikkan suhu material, melainkan untuk melepaskan ikatan antar molekul. Fase ini merupakan fase yang muncul ketika material dipanaskan hingga mencapai suhu kritis, saat material akan mengalami perubahan fase (Giancoli, 1998).

Jumlah energi panas yang dibutuhkan untuk menaikkan temperatur suatu zat adalah sebanding dengan temperatur dan massa zat tersebut, seperti ditunjukkan melalui persamaan 2.1 di bawah ini

$$Q = m c \Delta T \quad (2.1)$$

Keterangan:

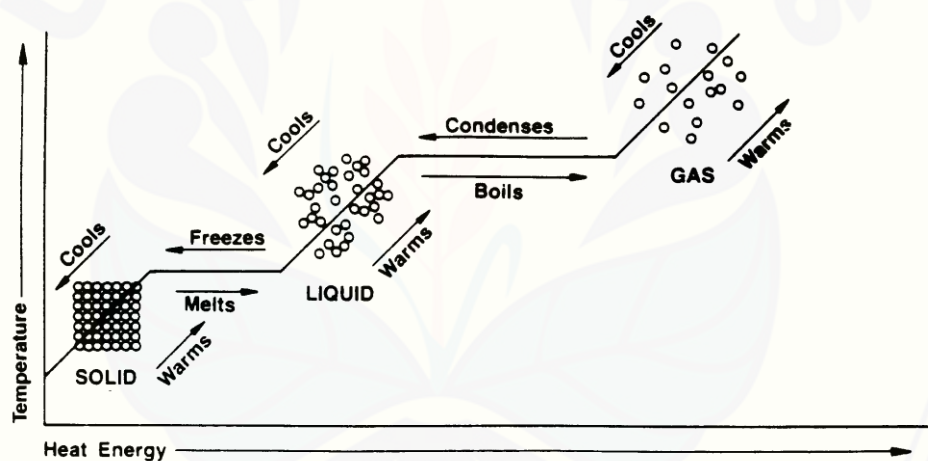
Q = energi yang dibutuhkan untuk menaikkan temperatur zat (Joule)

m = massa benda (Kg)

c = kalor jenis (J/Kg.K)

ΔT = perubahan temperatur (K)

(Tipler, 1991)



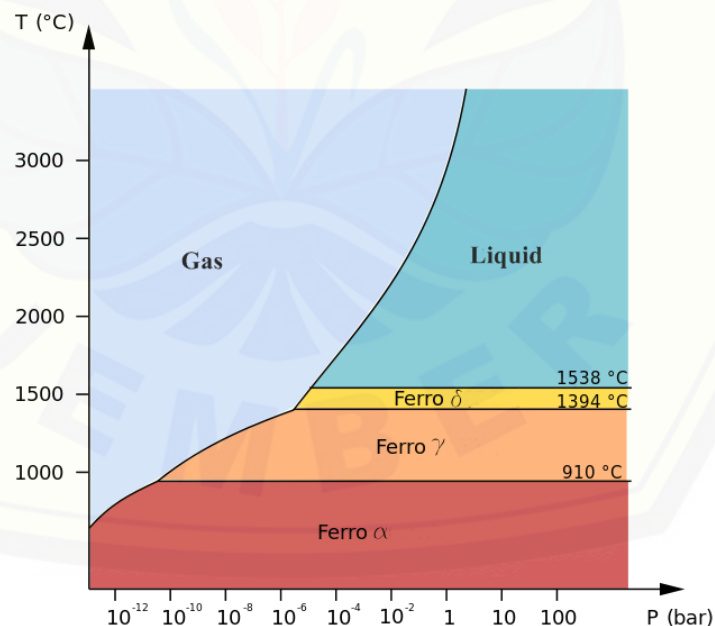
Gambar 2.1. Hubungan antara perubahan energi dan temperature (Zimmerman, 2005)

2.2 Besi (Fe)

Besi merupakan logam yang paling banyak digunakan oleh manusia dalam kehidupan sehari-hari, terlebih di zaman modern sekarang ini. Hal ini karena jumlahnya yang cukup banyak dan mudah diperoleh. Besi merupakan logam kedua dan unsur keempat yang ketersediaannya paling banyak di lapisan kerak bumi yaitu sebesar 6.2%. Besi mempunyai sifat mekanis seperti kekuatan dan keuletan yang cukup memadai, namun besi juga memiliki kekurangan yaitu mudah mengalami

korosi. Korosi besi ini diakibatkan oleh reaksi besi dengan oksigen yang membentuk oksidasi besi (Callister *et al.*, 2007).

Besi merupakan konstruksi logam yang sangat penting. Karena walau keadaan murni, besi tidak terlalu keras. Namun jika ditambahkan dengan sedikit karbon atau logam lain, maka besi akan menjadi campuran baja yang sangat keras. Besi merupakan logam yang dapat ditempa, melalui proses pengerasan. Proses ini dapat dilakukan dengan memanaskan besi hingga suhu tertentu, kemudian didinginkan secara cepat menggunakan air atau oli sehingga besi menjadi keras. Besi juga merupakan penghantar listrik dan panas yang baik, dan mudah termagnetisasi. Besi merupakan logam transisi yang berada pada golongan VIII B dan periode 4 pada tabel periodik unsur. Besi memiliki simbol Fe dengan nomor atom 26, massa atom 55.847 amu, dan konstanta kisi 2.861 Å. Titik leleh besi adalah 1535°C dan akan mendidih pada suhu 2750°C (Krebs, 2006).



Gambar 2.2. Diagram fase besi murni (Smith, 1995)

Besi murni bersifat *allotropy* yaitu mempunyai berbagai bentuk kristal. Pada suhu ruang, besi memiliki struktur kristal BCC. Fase ini biasa dikenal sebagai fase ferrit (besi- α). Jika besi dipanaskan hingga mencapai suhu 910°C , maka struktur besi berubah menjadi FCC. Fase ini dinamakan sebagai fase *austenite* (besi- γ). Fase *austenite* ini terus bertahan hingga suhu 1400°C . Ketika suhu berada di atas 1400°C , maka struktur besi kembali berubah menjadi BCC yang biasa disebut sebagai besi- δ . Walaupun sama-sama memiliki struktur BCC dengan fase ferrit (besi- α), namun jarak antar atom pada fase ini (besi- δ) lebih besar dari fase ferrit. Jika suhu terus dinaikkan hingga berada di atas 1535°C , maka besi mulai mencair (Smallman dan Bishop, 1999).

2.3 Perlakuan Panas

Perlakuan panas merupakan proses yang sangat penting dalam pengerjaan logam. Perlakuan panas melibatkan proses pemanasan dan proses pendinginan terkontrol pada logam maupun paduan logam. Terdapat beberapa proses perlakuan panas, yaitu *heating* (pemanasan), *cooling* (pendinginan normal), dan *quenching* (pendinginan cepat). Proses *heating* merupakan proses pemanasan material hingga mencapai suhu yang diinginkan dengan laju pemanasan terkontrol. Proses *cooling* merupakan proses pendinginan material hingga mencapai suhu yang diinginkan. Sedangkan *quenching* merupakan proses pendinginan secara cepat. Proses ini sama seperti proses *cooling*, namun laju pendinginan pada proses *quenching* lebih cepat daripada proses *cooling*.

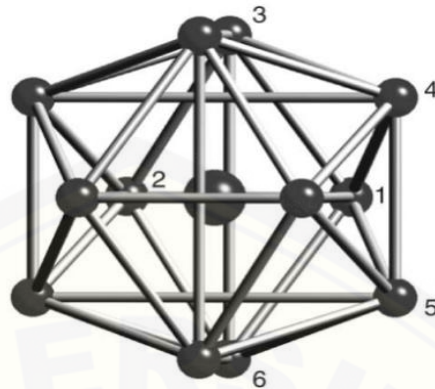
Tujuan dari perlakuan panas adalah mendapatkan sifat-sifat material yang diinginkan, seperti meningkatkan keuletan, meningkatkan kekerasan material, menghilangkan tegangan internal, menghaluskan ukuran butiran kristal, dan meningkatkan kekuatan tarik atau tegangan tarik logam. Terdapat 3 faktor utama yang sangat berpengaruh terhadap proses perlakuan panas yaitu suhu pemanasan, waktu pemanasan, dan laju pendinginan (Murtiono, 2012).

Salah satu proses perlakuan panas adalah *quenching*. Proses ini merupakan salah satu perlakuan panas yang biasanya dilakukan untuk mengeraskan baja. Bahan yang sudah dipanaskan dicelupkan secara cepat pada media yang sudah disiapkan. Media yang biasanya digunakan dalam proses *quenching* adalah udara, air, dan oli. Material yang mengalami proses *quenching* biasanya memiliki sifat yang seimbang antara kekuatan luluh (*yield strength*) dan ketangguhan (*toughness*) (Fuad, 2012).

2.4 Kuasikristal *Icosahedral*

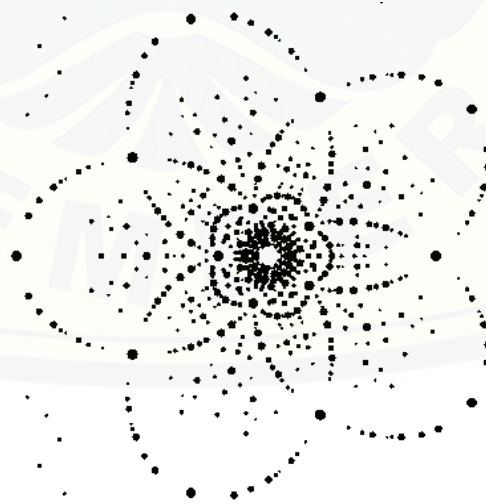
Kuasikristal merupakan kelas baru dalam material. Kuasikristal ditemukan pertamakali oleh Daniel Shechtman *et.al* pada tahun 1982 dan dipublikasikan pada tahun 1984 (Jansen, 2007). Kuasikristal memiliki beberapa sifat yang menarik, diantaranya: kekerasan yang tinggi, konduktivitas listrik dan termal rendah, energi permukaan rendah, koefisien gesek rendah, ketahanan korosi yang kuat, dan sifat optik yang belum diamati untuk paduan kristal (Gögebakan *et al*, 2009). Kuasikristal dapat diklasifikasikan menjadi 4 jenis, yaitu kuasikristal *octagonal*, *decagonal*, *dodecagonal*, dan *icosahedral*.

Jenis kuasikristal yang pertama kali ditemukan adalah kuasikristal *icosahedral* dalam paduan Al-Mn (Bendersky *et al*, 2012). Nama *icosahedral* diambil dari salah satu geometri Platonik yaitu *icosahedron*, karena atom-atom yang menyusun struktur *icosahedral* berbentuk geometri *icosahedron*. Kata *icosahedral* berasal dari bahasa Yunani yaitu “*icosa*” yang artinya dua puluh. Struktur *icosahedral* memiliki dua puluh buah segitiga sama sisi yang merupakan wajah *icosahedral* atau *icosahedron phase* dan dua belas puncak atau *icosacup* yang masing-masing terdiri dari lima segitiga sama sisi. Struktur *icosahedral* disusun oleh tiga belas atom pada setiap sel. Dua belas atom berada pada puncak struktur *icosahedral* dan satu atom lainnya berada pada pusat sel.



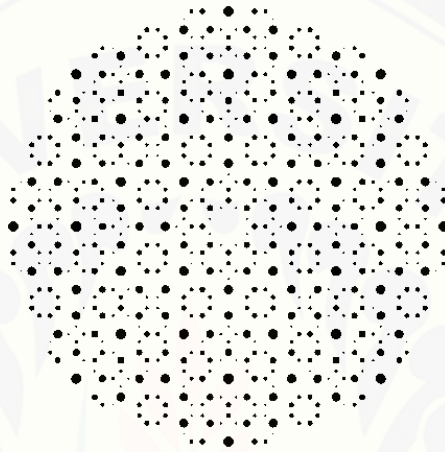
Gambar 2.3 Struktur kuasikristal *icosahedral* (Jansen, 2007)

Eksperimen menunjukkan bahwa sejumlah besar logam membentuk struktur *icosahedral* dalam keadaan cair (Zetterling, 2003). Hal ini yang menyebabkan kebanyakan kuasikristal, termasuk kuasikristal *icosahedral* hanya dapat diproduksi dibawah kondisi non-equilibrium, seperti *quenching*. Bahan-bahan yang membentuk kuasikristal *icosahedral* adalah Al-Mn, Al-Mn-Si, Al-Cu-Fe, Al-Mg-Zn, Nb-Fe, V-Ni-Si, dan Pd-U-Si. Gambar 2.4 di bawah ini merupakan kuasikristal *icosahedral* yang diperoleh dengan difraksi sinar-X.



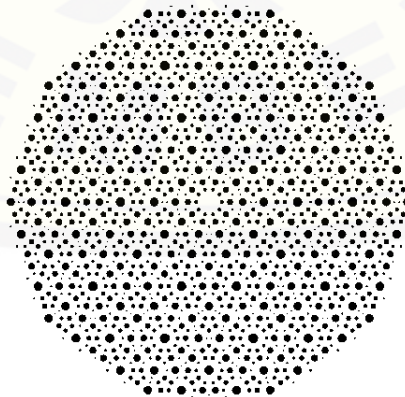
Gambar 2.4. Kuasikristal *icosahedral* dengan difraksi sinar-X (Weber, 2004)

Kuasikristal *octagonal* merupakan kuasikristal dengan *8-fold* (lipatan). Adapun material yang membentuk kuasikristal *octagonal* adalah V-Ni-Si, Cr-Ni-Si, Mn-Si, Mn-Si-Al, dan Mn-Fe-Si. Gambar 2.5 di bawah ini merupakan kuasikristal *octagonal* yang diperoleh dengan menggunakan difraksi sinar-X.



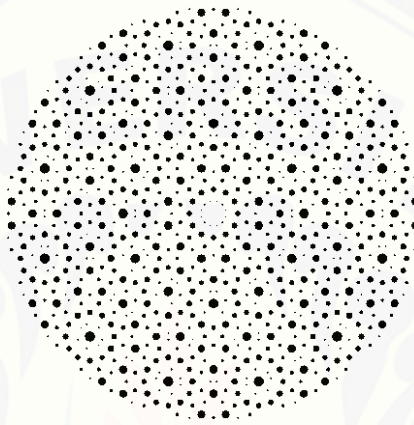
Gambar 2.5. Kuasikristal *octagonal* dengan difraksi sinar-X (Weber, 2004)

Kuasikristal *decagonal* merupakan kuasikristal dengan *10-fold* (lipatan). Bahan-bahan yang membentuk kuasikristal *decagonal* adalah Al-Ni-Co, Al-Cu-Mn, Al-Cu-Fe, Al-Cu-Ni, V-Ni-Si, dan Cr-Ni. Gambar 2.6 di bawah ini merupakan kuasikristal *decagonal* yang diperoleh dengan menggunakan difraksi sinar-X.



Gambar 2.6. Kuasikristal *decagonal* dengan difraksi sinar-X (Weber, 2004)

Kuaskristal *dodecagonal* merupakan kuaskristal dengan *12-fold* (lipatan). Bahan-bahan yang membentuk kuaskristal *dodecagonal* adalah Cr-Ni, V-Ni, dan V-Ni-Si (Weber, 2004). Gambar 2.7 di bawah ini merupakan kuaskristal *dodecagonal* yang diperoleh dengan menggunakan difraksi sinar-X.



Gambar 2.7. Kuaskristal *dodecagonal* dengan difraksi sinar-X (Weber, 2004)

2.5 Simulasi Dinamika Molekul

Menurut Arkundato (2012), metode dinamika molekul merupakan metode untuk menentukan trayektori atom-atom yang saling berinteraksi dalam suatu material pada kondisi tertentu. Penelitian dengan metode ini dapat dilakukan dengan menyelesaikan persamaan gerak Newton secara numerik, kemudian menerapkan konsep-konsep atau hukum-hukum mekanika statistik berdasarkan informasi lengkap trayektori atom tersebut. Dengan menggunakan metode ini, dapat diprediksi nilai berbagai besaran termodinamik, seperti tekanan, kapasitas panas, energi total sistem, *mean square displacement* (MSD), *radial distribution function* (RDF), koefisien difusi, energi aktivasi, *penetration depth*, dan sebagainya.

Dinamika molekul pertama kali diperkenalkan oleh Alder dan Wainwright pada tahun 1957. Terdapat beberapa komponen mekanika statistik yang diperlukan dalam simulasi dinamika molekul, yaitu termostat, integrator, dan fungsi potensial. Termostat berfungsi untuk mengontrol temperatur sistem, integrator diperlukan untuk

memecahkan Persamaan Newton secara numerik, dan fungsi potensial diperlukan untuk menghitung gaya yang bekerja pada sistem (Adler, 2003). Dengan menghitung gaya yang bekerja pada sistem, maka persamaan gerak Newton dapat dipecahkan secara numerik.

2.5.1 Persamaan Gerak

Dinamika molekul didasarkan pada hukum gerak dalam Mekanika Klasik, di mana pergerakan partikel diturunkan dengan menyelesaikan persamaan gerak Newton. Untuk menghitung trayektori atom, dapat dilakukan dengan menyelesaikan persamaan diferensial biasa yang terdapat dalam hukum II Newton.

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}}{m} \quad (2.2)$$

Dengan gaya yang bekerja pada sistem dapat diperoleh dari

$$\mathbf{F} = -\nabla_i V(r_1, \dots, r_N) \quad (2.3)$$

Dengan mengintegrasikan persamaan gerak pada persamaan 2.1, dapat diperoleh konfigurasi sebagai dari atom yang ditinjau. Langkah-langkahnya sebagai berikut:

1. Menghitung gaya yang bekerja pada setiap partikel berdasarkan posisi relatif terhadap atom lain dalam sistem
2. Integrasi persamaan gerak untuk memperoleh posisi di setiap waktu
3. *Update* posisi atom

Persamaan (2.2) dapat dituliskan sebagai berikut:

$$\frac{dr_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

$$\frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \frac{\mathbf{F}}{m} \quad (2.3)$$

$$i = x, y, z$$

Kemudian jika sistem yang ditinjau memiliki N partikel, maka pada setiap $6N$ step, persamaan diferensial biasa tersebut harus diselesaikan. Persamaan 2.3 di atas dapat dinyatakan dalam formalisme Hamiltonian seperti ditunjukkan pada persamaan 2.4 berikut (Åkesson, 2013):

$$\begin{aligned}\frac{dr_i}{dt} &= \frac{\mathbf{p}_i}{m} \\ \frac{d\mathbf{p}_i}{dt} &= \mathbf{F} \\ i &= x, y, z\end{aligned}\tag{2.4}$$

2.5.2 Interaksi Antar Molekul

Salah satu hal yang perlu diperhatikan dalam simulasi dinamika molekul adalah interaksi antar atom atau molekul selama simulasi berlangsung. Karena berada dalam skala atomik, interaksi antar molekul secara prinsip seharusnya diturunkan dari prinsip ketidakpastian Heisenberg. Namun dapat pula dilakukan pendekatan secara klasik, di mana atom atau molekul ditinjau sebagai sebuah titik massa. Terdapat dua buah kriteria utama dalam interaksi antar molekul, yaitu gaya tolak-menolak dan gaya tarik-menarik antar molekul. Jika atom atau molekul berada pada jarak yang sangat dekat, maka resultan gayanya berupa tolak-menolak. Namun jika atom atau molekul berada pada jarak yang sangat jauh, maka resultan gayanya berupa tarik-menarik. Pada jarak tertentu, resultan gaya tersebut akan saling meniadakan, sehingga resultannya sama dengan nol. Dalam dinamika molekul, interaksi antar molekul biasanya dikenal dengan potensial antar atom (Witoelar, 2002).

2.5.3 Potensial Lennard-Jones

Pemilihan fungsi potensial antar atom yang digunakan sangat penting dalam melakukan simulasi dinamika molekul. Karena fungsi potensial ini akan menentukan semua interaksi antar-atom dalam simulasi yang dilakukan (Chui, 2007). Salah satu potensial yang biasa digunakan dalam simulasi dinamika molekul adalah potensial Lennard-Jones. Potensial ini merupakan potensial yang sangat sederhana, namun memiliki ketelitian yang baik ketika digunakan dalam simulasi. Potensial ini biasanya digunakan untuk simulasi cairan atau gas non logam, misalnya Argon. Model potensial Lennard-Jones dapat dirumuskan sebagai berikut:

$$U(r) = k\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right\} \quad (2.5)$$

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)}$$

Keterangan:

$U(r)$ = Potensial interaksi

ε = parameter yang menyatakan kekuatan interaksi

σ = parameter jarak

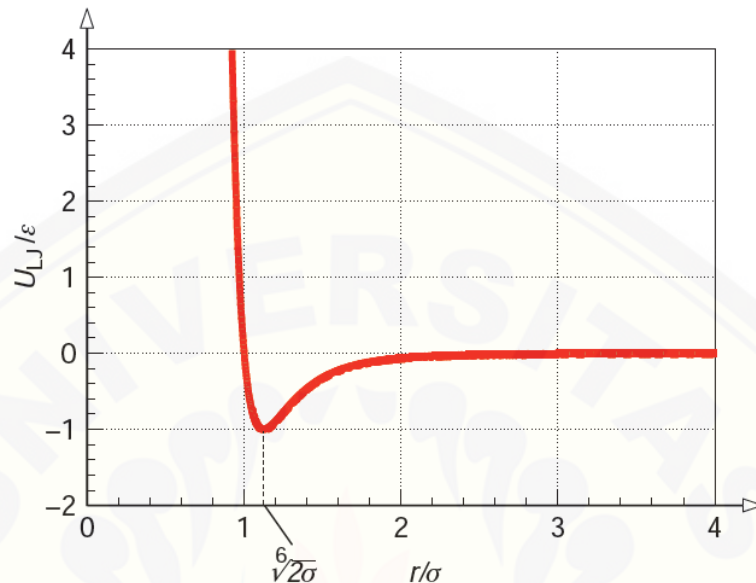
r = jarak rata-rata antar molekul

n dan m = bilangan bulat positif, dengan $n > m$

Bilangan positif yang biasa digunakan untuk n dan m adalah 12 dan 6, sehingga persamaan di atas dapat diganti menjadi persamaan 2.6 (Haile, 1992):

$$U(r) = 4\varepsilon \left\{ \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \quad (2.6)$$

Berikut merupakan kurva untuk potensial Lennard-Jones



Gambar 2.8. Kurva potensial Lennard-Jones (Sato, 2011)

2.5.4 Potensial Terpotong (*cut-off potential*)

Salah satu proses yang tidak terhindarkan dalam simulasi dinamika molekul adalah menghitung gaya-gaya yang terjadi antar molekul. Hal ini membutuhkan waktu yang lama, karena dalam simulasi dinamika molekul digunakan lebih dari ribuan atom. Maka salah satu cara untuk mempersingkat waktu simulasi adalah dengan memberikan jarak interaksi maksimum dari setiap atom atau molekul yang dalam dinamika molekul dikenal dengan potensial terpotong (*cut-off*). Jarak *cut-off* merupakan jarak maksimum di mana interaksi antar atom atau molekul diperbolehkan (Rapaport, 2004).

$$U(r) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right], & r \leq R_c \\ 0, & r \geq R_c \end{cases} \quad (2.7)$$

2.5.5 Potensial EAM (*Embedded Atomic Method*)

Potensial lain yang biasa digunakan dalam simulasi dinamika molekul adalah potensial EAM (*Embedded Atomic Method*). Potensial EAM merupakan potensial yang biasa digunakan untuk sistem logam (Zhou, 2013). Energi potensial dari sebuah atom i pada potensial EAM dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E = \sum_i E_i = \sum_i F(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij (i \neq j)} \phi(r_{ij}) \quad (2.8)$$

$$\bar{\rho}_i = \sum_{j \neq i} \rho(r_{ij})$$

Keterangan:

E = Energi total sistem

E_i = Energi potensial nominal dari atom i

F = Fungsi *embedding*

$\bar{\rho}_i$ = Total rapat muatan elektron pada atom i yang mencakup kontribusi elektron dari atom lain

$\phi(r_{ij})$ = energi interaksi pasangan antara atom i dan j

$\rho(r_{ij})$ = kontribusi rapat muatan elektron pada atom i akibat atom j

Dalam penelitian ini menggunakan potensial EAM, karena material yang simulasikan merupakan logam besi. Namun potensial yang digunakan tidak dihitung sendiri, tetapi diambil dari hasil penelitian sebelumnya yang dipublikasikan dalam website www.ctcms.nist.gov/potentials. Potensial EAM yang digunakan dalam penelitian ini merupakan hasil penelitian yang dilakukan oleh Mendelev *et al.* (Mendelev *et al.*, 2003).

2.6 Program Dinamika Molekul LAMMPS

LAMMPS (*Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) merupakan sebuah program dinamika molekul yang didistribusikan oleh *Sandia National Laboratory*, Amerika Serikat. Program ini dirancang untuk melakukan simulasi atom atau molekul dalam skala besar. LAMMPS ditulis dalam bahasa C++ dan pertama kali dirilis ke publik sebagai kode *open source* pada tahun 2004.

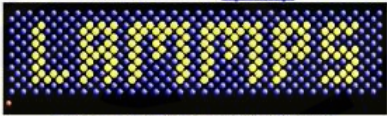
Program ini dapat memodelkan sebuah ensemble partikel pada keadaan padat, cair atau gas dan juga atom atau logam. Fitur lain yang menarik adalah bahwa program ini dapat menangani simulasi sistem dengan jutaan atau miliaran partikel, tapi dalam waktu yang sama juga akurat untuk sistem yang lebih kecil. LAMMPS adalah program yang mengintegrasikan persamaan gerak Newton untuk sekelompok atom yang saling berinteraksi (Camprubi, 2011). Dalam penelitian ini digunakan program LAMMPS. Program LAMMPS dipilih untuk simulasi ini karena merupakan program dinamika molekul klasik yang ditulis dalam bahasa C++ sehingga mudah dimodifikasi. Program LAMMPS dapat diunduh secara gratis melalui alamat <http://lammps.sandia.gov/>.

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

lamp: a device that generates light, heat, or therapeutic radiation; something that illumines the mind or soul -- www.dictionary.com

NEW Bi-annual [LAMMPS Users Workshop](#). 1st week in August, 2015 - [program](#) is now posted!

hover to animate -- [input script](#)



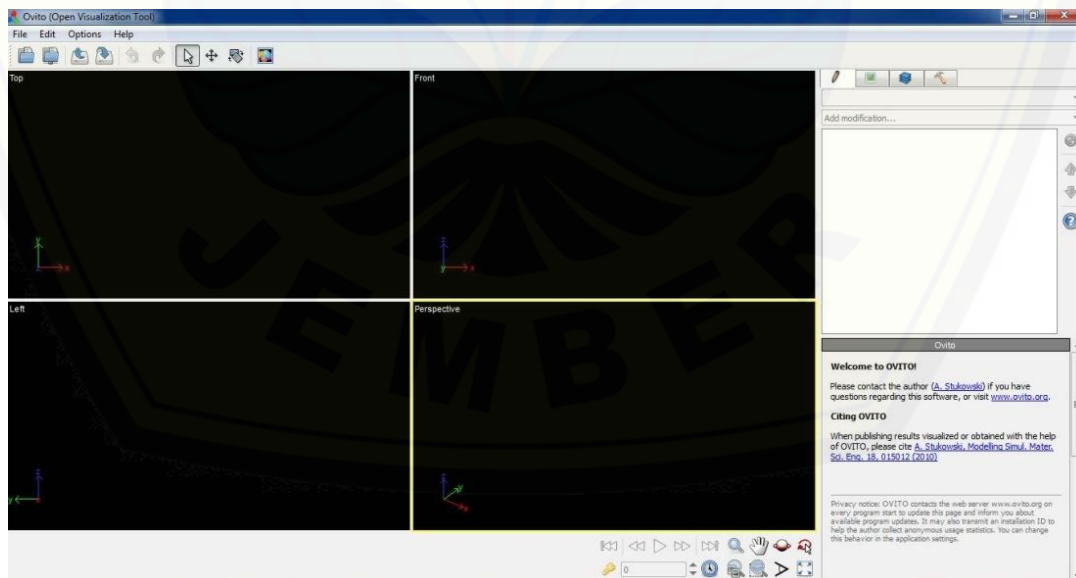
[physical analog \(start at 3:25\) & explanation](#)

Big Picture	Code	Documentation	Results	Related Tools	Context	User Support
Features	Download	Manual	Publications	Pre-Post Processing	Authors	Mail list
Non-features	SourceForge	Developer Guide	Pictures	Pizza.py Toolkit	History	Workshops
FAQ	Latest Features & Bug Fixes	Tutorials	Movies	Offsite LAMMPS packages & tools	Funding	User Scripts and HowTos
Wish list	Unfixed bugs	MD to LAMMPS glossary	Benchmarks	Visualization	Open source	Contribute to LAMMPS
		Commands	Citing LAMMPS	Related Modeling codes		

Gambar 2.9. Tampilan situs web LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>)

2.7 Program OVITO (*The Open Visualization Tool*)

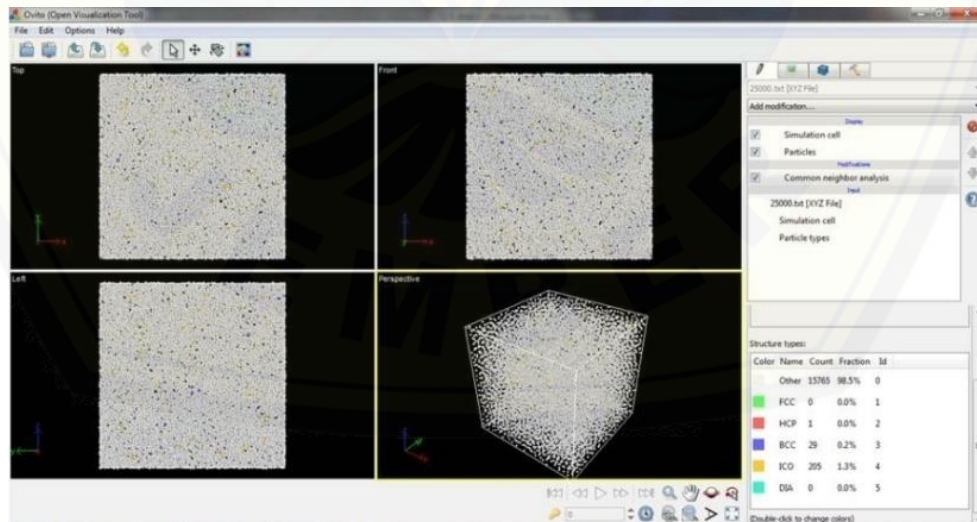
OVITO (*The Open Visualization Tool*) merupakan salah satu program pendukung dalam simulasi dinamika molekuler. OVITO merupakan program yang berfungsi untuk memvisualisasikan dan menganalisis data hasil simulasi atomik berskala besar dalam ilmu dan rekayasa material. Program OVITO dapat digunakan secara gratis oleh semua pengguna Windows, Linux, dan Mac OS di bawah lisensi *open source*. OVITO dikembangkan oleh Alexander Stukowski dari Departemen Material Sains Darmstadt University of Technology, Jerman (Stukowski, 2010). Dengan menggunakan program OVITO, dapat dihitung struktur kristal dalam suatu material yang telah disimulasikan. Dalam program OVITO terdapat fasilitas CNA (*common neighbor analysis*) yang dapat digunakan untuk melihat jumlah struktur yang terbentuk, seperti BCC (*Body-centered cubic*), FCC (*Face-centered cubic*), HCP (*Hexagonal close-packed*), ICO (*Icosahedral coordination*), dan DIA (*Cubic diamond structure*). Program OVITO dapat diunduh melalui halaman <http://www.ovito.org/>.



Gambar 2.10. Tampilan Program OVITO

2.8 Common Neighbor Analysis (CNA)

Salah satu masalah umum yang sering dihadapi dalam simulasi dinamika molekul berskala besar adalah mengidentifikasi daerah tempat kristal terbentuk atau mengalami kerusakan selama simulasi berlangsung. Salah satu cara sederhana untuk melihat sejumlah atom yang telah terlepas dari kristal adalah dengan menganalisis tetangga terdekat dari atom yang ditinjau (atom lokal). Dengan analisis tersebut, dapat diketahui atom-atom yang masih berbentuk kristal dan atom-atom yang mengalami cacat kristal. Metode ini dikenal dengan istilah *Common Neighbor Analysis* (CNA). CNA digunakan untuk mengkarakterisasi lingkungan atom lokal dalam material (Cleveland *et al.*, 1999). Dengan menggunakan analisis CNA, maka kita dengan mudah dapat melihat posisi suatu atom terhadap atom terdekatnya. CNA merupakan metode untuk mendeteksi suatu kristal apakah masih berbentuk kristal (BCC, FCC, HCP, atau struktur kristal lain) atau sudah mengalami kerusakan (Wang, 2006). Dalam penelitian ini, tidak dibahas mengenai CNA secara teori, namun hanya menggunakan fasilitas CNA yang sudah ada dalam program OVITO untuk menganalisis hasil simulasi.



Gambar. Fasilitas CNA pada program OVITO

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat

Pelaksanaan penelitian dilakukan di Laboratorium Komputasi Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember. Penelitian dilakukan pada bulan September – Nopember 2015.

3.2 Alat dan Bahan

Alat yang dibutuhkan dalam penelitian ini adalah:

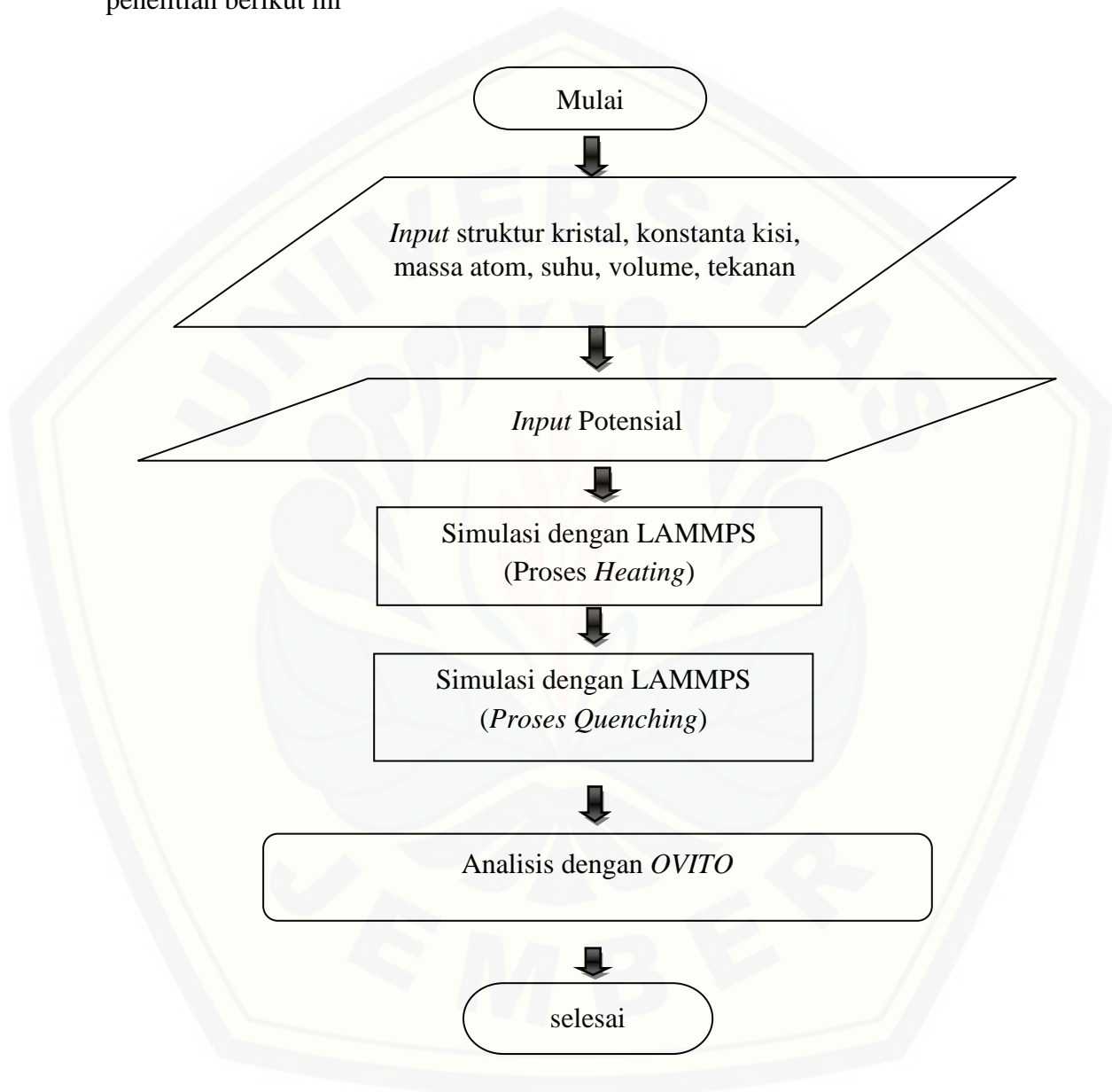
- 1) Satu set perangkat komputer dengan spesifikasi:
 - Prosesor : Intel (R) Core(TM) i5-3470 CPU @3.20 GHz 3.60 GHz
 - Memori : 4.00 GB
 - Sytem tipe : 64 bit
- 2) Aplikasi yang digunakan
 - a. LAMMPS : digunakan untuk melakukan simulasi
 - b. OVITO : digunakan untuk visualisasi dan menganalisis hasil simulasi

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian dilakukan untuk mendapatkan persentase struktur *icosahedral* material besi melalui proses *heating* dan *quenching*. Adapun prosedur penelitian yang akan dilakukan adalah sebagai berikut:

3.3.1 Diagram Penelitian

Secara umum, penelitian yang dilakukan digambarkan dalam diagram penelitian berikut ini



Gambar 3.1 Bagan tahapan – tahapan penelitian

3.3.2 Langkah Kerja

Langkah kerja dalam penelitian ini meliputi 2 tahap simulasi, yaitu proses *heating* dan proses *quenching*. Proses *heating* meliputi proses pemanasan material dari suhu ruang (300 K) hingga suhu di atas suhu kritis material. Sedangkan proses *quenching* merupakan proses mendinginkan material secara cepat dari suhu yang tinggi (di atas suhu kritis) hingga suhu 273 K. Material yang digunakan dalam penelitian ini adalah besi murni dengan struktur awal BCC (*Body Centered Cubic*) dengan jumlah atom 6750. Besi dipanaskan dari suhu ruang (300 K) hingga suhu di atas suhu kritis, yaitu pada suhu 2173 K, 2273 K, 2373 K, 2473 K, 2573 K, 2673 K, 2773 K, 2873 K, 2973 K, 3073 K, dan 3173 K. Kemudian pada masing-masing suhu tersebut dilakukan proses *quenching* dengan waktu yang berbeda-beda. Waktu simulasi diwakili oleh jumlah step simulasi. Dalam program LAMMPS, 1 step simulasi memiliki nilai 0.001 ps (*picosecond*). Simulasi ini dilakukan dengan jumlah step simulasi yang berbeda-beda, yaitu 62500 step (62.5 ps), 75000 step (75 ps), 87500 step (87.5 ps), 100000 step (100 ps), 112500 step (112.5 ps), 125000 step (125 ps), 137500 step (137.5 ps), 150000 step (150 ps), 162500 (162.5 ps), 175000 (175 ps), dan 187500 step (187.5 ps).

A. Proses *Heating*

Langkah-langkah yang dilakukan pada proses *heating* adalah:

1. Menentukan input yang akan digunakan dalam simulasi

Terdapat 2 file *input* yang akan digunakan dalam proses *heating*, yaitu:

- a. File *script input*

File ini berisi unit atom, konstanta kisi material, jumlah atom yang digunakan dalam simulasi, massa atom, suhu, jumlah step simulasi, dan perintah *tmp.restart*. Perintah *tmp.restart* ini berfungsi untuk menyimpan koordinat atom secara otomatis. Untuk *script input* pada proses *heating* dapat dilihat pada lampiran H.

- b. File Potensial EAM

2. Simulasi dengan program LAMMPS
 - a. Setelah *input* selesai dibuat, program LAMMPS, file fungsi potensial dan file *script input* diletakkan dalam satu folder.
 - b. Lalu program LAMMPS dijalankan (proses *heating*).
Simulasi dilakukan melalui *cmd*, dengan mengetikkan perinat “*lmp_win_no-mpi.exe < input file*“
 - c. Terdapat 3 file penting yang diperoleh dari proses *heating*, yaitu *heating_iron.log*, *heating_iron.dump*, dan *tmp.restart*.
 - d. File *heating_iron.log* berisi suhu simulasi, energi potensial, total energi, tekanan, dan volume. Hasil pada file ini kemudian digunakan untuk membuat grafik pengaruh kenaikan energi terhadap perubahan suhu material. File *heating_iron.dump* berisi koordinat atom dalam arah XYZ dan file *tmp.restart* merupakan posisi atom yang disimpan secara otomatis untuk digunakan dalam proses selanjutnya, yaitu proses *quenching*.

B. Proses *Quenching*

Langkah-langkah yang dilakukan pada proses *quenching* adalah

1. Menentukan input yang akan digunakan dalam simulasi

Terdapat 3 file input yang akan digunakan dalam proses *quenching*, yaitu:

- a. File *script input*

File ini berisi unit atom, suhu, jumlah step simulasi, dan perintah *read_restart*. Perintah *read_restart* ini berfungsi untuk membaca file *tmp.restart* yang dihasilkan dari proses *heating*. Untuk *script input* pada proses *quenching* dapat dilihat pada lampiran I.

- b. File Potensial EAM

- c. File *tmp.restart*

File ini berisi koordinat atom yang disimpan secara otomatis pada proses *heating*

2. Simulasi dengan Program LAMMPS

- a. Setelah *input* selesai dibuat, program LAMMPS, file fungsi potensial, file *script input* dan file *tmp.restart* diletakkan dalam satu folder.
- b. Lalu program LAMMPS dijalankan (proses *quenching*).
Simulasi dilakukan melalui *cmd*, lalu dengan menyetikkan perintah “*lmp_win_no-mpi.exe < input file*“
- c. Terdapat 2 file penting yang diperoleh dari proses *quenching*, yaitu *heating_iron.log* dan *heating_iron.dump*.
- d. File *heating_iron.log* berisi suhu simulasi, energi potensial, total energi, tekanan, dan volume. File *heating_iron.dump* berisi koordinat atom dalam arah XYZ. Hasil pada file *heating_iron.dump* ini dapat digunakan sebagai input pada program OVITO yang kemudian digunakan untuk menganalisis persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk.

3.4 Analisis Data

Langkah-langkah menganalisis hasil simulasi dengan menggunakan program OVITO adalah:

- a. Menemukan koordinat atom yang akan dianalisis dari hasil simulasi (proses *quenching*) yang tersimpan pada file *heating_iron.dump*.
- b. Program OVITO dijalankan dengan menggunakan *input* koordinat atom.
- c. Analisa jumlah struktur *icosahedral* yang terbentuk dengan mengaktifkan fasilitas CNA (*Common Neighbor Analysis*) yang terdapat pada menu *add modification*.
- d. Persentase struktur *icosahedral* dalam material dapat dihitung dengan cara

$$\text{Presentase icosahedral} = \frac{\text{Jumlah struktur icosahedral}}{\text{Jumlah atom}} \times 100\%$$

- e. Laju *quenching* (*rate*) dapat dihitung dengan cara

$$\text{Rate} = \frac{\text{Suhu Awal} - \text{Suhu Akhir}}{\text{waktu simulasi}}$$

BAB 5. PENUTUP

5.1 KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

1. Persentase struktur *icosahedral* mulai terbentuk ketika proses *quenching* dilakukan dengan suhu awal ≥ 2173 K.
2. Persentase struktur *icosahedral* mengalami penurunan ketika suhu awal *quenching* ditingkatkan hingga suhu 2773 K. Ketika suhu awal *quenching* terus ditingkatkan hingga mencapai suhu diatas 2873 K, persentase struktur *icosahedral* kembali meningkat.
3. Persentase struktur *icosahedral* mengalami penurunan ketika laju *quenching* dipercepat hingga kelajuan 22,45 K/ps. Ketika laju *quenching* dipercepat di atas 22,45 K/ps, persentase struktur *icosahedral* kembali mengalami peningkatan.
4. Persentase struktur *icosahedral* maksimum diperoleh ketika simulasi dilakukan dengan suhu awal *quenching* di sekitar suhu kritis material besi dengan laju *quenching* yang tidak terlalu cepat.

5.2 SARAN

Berdasarkan hasil penelitian, diperoleh bahwa terdapat hubungan antara suhu awal *quenching* dan laju *quenching* terhadap persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk. Karena penelitian ini masih menggunakan material besi murni, maka perlu dilakukan penelitian lebih lanjut dengan menggunakan besi paduan atau material paduan lain. Selain itu, perlu dilakukan kajian lebih lanjut untuk memahami fenomena meningkatnya persentase struktur *icosahedral* yang terbentuk pada material besi pada suhu tinggi di atas 2873 K.

DAFTAR PUSTAKA

- Adler, J. 2003. *Molecular Dynamics Simulation of Cooper Using Moldy*. Florida: Cornell University.
- Angelo, J. A. 2011. *Solid Matter*. New York: Fact on File.
- Arkundato, 2012. Disertasi: Studi Penghambatan Korosi Logam Besi Dalam Lingkungan Pendingin Reaktor Cepat Berbahan Pb dan PbBi Cair Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul. Bandung: Institut Teknologi Bandung.
- Avar, B., Göğebakan M., dan Yilmaz, F. 2008. *Characteization of the Icosahedral Quasicrystalline Phase in Rapidly Solidified Al-Cu-Fe Alloys*. München: Z. Kristallografi. 223 (731-734).
- Åkesson, P. 2013. Master Thesis: *Molecular Dynamics of the Adsorption of Organic Molecules on Organic Substrates*. Linköping: Linköping University Institute of Technology.
- Bendersky, L. dan Burton, B. P. 1986. *Nucleation behavior of Al-Mn icosahedral phase*. Maryland: National Institute of Standards and Technology.
- Callister, W., dan Retwisch, D. 2007. *Material Science and Engineering*. USA: John Wiley & Sons, Inc.
- Camprubi, G. 2011. *Mechanical properties at nano-level*. Sweden: Lund University.
- Chui, Y. 2007. *Dissertasi: Molecular Dynamics Study of structure and stability in Au nanoparticles*. Australia: RMIT University.
- Cleevand, C. L., Luedtke, W. D., dan Landman, U. 1999. *Melting of Gold Clusters*. Physical Review B. Georgia: Georgia Institut of Technolgy, Atlanta.
- Fuad, Z. 2012. *Thesis: Effect of Heat Treatment on Fatigule Life*. Pahang: Faculty of Mechanical Engineering, University Malaysia Pahang.

- Giancoli, D. C. 1998. *Physics: Fifth Edition*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc.
- Göğebakan, M., Avar, B., dan Uzun, O. 2009. *Quasicrystalline phase formation in the conventionally solidified Al-Cu-Fe system*. Poland: Journal of Material Science. Vol. 27.
- Guo-Jian, Qiang, Tie, Dong-Gang, Xiao, dan Ji-Cheng. 2008. *Molecular Dynamics Simulation of Icosahedral transformation in Solid Cu-Co Clusters*. China: China Physics Letter Vol. 26, No. 3.
- Haile, J. M. 1992. *Molecular Dynamics Simulation*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Jansen, T., Chapuis, G., dan de 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, Vol. 79 No. 8.
- Krebs, R. 2006. *The History and Use of Our Earth's Chemical Elements: A Reference Guide, Second Edition*. London: Greenword Press.
- Lidin, S. 2011. *The discovery of Quasicrystals*. Swedia: Lund University. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/2011/advanced-chemistryprize2011.pdf [14 Nopember 2015]
- Mendelev, M. I., Han, S., Srolovitz, D. J., Ackland, G. J., Sun, D. Y., dan Asta, M. 2003. *Development of New Interatomic Potentials Appropriate for Crystalline and liquid Iron*. *Philosophical Magazine* Vol. 83, No. 35, 3977-3994
- Murtiono, A. 2012. Pengaruh *Quenching* dan *Tempering* Terhadap Kekerasan dan Kekuatan Tarik Serta Struktur Mikro Baja Karbon untuk Mata Pisau Permanen Sawit. Fakultas Teknik, Universitas Sumatera Utara. Jurnal e-Dinamis, Volume II.
- Rapaport, D. C. 2004. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Satoh, A. 2011. *Introduction to Practice of Molecular Simulation*. Japan: Akita

Prefectural University.

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: Japan Institute of Metals.

Smallman, R. E. dan Bishop, R. J. 1999. *Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering*. London: Butterworth-Heinemann.

Smith, W. 1995. *Scienza e Tecnologia dei Materiali*. Italy: McGraw-Hill.

Sofyan, B. T. 2010. Pengantar Material Teknik. Jakarta: Salemba Teknik.

Stukowski, A. 2010. *Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – The Open Visualisation Tool*. USA: Lawrence Livermore National Laboratory.

Tipler, P. 1991. *Physics for Scientists and Engineers, Third Edition*. New York: Worth Publisher.

Wang, S. 2006. *Thesis: Molecular Dynamics Simulation of Grain Boundary Migration in Nanocrystalline Pd*. Beijing: University of Science and Technology.

Weber, S. 2004. Quasicrystals. <http://www.jcrystal.com/steffenweber/qc.html> [11 Nopember 2015].

Witoelar, A. 2002. Tugas Akhir: Perancangan dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard Jones. Bandung: Institut Teknologi Bandung.

Wu, S., Kramer, M., Fang, X., Wang, S., Wang, C., Ho, K., Ding, Z., dan Chen, L., 2012. *Icosahedral short-range order in amorphous Cu₈₀Si₂₀ by Ab Initio Molecular Dynamics Simulation Study*. Elsevier.

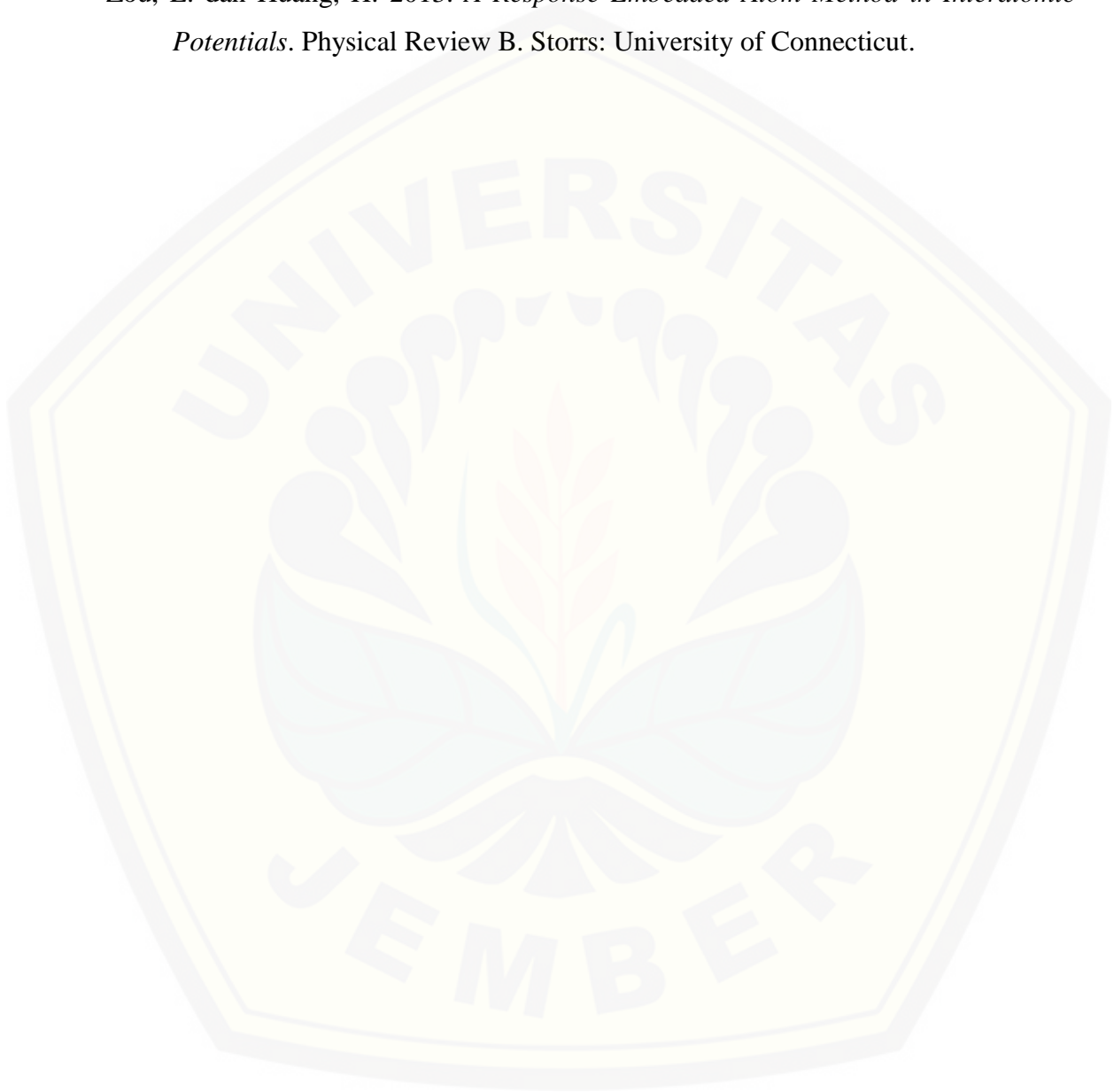
Young, H. D. dan Freedman, R. A. 2000. *University Physics 10th Edition*. Massachusetts: Addison-Wesley Longman, Inc.

Zetterling, F. 2003. *Dissertation: Phase Transformations in Computer Simulated Icosahedrally Ordered Phases*. Stockholm: Royal Institute of Technology.

Zimmerman, 2005. Heating Curve Showing Phase Change: melting, freezing, boiling,

condensing. <http://mrzimmerman.org/New%20Folder/HW/phases.gif> [5
Nopember 2015].

Zou, L. dan Huang, H. 2013. *A Response Embedded Atom Method in Interatomic Potentials*. Physical Review B. Storrs: University of Connecticut.



LAMPIRAN

LAMPIRAN A. KOORDINAT STRUKTUR *ICOSAHEDRAL*

No	Tipe Atom	Koordinat X	Koordinat Y	Koordinat Z
1	Fe	5,47721	10,6272	15,4567
2	Fe	8,2138	11,8234	12,6506
3	Fe	6,12765	10,626	12,9829
4	Fe	8,28923	10,017	14,5356
5	Fe	7,07279	12,3445	14,7681
6	Fe	9,50691	12,1913	15,0485
7	Fe	4,75627	12,4969	14,1717
8	Fe	5,79888	14,9132	15,1279
9	Fe	6,03588	13,4927	12,4356
10	Fe	8,2299	14,0899	13,469
11	Fe	7,76937	11,2228	17,2166
12	Fe	5,64455	13,0854	16,7174
13	Fe	8,30698	13,746	16,4333

**LAMPIRAN B. TABEL STRUKTUR MATERIAL BESI YANG DIHASILKAN
PADA SUHU AKHIR PROSES HEATING**

Suhu (K)	BCC (Jumlah)	HCP (Jumlah)	<i>Icosahedral</i> (Jumlah)
2073	756	0	0
2173	0	0	7
2273	0	0	6
2373	0	0	0
2473	0	0	2
2573	0	0	1
2673	0	0	1
2773	0	0	2
2873	0	0	2
2973	0	1	2
3073	0	0	1
3173	0	0	0

LAMPIRAN C. TABEL PENGARUH SUHU AWAL *QUENCHING* TERHADAP PERSENTASE STRUKTUR *ICOSAHEDRAL*

C.1 Suhu Awal *Quenching* 2173 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2173	62,5	30,4	3,140740741
2173	75	25,33333333	3,62962963
2173	87,5	21,71428571	4,044444444
2173	100	19	4,222222222
2173	112,5	16,88888889	3,451851852
2173	125	15,2	3,940740741
2173	137,5	13,81818182	4,385185185
2173	150	12,66666667	4,222222222
2173	162,5	11,69230769	4,02962963
2173	175	10,85714286	4,266666667
2173	187,5	10,13333333	4,02962963

C.2 Suhu Awal *Quenching* 2273 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2273	62,5	32	3,792592593
2273	75	26,66666667	4,444444444
2273	87,5	22,85714286	3,585185185
2273	100	20	4,02962963
2273	112,5	17,77777778	4
2273	125	16	3,703703704
2273	137,5	14,54545455	3,881481481
2273	150	13,33333333	4,444444444
2273	162,5	12,30769231	3,792592593
2273	175	11,42857143	3,318518519
2273	187,5	10,66666667	4,118518519

C.3 Suhu Awal *Quenching* 2373 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2373	62,5	33,6	3,688888889
2373	75	28	3,748148148
2373	87,5	24	4,192592593
2373	100	21	3,466666667
2373	112,5	18,66666667	3,762962963
2373	125	16,8	3,555555556
2373	137,5	15,27272727	4,074074074
2373	150	14	3,540740741
2373	162,5	12,92307692	4,133333333
2373	175	12	4,177777778
2373	187,5	11,2	4

C.4 Suhu Awal *Quenching* 2473 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2473	62,5	35,2	4,162962963
2473	75	29,33333333	3,525925926
2473	87,5	25,14285714	3,866666667
2473	100	22	3,6
2473	112,5	19,55555556	3,096296296
2473	125	17,6	3,807407407
2473	137,5	16	3,851851852
2473	150	14,66666667	3,851851852
2473	162,5	13,53846154	4,103703704
2473	175	12,57142857	3,866666667
2473	187,5	11,73333333	4,148148148

C.5 Suhu Awal *Quenching* 2573 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2573	62,5	36,8	3,762962963
2573	75	30,66666667	3,22962963
2573	87,5	26,28571429	3,792592593
2573	100	23	3,703703704
2573	112,5	20,44444444	3,777777778
2573	125	18,4	3,718518519
2573	137,5	16,72727273	4,607407407
2573	150	15,33333333	3,896296296
2573	162,5	14,15384615	3,525925926
2573	175	13,14285714	3,422222222
2573	187,5	12,26666667	4,37037037

C.6 Suhu Awal *Quenching* 2673 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2673	62,5	38,4	3,540740741
2673	75	32	3,940740741
2673	87,5	27,42857143	3,288888889
2673	100	24	4
2673	112,5	21,33333333	4,074074074
2673	125	19,2	3,940740741
2673	137,5	17,45454545	3,659259259
2673	150	16	3,97037037
2673	162,5	14,76923077	3,437037037
2673	175	13,71428571	3,644444444
2673	187,5	12,8	3,362962963

C.7 Suhu Awal *Quenching* 2773 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2773	62,5	40	3,377777778
2773	75	33,33333333	3,348148148
2773	87,5	28,57142857	3,62962963
2773	100	25	4,014814815
2773	112,5	22,22222222	3,407407407
2773	125	20	4,340740741
2773	137,5	18,18181818	3,644444444
2773	150	16,66666667	4,059259259
2773	162,5	15,38461538	3,022222222
2773	175	14,28571429	4,133333333
2773	187,5	13,33333333	3,688888889

C.8 Suhu Awal *Quenching* 2873 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2873	62,5	41,6	3,466666667
2873	75	34,66666667	4,207407407
2873	87,5	29,71428571	3,111111111
2873	100	26	3,822222222
2873	112,5	23,11111111	3,496296296
2873	125	20,8	3,422222222
2873	137,5	18,90909091	3,525925926
2873	150	17,33333333	4,103703704
2873	162,5	16	3,985185185
2873	175	14,85714286	3,837037037
2873	187,5	13,86666667	4,4

C.9 Suhu Awal *Quenching* 2973 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2973	62,5	43,2	3,614814815
2973	75	36	3,703703704
2973	87,5	30,85714	3,688888889
2973	100	27	3,866666667
2973	112,5	24	4,014814815
2973	125	21,6	3,481481481
2973	137,5	19,63636	3,244444444
2973	150	18	3,762962963
2973	162,5	16,61538	3,62962963
2973	175	15,42857	4,222222222
2973	187,5	14,4	4,725925926

C.10 Suhu Awal *Quenching* 3073 K

Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
3073	62,5	44,8	3,066666667
3073	75	37,33333333	3,614814815
3073	87,5	32	3,777777778
3073	100	28	3,777777778
3073	112,5	24,88888889	4,02962963
3073	125	22,4	3,881481481
3073	137,5	20,36363636	3,866666667
3073	150	18,66666667	3,955555556
3073	162,5	17,23076923	4,207407407
3073	175	16	3,659259259
3073	187,5	14,93333333	4,103703704

C.11 Suhu Awal *Quenching* 3173 K

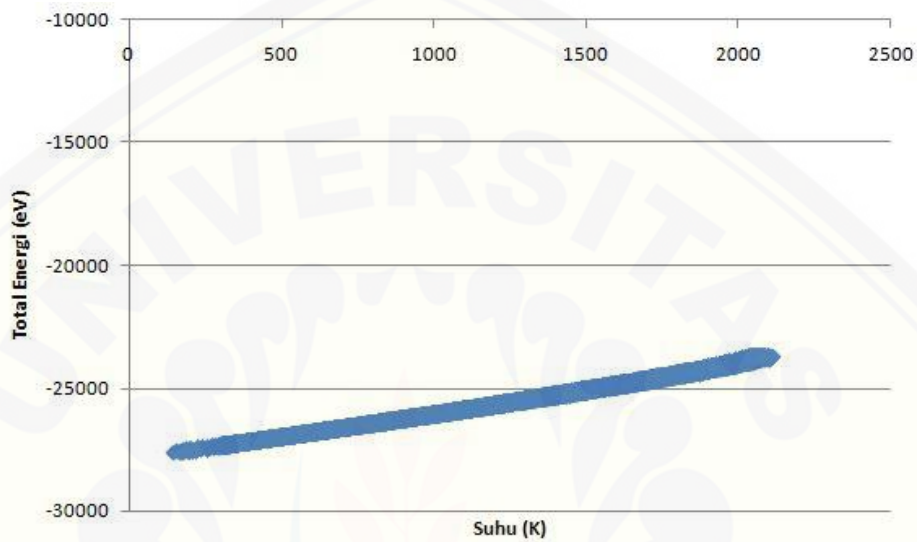
Suhu Awal (K)	Waktu (ps)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
3173	62,5	46,4	3,777777778
3173	75	38,66666667	3,511111111
3173	87,5	33,14285714	4,103703704
3173	100	29	3,97037037
3173	112,5	25,77777778	3,674074074
3173	125	23,2	3,733333333
3173	137,5	21,09090909	4,044444444
3173	150	19,33333333	3,57037037
3173	162,5	17,84615385	3,955555556
3173	175	16,57142857	3,688888889
3173	187,5	15,46666667	4,162962963

LAMPIRAN D. TABEL PENGARUH SUHU AWAL *QUENCHING* DAN LAJU *QUENCHING* RATA-RATA TERHADAP PERSENTASE STRUKTUR *ICOSAHEDRAL*

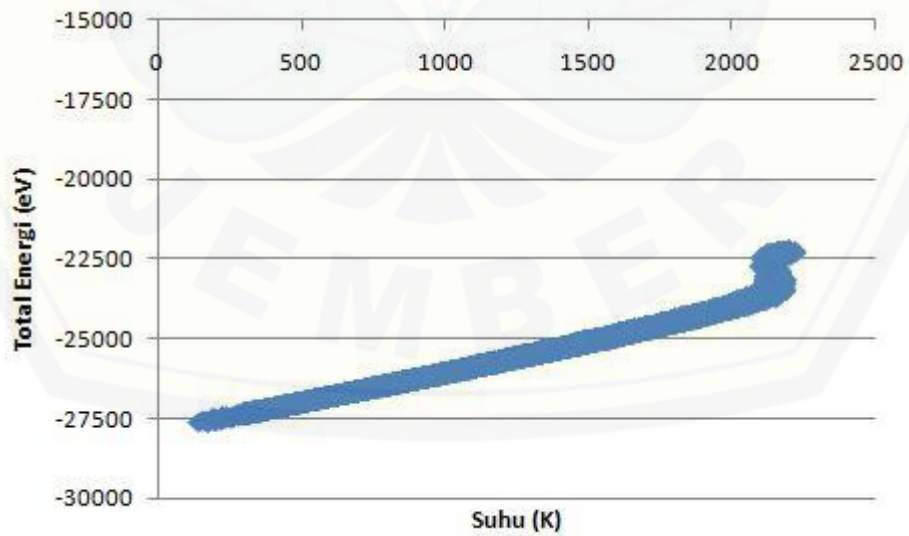
Suhu (K)	Laju <i>Quenching</i> (K/ps)	Persentase Struktur <i>Icosahedral</i> (%)
2173	17,06401275	3,942087542
2273	17,96211869	3,919191919
2373	18,86022462	3,849158249
2473	19,75833056	3,807407407
2573	20,65643649	3,800673401
2673	21,55454243	3,714478114
2773	22,45264836	3,696969697
2873	23,3507543	3,761616162
2973	24,24886023	3,814141414
3073	25,14696617	3,812794613
3173	26,0450721	3,835690236

LAMPIRAN E. GRAFIK PERUBAHAN TOTAL ENERGI SISTEM TERHADAP SUHU MATERIAL BESI

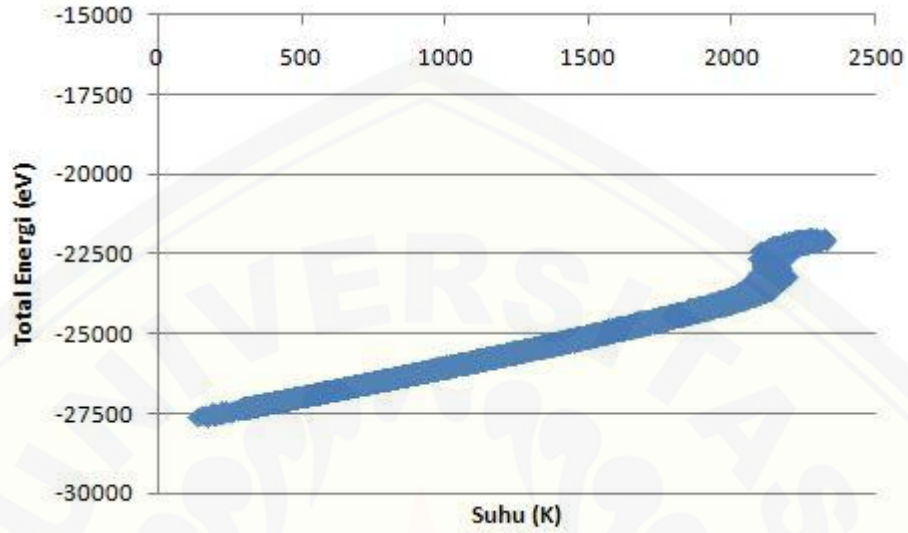
E.1 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2073 K



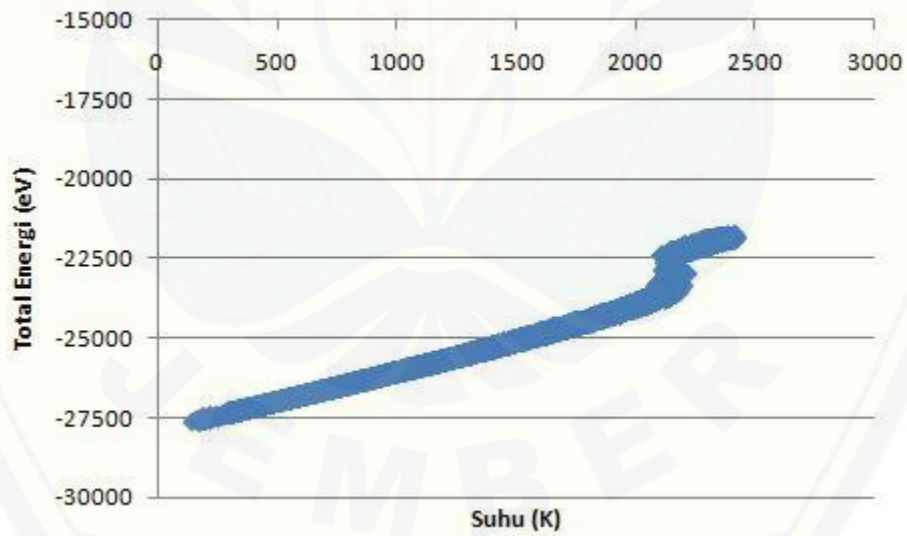
E.2 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2173 K



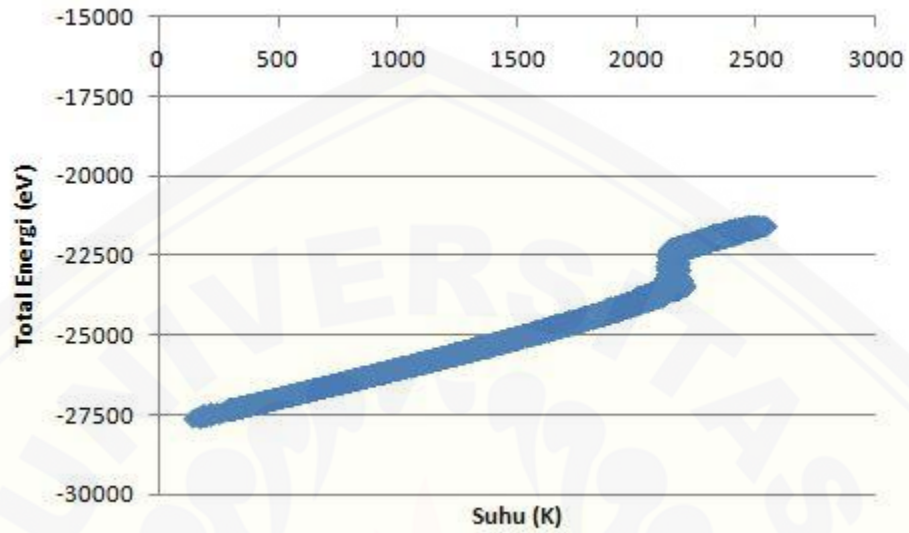
E.3 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2273 K



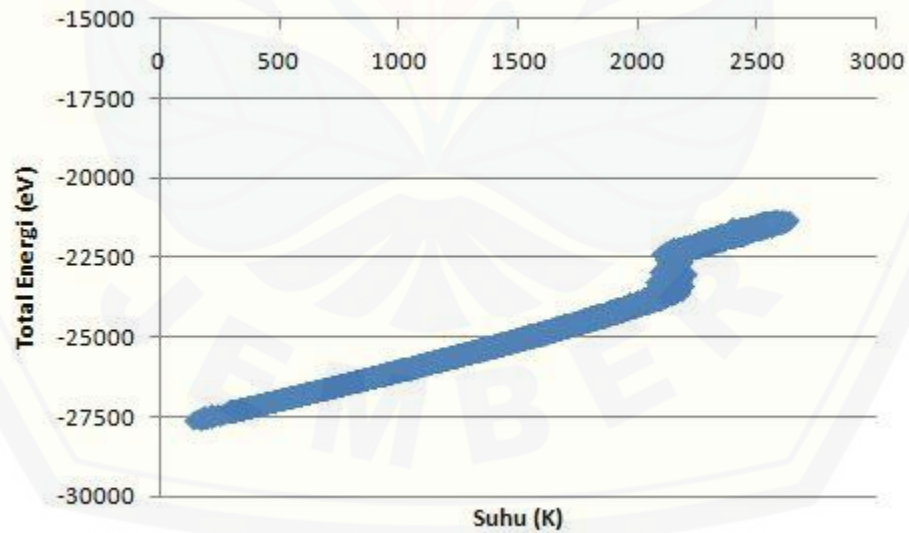
E.4 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2373 K



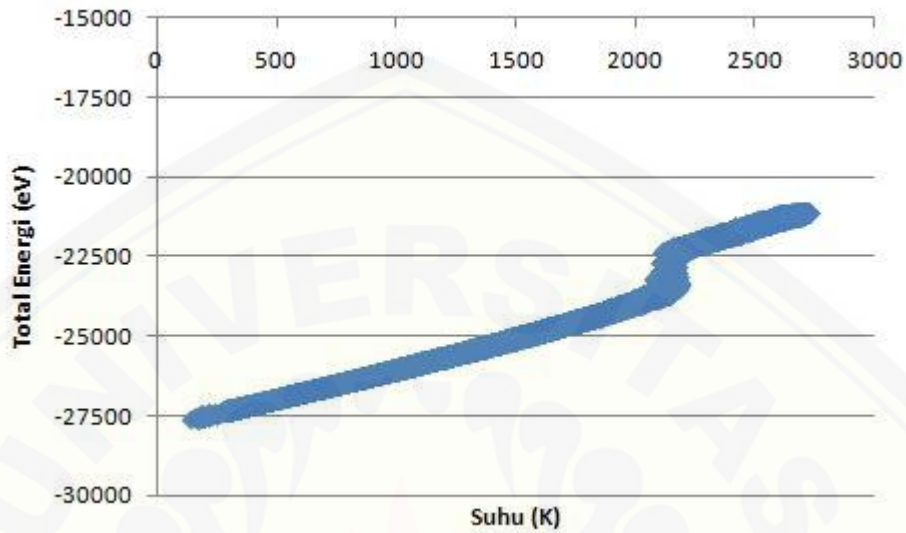
E.5 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2473 K



E.6 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2573 K



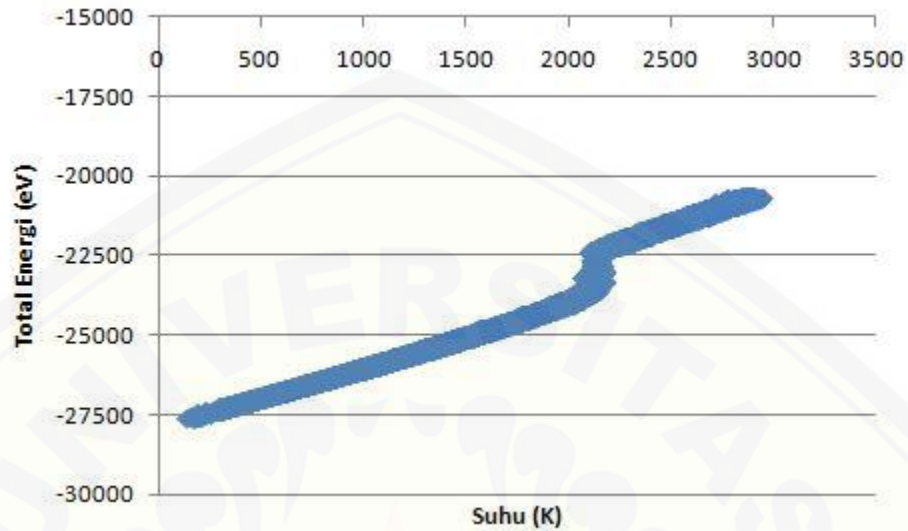
E.7 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2673 K



E.8 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2773 K



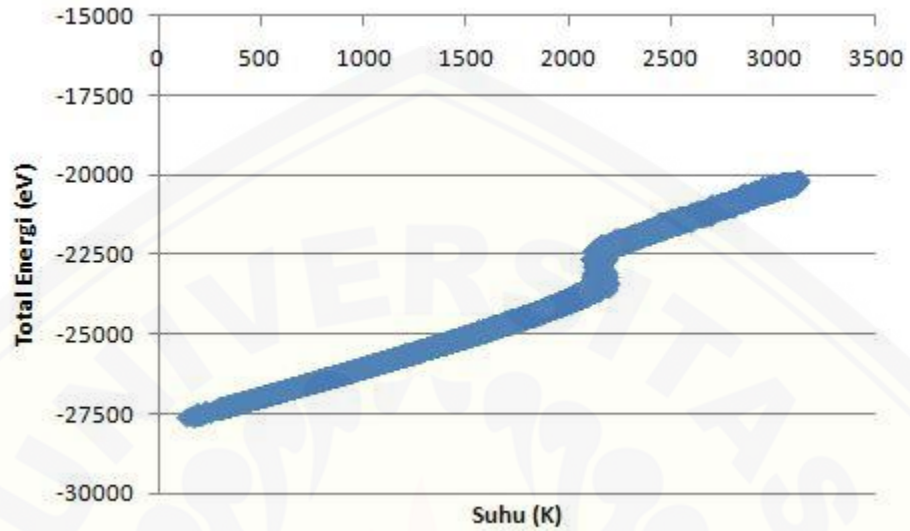
E.9 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2873 K



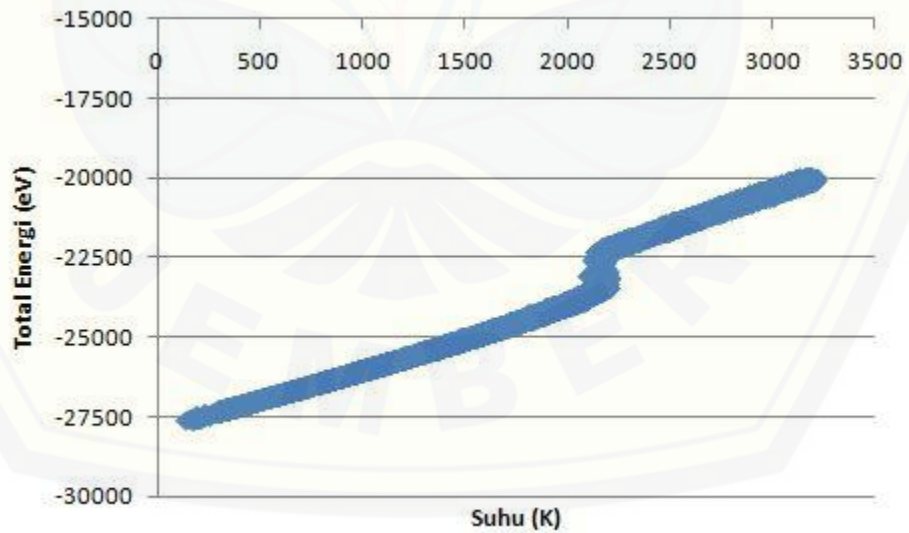
E.10 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 2973 K



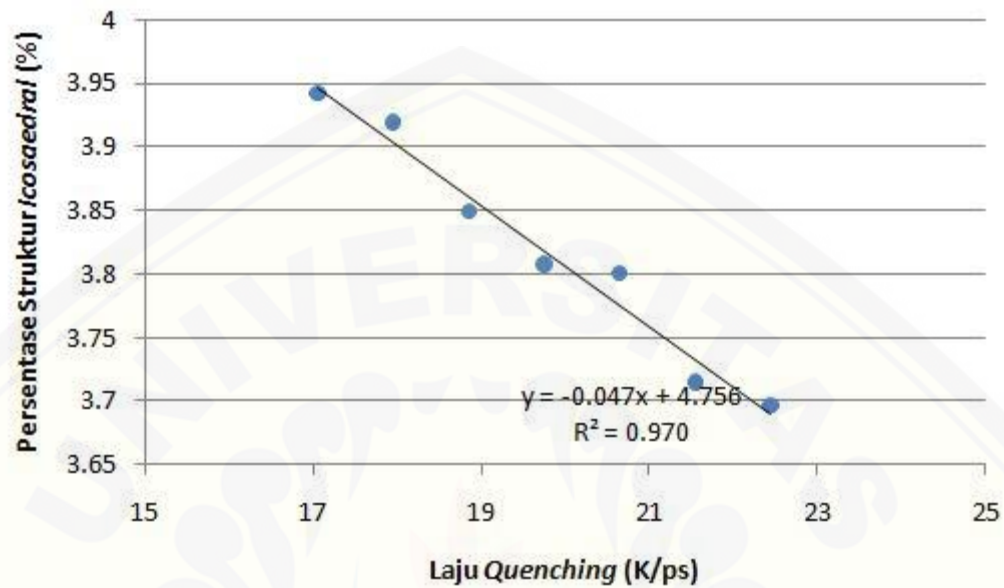
E.11 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 3073 K



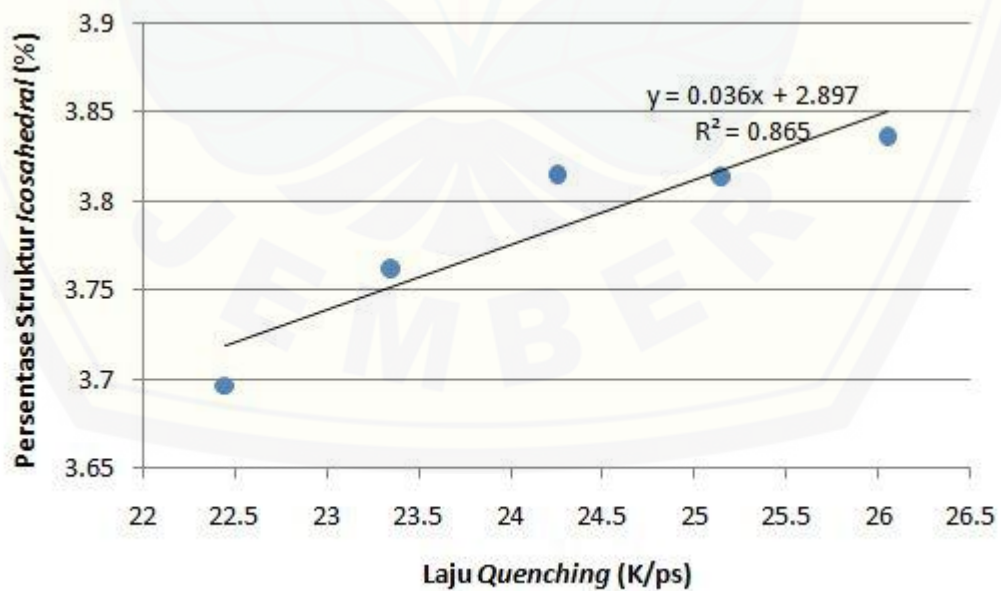
E.12 Perubahan Total Energi Sistem Terhadap Suhu Material Besi pada Suhu 3173 K



LAMPIRAN F. GRAFIK PERSAMAAN PERSENTASE STRUKTUR ICOSAHEDRAL UNTUK SUHU 2173 K - 2773 K



LAMPIRAN G. GRAFIK PERSAMAAN PERSENTASE STRUKTUR ICOSAHEDRAL UNTUK SUHU 2873 K - 3173 K



LAMPIRAN H. SCRIPT INPUT UNTUK PROSES HEATING

```

# Heating of Iron Materials
# 28/09/2015/Nikodemus Umbu Janga Hauwali

log                heating_iron.log

units             metal
atom_style        atomic
boundary          p p p

lattice           bcc 2.8552

region            mycube block 0 15 0 15 0 15
create_box        1 mycube
create_atoms      1 box
mass              1 55.845

pair_style         eam/alloy
pair_coeff         * * Fe_5.eam.fs Fe

neighbor          0.3 bin
neigh_modify      every 20 delay 0 check yes

compute           ep all pe/atom
dump              mydump all custom 10000 heating_iron,dump
                  type x y z c_ep
dump_modify       mydump append yes

thermo            10
thermo_style       custom step temp pe etotal press vol
thermo_modify     line one flush yes format 1 "Fe %8lu" format float
                  "%20.10g"

velocity          all create 300.15 87287

# Nosé-Hoover
fix               myfix all npt temp 300.15 2173.15 0.05 iso 0.0 0.0 0.1

restart           250000 tmp,restart
run               250000

```

LAMPIRAN I. SCRIPT INPUT UNTUK PROSES *QUENCHING*

```
# Quenching of Iron Materials
# 29/09/2015/Nikodemus Umbu Janga Hauwali

log                quenching_iron.log

units             metal
atom_style        atomic
boundary          p p p

read_restart      tmp.restart.250000

pair_style         eam/alloy
pair_coeff         * * Fe_5.eam.fs Fe

neighbor          0.3 bin
neigh_modify      every 20 delay 0 check yes

compute           ep all pe/atom
dump              mydump all custom 500 quenching_iron,dump
                  type x y z c_ep
dump_modify       mydump append yes

thermo            10
thermo_style      custom step temp pe etotal press vol
thermo_modify     line one flush yes format 1 "Fe %8lu" format float
                  "%20.10g"

velocity          all create 2173.15 87287

# Nosé-Hoover
fix              myfix all npt temp 2173.15 273.15 0.05 iso 0.0 0.0 0.1

run              50000
```