

**LAPORAN AKHIR
PENELITIAN FUNDAMENTAL**

**Investigasi Metode Penghambatan Kerusakan dan Inhibitor Korosi serta
Pemodelan Keramik/Baja Paduan yang Cocok Untuk Aplikasi Dalam
Reaktor Cepat Massa Depan Berpendingin Timbal-Bismuth Cair**



Tahun ke 1 dari rencana 2 Tahun

Ketua TIM Peneliti

Dr. Artoto Arkundato, S.Si, M.Si /NIDN 0025126901

UNIVERSITAS JEMBER

Oktober 2017

**LAPORAN AKHIR
PENELITIAN FUNDAMENTAL**

**Investigasi Metode Penghambatan Kerusakan dan Inhibitor Korosi serta
Pemodelan Keramik/Baja Paduan yang Cocok Untuk Aplikasi Dalam
Reaktor Cepat Massa Depan Berpendingin Timbal-Bismuth Cair**



Tahun ke 1 dari rencana 2 Tahun

Ketua TIM Peneliti

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si. /NIDN 0025126901

UNIVERSITAS JEMBER

Oktober 2017

HALAMAN PENGESAHAN

Judul : Investigasi Metode Penghambatan Kerusakan Baja dan Inhibitor Korosi serta Pemodelan Keramik/Baja Paduan yang Cocok Untuk Aplikasi Dalam Reaktor Cepat Massa Depan Berpendingin Timbal-Bismuth Cair

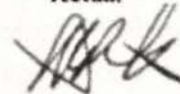
Peneliti/Pelaksana
Nama Lengkap : Dr ARTOTO ARKUNDATO, MSi
Perguruan Tinggi : Universitas Jember
NIDN : 0025126901
Jabatan Fungsional : Lektor
Program Studi : Fisika
Nomor HP : 081220688963
Alamat surel (e-mail) : a.arkundato@unej.ac.id

Anggota (1)
Nama Lengkap : Dr FIBER MONADO S.Si, M.Si
NIDN : 0025027002
Perguruan Tinggi : Universitas Sriwijaya

Institusi Mitra (jika ada)
Nama Institusi Mitra : -
Alamat : -
Penanggung Jawab : -
Tahun Pelaksanaan : Tahun ke 1 dari rencana 2 tahun
Biaya Tahun Berjalan : Rp 65,000,000
Biaya Keseluruhan : Rp 148,730,000



Kota Jember, 30 - 10 - 2017
Ketua.



(Dr ARTOTO ARKUNDATO, MSi)
NIP/NIK 196912251999031001



(Prof. Dr. Achmad Subagio, M.Agr., Ph.D.)
NIP/NIK 196905171992011001

RINGKASAN

Tujuan dari penelitian fundamental ini secara keseluruhan adalah: (1) menemukan *mekanisme kerusakan/korosi/degradasi material baja/keramik* yang digunakan dalam pembangkit listrik tenaga nuklir sekaligus menemukan metode yang tepat untuk penghambatan kerusakan/korosi material tersebut, (2) menemukan *model material baru seperti logam paduan atau keramik dengan komposisi dan struktur yang tepat* yang menghasilkan/mempunyai sifat mekanik yang baik (kuat) dan sifat termodinamik yang diinginkan (solubilitas unsur material nuklir dalam timbal cair rendah) sehingga mampu digunakan/bekerja dalam suhu tinggi reaktor, dan (3) menemukan *model interaksi atom pembentuk material* yang dapat digunakan untuk simulasi material dalam reaktor nuklir. Untuk dapat mencapai tujuan tersebut maka dalam penelitian ini dirumuskan beberapa hal yaitu (1) Apakah mekanisme terjadinya kerusakan/korosi ditinjau secara mikroskopis atau berdasarkan gerakan atom-atom pembentuk bahan? (2) Apa metode yang tepat untuk mengatasi kerusakan/korosi material nuklir tersebut? (3) Apa model material nuklir (baja atau keramik atau material baru yang lain) yang tepat yang memiliki sifat-sifat fisis unggul seperti kuat dan tahan panas? (4) Apa model interaksi antar atom yang cocok untuk kasus kerusakan tersebut? (5) Bagaimana cara mensimulasikan dan menguji metode-metode penghambatan korosi dan model-model material secara atau dengan metode simulasi dinamika molekul (6) Bagaimana menganalisis hasil simulasi dinamika molekul dan bagaimana menghitung besaran-besaran fisis dikaitkan dengan fenomena penghambatan korosi dan sifat-sifat fisis material? Kegiatan **penelitian ini direncanakan 2 (dua) tahun** dengan penekanan: **(1) Tahun pertama (2017)** untuk mempersiapkan data-data input simulasi dan meneliti baja-baja paduan yang mampu bertahan terhadap korosi serta metode penghambatan korosinya, **(2) Tahun kedua (2018)** difokuskan pada meneliti material keramik yang dapat digunakan dalam reaktor dan mampu bekerja dalam kondisi ekstrim suhu tinggi serta mempelajari metode penghambatan korosinya. Sampai tahapan laporan akhir **tahun pertama (2017) penelitian ini maka telah banyak luaran** yang telah dihasilkan sesuai target meliputi: (1) sudah terbit 1 buah artikel di jurnal internasional terindeks scopus Q3 IOP Journal of Physics, (2) sudah diterima (accepted) 1 buah artikel di jurnal internasional terindeks scopus Q4 Pertanika menunggu proses final review, (3) sudah submit (dalam proses review) di jurnal internasional terindeks scopus Q3 Material Research, (4) sudah siap 1 draft artikel jurnal untuk submit ke jurnal internasional terideks scopus Q4 Atom Indonesia, (5) Draft buku teks ber ISSN hasil penelitian selesai 40% yang akan dilengkapi pada akhir tahun kedua, (6) 1 makalah dan pemakalah seminar internasional (7) draft model interaksi antar atom material bahan (8) 1 buah draft model interaksi antar atom yang berpotensi didaftarkan HAKI. Pada tahun pertama ini secara umum sudah berhasil melaksanakan kegiatan penelitian seperti terencana dalam proposal usulan beserta target keluarannya, dan hasil-hasilnya siap digunakan untuk melanjutkan ke penelitian tahun kedua. Pada draft artikel yang akan di submit ke jurnal Atom Indonesia maka peneliti mengajak peneliti dari ITB, BATAN, dan dari USIM Malaysia untuk menjalin kerjasama penelitian agar hasil-hasilnya lebih nyata dan dapat dikembangkan untuk aplikasi yang lebih luas. Pada **tahun kedua penelitian (2018)** maka dengan memanfaatkan metode MD (molecular dynamics) dan DFT (density functional theory) direncanakan focus ke penelitian bahan keramik dan derivasi model potensial interaksi yang akurat untuk material nuklir. Luaran yang direncanakan adalah (1) publikasi dalam jurnal internasional terindeks scopus, (2) pemakalah dalam seminar internasional, (3) terbit buku teks ber-ISSN (4) Draft model interaksi yang dapat didaftarkan HAKI.

Keyword: Reaktor nuklir cepat, korosi baja dalam logam cair, inhibitor, model material, simulasi dinamika molekul

PRAKATA

Alhamdulillah, laporan penelitian akhir hibah fundamental ini telah selesai dibuat. Laporan ini disusun berdasarkan hasil-hasil pelaksanaan kegiatan yang dapat dicapai sesuai dengan target luaran yang dituangkan dalam proposal usulan. Bukti-bukti keberhasilan kegiatan dilampirkan dalam bagian Lampiran laporan ini. Bukti-bukti kegiatan ini disusun secara urut waktu sesuai dengan alur penelitian yang ada dalam proposal penelitian.

Satu hal yang mungkin menjadi perhatian adalah mengenai publikasi Jurnal internasional. Pada proposal direncanakan untuk submit ke salah satu jurnal yaitu Turkish Journal of Physics atau Annals of Nuclear energy. Namun pada pelaksanaannya karena mengingat waktu penelitian yang terbatas dan lama proses penerbitan di jurnal tersebut maka publikasi untuk tahun 2017 sedikit mengalami perubahan, yaitu: 1 hasil penelitian telah terbit di jurnal internasional IOP journal of Physics: Conference Series yang juga terindeks Scopus Q3 (telah terbit 2017), 1 artikel jurnal telah "accepted" untuk publikasi ke jurnal internasional Pertanika (terindeks Scopus), 1 artikel jurnal sudah "submit" ke jurnal internasional bergengsi Material Research yang merupakan jurnal terindeks scopus Q2. Telah siap juga draft artikel jurnal yang akan di submit ke jurnal Atom Indonesia yang merupakan jurnal internasional terindeks scopus.

Akhirnya peneliti mengucapkan banyak terima kasih kepada Kemenristek DIKTI Republik Indonesia, serta Universitas Jember atas segala bantuan yang diberikan sehingga penelitian ini dapat berjalan dengan baik.

Jember, 29 Oktober 2017

Peneliti



Dr. Artoto Arkundato

DAFTAR ISI

Halaman Sampul.....	i
Halaman Pengesahan.....	ii
Ringkasan.....	iii
Prakata.....	iv
Daftar Isi.....	v
DAFTAR TABEL.....	vi
DAFTAR GAMBAR.....	vii
DAFTAR LAMPIRAN.....	viii
Bab 1 Pendahuluan.....	1
Latar Belakang.....	1
Rumusan Masalah.....	3
Luaran Penelitian.....	4
Rencana Target Capaian Tahunan.....	4
Bab 2 Tinjauan Pustaka.....	5
Bab 3 Tujuan dan Manfaat.....	8
Bab 4 Metode Penelitian.....	9
Bab 5 Hasil yang Dicapai.....	11
Bab 6 Rencana Tahapan Berikutnya.....	14
Bab 7 Kesimpulan dan Saran.....	15
PUSTAKA.....	15
LAMPIRAN.....	
Lampiran A.	L1
A.1 Susunan Organisasi Tim Pengusul dan Pembagian Tugas.....	
A.2 BIODATA KETUA dan ANGGOTA TIM PENGUSUL.....	
A.3 Surat pernyataan ketua peneliti dan tim peneliti.....	L9
Lampiran B.	
B1. – B11. Dokumentasi Kegiatan Penelitian.....	L10- L36

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Rencana Target Capaian Tahunan	4
Tabel 2. Rincian Tingkat Kesiapan Teknologi	4

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1.1 Perbandingan bahan bakar pembangkit listrik	1
Gambar 1.2. Alokasi energi listrik nuklir negara-negara besar	2
Gambar 1.3 (kanan) Korosi Besi dalam Logam Cair	2
Gambar 2.1 Workshop Internasional Topik Material Nuklir	5
Gambar 2.2 Snapshot hasil sitasi pada jurnal	5
Gambar 2.3 Road Map penelitian	6
Gambar 4. Diagram Alir Penelitian	8

DAFTAR LAMPIRAN

A.1 IDENTITAS DIRI KETUA PENELITI	L1
A.2 IDENTITAS DIRI ANGGOTA PENELITI	
A.3 Surat pernyataan ketua peneliti dan tim peneliti.	
B.1	L10
B.1.1 Persiapan hardware komputasi.	
B.1.2 Website Lammmps (lammmps.sandia.gov) dan Moldy (ccl.net)	
B2. Jurnal internasional IOP Conf. Series	
B3. Judul Tugas Akhir dan Publikasi Mahasiswa	
B4. Prosedur paralisasi	
B5. Web Packmol dan registrasi	
B6. Aplikasi Packmol	
B7. File Control dan Spesifikasi Untuk MOLDY	
B8. Publikasi di Pertanika	
B9. Publikasi di IOPScience	
B.10 Seminar Internasional	
B11. Website penelitian Dr. Artoto Arkundato	L36

BAB 1. PENDAHULUAN

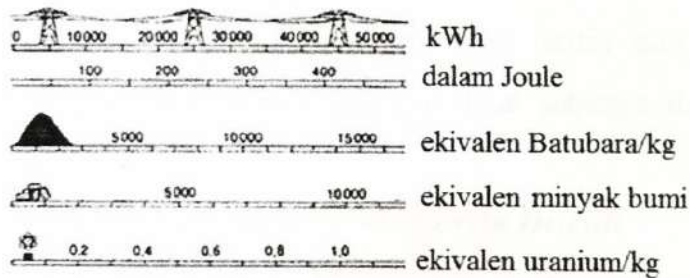
1.1 Latar Belakang

1.1.1 Upaya Membangun PLTN Pertama Indonesia

Berbagai diskusi, kajian, riset pendahuluan sampai merumuskan dalam kebijakan menyangkut pemanfaatan energi nuklir di Indonesia telah berlangsung cukup lama. Undang-Undang No. 10/1997 telah pula ada untuk memberi *payung hukum* pembangunan Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir (PLTN) di Indonesia¹⁾. Secara politik pembangunan PLTN juga sudah lebih diterima oleh DPR oleh karena itu tugas BATAN, BAPETEN dan pihak-pihak terkait perlu banyak melakukan *persiapan* yang serius agar PLTN pertama di bumi Indonesia dapat segera diwujudkan. Khususnya pihak institusi perguruan tinggi dapat mempersiapkan berbagai *aspek sains dan teknis* rancang bangun PLTN melalui riset-riset yang komprehensif, roadmap yang jelas dan realistis.

1.1.2 Perlu dan Ekonomiskah PLTN?

Bagaimana jika dibandingkan dengan pembangkit listrik yang sudah ada seperti PLTD (Diesel) yang memerlukan batubara? Pemanfaatan nuklir menjadi efisien karena hanya memerlukan bahan bakar yang sangat sedikit untuk menghasilkan jumlah listrik yang setara.

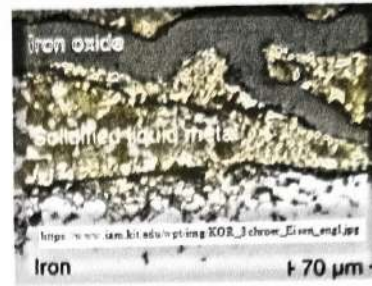


Gambar 1.1 Perbandingan kebutuhan bahan bakar pembangkit listrik¹⁾

Dapat kita lihat pada Gambar 1 bahwa pemanfaatan energi nuklir sangat efisien untuk menghasilkan energi listrik dari konversi batubara 15 ton ~ sama dengan 1 kg Uranium. Hal inilah yang menjadikan negara-negara maju berlomba-lomba melakukan riset dibidang nuklir untuk kesejahteraan yaitu listrik. Pada tahun 2004 di dunia telah terdapat 441 unit PLTN dengan kapasitas pembangkitan daya 363 GW, sementara 30 buah PLTN sedang dalam tahap pembangunan. Saat ini sumber bahan bakar uranium atau thorium di Indonesia diperkirakan sebesar 140.000 ton. Dengan demikian, Indonesia bukan hanya merupakan negara yang siap menjadi negara dengan ketahanan energi (memenuhi kebutuhan sendiri) yang kuat selama lebih dari 1.000 tahun namun juga akan mampu memasok energi listrik secara internasional.

1) <http://www.alpensteel.com/article/124-111-energi-nuklir--pltn/781--rencana-bangun-pltn-pertama-di-indonesia>

Sebagai informasi sekarang ini kita mengimpor listrik dari Malaysia untuk memenuhi kebutuhan listrik di 6 wilayah di Kalimantan Barat. Tentunya kita tidak ingin hal ini terus terjadi¹⁾. Pada kenyataannya negara-negara maju terus mengembangkan industri berbasis PLTN²⁾ seperti statistik berikut.



Gambar 1.2. (kiri): Alokasi energi listrik nuklir negara-negara besar
Gambar 1.3 (kanan) Korosi Besi dalam Logam Cair

1.1.3 PLTN Massa Depan (Generasi IV)

Reaktor nuklir massa depan didesain untuk mampu menerapkan sistem *inhrent safety* (keselamatan melekat) sehingga jika ada kerusakan dalam reaktor karena suatu sebab seperti gempa bumi atau anomali yang lain maka reaktor dapat mematikan dirinya sendiri secara otomatis tanpa harus dimatikan secara manual. Rancangan reaktor ini misalnya pada **reaktor cepat berpendingin logam cair**³⁾. Reaktor cepat jenis ini mampu dirancang dalam bentuk modular sehingga cocok untuk kawasan Indonesia yang terdiri dari banyak pulau, dapat dibawa oleh kapal laut, kapal selam, atau kendaraan darat sehingga dapat mudah dibawa ke tempat yang memerlukan.

1.1.4 Permasalahan Pengembangan Reaktor yang Perlu Diteliti

Istilah pendingin logam cair dimaksudkan media yang digunakan untuk mengalirkan panas melalui sistem pipa baja di dalam reaktor menuju tungku air untuk menghasilkan uap air pemutar turbin. Media pendingin reaktor bermacam-macam dan untuk desain reaktor cepat misalnya logam timbal-bismuth cair. Permasalahan yang ada adalah reaktor ini meski desain reaktor PLTN massa depan karena mampu menerapkan sistem keselamatan melekat namun masih memberikan kelemahan berupa adanya kerusakan/korosi (Gambar 1.3) pada material baja yang digunakan dalam reaktor (Zhang dan Li, 2008). Diperlukan mekanisme/metode penghambatan kerusakan material dan diperlukan ditemukannya material baru yang kuat dan tahan panas. Poin kedua adalah perlunya mencari metode penghambatan kerusakan/korosi yang terjadi dan mencari kandidat material baru yang mampu menahan panas dan kuat.

- 1). <http://finance.detik.com/read/2016/05/12/190700/3209274/1034/ri-impor-listrik-dari-malaysia-esdm-tak-bahayakan-kedaulatan-energi>
- 2). <https://www.euronuclear.org/info/encyclopedia/f/fuelcomparison.htm>
- 3). https://en.wikipedia.org/wiki/Lead-cooled_fast_reactor

Riset-riset eksperimen dan komputasi tentang bidang ini banyak dilakukan khususnya untuk komputasi telah dikerjakan oleh Cai dan Yip (2012). Peneliti (pengusul proposal ini) telah pula melakukan penelitian komputasi pendahuluan secara kontinu sejak tahun 2008 (mahasiswa program doktor ITB) sampai sekarang bersama Prof. Zaki Suud, Prof. Mikrajudin Abdullah dan Dr. Widayani dan hasil-hasilnya sudah banyak yang dipublikasikan baik dalam prosidings maupun jurnal internasional (Arkundato et al, 2010, 2011, 2013, 2015). Meskipun demikian masih banyak pekerjaan rumah yang harus dilakukan untuk mendapatkan hasil-hasil riset yang komprehensif untuk menjelaskan fenomena korosi dan penghambatannya dan mendapatkan model baja/keramik unggul tahan korosi. Hasil-hasil komputasi sebelumnya cukup baik namun demikian masih banyak hal yang harus diteliti berkaitan dengan fenomena korosi dan material nuklir (istilah material yang digunakan dalam aplikasi nuklir) tersebut yang ide-ide risetnya diajukan dalam proposal ini.

1.2 RUMUSAN MASALAH

Untuk dapat mengatasi permasalahan yang telah dipaparkan di atas maka pada penelitian ini ditetapkan rumusan masalah sebagai berikut:

1. Apakah mekanisme terjadinya kerusakan/korosi ditinjau secara mikroskopis?
2. Bagaimana/apa metode yang tepat untuk mengatasi kerusakan/korosi material nuklir tersebut?
3. Apa model material nuklir (baja atau keramik atau material baru yang lain) yang tepat yang memiliki sifat-sifat fisis unggul seperti kuat dan tahan panas?
4. Bagaimana cara mensimulasikan dan menguji metode-metode penghambatan korosi dan model-model material secara atau dengan metode simulasi dinamika molekul
5. Bagaimana menganalisis hasil simulasi dan bagaimana menghitung besaran-besaran fisis dikaitkan dengan fenomena penghambatan korosi dan sifat-sifat fisis material?

1.3 LUARAN/TEMUAN YANG DITARGETKAN

Dari penelitian ini maka ditargetkan dapat menghasilkan luaran berupa:

1. Metode efektif penghambatan korosi baja dalam pendingin logam cair
2. Model material baja paduan yang memiliki sifat-sifat fisis yang unggul yang dapat diaplikasikan dalam reaktor
3. Publikasi paper hasil penelitian dalam bentuk jurnal internasional bereputasi
4. Publikasi paper hasil penelitian dalam bentuk prosidings hasil seminar
5. Buku teks hasil penelitian
6. Judul-judul penelitian yang dapat ditawarkan untuk mahasiswa tugas akhir.

1.3.1 Rencana Target Capaian Tahunan

Tabel 1. Rencana Target Capaian Tahunan

No.	Jenis Luaran	Indikator Capaian		
		TS1	TS+1	TS+2
1	Publikasi Ilmiah	Internasional	Accepted/ Published	Accepted/ Published
		Nasional Terakreditasi		
2	Pemakalah dalam Temu Ilmiah	Internasional	Sudah dilaksanakan	Sudah dilaksanakan
		Nasional		
3	Invited Speaker dalam temu ilmiah	Internasional		
		Nasional		
4	Visiting Lecturer	Internasional		
5	Hak Keayaan Intelektual (HAKI)	Paten, Paten Sederhana, Hak Cipta, Merek Dagang, Rahasia Dagang, Desain Produk, Indikasi Geografis, Perlindungan Varietas Tanaman, Perlindungan Topografis Sirkuit Terpadu		
6	Tekn. Tepat Guna			
7	Model/Purwarupa /Karya Seni/Rekayasa Sosial		draft	draft
8	Buku Ajar ISBN		draft	Sudah terbit
9	Tingkat Kesiapan Teknologi ¹		3	4

1.3.2 Tingkat Kesiapan Teknologi

Penelitian ini memiliki tingkat kesiapan/kematangan luaran dengan skor 3-4. Berdasarkan penelitian yang sudah dilakukan sebelumnya.

Tabel 2. Rincian Tingkat Kesiapan Teknologi

TKT	Definisi	Deskripsi Kesiapan
3	Konsep dan karakteristik penting dari suatu teknologi telah dibuktikan secara analitis dan eksperimental	4. Telah dilakukan pemodelan dan simulasi mendukung prediksi kemampuan elemen-elemen Teknologi. 5. Telah dilakukan pengembangan teknologi tersebut dengan langkah awal menggunakan model matematik yang sangat dimungkinkan dan dapat disimulasikan. 8. Telah dilakukan penelitian di laboratorium dengan menggunakan data dummy.
4	Komponen teknologi telah divalidasi dalam lingkungan laboratorium	3. Hasil percobaan laboratorium (simulasi) terhadap setiap komponen menunjukkan bahwa setiap komponen dapat beroperasi. 5. Purwarupa teknologi skala laboratorium (simulasi) telah dibuat

BAB II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 State of The Art

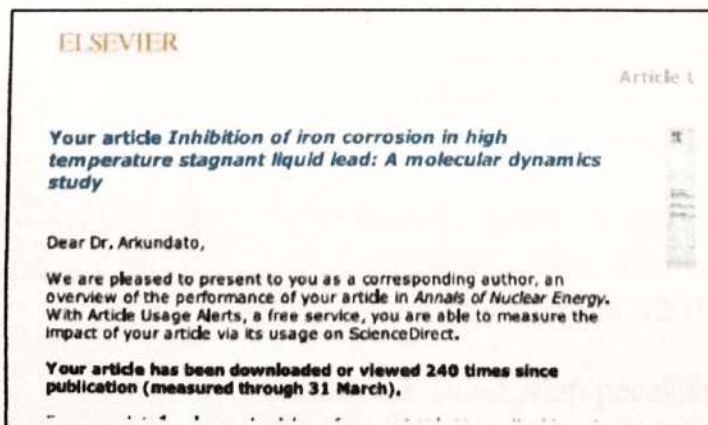
Penelitian komputasi material nuklir khususnya untuk memecahkan problem korosi dalam reaktor merupakan topik riset yang sangat intens pada akhir-akhir ini sehingga banyak seminar-seminar internasional terkait bidang riset ini. Penelitian komputasi material (metode dinamika molekul) sangat *powerful* sebagai *tools* penelitian, namun belum banyak diterapkan dalam riset material reaktor, meskipun metode komputasi dinamika molekul sudah merupakan metode baku penelitian material. Berbagai riset eksperimen juga mengkonfirmasi korosi untuk berbagai bahan dan perlakuan atau kondisi penelitian (Rivai dan Takahashi, 2010; Mosa, 2008; Zalenskii et al, 2007; Zhang dan Li, 2008; Meyers et al, 2013; Sara, 2011; Manly, 1959; Dong, 2013). Oleh karena itu topik ini adalah topik yang sedang uptodate dan menjanjikan.



Gambar 2.1 Workshop Internasional Topik Material Nuklir

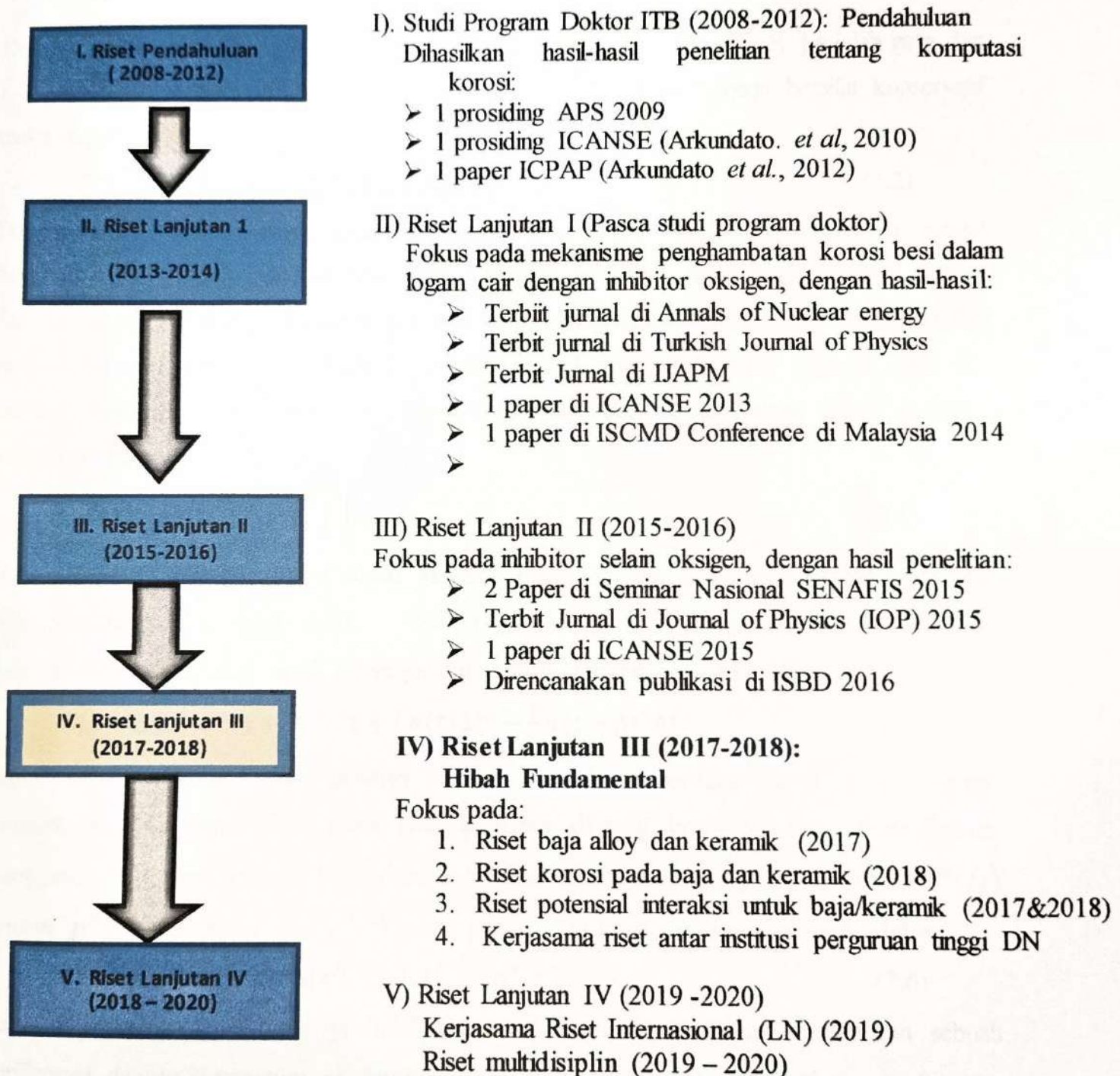
2.2 Penelitian Pendahuluan Yang Telah Dilakukan

Penelitian dalam bidang komputasi material nuklir dirintis oleh pengusul dengan mengambil studi program doktor di Fisika FMIPA ITB (2008-2012). Satu tulisan yang paling bermutu dari pengusul adalah yang dimuat dalam jurnal *Annals of Nuclear Energy*, yang telah disitasi/download lebih dari 240 kali .



Gambar 2.2 Snapshot hasil sitasi pada jurnal

Pada penelitian pendahuluan ini maka hasil yang dicapai secara kualitatif dapat menunjukkan adanya mekanisme penghambatan korosi melalui terbentuknya lapisan tipis oksigen antara lapisan logam cair dan besi. Namun demikian secara kuantitatif dan variasi problem, hasil-hasil yang diperoleh belum komprehensif, karena masih memerlukan penelitian lanjutan. Agar-agar penelitian lanjutan ini menghasilkan penemuan yang bermutu dan tingkat keberhasilan tinggi maka dapat kita susun ROADMAP penelitian sebagai berikut:



Gambar 2.3 Road Map penelitian

2.3 Teori dan Simulasi Dinamika Molekul

Dalam penelitian ini maka fenomena korosi dan sifat-sifat fisis bahan dihitung, disimulasikan dan diprediksi menggunakan metode simulasi dinamika molekul. Metode ini secara garis besar berusaha menelaah gerak atom-atom bahan/material menggunakan hukum-hukum Newton. Persamaan Gerak atom ke- i dari material yang disebabkan gaya luar \vec{F}_i dapat dinyatakan memenuhi gerak Newton (Martin, 2007):

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.1)$$

Dengan vektor $\vec{r}_i = \{\vec{x}_i, \vec{y}_i, \vec{z}_i\}$ adalah vektor posisi, vektor $\vec{F}_i = \{\vec{F}_i^x, \vec{F}_i^y, \vec{F}_i^z\}$ adalah gaya dan $i = 1, 2, 3, \dots, N$ indeks untuk atom. Kemudian jika gaya yang bekerja bersifat konservatif maka dapat dinyatakan:

$$\vec{F}_i = -\nabla_i U = -\nabla_i U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \quad (2.2)$$

Dengan $U(\vec{r}^N)$ adalah fungsi potensial antar atom. Fungsi potensial dewasa ini sangat bergantung pada sistem material yang ditinjau apakah zat padat, zat cair, gas, logam, polimer dan sebagainya. Salah satu contoh potensial yang sering digunakan untuk prediksi awal dan penyederhanaan perhitungan adalah potensial Lennard-jones (LJ) yang digagas oleh J.E. Lennard-Jones, 1924. Salah satu potensial LJ yang populer digunakan adalah LJ(12,6) dengan $n=12$ dan $m=6$ (Shu, 1983):

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (2.4)$$

Dalam komputasi/simulasi maka setiap interaksi dua atom maka interaksinya harus diwakili oleh nilai σ dan ε yang tepat. Solusi persamaan (2.2) memerlukan solusi numerik (pemrograman komputer) untuk mendapatkan koordinat-koordinat atom:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{2}{3}a(t)\Delta t^2 - \frac{1}{6}a(t - \Delta t)\Delta t^2 \quad (2.5)$$

Dari solusi numerik yang hasilnya adalah koordinat-koordinat atom yang dengan memanfaatkan konsep-konsep fisika statistik dapat dihitung besaran-besaran termodinamik menggunakan teorema ergodic bahwa untuk besaran sesaat sembarang $A = A(\mathbf{p}^N(t), \mathbf{r}^N(t))$ dengan $\mathbf{p}^N(t)$ momentum dan $\mathbf{r}^N(t)$ posisi pada waktu t maka rata-rata nilai A adalah:

$$\langle A \rangle_{ensemble} = \iint d\mathbf{p}^N d\mathbf{r}^N A(\mathbf{p}^N, \mathbf{r}^N) \rho(\mathbf{p}^N, \mathbf{r}^N) \quad (2.6)$$

Besaran ρ menyatakan rapat probabilitas ensemble yaitu probabilitas menemukan sebuah konfigurasi dengan momentum \mathbf{p}^N dan posisi \mathbf{r}^N . (TaoPang, 2006). Realisasi perhitungan besaran-besaran fisis dalam bentuk program sudah banyak dikerjakan didunia seperti dalam program LAMMPS¹⁾, MOLLY²⁾, OVITO³⁾, PACKMOL⁴⁾. Oleh karena itu dalam penelitian

ini kita tidak akan membuat program dinamika molekul dari awal kita hanya membuat program tambahan manakala diperlukan.

2.4 Difusi, Fenomena Korosi dan Model Simulasi Korosi

Korosi dapat didefinisikan sebagai degradasi material berstruktur (seperti baja) hasil dari lepasnya (terlarutnya) atom-atom komponen baja ke lingkungannya (logam cair) akibat reaksi kimia-fisika yang terjadi. Penggunaan "coolant" pada reaktor yang mempunyai suhu sangat tinggi memunculkan efek korosi panas (*hot corrosion*) pada logam (Manly, 1959). Jika biasanya korosi terjadi melalui reaksi kimia maka pada mekanisme "hot corrosion" seperti kasus dalam penelitian hibah fundamental ini tidak melalui mekanisme transfer elektron sebagai bagian dari reaksi kimia. Korosi terjadi melalui transfer massa langsung akibat efek termal difusi atom (Manly, 1959). Oleh karena itu pada penelitian ini cocok sekali digunakan metode dinamika molekul yang dapat menggambarkan proses lepasnya atom-atom baja melalui proses difusi.

Besaran fisis yang akan dihitung untuk mengevaluasi korosi diantaranya adalah koefisien difusi (Arkundato, 2010):

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle |\bar{r}(t) - \bar{r}(t=0)|^2 \rangle}{6t} \quad \text{atau} \quad D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{A}{R} \cdot \frac{1}{T}\right) \quad (2.7)$$

3. TUJUAN DAN MANFAAT

3.1 TUJUAN PENELITIAN

Berdasarkan latar belakang riset yang diuraikan diatas maka dapat disusun tujuan penelitian sebagai berikut:

1. Dapat menemukan mekanisme kerusakan/korosi material nuklir (baja) dan kemudian menemukan metode penghambatan kerusakan/korosi material nuklir yang tepat.
2. Menemukan model material baru seperti logam paduan atau keramik dengan komposisi dan struktur yang tepat yang menghasilkan/mempunyai sifat mekanik yang baik (kuat) dan sifat termodinamik yang diinginkan (solubilitas unsur material nuklir dalam timbal cair rendah) sehingga mampu digunakan/bekerja dalam suhu tinggi reaktor.

3.2 MANFAAT PENELITIAN

Pengembangan PLTN berbasis reaktor cepat massa depan sangat menjanjikan dan sangat penting sebagai salah satu solusi mengatasi keterbatasan ketersediaan listrik dimasa depan. Oleh karena itu desain PLTN harus dipastikan memenuhi unsur keselamatan dan ekonomis.

BAB 4. METODE PENELITIAN

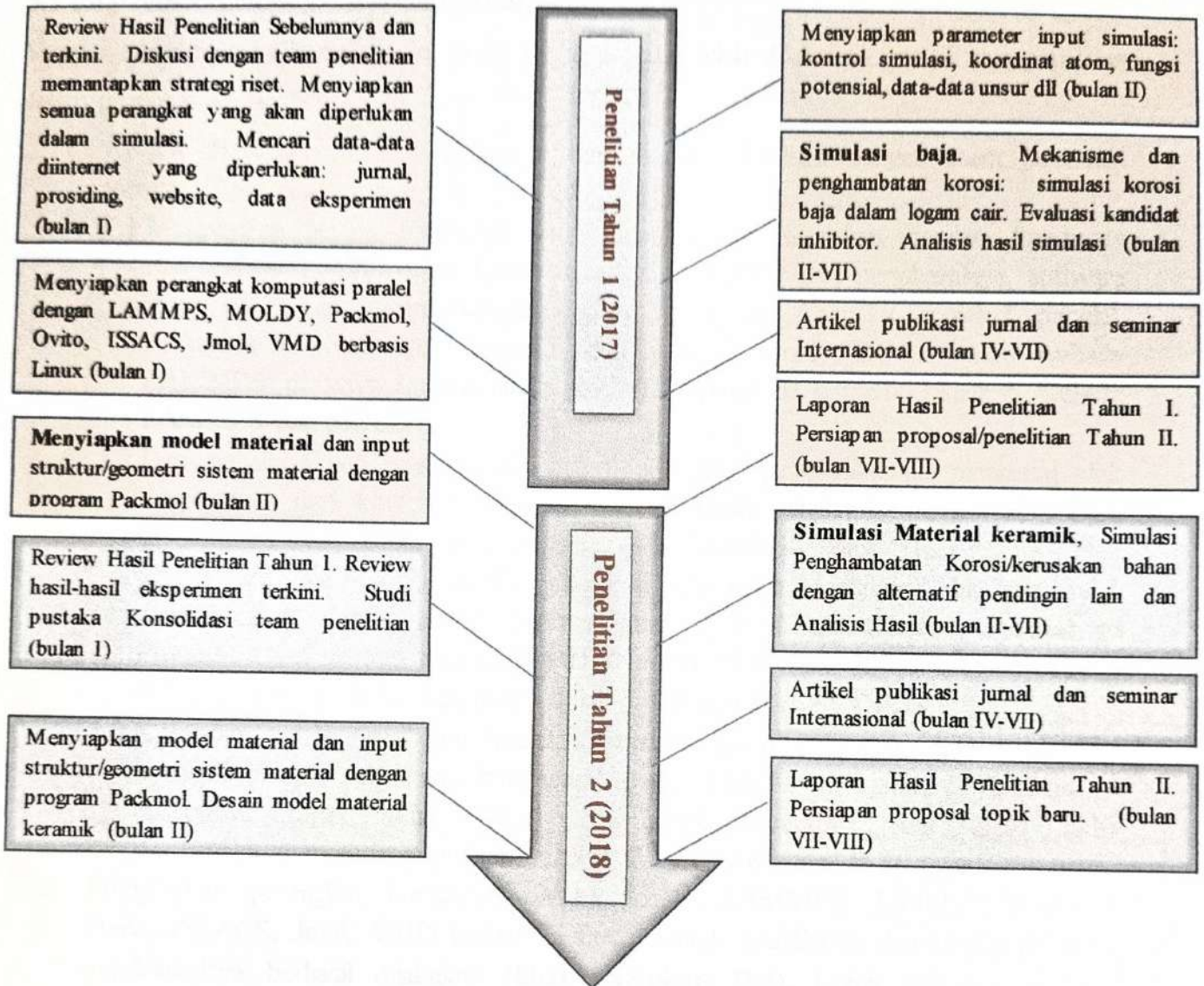
Ide dasar penelitian ini adalah laju korosi baja harus ditekan serendah mungkin. Dengan kata lain koefisien difusi komponen baja (terlarutnya Fe, Cr, Ti, Mo, C, Ni dan lain-lain dalam timbal-bismuth cair) harus diupayakan sekecil mungkin. Untuk mewujudkan ini (koefisien difusi yang rendah) maka dapat ditempuh 2 cara:

(1) mencari cara penghambatan korosi misalnya memberikan atau memasukkan inhibitor ke dalam sistem korosi misalnya gas oksigen, nitrogen (Arkundato et al, 2010, 2012, 2013, 2015) atau bahan lain; dan/atau (2) menyiapkan material baja atau bahan lain misalnya keramik yang tahan korosi/kerusakan pada suhu tinggi. Dalam penelitian ini kedua pilihan ini (1 dan 2) akan dilakukan observasi dengan kedua-duanya dilakukan simulasi dinamika molekul. Gambaran penerapan metode simulasi dinamika molekul dalam penelitian ini dapat dirumuskan dalam step-step berikut:

1. Pertama disiapkan sistem material yang ingin disimulasikan yaitu material besi/baja berbentuk geometri tertentu misal kotak berstruktur kristal bcc ditempatkan dalam kotak cairan timbal cair dengan rapat jenis tertentu. Sistem material ini bisa dibuat dengan program Packmol. Geometri yang lain adalah bola di dalam bola.
2. Kemudian pada suhu, tekanan tertentu dan parameter-parameter input tertentu program simulasi LAMMPS/Moldy dijalankan. Parameter-parameter input ini misalnya fungsi potensial interaksi, jumlah atom, koordinat atom-atom (yang diperoleh pada step 1) dan sebagainya. Model potensial ini sangat penting dan akan menentukan akurasi hasil.
3. Hasil simulasi kemudian di analisis dihitung nilai koefisien difusi $D(T)$ dengan rumus yang ada kemudian dikomparasi dengan eksperimen atau juga dilihat struktur mikroskopisnya dengan pprogram Ovito. Komparasi dengan hasil eksperimen untuk memastika model proses fisis kita di atas dan juga parameternya sudah bagus atau akurat. Jika belum kita perlu mencari model geometri atau struktur material dan atau juga fungsi potesialnya.
4. Jika langkah 3 dianggap cukup representatif maka kita lakukan langkah berikutnya mengulang simulasi lagi dari awal namun dengan memasukkan inhibitor seperti oksigen, nitrogen atau yang lain. Setelah itu dibandingkan nilai koefisien difusinya.
5. Jika koefisien difusi komponen-komponen baja ternyata terjadi penurunan yang signifikan (hasil step 3 dibanding step 4) maka berarti kita sudah berhasil menemukan apa yang kita cari dan kita targetkan.

6. Jika langkah 5 belum berhasil maka diulangi lagi langkah 1-5 sampai menemukan model dan metode yang tepat untuk mengatasi korosi/kerusakan bahan.

Berikut adalah diagram alir penelitian:



Gambar 4. Diagram Alir Penelitian

BAB 5. HASIL YANG DICAPAI

Berdasarkan rumusan masalah dan target yang ingin dicapai, maka dapat diungkapkan kegiatan penelitian yang telah dilakukan dan hasil-hasilnya sebagai berikut:

5.1 Kegiatan-kegiatan yang telah dilakukan

Sampai tahap laporan kemajuan ini maka kegiatan yang telah dilakukan sesuai alur penelitian dalam proposal adalah:

1. Review Hasil Penelitian Sebelumnya dan terkini. Diskusi dengan team penelitian memantapkan strategi riset.
 - 1.1 Menyiapkan semua perangkat yang akan diperlukan dalam simulasi (hardware dan software). Perangkat hardware adalah computer dan peripheralnya, software yang diperlukan dalam simulasi adalah program dinamika molekul parallel. Perangkat ini (software) diperoleh dari website Moldy CCL.net dan website LAMMPS di www.lammps.sandia.gov. (**Lampiran B.1** memperlihatkan website LAMMPS dan MOLDY).
 - 1.2 Dari penelitian sebelumnya maka masih ada yang perlu diketahui mengenai efek temperature dari kontribusi inhibitor oksigen pada penghambatan korosi. Oleh karena itu dilakukan pengambilan data simulasi untuk mengetahui efek temperature ini (hasil simulasi berhasil diperoleh kemudian hasilnya telah dipublikasikan dalam **jurnal internasional IOP Conf. Series: Journal of Physics: Conf. Series 853** (2017) 012046 doi :10.1088/1742-6596/853/1/012046 (Lihat **Lampiran B.2**). Jurnal ini adalah jurnal terindeks SCOPUS.
 - 1.3 Kemudian untuk membantu kegiatan penelitian ini dan juga untuk menyebarkan konsep-konsep penelitian komputasi pada mahasiswa, maka dilibatkan 3 mahasiswa tugas akhir yang mengerjakan beberapa judul tugas akhir menggunakan metode dinamika molekul (**Lihat Lampiran B.3**).
2. Menyiapkan perangkat komputasi paralel dengan LAMMPS, MOLDY, Packmol, Ovito, ISSACS, Jmol, VMD berbasis Linux. Untuk LAMMPS dan Moldy prosedur paralelisasinya berhasil dilakukan (**lihat Lampiran B.4**). Untuk software packmol maka dilakukan registrasi pada website Packmol untuk mendapatkan software (code) (**Lampiran B.5**).
3. Menyiapkan model material dan input struktur/geometri sistem material dengan program Packmol. Untuk Packmol maka berhasil dilakukan bagaimana cara menyiapkan input simulasi MD menggunakan packmol. Instalasi packmol dan cara menjalankan packmol untuk mendapatkan konfigurasi awal simulasi MD dituangkan dalam **Lampiran B.6**.
4. Menyiapkan parameter input simulasi: kontrol simulasi, koordinat atom, fungsi potensial, data-data unsur dll (**Lampiran B.7**). Termasuk dalam hal ini file control simulasi dan file spesifikasi simulasi Moldy yang hasil-hasilnya telah digunakan untuk menuliskan artikel jurnal yang berhasil terbit (**Lampiran B.2**).

Simulasi baja. Mekanisme dan penghambatan korosi: simulasi korosi baja dalam

logam cair. Evaluasi kandidat inhibitor. Pada tahapan ini maka telah diperoleh data simulasi. Hasil-hasilnya telah berhasil dituliskan dalam bentuk artikel jurnal dan telah dikirimkan ke penerbit **jurnal internasional Pertanika** (terindeks Scopus) dan sudah “accepted” dan masih dalam proses akhir penerbitan (**Lampiran B.8**).

Pada simulasi sistem logam dalam penelitian ini dimana melibatkan logam logam Pb, Fe, Cr, Ni, Al dll, ini kendalanya adalah menemukan model parameter potensial yang tepat antar logam. Oleh karena itu pada tahap ini dilakukan kajian teoretik untuk menemukan formula khusus bagaimana atom-atom logam berinteraksi satu sama lain menggunakan pendekatan potensial Lennard-Jones namun dengan konsep baru formula pencampuran (mixing rule). Pada penelitian ini berhasil diperoleh formula tersebut yang mempunyai error paling kecil jika dibandingkan formula mixing rules yang sudah dibuat orang sebelumnya. Hasil penelitian ini berhasil disubmit pada **jurnal internasional bergengsi Q2 (Lampiran B.9)** yaitu **Jurnal Material Research**, dengan judul “New Mixing Formula (AZFMZ) of Lennard-Jones Potential Parameters for Studying the Liquid Metals Corrosion using Molecular Dynamics Method”.

5. Artikel publikasi jurnal dan seminar Internasional

Dari kegiatan penelitian ini maka dari sejak proposal ini diajukan sampai disetujui didanai serta sampai tahap laporan akhir maka telah dilakukan 1 kegiatan keikutsertaan dalam seminar internasional yaitu ICCSE 2017 di ITB Bandung (**Lampiran B.10.1**), serta 1 kegiatan keikutsertaan dalam workshop Internasional CMD (computational material design) di Teknik Fisika di ITB Bandung pada 17-19 Oktober 2017. (**Lampiran B.10.2**). Workshop CMD adalah workshop komputasi yang diselenggarakan Osaka University bersama-sama Teknik Fisika ITB dengan topik pemrograman DFT (density functional theory). Jika dalam metode dinamika molekul klasik energi potensialnya harus sudah kita ketahui dan kita miliki, maka metode DFT akan memberikan tools bagi kita untuk mendapatkan energy potensial antar atom secara akurat. Sehingga kombinasi antara MD dan DFT akan sangat berguna untuk melanjutkan penelitian tahun kedua 2018 dimana struktur keramik belum banyak diteliti berkaitan dengan aplikasi nuklir.

Untuk hasil penelitian dalam bentuk jurnal internasional sudah berhasil “terbit” 1 buah jurnal internasional terindeks Scopus di IOP (**Lampiran B.2**) tahun 2017, 1 buah jurnal internasional sudah “accepted” untuk publikasi di **Pertanika (Lampiran B.8)** diperkirakan terbit 2018 dan 1 buah jurnal internasional terindeks scopus di **Material Research** dalam tahap submit (**Lampiran B.9.1**). Serta dalam tahap akhir penulisan berupa draft yang siap submit untuk publikasi ke jurnal terindeks scopus **Atom Indonesia** dimana mempelajari interaksi antara besi dan boron dalam reaktor nuklir (**Lampiran B.9.2**). Selain itu dari penelitian ini dihasilkan 3 buah judul skripsi yang dikerjakan mahasiswa (**Lampiran B.3**).

8. Pada penelitian ini juga sudah dikembangkan website penelitian sehingga hasil-hasil penelitian terkait penelitian korosi baja dalam logam cair dapat ditampilkan dan dapat diakses oleh pengguna (**Lampiran B.11**)

5.2 Permasalahan dalam penelitian yang sudah dijawab

Secara keseluruhan penelitian ini telah menjawab beberapa **rumusan masalah** yang diajukan dalam proposal penelitian yaitu:

1. Apakah mekanisme terjadinya kerusakan/korosi ditinjau secara mikroskopis? Mekanismenya adalah adanya tingkat kelarutan yang tinggi dari unsur-unsur baja jika ditempatkan dalam lingkungan timbal cair suhu sangat tinggi. Hal ini dapat dilihat dari struktur mikroskopis baja dimana pada permukaan logam baja (besi) sangat rusak dan terlepas dari permukaannya. Hasil ini sudah dituangkan dalam artikel jurnal yang berhasil kita publikasikan di IOP maupun Pertanika.
2. Bagaimana/apa metode yang tepat untuk mengatasi kerusakan/korosi material nuklir tersebut? Metode yang tepat untuk korosi suhu tinggi ini adalah dengan memberikan inhibitor gas oksigen dan nitrogen, serta gas mulia. Untuk nitrogen sudah kita publikasikan dalam jurnal IOP, untuk gas mulia sudah kita buktikan pada tugas akhir mahasiswa dan dipublikasikan pada Proceeding IBSC, sedang untuk oksigen sudah kita publikasikan pada penelitian sebelumnya.
3. Apa model material nuklir (baja atau keramik atau material baru yang lain) yang tepat yang memiliki sifat-sifat fisis unggul seperti kuat dan tahan panas? Secara sederhana ini telah dituangkan hasilnya dalam artikel jurnal yang telah disubmit dan "accepted" di Pertanika namun belum terbit. Secara komprehensif maka penelitian akan dilakukan pada tahun kedua penelitian yang mengevaluasi baja dan keramik. Untuk mewujudkan ini maka telah dilakukan pemodelan interaksi atom dahulu dalam bentuk mendapatkan model interaksi lennard-jones parameter baru yang hasilnya telah kita submit ke jurnal Material Research dan sekarang masuk dalam proses review.
4. Bagaimana cara mensimulasikan dan menguji metode-metode penghambatan korosi dan model-model material secara atau dengan metode simulasi dinamika molekul? Cara mensimulasikannya dengan mendapatkan input yang tepat pada awal simulasi sehingga hasilnya dapat di "compare" dengan data eksperimen.
5. Bagaimana menganalisis hasil simulasi dan bagaimana menghitung besaran-besaran fisis dikaitkan dengan fenomena penghambatan korosi dan sifat-sifat fisis material? Pada penelitian ini ditekankan pada perhitungan koefisien difusi untuk mengetahui kekuatan bahan baja/keramik dimana konsep difusi ini terkait erat

dengan konsep kelarutan material dalam lingkungan suhu tinggi dan kestabilan integritas bahan.

5.3 Target Luaran yang sudah dicapai

Dari penelitian ini maka target luaran dalam proposal yang telah dicapai adalah:

1. Metode efektif penghambatan korosi baja dalam pendingin logam cair

Metode efektif adalah menginjeksikan gas oksigen atau nitrogen atau gas mulia pada konsentrasi yang tepat dan terjaga pada logam cair. Konsentrasi ini tidak boleh kurang atau kelebihan dari konsentrasi efektif, dan secara komputasi ini dapat diprediksi. Secara eksperimen ini adalah hal yang tidak mudah. Hasil-hasil metode ini telah dituliskan dalam bentuk artikel jurnal: 1 buah sudah terbit di IOP, 1 buah sudah "accepted" di Pertanika dan 1 buah sudah "submit" ke jurnal internasional Q2 Material Research. (lihat Lampiran 2, 8, 9).

2. Model material baja paduan yang memiliki sifat-sifat fisis yang unggul yang dapat diaplikasikan dalam reaktor.

Model material baja paduan adalah baja dengan konsentrasi Fe:Cr:Ni yang tepat. Hasil penelitian ini telah disubmit ke Pertanika dan sudah "accepted" belum terbit (Lihat Lampiran 8).

3. Publikasi paper hasil penelitian dalam bentuk jurnal internasional bereputasi

Berhasil terbit/accepted/submit ke penerbit jurnal bergengsi 3 buah (Lihat Lampiran 2,8,9). 1 Buah berupa final draft akan disubmit ke Jurnal Atom Indonesia.

4. Publikasi paper hasil penelitian dalam bentuk prosidings hasil seminar

Berhasil terbit ke Prosiding IBSC melalui artikel tugas akhir mahasiswa sebagai dosen pembimbing utama (Lihat Lampiran 3).

5. Buku teks hasil penelitian

Pada akhir penelitian tahun 2017 dihasilkan draft buku 40% lengkap. Judul buku yang akan dibuat adalah "Aplikasi Metode Komputasi Dinamika Molekul pada Fenomena Korosi Logam dalam Reaktor Nuklir Cepat".

6. Judul-judul penelitian yang dapat ditawarkan untuk mahasiswa tugas akhir.

Ditawarkan 3 buah judul skripsi pada mahasiswa tugas akhir dan telah berhasil lulus studi.

7. Model/Purwarupa

Model yang telah diperoleh adalah model potensial interaksi LJ dengan "mixing rule" yang baru (sudah submit publikasi, Lihat Lampiran 9).

6. RENCANA TAHAPAN SELANJUTNYA

Kegiatan penelitian akan dilanjutkan pada tahun kedua 2018 penelitian dengan focus pada tema:

1. Simulasi keramik dalam logam cair dan metode pencegahan korosi.
Dari eksperimen yang ada maka keramik adalah salah satu material yang diprediksi/dipandang mampu bertahan diaplikasikan dalam suhu tinggi dan dilingkungan timbal cair. Oleh karena itu pada penelitian lanjutan akan dipelajari bahan ini apakah strukturnya masih kuat selama simulasi dan jika ada degradasi bagaimana penanggulangnya. Bagaimanakah dibanding baja dalam hal spesifik penggunaan?
2. Hal yang penting dari hasil penelitian tahun pertama adalah diperolehnya fungsi potensial interaksi dengan mixing rule yang baru yang cocok untuk logam dan keramik. Oleh karena itu pada penelitian tahun 2 semua simulasi akan menggunakan aturan mixing rule (AZFMZ) yang diperoleh, untuk menghitung semua interaksi antar atom logam yang berbeda.
3. Penerbitan buku teks ber ISSN hasil penelitian hibah fundamental selama 2017 – 2018.
4. Publikasi dalam jurnal internasional bergengsi.

5. KESIMPULAN DAN SARAN

Secara keseluruhan penelitian ini telah menghasilkan hasil-hasil penting baik dalam bentuk publikasi ilmiah Jurnal, topik tugas akhir mahasiswa S1, pembicara pada kegiatan seminar, model/purwarupa interaksi atom-atom dalam bentuk fungsi "mixing rule" yang baru, AZFMZ yang diajukan sebagai fungsi sederhana yang akurat untuk interaksi antar atom via skema simulasi dinamika molekul Lennard-Jones. Juga penelitian pengembangan ke aplikasi yang lain antara besi dengan boron. Pada akhir tahun pertama ini sudah mulai menulis buku teks hasil-hasil penelitian.

Sebagai saran maka perlu dilakukan tinjauan pustaka lebih mendalam dari berbagai sumber mengenai informasi terbaru pada kasus korosi logam pada suhu tinggi.

PUSTAKA

1. Abu Khalid Rivai, Minoru Takahashi, 2010, Corrosion characteristics of materials in Pb–Bi under transient temperature conditions, *Journal of Nuclear Materials* 398, 139–145.
2. Ahmed Moosa, 2008, Oxidation and Corrosion Mechanism of Steel Alloys and Inconel 600 Alloy in Liquid–Lead–Bismuth Eutectic, *Eng. & Tech.*, Vol. 26, No. 11.
3. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin, 2010, Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb By Molecular Dynamics Methods, *AIP Conference Proceedings*, Volume 1244, hal. 136-144.
4. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino, 2011, Proceedings: Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method, *International Conference ICANSE 2011*, Denpasar, Bali, Indonesia
5. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Proceedings: Computational Study: Reduction of Iron Corrosion in Lead Coolant of Fast Nuclear Reactor, *International Conference ICPAP 2011*, Bandung, Indonesia.
6. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, 2013, Study of Liquid Lead Corrosion of Fast Nuclear Reactor and Its Mitigation by Using Molecular Dynamics Method, *IJAPM 2013 Vol.3(1)*: 1-7 Singapore
7. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, 2013, Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic, *Turk. J. Phys.*, 37, (2013), 132-144
8. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino, 2013, Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study Volume 62, December 2013, Pages 298–306, *Annals of Nuclear Energy*, Elsevier, Netherlands
9. Artoto Arkundato, Zaki Su'ud, Sudarko, Muhammad Hasan, Massimo Celino, 2015, Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in LBE using nitrogen as corrosion inhibitor, *Journal of Physics: Conference Series*, 622(2015) 012009.
10. Cai dan Yip, 2012, Molecular Dynamics. In: Konings R.J.M., (ed.) *Comprehensive Nuclear Materials*, volume 1, pp. 249-265 Amsterdam: Elsevier.
11. G. K. Zelenskii, A. G. Ioltukhovskii, M. V. Leont'eva-Smirnova, I. A. Naumenko, and S. A. Tolkachenko, 2007, Corrosion Resistance of Fuel Element Steel Cladding in A Lead Coolant, *Metal Science and Heat Treatment*, Vol. 49, Nos. 11 – 12.
12. J. Zhang, 2008, N. Li Review of The Studies on Fundamental Issues In LBE Corrosion', *Journal of Nuclear Materials*, 373, hal. 351-377.
13. Martin J. Field, 2007, *A Practical Introduction to the Simulation of Molecular Systems*, Cambridge University Press, hal. 170.
14. Meyers, H. dan Friatec, Ag, 2013, Resistance of Oxide Ceramic Products to Corrosive Liquids, http://www.friatec.de/content/friatec/en/Ceramics/FRIALIT-DEGUSSIT-Oxide-Ceramics/Downloads/downloads/FA_Resistance_of_Oxide.pdf
15. Sara, E.F., 2011, Experimental Simulation of Crevice Corrosion of A Functionally Graded Composite System of F91 and Fe-12Cr-2Si Exposed to High-Temperature Lead-Bismuth Eutectic Coolant, Thesis, Nuclear Sciences and Engineering, MIT, June 2011).
16. Shu Zhen and G.J. Davies, 1983, L-J n-m Potential Energy Parameters: Calculation of the LJ n-m Pot Energy Parameters for Metals, *phys.stst.sol(a)* , 78,595.

17. Tao Pang, 2006, An Introduction to Comp. Physics, Cambridge Univ.Press, 227
18. W.D. Manly, Fundamentals of Liquid-Metal Corrosion (1959)
19. Weiwei Dong et al, 2013, Study if aluminium coating prepared by PCV used as anti-corrosion in liquid lead-bismuth, Col 11(Suppl.) S10210(2013) Chinese Optics Letters, June 30, 2013.

LAMPIRAN-LAMPIRAN

1. Lampiran A.

A.1 Susunan Organisasi Tim Pengusul dan Pembagian Tugas.

No.	Nama/NIDN	Instansi Asal	Bidang Ilmu	Alokasi Waktu (Jam /minggu)	Uraian Tugas
1	Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si/0025126901	Universitas Jember	Fisika Komputasi Bahan	8	Ketua: -Koordinasi Riset -Rancang sistem komputasi -Pengambilan data simulasi -Perhitungan dan analisis data -Pelaporan dan Publikasi
2	Dr. Fiber Monado, S.Si., M.Si.	Universitas Sriwijaya	Fisika Komputasi Reaktor	4	Anggota: -Persiapan dan inventarisasi data- data input simulasi -Pemrograman komputer -Analisa data dan kesimpulan -editing publikasi

A2. BIODATA KETUA dan ANGGOTA TIM PENGUSUL

A2.1 IDENTITAS DIRI KETUA PENELITI

1	Nama Lengkap (dengan gelar)	Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.
2	Jenis Kelamin	L
3	Jabatan Fungsional	Lektor
4	NIP/NIK/Identitas lainnya	196912251999031001
5	NIDN	0025126901
6	Tempat, Tanggal Lahir	Blitar, 25 Desember 1969
7	E-mail	a.arkundato@unej.ac.id
8	Nomor Telepon/HP	081220688963
9	Alamat Kantor	Fisika FMIPA Universitas Jember Jl. Kalimantan 37 Jember (68121)
10	Nomor Telepon/Faks	0331334293/0331330225

11	Lulusan yang Telah Dihilkan	S-1 = 20 orang; S-2 = ... orang; S-3 = ... orang
12	Nomor Telepon/Faks	0331334293/0331330225
13	Mata Kuliah yang Diampu	1. Fisika Komputasi
		2. Metode Numerik
		3. Fisika Modern
		4. Mekanika
		5. Fisika Kuantum
		6. Komputasi Atom dan Inti

B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2	S-3
Nama Perguruan Tinggi	UGM	ITB	ITB
Bidang Ilmu	Fisika Teori	Fisika Komputasi	Fisika Komputasi
Tahun Masuk-Lulus	1988-1995	2001-2003	2008-2012
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi	Aspek Klasik dan Kuantum Optika Nonlinear	Perhitungan Grup Konstan Nuklir Dengan Metode Brueckner-Hartree Fock	Studi Korosi Dalam Reaktor Cepat Berpendingin Logam Cair dengan metode MD
Nama Pembimbing/Promotor	Prof. Drs. Muslim, Ph.D	Prof. Dr. Zaki Suud	Prof. Dr. Zaki Suud Prof. Dr. Mikrajuddin Abdullah Dr. Widayani

C. Pengalaman Penelitian Dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2007	Pembuatan Membran Komposit Berbasis Kitosan Untuk DMFC Fuel Cell	Ristek KMRT	54
2	2008	Perancangan Patient Care Technology Systems (PCTS) Untuk Peningkatan Mutu Pelayanan Pasien Pada Rumah Sakit	Ristek KMRT	200
3	2008	Rancang-Bangun Tensiometer Terkomputerisasi untuk Tegangan Interfasial dan Sudut Kontak Liquid-liquid/solid Menurut Model ADSA	Hibah Bersaing	45
4	2009	Desain Dan Pengembangan CAR	Hibah Bersaing	47

		(Computerized Advanced-Reactometer):Integrasi Metode Spektroskopi Optik dan SFT (Stopped Flow Technique)Untuk Aplikasi Pengukuran Reaksi Kimia Cepat		
5	2013	Pengembangan Komputasi Skala Besar Dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja Pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul	Hibah Doktor	45
6	2014	Simulasi Dinamika Molekul Berbasis Cloud Computing Performa Tinggi Untuk Investigasi Korosi Material Cladding Reaktor Cepat Dalam Pendingin Logam Cair	Hibah Fundamental	32,5
7	2015	Penghambatan Korosi besi dalam logam cair dengan inhibitor Gas Mulia (Tugas Akhir Mahasiswa)	Mandiri	-

D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2013	Pelatihan Eksperimen Kelistrikan Jantung untuk Stikes Bakti Negara Jember	Mandiri	1
2	2015	IbM Perkotaan Berpenghasilan Rendah untuk Mengatasi Permasalahan Akses Terhadap Air Bersih	DP2M	47

E. Publikasi Artikel Ilmiah Dalam Jurnal dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/Nomor/Tahun
1	Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb By Molecular Dynamics Methods	AIP Conference Proc.	Vol.1244, pp. 136-144, 2010
2	Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor	AIP Conference Proc.	Vol.1454, pp. 65, 2012
3	Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method	AIP Conf. Proc	Vol. 1448, 2012
5	Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method	International Journal of Applied Physics and Mathematics	Vol.3 No.1, 2013.

6	Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic	Turkish Journal of Physics	DOI: 10.3906/fiz-1112-12, 2013
7	Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study	Annals of Nuclear Energy	Volume 62, December 2013, Pages 298–306,
8	Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in LBE using nitrogen as corrosion inhibitor	Journal of Physics: Conference Series	622(2015) 012009.

F. Pemakalah Seminar Ilmiah (*Oral Presentation*) dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Nama Pertemuan Ilmiah / Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	APS (Asean Physics Symposium)	Corrosion Study of Fe in Lead-Bismuth Eutectic: Self-Diffusion Calculation by Molecular Dynamics Methods	Juli 2009, ITB
2	ICANSE	Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb by Molecular Dynamics Methods	Oktober 2009, Grand Aquilla Bandung
3	ICPAP	Computational Study: Reduction of Iron Corrosion in Lead Coolant of Fast Nuclear Reactor	Nov 2011, ITB
4	ICANSE	Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method	Nov 2011, Hotel Aston, Bali

G. Karya Buku dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul Buku	Tahun	Jumlah Halaman	Penerbit
1	Gelombang	2007	9 Bab	ISBN 979-689-992-2 Universitas Terbuka
2	Optika	2007	9 Bab	ISBN 979-011-079-0 Universitas Terbuka
3	Analisis Vektor dan Tensor	2011	228	ISBN 978-602-9030-02-0 Universitas Jember

H. Perolehan HKI dalam 5–10 Tahun Terakhir

No.	Judul/Tema HKI	Tahun	Jenis	Nomor P/ID
1	-			

I. Pengalaman Merumuskan Kebijakan Publik/Rekayasa Sosial Lainnya dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul/Tema/Jenis Rekayasa Sosial Lainnya yang Telah Diterapkan	Tahun	Tempat Penerapan	Respon Masyarakat
1	-			

J. Penghargaan dalam 10 tahun Terakhir (dari pemerintah, asosiasi atau institusi lainnya)

No.	Jenis Penghargaan	Institusi Pemberi Penghargaan	Tahun
1	LULUSAN CUMLAUDE Program Doktor Fisika	Pasca Sarjana ITB	2012
2	Satya Lencana X Tahun	Pemerintah RI	2016

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila di kemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Fundamental

Jember, 29 Oktober 2017

Pengusul,



(Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si)
NIP. 196912251999031001

A2.2 IDENTITAS DIRI ANGGOTA PENELITIAN

1	Nama Lengkap (dengan gelar)	Dr. Fiber Monado, S.Si.,M.Si
2	Jabatan Fungsional	Lektor
3	NIP/NIDN	197002231995121002 / 0025027002
4	Tempat dan Tanggal Lahir	Palembang, 23-02-1970
5	Alamat Rumah	Komp. Atlit Amen Mulia Blok F No. 36 Rt 59, Kelurahan 15 Ulu, Palembang 30256
6	Nomor telepon	0711-516652
7	Nomor HP	0812-7857216
8	Alamat Kantor	Jurusan Fisika F.MIPA Universitas Sriwijaya Kampus Indralaya, Ogan Ilir, Sumatera Selatan.
9	Nomor Telepon/Faks	0711-580743/580268
10	E-mail	fibermonado@unsri.ac.id / Fiber_ms@yahoo.com
11	Mata kuliah yang diampu	1. Fisika Dasar 2. Fisika Komputasi 3. Fisika Komputasi Lanjut 4. Fisika Inti 5. Fisika Reaktor Nuklir

II. RIWAYAT PENDIDIKAN

	S-1	S-2	S-3
Nama Perguruan Tinggi	UNSRI	ITB	ITB
Bidang Ilmu	FISIKA	FISIKA Komputasi	FISIKA NUKLIR
Tahun Masuk	1989	1997	2009
Tahun Lulus	1994	2000	2014
Judul Skripsi/ Tesis/ Disertasi	Model Gaya Gesek Benda Jatuh dalam Fluida Viskos	Hamiltonian dan Gejala Chaos	Desain dan Optimasi GFR Berdaya 300- 350 MWt Berumur Panjang Berbahan Bakar Uranium Alam Menggunakan Skema Burnup MCANDLE
Nama Pembimbing	Drs. Arsali, M.Sc	Prof. Dr. B. Suprpto	Prof. Dr. Zaki Su'ud Dr. Abdul Waris Dr. Khairul Basar

III. Pengalaman Penelitian dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jml(Juta Rp)
1	2015	Desain Konsep Teras Reaktor Nuklir untuk Produksi Hidrogen dan Daya Listrik Menggunakan Skema <i>Burnup</i> MCANDLE Tipe B	Unsri	47.5

IV. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber	Jml(Juta Rp)
1	2015	Pemanfaatan Aplikasi Perangkat Lunak Excell dalam bidang Fisika kepada Guru-guru Fisika di Kab. Ogan Ilir	Unsri	4

V. Publikasi Artikel Ilmiah dalam Jurnal dalam 5 tahun terakhir

No	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/Nomor/ Tahun
1	Optimization of Small Long Life Gas Cooled Fast Reactors With Natural Uranium as Fuel Cycle Input	Applied Mechanics and Materials, Trans Tech Publications, Switzerland	Vol. 260-261 (2013), p.307
2	Application of Modified CANDLE Burnup to Very Small Long Life Gas-cooled Fast Reactor	Advanced Materials Research	Vol. 772 (2013). Pp. 501-506.

F. Pemakalah Semiar Ilmiah dalam dalam 5 tahun terakhir

No	Nama Pertemuan Ilmiah / Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	The 3rd International conference on advances in nuclear science and engineering (ICANSE)	Preliminary Safety Analysis of Small Long Life Gas Cooled Fast Reactors Without on-Site Refueling	November 2011, Denpasar, Bali
2	Seminar Fisika Nasional	Desain Konsep Reaktor PLTN Jenis GFR 333 MWt Berbasis Bahan Bakar Uranium Alam	Juli 2012, Unsri, Palembang
3	The Fourth International Conference of Mathematics and Natural Sciences (ICMNS)	Preliminary Design Study of the Long Life Very Small Gas-Cooled Fast Reactor Using Modified Candle Burnup	November 2012, ITB, Bandung
4	The 4 th International Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering (ICANSE)	Power Flattening on Modified CANDLE Very Small Long Life Gas-cooled Fast Reactor	September 2013, Bali, Indonesia
5	International Nuclear Science Technology and Engineering Conferences (iNuSTEC 2013)	Conceptual Design Study on Very Small Long-Life Gas Cooled Fast Reactor using Metallic Natural Uranium-Zr as Fuel Cycle Input	Oktober 2013, Kuala Lumpur, Malaysia.
6	The Japanese University Network for Global Nuclear Human Resource	Modified CANDLE Small Long Life Gas-cooled Fast Reactor	Pebruari 2014, Bandung, Indonesia.

	Development (JUNET-GNHRD) Program		
7	The 5 th International Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering (ICANSE)	Conceptual Design of Small GFR Core Using MCANDLE-B Burnup Scheme	November 2015, Bandung, Indonesia

G. Karya Buku dalam 5 tahun terakhir

No	Judul Buku	Tahun	Jumlah Halaman	Penerbit
1	-	-	-	-

H. Perolehan HKI dalam 5-10 tahun terakhir

No	Judul/Tema HKI	Tahun	Jenis	Nomor P/ID
1	-	-	-	-

I. Pengalaman Merumuskan Kebijakan Publik/Rekayasa Sosial Lainnya dalam 5 Tahun Terakhir

No	Judul/Tema/Jenis Rekayasa Sosial Lainnya yang Telah Diterapkan	Tahun	Tempat Penerapan	Respon Masyarakat
1	-	-	-	-

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila di kemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Fundamental

Palembang, 27 Oktober 2017



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

A.3 Surat pernyataan ketua peneliti dan tim peneliti.



KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS JEMBER
LEMBAGA PENELITIAN

Alamat : Jl. Kalimantan No. 37 Jember 68121 Telp. (0331) 337818, 339385 Fax. (0331) 337818
e-Mail : penelitian.lemlit@unej.ac.id

SURAT PERNYATAAN

Yang bertandatangan dibawah ini :

Nama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si
NIP / NIDN : 196912251999031001 / 0025126901
Pangkat / Golongan : Penata / IIIc
Jabatan Fungsional : Lektor
Alamat : Perumahan Pesona Regency AF-14 Jember

dengan ini menyatakan bahwa proposal penelitian saya dengan judul : **Investigasi Metode Penghambatan Kerusakan Baja dan Inhibitor Korosi serta Pemodelan Keramik/Baja Paduan yang Cocok untuk Aplikasi dalam Reaktor Cepat Massa Depan Berpendingin Timbal-Bismuth Cair** yang diusulkan dalam skim penelitian Hibah Fundamental Tahun Anggaran 2017 bersifat **original dan belum pernah dibiayai oleh lembaga/sumber dana lain.**

Bilamana di kemudian hari diketemukan ketidaksesuaian dengan pernyataan ini, maka saya bersedia dituntut dan diproses sesuai ketentuan yang berlaku dan mengembalikan seluruh biaya penelitian yang sudah diterima ke kas negara.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Jember, 27 Mei 2016

Mengetahui
Ketua Lembaga Penelitian,

Prof. Dr. Achmed Subagio, M.Agr., Ph.D.
NIP 196905171992011001

Yang Menyatakan,

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si
NIP 196912251999031001



CERTIFICATE NO : QMS/173

2. LAMPIRAN B

B.1.1 Persiapan hardware komputasi. Pada tahap ini disiapkan hardware komputasi seperti PC baru, memori RAM yang diperlukan, flash disk, dan sebagainya, jaringan internet dsb.

B.1.2 Website Lammmps (lammmps.sandia.gov) dan Moldy (ccl.net)

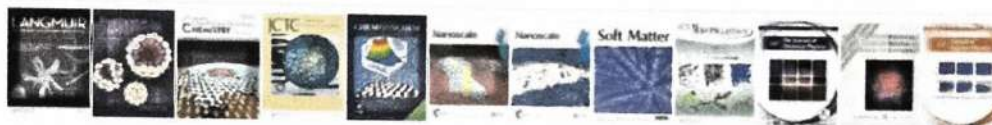
LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

lamp: a device that generates light, heat, or therapeutic radiation; something that illumines the mind or soul -- www.dictionary.com

hover to animate -- [input script](#)

[physical analog \(start at 3:25\) & explanation](#)

Big Picture	Code	Documentation	Results	Related Tools	Context	User Support
Features	Download	Manual	Publications	Pre/Post processing	Authors	Mail list
Non-features	GitHub	Developer guide	Pictures	Pizza.py Toolkit	History	Workshops
Packages	SourceForge	Tutorials	Movies	Offsite LAMMPS packages & tools	Funding	User scripts and How To's
FAQ	Latest features & bug fixes	MD to LAMMPS glossary	Benchmarks	Visualization	Open source	Contribute to LAMMPS
Wish list	Report bugs & request features	Commands	Citing LAMMPS	Related modeling codes		



CCL.NET

computational chemistry list, ltd.

<http://www.ccl.net/cca/software/SOURCES/C/moldy/index.shtml>

UP

CCL moldy

moldy
moldy-2.12g.com , moldy-2.12g.tar.Z , moldy-2.12g.tar.gz , moldy-2.12g.zip , moldy-manual.pdf , moldy-manual.ps.gz , moldy.README , old-version,

Name	Last modified	Size	Description
UP			
moldy-2.12g.com	04-Feb-1998 12:00	1559720	
moldy-2.12g.tar.Z	04-Feb-1998 12:00	605671	
moldy-2.12g.tar.gz	04-Feb-1998 12:00	384995	
moldy-2.12g.zip	04-Feb-1998 12:00	690700	
moldy-manual.pdf	04-Feb-1998 12:00	749097	
moldy-manual.ps.gz	04-Feb-1998 12:00	474785	
moldy.README	04-Feb-1998 12:00	13166	
old-version	28-Mar-1999 15:07		

Effect of temperature on the corrosion inhibition of iron in liquid lead using oxygen inhibitor: studied by MD simulation

Artoto Arkundato^{1*}, Fiber Monado² and Zaki Su'ud³

¹Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Jember, Jember

²Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Sriwijaya, Palembang

³Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, ITB, Bandung

*Corresponding email address: a.arkundato@unej.ac.id

Abstract. For corrosion mitigation of steels used in a fast nuclear reactor power plant, oxygen gas is one of promising candidates of inhibitors. Many experiments have been conducted to reveal the mechanism of corrosion and mechanism of how to overcome the corrosion. In the previous work, we had shown computationally that the oxygen atom can be used to reduce the corrosion and we had predicted the oxygen contents. In the current work, not only to explore deeper the ability of oxygen gas to reduce the corrosion, but also to include the variation of used temperature. We still used iron material to represent a real steels. Using MD (molecular dynamics) simulation based on the Lennard-Jones interaction potential, we sought to understand the concentration of oxygen gas as variation of temperature used in the reactor for the best corrosion mitigation. From this work, we conclude that the temperature does not give effect in related with how concentration of injected oxygen. The temperature merely affects to rise the diffusion coefficient of iron in liquid lead, yet it does not influence how much oxygen needed for corrosion mitigation. In this work, all simulations on different series of temperatures (1023^oK, 1073^oK, 1123^oK, 1173^oK) reveals that oxygen content of 0.1151wt% will cause the lowest corrosion level of iron in liquid lead.

1. Introduction

Molecular dynamics (MD) simulation is a powerful method in computational material sciences. Using MD simulation on many properties of materials under investigation may be predicted or calculated based on specific condition of temperature, pressure, concentration, and others. The purpose of this current study is to determine the corrosion phenomena and its material mitigation, especially the materials used in application of fast nuclear reactors (FNR) design. In FNR that uses liquid metals as a coolant material, for instance lead liquid, the coolant material may cause high corrosion level for steels besides of its important benefits. Many experiments showed the existing high corrosion on the surface of steel materials when they were immersed into high temperature liquid lead coolant [1]. Hence, the focus of the recent researches is to find the proper steels materials or a proper mitigation method to overcome the corrosion phenomena. One of the powerful methods to support the researches is MD simulation. In our previous works, we had shown that iron (representing steels) corrosion can be reduced or minimized using injection of oxygen/nitrogen for specific and proper concentration [2-7]. We applied MD simulation to predict how much the proper oxygen concentration that would minimize



Table 3. Quantitative Representation about Effect of Oxygen for Temperature 1023^oK

Oxygen content in liquid lead		# Fe before simulation		Fe in BCC after simulation	
# of atom	in %	# of atom	in %	# of atom	in %
0	0%	10745	100%	2739	25.5%
226	0.50%	10745	100%	6739	62.7%
674	1.50%	10745	100%	7471	69.5%

The number of atoms of iron after simulation by oxygen injection (Table 3) can be determined by Ovito code using facility of CNA common neighbour analysis [9].

4. Conclusions and remarks

By applying molecular dynamics simulation, this study proves that corrosion of iron in liquid lead can be reduced maximally using oxygen injection with content of 0.1151wt%. This oxygen content is independent from adjusted temperatures when the corrosion occurs. These simulations were conducted using Lennard-Jones potentials that may be not accurate for metal systems as iron in liquid lead. However for early prediction, we show that the oxygen contents for corrosion mitigation of iron in liquid lead are not affected by adjusted temperatures. In the other words, temperature has no effect towards the influence of the oxygen contents on corrosion mitigation. Eventually, this conclusion needs further and deeper studies for complete explanation of liquid corrosion inhibition and phenomena.

Acknowledgement

We thank to KEMENRISTEK DIKTI for a part of financial support of the research through the Hibah Fundamental grant.

References

- [1] Zhang J and Li N 2008 Review of the studies on Fundamental Issues in LBE *J. Nucl.Mater.* 373 351-377
- [2] Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A and Widayani 2012 Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor *AIP Conference Proc.* 1454 pp.65 USA
- [3] Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A, Widayani and Celino M 2012 Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method *AIP Conference Proc.* 1448 USA
- [4] Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A and Widayani January 2013 Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method, *International Journal of Applied Physics and Mathematics* 3. 1 Singapore
- [5] Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A and Widayani 2013 Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic, *Turkish Journal of Physics*, DOI: 10.3906/fiz-1112-12.
- [6] Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A, Widayani and Celino M 2013 Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study 62 Pages 298-306, *Annals of Nuclear Energy* Elsevier
- [7] Arkundato A, Su'ud Z, Sudarko, Hasan M and Celino 2015M Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor *Journal of Physics: Conference Series* 622 012009 IOP Publishing.
- [8] Refson K, 2000 *Moldy: a portable molecular dynamics simulation program for successive and parallel computers* *Comp Phys Commun*, 126 (3), 309-328.
- [9] Jmol: an open-source Java viewer for chemical structures in 3D. <http://www.jmol.org/>
- [10] Stukowski A 2010 *Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool* *Simul. Mater.Sci. Eng.* 18.

B3. Judul Tugas Akhir dan Publikasi Mahasiswa

1. Mahasiswa, nama: Fitriana Faizatu Zuhroh



Dear Mr/Mrs Fitriana Faizatu Zahroh

Jember, September 9, 2016

On behalf of The IBSC committee, it is our pleasure to inform you that your paper entitled: "Mechanical properties of metal materials computed by the molecular dynamics simulation methods" has been **accepted** to be presented in Plenary Session of IBSC 2016. You are requested to submit the full paper trough "Online paper Submission" in the IBSC homepage by September 19, 2016 and to arrange the payment (Invoice is attached). Please follow the guidelines as mentioned in our website: <http://ibsc.fmipa.unej.ac.id/conference/guidelines/>

We look forward to having you participate in this upcoming seminar and present your work.

Sincerely,

Agung Tjahjo Nugroho, Ph.D
Head of Internasional Basic Science Conference Committee

The First INTERNATIONALBASIC SCIENCECONFERENCE2016
Secretariat and contact:
Faculty of Mathematics and Natural Sciences, The University of Jember
Jember – Indonesia 68121

Phone +62-331-338696
Fax +62-331-330225
Email: ibsc.fmipa@unej.ac.id

2. Mahasiswa, nama Ernik Dwi Safitri



Dear Mr/Mrs Ernik Dwi S

Jember, September 9, 2016

On behalf of The IBSC committee, it is our pleasure to inform you that your paper entitled: "Study of self diffusion of iron (Fe) and Chromium (Cr) in liquid lead by computer simulation molecular dynamics" has been **accepted** to be presented in Plenary Session of IBSC 2016. You are requested to submit the full paper through "Online paper Submission" in the IBSC homepage by September 19, 2016 and to **arrange** the payment (Invoice is attached). Please follow the guidelines as mentioned in our website: <http://ibsc.fmipa.unej.ac.id/conference/guidelines/>

We look forward to having you participate in this upcoming seminar and present your work.

Sincerely,

Agung Tjahjo Nugroho, Ph.D
Head of Internasional Basic Science Conference Committee

The First INTERNATIONAL BASIC SCIENCE CONFERENCE 2016
Secretariat and contact:
Faculty of Mathematics and Natural Sciences, The University of Jember
Jember - Indonesia 68121

Phone +62-331-338696
Fax +62-331-330225
Email: ibsc.fmipa@unej.ac.id

Muzaki, Z.^{1,*} Arkundato, A.¹ Supriyanto, E.¹

¹ Jurusan Fisika FMIPA, Universitas Jember, Jember
* Email: zn_zaki@yahoo.com

Abstrak. Penentuan sifat-sifat fisis bahan sangat penting baik dikaitkan dengan aplikasi maupun pengembangan teori. Salah satu metode handal untuk memprediksi sifat-sifat fisis bahan adalah dengan metode komputasi dinamika molekuler. Dewasa ini metode simulasi dinamika molekuler telah mendapatkan banyak kemajuan dan sudah diterapkan ke berbagai sistem material dari yang sederhana sampai yang sangat kompleks. Pada penelitian ini karakteristik kehandalan komputasi paralel dibandingkan dengan komputasi serial. Program dinamika molekul yang digunakan adalah LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) dan MPI (*Message Passing Interface*) yang dijalankan pada komputer multicore. Hasil penelitian menunjukkan adanya peningkatan kecepatan dalam simulasi pada komputasi paralel menggunakan 4 buah prosesor sebesar 3,5 kali dibandingkan dengan simulasi tanpa menggunakan komputasi paralel.

B4. Prosedur paralisasi

Penggunaan mode paralel bertujuan untuk mengoptimalkan kinerja dari sebuah komputer sehingga dapat mempercepat proses simulasi. Program yang digunakan dalam paralel adalah MPI (Message Passing Interface). MPI adalah library yang memungkinkan sebuah program dapat menjalankan setiap perintah pada setiap node yang dimiliki oleh sebuah komputer. Operating sistem yang digunakan adalah Linux Ubuntu 14.04 LTS. Sebelum instalasi paralel diperlukan beberapa program atau library diantaranya: g++, gcc, gfortran, libopenmpi-dev. Program tersebut dapat di instal melalui terminal dengan perintah:

```
sudo apt-get install build-essential gfortran libopenmpi-dev
```

Instalasi MPI

MPI dalam tutorial ini adalah digunakan MPICH2 yang merupakan program *open source* sehingga dapat diperoleh secara gratis tanpa berbayar. MPICH2 yang digunakan dalam tutorial ini adalah versi 3.0. Adapun langkah-langkah untuk melakukan instalasi adalah sebagai berikut.

- Download program MPICH2 yang dapat diunduh melalui halaman websit resminya

```
http://www.mpich.org/static/downloads/3.3a2/mpich-3.3a2.tar.gz
```

Ekstrak file yang telah berhasil di download dengan perintah:

```
tar -zxvf mpich-3.3a2.tar.gz
```

Masuk ke dalam folder hasil ekstrakan dengan perintah:

```
cd mpich-3.3a2
```

- Lakukan konfigurasi pada program

```
./configure --prefix=/usr/local/src/mpich
```

- Instalasi MPICH2 dengan perintah:

```
sudo make install
```


Setelah proses instalasi selesai maka program mpi telah terinstal pada prefix yang telah disetting.

Instalasi Program Moldy

Moldy merupakan salah satu program simulasi material handal yang bekerja berdasarkan metode dinamika molekul. Moldy dapat diunduh melalui

<http://www.ccl.net/cca/software/SOURCES/C/moldy/moldy-2.12g.tar.gz>

user manual dapat diunduh di

<ftp://ftp.dl.ac.uk/ccp5/MOLDY/moldy.pdf>

- Ekstrak file yang telah berhasil di download dengan:

```
tar -zxvf moldy-2.12.tar.gz
```

- Masuk ke dalam folder hasil ekstrak tersebut untuk melakukan konfigurasi

```
cd moldy
```

- Lakukan konfigurasi pada program

```
env CC=mpicc ./configure --prefix=/usr/local/src/moldy --enable-parallel=mpi
```

Instalasi program Moldy dengan perintah:

```
sudo make install
```

Setelah proses instalasi selesai maka program mpi telah terinstal pada prefix yang telah disetting dan dapat dijalankan secara paralel menggunakan MPI.

Running Program

Perintah yang dapat digunakan untuk menjalankan program moldy secara paralel adalah sebagai berikut:

```
mpiexec -np # moldy control
```

mpiexec adalah perintah dari program MPI yang digunakan untuk menjalankan proses simulasi secara paralel. *-np* (number of processor) adalah perintah untuk penggunaan jumlah prosesor dan diikuti dengan jumlah prosesor yang akan digunakan, dimana tanda # dapat diganti dengan jumlah prosesor yang ingin digunakan dalam simulasi. *moldy* adalah program yang akan dijalankan secara paralel.

moldy.c adalah file input dari program simulasi. *moldy.o* adalah file output hasil simulasi.

Contoh perintah yang dapat digunakan:

```
mpiexec -np 2 moldy control.tip4p
```

PACKMOL

Initial configurations for Molecular Dynamics Simulations by packing optimization

Institute of Chemistry and Institute of Mathematics
University of Campinas
Institute of Mathematics and Statistics
University of São Paulo

The screenshot shows the PACKMOL website interface. At the top, there are three navigation tabs: "Home", "Usage", and "Download". On the left side, there is a sidebar menu with the following items: Packmol, Download, Input Examples, User guide, Utilities, External links, Applications, Reference, Citation, Features, Version history, Download summary, Contact, E-mail, Regular mail, and See also: The TANGO project. The main content area is under the "Usage" tab and contains the following text:

PACKMOL creates an initial point for molecular dynamics simulations by packing molecules in defined regions of space. The packing guarantees that short range repulsive interactions do not disrupt the simulations.

The great variety of types of spatial constraints that can be attributed to the molecules, or atoms within the molecules, makes it easy to create ordered systems, such as lamellar, spherical or tubular lipid layers.

The user must provide only the coordinates of one molecule of each type, the number of molecules of each type and the spatial constraints that each type of molecule must satisfy.

The package is compatible with input files of PDB, TINKER, XYZ and MOLDFY formats.

Below the text, there are two small images showing molecular packing: the top one shows a cross-section of a lamellar structure, and the bottom one shows a cross-section of a spherical structure.

At the bottom of the main content area, there is a note: "If you are having trouble with this page, please go to the github page at [this link], or write to".

B6. Aplikasi Packmol

Aplikasi packmol memerlukan 2 jenis file 1) file *.inp untuk control simulasi 2) file koordinat untuk struktur unit dasar molekul.

Contoh file *.inp

```
tolerance 2.753 #jarak minimum dua atom beda mixing rule LB
seed 132478
nloop 500 #normal 200
```

```
output FePb.opt
```

```
filetype xyz
```

```
structure FePb.xyz
```

```
number 1
```

```
inside box 0. 0. 0. 123.1 124.1 125.2
centerofmass
end structure
```

Contoh file FePb.xyz koordinat dalam format xyz

```
55751
2 0 45.049324 92.5960176
2 0.053013 52.186144 86.474124
2 0.137883 43.98776 47.4051438
2 0.238251 81.087816 119.9602665
2 0.24477 77.705716 109.2665934
2 0.316848 27.91426 47.992113
```

2	0.356454	71.963648	52.7212683
2	0.473919	20.04274	13.0230351
2	0.545997	5.73686	35.1398394
2	0.581421	85.0702	115.2592587
2	0.587817	58.465256	29.2861602
2	0.609342	78.991348	43.1428617
2	0.631728	40.640876	48.622617

Running simulasi dengan Packmol dengan perintah:
\$packmol < control name (enter)

Jika sukses maka setelah simulasi berhenti akan terbaca informasi:
 Writing structure to output file...

Best solution written to file: FePb.opt

 Success!

Final objective function value: .13187E-10

Minimum distance between atoms: *****

Maximum violation of the constraints: .13123E-10

 Please cite this work if Packmol was useful:

L. Martinez, R. Andrade, E. G. Birgin, J. M. Martinez,
 PACKMOL: A package for building initial configurations
 for molecular dynamics simulations.

Journal of Computational Chemistry, 30:2157-2164, 2009.

 Running time: 23.758999 seconds.

B7. File Control dan Spesifikasi Untuk MOLDY

Moldy memerlukan 2 file untuk menjalankan program dinamika molekul yaitu:

1. File control
2. File spesifikasi

Dijalankan dengan perintah: \$moldy control_name output_name (enter)

Contoh File Control:

```

sys-spec-file=data.in
title--Molecular Dynamics of FePb system--
time-unit=1.0181e-14
#density=7.85          #unit gr/mL
lattice-start=1
const-temp=1          # Nose_Hoover Thermostat
temperature=1023
const-pressure = 4 # Andersen constant pressure
pressure = 0.101325
#1 Atm = 0.101325 Megapascals
#text-mode-save=1
save-file=FePbnew.save
#restart-file=FePbnew.restart
backup-file=FePbnew.back
dump-file=FePbnew.dump%d
begin-dump=40000
dump-level=3
dump-interval=1000
scale-options=2
#scale-interval=5
#scale-end=2500

```

```

#steps=84000
nsteps = 100000
print-interval=1000
roll-interval=1000
begin-average=39000
average-interval=1000
step=0.0001 #
subcell=2
#strict-cutoff=1
cutoff=8.125 #2.5 * sigma Oxygen =3.125
begin-rdf=40000
rdf-interval=50
#rdf-out=15000
end

```

Contoh file Spesifikasi:

```

iron 10745
1 0 0 0 55.847 0 Fe
lead 45006
2 0 0 0 207.19 0 Pb
#oxy 114
#3 0 0 0 15.998 0 O
end
lennard-jones
1 1 0.4007 2.3193
2 2 0.1910 3.1888
#3 3 0.0102 3.2480
#1 2 0.7694 2.9071 #AZ-2016-1 (test 5)
#1 2 0.665 2.754# LB-AZ2016-2
#1 2 0.499 2.754# LB-AZ2016-3
#1 2 0.596 2.754# LB-AZ2016-4
#1 2 0.513 2.754# LB-AZ2016-5
#1 2 0.535 2.754# LB-AZ2016-6
#1 2 0.535 2.822# LB-AZ2016-7
1 2 0.513 2.3983# AZ2016-9
#1 2 0.513 2.464# AZ2016-8
#1 2 0.267 2.888#Fe Pb Halgren
#1 2 0.185 2.907 #Fe Pb waldman
#1 2 0.277 2.888#Fe Pb LB Halgren
#1 2 0.277 2.907#Fe Pb LB WH
#1 3 0.0639 2.7837
#2 3 0.0441 3.2184
end
123 124 125.1 90 90 90 1 1 1
lead 0 0.363301 0.740176
lead 0.000431 0.420856 0.69124
lead 0.001121 0.35474 0.378938
lead 0.001937 0.653934 0.958915
lead 0.00199 0.626659 0.873434
lead 0.002576 0.225115 0.38363
lead 0.002898 0.580352 0.421433
lead 0.003853 0.161635 0.104101
lead 0.004439 0.046265 0.280894
lead 0.004727 0.68605 0.921337
lead 0.004779 0.471494 0.234102
lead 0.004954 0.637027 0.344867
lead 0.005136 0.327749 0.38867
lead 0.00519 0.1279 0.92594
lead 0.005229 0.866398 0.885744
lead 0.005372 0.888249 0.628855
lead 0.005424 0.771697 0.554288
lead 0.005599 0.341387 0.32272
lead 0.006046 0.681455 0.248727
lead 0.006056 0.895511 0.23772
lead 0.006202 0.324454 0.820145
lead 0.006286 0.328715 0.344051
lead 0.006418 0.171405 0.171313
lead 0.006511 0.63117 0.933186

```

lead	0.006623	0.075407	0.701272
lead	0.00675	0.41498	0.5158
lead	0.006818	0.293903	0.831859
lead	0.00699	0.055925	0.190975
lead	0.007112	0.115144	0.754395
lead	0.007181	0.275365	0.853873
lead	0.007209	0.299631	0.867723
...
...
...
lead	0.007259	0.522903	0.727964
lead	0.007383	0.472269	0.700043
lead	0.007415	0.033302	0.229994
lead	0.007461	0.157679	0.928154
lead	0.00759	0.646244	0.640998
lead	0.007632	0.339289	0.700673
lead	0.007649	0.711785	0.520324
lead	0.007694	0.80946	0.080675
lead	0.007761	0.213033	0.263871
lead	0.007899	0.435555	0.498816
lead	0.007919	0.764423	0.481118
lead	0.008005	0.550355	0.35658
lead	0.008063	0.108962	0.453108
lead	0.008192	0.472971	0.753102
lead	0.008346	0.240463	0.289258
lead	0.008412	0.776788	0.072868
lead	0.008473	0.970065	0.297779
lead	0.008483	0.46838	0.673483
end			

B8. Publikasi di Pertanika



KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI, DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS JEMBER
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INTERNATIONAL BASIC SCIENCE CONFERENCE
Jl. Kalimantan No. 37 Kampus Tegalboto Kotak Pos 159 Jember 68121
Telepon (0331) 334293 Fax (0331) 330225



No : 005/IBSC/2017

Jember, 28 Februari 2017

Perihal : Informasi Lanjutan tentang Publikasi PERTANIKA-JST

Lampiran : 2 lembar

Kepada Yth:

Bapak/Ibu : Artoto Arkundato

Di Tempat

Dengan Hormat,

Berdasarkan Hasil reviewer The 1st IBSC 2016, kami Mengucapkan SELAMAT kepada bapak ibu atas terpilihnya artikel Bapak/Ibu yang berjudul:

"Thermodynamics properties of components of steel alloys in the high temperature molten liquid lead calculated by MD simulation"

pada seleksi kelayakan untuk publikasi pada jurnal PERTANIKA-JST (indexed Scopus).

Dengan ini, kami menyampaikan beberapa hal terkait dengan biaya (*invoice* terlampir) dan lain-lain seperti tertera dalam syarat dan ketentuan terlampir. Apabila bapak/ibu sudah melakukan pembayaran, maka kami mohon bukti pembayaran dan hasil scan/foto surat pernyataan yang sudah ditandatangani dikirimkan kepada panitia publikasi melalui email : ibsc_fmipa@unej.ac.id.

Demi kelancaran dan ketepatan terbitnya jurnal tersebut, kami mohon perhatian Bapak dan Ibu terhadap *timeline* yang sudah kami tetapkan. Demikian kami sampaikan. Atas perhatian dan kerjasama Bapak/Ibu, kami sampaikan terima kasih.

Ketua Panitia Publikasi,

The 1st Internasional Basic Science Conference



Agung Tjahjo Nugroho, Ph.D



**SYARAT dan KETENTUAN
PUBLIKASI ARTIKEL TERPILIH dari The 1st IBSC 2016
pada PERTANIKA-JOURNAL SCIENCE AND TECHNOLOGY -SPECIAL EDITION**

Sehubungan dengan publikasi hasil penelitian pada the 1st IBSC 2016 yang akan diterbitkan di edisi khusus PERTANIKA-Journal Science and Technology yang sudah terjadwal, maka penulis/peneliti harus memperhatikan syarat dan ketentuan sebagai berikut:

- 1) Biaya Publikasi sebesar Rp. 6.000.000,00 (Enam juta Rupiah) yang digunakan untuk biaya publikasi dan review isi konten dan bahasa Inggris
- 2) Pembayaran Paling lambat tanggal **15 maret 2017, pukul 18:00 WIB** dengan mengirimkan bukti Transfer ke email Panitia : ibsc_fmipa@unej.ac.id
- 3) Review bahasa Inggris yang dimaksud adalah review isi, konten dan struktur bahasa yang disesuaikan dengan standar kualifikasi PERTANIKA-JST.
- 4) Penulis bertanggung jawab atas revisi yang harus dilakukan baik isi, konten dan bahasa berdasarkan saran dari reviewer yang ditunjuk oleh panitia IBSC.
- 5) Timeline proses publikasi sebagai berikut:
 - a. First Language reviews : Februari-Maret 2017
 - b. External reviews : Februari-Maret 2017
 - c. Revised by author : max 30 hari setelah diberikan oleh panitia
 - d. Final Language review : Akhir April 2017
 - e. Draft Submission to PERTANIKA-JST : Awal Mei 2017
 - f. Revise (if possible) : bergantung pada PERTANIKA-JST
 - g. Final Submission : bergantung pada ada tidaknya revisi
 - h. Published : akhir 2017
- 6) Segala keterlambatan dan ketidakmampuan dalam revisi baik konten, isi dan bahasa menjadi tanggung jawab penulis dan timnya sepenuhnya. Dikarenakan deadline Pertanika sangat ketat maka artikel yang tidak berhasil diperbaiki akan ditinggal atau tidak disertakan dalam penerbitan dan biaya yang sudah dibayarkan tidak dikembalikan.
- 7) Jika karena sesuatu hal yang tidak bisa dihindari dan/atau terjadi kesalahan panitia sehingga publikasi ke edisi khusus jurnal PERTANIKA-JST tidak terjadi maka semua biaya yang sudah dibayarkan akan dikembalikan seutuhnya.
- 8) Hasil review pada tahap berikutnya akan dikirimkan ke Peserta sesuai dengan timeline jika pembayaran sudah dilakukan.

PERNYATAAN

Dengan ini Saya menyatakan sudah membaca, menerima, menyetujui 'Syarat Dan Ketentuan Publikasi Artikel Seminar IBSC 2016 Pada PERTANIKA-JST (Journal of Science and Technology) di atas, dan mengerti dan memahami seluruh isinya, serta bersedia untuk mempublikasi artikel saya yang berjudul

"Thermodynamics properties of components of steel alloys in the high temperature molten liquid lead calculated by MD simulation"

pada jurnal PERTANIKA-JST (Journal of Science and Technology).

Penulis

(Artoto Arkundato)

Physics Department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences. University of Jember



Invoice

Invoice Number: IBSC 28204

Date: Februari 28, 2017

Bill to: Artoto Arkundato

Please transfer the full payment of fees by Electronic/Bank for Your Publication Fee to:

Account Name : YENI MAULIDAH MUFLIAH
Account Number : 8123180825
Name of Bank : BNI
Branch : Kantor Cabang Jember, Indonesia
Swift Code : BNINIDJA
Reference code : IBS28204

Quantity	Description	Unit Price	Net Amount
1	Mr/Mrs Artoto Arkundato Fees: IBSC Publicatio fee 2016 at PERTANIKA Journal	Rp. 6.000.000,-	Rp. 6.000.000,-
		Net:	Rp.6.000.000,-
		Vat:	0,-
		Amount Due:	Rp. 6.000.000,-

Payment Deadline **March 15, 2017 at 18:00 WIB**

The First INTERNATIONAL BASIC SCIENCE CONFERENCE 2016
Secretariat and contact:
Faculty of Mathematics and Natural Sciences, The University of Jember
Jember- Indonesia 68121

Phone +62-331-334293
Fax +62-331-330225
Email: ibsc.fmipa@unej.ac.id

Thermodynamics properties of components of steel alloys in the high temperature molten liquid lead calculated by MD simulation

Artoto Arkundato¹⁾, Zaki Su'ud²⁾, Sujito¹⁾

¹⁾Physics Dept., Faculty of Math and Natural Sciences, University of Jember

²⁾Physics Dept., Faculty of Math and Natural Sciences, ITB

email: a.arkundato@unej.ac.id

Abstract—The material degradation of steels occurs in the liquid-metal-coolant fast-nuclear-reactors is still a major problem in current days. Some novel materials and new mechanism of corrosion inhibition then need to be designed and developed to overcome the problem. To get a novel needed material and also knowing the corrosion inhibition mechanism, we can use computational methods as MD molecular dynamics method. Using MD method we can propose a new material and corrosion inhibition mechanism by calculating the physical/ thermodynamical properties of the material. Finding the best value of the physical thermodynamical properties of the purposed material then we can find and take a conclusion a good alternative solution of the corrosion problem. In current work we studied nickel-chromium-iron material with certain each concentration and using oxygen atom for corrosion inhibitor. We want to see the performance of the Ni-Cr-Fe steel in molten lead without oxygen injection and with oxygen injection. The information about thermodynamics properties as diffusion coefficient of the NiCrFe material within molten lead is very useful for designing a fast nuclear reactor.

Index Terms—High temperature corrosion, liquid metals, molecular dynamics, diffusion coefficient

Introduction

A liquid metal cooled nuclear reactor is advanced type of nuclear reactor where the primary coolant is a liquid metal as lead liquid. The metal coolants have much higher density than the water coolant and they remove heat more rapidly and also allow much higher power density. This makes the metal coolants attractive in situations where size and weight are important, like on ships and submarines. The high temperature of the liquid metal can be used to produce higher temperature vapour than in a traditional water cooled reactor, leading to a higher thermodynamic efficiency issue. The liquid metals used typically need good heat transfer characteristics. This benefit makes them attractive for improving power output in conventional nuclear power plants. However, though there are many advantages of using liquid metals, there are also difficulties related to: fire hazard risk (for alkali metals), corrosion (for lead and lead-bismuth metals), etc [1,2]. The corrosion problem of using liquid lead as a coolant is a current major issue in nuclear reactor design. We need to overcome this problem by finding a mechanism of corrosion inhibition or using a new corrosion resistance materials. Operating the lead cooled reactor at temperature of 550 °C is readily achievable but 800°C is envisaged with support of advanced novel materials to provide lead corrosion resistance at high temperature where it would enable thermochemical hydrogen production.

In this current work we want to study computationally the corrosion problem that rise in liquid lead coolant. We want to study how to inhibit the corrosion and also how the used steel material performance under high temperature molten lead. We use the molecular dynamics simulation method that is a one of powerful computational tools. For inhibition we will use popular oxygen agent, and for steel material we use nickel-chromium-iron for preliminary study. As we know nickel base alloys are used in many applications where they are subjected to high temperature environments. Nickel chromium alloys or alloys that contain more that about 15% Cr are used to provide a resistance at temperatures exceeding 760 °C as inside of reactor core. Nickel-

chromium-iron alloys have been developed to provide high strength and excellent corrosion resistance. This group of alloys led the way to higher strength and resistance to elevated temperatures.

THEORY

Potential Energy

Materials or system of materials are composed of atoms. Among atoms there are interaction forces that mathematically can be described by potential energy function. For different form, type or phase of materials there may be also a different interaction or potentials. There are many kinds of interaction potential: van der Waals, hard-sphere, Lennard-Jones (LJ), ionic, Sutton-Chen, Gupta and Embedded Atomic Method (EAM), etc. The LJ potential is the most popular one that may be applicable for many materials or systems. The EAM potential is used for metal systems [3].

.....

CONCLUSIONS

The simulation work has shown an important conclusion. The use of FeCrNi steel alloy has strengthened the material used in liquid lead rather than using pure iron. Further, injecting the oxygen into liquid molten lead has reduced the corrosion significantly. In our work we use oxygen 0.75% of number of lead atoms. The use of oxygen 0.75% based on the previous results as shown in reference. The suggestions for future works, we need to more detail of simulation for many different oxygen concentrations. Also we need to use more accurate potential energy to predict all physical properties.

References

- [1] Zhang, J. and Li, N., "Review of the studies on fundamental Issues in LBE", *J. Nucl. Mater.* 373 351-377 (2008).
- [2] Yun Gao, Minoru Takahashi, Masao Nomura, "Characteristics of iron and nickel diffusion in molten lead-bismuth eutectic", Advance Publication by J-STAGE, The Japan Society of Mechanical Engineers, DOI:10.1299/mej.15-00149, J-STAGE Advance Publication date: 27 October, 2015
- [3] Soontrapa, C., Chen, Y., "Optimization approach in variable-charge potential for metal/metal oxide systems", *Comput. Mater. Sci.* 46 (4), 887, (2009)
- [4] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani "Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor", *AIP Conference Proc.*, Vol.1454, pp.65, (2012) USA
- [5] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, Celino, M. "Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method", *AIP Conference Proc.*, Vol. 1448, (2012) USA
- [6] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, " Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method", *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, Vol. 3, No. 1, January 2013, , Singapore.
- [7] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, "Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic", *Turkish Journal of Physics*, DOI: 10.3906/fiz-1112-12, (2013)
- [8] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, Celino, M., "Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study", Vol.62, Pages 298-306, *Annals of Nuclear Energy*, (2013) Elsevier

[9] Arkundato, A., Su'ud, Z., Sudarko, Hasan, M., Celino, M., "Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor", *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 622(2015) 012009, (2015), IOP Publishing.

[10] Zhen, S., Davies, GJ., "L-J n-m potential energy parameters: calculation of the LJ n-m pot energy parameters for metals", *Phys.Stat.Sol.(a)*, 78, 595, (1983).

[11] Refson, K., "Moldy: A Portable molecular dynamics simulation program for successive and parallel computers", *Comp. Phys. Commun.* 126(3) 309-328, (2000).

[12] Stukowski, A. "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool", *Simul. Mater.Sci. Eng.* 18, 2010.

B.9.1 Publikasi di Jurnal Material Research

ScholarOne Manuscripts

<https://mc04.manuscriptcentral.com/mr-sciel>

ScholarOne Manuscripts™ | Artoto Arkundato | Instructions & Forms | Help | Log Out

SciELO Materials Research

Home | Author

Author Dashboard

1 Submitted Manuscripts

Start New Submission

Legacy Instructions

5 Most Recent E-mails

Submitted Manuscripts

STATUS	ID	TITLE	CREATED	SUBMITTED
ADM: Zanolto, Luciana Awaiting Admin Processing	MR-2017-0888	New Mixing Formula (AZFMZ) of Lennard-Jones Potential Parameters for Studying the Liquid Metals Corrosion using Molecular Dynamics Method View Submission	29-Sep-2017	29-Sep-2017

New Mixing Formula (AZFMZ) of Lennard-Jones Potential Parameters for Studying the Liquid Metals Corrosion using Molecular Dynamics Method

Artoto Arkundato^a, Zaki Su'ud^b, Fiber Monado^c, Misto^d, Zulfikar^e

^{a,d} Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Jember, Jl Kalimantan 37, Jember (68121), Jawa Timur, Indonesia

^b Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, ITB, Jl Ganesha 10, Bandung, Jawa Barat, Indonesia

^c Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Sriwijaya Jl. Palembang – Prabumulih, Ogan Ilir (30662), Sumatera Selatan, Indonesia

^e Chemistry department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Jember, Jl Kalimantan 37, Jember (68121), Jawa Timur, Indonesia

It has been investigated the accurate of several mixing formulas of Lennard-Jones (LJ) potential parameter in studying the liquid metal corrosion phenomena. The potential is a popular one but it is very simple to represent an atomic interaction for metals system. However, for high temperature liquid metal corrosion, from our previous work, we saw that the LJ potential was still good enough to be applied as a prediction. The LJ potential application for multi-components system needs a mixing formulas to describe the interaction among atoms. In this research we study several available mixing formulas, making a comparison among them and also trying to find a new best mixing formula. Our new mixing formula shows there is only 3.57% error, out of the experimental data, for predicting the diffusion coefficient of iron in liquid lead coolant. There is significant improvement compared with other investigated mixing formulas.

Keywords: *Molecular dynamics simulation, liquid metals corrosion, mixing formula*

----- contents -----

7. References

1. Zhang J, Li N, Review of the studies on fundamental issues in LBE. *Journal of Nuclear Materials*. 2008; 373: 351-377
2. Zelenskii G K, Ioltukhovskii A G, Leont'eva-Smirnova M V, Naumenko I A, Tolkachenko S A. Corrosion resistance of fuel element steel cladding in a lead coolant. *Metal Science and Heat Treatment*. 2007; 49: Nos.11-12, 533 - 538.
3. Kashezhev A Z, Ponegev M Kh, Sozaev V A, Khasanov A I, Mozgovo A G. An experimental investigation of the wetting of reactor steels with molten lead and bismuth. *High Temperature*. 2010; 48: 756.
4. Maulana A, Su'ud Z, Hermawan K D, Khairurrijal. Simulation study of steels corrosion phenomenon in liquid lead-bismuth cooled reactors using molecular dynamics methods. *Progress in Nuclear Energy*. 2010; 50: 616-620.
5. Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajuddin A, Widayani. Corrosion study of Fe in a stagnant liquid Pb by molecular dynamics methods. *AIP Conference Proceedings*. 2010; 1244: 136-144.
6. Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajuddin A, Widayani S, Massimo C. Numerical study: iron corrosion-resistance in lead-bismuth eutectic coolant by molecular dynamics method. *AIP Conference Proceedings*. 2012; 1454: 65.

7. Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A, Widayani. Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method. *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, 2013; 3:1.
8. Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A, Widayani. Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic. *Turkish Journal of Physics*. DOI: 10.3906/fiz-1112-12
9. Arkundato A, Su'ud Z, Mikrajudin A, Widayani, Celino M. Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study. *Annals of Nuclear Energy*. 2013; 62: 298–306.
10. Arkundato A, Su'ud Z, Sudarko, Hasan M, Celino M. Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor. *IOP Journal of Physics: Conference Series*. 2015; 622: 012009.
11. Arkundato A, Su'ud Z, F Monado. Effect of temperature on the corrosion inhibition of iron in liquid lead using oxygen inhibitor: studied by MD simulation. *IOP Journal of Physics: Conference Series*. 2017; 853: 012046.
12. Rivai A K, Takahashi M. Corrosion characteristics of materials in Pb–Bi under transient temperature conditions. *Journal of Nuclear Material*. 2010; 398: 139.
13. Bolind, A M. PhD Thesis, Nuclear Engineering, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois, USA, 2009. Access on <https://core.ac.uk/download/pdf/4824822.pdf>
14. Soontrapa C, Chen Y. Optimization approach in variable-charge potential for metal/metal oxide systems, *Computational Material Science*. 2009; 46: 887.
15. Ali Khalaf Al-Matar, David A Rockstraw. A Generating Equation for mixing rules and two new rules for interatomic potential energy parameters. *Journal of Computational Chemistry*. 2004; 25: 660-668
16. Refson K. Moldy: A Portable molecular dynamics simulation program for successive and parallel computers. *Computer Physics Communication*. 2000; 126: 309-328.
17. Zhen S, Davies G J. L-J n-m potential energy parameters: calculation of the LJ n-m pot energy parameters for metals. *Physics Status Solidi (a)*. 1983; 78; 595.
18. Brodholt J, Wood B. Molecular dynamics simulations of the properties of CO₂-H₂O mixtures at high pressures and temperatures. *American Mineralogist*. 1993; 78: 558.
19. Manly, W D. *Fundamentals of liquid-metal corrosion*. 1959. Accessed on September 2017 from website: <https://doi.org/10.5006/0010-9312-12.7.46>

20. Kupryazhkin A Y, Zhiganov A N, Risovany D V, Nekrassov K A, Golovanov V N. Simulation of diffusion of oxygen and uranium in uranium dioxide nanocrystals. *Journal of Nuclear Materials*. 2008; 372: 233.
 21. L Martínez, R Andrade, E G Birgin, J M Martínez. Packmol: A package for building initial configurations for molecular dynamics simulations. *Journal of Computational Chemistry*. 2009; 30: 2157-2164
 22. Stukowski A. *Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO - the Open Visualization Tool. Modelling and Simulation in Material Sciences and Engineering*. 2010; 18:015012 or <http://ovito.org>
 23. Lemmon E W, Jacobsen R T. Viscosity and thermal conductivity equations for nitrogen, oxygen, argon. *International Journal of Thermophysics*. 2004; 25: 21.
 24. Hanson R. *Jmol – a paradigm shift in crystallographic visualization*. *Journal of Applied Crystallography*. 2010; 43:1250-1260, doi:10.1107/S0021889810030256
-

B.9.2 Draft Artikel Publikasi di Jurnal Atom Indonesia

Atom Indonesia

The temperature dependence diffusion coefficient calculation of iron, boron and iron-boron interaction by molecular dynamics simulation

A. Arkundato^{1*}, Asril P.A.M², F. Monado³, A.N. Rosli⁴, F. Aziz⁵

¹Physics Department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, Jember University, Jl. Kalimantan 37, Jember, Jawa Timur, Indonesia

²Physics Department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, ITB, Jl. Ganesha 10, Bandung, Jawa Barat, Indonesia

³Physics Department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, Sriwijaya University, Palembang, Sumatra Selatan, Indonesia

⁴Faculty of Science and Technology, Universiti Sains Islam Malaysia (USIM), Negeri Sembilan, Malaysia

⁵Center for Science and Technology of Advanced Materials, National Nuclear Energy Agency, Serpong, Indonesia

ARTICLE INFO

ABSTRACT

AIJ use only:

Received date
Revised date
Accepted date

Keywords:

Molecular Dynamics

Lennard-Jones

Lorentz-Berthelot

Diffusion Coefficient

Iron-Boron

Arrhenius

It has been calculated the self-diffusion and inter-diffusion coefficient of iron, boron and iron-boron as temperature function using molecular dynamics simulation method. The diffusion coefficient is very important data for knowing the physical and chemical phenomena of material processes. However, the diffusion coefficient data are not always available from experimental measurements, as so many applications using this data as an input for calculation. Then the computational molecular dynamics method shows an important tool for predicting the needed properties of material under consideration. In this work we predict the diffusion coefficient based on the Lennard-Jones potential under scheme of Lorentz-Berthelot mixing formula as the atomic interaction of material for molecular dynamics simulation application. It is from simulation we can determine the temperature dependence of diffusion coefficient of boron, iron and iron-boron for simple prediction of those values. The validity of the calculation should depend on the best potential energy function of materials.

© 2017 Atom Indonesia. All rights reserved

INTRODUCTION

The thermodynamics properties of materials as diffusion coefficients are very important to study the mechanism and physical-chemical processes in order to know the possible applications. Especially in nuclear reactors these data are used to design for efficient, safety and economical consideration. In this research we study the self and inter diffusion of iron and boron. The steels or other structural materials in nuclear power plant has usually iron material as a major component. The coolant that used in heat-transfer system can be many possible materials and some small quantity of specific material can be injected into for specific purposed. For example, in our previous work [1-6] we injected a small certain concentration of oxygen into high temperature molten liquid lead coolant (and also lead bismuth eutectic) in order to reduce the corrosion attack. We can also apply nitrogen as inhibitor to lower the corrosion rate of iron [7]. Experimentally, the use of oxygen for reducing corrosion rate of steels in liquid metal also investigate intensively by other researchers [8,9]. In our above previous work we study the integrity of material by utilizing the diffusion coefficient based on the computational molecular dynamics

----- contents -----

B.10 Seminar Internasional

B.10.1 International Conference on Energy Sciences (ICES 2016)

ITB Bandung, Indonesia

ICES 2016 <ices.conf@gmail.com>

to me

Dear Dr. Arkundato,

We have received the submission of your abstract:

Title:
Equations of Mixing Rules and New Mixing Formula for Lennard-Jones Interatomic Potential Energy
Parameters Used for Liquid Metal Corrosion Study

Authors:

1) Artoto Arkundato and 2) Zaki Suud

Institutions:

1) Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember, Jember, Jl. Kalimantan 37 Jember, Indonesia

2) Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, ITB, Bandung, Jl. Ganesha 10, Bandung, Indonesia

* Corresponding author.

E-mail address: a.arkundato@unej.ac.id

Content:

Nowadays the used of liquid metals as lead liquid and/or lead-bismuth liquid as coolant materials in fast nuclear reactor applications is an interest of the research. Many advantages rise from the used of these materials, however from some facts of experiments there is still a major problem. The liquid metals show high corrosion behaviour onto the used structural materials as steels. Many computational study have been done by researchers and one of the powerful tools is to use the molecular dynamics method. The molecular dynamics methods need a potential energy for running simulation. The simple potential energy function but very powerful as an early calculation approximation is Lennard-Jones potential with certain mixing rules for different element interaction. In this research we worked to compare several equations of mixing rules and also suggest a new mixing rules that may be used in the liquid metal corrosion study. For simplification we focus on the iron corrosion in the stagnant liquid lead environment. The LAMMPS molecular dynamics program was used for simulation and calculation. The Packmol program used for preparation of the input whereas the Ovito program was used for analysis and visualization.

Keywords:

Molecular dynamics, Lennard-Jones, Mixing Rules, Liquid Metal Corrosion.

Topic:

Nuclear Energies

Thank you very much.

Best Regards,

ICES 2016 Organizing Committee

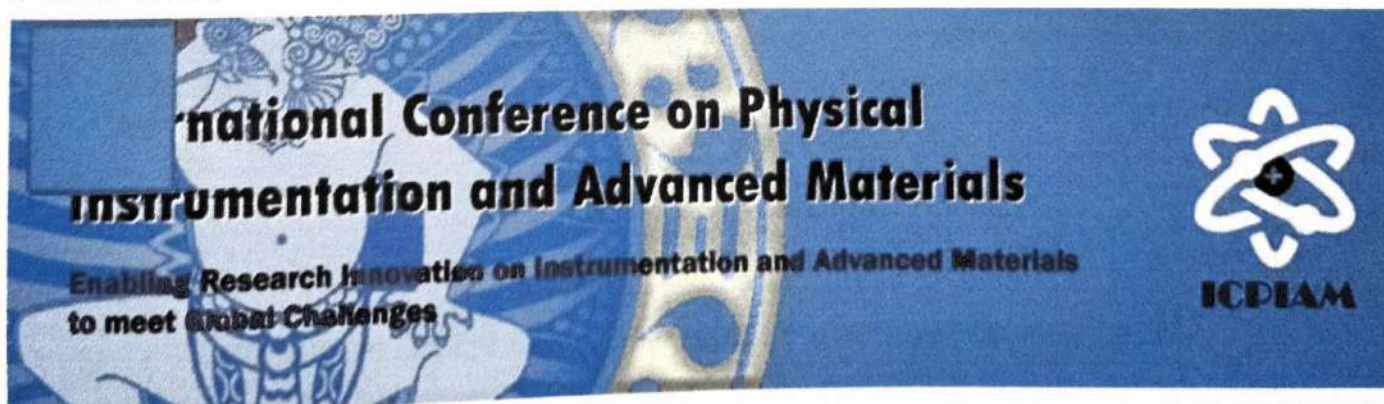
Website: <http://portal.fi.itb.ac.id/ices2016>

Email: ices.conf@gmail.com

B.10.2. SEMINAR INTERNASIONAL ICPIAM

The International Conference on Physical Instrumentation and Advance Material (ICPIAM)

UNAIR, Surabaya, Indonesia



Dear Artoto Arkundato

We are pleased to inform you that your abstract submitted to The International Conference on Physical Instrumentation and Advance Material (ICPIAM) 2016 is accepted for oral presentation entitled :

We kindly invite you to attend the ICPIAM 2016 that will be held in Surabaya, Indonesia on October, 27, 2016. We send you Letter of Abstract Acceptance and Registration Form in attachment file. Please

send back the Registration Form via email icpiam2016@fst.unair.ac.id before October, 15, 2016 to complete administrative requirement.

We would like to give some updated information about ICPIAM 2016 Conference :

Deadline of full paper submission : October, 25, 2016

Deadline of conference payment : October, 15, 2016

All payment can be done by a bank transfer to our account at :

Bank Name : Bank Mandiri

Bank Branch Name : Cabang Unair

Account Number : 141 00 0985029 8

Account Holder Name : Dyah Hikmawati

Your presence at the event would be great honor for ICPIAM 2016 Committee.

This international seminar will be an opportunity for researchers and practitioners to share new ideas and establish new collaboration in research

B.10.3. SEMINAR INTERNASIONAL, ICCSE Juli 2017, ITB Bandung, Indonesia



B.10.4 Sertifikat Workshop CMD



B11. Website penelitian Dr. Artoto Arkundato

(<http://www.cmse-unej-research.net/home/>)

