

Aplikasi Dinamika Molekul Kode LAMMPS untuk Fenomena Transisi Fase

Widiasih¹, Herawati², Heni Safitri³

^{1,2,3}Institusi: Pendidikan Fisika, Jurusan Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Terbuka
Email: (1) widiasih@ut.ac.id, (2) hera@ut.ac.id, (3) henip@ut.ac.id

Abstrak

Simulasi dinamika molekuler adalah salah metode komputasi material yang handal untuk memprediksi sifat-sifat fisis termodinamik padatan, cairan dan gas. Dengan metode dinamika molekuler gerak atom-atom dan hasil perubahan wujud zat dapat dipelajari dan divisualisasikan dengan sangat baik dan informatif karena mampu menggambarkan susunan atom-atom bahan selama proses transisi fase berlangsung, dimana hal ini gerak atom-atom susah diamati secara eksperimen. Penelitian ini bertujuan untuk menggambarkan aplikasi metode dinamika molekuler pada studi transisi fase bahan dimana terjadi perubahan dari padat ke cair. Untuk mengamati adanya transisi fase, simulasi dijalankan dan dimulai dari temperatur T nol absolut pada step ke nol kemudian temperatur dinaikan secara gradual sepanjang simulasi sampai mencapai temperatur 1950,51 K pada step ke 130000. Transisi fase tidak lain adalah berkaitan dengan temperatur leleh bahan, dapat diamati dengan melihat adanya perubahan yang tajam pada kurva Temperatur-Energi Total. Dari hasil simulasi dengan program MD Lammmps setelah step ke 60000 ($T = 840,49$ K) memperlihatkan bahwa dengan bantuan program Jmol untuk analisis struktur bahan diketahui bahwa struktur aluminium masih belum sepenuhnya mencair, sedangkan pada step ke 70000 ($T = 1011,11$ K) sudah lebih acak atom-atomnya yang memperlihatkan kecenderungan sifat-sifat struktur cair. Oleh karena itu temperatur titik lebur logam Al pada penelitian ini diprediksi pada nilai sekitar $T = 1059,75$ K pada step integrasi ke 78200. Selanjutnya metode dinamika selain dapat digunakan untuk menghitung titik leleh bahan, metode ini mempunyai kelebihan dapat digunakan untuk membantu dalam proses belajar-mengajar Fisika di kelas karena hasil simulasi dapat divisualisasikan dengan sangat baik dan informative serta *realtime*.

Kata Kunci: Metode Dinamika Molekul, Perubahan Wujud Zat, Titik Leleh Bahan, LAMMPS, Jmol.

1. Pendahuluan

Metode dinamika molekuler merupakan salah satu metode komputasi dalam fisika yang populer untuk mensimulasikan gerak partikel, atom, molekul sampai untuk obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi [1,2]. Dengan metode dinamika molekuler gerak atom-atom bahan jika mengalami pengaruh dari luar seperti pemanasan, dapat diamati dengan mudah. Metode dinamika molekuler sebenarnya berangkat dari pemikiran menyelesaikan persamaan gerak Newton kedua ($\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$) untuk sistem dinamik yang dievaluasi dengan syarat awal yang diketahui, dengan gaya interaksi dapat diperoleh dari diferensial negatif fungsi potensial. Solusi persamaan gerak Newton ini dapat digunakan mengetahui *trayektori* sistem yaitu kumpulan koordinat partikel/atom/molekul yang membentuk lintasan gerak sepanjang waktu. Berdasarkan informasi *trayektori* sistem dan teori fisika statistik selanjutnya dapat diprediksi besaran-besaran termodinamik sistem seperti temperatur akhir, tekanan akhir, energi total, enthalpi sistem dan sebagainya. Tulisan ini

memaparkan bagaimana metode dinamika molekuler diterapkan untuk merancang model pembelajaran inovatif untuk mata pelajaran fisika khususnya mengenai konsep fisika transisi fase. Kelebihan dari model ini gambaran mikroskopik struktur bahan selama proses perubahan wujud zat, pergerakan atom-atom selama proses pelelehan dapat dianalisis dan diperagakan secara visual.

2. Metode Simulasi

Step by step tahapan simulasi untuk pembelajaran dapat digambarkan sebagai berikut:

- (1) Menyusun atau menentukan fungsi potensial Untuk menggambarkan interaksi antar atom-atom bahan, khususnya logam, digunakan fungsi potensial EAM (*embedded atomic methods*). Fungsi potensial ini merupakan energi potensial yang diformulasikan cocok untuk logam [3,4] yang berbentuk,

$$U_i = F_\alpha \left(\sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (1)$$

Dengan r_{ij} adalah jarak antaran atom ke i

dan $\phi_{\alpha\beta}$ adalah fungsi potensial pasangan, P_{β} adalah kontribusi untuk rapat muatan elektron dari atom j tipe β pada lokasi atom i , dan F adalah fungsi (embedding) yang menggambarkan energi yang diperlukan untuk menempatkan atom i tipe α ke dalam awan elektron.

- (2) Menentukan metode integrasi numerik persamaan gerak

Salah satu algoritma yang digunakan adalah algoritma *Verlet-Velocity* yang sangat populer dimana kecepatan, percepatan dan posisi dihitung bersama pada waktu t :

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

(2)

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \Delta t)]\Delta t$$

(3)

dengan Δt adalah selisih waktu antara dua posisi yang berturutan (*time mesh*), a adalah percepatan dan v adalah kecepatan.

- (3) Menentukan posisi awal atom-atom bahan dan input simulasi (temperatur, tekanan, jumlah step integrasi dll). Posisi awal atom-atom bahan, khususnya logam murni dapat dalam bentuk sc, bcc, atau fcc struktur.
- (4) Pemilihan program MD yang digunakan misalnya LAMMPS [7].
- (5) Hasil dan Pembahasan. Pada tahap ini hasil-hasil simulasi disesuaikan dengan model pembelajaran fisika.

3. Hasil dan Pembahasan

3.1. Simulasi

Hasil dari simulasi menurut Gambar 1 adalah seperti di bawah ini.

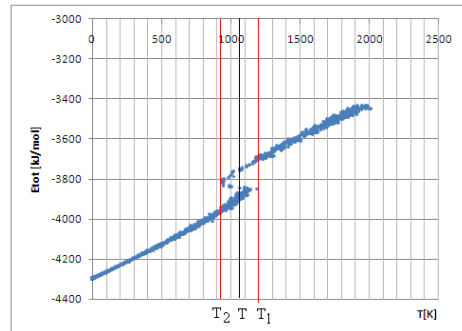
```
Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]
(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

LAMMPS (21 Dec 2010)
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05
Created orthogonal box = (0 0 0) to (32.4 32.4 20.25)
  1 by 1 by 1 processor grid
Created 1280 atoms
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.31123 Mbytes
Step Temp E_pair E_mol TotEng Press
0 0 2.5 -4299.8646 0 -4299.4513 -10496.323
100 1.269560655 21257.64 -4299.636088 -4299.4262 -10488.70844
200 1.397134931 21257.64 -4299.634825 -4299.403845 -10483.84415
300 1.384916473 21257.64 -4299.605354 -4299.376394 -10483.13836
400 1.575923002 21257.64 -4299.609008 -4299.34847 -10481.22533
500 1.580183413 21257.64 -4299.57934 -4299.318098 -10480.76711
600 1.695820925 21257.64 -4299.567221 -4299.286862 -10476.73168
700 1.686191216 21257.64 -4299.534038 -4299.255271 -10476.17223
800 1.856723918 21257.64 -4299.531392 -4299.224432 -10470.24152
```

Gambar 1. Tampilan step awal simulasi LAMMPS

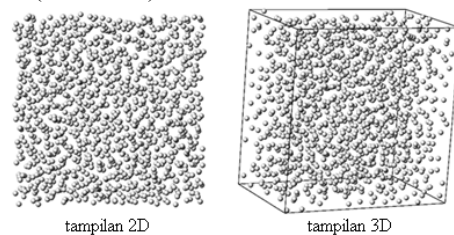
3.2. Perubahan Wujud dan Titik Leleh Bahan

Secara konseptual, titik leleh bahan dapat diketahui dari kurva T-E (temperatur-energi total) bahan, dimana titik leleh terjadi disekitar suhu dimana terjadi perubahan tiba-tiba energi total yaitu adanya perubahan wujud dari padat ke cair.



Gambar 2. Grafik T-E_T untuk perubahan fase padat-cair logam Al

Dari data hasil simulasi dan berdasarkan penafsiran terhadap grafik T-E_T pada Gambar 2 maka dapat dihitung temperatur titik lebur logam Al adalah sekitar $T = 1059,75$ K pada step integrasi ke 78200, dimana atom-atom bahan sudah terlihat acak tidak berstruktur kristal sama sekali (Gambar 3).



Gambar 3. Distribusi atom Al pada suhu disekitar titik leleh

Daftar Pustaka

- [1] Arkundato, A., Suud, Z., and Abdullah, M. (2010) 'Corrosion study of Fe in a stagnant liquid Pb by molecular dynamics methods', in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1244, pp.136 - 144.
- [2] Arkundato, A., Suud, Z., Abdullah, M., Widayani, S., and Massimo, C. (2012) 'Numerical study: Iron corrosion-esistance in lead-bismuth eutectic coolant by molecular dynamics method', in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1448, pp.155.
- [3] Embedded atom model. http://en.wikipedia.org/wiki/Embedded_atom_model di akses 7 Juli 2012
- [4] Interatomic Potentials Repository Project, <http://www.ctcms.nist.gov/> Di akses 7 Juli 2012
- [5] Plimpton, S. (1995) *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*, *J Comp Phys*, 117, 1-