

LAPORAN KUALIFIKASI

The Image Processing Analysis and Molecular Dynamics Studies of Microstructure of Titanium Alloys As Biomaterials for Hip Implant



Disusun oleh :

AJI ABDILLAH KHARISMA

99218017

PROGRAM DOKTOR TEKNOLOGI INFORMASI

UNIVERSITAS GUNADARMA

2021

The Image Processing Analysis and Molecular Dynamics Studies of Microstructure of
Titanium Alloys As Biomaterials for Hip Implant

DISERTASI

AJI ABDILLAH KHARISMA

Telah disetujui oleh :

Prof. Prof. Dr. rer.nat. A. Benny Mutiara, SSI, SKOM

Promotor

Dr. Haris Rudianto, S.T., M. Eng, Ph. D

Ko-Promotor

Dr

Ko-Promotor

Jakarta, 4 Agustus 2021

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar belakang

Titanium dan paduannya adalah bahan yang menjanjikan di bidang biomedis, aerospace, mobil dan di berbagai industri yang memiliki kekuatan tinggi, ringan, ketahanan yang sangat baik terhadap korosi dan biokompatibilitas yang luar biasa. Titanium merupakan logam transisi dengan densitas yang tinggi dibandingkan dengan logam lainnya. Beberapa fakta yang dimiliki oleh titanium dan paduannya antara lain titanium paduan tahan korosi, lebih ringan dan memiliki ketangguhan yang relatif baik dibandingkan dengan material lain, memiliki sifat biokompatibel atau kemampuan suatu material untuk dapat ditanamkan dalam tubuh manusia tanpa menimbulkan adanya reaksi negatif sehingga dapat digunakan dalam tubuh manusia serta memiliki sifat nonmagnetik dan memiliki kemampuan pasif dengan demikian menunjukkan tingkat kekebalan terhadap mineral, asam dan klorida[5]. Definisi prosedural dan definisi praktis atau dunia. Masing-masing definisi ini dapat membantu tetapi sayangnya, kegagalan untuk menangani keberhasilan kunci tertentu. *Biocompatibility is the ability of material to perform with an appropriate host responses in a specific application*[6].

Paduan Ti-Mn-Mo sangat populer di sektor aplikasi biomedis (*biomedical applications*) khusus nya untuk produk implan tulang pinggul. Biomaterial logam digunakan pada sekitar 70–80% implan, jadi studi material baru dengan sifat lebih banyak cukup untuk penggunaan seperti itu adalah yang paling penting. Paduan titanium sering digunakan untuk tujuan biomedis seperti itu sebagai implan gigi, pinggul, dan ortopedi serta perangkat lain seperti pelat dan sekrup karena memiliki perangkat yang sesuai sifat termasuk biokompatibilitas yang baik, ketahanan terhadap korosi dan keausan, sifat mekanik yang sangat baik[1]. Sifat bahan lain yang digunakan di area biomedis, seperti tahan karat 316 L baja, paduan Co-Cr-Mo3–6, dan paduan Ti-

6Al-4V ELI, tidak sebagus paduan titanium. Ti-6Al-4V ELI, misalnya, mengandung aluminium dan vanadium, elemen yang dapat menyebabkan masalah dalam penggunaan jangka panjang. Aluminium ion telah terbukti menyebabkan reaksi alergi pada jaringan manusia dan vanadium telah dikaitkan dengannya gangguan neurologis (seperti penyakit Alzheimer)[2].

Mikrostruktur, sifat mekanik, dan biokompatibilitas berbagai paduan Ti-Mn tipe- β berbiaya rendah yang dibuat dengan peleburan cold crucible levitation (CCLM) dan metal injection moulding (MIM) diselidiki setelah pelarutan. pengobatan. Mn dipilih sebagai elemen paduan berbiaya rendah yang potensial untuk Ti. Antara paduan yang dibuat dengan kedua metode, Ti-9Mn menunjukkan kombinasi terbaik dari kekuatan tarik dan elongasi, dan kinerjanya sebagian besar sebanding dengan atau lebih unggul dari Ti-6Al-4V (Ti-64) ELI. [4]. R.N.Correa, P.A.B Kuroda, M.L Lourence, C.J.C Fernandes, M.A.R Buzalaf, W.F Zambuzzi, & C.R Grandini melakukan penelitian dengan judul *Development of Ti-15Zr-Mo alloys for applying as implantable biomedical device*[7]. Pan Wang, Yan Feng, Fengchao Liu, Lihong W, Shaokang Guan dengan *Microstructure and mechanical properties of Ti-Zr-Cr biomedical alloys*[8]. Takeshi Nagasea, Yuuka Iijima, Aira Matsugaki, Kei Ameyama, Takayoshi Nakano dengan penelitiannya *Design and fabrication of Ti-Zr-Hf-Cr-Mo and Ti-Zr-Hf-Co-Cr-Mo high-entropy alloys as metallic biomaterials*[9]. Mariana Luna Lourenço, Giovana Collombaro Cardoso, Karolyne dos Santos Jorge Sousa, Tatiani Ayako Goto Donato, Fenelon Martinho Lima Pontes & Carlos Roberto Grandini dengan penelitiannya *Development of novel Ti-Mo-Mn alloys for biomedical applications*. Mangan adalah kandidat kuat sebagai elemen paduan untuk pengembangan paduan titanium tipe beta baru. Paduan Ti-10Mo-5Mn, Ti-15Mo-2.5Mn dan Ti-15Mo-5Mn disiapkan dalam tungku busur, yang menghasilkan struktur paduan yang secara jelas menunjukkan dominasi fase beta dengan kubik berpusat tubuh struktur kristal. Mikrostruktur yang diamati mengkonfirmasi hasil karakterisasi struktural paduan [10]. Paduan Ti-Mn yang mengandung 8–17% massa Mn dibuat dengan MIM (*metal injection molding*).

Mikrostruktur, kekerasan Vickers, modulus Young, sifat tarik, dan sifat tekan paduan yang akan dievaluasi[11]. Pengaruh substitusi molibdenum dianalisis pada struktur, struktur mikro dan sifat mekanik terpilih dari paduan Ti-20wt% Zr-Mo yang akan digunakan aplikasi biomedis. Sampel disiapkan dengan peleburan busur dan dikarakterisasi dengan difraksi sinar-X dengan perbaikan selanjutnya dengan metode Rietveld, optik dan pemindaian mikroskop electron [12].

Metode baru dan otomatis untuk mensegmentasi gambar mikrostruktur paduan Ti6Al4V menjadi butiran penyusunnya dan menghasilkan pengukuran. Hasil dari penerapan teknik ini dievaluasi dengan membandingkan pengukuran yang diperoleh dengan metode analisis yang berbeda.[20]. Proses termal dan mekanis mengubah struktur mikro material Ti6Al4V, yang menentukan properti mekanis. Algoritma pengolahan citra digital dikembangkan untuk mengisolasi fitur mikrostruktur secara individu, berupa segmentasi gambar dari morfologi, fraksi volume butir [25]. Memprediksi sifat mekanik dari Aluminium 0,5% graphene berdasarkan luas ukuran butir dengan metode image processing menggunakan software Matlab[26]. Pengaruh perlakuan panas terhadap sifat mekanik Ti6Al4V sampel yang dihasilkan oleh laser selektif peleburan dibahas berdasarkan analisis kuantitatif mikrostruktur dengan alat pemrosesan gambar dan *machine learning*. Mikrostruktur ini disegmentasi dan diklasifikasikan dari geometris partikel diekstraksi dan dievaluasi dengan analisis citra dengan output nilai kekerasan sampel [27].

Secara umum penggunaan metode Molecular Dynamic pada penelitian bertujuan dari untuk memprediksi pengaruh setiap penambahan unsur pada paduan titanium dengan menggunakan metode dinamika molekuler dengan kode komputer LAMMPS (Large-scale Atomic / Molecular Massively Parallel Simulator), Model simulasi untuk visualisasi, menggunakan Open Visualization Tool (OVITO) dan Visual Molecular Dynamics (VMD). Dimana hasil simulasi tersebut akan dibandingkan dengan hasil eksperimen untuk diperiksa dengan melakukan sifat mekanisnya (kompresi, kekerasan, dan keausan), stabilitas fasa dan perilaku oksidasi

dan koros pada suhu tinggi, dan akan diuji biokompatibilitasnya untuk menghasilkan produk implan tulang pinggul atau hip implant. Molecular dynamics (MD) adalah metode simulasi komputer untuk menganalisis pergerakan fisik atom dan molekul [39]. Atom dan molekul diizinkan untuk berinteraksi selama periode waktu tertentu, memberikan gambaran tentang evolusi dinamis sistem. Salah satu kekhasan utama dari dinamika molekuler klasik adalah pilihan potensi model dari interaksi antar atom, terutama ketika sistem logam sedang dipertimbangkan [40]. Penggunaan metode atom tertanam yang Dimodifikasi (MEAM) berdasarkan potensi, yang terdiri dari kontribusi banyak benda untuk interaksi dengan mempertimbangkan distribusi kerapatan atom dan Di sisi lain MEAM dapat dengan mudah digabungkan dengan metode dinamika molekuler dan itu terbukti memberikan hasil yang sangat andal untuk sejumlah logam cair murni dan beberapa paduan [41-42].

Potensi interatomik analitik baru untuk paduan Mo, Ti dan Mo-Ti telah dikembangkan. Berdasarkan potensi tersebut, ikatan difusi antarmuka Mo-Ti telah diselidiki, di mana efek suhu dan ketergantungan orientasi dipelajari secara rinci dengan menggunakan simulasi dinamika molekul [54]. Simulasi dinamika molekul mengungkapkan bahwa dibandingkan dengan Cu, antarmuka Cu/W dengan hubungan Kurdjumov–Sachs memiliki kekuatan kritis yang lebih tinggi dalam arah $[1\ 1\ 2]$ Cu atau $[1\ 1\ 0]$ Cu dan kekuatan yang jauh lebih rendah di $[1\ 1\ 1]$ Arah Cu, sedangkan daktilitasnya lebih kecil, terutama karena kendala antarmuka dan kisi W [55].

Pada penelitian ini akan dilakukan modelling desain komposisi paduan Ti-Mo dengan variabel unsur berbeda (Cr, Cu, dan W) yang dihubungkan dengan struktur mikro dan sifat mekanik (*compression test* dan *hardness test*) yang akan terbentuk menggunakan metode *Molecular dynamic simulation*, kemudian dengan bantuan metode image processing sebagai analisa struktur mikro (*microstructure*) untuk pengukuran ukuran butir yang terjadi pada pengembangan paduan.

1.2 Perumusan Masalah

Kajian dalam metode eksperimental untuk menghitung struktur mikro (*micro structure*) berdasarkan komposisi (*composition*) dari suatu perpaduan bahan (*alloys*) memerlukan waktu dan proses yang sangat panjang dan lama pekerjaan nya dengan meninjau berdasarkan sifat mekanik dari suatu material tersebut yang sampai saat ini pun masih dilakukan secara eksperimental. Oleh, karena itu dari masalah yang ada diatas, untuk mempermudah melakukan perhitungan ukuran butir struktur mikro perlu menggunakan beberapa metode pendekatan yaitu *image processing* dan untuk dapat memprediksi secara cepat sifat mekanik bahan akan dilakukan komputasi modelling desain komposisi Ti-Mo dihubungkan dengan struktur mikro (*micro structure*) dan sifat mekanik yang akan terbentuk dengan menggunakan pendekatan metode *molecular dynamic*.

Sifat bahan atau material yang digunakan pada aplikasi biomedis, seperti tahan karat 316 L baja, paduan Co-Cr-Mo, dan paduan Ti-6Al-4V ELI memiliki permasalahan terhadap sifat biokompatibilitas pada manusia. Kandungan Al dan V dapat menyebabkan masalah dalam penggunaan jangka panjang yaitu reaksi alergi pada jaringan manusia dan vanadium telah dikaitkan dengannya gangguan neurologis, seperti penyakit Alzheimer[2]. Dengan adanya permasalahan pada aplikasi biomedis tersebut dalam penggunaan seperti Implan gigi, pinggul, dan ortopedi serta perangkat lain nya perlu dilakukan peninjauan kembali terhadap pemilihan komposisi material yang baik aman yang digunakan manusia. Pada saat ini, Paduan titanium diharapkan menjadi penunjang yang baik sebagai jenis paduan dalam bidang biomedis seperti Paduan Ti-Mo. Perlu diketahui untuk melakukan pengembangan pengujian jenis paduan titanium tersebut perlu memakan waktu yang sangat lama untuk menghasilkan produk biomedis seperti implan tulang pinggul. Berdasarkan hal tersebut maka dapat dirumuskan sebagai berikut :

1. Bagaimana pemodelan desain komposisi Ti-Mo dihubungkan dengan sifat mekanik yang akan terbentuk menggunakan *molecular dynamic* ?
2. Bagaimana menganalisa struktur mikro (*microstructure*) untuk ukuran butir pada komposisi Ti-Mo menggunakan *image processing* ?
3. Bagaimana pengembangan komposisi jenis paduan titanium yang baik untuk implant tulang pinggul khususnya untuk Ti-Mo dan variable unsur yang berbeda dari Cr, Cu dan W ?

1.3 Batasan masalah

Untuk mempermudah pemahaman dan interpretasi dalam penelitian ini perlu diberikan beberapa batasan masalah, agar batasan masalah tidak meluas dan menyimpang dari tujuan. Adapun batasan masalah dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Hanya membahas komputasi material dari modelling desain dengan menggunakan metode *Molecular Dynamic Simulation* pada komposisi Ti-Mo dihubungkan dengan struktur mikro dan sifat mekanik yang akan terbentuk yaitu uji tekan (*compression test*) dan kekerasan (*hardness test*)
2. Proses analisa ukuran struktur mikro dari ukuran butir (*grain size*) paduan Ti – Mo menggunakan Metode *Image Processing*
3. Hanya membahas tentang paduan unsur Ti-Mo dengan variabel komposisi persentase yang berbeda dari unsur W, Cu, dan Cr.
4. Uji Karakterisasi Mikrostruktur (*Microstructure Characterization*) menggunakan XRD Analysis, Optical Microscopy, SEM (*Scanning Electron Microscopy*) dan EDS (*Energy Dispersive Spectroscopy*).
5. Tidak membahas pengaruh suhu, selain suhu yang ditentukan dalam parameter penelitian.

1.4 Tujuan penelitian

Penelitian ini menjelaskan tentang subprojek dengan menggunakan beberapa metode pendekatan sebagai berikut :

1. Komputasi material dari modeling desain komposisi Ti-Mo dihubungkan dengan struktur mikro dan sifat mekanik yang akan terbentuk dengan metode *molecular dynamic*.
2. Menganalisa struktur mikro dari ukuran butir (*grain size*) pada Ti-Mo menggunakan metode *image processing*
3. Mengembangkan paduan Titanium (Ti-Mo) dengan variabel komposisi persentase yang berbeda dari unsur Cr, Cu, dan W.

1.5 Manfaat penelitian

Manfaat dari penelitian ini yaitu dapat memprediksi dari hasil modelling desain komposisi yang dibuat dengan metode *molecular dynamic* yang dihubungkan dengan sifat mekanik yang akan terbentuk dari *compression test* dan *hardness test* agar dapat mempermudah mendapatkan hasil yang lebih cepat dan efisien dibandingkan dengan metode eksperimental yang memiliki pengerjaan waktu yang lebih lama, kemudian berdasarkan pengembangan paduan berbasis Ti-Mo elemen paduan seperti Cr, Cu, dan W dapat meningkatkan kinerja paduan berdasarkan sifat mekanik yang baik, sehingga akan memenuhi biokompatibilitas pada material paduan tersebut khususnya untuk *biomedical* untuk produk implan tulang pinggul (*Hip Implant*).

1.6 Kontribusi dan Kebaharuan Penelitian

Kontribusi dan kebaruan yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Terkait dengan pemodelan desain komposisi yang dihubungkan dengan sifat mekanik yang akan terbentuk dari uji tekan, uji kekerasan, dan oksidasi menggunakan *molecular dynamic*.
2. Terkait dengan komposisi paduan baru yang telah dikembangkan berdasarkan komposisi paduan Ti – Mo dengan variable persentase yang berbeda dari unsur Cr, Cu, dan W, mendapatkan hasil yang baik pada sifat mekanik dan uji oksidasi nya sehingga dapat cocok di gunakan pada aplikasi *biomaterial* untuk implant tulang pinggul.
3. Terkait dengan analisa struktur mikro dengan metode Image Processing dimana proses ini dilakukan dengan sampel disiapkan lalu dilakukan proses sintering dan dikarakterisasi dengan difraksi sinar-X atau pemindaian mikroskop elektron, dan hasil sampel dari SEM akan diproses untuk mendapatkan hasil perhitungan ukuran butir yang lebih baik.
4. Penelitian ini diharapkan dapat memberikan kontribusi bagi perkembangan IPTEK terutama pada bidang Teknologi Informasi dan bidang Material.
5. Menerbitkan makalah di Jurnal Internasional terkemuka.
6. Berpartisipasi dalam Konferensi Internasional.

1.7 Posisi dan Roadmap Penelitian

1.7.1 Penelitian sebelumnya

Beberapa penelitian yang terkait dengan modelling desain komposisi paduan dengan menggunakan *molecular dynamic* (MD) telah dilakukan oleh beberapa peneliti. Molecular dynamics (MD) adalah metode simulasi komputer untuk menganalisis pergerakan fisik atom dan molekul [39]. Atom dan molekul diizinkan untuk berinteraksi selama periode waktu tertentu, memberikan gambaran tentang evolusi dinamis sistem. Salah satu kekhasan utama dari dinamika molekuler klasik adalah pilihan potensi model dari interaksi antar atom, terutama ketika sistem logam sedang

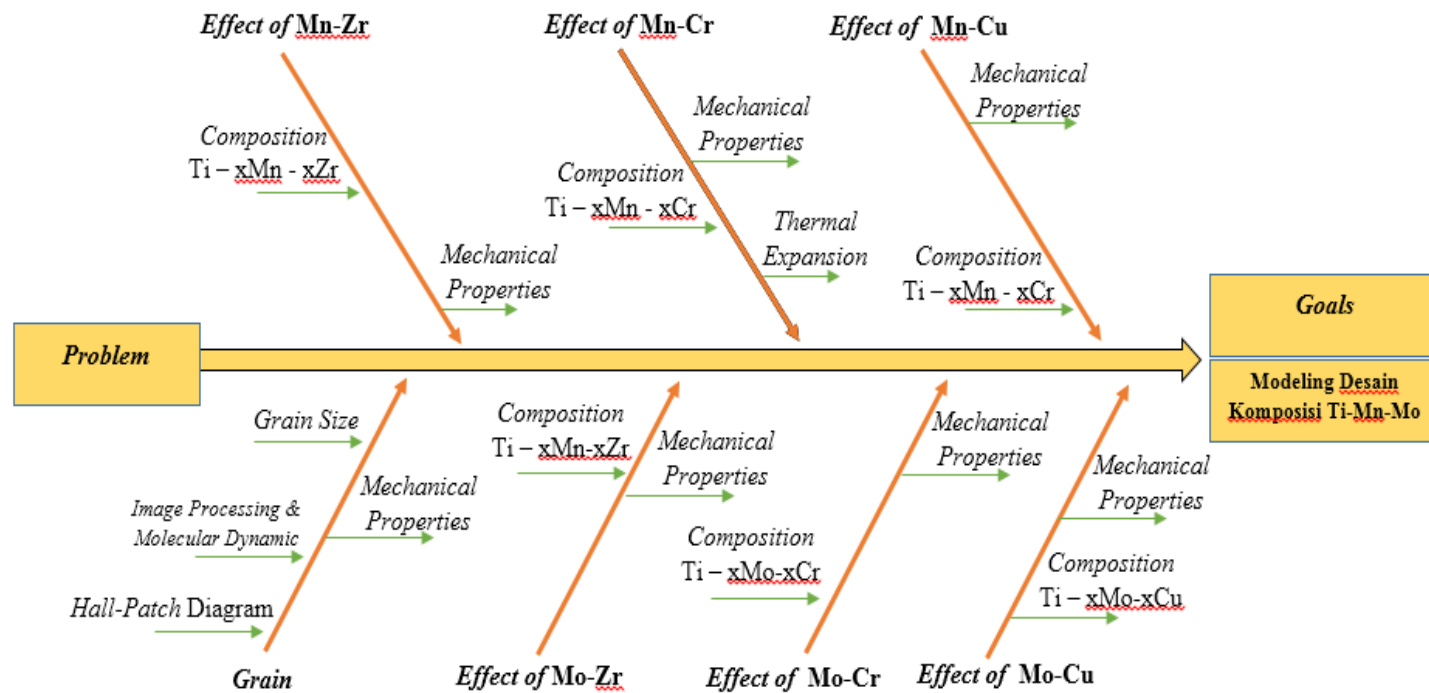
dipertimbangkan [40]. Penggunaan metode atom tertanam yang Dimodifikasi (MEAM) berdasarkan potensi, yang terdiri dari kontribusi banyak benda untuk interaksi dengan mempertimbangkan distribusi kerapatan atom dan Di sisi lain MEAM dapat dengan mudah digabungkan dengan metode dinamika molekul dan itu terbukti memberikan hasil yang sangat andal untuk sejumlah logam cair murni dan beberapa paduan [41-42].

Potensi interatomik analitik baru untuk paduan Mo, Ti dan Mo-Ti telah dikembangkan. Berdasarkan potensi tersebut, ikatan difusi antarmuka Mo-Ti telah diselidiki, di mana efek suhu dan ketergantungan orientasi dipelajari secara rinci dengan menggunakan molekul simulasi dinamika[54]. Simulasi dinamika molekul mengungkapkan bahwa dibandingkan dengan Cu, antar muka Cu/W dengan hubungan Kurdjumov–Sachs memiliki kekuatan kritis yang lebih tinggi dalam arah $[1\ 1\ 2]$ Cu atau $[1\ 1\ 0]$ Cu dan kekuatan yang jauh lebih rendah di $[1\ 1\ 1]$ Arah Cu, sedangkan daktilitasnya lebih kecil, terutama karena kendala antarmuka dan kisi W[55].

1.7.2 Road map penelitian

TOPIK	Tahun					
	2016	2017	2018	2019	2020	2021
Pemodelan	QibinLi, Cheng Huang, Yunpei Liang, dkk Pemodelan MD dengan <i>lammmps</i> , <i>ovito</i> untuk uji kekerasan (Nanoindentation of Cu/Au)		Mengzi Luo, Li Liang, Lin Lang, dkk Pemodelan <i>molecular dynamic simulation</i> pada interface (permukaan) paduan Mo/Ti (code MOLDY)	Shuai Liu Compression of Molecular Dynamics Simulation Data, algorithms on two datasets : MOFCOOL & LIQCRY. Multimedia compression algorithm		
			G.C. Ma, J.L. Fan, H.R. Gong Mechanical behavior of Cu-W upon tensile load from <i>molecular dynamic simulation</i> – <i>lammmps</i> & <i>ovito</i>			
Interatomic potential	M. I. Mendelev, , T. L. Underwood, and G. J. Ackland MEAM Interatomic potential Titanium Gibbs-Helmholtz integration, and a lattice-switch Monte Carlo method	Won-Mi Choi, Yongmin Kim, dkk MEAM Interatomic potential Cr.meam			Jaemin Wang, Sang-Ho Oh, Byeong-Joo Lee MEAM interatomic Potential for Cu-Mo	
Preparations Alloys	Kuroda, P. A. B., Buzalaf, M. A. R. & Grandini, C. R. Effect of molybdenum	Pedro F. Santos , Mitsuo Niinomi ,	D.R.N.Correa, P.A.B Kuroda, M.L Lourence, C.J.C Fernandes, dkk	Takeshi Nagasea, Yuuka Iijima, dkk Paduan atau alloys : Ti–Zr-Hf-Cr-Mo dan Ti–Zr-	Mariana Luna Lourenço, Giovana	

	on structure, microstructure and mechanical properties of biomedical Ti-20Zr-Mo alloys. Materials Science and Engineering	Huihong Liu , dkk Low-Cost Beta-Type Ti-Based Alloys	Material molibdenum dalam paduan berbasis Ti-15Zr dan Ti-15Zr-10Mo	Hf-Co-Cr-Mo.	Collombaro Cardoso, dkk Paduan / alloys: Ti-Mn-Mo	
--	---	--	--	--------------	---	--



Gambar 1. 1 Diagram Tulang Ikan Penelitian

BAB II

KAJIAN PUSTAKA

2.1 Pengertian Teknologi Informasi

Jacques Ellul (1967) mengartikan teknologi sebagai keseluruhan metode yang secara rasional mengarah dan memiliki ciri efisiensi dalam setiap kegiatan manusia. Gary J. Anglin (1991) mendefinisikan teknologi sebagai penerapan ilmu-ilmu perilaku dan alam serta pengetahuan lain secaraersistim dan tersistem, untuk memecahkan masalah.[44] Menurut Rogers (1986) Teknologi merupakan peralatan perangkat keras dalam struktur organisasi yang mengandung nilai sosial yang memungkinkan individu untuk mengumpulkan, memproses dan saling tukar informasi. Ely (1982) menyatakan bahwa yang dimaksud dengan Teknologi Informasi adalah mencakup sistem-sistem komunikasi seperti satelit siaran langsung, kabel interaktif dua-arah, penyiaran bertenaga rendah. Teknologi informasi (information technology) biasa disebut dengan T.I atau infotech. Berbagai definisi tentang informasi diperlihatkan pada tabel 1.1 dengan maksud dapat memberikan gambaran lebih lanjut tentang teknologi informasi.

Tabel 2.1 Berbagai definisi teknologi informasi

Sumber	Definisi
Haag dan Keen (1996)	Teknologi informasi adalah seperangkat alat yang membantu untuk bekerja dengan informasi dan melakukan tugas – tugas yang berhubungan dengan pemrosesan informasi
Matin (1999)	Teknologi informasi tidak hanya terbatas pada teknologi computer (perangkat keras dan perangkat lunak) yang digunakan untuk memproses dan menyimpan informasi, melainkan juga mencakup teknologi komunikasi untuk mengirimkan informasi.
Williams dan Sawyer (2003)	Teknologi informasi adalah teknologi yang menggabungkan komputasi (computer) dengan jalur komunikasi berkecepatan tinggi yang membawa data, suara, dan video.

Teknologi informasi adalah suatu teknologi yang digunakan untuk mengolah data, termasuk memproses, mendapatkan, menyusun, menyimpan, memanipulasi data dalam berbagai cara untuk menghasilkan informasi yang berkualitas, yaitu informasi yang relevan, akurat dan tepat waktu, yang digunakan keperluan pribadi, bisnis, dan pemerintahan dan merupakan informasi yang strategis untuk pengambilan keputusan.[29]

Teknologi informasi adalah studi penggunaan peralatan elektronika, terutama komputer, untuk menyimpan, menganalisis, dan mendistribusikan informasi apa saja, termasuk kata-kata, bilangan, dan gambar.[30] “Information technology (IT) includes all tools that capture, store, process, exchange, and use information. The field of IT includes computer hardware, such as mainframe computers, servers, laptops, and PDAs; software, such as operating systems and applications for performing various functions; networks and related equipment, such as modems, routers, and switches; and databases for storing important data”.[31] Teknologi informasi adalah hasil rekayasa manusia terhadap proses penyampaian informasi dari bagian pengirim ke penerima sehingga pengiriman informasi tersebut akan lebih cepat, lebih luas sebarannya, dan lebih lama penyimpanannya.

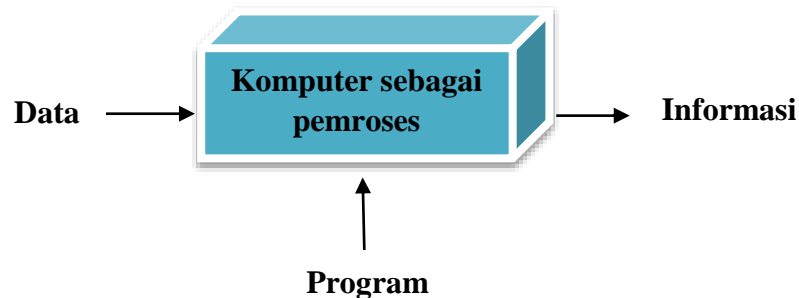
Menurut Eric Deeson, dalam Dictionary of information Technology (1991), IT dimaknai sebagai berikut : “Information Technology (IT) the handling of information by electric and electronic (and microelectronic) means. Here handling includes transfer, processing, storage and access, IT special concern being the use of hardware and software for these tasks for the benefit of individual people and society as a whole.[45]

Berdasarkan paparan diatas mengenai tentang teknologi informasi, dengan kata lain, teknologi informasi adalah gabungan antara teknologi computer dan teknologi informasi. Adapun kedua teknologi yang mendasari teknologi informasi adalah sebagai berikut:

a. Teknologi computer

Teknologi computer adalah teknologi yang berhubungan dengan computer, termasuk peralatan yang berhubungan dengan computer seperti printer, pembaca sidik jari, bahkan CD – ROM. Komputer adalah mesin serba guna yang dapat di kontrol oleh program, digunakan untuk mengolah data menjadi sebuah informasi.. Program adalah deretan instruksi yang digunakan untuk mengendalikan komputer sehingga komputer dapat melakukan tindakan sesuai yang dikehendaki pembuatnya.

Data adalah bahan mentah bagi computer yang data berupa angka maupun gambar, sedangkan informasi adalah bentuk data yang telah diolah sehingga dapat menjadi bahan yang berguna untuk pengambilan keputusan.



Gambar 2.1 Komputer dikendalikan oleh program untuk memproses data menjadi informasi

b. Teknologi Informasi

Teknologi telekomunikasi atau biasa juga disebut teknologi komunikasi adalah teknologi yang berhubungan dengan komunikasi jarak jauh. Termasuk dalam kategori ini adalah telepon, radio, dan televisi.



Gambar 2.2 Teknologi telekomunikasi menjadikan computer – computer diseluruh dunia dapat saling berkomunikasi

2.2 Peranan dan Pentingnya Teknologi Informasi

Teknologi informasi secara garis besar mempunyai peranan yang sangat signifikan seperti hal sebagai berikut :

- a. Teknologi informasi menggantikan peran manusia. Dalam hal ini, teknologi informasi

melakukan otomasi terhadap suatu tugas atau proses.

- b. Teknologi informasi memperkuat peran manusia, yakni dengan menyajikan informasi terhadap suatu tugas atau proses.
- c. Teknologi informasi berperan dalam restrukturisasi terhadap peran manusia. Dalam hal ini, teknologi berperan dalam melakukan perubahan-perubahan terhadap sekumpulan tugas atau proses.[30]

2.2.1 Tujuan dan Fungsi Teknologi Informasi

Tujuan dari teknologi informasi adalah untuk memecahkan masalah, untuk membuka kreativitas, dan untuk meningkatkan efektivitas dan efisiensi dalam melakukan pekerjaan.[32] Enam fungsi dari teknologi informasi adalah sebagai berikut :

- a. Menangkap (*Capture*) yaitu merupakan suatu proses penangkapan data yang akan menjadi data masukan.
- b. Mengolah (*Processing*) yaitu mengolah/memproses data masukan yang diterima untuk menjadi informasi. Pengolahan/pemrosesan data dapat berupa konversi (pengubahan data ke bentuk lain), analisis (analisis kondisi), perhitungan (kalkulasi), sintesis (penggabungan) segala data dan informasi seperti seagai berikut :
 - Data processing, memproses dan mengolah data menjadi suatu informasi.
 - Information processing, suatu aktivitas komputer yang memproses dan mengolah suatu tipe/bentuk dari informasi dan mengubahnya menjadi tipe/bentuk yang lain dari informasi.
 - Multimedia system, suatu sistem komputer yang dapat memproses berbagai tipe/bentuk dari informasi secara bersamaan (simultan).
- c. Menghasilkan (*Generating*) yaitu menghasilkan atau mengorganisasikan informasi ke dalam bentuk yang berguna. Misalnya laporan, tabel, grafik, dan sebagainya.
- d. Menyimpan (*Storage*) yaitu merekam atau menyimpan data dan informasi dalam suatu media yang dapat digunakan untuk keperluan lainnya.
- e. Mencari kembali (*Retrival*) yaitu menelusuri, mendapatkan kembali informasi atau menyalin (copy) data dan informasi yang sudah tersimpan.
- f. Transmisi (*Transmission*) yaitu mengirim data dan informasi dari suatu lokasi ke lokasi lain melaui jaringan komputer. [32]

2.2.2 Pengertian Kecanggihan Teknologi Informasi

Kecanggihan teknologi di masa kini memiliki perkembangan yang pesat bahkan mampu menghasilkan beraneka ragam teknologi sistem yang dirancang untuk membantu pekerjaan manusia dalam menghasilkan kualitas informasi terbaik. Keanekaragaman teknologi tersebut memberikan kemudahan bagi para pengguna teknologi dalam implementasi.

Information technology sophistication is defined as multi-dimensional construct which refers to the nature, complexity and interdependence of information technology usage and management in an organisation. Therefore, the concept of information technology sophistication integrates both aspects related to System Information usage and System Information management.[33]

2.2.3 Komponen sistem teknologi informasi

Sistem teknologi informasi adalah sistem yang terbentuk sehubungan dengan penggunaan teknologi informasi. Suatu sistem teknologi informasi pada dasarnya tidak hanya mencakup hal – hal yang bersifat fisik, seperti computer dan printer, tetapi juga mencakup hal yang tidak terlihat secara fisik yaitu software, dan yang lebih penting lagi adalah manusia. Dengan perkataan lain, komponen utama sistem teknologi informasi adalah sebagai berikut :

- a. Perangkat keras (*hardware*)
- b. Perangkat lunak (*software*)
- c. Manusia (*brainware*)



Gambar 2.3 Tiga komponen utama sistem teknologi informasi

2.3 *Molecular Dynamic*

2.3.1 Pendahuluan tentang *molecular dynamic*

Metode dinamika molekuler sebagai salah satu metode pendekatan simulasi komputer yang paling umum digunakan untuk mempelajari sistem molekuler yang menyajikan persamaan gerak dalam statistik yang paling relevan ensembles yang digunakan dalam simulasi dinamika sistem molekuler.[46]

Molecular dynamic adalah pendekatan simulasi komputer digunakan untuk mengintegrasikan persamaan gerak atom dan molekul secara numerik dengan perkiraan ilmu fisika. MD juga telah disebut mekanika statistik dengan angka dan visi Laplace tentang mekanika Newton untuk memprediksi masa depan dengan menghidupkan gaya alam (Bernal 1964; Schlick 1996) dan memungkinkan wawasan tentang gerak molekuler pada skala atom.

Simulasi MD panjang secara matematis terbatas, karena kesalahan kumulatif dalam integrasi numerik persamaan gerak. Namun, kesalahan numerik ini dapat diminimalkan dengan menggunakan algoritma yang lebih canggih dan pemilihan parameter (Martyna et al. 1994; Minary et al. 2004), tetapi tidak dihilangkan (Piana et al. 2014). [46] Metode dinamika molekul berhasil digunakan untuk memberikan resolusi ruang dan waktu yang rinci ke dalam perilaku representatif dalam ruang fase bila dikombinasikan dengan algoritma yang sesuai untuk mengoptimalkan pencarian konformasi (Andricioaei dan Straub 1996b).[46]

Pendekatan MD telah digunakan sejak lama untuk mempelajari sistem makromolekul. Studi ini mencakup banyak aplikasi, seperti gerakan atom internal (Amadei et al. 1993; Karplus dan McCammon 2002), pelipatan protein (Rogal dan Bolhuis 2008), pengambilan sampel jalur transisi (Bolhuis et al. 2002), perhitungan energi bebas (Seyler dan Beckstein 2014) dan prediksi struktur protein (Perez dkk. 2016).

2.4 *Molecular Dynamics Simulation*

Simulasi dinamika molekuler pada tingkat atom telah banyak digunakan dalam mempelajari sistem makromolekul, seperti protein, DNA dan kompleksnya, terutama karena hukum mekanika statistik klasik sebagian besar dapat mengatur proses yang terlibat pada kondisi eksperimental. Makromolekul, seperti protein, dicirikan oleh dinamika dengan skala waktu mulai dari nanodetik hingga milidetik. Metode dinamika molekuler sebagai salah satu pendekatan simulasi komputer yang paling umum digunakan untuk mempelajari sistem molekuler. Secara

khusus, kami akan menyajikan persamaan gerak dalam ansambel statistik paling relevan yang digunakan dalam simulasi dinamika molekuler sistem molekuler.[46]

2.4.1 Two Basic Problems

Dua masalah dasar dalam simulasi computer sistem molekuler dapat ditemukan seperti dalam hal sebagai berikut :

1. Ukuran ruang konfigurasi yang dapat diakses oleh sistem molekuler.
2. Keakuratan model molekul atau interaksi atom fungsi atau medan gaya yang digunakan untuk memodelkan molekul sistem.

Tabel 2.2 Model pada tingkat perkiraan yang berbeda

Model	Degrees of freedom left	Degrees of freedom removed	Example of predictable property	Example of force field	
- quantum mechanical	nuclei, electrons	nucleons	reactions	Coulomb	increasing: simplicity, speed of computation, search power, time scale
- all atoms, polarizable	atoms dipoles	electrons	binding charged ligand	ionic models [10]	
- all atoms	solute + solvent atoms	dipoles	hydration	OPLS [11] GROMOS [12]	
- all solute atoms	solute atoms	solvent	gas phase conformation	MM2 [13]	decreasing: complexity, accuracy of atomic properties
- groups of atoms as balls	atom groups	individual atoms	folding topology of macromolecule	LW [14]	

2.4.1.1 Ukuran Ruang Konfigurasi

Simulasi sistem molekuler pada suhu bukan nol membutuhkan generasi yang representatif secara statistic set konfigurasi, yang disebut ensemble. Properti dari sistem didefinisikan sebagai rata-rata ensemble atau integral atas ruang konfigurasi (atau lebih umum ruang fase).

Untuk sistem banyak partikel yang akan melibatkan rata-rata atau integrasi banyak derajat kebebasan, dan sebagai akibatnya hanya bisa dilakukan pada sebagian ruang konfigurasi. Lebih kecil ruang konfigurasi, semakin baik rata-rata ensemble atau integral dapat didekati. Saat memilih model dari yang mana properti tertentu yang akan dihitung dan diinginkan untuk secara eksplisit memasukkan hanya derajat kebebasan yang di atasnya properti yang dibutuhkan.[48]

2.4.1.2 Akurasi Model Molekuler dan Medan Gaya

Derajat kebebasan (degrees of freedom) sangat padat atau panjang mengambil sampel keakuratan di mana berbagai kuantitas diprediksi oleh simulasi hanya akan bergantung pada kualitas asumsi dan pendekatan model molekuler serta medan gaya antar atom. (Tabel 1) kuantum pemodelan mekanik asumsi dasarnya adalah validitas pendekatan Born-Oppenheimer.

Fungsi interaksi atom adalah sebagai interaksi yang efektif karena efek rata-rata dari derajat kebebasan (elektronik) yang dihilangkan telah dimasukkan dalam interaksi antara derajat kebebasan (atom) secara eksplisit dalam bentuk model.[48]

2.5 Asumsi, Perkiraan dan Batasan

Saat menggunakan model tertentu untuk memprediksi property sistem molekuler, harus menyadari asumsi, penyederhanaan, perkiraan dan batasan yang tidak eksplisit dalam model. Di bawah ini merupakan empat hal yang paling penting untuk perkiraan dan batasan menggunakan teknik simulasi komputer klasik.[48]

2.5.1 Mekanika Klasik dari Massa Titik

Sistem molekuler digambarkan sebagai sistem massa titik yang bergerak dalam medan potensial efektif, yang umumnya merupakan bidang konservatif, yaitu hanya bergantung pada koordinat sesaat dari massa titik. Gerakan massa titik memiliki tingkat akurasi yang cukup yang diatur oleh hukum mekanika klasik. Asumsi ini menyiratkan batasan untuk pemodelan sebagai berikut :

- a. Gerak molekul suhu rendah (0-10 K) tidak dijelaskan secara memadai
- b. Gerak rinci atom ringan seperti atom hidrogen tidak dijelaskan dengan benar bahkan pada suhu kamar
- c. Deskripsi reaksi kimia berada di luar ruang lingkup metode simulasi klasik.

2.5.2 Ukuran Sistem atau Jumlah Derajat Kebebasan

Umumnya, ukuran sistem dijaga sekecil mungkin untuk memungkinkan pengambilan sampel yang memadai dari derajat kebebasan yang disimulasikan. Derajat kebebasan yang tidak penting bagi properti harus dihilangkan dari sistem. Ketergantungan properti pada ukuran sistem dapat memberikan petunjuk tentang jumlah minimum derajat kebebasan yang diperlukan untuk

simulasi yang memadai. Semakin besar panjang korelasi spasial properti yang diinginkan, semakin banyak atom yang dimasukkan dalam simulasi.[48]

2.5.3 Kecukupan Sampling Ruang Konfigurasi atau Skala Waktu Proses

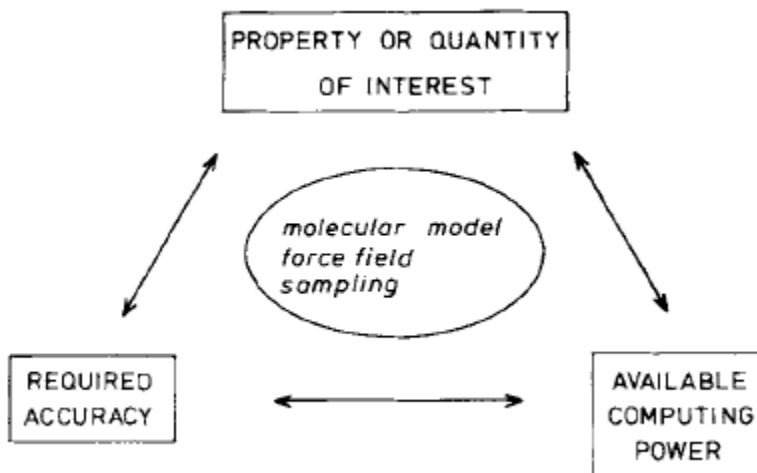
Simulasi komputer menghasilkan ansambel konfigurasi sistem. Konfigurasi yang dihasilkan mewakili keadaan sistem bergantung pada sejauh mana bagian penting (umumnya energi rendah) dari ruang konfigurasi (lebih umum diformulasikan, ruang fase) telah diambil sampelnya.

Algoritma pengambilan sampel yang diterapkan harus mampu mengatasi banyak penghalang permukaan energi multidimensi sistem. Dalam simulasi dinamis, skala waktu dari proses harus dibatasi. Saat ini, simulasi molekuler mencakup periode waktu 100-1000 pikodetik.[48]

2.5.4 Akurasi Model Molekuler dan Medan Gaya

Seperti yang diilustrasikan pada Tabel 1, terdapat berbagai molekul model dan medan gaya, dengan akurasi yang berbeda-beda dari jumlah fisik yang berbeda yang akan dimodelkan. Penentuan medan gaya akan tergantung pada properti dan tingkat akurasi yang dipilih.[48]

Dalam mempelajari sistem molekuler dengan simulasi computer, ada tiga faktor harus dipertimbangkan seperti yang diperlihatkan pada gambar 2.4.



Gambar 2.4 Pilihan model molekuler, medan gaya, dan ukuran sampel bergantung pada 1) properti (ruang yang akan dicari), 2) akurasi prediksi yang diperlukan, 3) daya komputasi yang tersedia untuk menghasilkan ensemble.[48]

- a. Sifat-sifat (sifat mekanik) sistem molekuler harus ditentukan dan konfigurasi ruang (atau waktu skala) yang akan dicari untuk konfigurasi yang relevan harus diperkirakan.
- b. Akurasi yang diperlukan dari properti harus ditentukan.
- c. Komputer dengan spesifikasi yang dibutuhkan harus tersedia.

2.6 LAMMPS (Simulator Paralel Besar-besaran Atom / Molekuler Skala Besar)

2.6.1 Pendahuluan LAMMPS

LAMMPS adalah kode simulasi dinamika molekul klasik yang dijalankan pada komputer paralel. Dikembangkan di Sandia National Laboratories. Pengembang utama kode ini adalah Steve Plimpton, Aidan Thompson dan Paul Crozier [49].

2.6.2 Fitur umum pada LAMMPS

Adapun fitur umum yang ada pada LAMMPS adalah sebagai berikut :

- a. Dapat dirunning pada prosesor tunggal atau parallel
- b. Pustaka opsional yang digunakan: MPI dan FFT prosesor tunggal
- c. Paralelisme penyampaian pesan memori terdistribusi (MPI)
- d. Distribusi open source
- e. Mudah diperluas dengan fitur dan fungsionalitas baru
- f. Sintaks untuk mendefinisikan dan menggunakan variabel dan rumus
- g. Proses running dapat dilakukan dalam satu atau beberapa simulasi secara bersamaan (secara paralel) dari satu skrip

2.6.3 Bidang gaya

Beberapa bidang yang digunakan di dalam LAMMPS adalah sebagai berikut :

- a. Potensi berpasangan: Lennard-Jones, Buckingham, Morse, Born-Mayer-Huggins, Yukawa.
- b. Soft, classs 2 (KOMPAS), ikatan hydrogen.
- c. Potensial berpasangan bermuatan: Coulomb, titik-dipol
- d. Body potential : EAM, Finnis / Sinclair EAM, EAM yang dimodifikasi (MEAM), tertanam
- e. Metode ion (EIM), ADP, Stillinger-Weber, Tersoff, REBO, AIREBO, ReaxFF, COMB
- f. Potensi berbutir kasar (coarse-grained potentials) : DPD, GayBerne, REsquared, koloid, DLVO potensi air: TIP3P, TIP4P, SPC

2.6.4 Ansambel, kendala, dan kondisi batas

Dalam LAMMPS, 'perbaikan' adalah setiap operasi yang diterapkan ke sistem selama langkah-waktu atau minimisasi. Misalnya, pembaruan posisi dan kecepatan atom karena integrasi waktu, pengontrolan suhu, penerapan gaya kendala pada atom, pemberlakuan kondisi batas, dan diagnostik komputasi, dll. Perbaikan menjalankan operasinya pada tahapan langkah waktu yang berbeda.

Jika dua atau lebih perbaikan beroperasi pada tahap yang sama dari langkah waktu, mereka dipanggil dalam urutan yang ditentukan dalam skrip input.

- a. Sistem 2D atau 3D
- b. Integrator NVE, NVT, NPT, NPH, Parinello / Rahman konstan
- c. Pilihan termostat untuk kelompok dan daerah geometris atom
- d. Kontrol tekanan melalui Nose/Hoover atau Berendsen barostatting dalam 1 hingga 3 dimensi
- e. Deformasi kotak simulasi (tegangan tarik dan tegangan geser)

2.6.5 Ensemble yang digunakan di LAMMPS

Dalam LAMMPS ansambel berbeda yang digunakan adalah NVE, NVT dan NPT.

2.6.6 Boundary conditions

Persyaratan batas yang diperbolehkan di LAMMPS adalah sebagai berikut :

- i. p p p
- ii. p p s
- iii. p f p

di mana 'p' adalah singkatan dari periodik sepanjang tiga arah, 'f' dan 's' berarti tetap dan terbungkus menyusut, yang non-periodik.

2.6.7 Integrator

Integrator yang tersedia di LAMMPS adalah sebagai berikut :

- a. Velocity -Verlet integrator
- b. Dinamika Brownian

- c. Rigid body integration
- d. Energi minimisasi melalui relaksasi penurunan konjugasi

2.6.8 *Energy minimization*

Koordinat atom diatur dalam LAMMPS untuk meminimalkan energi. Ketika salah satu kondisi kriteria minimisasi terpenuhi, iterasi dihentikan. Pada sistem posisi tersebut tetap dalam keadaan energi potensial minimum lokal. Algoritme minimisasi ditetapkan oleh 'min_style'

2.6.9 *Output*

Output dari simulasi LAMMPS yaitu posisi dan kecepatan masing-masing atom tertulis pada file dump. Posisi dan kecepatan setiap atom yang dibuang pada interval waktu. Nilai-nilai seperti suhu, tekanan, energi potensial sistem pada sejumlah iterasi tertentu dituliskan pada file log.

2.7 *Image processing*

2.8 *Unsur Paduan Material*

2.8.1 *Titanium*

Titanium pertama kali ditemukan pada tahun 1970. Dalam tabel periodik, titanium mempunyai simbol Ti dan memiliki nomor atom 22. Merupakan logam transisi dengan densitas yang rendah. Selain itu, titanium memiliki sifat elektropositif dan mudah bersenyawa dengan karbon sehingga mengakibatkan logam ini sulit untuk dimurnikan.[5]



Gambar 2.5 Serbuk Titanium

Pada saat ini titanium banyak digunakan dalam industri karena keunikan dari sifat yang dimiliki oleh logam ini. Keunikan yang dimiliki oleh logam titanium lebih unggul dibandingkan dengan logam lainnya seperti aluminium, baja dan superalloy. Beberapa fakta yang dimiliki oleh titanium dan paduannya antara lain [5] :

- a. Densitas yang dimiliki titanium hanya berkisar 60% dari baja, nikel, atau superalloy.
- b. Titanium paduan dapat digunakan pada suhu sekitar 538 °C sampai 595 °C (1000 °F hingga 1100 °F), tergantung pada komposisinya. Beberapa paduan titanium (titanium aluminides) mungkin memiliki kemampuan bertahan diatas suhu ini.
- c. Titanium sangat tahan korosi. Bahkan lebih baik dari stainless steel yang beredar dipasaran.
- d. Titanium memiliki sifat biokompatibel yang baik sehingga dapat digunakan didalam tubuh manusia.

Titanium mempunyai sifat nonmagnetik. Dengan koefisien dari ekspansi termal yang sedikit lebih rendah dibandingkan dengan baja dan kurang dari setengah material aluminium. Dibandingkan dengan baja, titanium dan paduannya mempunyai titik leleh yang lebih tinggi, tetapi suhu maksimum yang digunakan untuk aplikasi struktural umumnya berkisar kurang dari 427 °C (800 °F) untuk temperatur 583 °C sampai 595 °C (1000 °F – 1100 °F) yang bergantung pada komposisi.

Titanium memiliki kemampuan pasif dengan demikian menunjukkan tingkat kekebalan terhadap mineral, asam dan klorida. Titanium murni nontoxic dan beberapa paduan titanium umumnya memiliki kompetibelitas dengan jaringan dan tulang manusia karena tahan terhadap korosi, ringan dan memiliki kekuatan yang baik dibandingkan dengan aluminium dan baja. Selain itu, titanium banyak digunakan dalam aplikasi lainnya seperti aplikasi biomaterial, kimia dan petrokimia, lingkungan laut, serta struktur pesawat.

2.8.2 Molybdenum (Mo).

Sifat kimiawi molibdenum sangat kaya dan beragam. Molibdenum sangat penting untuk kehidupan unsur memiliki banyak aplikasi penting dalam industri, dan kimia molibdenum sudah sering digunaka terlibat dalam perkembangan penting dalam pemahaman prinsip-prinsip dasar teori dan praktek ilmu kimia.



Gambar 2.6 Serbuk Molybdenum

Properti fundamental molibdenum dan logam Golongan VI lainnya dan beberapa data berguna diberikan pada Tabel 2.3. Molibdenum memiliki enam elektron valensi dan sembilan orbital atom energi yang cocok untuk digunakan dalam ikatan kimia yaitu orbital $5x\ 4d$, $1x\ 5s$ dan $3x\ 5p = 9$. Molibdenum memiliki tingkat sedang Elektronegativitas Pauling (1,8) dan, sebagai akibatnya, keenam elektron valensi tersedia untuk pembentukan ikatan kimia, (kontras dengan logam transisi blok d yang lebih elektronegatif.

Tabel 2.3 Beberapa sifat kromium, molibdenum dan tungsten

Property	Cr	Mo	W
Atomic number	24	42	74
Electronic configuration	$[\text{Ar}]3d^5 4s^1$	$[\text{Kr}]4d^5 5s^1$	$[\text{Xe}]4f^{14} 5d^5 6s^1$
Valency orbitals	$3d\ 4s\ 4p$	$4d\ 5s\ 5p$	$5d\ 6s\ 6p$
Ionisation enthalpies	1 st 652.5	685	770
$\Delta H_{\text{ion}}^{\text{II}}$ (kJ mol ⁻¹)	2 nd 1592	1558	1710
	3 rd 3056	2618	-
	4 th 4900	4480	-
Electronegativity	1.6	1.8	1.7
Radius of atom in metal (pm)	128	139	139
Ionic radii for six co-ordination (O.S.), (pm)	44 (VI) - 80 (II)	59 (VI) - 69 (III)	60 (VI) - 66 (III)
MP/°C	1900	1620	3380
BP/°C	2690	4650	5500
Temperature at which evaporation is $1\ \text{gh}^{-1}\text{cm}^{-2}$	1480	2610	3320
ΔH_{vap} / kJ mol ⁻¹	342(± 6)	590 (± 21)	824 (± 21)
$\Delta H_{\text{formation}}$ (monatomic gas)/ kJ mol ⁻¹	397 9(± 3)	664 (±13)	849 (± 13)
Atomic weight	51.009	95.94	183.85

2.8.3 Mangan

Mangan adalah unsur dengan simbol, Mn. Nama mangan berasal dari Bahasa latin, magnes, yang memperlihatkan sifat magnetik dari pyrolusit. Berwarna keabu-abuan dan bersifat getas. Sifatnya hampir sama dengan besi namun mangan lebih ringan dan lebih keras. Mangan memiliki empat bentuk alotropi, yaitu Alpha mangan, beta mangan, gamma mangan, dan delta mangan. Logam ini akan menguap pada temperatur 2061°C.[28]



Gambar 2.7 Serbuk Mangan

2.8.4 Tembaga

Tembaga atau copper adalah salah satu unsur logam berbentuk kristal dengan warna kemerahan dengan nama kimia cupprum dilambangkan dengan Cu. Tembaga merupakan logam transisi golongan IB yang memiliki nomor atom 29 dan berat atom 63,55 g/mol. Tembaga di alam banyak ditemukan dalam bentuk persenyawaan atau sebagai senyawa padat dalam bentuk mineral.

Karakteristik dan Sifat Tembaga dapat dilihat pada tabel 2.4.

Tabek 2.4 Karakteristik dan Sifat Tembaga

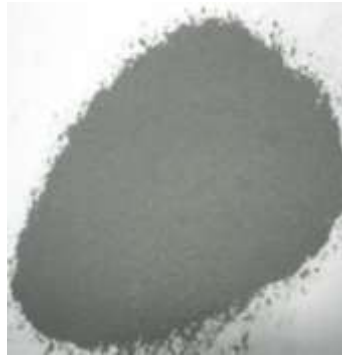
Simbol Kimia	Cu
Nomor Atom	29
Berat Atom	63.54
Densitas	8960 kg m ⁻³
Titik Lebur	1356 K
Panas Spesifik cp (293K)	0.383 kJ kg ⁻¹ K ⁻¹
Konduktivitas Termal	394 W m ⁻¹ K ⁻¹
Koefisien Ekspansi Linear	16.5 x 10 ⁻⁶ K ⁻¹
Elastisitas Modulu Young	110 x 10 ⁹ N m ⁻²
Konduktivitas Elektrik	1.673 x 10 ⁻⁸ ohm-m
Struktur Kristal	Face-Centered Cubic



Gambar 2.8 Serbuk tembaga

2.8.5 Chromium

Chromium adalah anggota logam transisi dalam golongan 6, memiliki elektronika konfigurasi $4s13d5$. Sebagai trace element, kromium adalah kofaktor dalam regulasi kadar gula dalam darah. Kekurangan kromium dapat menyebabkan hiperglikemia (peningkatan gula darah) dan glukosuria (glukosa dalam urin). Oleh karena itu, konsentrasi kromium dalam darah, plasma, serum atau urin dapat diukur untuk memantau keamanan di individu yang terpapar[34]



Gambar 2.8 Serbuk chromium

Kromium, serta nikel, diterima ke dalam tubuh melalui paru-paru [35], asupan oral [36], kontak kulit [37] atau melalui implan [38]. Begitu berada di dalam tubuh, kromium (VI) direduksi menjadi kromium (III) di dalam darah sebelum memasuki sel. Kromium (III) adalah dikeluarkan dari tubuh melalui urin.

2.8.6 Tungsten

2.9 Metalurgi Serbuk (*Powder Metallurgy*)

Metalurgi serbuk merupakan proses pembentukan benda kerja komersial dari logam dimana logam dihancurkan dahulu berupa serbuk, kemudian serbuk tersebut ditekan didalam cetakan (mold) dan dipanaskan di bawah temperatur leleh serbuk sehingga terbentuk benda kerja. Sehingga partikel-partikel logam memadu karena mekanisme transportasi masa akibat difusi atom antar permukaan partikel. Metode metalurgi serbuk memberikan kontrol yang teliti terhadap komposisi dan penggunaan campuran yang tidak dapat difabrikasi dengan proses lain. Sebagai ukuran ditentukan oleh cetakan dan penyelesaian akhir (finishing touch).

2.9.2 Langkah-langkah dasar pada powder metallurgy

Adapun langkah – langkah dalam pembuatan metalurgi serbuk adalah sebagai berikut :

a. Mixing.

Pencampuran serbuk dapat dilakukan dengan mencampurkan logam yang berbeda dan material-material lain untuk memberikan sifat fisik dan mekanik yang lebih baik. Pencampuran dapat dilakukan dengan proses kering (dry mixing) dan proses basah (wet mixing). Pelumas (lubricant) mungkin ditambahkan untuk meningkatkan sifat powders flow. Binders ditambahkan untuk meningkatkan green strenghtnya seperti wax atau polimer termoplastik.

b. Compaction.

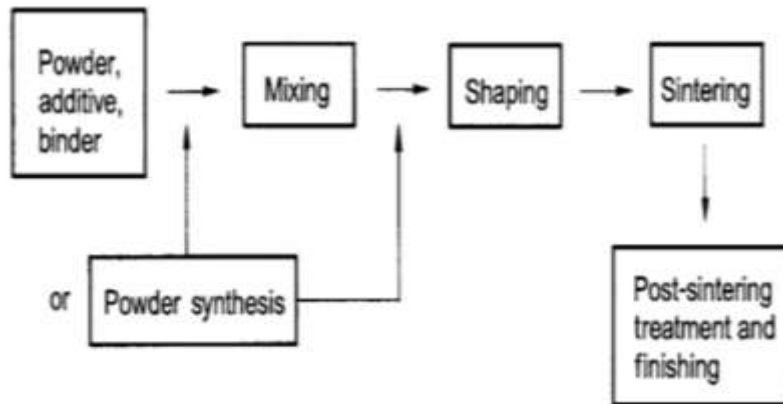
Proses kompaksi adalah suatu proses pembentukan logam dari serbuk logam dengan mekanisme penekanan setelah serbuk logam dimasukkan ke dalam cetakan (die). Proses kompaksi pada umumnya dilakukan dengan penekanan satu arah dan dua arah. Pada penekan satu arah penekan atas bergerak kebawah. Sedangkan pada dua arah, penekan atas dan penekan bawah saling menekan secara bersamaan dalam arah yang berlawanan. Jenis dan macam produk yang dihasilkan oleh proses metalurgi serbuk sangat ditentukan proses kompaksi dalam membentuk serbuk dengan kekuatan yang baik.

Bahan bahan dengan kekerasan rendah, seperti aluminium, kuningan, dan perunggu memerlukan tekanan pemadatan yang rendah. Bahan-bahan dengan kekerasan tinggi seperti besi, baja, dan nikel paduan memerlukan tekanan pemadatan yang tinggi. Semakin tinggi tekanan pemadatan akan menaikkan berat jenis hingga kondisi optimum. Di atas tekanan optimum tersebut, peningkatan tekanan tidak akan memberikan pengaruh yang signifikan terhadap kenaikan massa jenis.

Penekanan terhadap serbuk dilakukan agar serbuk dapat menempel satu dengan lainnya sebelum ditingkatkan ikatannya dengan proses sintering. Dalam proses pembuatan suatu paduan dengan metode metalurgi serbuk, terikatnya serbuk sebagai akibat adanya interlocking antar permukaan, interaksi adesikohesi, dan difusi antar permukaan. Untuk yang terakhir ini (difusi) dapat terjadi pada saat dilakukan proses sintering. Bentuk benda yang dikeluarkan dari pressing disebut bahan kompak mentah, telah menyerupai produk akhir, akan tetapi kekuatannya masih rendah. Kekuatan akhir bahan diperoleh setelah proses sintering. Tekanan pemadatan yang diperlukan tergantung pada jenis bahan serbuk yang berkisar antara 70 Mpa (10 ksi) hingga 800 Mpa (120 ksi) [13]

c. Sintering.

Proses sinter merupakan metode pembuatan produk dari bahan serbuk yang sebelumnya dilakukan proses kompaksi(cetak) kemudian dengan memanaskan material dibawah titik leburnya sehingga partikel partikelnya berikatan satu sama lain. Tujuan dari sintering adalah untuk meningkatkan kekuatan bedak padat.



Gambar 2.9 Fabrikasi umum dari bagian sintering

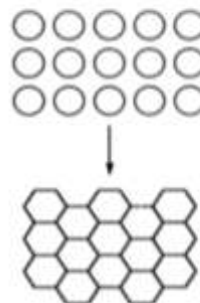
Adapun jenis – jenis dari proses sintering adalah sebagai berikut :

- Sintering fasa padat - hanya ada fasa padat
- Sintering fase cair - fase cair juga ada
- Sintering fase reaktif - ada fase berbeda yang bereaksi untuk menghasilkan fase baru

Liquid phase sintering

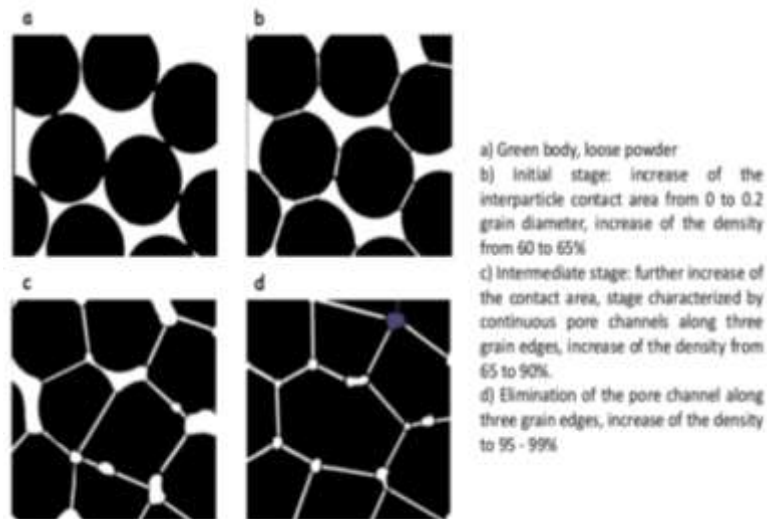


Solid phase sintering



Gambar 2.10 Sintering Type

Parameter padat bubuk dari sintering terdiri dari bentuk, distribusi bentuk, derajat aglomerasi, adanya kotoran, dan komposisi kimia. Sedangkan parameter kondisi sintering terdiri dari suhu, tekanan, atmosfer, dan tingkat pemanasan dan pendinginan. Berikut merupakan sintering stage diperlihatkan pada gambar 2.11.



Gambar 2.11 Sintering Stages

d. Finishing

2.9.3 Pembuatan Metalurgi Serbuk (Powder Metallurgy)

Ada beberapa cara dalam pembuatan serbuk antara lain : Decomposition, electrolytic deposition, atomization of liquid metals, mechanical processing of solid materials.

a. Decomposition.

Terjadi pada material yang berisikan elemen logam. Material akan menguraikan/memisahkan elemen-elemennya jika dipanaskan pada temperature yang cukup tinggi. Proses ini melibatkan dua reaktan, yaitu senyawa metal dan reducing agent. Kedua reaktan mungkin berwujud solid, liquid, atau gas.

b. Atomization of Liquid Metals.

Material cair dapat dijadikan powder (serbuk) dengan cara menuangkan material cair dilewatkan pada nozzel yang dialiri air bertekanan, sehingga terbentuk butiran kecil-kecil.

c. Electrolytic Deposition.

Pembuatan serbuk dengan cara proses elektrolisis yang biasanya menghasilkan serbuk yang sangat reaktif dan brittle. Untuk itu material hasil electrolytic deposition perlu diberikan perlakuan annealing khusus. Bentuk butiran yang dihasilkan oleh electrolytic deposits berbentuk dendritic.

d. Mechanical Processing of Solid Materials.

Pembuatan serbuk dengan cara menghancurkan material dengan ball milling atau dengan proses pengikisan dengan mechanical grinding. Material yang dibuat dengan Mechanical processing harus material yang mudah retak seperti logam murni, bismuth, antimony, paduan logam yang relative keras dan brittle, dan keramik.

2.9.4 Sifat-Sifat Khusus Serbuk Logam

a. Ukuran Partikel

Metoda untuk menentukan ukuran partikel antara lain dengan pengayakan atau pengukuran mikroskopik. Kehalusan berkaitan erat dengan ukuran butir. Faktor ini berhubungan dengan luas kontak antar permukaan, butir kecil mempunyai porositas yang kecil dan luas dan kontak antar permukaan besar sehingga difusi antar permukaan juga semakin besar dan kompaktibilitas juga tinggi.

b. Distribusi Ukuran Dan Mampu Alir

Dengan distribusi ukuran partikel ditentukan jumlah partikel dari ukuran standar dalam serbuk tersebut. Pengaruh distribusi terhadap mampu alir dan porositas produk cukup besar. Mampu alir merupakan karakteristik yang menggambarkan alir serbuk dan kemampuan memenuhi ruang cetak.

c. Sifat Kimia

Terutama menyangkut kemurnian serbuk, jumlah oksida yang diperbolehkan dan kadar elemen lainnya. Pada metalurgi serbuk diharapkan tidak terjadi reaksi kimia antara matrik dan penguat.

d. Kompresibilitas

Kompresibilitas adalah perbandingan volum serbuk dengan volum benda yang ditekan. Nilai ini berbeda-beda dan dipengaruhi oleh distribusi ukuran dan bentuk butir, kekuatan tekan tergantung pada kompresibilitas.

e. Kemampuan sinter

Sinter adalah prose pengikatan partikel melalui proses penekanan dengan cara dipanaskan 0.7-0.9 dari titik lelehnya.

2.10 Perlakuan Panas (Heat Treatment)

Perlakuan panas (heat treatment) pada umumnya dilakukan untuk memodifikasi struktur mikro baja sehingga dapat meningkatkan sifat mekanik yang salah satunya adalah kekerasan[14]

Perlakuan panas (heat treatment) didefinisikan sebagai kombinasi dari proses pendinginan dan pemanasan dengan kecepatan tertentu yang dilakukan sebagai upaya untuk memperoleh sifat-sifat tertentu terhadap logam/paduan. Tujuan dari perlakuan panas (heat treatment) adalah supaya didapatkan sifat mekanik yang lebih baik seperti meningkatkan kekerasan, mengurangi tegangan, melunakkan dan menghaluskan butir kristal yang berpengaruh pada pengerjaan sebelumnya dan menghaluskan butir kristal yang akan berpengaruh pada keuletan bahan.[15]

2.10.1 Klasifikasi Perlakuan Panas

Secara luas proses perlakuan panas (heat treatment) dapat diklasifikasikan menjadi dua jenis, yaitu proses perlakuan panas yang menghasilkan kondisi seimbang dan perlakuan panas yang menghasilkan kondisi yang tidak seimbang. Sedangkan proses perlakuan panas secara umum dapat diklasifikasikan sebagai berikut :

a. Annealing

Annealing dapat di definisikan sebagai pemanasan yang dilakukan pada suhu yang sesuai dan diikuti dengan proses pendinginan yang dilakukan pada kecepatan yang sesuai. Hal ini bertujuan untuk memperbaiki sifat-sifat pengerjaan dingin dan membebaskan tegangan-tegangan serta dapat menginduksi kelunakan pada material sehingga diperoleh struktur yang dikehendaki

b. Normalizing

Normalizing adalah proses pemanasan yang dilakukan pada suhu austenit dengan cara memanaskan bahan pada suhu 10 °C-40 °C diatas daerah kritis kemudian pendinginan dibiarkan di udara terbuka. Hasil proses normalizing pada bahan akan mendapatkan hasil berbutir yang lebih halus, lebih homogen dari hasil annealing.[15]

c. Hardening

Hardening adalah proses perlakuan panas (heat treatment) terhadap baja dengan tujuan untuk meningkatkan kekerasan alami baja. Perlakuan panas menurut pemanasan benda kerja menuju suhu pengerasan kemudian dilakukan pendinginan secara cepat dengan kecepatan pendinginan kritis.[16]

d. Tempering

Tempering adalah suatu proses pemanasan setelah diquenching pada temperatur tempering (dibawah suhu kritis) sehingga didapatkan keuletan tertentu, yang kemudian dilanjutkan dengan proses pendinginan. [15]

2.11 Pendinginan (Quenching)

Quenching merupakan proses pengerjaan logam dengan pendinginan yang dilakukan secara cepat. Sehingga akan mencegah adanya proses yang terjadi pada pendinginan lambat seperti pertumbuhan butir. Laju quenching tergantung pada beberapa faktor diantaranya panas spesifik, panas pada penguapan, viskositas, konduktifitas termal medium, dan agritas (aliran media pendingin).[17]

2.12 Pengujian Kekerasan

Pengujian kekerasan adalah pengujian yang dilakukan untuk mencari kekerasan dari suatu bahan dan dapat dilakukan pada benda uji yang relatif kecil tanpa melihat spesifikasi yang dimiliki benda uji. Pengujian yang sering dilakukan yaitu dengan menekan benda uji dengan indenter dengan beban bervariasi kemudian mengukur bekas dari penekanan yang terbentuk untuk mengetahui tingkat kekerasan bahan tersebut.[18]

2.12.1 Pengujian Vickers

Pengujian yang banyak digunakan dalam menentukan tingkat kekerasan bahan adalah dengan metode uji kekerasan Vickers. Uji Vickers dikembangkan di Inggris sekitar tahun 1925. D

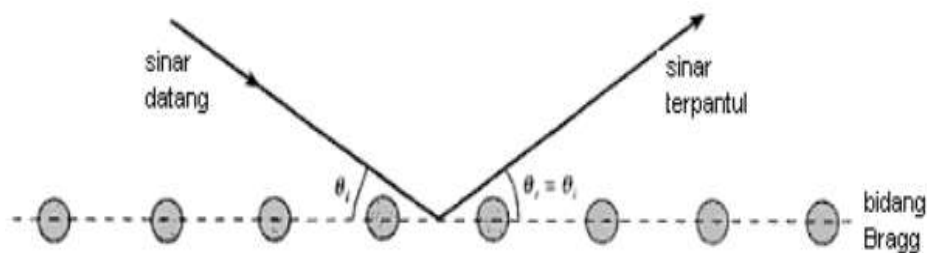
Dikenal juga dengan Diamond Pyramid Hardness Test (DPH). Uji kekerasan Vickers menggunakan indenter piramida intan, besar sudut antar permukaan piramida intan yang saling berhadapan yaitu sekitar 136 derajat. Terdapat dua rentang kekuatan yang berbeda yang dimiliki alat uji vickers ini yaitu micro dengan beban (10g-1000g) dan macro dengan beban (1kg-100 kg).[18]

2.13 Karakteristik Material

2.13.1 Difraksi Sinar-X (XRD)

Difraksi sinar-x merupakan metode analisa yang memanfaatkan interaksi antara sinar-x dengan atom yang tersusun dalam sebuah sistem kristal. Untuk dapat memahami prinsip dari difraksi sinar-x dalam analisa kualitatif maupun kuantitatif, terlebih dahulu diuraikan penjelasan mengenai sistem kristal.[19]

Hukum Bragg merupakan perumusan matematik mengenai proses difraksi yang terjadi sebagai hasil interaksi antara sinar-X yang dipantulkan oleh material. Pantulan tersebut terjadi tanpa mengalami kehilangan energi sehingga menghasilkan pantulan elastis atau elastic scattering. Bragg menunjukkan bahwa bidang yang berisi atom-atom di dalam kristal akan memantulkan radiasi dengan cara yang sama persis dengan peristiwa pemantulan cahaya di bidang cermin.



Gambar 2.12 Pemantulan cahaya pada bidang kristal (bidang Bragg)[19]

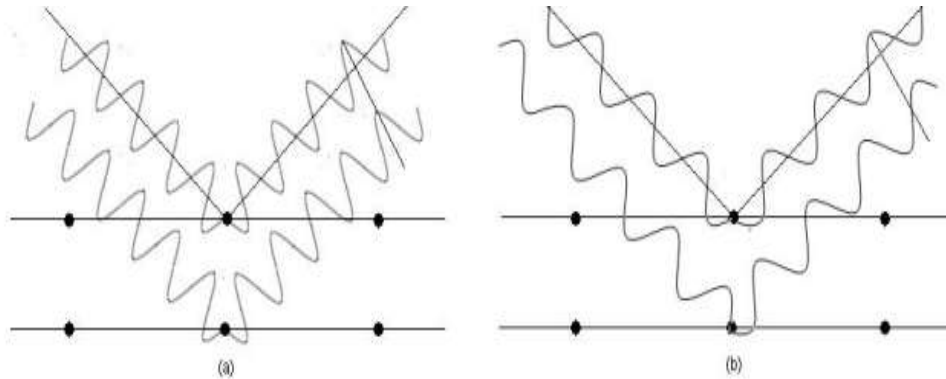
2.13.2 Metode Difraksi

Berdasarkan hukum Bragg ($n\lambda = 2d\sin\theta$), terdapat dua variabel yang dapat divariasikan untuk menghasilkan pola difraksi, yakni panjang gelombang dan sudut difraksi. Nilai d tidak dapat divariasikan karena merupakan rusuk yang menghubungkan antara bidang kristal dan bernilai tetap bagi suatu sistem kristal tertentu, kecuali jika struktur kristal tersebut mengalami perubahan (misalnya karena proses interstisi/penyusupan pada material komposit). Oleh karena itu, metode difraksi dapat dibagi menjadi dua jenis, yakni berdasarkan perubahan panjang gelombang (metode Laue) dan berdasarkan perubahan sudut difraksi (Metode Debye-Scherrer).[19]

a. Metode Laue

Pada metode Laue, sudut θ dibuat tetap sedangkan panjang gelombang sinar-X dibuat berubah. Hal ini dapat dilakukan dengan menetapkan arah sudut datang sinar-X tetapi memvariasikan $n\lambda$ dengan cara mengubah-ubah plat logam yang menjadi sasaran tembakan pada tabung sinar-X.

Logam yang berbeda akan menghasilkan panjang gelombang $0,1541\text{ nm}$, $\text{NiK}\alpha_1$ memiliki panjang gelombang $0,1658\text{ nm}$, dan $\text{ZnK}\alpha_1$ memiliki panjang gelombang $0,1435\text{ nm}$. Difraksi hanya akan terjadi jika terbentuk interferensi gelombang yang konstruktif pada saat berkas cahaya dipantulkan oleh material sampel. Sementara itu, interferensi konstruktif hanya dapat terjadi pada panjang gelombang tertentu yang datang dengan sudut tertentu pula. Artinya, tidak semua panjang gelombang yang datang pada sudut tertentu akan menghasilkan interferensi konstruktif.

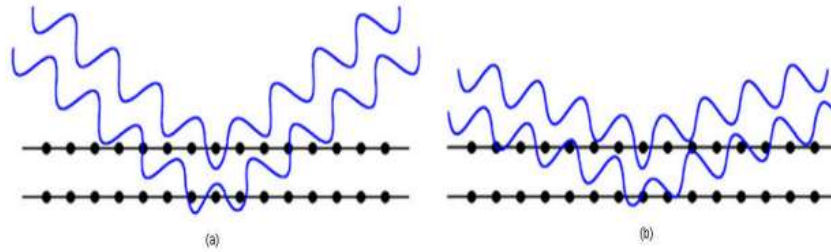


Gambar 2.13 (a) Interferensi konstruktif, (b) Interferensi destruktif

Gambar 2.13 memperlihatkan bahwa walaupun berkas cahaya datang dari sudut yang sama, namun jika panjang gelombangnya berbeda maka dapat menghasilkan pola interferensi yang berbeda. Kelemahan metode ini adalah kurang praktis karena harus mengubah-ubah plat logam pada tabung sumber sinar-X. Oleh karena itu, dikembangkan metode yang lebih baru oleh Debye-Scherrer, yakni metode serbuk.

b. Metode Debye-Scherrer (Metode serbuk)

Pada metode metode serbuk, sudut θ yang diubah-ubah sedangkan NJ dibuat tetap. Hal tersebut dapat dilakukan dengan dengan mengubahubah arah datangnya berkas sinar-X tanpa mengganti plat logam sumber sinar-X agar dihasilkan NJ yang tetap. Pola interferensi juga dapat dipengaruhi oleh arah datangnya gelombang. Walaupun berkas cahaya yang datang memiliki panjang gelombang yang sama namun jika arah datangnya berbeda maka pola interferensinya akan berbeda. Gambar 2.7 memperlihatkan berkas cahaya yang memiliki panjang gelombang yang sama, namun arah datangnya berbeda sehingga menimbulkan perbedaan pola interferensi.

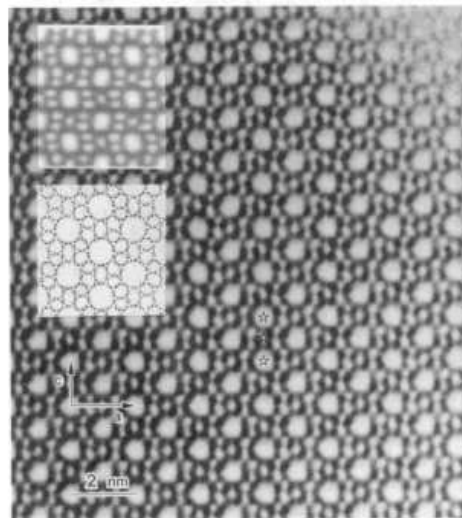


Gambar 2.14 (a) Interferensi konstruktif, (b) Interferensi destruktif

Berdasarkan Hukum Bragg, jika panjang gelombang dari sinar yang membentur diketahui, kemudian kita bisa mengontrol sudut dari benturan maka dapat ditentukan jarak antar atom/geometri dari kisi (d-spacing). Dengan menghitung d-spacing yang diperoleh dari rumus Bragg serta mengetahui nilai Indeks Miller (hkl) yang menyatakan posisi atom dalam kristal, maka dapat ditentukan latis parameter (a, b dan c) sesuai dengan bentuk kristalnya.[19]

2.14 Teknik Mikroskopi

Teknik mikroskop elektron merupakan cara yang relatif sederhana untuk menentukan bentuk dan ukuran partikel. Pada spesifikasi alat tertentu teknik ini dapat memberikan informasi tentang komposisi dan struktur internal suatu materi. Teknik ini juga telah menghasilkan gambar yang sangat menakjubkan seperti tampak pada Gambar 2.15. dimana partikel dalam skala molekuler dapat teramati.



Gambar 2.15 Hasil pengukuran mikroskop elektron transmisi yang menghasilkan gambaran struktur morfologi zeolith (ZSM-5).[19]

2.14.1 Instrumentasi Mikroskop Elektron

Berdasarkan berkas elektron yang dideteksi (bagian yang ditransmisi atau dihamburkan) instrumentasi elektron mikroskopi terdiri dari dua tipe, Scanning Electron Microscopy (SEM) dan Transmission Electron Microscopy (TEM). Pada SEM, berkas elektron ditembakkan pada permukaan sampel, sedangkan imejnya diperoleh berdasarkan hasil deteksi elektron yang dihamburkan atau berdasarkan elektron sekunder.

Elektron sekunder berasal dari permukaan sampel dan memiliki energi yang rendah sekitar 5- 50 eV. Sedangkan elektron yang dihamburkan berasal dari bagian sampel yang lebih dalam dan memberikan informasi tentang komposisi sampel karena elektron yang lebih berat menghamburkan secara lebih kuat dan tampak lebih terang pada image yang dihasilkan

Pengoperasian SEM dilakukan dalam keadaan vakum (10^{-6} bar) sehingga elektron hanya berinteraksi dengan sampel yang diteliti.

BAB III

METODOLOGI

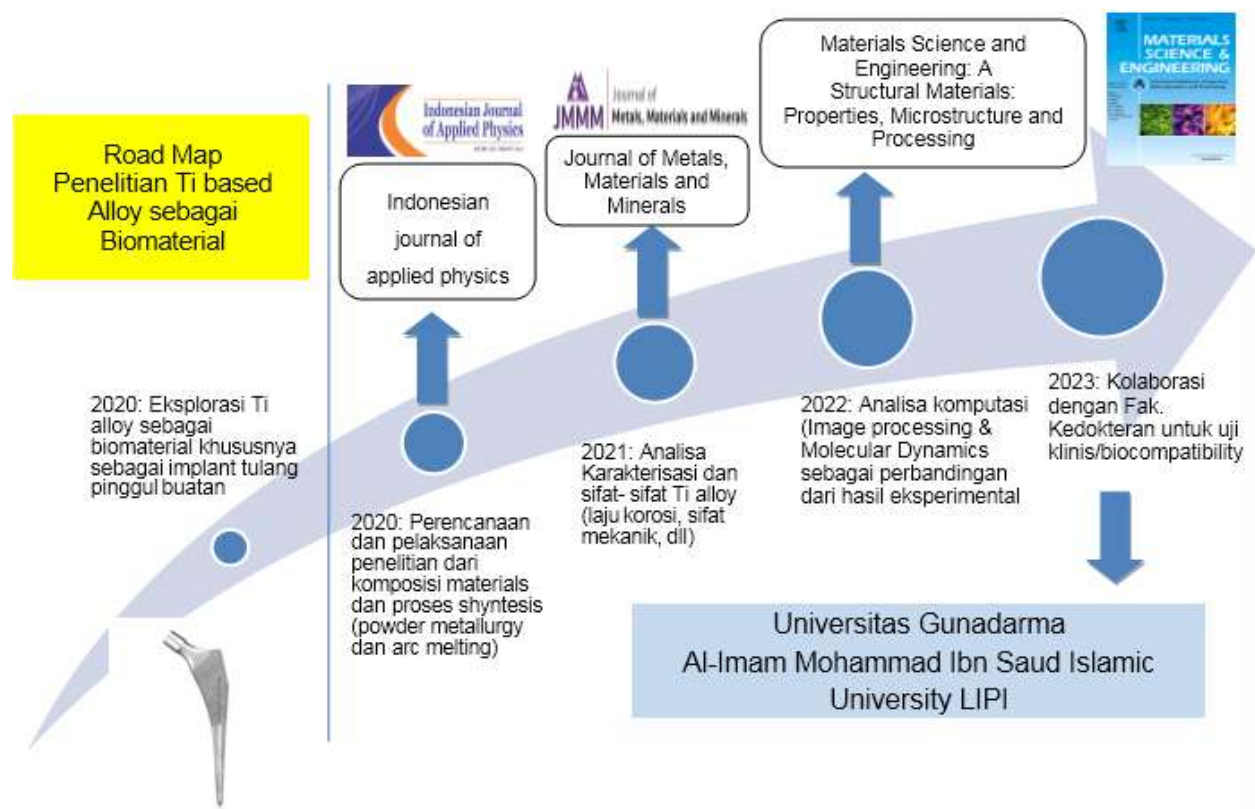
3.1 METODE PENELITIAN

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah komputasi material dengan metode simulasi dan numerik, yaitu modeling desain komposisi Ti-Mo yang dihubungkan dengan struktur mikro dan sifat mekanik yaitu uji tekan (*compression test*) dan uji kekerasan (*hardness test*) yang akan terbentuk dengan menggunakan *molecular dynamic* serta metode *image processing* untuk melakukan perhitungan ukuran butir struktur mikro dari paduan Ti-Mo dengan persentase unsur berbeda dari W, Cu, dan Cr.

3.2 Waktu dan Tempat

Penelitian dilaksanakan di Laboratorium Lanjutan Teknik Mesin Kampus H Universitas Gunadarma, Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia (LIPI Fisika).

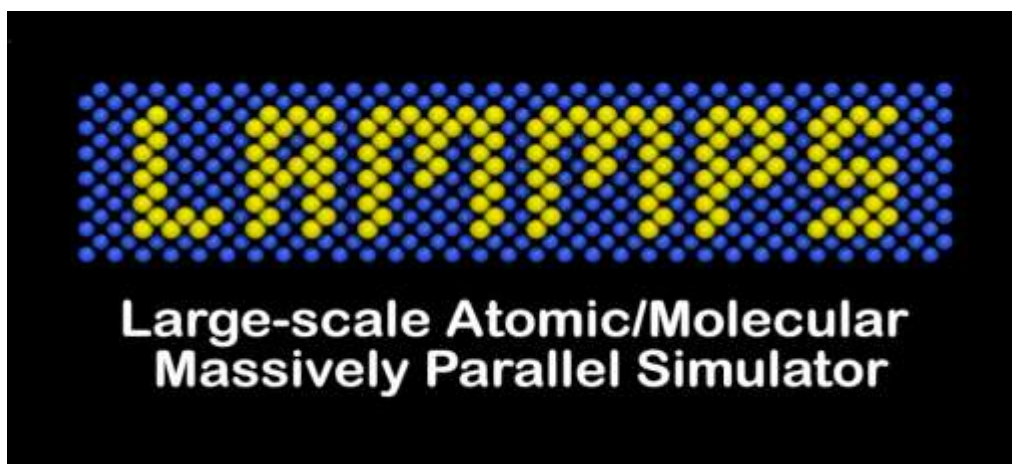
3.3 Road Map Ti-Mo Based Alloy Sebagai Biomaterial



3.4 Komponen simulasi *molecular dynamic*

Dalam melakukan pemodelan simulasi dibutuhkan beberapa komponen pendukung berupa perangkat lunak komputer yang mendukung pembentukan simulasi. Komponen pendukungnya adalah software LAMMPS dan OVITO.

1. LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)



Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) adalah kode dinamika molekuler klasik yang memodelkan partikel dalam bentuk cair, padat atau gas. LAMMPS menerapkan integrasi persamaan gerak Newton untuk atom, molekul, atau partikel makroskopik yang berinteraksi melalui gaya jarak pendek atau panjang dengan menggunakan berbagai kondisi batas [50].

2. OVITO

Open Visualization Tool (OVITO) adalah perangkat lunak yang sangat baik untuk visualisasi dan analisis atom. [51]. OVITO digunakan untuk membuat simulasi dinamika molekul secara visual. Manipulasi cepat struktur Beberapa format file yang didukung. Metode *common neighbor analysis* (CNA) dapat digunakan untuk menghitung jumlah unit kristal seperti BCC, FCC dan sebagainya. Perhitungan CNA ini dapat dilakukan menggunakan program OVITO.



3. VMD (Visual Molecular Dynamic)

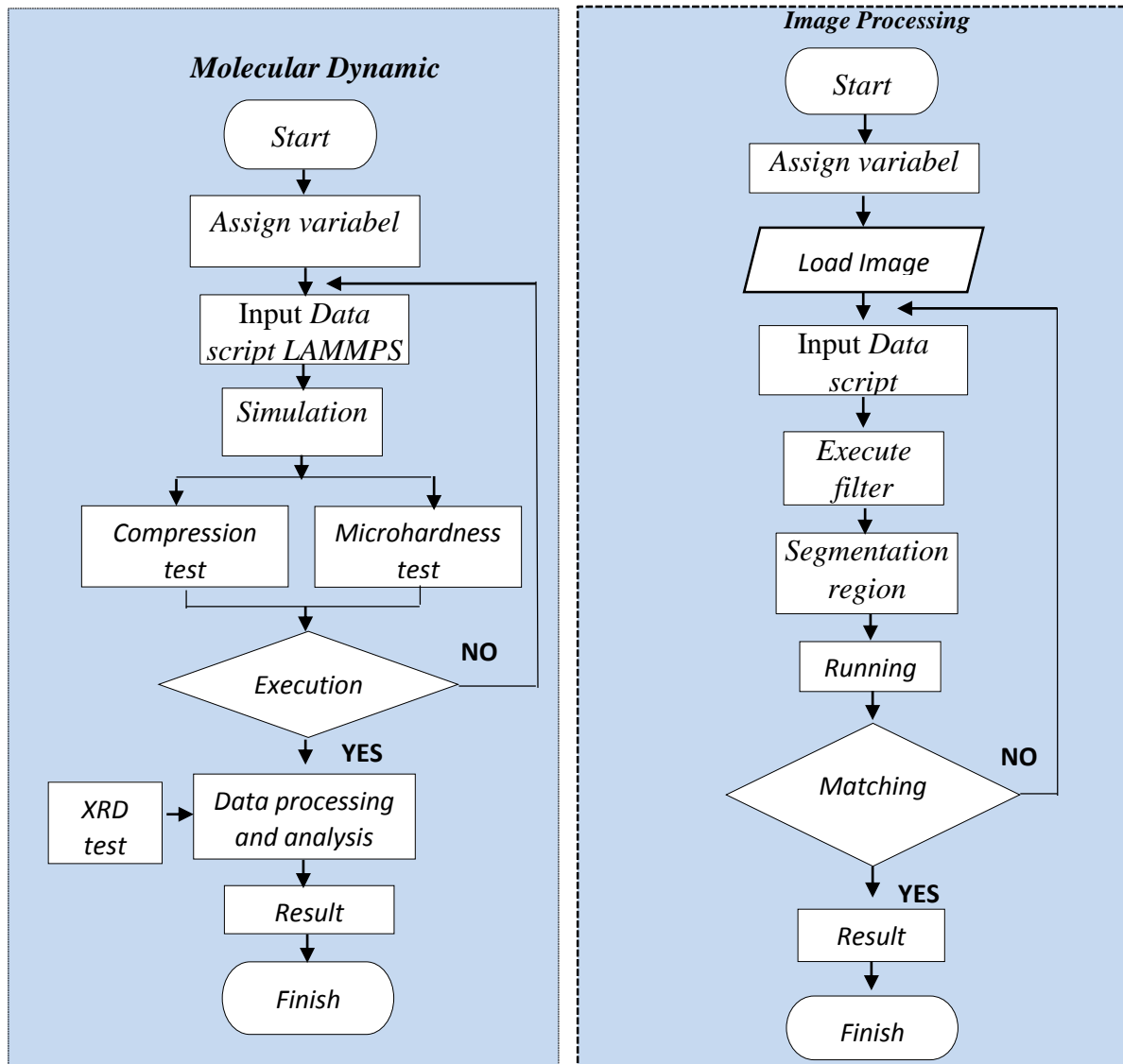
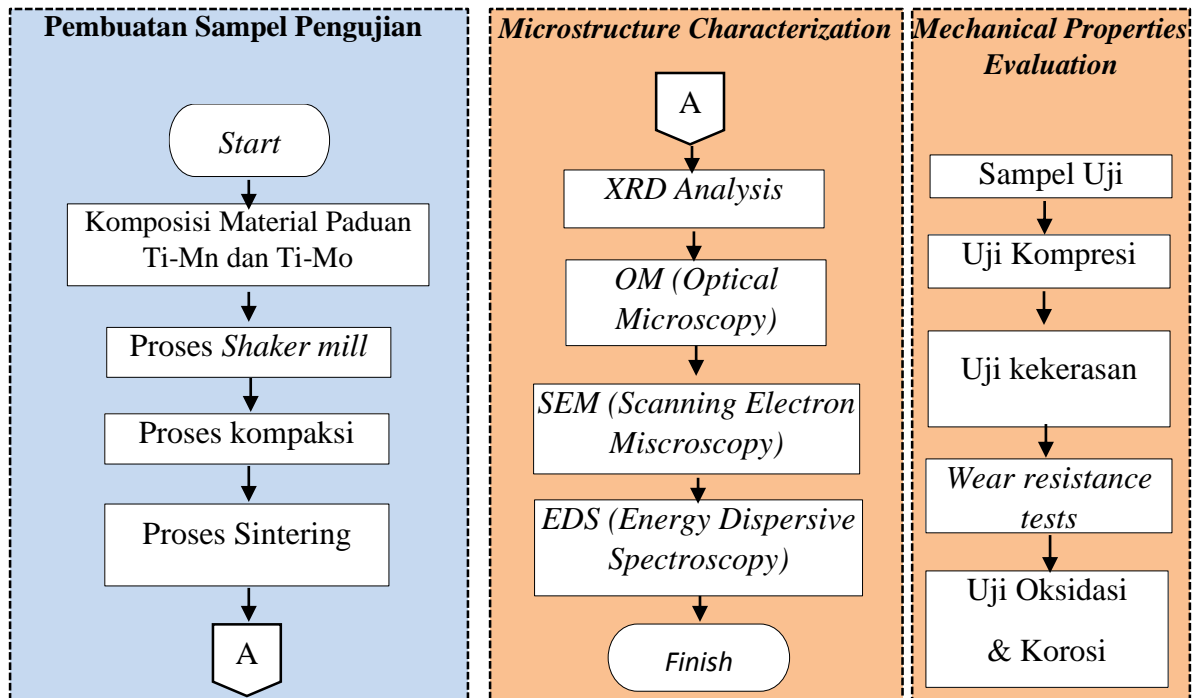
Alat analisis bawaan (rdf, FFT, dan lain-lain .) Manipulasi adegan rendering berkualitas tinggi. VMD (Visual Molecular Dynamics) adalah paket perangkat lunak untuk visualisasi 3D, pemodelan dan analisis sistem molekuler. VMD adalah instrumen ampuh yang digunakan dalam penelitian ilmiah nyata.[52]

VMD adalah program grafik molekuler yang dirancang untuk tampilan dan analisis kumpulan molekul, khususnya biopolimer seperti protein dan asam nukleat. VMD dapat secara bersamaan menampilkan sejumlah struktur menggunakan beragam gaya rendering dan metode pewarnaan. Molekul ditampilkan sebagai satu atau lebih "representasi," di mana setiap representasi mewujudkan metode rendering dan skema pewarnaan tertentu untuk subset atom yang dipilih. Atom yang ditampilkan di setiap representasi dipilih menggunakan sintaks pemilihan atom ekstensif, yang mencakup operator Boolean dan ekspresi reguler. VMD menyediakan antarmuka pengguna grafis lengkap untuk kontrol program, serta antarmuka teks menggunakan pengurai Tcl yang dapat disematkan untuk memungkinkan skrip kompleks dengan substitusi variabel, loop kontrol, dan pemanggilan fungsi. Pencatatan log sesi penuh didukung, yang menghasilkan skrip perintah VMD. VMD ditulis dalam C ++, menggunakan desain berorientasi objek; program, termasuk kode sumber dan dokumentasi ekstensif, tersedia secara gratis melalui ftp anonim dan melalui World Wide Web. [53]



3.5 PROSEDUR PENELITIAN

Dalam melakukan penelitian, biasanya diawali dengan menetapkan beberapa tahapan atau tahapan dalam melakukan penelitian. Berikut ini akan dijelaskan tentang metode penelitian dari awal hingga akhir penelitian yang ditunjukkan melalui diagram alir penelitian seperti Gambar 3.1.



Pada gambar 3.1 diagram alir penelitian, menjelaskan tahapan-tahapan yang akan dilakukan dalam penelitian guna memperoleh hasil yang signifikan dari penelitian dan sesuai dengan literatur. Tahapan proses tersebut menyatakan permulaan dan tahapan akhir dari tahapan studi yaitu proses penelitian yang sedang berlangsung dan menyatakan keputusan dengan membandingkan proses yang telah diproses.

3.5.1 Penentuan Variabel dan Parameter

a. Komposisi kimia

Pada penelitian ini titanium akan ditambahkan persentase komposisi variabel yang berbeda - beda yaitu Ti-Mo serta W, Cu, dan Cr.

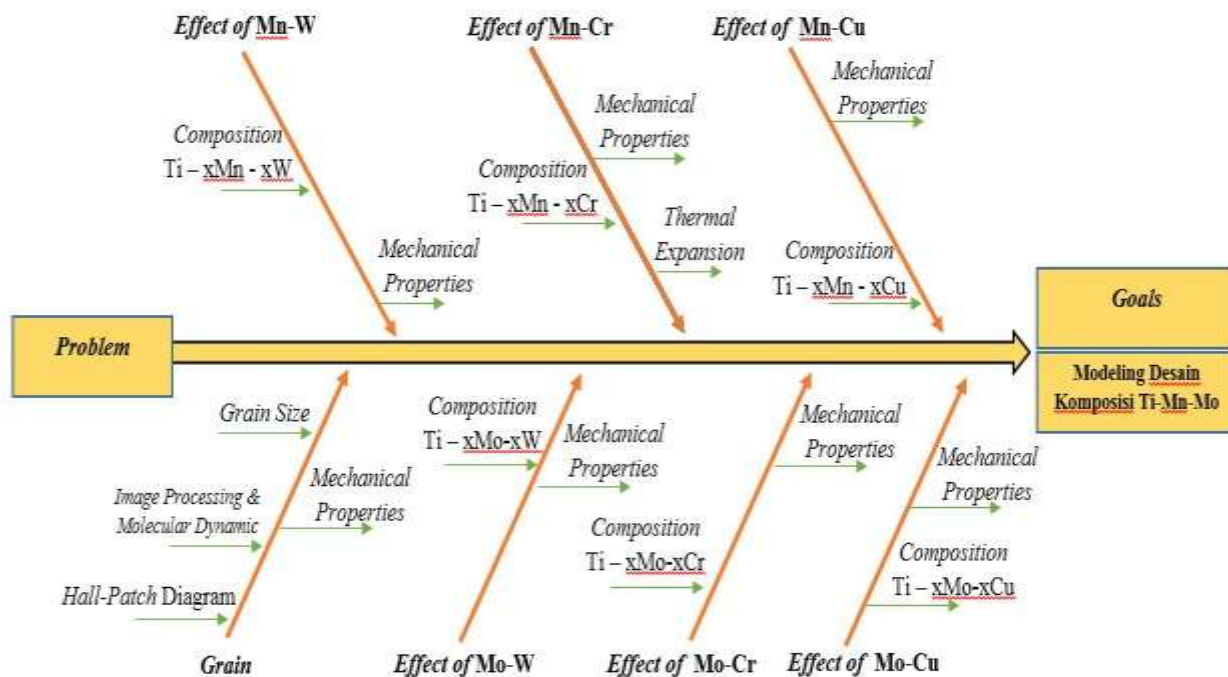
Tabel 3.1 Komposisi Ti - Mo Alloys

No.	Alloys	Ti	Mo	W	Cr	Cu
1.	TiMo3W	Balance	10	3	-	-
2.	TiMo6W	Balance	10	6	-	-
3.	TiMo9W	Balance	10	9	-	-
4.	TiMo3Cr	Balance	10	-	3	-
5.	TiMo6Cr	Balance	10	-	6	-
6.	TiMo9Cr	Balance	10	-	9	-
7.	TiMo3Cu	Balance	10	-	-	3
8.	TiMo6Cu	Balance	10	-	-	6
9.	TiMo9Cu	Balance	10	-	-	9

Tujuan pemodelan komposisi kimia adalah untuk mengetahui pengaruh molybdenum, chromium, tembaga terhadap sifat mekanik dan ukuran butir dari paduan titanium. Simulasi biner unsur Ti-Mo. Dilanjutkan dengan pemodelan dan simulasi Ti-Mo-W, Ti-Mo-Cr, dan Ti-Mo-Cu terhadap sifat mekanik dengan *molecular dynamic simulation*.

b. Road map penelitian

Berdasarkan telaah pustaka dari penelitian sebelumnya, Adapun road map penelitian modelling desain komposisi Ti-Mo dihubungkan dengan struktur mikro (micro structure) dan sifat mekanik yang akan terbentuk dengan menggunakan pendekatan metode *molecular dynamic* dan pengukuran ukuran butir atau *grain size* menggunakan metode *image processing* yang diperlihatkan pada gambar 3.1.



Gambar 3.1 Road map penelitian diagram fish bone

3.5.2 Input atau masukan script simulasi pada LAMMPS

Input script LAMMPS merupakan informasi yang harus disediakan sebelum dilakukan simulasi, berupa file notepad ++. Informasi ini berguna untuk menentukan atom dan molekul serta posisinya, serta menyediakan parameter yang diperlukan untuk menciptakan kondisi yang diinginkan. Isi script input pada LAMMPS terdiri dari empat bagian penting yang harus diperhatikan, diantaranya sebagai berikut:

1. Inisialisasi (*Initialization*)

Inisialisasi merupakan pengaturan parameter awal dalam simulasi. Parameter yang perlu ditentukan pada pengaturan awal adalah units, dimension, boundary, dan atom_style. Parameter inisialisasi yang digunakan dalam simulasi penelitian ini adalah sebagai berikut :

Tabel 3.2 Parameter yang digunakan pada Inisialisasi (*Initialization*)

Input command script	Deskripsi	Keterangan
units	metal	Jenis paduan adalah metal
dimension	3	Dimensi yang digunakan adalah tiga ruang
boundry	p p p	Boundary p p p ini merupakan sebuah batas periodik
atom_style	atomic	Simulasi satuan menggunakan satuan atom

2. Definisi Atom (*Atom Definition*)

Atom adalah bagian dari susunan untuk menentukan jenis atom, jumlah atom, jumlah atom dan molekul, jumlah ikatan, dan posisi awal koordinat atom.

Tabel 3.3 Atom definition

Input command script	Deskripsi	Keterangan
region box	block 0 10 0 10 0 10 units box	Ukuran simulasi adalah 10 x 10 x 10 satuan kisi
create_box	3 box	Tiga atom
lattice	hcp sama dengan fcc 4.05	Satuan kristal FCC atau HCP untuk titanium dan 4,05 adalah konstanta kisi
region	TiMoCr block 0 10 0 10 0 10 units box	Membentuk region box block TiMoCr
create_atoms	1 region TiMoCr units box	Perintah untuk membuat atom pada kisi, atau satu atom

set	region TiMoCr type/fraction 2 \$(v_Mo/(100))\$ 123939	Untuk mengatur region Mo
set	region TiMoCr type/fraction 3 \$(v_Cr/(100))\$ 142567	Untuk mengatur region Cr
variable definition	variable fTi equal 47.90 variable fMo equal 95.96 variable fCr equal 51.9961 variable Feva equal 6.022*10e23 variable WMo equal 10 variable WCr equal 3 variable WTi equal 100- \${WMo}-\${WCr}	Menentukan massa atom, dan komposisi kimia dalam persentase pada Ti10Mo3Cr

3. Pengaturan koefisien ikatan, parameter kondisi simulasi yang diinginkan, dan keluarannya. Perintah pengaturan koefisien yang digunakan untuk set up the Interatomic potential adalah sebagai berikut :

- time step
- pair_style.
- pair_coeff.
- minimize.
- group

Variasi dalam tipe perhitungan dijelaskan dengan perintah compute, compute_modify, dan variabel. Selain itu, Output diatur oleh thermo, dump, dan restart.

Tabel 3.4 Pengaturan FORCE FIELDS

pair_style	Meam	Jenis potensial antar atom
pair_coeff.	* * library.meam Ti Mo Cr TiMoCr.meam Ti Mo Cr	Library Ti, Mo, dan Cr
minimize	1.0e-6 1.0e-12 10000 10000	minimalisasi energi sistem, dengan menyesuaikan koordinat atom secara berulang. Iterasi dihentikan jika salah satu kriteria

		penghentian terpenuhi.
group	group Ti type 1 group Mo type 2 group Cr type 3	Menentukan grup dari masing – masing unsur Ti, Mo, dan Cr

Tabel 3.5 Pengaturan setting # EQUILIBRATION

Input command script	Deskripsi	Keterangan
reset_timestep	0	
timestep	0.005	
velocity	velocity all create 300 12345 mom yes rot no fix 1 all npt temp 1000 1000 1 iso 0 0 1 drag 1	Atur atau ubah kecepatan sekelompok atom dalam salah satu dari beberapa gaya. Untuk setiap gaya, ada argumen yang diperlukan dan parameter kata kunci / nilai opsional.

Tabel 3.6 Pengaturan setting # Set thermo output

Input command script	Deskripsi	Keterangan
dump	1 all atom 250 dump.lammpstrj	Membuang snapshot jumlah atom ke satu atau lebih file setiap N timesteps dalam salah satu dari beberapa gaya.
thermo	1000	Hitung dan cetak info termodinamika (misalnya suhu, energi, tekanan) pada langkah waktu yang merupakan kelipatan N dan di awal dan akhir simulasi. Nilai 0 hanya akan mencetak termodinamika di awal dan akhir.

thermo_style	thermo_style custom step lx ly lz press pxx pyy pzz pe temp	Atur gaya dan konten untuk mencetak data termodinamika ke layar dan file log
--------------	---	--

Tabel 3.7 Pengaturan setting # DEFORMATION

Input command script
<pre> reset_timestep 0 fix 1 all npt temp 300 300 1 y 0 0 1 z 0 0 1 drag 1 variable srate equal 1.0e10 variable srate1 equal "-v_srate / 1.0e12" fix 2 all deform 1 x erate \${srate1} units box remap x # Output strain and stress info to file # for units metal, pressure is in [bars] = 100 [kPa] = 1/10000 [GPa] # p2, p3, p4 are in GPa variable strain equal "(lx - v_L0)/v_L0" variable p1 equal "v_strain" variable p2 equal "-pxx/10000" variable p3 equal "-pyy/10000" variable p4 equal "-pzz/10000" fix def1 all print 100 "\${p1} \${p2} \${p3} \${p4}" file TiMoCr_comp_100.def1.txt screen no # Use cfg for AtomEye dump 1 all custom 250 dump.TiMoCr.comp.* id xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz #log file log logdata_10^8_check2.txt </pre>

3.5.3 Input hasil running *LAMMPS* ke OVITO (*Open Visualization Tool*) software

DAFTAR PUSTAKA

1. Xavier, C. C., Correa, D. R. N., Grandini, C. R. & Rocha, L. A, 2017. *Low temperature heat treatments on Ti-15Zr-xMo alloys. Journal of Alloys and Compounds.*
2. Chen, Q. & Thouas, G. A. Metallic implant biomaterials, 2015. *Materials Science and Engineering: R: Reports* 87, 1–57, <https://doi.org/10.1016/j.mser.2014.10.001>.
3. Cordeiro, J. M. & Barão, V. A. 2017. *Is there scientific evidence favoring the substitution of commercially pure titanium with titanium alloys for the manufacture of dental implants? Materials Science and Engineering: C* 71, 1201–1215.
4. Pedro F. Santos , Mitsuo Niinomi , Huihong Liu , Masaaki Nakai , Ken Cho , Takayuki Narushima , Kyosuke Ueda , Naofumi Ohtsu , Mitsuhiro Hirano ,and Yoshinori Itoh, 2017. *Development and Performance of Low-Cost Beta-Type Ti-Based Alloys for Biomedical Applications Using Mn Additions. Department of Materials Processing , Tohoku University.*
5. Donachie & Matthew, 2000. *Titanium: A Technical Guide, 2nd Edition. Ohio : The ASM International, the material information society.*
6. Ratner BD, 1998. *The Surface Characterization of Biomaterial : How finely can we resolve surface structure. In : Ratner BD (ed) Surface Characterization of Biomaterial. Elsevier, Amsterdam, pp 13-36*
7. D.R.N.Correa, P.A.B Kuroda, M.L Lourence, C.J.C Fernandes, M.A.R Buzalaf, W.F Zambuzzi, & C.R Grandini, 2017. *Development of Ti-15Zr-Mo alloys for applying as implantable biomedical devices. Journal of Alloys and Compounds.*
8. Pan Wang, Yan Feng, Fengchao Liu, Lihong W, Shaokang Guan, 2015. *Microstructure and mechanical properties of Ti–Zr–Cr biomedical alloys. Elsevier : Materials Science and Engineering C.*
9. Takeshi Nagasea, Yuuka Iijima, Aira Matsugaki, Kei Ameyama, Takayoshi Nakano, 2019. *Design and fabrication of Ti–Zr–Hf–Cr–Mo and*

- Ti-Zr-Hf-Co-Cr-Mo high-entropy alloys as metallic biomaterials*. Elsevier : Materials Science & Engineering C.
10. Mariana Luna Lourenço, Giovana Collombaro Cardoso, Karolyne dos Santos Jorge Sousa, Tatiani Ayako Goto Donato, Fenelon Martinho Lima Pontes & Carlos Roberto Grandini, 2020. *Development of novel Ti-Mo-Mn alloys for biomedical applications*. Nature research : Sciencereports.
 11. Pedro Fernandes Santos, Mitsuo Niinomi, Huihong Liu dkk, 2016. *Fabrication of low-cost beta-type Ti-Mn alloys for biomedical applications by metal injection molding process and their mechanical properties*.
 12. Pedro Akira Bazaglia Kuroda, Mar'ilia Afonso Rabelo Buzalaf, Carlos Roberto Grandini, 2016. *Effect of molybdenum on structure, microstructure and mechanical properties of biomedical Ti-20Zr-Mo alloys*.
 13. Tri. Joko Wardoyo, (2005). Metode Peningkatan Tegangan Tarik Dan Kekerasan Pada Baja Karbon Rendah Melalui Baja Fasa Ganda. Issn 0853-8697.
 14. ASM International. Handbook Committee, 1991. ASM handbook. Vol. 4, Heat treating. Materials Park, OH : ASM International.
 15. Koswara, Engkos. 1991. Pengujian Bahan Logam. Bandung. Humaniora Utama Press. Hal 134.
 16. Alois Schonmetz, Karl Gruber. 1985. Pengetahuan Bahan Dalam Pengerjaan Logam. Bandung: Angakasa.
 17. Syaefudin. 2001. Pengerasan Baja Karbon Rendah dengan Metode Nitridasi.
 18. Surdia, T., Chijiwa, K., 2000, Teknik Pengecoran Logam, Cetakan Ke-8, PT. Jakarta : Pradnya Paramita.
 19. Agus Setiabudi, Rifan Hardian, Ahmad Muzakir, 2012. Karakterisasi Material; Prinsip dan Aplikasinya dalam Penelitian Kimia. UPI : UPI PRESS.
 20. A Campbell, P Murray, E Yakushina, S Marshall, W Ion, 2017. *Automated*

- microstructural analysis of titanium alloys using digital image processing.*
Advanced Forming Research Centre, University of Strathclyde, Glasgow,
UK.
21. Hamweendo A, Malama T, Botef I, 2016. *Titanium-nickel alloys for bone tissue engineering application via cold spray*. In: International Conference on Competitive Manufacturing COMA16. Stellenbosch, South Africa. pp. 273-279
 22. Serope Kalpakjian, Steven Schmid, 2013. *Manufacturing Engineering & Technology*, 7th Edition. Pearson Education.
 23. German, R.M. (1994). *Powder metallurgy science, in Metal Powder Industries Federation*, 2nd edn, Princeton, New York.
 24. R. E. Smallman and R. J. Bishop, 2000. "Modern physical metallurgy and materials engineering", Hill International Book Company, New York.
 25. Andrew Campbell, PaulMurray, dkk, 2017. *New methods for automatic quantification of microstructural features using digital image processing.* Elsevier : *Materials and Design* .
 26. Zaid Al, K.R, 2020. Prediksi sifat mekanik berdasarkan luas butir Aluminium 0,5% graphene dengan metode *image processing*. Deopk : Universitas Gunadarma.
 27. Shiho Miyazaki, Masahiro Kusano, Dmitry S. Bulgarevich, dkk, 2019. *Image Segmentation and Analysis for Microstructure and Property Evaluation on Ti6Al4V Fabricated by Selective Laser Melting. The Japan Institute of Metals and Materials*.
 28. Cardarelli, F, 2008. *Materials Handbook A Concise Desktop Reference Second Edition*. London: Springer.
 29. Sutabri, 2014. Analisis Sistem Informasi. Penerbit : CV Andi Offset.
 30. Abdul Kadir dan Terra Ch. Triwahyuni. 2013. Pengantar Teknologi Informasi Edisi Revisi. Yogyakarta: Andi.
 31. George W, Reynold, 2015. *Ethic In Information Technology, Fifth Edition*. Boston : Cengage Learning.
 32. . Sutarman, 2009. Pengantar teknologi Informasi. Jakarta : Bumi Aksara.

33. Granel, 2014. *Multilingual Information Technology : Information Technology and Translator*. Oxfors : Chandos Publishing.
34. T. Tsuchiya, Y. Ikarashi, T. Uchima, H. Doi, A. Nakamura, Y. Ohshima, M. Fujimaki, K. Toyoda, E. Kobayashi, T. Yoneyama, H. Hamanaka, *Mater. Trans.* 43 (2002) 3058–3064.
35. K.D. Rosenman, M. Stanbury, *Am. J. Ind. Med.* 29 (1996) 491–500.
36. C.S. Dubey, B.K. Sahoo, N.R. Nayak, *Bull. Environ. Contam. Toxicol.* 67 (2001) 541–548.
37. D.G. Barceloux, *J. Toxicol. Clin. Toxicol.* 37 (1999) 173–194.
38. T. Tsuchiya, Y. Ikarashi, T. Uchima, H. Doi, A. Nakamura, Y. Ohshima, M. Fujimaki, K. Toyoda, E. Kobayashi, T. Yoneyama, H. Hamanaka, *Mater. Trans.* 43 (2002) 3058–3064.
39. Hwang, J.Y., Doty, H.W. and Kaufman, M.J., 2008. The effects of Mn additions on the microstructure and mechanical properties of Al–Si–Cu casting alloys. *Materials Science and Engineering: A*, 488(1-2), pp.496-504.
40. Alpas, A.T. and Zhang, J., 1992. Wear rate transitions in cast aluminum-silicon alloys reinforced with SiC particles. *Scripta Metallurgica et Materialia*; (United States), 26
41. Shabestari, S.G. and Moemeni, H., 2004. Effect of copper and solidification conditions on the microstructure and mechanical properties of Al–Si–Mg alloys. *Journal of Materials Processing Technology*, 153, pp.193-198.
42. Choudhary, C., Sahoo, K.L. and Mandal, D., 2020. *The Effect of Modified Strain-Induced Melt Activation (Modified SIMA) Process on the Microstructure and Mechanical Properties of Al-7Si Alloy*. In *Light Metals 2020* (pp. 277-282). Springer, Cham
43. Petra C.S, Martina Mudrova, Jana Petrova, Jaroslav Fojt, dkk, 2016. *Automatic characterization of titanium dioxide nanotubes by image processing of scanning electron microscopic images*. *Nanomaterials and Nanotechnology*.

44. Atmasasmita, Romli. 2010. *Globalisasi & Kejahatan Bisnis*. Jakarta: Kencana.
45. B. Uno, Hamzah. 2011. *Teknologi Komunikasi dan Informasi Pembelajaran*. Jakarta: Bumi Aksara.
46. Kamberaj, H., 2019. *Molecular Dynamics Simulations in Statistical Physics: Theory and Applications*
47. G. Jacucci, A. Rahman, J. Chem. Phys. 69 (1978) 4117.
48. Wilfred E van Gunsteren and Herman J. C. Berendsen, 1990. *Computer Simulation of Molecular Dynamics: Methodology, Applications, and Perspectives in Chemistry*. Weinheim : Eng.
49. Rapaport, Dennis C., and Dennis C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press, 2004.
50. Plimpton, Steve. 2015. "LAMMPS And Classical Molecular Dynamics For Materials Modeling," No. June.
51. Nordlund, Kai. K. Nordlund, Kai dan Antti Kuronen. 2015. Introduction to Molecular dynamics. *Complete lecture notes for self-studies*.
52. Robert, Johnson, *Visual Molecular Dynamics User Guide*. University of Pennsylvania : ITEST – NANO
53. Humphrey, W., Dalke, A. and Schulten, K., 1996. VMD: visual molecular dynamics. *Journal of molecular graphics*, 14(1), pp.33-38.
54. Mengzi Luo, Li Liang, Lin Lang, dkk, 2018. *Molecular dynamics simulations of the characteristics of Mo/Ti interfaces*. Elsevier : *Computational Materials Science*, pp. 293–301
55. G.C. Ma, J.L. Fan, H.R. Gong, 2018. *Mechanical behavior of Cu-W interface systems upon tensile loading from molecular dynamics simulations*. Elsevier : *Computational Materials Science*, pp. 165-168.