

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penyambungan difusi merupakan proses penyambungan antara dua bahan dimana logam bergabung pada saat keadaan padat, serta menekan dan memanaskan. Penyambungan difusi disebabkan oleh difusi interatomik material. Proses difusi splicing membutuhkan permukaan yang rata dan bersih untuk meminimalkan keberadaan partikel kontaminan yang mengganggu proses difusi atom [1].

Chamati, dkk. Mengamati self-diffusion atom yang terjadi pada permukaan Fe-BCC (1 0 0). Atom ditempatkan pada permukaan pelat yang dioptimalkan (kotak + vakum) dan simulasi dinamika molekul dilakukan pada 1050 ns (tergantung pada suhu) pada kisaran suhu 600-950 K. Karena suhu kurang dari 600K, jumlah peristiwa difusi yang terjadi terlalu kecil untuk mendapatkan statistik frekuensi yang sebenarnya, maka untuk setiap mekanisme difusi dihitung dengan menggunakan ekspresi [2].

Dalam proses self-diffusion BBC-Fe, konsentrasi *vacancy* kesetimbangan selalu jauh lebih tinggi daripada konsentrasi atom *interstisial* kesetimbangan, sehingga semua suhu dikendalikan oleh mekanisme *vacancy*. Keunggulan konsentrasi *vacancy* kesetimbangan atas konsentrasi atom *interstisial* dipengaruhi oleh energi kekosongan. Koefisien difusi dihitung menurut data eksperimen. Simulasi dinamika molekuler juga digunakan untuk menguji pendekatan kuasi-harmonik untuk perhitungan titik cacat. Diketahui bahwa pendekatan kuasi-harmonik dapat berdampak signifikan terhadap variasi karakteristik titik cacat [3].

Sambungan antara paduan aluminium dan baja memiliki titik leleh yang berbeda dan tidak mudah disambung dalam las yang sama. Titik lebur paduan aluminium 933K, titik lebur baja 1811K, dan proses penelitian yang digunakan adalah ikatan difusi memakai tungku. Parameter ikatan difusi yang diterapkan adalah perubahan suhu dan perubahan serbuk pengisi besi (Fe) dan tembaga (Cu) [4].

Simulasi dinamika molekuler diawali dengan memilih komposisi awal jenis atom sesuai yang akan diteliti. Pada tiap atom berinteraksi dikarenakan oleh gaya-gaya yang mempengaruhinya. Gaya yang bekerja dalam sistem tertutup adalah gaya terkait yang diturunkan menurut fungsi potensial. Tujuan dari simulasi dinamika molekuler adalah untuk membuat orbital molekul pada titik waktu tertentu. Pada setiap momen simulasi, molekul memiliki posisi dan momentum tertentu [5].

Simulasi dinamika molekuler adalah teknik simulasi yang menggunakan komputer sehingga dapat mempresentasikan hubungan antara molekul dan atom selama periode waktu yang telah tertentu. Metode ini memakai dasar persamaan hukum Newton dan hukum mekanika klasik. Keuntungan simulasi dinamika molekuler adalah simulasi dapat dilakukan dengan sistem operasi Windows, Mac Os dan Linux.

Seperti disebutkan di atas, beberapa penelitian tentang penyambungan logam yang berbeda telah dilakukan, tetapi hasil penelitian rinci tentang mekanisme difusi penyambungan logam Fe dengan Fe pada tingkat skala atomik belum ditemukan. Oleh karena itu, penelitian ini menggunakan simulasi dinamika molekuler untuk menganalisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan Fe.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah yang terdapat pada penelitian ini adalah :

1. Pada temperatur berapa penyambungan logam Fe terjadi proses difusi menggunakan simulasi dinamika molekuler?
2. Apakah perbedaan yang terjadi terhadap variasi permukaan terhadap difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler?

1.3 Tujuan

Tujuan penelitian antara lain :

1. Untuk mengetahui pada temperatur berapa terjadi proses difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler
2. Untuk mengetahui pengaruh variasi permukaan terhadap difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler?

1.4 Batasan Masalah

1. Menggunakan logam murni Fe
2. Simulasi dilakukan dengan kondisi vakum
3. Nilai koefisien difusi dihitung dari *Mean Square Displacement* (MSD)
4. Jumlah Atom ke dalam sistem simulasi dibuat tetap

1.5 Manfaat

Hasil studi ini diharapkan dapat bermanfaat bagi kalangan peneliti dan industri sebagai referensi untuk proses difusi pada penyambungan logam Fe Dan juga diharapkan studi ini dapat menjadi referensi untuk penelitian selanjutnya.

