

RESEARCH ARTICLE

Recrystallization of Iron Materials Under The Influence of High-Temperature Heat Treatment: A Molecular Dynamics Study

(Rekristalisasi Material Besi Di Bawah Pengaruh Perlakuan Panas Suhu Tinggi: Studi Dinamika Molekuler)

Nikodemus Umbu Janga Hauwali^{1*}, Marsi Devid Setyawan Bani¹, Amiruddin Supu¹, Artoto Arkundato²

¹Program Studi Pendidikan Fisika, FKIP, Universitas Nusa Cendana, Jl. Adisucipto Penfui, Kupang 85001, Indonesia

²Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember, Jalan Kalimantan No. 37, Jember 68121, Indonesia

ABSTRACT

Simulations have been carried out to study the recrystallization of iron materials after heat treatment. The heat treatment carried out consists of heating the iron from room temperature to critical temperature with different heating temperatures and cooling to room temperature with different cooling times. This study was carried out to obtain information on the occurrence of material recrystallization after the heat treatment process was carried out. This simulation approach was carried out using molecular dynamics methods and utilizing LAMMPS software. The heat treatment process begins by heating the iron from room temperature (300 K) until it reaches a critical temperature, even past the critical temperature value. Then a cooling process is carried out to observe the material recrystallization process. Through these two stages of heat treatment, analysis is carried out to observe the material structure at the end of the simulation. Based on the simulations that have been carried out, the results show that the material's recrystallization is more influenced by the cooling time than the initial cooling temperature. More than 60% of the BCC structures formed at the end of the simulation for all initial cooling temperatures, but for very short cooling times 16% of the BCC.

Telah dilakukan simulasi untuk mempelajari rekristalisasi material besi setelah perlakuan panas yang diberikan. Perlakuan panas yang dilakukan berupa pemanasan besi dari suhu ruang hingga suhu kritis dengan suhu pemanasan berbeda dan pendinginan kembali hingga suhu ruang dengan waktu pendinginan berbeda. Studi ini dilakukan untuk mendapatkan informasi terjadinya rekristalisasi material setelah proses perlakuan panas yang dilakukan. Pendekatan simulasi ini dilakukan dengan menggunakan metode dinamika molekuler dan memanfaatkan perangkat lunak LAMMPS. Proses perlakuan panas dimulai dengan pemanasan besi dari suhu ruang (300 K) hingga mencapai suhu kritis, bahkan melewati nilai suhu kritisnya. Kemudian dilakukan proses pendinginan untuk mengamati proses rekristalisasi material. Melalui kedua tahap perlakuan panas tersebut, dilakukan analisis untuk mengamati struktur material pada akhir simulasi. Dari hasil simulasi yang telah dilakukan, diperoleh hasil bahwa rekristalisasi material lebih dipengaruhi oleh waktu pendinginan daripada suhu awal pendinginan. Terdapat lebih dari 60% struktur BCC yang terbentuk di akhir simulasi untuk semua suhu awal pendinginan, namun untuk waktu pendinginan sangat singkat, terdapat struktur 16% struktur BCC yang terbentuk pada waktu pendinginan 75 ps.

Keywords: Heat treatment, Iron, Molecular dynamics, LAMMPS.

*Corresponding author:
Nikodemus Umbu Janga Hauwali
E-mail: nuj.hauwali@staf.undana.ac.id

PENDAHULUAN

Studi material memainkan peran yang sangat penting dalam perkembangan teknologi kontemporer [1]. Oleh karena itu, kajian material, pengembangan, dan manipulasi material menjadi esensial untuk dilakukan. Penelitian saat ini berfokus pada skala mikroskopis untuk mengungkap sifat material yang terkait erat dengan struktur atomnya [2], [3]. Salah satu

cara yang cukup baik adalah dengan melakukan simulasi komputer. Simulasi komputer menjadi jembatan yang sangat baik untuk menangani kesulitan yang terjadi jika penelitian dilakukan secara eksperimen [4].

Salah satu metode komputasi yang sering digunakan adalah simulasi dinamika molekuler yang pertama kali diperkenalkan oleh Alder dan Wainwright pada tahun 1957 [5]. Simulasi dinamika molekuler merupakan suatu metode komputasi yang

memodelkan interaksi atom-atom berdasarkan fungsi waktu dengan menyelesaikan persamaan geraknya. Penelitian menggunakan metode ini melibatkan penyelesaian numerik persamaan gerak Newton, diikuti dengan penerapan konsep-konsep mekanika statistik atau hukum-hukum yang relevan dengan informasi lengkap tentang trayektori atom. Dengan menggunakan pendekatan ini, dapat dilakukan prediksi terhadap berbagai parameter termodinamika seperti tekanan, kapasitas panas, energi total sistem, *Mean Square Displacement* (MSD), *Radial Distribution Function* (RDF), koefisien difusi, energi aktivasi, kedalaman penetrasi, dan lain sebagainya.

Besi, sebagai salah satu material yang penting, dimanfaatkan dalam berbagai aspek, meskipun mayoritas dalam bentuk paduan [6]. Dalam penelitian ini dipaparkan mengenai rekristalisasi material besi murni dengan struktur awal *Body-Centered Cubic* (BCC) yang dipanaskan pada suhu ruang (300 K) hingga pada suhu melebihi suhu kritis material. Simulasi kemudian dilanjutkan dengan proses pendinginan material dengan waktu berbeda-beda.

Simulasi ini menggunakan metode dinamika molekuler dengan paket LAMMPS [7]. Program LAMMPS sudah sering digunakan dalam simulasi material dan cukup baik dalam menjelaskan fenomena di tingkat atom yang tidak dapat dipelajari secara eksperimen [8],[9],[10],[11],[12],[13]. Dari simulasi yang dilakukan, diperoleh persentase rekristalisasi material besi di akhir simulasi setelah proses perlakuan panas yang diberikan.

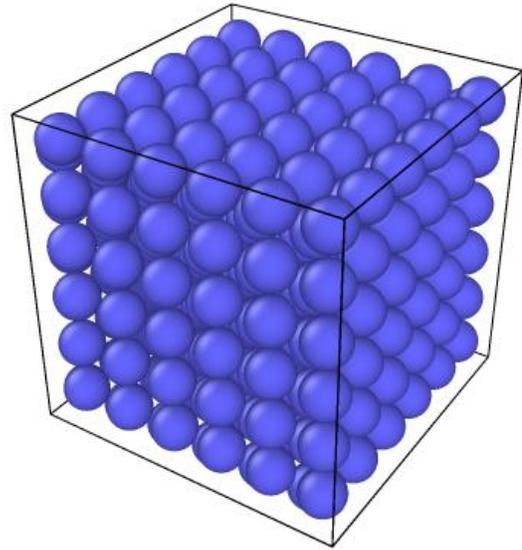
METODE PENELITIAN

Penelitian dilakukan menggunakan program LAMMPS yang diinstal pada fasilitas komputer dengan OS Linux Ubuntu 22.04. Selain LAMMPS, juga digunakan aplikasi OVITO [14] untuk menganalisa struktur material besi pada akhir simulasi. Di samping itu, persentase struktur yang terbentuk ditampilkan dalam bentuk grafik dengan menggunakan Gnuplot. Dalam penelitian ini digunakan fungsi potensial Finnis-Sinclair EAM [15], [16].

Prosedur Simulasi

Langkah awal simulasi dimulai dengan mendesain struktur awal material besi dengan struktur awal BCC dan ukuran $6 \times 6 \times 6$ sebanyak 432 atom, seperti

ditampilkan pada Gambar 1. Proses perlakuan panas dilakukan dengan menerapkan termostat Nosé-Hoover dan ensemble NPT. Pemanasan material besi dilakukan hingga sistem mencapai suhu kritis bahkan hingga melewati suhu kritis material. Setelah itu dilakukan proses pendinginan dengan waktu berbeda-beda hingga sistem mencapai suhu 300 K.



Gambar 1. Struktur awal material besi (BCC)

Simulasi dimulai dengan melakukan simulasi *equilibrium* material besi pada suhu 300 K selama 1000 *pico second* (ps). Dari hasil simulasi yang dilakukan, diperoleh kurva *equilibrium* material. Hasil output dari simulasi ini kemudian digunakan untuk simulasi selanjutnya, yaitu proses pemanasan material hingga pada suhu melebihi suhu kritis.

Setelah melakukan simulasi *equilibrium* material, kemudian dilakukan proses pemanasan (*heating*) untuk mencari titik leleh besi berdasarkan simulasi yang dilakukan. Setelah proses *heating* dengan suhu akhir berbeda selama 750 ps, kemudian dilakukan proses *equilibrium* pada suhu akhir *heating* selama 250 ps. Hasil akhir proses *equilibrium* ini kemudian digunakan untuk melakukan pendinginan (*cooling*) material hingga 300 K. Proses pendinginan dilakukan dengan waktu berbeda untuk setiap suhu awal pendinginan, dengan mengambil waktu pemanasan sebagai acuan. Pendinginan dilakukan selama 100% hingga 10% waktu pemanasan dengan interval sebesar 10%. Dengan demikian, proses pendinginan dilakukan pada setiap suhu, masing-masing selama 750 ps, 675 ps, 600 ps, 525 ps, 450 ps, dan 375 ps, 300 ps, 225 ps, 150 ps, dan 75 ps. Setelah proses pendinginan, kemudian

dilakukan proses *equilibrium* pada masing-masing simulasi selama 250 ps. Hasil akhir inilah yang dianalisis menggunakan fasilitas CNA dalam OVITO untuk mengamati rekristalisasi material setelah proses perlakuan panas.

Metode Analisis

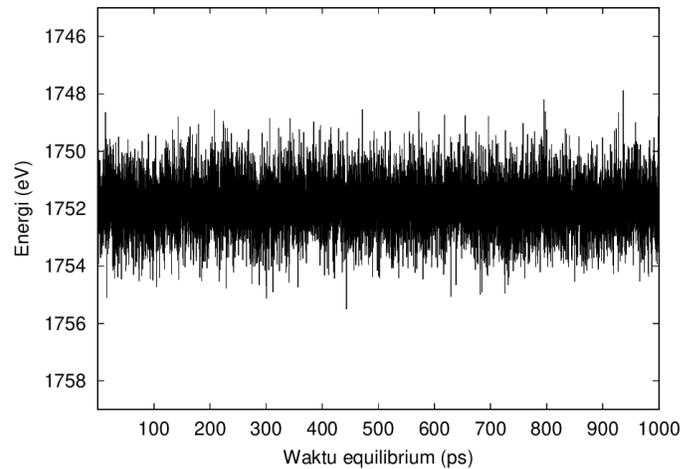
Setelah mendapatkan hasil pendinginan yang sudah diekuilibrasikan pada akhir simulasi, kemudian dilakukan analisis struktur material dengan menggunakan OVITO. Salah satu fitur yang digunakan dalam OVITO yaitu CNA (*Common Neighbor Analysis*) untuk menganalisis jumlah struktur kristal yang terbentuk pada akhir simulasi. Dalam menganalisis struktur yang terbentuk pada akhir simulasi, digunakan *cut-off radius* 3,2 Å. Dalam analisis struktur ini, terdapat beberapa struktur baru yang muncul selain BCC, di antaranya adalah *Face-Centered Cubic* (FCC), *Hexagonal Close-Packed* (HCP), dan *icosahedral* dalam jumlah yang sangat kecil.

Selain struktur kristal baru yang terbentuk, material besi berada dalam keadaan *amorf*. Kehadiran struktur ini telah diamati dalam penelitian terdahulu, khususnya terkait kehadiran struktur *icosahedral* setelah proses pendinginan cepat (*quenching*) material besi [17]. Namun dalam penelitian ini, peneliti hanya fokus untuk mengamati struktur BCC yang terbentuk setelah perlakuan panas yang diberikan.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Simulasi equilibrium pada suhu 300 K

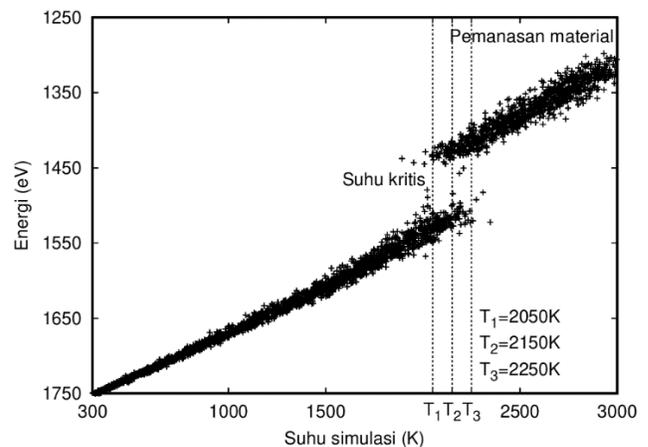
Proses pertama kali yang dilakukan adalah melakukan simulasi *equilibrium* pada suhu 300 K selama 1000 ps, dengan hasil yang ditampilkan pada Gambar 2. Berdasarkan hasil simulasi yang ditampilkan pada Gambar 2, diamati bahwa material besi sudah mengalami fase *equilibrium* pada waktu lebih dari 100 ps dengan rentang energi stabil berada di antara 1750 - 1754 eV. Karena itu pada simulasi pada tahap berikutnya, tidak lagi dilakukan proses *equilibrium* hingga 1000 ps, melainkan cukup 250 ps. Waktu simulasi 250 ps ini diambil untuk efisiensi waktu dalam melakukan perhitungan.



Gambar 2. Hasil ekuilibrasasi pada suhu 300 K selama 1000 ps

Simulasi pemanasan material besi hingga melampaui titik leleh

Simulasi dilakukan pada suhu 300 K - 3000 K untuk mendapatkan suhu kritis besi. Suhu 3000 K dipilih berdasarkan pertimbangan hasil riset terdahulu, bahwa titik leleh besi adalah 1794 K [18], 2358.7 K [19], dan 2400 K [20]. Pemanasan dilakukan melampaui titik leleh material selama 750 ps, dengan mengambil suhu pemanasan hingga 3000 K. Dari hasil pemanasan ini, diperoleh hasil bahwa material besi mengalami titik kritis pada suhu sekitar 2050 K - 2250 K, seperti ditampilkan pada Gambar 3.



Gambar 3. Pemanasan material dari suhu 300 K hingga suhu 3000 K

Dapat diamati dari hasil simulasi yang ditampilkan pada Gambar 3, bahwa suhu kritis besi berada di antara suhu 2050 K - 2250 K. Suhu kritis ini dijadikan acuan untuk proses simulasi pendinginan dengan menjadikan suhu kritis terbawah (2050 K) sebagai suhu terendah dalam proses simulasi. Pada daerah suhu kritis, diambil 3 titik simulasi yaitu 2050 K, 2150 K, dan 2250 K, dan dilanjutkan hingga melampaui suhu kritis, sampai suhu 2850 K.

Hasil simulasi tidak dianalisis untuk suhu di bawah 2050 K. Hal ini karena jika dilakukan simulasi di bawah suhu kritis terbawah material besi, maka tidak akan ada kerusakan struktur yang terjadi karena material besi belum mencapai suhu kritis, dengan persentase struktur ditampilkan pada Tabel 1.

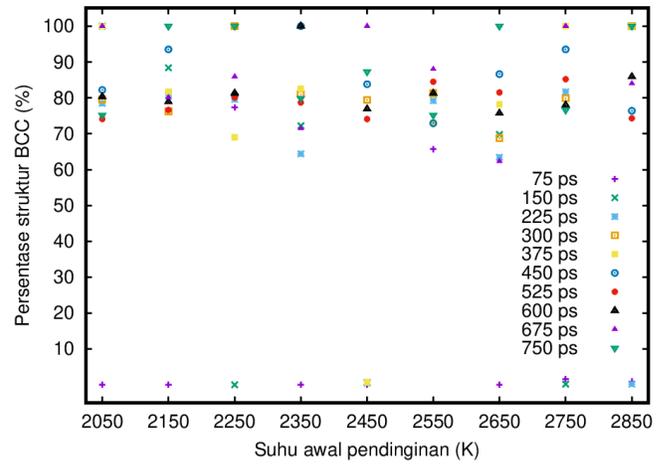
Tabel 1. Persentase struktur material besi pada proses pendinginan

Suhu	Persentase BCC setelah perlakuan panas (%)				
	450 ps	525 ps	600 ps	675 ps	750 ps
1800	100	100	100	100	100
1850	100	100	100	100	100
1900	100	100	100	100	100
1950	100	100	100	100	100
2000	100	100	100	100	100

Dapat diamati dari Tabel 1 bahwa ketika simulasi dilakukan di bawah suhu kritis terendah (2050 K), tidak terjadi kerusakan struktur BCC dari material besi. Hal ini ditandai dengan persentase struktur BCC material besi yang terbentuk setelah proses perlakuan panas secara konsisten berada di angka 100% di setiap akhir simulasi.

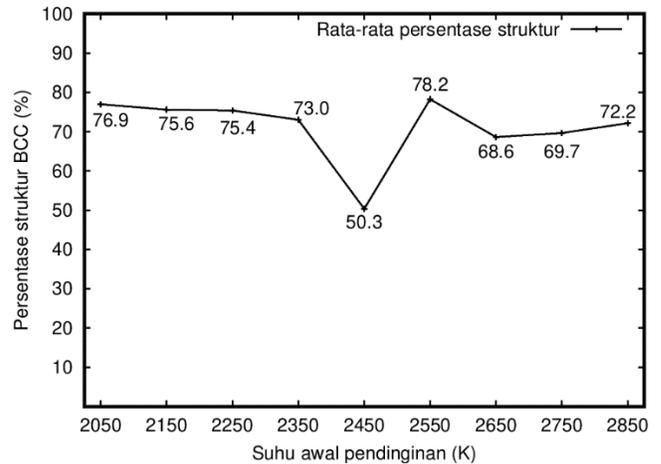
Simulasi pada suhu yang sama dengan waktu pendinginan berbeda

Proses pendinginan material besi dilakukan pada suhu awal yang sama dengan waktu berbeda. Simulasi dilakukan pada suhu 2050 K - 2850 K, dengan rentang suhu 100 K, kemudian dilakukan pendinginan dari masing-masing suhu tersebut hingga 300 K. Proses pendinginan pada masing-masing suhu tersebut dilakukan dengan waktu berbeda setiap suhu, yaitu secara berturut adalah 75 ps, 150 ps, 225 ps, 300 ps, 375 ps, 450 ps, 525 ps, 600 ps, 675 ps, dan 750 ps. Hasil simulasi ditampilkan pada Gambar 4.



Gambar 4. Material didinginkan dengan waktu yang berbeda pada masing-masing suhu

Dari hasil simulasi yang dilakukan, dapat diamati bahwa persentase rekristalisasi struktur BCC pada setiap suhu berada pada angka lebih dari 60% untuk masing-masing suhu dengan lama waktu pendinginan berbeda. Meski demikian, terdapat hasil di mana persentase rekristalisasi kurang dari 10% yaitu ketika simulasi dilakukan pada pada suhu 2250 K dan 2750 K dengan waktu 225 ps, 2450 K dengan waktu 75 ps, 150 ps, 225 ps, dan 375 ps, dan pada suhu 2850 K dengan waktu 75 ps dan 225 ps. Berdasarkan hasil simulasi ini, kemudian dilakukan perhitungan untuk mencari rata-rata struktur yang terbentuk pada setiap suhu awal pendinginan. Hasil perhitungan ini ditampilkan pada Gambar 5.

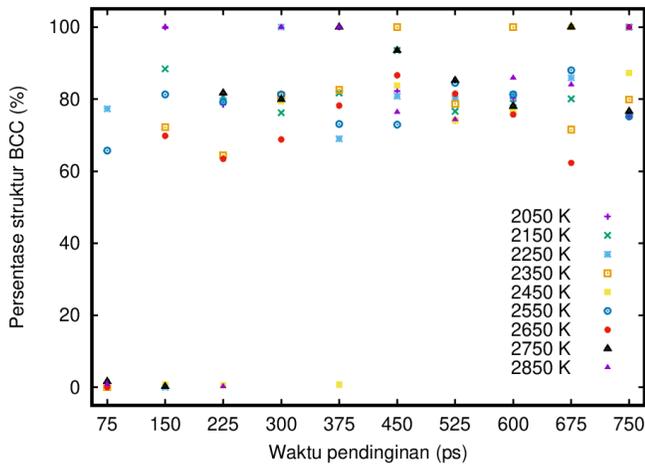


Gambar 5. Nilai rata-rata struktur BCC yang terbentuk pada setiap suhu

Berdasarkan hasil yang ditampilkan pada Gambar 5, dapat diamati bahwa rata-rata struktur yang terbentuk pada setiap suhu awal pendinginan berada di atas 68%. Hasil berbeda diperoleh ketika dilakukan pendinginan dengan suhu awal 2450 K, dengan rata-rata struktur yang terbentuk yaitu 50,3%. Dari hasil ini, dapat diamati bahwa rekristalisasi material besi dipengaruhi oleh suhu awal pendinginan, hal ini dapat diamati karena rata-rata struktur BCC yang terbentuk cenderung menurun dari suhu 2050 K - 2350 K, bahkan menurun drastis pada suhu 2450K. Namun demikian, terdapat perbedaan ketika didinginkan dengan suhu awal lebih tinggi, mengalami peningkatan secara drastis pada suhu 2550 K dan persentase BCC yang diperoleh lebih rendah pada suhu berikutnya.

Simulasi dengan waktu pendinginan sama pada suhu berbeda

Selain itu, juga dilakukan simulasi pada suhu yang berbeda, namun dengan waktu pendinginan sama untuk masing-masing suhu. Hal ini dilakukan untuk mengamati pengaruh waktu pendinginan terhadap rekristalisasi material. Hasil simulasi pada proses ini ditampilkan pada Gambar 6.

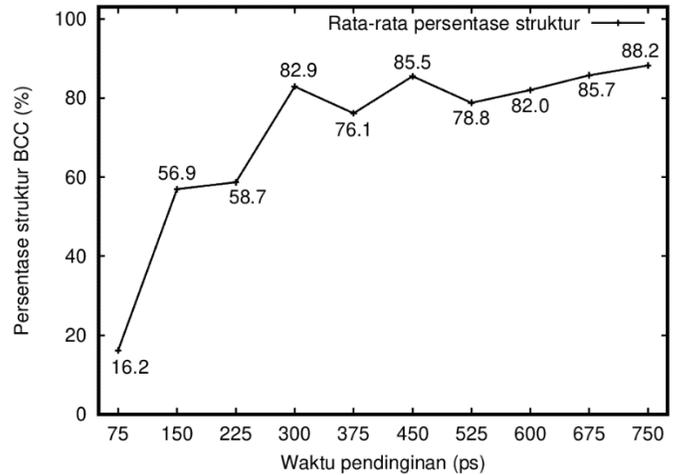


Gambar 6. Pendinginan material dengan waktu yang sama pada masing-masing suhu

Berdasarkan hasil simulasi yang diperoleh pada Gambar 6, diperoleh hasil bahwa kebanyakan hasil simulasi berada pada persentase di atas 60%. Namun demikian, terdapat nilai di mana persentase struktur BCC bernilai kurang dari 10%. Di antaranya adalah ketika simulasi dilakukan pada suhu 2050 dan 2150 dengan waktu 75 ps, 2250 K dengan waktu 150 ps, 2350 dengan waktu 75 ps, 2450 K dengan waktu 75 ps, 150 ps, 225 ps dan 375 ps, suhu 2650 K dengan

waktu 75 ps, suhu 2750 dengan waktu 75 ps dan 150 ps, dan suhu 2850 K dengan waktu 75 ps dan 225 ps.

Berdasarkan hasil simulasi yang diperoleh pada Gambar 6, juga dilakukan analisis untuk menghitung rata-rata struktur yang terbentuk pada suhu yang berbeda-beda dengan waktu pendinginan yang sama. Hal ini dilakukan untuk mengamati pengaruh waktu pendinginan terhadap struktur yang terbentuk di akhir simulasi. Hasil analisis analisis ini ditampilkan pada Gambar 7.



Gambar 7. Pendinginan material dengan waktu yang sama pada masing-masing suhu

Berdasarkan hasil analisis rata-rata struktur yang diperoleh berdasarkan waktu simulasi yang ditampilkan pada Gambar 7, diperoleh hasil bahwa terdapat kecenderungan peningkatan struktur BCC ketika waktu pendinginan lebih lama. Dapat diamati, bahwa ketika simulasi dilakukan dengan waktu paling rendah (75 ps), jumlah struktur yang terbentuk adalah 16,2 %. Hal ini terjadi karena ketika pendinginan dilakukan dengan waktu yang sangat singkat, maka atom-atom kehilangan energi dengan cepat, sehingga terperangkap di antara atom-atom lain dan tidak dapat kembali ke struktur awal.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian dan analisis dapat disimpulkan bahwa setelah dilakukan perlakuan panas, diperoleh hasil bahwa persentase struktur BCC material besi di akhir simulasi mayoritas >60 %. Rekristalisasi material besi lebih dipengaruhi oleh waktu pendinginan. Semakin cepat waktu

pendinginan, maka makin sulit terjadinya rekristalisasi material.

UCAPAN TERIMA KASIH

Kegiatan penelitian ini dibiayai melalui hibah penelitian kerja sama dalam negeri DRPTM tahun 2023.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Q. Xu, "Thoughts on the development of new material technology," *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 493, 2019.
- [2] F. Fang, N. Zhang, D. Guo, K. Ehmann, B. Cheung, K. Liu, and K. Yamamura, "Towards atomic and close-to-atomic scale manufacturing," *Int. J. Extrem. Manuf.*, 1, 2019.
- [3] J. Gao, X. Luo, F. Fang, and J. Sun, "Fundamentals of atomic and close-to-atomic scale manufacturing: a review," *Int. J. Extrem. Manuf.*, 4, 2022.
- [4] A. Satoh, "Introduction to Practice of Molecular Simulation," Akita Prefectural University, Japan, 2011.
- [5] J. G. Lee, "Computational Materials Science," CRC Press, 2017.
- [6] M. Palm, F. Stein, and G. Dehm, "Iron aluminides," *Annu. Rev. Mater. Res.*, vol. 49, pp. 297-326, 2019.
- [7] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, and S. J. Plimpton, "LAMMPS - A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales," *Comput. Phys. Commun.*, vol. 271, p. 108171, 2022.
- [8] Mardiyanto, S. Ahda, and A. K. Rivai, "Thermal properties investigation of FeCr alloy using LAMMPS Simulation: A preliminary study," *Majalah Ilmiah Pengkajian Industri*, vol. 13, no. 2, pp. 161-170, 2019.
- [9] J. Chen, P. Li, dan E. E. Lin, "A molecular dynamics study on the mechanical properties of Fe - Ni alloy nanowires and their temperature dependence," *National Library of Medicine*, vol. 66, no. 66, pp. 40084-40091, 2020.
- [10] J. Herman, M. Govednik, S. P. Patil, and B. Markert, "Molecular dynamics simulation study of the mechanical properties of nanocrystalline body-centered cubic iron," *Surfaces*, vol. 3 no.3, pp. 381-391, 2020.
- [11] A. Maulana, A. Arkundato, Sutisna, and H. Trilaksana, "Mechanical properties of Fe, Ni and Fe-Ni alloy: Strength and stiffness of materials using lammmps molecular dynamics simulation," *AIP Conf. Proc.: ICPLAM. Eng.*, vol. 2314, no. 1, 2020.
- [12] M. A. Pamungkas and R. Widiyatmoko, "Simulasi dinamika molekul reaktif proses amorfisasi silikon kristal," *Jurnal Sains Materi Indonesia*, vol. 18, no.3, pp. 123-128, 2017.
- [13] D. N. Trong, and H. D. T. Minh, "The crystallization process research of al metal by molecular dynamics methods," *International Journal of Applied Engineering Research*, vol. 15, no. 7, pp. 672-681, 2020.
- [14] A. Stukowski, "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 18, no. 1, 2010.
- [15] M. I. Mendelev, S. Han, D. J. Srolovitz, G. J. Ackland, D. Y. Sun, and M. Asta, "Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron," *Philos. Mag.*, vol. 83, no. 35, pp. 3977-3994, 2003.
- [16] W. Zhang, Y. Peng, and Z. Liu, "Molecular dynamics simulations of the melting curve of NiAl alloy under pressure," *AIP Adv.*, vol. 4, no. 5, pp. 0-13, 2014.
- [17] N. U. J. Hauwali, A. Arkundato, and L. Rohman, "Simulasi terbentuknya struktur icosahedral pada peristiwa perubahan fase padat-cair-padat menggunakan metode dinamika molekul," *J. ILMU DASAR*, vol. 17, no. 1, pp. 19-24, 2016.
- [18] P. Hartina, S. W. Suciati, A. Supriyanto, and Junaidi "Simulasi dinamika molekul berbasis kode LAMMPS untuk mengkaji titik leleh bahan besi (Fe), timbal (Pb) dan aluminium (Al)," *J. Energy, Mater. Instrum. Technol.*, vol. 1, no. 2, pp. 64-74, 2020.
- [19] D. Y. Sun and M. Asta "Crystal-melt interfacial free energies and mobilities in fcc and bcc Fe," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 69, no. 17, pp. 1-9, 2004.
- [20] Y. Shibuta, S. Takamoto, and T. Suzuki, "A molecular dynamics study of the energy and structure of the symmetric tilt boundary of iron," *ISIJ Int.*, vol. 48, no. 11, pp. 1582-1591, 2008.