



**STUDI TITIK LELEH BESI (Fe) DAN TIMBAL (Pb)  
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA  
MOLEKUL**

**SKRIPSI**

Oleh  
**Farisatul Lutfiah Arini**  
**NIM 101810201008**

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



**STUDI TITIK LELEH BESI (Fe) DAN TIMBAL (Pb)  
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA  
MOLEKUL**

**SKRIPSI**

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

Oleh  
**Farisatul Lutfiah Arini**  
**NIM 101810201008**

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

**PERSEMBAHAN**

Skripsi ini saya persembahkan dengan penuh rasa cinta, syukur dan terima kasih yang sebesar-besarnya untuk

1. kedua orang tuaku yang paling aku cintai Hari Supriyanto dan Feti Fatimah, yang selalu menyayangiku, mendukungku, dan memberiku semangat;
2. kakakku Efi Chandra Andhari dan adikku Idham Fitra Rahmanto yang sangat aku cintai, yang selalu memberikan motivasi dan dukungan selama ini;
3. guru-guruku yang sejak taman kanak-kanak hingga perguruan tinggi telah memberikan ilmu dan membimbingku selama ini;
4. seluruh keluarga besar Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

**MOTTO**

*Fighting has been enjoined upon you while it is hateful to you. But perhaps you hate a thing and it is good for you; and perhaps you love a thing and it is bad for you. And Allah Knows, while you know not. (QS surat Al-Baqarah 216)\*)*

---

\*) Departemen Agama Republik Indonesia. 2012. *Al-Hadi: Al Qur'an Terjemah Per Kata Latin dan Kode Tajwid*. Jakarta: Penerbit Satu Warna.

**PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Farisatul Lutfiah Arini

NIM : 101810201008

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Studi Titik Leleh Besi (Fe) dan Timbal (Pb) dengan Menggunakan Metode Dinamika Molekul” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali jika dalam pengutipan substansi disebutkan sumbernya, dan belum pernah diajukan pada institusi manapun, serta 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 adanya tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, Maret 2015  
Yang menyatakan,

Farisatul Lutfiah Arini  
NIM 101810201008

**SKRIPSI**

**STUDI TITIK LELEH BESI (Fe) DAN TIMBAL (Pb) MENGGUNAKAN  
METODE DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh

Farisatul Lutfiah Arini  
NIM 101810201008

Pembimbing:

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

Dosen Pembimbing Anggota : Drs. Sujito, Ph.D.

**PENGESAHAN**

Skripsi berjudul “Studi Titik Leleh Besi (Fe) dan Timbal (Pb) Menggunakan Metode Dinamika Molekul” telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal :

tempat :

Tim Penguji:

Ketua

Sekretaris

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.  
NIP 19691225 199903 1 001

Drs. Sujito, Ph.D.  
NIP 19610204 198711 1 001

Anggota I

Anggota II

Ir. Misto, M.Si.  
NIP 19591121 199103 1 002

Puguh Hiskiawan, S.Si, M.Si.  
NIP 19741215 200212 1 001

Mengesahkan

Dekan,

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

NIP 19610108 198602 1 001

**RINGKASAN**

**STUDI TITIK LELEH BESI (Fe) DAN TIMBAL (Pb) MENGGUNAKAN METODE DINAMIKA MOLEKUL;** Farisatul Lutfiah Arini, 101810201008; 2015: 75 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penelitian mengenai fisika bahan merupakan hal yang penting dilaksanakan terutama apabila dikaitkan dengan desain material baru untuk berbagai tujuan aplikatif. Sebagai contoh mengetahui titik leleh suatu bahan menjadi penting apabila dikaitkan dengan studi kekuatan bahan dan desain bahan baru tahan panas. Metode dinamika molekul merupakan sebuah teknik yang digunakan untuk mensimulasi pergerakan atom-atom atau molekul dan sistem makroskopis dalam bentuk simulasi komputer selama periode waktu tertentu berdasarkan hukum fisika dinamika newton.

Pada penelitian tugas akhir ini dilakukan pemodelan bahan dan penghitungan titik leleh bahan Fe dan Pb. Gambaran dari penelitian simulasi ini adalah dapat memodelkan bahan Fe dan Pb hingga dapat digambarkan struktur Kristal dan titik lelehnya melalui simulasi. Penelitian dasar ini sangat berguna untuk penelitian lebih lanjut manakala model sembarang kristal bahan diinteraksikan dengan logam cair untuk mengetahui kekuatannya salah satunya berdasarkan titik leleh.

Dalam metode ini digunakan beberapa program dinamika molekul antara lain adalah Program LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) untuk menentukan nilai titik leleh bahan, program Ovito (*Open Visualization Tool*) untuk menggambarkan struktur bahan ketika bahan mencapai nilai titik leleh, dan program ISAACS (*Interactive Structure Analisis of Amorphous*

*and Crystalline System*) untuk menggambarkan grafik fungsi distribusi radial (RDF) yang menganalisa bentuk struktur kristal bahan melalui hubungan jarak antar dua atom dan koefisien yang menyatakan banyaknya atom pada jarak tersebut .

Simulasi dilakukan untuk mendapatkan data trayektori atom yang dapat digunakan untuk menentukan nilai titik leleh bahan. Simulasi dilakukan terhadap beberapa sampel atom yaitu dimulai dari nilai kubus berdimensi 1x1x1 hingga 15x15x15. Melalui analisis grafik ini kemudian ditentukan besarnya nilai titik leleh pada simulasi atom (10x10x10 sebanyak 2.000 atom) untuk bahan Fe dan simulasi (10x10x10 sebanyak 4.000 atom) untuk bahan Pb. Hasil simulasi berupa grafik perubahan wujud bahan. Nilai titik leleh Fe berada pada nilai sebesar  $(1813,03 \pm 70,60^\circ)\text{C}$ . Nilai titik leleh Pb berada pada nilai  $(842,4^\circ \pm 30,85^\circ)\text{C}$ .

Prediksi titik leleh pada suhu tersebut baik Fe dan Pb masih perlu diverifikasi dengan melihat juga struktur kristal bahan pada suhu tersebut dengan simulasi menggunakan *software* Ovito. Dari data hasil visualisasi menggunakan *software* Ovito, terdapat informasi yang menunjukkan besar nilai jumlah struktur Kristal. Pada suhu rendah nilai struktur kristal masih besar yang menunjukkan bahan berada pada fase padat. Kemudian struktur kristal berkurang akibat kenaikan suhu. Suhu material mencapai yang titik leleh dan nilai struktur kristal hampir mendekati nol hal ini menunjukkan bahwa hampir seluruh material telah berubah menjadi cair pada suhu titik leleh.

Program ISAACS menghasilkan grafik RDF yaitu hubungan antara jarak antara dua atom dengan fungsi korelasi pada setiap atom yang berada pada jarak tersebut. Pada suhu awal simulasi  $0^\circ\text{C}$  bahan Fe dan Pb berada pada fase padat. Kurva memiliki banyak nilai 0 pada sumbu horisontal dikarenakan tidak ada korelasi atom pada jarak tersebut yang menyatakan bahan pada fase padat. Kemungkinan adanya atom sangat besar ketika fase bahan berada pada fase cairan di titik leleh karena struktur atom sudah tidak terikat rapi. Hal ini membuktikan bahwa pada suhu titik leleh bahan Fe dan Pb telah mencair.

## PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah Yang Maha Esa atas limpahan rahmat dan hidayah-Nya sehingga peneliti dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Titik Leleh Besi (Fe) dan Timbal (Pb) Menggunakan Metode 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 Karya Tulis Ilmiah ini telah mendapatkan pengarahan dan bimbingan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama dan Drs. Sujito, Ph.D., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran, dan perhatian dalam penulisan skripsi ini;
2. Ir. Misto, M.Si., selaku Dosen Penguji Utama dan Puguh Hiskiawan, S.Si, M.Si., selaku Dosen Penguji Anggota yang telah meluangkan waktu untuk menguji dan memberikan masukan demi kesempurnaan skripsi ini;
3. Bapak, Ibu, kakak Efi Chandra Andhari dan adik Idham Fitra Rahmanto yang senantiasa memberikan dukungan dan doa;
4. Teman – teman klub fisika komputasi (Dinamika Molekul), teman fisika seangkatan dan seperjuangan 2010, kakak angkatan dan adik angkatan yang selalu ada untuk membantu dalam penyelesaian skripsi;
5. Teman – teman anggota UKM TITIK dan anggota HIMAFI yang mengajarkan saya tentang loyalitas, organisasi dan tanggung jawab;

6. Sahabat saya Winda Olyvia, Devi Putri, Diar, Anniesa, Fatma, Dessy, Aisyah, Lina, Iza, dan Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu.

Peneliti menyadari bahwa penyusunan skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh sebab itu, saran dan kritik yang membangun dari pembaca sangat peneliti harapkan demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat.

Jember, Maret 2015

Penulis

DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL .....</b>	<b>i</b>
<b>PERSEMBAHAN.....</b>	<b>ii</b>
<b>MOTTO .....</b>	<b>iii</b>
<b>PERNYATAAN.....</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PEMBIMBING .....</b>	<b>v</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN.....</b>	<b>vi</b>
<b>RINGKASAN .....</b>	<b>vii</b>
<b>PRAKATA.....</b>	<b>ix</b>
<b>DAFTAR ISI.....</b>	<b>xi</b>
<b>DAFTAR GAMBAR.....</b>	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR LAMPIRAN .....</b>	<b>xvi</b>
<b>BAB 1. PENDAHULUAN .....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Latar Belakang .....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Rumusan Masalah dan Batasan Masalah.....</b>	<b>3</b>
<b>1.3 Tujuan dan Manfaat .....</b>	<b>4</b>
<b>BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA.....</b>	<b>5</b>
<b>2.1 Besi (Fe) dan Timbal (Pb) .....</b>	<b>5</b>
<b>2.2 Simulasi Dinamika Molekul.....</b>	<b>6</b>
<b>2.2.1 Persamaan Gerak.....</b>	<b>7</b>
<b>2.2.2 Interaksi Intermolekul .....</b>	<b>10</b>
<b>2.2.3 Energi Potensial EAM.....</b>	<b>11</b>
<b>2.2.4 Solusi Numerik Persamaan Gerak .....</b>	<b>12</b>
<b>2.2.5 Struktur Kristal.....</b>	<b>13</b>
<b>2.3 Program Dinamika Molekul LAMMPS .....</b>	<b>15</b>

2.4 Program Dinamika Molekul OVITO .....	16
2.5 Program Dinamika Molekul ISAACS.....	17
<b>BAB 3. Metode Penelitian .....</b>	<b>20</b>
3.1 Waktu dan Tempat .....	21
3.2 Alat dan Bahan.....	21
3.3 Tata Laksana Penelitian.....	21
3.3.1 Prosedur Simulasi.....	21
3.3.2 Langkah Kerja .....	22
3.3 Metode Analisis .....	24
<b>BAB 4. HASIL PENELITIAN .....</b>	<b>26</b>
4.1 Hasil dan Data Pengamatan.....	26
4.2 Simulasi Titik Leleh .....	27
4.3 Visualisasi Struktur Kristal.....	30
4.4 Analisis menggunakan grafik RDF ( <i>Radial Distribution</i> <i>Function</i> ) .....	45
<b>BAB 5. PENUTUP.....</b>	<b>50</b>
5.1 Kesimpulan .....	51
5.2 Saran.....	52
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>53</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>54</b>

## DAFTAR GAMBAR

2.1	Flowchart tahapan simulasi dinamika molekul .....	10
2.2	Kristal Lattice .....	14
2.3	Struktur kristal FCC.....	14
2.4	Struktur kristal BCC .....	15
2.5	Grafik titik leleh material.....	16
2.6	Situs web <a href="http://lammmps.sandia.gov">http://lammmps.sandia.gov</a> .....	16
2.7	Layar monitor program Ovito.....	17
2.9	Layar monitor program ISAACS .....	17
2.10	Kurva fungsi distribusi radian fase padat .....	18
2.11	Kurva fungsi distribusi radian fase cair .....	19
2.12	Kurva fungsi distribusi radian fase gas.....	19
3.1	Bagan tahapan-tahapan penelitian .....	23
3.2	Grafik analisis titik leleh material .....	25
4.1	Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Fe dengan jumlah atom 10x10x10.....	27
4.2	Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Pb dengan jumlah atom 11x11x11.....	29
4.3	Screenshoot lembar kerja program ovito untuk menentukan nilai CNA dalam simulasi bahan .....	32
4.4	Titik – titik pendefinisian visualisasi struktur bahan Fe dengan jumlah atom 10x10x10 .....	33
4.5	Visualisasi struktur bahan Fe dititik a dengan jumlah atom 10x10x10 .....	34
4.6	Visualisasi struktur bahan Fe dititik b dengan jumlah atom 10x10x10 .....	34
4.7	Visualisasi struktur bahan Fe dititik c dengan jumlah atom 10x10x10 .....	35

4.8	Visualisasi struktur bahan Fe dititik d dengan jumlah atom 10x10x10 .....	35
4.9	Visualisasi struktur bahan Fe dititik e dengan jumlah atom 10x10x10 .....	36
4.10	Visualisasi struktur bahan Fe dititik f dengan jumlah atom 10x10x10 .....	36
4.11	Visualisasi struktur bahan Fe dititik g dengan jumlah atom 10x10x10 .....	37
4.12	Hubungan nilai BCC dan suhu simulasi dalam simulasi Fe 10x10x10 .....	38
4.13	Hubungan nilai BCC dan step integrasi dalam simulasi Fe 10x10x10 .....	38
4.14	Titik – titik pendefinisian visualisasi struktur bahan Fe dengan jumlah atom 10x10x10 .....	39
4.15	Visualisasi struktur bahan Pb dititik a dengan jumlah atom 11x11x11 .....	40
4.16	Visualisasi struktur bahan Pb dititik b dengan jumlah atom 11x11x11 .....	40
4.17	Visualisasi struktur bahan Pb dititik c dengan jumlah atom 11x11x11 .....	41
4.18	Visualisasi struktur bahan Pb dititik d dengan jumlah atom 11x11x11 .....	41
4.19	Visualisasi struktur bahan Pb dititik e dengan jumlah atom 11x11x11 .....	42
4.20	Visualisasi struktur bahan Pb dititik f dengan jumlah atom 11x11x11 .....	42
4.21	Visualisasi struktur bahan Pb dititik g dengan jumlah atom 11x11x11 .....	43

4.22 Hubungan Nilai FCC dan suhu simulasi dalam simulasi Pb 11x11x11 .....	44
4.23 Hubungan Nilai FCC dan step integrasi dalam simulasi Pb 11x11x11 .....	44
4.24 Grafik RDF pada suhu pada suhu awal simulasi Fe 10x10 .....	46
4.25 Grafik RDF pada suhu pada suhu titik leleh simulasi Fe 10x10 .....	47
4.26 Grafik RDF pada suhu pada suhu akhir simulasi Fe 10x10 .....	48
4.27 Grafik RDF pada suhu pada suhu awal simulasi Pb 11x11x11 .....	48
4.28 Grafik RDF pada suhu pada suhu titik leleh simulasi Pb 11x11x11 .....	49
4.29 Grafik RDF pada suhu pada suhu akhir simulasi Pb 11x11x11 .....	49

**DAFTAR LAMPIRAN**

	Halaman
A. Perhitungan rumusan Dinamika Molekul .....	57
B. Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Fe .....	59
C. Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Pb .....	67

## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Kemajuan zaman dilatarbelakangi oleh kemajuan ilmu teknologi dan pengetahuan yang terus berkembang. Peningkatan dan pencapaian ilmu pengetahuan semakin mempermudah pekerjaan manusia dan mengestimasi pengeluaran dengan beragam metode. Penelitian mengenai fisika bahan merupakan hal yang penting dilaksanakan terutama jika dikaitkan dengan desain material baru untuk berbagai tujuan aplikatif. Sebagai contoh mengetahui titik leleh suatu bahan adalah penting jika dikaitkan dengan studi kekuatan bahan. Studi titik leleh suatu bahan penting jika dikaitkan dengan desain bahan baru tahan panas. Untuk menentukan titik leleh suatu bahan umumnya dibutuhkan sebuah eksperimen. Studi bahan baru dalam hal ini dapat dilakukan dengan simulasi komputer. Dengan simulasi komputer maka bahan baru dan proses-proses kimia fisika yang berkaitan dapat dimodelkan atau disimulasikan terlebih dahulu sebelum dilakukan sintesis bahan secara langsung.

Metode dinamika molekul merupakan sebuah teknik yang digunakan untuk mensimulasi pergerakan atom-atom atau molekul dan sistem makroskopis seperti sistem galaksi yang berinteraksi dengan fungsi potensial interaksi tertentu dalam bentuk simulasi komputer selama periode waktu tertentu berdasarkan hukum fisika dinamika newton. Simulasi dinamika molekul memberikan informasi besaran-besaran statik dan dinamik pada skala atomik (Cuendet, 2008).

Pada penelitian tugas akhir ini dilakukan pemodelan bahan dan penghitungan titik leleh bahan Fe dan Pb. Baja merupakan logam yang terbuat dari campuran beberapa unsur logam *alloys*. Salah satu komponen baja tersebut adalah logam Fe. Bahan baja merupakan bahan yang digunakan dalam kehidupan sehari – hari. Penelitian terhadap baja belum pernah dilakukan pada tugas akhir ini, dan sebagai studi awal diteliti besi (komponen utama baja). Hasil dari penelitian simulasi

ini adalah dapat memodelkan bahan Fe dan Pb hingga dapat digambarkan struktur kristal dan titik lelehnya melalui simulasi dan disesuaikan dengan data eksperimen. Penelitian dasar ini sangat berguna untuk penelitian lebih lanjut manakala model sembarang kristal bahan akan diinteraksikan dengan logam cair untuk mengetahui kekuatannya salah satunya berdasarkan titik leleh.

Penelitian ini sebenarnya terinspirasi dari penelitian lain tentang fenomena penghambatan korosi pada logam (Arkundato, 2013). Dalam penelitian tersebut simulasi dinamika molekul digunakan untuk memperhitungkan kemungkinan korosi pada Fe dapat terhambat dengan cara menginjeksi oksigen kedalam Fe. Pada penelitian tersebut simulasi menggunakan potensial Lennard-Jones. Penelitian selanjutnya adalah dengan menggunakan potensial EAM (*Embedded Atomic Method*) yang dianggap lebih tepat untuk logam namun lebih rumit. Potensial EAM menyatakan kerapatan elektron logam yang membutuhkan konstruksi kisi dan tetangga dari atom tersebut (Zhou, 2012).

Potensial EAM digunakan untuk memodelkan bahan Fe dan Pb, kemudian dihitung nilai besaran-besaran fisis titik leleh logam. Pada penelitian ini metode simulasi yang dipilih adalah metode simulasi dinamika molekul yang banyak digunakan sebagai metode standar komputasi bahan. Dalam metode ini digunakan beberapa program dinamika molekul, antara lain program LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) untuk menentukan nilai titik leleh bahan, program OVITO (*Open Visualization Tool*) untuk menggambarkan struktur bahan ketika bahan mencapai nilai titik leleh, dan program ISAACS (*Interactive Structure Analysis of Amorphous and Crystalline System*) untuk menggambarkan grafik fungsi distribusi radial (RDF) yang menganalisa bentuk struktur kristal bahan melalui hubungan jarak antar dua atom dan koefisien yang menyatakan banyaknya atom pada jarak tersebut .

Program LAMMPS, OVITO dan ISAACS dapat diunduh secara gratis melalui internet. Program LAMMPS dapat diunduh di <http://lammps.sandia.gov>. Input data yang dibutuhkan adalah struktur kristal bahan, massa atom bahan, kristal

*lattice* bahan dan rentang suhu selama simulasi. Dengan data input tersebut kemudian disimulasikan menurut fungsi potensial energi. Maka seterusnya dihitung besaran fisis yang ditentukan besarnya. Selanjutnya struktur bahan ketika mencapai suhu titik leleh dapat diamati dengan menggunakan simulasi program OVITO yang dapat diunduh di <http://OVITO.org>. OVITO menggunakan input data dari nilai koordinat atom yang didapat dari simulasi penentuan titik leleh menggunakan program LAMMPS. Nilai koordinat atom tersebut juga dapat digunakan untuk input data simulasi menggunakan program ISAACS sehingga dihasilkan grafik hubungan antara jarak antar dua atom dengan koefisien yang fungsi korelasi banyaknya atom yang berada pada jarak tersebut. Program ISAACS dapat diunduh di <http://isaacs.sourceforge.net/>.

## 1.2 Rumusan Masalah

Untuk keberhasilan penelitian ini maka dihimpun berbagai permasalahan yang dapat mendukung studi simulasi menggunakan metode dinamika molekul sebagai berikut:

1. Berapa nilai titik leleh yang didapat melalui hasil simulasi menggunakan dinamika molekul?
2. Bagaimana struktur bahan pada saat bahan mencapai titik leleh?

## 1.3 Batasan Masalah

Batasan Masalah dari penelitian studi simulasi titik leleh Fe dan Pb menggunakan metode dinamika molekul adalah penelitian ini hanya membahas

1. Struktur kisi yang digunakan adalah FCC (*Face Center Cubic*) untuk bahan Pb dan BCC (*Body Center Cubic*) untuk bahan Fe.
2. Struktur bahan dievaluasi menggunakan *software* OVITO.
3. Simulasi Metode Dinamika Molekul menggunakan *software* LAMMPS.

4. Visualisasi kurva distribusi fungsi radial menggunakan *software* ISAACS.
5. Struktur yang digunakan dalam simulasi diasumsikan merupakan struktur kristal murni sehingga ikatan antar atom lebih kuat.

#### **1.4 Tujuan**

Tujuan utama dari studi simulasi menggunakan metode dinamika molekul berikut:

1. Memperoleh model bahan Fe dan Pb yang tepat untuk simulasi dengan menggunakan metode dinamika molekul.
2. Menentukan titik leleh suatu bahan.
3. Mendapatkan metode penentuan titik leleh bahan.

#### **1.5 Manfaat**

Adapun manfaat dari kegiatan penelitian ini secara umum adalah memprogramkan metode simulasi dinamika molekul untuk berbagai macam permasalahan fisika. Dengan simulasi dinamika molekul ini maka dapat diprediksi nilai titik leleh suatu bahan berdasarkan model potensial dan model struktur untuk bahan tersebut. Dengan mengetahui titik leleh bahan berdasarkan model tersebut dan lalu dibandingkan dengan data eksperimen dan dilakukan kalibrasi, maka model bahan yang diperoleh dapat digunakan untuk keperluan penelitian lanjut.

## BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 Besi (Fe) dan Timbal (Pb)

Fe adalah salah satu material logam yang dibutuhkan oleh dunia untuk membangun kehidupan. Seperti dalam aplikasinya yang dicampur dengan logam lain sebagai komponen pembuat baja yang tahan lama. Beberapa sifat Fe dapat berubah menjadi magnet, memiliki kekuatan yang besar, dapat menghantarkan listrik, Fe cepat mengalami korosi dan beberapa sifat besi lainnya. Fe biasanya ditempa dan dilelehkan kemudian akan dibentuk menjadi benda-benda yang digunakan dalam kehidupan sehari-hari. Fe dapat meleleh pada suhu  $1535^{\circ}\text{C}$  (*Australian Geological Survey Organization, 1999*).

Untuk membuat baja, Fe terlebih dahulu dilelehkan pada suhu yang tinggi. Kemudian dicampurkan dengan logam lain seperti nikel, kromium, mangan atau titanium. Pencampuran Fe dan logam lain menyebabkan baja bersifat kuat, tidak mudah korosi, dan dapat menghantarkan arus listrik (*Australian Geological Survey Organization, 1999*).

Timbal adalah logam berat yang beracun pada tingkat paparan yang sangat rendah dan memiliki efek akut serta kronis terhadap kesehatan manusia. Timbal terbuat dari berbagai sumber alam antropogenik di atmosfer, lingkungan perairan dan dari dalam bumi. Timbal dilepaskan ke atmosfer diendapkan di darat dan mengalir ke lingkungan perairan (*United Nations environment programe, 2010*). Pb juga dapat ditemukan di tanah. Pb berbentuk lembut, berupa logam terberat dari seluruh logam karbon, dan berwarna biru keabuan dengan permukaan yang mengkilat. Pb memiliki titik leleh pada suhu  $327^{\circ}\text{C}$ . Pb tidak dapat menghantarkan arus listrik, suara dan getaran dengan baik. (Winter, 1993).

Tabel 2.1 Tabel titik leleh beberapa material

No	Element	Simbol	Titik Leleh °C
1	Aluminium	Al	695
2	Brass	Cu+Zn	900-940
3	Bronze	Cu+Sn	850-1000
4	Cast Iron	C+Si+Mn+Fe	1260
5	Carbon	C	3600
6	Chromium	Cr	1615
7	Copper	Cu	1083
8	Gold	Au	1063
9	Hidrogen	H	-259
10	Inconel	Ni+Cr+Fe	1393
<b>11</b>	<b>Iron</b>	<b>Fe</b>	<b>1535</b>
<b>12</b>	<b>Lead</b>	<b>Pb</b>	<b>327</b>
13	Magnesium	Mg	670

Sumber : Garelik 2009

## 2.2 Simulasi Dinamika Molekul

Dalam banyak kasus, pemahaman mendasar sifat-sifat material memerlukan pengetahuan atau informasi pada level mikroskopik. Pada umumnya informasi ini tidak mudah diperoleh melalui eksperimen (Aral, 2003). Oleh karena itu metode komputasi material sering diterapkan secara luas untuk berbagai problem dalam bidang yang berbeda. Dalam hal ini metode dinamika molekul berhasil diterapkan untuk berbagai keperluan studi komputasi material, baik dalam kimia, fisika, maupun biologi untuk memprediksi sifat-sifat kimia fisika (Ackland, 2011). Diharapkan hasil simulasi material dapat digunakan sebagai panduan bagi eksperimentalis untuk menemukan material-material baja baru yang unggul tahan terhadap korosi logam cair.

Dinamika molekul adalah kombinasi dari fisika, matematika, dan teknologi sintesis kimia. Dinamika molekul adalah metode pemodelan molekul yang bergantung pada mekanika Newton untuk mensimulasikan gerakan sistem molekuler. Metode dinamika molekul telah berkembang pesat dan diterapkan ke berbagai kasus terutama untuk penelitian komputasi material (Maulana dkk, 2008).

Dinamika molekul diterapkan untuk sistem material seperti kumpulan partikel, atom atau molekul. Bagaimana gerak evolusi semua partikel yang membentuk trayektori gerak dapat diamati dengan menggunakan metode dinamika molekul. Kemudian dapat diaplikasikan bagaimana cara menetapkan dan mendefinisikan potensial interaksi antar atom yang sesuai untuk obyek yang diteliti. Selanjutnya dengan menggunakan konsep-konsep mekanika statistik, dari trayektori-trayektori seluruh partikel dapat dihitung besaran-besaran termodinamika yang ingin diketahui, sistem seperti energi total, koefisien difusi, panas jenis, entalpi dan sebagainya.

Dalam metode dinamika molekul trayektori biasanya didapat dari solusi persamaan gerak klasik partikel seperti hukum gerak Newton. Karena untuk sistem konservatif gaya dapat diperoleh dari nilai negatif turunan fungsi energi potensial, maka dalam metode dinamika molekul, kemampuan mendefinisikan fungsi energi potensial yang tepat untuk sistem yang diamati adalah hal yang sangat penting. Sangat sering simulasi dinamika molekul dapat menunjukkan kondisi eksperimen sehingga hasil perhitungannya dapat dibandingkan dengan hasil pengamatan eksperimen.

### 2.2.1 Persamaan Gerak

Dinamika klasik untuk sistem banyak benda (*many-body system*) rumusnya dapat ditelusuri dari Hamiltonian untuk  $N$  buah atom (Aral, 2003).

$$H(\vec{r}, \vec{P}) = E_K + E_P = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{P}_i^2}{2m_i} + U(\{\vec{r}_i\}) \quad (2.1)$$

Pada persamaan ini suku pertama  $E_K$  adalah energi kinetik dan suku kedua  $E_p$  adalah energi potensial sistem dengan  $m_i$  adalah massa partikel ke  $i$ ,  $r$  adalah vektor posisi partikel ke  $i$ ,  $p_i$  adalah momentum partikel ke  $i$  dan  $U(\{r\})$  adalah energi potensial sistem total.

$$\dot{\vec{r}}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\vec{P}_i}{m_i} \quad (2.2)$$

$$\dot{\vec{P}}_i = -\frac{\partial H}{\partial r_i} = \vec{F}_i \quad (2.3)$$

Kedua persamaan ini disebut persamaan-persamaan Hamilton yang sesuai dengan  $H$  yang diberikan. Dari kedua persamaan tersebut dapat dirumuskan persamaan gerak Newton,

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i \quad (2.4)$$

Dengan  $\vec{F}_i$  adalah gaya yang bekerja pada partikel ke  $i$ . Gaya tersebut dapat diturunkan dari fungsi potensial  $U$  yaitu,

$$\vec{F}_i = -\frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_n)}{\partial \vec{r}_1} \quad (2.5)$$

Potensial antar atom (*interatomic potential*) seperti telah disampaikan diatas adalah hal yang penting untuk simulasi dinamika molekul. Persoalan dinamika telah disederhanakan dengan mencari rumusan yang tepat untuk fungsi energi potensial sebagai fungsi dari koordinat-koordinat atom. Problem fisis sekarang adalah berusaha mendapatkan trayektori sistem dari persamaan 2.4 yang merupakan persamaan diferensial orde dua dengan gaya yang dapat diturunkan dari persamaan 2.5. Untuk sistem 3D, persamaan 2.4 untuk  $N$  atom yang saling berinteraksi dituliskan menjadi:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.6)$$

dengan vektor posisi  $\vec{r}_i = \{\vec{x}_i, \vec{y}_i, \vec{z}_i\}$  dan gaya yang bekerja pada atom ke  $i$  adalah  $\vec{F}_i = \{\vec{f}_i^x, \vec{f}_i^y, \vec{f}_i^z\}$  dengan  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ . Dengan demikian dapat kita pisahkan  $3N$  buah persamaan:

$$m_i \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = F_i^x \quad (2.7a)$$

$$m_i \frac{d^2 y_i(t)}{dt^2} = F_i^y \quad (2.7b)$$

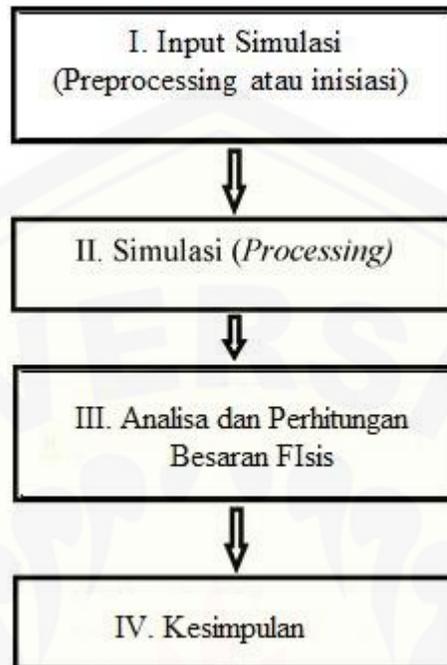
$$m_i \frac{d^2 z_i(t)}{dt^2} = F_i^z \quad (2.7c)$$

Percepatan partikel menurut persamaan 2.6 dapat diberikan oleh,

$$\vec{a}_i = \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \ddot{\vec{r}}_i = \frac{\vec{F}_i}{m_i} \quad (2.8)$$

Berdasarkan persamaan 2.4 maka trayektori sistem  $(r, t)$  dapat diperoleh dengan mengintegrasikan persamaan orde dua tersebut, dengan memberikan posisi-posisi awal semua atom dan juga kecepatan-kecepatan awal semua atom. Pada umumnya potensial untuk sistem material rumit sehingga persamaan gerak Newton harus dipecahkan secara numerik.

Pada umumnya material yang disimulasikan mengandung 10 hingga  $10^9$  buah atom dan waktu simulasi yang diperlukan sekitar  $10^3 \cdot \Delta t$  hingga  $10^6 \cdot \Delta t$  untuk  $\Delta t$  adalah selang waktu antara dua waktu sesaat yang berturutan (Aral, 2003). Jumlah atom yang dilibatkan dalam simulasi untuk menggambarkan material bergantung pada kompleksitas masalah dan kemampuan penyimpanan serta kecepatan proses dari komputer yang digunakan untuk menjalankan simulasi. Selanjutnya implementasi simulasi dinamika molekul umumnya melalui beberapa tahapan penyelesaian berikut:



Gambar 2.1 *Flowchart* tahapan simulasi dinamika molekul (Artoto, 2013)

Keterangan :

- I. Memasukan input simulasi dinamika molekul pada LAMMPS seperti massa, energi potensial, jumlah atom, dan temperatur.
- II. *Running* program LAMMPS hingga diperoleh data-data simulasi
- III. Analisis data simulasi seperti grafik energi potensial dan temperatur, visualisasi struktur atom, dan visualisasi dinamika molekul atom.
- IV. Kesimpulan

### 2.2.2 Interaksi Intermolekul

Potensial interaksi antar atom adalah hal yang paling menentukan dari keberhasilan penerapan metode dinamika molekul. Interaksi ini biasanya digambarkan oleh dekomposisi fungsi energi potensial menjadi interaksi-interaksi menyangkut atom-atom tunggal, pasangan atom (dwi atom), tripel atom, dan seterusnya seperti persamaan berikut (Abrams, 2009):

$$U(\vec{r}^N) = U_0 + \sum_{i=1}^N U_1(\vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N U_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N \sum_{k=j+1}^N U_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \quad (2.9)$$

Dengan  $U_0$  adalah potensial acuan,  $U_1$  adalah potensial satu benda,  $U_2$  adalah potensial interaksi dua benda,  $U_3$  adalah potensial interaksi tiga benda dan seterusnya. Persamaan 2.9 dengan demikian mendefinisikan fungsi beberapa potensial benda. Khususnya jika kita memperhatikan simetri, suku dua benda dan tiga benda tidak bergantung pada posisi absolut molekul namun pada posisi - posisi relatif (Abrams, 2009)

$U(r_{ij})$  adalah fungsi energi potensial dua benda  $i$  dan  $j$ , dan  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  adalah jarak skalar antar pusat massa atom  $i$  dan  $j$ . Meskipun secara formal fungsi potensial ini merupakan deret dengan banyak suku namun sering dalam komputasi kita menyederhanakan hanya sampai beberapa suku pertama saja untuk mempercepat konvergensi penghitungan.

Bentuk  $U(r)$  untuk molekul dapat diperoleh dari perhitungan mekanika kuantum (*first principles*) namun demikian biasanya perhitungan kuantum sangat sulit sehingga pada banyak kasus bentuk potensial didekati secara fenomenologis misalnya dengan energi potensial.

### 2.2.3 Energi Potensial EAM (*Embedded Atomic Method*)

Potensial energi dapat diturunkan melalui persamaan Schrodinger (mekanika kuantum) dan secara umum sangat sulit. Beberapa pendekatan yang digunakan untuk mencari potensial antar atom telah dikerjakan. Diantaranya yang dianggap cocok untuk interaksi antar atom logam adalah potensial EAM (*Embedded Atomic Method*). Potensial ini diperoleh dari pendekatan mekanika kuantum umum dengan beberapa asumsi tertentu. Pada penulisan tugas akhir ini menggunakan potensial EAM namun tidak menghitung nilai potensial ini sendiri tetapi mengambil hasil perhitungan peneliti lain seperti yang diambil dari situs website <http://www.etems.nist.gov>.

Potensial EAM ini digunakan sebagai salah satu input untuk simulasi dinamika molekul.

#### 2.2.4 Solusi Numerik Persamaan Gerak

Dalam penerapan metode dinamika molekul yang sebenarnya adalah menggunakan persamaan gerak newton untuk problem banyak benda maka mencari solusi dari persamaan gerak sistem  $N$  partikel. Energi potensial adalah fungsi posisi atom ( $3N$ ) dari semua atom dalam sistem. Fungsi potensial rumusnya cukup rumit untuk sistem fisis, maka sebenarnya susah untuk mendapatkan solusi analitik untuk persamaan gerak tersebut, sehingga dalam praktek digunakan metode numerik untuk memecahkan persamaan gerak. Berbagai algoritma numerik kemudian telah dikembangkan untuk integrasi persamaan gerak. Rumusan solusi numerik diturunkan dari konsep deret Taylor untuk fungsi  $f$  sembarang yang dapat dideretkan menjadi,

$$f_{n+1} = f_n + h \frac{df_n(t)}{dt} + \frac{h^2}{2!} \frac{d^2 f_n(t)}{dt^2} + \dots + \frac{h^p}{p!} \frac{d^p f_n(t)}{dt^p} + \dots \quad (2.11)$$

Keterangan :

1.  $p!$  : faktorial  $p$
2.  $f_n$  : nilai turunan ke  $p$  dari fungsi  $f$  pada titik  $t$

Ada beberapa algoritma untuk solusi numerik persamaan Newton 2.4 seperti menggunakan algoritma Verlet.

##### 2.2.4.1 Algoritma Verlet

Tuliskan  $r$  dan  $v$  dalam ekspansi deret Taylor orde ketiga untuk  $(t + \Delta t)$  dan  $(t - \Delta t)$  dan menjumlahkannya untuk masing-masing  $r$  dan  $v$  (Abrams, 2009).

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.12)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.13)$$

Sehingga setelah menjumlahkan diperoleh,

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 \quad (2.14)$$

Atau jika percepatan dinyatakan dalam bentuk gaya maka:

$$a = -\left(\frac{1}{m}\right) \nabla V(r(t)) \quad (2.15)$$

Ini adalah algoritma Verlet untuk posisi  $r$ . Algoritma menggunakan posisi dan percepatan pada waktu  $t$  dan posisi pada waktu  $(t - \Delta t)$  untuk menghitung posisi baru pada waktu  $(t + \Delta t)$ . Semua ini harus disimpan pada setiap iterasi. Algoritma ini tidak menggunakan kecepatan secara eksplisit. Sementara dalam simulasi dinamika molekul memerlukan perhitungan energi kinetik sistem sedemikian hingga kita dapat melihat konservasi energi total. Demikian juga syarat awal penyelesaian persamaan gerak memerlukan syarat awal koordinat dan juga kecepatan, sedangkan algoritma Verlet ini hanya memerlukan syarat awal posisi. Algoritma ini mempunyai keuntungan yaitu rumusnya sederhana dan tidak memerlukan memori komputer yang terlalu besar. Untuk mendapatkan kecepatan kita selisihkan dua persamaan 2.17 dan 2.18 sehingga diperoleh (Haille, 1992)

$$v(\Delta t) = \frac{r(t - \Delta t) - r(t + \Delta t)}{2} \quad (2.16)$$

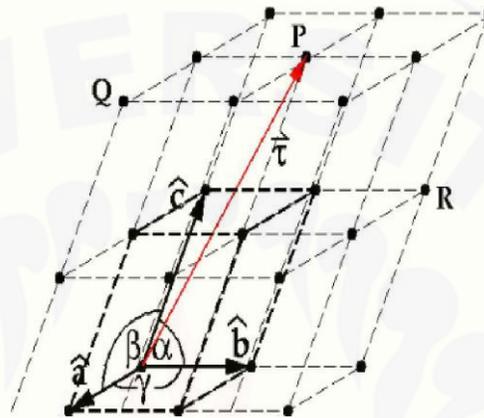
Algoritma tersebut memiliki kekurangan dalam hal akurasi yang moderat. Dalam penulisan tugas akhir ini menggunakan program LAMMPS yang didalamnya telah tercakup metode numerik penyelesaian persamaan gerak Newton sehingga penggunaannya langsung digunakan untuk simulasi bahan Fe dan Pb.

### 2.2.5 Struktur Kristal

Sebuah material terdiri dari atom atau molekul yang yang dapat berupa fase padat, cair, dan gas atom – atomnya bereaksi dengan fungsi potensial tertentu.

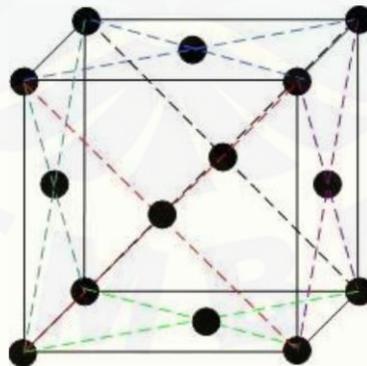
Bahan padat khususnya berupa kristal. Struktur kristal sebuah material atom atau molekul tersusun teratur dan berulang dalam pola 3 dimensi. Dalam material kristal terdapat unit kristal yang merupakan bagian terkecil dari sebuah struktur.

Kisi kristal merupakan sebuah kesatuan titik yang tidak terbatas dalam ruang. Setiap titik memiliki sifat yang identik dengan titik lainnya. Struktur kristal dapat diperoleh dengan memasukan atom, kelompok atom atau molekul. Sebuah kristal 3D akan mudah digambarkan oleh vektor satuan  $a$ ,  $b$ , dan  $c$ . Jika ada titik kisi maka akan diwakili oleh vektor posisi dititik beku tersebut.



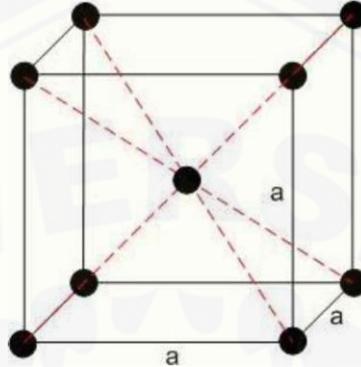
Gambar 2.2 Kisi Kristal ( Paul Valery, 2009 )

Struktur kristal 3D umumnya dapat dibedakan dalam 3 unit kristal (kristal satuan) yaitu SC (*Simple Cubic*), FCC (*Face Centered Cubic*), dan BCC (*Body Centered Cubic*). Struktur kristal FCC (*Face Centered Cubic*) yaitu sebuah kristal yang terdapat titik sel atom pada sudut-sudut dan pusat dari masing-masing permukaan atom. Contoh dari material dengan struktur kisi FCC adalah Pb (Timbal)



Gambar 2.3 Struktur kristal FCC ( Paul Valery, 2009 )

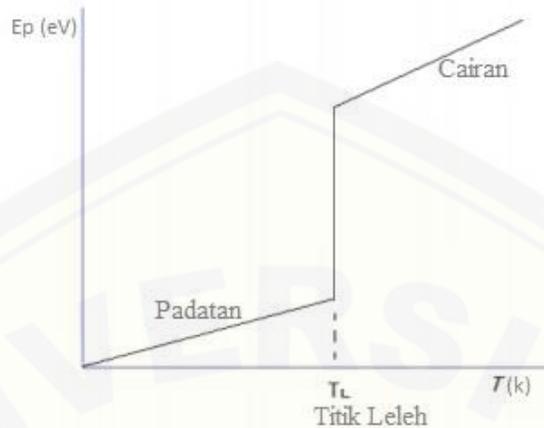
Struktur kristal BCC (*Body Centered Cubic*) yaitu sebuah kristal yang atom – atomnya berada pada sudut-sudut kubus dengan atom lain dipusat kubus. Contoh dari material dengan struktur kisi BCC adalah Fe (Besi)



Gambar 2.4 Struktur kristal BCC ( Paul Valery, 2009 )

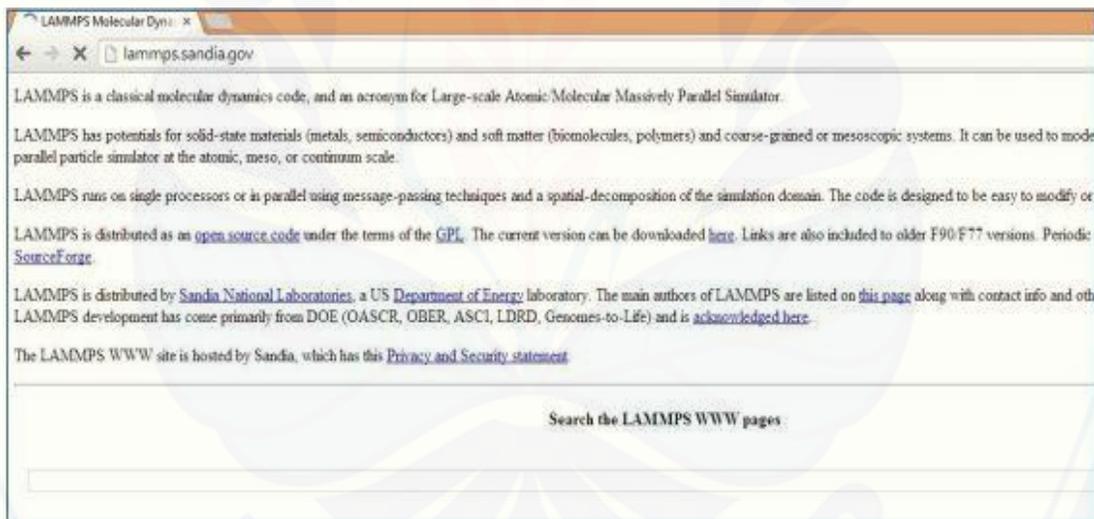
### 2.3 Program Dinamika molekul LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*)

Pada penelitian ini akan digunakan kode komputer LAMMPS untuk menjalankan simulasi dinamika molekul. Besaran-besaran fisis yang akan dihitung banyak yang fasilitasnya sudah disediakan oleh LAMMPS, termasuk perhitungan titik leleh meskipun tidak secara langsung. Untuk dapat menentukan titik leleh tersebut kita masih harus menganalisis lebih dahulu misalnya dari kurva perubahan fase bahan, misalnya kurva perubahan fase hasil padat energi potensial terhadap suhu.



Gambar 2.5 kurva perubahan fase zat yang menunjukkan adanya perubahan  $E_p$  tiba tiba pada suhu titik leleh

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

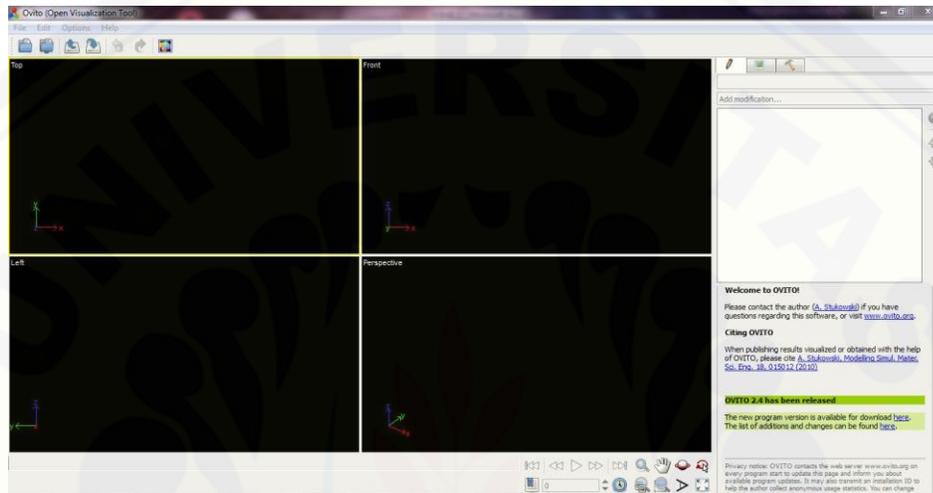


Gambar 2.6 Situs web <http://lammps.sandia.gov/>

#### 2.4 Program Dinamika Molekul OVITO (*Open Visualization Tool*)

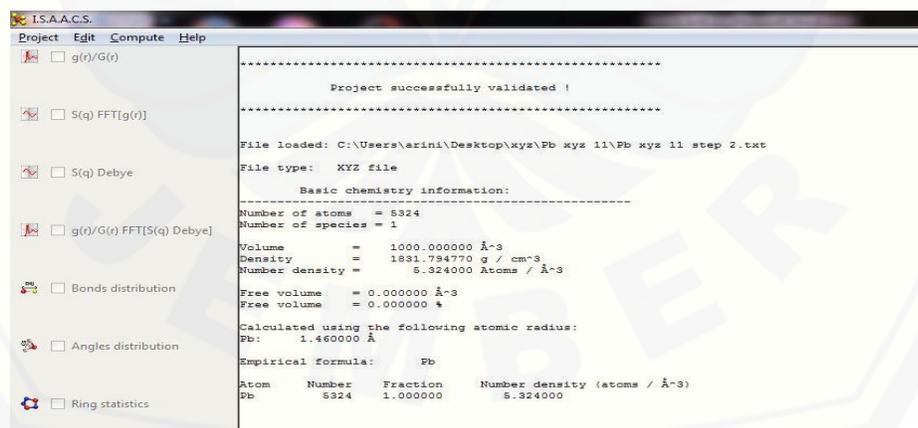
OVITO merupakan salah satu program pendukung tambahan yang dapat digunakan dalam analisis data dinamika molekul. OVITO misalnya dapat memfasilitasi visualisasi dan perhitungan suatu struktur kristal. OVITO tersedia secara gratis dalam bentuk perangkat lunak. OVITO menerjemahkan koordinat atom

kemudian mempresentasikan dalam bentuk grafis atomik sebagai outputnya (Stukowsky, 2013). Dalam tugas akhir ini OVITO digunakan untuk analisis struktur bahan hasil data simulasi LAMMPS untuk mengetahui apakah bahan benar benar sudah meleleh atau belum berdasarkan data nilai CNA yang akan dibahas pada bab pembahasan.



Gambar 2.7 Layar monitor program OVITO (ovito.org, 2013)

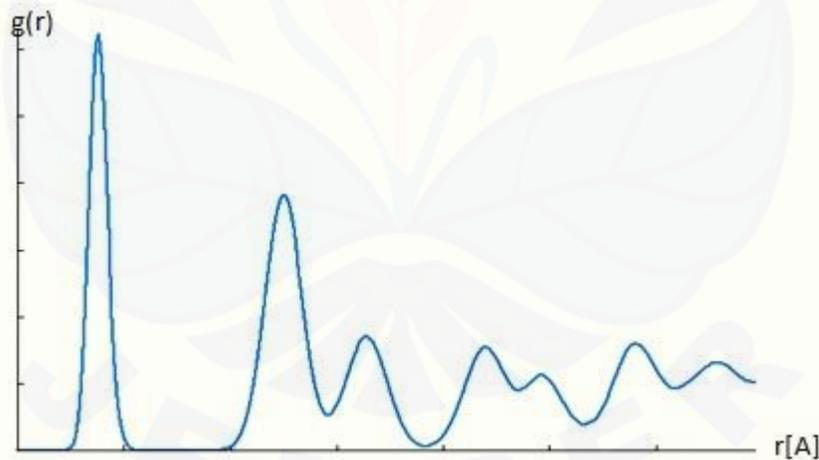
## 2.5 Program Dinamika Molekul ISAACS (*Interactive Structure Analysis of Amorphous and Crystalline System*)



Gambar 2.8 Layar monitor program ISAACS (sourceforge.net,2013)

Program ISAACS merupakan perangkat lunak tambahan yang dapat digunakan untuk analisis dengan kurva RDF (*Radial Distribution Function*) untuk struktur bahan yang dapat diinstal dalam sistem operasi berbeda misal *Microsoft, Windows*, dan *linux*. ISAACS adalah program yang berkembang untuk menganalisa karakteristik RDF dimensi bahan dari simulasi komputer. Analisa umum ISAACS untuk RDF adalah analisa fungsi distribusi radial yang digunakan untuk menghitung rata – rata jumlah atom yang tertata disekitar atom pusat secara radial. (Roux and Petkov, 2009).

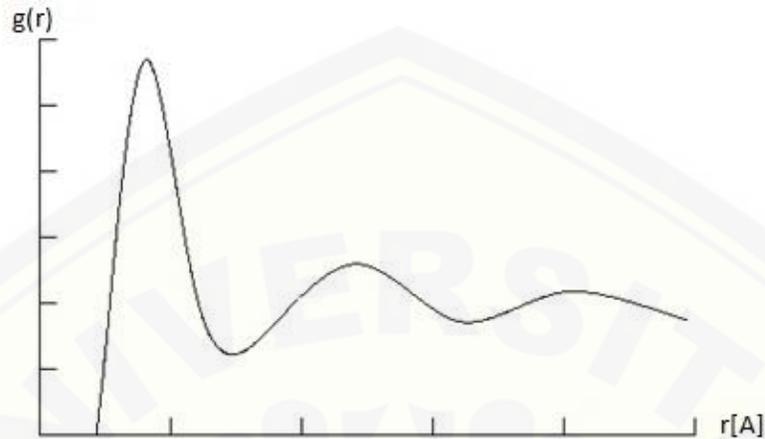
Dalam penelitian ini untuk menentukan nilai titik leleh suatu bahan akan dianalisis dengan melihat kurva perubahan fase bahan, struktur bahan dengan melihat nilai CNA bahan, dan melihat struktur bahan menggunakan kurva RDF. Kurva RDF dapat dihasilkan dengan menggunakan program ISAACS. Fungsi radial adalah fungsi yang menggambarkan struktur bahan dimana puncak – puncak RDF menyatakan besarnya korelasi atom – atom penyusun. Zat padat akan memiliki kurva RDF yang tajam di beberapa jarak  $r$  tertentu.



Gambar 2.10 Kurva fungsi distribusi radian fase padatan (Tuckerman, 1997)

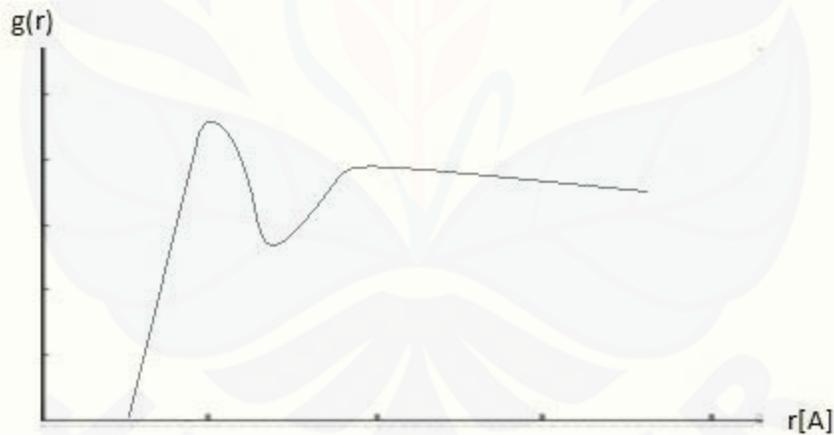
Keterangan :

1.  $g(r)$  : Koefisien menyatakan banyaknya pasangan atom
2.  $r[\text{Å}]$  : Jarak antar pasangan atom



Gambar 2.11 Kurva fungsi distribusi radian fase cairan (Tuckerman, 1997)

Sebaliknya zat cair kurang terkorelasi sehingga atom – atomnya akan tersebar lebih acak dan tidak rapi. Namun hal ini menyebabkan atom mudah ditemukan pada sepanjang lintasan kurva.



Gambar 2.12 Kurva fungsi distribusi radian fase gas (Tuckerman, 1997)

Pada kurva RDF fase gas kemungkinan menemukan atom berada pada sepanjang lintasan kurva. Menunjukkan bahwa material sudah berada dalam fase gas, karena ada kemungkinan untuk menemukan atom di setiap posisi hampir sama (Je-Luen Li 2007).

## **BAB 3. METODE PENELITIAN**

### **3.1 Waktu dan Tempat**

Pelaksanaan penelitian dilakukan di laboratorium Komputasi Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember. Penelitian dilakukan semester genap 2013 dan semester ganjil 2014.

### **3.2 Alat dan Bahan**

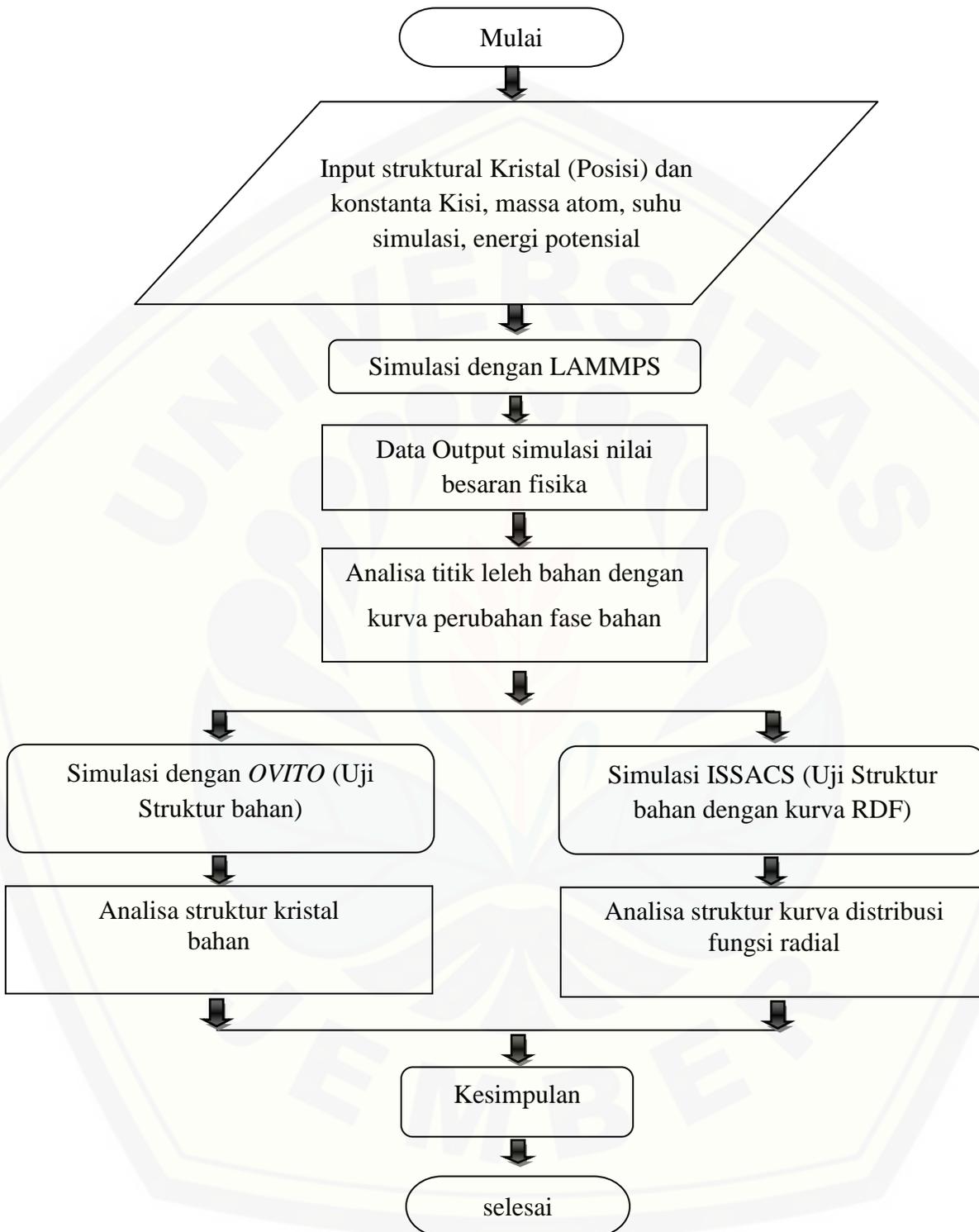
Alat yang dibutuhkan yaitu komputer yang diinstal prosesor windows. Kemudian instal Program LAMMPS, OVITO, dan ISAACS.

### **3.3 Tata Laksana Penelitian**

Prosedur penelitian dilakukan untuk mendapatkan nilai besaran fisis titik leleh untuk logam Fe dan Pb. Hasil yang didapat diharapkan berupa suatu nilai besaran suhu yang dapat mendekati nilai suhu berdasarkan data eksperimen. Adapun Prosedur simulasi dan langkah kerja dari penelitian menentukan titik leleh adalah

#### **3.3.1 Prosedur Simulasi**

Simulasi mempunyai beberapa gambaran berikut adalah :



Gambar 3.1 Bagan tahapan – tahapan penelitian

### 3.3.2 Langkah Kerja

Langkah kerja dalam menentukan nilai besaran fisis titik leleh dari logam Fe dan Pb adalah

1. Menentukan input masukan yang akan digunakan dalam simulasi. Dalam simulasi variabel yang digunakan untuk masing-masing bahan adalah :

- a. Struktur kristal Fe dan Pb

Struktur bahan Fe adalah BCC yaitu struktur atom yang unit atom-atomnya tersusun sebagai kubus dengan elektron - elektron menempati setiap sudut kubus. Setiap sel unit mengandung

$$1 + \left(8 \times \frac{1}{8}\right) \text{atom} = 2 \text{ atom sel} \quad (3.1)$$

Struktur bahan Pb adalah FCC yaitu atom yang unit atom-atomnya tersusun sebagai kubus elektronnya menempati setiap sudut kubus dan elektronnya berada pada pusat sisi-sisi kubus. Setiap sel unit mengandung

$$\left(6 \times \frac{1}{2}\right) + (8 \times 1/8) \text{atom} = 4 \text{ atom sel} \quad (3.2)$$

- b. Massa atom Fe dan Pb

Massa atom adalah massa partikel atom. Berdasarkan kesepakatan internasional 1 satuan atom didefinisikan sebagai  $\frac{1}{12}$  dari massa karbon. Fe memiliki massa atom sebesar 55, 845. Pb memiliki massa atom sebesar 207,2.

- c. Konstanta *lattice*

Konstanta *lattice* adalah jarak yang selalu terulang dalam pola jangkauan Kristal yang menentukan sel satuan dalam Kristal.

- d. Suhu Simulasi

Suhu kelipatan hasil simulasi jika suhu diberi 10 K maka hasil simulasi akan berada pada setiap kelipatan 10 K hingga suhu akhir simulasi.

2. Tentukan parameter dari potensial yang akan digunakan. Potensial yang akan digunakan adalah potensial EAM
  - a. Potensial EAM untuk Fe
  - b. Potensial EAM untuk Pb
3. Simulasi untuk program LAMMPS
  - a. Setelah input selesai dibuat maka letakkan kode LAMMPS, file fungsi potensial, dan file script input dalam satu folder untuk masing-masing Fe dan juga Pb. Jalankan program LAMMPS pada masing-masing bahan Fe dan Pb melalui dos.
  - b. Hasil akan didapat dalam bentuk format txt atau format file yang kemudian dapat dibuka melalui program *Microsoft Office Excel*. Grafik dapat dianalisa melalui nilai perubahan temperatur dengan energi potensial atau energi total. Grafik juga dapat dianalisa melalui hubungan temperatur dengan volume atau tekanan.
  - c. Melalui grafik akan ditemukan besaran fisis yang ditentukan melalui sebuah titik leleh.
4. Simulasi untuk program OVITO
  - a. Buat titik keadaan dimana sebuah keadaan tersebut akan divisualisasikan menggunakan OVITO.
  - b. Temukan koordinat atom untuk step integrasi dari titik keadaan yang telah ditentukan pada file dump. File dump sudah dihasilkan oleh simulasi LAMMPS.
  - c. Jalankan program OVITO dengan menggunakan input koordinat atom.
  - d. Analisa jumlah unit kristal bahan dengan mengaktifkan fasilitas CNA (*Common Neighbor Analysis*).

5. Simulasi untuk program ISAACS
  - a. Aktifkan program ISAACS, akan muncul kotak dialog berupa *project setting*
  - b. pilih format file koordinat atom yaitu koordinat **XYZ** pada step integrasi pada tab *data format setting*.
  - c. Isikan data bahan yang akan divisualisasikan pada tab chemistry setting.
  - d. Isikan data simulasi atom bahan yang akan divisualisasikan pada *tab box setting*. Klik *apply* untuk mulai running perhitungan.
  - e. Perhitungan akan muncul pada layar ISAACS. Kemudian untuk menampilkan grafik fungsi distribusi radial klik *compute* pada toolbar, pilih kolom  **$g(\mathbf{r})$**  untuk memasukan data grafik fungsi distribusi radial, masukan jumlah step integrasi berdasarkan step integrasi pada simulasi LAMMPS. Klik *apply* untuk *running* dan memunculkan grafik RDF
  - f. Analisa kurva RDF yang telah dihasilkan.

### 3.4 Metode Analisis

Untuk dapat mengukur titik leleh bahan maka dapat menggunakan metode kurva perubahan fase bahan. Sebuah bahan dipanaskan terus menerus dengan suhu yang semakin meningkat maka pada suatu titik suhu tertentu akan terjadi keadaan besaran fisis pada titik tersebut (misal energi potensial, energi total atau volume) bahan akan melonjak drastis untuk suhu yang sama. Jadi dari data simulasi kita harus menghitung energi potensial untuk variasi suhu, volume untuk variasi suhu atau tekanan untuk variasi suhu hingga nilai titik leleh akan dipilih yang mendekati nilai titik leleh secara eksperimen. Perubahan fase terjadi antara  $T_1$  (C) dan  $T_2$  (C) untuk hasil simulasi terbaik maka seharusnya perubahan terjadi antara satu garis yaitu pada nilai  $T_L$ .



## BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

### 4.1 Hasil dan Data Pengamatan

Analisis dilakukan berdasarkan input masukan yang sudah ditentukan terdapat dalam titik kontrol. Simulasi dilakukan untuk mendapatkan data trayektori atom yang dapat digunakan untuk menentukan nilai titik leleh dari bahan. Simulasi dilakukan terhadap beberapa sampel jumlah atom yaitu dimulai dari nilai kubus berdimensi  $1 \times 1 \times 1$  hingga  $15 \times 15 \times 15$ . Simulasi awal digunakan mencari dimensi minimal simulasi yang akan menghasilkan data output yang cukup baik. Hasil simulasi berupa data posisi atom – atom dalam format (XYZ) dan juga informasi energi potensial. Melalui hubungan energi potensial dan suhu dapat dibentuk kurva perubahan fase ketika titik leleh terjadi. Melalui analisis grafik ini kemudian ditentukan nilai besarnya titik leleh pada simulasi atom ( $10 \times 10 \times 10$  sebanyak 2.000 atom) untuk bahan Fe dan simulasi ( $10 \times 10 \times 10$  sebanyak 4.000 atom) untuk bahan Pb. Hasil analisa grafik dapat menunjukkan jika titik leleh dapat ditentukan cukup baik pada ukuran banyak atom minimal  $10 \times 10 \times 10$  baik Fe dan Pb. Pada grafik dengan dimensi kristal yang lebih kecil nilai titik leleh tidak terlihat karena line grafik tidak rapi. Nilai energi potensial dan suhu belum menentukan grafik yang menunjukkan nilai titik leleh

Output simulasi akan memberikan data-data hasil simulasi meliputi step integrasi, temperatur, energi potensial, energi total, dan temperatur. Data terdapat pada file format `heating_iron.txt` untuk Fe dan `heating_lead.txt` untuk Pb. Pada simulasi ini bahan berupa Fe dan Pb diberikan panas yang semakin meningkat sampai tercapai perubahan fase bahan padat menjadi cair.

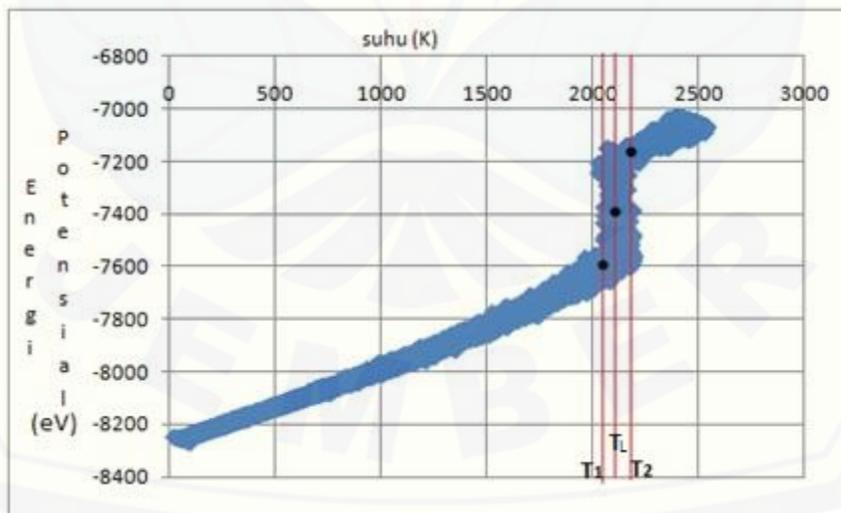
Nilai titik leleh adalah suhu yang teramati ketika zat padat mulai meleleh menjadi cair sampai semua partikel berubah menjadi cair (Tupamahu, 2001). Ketika bahan berupa wujud padat struktur kristal bahan akan berpola dan teratur, namun

perubahan suhu yang meningkat menyebabkan atom - atom bergerak sehingga berubah dan tidak teratur. Ketika struktur kristal bahan sudah tidak teratur maka fase bahan sudah mencair, suhu dalam simulasi akan konstan untuk beberapa rentang waktu namun energi potensial akan berjalan sesuai simulasi.

#### 4.2 Simulasi Titik Leleh

Titik leleh adalah keadaan dimana bahan mengalami perubahan fase dari padat ke cair. Keadaan ini ditandai dengan adanya perubahan nilai besaran fisis tiba – tiba pada besaran besaran fisis misalnya volume, energi potensial, dan tekanan. Pada penelitian ini dilihat pada nilai energi potensial yang berubah tiba – tiba pada suatu titik leleh.

Data simulasi berupa energi potensial dibuat plot grafik hubungan antara temperatur (untuk sumbu horizontal) dan energi potensial (untuk sumbu vertikal) sehingga dapat ditentukan nilai titik leleh untuk masing masing bahan nilai titik leleh didasarkan pada grafik ketika nilai suhu tetap, namun nilai energi potensial akan bertambah secara drastis. Nilai suhu dengan satuan Kelvin kemudian dikonversi pada satuan celcius.



Gambar 4.1 Grafik perubahan  $T - Ep$  pada perubahan fase padat cair logam Fe dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Keterangan :

1.  $T_1$  : Titik awal suhu mulai konstan (fase perubahan wujud)
2.  $T_2$  : Titik akhir suhu konstan (bahan kembali pada fase kenaikan suhu)
3.  $T_L$  : Titik leleh bahan

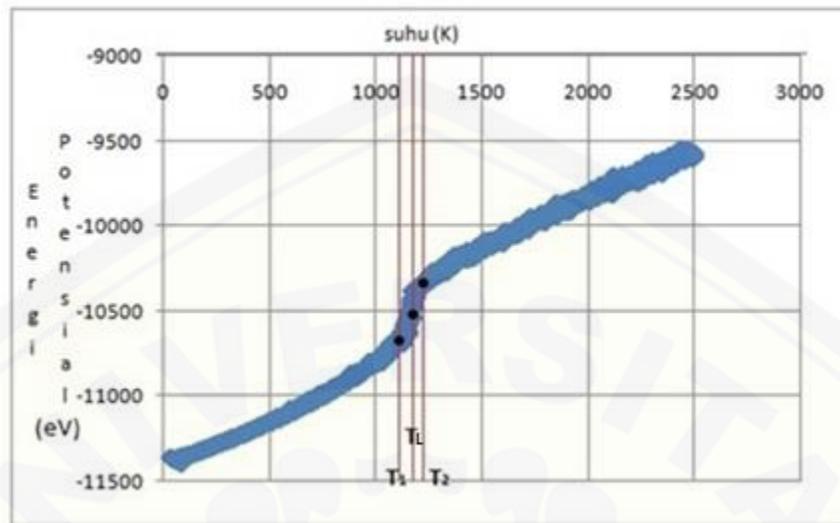
Dari gambar tersebut dapat diketahui bahwa grafik mengalami kenaikan nilai energi potensial namun nilai suhu tetap. Keadaan tersebut berada pada daerah  $T_1$  dan  $T_2$ . Untuk menentukan nilai titik leleh maka dapat diambil melalui pendekatan titik tengah dengan nilai tengah yaitu

$$T_L = \left(T_2 - \frac{\Delta T}{2}\right) \text{ atau } T_L = \left(T_1 + \frac{\Delta T}{2}\right) \quad (4.1)$$

Nilai  $T_1$  dianalisa sebesar 2004,91 K dan  $T_2$  adalah sebesar 2146,11 K. Hasil analisa kemudian dikonversi pada suhu celcius.  $T_1$  sebesar 1731,91°C dan  $T_2$  sebesar 1873,11°C, nilai tersebut digunakan untuk menentukan titik leleh.

$$\Delta T = (T_2 - T_1) \quad (4.2)$$

Maka nilai titik leleh Fe berada pada nilai sebesar  $(1813,03^\circ \pm 70,60^\circ)\text{C}$ , nilai tersebut terdapat pada step integrasi ke - 130.800. Kemudian hal ini juga dilakukan terhadap bahan Pb dengan menampilkan grafik seperti pada gambar



Gambar 4.2 Grafik perubahan  $T - Ep$  pada perubahan fase padat cair logam Pb dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Keterangan :

1.  $T_1$  : Titik awal suhu mulai konstan (fase perubahan wujud)
2.  $T_2$  : Titik akhir suhu konstan (bahan kembali pada fase kenaikan suhu)
3.  $T_L$  : Titik leleh bahan

Nilai  $T_1$  dianalisa sebesar 1053,54 K dan  $T_2$  adalah sebesar 1177,06 K. Hasil analisa kemudian dikonversi pada suhu celcius.  $T_1$  sebesar  $780,54^\circ\text{C}$  dan  $T_2$  sebesar  $904,06^\circ\text{C}$ , maka nilai titik leleh Pb dihitung berada pada nilai  $(842,4^\circ \pm 30,85^\circ\text{C})$  temperatur tersebut berada pada integrasi step ke - 45.400.

Terdapat perbedaan nilai titik leleh yang didapat dari simulasi dengan nilai secara eksperimen berdasarkan referensi yang sudah ada, berdasarkan eksperimen nilai titik leleh Fe adalah  $1535^\circ\text{C}$  dan Pb adalah  $327^\circ\text{C}$  (Garelick, 2009). Adanya perbedaan diduga dalam simulasi ini model struktur kristal adalah atom dengan struktur kristal yang murni oleh karena itu ikatan atom penyusun kristal adalah sangat kuat. Oleh sebab itu dibutuhkan panas yang lebih tinggi untuk dapat melelehkan bahan logam yang berakibat naiknya suhu leleh.

Grafik perubahan fase terdiri dari dua buah fase. Fase kenaikan suhu dimana bahan mengalami kenaikan suhu, wujud bahan masih berupa kristal padatan. Fase tersebut berada pada daerah awal simulasi hingga pada daerah  $T_1$ . Pada daerah  $T_1$  hingga  $T_2$  bahan mengalami fase perubahan wujud. Ketika bahan mengalami kenaikan suhu maka benda tidak mengalami perubahan wujud, ketika bahan mengalami perubahan wujud bahan tidak mengalami kenaikan suhu sehingga pada daerah  $T_1$  hingga  $T_2$  suhu benda akan konstan. Saat benda mengalami kenaikan suhu, energi panas yang digunakan adalah kalor jenis yaitu banyaknya kalor yang dibutuhkan untuk menaikkan suhu zat sebesar  $1^\circ\text{C}$ . Energi panas yang digunakan untuk merubah wujud bahan adalah kalor laten yaitu energi panas yang digunakan hanya untuk merubah wujud bahan.

Grafik yang dihasilkan Fe dan Pb memiliki karakteristik berbeda. Titik leleh Pb lebih rendah dari pada Fe. Hal ini disebabkan Fe memiliki ikatan antar atom yang lebih kuat dibandingkan dengan Pb sehingga dibutuhkan energi panas lebih besar untuk melelehkan Fe.

Prediksi titik leleh pada suhu tersebut baik Fe dan Pb masih perlu diverifikasi dengan melihat juga struktur kristal bahan pada suhu tersebut. Struktur bahan diketahui meleleh sempurna jika jumlah kristal FCC/BCC bahan adalah nol atau bahan sudah hancur meleleh semuanya. Secara komputasi perlu dilihat berapa jumlah kristal BCC/FCC pembentuk bahan dengan menggunakan metode CNA menggunakan program OVITO serta dengan menemukan probabilitas adanya atom dalam step integrasi dari simulasi dengan analisa kurva RDF menggunakan program ISAACS.

#### **4.3 Visualisasi Struktur Kristal Bahan**

Perubahan fase bahan selama pelelehan secara simulasi dapat digambarkan melalui perubahan struktur bahan yang disebabkan oleh perubahan posisi atom akibat energi panas. Struktur kristal yang berubah dapat dilihat melalui posisi atom

penyusunnya. Dalam simulasi juga memberikan hasil file dalam bentuk *dump file* terdapat nilai koordinat dalam sumbu *XYZ* dari komposisi penyusun atom-atom bahan selama simulasi berlangsung. Titik koordinat dihasilkan dalam 150.000 step yang disusun setiap kelipatan 200 step.

*File dump* memberikan informasi titik koordinat dari setiap perubahan gerak atom penyusun bahan berupa koordinat format untuk sumbu *XYZ*. Software OVITO menggunakan informasi koordinat gerak trayektori tersebut untuk penggambaran struktur setiap step. Kemudian dengan menggunakan program OVITO maka koordinat gerak trayektori juga dapat menunjukkan evaluasi struktur bahan untuk setiap step simulasi.

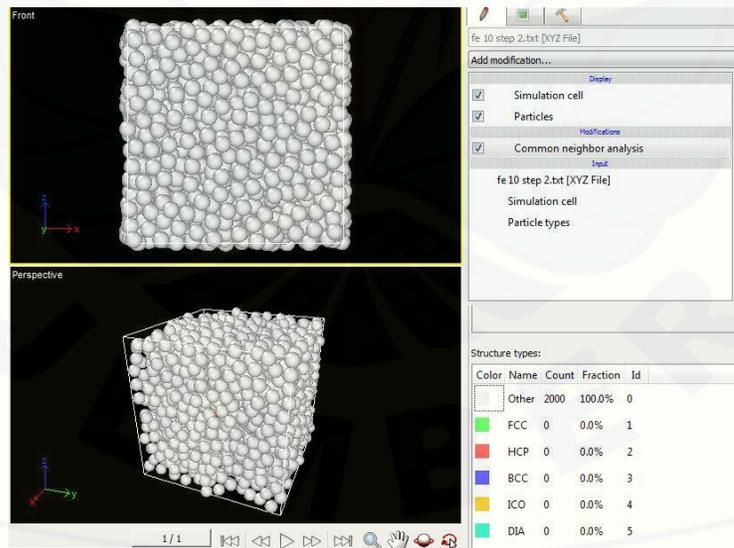
Input informasi titik koordinat dalam sumbu *XYZ* digunakan untuk menghasilkan bentuk 3 dimensi dari struktur bahan dalam suatu titik keadaan. Program OVITO memberi informasi mengenai bentuk tiga dimensi dari bahan. Gambaran dapat menunjukkan bahwa sebuah atom akan berubah sesuai dengan koordinatnya selama disimulasikan menggunakan LAMMPS. Selain itu OVITO juga memberikan informasi struktur kristal yang dimiliki oleh sistem bahan.

Struktur kristal bahan akan berada pada kondisi tersusun rapi jika berada pada wujud padat. Pengaruh panas dapat mengubah wujud bahan sehingga struktur kristal bahan akan berubah menjadi cair. Kondisi cair bahan ditunjukkan secara mikro dengan tidak adanya atau berkurangnya keteraturan struktur kristal. Atom – atom pada kristal akan bergerak karena adanya pengaruh panas pada bahan. Pergerakan atom jika digambarkan pada satu step akan berbeda posisinya dengan step lainnya. Pergerakan sepanjang  $r$  akan digambarkan pada sebuah titik dalam ruang koordinat *XYZ* untuk posisi. Koordinat posisi atom tersebut akan menggambarkan bagaimana bentuk struktur kristal benda. Jumlah struktur kristal pembentuk bahan dapat diketahui dengan metode CNA (*Common Neighbor Analysis*).

Metode CNA adalah salah satu metode untuk mengetahui karakteristik suatu struktur bahan. Metode CNA ini berusaha melihat struktur bahan berdasarkan

penempatan atom – atom bahan untuk kemudian memprediksi bentuk struktur yang menyusun bahan. Metode ini cukup populer dari banyak metode yang dapat digunakan untuk mengamati struktur kristal bahan. CNA membaca grafik koordinat dari atom dengan atom tetangga yang terikat oleh energi ikat dari atom pusat (OVITO.org, 2013). Untuk menentukan adanya sebuah struktur atom dalam simulasi adalah dengan memastikan atom dengan tetangga terdekatnya dalam jarak yang tepat. Pembacaan adanya jarak antar atom kemudian akan menyimpulkan adanya sebuah struktur baik FCC dan BCC dalam kristal. Dengan program OVITO dapat dianalisis secara komputasi 12 tetangga terdekat untuk sebuah struktur FCC dan 14 tetangga terdekat untuk struktur BCC.

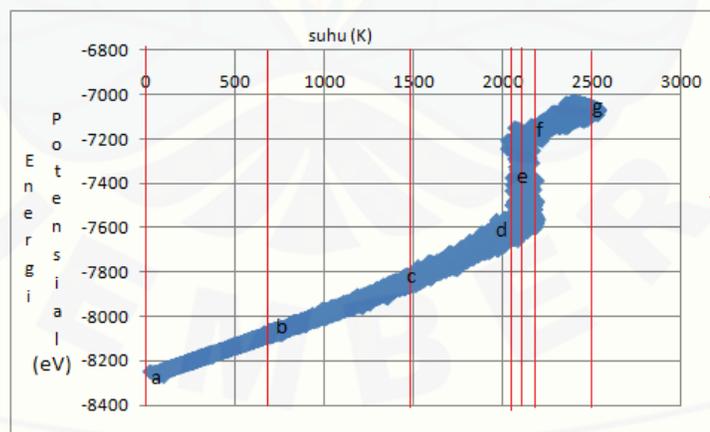
Cacat kristal disebabkan banyak hal salah satunya yaitu adanya pengaruh panas terhadap kristal. Kristal yang terkena pengaruh panas akan mengalami kerusakan struktur kristal. Nilai jumlah struktur kristal akan berkurang karena energi ikat atom pecah dan terlepas. Sehingga kemudian akan didapat hubungan antara besarnya suhu panas dengan nilai jumlah struktur kristal.



Gambar 4.3 Screenshot lembar kerja program OVITO untuk menentukan nilai CNA dalam simulasi bahan

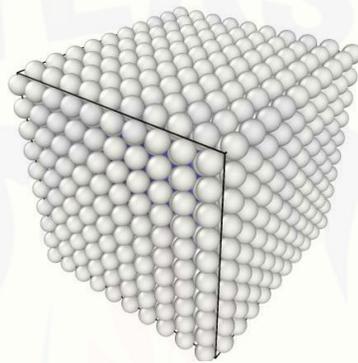
Secara umum setiap bahan padat tersusun oleh atom-atom yang terikat erat oleh ikatan atom. Atom – atom dapat bergerak karena suatu hal seperti pada simulasi ini adalah diberi energi panas pada suhu rendah yang kemudian meningkat hingga melewati titik lelehnya. Energi panas mempengaruhi gerak atom – atom yang terikat oleh gaya ikat kemudian atom – atom akan terlepas dari ikatan dan bergerak tidak beraturan. Ketidakteraturan atom – atom tersebut merupakan bentuk wujud benda padat telah mencair hingga sampai pada titik lelehnya. Untuk mengetahui bagaimana struktur kristal dan posisi atom yang bergerak maka pada simulasi akan dibuat 7 titik yang mewakili 7 keadaan selama simulasi berlangsung.

Keadaan awal simulasi adalah titik awal simulasi pada step 0 yaitu titik a, yang berada paling kiri, titik leleh adalah titik e, dan titik akhir atau titik g yang berada paling kanan. Titik  $T_1$  atau titik d titik adalah titik yang diambil saat mulai ada perubahan fase bahan dari padat menjadi cair, titik ini suhu akan tetap dan tidak berubah selama beberapa selang waktu namun potensial energi sistem naik secara drastis. Kemudian  $T_2$  keadaan suhu mulai kembali bertambah sesuai simulasi. 2 titik selanjutnya adalah titik b dan c merupakan titik rata-rata diantara titik awal dan titik  $T_1$  (Titik d). Secara berurutan titik – titik tersebut diurutkan (a,b,c,d,e,f,g) seperti pada gambar berikut.



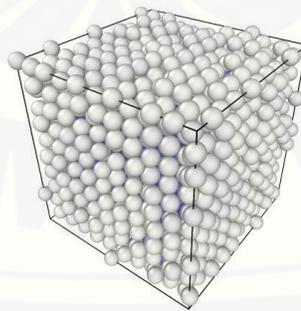
Gambar 4.4 Titik – titik pendefinisian visualisasi struktur bahan Fe dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Pemilihan 7 titik pada grafik gambar 4.4 berfungsi untuk visualisasi struktur bahan selama simulasi berjalan. Adanya visualisasi struktur bahan pada ke - 7 titik akan memberikan informasi mengenai perubahan fase dari wujud padat menjadi cair dan struktur bahan berdasarkan posisi atom penyusun bahan. Proses visualisasi dapat menggunakan *software* OVITO kemudian dapat dianalisa jumlah struktur kristal dari setiap titik selama proses simulasi berlangsung menggunakan nilai CNA.



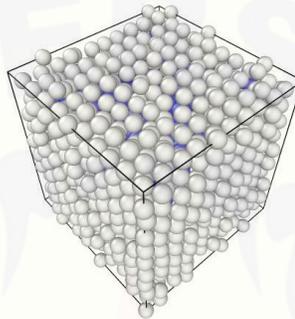
Gambar 4.5 Visualisasi struktur bahan Fe dititik a dengan jumlah atom 10x10x10

Gambar 4.5 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe pada suhu awal, pada suhu tersebut simulasi step integrasi berada pada step ke - 0. Pada keadaan dititik a struktur kristal masih rapi, pergerakan atom – atom akibat panas belum terlihat secara langsung namun pengaruh panas telah memecah energi ikatan atom. Nilai struktur kristal yang ada adalah struktur kristal FCC sebesar 0% dan struktur kristal BCC 51,2%, dan struktur yang tidak teratur akibat panas adalah 48,8%.



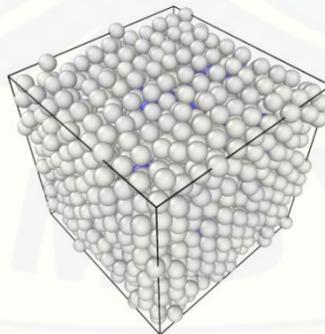
Gambar 4.6 Visualisasi struktur bahan Fe dititik b dengan jumlah atom 10x10x10

Gambar 4.6 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe pada suhu  $510^{\circ}\text{C}$ , pada suhu simulasi tersebut sebagian atom -atom telah bergerak tidak beraturan dan suhu panas meningkat. Titik b berada pada step integrasi ke - 43.000. Pada titik b ditemukan Struktur kristal FCC sebesar 0% dan struktur kristal BCC 51,0%, maka struktur yang tidak teratur adalah 49,0%.



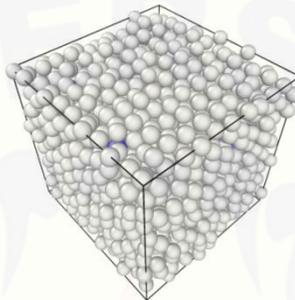
Gambar 4.7 Visualisasi struktur bahan Fe dititik c dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Gambar 4.7 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe pada suhu  $1121^{\circ}\text{C}$ , pada titik c tersebut sebagian atom - atom telah bergerak tidak beraturan dan suhu panas meningkat ini menyebabkan struktur kristal semakin tidak teratur terlihat beberapa atom masih terikat namun lebih banyak atom yang bergerak dibandingkan pada keadaan dititik sebelumnya. Struktur kristal FCC sebesar 0% dan struktur kristal BCC 41,1 %, maka struktur yang tidak teratur adalah 58,9%. Titik c berada pada step integrasi ke - 86.000.



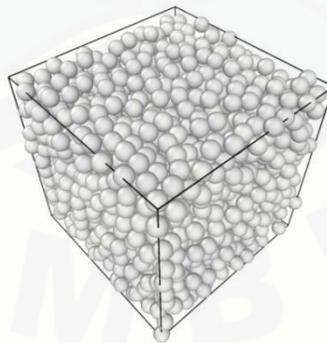
Gambar 4.8 Visualisasi struktur bahan Fe dititik d dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Gambar 4.8 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe dititik d pada suhu  $1715^{\circ}\text{C}$ , pada titik d tersebut sebagian atom – atom telah bergerak tidak beraturan namun belum seluruhnya bergerak dan terlepas dari ikatan. struktur kristal FCC sebesar 0% dan struktur kristal BCC 8,4%, maka struktur yang tidak teratur adalah 91,6% Titik d berada pada step integrasi ke – 129.400.



Gambar 4.9 Visualisasi struktur bahan Fe dititik e dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

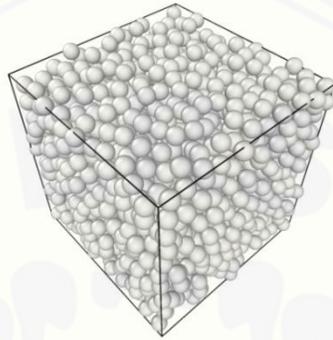
Gambar 4.9 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe dititik e pada suhu  $1813,03^{\circ}\text{C}$ , pada titik e tersebut atom - atom hampir seluruhnya telah bergerak tidak beraturan dan terlepas dari ikatan atom - atomnya, pada titik e merupakan titik leleh Fe struktur kristal yang tersisa adalah struktur kristal FCC sebesar 0,1% dan struktur kristal BCC 3,0%, sehingga struktur yang tidak teratur adalah 96,9%. Titik e berada pada step integrasi ke – 130.800.



Gambar 4.10 Visualisasi struktur bahan Fe dititik f dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Gambar 4.10 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Fe pada suhu  $1873^{\circ}\text{C}$ , pada titik f tersebut struktur kristal telah habis, suhu panas kembali

meningkat. Struktur kristal FCC sebesar 0% dan struktur kristal BCC 0%, dan struktur yang tidak teratur adalah 100%. Titik f berada pada step integrasi ke – 133.200.

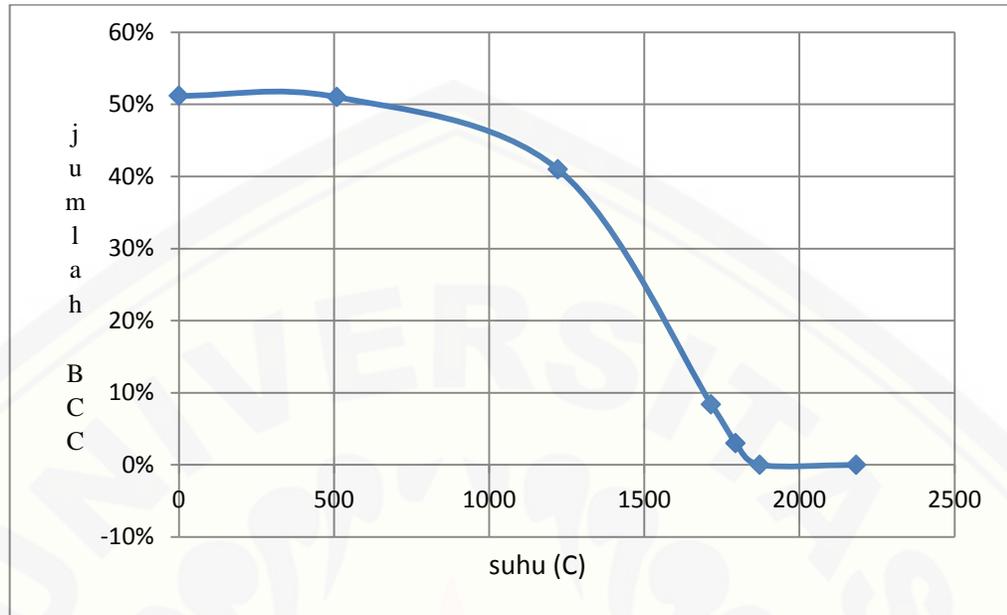


Gambar 4.11 Visualisasi struktur bahan Fe dititik g dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

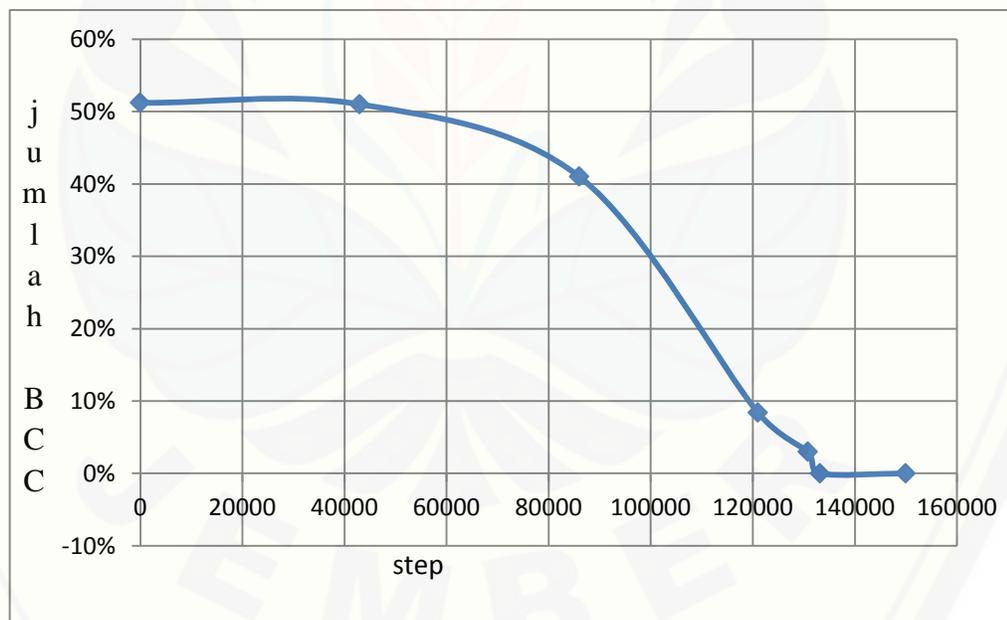
Gambar 4.11 merupakan titik teratas dalam grafik, titik g berada pada suhu terakhir  $2183^{\circ}\text{C}$ , pada titik g tersebut tidak terdapat lagi struktur kristal. Titik g berada pada step integrasi ke – 150.000.

Secara logika sederhana apabila sebuah bahan mengandung  $n$  buah unit kristal maka jika bahan tidak berubah karena panas maka bahan akan tetap mengandung  $n$  buah unit kristal. Akibat panas bahan akan meleleh maka  $n$  buah struktur kristal tersebut seharusnya habis atau bernilai 0.

Dari data hasil visualisasi menggunakan *software* OVITO, terdapat informasi yang menunjukkan besar nilai jumlah struktur kristal pada suhu dan step tertentu sesuai pada keadaan dimasing - masing titik. Nilai jumlah struktur jika dihubungkan dengan nilai besar suhu dan step integrasi akan menunjukan nilai suhu titik leleh dari bahan Fe. Ketika nilai suhu dan step integrasi rendah maka nilai BCC tinggi, kemudian berkurang seiring naiknya nilai suhu dan step integrasi



Gambar 4.12 Hubungan nilai BCC dan suhu dalam simulasi Fe 10x10x10

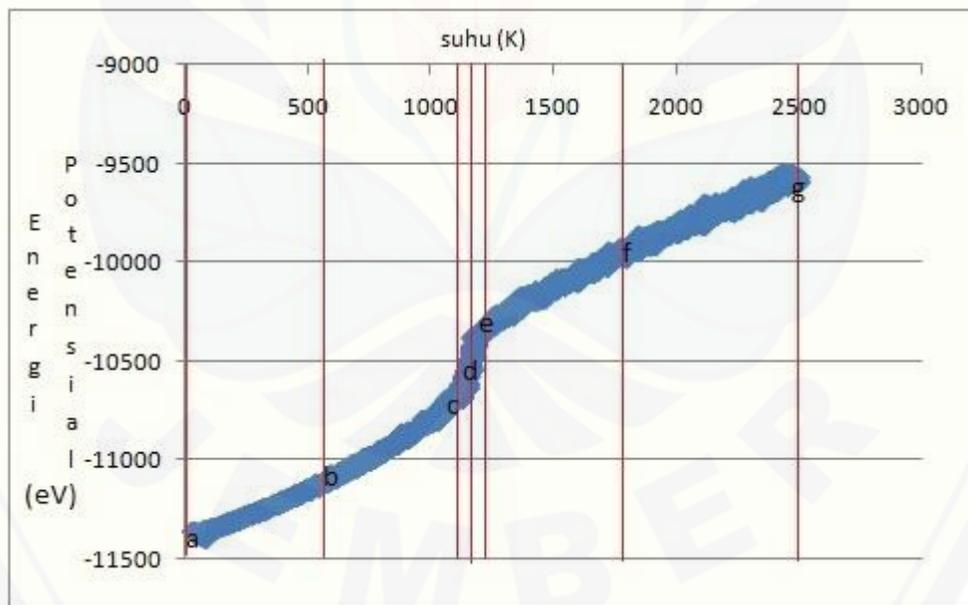


Gambar 4.13 Hubungan nilai BCC dan step itegrasi dalam simulasi Fe 10x10x10

Terlihat dalam eksekusi gambar menggunakan program OVITO yang menunjukkan jika pada suhu rendah nilai BCC masih besar yaitu 51%. Kemudian

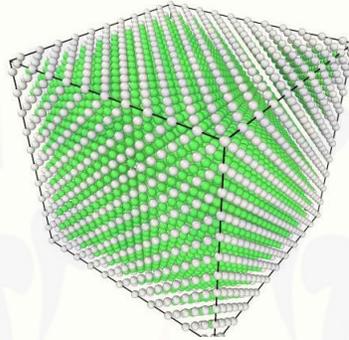
struktur kristal akan berkurang karena bergerak akibat perubahan suhu. Hingga pada suhu titik leleh struktur BCC tinggal 3% hal ini menunjukkan jika pada suhu titik leleh hampir seluruh material sudah berubah fase menjadi cair dan nilai struktur kristal sudah habis. Pengaruh panas pada bahan tidak memunculkan adanya struktur kristal lain selain struktur kristal BCC.

Visualisasi struktur bahan Pb dibagi dalam 7 titik juga, setiap titik menggambarkan suatu keadaan selama simulasi berlangsung. Keadaan awal simulasi adalah titik a, titik leleh adalah titik d, titik akhir yang berada paling kanan adalah titik g, titik  $T_1$  adalah titik c, titik  $T_2$  adalah titik e, titik b berada diantara titik awal dan titik  $T_1$  (titik c). Titik f adalah titik diantara  $T_2$  dan titik akhir. Kemudian untuk setiap step titik akan divisualisasikan menggunakan program OVITO bagaimana bentuk struktur kristal yang dihasilkan oleh simulasi dari setiap keadaan. Kemudian secara berurutan setiap titik tersebut diurutkan (a,b,c,d,e,f,g) seperti pada gambar berikut.



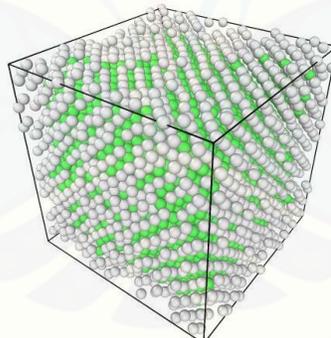
Gambar 4.14 Titik – titik pendefinisian visualisasi struktur bahan Pb dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Setiap titik yang berada pada suhu dan step integrasi tertentu akan menunjukan nilai struktur kristal berbeda sesuai dengan besarnya energi panas yang mempengaruhinya. Untuk mengetahui bagaimana keadaan struktur kristal tersebut maka dapat dianalisa melalui visualisasi berikut menggunakan *software* OVITO.



Gambar 4.15 Visualisasi struktur bahan Pb dititik a dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

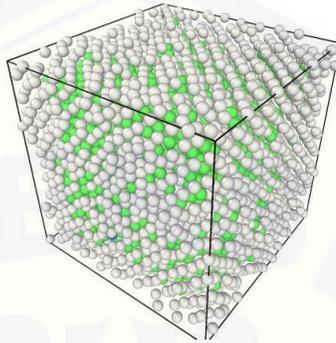
Gambar 4.15 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Pb pada suhu awal, pada suhu awal simulasi dimulai step integrasi berada pada step ke - 0. Ditemukan Struktur kristal FCC sebesar 75% dan struktur kristal BCC 0%, dan struktur yang tidak teratur akibat panas adalah 25%.



Gambar 4.16 Visualisasi struktur bahan Pb dititik b dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

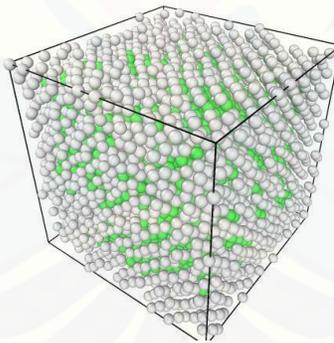
Gambar 4.16 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Pb pada suhu  $304,36^{\circ} \text{C}$ , pada suhu simulasi tersebut sebagian atom bahan Pb telah bergerak tidak beraturan akibat suhu panas meningkat. Titik b berada pada step integrasi ke -

20.400. Pada titik b ditemukan Struktur kristal FCC sebesar 62,4% dan struktur kristal BCC 0%, maka struktur yang tidak teratur akibat panas adalah 37,6%.



Gambar 4.17 Visualisasi struktur bahan Pb dititik c dengan jumlah atom 10x10x10

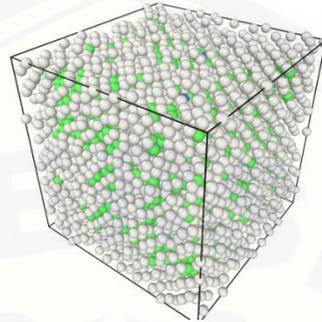
Gambar 4.17 menunjukkan struktur kristal bahan Pb pada keadaan di titik c pada suhu  $780,54^{\circ}\text{C}$ , pada titik c tersebut sebagian atom - atom telah bergerak tidak beraturan dan struktur kristal yang masih terbentuk adalah struktur kristal FCC sebesar 35,4% dan struktur kristal BCC 0,1 %, maka struktur yang tidak teratur adalah 64,5%. Titik c berada pada step integrasi ke - 39.800.



Gambar 4.18 Visualisasi struktur bahan Pb dititik d dengan jumlah atom 10x10x10

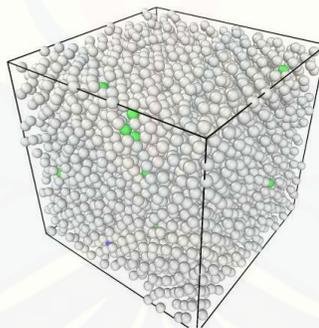
Gambar 4.18 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Pb dititik d pada suhu  $842,3^{\circ}\text{C}$ , pada titik d tersebut atom - atom telah bergerak tidak beraturan. Pada titik d merupakan titik leleh dari bahan Pb. Pada titik leleh struktur kristal hampir seluruhnya tidak berbentuk rapi namun masih ditemukan struktur kristal yang rapi.

struktur kristal FCC sebesar 6,4% dan struktur kristal BCC 0,1%, maka struktur yang tidak teratur adalah 93,5%. Titik d berada pada step integrasi ke – 45.400.



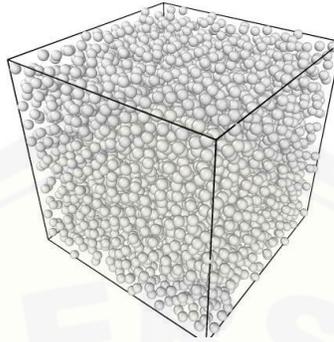
Gambar 4.19 Visualisasi struktur bahan Pb dititik e dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Gambar 4.19 menunjukkan keadaan struktur kristal bahan Pb dititik e pada suhu  $904,06^{\circ}\text{C}$ , pada titik e tersebut atom – atom bahan Pb hampir seluruhnya telah bergerak tidak beraturan dan menyisakan struktur kristal yang masih terbentuk adalah struktur kristal FCC sebesar 2,3% dan struktur kristal BCC 0,1%, sehingga struktur yang tidak teratur adalah 97,6%. Titik e berada pada step integrasi ke – 47.600.



Gambar 4.20 Visualisasi struktur bahan Pb dititik f dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

Gambar 4.20 menunjukkan struktur kristal bahan Pb pada titik f. Suhu pada titik f adalah  $1442^{\circ}\text{C}$ , pada titik f tersebut struktur kristal hampir habis seluruhnya. Struktur kristal FCC yang 0,7% dan struktur kristal BCC 0,1%, dan struktur yang tidak teratur adalah 99,2%. Titik f berada pada step integrasi ke – 67.800.

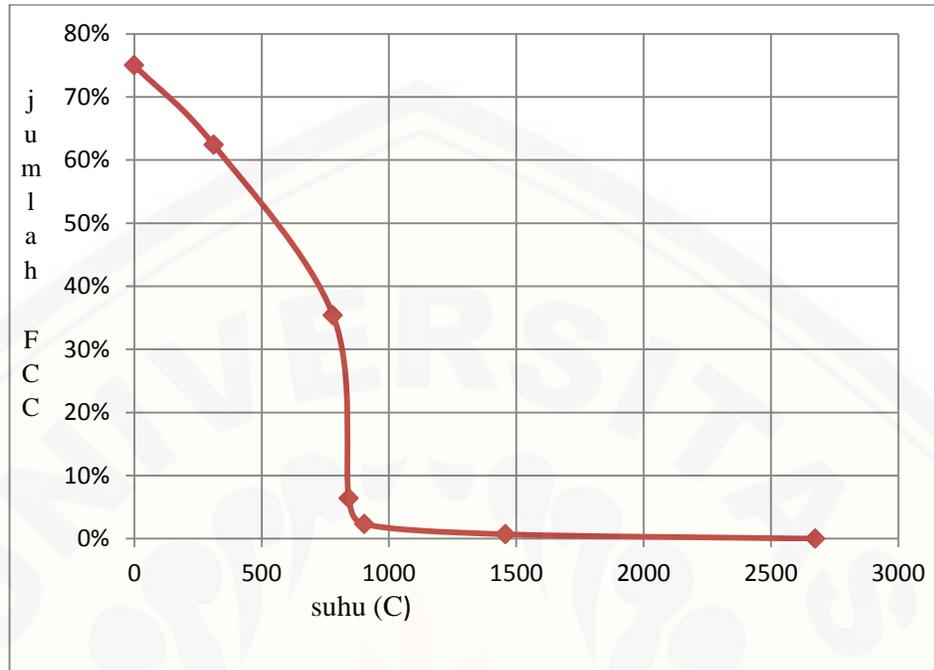


Gambar 4.21 Visualisasi struktur bahan Pb dititik g dengan jumlah atom  $10 \times 10 \times 10$

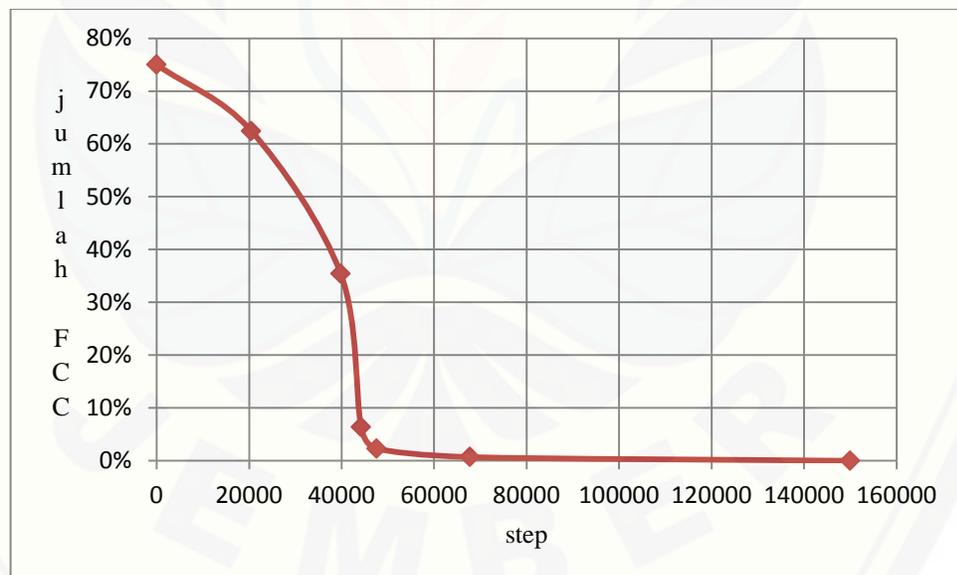
Gambar 4.21 merupakan keadaan struktur kristal di titik g. Titik g adalah titik teratas dan terakhir dalam grafik, titik g berada pada suhu terakhir  $2218^{\circ} \text{C}$ . Pada titik g tersebut tidak terdapat lagi struktur kristal FCC dan BCC, struktur yang tidak teratur adalah 100%. Titik g berada pada step integrasi terakhir ke -150.000.

Pada titik awal struktur kristal lebih rapi dan teratur, Kemudian dengan suhu yang meningkat maka struktur kristal berubah. Dalam eksekusi gambar menggunakan program OVITO yang menunjukkan jika pada suhu awal jumlah nilai FCC masih besar yaitu 75%. Kemudian struktur kristal akan berkurang karena bergerak akibat perubahan suhu. Hingga pada suhu titik leleh jumlah nilai struktur FCC tinggal 6,4%. Hal ini menunjukkan jika pada suhu titik leleh hampir seluruh bahan sudah berubah fase menjadi cair. Pada suhu akhir simulasi menunjukan bahwa bahan sudah tidak berstruktur FCC, membuktikan jika keadaan wujud bahan sudah mencair. Pada beberapa suhu ditemukan bahwa beberapa struktur kristal BCC yang terbentuk pada suhu titik keadaan di daerah titik c, d, e, dan f. Munculnya struktur kristal BCC disebabkan selama pemanasan terjadi dalam simulasi terdapat atom – atom yang bergerak justru malah membentuk sebuah struktur baru.

Nilai jumlah struktur kristal FCC dapat dihubungkan dengan step integrasi dan nilai suhu pada masing – masing keadaan di titik a hingga g. Hubungan nilai jumlah struktur kristal dengan step integrasi dan juga hubungan antara nilai jumlah struktur kristal dengan nilai suhu simulasi pada masing – masing titik akan menunjukan keadaan bagaimana struktur kristal pada bahan Pb selama simulasi berlangsung.



Gambar 4.22 Hubungan nilai jumlah FCC dan suhu simulasi Pb 10x10x10



Gambar 4.23 Hubungan nilai jumlah FCC dan step integrasi simulasi Pb 10x10x10

Nilai jumlah struktur kristal FCC pada awal simulasi besar kemudian ketika nilai suhu sudah mulai meningkat maka nilai struktur kristal FCC akan berkurang.

Hal ini juga berlaku pada hubungan antara step integrasi dan jumlah nilai struktur kristal FCC. Semakin besar step integrasi dalam simulasi maka akan semakin kecil jumlah nilai FCC yang disimulasikan. Kedua kurva menunjukkan hubungan yang berkebalikan, titik leleh dapat diketahui ketika grafik menunjukkan nilai struktur habis atau bernilai 0.

Dari analisa kurva perubahan fase bahan, kurva dapat digunakan memprediksi nilai titik leleh bahan. Kurva nilai CNA digunakan untuk menentukan pada suhu berapa bahan benar benar leleh mencair. Nilai titik ini jika dibandingkan dengan nilai eksperimen berbeda nilai hasil simulasi  $1813,03 \pm 39,015^\circ \text{C}$  untuk bahan Fe dan  $842,4 \pm 30,85^\circ \text{C}$  untuk bahan Pb. Nilai titik leleh eksperimen sebesar  $1535^\circ \text{C}$  untuk bahan Fe dan  $273^\circ \text{C}$  untuk bahan Pb. Namun dengan simulasi dapat diprediksi atau dihitung nilai titik leleh bahan dengan memvisualkan struktur bahan. Jika nilai simulasi dan nilai eksperimen tidak sama maka diasumsikan penggunaan bahan dalam eksperimen tidak benar benar murni dan bahan mengandung impuritas dan defect. Impuritas dan defect akan menurunkan titik leleh bahan karena energi ikat atom kristal lebih rendah.

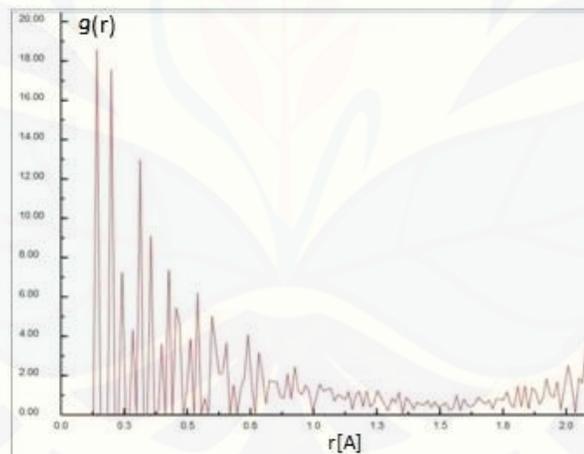
#### **4.4 Analisis Menggunakan Grafik RDF (*Radial Distribution Function*)**

Pada fenomena simulasi, karakteristik nilai titik leleh logam Fe dan Pb juga dapat diteliti karakteristiknya dengan menggunakan grafik RDF (*Radial Distribution Function*). Fungsi radial adalah fungsi yang menggambarkan struktur bahan dengan puncak – puncak RDF menyatakan besarnya korelasi atom – atom penyusun. Sebuah benda padat dengan struktur kristal yang tersusun rapi dan terikat oleh energi ikat atom, jika diambil sebuah atom sebagai titik pusat atom yang secara radial ditarik jarak ke atom lain sehingga dapat dianalisa sebuah atom pusat terpisah sejauh  $r[A]$  ke atom lain.

Bahan padat akan memiliki jarak antar atom yang kosong karena adanya ikatan atom yang menjaga setiap atom tetap pada posisinya. Energi panas yang

mempengaruhi bahan akan memecah energi ikat atom sehingga jarak antar atom akan mengecil karena gerakan atom. Kemudian atom akan tersebar merata pada permukaan bahan saat bahan sudah berada pada fase cairan. Hal ini menyebabkan zat padat akan memiliki kurva RDF yang tajam di beberapa jarak  $r$  tertentu, sementara pada zat cair kurva tidak tajam dan seluruh jarak terisi oleh atom sehingga tidak ada jarak kosong antar atom.

Dengan menghitung jarak antar atom, maka akan dihasilkan grafik RDF. Grafik RDF dapat dibuat dengan menggunakan *software* ISAACS (*Interactive Structure Analysis of Amorphous and Crystalline System*). Input yang digunakan untuk menghasilkan grafik RDF adalah nilai koordinat XYZ dari komposisi penyusun atom – atom bahan hasil simulasi menggunakan *software* LAMMPS. Kurva RDF grafik pada gambar 4.24 hingga gambar 4.29 dengan  $g(r)$  untuk sumbu vertikal ( $Y$ ) adalah koefisien banyaknya pasangan atom,  $r[\text{Å}]$  untuk sumbu horisontal ( $X$ ) adalah fungsi korelasi antar atom.



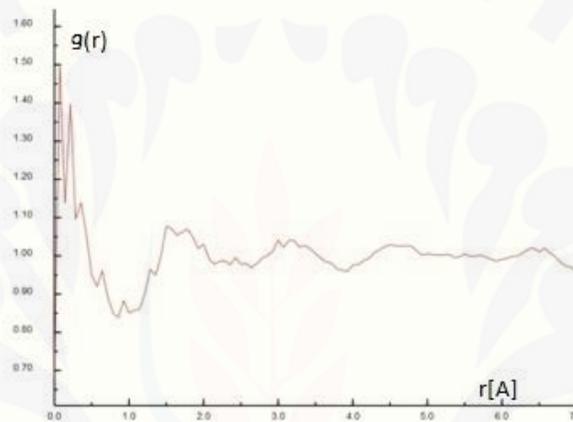
Gambar 4.24 Grafik RDF pada suhu awal simulasi Fe 10x10x10

Keterangan :

1.  $g(r)$  : Fungsi korelasi pasangan atom.
2.  $r[\text{Å}]$  : Jarak antar pasangan atom

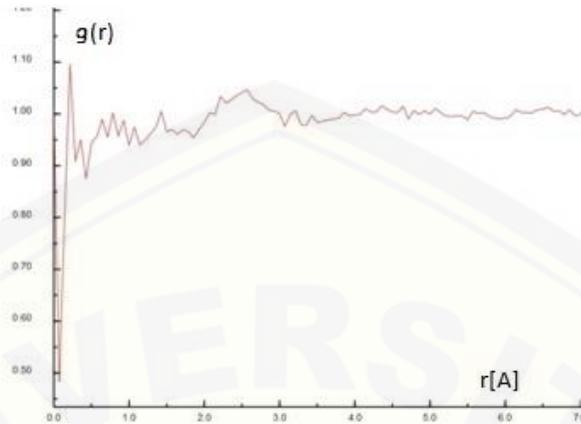
Gambar 4.24 merupakan visualisasi dari nilai – nilai fungsi distribusi radial kristal Fe 10x10x10 pada suhu awal simulasi. Dalam grafik sumbu  $Y$  ( $g(r)$ )

menunjukkan keberadaan korelasi atom, jarak antar atom pada disumbu  $X$  ( $r[\text{Å}]$ ) sehingga jika terdapat nilai 0 dalam lintasan maka artinya tidak ditemukan atom. Pada suhu awal tersebut puncak fungsi distribusi radial tinggi karena pada jarak tersebut banyak ditemukan pasangan atom yang berkumpul sehingga nilainya tinggi, kemudian akan ditemukan kembali pasangan atom pada jarak selanjutnya ketika kurva kembali tinggi setelah lintasan menurun pada angka nol. Kosongnya jarak antara dikarenakan tidak adanya atom yang ditemukan pada jarak tersebut. Bentuk kurva tersebut menunjukkan sistem dalam keadaan kristal/padat.



Gambar 4.25 Grafik RDF pada suhu titik leleh simulasi Fe  $10 \times 10 \times 10$

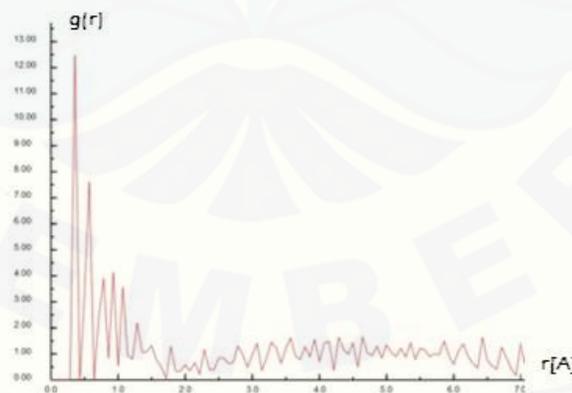
Gambar 4.25 menunjukkan grafik RDF pada simulasi Fe di suhu titik leleh. Pada visualisasi tersebut menunjukkan puncak yang sedikit lebih rendah daripada visualisasi sebelumnya pada gambar 4.24. Kemudian pada lintasan tidak ada lagi nilai  $Y$  sebesar 0 artinya korelasi antar atom tidak ditemukan berada pada jarak tertentu yang rendah, atom sudah tersebar merata pada setiap jarak antar atom. Hal ini menunjukkan jika pada simulasi ini seluruh atom – atom sudah bergerak dan berada pada posisi acak tidak beraturan, menunjukkan bahan berada pada fase cairan.



Gambar 4.26 Grafik RDF pada suhu akhir simulasi Fe 10x10x10

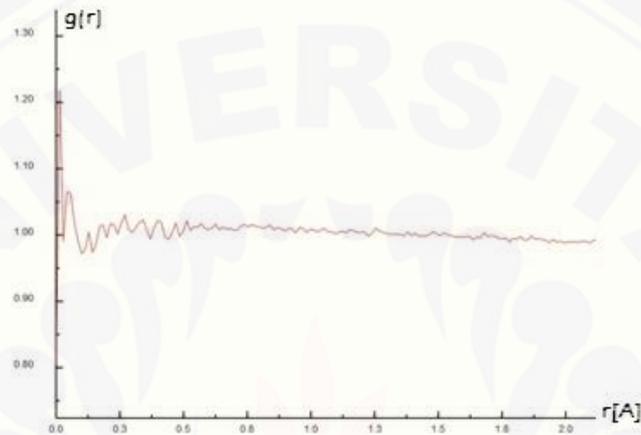
Gambar 4.26 menunjukkan grafik simulasi Fe pada suhu akhir simulasi. Puncak nilai maksimum terluar sangat rendah. Lintasan menunjukkan pada sumbu  $Y$  bernilai tinggi sehingga atom mudah ditemukan. Suhu yang tinggi menyebabkan posisi atom bergerak tidak teratur. Fase bahan pada simulasi ini sudah menunjukkan tepat berada pada fase cair.

Visualisasi menggunakan ISAACS juga digunakan untuk bahan Pb. Visualisasi menunjukkan nilai simulasi yang dihasilkan menggunakan *software* LAMMPS juga dapat divisualisasikan dan menunjukkan bagaimana fase bahan Pb selama simulasi berlangsung.



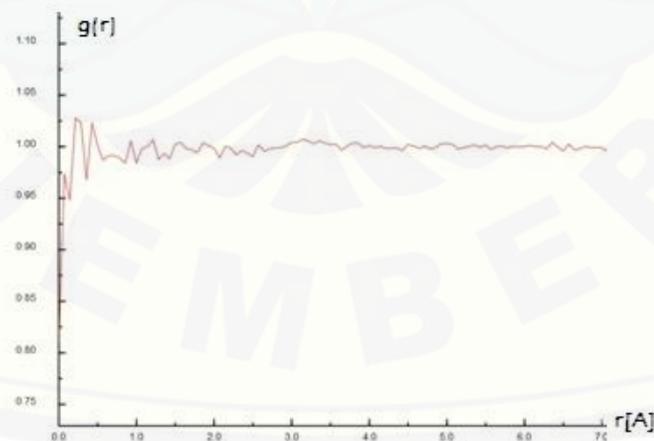
Gambar 4.27 Grafik RDF pada suhu awal simulasi Pb 10x10x10

Gambar 4.27 menunjukkan visualisasi dari nilai – nilai fungsi distribusi radial kristal Pb 10x10x10 pada suhu awal simulasi. Pada simulasi puncak fungsi distribusi radial tinggi, terdapat banyak nilai 0 dalam sumbu  $X$  karena tidak adanya atom yang ditemukan. Hal ini membuktikan jika sistem berada dalam keadaan kristal atau padat.



Gambar 4.28 Grafik RDF pada suhu titik leleh simulasi Pb 10x10x10

Gambar 4.28 menunjukkan grafik RDF pada simulasi Pb di suhu titik leleh. Puncak pada grafik sedikit lebih rendah dari pada simulasi sebelumnya. Pada lintasan tidak terdapat nilai  $Y$  sebesar 0. Hal ini menunjukkan dalam simulasi seluruh atom telah bergerak dan berada pada posisi acak tidak beraturan.



Gambar 4.30 Grafik RDF pada suhu akhir simulasi Pb 10x10x10

Gambar 4.30 menunjukkan grafik simulasi Pb pada suhu akhir simulasi. Nilai pada sumbu  $Y$  tinggi sehingga besarnya korelasi atom penyusun bahan bernilai besar. Oleh karena itu atom mudah ditemukan dalam simulasi. Suhu yang tinggi menyebabkan posisi atom tidak teratur. Simulasi telah menunjukkan bahan berada pada fase cair.



## BAB 5. PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian dan analisa data yang dilakukan di Jurusan Fisika Universitas Jember mengenai penentuan nilai titik leleh bahan Fe dan Pb menggunakan metode dinamika molekul dapat disimpulkan sebagai berikut

1. Dengan metode dinamika molekul menggunakan program LAMMPS dapat ditentukan nilai titik leleh dari bahan Fe dan Pb adalah sebesar  $1813,03 \pm 70,60^\circ \text{C}$  untuk material Fe dan  $842,3 \pm 30,85^\circ \text{C}$  untuk material Pb. Kesimpulan tersebut diperkuat oleh bentuk struktur pada suhu titik leleh Fe dan Pb telah rusak tidak teratur. Dari kurva RDF diketahui jika pada suhu titik leleh Fe dan Pb telah mengalami perubahan fase menjadi cairan.
2. Visualisasi struktur bahan selama simulasi berlangsung dilakukan untuk mengetahui bagaimana bentuk struktur dari bahan mulai dari padatan, setengah padat sampai dalam bentuk fase cair dapat dijelaskan dengan baik dan informatif berdasarkan data hasil simulasi LAMMPS yang divisualisasikan menggunakan program OVITO. Struktur bahan saat dalam fase padatan terstruktur dan rapi dengan jumlah nilai struktur bahan yang besar. Pada fase cair bahan sudah mencapai nilai titik leleh dengan struktur bahan sudah tidak berbentuk rapi dan nilai jumlah struktur bahan yang sangat kecil atau mendekati nilai 0.
3. Program ISAACS dapat menunjukkan fase bahan selama simulasi berlangsung. Program ISAACS menghasilkan grafik RDF yaitu hubungan antara jarak antar dua atom dan koefisien yang menyatakan banyaknya atom yang berada pada jarak tersebut. Pada suhu awal simulasi  $0^\circ$  bahan Fe dan Pb fase padatan dalam kurva terdapat banyak nilai 0 pada sumbu horisontal disebabkan tidak

ada atom pada jarak tersebut yang menyatakan bahan pada fase padatan. Kemungkinan adanya atom sangat besar ketika fase bahan berada pada fase cairan di titik leleh karena struktur atom sudah tidak terikat rapi. Hal ini membuktikan fase bahan Fe dan Pb telah mencair pada suhu titik leleh

## 5.2 Saran

Dalam penelitian selanjutnya untuk akurasi hasil simulasi yang perlu dibandingkan dengan hasil eksperimen maka pada kajian berikutnya perlu mencari fungsi potensial yang lebih tepat.

**DAFTAR PUSTAKA**

- Abrams, C. 2009. *Molecular Simulation*. Diakses dari website <http://www.pages.drexel.edu/~cfa22/msim/...> [30 April 2014.]
- Arkundato, Suud, Abdullah, Sutrisno. 2013. *Study of Liquid Lead Corrosion of Fast Nuclear Reactor and Its Mitigation by Using Molecular Dynamics Method*, *IJAPM 2013 Vol.3(1): 1-7* ISSN:2010-362X DOI: 10.7763/IJAPM.2013.V3.163 , Singapore
- Arkundato, Suud, Abdullah, Sutrisno. 2013. *Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic*. *Turk. J. Phys.*, 37, (2013), 132-144
- Arkundato, Suud, Abdullah, Widayani, Massimo Celino. 2013. *Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study* *Volume 62*, December 2013. Pages 298-306, *Annals of Nuclear Energy*, Elsevier, Netherlands
- Arthur. 2005. *Lennard-Jones Potential*, USA. Marryland university <http://www2.physics.umd.edu/~alaporta/Lennard-Jones.html> [20 2014 Mei]
- Alan Hinchliffe. 2009. *Molecular Modelling for Beginners*, John Wiley, USA.
- Aral, G. 2003. *Dissertasi: Parallel Molecular Dynamics Simulations Of Dynamics Of Oxidation And Reactive Wetting In Metal/Ceramic Systems*, Illinois Institute Of Technology.
- Atika Indri , 2013.*JMOL* . <http://atikahindriastuti.blogspot.com/2013/12/jmol.html> . [20 mei 2014]

Australian Geological Survey Organization, 1999. *Iron*. Australia.  
[www.agso.gov.au/education/factsheet/](http://www.agso.gov.au/education/factsheet/) . [20 Mei 2014]

Doitpoms , 2013 , *Lattice Kristal* . United Kingdom. University of Cambridge  
[http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller\\_indices/lattice\\_draw.php](http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/miller_indices/lattice_draw.php) [ 20 Mei 2014 ]

Eko Hidayanto, 2009, *Reaktor Nuklir* . Semarang. Universitas Panglima Sudirman  
<http://staff.undip.ac.id/fisika/ekohidayanto/files/2009/12/12-reaktor-nuklir.pdf>  
[ 20 Mei 2014 ]

Garelick, 2009. *Melting Point Of Metal*. United State of America  
[http://www.garelicksteel.com/pdfs/Melting\\_Points\\_of\\_Common\\_Metals.pdf](http://www.garelicksteel.com/pdfs/Melting_Points_of_Common_Metals.pdf)  
[ 20 Mei 2014 ]

G. J. Auckland, K. D'Mellow, S. L.Daraszewicks, D. J. Hepburn, M, Uhrin,  
Kstratford, (2011), "*The MOLDY short-range molecular dynamics package*,"  
*Computer Physics Comunity*, vol 182, hal.2587-2604

Haile, J.M. 1992 , *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, John  
Wiley & Sons, Inc.

Hsu, A. , 2007 , Master Thesis: *Molecular Dynamics Simulations of Hydrophobic  
Solutes in Liquid Water*Institute of Atomic and Molecular Sciences,  
Academia Sinica, Taiwan. [http://www.iams.sinica.edu.tw/lab/jlli/files/thesis\\_andy.pdf](http://www.iams.sinica.edu.tw/lab/jlli/files/thesis_andy.pdf)

Ismunandar, dan Marsih, *Catatan Kuliah KI 3231*, ITB, 2005  
[http://www.ccp5.ac.uk/DL\\_POLY/Democritus/Theory/rdf.html](http://www.ccp5.ac.uk/DL_POLY/Democritus/Theory/rdf.html)

Dr. Sebastien Le Roux, 2010, *Interactive Structure Analysis of Amorphous and  
Crystalline System*. J.Appl,Crys, <http://isaacs.sourceforge.net/>

Je-Luen Li, 2007, *Radial Distribution Function*, [http://w3.iams.sinica.edu.tw/lab/jlli/thesis\\_andy/node14.html](http://w3.iams.sinica.edu.tw/lab/jlli/thesis_andy/node14.html) [12 februari 2015]

L.G Zhou and Hancheng Huang, 2012. *Arespon Embedded Atom Method of Interatomic Potentials*, USA department of mechanical engineering university of Connecticut

Mark Winter, 1993 *Lead*. UK. <http://www.webelements.com/lead/physics.html> . [ 20 mei 2014 ]

Mark Tuckerman, 1997, *General distribution functions and correlation functions*, [https://www.nyu.edu/classes/tuckerman/stat.mech/lectures/lecture\\_8/node2.html](https://www.nyu.edu/classes/tuckerman/stat.mech/lectures/lecture_8/node2.html), [ 12 februari 2015 ]

Mostinsky, 2011, *Diffusion Coefficient* ,<http://www.thermopedia.com/content/696/> . [ 20 mei 2014 ]

Paul Valery . 2009. *The Solid State*. <http://www.chemprofessor.com/solids.htm> [20 mei 2014 ]

Pofit, 2013 . *Embedded Atom Method (EAM) Potentials*. Institute for Theoretical and applied Physics <http://potfit.sourceforge.net/wiki/doku.php?id=eam> . [ 20 Mei 2014 ]

Stukowsky A. 2009. *OVITO (Open Visualization Tool)*. Germany ; <http://OVITO.org/>. [ 20 mei 2014 ]

United Nations environment programe, 2010. *Final review of scientific information on lead* . USA UNEP Publisng.

Ziellinski, 1998. *Exploring the morse Potential*. USA Departement of Chemistry Medical technology and physics Monmouth Unversity

LAMPIRAN

1. Perumusan

Persamaan

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = E_K + E_P = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + U(\{\vec{r}_i\}) \quad (2.1)$$

$$\vec{r}_i' = -\frac{\partial H}{\partial p_i} = 2 \frac{\vec{p}_i}{2m_i} = \frac{\vec{p}_i}{m_i} \quad (2.2)$$

Persamaan

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.12)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.13)$$

Persamaan

$$\begin{aligned} r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) &= 2r(t) + a(t)\Delta t^2 \\ r(t + \Delta t) &= 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t)\Delta t^2 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Persamaan

$$F = ma$$

$$F = -\nabla V$$

$$a = \frac{F}{m} = -\nabla V \frac{1}{m} = -\frac{1}{m} \nabla V r(t + \Delta t)$$

$$a = -\left(\frac{1}{m}\right) \nabla V(r(t)) \quad (2.15)$$

Persamaan

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 + \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.12)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}\ddot{r}(t)\Delta t^3 + O(\Delta t)^4 \quad (2.13)$$

Pengurangan

$$r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) = 2v(t)\Delta t + \frac{1}{3}\ddot{r}(t)\Delta t^3$$

$$2v(t)\Delta t = r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t) + \frac{1}{3}\ddot{r}(t)\Delta t^3$$

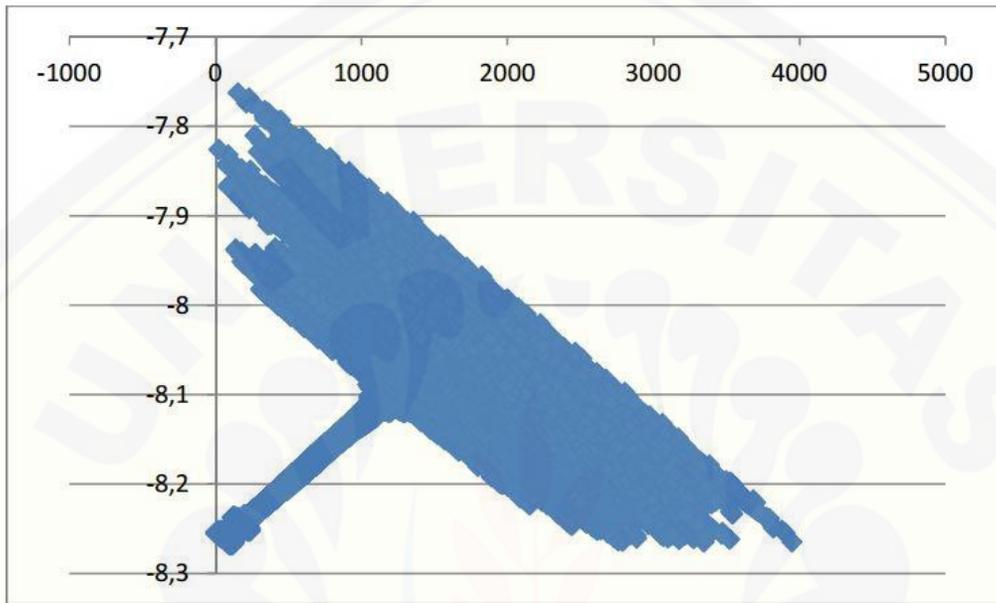
$$2 \frac{dr(t)}{dt} \Delta t = r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)$$

$$\frac{dr(t)}{dt} \Delta t = \frac{r(t + \Delta t) - r(t - \Delta t)}{2}$$

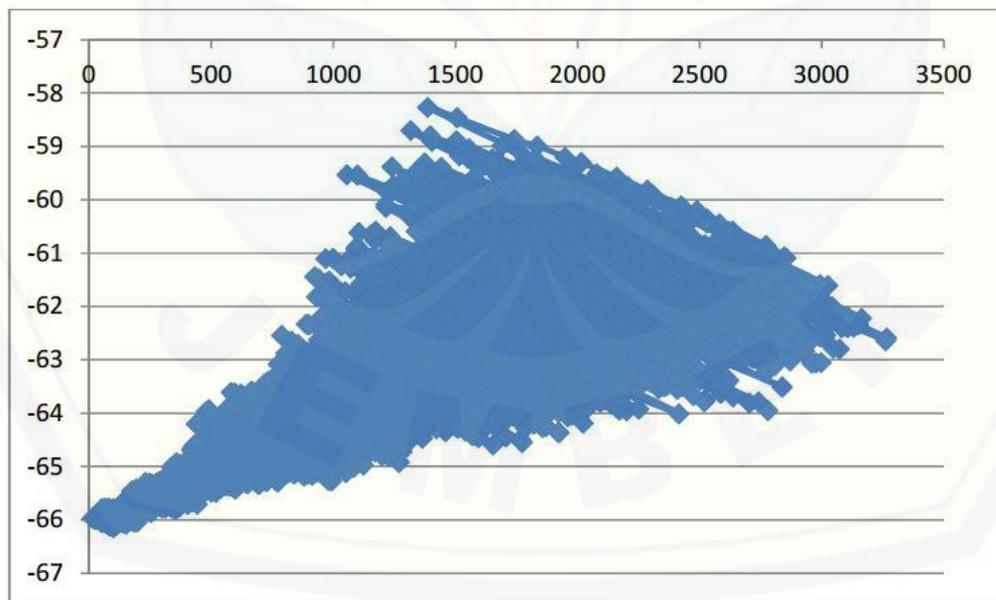
$$v(\Delta t) = \frac{r(t - \Delta t^2) - r(t + \Delta t)}{2} \quad (2.16)$$

2. Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Fe

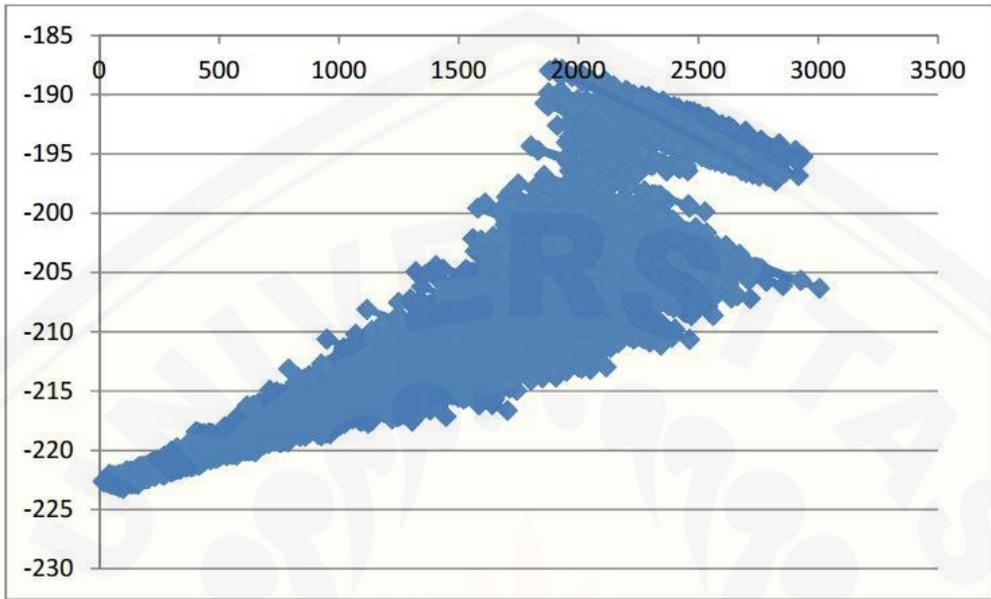
1x1x1



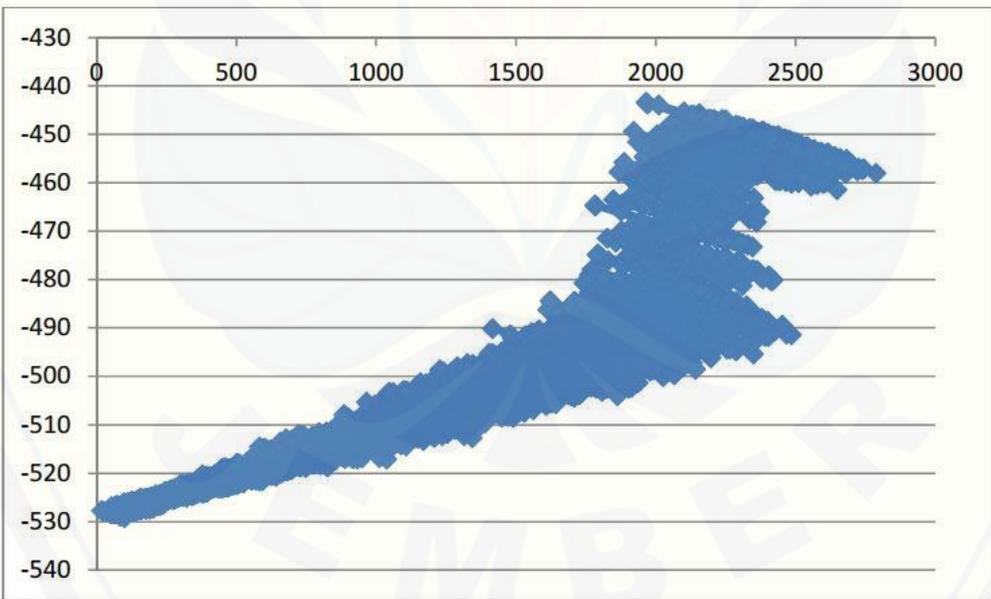
2x2x2



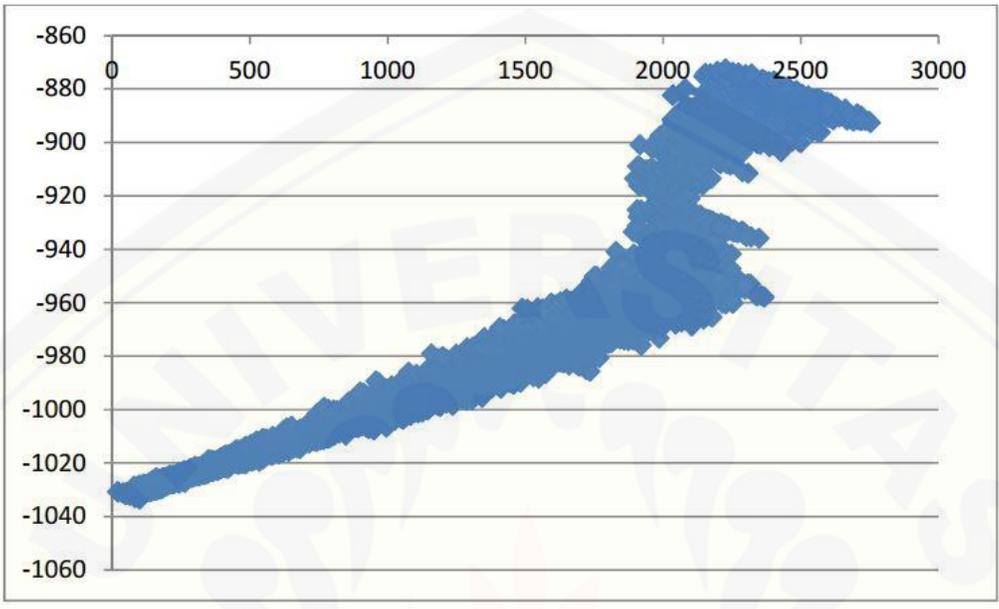
3x3x3



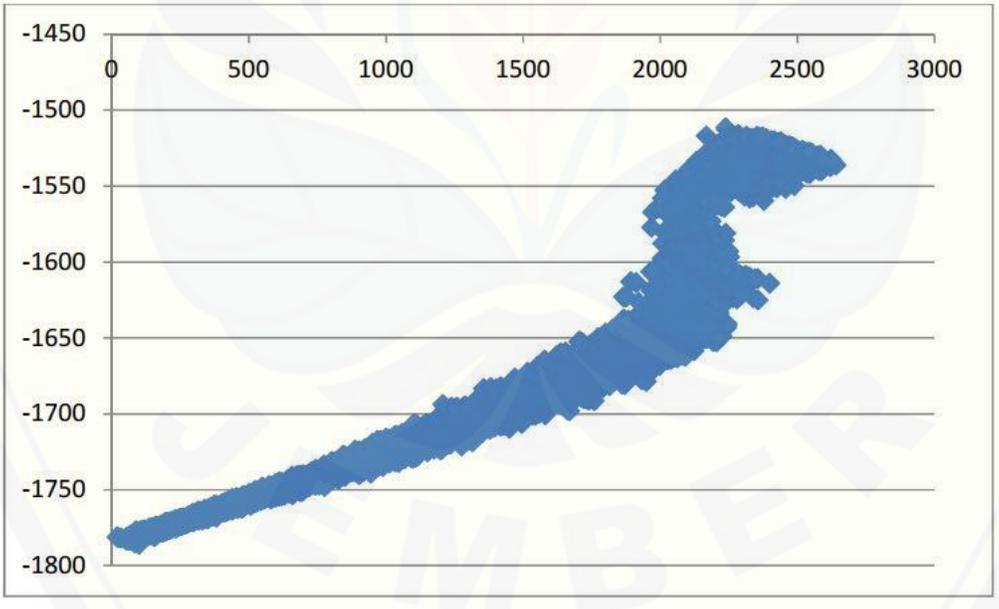
4x4x4



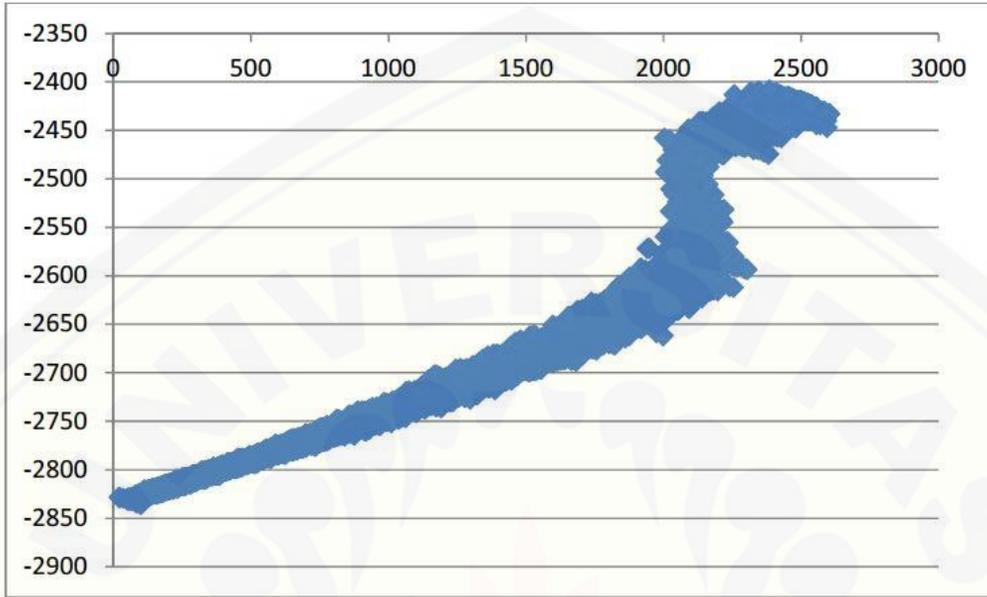
5x5x5



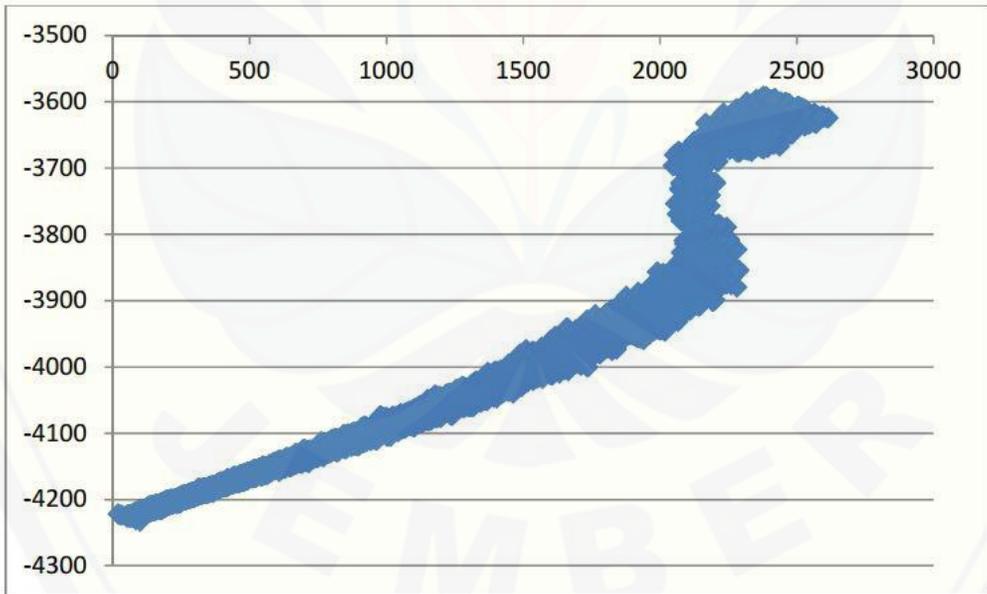
6x6x6



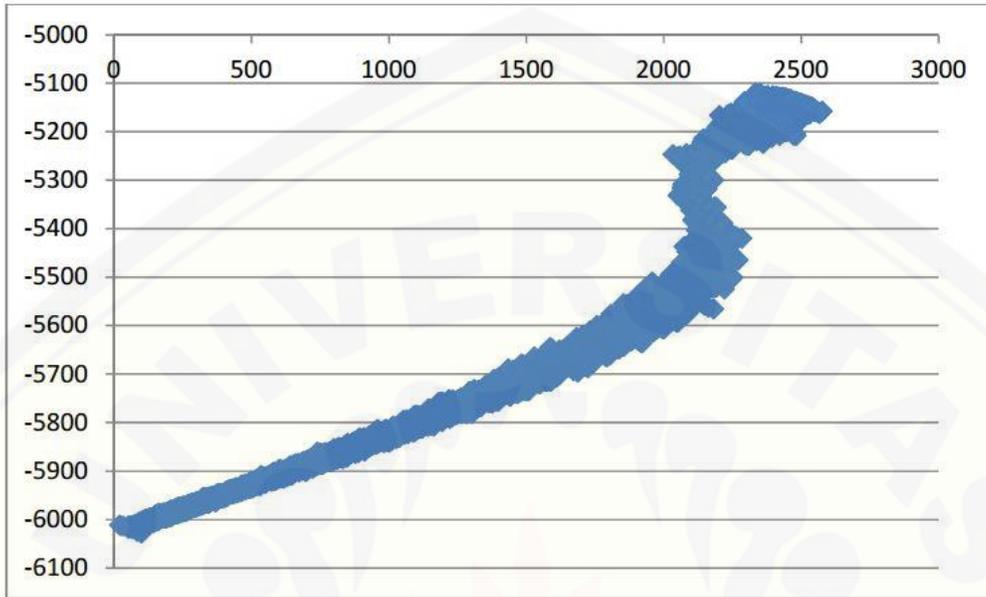
7x7x7



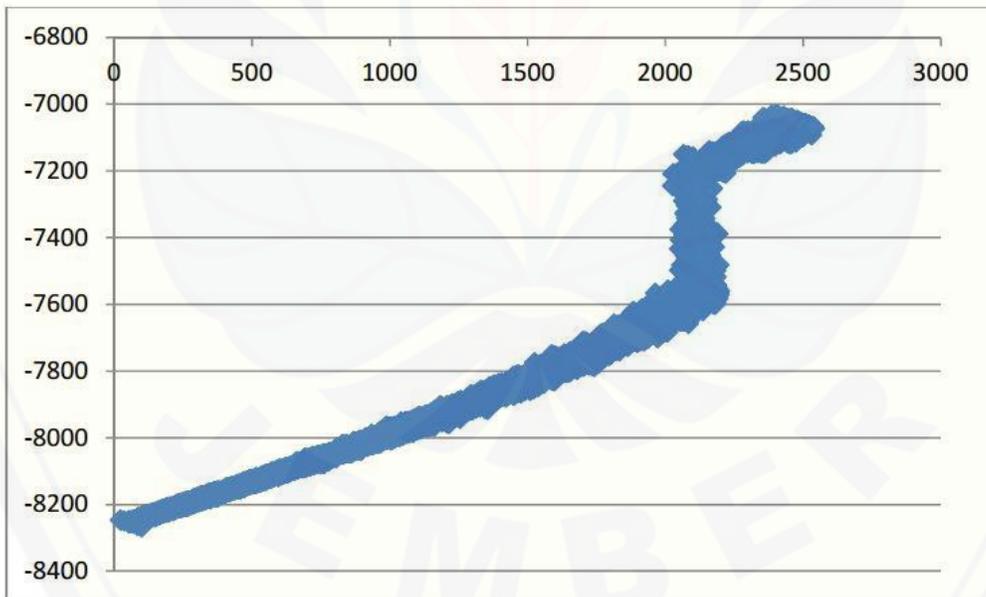
8x8x8



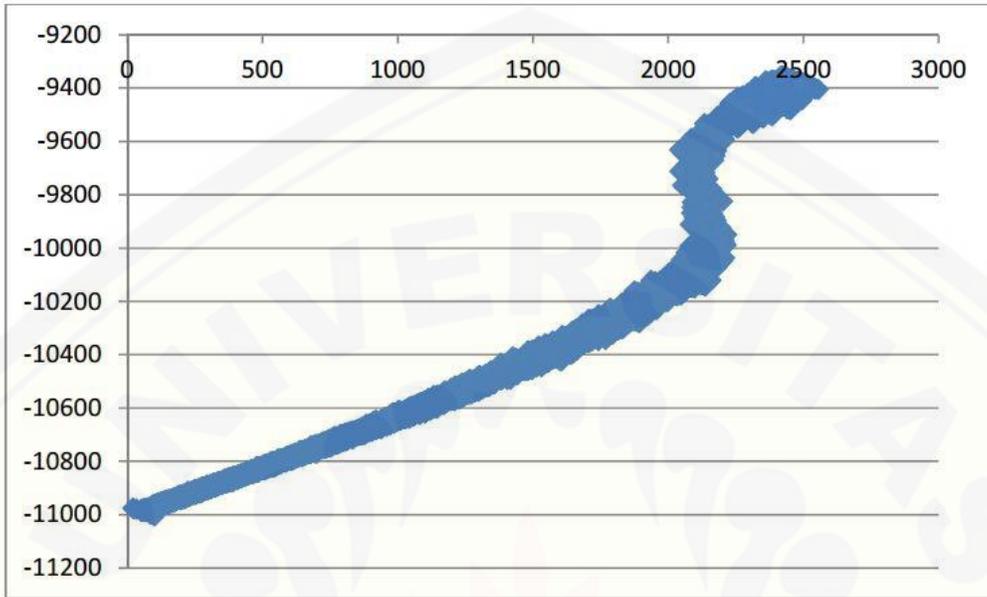
9x9x9



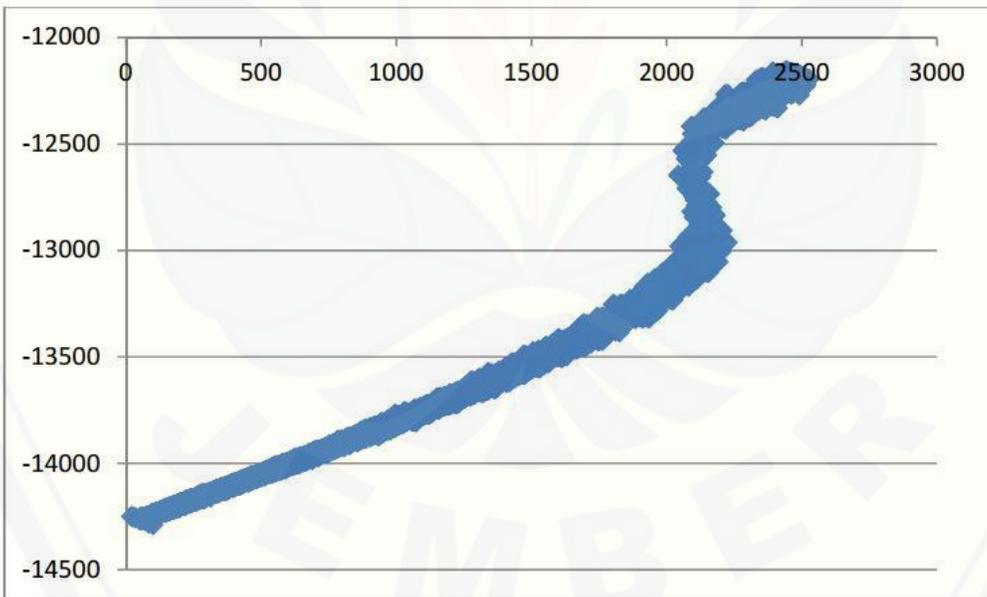
10x10x10



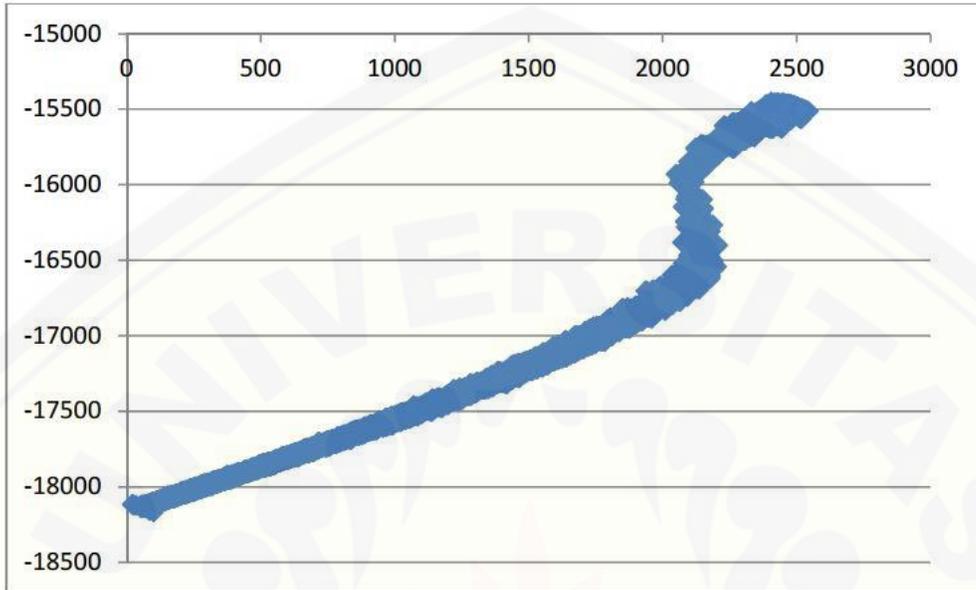
11x11x11



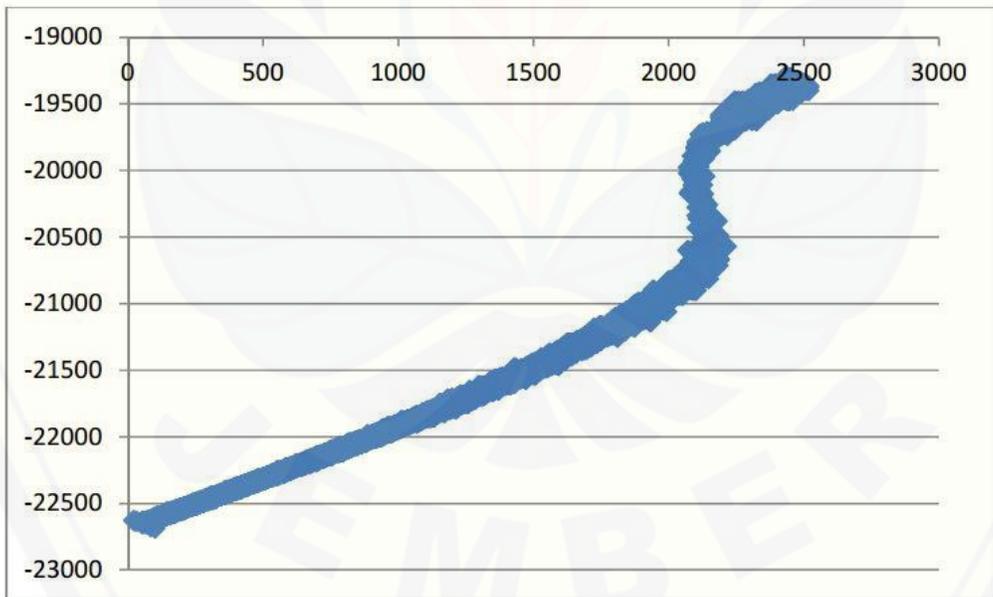
12x12x12



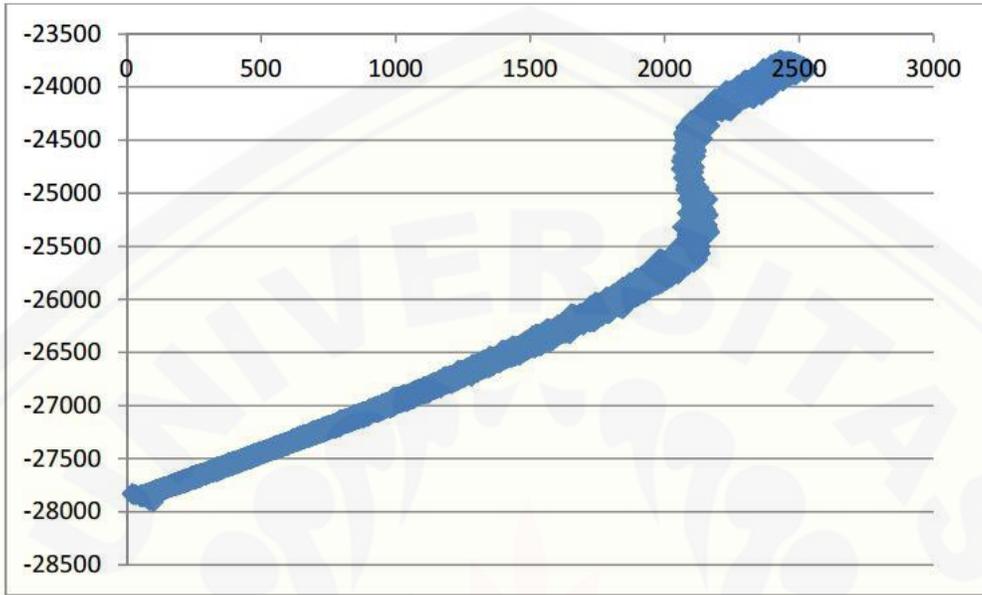
13x13x13



14x14x14

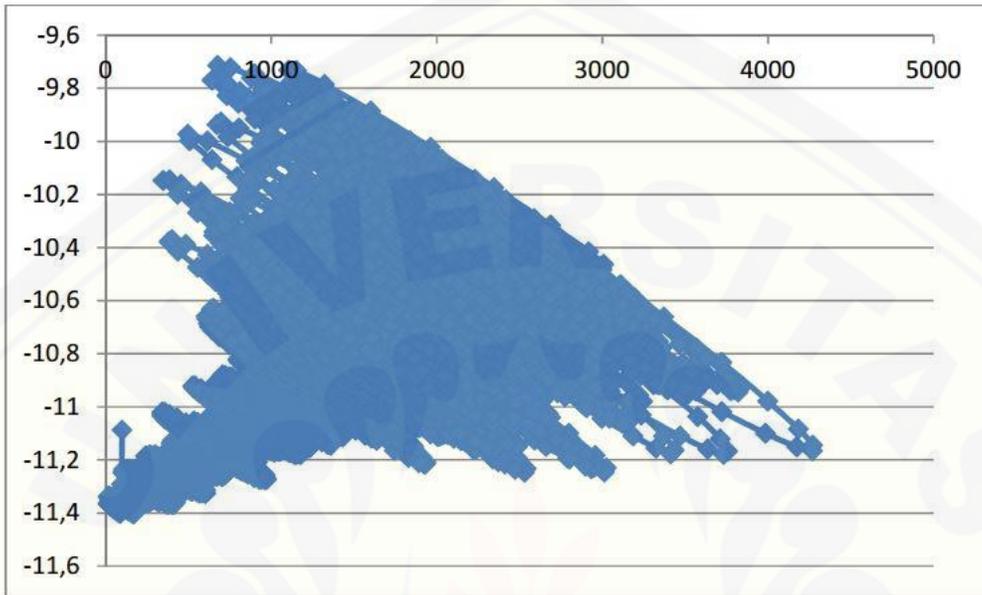


15x15x15

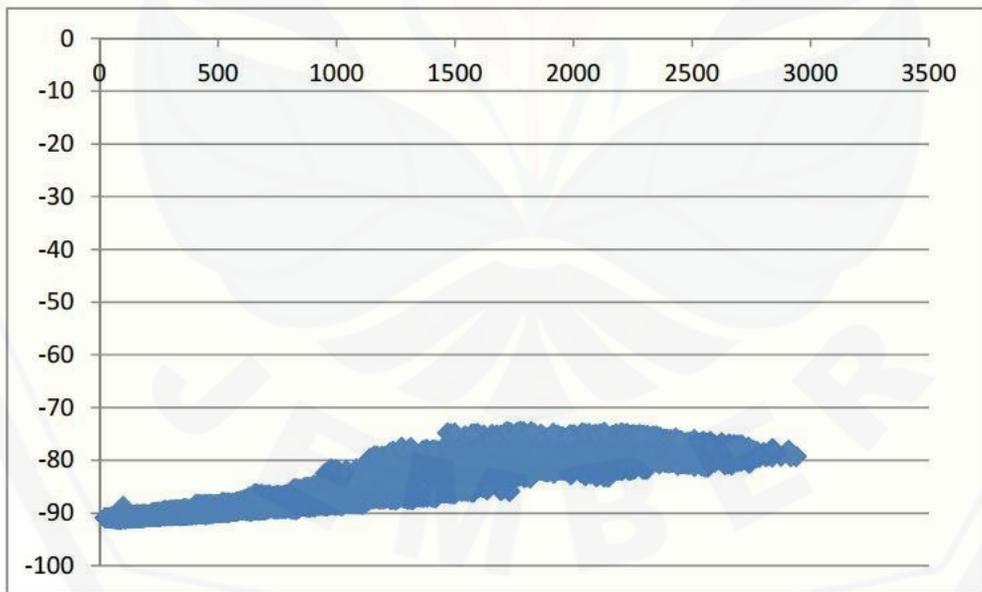


**3. Grafik perubahan T-Ep pada perubahan fase padat cair logam Pb**

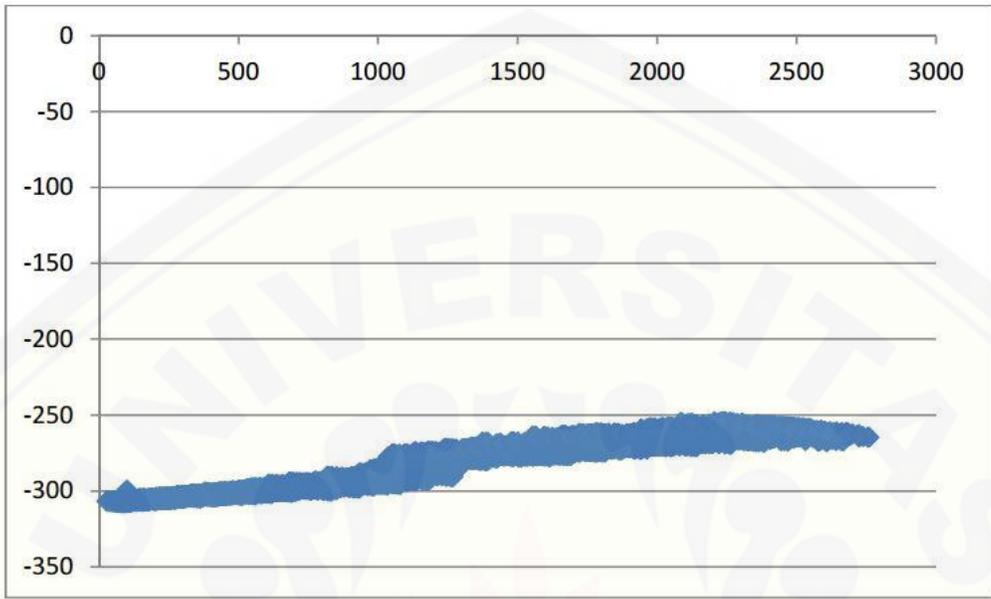
1x1x1



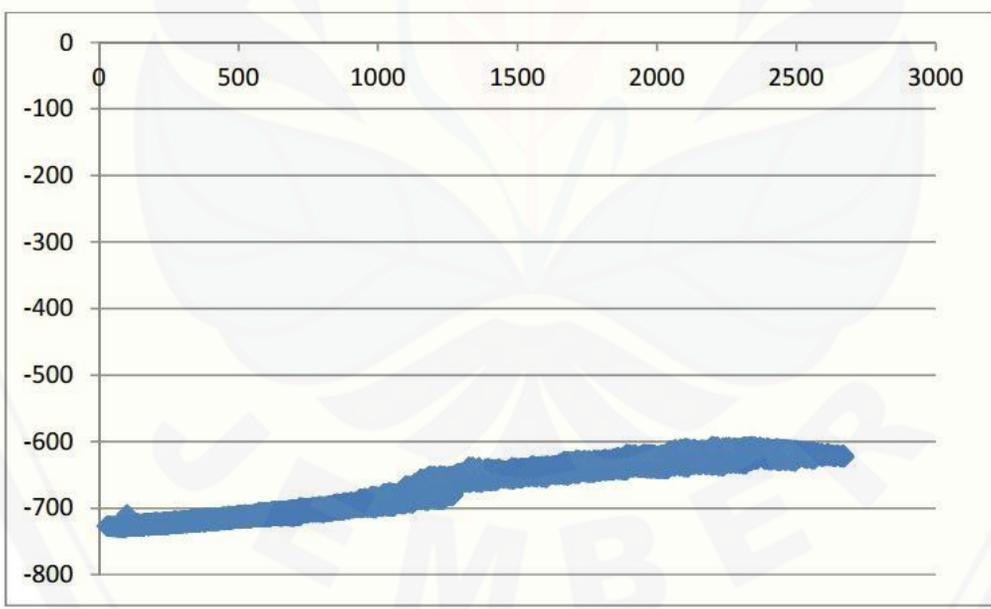
2x2x2



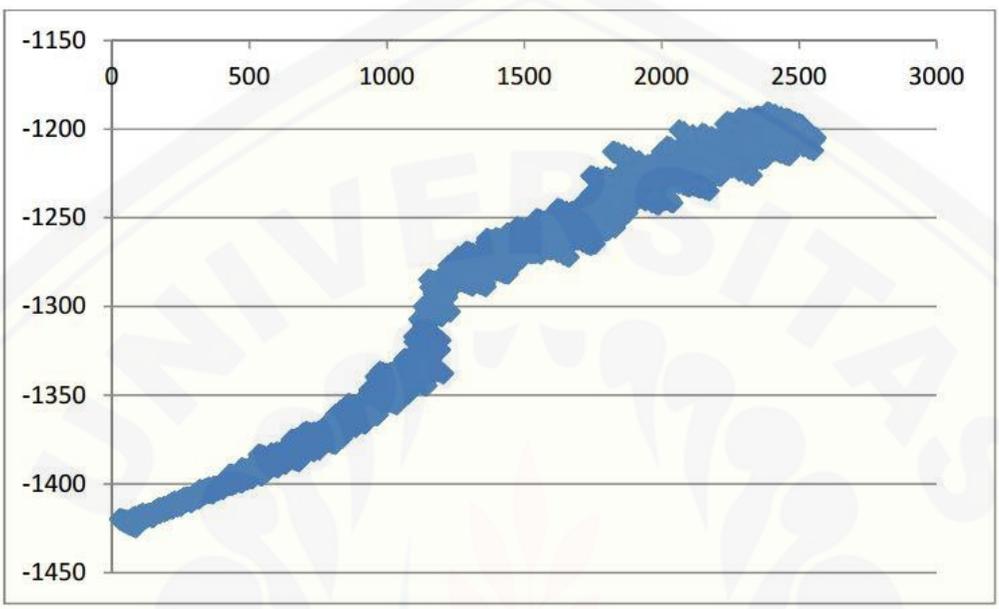
3x3x3



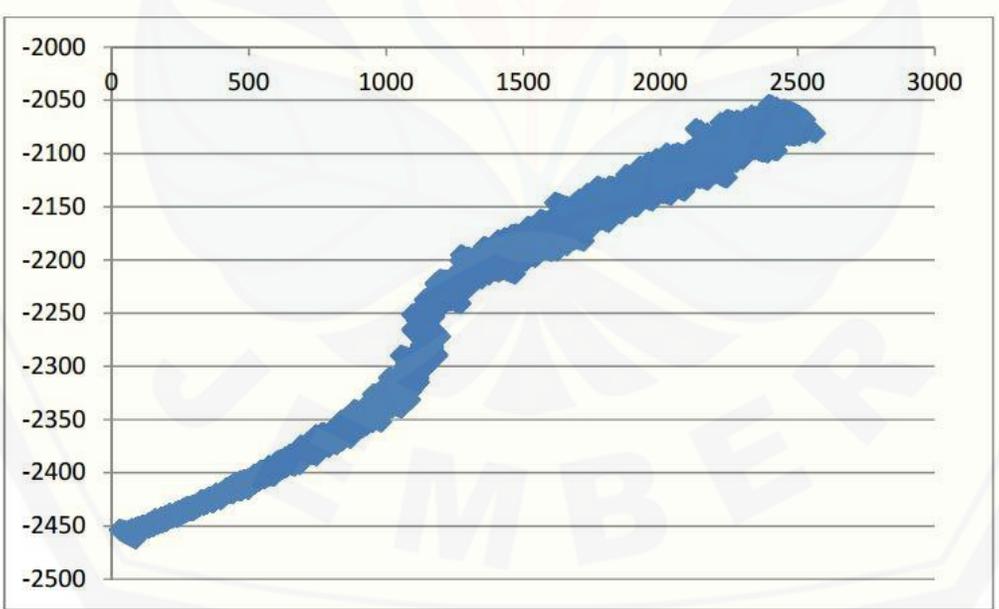
4x4x4



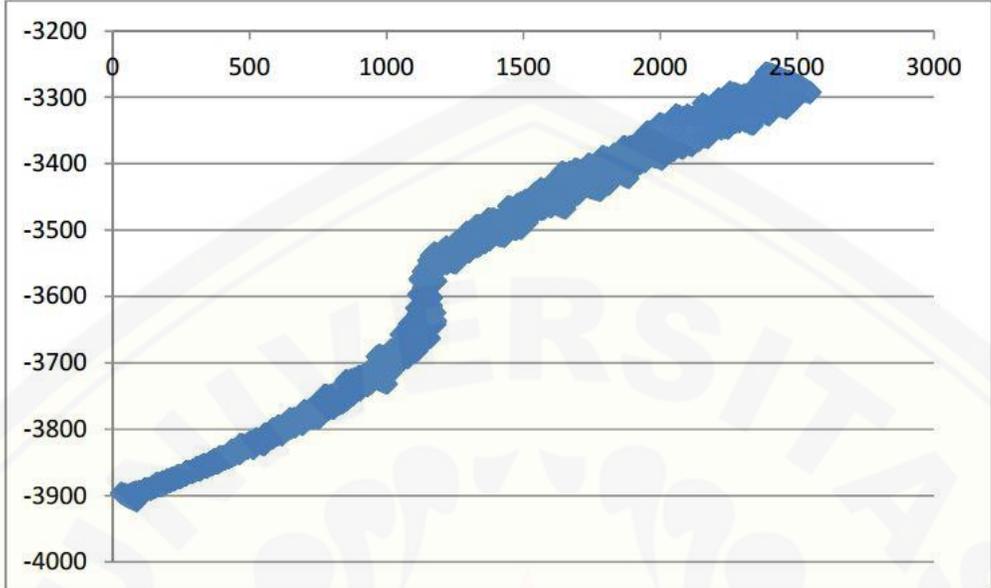
5x5x5



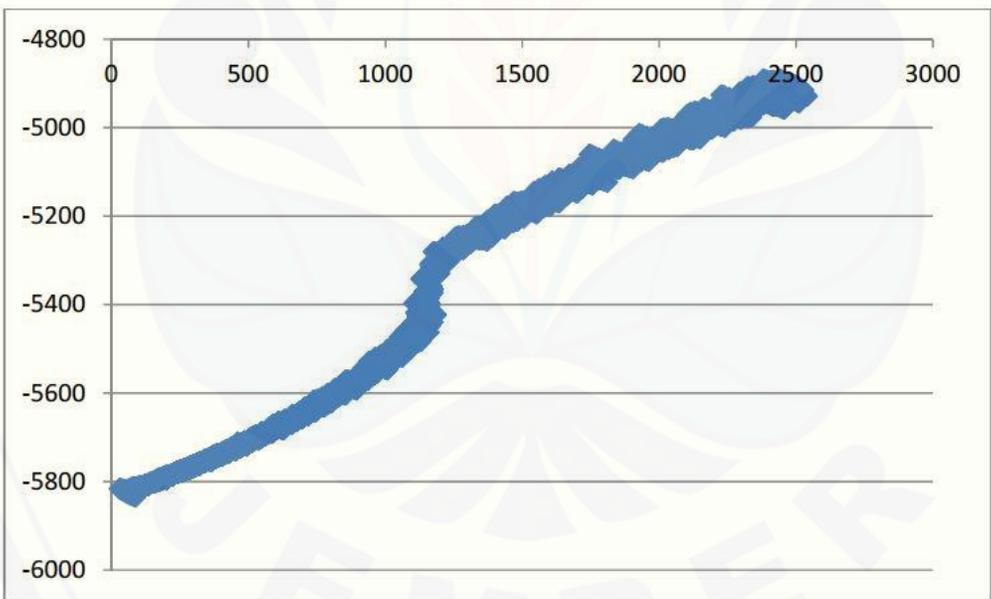
6x6x6



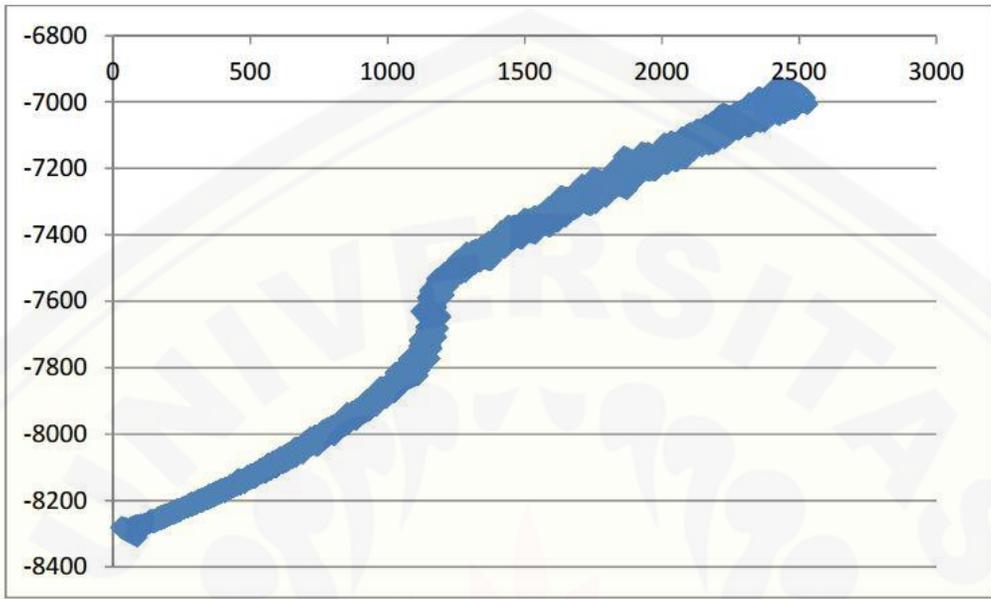
7x7x7



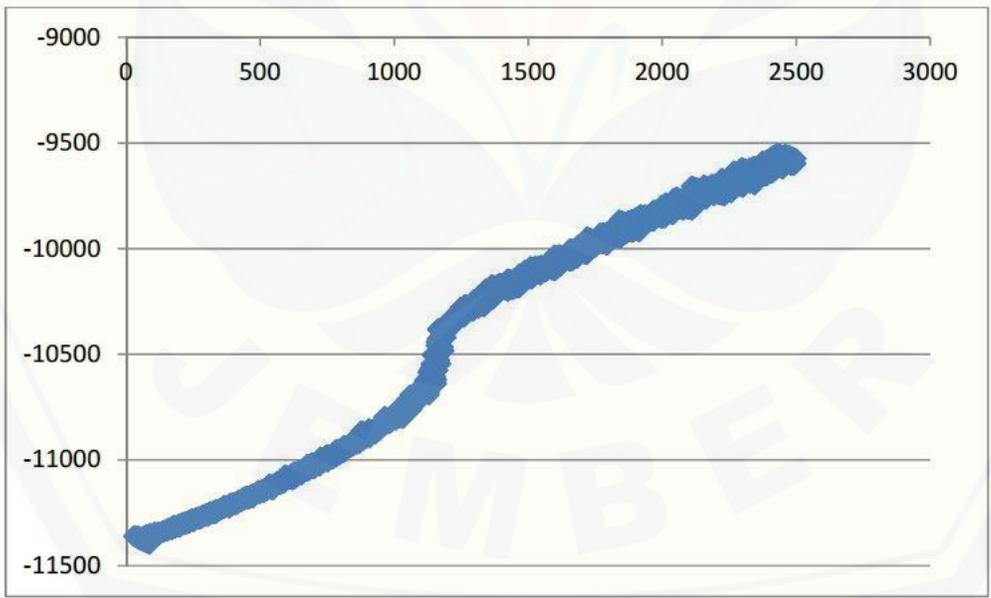
8x8x8



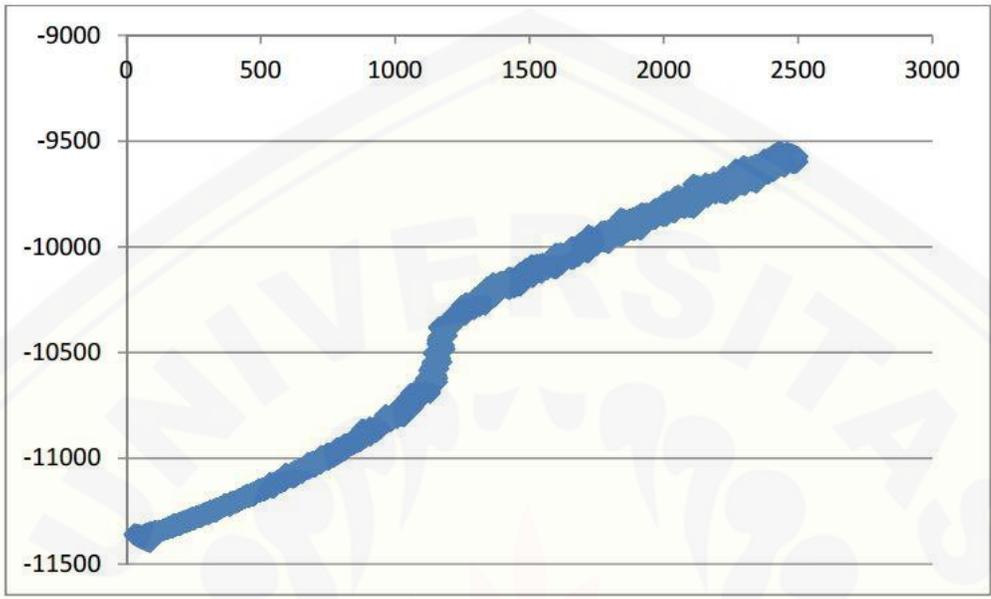
9x9x9



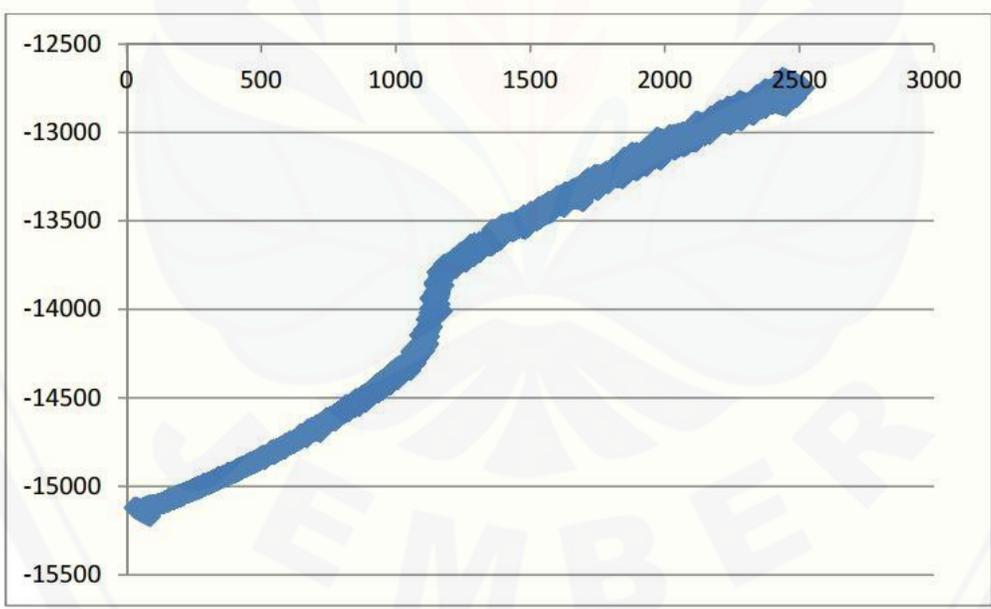
10x10x10



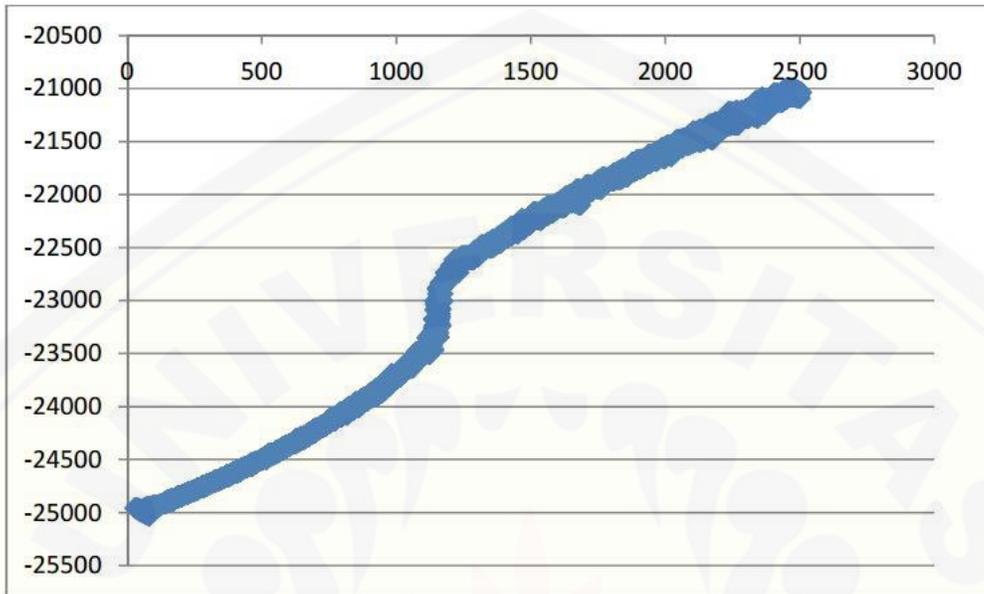
11x11x11



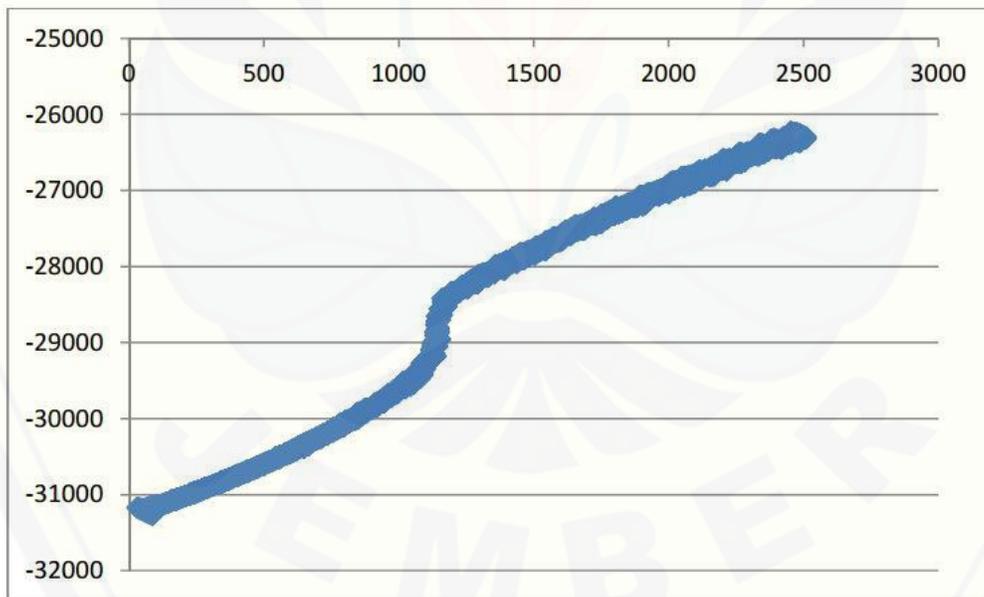
12x12x12



13x13x13



14x14x14



15x15x15

