



**PERHITUNGAN MODULUS YOUNG BAHAN LOGAM
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh

Fitriana Faizatu Zahroh

NIM 121810201043

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

2017



**PERHITUNGAN MODULUS YOUNG BAHAN LOGAM
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

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

Oleh

Fitriana Faizatu Zahroh

NIM 121810201043

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2017**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. kedua orang tuaku tercinta Mustadjib dan Jariati, yang selalu menyayangiku dan mendukungku saat suka maupun duka;
2. kakakku Yunita Rahmawati yang selalu memberi semangat dan motivasi;
3. kakek dan nenekku H. Dawam dan Alm. Hj. Aisyah, paman Isa Anshori dan paman Taufiq Shidqi, bibi Musyati dan bibi Muniroh yang telah menyayangiku dan mendukungku hingga saat ini;
4. guru-guru di TK RA Muslimat Ponorogo, SDN 1 Brotonegaran Ponorogo, SMP Ma'arif 1 Ponorogo, SMA Negeri 2 Ponorogo, serta dosen-dosen di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember yang telah mendidik dan memberikan ilmu dengan penuh perhatian dan kesabaran;
5. Almamater tercinta Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

MOTO

“Sesungguhnya sesudah kesulitan itu ada kemudahan. Maka apabila engkau telah selesai (dari sesuatu urusan), tetaplah bekerja keras (untuk urusan yang lain)”

(Terjemahan Q.S. Al-Insyirah ayat 6-7)^{*)}

“Jangan kamu berputus asa dari rahmat Allah”

(Penggalan Terjemahan Q.S. Yusuf ayat 87)^{*)}



^{*)} Departemen Agama Republik Indonesia. 2006. *Al-Qur'an Tajwid dan Terjemahannya*. Bandung: PT Syaamil Cipta Media.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Fitriana Faizatu Zahroh

NIM : 121810201043

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Perhitungan Modulus Young Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang telah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan di institusi mana pun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

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

Jember, 26 Mei 2017

Yang menyatakan,

Fitriana Faizatu Zahroh

NIM 121810201043

SKRIPSI

**PERHITUNGAN MODULUS YOUNG BAHAN LOGAM
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh

Fitriana Faizatu Zahroh

NIM 121810201043

Pembimbing:

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

Dosen Pembimbing Anggota : Endhah Purwandari, S.Si., M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Perhitungan Modulus Young Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul” telah diuji dan disahkan oleh Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember pada:

hari, tanggal :

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

Tim Penguji;

Ketua (DPU),

Sekretaris (DPA),

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

Endhah Purwandari, S.Si., M.Si.
NIP 198111112005012001
Penguji II,

Ir. Misto, M.Si.
NIP 195911211991031002

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

Mengesahkan
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember

Drs. Sujito, Ph.D
NIP 196102041987111001

RINGKASAN

Perhitungan Modulus Young Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul; Fitriana Faizatu Zahroh, 121810201043; 2017: 67 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Pengembangan material baru dengan memanfaatkan metode komputasi dan simulasi, merupakan salah satu solusi agar riset material dapat lebih dioptimalkan dan diefisiensikan sebelum sintesis eksperimen langsung. Penelitian material dengan meninjau struktur mikroskopik bahan dapat digunakan untuk memprediksi material secara makroskopik. Dengan memodelkan dan mensimulasikan bahan dalam ukuran mikro maka sifat-sifat fisis makro bahan dapat diperkirakan, contohnya informasi mengenai nilai modulus Young bahan logam tembaga, perak, emas, aluminium, dan nikel yang menunjukkan ketahanan material terhadap deformasi elastis akibat gaya eksternal. Nilai modulus Young menunjukkan tingkat kekakuan bahan.

Secara grafis, nilai modulus Young dapat dihitung menggunakan metode *offset*, yaitu dengan menentukan daerah elastis berdasarkan perpotongan garis lurus yang dibentuk pada regangan 0,2% terhadap kurva tegangan-regangan. Bahan dengan nilai modulus Young yang besar secara relatif sulit untuk memanjang sehingga diperlukan tegangan yang sangat besar untuk menghasilkan deformasi. Perhitungan nilai modulus Young ini dilakukan dengan menggunakan metode dinamika molekul berbasis potensial Morse, dimana metode ini merupakan salah satu metode komputasi fisika yang umum digunakan untuk mensimulasikan pergerakan atom dan molekul dengan memecahkan solusi persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai untuk bahan yang diteliti. Potensial Morse dipilih karena cocok digunakan untuk logam dalam fase padat. Dalam penelitian ini, dilakukan penentuan nilai parameter potensial Morse yang sesuai melalui proses *fitting* agar mendapatkan nilai modulus Young

yang sesuai dengan data eksperimen, yaitu pada temperatur 300 K. Sistem dimodelkan dalam sebuah kotak simulasi dengan ukuran $30a \times 30a \times 30a$.

Logam nikel memiliki nilai modulus Young yang paling besar yaitu sebesar 209,2 GPa. Sedangkan untuk logam tembaga, perak, emas, dan aluminium diperoleh nilai modulus Young sebesar 110,8 GPa; 83,8 GPa; 79,2 GPa; dan 70,3 GPa. Berdasarkan hasil visualisasi menggunakan program OVITO, terlihat bahwa logam perak, emas, dan aluminium mengalami proses patah (*fracture*) di akhir simulasi. Hal itu ditunjukkan oleh kurva tegangan-regangan yang cenderung menurun menuju tegangan nol dengan asumsi bahwa bahan telah kehilangan kemampuan untuk menerima beban. Sedangkan nikel dan tembaga secara umum memiliki tingkat keuletan dan kemampuan dalam mempertahankan diri terhadap deformasi yang lebih baik dibandingkan bahan logam lain, karena kurva tegangan-regangan yang dihasilkan tidak menuju nol. Selain pada temperatur 300 K, prediksi nilai modulus Young bahan dilakukan terhadap variasi temperatur yang berbeda untuk masing masing bahan dimana temperatur berpengaruh secara signifikan terhadap kekuatan dan keuletannya. Semakin tinggi temperatur bahan, akan menyebabkan nilai modulus Young semakin menurun.

Logam nikel memiliki ketahanan terhadap temperatur yang baik. Hal itu dibuktikan dengan perubahan fase logam nikel yang mendekati titik lelehnya. Berbeda halnya dengan keempat bahan lain, yang mengalami perubahan fase jauh sebelum mencapai titik lelehnya. Ini menunjukkan, bahwa logam tembaga, perak, emas, dan aluminium memiliki ketahanan terhadap temperatur yang tidak sebaik nikel. Dalam kasus tersebut, juga dipengaruhi oleh ketepatan nilai parameter potensial Morse yang digunakan. Keberhasilan penelitian yang dilakukan, dapat ditinjau berdasarkan nilai modulus Young kelima bahan sesuai dengan hasil eksperimen yaitu dengan nilai diskrepansi yang kurang dari 2%. Selain itu, ketepatan pemilihan fungsi potensial interatomik berdasarkan parameter yang sesuai, menjadi faktor penting dalam memperoleh hasil yang tepat dan akurat, dimana dalam penelitian ini menggunakan potensial Morse yang cocok untuk material logam dalam fase padat.

PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT, atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Perhitungan Modulus Elastisitas Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul”. 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 terima kasih kepada:

1. Drs. Sujito, Ph.D, selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
2. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama yang dengan sabar telah meluangkan waktu, tenaga, dan pikiran dalam penulisan skripsi ini;
3. Endhah Purwandari, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran, perhatian, arahan, dan perbaikan dalam penyelesaian skripsi ini;
4. Ir. Misto, M.Si., selaku Dosen Penguji I dan Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si., selaku Dosen Penguji II yang telah meluangkan waktunya guna menguji serta memberikan kritik dan saran demi kesempurnaan skripsi ini;
5. Dosen Jurusan Fisika FMIPA UNEJ yang telah mendidik dan memberikan ilmu dan pengetahuan;
6. Sahabat Alm. Wiwik, Ufi, Diana, Elfa, Ernik, Wulan, Fitri, Yuli, Rini, Arofah, Mita, Febri, Ridhlo, Zainul, Alfian, Miftahul Jannah, Abul, yang telah mengajarkan arti persahabatan dan memberikan dukungan dan atas kebersamaannya;
7. Keluarga kos biru jalan Kalimantan X no. 137 Jember atas kebersamaannya;
8. Sahabat LORENTZ'12 yang telah mengajarkan tentang arti persahabatan;
9. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu.

Sejauh apapun usaha yang telah dilakukan penulis, tentunya masih terdapat beberapa kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap semoga skripsi ini dapat bermanfaat yang berkelanjutan. Amin.

Jember, 26 Mei 2017

Penulis



DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSEMBAHAN	ii
HALAMAN MOTO	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN PEMBIMBING	v
HALAMAN PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xviii
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah.....	3
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan	4
1.5 Manfaat	4
BAB 2. DASAR TEORI	5
2.1 Modulus Young	5
2.2 Struktur Kristal	8
a. Struktur Kristal SC (<i>Simple Cubic</i>)	9
b. Struktur Kristal BCC (<i>Body Center Cubic</i>)	9
c. Struktur Kristal FCC (<i>Face Center Cubic</i>)	9
2.3 Logam.....	10
a. Tembaga (Cu)	10

b. Perak (Ag)	11
c. Emas (Au)	11
d. Aluminium (Al)	11
e. Nikel (Ni)	12
2.4 Metode Dinamika Molekul	12
2.4.1 Interaksi Antar Atom (Molekul)	13
2.4.2 Potensial Morse	15
2.4.3 Persamaan Gerak	18
2.4.4 Ensemble	19
a. Ensemble Mikrokanonikal (N, V, E)	19
b. Ensemble Kanonikal (N, V, T)	19
c. Ensemble Isobarik-Isotermal (N, P, T)	19
2.5 Program <i>Molecular Dynamics</i>	20
2.5.1 LAMMPS	20
2.5.2 OVITO	21
BAB 3. METODE PENELITIAN	22
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	22
3.2 Alat Penelitian	22
3.3 Diagram Alir Penelitian	22
a. Studi Pustaka	25
b. Pembuatan Model Sistem Simulasi.....	25
c. <i>Input</i> Simulasi	25
d. <i>Running</i> Simulasi	28
e. <i>Data Output</i>	29
f. Perhitungan Nilai Modulus Young	29
3.4 Analisis Data	30
3.4.1 Koreksi Parameter Potensial Morse	31
3.4.2 Perhitungan Nilai Modulus Young Logam Murni pada Temperatur 300 K	31
3.4.3 Perhitungan Nilai Modulus Young Logam Murni dengan Variasi Temperatur	32

BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	34
4.1 Koreksi Parameter Potensial Morse berdasarkan Nilai D, , dan r_0	34
4.2 Nilai Modulus Young Logam Murni pada Temperatur 300K.....	37
4.2.1 Analisis Besaran Fisis pada Sistem Kesetimbangan	37
4.2.2 Penentuan Nilai Modulus Young pada Sistem Deformasi	42
4.2.3 Visualisasi Hasil Uji Tarik pada Logam Murni	50
4.3 Nilai Modulus Young Logam Murni pada Berbagai Variasi Temperatur	54
BAB 5. PENUTUP	67
5.1 Kesimpulan	67
5.2 Saran	68
DAFTAR PUSTAKA	69
LAMPIRAN	73

DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Nilai modulus Young beberapa logam murni.....	7
2.2 Daftar jarak antar atom terdekat beberapa unsur	10
2.3 Parameter potensial Morse logam kubik	16
2.4 Parameter potensial Morse yang sesuai untuk beberapa logam murni	17
2.5 Parameter potensial Morse untuk logam paduan pada logam kubik	17
3.1 <i>Input</i> simulasi dengan program LAMMPS	26
4.1 Parameter potensial Morse terhadap nilai modulus Young bahan logam murni	35
4.2 Parameter potensial Morse beberapa logam murni yang telah dikoreksi	36
4.3 Nilai modulus Young bahan logam murni pada temperatur 300 K	48

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Atom logam padat yang didistribusikan ke kisi-kisi tiga dimensi secara berulang	5
2.2 Struktur kristal <i>simple cubic</i>	9
2.3 Struktur kristal <i>body centered cubic</i>	9
2.4 Struktur kristal <i>face centered cubic</i>	9
2.5 Ketergantungan antara interaksi tarik-menarik (<i>attractive</i>) dan interaksi tolak-menolak (<i>repulsive</i>) antar atom terhadap gaya interaksi	14
2.6 Ketergantungan antara interaksi tarik-menarik (<i>attractive</i>) dan interaksi tolak- menolak (<i>repulsive</i>) antar atom terhadap potensial energi	14
2.7 Tampilan awal program LAMMPS	20
2.8 Tampilan awal program OVITO	21
2.9 Kode warna struktur kristal pada CNA	21
3.1 Prosedur penelitian pada temperatur 300 K	23
3.2 Prosedur penelitian dengan variasi temperatur hingga titik leleh bahan	24
3.3 Tampilan <i>command window</i> pada cmd	28
3.4 Kurva sistem deformasi logam aluminium berbasis potensial EAM	30
3.5 Kurva sistem kesetimbangan logam aluminium berbasis potensial EAM	30
4.1 Kurva sistem kesetimbangan ditinjau dari energi kinetik logam murni pada temperatur 300 K	38
4.2 Kurva sistem kesetimbangan ditinjau dari energi potensial logam murni pada temperatur 300 K	39
4.3 Kurva sistem kesetimbangan ditinjau dari temperatur sistem pada 300 K.....	40

4.4	Kurva sistem kesetimbangan logam murni ditinjau dari volume sistem pada temperatur 300 K	41
4.5	Kurva sistem kesetimbangan logam murni ditinjau dari tekanan sistem pada temperatur 300 K	42
4.6	Kurva tegangan-regangan logam tembaga murni pada temperatur 300 K	43
4.7	Kurva tegangan-regangan logam perak murni pada temperatur 300 K	44
4.8	Kurva tegangan-regangan logam emas murni pada temperatur 300 K	45
4.9	Kurva tegangan-regangan logam aluminium murni pada temperatur 300 K	46
4.10	Kurva tegangan-regangan logam nikel murni pada temperatur 300 K	47
4.11	Visualisasi sistem kelima bahan sebelum diberikan pembebanan pada temperatur 300 K	51
4.12	Visualisasi sistem logam tembaga di daerah kekuatan tarik pada temperatur 300 K	51
4.13	Visualisasi sistem logam perak di daerah kekuatan tarik pada temperatur 300 K	52
4.14	Visualisasi sistem logam emas di daerah kekuatan tarik pada temperatur 300 K	52
4.15	Visualisasi sistem logam aluminium di daerah kekuatan tarik pada temperatur 300 K	53
4.16	Visualisasi sistem logam nikel di daerah kekuatan tarik pada temperatur 300 K	54
4.17	Kurva tegangan-regangan pada logam tembaga murni dengan variasi temperatur	55
4.18	Kurva tegangan-regangan pada logam perak murni dengan variasi temperatur	56

4.19 Kurva tegangan-regangan pada logam emas murni dengan variasi temperatur	58
4.20 Kurva tegangan-regangan pada logam aluminium murni dengan variasi temperatur	59
4.21 Kurva tegangan-regangan pada logam nikel murni dengan variasi temperatur	60
4.22 Hubungan nilai modulus Young logam murni terhadap variasi temperatur	62
4.23 Hubungan hasil simulasi modulus Young terhadap variasi temperatur pada logam aluminium berdasarkan hasil simulasi dengan eksperimen	63
4.24 Visualisasi bahan nikel sebelum dan sesudah diberikan pembebanan pada temperatur 300 K	64
4.25 Visualisasi bahan nikel sebelum dan sesudah diberikan pembebanan pada temperatur 1723 K	65

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1.3a Tabel Nilai Modulus Young Logam Nikel dengan Variasi Ukuran pada Temperatur 300 K	73
Lampiran 1.3b Kurva Tegangan-Regangan Logam Nikel dengan Variasi Ukuran pada Temperatur 300 K.....	73
Lampiran 1.3c Tabel Persentase Struktur Kristal Logam Nikel dengan Variasi Ukuran pada Temperatur 300 K	74
Lampiran 1.3d Tabel Nilai Modulus Young Logam Nikel dengan Variasi Laju Deformasi pada Temperatur 300 K	75
Lampiran 1.3e Kurva Tegangan-Regangan Logam Nikel dengan Variasi Laju Deformasi pada Temperatur 300 K	75
Lampiran 1.3f Tabel Persentase Struktur Kristal Logam Nikel terhadap Variasi Laju Deformasi pada Temperatur 300 K	76
Lampiran 1.3g Visualisasi Pengaruh Laju Deformasi terhadap Sistem Logam Murni pada Temperatur 300 K	76
Lampiran 3.1 <i>File Input</i> Simulasi Menggunakan Program LAMMPS	79
Lampiran 4.3a Tabel Nilai Modulus Young Logam Murni dengan Variasi Temperatur	83
Lampiran 4.3b Visualisasi Pengaruh Temperatur terhadap Sistem Bahan Logam Murni	84
Lampiran 4.3c Tabel Kekuatan Tarik Logam Murni terhadap Variasi Temperatur	88
Lampiran 4.3d Tabel Persentase Struktur Kristal Logam Murni terhadap Variasi Temperatur	91

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Kemajuan teknologi dewasa ini tidak terlepas dari kemajuan dibidang Sains, terutama bidang material. Riset-riset baru mengenai sintesis dan rekayasa sifat-sifat material sangat penting untuk selalu dilakukan baik dari segi pengembangan teori maupun terapan agar dapat dimanfaatkan untuk kesejahteraan umat khususnya di bidang komputasi material yang dewasa ini sangat berkembang pesat. Pengembangan material secara eksperimen sering memerlukan sintesis yang berulang-ulang dan memakan waktu cukup lama serta memerlukan biaya yang tidak sedikit untuk mencapai hasil yang diinginkan. Dengan metode komputasi menggunakan metode-metode numerik, maka riset material dapat lebih dioptimalkan dan diefisiensikan sebelum sintesis eksperimen langsung yang memerlukan banyak waktu, alat dan biaya. Penelitian material secara mikroskopik juga sangat penting karena berhubungan erat dengan prediksi sifat-sifat material secara makroskopik. Pada skala mikroskopik, sifat mekanik material berkaitan erat dengan struktur atom penyusunnya, bahkan dalam skala nano dimensi, fenomena fisis dapat dikembangkan dan diperbandingkan dengan makrodimensi (Hauwali, 2015).

Diantara beberapa material yang ada, logam banyak dimanfaatkan dalam kehidupan sehari-hari khususnya sebagai bahan pembangunan jembatan, industri otomotif, transportasi, beberapa peralatan listrik dan material elektronik. Terdapat beberapa unsur logam terkenal seperti aluminium, nikel, tembaga, perak, emas, dan timah yang beberapa diantaranya dimanfaatkan sebagai penyusun baja. Aluminium, nikel, dan tembaga merupakan beberapa unsur logam penyusun baja yang paling banyak digunakan di zaman modern sekarang ini. Setiap material logam memiliki beberapa sifat, diantaranya adalah sifat mekanik bahan yang meliputi kekerasan, kekakuan, keuletan, kekuatan, dan elastisitas. Sifat elastisitas merupakan kecenderungan suatu material padat untuk kembali ke bentuk semula sebelum mengalami deformasi secara permanen (Giancoli, 1998). Deformasi pada material padat terjadi ketika gaya diaplikasikan pada material tersebut. Ukuran

tingkat elastisitas bahan menunjukkan ketahanan material terhadap deformasi elastis akibat gaya eksternal, dan ini dikenal sebagai modulus Young (Popov, 1996).

Informasi mengenai modulus Young suatu bahan berkaitan erat dengan karakteristik suatu bahan berdasarkan tingkat kekakuan saat dipengaruhi oleh gaya luar. Secara grafis modulus Young suatu material dapat dihitung dengan melihat kemiringan dari kurva tegangan-regangan di wilayah deformasi elastis. Hal ini sesuai dengan hukum Hooke yang menyatakan hubungan antara tegangan dan regangan berbentuk linier untuk semua bahan (Popov, 1996). Modulus Young menjadi salah satu syarat penting untuk mengetahui kekuatan material logam ketika gaya diaplikasikan pada material tersebut. Bahan dengan nilai modulus Young yang besar secara relatif sulit untuk memanjang sehingga diperlukan tegangan yang sangat besar untuk menghasilkan deformasi (Young & Freedman, 2002).

Penelitian tugas akhir ini, merupakan penelitian komputasi dengan menggunakan metode dinamika molekul yang dilakukan untuk mempelajari dan memprediksi sifat-sifat mekanik bahan berdasarkan nilai modulus Young bahan, untuk beberapa unsur logam yaitu nikel, aluminium, tembaga, perak dan emas yang merupakan unsur logam yang banyak digunakan dalam banyak aplikasi. Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode komputasi fisika yang umum digunakan dewasa ini untuk mensimulasikan pergerakan atom dan molekul yang kemudian dengan cara tertentu dapat digunakan untuk menghitung, memprediksi besaran-besaran fisis fenomena bahan (Dipojono, 2001). Pada dasarnya, metode dinamika molekul ini memecahkan atau mencari solusi persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai untuk bahan yang diteliti (Arkundato, 2013). Pergerakan atom dan molekul yang menghasilkan trayektori ini dipengaruhi oleh potensial yang dibentuk oleh medan gaya dari suatu atom dengan atom-atom lain disekitarnya. Masing-masing atom tersebut saling berinteraksi satu sama lain untuk membentuk sistem materi yang dalam hal ini dirumuskan dalam fungsi energi potensial. Adapun solusi dari persamaan

gerak sistem tersebut dapat dipecahkan dengan mudah secara numerik dengan menggunakan komputer (Maulana *et al.*, 2005).

Terdapat beberapa jenis potensial yang bisa digunakan dalam simulasi dinamika molekul seperti potensial Morse, potensial EAM (*Embedded Atomic Method*), potensial Finnis Sinclair, potensial Lennard-Jones, dan lain-lain. Pemilihan fungsi potensial antar atom yang digunakan dalam simulasi bahan sangat penting dalam simulasi dinamika molekul, karena fungsi potensial ini akan menentukan keakuratan hasil interaksi antar atom dalam material yang disimulasikan (Chui, 2007). Potensial Morse cocok digunakan untuk logam dalam bentuk padatan. Pada penelitian tugas akhir ini, akan dilakukan prediksi nilai modulus Young beberapa bahan di atas dengan berbasis potensial Morse berdasarkan parameter yang sesuai, kemudian hasilnya dibandingkan dengan referensi. Setelah itu, prediksi modulus Young bahan dilakukan dengan variasi temperatur yang berbeda untuk masing masing bahan dimana temperatur berpengaruh secara signifikan terhadap kekuatan dan keuletannya (Asfarizal, 2008). Hal itu dilakukan untuk memprediksi pengaruh temperatur terhadap sifat mekanik bahan.

1.2 Rumusan Masalah

Permasalahan yang dibahas pada penelitian modulus Young beberapa bahan logam, antara lain:

1. Bagaimana nilai parameter potensial Morse berdasarkan nilai D , dan r_0 yang sesuai untuk perhitungan nilai modulus Young agar sesuai dengan data eksperimen?
2. Berapa nilai modulus Young dari beberapa bahan logam murni, yang disimulasikan dengan menggunakan metode dinamika molekul berbasis potensial Morse?
3. Bagaimana pengaruh variasi temperatur terhadap nilai modulus Young pada bahan?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian modulus Young beberapa bahan logam, antara lain:

1. Simulasi dilakukan dengan program dinamika molekul LAMMPS
2. Sistem yang ditinjau hanya pada unsur logam murni Cu, Ag, Au, Al, dan Ni
3. Metode dinamika molekul yang digunakan adalah metode dinamika molekul klasik
4. Variasi temperatur disimulasikan mulai dari nilai terkecil sampai dengan yang terbesar.
5. Kotak simulasi menggunakan ukuran $30a \times 30a \times 30a$
6. Variasi ukuran kotak simulasi (*region*) diasumsikan cukup untuk akurasi nilai modulus Young
7. Laju deformasi yang digunakan adalah 1 \AA/ps

1.4 Tujuan

Tujuan penelitian yang dilakukan adalah

1. Menentukan parameter potensial Morse bahan yang sesuai untuk perhitungan nilai modulus Young sesuai dengan data eksperimen, yaitu parameter D , dan r_0
2. Menghitung nilai modulus Young dari beberapa bahan logam murni, dengan metode dinamika molekul berbasis potensial Morse
3. Mengetahui pengaruh variasi temperatur terhadap nilai modulus Young pada bahan

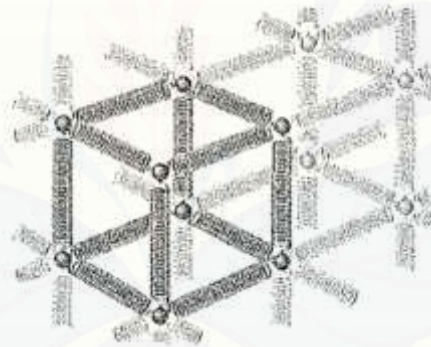
1.5 Manfaat

Manfaat dari penelitian tugas akhir ini adalah mendapatkan nilai parameter potensial Morse untuk beberapa bahan, yang cocok untuk perhitungan sifat-sifat mekanik bahan seperti modulus Young, sehingga diharapkan dapat digunakan untuk perhitungan sifat-sifat fisis yang lain.

BAB 2. DASAR TEORI

2.1 Modulus Young

Suatu material elastis dapat mengalami penguluran pada dimensinya akibat adanya gaya yang mengenainya, dan dapat kembali ke keadaan semula ketika gaya yang mengenainya dihilangkan (Coban *et al.*, 2011). Ditinjau dari struktur mikroskopiknya, jika atom dalam jumlah besar membentuk logam padat maka atom tersebut mengatur dirinya dalam posisi setimbang dalam kisi-kisi tiga dimensi. Terjadi susunan berulang dalam kisi-kisi tiga dimensi, di mana setiap atomnya berada pada jarak setimbang yang diatur dari atom-atom terdekatnya. Atom disatukan oleh gaya antar atom (interatomik) yang dimodelkan sebagai pegas-pegas kecil seperti pada gambar 2.1 (Halliday *et al.*, 2010).



Gambar 2.1 Atom logam padat yang didistribusikan ke kisi-kisi tiga dimensi secara berulang (Sumber: Halliday *et al.*, 2010)

Ukuran yang menunjukkan tingkat elastisitas bahan sehingga ketahanan material terhadap deformasi elastis akibat gaya eksternal dapat diketahui, dikenal sebagai modulus Young (Popov, 1996). Bahan dengan nilai modulus Young yang besar secara relatif tidak dapat memanjang sehingga diperlukan tegangan yang sangat besar untuk menghasilkan deformasi (Young & Freedman, 2002).

Suatu material padat tidak akan kembali ke keadaan semula melainkan tetap pada keadaan akhir saat gaya tepat akan dihilangkan ketika bahan berperilaku plastis. Dapat dikatakan bahwa material tersebut mengalami deformasi plastis dimana terjadi pemanjangan permanen ketika beban yang diberikan melampaui

batas elastis. Material padat dapat mengalami kerusakan secara permanen ketika gaya deformasinya cukup besar. Ditinjau secara makroskopik modulus Young bahan dapat ditentukan menggunakan perbandingan tegangan () terhadap regangannya (), dikenal dengan istilah hukum Hooke.

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon} \quad (2.1)$$

Keterangan:

- E = modulus Young (GPa)
- σ = tegangan (*stress*) (GPa)
- ϵ = regangan (*strain*)

Variabel σ dapat didefinisikan sebagai tegangan (*stress*) dan variabel ϵ sebagai regangan (*strain*). Penentuan σ dan ϵ dapat dilakukan berdasarkan persamaan:

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (2.2)$$

$$\epsilon = \frac{l-l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.3)$$

Keterangan:

- F = gaya tarik yang mengenai logam (eV/Å)
- A = luas permukaan logam (Å²)
- l_0 = panjang logam sebelum dikenai beban (Å)
- l = panjang logam sesudah dikenai beban (Å)
- Δl = perubahan panjang logam sebelum dan sesudah dikenai beban (Å)

Variabel l_0 dan l merupakan variabel panjang dari suatu batang sebelum dan sesudah dikenai perlakuan eksternal berupa tegangan (Young & Freedman, 2002).

Hukum Hooke menyatakan bahwa dalam deformasi elastis, tegangan berbanding lurus terhadap regangan, yang memiliki rentang keabsahan yang terbatas (Young & Freedman, 2002). Nilai modulus Young (E) beberapa logam yang dinyatakan dengan modulus Young (Y) sesuai pada Tabel 2.1.

Tabel 2.1 Nilai modulus Young beberapa logam murni

Bahan	Modulus Young Y (Pa)	Sumber
Aluminium	$7,0 \times 10^{10}$	Young dan Freedman, 2002
Kuningan	$9,0 \times 10^{10}$	
Tembaga	$11,0 \times 10^{10}$	
Kaca Kerona	$6,0 \times 10^{10}$	
Timbal	$1,6 \times 10^{10}$	
Nikel	$21,0 \times 10^{10}$	
Baja	$20,0 \times 10^{10}$	
Emas	$7,9 \times 10^{10}$	Hannula <i>et al.</i> , 1983 dalam Kim <i>et al.</i> , 2006 Smith dan Fickett, 1995
Perak	$8,25 \times 10^{10}$	

Nilai modulus Young menunjukkan tingkat kekakuan suatu bahan, akibat beban yang dikenakan pada bahan. Sehingga dapat disimpulkan bahwa tingkat kekakuan suatu bahan sebanding dengan nilai modulus Young. Penelitian mengenai modulus Young bahan logam telah dilakukan sebelumnya oleh Camprubi (2011), dengan menggunakan kawat tembaga berukuran nano sebagai bahannya. Penelitian tersebut bertujuan untuk menentukan nilai modulus Young kawat tembaga berdasarkan variasi dari beberapa parameter seperti ukuran bahan dan nilai laju deformasi terhadap waktu berbasis potensial EAM. Selain itu, Ferguson (2014) juga melakukan penelitian yang hampir sama yaitu modulus Young logam aluminium murni berbasis potensial EAM. Berkaitan dengan bahan yang digunakan merupakan bahan logam, sehingga potensial yang digunakan difokuskan untuk logam saja.

Tidak sedikit pengujian terhadap logam dilakukan pada temperatur tinggi, karena banyak logam yang diaplikasikan dalam industri yang bekerja dengan kondisi bertemperatur tinggi seperti turbin-turbin uap, dapur-dapur pembakaran, alat-alat penyulingan (Asfarizal, 2008). Kenaikan temperatur akan berpengaruh pada fase dan struktur dari logam, dimana hal itu berkaitan erat terhadap sifat-sifat mekanisnya. Eksperimen tentang pengaruh temperatur bahan terhadap modulus Young pernah dilakukan oleh Greer (2011) dengan menggunakan garpu tala yang terbuat dari logam aluminium murni sebagai bahannya. Berdasarkan penelitian tersebut, dapat diketahui bahwa kenaikan temperatur bahan berpengaruh terhadap

nilai modulus Young. Semakin tinggi temperatur bahan, menyebabkan nilai modulus Young semakin menurun.

Pembebanan yang diberikan pada bahan secara terus menerus akan menyebabkan hubungan tegangan dan regangan menjadi tidak linier. Daerah tersebut dinamakan daerah plastis, dimana bahan tidak dapat kembali ke keadaan semula ketika beban yang diberikan dihilangkan. Setelah melewati titik luluh bahan, tegangan akan terus naik hingga pada batas tertentu, yang disebut dengan tegangan maksimum yang dapat diterima bahan. Tegangan maksimum tersebut biasa dinamakan dengan istilah kekuatan tarik atau UTS (*Ultimate Tensile Strength*) (Callister & Retwisch, 2007). Setelah melewati kekuatan tarik, kemampuan bahan dalam menerima beban akan mengalami penurunan hingga bahan tersebut patah (*fracture*).

2.2 Struktur Kristal

Setiap material tersusun oleh atom-atom dan molekul yang saling berikatan satu sama lain. Ikatan antar atom dan molekul yang teratur di dalam suatu material akan membentuk sebuah kristal. Kristal merupakan material padat yang atom-atomnya tersusun dalam satu pola yang berulang dalam ruang tiga dimensi (Kittel, 1996). Struktur kristal pada material padat merupakan penggolongan material berdasarkan keteraturan susunan atom atau molekul (Puri & Babbar, 2001). Susunan atom-atom yang beraturan tersebut dinamakan struktur kristal. Keteraturan susunan atom tersebut dapat digambarkan dengan menggunakan sistem sumbu koordinat (X,Y,Z). Struktur sebuah kristal dapat digambarkan melalui bentuk kisinya, yang terdiri dari kelompok atom yang saling berdekatan pada setiap titik kisinya. Kelompok dari atom dinamakan basis, ketika terjadi pengulangan basis pada ruang tiga dimensi akan membentuk struktur kristal (Kittel, 1996). Struktur kristal terbagi menjadi beberapa jenis yaitu SC (*Simple Cubic*), BCC (*Body Centered Cubic*), FCC (*Face Centered Cubic*), dan HCP (*Hexagonal Close Packed*) (Askeland *et al.*, 2010). Sistem simulasi yang digunakan, dimodelkan dalam sebuah kubus dengan geometri tertentu berkaitan dengan struktur kristal logam yang digunakan adalah kubus (*cubic*).

a. Struktur Kristal SC (*Simple Cubic*)

Struktur kristal SC terdiri dari 1 atom pada setiap selnya, yaitu $1/8$ atom di setiap sudutnya. Polonium merupakan unsur yang tersusun atas struktur kristal SC seperti pada gambar 2.2.



Gambar 2.2 Struktur kristal *simple cubic* (Sumber: Kittel, 1996)

b. Struktur Kristal BCC (*Body Centered Cubic*)

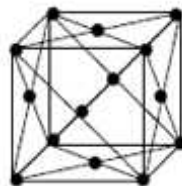
Struktur kristal BCC terdiri dari 2 atom pada setiap selnya, yaitu $1/8$ atom di setiap sudutnya dan 1 atom di bagian tengah ruang. Contoh logam yang memiliki struktur kristal BCC antara lain Fe, Cr, Li, Mo. Struktur kristal BCC ditunjukkan sesuai gambar 2.3.



Gambar 2.3 Struktur kristal *body centered cubic* (Sumber: Kittel, 1996)

c. Struktur Kristal FCC (*Face Centered Cubic*)

Struktur kristal FCC terdiri dari 4 atom di setiap selnya, yaitu $1/8$ atom di setiap sudutnya dan $1/2$ atom di bagian tengah setiap sisinya. Contoh logam yang memiliki struktur kristal FCC antara lain Al, Cu, Ni, Au, dan Ag. Struktur kristal FCC ditunjukkan sesuai gambar 2.4.



Gambar 2.4 Struktur kristal *face centered cubic* (Sumber: Kittel, 1996)

2.3 Logam

Logam merupakan suatu material yang memiliki kekuatan yang lebih besar dibandingkan material komposit, keramik, dan polimer (Askeland *et al.*, 2010). Setiap logam memiliki karakteristik yang berbeda-beda, sehingga dapat dilakukan beberapa pengujian, misalnya pengujian tarik, uji impak, dan uji kekerasan untuk mengetahui sifat-sifat logam khususnya sifat mekaniknya (Vliet, 1984).

Tabel 2.2 Daftar jarak antar atom terdekat beberapa unsur

<i>Element</i>	<i>Crystal structure</i>	<i>Closest interatomic distance (nm)</i>	<i>Element</i>	<i>Crystal structure</i>	<i>Closest interatomic distance (nm)</i>
<i>Aluminum</i>	fcc	0.286	<i>Platinum</i>	fcc	0.277
<i>Beryllium</i>	hcp (c/a = 1.568)	0.223	<i>Potassium</i>	bcc	0.461
<i>Cadmium</i>	hcp (c/a = 1.886)	0.298	<i>Rhodium</i>	fcc	0.269
<i>Chromium</i>	bcc	0.250	<i>Rubidium</i>	bcc	0.494
<i>Cobalt</i>	hcp (c/a = 1.623)	0.250	<i>Silver</i>	fcc	0.289
<i>Copper</i>	fcc	0.255	<i>Sodium</i>	bcc	0.372
<i>Gold</i>	fcc	0.288	<i>Tantalum</i>	bcc	0.286
<i>Iron</i>	bcc	0.248	<i>Thorium</i>	fcc	0.360
<i>Lead</i>	fcc	0.350	<i>Titanium</i>	hcp (c/a = 1.587)	0.299
<i>Lithium</i>	bcc	0.331	<i>Tungsten</i>	bcc	0.274
<i>Magnesium</i>	hcp (c/a = 1.623)	0.320	<i>Uranium</i>	orthorhombic	0.275
<i>Molybdenum</i>	bcc	0.275	<i>Vanadium</i>	bcc	0.262
<i>Nickel</i>	fcc	0.249	<i>Zinc</i>	hcp (c/a = 1.856)	0.266
<i>Niobium</i>	bcc	0.286	<i>Zirconium</i>	hcp (c/a = 1.592)	0.318

(Sumber: Smallman dan Bishop, 1999)

Pada tabel 2.2 tercatat mengenai struktur kristal dari beberapa logam yang menjadi bahan dalam penelitian ini. Setiap unsur memiliki jarak interaksi terdekat antar atom yang berbeda-beda. Berikut ini merupakan beberapa penjelasan mengenai bahan logam yang digunakan.

a. Tembaga

Tembaga biasa digunakan dalam bentuk paduan, karena dapat dengan mudah membentuk paduan dengan logam lain diantaranya yaitu logam Pb dan logam Sn (Vliet, 1984). Tembaga termasuk logam yang memiliki struktur kristal FCC dengan konstanta kisi sebesar 3,6062 Å (Born, 1940) dan titik leleh 1358 K (Kittel, 1996) yang sering diaplikasikan sebagai kawat berukuran nano. Tembaga memiliki nilai modulus Young sebesar 110 Gpa (Young & Freedman, 2002), dan

sering digunakan pada komposisi paduan duralium sebagai komponen pesawat terbang.

b. Perak (Ag)

Sebagian besar perak merupakan salah satu material logam yang sering diaplikasikan dalam pengembangan material superkonduktor suhu tinggi yaitu sebagai pelindung dari materi disekitarnya (Smith & Fickett, 1995). Perak memiliki jarak terdekat antar atom pada $2,89 \text{ \AA}$ dengan titik leleh pada 1235 K (Kittel, 1996). Perak merupakan logam dengan massa relatif sebesar $107,87 \text{ gram/mol}$ yang tersusun oleh struktur kristal FCC dengan konstanta kisi sebesar $4,0729 \text{ \AA}$ (Born, 1940). Ditinjau berdasarkan sifat mekaniknya, perak memiliki nilai modulus Young yang lebih rendah dibandingkan tembaga dan nikel yaitu $82,5 \text{ GPa}$ pada temperatur 293 K (Smith & Fickett, 1995). Dalam aplikasi konduktor, perak juga diaplikasikan sebagai stabilisasi jalan termal untuk proses pendingin pada konduktor yang juga memberikan kekuatan mekanik pada konduktor.

c. Emas

Emas merupakan bahan logam yang ideal untuk kawat dan elektroda pada skala nano karena ketahanan terhadap korosi dan biokompatibilitas, sedangkan untuk sistem integrasi sifat mekanik kawat nano emas sangat penting (Olliges, 2007) sehingga diperlukan peningkatan pada sifat mekaniknya (Qi & Zhang, 1997). Pada ukuran nano partikel, logam emas dan perak telah banyak dimanfaatkan sebagai sensor, katalisis, biokimia, optik, dan elektronik (Babayi *et al.*, 2004). Emas tersusun oleh struktur kristal FCC dengan konstanta kisi sebesar $4,0588 \text{ \AA}$ (Born, 1940) dan memiliki titik leleh pada 1338 K (Kittel, 1996).

d. Aluminium

Aluminium merupakan logam yang dalam keadaan murninya relatif lunak dan berlimpah yaitu sekitar 8.07% dari kerak bumi (Jacobs, 1999). Selain itu,

aluminium termasuk dalam logam ringan yang memiliki massa atom sebesar 26,981 gram/mol dan memiliki ketahanan terhadap korosi (Surdia & Saito, 1999). Logam ini tersusun atas struktur kristal FCC dengan konstanta kisi sebesar 4,0305 Å (Born, 1940). Young & Freedman (2002), menyatakan dalam bukunya bahwa logam aluminium memiliki konstanta modulus Young sebesar 70 Gpa. Aluminium akan mengalami perubahan fase menjadi cair pada temperatur 933,5 K (Kittel, 1996). Logam ini banyak diaplikasikan pada bagian kendaraan bermotor seperti bagian badan (rangka), peralatan rumah tangga, komponen otomotif dan pesawat terbang.

e. Nikel (Ni)

Nikel merupakan logam yang memiliki struktur kristal FCC dengan konstanta kisi sebesar 3,5214 Å (Born, 1940) dan sering dimanfaatkan dalam bidang industri sebagai penyusun baja. Salah satu kelebihan dari nikel yaitu memiliki sifat tahan korosi namun dalam keadaan murni bersifat lunak, sehingga ketika dipadukan dengan beberapa logam lain seperti krom dan besi akan menjadi pilihan yang tepat untuk membentuk baja tahan korosi yang keras. Logam yang memiliki massa relatif 58,71 gram/mol (Huheey & Keither, 1993). Nikel sangat mudah dipadukan dengan unsur logam lain, sehingga penggunaannya sangat penting sebagai penyusun logam paduan untuk ketahanan korosi dan panas mengingat titik lelehnya yang cukup tinggi yaitu 1728 K (Kittel, 1996).

2.4 Metode Dinamika Molekul

Simulasi dinamika molekul digunakan untuk memprediksi nilai besaran-besaran fisis dari interaksi ditingkat atom atau molekul berdasarkan model material yang dirancang dan berdasarkan *input* data simulasi yang diberikan (Arkundato, 2013). Metode penelitian yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode dinamika molekul klasik yang dapat memecahkan atau mencari solusi persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai dengan hasil solusi trayektori atom, dimana dalam penelitian ini berbasis potensial Morse. Berdasarkan hal itu, terjadi hubungan antara sifat-sifat makroskopis materi dengan

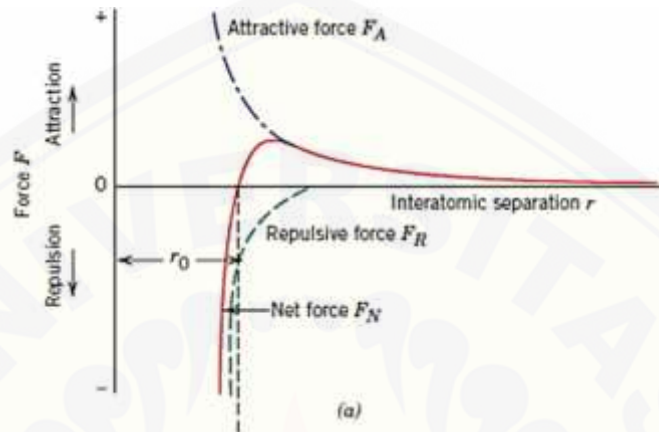
interaksi yang ada di tingkat atom atau molekul. Dipojono (2001) menganggap bahwa penentuan potensial energi menjadi syarat penting dalam simulasi dinamika molekul dimana dapat mengatur hubungan antara atom-atom atau molekul-molekul yang saling berinteraksi di dalam sistem. Berdasarkan model potensial energi inilah gaya-gaya yang mempengaruhi dinamika sistem dapat ditentukan.

Secara umum simulasi dengan menggunakan metode dinamika molekul membutuhkan beberapa informasi terkait kondisi awal yang harus diketahui, diantaranya adalah posisi dan kecepatan awal dari seluruh atom serta energi potensial antar atom (Maulana *et al.*, 2005). Deskripsi mengenai gaya-gaya yang mempengaruhi dinamika sistem secara prinsip harus didasarkan pada mekanika kuantum, namun pendekatan mekanika klasik dapat digunakan yaitu dengan memperlakukan atom-atom atau molekul-molekul sebagai suatu titik massa, dalam batas tertentu. Model paling sederhana yang dapat digunakan untuk menjelaskan suatu materi didasarkan pada konsep atom-atom berbentuk bola yang saling berinteraksi, dalam hal ini disebut atom.

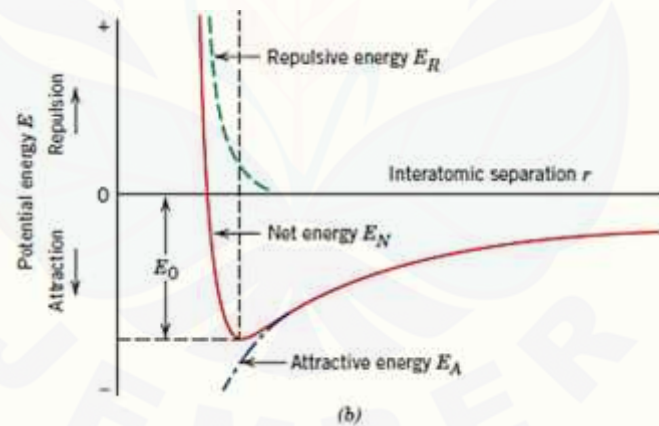
2.4.1 Interaksi Antar Atom (Molekul)

Pada skala mikroskopis setiap atom yang saling berdekatan akan saling berinteraksi satu sama lain akibat adanya gaya antar atom. Sehingga dibutuhkan adanya gaya interaksi antar atom yang ekuivalen dengan potensial interaksi yang digunakan. Seperti disebutkan di atas, simulasi dinamika molekul memerlukan definisi fungsi potensial interatomik, sehingga diperlukan informasi mengenai letak atom ketika akan berinteraksi. Pemilihan potensial interaksi sangat menentukan hasil simulasi yang dilakukan. Rapoport (2004) menyatakan bahwa terdapat dua prinsip utama dalam interaksi antar atom, yaitu gaya tarik-menarik (*attractive forces*) dan gaya tolak-menolak (*repulsive forces*) antar atom. Pertama, jika pasangan atom terpisah pada jarak yang dekat maka resultan gaya interaksi akan saling tolak-menolak. Kedua, jika pasangan atom terpisah pada jarak yang jauh maka resultan gaya interaksinya akan saling tarik-menarik. Namun pada jarak tertentu, gaya interaksi yang terjadi akan saling meniadakan. Sehingga

resultan gaya interaksinya akan bernilai nol. Terjadi ketegantungan antara interaksi tarik-menarik (*attractive*) dan interaksi tolak-menolak (*repulsive*) antar atom terhadap gaya interaksi dan potensial energi, yang digambarkan sesuai gambar 2.5 dan 2.6.



Gambar 2.5 Ketegantungan antara interaksi tarik-menarik (*attractive*) dan interaksi tolak-menolak (*repulsive*) antar atom terhadap gaya interaksi (Sumber: Young & Freedman, 2002)



Gambar 2.6 Ketegantungan antara interaksi tarik-menarik (*attractive*) dan interaksi tolak-menolak (*repulsive*) antar atom terhadap potensial energi (Sumber: Young & Freedman, 2002)

Gaya total yang bekerja pada setiap atom dalam sistem adalah hasil dari interaksi suatu atom dengan seluruh atom lain dalam sistem (Ferguson, 2014). Energi potensial sistem adalah fungsi koordinat atom yang rumit, sehingga keakuratan dari potensial interaksi yang digunakan sangat penting untuk melakukan simulasi dalam skala molekuler. Potensial interaksi antar atom terdiri

dari fungsi posisi yang mewakili energi potensial dari atom ketika terletak dalam konfigurasi tertentu. Hal ini dapat digambarkan menggunakan posisi relatif suatu atom terhadap atom lain yang dapat dijelaskan dengan persamaan:

$$U(r_1, r_2, \dots) = V_1 + V_2 + V_3 \quad (2.4)$$

Gaya yang membuat atom-atom dalam sistem atom yang berinteraksi secara tidak terikat ketika atom saling berdekatan atau bertetangga, dapat bertahan dalam menyusun kristal adalah gaya Van der Waals. Saat jarak antar atom sangat pendek, interaksi antar atom akan saling tolak-menolak. Sedangkan saat antar atom saling menjauh, interaksi antar atom akan saling tarik-menarik. Tarik-menarik antar dua atom ditimbulkan oleh induksi dipol-dipol yang disebabkan oleh gerak dari elektron pada suatu molekul, yang merupakan dampak dari molekul yang saling bertetangga (Vita, 2015). Gabungan dari gaya tarik-menarik antar atom dengan gaya tolak-menolak antar atom yang bekerja pada sebuah molekul dinamakan gaya Van der Waals (Oxtoby *et al.*, 2001).

2.4.2 Potensial Morse

Selain potensial Lennard Jones dan EAM (Embedded atomic Method), terdapat potensial lain yang sering digunakan dalam simulasi dinamika molekul yaitu potensial Morse. Yamamoto (1974) menyatakan bahwa sejak Girifalco dan Weizer telah menerapkan fungsi potensial Morse untuk logam murni, potensial ini telah banyak digunakan untuk menjelaskan berbagai sifat dari kristal. Sifat kristal tersebut diantaranya adalah energi kohesif, konstanta kisi, kompresibilitas dan konstanta elastisitas. Fungsi potensial Morse biasa dituliskan dalam bentuk persamaan berikut.

$$\phi_{(r_{ij})} = D \{ \exp[-2(r_{ij}-r_0)] - 2 \exp[-(r_{ij}-r_0)] \} \quad (2.5)$$

dimana,

$\phi_{(r_{ij})}$ = energi interaksi antara atom i dan j yang terpisah pada jarak tertentu (eV)

- D = kedalaman sumur potensial dan merupakan parameter energi (eV)
 = parameter pengendali lebar potensial (\AA^{-1})
 r = jarak antar atom (\AA)
 r_0 = jarak kesetimbangan antara atom i dan j saat potensial minimum (\AA)
 (Chen & Huang, 1981).

Dalam simulasi dinamika molekul, tidak mudah menghitung seluruh interaksi yang terjadi antar atom. Oleh karena itu, diperlukan hipotesis radius *cut-off* sebagai nilai maksimum dari vektor radius yang diperhitungkan, dengan tujuan untuk mengurangi upaya komputasi. Nilai yang paling umum digunakan sebagai radius *cut-off* pada potensial Morse adalah 3,4. Girifalco dan Weizer (1959) merumuskan parameter potensial Morse dari beberapa logam murni berdasarkan hasil penurunan persamaan umumnya, untuk menjelaskan sifat-sifat kristal dari logam kubik seperti modulus Bulk, dimana parameternya sesuai pada tabel 2.3.

Tabel 2.3 Parameter potensial Morse logam kubik

Logam	$= \text{\AA}^{-1}$	$r_0 = \text{\AA}$	D (eV)
Pb	1,1836	3,733	0,2348
Ag	1,369	3,115	0,3323
Ni	1,4199	2,78	0,4205
Cu	1,3588	2,866	0,3429
Al	1,1646	3,253	0,2703
Ca	0,80535	4,569	0,1623
Sr	0,73776	4,988	0,1513
Mo	1,5079	2,976	0,8032
W	1,4116	3,032	0,9906
Cr	1,5721	2,754	0,4414
Fe	1,3885	2,845	0,4174
Ba	0,65698	5,373	0,1416
K	0,49767	6,369	0,05424
Na	0,58993	5,336	0,06334
Cs	0,41569	7,557	0,04485
Rb	0,42981	7,207	0,04644

(Sumber: Girifalco dan Weizer, 1959)

Selain Girifalco dan Weizer (1959), juga terdapat parameter potensial Morse beberapa logam murni yang sering digunakan untuk menjelaskan

fenomena energi aktivasi pada difusi diri logam kubik seperti yang telah dilakukan oleh Chen & Huang (1981), yang sesuai pada tabel 2.4.

Tabel 2.4 Parameter potensial Morse yang sesuai untuk beberapa logam murni

Logam	Konstanta Kisi (Å)	(Å ⁻¹)	D (eV)	r ₀ (Å)
Cu	3,6062	2,369	0,1716	2,5904
Ag	4,0729	2,389	0,1534	2,9060
Au	4,0588	3,174	0,1588	2,8764
Al	4,0305	2,335	0,1139	2,8798
Ni	3,5214	2,544	0,2091	2,5218
Pb	4,9356	-2,398	0,0849	3,5022

(Sumber: Born, 1940 dalam Chen & Huang, 1981)

Chen & Huang (1981) menyatakan bahwa selain logam murni, potensial Morse juga cocok untuk digunakan pada sistem logam paduan. Parameter D , ρ , dan r_0 , dapat dinyatakan sesuai persamaan berikut (2.6), (2.7), dan (2.8). Data parameter beberapa logam paduan berdasarkan persamaan tersebut dinyatakan dalam tabel 2.5.

$$D_{AB} = (D_A D_B)^{1/2} \quad (2.6)$$

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} (\rho_A + \rho_B) \quad (2.7)$$

$$r_{AB} = (r_A r_B)^{1/2} \quad (2.8)$$

Tabel 2.5 Parameter potensial Morse untuk logam paduan pada logam kubik

Logam Paduan	(Å ⁻¹)	D (eV)	r ₀ (Å)
Au-Cu	2,3790	0,1622	2,7437
Au-Cu	2,7715	0,1651	2,7089
Ni-Cu	2,4565	0,1849	2,5554
Cu-Ag	2,3790	0,1622	2,7437
Au-Ag	2,7815	0,1561	2,8786
Pb-Ag	2,3935	0,1141	3,1908
Ni-Ag	2,4665	0,1791	2,7090

(Sumber: Chen & Huang, 1981)

Interaksi antar atom dapat dijelaskan menggunakan fungsi potensial dan gaya interaksi yang menyebabkan posisi atom mengalami perubahan terhadap posisi awalnya. Perubahan posisi atom terjadi karena adanya gerakan yang dilakukan oleh setiap atom, dimana gerakan ini memenuhi hukum kedua Newton yang secara umum dapat dinyatakan dengan persamaan:

$$F = m.a \quad (2.9)$$

dimana, m adalah massa atom relatif dalam satuan gram/mol dan a adalah percepatan gerak atom dalam satuan $\text{\AA}/\text{pikosekon}^2$. Dengan menggunakan perhitungan potensial interaksi untuk setiap langkah dalam simulasi, persamaan gerak Newton kedua dalam bentuk persamaan diferensial parsial secara numerik dapat dipecahkan sehingga posisi atom dapat diperbarui (Pazurikova, 2014).

2.4.3 Persamaan Gerak

Dalam dinamika molekul klasik, setiap atom dan molekul diperlakukan sebagai suatu titik massa yang memenuhi persamaan gerak Newton. Simulasi dilakukan berdasarkan mekanika klasik untuk sistem atom sejumlah N yang berinteraksi melalui fungsi potensial $V(r_1, \dots, r_N)$. Persamaan gerak ini dikenal sebagai hukum Newton kedua, yaitu:

$$F_i = m_i \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2.10)$$

dimana F_i adalah gaya total dalam satuan Newton pada atom i yang ditentukan dari gradien negatif energi potensial berdasarkan koordinat atom,

$$F_i = -\nabla_i V(r_1, \dots, r_N) \quad (2.11)$$

N adalah jumlah atom dalam simulasi (Camprubi, 2011).

2.4.4 Ensemble

Ensemble adalah kumpulan dari keadaan sistem yang mungkin memiliki keadaan mikroskopis yang berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis yang sama (Stote *et al.*, Tanpa tahun) seperti pada sistem dengan konfigurasi posisi atau momentum yang berbeda namun memiliki temperatur yang sama (Witoelar, 2002). Beberapa ensemble yang sering digunakan dalam simulasi dinamika molekul adalah ensemble mikrokanonikal, ensemble kanonikal dan ensemble isobarik-isotermal.

a. Ensemble Mikrokanonikal (N, V, E)

Ensemble mikrokanonikal adalah ensemble yang memiliki karakteristik jumlah molekul (N) dan volume (V) yang tidak berubah serta energi total (E) yang konstan. Ensemble ini diperoleh dari sistem yang terisolasi sehingga tidak ada interaksi sistem dengan lingkungan. Dengan demikian energi tidak dapat keluar dan masuk ke dalam sistem dan memiliki energi total yang konstan (Witoelar, 2002). Ensemble mikrokanonikal adalah ensemble yang paling sederhana untuk simulasi dinamika molekul, namun memiliki kelemahan yaitu sulit untuk mempertahankan energi total agar tetap berharga konstan.

b. Ensemble Kanonikal (N, V, T)

Ensemble kanonikal adalah ensemble dengan karakteristik yang memiliki keadaan makroskopis temperatur (T), jumlah molekul (N) dan volume (V) yang konstan. Witoelar (2002) menyatakan bahwa eksperimen mengenai sifat fisis dan mekanik material sering dilakukan pada temperatur konstan karena temperatur sistem lebih mudah dikendalikan dibandingkan energi total sistem, sehingga simulasi dengan ensemble kanonikal akan memiliki hasil yang mendekati keadaan eksperimen pada temperatur konstan.

c. Ensemble Isobarik-Isotermal (N, P, T)

Dalam ensemble isobarik-isotermal, volume sistem dapat berubah namun jumlah molekul tidak berubah. Simulasi dinamika molekul juga dapat dilakukan

dengan mempertahankan tekanan dan temperatur sebagai sifat makroskopis sistem pada harga yang konstan.

2.5 Program *Molecular Dynamics*


2.5.1 LAMMPS

LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) merupakan sebuah program simulasi dinamika molekul klasik yang dikembangkan dan diperbarui secara berkala oleh Laboratorium Nasional Sandia, Amerika Serikat yang dapat diakses secara gratis pada laman <http://lammps.sandia.gov/>. Program ini dirancang untuk memodelkan ensembel dari atom pada zat cair, padatan maupun gas dengan bahasa C++ yang dapat diparalelkan dengan program lain untuk memodelkan beberapa hingga jutaan atom. Secara umum, LAMMPS mengintegrasikan persamaan gerak Newton untuk koleksi atom, molekul, atau atom makroskopik yang saling berinteraksi pada jarak dekat atau jauh dengan berbagai kondisi batas (Camprubi, 2011). Untuk efisiensi komputasi LAMMPS menggunakan daftar jarak terdekat antar atom untuk melacak adanya atom terdekat. Berikut ini merupakan tampilan awal ketika mengakses program LAMMPS.

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

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

hover to animate → [input script](#)



physical analog (start at 3:25) & explanation

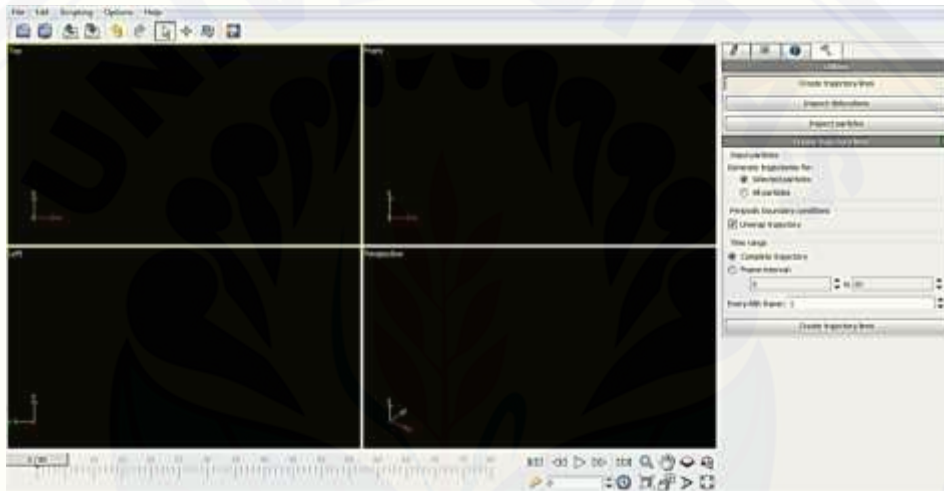
*** August 2016 workshop and symposium on *Materials modeling with LAMMPS* at Temple University.

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 2.7 Tampilan awal program LAMMPS

2.5.2 OVITO

OVITO merupakan program untuk visualisasi dan analisis ilmiah hasil simulasi data atomistik yang dikembangkan oleh Alexander Stukowski di Darmstadt University of Technology, Jerman. Program ini ditulis dalam bahasa C++ dan tergolong sebagai program *open source* yang dapat diunduh pada laman <http://OVITO.sourceforge.net>. Hasil pengolahan dinamika molekul akan divisualisasikan berdasarkan koordinat (X,Y,Z). Berikut ini merupakan tampilan awal ketika mengakses program OVITO.



Gambar 2.8 Tampilan awal program OVITO (Sumber: Stukowski, 2010)

Berdasarkan visualisasi hasil simulasi, dapat dilakukan analisis CNA (*Common Neighbor Analysis*) untuk mengetahui bentuk dan persentase struktur kristal dari bahan yang disimulasikan, seperti pada gambar 2.9.

Structure types:				
Color	Structure	Count	Fraction	Id
	Other	0	0.0%	0
■	FCC	4000	100.0%	1
■	HCP	0	0.0%	2
■	BCC	0	0.0%	3
■	ICO	0	0.0%	4

Gambar 2.9 Kode warna struktur kristal pada CNA (Sumber: Stukowski, 2010)

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian modulus Young bahan logam dengan menggunakan metode dinamika molekul dilakukan pada bulan November sampai bulan Mei yang bertempat di Laboratorium Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

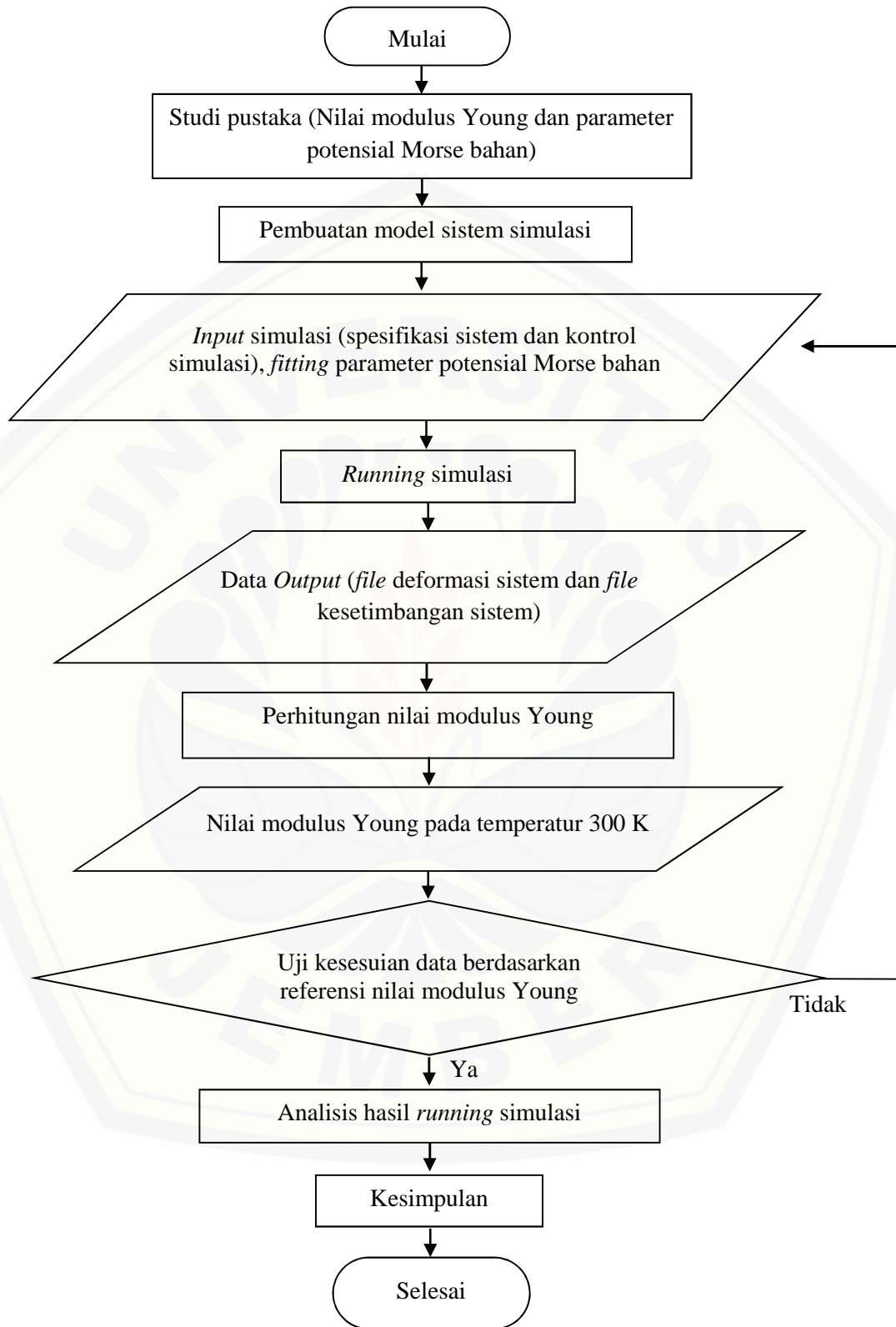
3.2 Alat Penelitian

Alat yang digunakan pada penelitian “Perhitungan Modulus Young Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul” adalah:

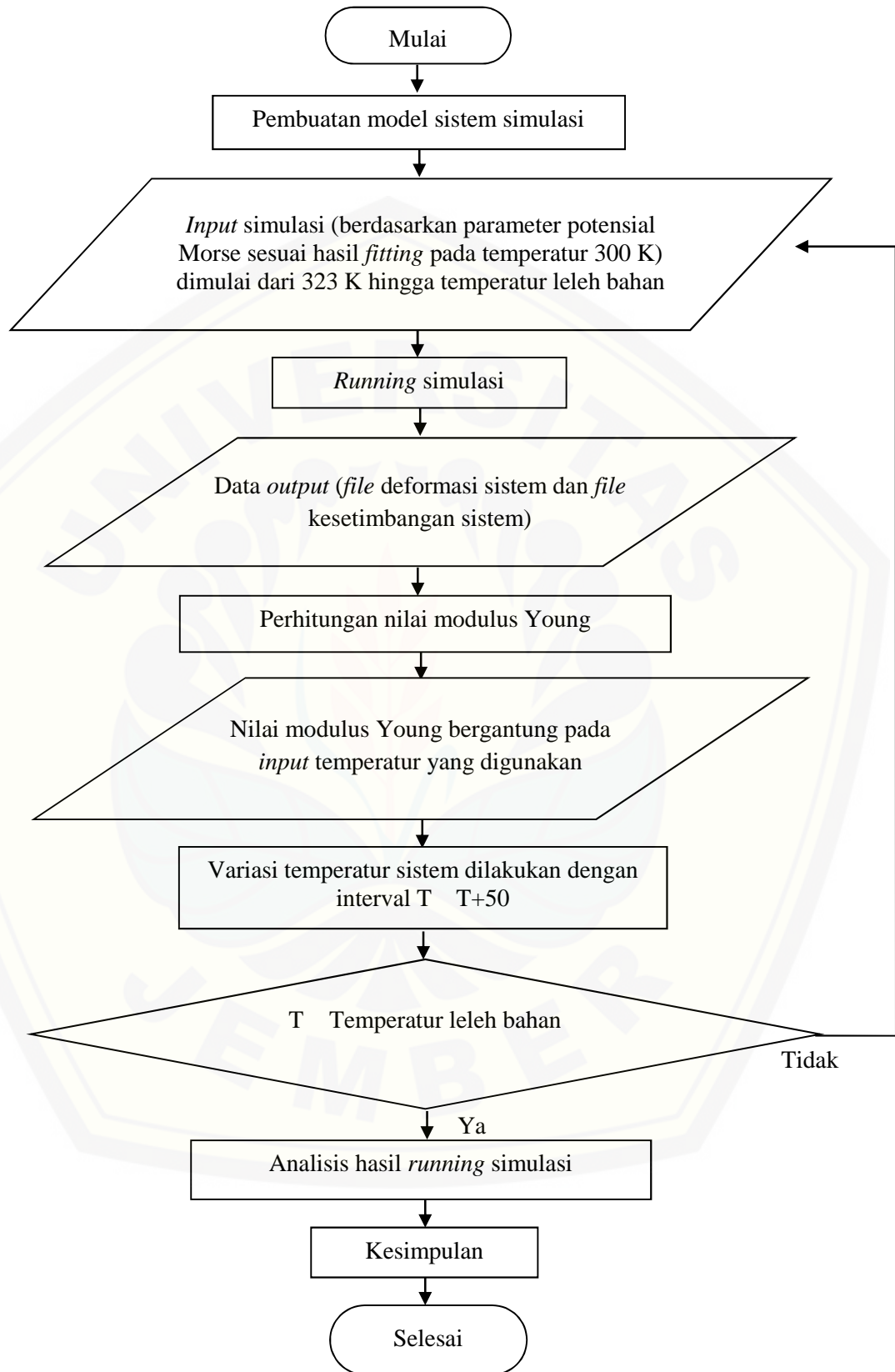
1. Komputer dengan spesifikasi
 - Processor : Intel(R) Core (TM) i3-4170 CPU @ 3.70GHz 3.70GHz
 - Memori : 2.00 GB
 - Sistem Operasi : Windows
2. Program
 - a. LAMMPS, berfungsi untuk running simulasi
 - b. OVITO (Versi ovito-2.6.2-win64), berfungsi untuk visualisasi dan analisis ilmiah data atomistik yang telah dihasilkan dari program LAMMPS. Program ini juga dapat digunakan untuk mengetahui jumlah struktur kristal suatu bahan. Penggunaan versi program OVITO ini disesuaikan dengan *system type* komputer.

3.3 Diagram Alir Penelitian

Berdasarkan permasalahan dan tujuan yang ingin dicapai dari penelitian yang dilakukan, maka pelaksanaan penelitian “Perhitungan Modulus Young Bahan Logam Menggunakan Metode Dinamika Molekul” dilakukan menurut diagram alir penelitian yang ditunjukkan pada gambar 3.1 dan 3.2. Gambar 3.1 menunjukkan prosedur penelitian perhitungan nilai modulus Young pada temperatur 300 K, sedangkan untuk prosedur penelitian dengan variasi temperatur dilakukan sesuai gambar 3.2.



Gambar 3.1 Prosedur penelitian pada temperatur 300 K



Gambar 3.2 Prosedur penelitian dengan variasi temperatur hingga titik leleh bahan

BAB 5. PENUTUP

1.1 Kesimpulan

Berdasarkan pada hasil penelitian penelitian simulasi nilai modulus Young dengan metode dinamika molekul, dapat disimpulkan ssebagai berikut.

1. Keakuratan hasil simulasi ditentukan berdasarkan parameter potensial Morse yang digunakan. Hasil koreksi parameter potensial Morse yang diperoleh adalah dengan mengubah parameter D logam nikel dengan nilai sebesar 0,211 eV. Koreksi parameter logam tembaga, perak, emas, aluminium, dan nikel yaitu sebesar $2,538\text{\AA}^{-1}$; $2,491\text{\AA}^{-1}$; $2,357\text{\AA}^{-1}$; $2,743\text{\AA}^{-1}$; $3,080\text{\AA}^{-1}$. Koreksi terhadap parameter r_0 dilakukan pada logam emas dengan nilai sebesar $2,8767\text{\AA}$.
2. Nilai modulus Young logam murni yang diperoleh, memiliki nilai yang sesuai dengan referensi. Nilai modulus Young yang diperoleh yaitu 209,2 GPa dengan diskrepansi sebesar 0,4% untuk nikel; 70,3 GPa dengan diskrepansi sebesar 0,4% untuk aluminium; 110,8 GPa dengan diskrepansi sebesar 0,7% untuk tembaga; 83,8 GPa dengan diskrepansi sebesar 1,6% untuk perak; dan 79,214 GPa dengan diskrepansi sebesar 0,2% untuk emas.
3. Variasi temperatur berpengaruh pada nilai modulus Young yang diperoleh. Semakin tinggi temperatur bahan, akan menyebabkan nilai modulus Young semakin menurun. Berdasarkan hasil yang diperoleh, logam nikel memiliki ketahanan terhadap temperatur yang baik. Hal itu dibuktikan dengan perubahan fase logam nikel yang mendekati titik lelehnya. Berbeda halnya dengan keempat bahan lain, yang mengalami perubahan fase jauh sebelum mencapai titik lelehnya. Ini menunjukkan, bahwa logam tembaga, perak, emas, dan aluminium memiliki ketahanan terhadap temperatur yang tidak sebaik nikel. Dalam kasus tersebut, juga dipengaruhi oleh ketepatan nilai parameter potensial Morse yang digunakan.

1.2 Saran

Adapun saran untuk penelitian yang selanjutnya adalah

1. Koreksi parameter potensial Morse untuk logam Cu, Ag, Au, Al, dan Ni, perlu ditinjau kembali agar diperoleh hasil yang lebih sesuai, berdasarkan perubahan fase dari masing-masing logam sehingga mendekati temperatur lelehnya,
2. Simulasi nilai modulus Young dengan menggunakan metode dinamika molekul dilakukan untuk bahan logam paduan, polimer dan komposit,
3. Mencari referensi mengenai potensial interatomik yang cocok untuk perhitungan nilai modulus Young bahan logam paduan, polimer dan komposit.

DAFTAR PUSTAKA

- Arkundato, A. 2013. Pengembangan Komputasi Skala Besar dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul. *Disertasi*. Jember: Universitas Jember.
- Asfarizal, 2008. Pengaruh Temperatur yang Ditinggikan Terhadap Kekuatan Tarik Baja Karbon Rendah. *ISSN: 0854-8471 2 (29)*. Institut Teknologi Padang: 53-59.
- Askeland, D. R., Fulay, P. P., & Wright, J. W. 2010. *The Science and Engineering of Materials*. USA: Cengage Learning, Inc.
- Babayi, H *et al.* 2004. The antimicrobial Activities of Methanolic Extract of Eucalyptus camaldulensis and Terminalia catappa Against some Pathogenic Microorganisms. *An Int. J. Niger. Soc. for Experiment. Bio* 16 (2). Nigeria: 106-111.
- Born, M. dalam Chen, S. J. dan Huang, H. L. 1981. Diffusion Activation Energies in Face-Centered Cubic Metals Using the Mors Potential Function. *Journal of Physics* 19 (4).
- Callister, W. D. J. & Retwisch, D.G. 2007. *An Introduction Materials Science and Engineering Seventh Edition*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Camprubi, G. S. 2011. Mechanical Properties at Nano-Level. *Tesis*. Sweden: Lund University.
- Chen, S. J. dan Huang, H. L. 1981. Diffusion Activation Energies in Face-Centered Cubic Metals Using the Mors Potential Function. *Journal of Physics* 19 (4). National Taiwan University: 106-112.
- Chui, Y. 2007. Molecular Dynamics Study of Structure and Stability in Au Nanoparticles. *Disertasi*. Australia: RMIT University.
- Coban, G. U., Sengoren, S. K., & Korkubilmez, S. 2011. An Alternative Tool to Explain Hooke's Law and The Principle of Dynamometer: The Rubber Band. *Lat. Am. J. Physics Education* 5 (1). March 2011. Dokuz Eylul University: 167-170.
- Dipojono, H. K. 2001. Simulasi Dinamika Molekul (Sebuah Pengantar). *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 4 ISSN 1410-7686*: 1-12

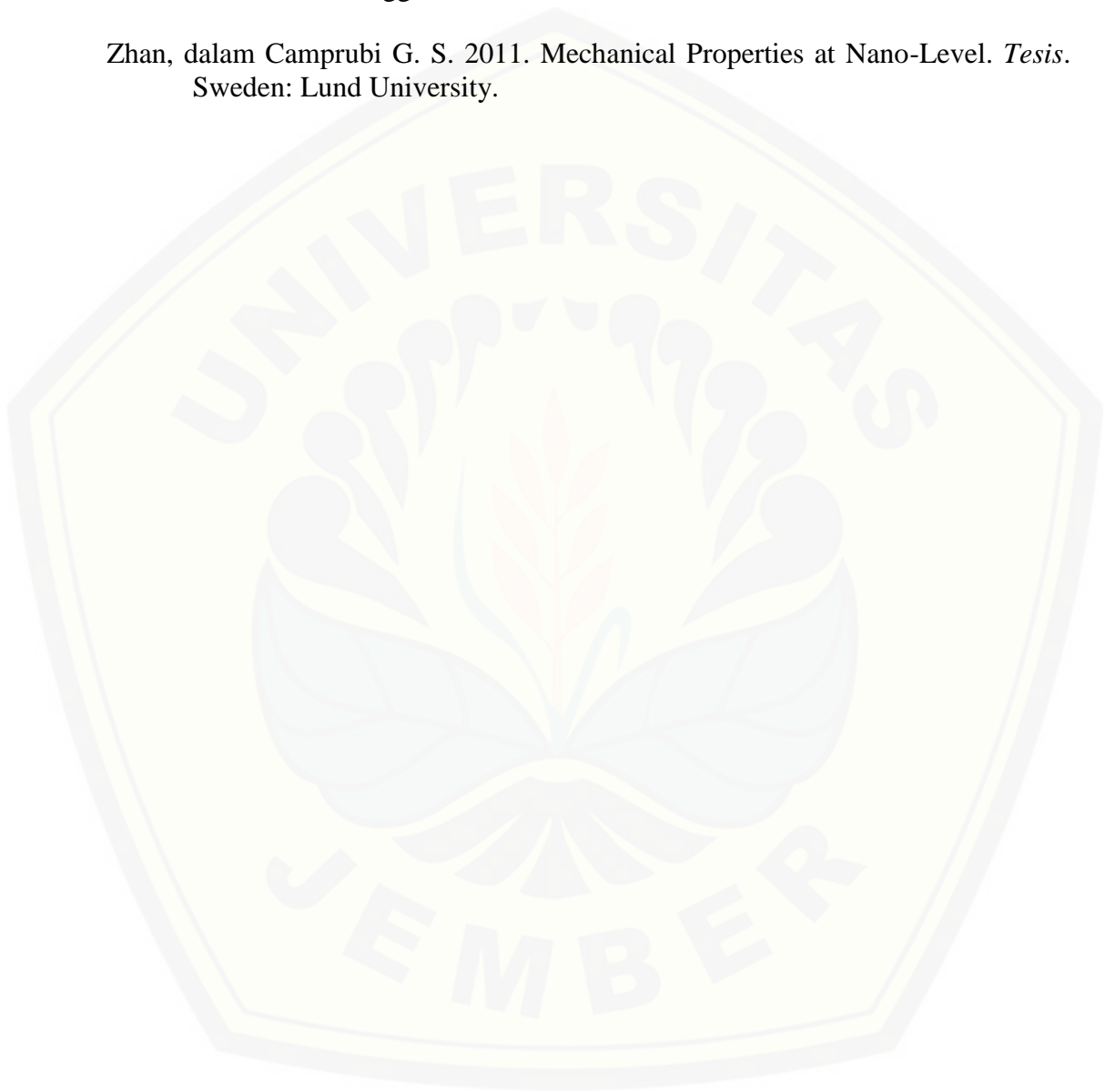
- Ferguson, A. L. 2014. *Elements of ICME Research Workshop Molecular Dynamics with LAMMPS*. Urbana-Champaign: University of Illinois.
- Giancoli, D. C. 1998. *Physics: Fifth Edition*. New Jersey: Prentice-Hall, Inc.
- Girifalco, L. A. Dan Weizer, V. G. 1959. Application of the Morse Potential Function to Cubic Metals. *Physical Review* 114 (3). National Aeronautics and Space Administration: 687-690.
- Greer, Z. L. 2011. Temperature, Frequency, and Young's Modulus of an Aluminum Tuning Fork. *ISB Journal of Physics*. 5 (1): 1-4.
- Halliday, D., Resnick, R., dan Walker, J. 2010. *Fisika Dasar Edisi 7 Jilid 1*. Jakarta: Erlangga.
- Hannula, S. P. dalam Kim, K. S., Song, J. Y., Chung, E. K., Park, J. K., dan Hong, S. H. 2006. Relationship between Mechanical Properties and Microstructure of Ultra-Fine Gold Bonding Wires. *Mechanics of Materials* (38): 119–127.
- Hauwali, N. U. J. 2015. Studi Pengaruh Suhu Awal Quenching Terhadap Jumlah Struktur Icosahedral Material Besi Menggunakan Simulasi Dinamika molekul. *Skripsi*. Jember: Universitas Jember.
- Huheey, J. E. & Keither, R. L. 1993. *Inorganic Chemistry, Fourth Edition*. New York: Hampercollies College Publisher.
- Jacobs, M. H. 1999. *Introduction to Aluminium as an Engineering Material Basic Level*. United Kingdom: University of Birmingham.
- Kittel, C. 1996. *Introduction to Solid State Physics Seventh Edition*. USA: John Wiley & Sons, Inc.
- Maulana, Su'ud, Hermawan, dan Khairurijal. 2005. Studi Sifat Pb-Bi dengan Metoda Molekular Dinamik. *Risalah Lokakarya Komputasi dalam Sains dan Teknologi Nuklir XVI*: 55-63.
- Olliges, S., Gruber, P. A., Auzelyte, V., Ekinci, Y., Solak, H. H., dan Spolenak, R. 2007. Tensile Strength of Gold Nanointerconnects Without The Influence of Strain Gradients. *Acta Materialia* 55. Published by Elsevier Ltd: 5201–5210
- Oxtoby, Gillis, dan Nachtrieb. *Prinsip-prinsip Kimia Modern Edisi Keempat Jilid 1*. Terjemahan oleh Suminar. 2001. Jakarta: Erlangga.

- Pazurikova, J. 2014. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations for Highly Parallel Infrastructures. *Tesis*. Masaryk University: Faculty of Informatics.
- Popov, E. P. 1996. *Mekanika Teknik Edisi Kedua*. Jakarta: Erlangga.
- Puri, R. K. & Babbar, V. K. 2001 (dalam Sa'adah, U. 2015). *Solid State Physics and Electronics*. New Delhi: S. Chand & Company Ltd.
- Qi, G. dan Zhang, S. dalam Kim et al. 2006. Relationship between mechanical properties and microstructure of ultra-fine gold bonding wires. *Mechanics of Materials* 38: 119–127.
- Rapaport, D. C. 2004. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press.
- Smallman, R. E. & Bishop, R. J. 1999. *Modern Physical Metallurgy and Materials Engineering Sixth Edition*. London: Butterworth-Heinemann.
- Smith, D. R. dan Fickett, F. R. 1995. Low-Temperature Properties of Silver. *Journal of Research* 100 (2). Maret-April 1995. National Institute of Standards and Technology: 119-171.
- Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L. (Tanpa Tahun). Molecular Dynamics Simulations <http://www.ch.embnet.org/MDtutorial/>. [diakses 13 Oktober 2016].
- Stukowski, A. 2010 (dalam Sa'adah, U. 2015). Visualization and Analysis of Atomic Simulation Data with OVITO-the Open Visualization Tool. Modelling Simulation Material. *Science Engineering* 18 015012.
- Surdia, T. & Saito, S. 1999. *Pengetahuan Bahan Teknik Cetakan Ke-4*. Jakarta: PT. Padnya Paramita.
- Vita, P. L. 2015. Studi suku “Cross-Interaction” pada Simulasi Dinamika Molekul Lennard-Jones Material Besi dalam Logam Cair Timbal-Bismuth. *Skripsi*. Jember: Universitas Jember.
- Vliet, G. L. J. V. & Both, W. *Teknologi untuk Bangunan Mesin Bahan-bahan I, Cetakan ke-1*. Alih bahasa oleh Haroen. 1984. Jakarta: Erlangga.
- Witoelar, A. 2002. Perancangan dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones. *Skripsi*. Bandung: Institut Teknologi Bandung.

Yamamoto, R. dan Doyama, M. 1974. Technical Notes The Application of Morse Potential Function to Metallic Solid Solutions. *Journal Physics Chemical Solids* 35: 759-761.

Young, H. D. & Freedman, R. A. 2002. *Fisika Universitas Edisi Kesepuluh Jilid 1*. Jakarta: Erlangga.

Zhan, dalam Camprubi G. S. 2011. Mechanical Properties at Nano-Level. *Tesis*. Sweden: Lund University.



LAMPIRAN

Lampiran 1.3a Tabel Nilai Modulus Young Logam Nikel dengan Variasi Ukuran pada Temperatur 300 K

Dimensi	Kekuatan Tarik (GPa)	E Simulasi (Gpa)	E Referensi (Gpa)	Diskrepansi, E (%)
10x10x10	18,5	209,85		0,1
10x20x30	18,8	208,64		0,6
30x20x10	18,7	209,33		0,3
20x20x20	18,7	209,09		0,4
20x20x30	18,7	208,14		0,9
30x20x20	18,8	208,08	210	0,9
20x30x30	18,9	208,32		0,8
30x20x30	18,9	207,84		1,0
30x30x20	18,8	208,70		0,6
30x30x30	18,9	209,20		0,4

Lampiran 1.3b Kurva Tegangan-Regangan Logam Nikel dengan Variasi Ukuran pada Temperatur 300 K

