



**KARAKTERISTIK LOGAM BESI (Fe), NICKEL (Ni) DAN
PADUANNYA FeNi DALAM PENDINGIN TIMBAL (Pb)
BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

*diajukan untuk memenuhi sebagian persyaratan memperoleh gelar Sarjana pada
program studi Fisika (S-1)*

SKRIPSI

Oleh

**Ulvatu Rizqa Ilmawati
181810201043**

**KEMENTERIAN PENDIDIKAN, KEBUDAYAAN, RISET DAN
TEKNOLOGI
UNIVERSITAS JEMBER
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN
FISIKA
JEMBER
2023**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini penulis persembahkan Kepada :

1. Allah SWT yang telah memberikan hidayah dan berkah sehingga saya bisa menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
2. Ayah (Suparno) dan Ibu (Katmini) yang telah selalu mendoakan dan mendukung saya dalam penulisan skripsi ini serta kakak saya (Anisaul Azizah Septiana) yang selalu memberikan doa dan motivasi dalam penyelesaian penulisan skripsi ini.
3. Ibu Bapak guru (pengajar) mulai dari TK hingga SMA serta para Dosen di Perguruan Tinggi yang selalu mendukung penyelesaian pendidikan saya
4. Teman-teman seperjuangan fisika angkatan 2018 yang telah memberikan banyak arahan dan semangat untuk menyelesaikan skripsi ini
5. Almamater Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

MOTTO

No matter what some people say
No matter what some people hate
No matter what the things that make you sick
(Sunrise-Ateez)



PERNYATAAN ORISINALITAS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Ulvatu Rizqa Ilmawati

NIM : 181810201043

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Karakteristik Logam Besi (Fe), Nickel (Ni) dan Paduannya FeNi dalam Pendingin Timbal (Pb) Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali jika dalam pengutipan substansi disebutkan sumbernya, dan belum pernah diajukan pada institusi manapun, serta bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan skripsi ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa adanya tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 28 Juli 2023

Yang menyatakan,

(Ulvatu Rizqa Ilmawati)

NIM 181810201043

HALAMAN PERSETUJUAN

Skripsi berjudul *Karakteristik Logam Besi (Fe), Nickel (Ni) dan Paduannya FeNi dalam Pendingin Timbal (Pb) Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul*. telah diuji dan disahkan oleh Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember pada:

Tempat : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

Tim Penguji:

Ketua,

Anggota I,

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

Dr. Sutisna, S.Pd, M.Si.
NIP. 19730115200031001

Anggota II,

Anggota III,

Agung Tjahjo Nugroho, S.Si., M.Phil., Ph.D.
NIP.196812191994021001

Wenny Maulina, S.Si, M.Si.
NIP.198711042014042001

Mengesahkan
Dekan Fakultas MIPA
Universitas Jember

Drs. Achmad Sjaifullah, M.Sc., Ph.D.
NIP. 195910091986021001

ABSTRAK

Dalam penelitian ini nanti akan dilakukan analisis bahan Fe, Ni, dan FeNi dalam Pb pada berbagai temperatur 1023 K. Setiap bahan mempunyai tingkat kelarutan tertentu. Pada proses korosi logam dalam pendingin Pb cair maka diasumsikan korosi terjadi karena atom-atom logam padat Fe, Ni dan FeNi terdifusi masuk ke dalam logam Pb cair. Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember. Penelitian dilakukan menggunakan metode Dinamika Molekul dengan program MOLLY penggunaan paduan FeNi membuat baja komposit yang lebih kuat karena secara umum logam murni lebih lembek dibanding logam paduan. Oleh karena itu, simulasi dalam penelitian ini menunjukkan bahwa dalam menghadapi korosi Pb cair Fe harus lebih banyak dari pada Ni, untuk membuat baja paduan FeNi. Ini dapat terlihat dari nilai CNA FCC baja Fe75%Ni25% yang lebih tinggi daripada baja Fe25%Ni75%. Simulasi dalam penelitian ini menunjukkan bahwa dalam menghadapi korosi Pb cair Fe harus lebih banyak dari pada Ni, untuk membuat baja paduan FeNi. Ini dapat terlihat dari nilai CNA FCC baja Fe75%Ni25% yang lebih tinggi daripada baja Fe25%Ni75%.

Kata Kunci : MOLLY, CAN, FCC, Fe, Ni, Pb.

ABSTRACT

In this study, an analysis of Fe, Ni, and FeNi materials in Pb will be carried out at various temperatures of 1023 K. Each material has a certain level of solubility. In the process of metal corrosion in liquid Pb cooling, it is assumed that corrosion occurs due to solid metal atoms Fe, Ni and FeNi diffused into the molten Pb metal. This research was conducted at the Computational Physics Laboratory, Department of Physics, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Jember. The research was conducted using the Molecular Dynamics method with the MOLLY program. The use of FeNi alloys makes composite steel stronger because in general pure metals are softer than alloy metals. Therefore, the simulation in this study shows that in the face of corrosion liquid Pb Fe must be more than Ni, to make FeNi alloy steel. This can be seen from the CNA FCC value of Fe75%Ni25% steel which is higher than Fe25%Ni75% steel. Simulations in this study show that in the face of corrosion liquid Pb Fe must be more than Ni, to make FeNi alloy steel. This can be seen from the CNA FCC value of Fe75%Ni25% steel which is higher than Fe25%Ni75% steel.

Keywords : MOLLY, CAN, FCC, Fe, Ni, Pb.

RINGKASAN

Karakteristik Logam Besi (Fe), Nickel (Ni) dan Paduannya FeNi dalam Pendingin Timbal (Pb) Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul ; Ulvatu Rizqa Ilmawati, 1818201043 ; 2023; 36 halaman ; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Dalam penelitian ini nanti akan dilakukan perhitungan koefisien difusi untuk mengetahui performa bahan Fe, Ni dan baja FeNi dalam Pb pada berbagai temperatur 1023 K. Setiap bahan mempunyai tingkat kelarutan tertentu jika berada dalam bahan lain, dimana tingkat kelarutan ini dapat digambarkan dengan koefisien difusi. Pada proses korosi logam dalam pendingin Pb cair maka diasumsikan korosi terjadi karena atom-atom logam padat Fe, Ni dan FeNi terdifusi masuk ke dalam logam Pb cair.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa beberapa gambaran yang menarik, bahwa komposisi atom-atom suatu bahan khususnya berbasis Fe dan Ni sangat menentukan karakteristik suatu bahan. Pada penelitian ini kita ingin melihat bagaimana kekompakan struktur bahan dengan komposisi tertentu jika bahan itu dimasukkan dalam lingkungan Pb cair pada suhu 1023K. Pada logam Ni ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 78 %, pada logam Fe memiliki jumlah struktur FCC 81,2 %, pada logam paduan Fe50%Ni50% memiliki jumlah struktur FCC 10,8 %, pada logam paduan Fe25%Ni50% memiliki jumlah struktur FCC 42,2 %, dan pada logam paduan Fe75%Ni25% memiliki jumlah struktur FCC 48,2 %. Dengan demikian penggunaan logam murni Fe lebih kuat dari pada penggunaan logam Fe maupun Ni dengan ditunjukkan FCC Fe 81,2 % > 78 % FCC.

PRAKATA

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT karena atas rahmat dan karunia-Nya penulis dapat menyelesaikan penelitian serta menyusun skripsi dengan Judul “Karakteristik Logam Besi (Fe), Nickel (Ni) dan Paduannya FeNi dalam Pendingin Timbal (Pb) Berdasarkan Simulasi Dinamika Molekul”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) dan program studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember .

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada :

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama (DPU) dan Dr. Sutisna, S.Pd, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota (DPA) , yang telah meluangkan untuk memberikan ilmu yang bermanfaat dan dorongan kepada penulis dalam menyelesaikan skripsi;
2. Agung Tjahjo Nugroho, S.Si., M.Phil., Ph.D., selaku Dosen Penguji I dan Wenny Maulina, S.Si, M.Si., selaku Dosen Penguji II yang telah memberikan saran dan membantu penulis dalam penyelesaian skripsi ini.
3. Dr. Ratna Dewi Syarifah S.Pd., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah membimbing rencana akademik penulis selama masa perkuliahan serta membantu saya dalam finansial untuk segera menyelesaikan skripsi ini.
4. Endhah Purwandani, S.Si., M.Si. yang telah membantu saya dalam segi penambahan finansial selama penyelesaian skripsi ini.
5. Seluruh Dosen Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Jember yang telah memberikan ilmu serta bimbingan selama masa perkuliahan
6. Kedua Orang Tua Bapak Suparno dan Ibu Katmini yang tidak lepas selalu mendoakan serta memberikan dukungan serta kakak tercinta Anisaul Azizah Septiana yang tidak pernah lepas memberikan motivasi dan doa.
7. Teman-Teman fisika angkatan 2018 Onephyys, BPM Fmipa 2021, UKMS Titik dan Antareja atas rasa kebersamaan dan kekeluargaannya.

8. Deananda Lourena Asti, Samakhatus Sahiroh Saroyatin, Irma Aurellia, Rizka Amaliya Fatmawati, Wardatul Jannah, Trio Febriansyah, Mila Hidayatul, Davin Dalta Bioser yang selalu memberi motivasi dan semangat.
9. Sahabat tercinta Dhayu Erinka Meilinia dan Rafini Aminatul Hidayah yang tidak luput selalu memberi semangat dan motivasi.
10. Stray Kids dan Ateez dengan karya-karya mereka yang memotivasi, memberi arti hidup dan memberi semangat.
11. Serta Pihak-Pihak yang tidak bisa disebutkan satu persatu untuk doa-doa dan memberi rasa semangat, turut membantu dalam penyelesaian skripsi ini.

Sebagai penulis sadar bahwa dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini masih banyak kekurangan sehingga penulis mengharapkan kritik dan saran oleh semua pihak untuk perbaikan skripsi selanjutnya. Semoga skripsi ini memberikan manfaat dalam ilmu pengetahuan maupun untuk penelitian selanjutnya.

Jember, 28 Juli 2023

Penulis

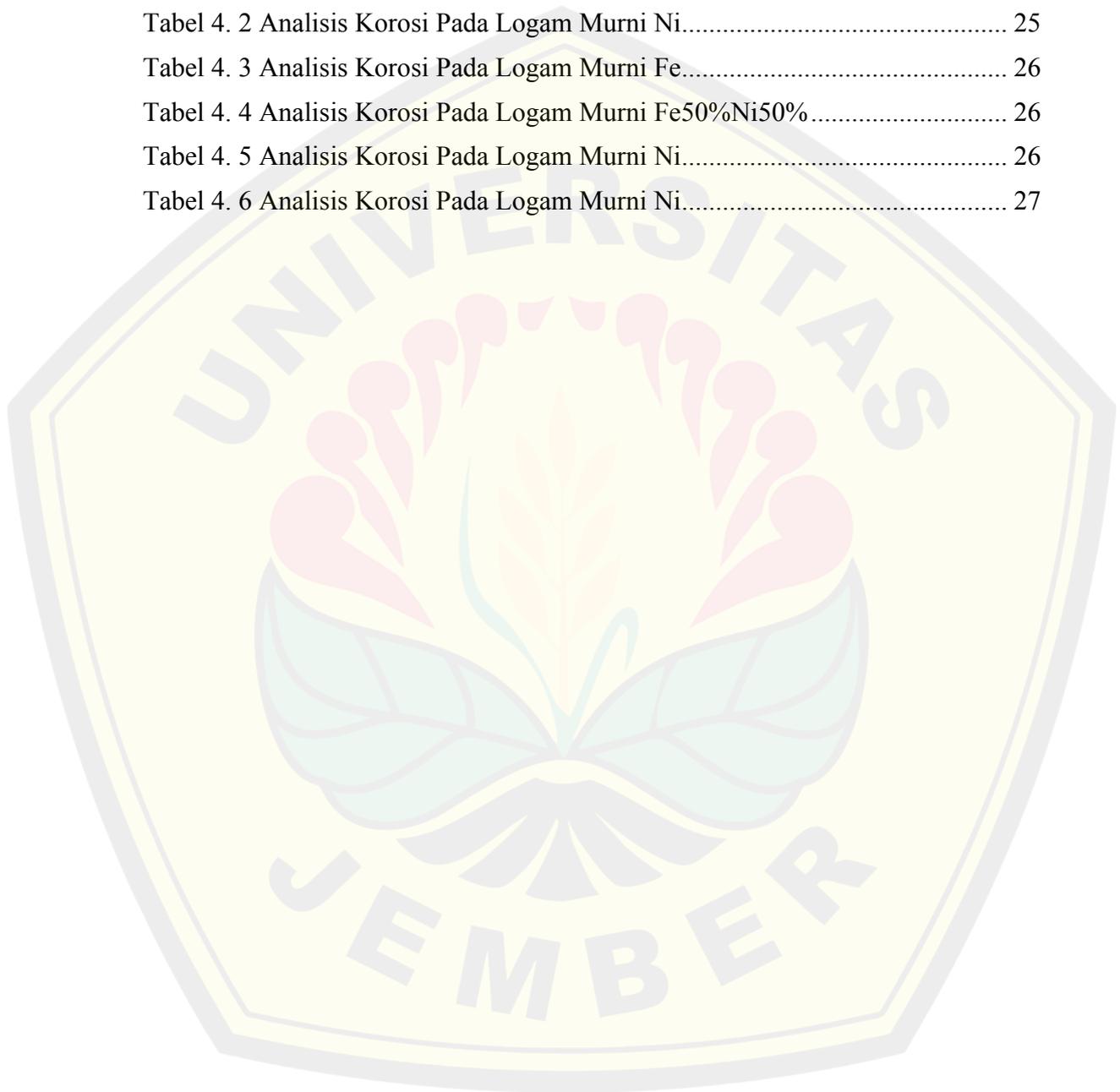
DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
PERSEMBAHAN.....	iii
MOTTO	iv
PERNYATAAN ORISINALITAS.....	v
HALAMAN PERSETUJUAN	vi
ABSTRAK	vii
RINGKASAN	viii
PRAKATA.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xv
DAFTAR NOTASI.....	xvi
DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN	xvii
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Penelitian	4
1.4 Tujuan Penelitian.....	4
1.5 Manfaat Penelitian.....	4
BAB 2. TINJAUAN TEORI.....	5
2.1 Koefisien Difusi	5
2.2 Material	5
2.2.1 Besi (<i>Fe</i>).....	5
2.2.2 Nikel (<i>Ni</i>).....	6
2.2.3 Timbal (<i>Pb</i>).....	7
2.3 Metode Dinamika Molekul	8
2.3.1. <i>Potensial Lennard-Jones</i>	9
2.4 Program Dinamika Molekul.....	11
2.4.1. <i>MOLDY</i>	11
2.4.2. <i>OVITO</i>	12
BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN	13
3.1 Lokasi dan Waktu Penelitian.....	13
3.2 Desain Penelitian.....	13

3.3	Prosedur Penelitian.....	14
3.5.1	<i>Sistem Simulasi</i>	16
3.5.2	<i>Input Simulasi</i>	16
3.5.3	<i>Running Simulasi</i>	16
3.5.5	<i>Analisis dan Visualisasi Hasil Simulasi</i>	16
3.4	Pengumpulan Data Penelitian.....	17
3.5	Alat/Instrumen Penelitian.....	17
3.6	Metode Analisis.....	18
BAB 4.	HASIL DAN PEMBAHASAN.....	19
4.1	Komposisi Logam.....	19
4.2	Logam Ni Murni.....	19
4.3	Logam Fe Murni dalam Pb Cair.....	21
4.4	Logam Fe50%Ni50% di dalam Pb Cair.....	22
4.5	Logam Fe25%Ni75% di dalam Pb Cair.....	23
4.6	Logam Fe75%Ni25% di dalam Pb Cair.....	24
4.7	Analisis Korosi Pada Logam Fe, Ni, dan FeNi dalam Pb cair.....	25
BAB 5.	KESIMPULAN DAN SARAN.....	29
5.1	Kesimpulan.....	29
5.2	Saran.....	29
DAFTAR PUSTAKA	30
LAMPIRAN-LAMPIRAN	34

DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Analisis Komposisi Jumlah Atom Logam	18
Tabel 3. 2 Analisis Korosi Pada Logam.....	18
Tabel 4. 1 Komposisi Material.....	19
Tabel 4. 2 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni.....	25
Tabel 4. 3 Analisis Korosi Pada Logam Murni Fe.....	26
Tabel 4. 4 Analisis Korosi Pada Logam Murni Fe50%Ni50%.....	26
Tabel 4. 5 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni.....	26
Tabel 4. 6 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni.....	27



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Potensial Lennard-Jones.....	10
Gambar 2. 2 Tampilan MOLDY.....	Error! Bookmark not defined.
Gambar 2. 3 Tampilan OVITO.....	12
Gambar 3. 1 Diagram Alir Rancangan Penelitian.....	13
Gambar 3. 2 Flowchart Simulasi Pada Penelitian.....	15
Gambar 4. 1 Visualisasi Logam Ni Murni.....	21
Gambar 4. 2 Visualisasi Logam Fe Murni.....	22
Gambar 4. 3 Visualisasi Logam Fe50%Ni50%.....	23
Gambar 4. 4 Visualisasi Logam Fe25%Ni75%.....	24
Gambar 4. 5 Visualisasi Logam Fe75%Ni25%.....	25

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Analisis Komposisi Pada Excel.....	34
lampiran 2 Input Program MOLDY.....	35



DAFTAR NOTASI

UR_{ij} = potensial Lennard-Jones (eV)

σ = parameter potensial Lennard-Jones berupa jarak ikatan atom (Å)

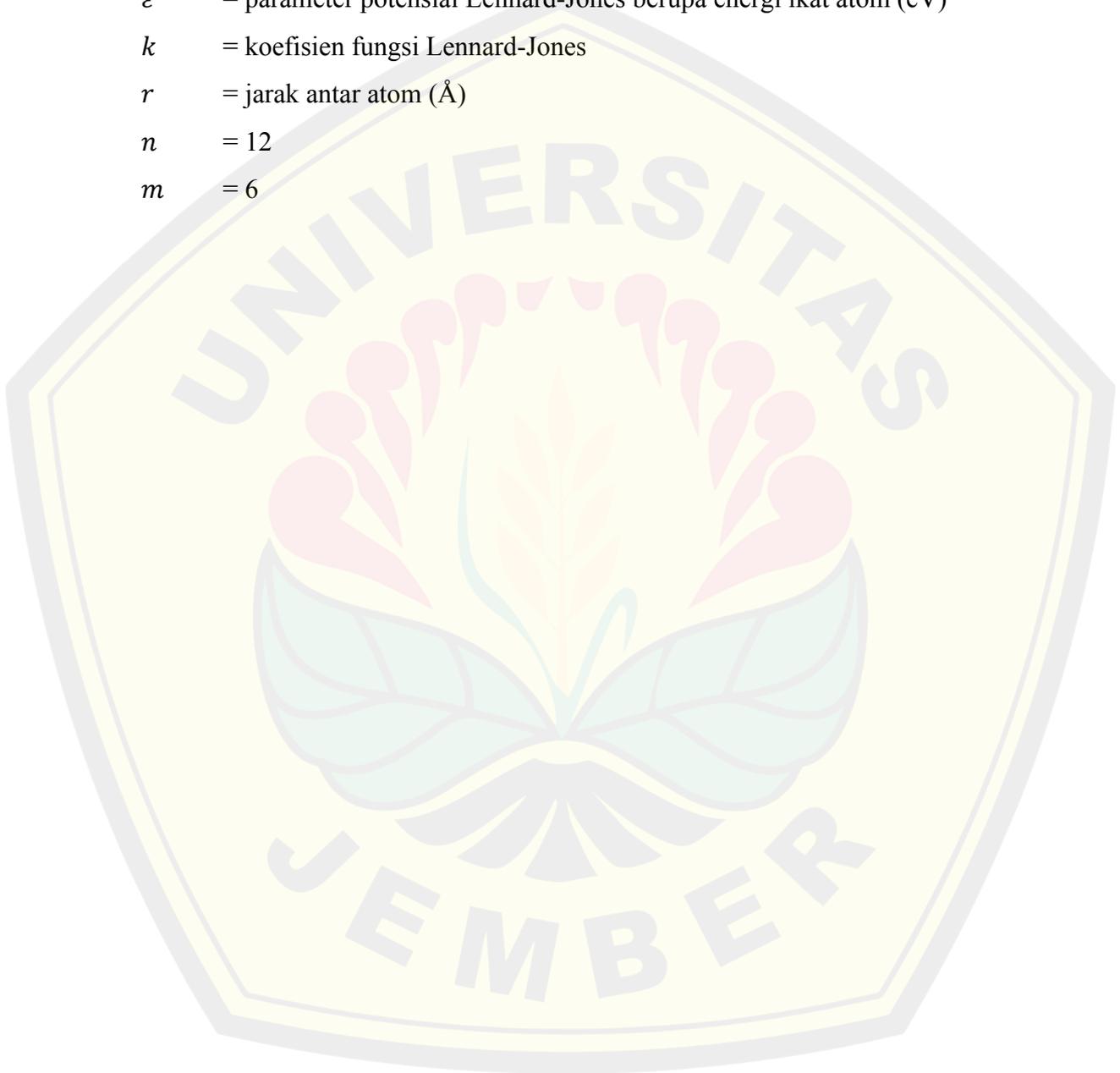
ε = parameter potensial Lennard-Jones berupa energi ikat atom (eV)

k = koefisien fungsi Lennard-Jones

r = jarak antar atom (Å)

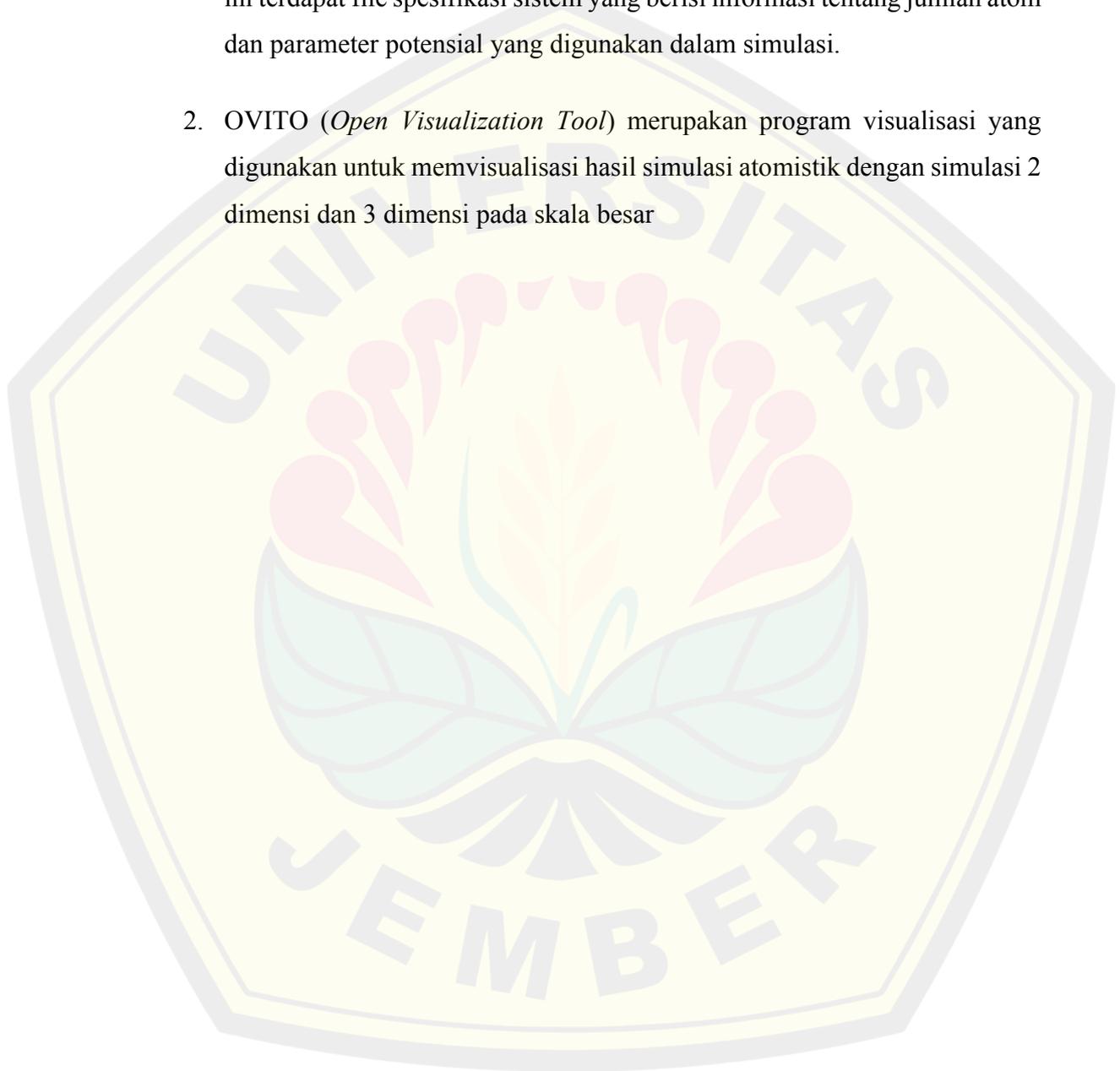
n = 12

m = 6



DAFTAR ISTILAH DAN SINGKATAN

1. MOLDY merupakan program komputer yang dapat menangani kumpulan molekul, atom, atau ion apa pun serta campuran keduanya. Pada program ini terdapat file spesifikasi sistem yang berisi informasi tentang jumlah atom dan parameter potensial yang digunakan dalam simulasi.
2. OVITO (*Open Visualization Tool*) merupakan program visualisasi yang digunakan untuk memvisualisasi hasil simulasi atomistik dengan simulasi 2 dimensi dan 3 dimensi pada skala besar



BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Seiring perkembangan teknologi saat ini, penelitian berbasis sains dapat dilakukan lebih baik dengan menggunakan simulasi pada sebuah perangkat komputer. Simulasi pada komputer merupakan sebuah alat untuk mempelajari karakteristik sebuah sistem, khususnya untuk kajian bahan kita dapat menggunakan metode simulasi dinamika molekul yang menerapkan sebuah model mikroskopis pada material (Frenkel & Smith, 2002). Model mikroskopis terdiri atas interaksi *intermolecular* dan struktur molekul bahan. Pada tahap awal, simulasi komputer biasanya hasilnya diperbandingkan dengan data eksperimen yang ada untuk verifikasi ketepatan model dengan hasil yang akurat. Arkundato et al (2022) telah menggunakan metode simulasi dinamika molekul ini pada sistem besi dalam timbal cair dengan hasil yang akurat disebabkan dapat memprediksi nilai-nilai besaran-besaran fisis yang ingin diketahui (koefisien difusi) berdasarkan model material yang dirancang dan berdasarkan input data simulasi yang diberikan. Oleh karena itu dalam penelitian ini juga menggunakan metode simulasi dinamika molekul untuk meneliti performa baja dalam logam cair PbLi. Penerapan simulasi komputer pada riset-riset secara umum yaitu dapat membantu memahami tentang percobaan pada tingkat mikroskopis, mempelajari sistem yang sulit diteliti secara eksperimen sehingga kita dapat memprediksi sifa-sifat pada material (Frenkel & Smith, 2002).

Pembangkit listrik tenaga nuklir (reaktor nuklir) merupakan salah satu perkembangan teknologi pada masa kini. Reaktor nuklir cepat kemungkinan lebih aman saat dioperasikan karena terdapat sistem informasi non otomatis pada keadaan darurat seperti *shutdown* otomatis, yang mana sistem pada reaktor akan dimatikan secara otomatis saat reaktor terdeteksi kondisi abnormal. Namun, reaktor juga memiliki kekurangan seperti terdapat korosi pada bahan yang digunakan sebagai pembungkus (*cladding*) yang disebabkan difusi partikel pada suhu yang sangat tinggi (Agustini, 2015). *Cladding* merupakan material pelapis bahan bakar uranium pada nuklir. Pada umumnya, material *cladding* terbuat dari

baja dengan campuran dari besi dan karbon. Material *cladding* dalam pemilihannya berdasarkan sifat-sifat kekuatan mekanik, keteknikan konvensional tertentu seperti keuletan, kestabilan termal, penghantar panas, dan ketahanan pada korosi (Soetomo, 1998).

Korosi dapat didefinisikan sebagai proses elektrokimia yang menyebabkan kerusakan pada logam melalui reaksi dengan lingkungan sekitar. Kerusakan logam diakibatkan adanya reaksi kimia secara menyeluruh dengan dibuktikan adanya transfer elektron (Arkundato *et al.*, 2013). Pada reaktor nuklir tipe tersebut masih terjadi fenomena korosi material baja. Penggunaan material baja pada aplikasi reaktor nuklir berpendingin timbal cair dewasa ini adalah topik yang populer diteliti. Reaktor tipe ini adalah termasuk reaktor yang dirancang berdasarkan proses pembelahan inti atom (fisi). Desain reaktor fisi ini salah satu diantaranya adalah reaktor cepat berpendingin logam cair Pb seperti telah disebutkan di atas. Oleh karena mengingat pentingnya studi bahan dalam Pb maka penelitian simulasi ini kita fokuskan pada upaya melihat performa bahan baja FeNi pada pendingin Pb.

Penelitian tentang paduan Baja Fe-Ni menggunakan simulasi dinamika molekul sebelumnya telah dilakukan. Pemodelan perilaku korosi pada paduan baja (Fe-Cr-Ni) merupakan eksperimen yang diteliti secara simulasi oleh (Dwiyanti, 2012) yang meneliti perilaku korosi terhadap paduan baja (Fe-Ni-Cr) dengan pasir silika (SiO_2) menggunakan simulasi dinamika molekular. Hasil penelitian menunjukkan bahwa korosi disebabkan karena tidak terjadi perpindahan elektron pada metode dinamika molekuler. Hal tersebut menyebabkan pada pasir silika (SiO_2) mendestruksi baja paduan sehingga korosi terjadi tanpa proses oksidasi, namun terjadi akibat adanya penetrasi, difusi, dan substitusi pada baja paduan oleh pasir silika. Pada penelitian tugas akhir ini maka korosi juga diasumsikan terjadi melalui proses difusi murni dan tidak ada reaksi kimia yang terjadi.

Metode simulasi dinamika molekul akan digunakan pada penelitian ini. Metode ini dimanfaatkan untuk mencari nilai besaran-besaran fisika berlandaskan model material yang telah disusun dan berlandaskan kontrol simulasi yang telah diinput, seperti temperatur, lama simulasi dan lain-lain. Metode ini dapat digunakan untuk menyimulasikan model-model material kemudian menghitung

nilai koefisien difusi seperti pada sistem besi (Fe) yang terdapat pada timbal (Pb) cair. Kajian simulasi difusi besi dalam logam cair Pb penting dimanfaatkan untuk melihat dampak korosif material pendinginan Pb sebuah reaktor nuklir. Logam besi umumnya merupakan unsur utama yang sering digunakan dalam penyusunan baja, sedangkan untuk timbal cair merupakan bahan yang potensial digunakan sebagai pendingin reaktor (sebagai pengganti sodium).

Dalam penelitian ini nanti akan dilakukan perhitungan koefisien difusi untuk mengetahui performa bahan Fe, Ni dan baja FeNi dalam Pb pada berbagai temperatur 1023 K. Setiap bahan mempunyai tingkat kelarutan tertentu jika berada dalam bahan lain, dimana tingkat kelarutan ini dapat digambarkan dengan koefisien difusi. Pada proses korosi logam dalam pendingin Pb cair maka diasumsikan korosi terjadi karena atom-atom logam padat Fe, Ni dan FeNi terdifusi masuk ke dalam logam Pb cair. Diasumsikan semakin tinggi korosi terjadi hal ini disebabkan oleh semakin banyaknya atom-atom logam padat yang terdifusi ke dalam logam cair. Diasumsikan juga bahwa nilai koefisien difusi ini juga dipengaruhi oleh komposisi atom-atom penyusun bahan padat ini. Besaran koefisien difusi tersebut bergantung pada komposisi atom pada material serta sifat zat lainnya yang menyebar disekitarnya. Nilai koefisien difusi dapat ditentukan menggunakan metode eksperimen dan juga dapat menggunakan simulasi pada komputer. Salah satu metode komputasi dalam simulasi yang digunakan untuk menentukan nilai koefisien adalah simulasi dinamika molekul (Dipojono, 2001). Metode dinamika molekul pada simulasi tersebut dalam penggunaannya memerlukan fungsi potensial untuk menggambarkan interaksi atom yang pada penelitian ini dengan menggunakan potensial Lennar-Jones.

Melakukan simulasi dinamika molekul membutuhkan program komputer yang mampu menangani sistem multi-partikel, termasuk MOLDY. MOLDY merupakan program komputer yang dapat menangani kumpulan molekul, atom, atau ion apa pun serta campuran keduanya. Pada program ini terdapat file spesifikasi sistem yang berisi informasi tentang jumlah atom dan parameter potensial yang digunakan dalam simulasi. Fungsi potensial yang dapat digunakan

di MOLLY misalnya Lennard-Jones, Buckingham dan tipe potensial lainnya dapat ditambahkan (Refson, 2001)

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah pada penelitian ini yaitu sebagai berikut :

1. Bagaimana komposisi baja FeNi yang dapat menghasilkan struktur baja yang lebih kuat dalam Pb cair dilihat dari nilai CNA FCC bahan?
2. Bagaimana karakteristik logam Fe, Ni dan baja FeNi di dalam logam Pb cair?

1.3 Batasan Penelitian

1. Karakteristik yang diamati adalah koefisien difusi dan struktur kristal logam padat Fe, Ni dan FeNi akibat pengaruh logam cair Pb.
2. Korosi diamati pada suhu 1023K dimana ini adalah suhu dalam reaktor nuklir
3. Potensial interaksi antar atom yang digunakan adalah potensial Lennard-Jones

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan pada penelitian ini yaitu Ingin mengetahui performa logam Fe, Ni dan baja FeNi dalam cairan Pb.

1.5 Manfaat Penelitian

Simulasi pada penelitian diharapkan dapat melengkapi informasi tentang karakteristik material pada pemanfaatan reaktor nuklir sebagai sumber energi yang berkelanjutan. Hasil dari penelitian ini juga diharapkan dapat digunakan sebagai acuan pada penelitian selanjutnya dengan riset-riset berbasis komputasi..

BAB 2. TINJAUAN TEORI

2.1 Koefisien Difusi

Difusi merupakan fluks atau aliran yang terdapat pada atom-atom, elektron atau molekul dan beberapa ion. Difusi memiliki proses yang berhubungan dengan struktur material dan kristal. Difusi juga disebut sebagai fenomena yang terjadi akibat adanya kekosongan pada sebuah material yang disebabkan terjadinya atom-atom yang bergerak melompat dari sisi ke sisi lain (Askeland *et al.*, 2011). Nilai koefisien difusi sering dimanfaatkan untuk memantau nilai penguatan logam. Proses difusi pada atom pada bahan akan melibatkan pergerakan atom dari sisi konsentrasi yang tinggi ke konsentrasi yang rendah dalam suatu bahan. Pada rekayasa bahan permukaan atom donor yang diaktifkan sehingga dapat menembus permukaan material dalam pembentukan permukaan baru melalui membentuk molekul baru (Setiawan, 2015).

Difusi dalam sistem mekanismenya dibagi dalam dua jenis yaitu difusi interstitial dan difusi *vacancy* (kekosongan). Difusi interstitial disebut sebagai difusi yang terjadi dalam atom yang bergerak dari lubang satu ke lubang lain yang keluar dari struktur kristal dari unsur yang berbeda. Difusi *vacancy* merupakan difusi yang terjadi apabila atom bergerak dari kisi yang bersifat normal ke sisi yang terdekat yang terdapat kekosongan (Callister dan Rethwisch, 2009). Difusi tersebut tidak jarang terjadi pada logam campuran dari pada difusi *vacancy*, disebabkan interstitial yang relatif lebih kecil dan terjadi proses difusi lebih cepat.

2.2 Material

2.2.1 Besi (Fe)

Besi(Fe) disebut sebagai logam berat yang sangat berpengaruh dalam proses menghasilkan oksidasi enzim cytochrome dan juga pigmen pernapasan (haemoglobin). Konsentrasi pada logam akan bersifat di atas normal apabila dapat berubah menjadi racun (Hasbi, 2007). Besi termasuk golongan transisi yang

memiliki sifat menunjukkan keadaan saat oksidasi (Syam, 2004). Logam pada besi (Fe) faktanya bersifat mineral saat membentuk hemoglobin, dimana dapat dijumpai pada buah, sayuran dan juga pada suplemen makanan (Pratama *et all*, 2012).

Besi merupakan salah satu jenis logam yang terdapat nomor atom 26, massa atom relatif (Ar) 55.845 u. Titik leleh besi pada suhu 1538°C, 2800°F, 181 K (Hartina *et al*, 2020). Unsur besi dapat diperoleh melalui penguraian kimia dengan campuran unsur lain yang dipisahkan. Besi dimanfaatkan dalam pembuatan besi baja melalui proses tidak hanya campuran beberapa logam maupun non logam, namun juga dapat dicampur dengan karbon (Sunardi, 2006).

Besi Murni yang berada pada suhu dibawah 219 °C memiliki struktur kristal *Body Centered Cubic* (BCC). Pada besi BCC terdapat karbon yang dapat dilarutkan dalam jumlah yang sedikit yaitu 0,02 % pada suhu maksimum 723 °C. Besi disebut sebagai logam yang sering digunakan pada kehidupan sehari-hari. Hal tersebut disebabkan beberapa faktor seperti sumber pemberdayaan besi yang melimpah pada permukaan bumi, sifat besi yang mudah dimodifikasi, serta pengelolaan besi yang mudah dan tidak terlalu memberatkan penggunaannya. Besi memiliki macam-macam karakteristik yang diantaranya dapat menghantarkan listrik, mengalami korosi, mengalami perubahan menjadi magnet, dan lain sebagainya. Pada industri besi sering dipadukan sebagai baja disebabkan pada besi murni yang memiliki sifat mudah dibentuk. Baja merupakan material yang terbentuk dari beberapa macam logam yang dibuat dari besi tuang kemudian ditambahkan unsur-unsur lainnya (Geoscience Australia, 2020).

2.2.2 Nikel (Ni)

Nikel merupakan salah satu unsur paduan baja yang dapat menghambat korosi yang memiliki sifat konsentrasi relatif rendah untuk baja yang memiliki sifat tahan karat *ferrit* serta penambahan nikel di atas 20 % pada baja *superaunstenit* (Wessman, 2013). Nikel merupakan unsur yang bersifat fisis mekanik dengan kondisi baik seperti dapat bertahan pada oksidasi, ketahanan korosi pada temperature tinggi, dan dapat membentuk larutan padat yang bersifat kuat. Perpaduan nikel pada baja saat menurunkan temperature transformasi yang

menghasilkan struktur *aunteni* sehingga dapat meningkatkan ketahanan pada temperature. Nikel mampu beroperasi pada temperature tinggi menyebabkan nikel menjadi salah satu komponen utama dalam pembuatan perkengkapan nuklir untuk pendingin nuklir (Lister dan Cook, 2004).

2.2.3 Timbal (Pb)

Timbal (Pb) merupakan salah satu jenis logam yang mempunyai nomor atom 82, masa atom (Ar) sebesar 207.2 u yang bersifat relati. Titik leleh timbal (Pb) pada suhu 327.46°C, 621.43°F, 600.6 K dan terdapat struktur kristal (FCC) (Hartina *et al*, 2020). Timbal Pb disebut sebagai logam yang memiliki sifat toksik yang berbahaya dan berdampak besar pada Kesehatan. Dampak logam pada timbal (Pb) pada Kesehatan antara lain seperti sel-sel darah yang dapat tersumbat, perkembangan otak pada anak-anak (Ika *et al*, 2012). Timbal memiliki karakteristik logam yang berbahaya disebabkan adanya sifat karsinogenik, sehingga memiliki dampak seperti mutase, terurai dalam jangka waktu lebuh lama, dan pada toksisitasnya tidak mengalami perubahan (Brass dan Strauss, 1981).

Timbal terbentuk oleh beberapa sumber yang berasal dari antropogenik di atmosfer, perairan dan dari dalam bumi. Pada atmosfer timbal terlepas kemudian diendapkan di darat, dan mengalir ke perairan (United Nations Enviroment Prgram, 2010). Timbal memiliki sifat seperti material pendingin nuklir pada umumnya seperti memiliki titik didih yang lebih tinggi, tekanan uap yang lebih rendah, serta memiliki transfer panas yang baik (Hatta *et al*. dalam Maulana, 2007). Timbal memiliki wujud lebih lembut, yaitu terdapat logam terberat di antara seluruh logam karbon, permukaan mengkilat dan berwarna biru keabuan. Timbal memiliki sifat yang tidak bisa menghantarkan getaran, suara, serta listrik dengan baik (Winter, 1993).

2.3 Metode Dinamika Molekul

Metode dinamika molekul merupakan metode yang populer pada metode bidang komputasi. Metode tersebut digunakan sebagai gerak atom pada sistem molekul maupun objek dengan ukuran besar seperti planet. Metode dinamika molekul berkembang secara pesat dan sering diterapkan pada berbagai kasus penelitian terutama pada bidang komputasi material (Widiasih *et al.*, 2013). Dinamika molekul digunakan untuk menilai Gerakan partikel yang diakibatkan adanya interaksi antar atom. beberapa model yang menunjukkan interaksi seperti : mekanika kuantum, mekanika molekuler, dan lainnya. Metode dinamika molekuler sering digunakan sebagai analisis model molekul dan memprediksi sifat secara detail pada gerakan atom yang diakibatkan oleh interaksinya (Jana, 2014). Metode dinamika molekul berhasil diterapkan pada berbagai riset penelitian komputasi material baik pada bidang fisika, kimia, maupun biologi dengan tujuan memprediksi sifat-sifat pada bidang tersebut (Ackland *et al.*, 2011).

Simulasi dinamika molekul menggunakan prinsip mekanika klasik yaitu persamaan Newton seperti persamaan yang tertulis sebagai berikut :

$$F_i = m_i \frac{\partial^2 r_1}{\partial t^2} \quad (2.1)$$

Mekanika klasik keadaan gerak menyatakan bahwa bahwa gaya merupakan negatif dari gradien fungsi potensial. Partikel dengan jumlah N pada sebuah sistem dan interaksi dilakukan akan menghasilkan potensial antar atom sebesar V yang merupakan potensial interaksi sistem :

$$F_i = -\nabla_i V(r_i, \dots, r_N) \quad (2.2)$$

Sehingga gaya yang bekerja pada sebuah sistem dengan atom berjumlah N dapat diprediksi nilainya dengan negatif dari gradien potensial dihitung yang diperoleh dari hasil interaksi antar atom (Fransson dan Hakansson, 2014).

Dinamika molekul diaplikasikan pada sistem material seperti kumpulan atom dan molekul. Dinamika molekul digunakan mengamati gerak evolusi semua partikel yang membentuk trayektori. Selanjutnya dapat diterapkan bagaimana cara membuktikan dan menentukan nilai potensial antar atom yang sesuai objek penelitian yang dilakukan. konsep yang digunakan seperti konsep mekanika

statistik, dari trayektori-trayektori pada seluruh partikel yang dapat menghitung besaran-besaran termodinamik dan mekanik yang ingin dipelajari (Arkudanto *et al.*, 2016). Parameter dari dinamika molekuler yang harus diketahui yaitu interaksi potensial antar atom dalam material, yang pada dasarnya fungsi potensial diterapkan untuk menyelesaikan persamaan gerak Newton dan memperoleh penyelesaian untuk lintasan atomnya (Arkundato, 2013).

2.3.1. Potensial Lennard-Jones

Potensial Lennard-Jones menggambarkan interaksi antar atom dan molekul yang mana pada jarak jauh terjadi gaya tarik menarik sedangkan pada jarak dekat terjadi tolak menolak. Parameter yang diperoleh potensial Lennard-Jones yaitu (σ) dan (ε) yang didapatkan berdasarkan fitting eksperimen (Rodgers, 2012). Menurut (Zhen dan Davies, 1983) secara umum potensial Lennard-Jones ditunjukkan pada persamaan berikut :

$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (2.3)$$

dimana $n > m$ (n dan m merupakan bilangan bulat positif)

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (2.4)$$

Keterangan :

$U_{R_{ij}}$ = potensial Lennard-Jones (eV)

σ = parameter potensial Lennard-Jones berupa jarak ikatan atom (Å)

ε = parameter potensial Lennard-Jones berupa energi ikat atom (eV)

k = koefisien fungsi Lennard-Jones

r = jarak antar atom (Å)

n = 12

m = 6

Sehingga diperoleh persamaan Lennard-Jones yang ditulis sebagai berikut :

$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.5)$$

Parameter Lennard-Jones pada atom yang berbeda dituliskan dalam persamaan Lorentz-Berthelot sebagai berikut :

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \quad (2.6)$$

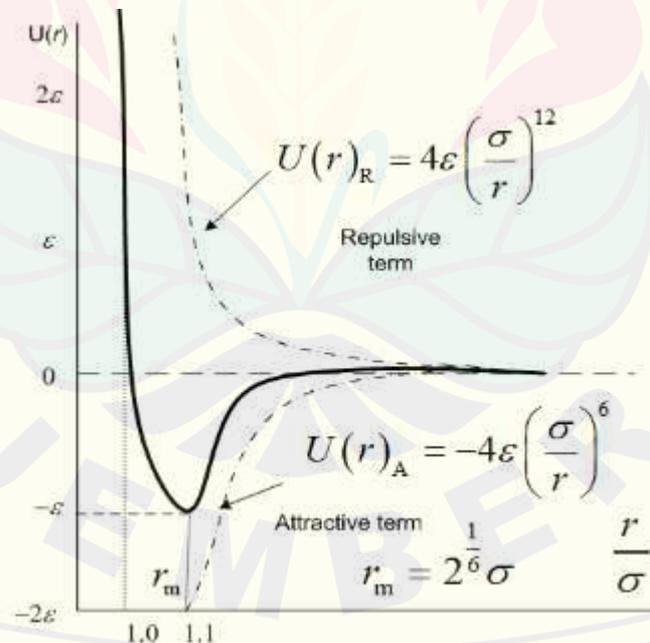
kemudian untuk parameter energi ditulis persamaan sebagai berikut :

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \quad (2.7)$$

Tabel 2.1 Parameter Potensial untuk Interaksi Lennard Jones-Jones

Interaksi Pasangan	σ (Å)	ε (eV)
Fe-Fe	0,400	2,319
Pb-Pb	0,191	3,189

(Sumber : Arkundato *et al.*, 2013)



Gambar 2. 1 Potensial Lennard-Jones

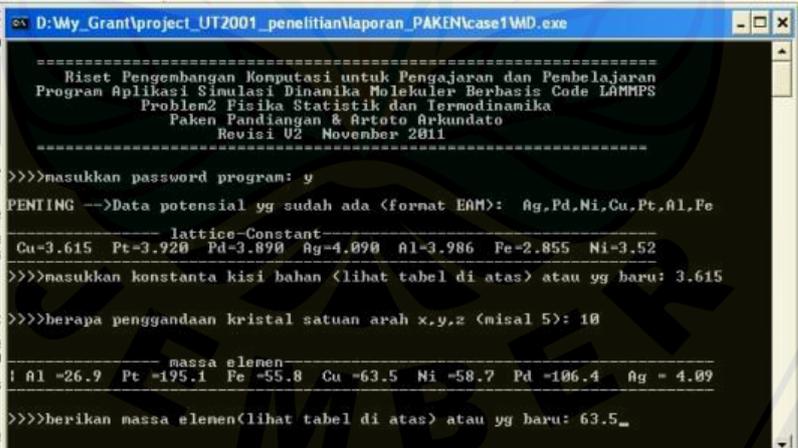
(Sumber : Maghfiroh, 2020)

Pada gambar 2.5 merupakan fungsi potensial interaksi Lennard-Jones yang ditunjukkan dengan kurva. Gambar tersebut menjelaskan bahwa pada potensial Lennard-Jones dengan jarak yang sangat dekat akan terjadi gaya tolak menolak seperti penjelasan dari prinsip Pauli, sedangkan pada jarak yang lebih jauh akan terjadi interaksi tarik menarik antar atom seperti pengaruh gaya Van der Waals yang dipengaruhi oleh interaksi dipol-dipol.

2.4 Program Dinamika Molekul

2.4.1. MOLLY

Melakukan simulasi dinamika molekul membutuhkan program komputer yang mampu menangani sistem multi-partikel, termasuk MOLLY. MOLLY merupakan program komputer yang dapat menangani kumpulan molekul, atom, atau ion apa pun serta campuran keduanya. Pada program ini terdapat file spesifikasi sistem yang berisi informasi tentang jumlah atom dan parameter potensial yang digunakan dalam simulasi. Fungsi potensial yang dapat digunakan di MOLLY misalnya Lennard-Jones, Buckingham dan tipe potensial lainnya dapat ditambahkan (Refson, 2001)



```
D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case1\MD.exe

=====
Riset Pengembangan Komputasi untuk Pengajaran dan Pembelajaran
Program Aplikasi Simulasi Dinamika Molekuler Berbasis Code LAMMPS
Problem2 Fisika Statistik dan Termodinamika
Paken Pandliangan & Artoto Arkundato
Revisi U2 November 2011
=====

>>>masukkan password program: y
PENTING -->Data potensial yg sudah ada <format EAM>: Ag,Pd,Ni,Cu,Pt,Al,Fe

----- lattice-Constant -----
Cu=3.615 Pt=3.920 Pd=3.890 Ag=4.090 Al=3.986 Fe=2.855 Ni=3.52
>>>masukkan konstanta kisi bahan <lihat tabel di atas> atau yg baru: 3.615

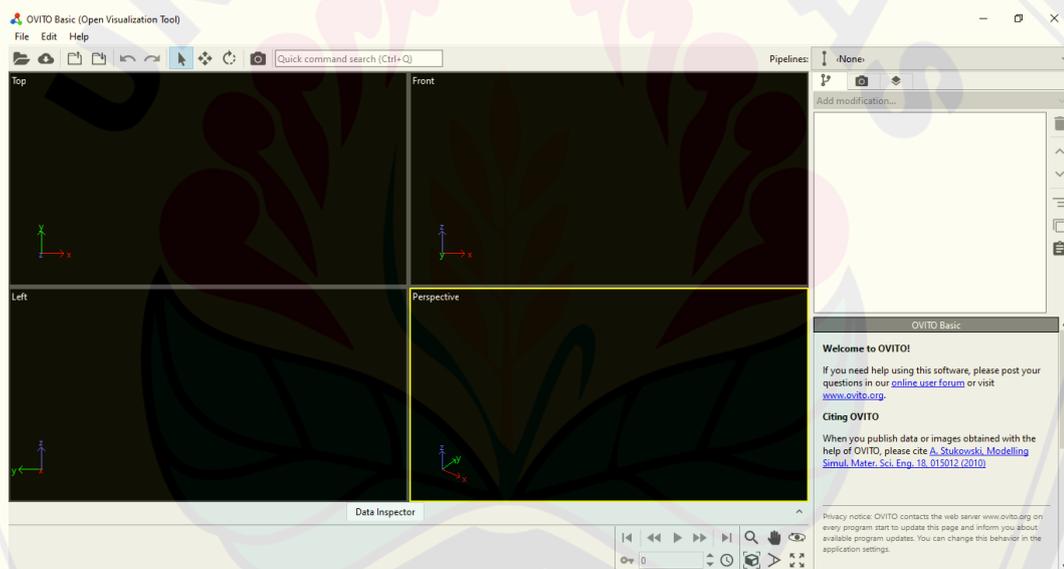
>>>berapa penggandaan kristal satuan arah x,y,z <misal 5>: 10

----- massa elemen -----
Al 26.9 Pt 195.1 Fe 55.8 Cu 63.5 Ni 58.7 Pd 106.4 Ag 107.9
>>>berikan massa elemen<lihat tabel di atas> atau yg baru: 63.5_
```

Gambar 2. 2 Tampilan MOLLY (Adler, 2003)

2.4.2. OVITO

OVITO (*Open Visualization Tool*) merupakan program visualisasi yang digunakan untuk memvisualisasi hasil simulasi atomistik dengan simulasi 2 dimensi dan 3 dimensi pada skala besar yang dikembangkan di Darmstadt University of Technology, Jerman oleh Alexander Stukowski (Stukowski, 2010). Program OVITO memiliki banyak keunggulan sebagai program visualisasi, salah satunya yaitu dapat menghasilkan visualisasi struktur molekul dan kristal serta menganalisis hasil simulasi komputasi. OVITO memiliki berbagai fitur dan fasilitas analisis, salah satunya yaitu CNA (*Common Neighbor Analysis*) yang digunakan untuk mengetahui presentase struktur kristal. Program OVITO dapat digunakan dengan mengunduh melalui website <http://www.ovito.org/> (Arkundato *et al.*, 2013).



Gambar 2. 3 Tampilan OVITO

(Sumber : <http://www.ovito.org/>)

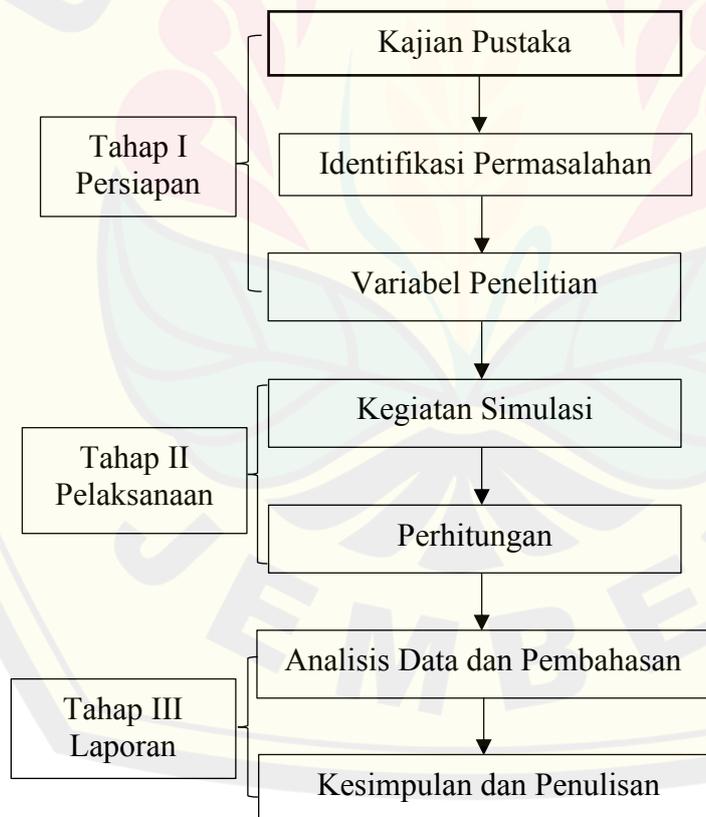
BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Lokasi dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

3.2 Desain Penelitian

Desain Penelitian ini terdapat rancangan yang dilakukan untuk menjelaskan apa saja langkah-langkah yang dilakukan pada pada sebuah penelitian sehingga dapat berjalan secara terstruktur Penelitian dilakukan menggunakan metode Dinamika Molekul dengan program MOLDY. Kegiatan penelitian dilakukan dalam beberapa tahap simulasi. Berikut merupakan skema rancangan pada penelitian ini dalam bentuk diagram alir sebagai berikut :

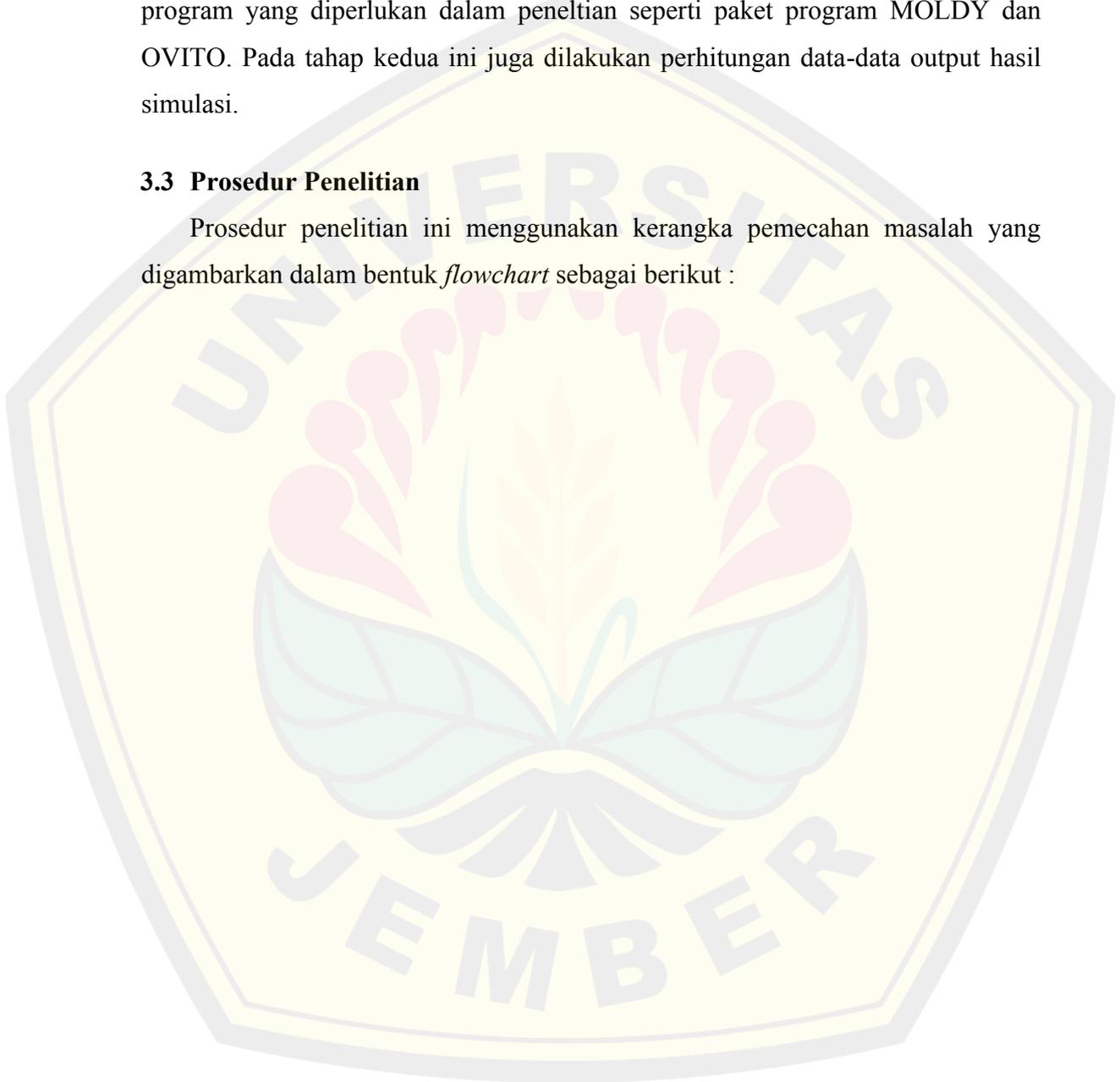


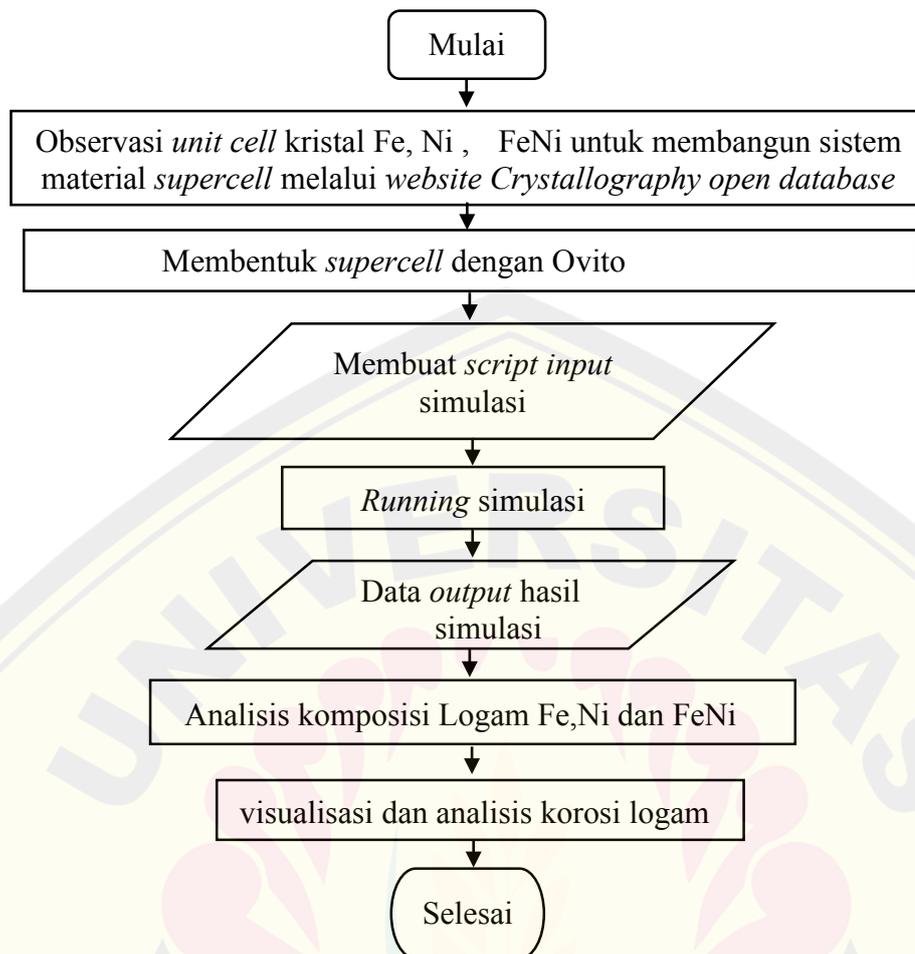
3. 1 Diagram Alir Rancangan Penelitian

Penelitian dilakukan dengan tahap pertama (persiapan) yaitu melakukan studi literatur untuk mendapatkan rumusan masalah penelitian. Tahapan selanjutnya yaitu tahap pelaksanaan, dilakukan instalasi program di komputer, menyiapkan data-data input yang diperlukan seperti: struktur kristal bahan, potensial interaksi, timestep, jumlah step integrasi. Pada bagian ini juga dilakukan instalasi program program yang diperlukan dalam penelitian seperti paket program MOLLY dan OVITO. Pada tahap kedua ini juga dilakukan perhitungan data-data output hasil simulasi.

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian ini menggunakan kerangka pemecahan masalah yang digambarkan dalam bentuk *flowchart* sebagai berikut :





3. 2 Flowchart Simulasi Pada Penelitian

Detail input pada Tahapan II (simulasi) adalah sebagai berikut:

- Script Input* dibuat pada MOLDY, *Input Simulasi* yang disiapkan yaitu *input file* yang memuat data-data seperti jumlah atom, bentuk potensial serta parameternya, jumlah step simulasi yang diukur dan parameter lain yang mengatur proses hingga mendapatkan *output* simulasi.
- Menjalankan simulasi menggunakan model sistem pada *input file*. Sistem yang diamati yaitu logam besi yang diletakkan di tengah logam timbal Pb cair.
- Membuat struktur kristal pada OVITO untuk memvisualisasi hasil simulasi.
- Menganalisis hasil visualisasi pada OVITO dengan mengamati komposisi logam Fe, Ni dan paduannya FeNi.
- Menganalisis korosi struktur kristal pada logam Fe, Ni dan paduannya FeNi

3.5.1 Sistem Simulasi

Simulasi penelitian ini terdiri dari logam besi (Fe) dan logam timbal (Pb) cair. *Box* simulasi ini menempatkan logam besi (Fe) di bagian tengah logam timbal cair (Pb) cair. Besi (Fe) memiliki jumlah atom sebesar 17969 atom dan pada logam cair atom tersusun atas 13497 atom.

3.5.2 Input Simulasi

Simulasi pada penelitian ini dilakukan dengan menyiapkan *input file*. Input file berupa besaran fisis pada koefisien difusi (D_T) yang akan dihitung dan beberapa data keadaan sistem simulasi berupa bentuk jumlah atom, kristal logam, konstanta kristal, bentuk potensial dan parameter, berat atom, jumlah step simulasi temperature T (K). Data yang diinput memiliki karakteristik konstan seperti pada kristal logam, jumlah atom, konstanta kristal, jumlah step simulasi, serta berat atom. data input dapat diubah menyesuaikan variasi yang diberikan seperti bentuk potensial, temperatur, dan parameter. Saat simulasi dijalankan, akan terjadi atom yang bergerak pada sistem simulasi.

3.5.3 Running Simulasi

Running simulasi dilakukan dengan memasukkan *input file* yang disiapkan. Sistem yang akan diamati yaitu logam besi (Fe) yang terletak pada logam timbal cair (Pb). *Running* simulasi dijalankan menggunakan program OVITO dan MOLDY pada sistem operasi LINUX. *Running* simulasi dilakukan dengan memasukkan *file input* kemudian menuliskan perintah simulasi pada terminal LINUX. Setelah menulis perintah pada terminal LINUX maka program akan melakukan *running* sesuai *file input* yang diberikan.

3.5.5 Analisis dan Visualisasi Hasil Simulasi

Analisis hasil simulasi yang akan diperoleh pada penelitian ini yaitu parameter potensial terbaik dan visualisasi hasil simulasi seperti komposisi pada

logam murni Fe, Ni dan paduan FeNi dan jumlah struktur kristal setelah korosi dengan temperature tertentu (T) sebesar 1023K. Kemudian dengan visualisasi tersebut akan menghasilkan kesimpulan dari penelitian yang telah dilakukan.

3.4 Pengumpulan Data Penelitian

Pengumpulan data penelitian dilakukan dengan menggunakan jenis data yaitu data kuantitatif. Data yang diperoleh diukur dan dihitung secara langsung kemudian dinyatakan dalam sebuah angka. Data kuantitatif dibagi menjadi data primer dan data sekunder. data primer merupakan data yang dihitung berdasarkan hasil simulasi yaitu komposisi logam murni Fe, Ni dan paduan FeNi dalam logam Pb cair dengan potensial interaksi yang berbeda sebagai parameter. Sedangkan data sekunder merupakan data yang diperoleh dari sumber yang ada. Data tersebut seperti nilai korosi logam Fe, Ni dan FeNi setelah berinteraksi dengan logam Pb cair yang kemudian hasil eksperimen yang nantinya akan digunakan sebagai pembandingan data simulasi. Data yang diperoleh dari visualisasi yaitu gambar struktur kristal dan struktur kristal.

3.5 Alat/Instrumen Penelitian

Alat/instrumen yang digunakan pada penelitian ini yaitu :

- a. Perangkat Komputer serta spesifikasi :
 - a) Prosesor : Intel (R) core (TM) i5-3470 CPU @3.20GH
 - b) Memori : 4.00 GB
 - c) Sistem Operasi : *Linux Ubuntu*
- b. Program yang digunakan pada simulasi yaitu :
 - a) MOLDY untuk melakukan *running* simulasi dinamika molekul dan memperoleh data .
 - b) OVITO sebagai visualisasi dan analisis ilmiah data atomistik yang diperoleh dari program MOLDY.

3.6 Metode Analisis

Analisis data pada penelitian ini meliputi analisis nilai parameter potensial Lennard-Jones serta nilai komposisi dengan jumlah atom pada logam Fe, Ni dan FeNi. Nilai komposisi jumlah logam dianalisis dalam bentuk tabel sebagai berikut :

Tabel 3. 1 Analisis Komposisi Jumlah Atom Logam

Logam	Fe	Ni	Pb

Kemudian dari hasil simulasi yang dikelompokkan menjadi komposisi jumlah atom logam tersebut dilakukan visualisasi pada OVITO dengan melihat perubahan setelah terjadi korosi pada logam dengan dianalisis pada tabel sebagai berikut :

Tabel 3. 2 Analisis Korosi Pada Logam

Logam Ni			N
Struktur	count	Fraction	

Sehingga dari proses analisis tersebut, kita akan membandingkan nilai struktur logam setelah berinteraksi pada logam Pb cair kemudian mengalami korosi dari yang logam murni maupun logam paduan dan melihat mana yang paling Tangguh saat mengalami korosi.

BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Penelitian ini menggunakan metode simulasi dinamika molekul untuk meneliti karakteristik logam Fe, Ni, dan baja paduan FeNi di dalam logam cair Pb. Simulasi dinamika molekul menggunakan program LAMMPS sedangkan visualisasi dan uji struktur kristal menggunakan program Ovito. Data-data yang telah diperoleh dari simulasi adalah sebagai berikut.

4.1 Komposisi Logam

Fenomena korosi dipelajari dengan menempatkan logam Fe, Ni, FeNi di dalam logam cair Pb pada suhu 1023K dengan komposisi jumlah atom sebagai berikut:

Tabel 4. 1 Komposisi Material

Logam	Fe	Ni	Pb
Ni Murni		17969 (100 %)	13497
Fe Murni	17969 (100 %)		13497
Fe50%Ni 50%	8985 (50 %)	8984 (50%)	13497
Fe25%Ni75%	4492 (25%)	13477 (75%)	13497
Fe75%Ni25%	13477 (75%)	4492 (25%)	13497

4.2 Logam Ni Murni

Simulasi logam Ni murni di dalam Pb cair pada suhu 1023K menggunakan program MOLDY menggunakan data input sebagai berikut :

```
#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html
nickel 17969
1 0 0 0 58.6934 0 Ni
lead 13497
2 0 0 0 207.19 0 Pb
end
lennard-jones
1 1 0.3729 2.2808 #Ni nm
```

```

2 2 0.1909 3.1888 #Pb nm
1 2 0.266808189529482 2.7348#LB
end

```

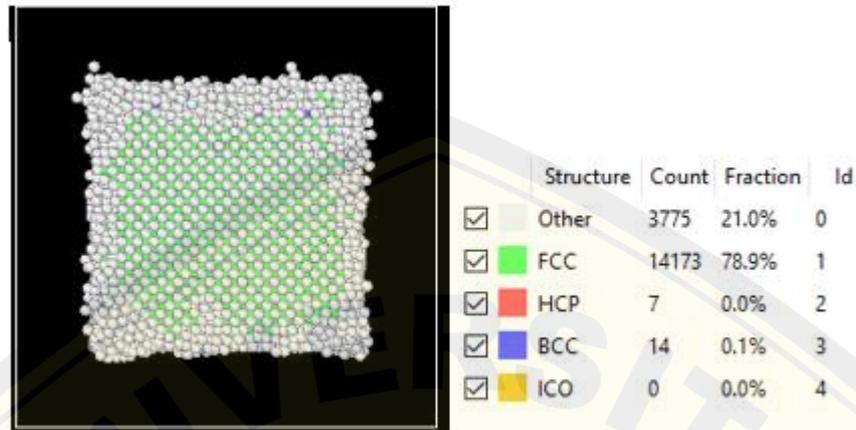
Data input di atas kemudian digunakan untuk simulasi dengan program MOLDY dengan script kontrol simulasi sebagai berikut :

```

sys-spec-file=FeNifrac.in
title=--Moldy on liquid metal corrosion --
time-unit=1.0181e-14
#density=7.85 #unit gFeNifrac.inr/mL
lattice-start=1
const-temp=1 # Nose_Hoover Thermostat
temperature=1023
const-pressure = 4 # Andersen constant pressure
pressure = 0
#text-mode-save=1
save-file=file.save
#restart-file=file.restart
backup-file=file.back
dump-file=file.dump%d
begin-dump=20000
dump-level=3
dump-interval=1000
scale-options=2
#scale-interval=5
#scale-end=2500
#steps=84000
nsteps = 30000
print-interval=1000
roll-interval=1000
begin-average=20000
average-interval=1000
step=0.0001 #
subcell=2
#strict-cutoff=1
cutoff=8.5125 #2.5 * sigma
begin-rdf=20000
rdf-interval=50
#rdf-out=15000
end

```

Hasil simulasi Nikel di dalam pendingin logam Pb cair pada 1023K yang dianalisis dengan program OVITO adalah sebagai berikut :



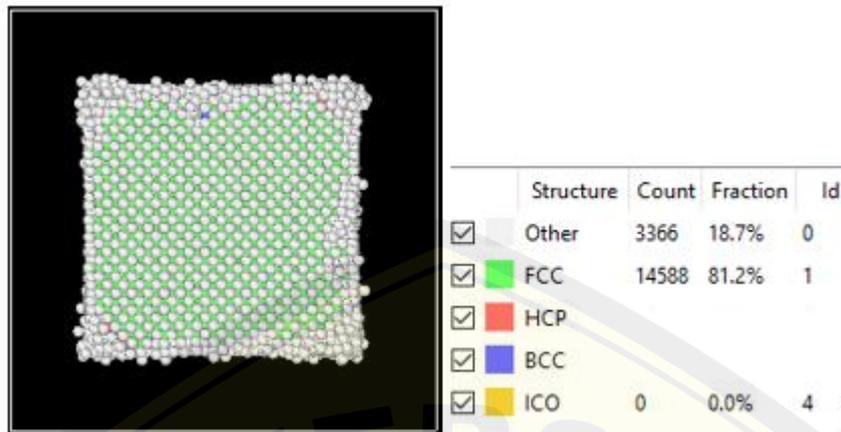
Gambar 4. 1 Visualisasi Logam Ni Murni

4.3 Logam Fe Murni dalam Pb Cair

Simulasi logam Fe murni di dalam Pb cair pada suhu 1023K menggunakan program MOLDDY menggunakan data input sebagai berikut :

```
#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html
iron 17969
1 0 0 0 55.847 0 Fe
lead 13497
2 0 0 0 207.19 0 Pb
end
lennard-jones
1 1 0.5193 2.3193 #Fe
2 2 0.1909 3.1888 #Pb
#3 3 0.3729 2.2808 #Ni
1 2 0.31485610999312 2.75405
#1 3 0.440053371763017 2.30005
#2 3 0.266808189529482 2.7348
end
89.514 89.514 89.514 90 90 90 1 1 1
```

Hasil simulasi Fe di dalam pendingin logam Pb cair pada 1023K yang dianalisis dengan program OVITO adalah sebagai berikut :



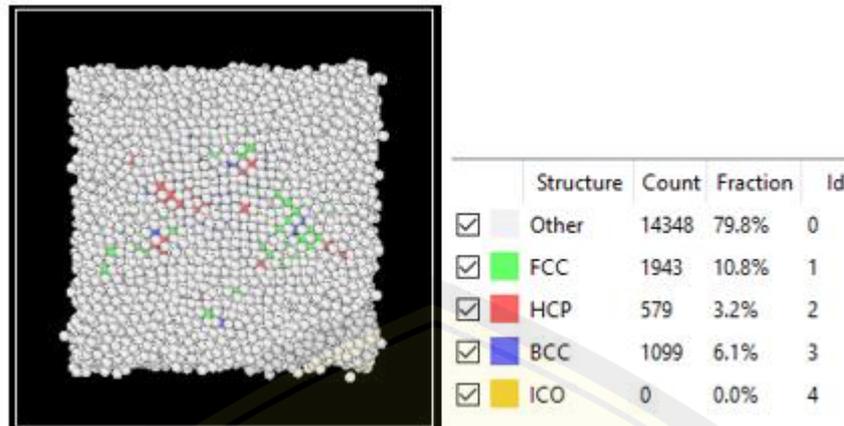
Gambar 4. 2 Visualisasi Logam Fe Murni

4.4 Logam Fe50%Ni50% di dalam Pb Cair

Simulasi logam Fe50%Ni50% di dalam Pb cair pada suhu 1023K menggunakan program MOLDY menggunakan data input sebagai berikut :

```
#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html
iron 8985
1 0 0 0 55.847 0 Fe
lead 13497
2 0 0 0 207.19 0 Pb
nickel 8984
3 0 0 0 58.6934 0 Ni
end
lennard-jones
1 1 0.5193 2.3193 #Fe
2 2 0.1909 3.1888 #Pb
3 3 0.3729 2.2808 #Ni
1 2 0.31485610999312 2.75405
1 3 0.440053371763017 2.30005
2 3 0.266808189529482 2.7348
end
```

Hasil simulasi Fe50%Ni50% di dalam pendingin logam Pb cair pada 1023K yang dianalisis dengan program OVITO adalah sebagai berikut :



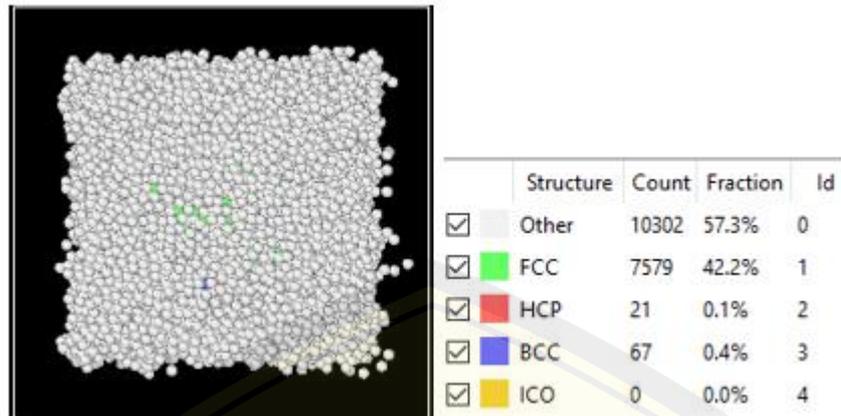
Gambar 4. 3 Visualisasi Logam Fe50%Ni50%

4.5 Logam Fe25%Ni75% di dalam Pb Cair

Simulasi logam Fe25%Ni75% di dalam Pb cair pada suhu 1023K menggunakan program MOLDY menggunakan data input sebagai berikut :

```
#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html
iron 4492
1 0 0 0 55.847 0 Fe
lead 13497
2 0 0 0 207.19 0 Pb
nickel 13477
3 0 0 0 58.6934 0 Ni
end
lennard-jones
1 1 0.5193 2.3193 #Fe
2 2 0.1909 3.1888 #Pb
3 3 0.3729 2.2808 #Ni
1 2 0.31485610999312 2.75405
1 3 0.440053371763017 2.30005
2 3 0.266808189529482 2.7348
end
89.514 89.514 89.514 90 90 90 1 1 1
```

Hasil simulasi Fe25%Ni75% di dalam pendingin logam Pb cair pada 1023K yang dianalisis dengan program OVITO adalah sebagai berikut :



Gambar 4. 4 Visualisasi Logam Fe25%Ni75%

4.6 Logam Fe75%Ni25% di dalam Pb Cair

Simulasi logam Fe75%Ni25% di dalam Pb cair pada suhu 1023K menggunakan program MOLDY menggunakan data input sebagai berikut :

[#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html](http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html)

iron 13477

1 0 0 0 55.847 0 Fe

lead 13497

2 0 0 0 207.19 0 Pb

nickel 4492

3 0 0 0 58.6934 0 Ni

end

lennard-jones

1 1 0.5193 2.3193 #Fe

2 2 0.1909 3.1888 #Pb

3 3 0.3729 2.2808 #Ni

1 2 0.31485610999312 2.75405

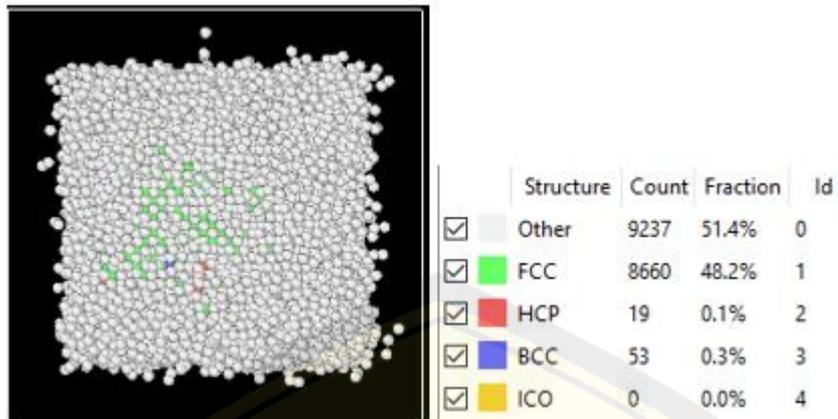
1 3 0.440053371763017 2.30005

2 3 0.266808189529482 2.7348

end

89.514 89.514 89.514 90 90 90 1 1 1

Hasil simulasi Fe75%Ni25% di dalam pendingin logam Pb cair pada 1023K yang dianalisis dengan program OVITO adalah sebagai berikut :



Gambar 4. 5 Visualisasi Logam Fe75%Ni25%

4.7 Analisis Korosi Pada Logam Fe, Ni, dan FeNi dalam Pb cair

Dari gambar 4.1 sampai dengan 4.5 di atas dapat kita ringkas kinerja dari logam Fe, Ni, dan FeNi seperti tabel berikut :

Tabel 4. 2 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni

Logam Ni			N
Struktur	count	Fraction	
other	3909	21,8 %	13497
FCC	14014	78,9 %	
HCP	8	0,0 %	
BCC	38	0,1 %	
ICO	0	0,0 %	

Tabel 4. 3 Analisis Korosi Pada Logam Murni Fe

Logam Fe			N
Struktur	count	Fraction	
other	3366	18,7%	13497
FCC	14588	81,2%	
HCP	10	0,1 %	
BCC	5	0,0 %	
ICO	0	0,0 %	

Tabel 4. 4 Analisis Korosi Pada Logam Murni Fe50%Ni50%

Fe50%50%			N
Struktur	count	Fraction	
other	14348	79,8 %	13497
FCC	1943	10,8 %	
HCP	579	3,2 %	
BCC	1099	6,1 %	
ICO	0	0,0 %	

Tabel 4. 5 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni

Fe25%Ni75%			N
Struktur	count	Fraction	
other	10302	57,3 %	13497
FCC	7579	42,2%	
HCP	21	0,1 %	
BCC	67	0,4 %	
ICO	0	0,0 %	

Tabel 4. 6 Analisis Korosi Pada Logam Murni Ni

Fe75%Ni25%			N
Struktur	count	Fraction	
other	9237	51,4 %	13497
FCC	8660	48,2 %	13477
HCP	19	0,1 %	
BCC	53	0,3 %	
ICO	0	0,0 %	

Dari tabel ringkasan di atas kita mendapatkan beberapa gambaran yang menarik, bahwa komposisi atom-atom suatu bahan khususnya berbasis Fe dan Ni sangat menentukan karakteristik suatu bahan. Pada penelitian ini kita ingin melihat bagaimana kekompakan struktur bahan dengan komposisi tertentu jika bahan itu dimasukkan dalam lingkungan Pb cair pada suhu 1023K. Pada kasus pertama untuk logam Ni ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 78 %.

Kemudian pada kasus kedua untuk logam Fe ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 81,2 %.

Pada kasus ketiga untuk logam Fe50%Ni50% ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 10,8 %.

Pada kasus keempat untuk logam Fe25%Ni75% ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 42,2%.

Pada kasus kelima untuk logam Fe75%Ni25% ternyata yang semula memiliki jumlah struktur FCC 100% setelah berinteraksi dengan logam Pb cair selama waktu tertentu (30000 step integrasi) telah mengalami korosi sehingga jumlah struktur FCC 48,2%.

Dari data di atas dapat kita simpulkan bahwa penggunaan logam murni Fe untuk aplikasi dalam Pb cair lebih tangguh dari pada penggunaan logam murni Ni yang ditunjukkan jumlah FCC Fe 81,2 % > 78,% FCC Ni.

Dari data di atas juga dapat kita simpulkan bahwa penggunaan logam paduan FeNi untuk aplikasi dalam Pb cair memiliki karakteristik yang tangguh melawan korosi berturut-turut dari lemah ke yang lebih kuat sebagai berikut : Fe50%Ni50% < Fe25%Ni75% < Fe75%Ni25%. Hal ini konsisten dengan karakteristik dengan logam murni di atas yaitu jumlah Fe yang lebih besar menunjukkan ketangguhan yang lebih besar terhadap Korosi Pb cair.

Namun demikian, dalam aplikasi nyata penggunaan Ni untuk dipadu dengan Fe mempunyai tujuan membuat baja komposit yang lebih kuat karena secara umum logam murni lebih lembek dibanding logam paduan. Oleh karena itu, simulasi dalam penelitian ini menunjukkan bahwa dalam menghadapi korosi Pb cair Fe harus lebih banyak dari pada Ni, untuk membuat baja paduan FeNi. Ini dapat terlihat dari nilai CNA FCC baja Fe75%Ni25% yang lebih tinggi daripada baja Fe25%Ni75%.

BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN**5.1 Kesimpulan**

Simulasi dalam penelitian ini menunjukkan bahwa dalam menghadapi korosi Pb cair Fe harus lebih banyak dari pada Ni, untuk membuat baja paduan FeNi. Ini dapat terlihat dari nilai CNA FCC baja Fe75%Ni25% yang lebih tinggi daripada baja Fe25%Ni75%.

5.2 Saran

Penelitian dilakukan untuk mencari komposisi material yang tahan pada suhu tinggi dan pengaruh dari logam cair. Simulasi untuk mendapatkan baja yang kuat antara Fe dan Ni dalam hal ini hanya berfokus pada sifat termodinamika saja, sehingga saran untuk penelitian selanjutnya adalah perlu mencari sifat mekanik bahan. Penelitian lebih lanjut juga perlu dilakukan, misalnya dengan paduan baja selain kromium dengan jumlah atom yang lebih banyak, dimana semakin besar jumlah atom yang digunakan maka hasil yang didapatkan semakin akurat.

DAFTAR PUSTAKA

- Adler, J. 2003. Molecular Dynamic Simulation of Copper Using Moldy. *Research Experience for Undergraduates National High Magnetic Field Laboratory*. Florida State University.
- Agustini, N. S. 2015. Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair : Penentuan Daerah Temperatur Operasi Migitasi Korosi dengan Inhibitor Nitrogen. *Skripsi*. Jember : Universitas Jember.
- Arkundato, A., Z. Su'ud, dan M. Abdullah. 2013. Molecular Dynamics Simulation on Iron Corrosion-Reduction in High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic. *Turkish Journal of Physics*. 37:132-144.
- Arkundato, A. 2015. *Simulasi Dinamika Molekul Berbasis Cloud Computing Performa Tinggi Untuk Invetigasi Korosi Material Cladding Reaktor Cepat Dalam Pendingin Logam Cair*. Seminar Internasional SCIETECH 2015.
- Arkundato, A., M. Hasan, dan Z. Su'ud. 2016. *Fisika Komputasi : Metode Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya*. Jember: Universitas Jember.
- Arkundato, A., S. Supriyadi, dan H. Baskoro. 2017. Simulastion of Self Diffusion of Iron (Fe) and Chromium (Cr) in Liquid Lead by Molecular Dynamics. *Proceeding The 1st IBSC: Towards The Extended Use of Basic Sience For Enhancing Health, Environment, Energy and Biotechnology*. ISBN: 978-602-60569-5-5.
- Askeland, D. R., P. Fulay dan W. J. Wright. 2011. *The Science an Engineering of Materials*. 6th ed. United State of America : Cengage Learning, Inc.
- Brass, G.M. dan W. Strauss. 1981. *Air Pollution Control*. New York: John Willey & Sons.
- Camprubi, G. s. 2011. Mechanical Properties at Nano-Level. *Tesis*. Sweden: Lund University.

- Dipojono, H. K. 2001. Simulasi Dinamika Molekul (Sebuah Pengantar). In *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron an Sinar X ke 4* (pp. 1-12). Bandung : Departemen Teknik Fisika ITB
- Dwiyanti, Y. (2012). Pemodelan Perilaku Korosi Baja Paduan (Fe-Cr-Ni) Menggunakan Metoda Dinamika Molekular. *Teknika: Jurnal Sains dan Teknologi*, 8(1), 64-74.
- Frenkel, D. & Smith, B. 2002. *Understanding Molecular Simulation*. Second Edition London : Academic Press.
- Geoscience Australia. 2020. Iron. <http://www.ga.gov.au/education/classroom-resources/minerals-energy/australian-mineral-facts/> . [Diakses pada 08 Juni 2022]
- Hartina, P., Suciwati, S. W., Supriyanto, A., & Junaidi, J. (2020). Simulasi Dinamika Molekul Berbasis Kode LAMMPS untuk Mengkaji Titik Leleh Bahan Besi (Fe), Timbal (Pb) dan Aluminium (Al). *Journal of Energy, Material, and Instrumentation Technology*, 1(2), 64-74.
- Hasbi, R. (2007). Analisis Polutan Logam Tembaga (Cu) dan Timbal (Pb) dalam Sedimen Laut Pelabuhan Pantolan Berdasarkan Kedalamannya. Palu : UNTAD.
- Ika, I., Tahril, T., & Said, I. (2012). Analisis Logam Timbal (Pb) Dan Besi (Fe) Dalam Air Laut Di Wilayah Pesisir Pelabuhan Ferry Taipa Kecamatan Palu Utara (The Analysis of Lead (Pb) and Iron (Fe) Metals in The Sea Water of Coastal Area of Taipa's Ferry Harbor Subdistrict of North Palu). *Jurnal Akademika Kimia*, 1(4).
- Lister, D.H dan Cook, W.G. 2004. *Nuclear Plant Material and Corrosion*. Canada: University of New Brunswick.
- Maghfiroh, C. Y., A. Arkundato, Misto, dan W. Maulina. 2020. Parameters (σ , ϵ) of Lennard-Jones for Fe, Ni, Pb potential and Cr based on melting point values using molecular dynamics method of the LAMMPS program. *Journal of Physic: Conf. Series* 1491.
- Pangabea, Daniel Sahala P, *et al.* 2015. *Perbandingan Penggunaan Material Isotropi dan Orthotropi Pada Metode Elemen Hingga Untuk Analisa Kekuatan Kapal Fiberglass*. Jurnal Teknik Perkapalan Vol. 03, No.02. 265.

- Pratama, G. A., Pribadi R., & Maslukah, L., (2012). Kandungan Logam Berat Pb dan Fe pada Air, Sedimen, dan Kerang Hijau (*Perna viridis*) di Sungai Tapak Keluarahan Tugurejo Kecamatan Tugu Kota Semarang. *Journal of Marine Research*. Vol. 01, No. 02. 133-137.
- Refson, K. 2001. *Moldy User's Manual*. Departemen of Earth Science : Oxford.
- Rodgers, T. 2012. *Soft Mater Simulation*. Manchester:University of Manchaester
- Setiawan, J. 2015. *Pengembangan Program Perhitungan Koefisien Difusi Material dalam Rekayasa Permukaan*. Tangerang: Pusat Teknologi Bahan Bakar Nuklir.
- Soetomo, S. 1998. Bahan-Bahan Untuk Industri Reaktor Nuklir. *In Prosiding Pertemuan Ilmiah Sains Materi III* (pp. 22-31). Serpong: Batan.
- Stukowski, A. 2010. Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO – The Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation In Materials is Science and Engimeering 015012*.
- Sunardi, 2006. 116 Unsur Kimia Deskripsi dan Pemanfaatannya. Bandung : CV Yrama Widya.
- Syam,. L. (2004). Analisis Kadar Besi (Fe) dalam Kedelai dengan Pengompleks Fenantrolin. Palu : UNTAD.
- Wessman, S. 2013. Application of Computational Thermodynamics and Kinetics on Transformation in Stainless Steels. *Tesis*. Sweden : Science Stockholm.
- Widiasih, H., Safitri, dan A. Arkundato. 2013. Penerapan Metode Dinamika Molekul untuk Pembelajaran : Konsep Titik Leleh dan Perubahan Wujud. *JURNAL Teori dan Aplikasi Fisika*. 01(02):171-175.
- Winter, M. 1993. *Iron: The Essentials*. <http://www.webelements.com/iron/>. [diakses pada 23 Juli 2022)
- United Nations Enviroment Program. 2010. *Final Review of Scientific Information on Lead*. USA: UNEP Publishing.

Zhen, S., dan G. davies. 1983. Calculation of the Lennard-Jones n-m Potential Energy Parameters for Metals. *Physica Status Solidi. A, Applied Research*. 78(2): 595-605.



LAMPIRAN-LAMPIRAN

Lampiran 1 Analisis Komposisi Pada Excel

Logam	Fe	Ni	Pb
Ni		17969	13497
Fe		17969	13497
Fe50%Ni50%	8985	8984	13497
Fe25%Ni75%	4492	13477	13497
Fe75%Ni25%	13477	4492	13497

Ni			N
Struktur	count	Fraction	
other	3909	21,8 %	13497
FCC	14014	78,9 %	
HCP	8	78,0 %	
BCC	38	0,0 %	
ICO	0	0,0 %	

Fe25%Ni75%			N
Struktur	count	Fraction	
other	10302	57,3 %	13497
FCC	7579	42,2%	4492
HCP	21	0,1 %	
BCC	67	0,4 %	
ICO	0	0,0 %	

	Fe50%Ni50%		N
Struktur	count	Fraction	
other	14348	79,8 %	13497
FCC	1943	10,8 %	8985
HCP	579	3,2 %	
BCC	1099	6,1 %	
ICO	0	0,0 %	

Fe			N
Struktur	count	Fraction	
other	3366	18,7%	13497
FCC	14588	81,2%	
HCP	10	0,1 %	
BCC	5	0,0 %	
ICO	0	0,0 %	

	Fe75%Ni25%		N
Struktur	count	Fraction	
other	9237	51,4 %	13497
FCC	8660	48,2 %	13477
HCP	19	0,1 %	
BCC	53	0,3 %	
ICO	0	0,0 %	

lampiran 2 Input Program MOLDY

```
#http://www.chemicalelements.com/elements/ni.html
nickel 17969
1 0 0 0 58.6934 0 Ni
lead 13497
2 0 0 0 207.19 0 Pb
end
lennard-jones
1 1 0.3729 2.2808 #Ni nm
2 2 0.1909 3.1888 #Pb nm
1 2 0.266808189529482 2.7348#LB
end
```