



**SIMULASI KOROSI BESI DALAM LOGAM CAIR: PENENTUAN
DAERAH TEMPERATUR OPERASI MITIGASI KOROSI
DENGAN INHIBITOR NITROGEN**

SKRIPSI

Oleh

**Nur Sarafina Agustini
NIM 111810201012**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2015**



**SIMULASI KOROSI BESI DALAM LOGAM CAIR: PENENTUAN
DAERAH TEMPERATUR OPERASI MITIGASI KOROSI
DENGAN INHIBITOR NITROGEN**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat untuk menyelesaikan Program Studi Fisika (S1) dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh

**Nur Sarafina Agustini
NIM 111810201012**

**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER
2015**

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Ayahanda (Alm) Mispandi Sugiarto tercinta, terima kasih untuk doa, motivasi, kasih sayang serta 20 tahun kebersamaan yang telah diberikan;
2. Ibunda Suyantini tercinta, terima kasih untuk doa, motivasi, kesabaran serta cinta kasih yang tiada henti tcurahkan;
3. guru-guru di TK Kartika V Jember, SDN kebonsari VIII Jember, SDN Prajekan Kidul 2, SMPN 1 Prajekan, dan SMAN 1 Prajekan serta dosen-dosen di Jurusan Fisika FMIPA UNEJ yang telah memberikan ilmu, mendidik, dan membimbing dengan penuh kesabaran;
4. Almamater tercinta Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTTO

“ Sesungguhnya bersama kesulitan itu ada kemudahan, maka apabila kamu selesai (dari suatu urusan), kerjakanlah dengan sungguh-sungguh (urusan) yang lain”

(Terjemahan surat Al-Insyiroh ayat 6-7)*

“Laa Tahzan, Innallaha Ma’ana”

(Penggalan surat At-taubah ayat 40)*

*Departemen Agama Proyek Pengadaan Kitab Suci Al’Qur’an.1975. Al’Qur’an dan Terjemahannya. Jakarta: PT. Bumi Restu.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Nur Sarafina Agustini

NIM : 111810201012

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair: Penentuan Daerah Temperatur Operasi Mitigasi Korosi dengan Inhibitor Nitrogen” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi mana pun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

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

Jember, Agustus 2015

Yang menyatakan,

Nur Sarafina Agustini

NIM 111810201012

SKRIPSI

**SIMULASI KOROSI BESI DALAM LOGAM CAIR: PENENTUAN
DAERAH TEMPERATUR OPERASI MITIGASI KOROSI
DENGAN INHIBITOR NITROGEN**

Oleh

Nur Sarafina Agustini

NIM 111810201012

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si

Dosen Pembimbing Anggota : Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair: Penentuan Daerah Temperatur Operasi Mitigasi Korosi dengan Inhibitor Nitrogen” telah diuji dan disahkan oleh Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember pada :

hari, tanggal :

tempat : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Tim Penguji;

Ketua (DPU),

Sekretaris (DPA),

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

Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si
NIP. 197208201998021001

Penguji I,

Penguji II,

Drs. Yuda C. Hariadi, M.Sc., Ph.D
NIP. 196203111987021001

Ir. Misto, M.Si
NIP. 195911211991031002

Mengesahkan
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember

Prof. Drs. Kusno, DEA., Ph.D
NIP. 196101081986021001

RINGKASAN

Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair: Penentuan Daerah Temperatur Operasi Mitigasi Korosi dengan Inhibitor Nitrogen; Nur Sarafina Agustini, 111810301012; 2015: 84 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Korosi atau kerusakan logam besi padat di dalam lingkungan logam cair timbal-bismut pada temperatur tinggi termasuk korosi temperatur tinggi yang tidak meninjau transfer elektron atau reaksi kimia pada prosesnya. Mekanisme korosi tersebut ditinjau melalui proses difusi atom-atom material logam besi padat ke dalam logam cair. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan upaya penghambatan atau mitigasi korosi akibat proses difusi tersebut serta menentukan daerah temperatur operasi mitigasi melalui simulasi dinamika molekul. Sistem simulasi dimodelkan menjadi dua bagian yaitu sistem simulasi awal dan sistem simulasi untuk proses mitigasi korosi. Sistem simulasi awal terdiri dari logam besi dengan interaksi lennard-Jones dan diletakkan dalam logam cair timbal-bismut. Sedangkan, untuk proses mitigasi korosi, gas nitrogen diinjeksikan ke dalam sistem awal pada konsentrasi tertentu. Kedua sistem material disimulasikan/dijalankan dengan variasi temperatur.

Hasil yang didapatkan menunjukkan bahwa koefisien difusi besi dalam logam cair timbal-bismut mengalami kenaikan seiring dengan kenaikan temperatur untuk kedua sistem simulasi. Proses mitigasi dengan inhibitor gas nitrogen ditunjukkan dengan adanya penurunan nilai koefisien difusi besi dalam logam cair timbal bismut setelah gas nitrogen diinjeksikan. Perlakuan variasi temperatur untuk sistem simulasi sebelum dan setelah injeksi gas nitrogen menghasilkan daerah temperatur operasi mitigasi korosi dengan interval temperatur 600 °C hingga 1550 °C. Pengaplikasian dari mitigasi korosi dengan menggunakan gas nitrogen pada reaktor nuklir

memerlukan peninjauan lanjutan tentang temperatur optimum yang bekerja pada suatu reaktor.



PRAKATA

Puji syukur ke hadirat Allah SWT. Atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair: Penentuan Daerah Temperatur Operasi Mitigasi Korosi dengan Inhibitor Nitrogen”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Kimia 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. Prof. Drs. Kusno, DEA., Ph.D, selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
2. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si, selaku ketua Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember;
3. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si, selaku Dosen Pembimbing Utama yang telah meluangkan waktu, tenaga, pikiran dan perhatian dalam penulisan skripsi ini;
4. Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si, selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, tenaga, pikiran, dan perhatian dalam penulisan skripsi ini
5. Drs. Yuda C. Hariadi, M.Sc., Ph.D selaku Dosen Penguji I dan Ir Misto, M.Si., selaku Dosen Penguji II yang telah meluangkan waktunya guna menguji, serta memberikan kritik dan saran demi kesempurnaan skripsi ini;
6. Drs. Sujito, Ph.D selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah membimbing penulis selama menjadi mahasiswa;
7. bapak dan ibu dosen-dosen FMIPA UNEJ, dan dosen-dosen Jurusan Fisika khususnya yang telah banyak memberikan ilmu dan pengetahuan;

8. Ayahanda (Alm) Mispandi Sugiarto tercinta untuk doa, nasehat, kasih sayang dan cinta kasih yang tiada henti tercurahkan dalam 20 tahun kebersamaan yang telah papi berikan;
9. Ibunda Suyantini tercinta untuk doa, kerja keras, kasih sayang dan cinta kasih yang tiada henti tercurahkan serta segala hal yang tidak dapat diuraikan satu persatu;
10. kakak tercinta Ika Dina, Dewi Masitha dan Putri Zakiah serta keluarga besar yang senantiasa memberikan cinta kasih, dorongan semangat, motivasi, dan doa;
11. Aisyah S, Rosaria D, Novdianti A, Dewi A, Putri R, Nurul Puput, Noer R, Umi S dan Vita P untuk dukungan dan kebersamaan dikala suka dan duka;
12. teman-teman angkatan 2011, terima kasih atas semangat, bantuan, saran, perhatian, dan kenangan yang telah diberikan;
13. teman-teman seperjuangan di laboratorium komputasi terima kasih atas saran, kerjasama dan bantuannya;
14. semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu persatu.

Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi ilmu pengetahuan.

Jember, 24 Agustus 2015

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PERSEMBAHAN	ii
MOTTO	iii
PERNYATAAN	iv
PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan	4
1.5 Manfaat	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Atom dan Molekul	6
2.1.1 Besi (Fe).....	6
2.1.2 Nitrogen.....	7
2.1.3 Logam Cair PbBi	7

2.2 Struktur Kristal	8
2.3 Difusi dan Korosi	11
2.3.1 Proses Difusi.....	11
2.3.2 Korosi Akibat Proses Difusi.....	13
2.4 Dinamika Molekul	15
2.5 Mekanika Klasik	17
2.5.1 Algoritma Integrasi Waktu.....	17
2.6 Interaksi Antar Atom (Molekul)	19
2.7 Program Aplikasi	22
2.7.1 <i>Moldy</i>	22
2.7.2 OVITO.....	22
BAB 3. METODE PENELITIAN	24
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	24
3.2 Alat Penelitian	24
3.3 Diagram Alir Penelitian	24
3.3.1 Pengaturan <i>Input File</i>	28
3.3.2 Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair dan Penghambatannya.....	29
3.3.3 Uji Ekuilibrasi Sistem.....	30
3.3.4 Ekstraksi Mean Square Displacement.....	31
3.3.5 Penentuan Koefisien Difusi (<i>D</i>).....	31
3.3.6 Analisis Struktur Besi dengan OVITO.....	32
3.4 Metode Analisis	32
3.4.1 Pembuatan Kurva MSD dan Penentuan Koefisien Difusi <i>D</i>	33
3.4.2 Pembuatan grafik <i>D(T)-T</i>	34
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	35
4.1 Difusi Korosi Besi dalam Logam Cair pada Temperatur Tinggi	35

4.2 Efek Injeksi gas Nitrogen terhadap Difusi Korosi Besi dalam Logam Cair.....	40
4.3 Daerah Operasi Mitigasi Korosi Besi dalam Logam Cair dengan Inhibitor Nitrogen	46
BAB 5. PENUTUP.....	50
5.1 Kesimpulan	50
5.2 Saran.....	50
DAFTAR PUSTAKA.....	51
LAMPIRAN.....	56

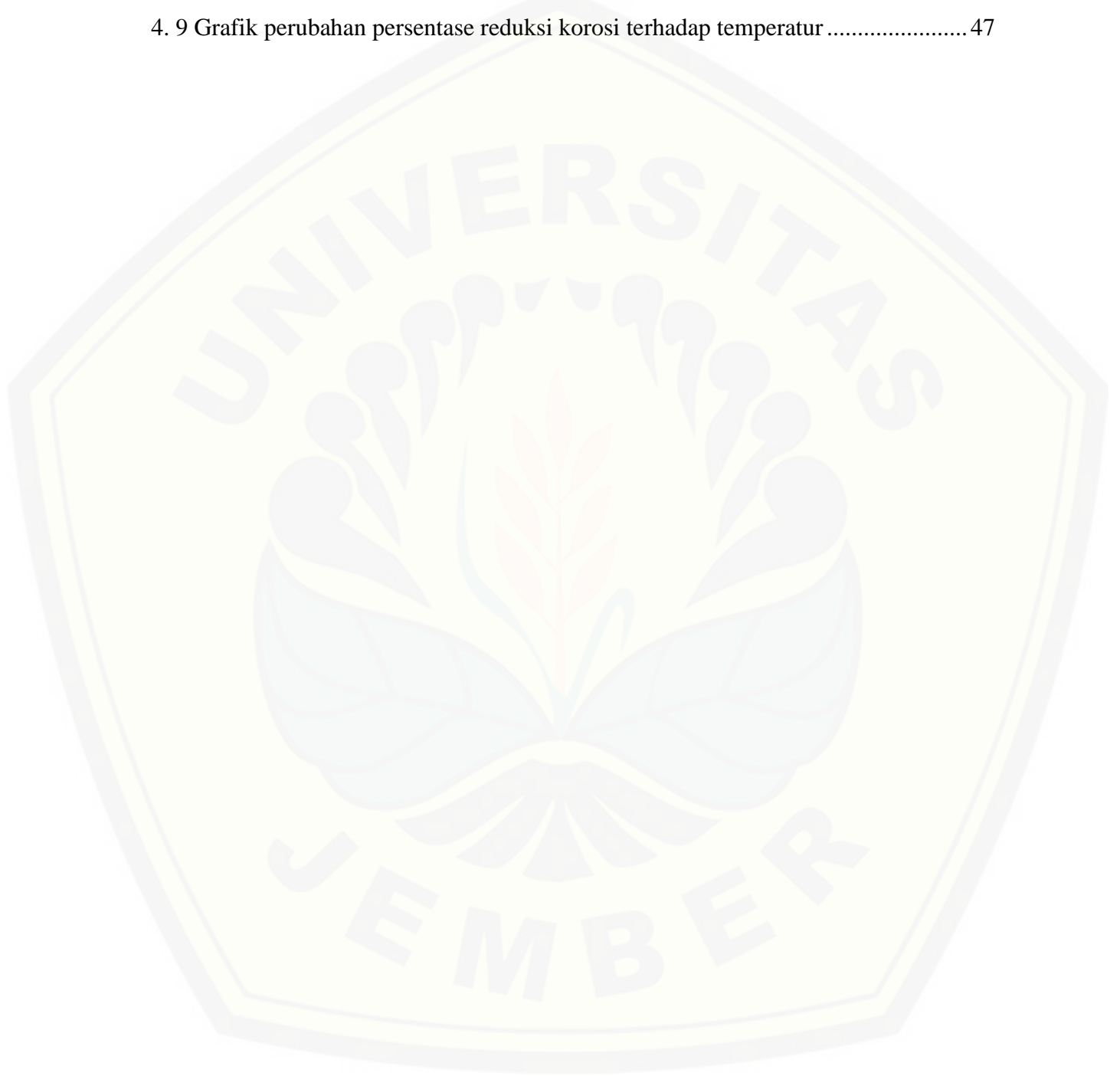
DAFTAR TABEL

2. 1 Daftar Parameter Potensial.....	20
3. 1 Data Masukan pada <i>Control file</i>	29
4. 1 Struktur kristal atom besi dalam logam cair timbal-bismut setelah injeksi gas nitrogen	45

DAFTAR GAMBAR

2. 1 Struktur kristal dalam 3 dimensi	8
2. 2 Struktur kristal BCC.....	9
2. 3 Struktur Kristal FCC	10
2. 4 Struktur kristal HCP.....	10
2. 5 Mekanisme difusi	11
2. 6 Korosi pada logam padat akibat proses difusi.....	14
2. 7 Koefisien difusi besi (Fe) dalam logam cair timbal-bismut untuk berbagai variasi konsentrasi gas O ₂	14
2. 8 Skema proses yang terlibat dalam difusi korosi dan pencegahannya	15
2. 9 Sistem sebagai kumpulan N partikel.....	16
3. 1 Diagram alir penelitian.....	25
3. 2 Diagram alir kegiatan simulasi.....	26
3. 3 Diagram alir penelitian.....	30
4. 1 Grafik hubungan antara Log D dan 1/T dari simulasi besi dalam logam cair timbal-bismut	36
4. 2 Interaksi Potensial Lennard-Jones antar atom dalam sistem simulasi	37
4. 3 Kurva MSD besi dalam logam cair timbal-bismut dengan perlakuan variasi temperatur	38
4. 4 Sistem simulasi yang terdiri atas besi dan logam cair timbal-bismut pada temperatur yang berbeda.....	39
4. 5 Perbandingan kurva MSD sistem simulasi sebelum dan setelah injeksi gas nitrogen pada temperatur 800°C	41
4. 6 Struktur mikroskopik besi, timbal-bismut dan nitrogen pada daerah korosi	43
4. 7 Struktur material besi dalam logam cair PbBi dengan inhibitor gas nitrogen pada temperatur 950°C	44

4. 8 Perbandingan kurva koefisien difusi antara sistem simulasi dengan dan tanpa gas nitrogen.....	46
4. 9 Grafik perubahan persentase reduksi korosi terhadap temperatur	47



DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
A. PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DAN ANALISA STRUKTUR BESI PADA SISTEM SIMULASI TANPA GAS NITROGEN.....	56
B. PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DAN ANALISA STRUKTUR BESI PADA SISTEM SIMULASI SETELAH INJEKSI GAS NIROGEN ...	62
C. HASIL UJI EKUILIBRASI SISTEM.....	67

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Dewasa ini pengembangan metode untuk mendapatkan energi dalam jumlah besar dari bahan bakar yang minimalis gencar dilakukan di beberapa negara termasuk Indonesia. Salah satu cara yang efektif dan harus dipertimbangkan untuk diaplikasikan adalah penggunaan bahan bakar nuklir sebagai pembangkit listrik (PLTN). Bahan bakar nuklir dapat diolah dalam suatu reaktor nuklir untuk menghasilkan energi listrik. Terdapat dua kelompok reaktor nuklir berdasarkan kuantitas energi neutron yang dihasilkan, yaitu reaktor termal (*thermal reactor*) dan reaktor nuklir cepat (*fast nuclear reactor*). Reaktor nuklir cepat (*fast nuclear reactor*) mempunyai keunggulan dibanding reaktor termal dalam hal keamanan pengoperasian reaktor.

Sistem operasi reaktor nuklir cepat dirasa lebih aman karena reaktor dapat non aktif secara otomatis dalam keadaan darurat. Di samping itu, selain mempunyai keunggulan, reaktor cepat juga memiliki kekurangan yang salah satunya adalah adanya korosi pada material yang digunakan sebagai selongsong (*cladding*) akibat difusi partikel pada suhu yang sangat tinggi. *Cladding* merupakan bahan pembungkus bahan bakar Uranium pada reaktor nuklir (Sekimoto, 2007). Material *cladding* (umumnya terbuat dari baja yang merupakan campuran dari besi dan karbon) tersebut akan berinteraksi dengan logam cair (logam timbal (Pb) ataupun campuran logam timbal-bismuth (PbBi)) pada suhu tinggi untuk mengalirkan panas yang berasal dari reaksi fisi pada bagian utama reaktor nuklir. Interaksi langsung antara logam cair bersuhu tinggi dan material penyusun *cladding* (pembungkus) dapat dipandang sebagai proses difusi atom-atom material *cladding*. Proses difusi tersebut akan mengakibatkan terjadinya korosi material *cladding*.

Manly (1958) menyatakan bahwa definisi korosi pada material dapat diperluas pada tinjauan kerusakan suatu logam padat yang berinteraksi dengan logam cair pada temperatur tinggi tanpa meninjau atau melibatkan proses transfer elektron ataupun reaksi kimia pada prosesnya. Salah satu parameter acuan yang menunjukkan terjadinya proses korosi logam padat dalam logam cair tersebut adalah koefisien difusi yang juga dipengaruhi oleh temperatur. Hal ini sesuai dengan persamaan Arrhenius yang menunjukkan bahwa koefisien difusi D dapat dinyatakan sebagai fungsi dari temperatur $D(T)$ (Askeland, 2006). Berdasar pada hal tersebut, Arkundato *et al.* (2013) meninjau korosi akibat proses difusi dengan memodelkan besi (unsur penyusun baja) sebagai logam *cladding* yang dikelilingi oleh logam cair timbal-bismut (PbBi) pada temperatur tinggi. Temperatur sistem simulasi divariasikan pada interval temperatur 750°C hingga 1000°C. Hasil yang didapatkan menunjukkan koefisien difusi D besi yang juga menunjukkan laju difusi atom-atom logam padat dalam logam cair mengalami kenaikan seiring dengan kenaikan temperatur.

Sebagai kelanjutan dari penelitian tentang difusi korosi, dilakukan penelitian yang meninjau metode penghambatan difusi korosi yang dikenal dengan proses mitigasi korosi. Mitigasi korosi dilakukan untuk mengembangkan perlindungan terhadap struktur permukaan material *cladding* dengan menciptakan lapisan pelindung yang akan mencegah terjadinya kontak langsung antara material logam dengan logam cair bersuhu tinggi. Lapisan pelindung (oksida logam) tersebut dapat dibentuk dengan menginjeksikan suatu gas pada logam cair. Arkundato *et al.* (2013) juga telah berhasil mendapatkan penurunan besar koefisien difusi D besi (Fe) dalam logam cair bersuhu tinggi setelah dilakukan injeksi gas oksigen untuk upaya mitigasi korosi. Batas maksimum dan minimum konsentrasi gas oksigen yang diinjeksikan pada logam cair timbal-bismut untuk mendapatkan hasil yang optimum juga telah diketahui. Hasil penelitian juga menunjukkan bahwa gas oksigen mampu mereduksi korosi besi dengan baik hingga batas temperatur tertentu.

Kemampuan suatu gas untuk menghambat korosi akibat difusi memungkinkan penelitian lebih lanjut mengenai proses difusi korosi dan penghambatannya dengan

melakukan penggantian gas (selain gas oksigen) inhibitor untuk diinjeksikan pada logam cair menjadi gas nitrogen (N_2). Nitrogen merupakan gas yang terletak dalam periode yang sama dengan gas oksigen pada sistem periodik unsur yang cenderung bersifat lebih stabil dan tidak mudah bereaksi dengan unsur lain. Gas nitrogen juga lebih mudah didapatkan di alam. Penelitian terdahulu yang dilakukan secara eksperimen oleh Purwanto *et al.* (2003) mendapatkan bahwa gas nitrogen yang diinjeksikan dengan teknik plasma mampu membentuk suatu lapisan nitrida besi yang dapat melindungi struktur material suatu logam setelah dipanaskan hingga mencapai suhu $500\text{ }^\circ\text{C}$. Namun, pada penelitian secara eksperimen tersebut proses nitridasi tidak dilakukan dalam lingkungan logam cair melainkan di dalam ruang vakum dengan besar tekanan tertentu yang juga memerlukan tinjauan metode yang berbeda. Pada penelitian yang dilakukan akan dikaji kemampuan gas nitrogen sebagai inhibitor korosi dari suatu sistem simulasi yang terdiri dari logam padat dan logam cair pada temperatur-temperatur tinggi dengan menggunakan metode dinamika molekul (*Molecular Dynamics Method*).

Metode dinamika molekul (*Molecular Dynamics Method*) adalah suatu metode numerik yang dapat digunakan untuk menentukan besaran-besaran fisis suatu sistem fisis melalui simulasi guna memprediksi suatu fenomena fisika seperti proses difusi yang menyebabkan kerusakan berupa korosi. Sistem simulasi yang akan ditinjau dimodelkan terlebih dahulu dalam bentuk model material dan model interaksi atom-atom material. Pada penelitian ini, simulasi korosi logam *cladding* dimodelkan oleh besi (Fe) yang ditempatkan di tengah logam cair timbal-bismut bersuhu tinggi. Interaksi antar atom dapat ditinjau dengan potensial Lennard Jones dan disimulasikan menggunakan metode dinamika molekul. Sebagai upaya pencegahan difusi korosi, gas nitrogen (N_2) akan diinjeksikan ke dalam logam cair PbBi pada sistem simulasi awal (dengan dimensi sel simulasi yang sama) dengan persentase tertentu. Besarnya laju difusi korosi besi D , sebelum dan sesudah injeksi gas nitrogen dapat menunjukkan proses difusi dan daerah temperatur operasi mitigasi korosi.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah yang akan dibahas melalui penelitian adalah:

1. Bagaimana efek perubahan temperatur tinggi pada ketahanan besi (Fe) dalam logam cair terhadap korosi?
2. Bagaimana pengaruh injeksi gas nitrogen terhadap difusi besi dalam logam cair dengan variasi temperatur?
3. Bagaimana daerah temperatur operasi mitigasi korosi bahan besi yang ditentukan setelah injeksi gas nitrogen?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini adalah:

1. Simulasi penelitian dilakukan dengan menggunakan metode *Molecular Dynamicss* dan program *Moldy*.
2. Sistem simulasi sebelum dan setelah injeksi gas inhibitor dimodelkan dalam suatu sel simulasi yang sama berukuran $123 \times 123 \times 123 \text{ \AA}^3$ yang terdiri atas atom besi, logam cair timbal-bismut dan gas nitrogen (N_2) sebagai inhibitor.
3. Interaksi antar atom material yang berkaitan ditinjau dengan potensial Lennard Jones.

1.4 Tujuan

Penelitian dilakukan dengan tujuan:

1. Untuk mengetahui efek perubahan temperatur tinggi pada ketahanan besi (Fe) dalam logam cair terhadap korosi.
2. Untuk mengetahui pengaruh injeksi gas nitrogen terhadap difusi besi dalam logam cair dengan variasi temperatur.
3. Untuk mengetahui daerah operasi mitigasi bahan besi yang diperoleh dalam logam cair sebagai pengaruh dari injeksi gas nitrogen.

1.5 Manfaat

Penelitian ini dalam jangka panjang diharapkan dapat memberikan pengetahuan terhadap perancangan desain reaktor nuklir dengan menggunakan bahan yang tepat dan aman. Selain itu, dapat menambah wawasan mahasiswa tentang proses yang berhubungan dengan material dan simulasi proses yang berkaitan.



BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Atom dan Molekul

Atom adalah penyusun materi yang paduannya akan membentuk molekul. Atom juga biasa disebut dengan unsur. Unsur diklasifikasikan dalam periode dan golongan pada suatu tabel periodik unsur. Periode merupakan deretan unsur yang terletak sebaris pada tabel periodik, sedangkan golongan adalah deretan unsur yang terletak dalam kolom yang sama. Secara garis besar terdapat golongan utama dan golongan transisi. Unsur yang termasuk dalam golongan utama dibedakan menjadi golongan IA hingga VIIIA dan unsur golongan transisi terdiri atas golongan IB hingga VIIIB. Contoh unsur golongan utama adalah natrium (Na), hidrogen (H), nitrogen (N), timbal (Pb), bismuth (Bi) serta unsur lainnya, sedangkan unsur yang mewakili golongan transisi salah satunya adalah besi (Fe) (Chang, 2006).

Suatu molekul dapat terdiri dari dua atom atau lebih, baik dari atom yang sama ataupun berbeda. Molekul unsur adalah molekul yang terdiri atas dua buah atom sejenis atau lebih seperti O_2 , N_2 dan H_2 , sedangkan molekul senyawa adalah molekul yang terbentuk dari gabungan dua atom yang berbeda jenis seperti NaCl, HCl dan FeC. Atom dan molekul yang terlibat pada simulasi dinamika molekul ini adalah besi (Fe), logam cair PbBi dan molekul nitrogen (N_2)

2.1.1 Besi (Fe)

Besi merupakan unsur logam yang memiliki massa atomik 55.847 amu, terletak pada golongan VIIIB dan periode ke empat. Berdasarkan tinjauan struktur kristalnya, besi dapat ditemukan dalam dua struktur yaitu struktur BCC dan FCC dengan konstanta kisi a sebesar 2.861 Å. Kedua struktur kristal tersebut terbentuk pada temperatur yang berbeda, sehingga dapat dikatakan bahwa besi akan mengalami

perubahan struktur jika ditempatkan pada sistem dengan temperatur yang berbeda. Perubahan tersebut dapat dikatakan sebagai perubahan fasa (transformasi struktural) yang disertai dengan perubahan entropi atau sifat fisis lainnya secara mendadak.

Besi yang berada pada temperatur ruangan disebut ferrit atau besi- α yang merupakan besi dengan struktur kristal BCC yang bersifat lunak. Ferrit menunjukkan transformasi menuju austenit FCC atau dikenal dengan besi- γ pada temperatur diatas 911°C . Struktur besi BCC memiliki rongga yang lebih luas daripada struktur FCC (besi- α). Pada temperatur 1394°C struktur FCC austenit akan kembali menjadi struktur BCC yang diketahui sebagai besi- δ sebelum akhirnya meleleh pada temperatur 1536°C (Pepperhoff dan Acet, 2001).

2.1.2 Nitrogen

Unsur nitrogen merupakan unsur golongan VA dengan massa atomik 14.00674 amu yang memiliki titik leleh -209°C . Persenyawaan nitrogen yang tersebar di alam adalah molekul senyawa (diatomik) berupa gas nitrogen (N_2) yang cukup stabil karena termasuk dalam gas inert. Nitrogen memiliki massa dan jari-jari atom yang lebih kecil daripada besi, sehingga memudahkan terjadinya proses difusi (perpindahan molekul gas) saat gas nitrogen mengalami kontak langsung dengan material besi. Difusi atom nitrogen pada pada besi (Fe) selanjutnya dikenal dengan *interstitial diffusion* (Mohalik *et al.*, 2005).

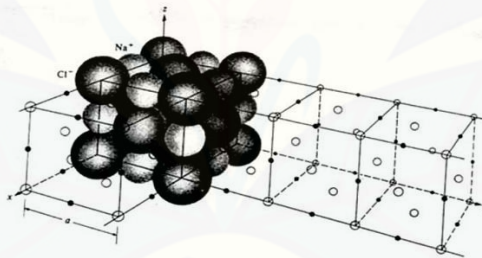
2.1.3 Logam Cair PbBi

Logam cair PbBi atau yang biasa dikenal dengan *liquid Lead-Bismuth Eutectic* (LBE) adalah campuran yang digunakan sebagai penghantar panas yang baik dalam sebuah reaktor nuklir cepat (*fast nuclear reactor*). Campuran logam cair PbBi terdiri atas 44.5 wt% atom timbal (Pb) dan 55.5 wt% atom bismuth (Bi). Timbal (Pb) dan bismuth (Bi) merupakan unsur golongan utama yang terletak pada periode 4 dan golongan IVA untuk timbal (Pb) serta VA untuk bismuth (Bi). Titik didih tinggi

(1943 ± 20 K), titik leleh yang rendah ($396,65 - 398,7$ K) pada tekanan atmosfer normal dan sifat agresifnya yang tinggi terhadap logam padat menjadikan logam cair timbal-bismut sebagai kandidat pendingin yang baik dalam reaktor nuklir (Sobolev, 2007). Selain itu, logam cair PbBi tidak mengalami transformasi struktural yang signifikan seiring dengan kenaikan temperatur (Song *et al.*, 2013).

2.2 Struktur Kristal

Material dapat diklasifikasikan dalam bentuk kristalin, nonkristalin atau campuran dari kedua struktur. Sifat mekanik dari suatu material nantinya bergantung pada struktur material tersebut, yang berhubungan dengan susunan atom-atom, ion-ion atau molekul-molekul yang saling berikatan. Kristal adalah bahan padat dimana atom-atomnya tersusun dalam satu pola yang periodik dalam tiga dimensi. Keteraturan atau kekristalan struktur material hanya terdapat pada material padat, tidak pada gas ataupun cair. Susunan atom yang teratur tersebut dapat digambarkan dengan tiga sumbu sistem koordinat kartesian (x, y, z) seperti gambar:

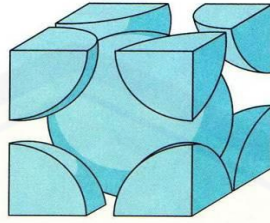


Gambar 2. 1 Struktur kristal dalam 3 dimensi (Sumber: Mangonon, 1999)

Terdapat beberapa jenis struktur Kristal yang umumnya terdapat pada logam, yaitu:

1. Struktur *Body Centered Cubic* (BCC)

Merupakan struktur kristal dimana terdapat satu atom pusat yang utuh di tengah sel satuan dan $1/8$ atom lain terdapat pada tiap-tiap sudut sel satuan, sehingga dalam satu sel satuan BCC terdapat 2 atom. Bilangan koordinasi dari struktur BCC adalah 8. Gambar struktur BCC ditunjukkan pada gambar berikut.



Gambar 2. 2 Struktur kristal BCC (Sumber: Askeland *et al.*, 2010)

Berdasarkan gambar, terlihat bahwa atom-atom inti ion bersentuhan satu sama lain sepanjang diagonal ruang. Hubungan panjang sisi Kristal BCC, a (Å) dan jari-jari atomnya R (Å), diberikan dalam:

$$a = \frac{4R}{\sqrt{3}} \quad (2.1)$$

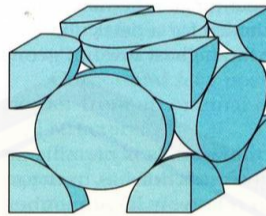
a juga biasa dikenal sebagai konstanta kisi yang berbeda untuk tiap unsur. Besar *atomic packing factor* (APF) dari struktur BCC dapat ditentukan dari:

$$APF = \frac{\text{Volume atom-atom dalam sel satuan}}{\text{volume sel satuan}} \quad (2.2)$$

yang menghasilkan angka sebesar 68%, berarti bahwa 68% dari volume sel satuan BCC ditempati oleh atom-atom dan sisanya sebesar 32% merupakan ruang kosong, sehingga dapat dikatakan bahwa struktur BCC bukan merupakan struktur yang padat (Talbot dan David, 1998).

2. Struktur *Face Centered Cubic* (FCC)

Merupakan struktur Kristal yang mempunyai $1/2$ atom pusat pada semua sisi kubus dan $1/8$ atom pada setiap titik sudut kubus. Jumlah atom total pada satu sel satuan FCC adalah 4 dengan 8 buah $1/8$ atom pada masing-masing titik sudut sel satuan. Struktur kristal berbentuk kubus (termasuk BCC dan FCC) mempunyai besar vektor translasi \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 dan \mathbf{a}_3 yang sama. Atom-atom atau inti ion bersentuhan satu sama lain sepanjang diagonal sisi yang ditunjukkan dalam Gambar 2.3.



Gambar 2. 3 Struktur Kristal FCC (Sumber: Askeland *et al.*, 2010)

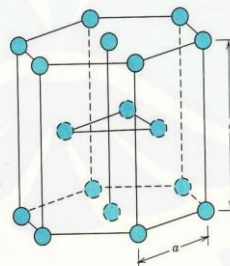
Hubungan konstanta kisi a (Å), dengan jari-jari atomnya R (Å), ditunjukkan oleh persamaan:

$$a = 2R\sqrt{2} \quad (2.3)$$

yang berbeda-beda untuk setiap unsur yang ditinjau. Sementara itu, bilangan APF suatu logam dengan struktur FCC adalah 74%, yang menandakan bahwa struktur FCC lebih rapat dibandingkan struktur BCC.

3. Struktur *Hexagonal Closed Packed* (HCP)

Gambar berikut menunjukkan struktur HCP yang mempunyai bilangan koordinasi 12 dan atom-atomnya tersusun cukup padat. Satu sel satuan HCP terdiri dari 6 atom yang diperoleh dari jumlah $1/6$ atom pada 12 titik sudut lapisan atas dan bawah serta dua atom pada pusat lapisan atas dan 3 atom pada lapisan sela.



Gambar 2. 4 Struktur kristal HCP (Sumber: Askeland *et al.*, 2010)

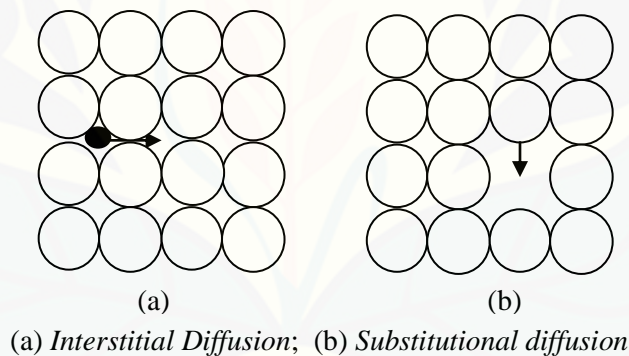
Struktur HCP mempunyai besar APF yang sama dengan struktur FCC, yaitu 74%. Perbedaan yang dimiliki oleh struktur HCP dengan struktur kristal kubus (BCC dan FCC) adalah adanya besaran c dan a , c adalah parameter kisi yang

menyatakan besar vektor translasi \mathbf{a}_3 dari struktur kristal, sedangkan besar vektor translasi \mathbf{a}_1 dinyatakan oleh a (Å) (Kittel, 2005).

2.3 Difusi dan Korosi

2.3.1 Proses Difusi

Askeland *et al.* (2010) menyatakan bahwa secara umum difusi dapat diartikan sebagai fluks atau aliran dari beberapa ion, atom-atom, elektron atau molekul. Besar fluks yang mengalir bergantung pada gradien (perbedaan konsentrasi) dan juga temperatur. Proses difusi juga berkaitan erat dengan struktur kristal dari material. Ketika atom-atom dari suatu material mengalami perpindahan maka struktur kristal material akan mengalami perubahan (cacat kristal). Atom dapat berpindah untuk mengisi kekosongan dalam suatu kisi, ataupun melewati *grain boundary* sehingga menyebabkan adanya pergeseran *grain boundary* tersebut.



Gambar 2. 5 Mekanisme difusi (Campbell, 2008)

berdasarkan Gambar 2.5 mekanisme difusi terdiri atas dua macam, yaitu *interstitial* dan *substitutional diffusion*. Keduanya dibedakan berdasarkan perbandingan antara jari-jari (ukuran) atom yang berdifusi terhadap jari-jari atom matriks awal. *Interstitial diffusion* terjadi apabila ukuran atom yang berdifusi sangat kecil dibandingkan ukuran atom matriks. Oleh karena itu, tidak terjadi perubahan pada struktur kristal akibat difusi yang terjadi. Jika ukuran atom yang berdifusi sama besarnya dengan ukuran atom matriks maka prosesnya dikenal dengan *substitutional diffusion*.

Kemampuan suatu atom untuk berdifusi meningkat seiring bertambahnya temperatur, yaitu ketika energi termal yang didapatkan oleh atom atau molekul meningkat. Hubungan antara difusi dan temperatur ditunjukkan oleh persamaan Arrhenius berikut:

$$D(T) = D_0 \exp\left(-Q/RT\right) \quad (2.4)$$

Keterangan : D = koefisien difusi dalam (cm^2/s) atau (m^2/s),

D_0 = konstanta

T = temperatur T (K)

R = konstanta gas ($1.987 \frac{\text{cal}}{\text{mol.K}}$)

Q = energi aktivasi (cal/mol) atau (J/mol)

Energi aktivasi merupakan energi ambang yang harus dimiliki suatu atom untuk dapat berpindah dengan kecepatan tertentu. Besar energi aktivasi merupakan selisih energi potensial yang harus dimiliki oleh atom agar dapat meloncat atau berpindah pada sisi lain dengan melewati daerah di bawah pengaruh energi potensial maksimum (Campbell, 2008). Energi aktivasi yang rendah menandakan semakin mudah terjadi proses difusi. Ketika temperatur dari material meningkat, koefisien difusi D juga meningkat. Energi termal akan mendorong atom untuk melewati energi ambang pada temperatur tinggi, sedangkan pada temperatur rendah (hingga mencapai 0.4 kali titik leleh material), proses difusi akan menjadi lambat atau bahkan atom tidak dapat melewati energi ambang untuk berpindah.

Setiap atom atau molekul yang mengalami pergerakan dari posisi awal $\vec{r}_i(0)$ dalam waktu t menuju posisi $\vec{r}_i(t)$ akan memiliki kuadrat rata-rata pergerakan (*mean square displacement*) sebesar:

$$MSD = \langle |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2 \rangle \quad (2.5)$$

Sementara itu, besarnya koefisien difusi atom dalam tiga dimensi adalah sebesar:

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} dt \langle \vec{v}_i(t) \cdot \vec{v}_0(t) \rangle \quad (2.6)$$

$\vec{v}_i(t)$ adalah kecepatan pusat massa dari partikel tunggal, dan relasi Einstein yang berhubungan dengan persamaan koefisien difusi tersebut adalah:

$$2tD = \frac{1}{3} \langle |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2 \rangle \quad (2.7)$$

$$D = \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2t} \langle |\vec{r}_i(t) - \vec{r}_i(0)|^2 \rangle \quad (2.8)$$

$$D = \frac{1}{6t} MSD \quad (2.9)$$

Sehingga dapat diketahui bahwa besarnya koefisien difusi D didapatkan dari kuadrat rata-rata pergerakan atom sebagai fungsi waktu (Allen dan Tildesley, 1987).

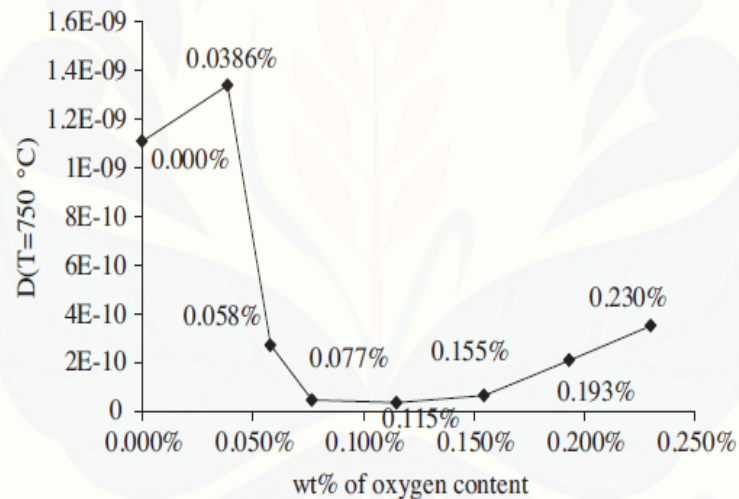
2.3.2 Korosi Akibat Proses Difusi

Evans (dalam Manly, 1958) menyatakan bahwa korosi merupakan kerusakan material logam akibat reaksi kimia atau elektrokimia. Berdasarkan definisi tersebut, korosi melibatkan proses transfer elektron tertentu. Sementara itu, pada tinjauan korosi yang terjadi dalam logam cair, definisi korosi diperluas menjadi kerusakan logam padat akibat kelarutan logam padat di dalam logam cair. Kelarutan logam padat menunjukkan adanya proses difusi dari atom-atom logam padat menuju logam cair yang dapat dipengaruhi oleh beberapa faktor. Faktor-faktor yang mempengaruhi proses difusi tersebut adalah temperatur, perubahan temperatur, fluktuasi siklus temperatur, impuritas pada logam cair serta rasio antara luas permukaan logam padat terhadap volume dari logam cair yang berinteraksi (Manly, 1958).



Gambar 2. 6 Korosi pada logam padat akibat proses difusi (Sumber: Niu *et al*, 2014)

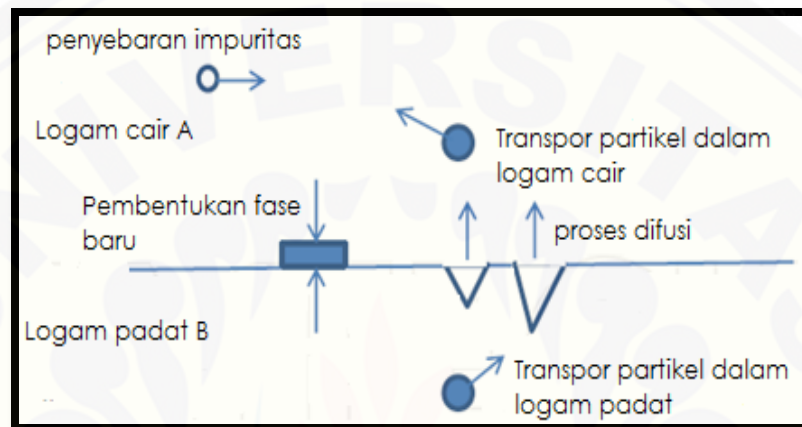
Contoh visual dari kerusakan logam padat akibat korosi dalam logam cair tertera pada Gambar 2.6. Gambar tersebut menunjukkan korosi yang terjadi pada bagian dalam pipa logam akibat aliran logam cair timbal-bismut pada interval temperatur 395°-520°C (Niu *et al.*, 2014).



Gambar 2. 7 Koefisien difusi besi (Fe) dalam logam cair timbal-bismut untuk berbagai variasi konsentrasi gas O₂ (Sumber: Arkundato *et al.*, 2013)

Tinjauan korosi dalam logam cair akibat difusi atom-atom logam padat dapat terukur dengan besarnya koefisien difusi D dari material logam padat. Koefisien difusi D merupakan parameter yang menunjukkan laju difusi dari atom. Semakin besar nilai koefisien difusi D maka semakin cepat dan besar peluang terjadinya korosi pada logam padat dan sebaliknya. Pada Gambar 2.7, ditunjukkan sebuah grafik

sebagai interpretasi dari hubungan antara besar koefisien difusi D terhadap konsentrasi gas inhibitor (wt%) dalam proses pencegahan korosi akibat difusi dengan injeksi gas oksigen ke dalam logam cair. Proses injeksi suatu gas inhibitor ke dalam logam cair untuk menghambat korosi yang terjadi pada logam padat dijabarkan pada gambar 2.8.



Gambar 2. 8 Skema proses yang terlibat dalam difusi korosi dan pencegahannya (Sumber: Czerwinski, 2014)

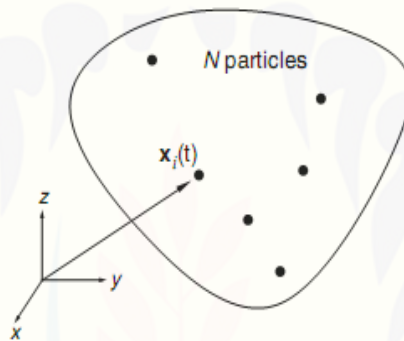
Secara umum, proses yang berkaitan dengan pengendalian korosi logam padat akibat difusi adalah transpor atom dalam logam padat, reaksi yang terjadi pada bidang batas antara logam padat dan logam cair serta transpor atom pengotor pada logam cair. Pembentukan fase atau senyawa baru akibat reaksi yang terjadi antara atom pengotor dan atom logam padat pada bagian struktur permukaan merupakan salah satu reaksi yang dapat terjadi pada permukaan bidang batas.

2.4 Dinamika Molekul

Dinamika molekul adalah metode simulasi yang meninjau pergerakan molekul-molekul yang saling berinteraksi. Interaksi antar molekul dapat berupa tarikan, tolakan ataupun tumbukan satu sama lain yang bersifat deterministik. Jika keadaan materi atau atom diketahui pada waktu tertentu, maka keadaan materi pada keadaan setelahnya dapat diketahui secara tepat. Sistem yang diamati adalah sistem

tertutup dimana jumlah materi (molekul) dalam sistem tidak berubah. Namun, saat simulasi energi dapat keluar masuk sistem.

Sistem adalah suatu kuantitas materi yang dimodelkan untuk diamati, sedangkan materi diluar sistem disebut lingkungan. Materi yang terdapat dalam sistem dapat berupa sejumlah N partikel atau atom dengan kondisi awal dan syarat batas tertentu. Trayektori pergerakan N partikel sepanjang suatu jangka waktu tertentu didapatkan dengan integrasi numerik dari persamaan gerak Newton dengan potensial antar atom yang spesifik (Li, 2005).



Gambar 2. 9 Sistem sebagai kumpulan N partikel (Sumber: Li, 2005)

Haile (1992) mengatakan bahwa metode dinamika molekul secara garis besar mencakup dua hal yaitu:

1. Pengembangan Model

Pembuatan dan pengembangan model sistem dilakukan sebagai persiapan awal simulasi. Model interaksi antar molekul dilakukan apabila terjadi interaksi antara molekul satu dan lainnya sehingga terjadi pergerakan yang memenuhi persamaan gerak tertentu. Selain itu, antara sistem dan lingkungan juga berinteraksi yang dikendalikan dengan pengendalian tekanan dan juga temperatur sistem.

2. Simulasi Dinamika Molekul

Metode dinamika molekul mengomputasikan trayektori dari suatu koleksi molekul yang mengikuti suatu persamaan gerak untuk selanjutnya mengetahui informasi makroskopis sistem melalui analisis hasil simulasi. Secara analisis,

solusi dari persamaan gerak yang berbentuk persamaan differensial orde kedua didapat dengan melakukan integrasi dua kali dari waktu 0 ke waktu t untuk mendapatkan kecepatan dan posisi. Proses simulasi dengan menggunakan komputer dibagi menjadi tahap inialisasi, tahap ekuilibrium dan tahap produksi.

2.5 Mekanika Klasik

Simulasi dengan metode Dinamika Molekul meninjau pergerakan molekul yang sesuai dengan ketiga hukum Newton:

1. Suatu partikel akan tetap dalam keadaan setimbang atau bergerak dengan kecepatan konstan saat resultan gaya yang bekerja padanya bernilai nol.
2. Jika partikel dengan massa m (kg) bergerak dengan percepatan tertentu akan menerima gaya \vec{F} sebesar:

$$m_i \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = F_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i} \quad (2.10)$$

dengan $i = 1, \dots, N$, x adalah koordinat yang menyatakan posisi partikel dan U dalam Joule adalah energi potensial. Suku kanan pada Hukum kedua Newton adalah dasar simulasi yang membutuhkan waktu lebih banyak pada proses simulasi.

3. Jika partikel i memberikan gaya pada partikel j sebesar \vec{F}_{ij} , maka partikel j itu akan memberikan gaya pada partikel i sebesar $-\vec{F}_{ij}$ yang dituliskan dalam:

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} \quad (2.11)$$

Tanda negatif menunjukkan arah gaya yang berlawanan (Witoelar, 2002).

2.5.1 Algoritma Integrasi Waktu

Tinjau persamaan Newton untuk satu satuan massa partikel:

$$\ddot{x} = f(x) \quad (2.12)$$

notasi dot menunjukkan differensial terhadap waktu yang sesuai dengan persamaan gerak Newton. Persamaan gerak tersebut harus diselesaikan guna mendapatkan

trayektori dari pergerakan molekul. Penyelesaian yang dimaksud adalah integrasi numerik yang dapat berupa Algoritma Störmer orde keempat (orde algoritma didasarkan dari nilai eror) yang ditemukan oleh Verlet adalah:

$$x_{n+1} = 2x_n - x_{n-1} + a_n h^2 \quad (2.13)$$

a_n adalah percepatan saat *timestep* ke n , h adalah *stepsize* dan x menyatakan posisi berdasarkan sistem koordinat yang digunakan. Algoritma selanjutnya yang diperkenalkan oleh Hockney dan Eastwood adalah algoritma leapfrog, dituliskan dalam:

$$v_{n+\frac{1}{2}} = v_n + a_n h \quad (2.14)$$

$$x_{n+1} = x_n + v_{n+\frac{1}{2}} h \quad (2.15)$$

$v_{n+\frac{1}{2}}$ adalah kecepatan saat tengah *step*. Swope et al. menuliskan algoritma kecepatan Verlet:

$$x_{n+1} = x_n + v_n \left(v_n + a_n \frac{h}{2} \right) h \quad (2.16)$$

$$v_{n+1} = v_n + \left(a_n + a_{n+1} \frac{h}{2} \right) h \quad (2.17)$$

Selain itu, terdapat algoritma lain yang dapat digunakan untuk menyelesaikan integrasi waktu simulasi Dinamika molekul yaitu:

$$x_{n+1} = x_n + v_n h + v_n \left(\frac{2}{3} a_n + \frac{1}{6} a_{n-1} \right) h^2 \quad (2.18)$$

$$v_{n+1} = v_n + \left(\frac{1}{3} a_{n+1} + \frac{5}{6} a_n - \frac{1}{6} a_{n-1} \right) h \quad (2.19)$$

yang dikenal dengan algoritma Beeman (Beeman, 1976). Algoritma Beeman adalah algoritma integrasi yang dapat mencapai tingkat akurasi yang lebih baik dibandingkan algoritma integrasi lainnya.

Refson (1985) memodifikasi algoritma Beeman untuk mendapatkan hasil dengan tingkat akurasi yang lebih baik dengan asumsi bahwa gaya yang ditinjau bergantung pada posisi dan juga kecepatan. Formulasi modifikasi algoritma Beeman

menggunakan simbol x untuk mewakili variabel dinamika gerak (koordinat pusat massa), $\dot{x}^{(p)}$ dan $\dot{x}^{(c)}$ sebagai “*predicted velocity*” dan “*corrected velocity*” yang ditunjukkan dalam:

$$x(t + \delta t) = x(t) + \delta t \dot{x}(t) + \frac{\delta t^2}{6} [4\ddot{x}(t) - \ddot{x}(t - \delta t)] \quad (2.20)$$

$$\dot{x}^{(p)}(t + \delta t) = \dot{x}(t) + \frac{\delta t}{2} [3\ddot{x}(t) - \ddot{x}(t - \delta t)] \quad (2.21)$$

$$\ddot{x}(t + \delta t) = F(\{x_i(t + \delta t), \dot{x}_i^{(p)}(t + \delta t)\}, i = 1 \dots n) \quad (2.23)$$

$$\dot{x}^{(c)}(t + \delta t) = \dot{x}(t) + \frac{\delta t}{6} [2\ddot{x}(t + \delta t) + 5\ddot{x}(t) - \ddot{x}(t - \delta t)] \quad (2.24)$$

$$\text{Ubah } \dot{x}^{(p)} \text{ dengan } \dot{x}^{(c)} \text{ dan ulangi langkah iii} \quad (2.25)$$

simbol δt memiliki fungsi yang sama dengan h yaitu menyatakan *stepsize*. Siklus prediktor – korektor dari langkah iii hingga v diiterasikan hingga $\dot{x}^{(p)}$ dan $\dot{x}^{(c)}$ mencapai angka presisi yang baik (Refson, 2001).

2.6 Interaksi Antar Atom (Molekul)

Pada dasarnya atom-atom saling berinteraksi melalui gaya van der Waals dan gaya elektrostatis. Ketika atom-atom berikatan secara kovalen, gaya yang mengikatnya adalah gaya kuat sehingga membentuk gugus kimia yang stabil. Secara matematis energi potensial sistem molekuler terdiri dari enam jenis interaksi, yaitu:

$$U = V_{LJ} + V_{EL} + V_{BS} + V_{AB} + V_{PT} + V_{IT} \quad (2.26)$$

Interaksi V_{LJ} adalah potensial Lennard-Jones, V_{EL} adalah energi potensial listrik, energi yang muncul akibat atom-atom yang terikat secara kovalen V_{BS} , *angle-bending energy* V_{AB} didasari atas kumpulan atom dengan ikatan ovalen yang membentuk suatu sudut yang stabil, V_{PT} dan V_{IT} adalah *proper* dan *improper torsional energies*. Interaksi yang digunakan pada simulasi dinamika molekul hanya jenis interaksi pada suku pertama, V_{LJ} , adalah potensial Lennard-Jones yang berupa gaya tarik menarik

pada jarak jauh dan gaya tolak menolak pada jarak dekat (Xie, tanpa tahun). Secara eksplisit, potensial Lennard-Jones dituliskan:

$$U(r_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^m \right] \quad (2.27)$$

n dan m adalah bilangan bulat positif dimana $n > m$.

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (2.28)$$

i dan j adalah indeks dari molekul, $r_{ij} = |r_i - r_j|$ atau jarak antara molekul i dan j . Variabel ε (eV) adalah parameter yang menunjukkan kekuatan interaksi dan σ (Å) adalah parameter jarak (Haile, 1992). Interaksi antar atom yang tak sejenis (atom A dan atom B) dihitung berdasarkan persamaan yang dituliskan oleh Brodholt dan Wood (1993):

$$\sigma_{AB} = (\sigma_{AA} + \sigma_{BB})/2 \quad (2.29)$$

$$\varepsilon_{AB} = \sqrt{\varepsilon_{AA} + \varepsilon_{BB}} \quad (2.30)$$

keterangan:

σ_{AA} , ε_{AA} = parameter potensial interaksi antar atom A

σ_{BB} , ε_{BB} = parameter potensial interaksi antar atom B

Daftar besar parameter ε dan σ untuk unsur besi (Fe), timbal (Pb), bismuth (Bi) dan nitrogen (N) ditunjukkan pada berikut:

Tabel 2. 1 Daftar Parameter Potensial

Pasangan Atom Interaksi	ε (eV)	σ (Å)
Fe-Fe	0.4007	2.3193
Pb-Pb	0.1910	3.1888
Bi-Bi	0.0590	3.0500
N-N	0.0085	3.6560
Fe-Pb	0.2766	2.7540
Fe-Bi	0.1538	2.6846
Pb-Bi	0.1061	3.1194
Fe-N	0.0584	2.9876

Pasangan Atom Interaksi	ϵ (eV)	σ (Å)
Pb-N	0.0403	3.4224
Bi-N	0.0224	3.353

Beberapa parameter yang dicantumkan dalam Tabel 2.1 dirujuk dari jurnal yang berbeda, yaitu:

1. Interaksi Fe-Fe dan Pb-Pb (Zhen dan Davies, 1983).
2. Interaksi N-N (Lemon dan Jacobsen, 2004).
3. Interaksi Bi-Bi (Belashchenko dan Ostrovskii, 2006)

Li (2005) menyatakan bahwa terdapat beberapa hal yang perlu diperhatikan pada potensial Lennard Jones, yaitu:

1. $U(r = \sigma) = 0$, adalah titik dimana terjadi gaya tolak-menolak antar molekul atau antar atom, berarti bahwa ketika $U'(r = \sigma) < 0$, kedua atom akan saling menjauh satu sama lain.
2. Besarnya potensial terendah terjadi pada $r_{min} = 2^{1/6}\sigma$ dan $U_{min} = -\epsilon$, sedangkan interaksi tolak-menolak akan menjadi saling tarik-menarik saat $r > r_{min}$.
3. Saat $r \rightarrow \infty$, $U(r)$ terjadi gaya tarikan yang akan meluruh saat r^{-6} , sedangkan saat $r \rightarrow 0$, hingga (r^{-12}), $U(r)$ akan menyebabkan atom-atom saling tolak menolak.

Perhitungan gaya-gaya yang terjadi antar molekul adalah proses yang relatif lama dalam simulasi dinamika molekul sehingga perlu diadakan pemotongan potensial dengan jarak *cutoff* R_c . Interaksi antar atom yang berjarak lebih besar dari R_c dapat diabaikan. Persamaan yang menunjukkan adanya jarak *cutoff* R_c pada atom-atom yang berinteraksi dengan potensial Lennard-Jones adalah:

$$U(r_{ij}) = \begin{cases} k\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^m \right] & r_{ij} \leq R_c \\ 0 & r_{ij} > R_c \end{cases} \quad (2.31)$$

Berdasarkan persamaan, interaksi atom ke $-i$ dan atom ke $-j$ akan diasumsikan nol ketika jarak antar atom tersebut melebihi besarnya jarak cutoff R_c (Haile, 1992).

2.7 Program Aplikasi

Program aplikasi yang digunakan untuk proses simulasi dinamika molekul serta program pendukung untuk analisis hasil simulasi adalah:

2.7.1 *Moldy*

Moldy adalah program aplikasi yang digunakan untuk proses simulasi dinamika molekul dari suatu material yang terkondensasi, seperti pembentukan molekul poliatomik padat, atom, ion ataupun campuran keduanya. Simulasi sistem molekular yang dijalankan berdasarkan asumsi bahwa gaya atau interaksi yang bekerja antar atom atau molekul diturunkan dari fungsi potensial berlanjut pada tiap atom atau molekul yang bersesuaian dengan persamaan gerak Newton-Euler.

Moldy dapat dijalankan dari jendela terminal pada komputer berbasis *Unix (tm)*, jendela perintah pada *Windows* atau melalui jendela *MS DOS* pada *Windows 95/NT*. Perintah yang dituliskan mempunyai dua buah argumen yang opsional dan bergantung pada nama *file* yang telah tersimpan pada direktori yang digunakan yaitu nama dari *control file* dan nama *file* hasil keluaran. Terdapat dua *file* yang perlu dipersiapkan untuk memulai simulasi dengan program *Moldy* yaitu *control file* dan *file* spesifikasi sistem. Keduanya saling berkaitan karena nama *file* spesifikasi yang digunakan harus tercantum pada *control file* agar model sistem yang terbaca dan yang akan disimulasikan sesuai (Refson, 2001).

2.7.2 OVITO

Ovito adalah software yang dapat digunakan untuk proses visualisasi data-data ilmiah untuk simulasi atomik skala besar dalam disiplin ilmu material. Salah satu fungsi software OVITO yang digunakan adalah *Common Neighbour Analysis (CNA)* untuk analisis struktur kristal dari material yang ditinjau. Parameter yang berpengaruh terhadap analisis CNA adalah *cutoff radius* yang menunjukkan atom atau pasangan partikel yang masih termasuk dalam tetangga terdekat (*nearest neighbour*). Partikel atau atom yang terletak pada jarak yang lebih dekat dibandingkan *cutoff radius* dapat

dikatakan terikat dengan atom yang ditinjau. Hasil analisis CNA dengan software OVITO adalah informasi tentang struktur kristal yang dibedakan dalam struktur FCC (*face centered cubic*), HCP (*Hexagonal closed-packed*), BCC (*Body-centered cubic*), ICO (*Icosahedral coordination*) dan DIA (*Cubic Diamond Structure*) (Stukowski, 2015).



BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilakukan pada bulan April 2015 – selesai yang bertempat di Laboratorium Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

3.2 Alat Penelitian

Alat yang digunakan pada penelitian adalah:

1. Komputer dengan spesifikasi

Prosesor : Intel (R) core (TM) i5-3470 CPU @ 3.20GHz 3.60GHz,

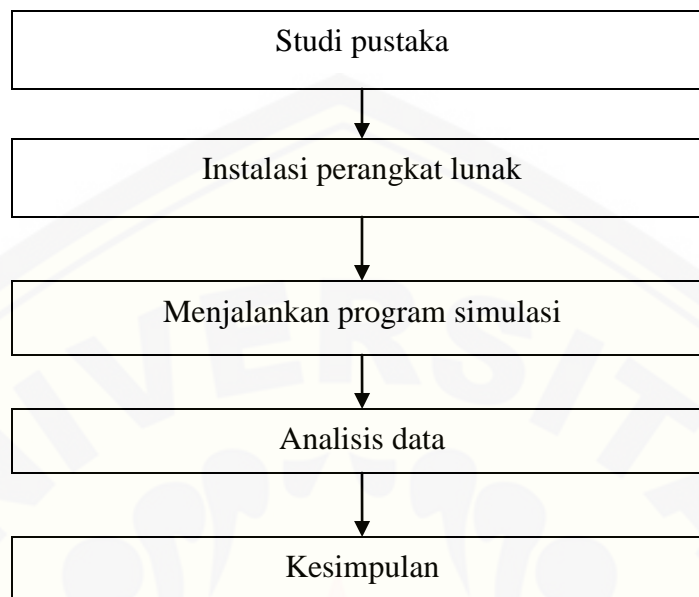
Memori : 4.00 GB (3.90 GB dapat digunakan)

Sistem Operasi : *Windows* dan *Linux Ubuntu*

2. Program aplikasi yang digunakan untuk simulasi *Molecular Dynamic* adalah *Moldy* dan *OVITO*.

3.3 Diagram Alir Penelitian

Sesuai dengan permasalahan yang dikemukakan dan tujuan yang ingin dicapai melalui penelitian yang dilakukan, maka secara umum runtutan kegiatan penelitian dilakukan seperti ditunjukkan Gambar 3.1.

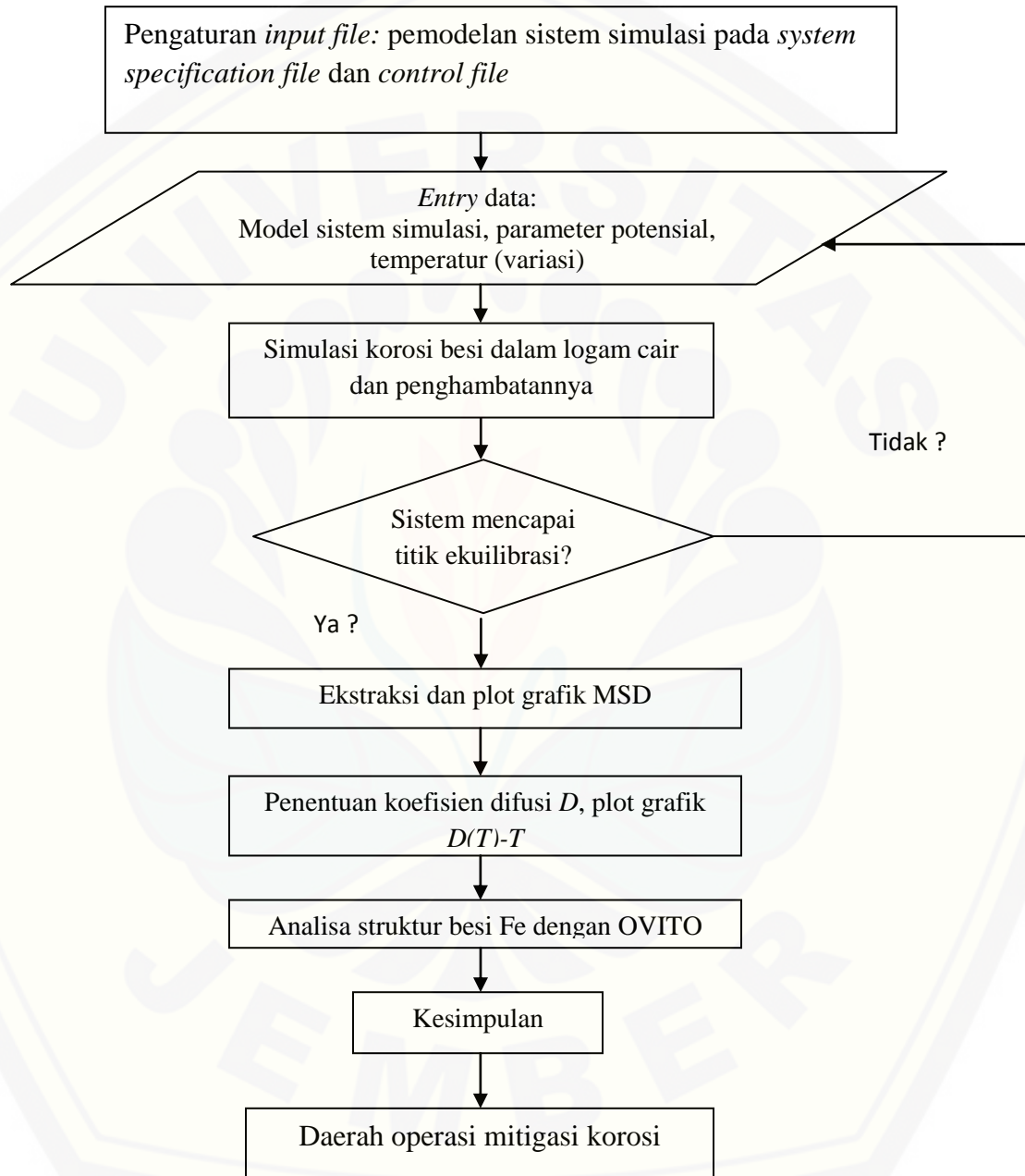


Gambar 3. 1 Diagram alir penelitian

Ketahanan besi terhadap korosi dalam logam cair, pengaruh injeksi gas nitrogen terhadap korosi serta daerah operasi mitigasi korosi besi dengan gas nitrogen dapat ditentukan dari koefisien difusi besi D dalam logam cair timbal-bismut. Koefisien difusi D serta kebergantungannya terhadap temperatur $D(T)$ dihasilkan dari pengolahan hasil simulasi dinamika molekul berdasarkan penyelesaian persamaan gerak Newton.

Kegiatan simulasi dimulai dengan memodelkan besi dalam bentuk logam padat, timbal dan bismut sebagai campuran dari bahan logam cair serta gas nitrogen dalam suatu sistem simulasi. Pemodelan dilakukan dengan mengatur posisi atom-atom dari bahan dalam koordinat tertentu, parameter-parameter potensial yang digunakan serta temperatur sistem simulasi. Variasi temperatur untuk sistem simulasi besi dalam logam cair timbal-bismut dilakukan pada interval yang berbeda dengan sistem simulasi yang disertai oleh injeksi gas nitrogen. Pada masing-masing sistem simulasi dengan temperatur yang berbeda, akan didapatkan hasil yang berbeda pula. Selanjutnya, selain nilai koefisien difusi besi dalam logam cair dengan dan tanpa gas

nitrogen, juga akan didapatkan visualisasi struktur besi setelah simulasi dilakukan untuk masing-masing temperatur. Secara garis besar, keseluruhan proses simulasi dapat dilihat pada gambar 3.2.



Gambar 3. 2 Diagram alir kegiatan simulasi

Berdasarkan diagram alir simulasi, secara garis besar tahapan simulasi yang dilakukan adalah:

1. Input simulasi yang disiapkan adalah *system specification file* dan *control file*. *Control file* adalah *file* yang berisi pilihan besaran-besaran yang berpengaruh terhadap keadaan sistem seperti temperatur T (K), tekanan P (atm), kerapatan ρ (gr/mL) serta parameter lain yang mengatur proses dan hasil keluaran simulasi. Sedangkan, *system specification file* adalah *file* yang berisi posisi atom dan potensial.
2. Entry data temperatur pada *control file* dan model sistem simulasi serta parameter potensial pada *system specification file*
3. Simulasi dijalankan dengan menggunakan model sistem yang telah disiapkan dalam *control file* dan *system specification file*. Sistem awal yang ditinjau terdiri dari logam besi Fe yang diletakkan di tengah logam cair timbal-bismuth PbBi, selanjutnya simulasi dilanjutkan dengan menginjeksikan gas nitrogen N pada logam cair timbal-bismuth PbBi.
4. Uji ekuilibrisasi sistem setelah simulasi dilakukan untuk mengetahui keadaan sistem hasil simulasi. Simulasi dilanjutkan ketika sistem telah mencapai ekuilibrisasi.
5. Perhitungan MSD dilakukan dari hasil simulasi yang didapatkan. Selanjutnya nilai MSD dari logam besi (Fe) direpresentasikan dalam grafik terhadap waktu simulasi untuk mendapatkan koefisien difusi D .
6. Perhitungan koefisien difusi D yang bergantung terhadap temperatur berdasarkan persamaan Arrhenius.
7. Analisis struktur besi (Fe) dengan visualisasi hasil simulasi dan CNA (*Common Neighbour Analysis*)

3.3.1 Pengaturan *Input File*

Simulasi dengan menggunakan metode dinamika molekul yang dijalankan dengan program *Moldy* membutuhkan dua *file* masukan yaitu *control file* dan *system specification file*.

a. *System Specification File*

System specification file adalah *file* yang berisi informasi tentang atom serta posisinya dan potensial interaksi yang digunakan untuk meninjau interaksi antar molekul. Informasi atom dan yang dicantumkan adalah massa atom, muatan, konstanta kisi dari kristal yang terbentuk dari atom yang ditinjau serta posisi atom-atom dalam *xyz*.

1. Model Sistem Simulasi

Simulasi awal yang dijalankan adalah sistem yang terdiri dari material besi (Fe) yang diletakkan di tengah logam cair timbal-bismut (Pb-Bi). Logam besi dimodelkan terdiri atas 10745 atom yang tersusun menjadi 17 x 17 x 17 kristal berstruktur bcc. Konstanta kisi dari kristal bcc material besi adalah 2,826 Å. Logam cair yang digunakan sebagai pendingin dalam reaktor nuklir tersusun dari 18309 (45 wt%) atom timbal (Pb) dan 22376 (55 wt%) atom bismut (Bi). Material pembungkus bahan bakar nuklir yang diwakili oleh logam besi (Fe) dan logam cair timbal-bismut (PbBi) dimodelkan dalam suatu kubus atau sel simulasi berukuran 123x123x123 Å³ dengan besi Fe ditempatkan di tengah logam cair PbBi. Selanjutnya, simulasi penghambatan (mitigasi) korosi melibatkan 340 atom (0,0562wt%) Nitrogen yang diinjeksikan pada sistem awal.

2. Parameter Potensial

Interaksi antar atom-atom ditinjau dengan potensial Lennard-Jones yang memiliki dua parameter potensial sebagai masukan yaitu ϵ (eV) dan σ (Å). Daftar

parameter potensial untuk atom besi (Fe), timbal (Pb), bismuth (Bi) dan nitrogen (N) sesuai dengan referensi yang tercantum pada Tabel 2.1.

b. Control File

Control file adalah masukan yang berisi beberapa parameter masukan untuk menentukan keadaan awal sistem dan mengendalikan jalannya simulasi. Parameter masukan pada *control file* dapat diatur ulang saat sistem belum mencapai keadaan setimbang (ekuilibrasi). Beberapa parameter masukan yang digunakan dalam simulasi penghambatan korosi besi dalam logam cair dengan injeksi gas nitrogen ditunjukkan dalam tabel 3.1.

Tabel 3. 1 Data Masukan pada *Control file*

Nama	Nilai	Fungsi
<i>Temperature</i>	Variasi	Temperatur konfigurasi awal
<i>Pressure</i>	0	Tekanan eksternal yang diberikan pada sistem
<i>Begin-dump</i>	60000	Timestep awal proses penyalinan hasil simulasi
<i>Dump-interval</i>	1000	Frekuensi pencetakan hasil proses penyalinan
<i>Step</i>	0,0001, 0,00005	Lamanya waktu tiap timestep (ps)
<i>Nstep</i>	160000	Jumlah proses integrasi numerik yang dijalankan

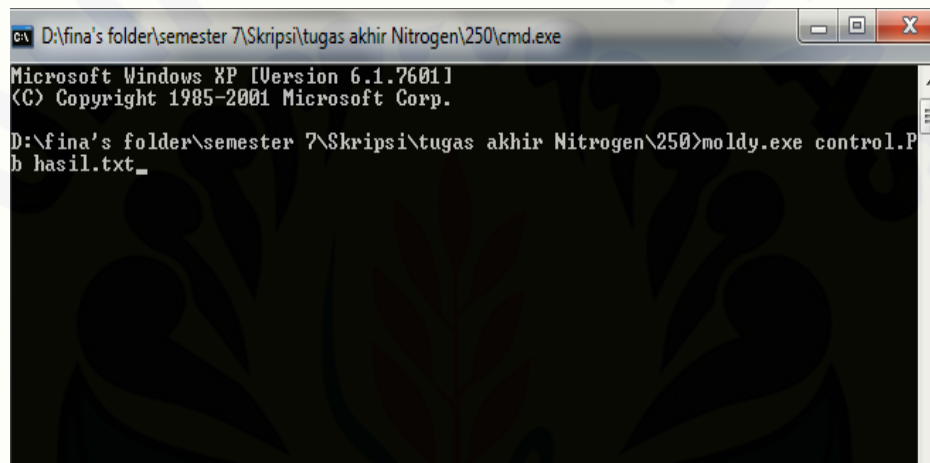
(Sumber: Refson, 2001)

3.3.2 Simulasi Korosi Besi dalam Logam Cair dan Penghambatannya

Simulasi korosi besi dalam logam cair beserta penghambatannya dilakukan dengan program moldy. Langkah-langkah yang dilakukan untuk memulai simulasi adalah:

1. Konfigurasi awal sistem ditentukan terlebih dahulu dalam *control file* dan *system specification file*.

2. Pada *control file* dituliskan nama input *file* yang telah dibuat pada masukan “sys-spec-*file*”.
3. Temperatur dari konfigurasi awal sistem sebagai variabel bebas divariasikan pada interval 625°C (898 K)-1000°C (1273 K) untuk sistem simulasi awal dan 650°C (873K)-1000°C (1273K) untuk sistem simulasi setelah proses injeksi gas nitrogen.
4. Simulasi dijalankan dengan menuliskan perintah panggilan pada jendela cmd “*moldy.exe namacontrolfile.txt namafilehasil.txt*”



```
cmd D:\fina's folder\semester 7\Skripsi\tugas akhir Nitrogen\250\cmd.exe
Microsoft Windows XP [Version 6.1.7601]
(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

D:\fina's folder\semester 7\Skripsi\tugas akhir Nitrogen\250>moldy.exe control.P
b hasil.txt_
```

Gambar 3. 3 Diagram alir penelitian

3.3.3 Uji Ekuilibrasi Sistem

Ekuilibrasi sistem merupakan keadaan yang harus dicapai pada sistem agar simulasi dapat dilanjutkan. Energi potensial sistem merupakan salah satu parameter acuan dari uji ekuilibrasi sistem. Sistem dapat dikatakan mencapai keadaan setimbang (memenuhi keadaan ekulibrasi) jika besar energi potensial sistem untuk setiap waktu simulasi bersifat stabil atau berkisar pada interval besaran tertentu. Besar energi potensial sistem didapatkan melalui ekstraksi hasil simulasi. Langkah yang dilakukan untuk mengetahui tingkat ekuilibrasi sistem adalah:

1. Jendela cmd dibuka untuk menjalankan program moldy. Perintah yang dituliskan adalah “*moldyext.exe -f 1,4 -(nama file hasil simulasi)*”.

2. Hasil keluaran direpresentasikan dalam grafik yang menyatakan hubungan antara energi sistem pada sumbu vertikal dan rentang waktu simulasi dimulai dari *timestep* 0 hingga 160000 dengan *step* 0,0001 pada sumbu horisontalnya.

3.3.4 Ekstraksi Mean Square Displacement

Penentuan nilai *Mean Square Displacement* logam besi (Fe) dilakukan dengan proses ekstraksi pada hasil yang didapatkan dari simulasi. Proses ekstraksi dilakukan pada komputer berbasis Linux. Perintah yang dituliskan pada jendela terminal adalah:

1. `pwd` : untuk mengetahui direktori yang sedang bekerja
2. `ls` : untuk melihat daftar *file* yang terdapat pada direktori kerja
3. `cd` : untuk mengubah direktori pada direktori lain yang akan digunakan
4. Jika telah berada pada folder yang berisi berkas hasil simulasi maka dituliskan perintah:

```
msd [-s system-specification | -r restart-file] [-d dump-file-format] [-t dump-range] [-m msd-time-range] [-o output-file ]
```
5. Interval dari dump range dimulai dari step ke 60000 hingga 160000 yang bersesuaian dengan step yang mencapai kesetimbangan pada uji ekuilibrasi langkah sebelumnya.
6. Hasil MSD akan muncul dalam folder yang sama sesuai dengan nama dan format *file* (.txt) yang diinginkan.

3.3.5 Penentuan Koefisien Difusi (*D*)

Koefisien difusi dari logam besi dapat diketahui dari data hasil MSD dengan langkah-langkah sebagai berikut:

1. *File* hasil dalam format (.txt) diolah menggunakan program microsoft office Excell.
2. Data nilai MSD logam besi (Fe) direpresentasikan dalam bentuk grafik terhadap waktu simulasi untuk setiap variasi temperatur yang digunakan. Derajat kerniringan (*gradien*) grafik ditentukan.

3. Nilai koefisien difusi D ditentukan berdasarkan gradien grafik hubungan perubahan nilai MSD terhadap perubahan waktu simulasi untuk setiap variasi temperatur.

3.3.6 Analisis Struktur Besi dengan OVITO

Analisis struktur besi dilakukan setelah proses simulasi guna membandingkan hasil simulasi mitigasi korosi besi dalam logam cair tanpa dan dengan gas nitrogen (N_2). Melalui analisa struktur besi, dapat diketahui persentase jumlah atom yang tidak atau pun mengalami kerusakan setelah simulasi. Langkah-langkah yang dilakukan untuk analisis struktur besi adalah:

1. Instalasi program OVITO yang diunggah dari situs resmi www.ovito.org.
2. Ekstraksi data posisi atom dalam koordinat xyz sebagai hasil proses simulasi dari *dump file* dengan perintah:

```
mdavpos [-r restart_ file] [-c] [-f xyz] [-d dump_ file-format] [-t dump-range] [-m msd-time-range] [-o output_ file]
```
3. Data posisi dipilih untuk unsur yang akan dianalisis strukturnya dan disalin pada *file* baru dengan format *.txt* sebagai *file* yang akan diimport pada program OVITO.
4. Jendela OVITO diaktifkan dan digunakan menu *File, import local file*, lalu pilih *file* yang telah disimpan pada langkah 3.
5. Analisis struktur besi didapatkan dengan analisis CNA (*Common Neighbour Analysis*) pada menu *add modification*.
6. Hasil akhir yang didapatkan berupa data struktur kristal besi (Fe) dan juga gambar tiga dimensi dari atom-atom besi (Fe) yang disimpan dengan menu *render active viewport*.

3.4 Metode Analisis

Analisa ketahanan besi terhadap korosi dalam logam cair serta pengaruh dari injeksi gas nitrogen dalam proses mitigasi korosi dilakukan dengan membandingkan kurva MSD serta besarnya koefisien difusi besi D dalam logam cair dari dua keadaan simulasi, yaitu simulasi yang dijalankan dengan dan tanpa gas nitrogen sebagai

inhibitor. Sementara itu, perbandingan grafik $D(T)-T$ yang dihasilkan dapat digunakan dalam penentuan daya reduksi yang menunjukkan daerah operasi mitigasi korosi besi dalam logam cair dengan gas nitrogen.

3.4.1 Pembuatan Kurva MSD dan Penentuan Koefisien Difusi D

Grafik yang diperoleh dari hubungan antara *mean square displacement* (MSD) dan waktu simulasi merupakan trayektori pergerakan atom-atom besi (Fe) dalam logam cair timbal-bismut baik sebelum dan setelah dilakukan injeksi gas Nitrogen. Selanjutnya, melalui trayektori pergerakan atom-atom setelah simulasi tersebut, korosi yang terjadi pada logam Fe dapat diselidiki dari besarnya koefisien difusi (D). Semakin besar nilai koefisien difusi D besi dalam logam cair, maka semakin besar pula peluang terjadinya korosi pada besi. Persamaan yang digunakan sebagai dasar dari penentuan nilai koefisien difusi (D) dari grafik hubungan antara nilai MSD dan waktu simulasi t adalah:

$$\langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle = 6Dt \quad (3.1)$$

dengan

$$\langle |\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)|^2 \rangle = MSD \quad (3.2)$$

sehingga, diketahui bahwa:

$$D = \frac{\Delta MSD}{\Delta t} \times \frac{1}{6} \quad (3.3)$$

D pada persamaan 3.1 dan 3.3 adalah nilai koefisien difusi dalam m^2/s , $\mathbf{r}(t)$ dan $\mathbf{r}(0)$ menunjukkan posisi atom atau molekul sebagai fungsi waktu saat t dan mula-mula, t (s) adalah rentang waktu simulasi saat nilai MSD (\AA^2) ditentukan pada hasil simulasi dan $\frac{\Delta MSD}{\Delta t}$ adalah gradien grafik yang terbentuk.

3.4.2 Pembuatan grafik $D(T)$ - T

Bentuk umum persamaan Arrhenius dituliskan dalam:

$$D(T) = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{RT}\right) \quad (3.4)$$

$D(T)$ adalah koefisien difusi yang bergantung pada temperatur $T(K)$, sehingga D_0 adalah koefisien difusi dari suatu unsur saat temperatur 0°C (273 K). Selanjutnya, persamaan koefisien difusi tersebut dinyatakan dalam bentuk logaritma, yaitu:

$$\ln D = \ln D_0 - \frac{Q}{RT} \quad (3.5)$$

Q pada persamaan 3.4 dan 3.5 merupakan energi aktivasi (kalori, joule) dan R adalah konstanta gas. Persamaan 3.5 merupakan persamaan linier yang dapat direpresentasikan dalam bentuk grafik hubungan antara $\log D$ pada sumbu vertikal dan $1/T$ pada sumbu horisontalnya.

Hasil D_0 (m^2/s) didapatkan dari nilai konstanta persamaan garis dan Q (kalori / Joule) merupakan nilai gradien grafik pada Gambar 3.5. Nilai D_0 dan energi aktivasi Q tersebut selanjutnya digunakan untuk mendapatkan $D(T)$ sesuai persamaan 3.4 yang juga dapat direpresentasikan dalam bentuk grafik.

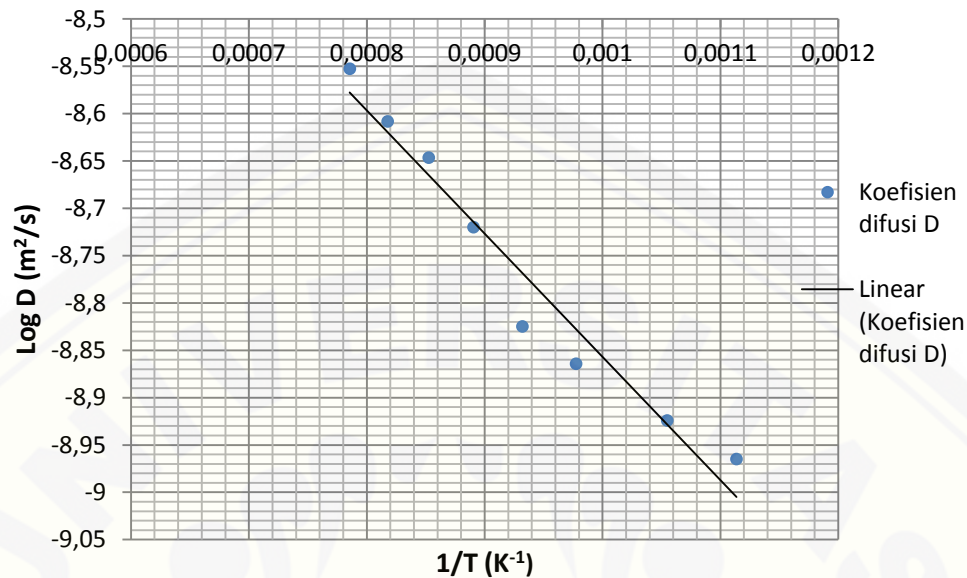
Besarnya D ataupun $D(T)$ untuk besi dalam logam cair akan menunjukkan perbedaan saat simulasi berjalan dengan dan tanpa injeksi gas nitrogen. Perbandingan grafik dari keduanya dapat menunjukkan pengaruh injeksi gas nitrogen dalam bentuk persentase reduksi korosi. Persentase reduksi korosi merupakan persentase kemampuan gas nitrogen dalam mereduksi korosi yang bergantung terhadap temperatur. Berdasar pada daya reduksi korosi yang diperoleh, daerah operasi mitigasi korosi dapat ditentukan sebagai fungsi terhadap temperatur pula.

BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Salah satu acuan untuk menentukan hasil simulasi dengan metode dinamika molekul yang didapatkan adalah kesetimbangan energi sistem selama proses simulasi berlangsung dalam waktu simulasi yang telah ditentukan. Waktu simulasi pada penelitian yang meninjau korosi logam padat dalam logam cair dan mitigasinya dengan inhibitor nitrogen adalah 16 ps dengan *step* 0,0001 untuk setiap *timestep*nya. Berdasarkan hasil simulasi yang dilakukan, keadaan ekuilibriasi atau kesetimbangan energi sistem dicapai setelah 60000 hingga 160000 *timestep* simulasi baik untuk sistem simulasi sebelum ataupun setelah injeksi gas inhibitor yang ditunjukkan pada lampiran C. Pencapaian keadaan setimbang sistem menandakan bahwa pengukuran dan perhitungan selanjutnya yang melibatkan hasil simulasi dapat dilanjutkan untuk menentukan nilai koefisien difusi logam padat dalam logam cair serta daerah mitigasinya berdasarkan temperatur dengan inhibitor nitrogen.

4.1 Difusi Korosi Besi dalam Logam Cair pada Temperatur Tinggi

Simulasi yang dilakukan untuk mengetahui proses korosi besi (unsur dasar penyusun baja) sebagai logam padat yang diletakkan di dalam logam cair timbal-bismut (PbBi) pada temperatur tertentu menunjukkan bahwa bahwa kenaikan temperatur akan meningkatkan laju difusi korosi besi. Laju difusi korosi yang dinyatakan oleh koefisien difusi besi D mengalami perubahan seiring berubahnya temperatur sistem yang ditunjukkan pada gambar 4.1 berikut.



Gambar 4. 1 Grafik hubungan antara Log D dan 1/T dari simulasi besi dalam logam cair timbal-bismut

Gambar 4.1 menunjukkan hubungan antara log D yang mengalami penurunan seiring kenaikan 1/T (dengan T dalam Kelvin) dengan kebergantungan koefisien difusi D terhadap temperatur T yang diperoleh adalah:

$$D(T)_{(0.00wt\%)} = 2,791 \times 10^{-8} \exp \{(-2999,98/T)\} \quad (4.1)$$

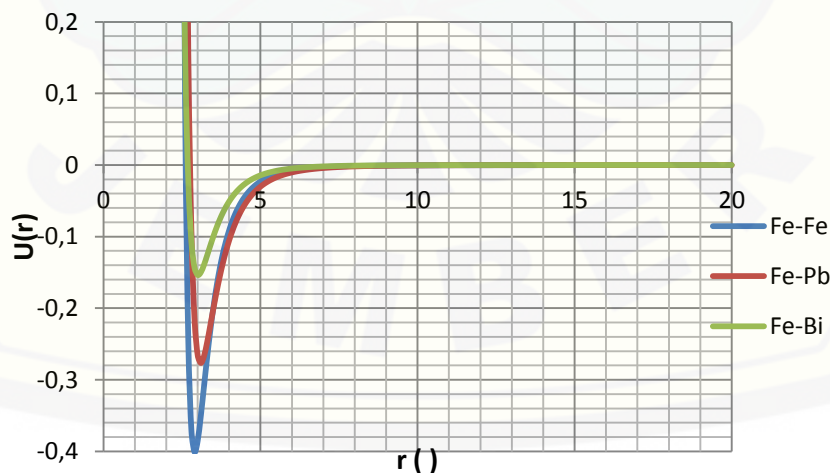
Sementara itu, penelitian terdahulu Arkundato et al. (2013) melakukan simulasi dengan jenis atom yang sama yaitu besi dalam logam cair timbal-bismut, namun dengan ukuran sel simulasi dan jumlah atom logam cair yang berbeda menghasilkan $D(T)$ besi dalam logam cair timbal-bismut yang dinyatakan dalam:

$$D(T)_{(0.00wt\%)} = 5,280 \times 10^{-8} \exp \{(-2340,18/T)\} \quad (4.2)$$

Persamaan 4.1 dan 4.2 menunjukkan selisih yang diduga diakibatkan oleh adanya perbedaan ukuran sel simulasi. Perbedaan sel simulasi memungkinkan adanya perbedaan jumlah atom logam cair timbal-bismut karena pada simulasi dinamika molekul, perhitungan suatu besaran fisis didasarkan pada perhitungan rata-rata dari setiap atom dalam sistem yang ditinjau. Berdasarkan persamaan 4.1 dihasilkan besar

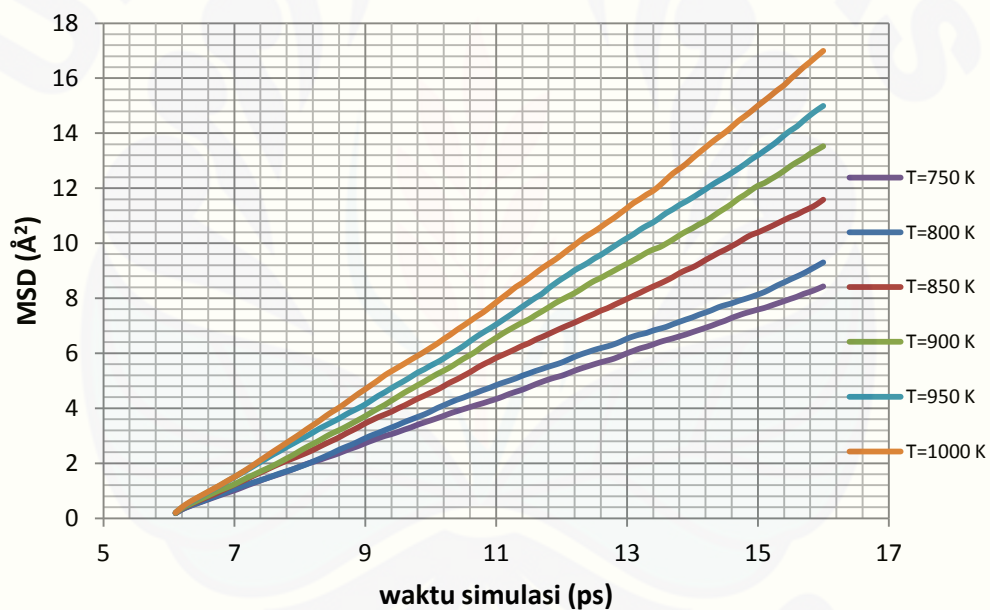
energi aktivasi yang rendah dan menunjukkan bahwa atom material besi (Fe) mudah mengalami perpindahan saat diletakkan di tengah logam cair timbal-bismut (PbBi). Semakin mudah atom berpindah maka semakin mudah pula proses difusi korosi terjadi. Atom besi (Fe) yang tersusun dalam suatu kisi kristal dan diasumsikan berada dibawah pengaruh potensial Lennard-Jones (akibat interaksi dengan atom lainnya), akan menerima energi yang berasal dari kenaikan temperatur dan interaksi dengan logam cair timbal-bismut. Jika energi yang diterima melebihi energi aktivasi (potensial) yang mengikatnya, energi tersebut berubah menjadi energi kinetik hingga atom mulai bergerak dari posisi awal.

Asumsi interaksi Lennard-Jones saat simulasi menitikberatkan pada tinjauan interaksi yang terjadi pada atom besi (Fe). Beberapa interaksi yang terjadi pada atom Fe adalah interaksi antara atom Fe dengan atom Fe lainnya (Fe-Fe), atom besi dengan atom timbal (Fe-Pb) serta atom besi dengan atom bismut (Fe-Bi). Kuat interaksi antara atom Fe-Pb dan Fe-Bi bernilai lebih kecil dibandingkan dengan kuat interaksi antar atom Fe. Namun, atom Fe yang terletak pada bagian struktur permukaan cenderung tertarik atau berinteraksi dengan atom Pb dan Bi yang menyebabkan perpindahan atom dan kerusakan struktur kristal material besi. Interaksi antar atom selama simulasi yang ditinjau dengan interaksi potensial Lennard-Jones dijelaskan dalam gambar berikut:



Gambar 4. 2 Interaksi Potensial Lennard-Jones antar atom dalam sistem simulasi

Pada Gambar 4.2 kuat interaksi antara atom Fe-Fe, Fe-Pb dan Fe-Bi ditunjukkan oleh kedalaman lengkungan grafik yang berturut-turut bernilai 0,4007, 0,2766 dan 0,1538 eV. Sebagai akibat dari interaksi Fe-Pb dan Fe-Bi, atom-atom Fe yang berada pada bagian permukaan besi mulai berdifusi dan menyebar dalam skala luasan tertentu. Luas rata-rata yang dicakup oleh difusi atom-atom Fe dinyatakan oleh *Mean Square Displacement* (MSD). Luasan tersebut akan mengalami perubahan sesuai dengan perubahan waktu. Variasi temperatur sistem yang dilakukan saat simulasi juga mempengaruhi besarnya MSD karena semakin tinggi temperatur sistem, semakin besar energi kinetik atom Fe dan semakin luas pula daerah persebaran difusinya.

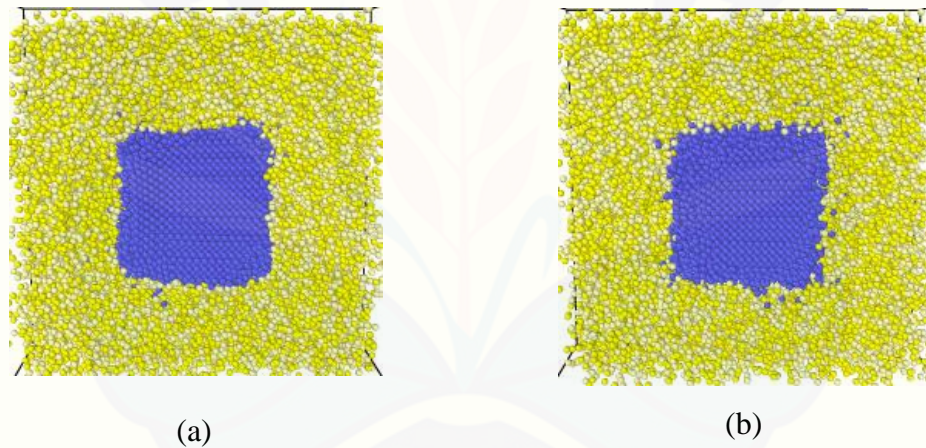


Gambar 4. 3 Kurva MSD besi dalam logam cair timbal-bismut dengan perlakuan variasi temperatur

Berdasarkan Gambar 4.3 diketahui bahwa kurva MSD yang terbentuk dari hasil simulasi dengan temperatur 1000°C, pada waktu simulasi yang sama, memiliki interval luasan yang lebih besar dibandingkan kurva MSD besi dalam logam cair pada temperatur yang lebih rendah. Setelah simulasi berjalan selama 16 ps, nilai MSD atom-atom Fe pada temperatur 1000°C adalah 16,944 Å², sedangkan pada

temperatur yang lebih rendah yaitu 750°C dihasilkan nilai MSD yang lebih rendah pula yaitu $8,425 \text{ \AA}^2$. Nilai MSD juga akan mengalami kenaikan seiring bertambahnya waktu simulasi yang dijalankan. Jika meninjau salah satu kurva MSD pada temperatur 1000°C , diketahui bahwa luasan awal rata-rata (MSD) yang ditempuh oleh atom-atom Fe setelah $0,1 \text{ ps}$ adalah $0,2072 \text{ \AA}^2$. Pada waktu simulasi yang lebih lama yaitu 8 ps ,

atom-atom Fe memiliki nilai MSD atau cakupan luasan pergerakan rata-rata yang lebih besar yaitu $3,0631 \text{ \AA}^2$. Bertambahnya nilai MSD terhadap setiap perubahan waktu menandakan bahwa atom-atom Fe bergerak dari posisi awalnya seiring perubahan waktu simulasi dan juga kenaikan temperatur. Hal tersebut telah sesuai dengan hasil yang didapatkan oleh Arkundato *et al.* (2013) yang juga menunjukkan kecenderungan kenaikan nilai MSD yang sama untuk setiap perubahan temperatur.



Gambar 4. 4 Sistem simulasi yang terdiri atas besi dan logam cair timbal-bismut pada temperatur (a) 750°C ; (b) 1000°C

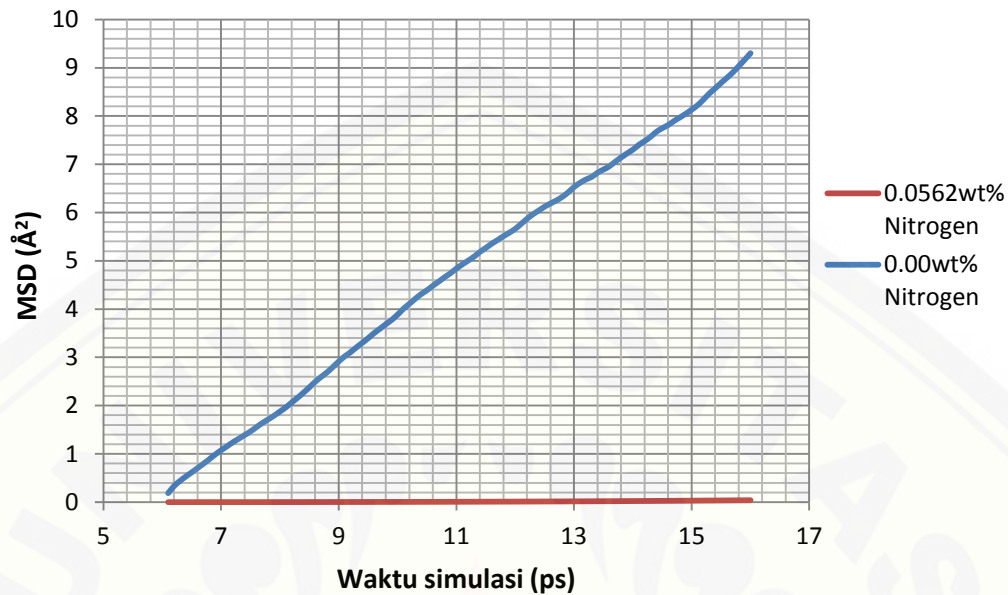
Gambar 4.4 a dan 4.4 b menunjukkan hasil simulasi dan analisa struktur dari sebuah sistem yang terdiri dari atom Fe, Pb dan Bi. Atom-atom Fe ditandai dengan warna biru, sedangkan atom-atom yang mengelilinginya merupakan atom Pb dan Bi yang berada dalam fase cair. Berdasarkan hasil analisa struktur material besi pada temperatur 750°C (Gambar 4.4 a), terdapat 587 atom berbentuk kristal bcc, 1461 atom yang mengalami perubahan struktur kristal menjadi fcc serta 6197 atom

mengalami kerusakan. Pada temperatur yang lebih tinggi yaitu 1000°C (Gambar 4.4b), didapatkan bahwa jumlah atom yang mengalami kerusakan semakin bertambah menjadi 8796 atom dan tersisa 400 atom yang bertahan pada struktur awalnya yaitu bcc. Secara lebih lengkap, presentase jumlah kristal dan visualisasi struktur besi setelah simulasi dapat dilihat pada lampiran A.1.

Berdasarkan analisa struktur kristal besi, jumlah atom kristal yang mengalami kerusakan akan semakin bertambah seiring kenaikan temperatur dari sistem. Atom-atom Fe yang mengalami perubahan struktur kristal merupakan atom yang terletak pada struktur permukaan material besi. Kenaikan temperatur menyebabkan kenaikan jumlah atom Fe pada struktur permukaan yang mengalami perubahan struktur serta merusak ketahanan besi terhadap korosi seperti yang ditunjukkan dalam lampiran A.2. Perubahan struktur kristal dari atom Fe tersebut menandakan terjadinya proses difusi akibat rendahnya ketahanan besi terhadap korosi apabila ditempatkan dalam logam cair, sehingga dapat dikatakan bahwa difusi korosi bahan padat di dalam lingkungan cair dengan suhu tinggi merupakan salah satu mekanisme korosi yang tidak melibatkan transfer elektron atau reaksi kimia pada prosesnya. Hasil yang didapatkan untuk setiap kenaikan temperatur sesuai dengan pernyataan Manly (1958) yaitu terdapat beberapa faktor yang mempengaruhi difusi korosi bahan padat (logam padat) dalam lingkungan cair (logam cair) yaitu temperatur, kemurnian logam cair serta kondisi struktur permukaan dari logam padat.

4.2 Efek Injeksi gas Nitrogen terhadap Difusi Korosi Besi dalam Logam Cair

Berdasar pada hasil penelitian diketahui bahwa injeksi gas nitrogen pada sistem simulasi awal mempengaruhi laju difusi besi dalam logam cair. Besaran yang dijadikan acuan untuk mengetahui pengaruh tersebut adalah MSD, koefisien difusi serta struktur material besi yang ditinjau. Hal tersebut dapat dilihat dari perbandingan kurva MSD besi sebelum dan setelah gas Nitrogen diinjeksikan.



Gambar 4. 5 Perbandingan kurva MSD sistem simulasi sebelum dan setelah injeksi gas nitrogen pada temperatur 800°C

Gambar 4.5 menunjukkan bahwa cakupan luasan sebaran atom-atom Fe dalam sistem yang diinjeksikan gas Nitrogen ke dalamnya, memiliki nilai yang lebih kecil dibandingkan dengan simulasi yang dilakukan tanpa injeksi gas nitrogen. Terdapat perbedaan yang signifikan diantara keduanya. Pada simulasi sistem tanpa inhibitor gas nitrogen, atom-atom material besi mengalami perubahan besar MSD dimulai dari 0 hingga 9,299 Å setelah 16 ps simulasi, sedangkan pada sistem dengan inhibitor gas nitrogen didalamnya hanya mengalami perubahan besar MSD sebesar 0,038 Å selama rentang waktu simulasi yang sama. Setelah dilakukan injeksi gas nitrogen, berdasarkan kurva MSD yang ditunjukkan pada gambar 4.5 diketahui bahwa atom-atom Fe tidak dapat bergerak bebas atau berpindah terlalu jauh dari posisi awal. Hal tersebut menandakan bahwa terjadi peningkatan energi aktivasi atom Fe akibat interaksi yang terjadi antara atom-atom Fe pada bagian struktur permukaan dengan gas Nitrogen yang diinjeksikan. Analisa lanjutan dari perubahan besar MSD terhadap

waktu dari sistem dengan inhibitor nitrogen menghasilkan persamaan yang menunjukkan kebergantungan koefisien difusi D terhadap temperatur T berikut:

$$D(T)_{(0.0562wt\%)} = 1,65 \times 10^{-9} \exp \{(-5521,3/T)\} \quad (4.3)$$

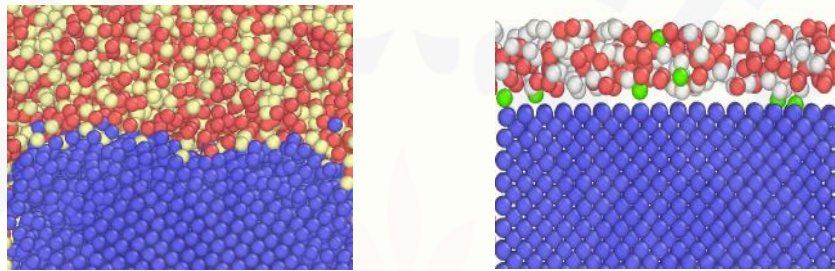
Persamaan 4.1 dan 4.3 merupakan persamaan yang mendasari penentuan nilai koefisien difusi besi dalam logam cair timbal-bismut sebelum dan setelah injeksi nitrogen. Pada temperatur 1023 K yang setara dengan 750°C nilai koefisien difusi besi pada sistem simulasi awal (besi dalam logam cair timbal bismut) dan sistem simulasi setelah injeksi gas nitrogen secara berurutan adalah $1,487 \times 10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ dan $7,49 \times 10^{-12} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$. Penurunan koefisien difusi besi dalam logam cair yang didapatkan dari persamaan 4.1 dan 4.3 menunjukkan penghambatan korosi besi dalam logam cair akibat proses difusi sebagai pengaruh dari injeksi gas nitrogen. Penelitian terdahulu dari Arkundato *et al.* (2013) memodelkan mitigasi korosi besi dalam logam cair dengan inhibitor oksigen yang menemukan bahwa inhibitor oksigen dapat menghambat korosi secara optimum dengan konsentrasi berat sebesar 0,0768wt% atau sebanyak 450 atom oksigen dengan 20027 atom timbal dan 24979 atom bismut. Persamaan koefisien besi dalam logam cair timbal bismut yang didapatkan dari pemodelan tersebut sebagai fungsi temperatur $D(T)$ yaitu:

$$D(T)_{(0.0768wt\%)} = 5,32 \times 10^{-7} \exp \{(-5981,1/T)\} \quad (4.4)$$

Persamaan 4.3 dan 4.4 menunjukkan bahwa dapat dihasilkan nilai koefisien difusi besi dalam logam cair D yang berbeda pada temperatur T yang sama. Perbedaan nilai koefisien difusi yang dihasilkan dari proses mitigasi korosi dengan inhibitor nitrogen dan oksigen dapat disebabkan oleh adanya perbedaan jumlah atom logam cair yang digunakan atau menunjukkan kemampuan reduksi korosi yang berbeda dari keduanya.

Pada simulasi yang dilakukan, merujuk pada Gambar 2.8, atom pengotor yang dimaksud adalah gas nitrogen dan logam padat yang digunakan adalah besi. Injeksi gas nitrogen memungkinkan terjadinya pembentukan lapisan tipis nitrida

sebagai hasil dari reaksi antara atom-atom pengotor yang diinjeksikan dan atom logam padat pada bagian permukaan bidang batas seperti yang ditunjukkan oleh Gambar 2.8 guna melindungi besi dari korosi yang diakibatkan oleh proses difusi. Berdasarkan hasil penelitian Purwanto *et al.* (2003) secara eksperimen, gas nitrogen yang diinjeksikan dengan teknik plasma pada permukaan lapisan baja akan berdifusi mengisi ruang kosong dalam kisi kristal untuk membentuk senyawa baru dengan atom-atom material besi.



(a)

(b)

Gambar 4. 6 Struktur mikroskopik besi, timbal-bismut dan nitrogen pada daerah korosi (a) sistem simulasi tanpa gas nitrogen; (b) sistem simulasi dengan gas nitrogen

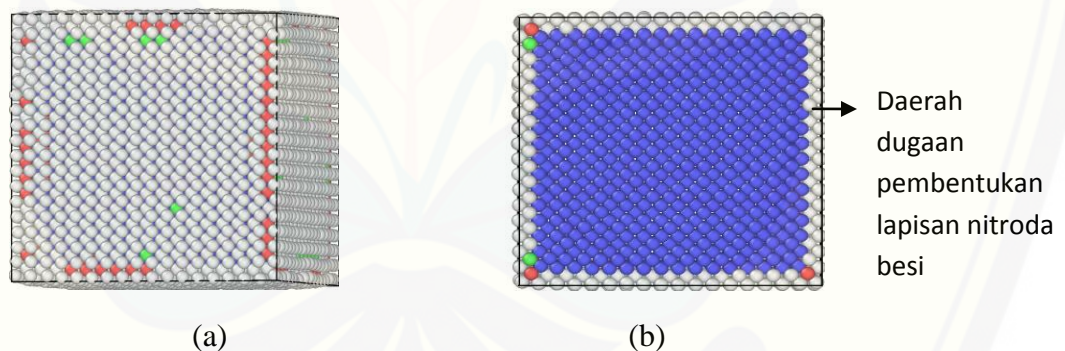
Berdasarkan penelitian Purwanto *et al.* (2003) juga diketahui penampang lapisan nitrida pada besi diketahui akan terbentuk dengan sempurna pada bagian struktur permukaan setelah 1-3 jam waktu penelitian berlangsung. Lapisan nitrida yang terbentuk akibat penyerapan gas nitrogen pada permukaan besi tersebut adalah lapisan nitrida besi atau senyawa Fe_4N . Senyawa yang terbentuk mempunyai fase padat dan bersifat keras serta tahan korosi. Arkundato *et al.* (2013) pada penelitian sebelumnya juga menyatakan bahwa inhibitor gas oksigen juga memiliki kecenderungan untuk bergerak menuju struktur permukaan besi untuk membentuk lapisan oksida Fe_3O_4 untuk melindungi struktur material besi.

Penampang daerah korosi yang ditunjukkan pada Gambar (4.6a), terdiri atas besi yang dimodelkan dalam warna biru, logam cair PbBi dalam warna merah dan putih serta gas nitrogen dalam warna hijau. Simulasi mitigasi korosi akibat difusi

dalam gambar dilakukan pada temperatur 950 °C. Dapat diketahui bahwa gas nitrogen yang diinjeksikan pada logam cair, cenderung bergerak mendekati struktur permukaan besi dan memisahkan besi dengan logam cair (Gambar 4.6b).

Kecenderungan pergerakan molekul nitrogen menuju atom-atom besi diasumsikan sebagai awal proses pembentukan lapisan nitrida besi melalui proses *interstitial diffusion* sesuai dengan hasil penelitian Purwanto *et al.* (2003). Sudjatmoko *et al.* (2010) menyatakan bahwa waktu nitridasi pada proses nitridasi ion secara eksperimen mempengaruhi pembentukan lapisan nitrida besi. Semakin lama waktu nitridasi maka semakin banyak atom nitrogen yang berdifusi kedalam struktur material logam yang digunakan untuk menghasilkan lapisan senyawa nitrida atau zona difusi. Berdasar pada hal tersebut, waktu simulasi yang dijalankan selama 16 ps diasumsikan belum cukup untuk menghasilkan lapisan nitrida besi yang sempurna pada struktur permukaan material besi.

Visualisasi struktur kristal material besi sebelum dan setelah injeksi gas nitrogen dapat menunjukkan perbedaan yang ditunjukkan oleh gambar berikut:



Gambar 4. 7 Struktur material besi dalam logam cair PbBi dengan inhibitor gas nitrogen pada temperatur 950 °C: (a) Struktur material besi tampak luar; (b) penampang lintang bagian dalam struktur material besi

Gambar 4.7 terdiri atas dua gambar yaitu Gambar 4.7a yang menunjukkan struktur kristal besi secara utuh dan Gambar 4.7b yang menunjukkan irisan lintang struktur kristal besi pada bagian tengah. Perbedaan warna atom pada masing-masing gambar menunjukkan perbedaan struktur kristal pada material besi. Atom-atom Fe dengan struktur kristal bcc berada pada bagian tengah (atom berwarna biru) yang

dikelilingi oleh atom dengan struktur kristal yang berbeda (atom berwarna putih, merah dan hijau). Analisa struktur kristal dari atom-atom besi pada beberapa variasi temperatur dijelaskan pada tabel 4.1.

Tabel 4. 1 Struktur kristal atom besi dalam logam cair timbal-bismut setelah injeksi gas nitrogen

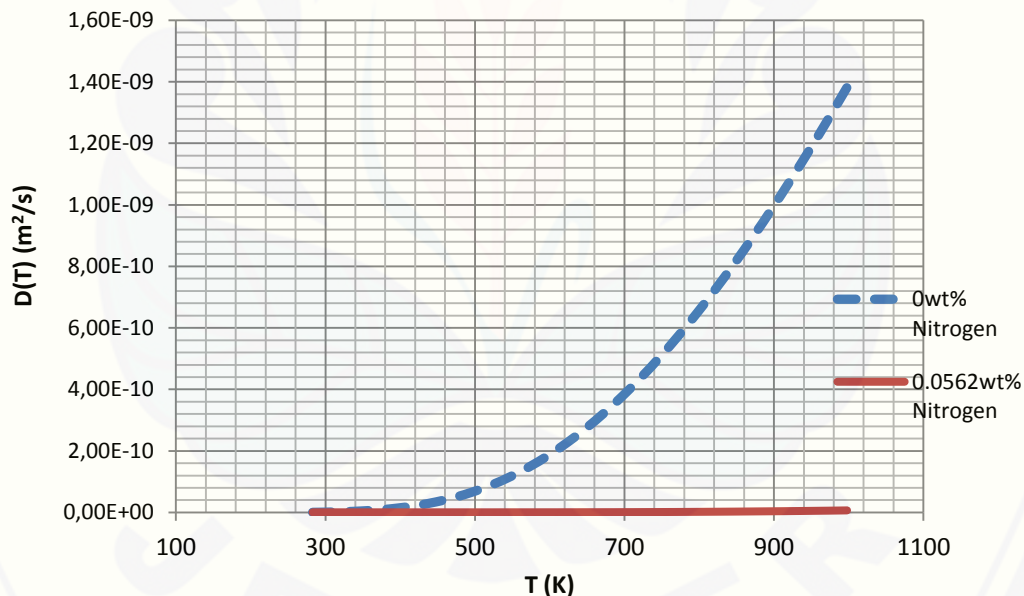
Temperatur (°C)	Jumlah atom (persentase)				
	Others	fcc	hcp	bcc	kristal
650	30,31%	0,02%	0,14%	69,53%	69,69%
700	30,25%	0,01%	0,22%	69,52%	69,75%
750	30,26%	0,03%	0,20%	69,52%	69,74%
800	30,23%	0,04%	0,22%	69,51%	69,77%
850	29,29%	0,32%	2,49%	67,90%	70,71%
900	29,41%	0,25%	2,38%	67,96%	70,59%
950	29,30%	0,40%	2,30%	68,10%	70,80%
1000	29,35%	0,35%	2,42%	67,87%	70,65%

Berdasarkan analisa dan visualisasi struktur kristal besi yang ditampilkan dalam Tabel 4.1 dan lampiran B.4, untuk setiap variasi temperatur tidak terdapat perubahan yang signifikan pada persentase jumlah atom Fe dengan struktur kristal bcc maupun pada struktur material besi. Atom-atom Fe yang mengalami transformasi struktur kristal menjadi fcc ataupun hcp diasumsikan sebagai atom yang mengalami perpindahan posisi akibat adanya energi termal dari kenaikan temperatur atau sebagai akibat dari adanya interaksi antara atom-atom besi dan molekul nitrogen pada proses pembentukan lapisan nitrida, sehingga penentuan jumlah atom Fe yang masih tetap bertahan akibat pengaruh injeksi gas nitrogen hanya meninjau jumlah atom Fe dengan struktur kristal bcc.

Secara keseluruhan hasil yang telah didapatkan mendukung pernyataan Manly (1958) yang mengatakan bahwa difusi yang menyebabkan korosi pada logam cair merupakan proses yang bergantung pada laju difusi dan struktur senyawa pada permukaan logam padat akibat interaksi dengan logam cair. Struktur permukaan dari logam padat akan lebih terhindar dari proses difusi korosi jika dilapisi oleh lapisan tipis yang terbentuk akibat penambahan gas tertentu ke dalam logam cair.

4.3 Daerah Operasi Mitigasi Korosi Besi dalam Logam Cair dengan Inhibitor Nitrogen

Salah satu besaran yang dapat dijadikan sebagai tolak ukur dari proses korosi pada besi akibat proses difusi adalah koefisien difusi besi. Koefisien difusi besi menyatakan laju difusi dari atom-atom besi. Karena temperatur merupakan faktor yang mempengaruhi laju difusi, koefisien difusi juga dapat dinyatakan sebagai fungsi dari temperatur $D(T)$. Berdasar pada hasil simulasi, koefisien difusi dari besi yang dinyatakan sebagai fungsi temperatur dalam logam cair timbal-bismut sebelum dan setelah injeksi gas nitrogen dengan persentase berat 0,0562wt% telah dituliskan pada persamaan (4.1 dan 4.3).



Gambar 4. 8 Perbandingan kurva koefisien difusi antara sistem simulasi dengan dan tanpa gas nitrogen

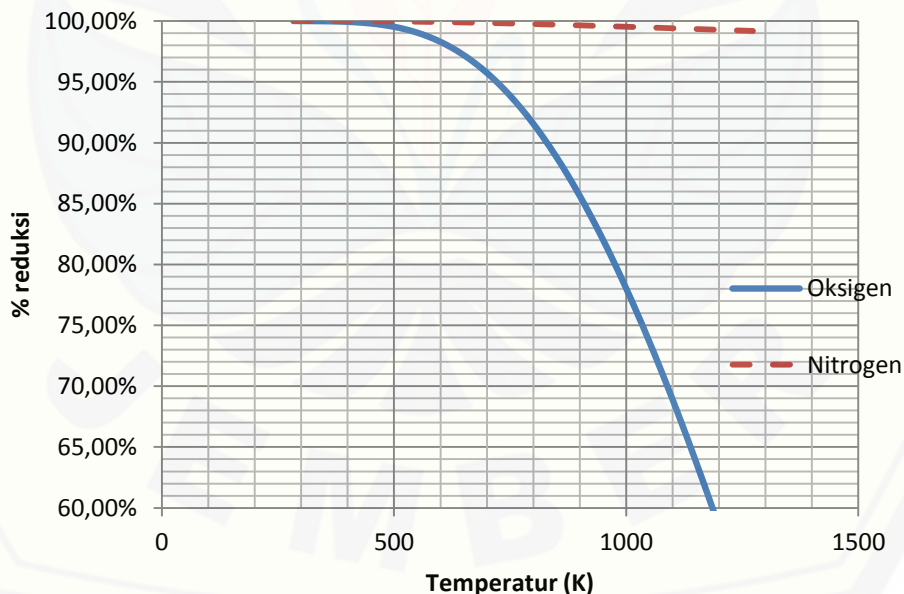
Gambar 4.8 merupakan interpretasi grafik dari kedua persamaan koefisien difusi besi dalam logam cair dengan dan tanpa gas nitrogen. Koefisien difusi besi setelah injeksi gas nitrogen ($D_{0,0562\text{wt}\%}$) mempunyai nilai yang relatif kecil jika dibandingkan dengan

koefisien difusi besi tanpa gas nitrogen ($D_{0wt\%}$). Perubahan ($D_{0wt\%}$) pada setiap temperatur dapat terlihat dengan jelas, sedangkan pada ($D_{0.0562wt\%}$), kenaikan temperatur menyebabkan perubahan yang sangat kecil sehingga kurva koefisien difusi yang terbentuk cenderung mendekati garis nol. Semakin kecil koefisien difusi maka semakin kecil pula peluang terjadinya korosi pada material besi.

Arkundato *et al.* (2013) menyatakan bahwa nilai koefisien difusi dari besi sebelum dan setelah injeksi gas inhibitor (oksigen) dapat dijadikan acuan dalam penentuan persentase reduksi korosi. Hubungan antara keduanya dinyatakan dalam persamaan:

$$\% \text{reduksi } (T) = \frac{D_{0wt\%}(T) - D_{0.0562wt\%}(T)}{D_{0wt\%}(T)} \quad (4.5)$$

Persentase reduksi tersebut menunjukkan persentase penurunan koefisien difusi besi dari nilai awal sebagai pengaruh dari perlakuan injeksi gas nitrogen. Kebergantungan koefisien difusi terhadap temperatur menghasilkan persentase reduksi yang berubah pula untuk setiap temperatur yang berbeda.



Gambar 4. 9 Grafik perubahan persentase reduksi korosi terhadap temperatur

Gambar 4.9 menunjukkan perbandingan persentase reduksi korosi besi dalam logam cair timbal-bismut dari kedua gas yang berbeda. Untuk gas nitrogen, hubungan antara temperatur dan persentase reduksinya berdasarkan hasil simulasi dapat dimodelkan dalam bentuk persamaan regresi polinomial yaitu:

$$\% \text{reduksi} = -10^{-8} T^2 - 6 \times 10^{-6} T + 0,9991 \quad (4.6)$$

Berdasarkan persamaan 4.5 diketahui bahwa temperatur dan persentase reduksi memiliki korelasi yang tinggi, namun diketahui pula bahwa perubahan pada temperatur memberikan pengaruh yang kecil pada persentase reduksi korosi yang ditunjukkan oleh besarnya koefisien pada tiap suku dalam persamaan regresi tersebut. Sementara itu, persentase reduksi korosi dari gas oksigen (ditunjukkan oleh garis biru) yang didapatkan dari penelitian terdahulu milik Arkundato *et al.* (2013), menunjukkan hal yang berkebalikan ditandai dengan penurunan yang relatif besar untuk setiap kenaikan temperaturnya. Persentase reduksi gas oksigen tersebut dapat mencapai kestabilan yang mendekati nilai 100% hingga temperatur 548 K dan mengalami penurunan menjadi 76,05% pada suhu 1023 K.

Berdasarkan persamaan 4.5 dan Gambar 4.9 dapat dikatakan kemampuan reduksi atau daerah mitigasi korosi besi dalam logam cair timbal bismut dari gas nitrogen mempunyai interval temperatur yang lebar dimulai dari temperatur 600 °C (batas temperatur minimal terjadinya proses difusi pada material besi) dan diasumsikan mencapai suhu 1823 K atau setara dengan 1550 °C. Namun, pengaplikasian pemodelan sistem simulasi tersebut dalam suatu reaktor nuklir memerlukan peninjauan yang lebih lanjut tentang sistem operasi dan keselamatan inheren dari reaktor nuklir. Hal tersebut menunjukkan bahwa daerah operasi mitigasi korosi dari inhibitor nitrogen dengan interval temperatur yang lebar tetap harus menyesuaikan dengan daerah temperatur yang memungkinkan untuk dioperasikan dalam suatu reaktor nuklir seperti yang dinyatakan oleh Rivai dan Takahashi (2010), bahwa suatu reaktor nuklir yang menggunakan logam cair PbBi dapat beroperasi dengan baik hingga temperatur 792 °C akibat ULOHS (*Unprotected Loss of Heat*

Sink) / ULOF (*Unprotected Loss of Flow*). Kedua jenis kecelakaan pada reaktor nuklir tersebut dipengaruhi oleh perubahan temperatur logam cair, temperatur bahan bakar dan reaktivitas umpan balik selama kecelakaan berlangsung.



BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil analisa data yang diperoleh, dapat disimpulkan bahwa:

1. Kenaikan temperatur dapat mempercepat kerusakan besi di dalam logam cair timbal-bismut (korosi) yang ditunjukkan dari kenaikan nilai luasan rata-rata sebaran atom (MSD) dan koefisien difusi D dari besi.
2. Injeksi gas nitrogen ke dalam logam cair timbal-bismut dengan konsentrasi 0,0562wt% dapat menghambat korosi pada besi dalam logam cair akibat proses difusi. Hal tersebut ditunjukkan oleh adanya persentase reduksi gas nitrogen terhadap korosi besi dalam logam cair timbal bismut yang juga mempunyai korelasi tinggi dengan temperatur.
3. Daerah operasi mitigasi korosi dengan inhibitor nitrogen yang didapat berdasarkan persentase reduksi mempunyai interval temperatur yang lebar yaitu (600-1550) °C. Hasil tersebut menunjukkan perbedaan dengan daerah operasi mitigasi dari inhibitor oksigen (dengan konsentrasi 0,0768wt%) yang bekerja secara efektif hingga temperatur 750 °C. Namun demikian, jika diaplikasikan dalam suatu reaktor nuklir, daerah temperatur operasi mitigasi korosi tersebut harus disesuaikan dengan daerah temperatur operasi efektif dari reaktor.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian didapatkan bahwa gas nitrogen merupakan inhibitor korosi besi dalam logam cair yang cukup baik jika ditinjau dengan salah satu jenis interaksi (Lennard-Jones) serta geometri tertentu, sehingga pada peneliti yang akan melakukan penelitian yang sejenis dengan penelitian ini dapat menggunakan tinjauan interaksi antar atom serta geometri material yang berbeda.

DAFTAR PUSTAKA

- Allen, M., Tildesley, M. 1987. *Computer Simulations of Liquids*. New York: Clarendon Press.
- Askeland, D.R., Fulay, P.P., Wright, J.W. 2010. *The Science and Engineering of Materials*. USA: Cengage Learning, Inc.
- Arkundato, A., Su'ud, Z., Abdullah, M., Sutrisno, W. 2013. *Molecular Dynamic Simulation on Iron Corrosion in High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic*. *Tur J. Phys.* 37: 132-144.
- Beeman, D. 1976. *Some Multistep Methods For Use In Molecular Dynamics Calculations*. *J. Comput. Phys.* 20, 130.
- Belaschenko, D.K., Ostrovskii, O.I. 2006. *The Embedded Atom Model for Liquid Metals: Liquid Galium and Bismuth Chemical Thermodynamics and Thermo Chemistry*. *Russian Journal of Physical Chemistry* 80, No. 4, 509-522.
- Brodholt, J., Wood, B. 1993. *Molecular Dynamics Simulations of the Properties CO₂-H₂O mixtures at High Pressures and Temperatures*. *Am. Mineral.* 78, 558.
- Campbell, F.C. 2008. *Elements of Metallurgy and Engineering Alloys*. United States of America: ASM International.
- Chang, R. 2006. *Kimia Dasar: Konsep-konsep Inti jilid 1*. Terjemahan oleh Muhamad Abdulkadir Martoprawiro *et al.* Jakarta: Erlangga.
- Czerwinski, F. 2014. *Corrosion of Materials in Liquid Magnesium Alloys and Its Prevention*. Articles. INTECH.
- Dipojono, H.K. 2001. *Simulasi Dinamika Molekul (Sebuah Pengantar)*. Prosiding Seminar Nasional. Bandung: Departemen Teknik Fisika ITB.
- Haile, J.M. 1992. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*. New York: John Wiley & Sons, Inc.
- Kittel, C. 2005. *Introduction to Solid State physics, 8th Ed.* New York: John Wiley & Sons, Inc.

- Lemmon, E.W., Jacobsen, R.T. 2004. *Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon. Inter. J. Thermophysics.* 25 (1), 21.
- Li, J. 2005. *Basic Molecular Dynamics.* USA. Springer.
- Mangonon, P.L. 1999. *The Principles of Materials Selection for Engineering Design.* Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall.
- Manly, W.D. 1958. *Fundamentals of Liquid-Metal Corrosion.* U.S: Oak Ridge.
- Mohalik, N.K., Singh.R.V.K., Pandey, J. 2005. *Application of Nitrogen as preventive and Controlling Subsurface Fire. J. of Sci & Industrial Research:* 273-280.
- Purwanto, Malau, V., Sujitno, T. 2003. *Pemanfaatan Teknik Plasma dalam Proses Nitridasi pada Baja Paduan 42CrMo4.* Prosiding Pertemuan dan Presentasi Ilmiah Teknologi Akselerator dan Aplikasinya Vol 5: 228-234.
- Refson, K. 1985. *Molecular Dynamics Simulation of Solid n-butane.* Physica 131 B: 256-266.
- Refson, K. 2001. *Moldy User's Manual.* Oxford: Department of Earth Science.
- Rivai, A. K., Takahashi, M. 2010. *J. Nuclear Mater,* 398: 139.
- Sekimoto, H. 2007. *Nuclear Reactor Theory.* Tokyo: Tokyo Institute of Technology.
- Sobolev, V. 2007. *Thermophysical Properties of Lead and Lead-Bismuth Eutectic. J. of Nuclear Materials,* 362: 235-247.
- Song, C., Li, D., Xu, Y., Pan, B.C., Wang, Z. 2013. *Ab Initio. J of Nuclear materials* 362: 235-247. *Molecular Dynamics Study of Temperature Dependent Structure Properties of Liquid Lead-Bismuth Eutectic Alloy. Physica B.* 429: 6-11.
- Sudjatmoko, Warjoadi, Siswanto, B., Suharni, Sujitno, T. 2010. *Analisis Struktur Mikro Lapisan Tipis Nitrida Besi yang Ternitridasi pada Permukaan Material Komponen Mesin. J. iptk nuklir Gerindra.* 13: 101-111.
- Swope, W.C., Andersen, H.C., Berens, P.H., Wilson, K.R. 1982. *A Computer Simulation Method For The Calculation Of Equilibrium Constants For The Formation Of Physical Clusters Of Molecules: Application To Small Water Clusters. J. Chem.Phys.* 76, 637.
- Talbot, J., David, T. 1998. *Corrosion Science and Technology.* USA: CRC Press LLC.

Pepperhoff, W. Acet, M. 2001. *Constitution and Magnetism of Iron and Its Alloy*. Germany: Springer.

Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L. Tanpa tahun. **CHARMM Molecular Dynamics Simulations**. http://www.ch.embnet.org/MD_tutorial/ [15 Maret 2015].

Stukowski, A. 2015 . Common Neighbour Analysis. http://www.ovito.org/manual/particles.modifiers.common_neighbor_analysis.html [10 Maret 2015].

Witoelar, A. 2002. *Perancangan Dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal Dan Kanonikal Dengan Potensial Lennard Jones*. Skripsi. Bandung: Institut Teknologi Bandung.

Xie, C. (Tanpa Tahun). *Molecular Dynamics for Everyone: A Technical Introduction to the Molecular Workbench Software*. USA: The Concord Consortium.

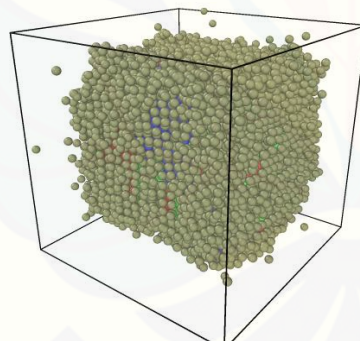
Zhen, S., Davies, G.J. 1983. *L-J n-m Potential Energy Parameters: Calculation of the LJ n-m Pot Energy Parameters for Metals*. *Phys. Stat. Sol.* (a) 78, 595.

LAMPIRAN A. PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DAN ANALISA STRUKTUR BESI PADA SISTEM SIMULASI TANPA GAS NITROGEN

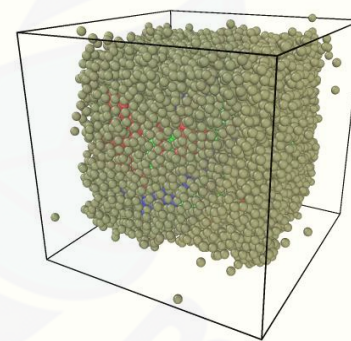
A.1 Persentase Jumlah Kristal Pada Besi dalam Logam Cair Setelah 16 ps Waktu Simulasi

Temperatur	Persentase				
	Others	fcc	hcp	bcc	kristal
625	48,85%	18,32%	26,88%	5,95%	51,15%
675	51,21%	22,26%	20,73%	5,80%	48,79%
750	57,67%	13,60%	23,27%	5,46%	42,33%
800	59,60%	8,50%	30,10%	1,80%	40,40%
850	65,90%	7,80%	20,10%	6,10%	34,00%
900	74,80%	9,70%	10,60%	4,90%	25,20%
950	77,90%	3,40%	17,70%	1,00%	22,10%
1000	81,90%	4,80%	9,50%	3,80%	18,10%

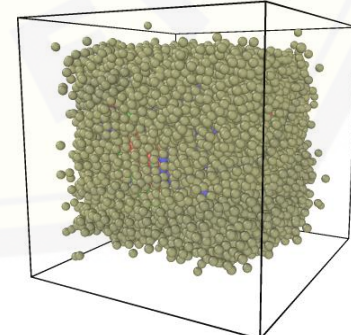
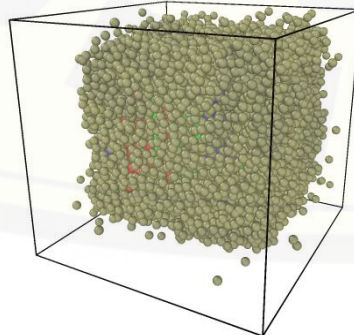
A.2 Visualisasi Struktur Besi dalam Logam Cair Setelah 16 ps Waktu Simulasi



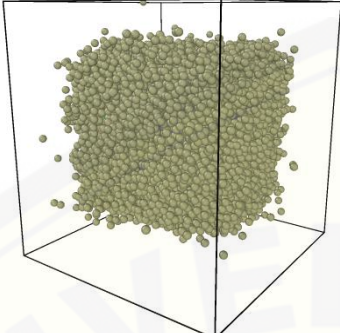
(a) 625°C



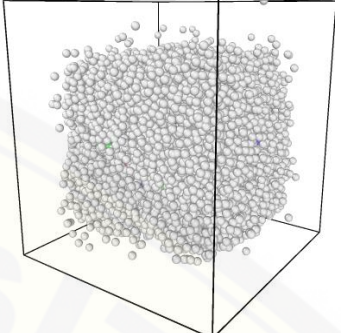
(b) 675°C



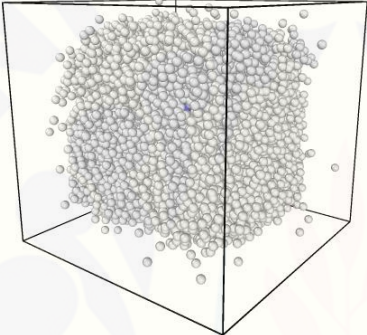
(d) 750°C



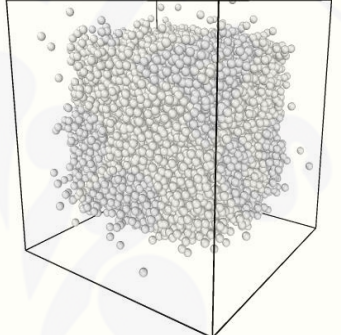
(f) 800°C



(g) 850°C



(h) 900°C



(i) 950°C

(j) 1000°C

A.3 Penentuan Nilai Koefisien Difusi Besi D dalam Logam Cair Timbal-Bismut

Suhu ($^{\circ}\text{C}$)	Slope	D	D (m^2/s)	suhu (K)	$1/T$ (K^{-1})	logD
625	0,650534449	0,10842241	1,0842E-09	898	0,00111359	-8,96488095
675	0,71445048	0,11907508	1,1908E-09	948	0,00105485	-8,92417912
750	0,820216203	0,1367027	1,367E-09	1023	0,00097752	-8,86422291
800	0,898128747	0,14968812	1,4969E-09	1073	0,00093197	-8,82481265
850	1,143310712	0,19055179	1,9055E-09	1123	0,00089047	-8,71998698
900	1,35400994	0,22566832	2,2567E-09	1173	0,00085251	-8,6465294
950	1,478725814	0,2464543	2,4645E-09	1223	0,00081766	-8,6082636
1000	1,680744799	0,28012413	2,8012E-09	1273	0,00078555	-8,55264947

A.4 Nilai *Mean Square Displacement* untuk Atom Material Besi (Fe) dalam Logam Cair Timbal-bismut

Waktu (ps)	Temperatur °C							
	750	800	850	900	950	1000	625	675
6,1	0,176576	0,184235	0,189331	0,1963539	0,2037374	0,207215	0,15909	0,16734
6,2	0,316881	0,332093	0,351578	0,3710891	0,3955161	0,408333	0,266861	0,290138
6,3	0,417828	0,436638	0,469529	0,4964314	0,5451167	0,569847	0,340634	0,363896
6,4	0,509054	0,528914	0,574711	0,6077197	0,6857709	0,710586	0,404715	0,432997
6,5	0,592823	0,61483	0,679644	0,7185738	0,8188765	0,840573	0,457922	0,504202
6,6	0,678828	0,705053	0,778636	0,8298452	0,9497841	0,971836	0,514407	0,571981
6,7	0,764533	0,794868	0,875855	0,9436007	1,0804011	1,100492	0,56649	0,639525
6,8	0,848507	0,887699	0,990637	1,0451264	1,2160659	1,233214	0,62048	0,702321
6,9	0,930099	0,984514	1,106226	1,137015	1,3567673	1,374465	0,679423	0,765723
7	1,009797	1,072635	1,219231	1,2415956	1,4966528	1,506	0,731061	0,829552
7,1	1,098706	1,15512	1,325342	1,3628253	1,6323717	1,649885	0,781243	0,889225
7,2	1,194679	1,2379	1,436704	1,4843086	1,7658181	1,799754	0,832145	0,951513
7,3	1,280805	1,313521	1,551992	1,5913554	1,9042867	1,955267	0,891832	1,013362
7,4	1,367791	1,388672	1,661584	1,7065389	2,0475012	2,118404	0,95414	1,075974
7,5	1,45474	1,463962	1,771807	1,8148734	2,1871473	2,277469	1,006133	1,14834
7,6	1,531523	1,551184	1,883701	1,9270124	2,3261742	2,439135	1,066294	1,226203
7,7	1,609976	1,637936	1,988588	2,0517357	2,4540354	2,593213	1,130492	1,298264
7,8	1,692861	1,712701	2,084952	2,1821249	2,5921643	2,751	1,186307	1,366124
7,9	1,781861	1,790053	2,179247	2,3071228	2,7203747	2,906411	1,246306	1,442304
8	1,874509	1,87576	2,274226	2,4505282	2,8528659	3,063108	1,309058	1,51637
8,1	1,967351	1,962578	2,371765	2,5860875	2,9807717	3,233189	1,371757	1,585966
8,2	2,040499	2,062466	2,477831	2,7090568	3,1157513	3,389624	1,434882	1,655497
8,3	2,114644	2,16086	2,598049	2,8341995	3,2591692	3,549566	1,492901	1,739128
8,4	2,199563	2,266869	2,714722	2,9740807	3,3812277	3,724716	1,550792	1,827281
8,5	2,277721	2,375926	2,824957	3,0995041	3,5031397	3,881162	1,607477	1,909636
8,6	2,361965	2,492316	2,939076	3,2071109	3,6270835	4,026232	1,667263	1,98423
8,7	2,457098	2,593328	3,071317	3,3275497	3,7677526	4,193792	1,731984	2,064236
8,8	2,543277	2,68684	3,189936	3,4578139	3,8933966	4,366174	1,799133	2,144636
8,9	2,627283	2,798051	3,312918	3,5855248	4,0099696	4,53934	1,859052	2,22265
9	2,726491	2,91396	3,448071	3,7189708	4,1416426	4,69697	1,924148	2,305733
9,1	2,816891	3,017573	3,560944	3,8630695	4,2956506	4,862083	1,983774	2,387645
9,2	2,904835	3,105207	3,674112	3,9999983	4,4496379	5,025693	2,039418	2,47447
9,3	2,988085	3,204743	3,770012	4,1294551	4,5819786	5,205214	2,096046	2,54347
9,4	3,052904	3,299046	3,869448	4,2796555	4,7293578	5,349333	2,167685	2,624653

Waktu (ps)	Temperatur °C							
	750	800	850	900	950	1000	625	675
9,5	3,133119	3,395608	3,990966	4,4253878	4,8676583	5,488818	2,229932	2,690844
9,6	3,220612	3,500254	4,099214	4,5742689	5,0000843	5,628113	2,28804	2,756352
9,7	3,300745	3,591024	4,221364	4,7041732	5,1443735	5,77291	2,350863	2,826289
9,8	3,395434	3,684806	4,342407	4,8413849	5,2963656	5,910302	2,411314	2,905259
9,9	3,476697	3,774751	4,448981	4,9710811	5,4124756	6,051976	2,487138	2,976688
10	3,553565	3,883427	4,562659	5,1135833	5,5503784	6,204156	2,553623	3,033112
10,1	3,635088	4,005685	4,669562	5,2502839	5,6720806	6,353334	2,607905	3,081983
10,2	3,720243	4,106976	4,800276	5,3709056	5,810432	6,521973	2,675026	3,145159
10,3	3,810599	4,211563	4,934752	5,4989442	5,9642634	6,678181	2,740494	3,212709
10,4	3,88809	4,30769	5,045982	5,6511981	6,1079924	6,852317	2,805605	3,269992
10,5	3,96219	4,38854	5,175388	5,8038816	6,2588125	7,009406	2,874179	3,343706
10,6	4,03703	4,482995	5,303997	5,9352358	6,4341379	7,171183	2,930227	3,410131
10,7	4,1105	4,568638	5,452304	6,0856958	6,5999048	7,33789	2,982732	3,488026
10,8	4,178375	4,659744	5,584625	6,2618193	6,7517189	7,487889	3,040545	3,570667
10,9	4,255308	4,742462	5,70051	6,4152366	6,8947883	7,668105	3,089267	3,643093
11	4,330024	4,839847	5,824463	6,5667181	7,0453219	7,853114	3,145412	3,723172
11,1	4,416689	4,924932	5,933087	6,7216613	7,2042723	8,03774	3,207863	3,800173
11,2	4,513532	5,002149	6,040518	6,8588627	7,3621791	8,218678	3,27377	3,87119
11,3	4,592756	5,085252	6,15187	6,9910746	7,5239629	8,411159	3,369193	3,949063
11,4	4,669444	5,183136	6,267885	7,1204257	7,6909472	8,559364	3,455089	4,020032
11,5	4,76458	5,2655	6,360499	7,2364461	7,8522572	8,729778	3,519334	4,106844
11,6	4,864015	5,352701	6,485379	7,384446	8,0133228	8,912637	3,588309	4,189978
11,7	4,95455	5,429247	6,585066	7,5237308	8,1577201	9,089914	3,664996	4,277912
11,8	5,039129	5,509152	6,69288	7,6689136	8,3560133	9,252378	3,760928	4,365825
11,9	5,112907	5,581188	6,802205	7,8196608	8,5339193	9,404219	3,851406	4,452388
12	5,176082	5,661043	6,911967	7,9492467	8,6978673	9,579877	3,922259	4,524709
12,1	5,263112	5,763185	7,012947	8,0719115	8,8480653	9,763945	3,992356	4,59337
12,2	5,359353	5,868014	7,112497	8,194482	9,0164983	9,938174	4,068425	4,666031
12,3	5,442651	5,961811	7,220754	8,3382612	9,1480361	10,12787	4,152282	4,75125
12,4	5,518663	6,039731	7,328514	8,494291	9,2826726	10,28774	4,228564	4,836305
12,5	5,59543	6,120316	7,42847	8,6338451	9,4420289	10,43454	4,306735	4,912737
12,6	5,666618	6,186916	7,543264	8,7430725	9,5745145	10,59524	4,366087	4,98611
12,7	5,729653	6,249087	7,632557	8,876104	9,7291165	10,76516	4,441439	5,065965
12,8	5,797314	6,323586	7,749348	9,0022465	9,8809954	10,92157	4,503318	5,162872
12,9	5,893625	6,417419	7,85901	9,1329688	10,0375006	11,10057	4,574638	5,236083
13	5,994361	6,527292	7,970673	9,2565398	10,184101	11,28238	4,638898	5,326706
13,1	6,082194	6,613385	8,083687	9,3859266	10,3239539	11,46672	4,687995	5,403377

Waktu (ps)	Temperatur °C							
	750	800	850	900	950	1000	625	675
13,2	6,171301	6,683093	8,194697	9,5176881	10,4930144	11,61131	4,758951	5,463346
13,3	6,235259	6,737204	8,311125	9,661996	10,633011	11,77288	4,825318	5,527125
13,4	6,31608	6,823578	8,420698	9,7754905	10,07566129	11,91062	4,881045	5,578767
13,5	6,402141	6,889638	8,525213	9,85958	10,9235046	12,10108	4,949813	5,616982
13,6	6,471786	6,957171	8,635854	9,9912402	11,0959393	12,3211	5,000679	5,659768
13,7	6,536253	7,052116	8,760802	10,1340573	11,2313185	12,53711	5,071125	5,705468
13,8	6,607283	7,138186	8,902152	10,2875772	11,3872871	12,70675	5,143354	5,770532
13,9	6,678339	7,223188	9,018805	10,4283558	11,5146772	12,88222	5,216136	5,831928
14	6,760583	7,302142	9,114327	10,5471246	11,6566001	13,09169	5,265588	5,87661
14,1	6,83985	7,39918	9,241978	10,6899475	11,8071699	13,29249	5,318315	5,908249
14,2	6,920663	7,478811	9,385914	10,8094172	11,9592198	13,48485	5,399767	5,962837
14,3	7,002378	7,567346	9,5139	10,9621037	12,1211667	13,68179	5,467317	6,022535
14,4	7,094697	7,671475	9,646682	11,1266093	12,264634	13,86109	5,512543	6,083176
14,5	7,176905	7,746583	9,757522	11,2767963	12,4013464	14,0338	5,553128	6,134177
14,6	7,279505	7,811849	9,887951	11,4345685	12,5533372	14,22973	5,626087	6,202418
14,7	7,36608	7,895855	10,0183	11,619286	12,7084699	14,44427	5,678551	6,266207
14,8	7,447285	7,969821	10,16993	11,7653523	12,8693451	14,61821	5,747093	6,329431
14,9	7,51373	8,046499	10,29915	11,9357573	13,0493582	14,80347	5,811794	6,392858
15	7,583329	8,131714	10,38666	12,0930575	13,1968229	15,00254	5,879078	6,459823
15,1	7,642803	8,221749	10,49363	12,1936895	13,3628399	15,18856	5,935925	6,511554
15,2	7,725203	8,339743	10,60112	12,3357485	13,5287908	15,37687	5,994168	6,587992
15,3	7,807761	8,465497	10,719	12,4767331	13,7090985	15,5743	6,050439	6,66604
15,4	7,888001	8,571796	10,83567	12,6354537	13,9161657	15,74774	6,10946	6,732547
15,5	7,971801	8,685533	10,94852	12,8088705	14,0960486	15,97941	6,186653	6,801247
15,6	8,051785	8,791648	11,0408	12,9590419	14,2509857	16,18888	6,266101	6,889088
15,7	8,15381	8,903261	11,16541	13,0937163	14,4597775	16,40709	6,344299	6,963783
15,8	8,229558	9,032898	11,27477	13,2594347	14,6531183	16,59796	6,424112	7,057758
15,9	8,321289	9,164146	11,4085	13,395395	14,8328902	16,80139	6,497723	7,163996
16	8,425442	9,299904	11,57862	13,5317099	14,9919878	16,9994	6,569023	7,25821

LAMPIRAN B. PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DAN ANALISA STRUKTUR BESI PADA SISTEM SIMULASI SETELAH INJEKSI NITROGEN GAS NITROGEN

B.1 Nilai *Mean Square Displacement* untuk Atom Material Besi (Fe) dalam Logam Cair Timbal-Bismut

Waktu Simulasi (ps)	Suhu (temperatur)°C							
	650	675	700	800	850	900	950	1000
6,1	0,0000194	0,0000182	0,0000212	0,0000194	0,0001249	0,000142	0,000167	0,0001367
6,2	0,0000429	0,0000437	0,0000483	0,0000495	0,0002847	0,000275	0,000336	0,0002745
6,3	0,0000744	0,0000731	0,0000771	0,0000815	0,0003827	0,000352	0,000512	0,0004904
6,4	0,0001049	0,0000976	0,0001142	0,0001204	0,0004842	0,000466	0,000648	0,0006005
6,5	0,0001415	0,0001275	0,0001542	0,0001602	0,0005947	0,000588	0,000823	0,0007821
6,6	0,0001882	0,000173	0,0001953	0,0001973	0,0007204	0,000697	0,000934	0,0009725
6,7	0,0002439	0,0002303	0,0002455	0,0002495	0,0009325	0,000856	0,001094	0,0011918
6,8	0,0003	0,0002955	0,000296	0,0003074	0,0011073	0,001029	0,001328	0,0013346
6,9	0,0003511	0,0003598	0,0003548	0,0003685	0,0012738	0,001171	0,001604	0,0014659
7	0,0004115	0,0004406	0,0004181	0,0004313	0,0014525	0,001287	0,001802	0,0016541
7,1	0,0004722	0,0005062	0,0004869	0,0005013	0,001678	0,001436	0,002023	0,0018871
7,2	0,0005493	0,0005721	0,0005588	0,0005733	0,0018039	0,001639	0,002397	0,0021771
7,3	0,0006236	0,0006457	0,0006267	0,0006464	0,0019702	0,001832	0,002613	0,0024262
7,4	0,0006963	0,0007301	0,0007016	0,0007364	0,0021914	0,002092	0,002841	0,0026889
7,5	0,0007784	0,0008248	0,0007847	0,0008133	0,0023584	0,002307	0,003027	0,0029928
7,6	0,0008601	0,0009104	0,0008739	0,000902	0,0025873	0,00254	0,003301	0,0033343
7,7	0,0009425	0,001003	0,0009665	0,0009927	0,0028368	0,002786	0,003559	0,0035309
7,8	0,0010356	0,0010985	0,0010611	0,0011051	0,0030778	0,002994	0,003857	0,0038382
7,9	0,0011337	0,0012011	0,001187	0,0012124	0,003299	0,003293	0,004149	0,0041522
8	0,0012311	0,0013097	0,001302	0,0013236	0,0035292	0,00355	0,004407	0,0044909
8,1	0,0013292	0,001429	0,0014147	0,0014352	0,0038329	0,003821	0,004675	0,004804
8,2	0,0014422	0,0015468	0,001537	0,001562	0,0040759	0,004115	0,004936	0,0051754
8,3	0,0015547	0,0016733	0,0016616	0,0016869	0,0044452	0,004435	0,005214	0,0054515
8,4	0,0016768	0,0018023	0,001801	0,0018209	0,0047203	0,004739	0,00557	0,0057916
8,5	0,0017964	0,0019247	0,001935	0,001952	0,0050601	0,005091	0,005928	0,0061954
8,6	0,001921	0,0020779	0,0020717	0,0020984	0,0054366	0,005467	0,006368	0,0065583
8,7	0,0020586	0,0022228	0,0022213	0,0022576	0,0057559	0,005792	0,006734	0,0069759
8,8	0,0022067	0,0023751	0,0023798	0,0024014	0,0061707	0,006268	0,007119	0,0073562
8,9	0,0023532	0,002525	0,0025453	0,0025719	0,0064815	0,006696	0,007527	0,0077733
9	0,0025061	0,0026702	0,0027099	0,0027506	0,0068833	0,007084	0,008027	0,0082266

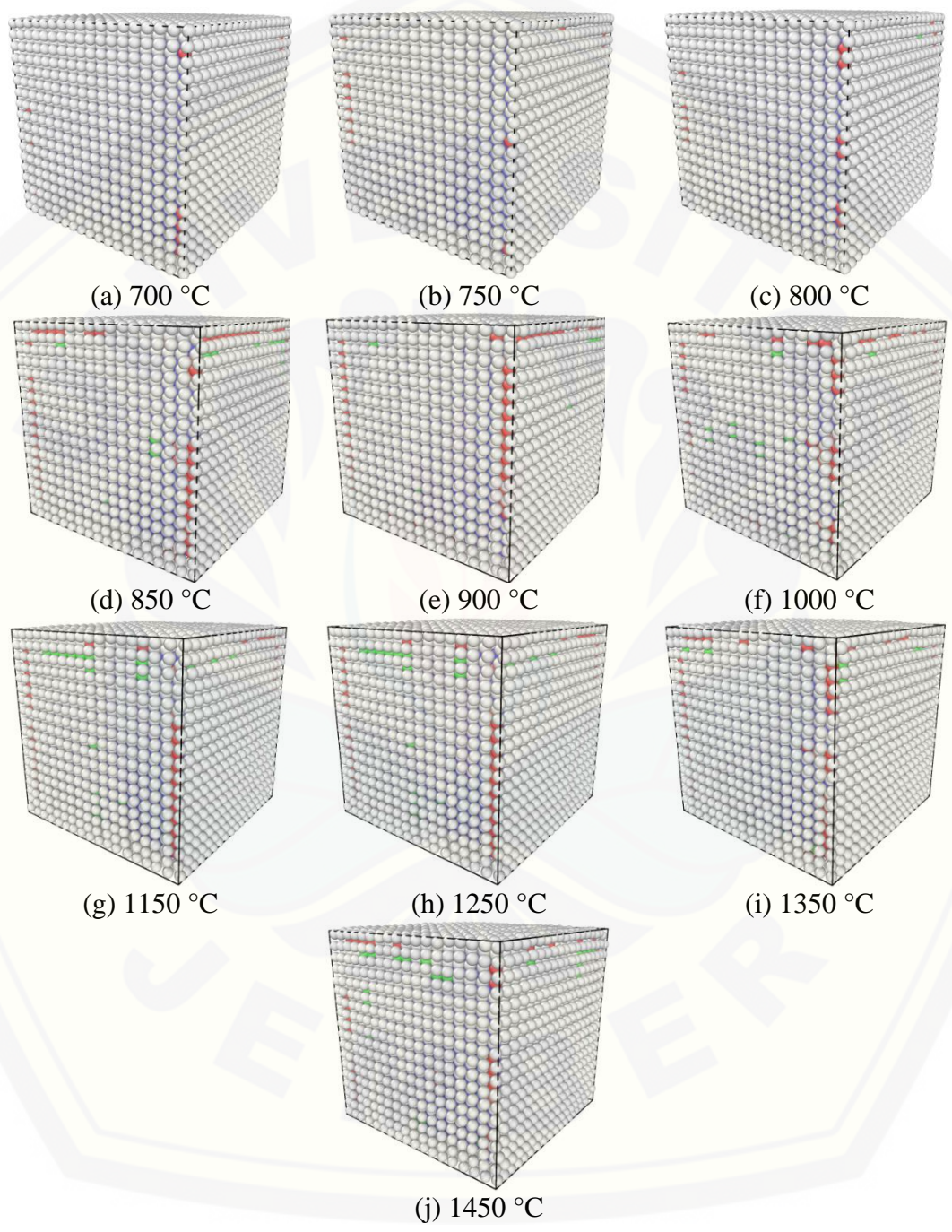
Waktu Simulasi (ps)	Suhu (temperatur)°C							
	650	675	700	800	850	900	950	1000
9,1	0,0026627	0,0028334	0,0028805	0,0029211	0,0073055	0,00747	0,008414	0,0087024
9,2	0,0028344	0,0029968	0,003052	0,0031074	0,0076755	0,007928	0,00885	0,0092359
9,3	0,0029959	0,0031608	0,0032339	0,0032944	0,0080377	0,008329	0,009311	0,0096721
9,4	0,0031661	0,003334	0,0034189	0,0034903	0,0084295	0,008787	0,009778	0,0101104
9,5	0,0033414	0,0035169	0,0035971	0,0037041	0,0088962	0,009315	0,010228	0,0106384
9,6	0,003547	0,0037077	0,0037886	0,0039065	0,0093208	0,009738	0,010686	0,0112275
9,7	0,0037223	0,0039096	0,003992	0,0041359	0,0097734	0,010163	0,011165	0,0117785
9,8	0,0039084	0,0041158	0,0041916	0,0043481	0,0102311	0,010705	0,011611	0,0122836
9,9	0,0041089	0,0043194	0,0044067	0,0045839	0,0106964	0,011228	0,012138	0,0127986
10	0,004326	0,0045263	0,004633	0,0048475	0,011235	0,011722	0,012661	0,0133949
10,1	0,0045223	0,0047462	0,0048495	0,0050928	0,0118266	0,012247	0,013113	0,0140514
10,2	0,0047369	0,0049689	0,0050686	0,0053596	0,012335	0,012712	0,013708	0,0146204
10,3	0,0049563	0,0052059	0,0052892	0,0056192	0,0128399	0,013174	0,014258	0,0151812
10,4	0,0051776	0,0054465	0,005519	0,0058938	0,0133507	0,013685	0,014775	0,0157944
10,5	0,0054172	0,0056882	0,005773	0,0061822	0,013887	0,014279	0,015384	0,0164404
10,6	0,0056668	0,0059277	0,0060395	0,0064685	0,0144962	0,01484	0,015931	0,0170906
10,7	0,0059116	0,006191	0,0062999	0,0067675	0,0151157	0,015409	0,016493	0,0178466
10,8	0,0061492	0,0064495	0,0065749	0,007064	0,0156658	0,016096	0,017187	0,018417
10,9	0,0063857	0,0067083	0,0068556	0,0073517	0,0162553	0,016666	0,017799	0,0190349
11	0,0066291	0,0069822	0,0071279	0,0076392	0,0168727	0,017215	0,01837	0,019671
11,1	0,0068858	0,0072471	0,0074115	0,007965	0,0174562	0,017773	0,018989	0,0203088
11,2	0,0071569	0,0075288	0,0077087	0,0082902	0,0181041	0,018398	0,019495	0,0209551
11,3	0,0074487	0,0078204	0,0080082	0,0085869	0,0186935	0,019012	0,020087	0,0218513
11,4	0,0077465	0,0081047	0,0083239	0,0089023	0,0193185	0,01961	0,020657	0,0226533
11,5	0,0080568	0,0084036	0,0086574	0,0092435	0,019962	0,020151	0,021319	0,0233435
11,6	0,0083705	0,0087218	0,0089973	0,0096209	0,0206451	0,020712	0,021927	0,0239624
11,7	0,0086819	0,0090328	0,009333	0,0099985	0,0212025	0,02126	0,022464	0,0246196
11,8	0,0090176	0,0093565	0,0096753	0,0104066	0,0218094	0,021851	0,023096	0,0253074
11,9	0,0093279	0,0096925	0,0100416	0,0107936	0,0224251	0,022432	0,023736	0,0260633
12	0,0096397	0,0100401	0,0104217	0,0111891	0,023099	0,023009	0,024414	0,0267651
12,1	0,0100154	0,0103787	0,0107767	0,0115923	0,023766	0,023629	0,0251	0,0276369
12,2	0,0103648	0,0107355	0,0111593	0,0120135	0,0244758	0,024289	0,025812	0,0284399
12,3	0,010717	0,0111123	0,0115506	0,0124518	0,0250773	0,024919	0,026379	0,0292311
12,4	0,0110761	0,0114928	0,0119632	0,0129146	0,0256247	0,02552	0,027015	0,0298321
12,5	0,0114408	0,011864	0,0123571	0,0134076	0,0263106	0,026081	0,027634	0,0304723
12,6	0,0117969	0,0122519	0,0127631	0,0138758	0,0268925	0,026774	0,028277	0,0311317

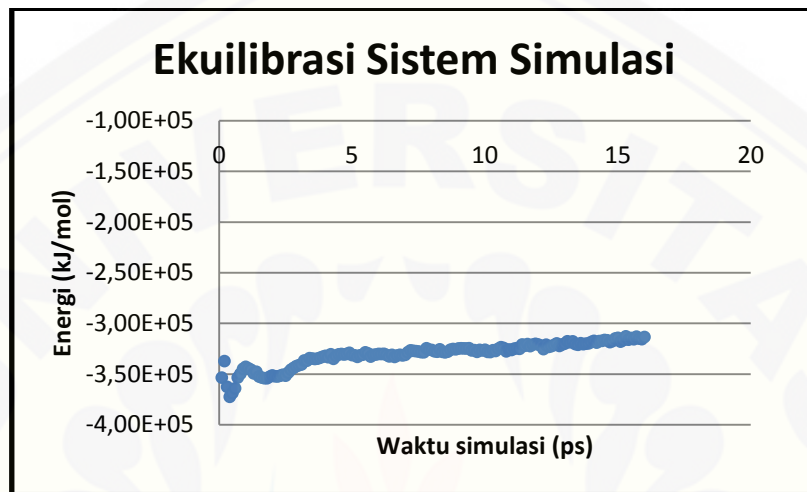
Waktu Simulasi (ps)	Suhu (temperatur)°C							
	650	675	700	800	850	900	950	1000
12,7	0,0121754	0,0126357	0,0131885	0,0143783	0,027501	0,027464	0,028866	0,0317924
12,8	0,0125667	0,0130326	0,0136154	0,0148845	0,0280929	0,028256	0,029547	0,0325477
12,9	0,0129403	0,0134337	0,0140268	0,0154295	0,0287335	0,028997	0,030101	0,0332701
13	0,0133481	0,0138278	0,0144692	0,0159924	0,0293967	0,029641	0,030776	0,0339528
13,1	0,0137501	0,014238	0,0149269	0,0165735	0,0300978	0,030292	0,031456	0,0346222
13,2	0,0141605	0,0146823	0,0154008	0,0171435	0,0306769	0,03083	0,032214	0,0352721
13,3	0,0145829	0,0151414	0,0158692	0,0177125	0,0312747	0,031581	0,032787	0,0360361
13,4	0,0149863	0,0156081	0,0163644	0,0182997	0,0319447	0,03232	0,033541	0,0366783
13,5	0,015408	0,0160962	0,0168623	0,0189254	0,0325965	0,032938	0,034396	0,0375143
13,6	0,0158511	0,016605	0,0173784	0,0195306	0,0332444	0,033662	0,035087	0,0382287
13,7	0,0163227	0,0170912	0,0178847	0,0201717	0,0338969	0,034261	0,035757	0,0390101
13,8	0,016813	0,0176054	0,0184181	0,0208389	0,0345483	0,035002	0,0364	0,0395778
13,9	0,0173232	0,0181263	0,0189623	0,0215211	0,035146	0,035701	0,037077	0,0403447
14	0,0178209	0,0186309	0,0195346	0,0222436	0,0358221	0,036354	0,037878	0,0412105
14,1	0,0183526	0,0191288	0,020114	0,0229196	0,0364617	0,037025	0,038632	0,041975
14,2	0,0188605	0,0196815	0,0206845	0,0236381	0,0372034	0,037733	0,039433	0,0427751
14,3	0,0193576	0,0202426	0,0212363	0,0244177	0,0378564	0,038473	0,040212	0,0434033
14,4	0,0198654	0,0208027	0,0218412	0,0252124	0,0386125	0,039164	0,040844	0,0440371
14,5	0,0204112	0,0213977	0,0224587	0,0260423	0,0392481	0,039906	0,041574	0,044786
14,6	0,0209316	0,0219825	0,0230873	0,0268514	0,0398337	0,040663	0,042268	0,0454209
14,7	0,0215024	0,0225636	0,023722	0,0276571	0,040437	0,0413	0,043019	0,0460983
14,8	0,0220814	0,0231541	0,0243679	0,0284388	0,0411397	0,041992	0,043735	0,0468812
14,9	0,0226991	0,0237384	0,0250126	0,0293335	0,0417936	0,042654	0,044416	0,0475985
15	0,0232776	0,0243691	0,0256871	0,0301083	0,0425245	0,043351	0,045246	0,0483383
15,1	0,0239014	0,0250171	0,0263609	0,0309142	0,0432486	0,044027	0,04593	0,0490713
15,2	0,0244673	0,02567	0,0271231	0,0318535	0,0439	0,044631	0,046635	0,0498051
15,3	0,0250819	0,0263445	0,02782	0,0327403	0,0446308	0,045237	0,047273	0,0506102
15,4	0,0257219	0,0270491	0,0284919	0,0336227	0,0452907	0,045894	0,048022	0,0513097
15,5	0,0263757	0,0277571	0,0292028	0,0344531	0,0461138	0,046443	0,048748	0,0520765
15,6	0,0270463	0,0284277	0,0299513	0,0353295	0,0468829	0,047103	0,049411	0,0527889
15,7	0,027721	0,0291384	0,0307144	0,0361327	0,0476329	0,047845	0,050226	0,0535949
15,8	0,0284349	0,029897	0,0315323	0,0369741	0,0482836	0,048494	0,05102	0,0542951
15,9	0,0290744	0,0306285	0,0323178	0,0378802	0,048958	0,051728	0,055192	0,0582616
16	0,029732	0,0313691	0,0331097	0,0387628	0,0496909	0,052305	0,055942	0,0591245

B.2 Perhitungan Nilai Koefisien Difusi Besi dalam Logam Cair dengan Injeksi Gas Nitrogen

Suhu (°C)	Suhu (K)	slope	D(m ² /s)	log D	1/T	1/T (K ⁻¹)
650	923	0,002878493	4,79749E-12	-11,319	0,001538	0,001083
675	948	0,003014619	5,02437E-12	-11,2989	0,001481	0,001055
700	973	0,003178511	5,29752E-12	-11,2759	0,001429	0,001028
725	998	0,003198536	5,33089E-12	-11,2732	0,001379	0,001002
800	1073	0,003420842	5,7014E-12	-11,244	0,00125	0,000932
850	1123	0,007398719	1,23312E-11	-10,909	0,001176	0,00089
900	1173	0,010501811	1,7503E-11	-10,7569	0,001111	0,000853
950	1223	0,011053913	1,84232E-11	-10,7346	0,001053	0,000818
1000	1273	0,011962739	1,99379E-11	-10,7003	0,001	0,000786

B.4 Visualisasi Struktur Besi dalam Logam Cair Setelah 16 ps Waktu Simulasi



LAMPIRAN C. HASIL UJI EKUILIBRASI SISTEM**C.1 Uji Ekuilibrasi Sistem Simulasi tanpa Gas Nitrogen****C.2 Uji Ekuilibrasi Sistem Simulasi dengan Inhibitor Gas Nitrogen**