

## EXECUTIVE SUMMARY DAN ABSTRAK PENELITIAN FUNDAMENTAL



**Simulasi Dinamika Molekul Berbasis *Cloud Computing* Performa  
Tinggi Untuk Investigasi Korosi Material *Cladding* Reaktor Cepat  
Dalam Pendingin Logam Cair**

**TIM PENELITI:**

**Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si. (NIDN: 0025126901)**  
**Drs. Sudarko. M.Sc., Ph.D (NIDN: 0012036905)**  
**Drs. Mohammad Hasan, M.Sc., Ph.D (NIDN: 0004046404)**

**UNIVERSITAS JEMBER**

**Februari 2015**

# Simulasi Dinamika Molekul Berbasis *Cloud Computing* Performa Tinggi untuk Investigasi Korosi Material *Cladding* Reaktor Cepat Dalam Pendingin Logam Cair

Peneliti : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.<sup>1)</sup>

Mahasiswa Yang Terlibat : -

Sumber Dana : DIPA Universitas Jember 2014

<sup>1)</sup>Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

## ABSTRAK

Sumber energi nuklir adalah sumber energi alternatif yang menjanjikan adanya ketersediaan energi dalam jumlah luar biasa besar dan terbarukan. Namun demikian instalasi pembangkit listrik tenaga nuklir memerlukan konsep dan teknis keselamatan reaktor tingkat tinggi dan lebih dari itu sistem keselamatan yang diterapkan adalah sistem keselamatan yang melekat (*inherent safety*). Reaktor nuklir dewasa ini telah masuk ke fase reaktor generasi IV yang merupakan desain baru. Salah satu reaktor jenis ini adalah reaktor nuklir cepat yang menggunakan bahan pendingin logam cair seperti PbBi/Pb cair untuk sistem tranpor panas. Reaktor ini mampu menghasilkan energi dalam jumlah besar dan dapat dirancang memiliki sistem keselamatan melekat.

Namun demikian, disamping potensi keunggulannya tersebut, rancangan reaktor jenis ini masih mempunyai problem serius akibat penggunaan bahan pendingin tersebut. Logam cair yang digunakan sangat korosif pada baja yang digunakan untuk pembungkus bahan bakar reaktor (uranium) dan baja pipa sistem tranpor panas. Oleh karena itu perlu dilakukan riset yang mendesak untuk mencari metode penanggulangan korosi.

Pada penelitian fundamental ini dilakukan studi simulasi untuk mencari metode penghambatan korosi yang tepat pada sistem reaktor. Penelitian sebelumnya telah diketahui bahwa oksigen sangat baik dalam menghambat korosi baja (besi). Namun dari hasil penelitian ini dapat diketahui bahwa nitrogen ternyata mempunyai potensi penghambatan korosi yang lebih baik. Metode simulasi dinamika molekul mampu memprediksi secara kualitatif dan kuantitatif efek nitrogen tersebut. Diketahui dari hasil simulasi bahwa memberikan injeksi atom nitrogen sebesar 0.75% ke dalam medium pendingin logam cair akan mampu menghambat korosi besi pada tingkat rendah yang signifikan. Diketahui juga efek nitrogen untuk penghambatan jauh lebih baik daripada menggunakan oksigen.

**Kata Kunci:** Korosi logam cair, penghambatan korosi, injeksi nitrogen, metode simulasi dinamika molekul, difusi.

# **Simulasi Dinamika Molekul Berbasis *Cloud Computing* Performa Tinggi untuk Investigasi Korosi Material *Cladding* Reaktor Cepat Dalam Pendingin Logam Cair**

Peneliti : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si<sup>1)</sup>.  
Mahasiswa Yang Terlibat : -  
Sumber Dana : DIPA Universitas Jember 2014  
Kontak Email : a.arkundato@gmail.com  
Diseminasi : Seminar Internasional SCIETECH 2015  
Denpasar Bali, 31 Januari – 01 Februari 2014

<sup>1)</sup>Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

## **PENDAHULUAN**










### **LATAR BELAKANG PENELITIAN**

#### **Energi Alternatif Berbasis Sains dan Teknologi Nuklir dan Status Terkini**

Salah satu sumber energi alternatif yang menjanjikan untuk memenuhi kebutuhan tinggi listrik nasional dan dunia dalam jangka panjang adalah dari energi nuklir yang dihasilkan dari proses reaksi nuklir di dalam reaktor nuklir. Reaktor ini harus mempunyai efisien dan desain yang aman dan menjamin keselamatan operasional. Reaktor dengan konsep ini dewasa ini misalnya mengusung model keselamatan inheren. Salah satu tipe reaktor ini adalah reaktor generasi ke IV seperti reaktor pembiak cepat FBR (Goldberg dan Rosner, 2011). Lain dari itu, meskipun pemanfaatan energi nuklir dewasa ini menjadi isu pencemaran lingkungan oleh negara-negara maju, pada kenyataannya justru negara-negara maju tetap mengembangkan dan menambah reaktor nuklirnya (lihat Tabel 1).

Tabel.1. Pemanfaatan Energi Nuklir Untuk Listrik Per Negara

Sumber: [http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear\\_power\\_by\\_country](http://en.wikipedia.org/wiki/Nuclear_power_by_country) (2013)

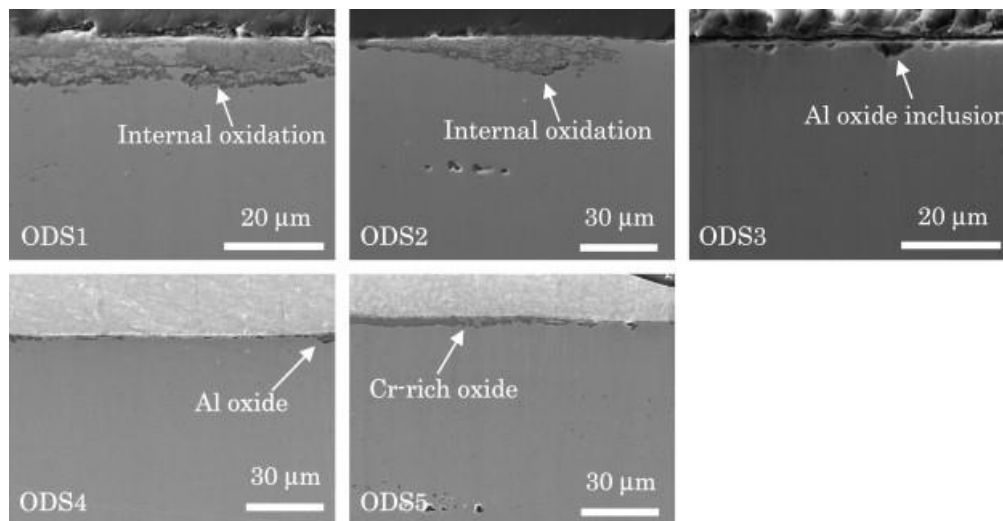
| Rank | Negara Pengguna  | Kapasitas (MW)<br>(2010) | Nuklir Untuk Energi Listrik |
|------|--|--------------------------|-----------------------------|
| 1    |  <a href="#">United States</a>  | 101,409                  | 19.3%                       |
| 2    |  <a href="#">France</a>         | 63,130                   | 77.1%                       |
| 3    |  <a href="#">Ukraine</a>        | 13,107                   | 47.2%                       |
| 4    |  <a href="#">Germany</a>        | 12,003                   | 17.8%                       |
| 5    |  <a href="#">United Kingdom</a> | 9,703                    | 15.7%                       |
| 6    |  <a href="#">Belgium</a>        | 5,927                    | 54.0%                       |
| 7    |  <a href="#">Slovakia</a>       | 1,816                    | 54.0%                       |
| 8    |  <a href="#">Iran</a>           | 915                      | 1.5%                        |
| 9    |  <a href="#">Pakistan</a>       | 725                      | 3.8%                        |

Melihat pola pemenuhan kebutuhan listrik dunia di atas, maka Indonesia perlu memandang jauh 50 – 100 tahun ke depan untuk merancang pemenuhan kebutuhannya menggunakan nuklir. Untuk itu pengembangan PLTN di Indonesia juga telah diamanatkan dalam UU No. 17/2007.

### Latar Belakang Penelitian

Reaktor pembiak cepat FBR adalah salah satu tipe reaktor masa depan yang menggunakan neutron cepat untuk menghasilkan rasio pembiakan neutron yang tinggi, dengan salah satu desainnya menggunakan logam berat cair sebagai pendingin reaktor (*coolant*) dan tidak menggunakan air seperti pada reaktor termal yang umum digunakan selama ini. Material pendingin PbBi atau yang dikenal sebagai *lead bismuth eutectic* (LBE) dewasa ini adalah kandidat material pendingin yang terkenal (Zhang dan Li, 2008). Telah diketahui logam paduan Pb-Bi ini mempunyai sifat tidak bereaksi aktif dengan air dan udara sehingga tidak memicu adanya ledakan karena proses reaksi kimia. Demikian pula logam cair ini mempunyai kemampuan mendukung sistem transfer panas yang baik pada sistem *thermal hydrolics* karena timbal dan LBE adalah **media transfer panas yang efisien** yang mempunyai konduktivitas termal dan kapasitas panas tinggi. Namun demikian desain reaktor cepat masih mempunyai sebuah problem serius yaitu logam cair Pb/LBE yang digunakan bersifat korosif terhadap

material baja (*cladding*) yang digunakan di dalam teras reaktor (Zhang dan Li, 2008; Sapunjidjiev et al., 2006; Zalenskii et al, 2007), Takaya et al., 2009). Korosi tersebut menyebabkan bahan cepat rusak sehingga **perlu dikontrol dan perlu ada upaya mitigasi** agar tidak menyebabkan adanya permasalahan keselamatan reaktor dan kerugian ekonomi setelah reaktor dibangun dan digunakan. Oleh karena itu berbagai tipe baja paduan unggul tahan korosi dan kuat secara mekanik banyak diteliti. Baja ODS tahan korosi salah satu kandidat material telah diteliti dengan membuat komposisi baja untuk 0 - 3.5 wt% Al dan 13.7-17.3 wt% Cr. Gambar 1 di bawah ini memperlihatkan foto SEM tampang lintang baja ODS setelah diuji rendam dalam logam cair LBE selama 3000 jam pada temperatur konstan 650 °C.



Gambar 1 Hasil SEM baja ODS setelah uji rendam dalam LBE selama 3000 jam (<http://ars.els-cdn.com/content/image/1-s2.0-S0022311508009148-gr4.jpg>).

Sejauh ini eksperimen korosi sudah banyak dilakukan baik mencoba mencari baja unggul atau metode penghambatan korosi (Takaya, 2009). Namun demikian biaya instalasi untuk eksperimen korosi LBE sangat mahal dan perlu keselamatan tingkat tinggi karena uap logam yang dihasilkan sangat beracun. Juga tidak semua penelitian dapat dilakukan dalam reaktor yang sedang beroperasi. Untuk itu perlu metode selain metode eksperimen untuk mengatasi kendala yang ada, seperti dengan metode komputasi dan simulasi. Kajian komputasi yang dilakukan salah satunya adalah dengan menggunakan metode Dinamika Molekul (MD).

## **Tujuan dan Manfaat Penelitian**

Tujuan dari penelitian ini adalah berusaha menemukan model mitigasi korosi besi dalam logam cair Pb/Bi yang tepat dan efisien, menggunakan metode simulasi dinamika molekul. Manfaat penelitian adalah dengan menemukan model korosi dan mitigasinya maka kita dapat mengajukan model solusi korosi dalam reaktor nuklir sehingga desain reaktor nuklir dapat dilakukan dengan lebih baik. Juga memberi kemungkinan banyak fenomena-fenomena fisika dalam reaktor yang dapat dievaluasi dengan model simulasi ini.

## **METODE PENELITIAN**

Metode penelitian yang digunakan dalam penelitian ini adalah **Metode Dinamika Molekul Klasik** menggunakan potensial Lennard-Jones (Arkundato et al, 2010, 2011). Simulasi dinamika molekul digunakan untuk memprediksi nilai besaran-besaran fisis yang ingin diketahui (koefisien difusi) berdasarkan model material yang dirancang dan berdasarkan kontrol simulasi yang diberikan meniru kondisi eksperimen. Pada intinya metode dinamika molekul adalah menghitung trayektori dinamika atom secara numerik (dikerjakan oleh program MOLDY pada penelitian ini) hasil memecahkan persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai untuk fenomena korosi. Selanjutnya menggunakan mekanika statistik dapat dihitung besaran-besaran termodinamik yang ingin diketahui berdasarkan/dari trayektori tadi. Untuk mengetahui adanya korosi maka dihitung koefisien difusi besi dalam logam cair menggunakan formula Einstein MSD dan Formula Arrhenius  $D(T)$ . Kemudian dicari nilai koefisien difusi besi ini yang sekecil-kecilnya, sembari memberikan injeksi nitrogen dengan konsentrasi tertentu agar korosi besi berhenti.

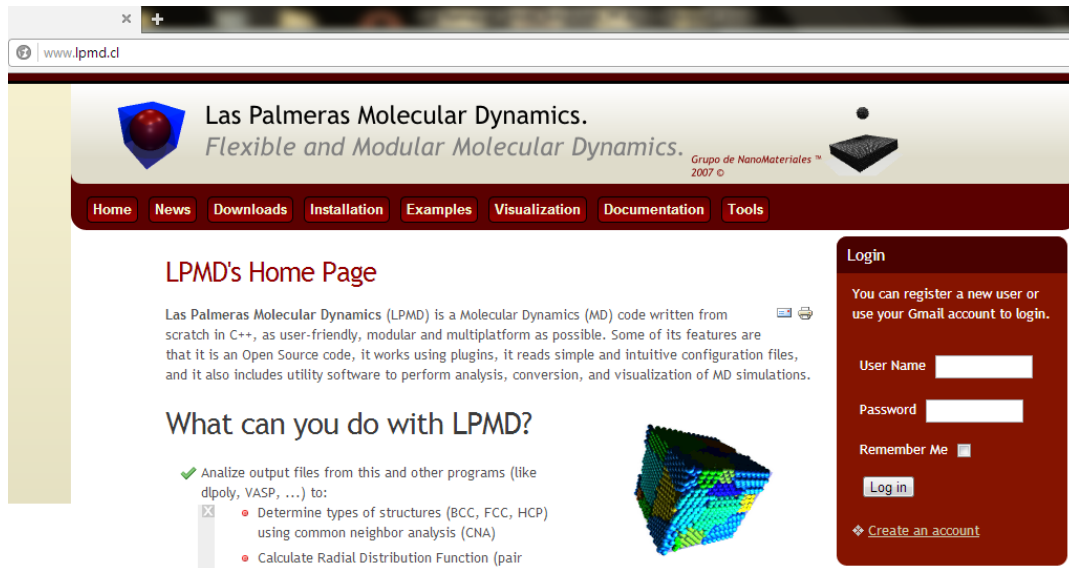
## **HASIL SIMULASI**

### **Program Dinamika Molekul**

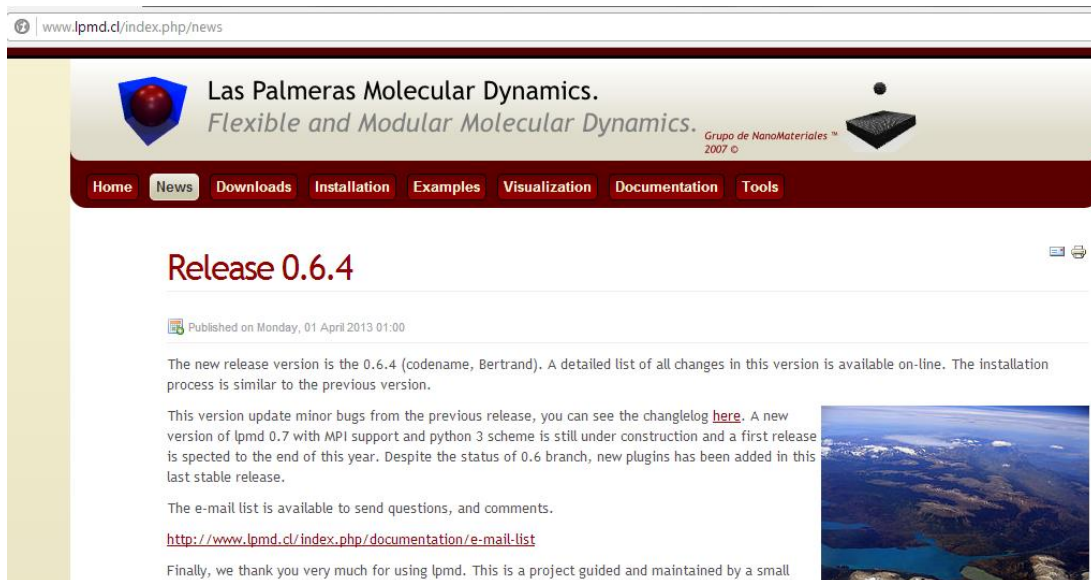
Pada penelitian ini setelah dilakukan studi pustaka melalui searching internet maka ada beberapa pilihan program dinamika molekul yang baik yang dapat digunakan/diinstall dalam perangkat komputasi penelitian ini.

## A. LPMD (Las Palmeras Molecular Dynamics)

Program dinamika molekul LPMD tampak mempunyai performance yang baik untuk menjalankan komputasi untuk topik penelitian fundamental ini dengan catatan program LPMD dapat diinstall dalam lingkungan OS Linux dan mendukung pemanfaatan potensial EAM yang dapat diterapkan untuk kasus simulasi/komputasi bahan logam seperti baja. Program ini juga selalu di update versinya.




Gambar 2. LPMD view



Gambar 3. LPMD release

## B. LAMMPS

Program dinamika molekul LAMMPS mempunyai keunggulan dapat diterapkan untuk kasus komputasi paralel ataupun serial sehingga dapat digunakan untuk menjalankan komputasi skala besar dengan jumlah atom hingga jutaan butir. Program LAMMPS ini juga banyak digunakan untuk simulasi material dengan bukti banyaknya artikel jurnal yang dimuat dari hasil penelitian komputasi berbasis LAMMPS. Program ini juga selalu di update versinya.

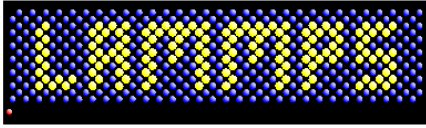
 lammps.sandia.gov

---

**LAMMPS Molecular Dynamics Simulator**

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

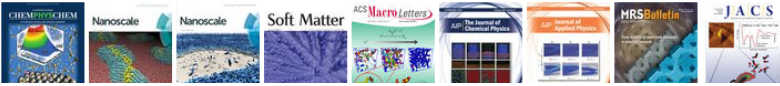
hover to animate -- [input script](#)



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

| Big Picture                  | Code  | Documentation                         | Results                       | Related Tools                                       | Context                     | User Support                            |
|------------------------------|---|---------------------------------------|-------------------------------|---|-----------------------------|---|
| <a href="#">Features</a>     | <a href="#">Download</a>                        | <a href="#">Manual</a>                | <a href="#">Publications</a>  | <a href="#">Pre/Post Processing</a>                 | <a href="#">Authors</a>     | <a href="#">Mail list</a>               |
| <a href="#">Non-features</a> | <a href="#">SourceForge</a>                     | <a href="#">Developer Guide</a>       | <a href="#">Pictures</a>      | <a href="#">Pizza.py Toolkit</a>                    | <a href="#">History</a>     | <a href="#">Workshops</a>               |
| <a href="#">FAQ</a>          | <a href="#">Latest Features &amp; Bug Fixes</a> | <a href="#">Tutorials</a>             | <a href="#">Movies</a>        | <a href="#">Offsite LAMMPS packages &amp; tools</a> | <a href="#">Funding</a>     | <a href="#">User Scripts and HowTos</a> |
| <a href="#">Wish list</a>    | <a href="#">Unfixed bugs</a>                    | <a href="#">MD to LAMMPS glossary</a> | <a href="#">Benchmarks</a>    | <a href="#">Visualization</a>                       | <a href="#">Open source</a> | <a href="#">Contribute to LAMMPS</a>    |
| .                            | .   | <a href="#">Commands</a>              | <a href="#">Citing LAMMPS</a> | <a href="#">Related Modeling codes</a>              | .                           | .                                       |

---



Gambar 4. LAMMPS

### Download a tarball

Select the code you want, click the "Download Now" button, and your browser should download a gzipped tar file. Unpack it with the following

```
gunzip file.tar.gz
tar xvf file.tar
```

There have been ~166,300 downloads of LAMMPS from Sept 2004 thru Dec 2013.

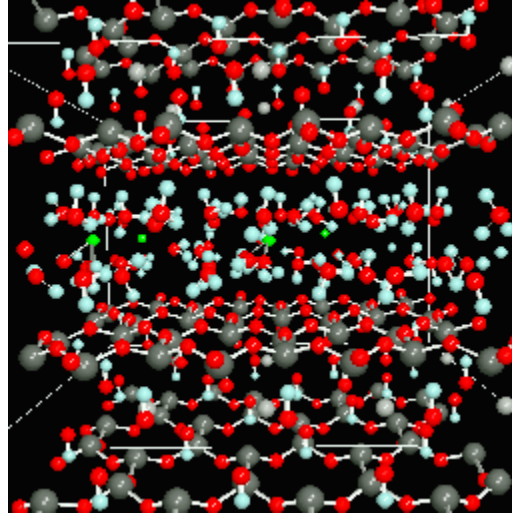
### LAMMPS molecular dynamics package:

- [LAMMPS](#) --- Stable version (28 Jun 2014) - Recent C++ version source tarball, GPL license, ~64 Mb. Includes all bug fixes and new feat
- [LAMMPS](#) --- Development version - Most current C++ version source tarball, GPL license, ~64 Mb. Includes all bug fixes and new featur
- [LAMMPS Windows serial executable](#) --- C++ version (12 April 2013), 14.0 Mb (includes all subsequent bug fixes and new features descri PPPM), built with all packages except: gpu xtc kim meam reax voronoi user-atc user-cuda user-reaxc user-awpmd user-misc user-omp. NOTE scripts, auxiliary tools, etc, you need to also download the C++ tarball.
- [LAMMPS Windows parallel executable](#) --- C++ version (12 April 2013), 14 Mb, includes everything that the above serial executable has in LAMMPS Windows executable requires MPICH2 as a pre-requisite. To use it, you'll need to also download and install [MPICH2](#) for Windows example scripts, auxiliary tools, etc, you need to also download the C++ tarball.
- [LAMMPS 2001](#) --- older f90 version source tarball, GPL license, 1.1 Mb, last updated 17 Jan 2005
- [LAMMPS 99](#) --- older f77 version source tarball, GPL license, 840 Kb

Gambar 5. LAMMPS code



### C. Moldy



Gambar 6. Moldy ([http://cc-ipcpc.icp.ac.ru/Moldy\\_2\\_16.html](http://cc-ipcpc.icp.ac.ru/Moldy_2_16.html))

**Program** moldy ini adalah program multi-purpose sehingga dapat digunakan baik untuk zat padat maupun zat cair, sehingga cocok untuk penelitian fundamental ini. Namun demikian berbeda dengan program LPMD dan LAMMPS yang merupakan program baru, MOLLY adalah program lama dan sederhana namun masih tangguh untuk menjalankan simulasi MD.

### Fungsi Potensial

Beberapa website sumber database fungsi potensial yang dapat digunakan sebagai referensi pada penelitian fundamental ini:

[sites.google.com/site/eampotentials/](http://sites.google.com/site/eampotentials/)

Elements

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

Gambar 7. Layar depan [sites.google.com/site/eampotentials/](http://sites.google.com/site/eampotentials/)

NIST | NIST Time | NIST Home | About NIST | Contact Us | A-Z Site Index | Search

Material Measurement Laboratory

About MML | Publications | Topic/Subject Areas | Products/Services | News/Multimedia | Events | Programs/Projects | Facilities

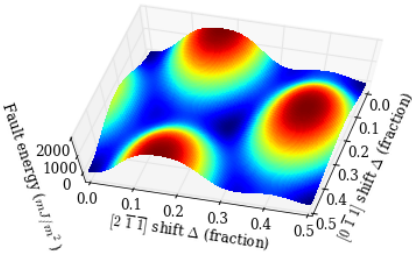
## Interatomic Potentials Repository Project

References - FAQ - Resources - People - Contact

### Overview

This repository provides a source for interatomic potentials (force fields), related files, and evaluation tools to help researchers obtain interatomic models and judge their quality and applicability. Users are encouraged to download and use interatomic potentials, with proper acknowledgement, and developers are welcome to contribute potentials for inclusion. The files provided have been submitted or vetted by their developers and appropriate references are provided. All classes of potentials (e.g., MEAM, ADP, COMB, Reax, EAM, etc.) and materials are welcome. Interatomic potentials and/or related files are currently available for various metals, semiconductors, oxides, and carbon-containing systems.

If you do not find the element or alloy potential you are seeking, send an email to [Chandler.Becker@nist.gov](mailto:Chandler.Becker@nist.gov), and we may be able to help. This site reflects what has been submitted, so it is not a complete survey of interatomic potentials for any or all systems. Here



The 3D surface plot shows fault energy in units of  $\text{meV}/\text{Å}^2$  on the vertical axis, ranging from 0 to 2000. The two horizontal axes represent shifts in fractions:  $[2 \ 1 \ 1]$  shift  $\Delta$  (fraction) and  $[0 \ 1 \ 1]$  shift  $\Delta$  (fraction), both ranging from 0.0 to 0.5. The surface exhibits several peaks, with the highest energy regions shown in red and yellow, and lower energy regions in blue and green.

Gambar 8. IPRP

## EAM potential database

The Embedded Atom Method (EAM) is a simple empirical model for describing metallic bonding.

Our purpose of constructing the EAM potential database is

- To share our EAM potentials with other researchers who use and/or develop EAM potentials
- To collecting EAM potentials developed by other researchers either by linking to their sites or by placing their potentials on our w

We wish to get your feedback about your using our potentials or other people's potentials, thus encouraging improvement of the existing

Copyright © 2000, Computational Materials Science Group at ASU

All rights reserved.  
email at: [wh@billbo.eas.asu.edu](mailto:wh@billbo.eas.asu.edu)

Gambar 9. EAM potential database

## Desain Dan Pengembangan Komputer Paralel

Dalam penelitian ini untuk dapatnya melakukan penelitian material dengan metode simulasi dinamika molekul atom banyak maka dilakukan terlebih dahulu desain dan pengembangan

perangkat komputasinya. Adapun tahap-tahap pengerjaan perangkat komputasi penelitian adalah sebagai berikut:

A. Rancang Bangun Rak Komputasi



Gambar 10. Kegiatan penelitian 1

Selanjutnya setelah tahap persiapan penelitian ini perangkat komputasi yang berhasil dibuat akan dilakukan instalasi program dinamika molekul paralel dan software-software pendukung seperti jmol, moviemaker, VMD dan dilanjutkan dengan mengambil data simulasi material cladding yang merupakan tujuan dari penelitian ini.

## Hasil Simulasi

Setelah pengerjaan perangkat komputasi paralel maka kegiatan selanjutnya adalah menggunakannya untuk simulasi proses korosi dan mencari metode penghambatannya. Pada penelitian sebelumnya kita menggunakan gas oksigen yang diinjeksikan ke dalam medium transfer panas LBE (Arkundato, 2013). Hasil penelitian tersebut dapat menunjukkan bahwa oksigen dapat menekan laju korosi besi dalam LBE (logam Pb dan Bi cair) secara signifikan. Namun konsentrasi oksigen yang diberikan harus dapat diatur pada daerah yang cukup sempit sehingga secara teknis realisasi di dalam reaktor harus benar-benar dijaga. Oleh karena itu masih memberikan peluang ketidakakuratan penanganan penghambatan korosi. Pada penelitian baru ini maka kita mencoba mencari alternatif lain selain oksigen dan secara luar biasa kita mendapatkan kenyataan bahwa penggunaan nitrogen dapat menekan laju korosi baja (besi) dalam reaktor nuklir jauh lebih baik. Berikut adalah hasil-hasil penelitian penghambatan korosi baja (besi) dengan injeksi gas nitrogen ke dalam sistem reaktor PbBi.

### Tampilan layar jalannya simulasi

```

Sat Sep 20 12:43:22 2014   Simulasi MD N in FeLBE system
Page 2

# # ##### #          ##### # #
## ## # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # #
# # # # # # # # # # # # #

Version Release2_16e (Exp ) 2000/12/11 12:33:24

Keith Refson
Department of Earth Sciences
Parks Road, Oxford OX1 3PR
keith@earth.ox.ac.uk

Moldy Copyright (C) Keith Refson 1988, 1992, 1993
Moldy comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY:
This is free software and you are welcome to
redistribute it under certain conditions.
For details see file COPYING included with source.

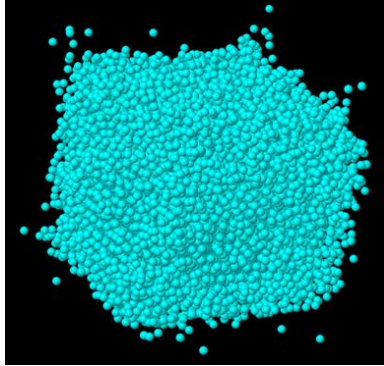
System specification read in from file FeLBEN.in
iron
Number of molecules          = 10745
Number of sites              = 1

```

Gambar 11. Kegiatan penelitian

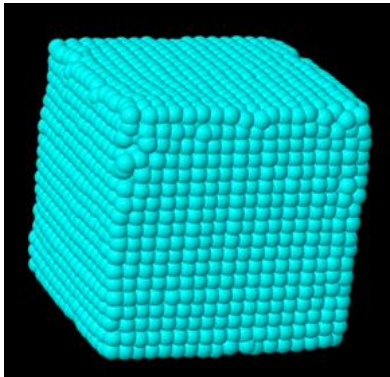
*Struktur Besi oleh Korosi dan Hasil Penghambatan*

*Struktur Besi Tanpa Injeksi Gas Oksigen/Nitrogen*



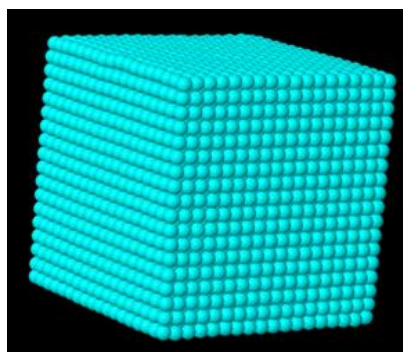
Gambar 12. Kegiatan penelitian

*Struktur Besi Dengan Penghambatan 0.75% Oksigen*



Gambar 13. Kegiatan penelitian

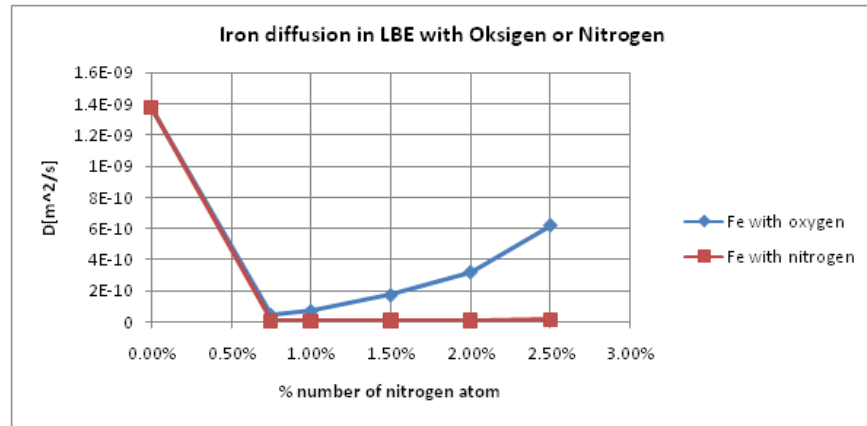
*Struktur Besi Dengan Penghambatan 0,75% Nitrogen*



Gambar 14. Kegiatan penelitian



## Hasil Komparasi Koefisien Difusi Besi dengan Pemberian Oksigen Atau Nitrogen



Gambar 15. Kegiatan penelitian

### PEMBAHASAN

Dari hasil-hasil simulasi diatas maka diprediksi penggunaan nitrogen sebagai agen penghambat korosi baja dalam rector nuklir tampak menjanjikan dan mempunyai prospek besar. Pada gambar difusi besi di atas maka untuk injeksi atom nitrogen/oksigen dalam jumlah 0,75% jumlah seluruh atom dalam simulasi (50 ribu atom) maka secara signifikan korosi besi dapat ditekan sampai pada titik yang sangat rendah. Namun terlihat penggunaan gas nitrogen mampu menjaga ketahanan struktur besi lebih baik dibanding penggunaan oksigen. Hasil prediksi simulasi ini sangat penting untuk aplikasi riil dan perlu segera dikonfirmasi dengan data eksperimen.

### KESIMPULAN DAN SARAN

Penggunaan nitrogen sebagai agen penghambat (*inhibitor*) korosi baja (besi) dalam rektor nuklir berpendingin logam cair Pb/Bi tampak menjanjikan dan mempunyai prospek besar untuk aplikasi. Untuk injeksi atom nitrogen/oksigen dalam jumlah 0,75% dari jumlah seluruh atom dalam simulasi (50 ribu atom) maka secara signifikan korosi besi dapat ditekan sampai pada titik yang sangat rendah. Namun terlihat penggunaan gas nitrogen mampu menjaga ketahanan struktur besi lebih baik dibanding penggunaan oksigen. Hasil prediksi simulasi ini sangat penting untuk aplikasi riil dan perlu segera dikonfirmasi dengan data eksperimen. Penelitian lanjutan yang lebih komprehensif namun demikian perlu dilakukan untuk lebih memahami mekanisme korosi dan penghambatannya lebih baik.

## DAFTAR PUSTAKA

- Arkundato et al.(2007) **Si-xC1-xO2 Alloys: A Possible Route to Stabilize Carbon-Base Silica-Like Solids**, 144,pp. 273-276, Solid State Communications
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani (2009) **Perhitungan Koefisien Difusi Logam Fe Dalam Pb Cair Dengan Metode Dinamika Molekuler: Studi Awal Korosi Dalam Reaktor Cepat**, Spektra: Fisika dan Aplikasinya ISSN: 1411-8823, Volume VIII, No.2 Desember 2009
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani (2010) **Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb By Molecular Dynamics Methods**, AIP Conference Proc., Vol.1244, pp. 136-144
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani (2012) **Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor**, AIP Conference Proc., Vol.1454, pp. 65
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, Celino, M. (2012) **Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method**, AIP Conference Proc., Vol. 1448
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani (2013) **Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method**, International Journal of Applied Physics and Mathematics, Vol.3 No.1
- Arkundato, A., Suud, Z., Mikrajudin, A., Widayani (2013) **Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic**, Turkish Journal of Physics, DOI: 10.3906/fiz-1112-12
- Buyukozturk, O., Buehler, M.J., Lau, D., Tuakta, C. (2011) **Structural Solution Using Molecular Dynamics: Fundamentals and A Case Study of Epoxy-Silica Interface**, International Journal of Solids and Structures 48, 2131-2140
- Goldberg, S.M., Rosner, R., (2011) **Nuclear Reactors: Generation to Generation**, American Academy Of Arts & Sciences, Cambridge. Dapat diakses di (<http://www.amacad.org/pdfs/nuclearreactors.pdf>).
- Gonzalez, J., Florido, P., Gimenez M. and Converti, J., (2011) **Asian Journal of Industrial Engineering**, 3(1): 13-28, ISSN 1996-3386/DOI: 10.3923/ajie.2011.13.28, Knowledge Review, Malaysia
- Sapundjiev, D., Van Dyck, S., Bogaerts, W. (2006) **Liquid metal corrosion of T91 and A316L materials in Pb-Bi eutectic at temperatures 400-600 °C**, *Corrosion Science*, 48, 577-594, Elsevier
- Takaya, (2009), **Corrosion behavior of Al-alloying high Cr-ODS steels in lead-bismuth eutectic**, Journal of Nuclear Materials 386-388, 507-510
- Zelenskii, G.K., Loltukhovskii, A.G., Leont'eva-Smirnova, M.V., Naumenko, I., Tolkachenko, S.A. (2007) **Corrosion Resistance of Fuel Element Steel Cladding in a Lead Coolant**, *Metal Science and Heat Treatment*, Vol. 49, No. 11-12
- Zhang, J. dan Li, N. (2008) **Review of the studies on fundamental issues in LBE corrosion**, *Journal of Nuclear Materials*, 373, 351-377, Elsevier

## LAMPIRAN

### L1. PUBLIKASI YANG DIHASILKAN

#### Seminar Internasional

Hasil penelitian telah didaftarkan untuk ikut dalam seminar internasional SCIETECH 2015 Januari 2015 Sanur Bali dan telah diterima.

The 3rd 2015 International Conference on Science & Engineering in Mathematics, Chemistry and Physics (ScieTech 2015)

#### PUBLISHING AGREEMENT

Article entitled: Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor

Corresponding author: Artoto Arkundato

To be published in **The 3rd 2015 International Conference on Science & Engineering in Mathematics, Chemistry and Physics (ScieTech 2015)**

I hereby assign to **the 3rd 2015 International Conference on Science & Engineering in Mathematics, Chemistry and Physics (ScieTech 2015)** (the "Publication") the copyright in the manuscript identified above and any supplemental tables, illustrations or other information submitted therewith that are intended for publication as part of or as a supplement to the manuscript (the "Article") in all forms and media (whether now known or hereafter developed), throughout the world, in all languages, for the full term of copyright, effective when and if the article is accepted for publication. This transfer includes the right to provide the Article in electronic and online forms and systems. No revisions, additional terms or addenda to this Agreement can be accepted without express written consent. Authors at institutions that place restrictions on copyright assignments, including those that do so due to policies about local institutional repositories, are encouraged to obtain a waiver from those institutions so that the author can accept this publishing agreement.

I confirm that I have read and understand the full list of rights retained by authors and also agree to the other *General Terms of Publication* (see below).

- I am the sole author of the manuscript
- I am one author signing on behalf of all co-authors of the manuscript

Please mark of the above boxes (as appropriate) and then sign and date the document

Signed: \_\_\_\_\_ Name printed: Dr. Artoto Arkundato

Date: October 17, 2014

Gambar L1. Form copyright



## REGISTRATION FORM

---

|                                |  |                       |                 |
|--------------------------------|--|-----------------------|-----------------|
| <b>Paper ID</b>                | 116  |                       |                 |
| <b>Paper Title</b>             | Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor |                       |                 |
| <b>Name</b>                    | Artoto Arkundato, Zaki Su'ud, Sudarko, M Hasan, Massimo Celino   |                       |                 |
| <b>Affiliation</b>             | Fisika FMIPA Universitas Jember  |                       |                 |
| <b>Nationality</b>             | Indonesia  |                       |                 |
| <b>E-mail</b>                  | a_arkundato.fmipa@unej.ac.id   | <b>Phone (mobile)</b> | +62 81220688963 |
| <b>Registration Fee</b>        | 1 Non student : US\$ 400 (<=10 pages)  |                       | US\$ 400        |
|                                | 2 Student : US\$ 350 (<=10 pages)  |                       |                 |
|                                | 3 Conference Attendee: US\$ 175/person   |                       |                 |
|                                | 4. Extra Pages US\$ 50/page  |                       |                 |
|                                | 5 Extra paper (per paper, 2nd paper and onwards): US\$250 /paper   |                       |                 |
|                                | 6 Extra Proceedings: US\$ 75/proceeding  |                       |                 |
|                                | 7. Bank Administration Fee (Compulsory)  |                       | USD 20          |
|                                | <b>Total</b>   |                       | <b>USD 420</b>  |
| <b>Correspondence Address:</b> | Fisika FMIPA Universitas Jember<br>Jl. Kalimantan 37 Jember<br>Jawa Timur, Republik of Indonesia (post code 68121)           |                       |                 |
| <b>Presenter Name</b>          | Dr. Artoto Arkundato   |                       |                 |

Gambar L2. Form Registrasi

The 3rd International Conference on Science & Engineering  
in Mathematics, Chemistry and Physics (2015)  
**(ScieTech 2015)**



Welcome

On behalf of the Organizing Committee, it gives us great pleasure to invite you to the **The 3rd International Conference on Science & Engineering in Mathematics, Chemistry and Physics 2015 (ScieTech 2015)**, which will be held at the **Sanur Paradise Hotel**, Bali, Indonesia, during 31 January - 01 February 2015.

Home

Scope of Conference

Call for Papers

Conference Location

Paper Submission

Gambar L3. Seminar Internasional

## Jurnal Internasional

**The ScieTech 2015 proceedings will be published by Journal of Physics: Conference Series (JPCS) and will be indexing in Compendex, SCOPUS, Conference Proceedings Citation Index – Science (CPCI-S) (Thomson Reuters, Web of Science), INSPEC, Chemical Abstracts Service, INIS (International Nuclear Information System), NASA Astrophysics Data System, SPIRES, VINITI Abstracts Journal (Referativnyi Zhurnal). Further information about JPCS indexing please visit [http://conferenceseries.iop.org/content/quick\\_links/Abstracted%20In#tab1](http://conferenceseries.iop.org/content/quick_links/Abstracted%20In#tab1)**

Journal of Physics: Conference Series

Subject Area: Physics and Astronomy  
 Publisher: Institute of Physics Publishing  
 ISSN: 1742-6596  
 Scopus Coverage Years: from 2002 to Present

Journal Metrics

Scopus journal metrics offer the value of content with their citation measuring tools. The metrics below allow for direct comparison of journals, is dependent of their subject classification. To learn more, visit [www.journalmetrics.com](http://www.journalmetrics.com).

|  |             |
|--|-------------|
| SJR (SCImago Journal Rankings)             | 2011: 0.250 |
| SMIIP (Source Normalized Impact per Paper) | 2011: 0.312 |

Compare with other Sources: [View journal analysis](#)

| Documents availability                  | View                                   |
|---|--|
| Latest issue Volume 457, Issue 1 (2013) | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2013 (2018 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2012 (2514 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2011 (4847 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2010 (4175 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2009 (3323 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2008 (2851 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2007 (1998 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2006 (2291 Documents)                 | <a href="#">View citation overview</a> |
| • 2005 (763 Documents)                  | <a href="#">View citation overview</a> |

Gambar L4. Seminar Internasional

## Judul Publikasi Seminar

### SEMINAR INTERNASIONAL

The 3<sup>rd</sup> 2015 International Conference on Science & Engineering in Mathematics, Chemistry and Physics (ScieTech 2015),

Judul: Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor

Paper I: 116

Author: Artoto Arkundato, Zaki Su'ud, Sudarko, M Hasan, Massimo Celino

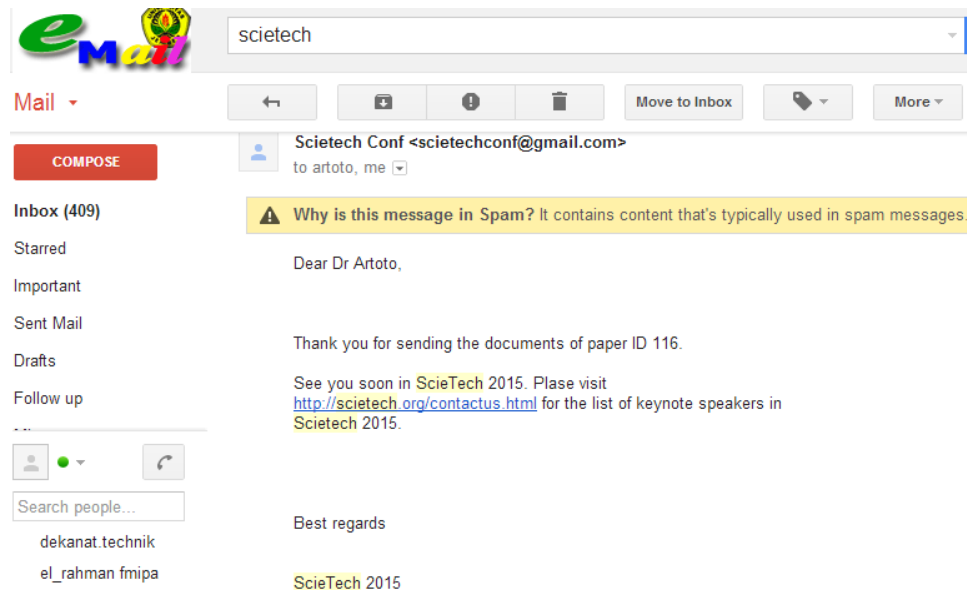
Jadwal Seminar: 31 Januari 2015

Lokasi: Sanur, Denpasar Bali

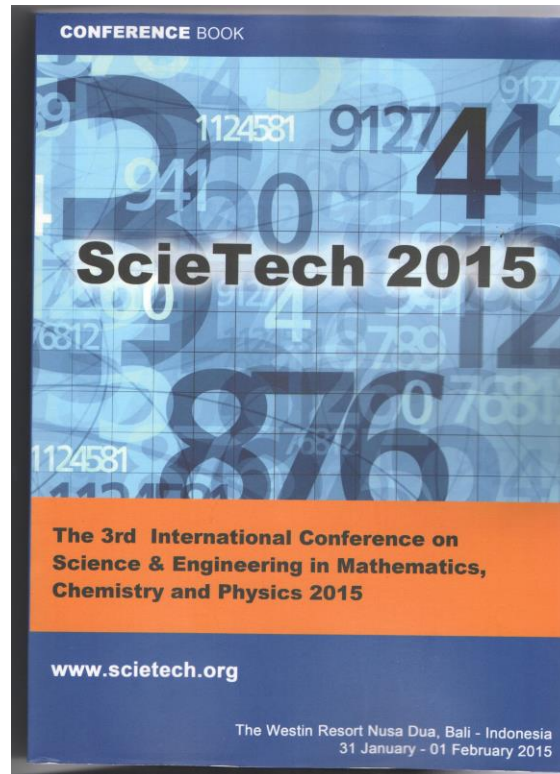
## JURNAL INTERNASIONAL

Journal of Physics: Conference Series (SCOPUS), IOP Publishing (waiting for press, 2015)

Judul: Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor



Gambar L5. Penerimaan paper



Gambar L5. Buku Seminar



Gambar L6. Foto Peserta Seminar