

Muhammad Akbar Elnanda Dzulfikar. 081411333015, 2018. **Simulasi Komputasi Dinamika Molekul untuk Menentukan Modulus Bulk dan Konstanta Elastik Material Mg-xZn**. Skripsi S1 fisika ini di bawah bimbingan Drs. Adri Supardi, MS. dan Dyah Hikmawati, S.Si, M.Si, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya.

Abstrak

Telah dilakukan penelitian berupa simulasi komputasi dinamika molekul dengan metode mekanika klasik pada paduan Mg-xZn menggunakan perangkat lunak LAMMPS. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui struktur Mg-xZn setelah diberi perlakuan temperatur beserta sifat mekaniknya. Potensial yang digunakan pada simulasi ini adalah potensial EAM dan SW. Struktur Mg-xZn sebelum perlakuan temperatur adalah HCP. Sifat mekanik yang ditinjau meliputi konstanta elastik dan modulus bulk. Simulasi perlakuan temperatur dilakukan sebelum simulasi sifat mekanik dengan melakukan simulasi proses pemanasan – pendinginan pada struktur material yang telah ditentukan. Nilai konstanta elastik akan semakin tinggi pada Mg-xZn dengan persen berat Zn yang semakin rendah. Nilai konstanta elastik perlakuan titik leleh lebih tinggi daripada perlakuan *sintering*. Konstanta elastik dengan nilai yang cukup mendekati untuk sifat mekanik adalah Mg-7Zn dengan perlakuan *sintering* dengan nilai konstanta elastik C_{11} , C_{12} dan C_{44} berturut-turut bernilai 34,05 GPa, 12,79 GPa, dan 1,33 GPa.

Kata Kunci : Dinamika Molekul, Mg-xZn, LAMMPS, Modulus Bulk, dan Konstanta Elastik.

Muhammad Akbar Elnanda Dzulfikar. 081411333015, 2018. **Molecular Dynamics Simulation to Find Bulk Modulus and Elastic Constant from Mg-xZn**. This physics essay under guidance of Drs. Adri Supardi, MS. and Dyah Hikmawati, S.Si, M.Si, Faculty of Science and Technology, University of Airlangga, Surabaya.

Abstract

The research of molecular dynamic simulation by classical mechanic method on Mg-xZn has been done. The goal of this research are to find out Mg-xZn's structure after it's been given temperature treatment and how it's mechanical properties. Potential which been used are EAM and SW potential. The structure of Mg-xZn before temperature treatment was HCP. Mechanical properties which observed are elastic constant and bulk modulus. Temperature treatment simulation was conducted before mechanical properties simulation is done by doing heating-cooling proses simulation on the fixed material's structure. Elastic constant value on Mg-xZn which has low percentage of Zn is higher than the one which has high percentage. Elastic constant value from melting treatment is higher than sintering treatment. Elastic constant that it's value is approaching good mechanical properties is sintering treatment Mg-7Zn which has C_{11} , C_{12} , and C_{44} is 34,05 GPa, 12,79 GPa, and 1,33 GPa respectively.

Keyword : Molecular Dynamic, Mg- xZn Alloy, LAMMPS, Bulk Modulus, and Elastic Constant.