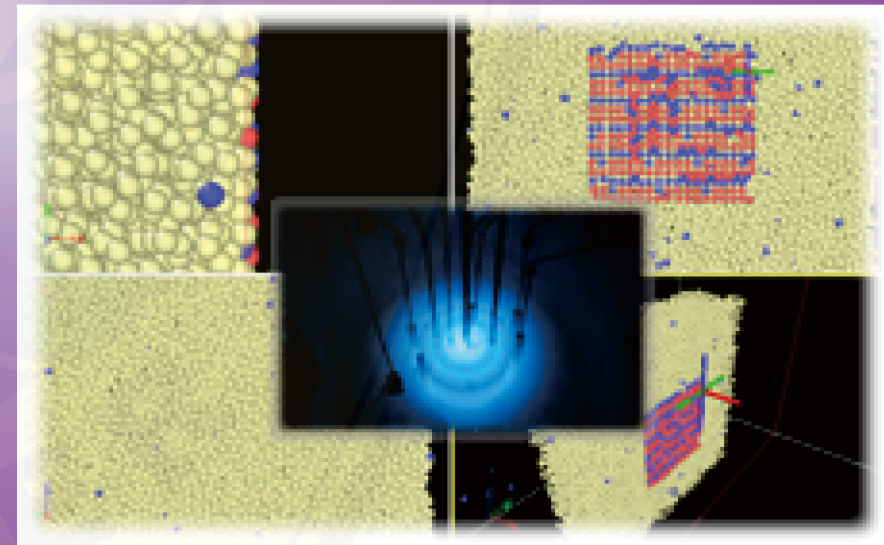


Metode Simulasi Dinamika Molekul:

Aplikasi Untuk Riset Material Nuklir

Artoto Arkundato
Fiber Monado
Zaki Su'ud

Seri Metode Simulasi Dinamika Molekul



Anggota APPTI No. 036/KTA/APPT/2012

Anggota IKAPI No. 127/JTI/2015


Jember University Press
Jl. Kalimantan 37 Jember 68121
Telp. 0331-330224, psw. 0319
E-mail: upt-penerbitan@unej.ac.id



Membangun Generasi
Menuju Insan Berprestasi

Metode Simulasi Dinamika Molekul:

Aplikasi untuk Riset Material Nuklir



Artoto Arkundato
Fiber Monado
Zaki Su'ud

**UPT PERCETAKAN & PENERBITAN
UNIVERSITAS JEMBER**

Metode

Simulasi Dinamika Molekul:

Aplikasi untuk Riset Material Nuklir

Penulis:

Artoto Arkundato
Fiber Monado
Zaki Su'ud

Desain Sampul dan Tata Letak

Noerkoentjoro W.D.
Fatkhur Rokhim

ISBN: 978-602-5617-71-3

Copy Right © 2018

Penerbit:

UPT Percetakan & Penerbitan Universitas Jember

Redaksi:

Jl. Kalimantan 37
Jember 68121
Telp. 0331-330224, Voip. 00319
e-mail: upt-penerbitan@unej.ac.id

Distributor Tunggal:

UNEJ Press
Jl. Kalimantan 37
Jember 68121
Telp. 0331-330224, Voip. 0319
e-mail: upt-penerbitan@unej.ac.id

Hak Cipta dilindungi Undang-Undang. Dilarang memperbanyak tanpa ijin tertulis dari penerbit, sebagian atau seluruhnya dalam bentuk apapun, baik cetak, *photoprint*, maupun *microfilm*.

KATA PENGANTAR PAKAR SEBIDANG ILMU

Pertama tama saya mengucapkan selamat kepada penulis (AFZ) yang sudah berhasil menyelesaikan buku “Metode Simulasi Dinamika Molekul: Aplikasi untuk Riset Material Nuklir”. Buku ini merupakan buku yang sangat berguna bagi siapa saja yang tertarik pada riset komputasi dinamika molekul dan penerapannya khususnya pada fenomena korosi material nuklir.

Di dalam buku ini, penulis secara sistematis menjelaskan bagaimana program Moldy dapat digunakan untuk menjalankan riset dibidang material nuklir. Penulis dapat memprediksi besaran-besaran terkait dan kemudian menawarkan solusi pada problem korosi terkait. Sangat jarang sebuah buku dituliskan secara gamblang, bagaimana secara teori dapat diprediksi sebuah fenomena yang secara eksperimen cukup sulit. Juga sangat jarang buku riset dalam bidang komputasi ditulis di Indonesia.

Dari sisi isi, materi yang disajikan dalam buku ini cukup mendalam jika tidak bisa dikatakan sangat dalam, karena bab demi Bab disusun dengan tahapan yang urut dan rinci dari teori dinamika molekul, software ayng digunakan untuk simulasi, cara analisis dan dengan contoh-contoh yang memang diarahkan untuk riset komputasi. Buku ini juga disusun sangat detail untuk mampu menyampaikan gagasan kepada pembaca yang mulai tertarik menekuni bidang komputasi karena disusun dari yang mudah ke yang sulit serta dengan ilustrasi gambar, tabel, grafik yang memadai, meskipun sebagai buku edisi pertama tentunya masih ada kekurangan di sana sini.

Menurut pendapat saya, buku ini dapat memberikan inspirasi dan manfaat dalam menunjang riset dibidang Fisika *condensed matter* berbasis komputasi. Akhir kata, saya mengucapkan terima kasih sudah diberi kesempatan untuk membaca dan menelaah buku ini, dan semoga buku ini dapat memberikan wawasan, khazanah baru, dan inspirasi bagi mahasiswa atau siapa saja yang sedang menekuni riset Fisika khususnya bidang *komputasi material terapan*.

Jakarta, Oktober 2018



Dr. Iwan Sugihartono, MSc.
Grup Fisika Semikonduktor dan Nano-Struktur
Jurusan Fisika FMIPA Universitas Negeri Jakarta
Email: isugihar@gmail.com

PRAKATA

Penulisan dan penerbitan buku-buku hasil penelitian di Indonesia pada saat ini masih relatif sedikit. Padahal untuk menumbuhkan semangat meneliti dan meningkatkan kemampuan meneliti sangat dibutuhkan buku-buku tersebut. Sejalan dengan ini maka demi kemajuan dan kemandirian bangsa Indonesia tentu saja dibutuhkan peneliti-peneliti (baru) yang mampu menghasilkan hasil-hasil penelitian bermutu dan bernilai HAKI.

Buku ini ditulis berdasarkan hasil-hasil penelitian di bidang komputasi dinamika molekul yang dikhususkan pada topik korosi pada logam cair dan pencegahannya. Sebagai gambaran sekilas, pengembangan sains dan teknologi reaktor cepat masa depan sangat memerlukan dukungan hasil-hasil riset dibidang ini. Salah satu kendala pengembangan reaktor nuklir tersebut adalah masih adanya dampak korosi pada material yang digunakan seperti baja akibat berinteraksi dengan logam cair timbal bismuth. Dengan dilakukannya riset dibidang ini maka berbagai fenomena dapat dianalisis dan mitigasi korosi dapat dipelajari.

Buku ini dikhususkan untuk peneliti dan mahasiswa yang tertarik pada topik aplikasi metode dinamika molekul untuk mengkaji fenomena korosi logam cair suhu tinggi. Buku ini disusun dengan sistematikasebagai berikut:

Bab I – Energi Nuklir dan Riset Reaktor: Pada Bab I ini akan dijelaskan latar belakang pentingnya riset dibidang korosi logam cair.

Bab – II – Program MOLDY: Pada Bab II ini akan dijelaskan bagaimana program MOLDY dapat digunakan sebagai alat utama untuk riset dinamika molekul.

Bab III – Simulasi Dinamika Molekul: Pada Bab III ini akan dijelaskan kajian teori mengenai simulasi dinamika molekul.

Bab IV – Simulasi Korosi Besi Dalam LBE. Pada Bab IV ini simulasi dinamika molekul diterapkan untuk topik korosi besi dalam logam cair PbBi.

Bab V – Simulasi Penghambatan Korosi: Pada Bab V ini akan dibahas bagaimana proses korosi besi dapat dihambat dengan menganalisis hasil simulasi dinamika molekul

Buku teks hasil penelitian ini dapat disusun atas bantuan dari Hibah Penelitian Dasar Kementristek Dikti 2017-2018. Oleh karena itu penulis sangat berterima kasih atas dukungan pembiayaan penulisan dan penerbitan buku ini. Tak lupa penulis juga berterima kasih kepada semua pihak yang telah membantu penyelesaian penulisan dan penerbitan buku ini.

Jember, Kampus Tegal Boto, 10 Oktober 2018

Penulis
A.F.Z

DAFTAR ISI

Sampul.....	i
Informasi Penerbit.....	ii
Kata Pengantar Pakar Sebidang Ilmu.....	iii
Prakata.....	iv
Daftar Isi.....	vi
Kronologis Perkembangan Metode Dinamika Molekul.....	viii
Bab 1 Energi Nuklir dan Riset Reaktor.....	1
Pendahuluan.....	2
1.1 PLTN di Dunia	3
1.2 Problem Korosi Pada Feaktor Cepat.....	17
1.3 Simulasi Korosi dan Penghambatannya.....	19
DAFTAR PUSTAKA.....	20
Bab II Program Moldy.....	23
Pendahuluan.....	24
2.1 Program Simulasi Dinamika Molekul Moldy.....	24
2.2 Instalasi Moldy.....	27
2.3 Menjalankan Moldy.....	27
2.4 File Input Moldy.....	28
2.5 Paramater Dalam File Kontrol Moldy.....	32
2.6 Format Penulisan File Spesifikasi.....	34
2.7 Simulasi dari File Restart.....	37
2.8 Rcut-off	37
2.9 Pesan Dan Error.....	38
2.10 Utilitis MOLDY.....	38
2.11 Contoh File Input.....	43
2.12 Time Step.....	44
2.13 Membangun Konfigurasi Arom-Atom Sistem Material.....	46
2.14 Pengembangan Program Moldy.....	59
DAFTAR PUSTAKA.....	59
Bab III Metode Dinamika Molekul.....	60
Pendahuluan.....	61
3.1 Persamaan Gerak.....	63

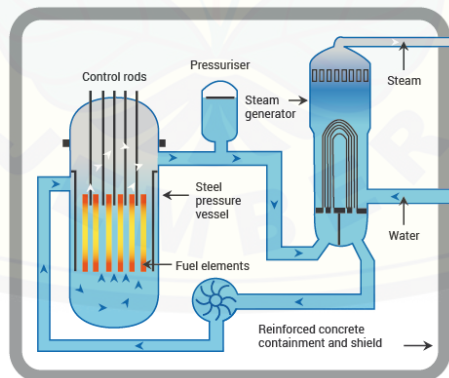
3.2	Potensial Interaksi.....	64
3.3	Satuan Tereduksi.....	68
3.4	Solusi Numerik Persamaan Gerak.....	68
3.5	Mekanika Statistik.....	71
3.6	Simulasi Korosi Baja Dalam Logam Cair.....	72
3.7	Metode CNA.....	77
	DAFTAR PUSTAKA.....	78
Bab IV	Simulasi Korosi Besi Dalam LBE.....	81
	Pendahuluan.....	82
4.1	Merancang Simulasi Korosi.....	82
4.2	Simulasi Material Logam Cair.....	85
4.3	Simulasi Material.....	87
4.4	Simulasi Korosi Besi Dalam Logam Cair.....	98
4.5	Perhitungan Koefisien Difusi Besi dalam LBE.....	107
	DAFTAR PUSTAKA.....	109
Bab V	Simulasi Penghambatan Korosi.....	111
	Pendahuluan.....	112
5.1	Konsentrasi Oksigen Yang disimulasikan.....	112
5.2	Penghambatan Korosi Besi dalam PbBi.....	129
5.3	Kebergantungan Suhu Koefisien Difusi.....	129
5.4	Analisis Struktur Besi dengan CNA.....	134
	DAFTAR PUSTAKA.....	135
	LAMPIRAN	
	Tabel Periodik Unsur.....	xii
	Tabel Massa Atom.....	xii
	Tabel Konstanta Kisi.....	xiv
	Tabel Titik leleh Logam.....	xvi
	Tabel Konversi Energi.....	xviii
	Tabel Konstanta Universal.....	xx
	Biografi Penulis.....	xxi
	Ringkasan Buku.....	xxv

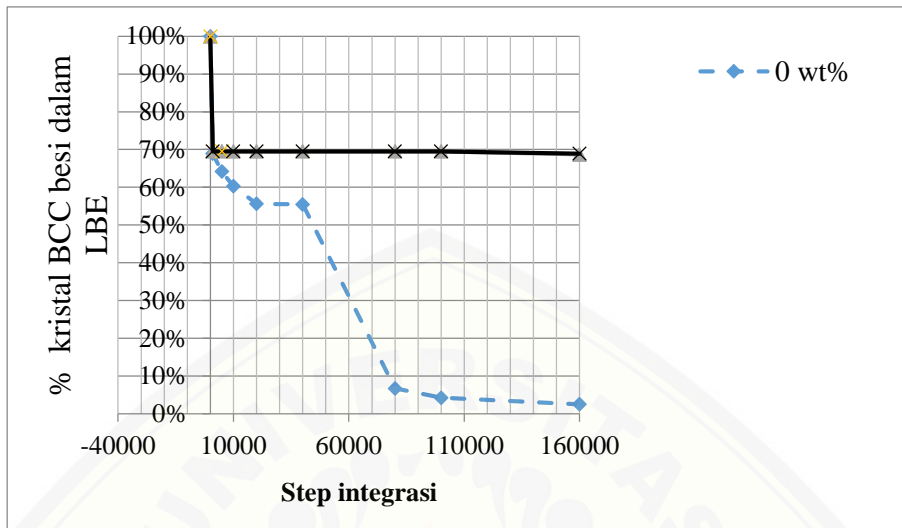
KRONOLOGI METODE DINAMIKA MOLEKUL

- 1900 Konsep medan gaya dalam analisis spektroskopi
- 1929 Potensial atom (Morse dan Lennard-Jones)
- 1937 Dispersi London
- 1946 Mekanika Molekuler
- 1953 Simulasi Monte Carlo
- 1957 Simulasi Dinamika Molekul Hard Sphere (Alder dan Wainwright)
- 1964 Simulasi Dinamika Molekul Gas Argon potensial Lennard-Jones (A Rahman)
- 1967 Algoritma Verlet oleh Loup Verlet
- 1970 Simulasi Liquid. Pengembangan potensial Born-Mayer-Huggins, BMH)
- 1976 Simulasi SiO₂ (silica) dengan potensial BMH
- 1980 Algoritma Anderson Constant-Pressure
Algoritma Rahman Parrinello Constant-Pressure
- 1985 Metode Dinamika Molekul Kuantum Car-Parrinello (CPMD) dengan DFT
- 1990 Potensial Interaksi Stillinger-Weber
- 2000 - Software Dinamika Molekul Paralel: MOLLY, NAMD, OVITO, LAMMPS, PACKMOL dan lain-lain

BAB 1

ENERGI NUKLIR DAN RISET REAKTOR





Gambar 5.7 Prosentase jumlah kristal BCC besi dalam LBE.

Terlihat dari gambar di atas jumlah kristal bcc tersisa dengan adanya pemberian oksigen 0,1156 wt% mampu dipertahankan 70% daripada tanpa pemberia oksigen.

DAFTAR PUSTAKA

- Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani (2012): Disertasi: Studi penghambatan korosi logam besi dalam lingkungan pendingin reaktor cepat berbahan Pb dan PbBi cair menggunakan metode simulasi dinamika molekul, Fisika, FMIPA, ITB
- Rivai, A.K. dan Takahashi, M. (2010) Corrosion Characteristics Of Materials In Pb–Bi Under Transient Temperature Conditions, *J. Nucl. Mater.*, Vol. **398**, pp.139.
- Zhang, J. dan Li, N. (2008) : Review of The Studies on Fundamental Issues In LBE Corrosion , *J. Nucl. Mater.*, Vol. 373, pp. 351-377.



TABEL MASSA ATOM

[<http://periodictable.com/Properties/A/AtomicMass.an.html>]

Hydrogen	1.008	Niobium	92.90637	Thallium	204.38
Helium	4.002602	Molybdenum	95.95	Lead	207.2
Lithium	6.94	Technetium	97	Bismuth	208.9804
Beryllium	9.0121831	Ruthenium	101.07	Polonium	209
Boron	10.81	Rhodium	102.9055	Astatine	210
Carbon	12.011	Palladium	106.42	Radon	222
Nitrogen	14.007	Silver	107.8682	Francium	223
Oxygen	15.999	Cadmium	112.414	Radium	226
Fluorine	18.998403163	Indium	114.818	Actinium	227
Neon	20.1797	Tin	118.71	Thorium	232.0377
Sodium	22.98976928	Antimony	121.76	Protactinium	231.03588
Magnesium	24.305	Tellurium	127.6	Uranium	238.02891
Aluminum	26.9815385	Iodine	126.90447	Neptunium	237
Silicon	28.085	Xenon	131.293	Plutonium	244
Phosphorus	30.973761998	Cesium	132.905451 96	Americium	243
Sulfur	32.06	Barium	137.327	Curium	247
Chlorine	35.45	Lanthanum	138.90547	Berkelium	247
Argon	39.948	Cerium	140.116	Californium	251
Potassium	39.0983	Praseodymium	140.90766	Einsteinium	252
Calcium	40.078	Neodymium	144.242	Fermium	257
Scandium	44.955908	Promethium	145	Mendelevium	258
Titanium	47.867	Samarium	150.36	Nobelium	259
Vanadium	50.9415	Europium	151.964	Lawrencium	262
Chromium	51.9961	Gadolinium	157.25	Rutherfordium	267
Manganese	54.938044	Terbium	158.92535	Dubnium	270
Iron	55.845	Dysprosium	162.5	Seaborgium	269
Cobalt	58.933194	Holmium	164.93033	Bohrium	270
Nickel	58.6934	Erbium	167.259	Hassium	270
Copper	63.546	Thulium	168.93422	Meitnerium	278
Zinc	65.38	Ytterbium	173.045	Darmstadtium	281
Gallium	69.723	Lutetium	174.9668	Roentgenium	281

Germanium	72.63	Hafnium	178.49	Copernicium	285
Arsenic	74.921595	Tantalum	180.94788	Nihonium	286
Selenium	78.971	Tungsten	183.84	Flerovium	289
Bromine	79.904	Rhenium	186.207	Moscovium	289
Krypton	83.798	Osmium	190.23	Livermorium	293
Rubidium	85.4678	Iridium	192.217	Tennessine	293
Strontium	87.62	Platinum	195.084	Oganesson	294
Yttrium	88.90584	Gold	196.966569		
Zirconium	91.224	Mercury	200.592		

TABEL KONSTANTA KISI

[<http://periodictable.com/Properties/A/LatticeConstants.html>]

Hydrogen	470, 470, 340 pm	Neodymium	365.8, 365.8, 1179.9 pm
Helium	424.2, 424.2, 424.2 pm	Promethium	N/A
Lithium	351, 351, 351 pm	Samarium	362.1, 362.1, 2625 pm
Beryllium	228.58, 228.58, 358.43 pm	Europium	458.1, 458.1, 458.1 pm
Boron	506, 506, 506 pm	Erbolinium	363.6, 363.6, 578.26 pm
Carbon	246.4, 246.4, 671.1 pm	Terbium	360.1, 360.1, 569.36 pm
Nitrogen	386.1, 386.1, 626.5 pm	Dysprosium	359.3, 359.3, 565.37 pm
Oxygen	540.3, 342.9, 508.6 pm	Holmium	357.73, 357.73, 561.58 pm
Fluorine	550, 328, 728 pm	Erbium	355.88, 355.88, 558.74 pm
Neon	442.9, 442.9, 442.9 pm	Thulium	353.75, 353.75, 555.46 pm
Sodium	429.06, 429.06, 429.06 pm	Ytterbium	548.47, 548.47, 548.47 pm
Magnesium	320.94, 320.94, 521.08 pm	Lutetium	350.31, 350.31, 555.09 pm
Aluminum	404.95, 404.95, 404.95 pm	Hafnium	319.64, 319.64, 505.11 pm
Silicon	543.09, 543.09, 543.09 pm	Tantalum	330.13, 330.13, 330.13 pm
Phosphorus	1145, 550.3, 1126.1 pm	Tungsten	316.52, 316.52, 316.52 pm
Sulfur	1043.7, 1284.5, 2436.9 pm	Rhenium	276.1, 276.1, 445.6 pm
Chlorine	622.35, 445.61, 817.85 pm	Osmium	273.44, 273.44, 431.73 pm
Argon	525.6, 525.6, 525.6 pm	Iridium	383.9, 383.9, 383.9 pm
Potassium	532.8, 532.8, 532.8 pm	Platinum	392.42, 392.42, 392.42 pm
Calcium	558.84, 558.84, 558.84 pm	Gold	407.82, 407.82, 407.82 pm
Scandium	330.9, 330.9, 527.33 pm	Mercury	300.5, 300.5, 300.5 pm

Titanium	295.08, 295.08, 468.55 pm	Thallium	345.66, 345.66, 552.48 pm
Vanadium	303, 303, 303 pm	Lead	495.08, 495.08, 495.08 pm
Chromium	291, 291, 291 pm	Bismuth	667.4, 611.7, 330.4 pm
Manganese	891.25, 891.25, 891.25 pm	Polonium	335.9, 335.9, 335.9 pm
Iron	286.65, 286.65, 286.65 pm	Astatine	N/A
Cobalt	250.71, 250.71, 406.95 pm	Radon	N/A
Nickel	352.4, 352.4, 352.4 pm	Francium	N/A
Copper	361.49, 361.49, 361.49 pm	Radium	514.8, 514.8, 514.8 pm
Zinc	266.49, 266.49, 494.68 pm	Actinium	567, 567, 567 pm
Gallium	451.97, 766.33, 452.6 pm	Thorium	508.42, 508.42, 508.42 pm
Germanium	565.75, 565.75, 565.75 pm	Protactinium	392.5, 392.5, 323.8 pm
Arsenic	375.98, 375.98, 1054.75 pm	Uranium	285.37, 586.95, 495.48 pm
Selenium	905.4, 908.3, 1160.1 pm	Neptunium	666.3, 472.3, 488.7 pm
Bromine	672.65, 464.51, 870.23 pm	Plutonium	618.3, 482.2, 1096.3 pm
Krypton	570.6, 570.6, 570.6 pm	Americium	346.81, 346.81, 1124.1 pm
Rubidium	558.5, 558.5, 558.5 pm	Curium	349.6, 349.6, 1133.1 pm
Strontium	608.49, 608.49, 608.49 pm	Berkelium	341.6, 341.6, 1106.9 pm
Yttrium	364.74, 364.74, 573.06 pm	Californium	338, 338, 1102.5 pm
Zirconium	323.2, 323.2, 514.7 pm	Einsteinium	N/A
Niobium	330.04, 330.04, 330.04 pm	Fermium	N/A
Molybdenum	314.7, 314.7, 314.7 pm	Mendelevium	N/A
Technetium	273.5, 273.5, 438.8 pm	Nobelium	N/A
Ruthenium	270.59, 270.59, 428.15 pm	Lawrencium	N/A
Rhodium	380.34, 380.34, 380.34 pm	Rutherfordium	N/A
Palladium	389.07, 389.07, 389.07 pm	Dubnium	N/A
Silver	408.53, 408.53, 408.53 pm	Seaborgium	N/A
Cadmium	297.94, 297.94, 561.86 pm	Bohrium	N/A
Indium	325.23, 325.23, 494.61 pm	Hassium	N/A
Tin	583.18, 583.18, 318.19 pm	Meitnerium	N/A
Antimony	430.7, 430.7, 1127.3 pm	Darmstadtium	N/A
Tellurium	445.72, 445.72, 592.9 pm	Roentgenium	N/A
Iodine	718.02, 471.02, 981.03 pm	Copernicium	N/A
Xenon	620.23, 620.23, 620.23 pm	Nihonium	N/A
Cesium	614.1, 614.1, 614.1 pm	Flerovium	N/A

Barium	502.8, 502.8, 502.8 pm	Moscovium	N/A
Lanthanum	377.2, 377.2, 1214.4 pm	Livermorium	N/A
Cerium	362, 362, 599 pm	Tennessine	N/A

TABEL TITIK LELEH LOGAM

[<https://www.steelforge.com/literature/metal-melting-ranges/>]

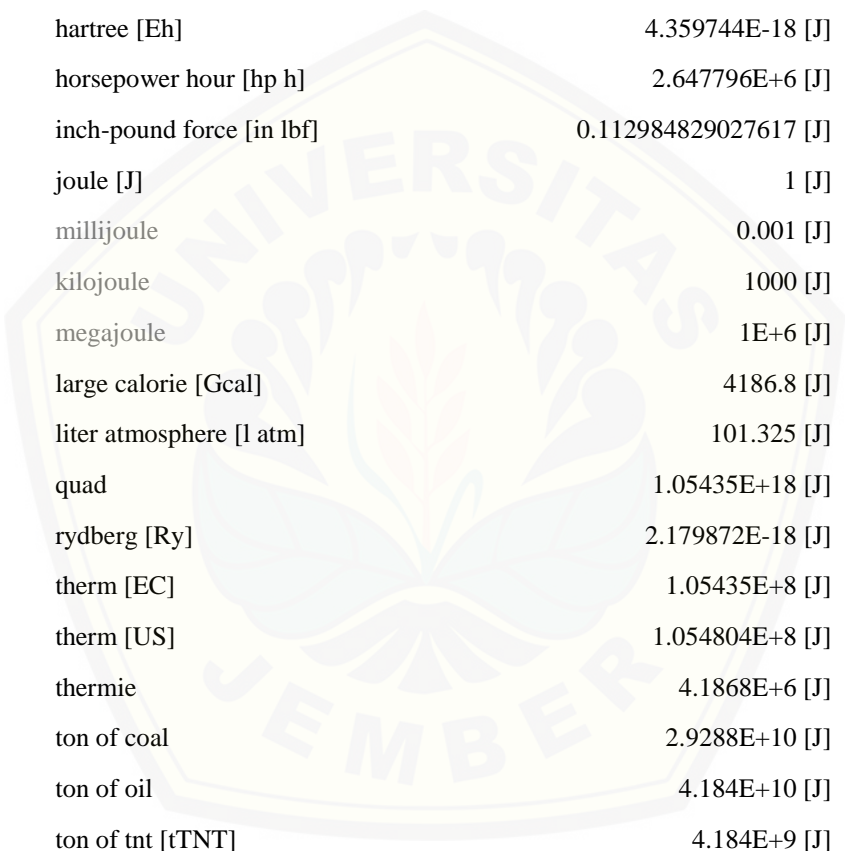
LOGAM	TITIK LELEH	
	(°C)	(°F)
Admiralty Brass	900 – 940	1650 – 1720
Aluminum	660	1220
Aluminum Alloy	463 – 671	865 – 1240
Aluminum Bronze	600 – 655	1190 – 1215
Babbitt	249	480
Beryllium	1285	2345
Beryllium Copper	865 – 955	1587 – 1750
Bismuth	271.4	520.5
Brass, Red	1000	1832
Brass, Yellow	930	1710
Cadmium	321	610
Chromium	1860	3380
Cobalt	1495	2723
Copper	1084	1983
Gold, 24K Pure	1063	1945
Hastelloy C	1320 – 1350	2410 – 2460
Inconel	1390 – 1425	2540 – 2600
Incoloy	1390 – 1425	2540 – 2600
Iron, Wrought	1482 – 1593	2700 – 2900
Iron, Gray Cast	1127 – 1204	2060 – 2200
Iron, Ductile	1149	2100
Lead	327.5	621

LOGAM	TITIK LELEH	
	(°C)	(°F)
Magnesium	650	1200
Magnesium Alloy	349 – 649	660 – 1200
Manganese	1244	2271
Manganese bronze	865 – 890	1590 – 1630
Mercury	-38.86	-37.95
Molybdenum	2620	4750
Monel	1300 – 1350	2370 – 2460
Nickel	1453	2647
Niobium (Columbium)	2470	4473
Palladium	1555	2831
Phosphorus	44	111
Platinum	1770	3220
Red Brass	990 – 1025	1810 – 1880
Rhenium	3186	5767
Rhodium	1965	3569
Selenium	217	423
Silicon	1411	2572
Silver, Pure	961	1761
Silver, Sterling	893	1640
Carbon Steel	1425 – 1540	2600 – 2800
Stainless Steel	1510	2750
Tantalum	2980	5400
Thorium	1750	3180
Tin	232	449.4
Titanium	1670	3040
Tungsten	3400	6150
Yellow Brass	905 – 932	1660 – 1710
Zinc	419.5	787

TABEL KONVERSI ENERGI

[https://www.smartconversion.com/unit_conversion/energy_unit_conversion_table.aspx]

atomic unit of energy [Eh]	4.359744E-18 [J]
barrel of oil	6.117863E+9 [J]
BTU [59°F, British Thermal Unit]	1054.804 [J]
BTU [international, British Thermal Unit]	1055.05585262 [J]
BTU [ISO, British Thermal Unit]	1054.5 [J]
BTU [mean, British Thermal Unit]	1055.87 [J]
BTU [thermochemical, British Thermal Unit]	1054.35026444 [J]
calorie [cal][15°C]	4.1852 [J]
calorie [cal][20°C]	4.182 [J]
calorie [cal][international]	4.1868 [J]
kilocalorie	4186.8 [J]
calorie [cal][international 1929]	4.18604651162791 [J]
calorie [cal][international 1956]	4.1868 [J]
calorie [cal][mean]	4.19 [J]
calorie [cal][thermochemical]	4.184 [J]
celsius heat unit [CHU][thermochemical]	1899.100534716 [J]
cubic foot of atmosphere	2869.2044809344 [J]
cubic foot of natural gas	1.055056E+6 [J]
cubic meter of atmosphere	1.01325E-4 [J]
cubic yard of atmosphere	7.746852E+4 [J]
electronvolt [eV]	1.602176E-19 [J]
erg [erg][CGS]	1E-7 [J]



foot pound [ft lbf]	1.3558179483314 [J]
foot-pound force [ft lbf]	1.3558179483314 [J]
foot-poundal [ft pdl]	0.0421401100938048 [J]
gallon atmosphere [gal atm][imperial]	460.63256925 [J]
gallon atmosphere [gal atm][US]	383.5568490138 [J]
hartree [Eh]	4.359744E-18 [J]
horsepower hour [hp h]	2.647796E+6 [J]
inch-pound force [in lbf]	0.112984829027617 [J]
joule [J]	1 [J]
millijoule	0.001 [J]
kilojoule	1000 [J]
megajoule	1E+6 [J]
large calorie [Gcal]	4186.8 [J]
liter atmosphere [l atm]	101.325 [J]
quad	1.05435E+18 [J]
rydberg [Ry]	2.179872E-18 [J]
therm [EC]	1.05435E+8 [J]
therm [US]	1.054804E+8 [J]
thermie	4.1868E+6 [J]
ton of coal	2.9288E+10 [J]
ton of oil	4.184E+10 [J]
ton of tnt [tTNT]	4.184E+9 [J]
watt hour [Wh]	3600 [J]

TABEL KONSTANTA UNIVERSAL

[<http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Tables/funcon.html>]

Constant	Symbol	Value
Speed of light	c	$2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$
Planck constant	h	$6.6260755 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
Planck constant	h	$4.1356692 \times 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$
Planck hbar	\hbar	$1.0545727 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$
Planck hbar	\hbar	$6.582121 \times 10^{-16} \text{ eV}\cdot\text{s}$
Gravitation constant	G	$6.67259 \times 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2}$
Boltzmann constant	k	$1.380658 \times 10^{-23} \text{ J/K}$
Boltzmann constant	k	$8.617385 \times 10^{-5} \text{ eV/K}$
Molar gas constant	R	$8.314510 \text{ J/mol}\cdot\text{K}$
Avogadro's number	N_A	$6.0221 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Charge of electron	e	$1.60217733 \times 10^{-19} \text{ C}$
Permeability of vacuum	μ_0	$4\pi \times 10^{-7} \text{ N/A}^2$
Permittivity of vacuum	ϵ_0	$8.854187817 \times 10^{-12} \text{ F/m}$
Coulomb constant	$1/4\pi\epsilon_0 = k$	$8.987552 \times 10^9 \text{ N}\cdot\text{m}^2/\text{C}^2$
Faraday constant	F	96485.309 C/mol
Mass of electron	m_e	$9.1093897 \times 10^{-31} \text{ kg}$
Mass of electron	m_e	$0.51099906 \text{ MeV}/c^2$
Mass of proton	m_p	$1.6726231 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Mass of proton	m_p	$938.27231 \text{ MeV}/c^2$
Mass of neutron	m_n	$1.6749286 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Mass of neutron	m_n	$939.56563 \text{ MeV}/c^2$

Atomic mass unit	u	$1.6605402 \times 10^{-27} \text{ kg}$
Atomic mass unit	u	$931.49432 \text{ MeV} / c^2$
Avogadro's number	N_A	$6.0221367 \times 10^{23} / \text{mol}$
Stefan-Boltzmann constant	σ	$5.67051 \times 10^{-8} \text{ W} / \text{m}^2 \cdot \text{K}^4$
Rydberg constant	R_∞	$10973731.534 \text{ m}^{-1}$
Bohr magneton	μ_B	$9.2740154 \times 10^{-24} \text{ J} / \text{T}$
Bohr magneton	μ_B	$5.788382 \times 10^{-5} \text{ eV} / \text{T}$
Flux quantum	Φ_0	$2.0678338 \times 10^{-15} \text{ T m}^2$
Bohr radius	a_0	$0.529177249 \times 10^{-10} \text{ m}$
Standard atmosphere	atm	101325 Pa
Wien displacement constant	b	$2.897756 \times 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}$

BIOGRAFI PENULIS

(A) **Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Silahir** di Srengat, Blitar, Jawa Timur, pada 25 Desember 1969. Sekolah SD, SMP diselesaikan di Srengat kemudian SMA diselesaikan di kota Blitar, tepatnya di SMAN 1 Blitar. Kemudian melanjutkan kuliah pada Jurusan Fisika, FMIPA, UGM di Yogyakarta. Lulus kuliah S1 dengan menyelesaikan skripsi teori yang berjudul *Aspek Klasik dan Kuantum Optika Nonlinear* dengan pembimbing Prof. Muslim, Phd dan Dra. Zahara, MSc. Setelah lulus kuliah sempat bekerja di dunia Industri di beberapa *multinational company* seperti SINOCA (Eks AT & T), Quantum Matshushita Ltd dan Symens Component Electronics di BATAM. Beberapa tahun di industri kemudian pada tahun 1999 memutuskan untuk kembali ke dunia pendidikan yaitu bekerja di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember. Sejak SMA menyenangi dunia pemrograman komputer dengan bahasa pemrograman yang pertama dipelajari adalah BASIC. Kuliah lanjut S2 diselesaikan di Jurusan Fisika FMIPA ITB pada 2003 dengan mengambil thesis mengenai *metode komputasi Bruckner Hartree-Fock untuk aplikasi problem hamburan nuklir* dengan pembimbing Prof. Zaki Su'ud. Kuliah S3 juga diselesaikan di Jurusan Fisika FMIPA ITB Bandung pada 2012 mengambil topik disertasi *aplikasi metode simulasi dinamika molekul untuk mengamati proses dan penghambatan korosi besi dalam logam cair* dalam reaktor nuklir, dengan promotor utama Prof. Zaki Suud, co-promotor Prof. Mikrajudin Abdullah dan Dr. Widayani.

Pelatihan metode komputasi yang pernah diikuti adalah *Workshop on Material Computation* di JNCASR, Bangalore, India pada 2005 yang diselenggarakan ICTP Italia. Kegiatan *visiting researcher* yang pernah diikuti adalah ke ENEA Roma, Italia pada Oktober-Desember 2010 untuk memperdalam metode simulasi dinamika molekul paralel menggunakan ENEA grid supercomputing dengan supervisor Dr. Massimo Celino. Kegiatan *visiting research* juga kembali diikuti di Lab Theoretical Nanotechnology, ISIR, Osaka University, Nov 2017 - Januari 2018 dengan supervisor prof. Tamio Oguchi. Beberapa publikasi Jurnal Internasional dapat ditelusuri pada www.google.com seperti pada *Annals of Nuclar Energy*, *Turkhing Journal of Physics*, *Journal of Physics: Conference*

Series IOP. Beberapa buku yang sudah diterbitkan adalah Analisis Vektor dan Tensor (UNEJ Press), Fisika Komputasi: Metode Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya (UNEJ Press), Optika (Universitas Terbuka) dll. Artoto Arkundato aktif mengajar beberapa matakuliah seperti Fisika Kuantum, Fisika Inti, Fisika Komputasi, dan Mekanika. Artoto Arkundato juga aktif melakukan riset komputasi material dengan mendapatkan bantuan dana riset dari DRPM DIKTI Republik Indonesia melalui skim hibah PD, hibah Doktor dan hibah Kompetensi.

Penulis menikah dengan Dwi Lestari, dikaruniai 3 orang anak, Khalif Ardian Syah (2000), Nadhif Hasyim Ardian (2006) dan Belva Arawinda Zahra (2015).

(M) Dr. Fiber Monado, S.Si., M.Si

Dr. Fiber Monado, S.Si., M.Si. dilahirkan pada tanggal 23 Februari 1970 dari Ibunda Shofiah dan Ayah Mustopa Hasan, di Palembang, Sumatera Selatan. Ia lulus dari SMA Negeri 8 Palembang pada tahun 1988. Penulis memperoleh gelar Sarjana pada tahun 1994 dari Jurusan Fisika FMIPA Universitas Sriwijaya, gelar Magister dengan kajian khusus Fisika Komputasi pada tahun 2000 di Jurusan Fisika FMIPA Institut Teknologi Bandung, dan Gerlar Doktor Fisika dengan kepakaran Desain Konsep Reaktor Nuklir Generasi Lanjut pada tahun 2014 di tempat yang sama, dengan promotor Prof. Dr. Zaki Su'ud dan co-promotor Prof. Dr. A. Waris dan Dr. Khairul Basar. Sejak tahun 1995 penulis menjadi anggota staf pengajar di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Sriwijaya. Penulis menikah dengan Idha Royani pada tahun 1999 dan mempunyai dua orang anak Nanda Fibryani dan Fida Khansa Zahirah.

(Z) Prof. Zaki Suud adalah dosen aktif Jurusan Fisika FMIPA ITB Bandung. Menyelesaikan S1 pada Jurusan Fisika FMIPA ITB Bandung pada 1986. Studi lanjut S2 pada Magister Engineering, Dept. of Nuclear Engineering, Tokyo Inst. of Technology (1992 sedangkan Studi lanjut S3 pada Dep. of Nuclear Engineering, Tokyo Institute of Technology (TIT) Jepang yang diselesaikan pada 1995. Beberapa matakuliah penting yang pernah berikan adalah Fisika Reaktor, Komputasi Nuklir, Fisika Inti, dan Mekanika Kuantum. Prof. Zaki Suud aktif meneliti desain reaktor nuklir dan telah membimbing serta meluluskan banyak mahasiswa termasuk program doktor di Fisika FMIPA ITB.

PUBLIKASI JURNAL PENULIS

- [1] Arkundato A, Su'ud Z, Abdullah M and Widayani 2010 *AIP Conf. Proc.* **1244** 136-144.
- [2] Arkundato A, Su'ud S, Abdullah M, Widayani S and Celino M 2010 *AIP Conf. Proc.* **1454** 65
- [3] Arkundato A, Su'ud S, Abdullah M and Widayani 2013 *Inter. J. of Applied Phys. and Math.* 2013 **3** 1
- [4] Arkundato A, Su'ud Z, Abdullah M and Widayani 2013 *Turkish J. of Physics* **37** 132-144
- [5] Arkundato A, Su'ud Z, Abdullah M, Widayani and Celino M 2013 *Annals of Nuclear Energy* **62** 298–306
- [6] Arkundato A, Su'ud Z and Monado F 2017 *IOP J. of Phys. Conf. Series*, **853** 012046
- [7] Arkundato A, Su'ud Z, Sudarko, Hasan M and Celino M 2015 *IOP J. of Phys: Conf. Series* **622** 012009

RINGKASAN BUKU

Buku ini merupakan buku hasil penelitian. Khususnya hasil penelitian komputasi material menggunakan metode simulasi dinamika molekul. Program MOLDY digunakan untuk menjalankan simulasi material. Simulasi material yang dilakukan adalah sistem material dengan model besi di dalam timbal cair pada suhu tinggi. Model material ini untuk menggambarkan fenomena korosi baja dalam timbal cair seperti yang dialami baja yang digunakan dalam reaktor nuklir cepat berpendingin logam cair. Dengan simulasi dinamika molekul, ingin diteliti bagaimana mekanisme dan penghambatan korosi baja, ditinjau secara simulasi dengan harapan dapat memahami fenomena korosi yang terjadi. Penerapan metode dinamika molekul sangat powerful untuk memprediksi berbagai besaran fisis penting seperti difusi baja dalam logam cair yang mana secara eksperimen sangat mahal dan sulit.

Program dinamika yang digunakan adalah program MOLDY yang merupakan program open-source yang dikembangkan oleh Prof. Keith Refson dari United Kingdom. Program ini cukup sederhana namun mempunyai hasil hitung yang sangat akurat. Program ini juga dapat dikembangkan sendiri oleh pengguna dengan menambahkan modul-modul yang diperlukan. Program Moldy dibuat dalam bahasa C yang akan memudahkan pengembang menambahkan modul-modul baru kedalam Moldy.

Untuk visualisasi hasil simulasi maha digunakan program OVITO. Program OVITO disediakan gratis di internet dan sangat mudah dilakukan instalasi pada komputer baik instalasi secara online maupun offline. Secara online dapat dilakukan dengan perintah---- \$sudo apt-get install ovito----- untuk komputer dengan sistem operasi Linux Ubuntu. Ovito mempunyai banyak fasilitas penting yang dapat digunakan.

Pada buku ini juga diulas sedikit mengenai program Packmol yang akan memudahkan peneliti dalam merancang file input untuk program dinamika molekul, khususnya dengan Moldy. Program ini juga free yang mudah diunduh dan dilakukan instalasi di komputer.

Buku ini disusun secara *step-by-step* dari dasar sampai penerapannya agar memudahkan pembaca mengikuti bagaimana sebuah penelitian dalam bidang material nuklir di lakukan. Penulis merasa jarang sekali buku hasil penelitian komputasi yang ditulis di Indonesia, sehingga dengan hadirnya buku ini penulis berharap dapat memberi warna baru penelitian bidang komputasi material, khususnya topik riset dinamika molekul untuk material nuklir. Buku ini dapat digunakan oleh peneliti maupun mahasiswa yang ingin mempelajari aplikasi metode dinamika molekul.

