

Laporan Akhir
PENELITIAN BERBASIS KOMPETENSI



**Upaya Menemukan Material Terstruktur, Inhibitor dan Metode Baru
Penghambatan Korosi Logam Cair untuk Aplikasi Reaktor Nuklir Cepat Dengan
Metode Dinamika Molekul Paralel Terakselerasi**

TIM PENGUSUL

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si. (NIDN 0025126901)
Drs. Moh. Hasan, M.Sc., Ph.D (NIDN 0004046404)
Endhah Purwandari, S.Si., M.Si (NIDN 0025027002)

UNIVERSITAS JEMBER
November 2018

HALAMAN PENGESAHAN

Judul : Upaya Menemukan Material Terstruktur, Inhibitor dan Metode Baru Penghambatan Korosi Logam Cair untuk Aplikasi Reaktor Nuklir Cepat Dengan Metode Dinamika Molekul Paralel Terakselerasi

Peneliti/Pelaksana
 Nama Lengkap : Dr ARTOTO ARKUNDATO, S.Si, M.Si
 Perguruan Tinggi : Universitas Jember
 NIDN : 0025126901
 Jabatan Fungsional : Lektor
 Program Studi : Fisika
 Nomor HP : 081334570022
 Alamat surel (e-mail) : a.arkundato@unej.ac.id

Anggota (1)
 Nama Lengkap : Dr. Drs MOHAMMAD HASAN
 NIDN : 0004046404
 Perguruan Tinggi : Universitas Jember

Anggota (2)
 Nama Lengkap : ENDHAH PURWANDARI
 NIDN : 0011118102
 Perguruan Tinggi : Universitas Jember

Institusi Mitra (jika ada)
 Nama Institusi Mitra : -
 Alamat : -
 Penanggung Jawab : -
 Tahun Pelaksanaan : Tahun ke 1 dari rencana 2 tahun
 Biaya Tahun Berjalan : Rp 121,000,000
 Biaya Keseluruhan : Rp 121,000,000



Mengetahui,
 Dekan Fakultas MIPA

(Drs. Sujito, Ph.D)
 NIP/NIK 196102041987111001

Kab. Jember, 14 - 11 - 2018
 Ketua,

(Dr ARTOTO ARKUNDATO, S.Si, M.Si)
 NIP/NIK 196912251999031001



Menyetujui,
 Ketua LPPM

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

DAFTAR ISI

Halaman Sampul	1
Halaman Pengesahan	2
Daftar Isi	3
Ringkasan	4
Bab 1 Pendahuluan	6
Bab 2 Uraian Kegiatan	14
Bab 3 Metode Penelitian	16
Bab 4 Hasil penelitian yang telah dicapai	18
	20
REFERENSI	43
LAMPIRAN	44
Lampiran 1. BIODATA KETUA dan ANGGOTA TIM PENGUSUL.....	44
Lampiran 2. Susunan Organisasi Tim Pengusul dan Pembagian Tugas.....	57
Lampiran 3. Surat pernyataan ketua peneliti dan tim peneliti.....	59

RINGKASAN

Dengan semakin meningkatnya kebutuhan listrik industri dan rumah tangga maka keberadaan sumber energi alternatif yang dapat diperbaharui seperti energi nuklir di Indonesia akan menjadi sangat vital di masa datang. Salah satu sumber energi yang menjanjikan ditinjau baik dari sisi efisiensi, fleksibilitas penggunaan, keselamatan maupun nilai ekonomi adalah pemanfaatan reaktor nuklir cepat berpendingin logam cair. Desain reaktor ini mempunyai banyak keunggulan dibanding reaktor termal yang telah ada sebelumnya, terutama telah mengadopsi konsep "keselamatan melekat" (*inherent safety*) yang tentu saja merupakan perbaikan dari desain reaktor termal yang umum digunakan.

Di samping banyak keunggulannya namun pemanfaatan reaktor cepat ini desainnya masih terkendala dengan adanya fenomena korosi material baja yang digunakan dalam teras reaktor. Penelitian ini secara umum bertujuan ingin mendapatkan kesimpulan yang komprehensif bagaimana fenomena kerusakan/korosi material oleh logam cair dapat dijelaskan dan diketahui solusi penghambatannya. Logam cair itu sendiri adalah media pendingin untuk menyalurkan panas keluar reaktor untuk memanaskan air menjadi uap penggerak turbin listrik. Lebih jauh lagi juga perlu mencari material baru yang sanggup menggantikan jenis baja umum yang sekarang digunakan, baik apakah itu baja paduan baru atau bahan keramik yang sudah diketahui tahan panas tinggi.

Secara khusus penelitian ini fokus pada upaya mencari material nuklir baru baik itu adalah baja/keramik atau inhibitor yang digunakan dalam reaktor. Berbeda dengan penelitian sebelumnya yang sudah dikerjakan tim pengusul yang menggunakan metode/pendekatan dinamika molekul *klasik* dengan potensial yang ada di komunitas komputasi material (jurnal/website) maka dalam penelitian yang sekarang diajukan ini akan mengkaji fenomena korosi menggunakan metode dinamika molekul dengan investigasi potensial interaksi yang baru agar dapat menghasilkan penelitian yang lebih akurat.

Penelitian ini direncanakan dalam dua tahun penelitian yaitu 2018 dan 2019. Pada penelitian tahun pertama sampai pada bulan September 2018 hasil-hasil yang sudah dicapai telah dan akan dipublikasikan pada tiga seminar internasional yaitu UPIS 1-2 Mei 2018 di UNNES Semarang dengan *selected paper* dipublikasikan pada IOP Journal of Physics jurnal terindeks Scopus, dan Seminar Internasional of Energy Systems ICES 2018 25-26 September 2018 di ITB Bandung dengan untuk *selected paper* akan diterbitkan di Jurnal Internasional terindeks Scopus, serta akan dipublikasikan juga hasil penelitian pada International Conference ICANSE 2018 bidang nuklir di ITB Bandung yang juga akan dipublikasikan pada Journal terindeks scopus. Hasil terpenting dari penelitian ini juga sedang disusun draft artikel untuk submit jurnal internasional regular yaitu mengenai rumusan baru Mixing Formula interaksi antar type atom dalam bahan. Hasil dari penelitian ini juga berupa buku (teksbook) hasil penelitian. Dalam penelitian ini juga dilibatkan dua orang mahasiswa Tugas Akhir S1 dan S2. Hasil-hasil penelitian ini secara umum diharapkan dapat menjadi landasan/inisiasi pengembangan sumber energi terbarukan khususnya dalam bidang pengembangan tenaga nuklir. Pada penelitian ini peneliti utama juga menjadi *invited speaker* pada Seminar Internasional UPIS 2018. Pada penelitian ini juga didapatkan model interaksi material yang baru.

Keyword: Reaktor Nuklir, Korosi logam cair, Inhibitor, model material, simulasi dinamika molekul

KATA PENGANTAR

Alhamdulillah, laporan akhir hibah Penelitian Dasar 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.

Hasil-hasil penelitian ini yang akan menjadi dasar untuk pengembangan penelitian selanjutnya, dimana pada penelitian ini telah diperoleh prosedur komputasi yang akurat serta model interaksi pasangan atom tak sejenis yang lebih akurat untuk dapat menghasilkan perhitungan yang sesuai dengan hasil eksperimen. Dengan demikian diharapkan pada penelitian berikutnya akan lebih banyak hasil-hasil penting yang akan dicapai dan dapat dipublikasikan pada jurnal bergengsi yang lain.

Tak lupa peneliti mengucapkan banyak terima kasih pada DRPM DIKTI RI atas bantuan finansial untuk penelitian ini. Juga terima kasih kami sampaikan kepada Universitas Jember dan semua pihak yang telah membantu pelaksanaan penelitian ini.

Jember, 10 November 2018
Ketua Peneliti



Dr. Artoto Arkundato

BAB 1 PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang Penelitian

Dewasa ini kebutuhan listrik di Indonesia banyak disuplai dari PLTU (Pembangkit Listrik Tenaga Uap) yang memerlukan bahan bakar fosil sebagai sumber energi penggerak turbin. Salah satunya adalah batubara. Menurut PT PLN kebutuhan operasional PLTU di Indonesia memerlukan 82 juta ton per 2015 yang merupakan peningkatan 17,1% dibanding realisasi kebutuhan batubara dari tahun sebelumnya yang 70 juta ton. Kebutuhan ini akan terus meningkat setiap tahunnya karena pemerintah telah mencanangkan pembangunan 35 ribu MW pembangkit listrik kedepan, karena 60% tambahan pasokan listrik tersebut berasal dari PLTU. Menurut PLN maka untuk operasional 1 MW PLTU membutuhkan batubara 4 ribu ton, sehingga untuk 60% PLTU nantinya yang akan dibuat akan memerlukan 100 juta ton batubara per tahun.

(<http://www.cnnindonesia.com/ekonomi/20150311071443-85-38215/2015-pln-butuh-82-juta-ton-batubara-untuk-pembangkit-listrik/>).

Walaupun di Indonesia ada 12 milyar ton batubara akan tetapi jumlah ekspor yang tinggi diduga batubara Indonesia akan habis 20 tahun lagi. Menurut buku putih PLTN (SDM) batubara dan minyak akan habis pada 2025. Jadi darimana lagi sumber energi listrik Indonesia?

(http://www.kompasiana.com/bob911/thorium-sumber-energi-1000-tahun-kedepan_55ddc704cf92732c0af714f4)

Salah satu solusi alternatif yang sangat menjanjikan dan terbukti mampu mengatasi kekurangan sumber daya alam energi adalah pemanfaatan energi nuklir. Bahan bakar pembangkit listrik tenaga nuklir (PLTN) dapat menggunakan Uranium atau yang lebih efisien lagi menggunakan Thorium. Secara kasar 1000 ton batubara yang dibakar habis untuk dikonversi menjadi listrik melalui PLTU setara dengan 1 kg uranium yang dikonversi menjadi listrik melalui proses/reaksi pembelahan inti (fission). Jadi dapat dibayangkan betapa efisiennya energi nuklir jika dapat dimanfaatkan. Menurut pengamat energi nasional Marwan Batubara maka pengembangan energi nuklir sudah memiliki payung hukum yakni Peraturan Presiden Nomor 5 Tahun 2006 tentang Kebijakan Energi Nasional. Dalam Perpres tersebut disebutkan, nuklir menjadi energi baru yang dapat dikembangkan. Menteri Energi dan Sumber Daya Mineral, Sudirman Said juga mengatakan, sesuai dengan rencana umum energi nasional (RUEN), opsi pengembangan nuklir untuk memenuhi bauran energi nasional

dengan porsi EBT (energi baru terbarukan) sebanyak 23 persen pada tahun 2025, perlu segera dipersiapkan tindak lanjutnya. "Sudah waktunya kita menutup polemik tentang PLTN, dan *move on* dengan langkah langkah yang lebih progresif. "Saatnya kini kita menyiapkan peta jalan (road map) untuk pembangunan PLTN".

(<http://nasional.republika.co.id/berita/nasional/umum/16/07/17/oagd33368-indonesia-dinilai-butuh-energi-nuklir>)



Gambar 1. Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir (kiri). Cladding Baja wadah uradium

Persoalan utama pembangunan PLTN di Indonesia tampaknya masih pada persoalan perlu tidaknya Indonesia mengembangkan PLTN?. Aman tidak PLTN dikembangkan? Bagaimana posisi Indonesia di antara negara-negara di dunia? Indonesia telah 40 tahun mempersiapkan pengembangan PLTN sejak 1960-an namun sampai saat ini belum terbangun PLTN untuk listrik industri. Menurut *Nuclear Energy Institute* "tercatat hingga Mei 2016, 30 negara di seluruh dunia mengoperasikan 444 reaktor nuklir untuk pembangkit listrik dan dalam proses pembangunan 63 pembangkit listrik tenaga nuklir baru di 15 negara." Di Asia sendiri, direncanakan pada tahun 2030, China menargetkan memiliki sumber energi sebesar 150 gigawatt, Malaysia 1 GWe; Vietnam. 10 GWe; dan Indonesia, 35 GWe. Sedangkan di Perancis, 75 % kebutuhan listriknya dipenuhi oleh Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir. Untuk saat ini Indonesia sudah mulai mendesain/membangun PLTN penelitian yaitu PLTN skala kecil yang ditujukan untuk persiapan pembangunan PLTN yang sesungguhnya.

(<http://www.batan.go.id/index.php/id/ke deputian/manajemen/hhk/2694-belajar-dari-kebutuhan-listrik-singapura>).

Amerika Serikat adalah negara yang mempunyai jumlah PLTN terbanyak di dunia yaitu 99 buah, Perancis 58 buah, disusul Jepang 43 buah, India 22 buah, Inggris 15 buah dan Indonesia baru menyaipkan.

(<https://www.euromuclear.org/info/encyclopedia/n/nuclear-power-plant-world-wide.html>.)

Jadi dengan melihat perkembangan yang ada maka BATAN sebagai Badan Tenaga Nuklir Nasional berusaha menyiapkan baik sumber daya manusia, sumber daya alam untuk PLTN yaitu sumber-sumber uranium di Indonesia dan juga sarana dan prasarana. Batan telah menyiapkan *RoadMap* untuk penggunaan Nuklir beberapa puluh tahun kedepan. Sampai beberapa tahun kedepan maka SDM dan sains-teknologi nuklir di Indonesia harus tetap dijaga ketersediaannya dalam kuantitas tertentu sambil menguatkan kemampuan SDM-SDM Indonesia di bidang nuklir dan menunggu keputusan pasti pembuatan PLTN yang pertama di Indonesia dari para pemangku kebijakan. **Bagaimana peran peneliti perguruan tinggi?** Para peneliti dari perguruan tinggi harus terus mengembangkan kemampuannya dalam riset dasar dan terapan di bidang nuklir karena SDM-SDM baru yang menggantikan SDM-SDM lama yang sudah purna tugas tentu saja harus terus dihasilkan dari institusi perguruan tinggi baik SDM S1, S2 maupun S3. Pembangunan dan pengembangan PLTN yang mandiri tidak dapat dilakukan secara instan karena SDM-SDM harus sudah tersedia dan siap. Tidak seperti pembangunan PLTU/PLTA/PLTG misalnya yang dapat dibangun dalam waktu singkat beberapa tahun saja maka pembangunan PLTN memerlukan waktu yang lama mulai tahap perencanaan sampai tahap realisasi sampai dapat dioperasikan dapat saja memerlukan waktu 10-15 tahun. Apalagi bagi Indonesia yang baru memulai. (<http://pappiptek.lipi.go.id/web/berita/detail/27>)

Pembangunan PLTN di Indonesia sebenarnya sudah siap baik dari sisi SDM, sumber bahan tambang uranium maupun lokasi pembangunan yang aman menurut *survey* yaitu di beberapa tempat yang tidak rawan gempa sehingga aman untuk PLTN, misalnya Jepara, Bangka, Batam, dan Kalimantan.

(<https://finance.detik.com/energi/3317886/batan-ri-sudah-siap-bangun-pembangkit-listrik-tenaga-nuklir>)

Penelitian berbasis kompetensi ini oleh karena itu diajukan dengan latar belakang atau dalam rangka untuk ikut serta mempersiapkan diri pengembangan PLTN di Indonesia melalui penelitian riset dasar yang akan mampu menguatkan kemampuan pengetahuan sains nuklir peneliti Indonesia di perguruan tinggi melalui hasil-hasil penelitian. Penelitian ini juga melibatkan mahasiswa tugas akhir sehingga sekaligus mempersiapkan SDM-SDM muda di bidang nuklir pada bidang kajian yang relevan. Penelitian ini adalah merupakan kajian secara komputasi material di bidang sains nuklir dengan komposisi tim pengusul berangkat dari keahlian yang berbeda namun sangat terkait dan mendukung

yaitu bidang komputasi material nuklir (ketua peneliti) dan bidang komputasi material granular (anggota 1), serta bidang komputasi FEMLAB (anggota 2).

Tema penelitian yang diajukan dalam proposal ini adalah mengenai upaya mencari material baru (*novel material*) yang memiliki keunggulan-keunggulan yang dapat digunakan dalam mendesain PLTN tipe cepat (*fast nuclear reactor*). Seperti diketahui reaktor nuklir cepat adalah tipe reaktor generasi baru (IV) yang menjanjikan dimana mampu digunakan dalam jangka panjang 10-20 tahun sekali pengisian bahan bakar dan menghasilkan panas hasil fisis yang sangat tinggi. Reaktor tipe ini juga dapat dibuat dalam ukuran kecil (modular) sehingga mampu digunakan secara *mobile* baik untuk memenuhi kebutuhan. Reaktor jenis ini juga sudah dirancang *inherent safety* yaitu keselamatan melekat dalam arti jika di dalam reaktor muncul anomali yang berpotensi ledakan atau kerusakan berat maka secara otomatis reaktor akan mematikan dirinya sendiri. Model reaktor ini oleh karena itu sangat aman. Ini sangat berbeda dibanding dengan reaktor klasik yang tidak dirancang *inherent safety*. Reaktor cepat ini selain dapat dibuat dalam ukuran kecil dan *inherent safety* juga mampu menghasilkan daya besar. Reaktor cepat ini dewasa ini menggunakan media logam cair untuk membawa panas hasil reaksi ini keluar teras reaktor untuk menuju proses konversi energi panas menjadi energi listrik menggunakan generator. Beberapa logam cair seperti timbal cair, timbal-bismuth cair, sodium cair, timbal bismuth cair biasa digunakan untuk medium pendingin dalam desain reaktor cepat. Medium pendingin (medium yang digunakan untuk membawa panas keluar dari dalam reaktor) ini sebenarnya memiliki kelebihan dibanding pendingin air (berat) yang biasa digunakan dalam tipe reaktor thermal (yaitu reaktor generasi lama yang merupakan tipe umum reaktor untuk membangun PLTN selama ini). Reaktor nuklir cepat ini banyak menggunakan logam cair sebagai pendingin (*coolant*) dan diyakini akan menjadi model reaktor masa depan dengan banyak kelebihan yang dimilikinya menggantikan reaktor generasi sebelumnya.

Namun demikian pemanfaatan logam cair sebagai bahan pendingin untuk reaktor cepat ternyata menunjukkan adanya masalah yang serius yang harus segera dicari solusinya. Masalah yang timbul adalah masalah kerusakan material seperti baja yang digunakan di dalam teras reaktor. Investigasi dari reaktor berpendingin logam cair yang telah dioperasikan dalam waktu tertentu menunjukkan adanya rusaknya permukaan struktur baja yang digunakan (seperti pada cladding, Gambar 1). Hal ini tentu saja merugikan dari sisi ekonomis dan keselamatan reaktor. Oleh karena itu banyak penelitian

dewasa ini baik secara teoretik maupun eksperimen berusaha mencari jalan untuk mengatasi problem rusaknya baja atau material nuklir yang lain oleh karena pengaruh logam cair seperti timbal dan timbal-bismuth cair (Rivai dan Takahasi, 2010; Zhang and Li, 2008; Moosa, 2008; Zalenskii et al, 2007). Berbagai riset material untuk menemukan material baru (*novel material*) yang kuat, tahan panas tinggi, tahan terhadap korosi logam cair banyak dilakukan baik yang berbasis logam paduan Fe (*Fe-alloys*) maupun yang berbasis keramik. Selain itu juga berusaha dicari metode penghambatan kerusakan (korosi) baja untuk menurunkan atau menghentikan laju difusi yang sangat tinggi dari komponen-komponen pembentuk baja seperti Fe, Ni, Cr ke dalam medium logam cair yang mana ini merupakan salah satu faktor penyebab rusaknya permukaan baja. Salah satu metode yang dilakukan untuk menghambat adalah dengan memasukkan gas oksigen atau gas nitrogen atau unsur yang lain ke dalam medium logam cair sehingga permukaan baja yang rusak dapat dihindari. Semua penelitian-penelitian terkini dalam tema riset kerusakan/korosi baja dalam logam cair dalam reaktor nuklir cepat oleh karena itu bertujuan untuk 1) menemukan material baru (baja, keramik atau yang lain) yang lebih tahan kerusakan dalam logam cair, 2) menemukan material pendingin baru yang lebih aman dan ekonomis, 3) menemukan metode baru yang lebih efektif untuk penghambatan kerusakan baja.

Bagaimana kegiatan penelitian yang diusulkan dalam proposal penelitian ini? Secara umum penelitian ini mengarah pada ketiga buah penelitian di atas yang merupakan tujuan penelitian pada peneliti dunia di bidang pencegahan korosi material nuklir oleh logam cair. Namun dalam penelitian ini akan diarahkan kepada tujuan yang lebih spesifik.

1.2 Tujuan Penelitian

Penelitian yang diajukan oleh pengusul adalah penelitian komputasi menggunakan metode simulasi komputer dinamika molekul. Tujuan penelitian ini adalah ingin mengkaji secara komprehensif beberapa permasalahan yang mungkin dapat dipelajari fenomenanya seperti:

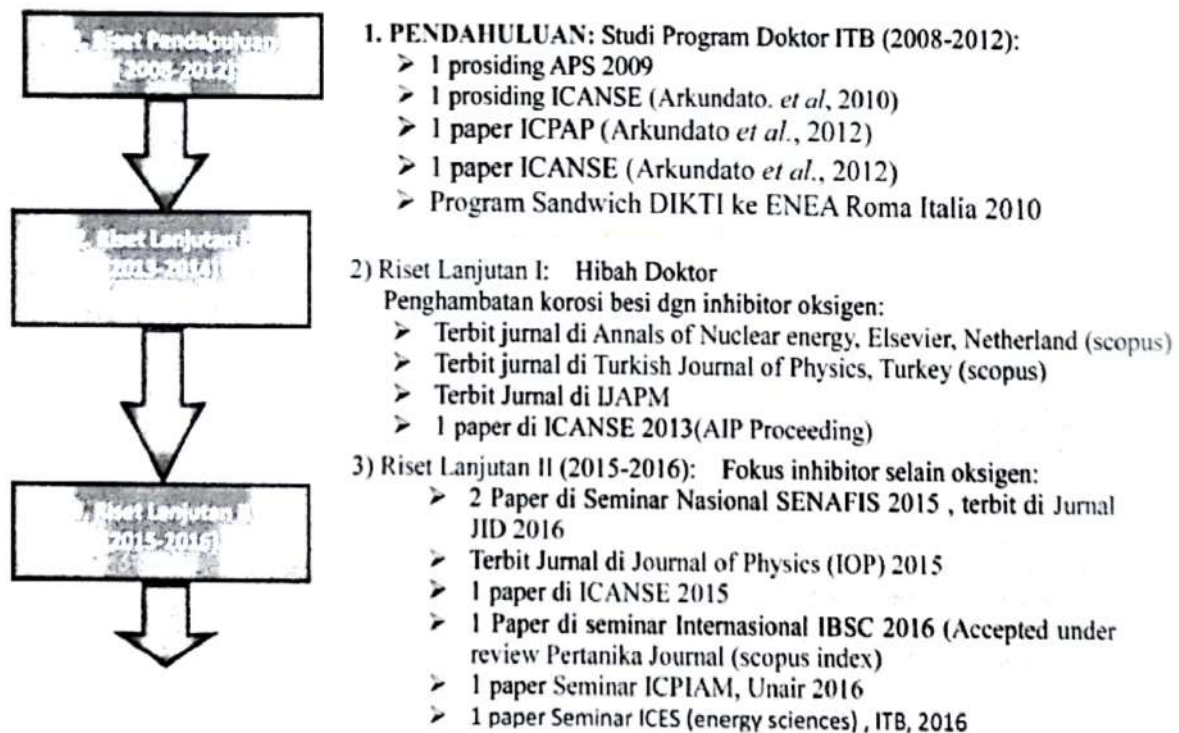
1. Meneliti sifat-sifat fisis termodinamik beberapa material *coolant* logam cair seperti Li, Pb, PbBi, PbLi untuk berbagai kondisi aplikasi pada suhu dan tekanan operasi reaktor yang beragam untuk berbagai komposisi sehingga diperoleh material baru yang diinginkan. Pada penelitian ini akan banyak mempelajari sifat-sifat fisis liquid *coolant* dari material yang berbeda.
2. Meneliti sifat-sifat termodinamik dan mekanik material nuklir seperti baja paduan (berbasis Fe, Ni, Cr) dan keramik baru untuk berbagai komposisi dan konsentrasi sehingga diperoleh material baru

yang kuat tahan korosi logam cair pada poin 1 di atas, yang cocok untuk aplikasi reaktor nuklir suhu tinggi berpendingin logam cair. Penggunaan metode dinamika molekuler yang diakselerasi akan menghasilkan fenomena yang lebih kompleks dalam riset ini.

3. Meneliti sifat-sifat inhibitor korosi seperti oksigen, nitrogen, argon dan material baru yang potensial untuk (metode) penghambatan korosi dengan konsentrasi yang tepat.

1.3 RoadMap Penelitian Pengusul

Apakah tim pengusul mempunyai kelayakan melakukan riset dalam proposal usul penelitian ini? Pengusul mempunyai rekam jejak penelitian yang tersistematis, terarah dan konsisten seperti dalam Gambar 1 *Road Map* penelitian bidang sains (komputasi) nuklir. Rekam jejak pengusul dalam riset komputasi khususnya bidang kerusakan/korosi baja dalam logam cair secara lengkap dapat dilihat pada daftar riwayat hidup. Ada total lebih dari 10 judul artikel/publikasi sejak 2010 yang tersebar baik dalam jurnal nasional, jurnal internasional, prosiding nasional maupun prosiding internasional yang terindeks Scopus atau Thomson-Reuter. Pembimbingan tugas akhir mahasiswa juga konsisten memberikan judul-judul tugas akhir di bidang ini. Secara sistematis dan terencana penelitian dari pengusul utama sangat jelas dan dengan target yang jelas dan konsisten tergambar dari seminar, riset dan publikasi yang dihasilkan.





4) Riset Lanjutan III (2017-2018): Hibah Fundamental 2014-2015

Fokus pada:

1. Riset baja dan korosi alloy dan keramik
2. Riset potensial morse
3. Kerjasama riset dgn ITB, Prof. Zaki Suud)
4. Visiting research di Osaka University, November 2017
Dengan Sensei Prof. Tamio Oguchi
 - > Terbit 1 paper di Journal of Physics (IOP) (Scopus)
 - > Pemakalah Seminar ICCSE Juli 2017 ITB
 - > Seminar Nasional SENAFIS Nov 2017, Fisika FMIPA, UNEJ
 - > Submit 1 paper ke Jurnal internasional Modelling and Simulation in Material Sciences and Engineering (September 2017)

5) Riset Lanjutan IV (2018 - 2019):

- > Kerjasama Riset Internasional (LN) dgn Prof Tamio Oguci, Osaka Uni
- > Membimbing Thesis S2 Fisika (Fisika FMIPA UNEJ)
- > Riset Dinamika molekul Kuantum/Terakselerasi dan terapannya pada kasus korosi (HIBAH KOMPETENSI 2018-2020)
- > Riset material dengan metode baru DFT hasil studi NDF di Osaka University

6) Riset Lanjutan V (2019 - 2020...)

Riset Multi bidang dan Terapan:

- > Sistem material baja/keramik
- > Biologi, Kimia, Farmasi

Gambar 1. RoadMap

1.4 Luaran Penelitian

Luaran yang ditargetkan dalam penelitian ini terangkum dalam Tabel 1.

Tabel 1. Luaran Penelitian yang ditargetkan/Rencana Capaian Tahunan

No	Jenis Luaran				Indikator Capaian	
	kategori	Sub Kategori	Wajib	Tambahan	TS	TS+1
1	Artikel ilmiah di jurnal	Internasional Bereputasi	1		Accepted/ Published	Accepted/ Published
		Nasional Terakreditasi			Belum ada	Belum ada
2	Artikel ilmiah di prosiding	Internasional Terindeks	1		Accepted/ Published	Accepted/ Published
		Nasional	1		Accepted/ Published	Accepted/ Published
3	Invited speaker				Belum ada	Belum ada
4	Visiting Lecturer				Belum ada	Belum ada

5	HKI				Tidak ada	Tidak ada
6	Teknologi Tepat Guna				Tidak ada	Tidak ada
7	Model Desain		1		Draft	Draft
8	Buku Ajar (ISBN)		1		Draft/Editing	Terbit
9	TKT				3	3

1.5 Aplikasi/Penerapan dari Hasil Penelitian

Aplikasi dari hasil penelitian ini sangat jelas yaitu memberikan data-data riset tentang materi nuklir yang digunakan/diterapkan dalam desain reaktor nuklir cepat yang akan dibutuhkan oleh Indonesia dimasa yang akan datang melalui penguatan kemampuan riset mandiri bangsa dimasa sekarang. Data-data riset nuklir karena sifatnya yang strategis untuk kemampuan suatu negara menjadi sangat rahasia dan bangsa Indonesia dapat mempersiapkannya dari sekarang untuk kemandirian tersebut.

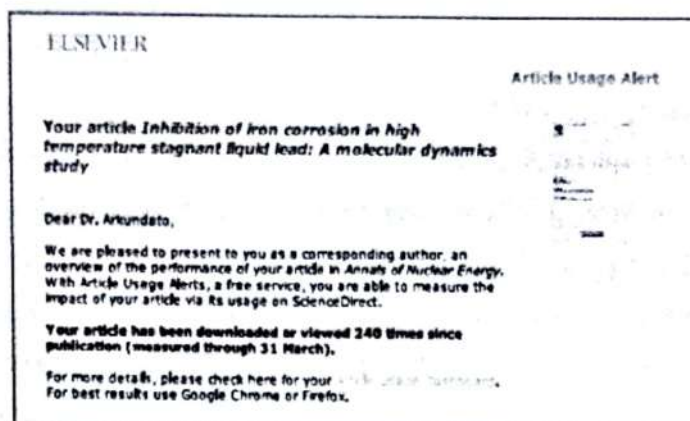
1.6 Kontribusi Pada Sains

Kontribusi pada sains adalah mengembangkan kajian fenomena korosi/kerusakan material nuklir melalui metode simulasi dinamika molekul sehingga diperoleh pengetahuan yang komprehensif bagaimana kerusakan material dapat diprediksi secara teori dan diatasi.

BAB 2 URAIAN KEGIATAN

2.1 Penelitian Yang Telah dilakukan dan Penelitian Lain Sejenis

Dalam penelitian ini digunakan metode dinamika molekul (metode DM) yang merupakan salah satu metode komputasi material yang sangat populer dalam bidang riset bahan. Dengan metode DM ini banyak hal dapat diprediksi dan dikaji seperti sifat-sifat fisis termodinamik dan mekanik bahan. Dengan metode DM ini pengusul sudah berhasil menghasilkan publikasi baik jurnal maupun prosiding baik nasional maupun internasional (Arkundato et al, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015). 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 download lebih 240 kali.



Gambar 2. Snapshot frekuensi download pada jurnal

Peneliti utama juga aktif sebagai editor/reviewer Jurnal nasional: JID-UNEJ, Spektra-UNJ, dan JFTA-UNSRI dan juga jurnal internasional bereputasi seperti Elsevier untuk beberapa skim jurnal seperti Journal of Nuclear Material, International Journal of heat dan Mass Transfer, dan juga jurnal dari China Nuclear Science and Techniques. Peneliti utama dan anggota 1 juga telah menghasilkan buku hasil riset ber ISBN pada 2016 lalu dengan judul Fisika Komputasi: Metode Dinamika Molekul dan Aplikasinya, Penerbit Universitas Jember. Dan dengan institusi pengusul baik tingkat universitas maupun prodi Fisika mendapatkan re-akreditasi A dari BAN-PT masing-masing pada tahun 2016 dan 2017 maka menandakan bahwa kesiapan dari peneliti untuk menjalankan penelitian bergengsi ini. Secara rinci penelitian yang telah dilakukan secara kontinu/berkesinambungan dan konsisten pada topik riset dapat terlihat pada Gambar 1 Road Map penelitian di atas.

2.2 Potensi pengembangan ke depan

Potensi dari penelitian ini kedepan sangat jelas dan pasti dimana riset di dalam teras reaktor dalam beberapa hal tidak memungkinkan/sulit dilakukan. Sangat sulit mengambil dan mengamati data-data penting manakala sebuah reaktor sudah berjalan/beroperasi yang kita ketahui suhunya sangat tinggi lebih dari 500°C . Oleh karena itu harus ada metode lain yang dapat digunakan untuk mengkaji atau memprediksi fenomena yang terjadi sehingga dapat dilakukan langkah-langkah penting untuk mencari solusi atas kendala/masalah yang ada. Metode simulasi dinamika molekul dan DFT seperti dalam penelitian ini oleh karena itu sangat menjanjikan untuk pengembangan kedepan. Selain itu penelitian teori/komputasi sangat aman dan relatif murah dibanding eksperimen.

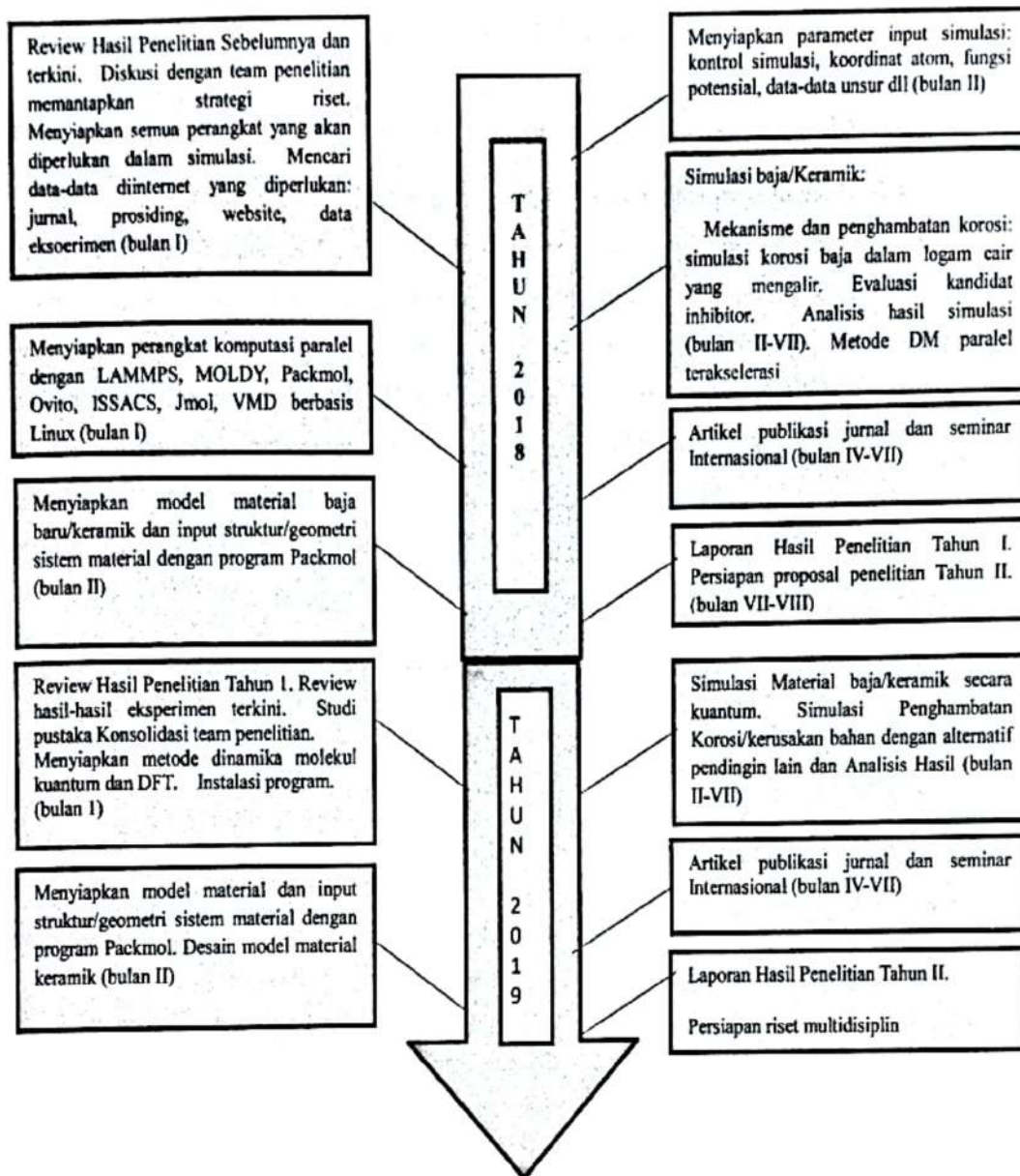
2.3 Tujuan yang ingin di capai

Penelitian ini secara umum bertujuan ingin mendapatkan kesimpulan yang komprehensif bagaimana fenomena kerusakan/korosi material oleh logam cair dapat dijelaskan dan diketahui solusi penghambatannya. Logam cair itu sendiri adalah media pendingin untuk menyalurkan panas keluar reaktor untuk memanaskan air penggerak generator listrik. Lebih jauh lagi juga perlu mencari material baru yang sanggup menggantikan jenis baja umum yang sekarang digunakan, baik apakah itu baja paduan baru atau bahan keramik yang sudah diketahui tahan panas tinggi.

Secara khusus penelitian ini akan fokus pada upaya mencari material nuklir baru baik itu adalah baja/keramik atau inhibitor yang digunakan dalam reaktor. Berbeda dengan penelitian sebelumnya yang sudah dikerjakan tim pengusul yang menggunakan metode/pendekatan dinamika molekul *klasik* maka dalam penelitian yang sekarang diajukan ini akan mengkaji fenomena korosi menggunakan metode dinamika molekul *kuantum* dan *terakselerasi* agar mampu menghasilkan kesimpulan yang lebih akurat dan komprehensif.

BAB 3 METODE PENELITIAN

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*). Jika biasanya korosi terjadi melalui reaksi kimia maka pada mekanisme "*hot corrosion*" seperti kasus dalam penelitian ini tidak melalui mekanisme transfer elektron sebagai bagian dari reaksi kimia. Korosi terjadi melalui transfer massa langsung akibat efek termal difusi atom. Oleh karena itu secara teoretik 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 /kerusakan bahan diantaranya adalah koefisien difusi $D(T)$ dan untuk tujuan penelitian dalam 2 tahun kedepan akan lebih banyak mengkaji mengenai koefisien difusi ini (Arkundato, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015). Selain besaran fisis termodinamik $D(T)$, maka jika ingin mencari baja kuat maka kita perlu melihat struktur bahan terhadap komposisi bahan yang digunakan menghasilkan baja paduan atau keramik. Kita dapat menghitung nilai modulus Young (Y) bahan paduan yang kita modelkan. Secara konsep/teori maka pada penelitian ini ingin dicari suatu bahan (baja/keramik) yang kuat (dapat dihitung nilai Y nya) tahan korosi tahan panas yang jika digunakan didalam reaktor (dimasukkan dalam coolant logam cair) maka akan menghasilkan nilai difusi Fe, Ni, Cr dll yang paling rendah. Nilai difusi yang rendah berarti bahan tahan korosi karena jika difusinya tinggi berarti atom-atom pembentuk baja/keramik mengalami proses pelepasan dari permukaan baja menuju logam cair. Selain dengan menjadi model material baru tersebut, kita dapat juga memasukkan unsur inhibitor dalam sistem logam cair-baja sedemikian hingga nilai difusi diri komponen baja Fe, Ni, Cr, dll juga akan tertahan kecil atau jika memungkinkan difusi nya nol. Jadi dalam 2 tahun kedepan luaran penelitian ini dari sisi teoretik adalah mencari kondisi-kondisi atau kemungkinan-kemungkinan penting dimana koefisien difusi diri ini diperoleh sekecil mungkin. Ini adalah ide yang sederhana namun sangat vital dan secara komputasi memerlukan banyak perlakuan khusus yang tidak sederhana. Secara detail maka metode penelitian dalam penelitian ini untuk dapat mencapai tujuan akhir dapat digambarkan dalam bentuk diagram fishbone seperti Gambar 3 dibawah ini. Kemudian pembagian kerja penelitian tim pengusul dapat digambarkan dalam Tabel 2.



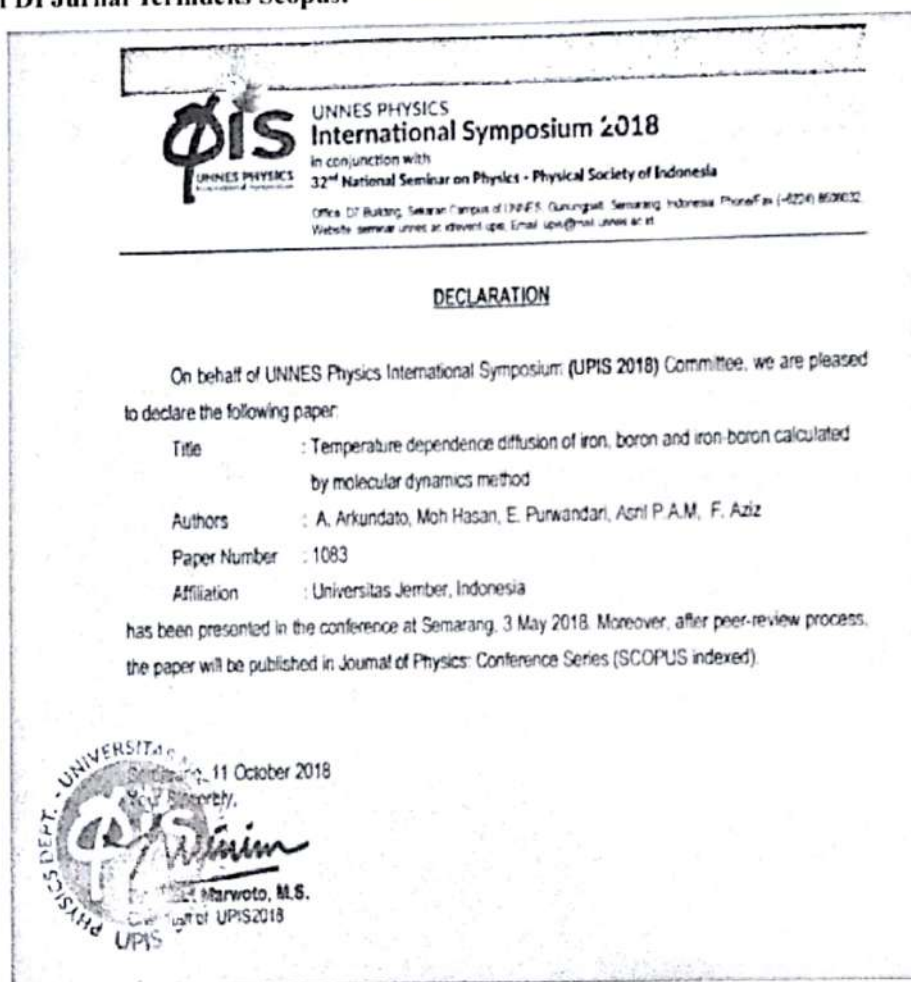
Gambar 3. Diagram Alir Penelitian

BAB 4. HASIL PENELITIAN YANG TELAH DICAPAI

4.1 Kebergantungan Difusi Besi terhadap Temperatur

Pada penelitian ini dilakukan riset material berbasis Boron dimana perlu di hitung koefisien difusi Boron terhadap kenaikan suhu difusi karena besaran ini sangat penting pada dimana data-data eksperimen difusi bergantung temperatur tidak di dapatkan. Keterkaitan koefisien difusi besi dan boron terhadap temperatur diprediksi dengan metode dinamika molekul. Hasil riset dipublikasikan pada Seminar Internasional UPIS 2018 di UNNES Semarang. Paper yang dipresentasikan sebagai **invited Speaker** dan akan diterbitkan dalam IOP Journal of Physics 2018, Jurnal terindeks Scopus.

Publikasi DI Jurnal Terindeks Scopus:



Sebagai Invited Speaker:

UPIS 2018 in Conjunction with The 32nd National Seminar on Physics PSI

Abstract of Invited Speaker
IS-10 Artoto Arkundato

Temperature dependence diffusion of iron, boron and iron-boron calculated by molecular dynamics method

A. Arkundato, Moh Hasan, E. Purwandari, Asril P.A.M, F. Aziz
Physics Department/University of Jember, Indonesia

Corresponding author: a.arkundato@unej.ac.id

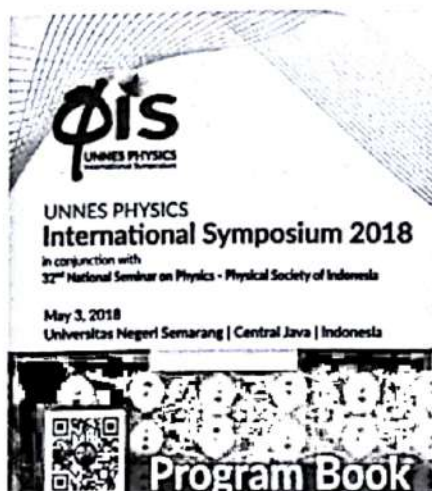
Abstract. It has been calculated the self-diffusion and inter-diffusion coefficient of iron, boron and iron-boron as temperature function using molecular dynamics simulation method. The diffusion coefficient is very important data for knowing the physical and chemical phenomena of material processes. 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.

Keywords: Temperature dependence diffusion coefficient, iron, boron, molecular dynamics

Pemakalah di International Conference:



Buku Abstract:

UPIS 2018 in Conjunction with The 32nd National Seminar on Physics PSI

Invited Speaker	
Code	Name and Paper
IS-01	(Invited Speaker) Agus Setyo Budi Prodi Fisika, FMIPA- Universitas Negeri Jakarta <i>"Micro Structure of Hydrothermal ZnO rods on Micro cantilever Surface"</i>
IS-02	(Invited Speaker) Arinto Yudi Ponco Wardoyo Laboratory of Air Quality and Astro Imaging, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Science, University of Brawijaya <i>"Biomass Burning, Ultrafine Particles, Concentration, and Organ Effect"</i>
IS-03	(Invited Speaker) Muhammad Farchani Rosyid Kelompok Belajar Kosmologi, Astrofisika, dan Fisika Matematik (KAM), Departemen Fisika, Universitas Gadjah Mada, Yogyakarta, INDONESIA <i>"Wasserstein Space as State Space of Quantum Mechanics and Optimal Transport"</i>
IS-04	(Invited Speaker) Kuwat Triyana Departement of Physics, Universitas Gajah Mada <i>"Routes for developing rapid detector of saffrole based on quartz crystal microbalance"</i>
IS-05	(Invited Speaker) Ani Rusilowati Physics Department, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Semarang, Central Java, Indonesia <i>"How to Improve of Students' Scientific Literacy"</i>
IS-06	(Invited Speaker) Budi Naini Mindyarto Physics Department, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Semarang, Central Java, Indonesia <i>"Concept Mastery of Electricity and Magnetism and the Challenges of Instructional Media Development"</i>
IS-07	(Invited Speaker) Ida Kaniawati Physics Education, Universitas Pendidikan Indonesia <i>"Innovation of Physics Learning in Improving 21st Century Capabilities"</i>
IS-08	(Invited Speaker) Suminar Pratapa Department of Physics, Faculty of Science, Institute of Technology Sepuluh Nopember, Surabaya, Indonesia <i>"Phase analyses of local-mineral-derived functional materials utilizing XRD and synchrotron WAXS data"</i>
IS-09	(Invited Speaker) Ian Yulianti Physics Department, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Semarang, Central Java, Indonesia <i>"Study of Chitosan Layer-based Fabry Perot Interferometer Optical Fiber Sensor Properties for Detection of Pb²⁺, Hg²⁺ and Ni²⁺"</i>
IS-10	(Invited Speaker) Artoto Arkundato Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember <i>"Temperature dependence diffusion of iron, boron and iron-boron calculated by molecular dynamics method"</i>

4.2 Perhitungan Difusi Bahan dengan Metode Green-Kubo untuk berbagai model Mixing Rules Potensial Lennard-Jones.

Hasil penelitian berikutnya adalah mengenai aplikasi metode Green-Kubo. Diterima untuk dipresentasikan di Seminar Internasional ICES 2018 ITB 24-26 September 2018. Pada penelitian ini maka diperoleh prosedur yang baku untuk menjalankan program dinamika molekul dengan hasil yang lebih akurat dengan prosedur sebelumnya. Paper yang dipresentasikan akan diterbitkan dalam Journal terindeks Scopus.

Pemakalah pada International Conference:



ICES 2018

International Conference on Energy Sciences
ITB Campus, 24-26 September 2018
Website: <http://portal.fmipa.itb.ac.id/ices2018>
Email: ices.conf@gmail.com

Date: 22 September 2018

Letter of Invitation

Dear Authors: Artoto Arkundato(1), Endhah Purwandari(2), Moh. Hasan(3), Iwan Sugihartono(4), Zaki Su'ud(5)

We are pleased to inform you that your abstract (ABS-10, Oral Presentation), entitled:

"Comparison of available mixing formulas of Lennard-Jones potential for diffusion coefficient calculation of iron in liquid lead via Green-Kubo method of molecular dynamics"

has been reviewed and accepted to be presented at ICES 2018 conference to be held on 24-26 September 2018 in Bandung, Indonesia.

We cordially invite you to attend our conference and present your research described in the abstract.

Please submit your full paper and make the payment for registration fee before the deadlines, visit our website for more information.

Thank You.

Best regards,

Pentingnya dari hasil penelitian ini adalah untuk menjalankan simulasi material yang terdiri dari berbagai komponen maka interaksi antar komponen/atom yang tidak sejenis perlu diketahui secara akurat. Pada penelitian ini ingin dilihat berbagai perhitungan menggunakan rumusan dari berbagai peneliti yang berbeda dan membandingkannya untuk menghitung koefisien difusi dengan metode Green-Kubo kemudian menjadi yang paling akurat diantara berbagai formula mixing.

Book of Abstracts



Artoto Arkundato(1), Endhah Purwandari(2), Moh. Hasan(3), Iwan Sugihartono(4), Zaki Su'ud(5).....	63
[ABS-11]	65

Comparison of available mixing formulas of Lennard-Jones potential for diffusion coefficient calculation of iron in liquid lead via Green-Kubo method of molecular dynamics

Artoto Arkundato¹, Endhah Purwandari², Moh. Hasan³, Iwan Sugihartono⁴, Zaki Su'ud⁵

^{1,2}Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Jember

³Mathematics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, University of Jember

⁴Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, Universitas Negeri Jakarta

⁵Physics department, Faculty of Mathematical and Natural Sciences, ITB

Abstract: Knowing of transport properties of multicomponent gases and liquids is of great economical important in modeling and designing of interest materials as in nuclear reactors. For mixtures of dissimilar atoms or substances in material, the diffusion coefficient can be predicted using molecular dynamics (MD). In this way, the intermolecular forces play a crucial role in understanding phase behavior and thermodynamic properties. The Lennard-Jones force (potential) has been widely used in the study of thermodynamics properties. For this potential, the two important parameters are ϵ and σ to describe the interaction between two atoms or substances in materials. For similar atoms or substances these parameters usually be determined experimentally. Whereas for mixture of different substances however these parameters usually can be calculated based on the appropriate mixing formula. In this research we want to predict the diffusion coefficient of iron in liquid lead by MD method in the scheme of Lennard-Jones potential and Green-Kubo formula for specific mixing formula of mixture of substances. Wee want to find the best mixing formula for accurate calculation. We search the available mixing formulas that have been proposed by previous researchers and find the most appropriate formula for accurate calculation.

Keywords: Lennard-Jones potential, molecular dynamics, mixing formula, diffusion coefficient, liquid lead, Green-Kubo

4.3 Thermodynamical and Structural Properties of SiC Ceramics Material in Liquid Lead Metals”.

Judul paper yang akan diikutkan pada seminar ICANSE November 2018 adalah: “Thermodynamical and Structural Properties of SiC Ceramics Material in Liquid Lead Metals”.



[Abstract ID: ABS-46]

Thermodynamical and Structural Properties of SiC Ceramic Material in Liquid Lead Metals

Artoto Arkundato(1), Moh Hasan(2), Endhah Purwandari(3), Asril Pramutadi(4), Zaki Su'ud(5)

1,3-Physics dept, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Jember

2-Mathematics dept, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Jember

4,5-Physics dept, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Jember

Abstract

It has been investigated the thermodynamical and structural properties of SiC ceramic material in high temperature molten liquid lead. Th research was done for the purpose of finding the characteristic SiC ceramic material when immersed and interact with liquid lead. Knowing its characteristics have benefit for application of the material in nuclear reactor design. The research is done using the molecular dynamics method to predict some of properties of the ceramic materials as diffusion coefficient, CNA common neighbour analysis, RDF curve, etc.

Keywords: Nuclear materials, SiC, ceramics, liquid lead, molecular dynamics



ICANSE 2018

International Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering

Institut Teknologi Bandung, 29-30 November 2018

Website: <http://portal.fmipa.itb.ac.id/icanse2018>

Email: icanse.committee@gmail.com

Date: 16 November 2018

Letter of Acceptance

Dear Authors: Artoto Arkundato(1), Moh Hasan(2), Endhah Purwandari(3), Asril Pramutadi(4), Zaki Su'ud(5)

We are pleased to inform you that your abstract (ABS-46, Oral Presentation), entitled:

"Thermodynamical and Structural Properties of SiC Ceramic Material in Liquid Lead Metals"

has been reviewed and accepted to be presented at ICANSE 2018 conference to be held on 29-30 November 2018 in Bandung, Indonesia.

Please submit your full paper and make the payment for registration fee before the deadlines, visit our website for more information.

Thank You.

Best regards,

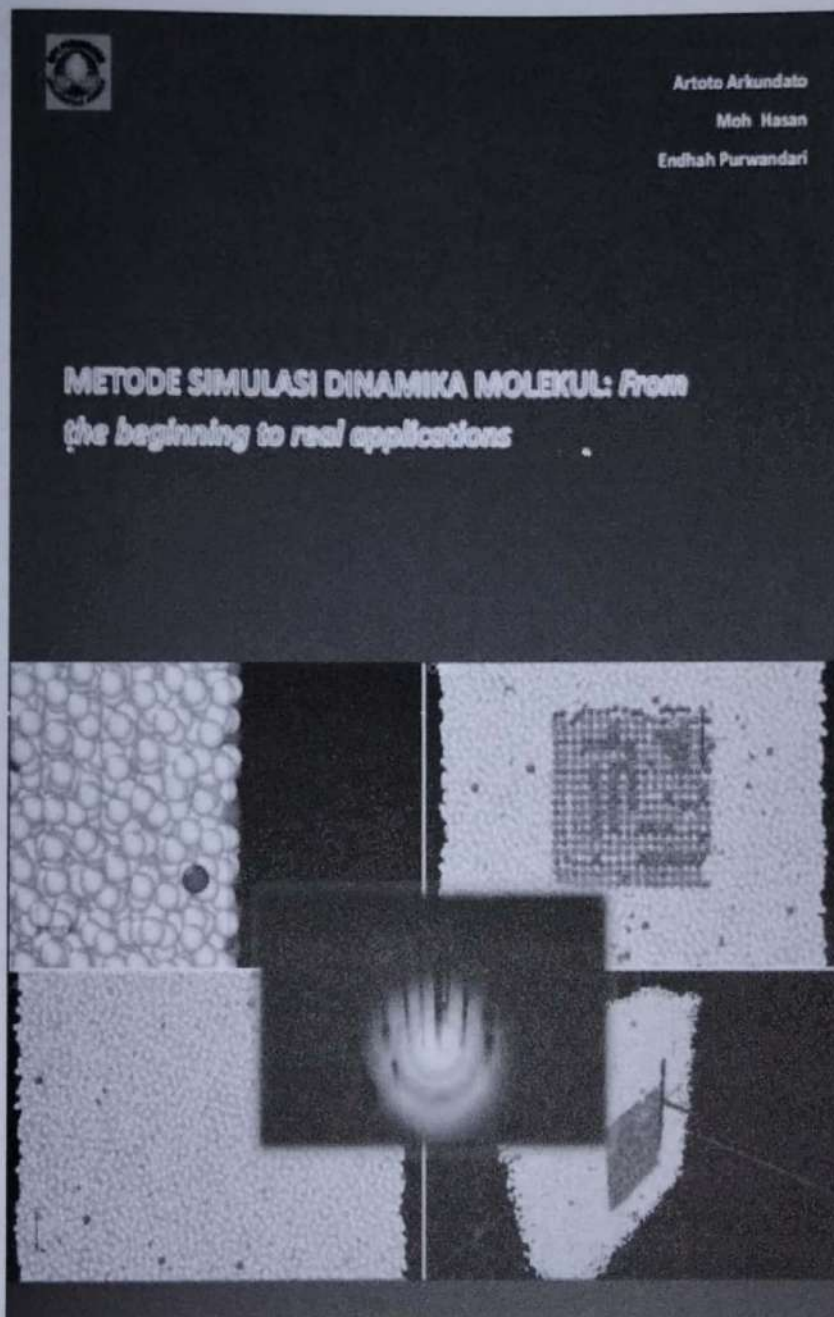
A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Zaki Suud', written over a small rectangular stamp.

Prof. Dr. Zaki Suud
ICANSE 2018 Chairperson

4.4 Buku Teks Hasil Penelitian

Hasil pamungkas dari penelitian ini adalah Buku Teks hasil penelitian dengan judul “Metode Simulasi Dinamika Molekul: from the beginning to real applications” dengan penerbit Universitas Jember.

Sampul Buku:



Halaman 2 buku:

Artoto Arkundato

Moh. Hasan

Endhah Purwandari

Metode Simulasi Dinamika Molekul: *from the beginning to real applications*

Penerbit Universitas Jember

Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si (A)
Jurusan Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember - Jember
Email: a.arkundato@unej.ac.id

Drs. Moh Hasan, MSc., Ph.D (M)
Jurusan Matematika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember - Jember

Endhah Purwandari, S.Si., MSi (E)
Jurusan Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember - Jember

Anggota IKAPI

ISBN

Halaman 3 buku:

PRAKATA

Alhamdulillah buku teks hasil penelitian ini akhirnya berhasil kami susun setelah melalui proses pembuatan, editing dan perbaikan yang cukup lama. Buku ini diharapkan dapat memberikan bahan atau referensi tambahan untuk mendukung riset yang menggunakan Metode Dinamika Molekul. Buku ini juga diharapkan dapat memberi bekal bagi yang tertarik mempelajari metode dinamika molekul untuk pengembangan riset/penelitian baik bidang fisika, kimia, biologi dan matematika bahkan tidak menutup kemungkinan pada bidang farmasi dan ilmu bahan. Metode dinamika molekul sebagai salah satu metode komputasi yang handal, dewasa ini mempunyai tempat dan peran yang sangat penting bagi kemajuan ilmu dan pengembangan teknologi. Banyak berbagai fenomena bidang sains yang dapat diprediksi gejala dan prosesnya melalui pendekatan metode dinamika molekul. Dengan makin meningkat pesatnya sumber daya komputasi seperti kecepatan processor komputer, kemampuan memori komputer, teknologi jaringan komputer, kapasitas dan kemampuan media penyimpan data maka penerapan metode dinamika molekul untuk menangani problem-problem kompleks bidang sains dan teknik menjadi semakin memungkinkan dan menjanjikan. Dengan memodelkan sistem material dan mensimulasikan fenomena terkait yang ingin diteliti maka pencapaian-pencapaian dan inovasi-inovasi bidang sains dapat dimaksimalkan dengan penggunaan sumber dana yang efisien. Oleh karena itu tidaklah berlebihan jika mempelajari metode dinamika molekul ini merupakan hal yang sangat positif dan berguna. Berbagai artikel-artikel ilmiah dalam bentuk jurnal dan prosidings yang menampilkan tulisan hasil riset dinamika molekul dapat memberikan gambaran betapa dewasa ini metode ini menjadi salah satu alat penting bagi periset-periset kelas dunia.

Buku ini secara umum dapat juga digunakan sebagai bahan rujukan oleh mahasiswa yang melakukan penelitian tugas akhir/thesis/disertasi bidang komputasi material. Namun demikian buku ini juga ada manfaatnya jika digunakan untuk bahan rujukan perkuliahan komputasi. Apa yang menjadi kekhasan dari buku ini adalah pembaca akan dibawa mendalami mulai dari tingkatan dasar, diberikan pandangan yang cukup mengenai urgensi dari metode komputasi, diberikan cara bagaimana bagi pemula untuk memasuki metode komputasi ini baik berkenaan dengan sistem operasi, instalasi, software-software yang diperlukan, sampai bagaimana menjalankan program simulasi yang mana lebih ditekankan pada persiapan melakukan riset di bidang komputasi material. Software-software yang digunakan juga software-software yang populer digunakan dalam riset komputasi material yang hasil-hasilnya banyak dipublikasikan dalam jurnal dan prosidings internasional. Pada Bab 6 yaitu bab terakhir diberikan contoh aplikasi simulasi dinamika molekul yang hasil-hasilnya cukup layak untuk ide publikasi dalam jurnal internasional.

Akhirnya tentu saja tidak ada yang sempurna kecuali perkenan Allah swt, oleh karena itu saran-saran dan pendapat yang membangun dari pembaca akan sangat membantu bagi perbaikan buku ini. Penulisan buku ini juga telah melalui review buku oleh Dr. Paken Pandiangan dari Universitas Terbuka Jakarta, dimana beliau mempunyai pengetahuan yang cukup baik dalam bidang teori dan komputasi fisika.

Jember, Kampus Tegal Boto, November
Penulis, AME

Halaman ke-4 buku:

KATA PENGANTAR PAKAR SEBIDANG ILMU

Buku yang berjudul Metode Simulasi Dinamika Molekul: from the beginning to real applications ini terasa seperti oase di tengah padang pasir yang luas. Mengapa demikian karena jarang sekali sebuah buku teks berbasis riset yang diterbitkan khususnya dalam bidang riset komputasi material. Apalagi buku ini ditulis sangat detail khususnya mengenai teknis bagaimana sebuah riset komputasi material dilaksanakan mulai dari awal, pemilihan software, teori, instalasi dan penerapannya.

Isi dari buku ini menurut pandangan saya sudah sangat lengkap dan bermutu sebagai buku referensi riset komputasi karena disusun berdasarkan referensi yang up to date pada saat ini. Software-software yang digunakan juga software yang populer dan banyak digunakan oleh periset-periset kelas dunia.

Isi buku ini menurut pandangan saya juga sangat disiapkan agar pembaca yang tertarik pada bidang/metode simulasi dinamika molekul ini mampu mempelajarinya dengan baik dan mampu menerapkannya sebagai inisiasi riset untuk berbagai problem yang menarik dalam fisika.

Format penulisan buku ini juga tidak kaku dan monoton, serta ditampilkan banyak gambar yang menarik serta ilustrasi yang sangat membantu.

Akhirnya saya mengucapkan selamat untuk tim penulis buku ini yang telah memberikan satu sumbangsih yang sangat berarti untuk kemajuan sains komputasi di Indonesia.

Jakarta, 01 Oktober 2018



Dr. Paken Pandiangan, S.Si., M.Si
Pendidikan Fisika, FKIP, Universitas Terbuka
Email: pakenp@ut.ac.id

Halaman ke-5 buku:

DAFTAR ISI

Sampul	i
Informasi Penerbit	ii
Prakata	iii
Kata Pengantar Pakar Sebidang Ilmu	iv
Daftar Isi	v
Daftar Gambar	ix
Daftar Tabel	xii
Kronologi Metode Dinamika Molekuler	xiii
Bab 1 Pendahuluan	1
1.1 Skala Panjang Sistem Material	1
1.2 Metode Simulas untuk Skala Panjang dan Waktu yang Berbeda	5
1.3 Simulasi Dinamika Molekul	8
1.4 Persiapan Riset Simulasi Dinamika Molekul	8
DAFTAR PUSTAKA	10
Bab 2 Struktur Kristal	11
2.1 Sel Satuan Kristal	11
2.2 Struktur Kristal Logam Murni	12
2.3 Struktur Kristal Ionik	13
2.4 Struktur Diamond	14
2.5 Struktur CaF_2 atau ZrO_2	14
2.6 Struktur Perovskite	15
2.7 Struktur Spinel	15
2.8 Sistem Kisi	16
2.9 Konstanta Kisi	17
2.10 Massa Atom, Titik Didih dan Titik Leleh	20
2.11 Elastisitas Bahan	24
2.12 Konversi Satuan	29
DAFTAR PUSTAKA	30
Bab 3 Software	31
3.1 ATOMSK	31
3.2 Instalasi Program ATOMSK	35
Aplikasi ATOMSK untuk Kreasi Kristal	36
3.4 Penggandaan Kristal	41

3.5	Instalasi JMOL	43
3.6	Instalasi VESTA	44
3.7	Instalasi OVITO	49
3.8	Program Plot Data GNUPLOT	53
3.8.1	Instalasi GNUPLOT	54
3.8.2	Menggambar/Plot Grafik	55
3.9	Program PACKMOL	63
3.9.1	Volume Guesser	64
3.9.2	Instalasi Packmol	64
3.9.3	Aplikasi Packmol	66
3.10	Program XCRYSDEN	72
3.11	Program PYTHON	74
	DAFTAR PUSTAKA	79
Bab 4	Teori Dinamika Molekul	80
4.1	Persamaan Gerak Atom-Atom	81
4.2	Model Medan Gaya Atom	82
4.2.1	Sistem Gas Mulia	84
4.2.2	Potensial Lennard-Jones	85
4.2.3	Sistem Ion	88
4.2.4	Sistem Logam	89
4.2.5	Sistem Kovalen	89
4.2.6	Sistem Semikonduktor	90
4.2.7	Sistem Kristal Logam Padat	90
4.3	Algoritma Integrasi	90
4.3.1	Algoritma Verlet	91
4.3.2	Algoritma Beeman	93
4.4	Step Waktu	93
4.5	Fungsi Distribusi Radial	97
4.6	Analisis dan Perhitungan Besaran Fisis	97
4.6.1	Postulat Ergodisiti	98
4.6.2	Fluktuasi	101
4.6.3	Sifat-Sifat Transpor	102
4.7	Implementasi Metode Dinamika Molekul	103
4.8	Mekanika Statistik	105
4.9	Efek Kuantum pada Limitasi Metode MD	107
	DAFTAR PUSTAKA	110
Bab 5	PROGRAM MOLDY	111
5.1	Software-Software Simulasi Dinamika Molekul	111
5.2	MOLDY	114
5.2.1	Instalasi	116
5.2.2	Menjalankan Moldy	117
5.2.3	File Input dan File Output Simulasi Moldy	117
5.2.4	Tampilan dan Hasil Simulasi	119
5.2.5	Detail Parameter file input spesifikasi sistem	121

5.2.6 Running dari running (file) sebelumnya	123
5.2.7 Reut-off untuk perhitungan gaya	123
5.2.8 Pesan dan Error	124
5.2.9 Utilitis Moldy	124
5.3 Contoh File Spesifikasi dan Kontrol (studi kasus)	129
5.3.1 Membuat script untuk mengubah temperatur	133
DAFTAR PUSTAKA	138

Bab 6	APLIKASI SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL.....	139	
	6.1 Reaktor Nuklir, Jenis dan Karakteristiknya.....	139	
	6.2 Reaktor Cepat Berpendingin Timbal Cair LBE dan Korosi	142	
	6.3 Rancangan Riset Komputasi Penghambatan Korosi Baja dalam Pendingin Timbal Cair	145	
	6.3.1 Tahap Persiapan Besi Berstruktur Kristal BCC	145	
	6.3.2 Tahap Persiapan Medium Timbal Cair	149	
	6.3.3 Simulasi Timbal Cair	155	
	6.3.4 Tahap Persiapan Sistem Fe dalam Pb Cair	163	
	6.3.5 Simulasi Fe dalam Pb Cair pada 750 °C	175	
	6.3.6 Difusi Fe dalam Pb Cair	179	
	6.3.7 Menghambat Korosi Besi dalam Timbal Cair	185	
	6.3.8 Publikasi Hasil Penelitian Pada Jurnal Internasional	197	
	DAFTAR PUSTAKA	198	
	DAFTAR PUSTAKA	xiv	
	LAMPIRAN	xvi	
	INDEKS		xvii
	BIOGRAFI PENULIS	xix	
	RINGKASAN BUKU	xxi	

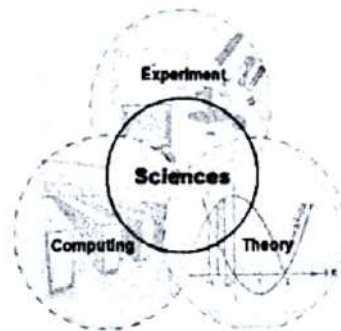
Halaman pertama Bab 1 buku:

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Skala Panjang Sistem Material

Dewasa ini sains fisika telah berkembang sedemikian cepat dan maju dengan banyak pencapaian yang barangkali sulit kita bayangkan pada waktu lampau. Perkembangan sains tentu saja hasil dari kolaborasi riset dan pelaku ekonomi dimana terjadi sinergi yang sangat kuat antara konsumen (pengusaha) dan produsen (peneliti sains dan rekayasa, baik akademisi maupun non akademisi). Khususnya dalam bidang fisika, kemajuan sains ini tidak lepas dari kontribusi 3 bidang riset besar yang saling bersinergi yaitu fisika eksperimen, fisika teori dan yang belakangan lahir namun kurang berarti kontribusinya yaitu fisika komputasi. Ketiga bidang fisika ini saling mengisi satu sama lain, saling mengembangkan satu sama lain, saling melahirkan metode-metode satu sama lain, sehingga terwujud kemajuan nyata dari aplikasinya di kehidupan riil, seperti yang sedang dan telah kita lihat sekarang ini. Hubunhan interseksi dari ketiga bidang tersebut secara sederhana ditunjukkan pada Gambar 1.1.



(<https://ramonrehuet.wordpress.com/2015/02/02/theory-experiment-and-computation/>)

Gambar 1.1 Hubungan 3 bidang riset fisika

Secara parsial, relasi dari ketiga bagian dapat pula digambarkan dalam bentuk interseksi antara eksperimen dan teori, dan antara teori dan komputasi. Ilustrasi singkat ditunjukkan pada Gambar 1.2.

Halaman pertama Bab 2 buku:

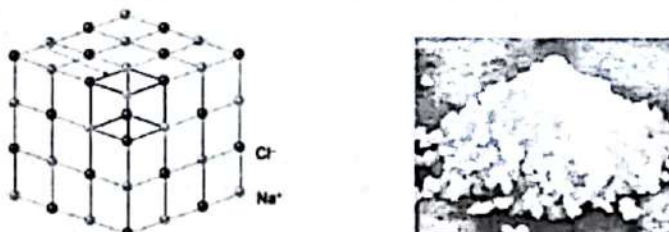
BAB 2

STRUKTUR KRISTAL

2.1 Sel Satuan Kristal

Simulasi dinamika molekul memerlukan data koordinat posisi atom-atom dalam material untuk memulai simulasi. Material ini dapat berupa fase padat, cair maupun gas. Dalam fase padat dapat berupa material dengan struktur kristal maupun yang lain, baik dalam bentuk material dari elemen murni maupun paduan (alloys). Dengan demikian untuk dapat menjalankan simulasi dinamika molekul Anda harus dapat membuat input simulasi yang di dalamnya tertulis semua posisi atom-atom yang menyusun material. Khususnya material berstruktur kristal penyusunan atom-atomnya memiliki sifat periodik tertentu, sehingga material kristal dapat dikelompokkan dengan cara tertentu.

Ada dua istilah penting yang harus dipahami bersama yaitu struktur kristal dan sel satuan (*unit cell*). Struktur kristal merupakan cara penyusunan bagaimana atom, ion atau molekul yang membentuk material. Adapun sel satuan adalah satuan kecil untuk pengulangan struktur kristal, *basic building block* untuk bahan berstruktur kristal. Gambar 2.1 merupakan struktur kristal NaCl dan bongkahan kecil dari NaCl. Pada struktur NaCl di atas, blok yang berwarna kuning adalah sel satuan dari kristal NaCl. Bentuk ini tersusun berulang secara teratur membentuk sebuah kristal NaCl.



(<http://green.wikia.com/wiki/File:Chlorine-sodium-chloride.jpg>)

Gambar 2.1 Kristal NaCl dan bongkahan material NaCl

Halaman pertama Bab 3 buku:

BAB 3

SOFTWARE

Riset simulasi dinamika molekul memerlukan banyak software untuk dapat menghasilkan output yang berkualitas. Beberapa yang penting digunakan dalam, baik mempersiapkan, menjalankan, mengolah data dan hasil simulasi dapat Anda pelajari dan kuasai seperti berikut ini.

3.1 ATOMSK

Salah satu software yang penting untuk membantu proses awal penyiapan input simulasi dinamika molekul. Software ini dapat Anda lihat pada: <http://atomsk.univ-lille1.fr/index.php>. Berikut adalah informasi dari halaman-halaman website ini (catatan: beberapa sengaja tidak kami terjemahkan untuk tidak mengurangi pengertian asli dari informasi yang ditampilkan dalam website).

atomsk is an Open Source command-line program dedicated to the creation, manipulation, and conversion of atomic data files. It supports the file formats used by many programs, including:

- Visualization and analysis softwares: [Atomeye](#), [OVITO](#), [VESTA](#), [XCrySDen](#);
- *Ab initio* calculation softwares: [Quantum Espresso](#), [VASP](#), [SIESTA](#);
- Classical force-field simulation softwares: [DL_POLY](#), [GULP](#), [IMD](#), [LAMMPS](#), [XMD](#);
- TEM image simulation softwares: [Dr Probe](#), [JEMS](#), [QSTEM](#).

Atomsk can be used to transform and shape atomic systems: duplicate, rotate, deform, insert dislocations, merge several systems, create bicrystals and polycrystals, etc. To learn more, you are invited to read [the documentation](#), and to follow [the tutorials](#).

If you use Atomsk in your work, the citation of the following article will be greatly appreciated:

- "Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files"
Pierre Hirel, *Comput. Phys. Comm.* **197** (2015) 212-219

Halaman pertama bab 4 buku:

BAB 4

TEORI DINAMIKA MOLEKUL

Metode dan teknik komputasi saat ini telah menjadi jantung penelitian material modern dan pengembangannya. Dengan menggunakan metode dan teknik-teknik komputasi yang powerful, ada dua manfaat utama yang akan kita dapatkan.

- 1) Berdasarkan desain yang diprediksi secara teoretis, berdasarkan sifat-sifat material, dapat memungkinkan ditemukannya material baru, dengan fungsi-fungsi baru yang diinginkan.
- 2) Penggabungan antara sains dan rekayasa dalam riset *nanotechnology* memungkinkan dikembangkannya material dengan struktur baru untuk aplikasi yang lebih luas.

Dalam hal ini khususnya pemodelan material telah memanfaatkan berbagai "tools" yang ada dan makin berkembang baik dalam bentuk akurasi perhitungan dan prediksi maupun utilitinya. Beberapa metode komputasi yang telah banyak dikenal dalam pemodelan material adalah sebagai berikut:

- Metode elemen hingga (FEM, *finite element method*) dan metode beda hingga (FD, *finite difference*)
- Metode dinamika molekul (MD) untuk memprediksi sifat-sifat material berdasarkan trayektori atom-atom bahan selama simulasi yang diatur oleh persamaan gerak Newton
- Metode Density Functional Theory (DFT) untuk memprediksi sifat-sifat material berdasarkan perhitungan kuantum
- Metode mikromagnetik untuk memprediksi sifat-sifat magnetik bahan
- Metode Computational Fluid Dynamics (CFD) untuk memecahkan problem-problem mekanika fluida
- dll

Khususnya metode MD, dewasa ini sangat intens diterapkan untuk berbagai macam riset material khususnya material nuklir (*nuclear material*). Material nuklir merupakan topik riset yang dibahas dalam buku kita ini.

BAB 5

PROGRAM MOLDY

5.1 Software-Software Simulasi Dinamika Molekul

Simulasi dinamika molekul sebenarnya merupakan suatu proses eksplorasi dan pencarian (sesuatu yang baru) sebuah fenomena menggunakan model sederhana. Pengertian sederhana tidak berarti benar-benar sederhana, sehingga mudah dilakukan tanpa kendala. Sederhana yang dimaksud adalah teori/konsep/model yang diajukan atau digagas jauh lebih sederhana dari kenyataan sebenarnya, dimana sebuah fenomena fisis sejatinya adalah suatu problem yang kompleks, rumit, luas, dalam, nonlinear, dan sangat sulit diprediksi secara tepat dan akurat. Pendekatan sederhana ini dalam banyak hal dapat dinyatakan dalam bentuk linear, orde rendah, pengabaian, idealisasi dan lain sebagainya. Meskipun demikian ternyata dengan model yang sederhana ini tanpa dapat kita bantah telah menghasilkan banyak kemajuan dalam bidang sains dan teknologi.

Di dalam prosesnya, simulasi dinamika molekul dilakukan berdasarkan model-model interaksi antar-atom penyusun bahan/material. Model interaksi ini sebenarnya merupakan model sederhana, yang dapat digunakan untuk mendekati interaksi kompleks yang sesungguhnya. Berbagai sifat-sifat kimia fisika sebuah material/fenomena/proses berusaha diprediksi untuk dapat menghasilkan gambaran material yang lebih komprehensif. Hasil yang diperoleh diharapkan dapat direalisasikan dalam taraf fabrikasi, untuk menghasilkan perangkat baru dengan kinerja yang lebih canggih.

Simulasi dinamika molekul secara teori sebenarnya berusaha memecahkan persamaan gerak Newton untuk potensial (energi) tertentu. Solusi yang diperoleh berupa posisi-posisi atom yang dari waktu ke waktu secara keseluruhan setiap atom akan mengikuti/membentuk trayektori tertentu. Berdasarkan informasi trayektori ini dan dengan mengaplikasikan konsep-konsep fisika statistik, berbagai sifat-sifat kimia fisika sebuah material dapat dihitung. Hasil perhitungan akan sangat bergantung pada seberapa tepat model fungsi potensial yang kita ajukan/terapkan pada simulasi dinamika molekul. Makin tepat sebuah model, makin dekat hasil perhitungan dengan hasil yang sebenarnya. Oleh karena itu salah satu tugas dari peneliti yang menggunakan metode dinamika molekul adalah menyiapkan

Halaman pertama Bab 6:

BAB 6

APLIKASI SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

PENDAHULUAN

Pada Bab 6 ini kita akan menerapkan metode dinamika molekul yang telah kita pelajari pada bab-bab sebelumnya. Kita akan melihat aplikasi sederhana simulasi material yang digunakan dalam reaktor nuklir seperti *cladding* reaktor. Kita ilustrasikan dahulu mengenai konsep reaktor nuklir dan perkembangannya.

6.1 Reaktor Nuklir, Jenis dan Karakteristiknya

Issue energi sudah kita ketahui adalah issue yang sangat penting pada tahun-tahun yang sudah lewat, sekarang apalagi di masa yang akan datang. Kebutuhan energi dan sumber energi baru makin lama bukannya cenderung berkurang namun seiring dengan perkembangan ilmu dan teknologi serta meningkatnya kesejahteraan umat manusia issue energi ini semakin meningkat. Sementara ketersediaan energi berbasis fosil seperti minyak bumi jelas semakin (cepat) menipis. Berbagai upaya mencari sumber energi alternatif terus diupayakan dan yang paling potensial adalah pemanfaatan energi nuklir yang dewasa ini perkembangannya sangat cepat. Apa yang menarik dari energi nuklir ini [1]?

- o **Kapasitas yang sangat besar**
Jika Anda tahu maka 1 kg bahan bakar nuklir uranium dapat menghasilkan energi yang setara dengan yang dihasilkan oleh 100 ton batubara atau sekitar 60 ton minyak.
- o **Reduksi gas rumah kaca**
Pemanfaatan energi nuklir dapat menekan emisi gas CO₂ sangat signifikan
- o **Mempercepat pertumbuhan ekonomi**

Reaktor nuklir adalah devais yang mampu memanfaatkan panas yang dihasilkan selama proses pembelahan inti untuk menghasilkan energi yang digunakan untuk pembangkitan listrik. Selama

LAMPIRAN

L.1 Tabel Periodik Unsur-Unsur

(<http://www.chemistry2011.org/periodictableofelements>)

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period ↓																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba		72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra		104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
Lanthanides	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu			
Actinides	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr			

L.2 Beberapa Judul Artikel Publikasi Penulis Pada Jurnal

- [1] 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
- [2] 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
- [3] 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.
- [4] 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)

Berdasarkan hasil-hasil di atas maka luaran yang telah dicapai dapat diringkas sebagai berikut:

1. Pemakalah dalam international conference:
 - UPIS 2018 UNNES Semarang
 - ICES 2018 ITB Bandung
 - ICANSE 2018 ITB Bandung
2. Invited Speaker pada International Conference UPIS 2018 UNNES Semarang
3. Publikasi pada Journal International terindeks Scopus:
 Accepted for publication: IOP Journal of Physics:
 Temperature dependence diffusion of iron, boron and iron-boron calculated by molecular dynamics method
4. Buku Hasil Penelitian dengan judul
 Metode Simulasi Dinamika Molekul: from the beginning to real applications
 Universitas Jember Press, 200 halaman, 2018
 (Dalam proses percetakan)

Pada penelitian ini sebenarnya juga dikembangkan konsep Docker untuk pengembangan perangkat simulasi ke depan. Dengan konsep docker ini maka ke depan simulasi dapat dipersiapkan secara remote melalui server universitas Jember.

← → ↻ | 🔒 hub.docker.com/r/aarkundato/moldy



PUBLIC REPOSITORY

aarkundato/moldy ☆

Last pushed 13 days ago

Repo Info Tags

Short Description

Short description is empty for this repo.

Dari penelitian ini juga dikembangkan website riset untuk mengelola berbagai perkembangan riset yang dilaksanakan:

inet.arkundato.net/home



- HOME
- PROFILE
- GRANTS
- PEOPLE
- PUBLICATIONS
- CONFERENCES
- SOFTWARE

CMSE | Research Group
Computational Material Science and Engineering
Physics Department, Jember University

...Kurniyo, Zaki Said, Nurvaidin Arsalita, Widyana, 2017. Study of ...
 ...Theoretical Analysis and Simulation of ...
 ...Singapore

...Zaki Said, Nurvaidin Arsalita, Widyana, 2015. Modeling of ...
 ...high temperature media in 4-branch system. ...
 ...132-144

...Zaki Said, Mikrosani Aldillah, Widyana, 2014. ...
 ...high temperature liquid lead. A ...
 ...December 2013, Page 285-300. ...

...Zaki Said, Nurvaidin Arsalita, Widyana, 2014. ...
 ...of ...
 ...Series, 8(2), 2013, 013039.

...A. G. ...
 ...Resistance of ...
 ...

REFERENSI PENELITIAN

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.
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
5. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, *Proceedings: Computational Study: Reduction of Iron Corrosion in Lead Coolant of Fast Nuclear Reactor*, Internatioanal 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. 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,

11. J. Zhang, 2008, N. Li Review of The Studies on Fundamental Issues In LBE Corrosion', Journal of Nuclear Materials, 373, hal. 351-377.

LAMPIRAN-LAMPIRAN

Lampiran 1. Biodata Ketua dan Anggota TIM

A. IDENTITAS DIRI PENELITI (KETUA)

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 Dihasilkan	S-1 = 20 orang; S-2 = 1 orang; S-3 = ... orang
12	Nomor Telepon/Faks	0331334293/0331330225
13	Mata Kuliah yang Diampu	1. Fisika Modern 2. Fisika Inti (nuklir) 3. Fisika Kuantum 4. Mekanika 5. Komputasi Atom dan Inti 6. Fisika Komputasi

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 DM
Nama Pembimbing/Promotor	Prof. Drs. Muslim, Ph.D	Prof. Dr. Zaki Su'ud	Prof. Dr. Zaki Su'ud 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 <i>Patient Care Technology Systems (PCTS)</i> 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 (Computerized Advanced-Reactometer):Integrasi Metode Spektroskopi Optik dan SFT (Stopped Flow Technique)Untuk Aplikasi Pengukuran Reaksi Kimia Cepat	Hibah Bersaing	47
5	2013	Pengembangan Komputasi Skala Besar Dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja Pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis <i>Coolant</i> Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul	Hibah Doktor	45
6	2014	Simulasi Dinamika Molekul Berbasis <i>Cloud Computing</i> Performa Tinggi Untuk Investigasi Korosi Material <i>Cladding</i> Reaktor Cepat Dalam Pendingin Logam Cair	Hibah Fundamental	52,5
7	2015-2016	Pengembangan Simulasi Berbasis Visual Molecular Dynamic Untuk Mengatasi Miskonsepsi Gerak Peluru Siswa Menggunakan Metode Demontrasi	Hibah Pekerti (TPM)	
8	2017	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	Hibah Fundamental	70

D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2012 /2013	Pembimbingan Eksperimen Isyarat kelistrikan Jantung Untuk Meningkatkan Kemampuan Analisis Fisis Mahasiswa Stikes Bhakti Negara	Mandiri	0,5
2	2013 /2014	Pembinaan Dan Pengawasan Pelaksanaan Ujian Nasional Tingkat SMA/MA/SMK Tahun Pelajaran 2013/2014 Pada SMK 1 Pancasila Ambulu Jember	Mandiri	0,5
2	2015 /2016	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 Conference 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.
9	Effect of temperature on the corrosion inhibition of iron in liquid lead using oxygen inhibitor: studied by MD simulation	Journal of Physics: Conference Series	http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1742-6596/853/1/012046 (2017)

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	Nov 2011, ITB

		Nuclear Reactor	
4	ICANSE	Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method	Nov 2011, Hotel Aston, Bali
5	International Conference on Physical Instrumentation and Advanced Materials	Effect of temperature on the corrosion inhibition of iron in liquid lead using oxygen inhibitor: studied by MD simulation	27 October 2016, Hotel Santika Premiere, Surabaya, Indonesia

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
4	Fisika Komputasi: Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya	2016	120	http://ura.unej.ac.id/123456789/66112

H. 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 ketidak-sesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

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

Jember, 03 Juli 2017

Peneliti,



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

ANGGOTA PENELITI 1

A. Identitas Diri

1	Nama Lengkap (dengan gelar)	Drs. Moh. Hasan, MSc., PhD
2	Jenis Kelamin	L
3	Jabatan Fungsional	Lektor Kepala
4	NIP/NIK/Identitas lainnya	196404041988021001
5	NIDN	0004046404
6	Tempat, Tanggal Lahir	Malang, 4 April 1964
7	E-mail	hasan@fmipa.unej.ac.id
8	Nomor Telepon/HP	08124964921
9	Alamat Kantor	Jurusan Matematika FMIPA Universitas Jember
10	Nomor Telepon/Faks	0331334293/0331330225
11	Lulusan yang Telah Dihasilkan	S-1 = 45 orang; S-2 = 9 orang; S-3 = 0 orang
12	Nomor Telepon/Faks	
13	Mata Kuliah yang Diampu	1. Linear Algebra
		2. Kalkulus I
		3. Pra Thesis
		4. Riset Operasi
		5. Analisis Numerik
		6. Kalkulus III
		7. Pemodelan Matematika
		8. Sistem Dinamik

B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2	S-3
Nama Perguruan Tinggi	Universitas Jember	The University of Western Australia	Wageningen University
Bidang Ilmu	Matematika	Matematika	Matematika Terapan

Tahun Masuk-Lulus	1983 - 1987	1992 - 1995	1999 - 2003
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi	Pengaruh Tugas Ko-kurikuler terhadap Prestasi Belajar Siswa	Modelling of Industrial Packers	Deposition of Granular Materials: Stick-Slip Model
Nama Pembimbing/Promotor	Drs. Kamdi	Dr. Neville D Fowkes	Prof. Dr. Gerard Bot, Prof. Dr. Johan Grasman, Dr. Joost van Opheusden

C. Pengalaman Penelitian Dalam 5 Tahun Terakhir
(Bukan Skripsi, Tesis, maupun Disertasi)

No.	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)
1	2006	Penentuan Berat Volume dan Berat Jenis Tanah Mineral secara tidak langsung dari Data Pengukuran Tensiogravimetris	Hibah Fundamental DP2M	26
2	2007	Tensiohigrogravimetri Digital untuk Penentuan Karakteristik Hidraulik Tanah	Hibah Bersaing DP2M	40
3	2011	Penggunaan <i>Lindenmayer System</i> (L-system) dalam memodelkan pertumbuhan tanaman dan membangun obyek-obyek <i>fractal</i>	Mandiri	10
4	2010	Pengembangan model <i>granular dynamic</i>	Hibah Fundamental DP2M	21

* Tuliskan sumber pendanaan baik dari skema penelitian DIKTI maupun dari sumber lainnya.

D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (Juta Rp)

* Tuliskan sumber pendanaan baik dari skema pengabdian kepada masyarakat DIKTI maupun dari sumber lainnya.

E. Publikasi Artikel Ilmiah Dalam Jurnal dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/Nomor/Tahun
1	Modelisasi Benda Onyx dan Marmer dengan Bantuan Permukaan Putar	Jurnal Ilmu Dasar (UNEJ)	2006
2	Model for Static and Dynamic Phenomena in Deposition Process	Journal of the Indonesian Math Society (ITB)	2007
3	Computer Simulation of Pouring Grains Using Stick-Slip Model	Jurnal Ilmu Dasar (UNEJ)	2009

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

No.	Nama Pertemuan Ilmiah / Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	Seminar Hasil Penelitian Fundamental	Penentuan Berat Volume dan Berat Jenis Tanah Mineral Secara Tidak Langsung dari Data Pengukuran Tensiogravimetris	2007, DP2M DIKTI
2	Seminar Nasional tentang Inovasi Penelitian Matematika dan Pembelajarannya di Era Persaingan Global	Pemodelan Pertumbuhan Batang Tanaman dengan Menggunakan L-systems	2007, UNESA
3	Kongres Nasional IX Himpunan Ilmu Tanah Indonesian/	Pendekatan Empiris Distribusi Usuran Pori Tanah dengan Model Arya-Paris dan Korelasinya Terhadap Hasil Pengukuran Laboratorium	2007, UPN Yogyakarta
4	Seminar Nasional Matematika tentang Peran matematika/	Modeling and Simulation of Depositing Dry Grains	2009, FMIPA UNEJ
5	International Conference on Natural Science	Two Dimensional Granular Dynamic Simulation of Depositing Materials	2011, Humboldtian Kollege Indonesia dan Universitas Ma Chung

G. Karya Buku dalam 5 Tahun Terakhir

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

H. Perolehan HKI dalam 5–10 Tahun Terakhir

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

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
-----	--	-------	------------------	-------------------

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

No.	Jenis Penghargaan	Institusi Pemberi Penghargaan	Tahun
-----	-------------------	-------------------------------	-------

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

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

Jember, 06 Juli 2017

Pengusul,



Drs. Mohammad Hasan, M.Sc., Ph.D
NIP. 196404041988021001

ANGGOTA PENELITI 2

A. Identitas Diri

1	Nama Lengkap	Endhah Purwandari, S.Si., M.Si.
2	Jenis Kelamin	Perempuan
3	Jabatan Fungsional	Lektor
4	NIP	19811111 200501 2 001
5	NIDN	0011118102
6	Tempat dan Tanggal Lahir	Jember, 11 November 1981
7	Email	endhahfisika@yahoo.co.id
8	Nomor HP	085236054435
9	Alamat Kantor	Fakultas MIPA-Universitas Jember Kampus Tegalboto Jl. Kalimantan No. 37 Jember
10	Nomor Telepon/Faks	0331-334293/0331-330225
11	Lulusan yang Telah Dihadirkan	S1 = 19 orang
12	Mata Kuliah yang Diampu	1. Fisika Dasar
		2. Fisika Matematika I, II
		3. Fisika Atom
		4. Elektrodinamika
		5. Eksperimen Fisika I, II
		6. Fisika Komputasi
		7. Algoritma dan Pemrograman Komputer
		8. Aplikasi Office dan Web Disain
		9. Komputasi Material

B. Riwayat Pendidikan

	S1	S2	S3
Perguruan Tinggi	Universitas Jember	Institut Teknologi Bandung	-
Bidang Ilmu	Fisika	Fisika	-
Tahun Masuk-Lulus	1999-2003	2008-2011	-
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi	Identitas Ward-Takahashi, Slavnov-Taylor dan BRST dalam Kondisi Gauge Umum	The Study of Deposition Parameter Optimization on The Simulation of a-Si:H Solar Cells Efficiency by Investigating The Effect of Optical Bandgap	-
Nama Pembimbing/Promotor	Sutisna, SPd., M.Si. Drs. Sujito, Ph.D.	Prof. Dr. Toto Winata	-

C. Pengalaman Penelitian dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Sumber Pendanaan
1	2011	Optimasi Tekanan Deposisi dalam Simulasi Efisiensi Sel Surya Berbasis Material a-Si:H	Mandiri
2	2012	Simulasi Penentuan Daya RF Optimum dalam Proses Fabrikasi Sel Surya Berbasis Silikon Amorf Terhidrogenasi	Mandiri
3	2013	Analisis Numerik Perhitungan Efisiensi Sel Surya Berbasis A-Si:H dalam Penentuan Temperatur Filamen Optimum Bahan	Mandiri
4	2013	Perancangan Aplikasi Pengukuran Kadar Gula (Sukrosa) Nira Tebu Dengan Sistem Polariser Dilanjutkan dengan Menggunakan Sistem Interferometer Michelson Presisi Tinggi	Hibah Bersaing
5	2013	Pengembangan Bahan Komposit Ramah Lingkungan Berpenguat Serat Ampas Tebu Dan Resin Biodegradable	Penelitian unggulan Perguruan Tinggi
6	2014	Pengembangan Bahan Komposit Ramah Lingkungan Berpenguat Serat Ampas Tebu dan Bacterial Cellulose (BC) Biodegradable Resin Sebagai Bahan Panel Interior Industri Otomotif	Penelitian Strategis Nasional

D. Pengalaman Pengabdian kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Pengabdian kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber	Jml (Rp)
1	2011	Pelatihan Eksperimen Fisika Modern Untuk Meningkatkan Kemampuan Siswa SMA Negeri 2 Jember Dalam Pembelajaran Efek Fotolistrik dan Difraksi Optik	Mandiri	500.000,00
2	2012	Pelatihan Eksperimen Radiasi Termal Untuk Meningkatkan Kemampuan Analisis Mahasiswa STIKES BHAKTI NEGARA Jember	Mandiri	500.000,00
3	2013	IbM Dusun Karetan Kel. Jember Lor Kec. Patrang Kab. Jember dalam Usaha	Hibah Pengabdian Purnbinaan Dan	37.500.000

		Meningkatkan Kondisi Sosial Ekonominya	Penguatan Sumberdana BOPTN Universitas Jember	
4	2014	Pelatihan Analisis Data Bagi Mahasiswa Stikes Dr. Soebandi Pada Eksperimen Pengaruh Ketinggian Reservoir Terhadap Debit Fluida	IbM DIKTI	500.000
5	2015	IbM Peternak Lele di Dusun Gebang Poreng Jember Melalui Modifikasi Pakan Ekonomis Berbahan Dasar Kotoran Ternak	IbM DIKTI	39.000.000
6	2016	Penerapan Teknologi Tepat Guna pada Home Industri Tempe Desa Kasiyan Timur Kecamatan Puger Kabupaten Jember	Hibah Pengabdian Peningkatan Kegiatan Pengabdian Kepada Masyarakat Dosen yang Berorientasi pada Pencapaian IKU dan IKK LPM Universitas Jember	15.000.000
7	2017	Pelatihan Pengolahan Air Bersih untuk Kebutuhan Rumah Tangga di Desa Kladi Kecamatan Cermee Kabupaten Bondowoso	Mandiri	1.500.000

E. Publikasi Artikel Ilmiah dalam Jurnal dalam 5 Tahun Terakhir

No	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/Nomor/Tahun
1	Optimasi Tekanan Deposisi dalam Simulasi Efisiensi Sel Surya Berbasis Material a-Si:H (Jurnal Gradien Volume 8 No.1, FMIPA Universitas Bengkulu, 2011)	Jurnal Gradien FMIPA Universitas Bengkulu	Volume 8/ No 1/Th. 2011
2	Analisis Perhitungan Efisiensi Sel Surya Berbasis A-Si:H dalam Penentuan Temperatur Filamen Optimum Bahan	Jurnal Ilmu Dasar	Vol. 14/No.1/2013
3	Mechanical Properties and Biodegradability of Bamboo and Sengon Wood Thin Sheets Reinforced Poly Lactic Acid (PLA) Biocomposites)	Jurnal Ilmu Dasar	Vol. 14/No.2/2013
4	Pengukuran Kadar Gula(Sukrosa) Nira Tebu Menggunakan Sistem Interferometer Michelson Presisi Tinggi	Prosiding Seminar Nasional Fisika	No. ISBN : 978-602-9030-79-2 Tahun 2015
5	Efek Wetting Layer terhadap Struktur Kristal Film Tipis ZnO yang Ditumbuhkan di Atas Substrat Si(100) dengan Metode Spin Coating	Prosiding Seminar Nasional Fisika	No. ISBN : 978-602-9030-79-2 Tahun 2015
6	Komparasi Bentuk-Bentuk Suku "Cross-Interaction" Pada Simulasi Dinamika Molekul Potensial Lennard-Jones Untuk Sistem Fe Dalam Logam Cair Pb Dan PbBi	Prosiding Seminar Nasional Fisika	No. ISBN : 978-602-9030-79-2 Tahun 2015

7.	Visualisasi Molekul Besi Berbentuk Bola Dalam Timbal Cair Berbentuk Bola Menggunakan Software Packmol	Prosiding Seminar Nasional Fisika	No. ISBN : 978-602-9030-79-2 Tahun 2015
8	Simulation of I-V Characteristics of Si Diode at Difference Operating Temperature: Effect of Ionized Impurity Scattering	Proceedings : The 1st International Basic Science Conference 2016	No. ISBN : 978-602-60569-5-5 Tahun 2016
9	Simulation of Solar Cell Diode I-V Characteristics Using Finite Element Methode: Influence of p-Layer Thickness	Proceedings : The 1st International Basic Science Conference 2016	No. ISBN : 978-602-60569-5-5 Tahun 2016

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

NO	Nama Pertemuan Ilmiah/Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	Seminar Nasional MIPA dan Pembelajaran MIPA-	Simulasi Penentuan Daya RF Optimum dalam Proses Fabrikasi Sel Surya Berbasis Silikon Amorf Terhidrogenasi	31 Maret 2013, Universitas Jember
2	Seminar Nasional Fisika	Simulasi Distribusi Pembawa Muatan Dioda Si Akibat Efek Hamburan Impuritas Terionisasi	28 Agustus 2015, Universitas Jember

G. Karya Buku dalam 5 Tahun Terakhir

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

H. Perolehan HKI dalam 5-10 Tahun Terakhir

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

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
-	-	-	-	-

J. Penghargaan dalam 10 Tahun Terakhir

No	Jenis Penghargaan	Institusi Pemberi Penghargaan	Tahun
-	-	-	-

--	--	--	--

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

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam penelitian Hibah Kompetensi

Jember, 5 Juli 2017
Peneliti



Endah Purwandari, MSi

Lampiran 2. Susunan organisasi tim peneliti dan pembagian tugas (Lampiran D)

No.	Nama/NIDN	Instansi Asal	Bidang Ilmu	Alokasi Waktu	Uraian Tugas
1	Dr. Artoto Arkundato	UNEJ	Fisika Komputasi	8 J/M	Koordinator Analisis Metode DM Pemodelan Kajian Teori Fisika Analisis data Penulisan Artikel Seminar
2	Moh Hasan, PhD	UNEJ	Matematika Komputasi	6 J/M	Kajian Matematis fungsi potensial Dinamika Granular Desain database data nuklir Analisis data Penulisan Artikel dan Buku Seminar
3	Endah Purwandari, MSi	UNEJ	Fisika Komputasi	6 J/M	Instalasi softwate Instalasi perangkat paralel Pengambilan data Pembuatan laporan Support umum

Lampiran 3. Surat Pernyataan Ketua dan Anggota (H)



KEMENTERIAN RISET, TEKNOLOGI, DAN PENDIDIKAN TINGGI
UNIVERSITAS JEMBER
LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
Jl. Kalimantan No. 37 Jember Telp. 0331-337818, 339385 Fax. 0331-337818


SURAT PERNYATAAN KETUA PENGUSUL

Yg bertanda tangan dibawah ini, saya

Nama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.
NIP : 196912251999031001
Instansi : FMIPA Universitas Jember
Jl.Kalimantan No. 37 Jember, Kampus Tegal Boto

Dengan ini menyatakan bahwa proposal saya dengan judul: **Upaya Menemukan Material Terstruktur, Inhibitor, dan Metode Baru Penghambatan Korosi Logam Cair untuk Aplikasi Reaktor Nuklir Cepat Dengan Metode Dinamika Molekul Paralel Terakselerasi** yang diusulkan dalam skema Hibah Penelitian Berbasis Kompetensi untuk tahun anggaran 2018 bersifat original dan belum pernah dibiayai oleh lembaga/sumber dana lain. Bilamana di kemudian hari ditemukan ketidasesuaian dengan pernyataan ini, maka saya bersedia dituntut dan diproses sesuai dengan ketentuan yang berlaku dan mengembalikan seluruh penugasan yang sudah diterima ke kas negara.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya

Mengetahui,
Ketua LP2M Universitas Jember,

Prof. Ir. Achmad Subagio, M.Agr., Ph. D.
NIP. 196905171992011001

Jember 06 Juli 2017
Mengetahui,
Ketua LP2M Universitas Jember,

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

