



**SEMINAR NASIONAL KIMIA DAN PENDIDIKAN KIMIA VIII**  
“Peningkatan Profesionalisme Pendidik dan Periset Sains Kimia di  
Era Masyarakat Ekonomi Asean (MEA)”  
Program Studi Pendidikan FKIP UNS  
Surakarta, 14 Mei 2016



**MAKALAH  
PENDAMPING**

**PARALEL MP**

**ISBN :978-602-73159-1-4**

**PENGARUH PERBEDAAN TEKANAN SELAMA PROSES  
PENDINGINAN TERHADAP STRUKTUR ALUMINIUM PADAT**

**Rizal Arifin<sup>1\*</sup>**

*<sup>1</sup>Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo, Jl. Budi Utomo No. 10 Ponorogo  
63471 Indonesia*

**ABSTRAK**

Pendinginan merupakan salah satu proses utama dalam industri logam. Perbedaan perlakuan fisis dalam proses tersebut menghasilkan logam dengan struktur yang berbeda. Karena aluminium merupakan logam yang banyak ditemukan di alam dan diolah ke dalam berbagai macam produk teknologi, sehingga penelitian mengenai perbedaan struktur aluminium sebagai fungsi dari perubahan tekanan selama proses pendinginan menjadi sangat penting untuk dilakukan. Dalam hal ini, kami menggunakan simulasi dinamika molekular untuk memahami struktur mikroskopik aluminium yang dihasilkan. Analisis sudut ikatan (*bond-angle analysis*) digunakan untuk menentukan struktur lokal dari aluminium padat.



# Pengaruh Perbedaan Tekanan Selama Proses Pendinginan terhadap Struktur Aluminium Padat

Rizal Arifin, Universitas Muhammadiyah Ponorogo



Dipresentasikan pada Seminar Nasional Kimia dan Pendidikan Kimia VIII di UNS Surakarta

## 1 Pendahuluan

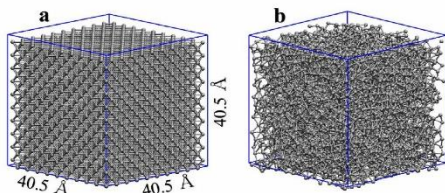
Logam aluminium (Al) adalah salah satu material yang banyak terdapat di alam. Logam ini banyak digunakan dalam berbagai macam industri. Peleburan dan solidifikasi Al merupakan salah satu proses yang banyak dikaji dan dipelajari. Mekanisme dari proses tersebut sangat tergantung dari kondisi yang diberikan, semisal tekanan dan laju pemanasan atau pendinginan. Dengan menggunakan simulasi dinamika molekular, Sarkar, dkk. melaporkan proses solidifikasi Al dengan pendinginan tiba-tiba pada tekanan 0, 0,5, 1, dan 2 GPa [1]. Dalam artikel lain, Zhang, dkk. menjelaskan perubahan kurva lebur campuran NiAl pada tekanan yang berbeda mulai dari 0 GPa sampai dengan 40 GPa [2]. Proses pendinginan material yang terjadi di alam maupun industri biasanya berlangsung secara bertahap, sehingga pemahaman tentang mekanisme perubahan struktur material pada keadaan tersebut sangat diperlukan. Tekanan merupakan salah satu faktor yang mempengaruhi struktur material selama proses pendinginan. Namun demikian, sejauh yang kami ketahui belum ada artikel yang membahas pengaruh tekanan terhadap struktur Al pada proses pendinginan bertahap. Hal ini memotivasi kami untuk melakukan penelitian ini dengan menggunakan teknik simulasi dinamika molekular.

[1]. Sarkar, A., et al. *Int. J. Mod. Phys. B* 22, 2781 (2008)

[2]. Zhang, W., et al. *AIP Advances* 4, 057110 (2014)

## 2 Detail Simulasi

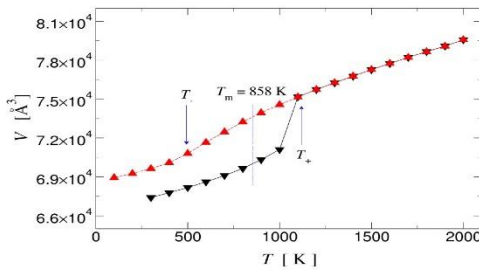
- Sistem : 10 unit cells Al pada sumbu-x, -y, dan -z  
4000 atom Al
- Sistem batas periodik
- Simulasi Dinamika Molekular
- Potensial Embedded Atom Method (EAM)
- Nosé-Hoover thermostat-barostat (NPT)
- Heating Process : 300 K – 2000 K
- Cooling Process : 2000 K – 300 K
- Tekanan  $P = 0, 2, 5, 10, \text{ dan } 15 \text{ GPa}$
- $\Delta T/\Delta t = 0.25 \times 10^{-12} \text{ K/s}$
- Time step  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-15} \text{ s}$  (1 fs)



Konfigurasi awal sistem. (a) Struktur kristal Al dan (b) struktur likuid Al

## 3 Peleburan Al

### A. Sistem Satu Fase

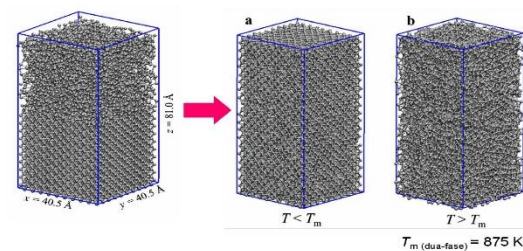


Pada sistem satu fase, temperature lebur ( $T_m$ ) Al diprediksi dengan metode histerisis. Selama proses pemanasan dan pendinginan, terjadi peningkatan dan penurunan volume secara tiba-tiba pada temperatur  $T_*$  dan  $T_*$ .  $T_m$  ditentukan dengan persamaan :

$$T_m = T_* + T_* - \sqrt{T_* T_*}$$

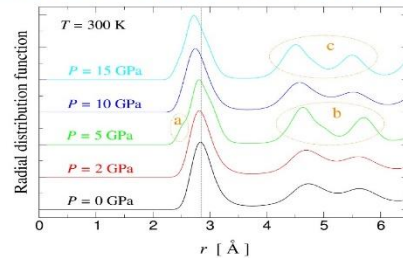
Didapatkan nilai  $T_m = 858 \text{ K}$  yang mendekati nilai eksperimen  $T_m(\text{eks}) = 933 \text{ K}$ .

### B. Sistem Dua Fase

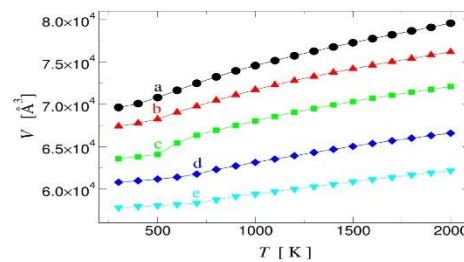


**Acknowledgement:**  
Penelitian ini didanai sebagian oleh hibah penelitian internal Universitas Muhammadiyah Ponorogo

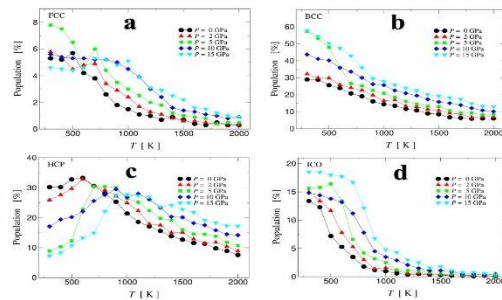
## 4 Efek Tekanan pada Struktur Al Padat



Radial distribution function (RDF) suatu sistem menunjukkan densitas/kepadatan yang bervariasi sebagai fungsi jarak dari sebuah atom referensi. Pada gambar di atas, dapat dilihat bahwa terjadi pergeseran puncak pertama ke arah jarak yang lebih rendah. Hal ini menunjukkan bahwa densitas atom bertambah. Pada tekanan 5 GPa, terjadi penambahan tinggi puncak pada radius yang lebih tinggi. Keadaan ini menggambarkan perubahan struktur menuju kristal.



Grafik di atas menunjukkan fungsi perubahan volume terhadap temperatur selama proses pendinginan pada beberapa nilai tekanan (a) 0 GPa, (b) 2 GPa, (c) 5 GPa, (d) 10 GPa, dan (e) 15 GPa. Dari grafik tersebut dapat dilihat secara jelas bahwa pada sistem yang diberikan tekanan sebesar 5 GPa, terjadi perubahan volume yang besar pada temperatur 500 K. Hal ini bisa mengindikasikan terjadinya perubahan struktur pada temperatur tersebut.



Perubahan struktur yang terjadi secara detail dapat dilihat pada grafik di atas. Struktur FCC merupakan struktur induk dari kristal Al. Presentase tertinggi struktur lokal FCC didapatkan pada tekanan 5 GPa. Tekanan sebesar 15 GPa cenderung untuk menghasilkan struktur lokal Icosahedral lebih banyak.

## Rangkuman:

Pengaruh tekanan pada saat pendinginan terhadap struktur Al padat telah di investigasi dengan menggunakan simulasi dinamika molekular. Validasi potensial EAM dilakukan dengan menentukan temperatur lebur Al. Dari hasil simulasi didapatkan bahwa populasi struktur lokal FCC terbanyak didapatkan pada tekanan 5 GPa.