



**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PENGARUH UNSUR  
(Cr,Ni) PADA PENGHAMBATAN KOROSI BAJA Fe-Cr/Ni  
DALAM TIMBAL CAIR**

**Skripsi**

**Oleh**

**ERNIK DWI SAFITRI  
NIM 121810201054**

**JURUSAN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS JEMBER  
2017**



**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PENGARUH UNSUR  
(Cr, Ni) PADA PENGHAMBATAN KOROSI BAJA Fe-Cr/Ni  
DALAM TIMBAL CAIR**

**SKRIPSI**

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat  
untuk menyelesaikan Program Studi Ilmu Fisika (S-1)  
dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh

**Ernik Dwi Safitri  
NIM 121810201054**

**JURUSAN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS JEMBER  
2017**

## PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Ayahanda Sunoko dan Ibunda Siti Nurul Asma yang terkasih, terima kasih telah memberikan cinta kasih dan kehidupan yang luar biasa;
2. kakek Alm. Marjan, nenek Alm. Siti Aminah, dan sahabat Alm. Wiwik Mujiati, yang selama hidupnya mengajarkan banyak hal dan telah menjadi motivator yang selalu menemani dan mengingatkan;
3. kakak Hendrik Kasa Putra dan keluarga besar lainnya yang selalu memberi semangat dan kebahagiaan;
4. guru-guru yang telah membimbing dan mendidik secara formal maupun non-formal sejak taman kanak-kanak sampai perguruan tinggi;
5. Almamater Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

**MOTTO**

Jika kamu sanggup menembus (melintasi) penjuru langit dan bumi, maka lintasilah, kamu tidak dapat menembusnya kecuali dengan kekuatan.

(Terjemahan Surat *Ar-Rahmaan* ayat 33)<sup>\*)</sup>

Faith is to believe what you do not see yet; the reward for this faith is to see what you believe.

(St. Augustine)<sup>\*\*)</sup>

Jejak-jejak kaki di pasir waktu, tidak dibuat sambil duduk.

(James Lee Valentine)<sup>\*\*\*)</sup>

\*) QS. Asy-Syarah, terjemahan ayat 33, Departemen Agama RI. 2010. *Al-qur'an Terjemahan dan Tafsir Per Kata*. Bandung. Jabal.

\*\*\*) Vilord, T.J.2001. *1001 Motivational Quotes for Succes*. Austin: Garden State Publishing.

\*\*\*) Mahya, H. A. *1001 Mutiara Kata*. 2012. Kalten: Cable Book.

**PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Ernik Dwi Safitri

NIM : 121810201054

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Simulasi Dinamika Molekul Pengaruh Unsur (Cr, Ni) pada Penghambatan Korosi Baja Fe-Cr/Ni dalam Timbal Cair” adalah karya ilmiah bersama dosen pembimbing dan saya sebagai mahasiswa, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Penelitian ini merupakan bagian dari penelitian bersama dosen dan mahasiswa, dan hanya dapat dipublikasikan dengan mencantumkan nama dosen pembimbing.

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, Mei 2017

Yang menyatakan,

Ernik Dwi Safitri  
NIM 121810201054

**SKRIPSI**

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PENGARUH UNSUR  
(Cr, Ni) PADA PENGHAMBATAN KOROSI BAJA Fe-Cr/Ni  
DALAM TIMBAL CAIR**

Oleh

**Ernik Dwi Safitri  
NIM 121810201054**

Pembimbing:

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

Dosen Pembimbing Anggota : Supriyadi, S.Si., M.Si.

**PENGESAHAN**

Skripsi berjudul “Simulasi Dinamika Molekul Pengaruh Unsur (Cr, Ni) pada Penghambatan Korosi Baja Fe-Cr/Ni dalam Timbal Cair” karya Ernik Dwi Safitri telah diuji dan disahkan secara akademis pada:

hari, tanggal :

tempat : FMIPA Universitas Jember

**Tim Penguji:**

Ketua

Anggota I

Dr.Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.  
NIP 19691225199901001

Supriyadi, S.Si., M.Si.  
NIP 198204242006041003

Anggota II

Anggota III

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

Bowo Eko Cahyono, S.Si., M.Si., Ph.D  
NIP 197202101998021001

Mengesahkan

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Drs. Sujito, Ph.D.  
NIP 196102041987111001

## RINGKASAN

**Simulasi Dinamika Molekul Pengaruh Unsur (Cr, Ni) pada Penghambatan Korosi Baja Fe-Cr/Ni dalam Timbal Cair;** Ernik Dwi Safitri, 121810201054; 2017; 52 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Reaktor pembiak cepat merupakan salah satu reaktor jenis baru (generasi IV) yang masih terus dikembangkan karena kelebihanannya menghasilkan efisiensi termal yang lebih besar. Namun, reaktor jenis ini memiliki sifat korosif yang tinggi pada timbal cair yang digunakan sebagai pendingin terhadap baja yang digunakan. Korosi yang terjadi disebabkan interaksi yang kuat antara atom-atom penyusun baja dengan logam cair pada temperatur yang tinggi. Hal ini menyebabkan terjadinya proses difusi yang sangat tinggi antara baja dan material pendingin. Penambahan unsur padu pada baja mampu meningkatkan ketahanan korosi baja ketika beroperasi pada temperatur tinggi.

Pada penelitian ini, simulasi dilakukan dengan meletakan baja paduan Fe-Cr/Ni dalam timbal cair pada temperatur 1023 K dengan konsentrasi atomik (Cr, Ni) dari 2% sampai 50% dengan interval 2%. Simulasi dimaksudkan untuk menghasilkan model material baja paduan yang tahan korosi pada temperatur tinggi. Simulasi dijalankan menggunakan metode dinamika molekul dengan fungsi potensial Lennard-Jones. Pada penelitian ini juga akan menggunakan program OVITO (*Open Visualization Tools*) untuk membantu visualisasi perubahan struktur atom setelah simulasi. Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui pengaruh unsur padu (Cr, Ni) terhadap difusi besi (Fe) dan struktur kristal paduan Fe-Cr/Ni sebagai parameter terjadinya proses penghambatan korosi pada baja dalam logam cair dengan temperatur tinggi.

Berdasarkan simulasi yang telah dilakukan, penambahan unsur padu (Cr, Ni) mampu menghambat korosi baja paduan Fe-Cr/Ni dalam timbal cair dengan menurunkan nilai difusi besi dan mempertahankan struktur paduan. Keutuhan struktur paduan ditunjukkan dengan peningkatan jumlah struktur kristal BCC dan penurunan jumlah kerusakan struktur atom dibanding besi murni tanpa unsur padu. Difusi besi terendah dihasilkan pada paduan Fe-48%Cr yang mampu mereduksi korosi sampai 49,225% dan paduan Fe-18%Ni yang mencapai 78,199%. Jumlah kerusakan struktur paling sedikit terdapat pada paduan Fe-48%Cr dan paduan Fe-20%Ni. Sedangkan untuk jumlah tertinggi struktur BCC yang mampu dipertahankan dihasilkan paduan Fe-8%Cr mencapai 46,175% dan Fe-14%Ni mencapai 37,987%. Selain penambahan unsur padu, penghambatan korosi juga dilakukan dengan penambahan inhibitor gas oksigen. Penginjeksian gas oksigen ke dalam timbal cair menurunkan nilai difusi besi pada paduan Fe-Cr/Ni dengan membentuk lapisan pelindung. Gas oksigen yang diinjeksikan melindungi struktur paduan dengan mempertahankan struktur kristal BCC.



## PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT atas segala limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Simulasi Dinamika Molekul Pengaruh Unsur (Cr, Ni) pada Penghambatan Korosi Baja Fe-Cr/Ni dalam Timbal Cair”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata (S-1) pada jurusan fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember. Penulisan skripsi tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama dan Supriyadi, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu dan pikiran di tengah kesibukan untuk memberikan arahan, perbaikan dan dukungan dalam penyelesaian skripsi ini;
2. Drs. Yuda Cahyoargo Hariadi, M.Sc., Ph.D., selaku Dosen Penguji Utama dan Bowo Eko Cahyono, S.Si., M.Si., Ph.D., selaku Dosen Penguji Anggota yang telah meluangkan waktu dan pikiran di tengah kesibukan untuk menguji dan memberikan masukan demi perbaikan skripsi ini;
3. segenap dosen Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Jember yang telah menyalurkan ilmu dan memberikan motivasi selama perkuliahan;
4. Ayahanda Sunoko, Ibunda Nurul Asma, Kakak Hendrik Kasa Putra, serta keluarga besar tercinta yang selalu memberikan doa dan semangat demi terselesaikannya skripsi ini;
5. Program beasiswa Bidik Misi periode 2012-2016, terima kasih kepada pemerintah atas dukungan dan bantuannya secara material;
6. teman-teman Fisika angkatan 12, teman-teman Gadis Jelita, teman-teman komputasi, dan keluarga besar HIMAFI yang telah memberikan kasih sayang, persahabatan, dorongan, semangat, dan pelajaran hidup yang sangat berharga;
7. kakak-kakak alumni Jurusan Fisika terutama bidang komputasi terima kasih untuk arahan dan ilmunya;

8. seluruh staf dan karyawan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember yang telah membantu dalam hal administrasi maupun non-administrasi.

Penulis menyadari bahwa penyusunan skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh sebab itu, saran dan kritik yang membangun dari pembaca sangat diharapkan demi perbaikan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat yang berkelanjutan.

Jember, Mei 2017

Penulis

**DAFTAR ISI**

	<i>Halaman</i>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b> .....	ii
<b>HALAMAN MOTTO</b> .....	iii
.....	
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	iv
<b>HALAMAN PEMBIMBING</b> .....	v
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	vi
<b>RINGKASAN</b> .....	vii
<b>PRAKATA</b> .....	viii
<b>DAFTAR ISI</b> .....	x
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	xiii
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b> .....	xvi
<b>BAB 1. PENDAHULUAN</b> .....	1
<b>1.1 Latar Belakang</b> .....	1
<b>1.2 Rumusan Masalah</b> .....	4
<b>1.3 Tujuan</b> .....	4
<b>1.4 Manfaat</b> .....	4
<b>BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	5
<b>2.1 Korosi Logam</b> .....	5
<b>2.2 Material</b> .....	6
2.2.1 Besi (Fe).....	6
2.2.2 Besi(II)-Kromium (FeCr).....	6
2.2.3 Besi(II)-Nikel (FeNi).....	7
2.2.3 Timbal Cair (Pb).....	8
<b>2.3 Penghambatan Korosi</b> .....	8
<b>2.4 Struktur Kristal</b> .....	9
<b>2.5 Dinamika Molekul</b> .....	10
2.5.1 Algoritma Beeman.....	11

2.5.2 Interaksi Atom.....	12
2.5.3 Fungsi Potensial Lennard-Jones.....	13
<b>2.6 Difusi Material.....</b>	<b>15</b>
2.6.1 Mekanisme Difusi.....	15
2.6.2 Koefisien Difusi.....	16
2.6.3 Faktor-faktor yang Mempengaruhi Difusi.....	17
2.6.4 <i>Mean Square Displacement</i> (MSD).....	17
<b>2.7 MOLDY.....</b>	<b>17</b>
<b>2.8 OVITO.....</b>	<b>18</b>
.....	
<b>BAB 3. METODE PENELITIAN.....</b>	<b>19</b>
<b>3.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....</b>	<b>19</b>
<b>3.2 Alat dan Bahan Penelitian.....</b>	<b>19</b>
<b>3.3 Prosedur Pelaksanaan.....</b>	<b>19</b>
3.3.1 Diagram Alir Penelitian.....	20
3.3.2 Pemodelan Sistem Simulasi.....	21
3.3.3 Parameter <i>Input</i> .....	22
3.3.4 Langkah Kerja.....	23
<b>3.4 Metode Analisis.....</b>	<b>24</b>
<b>BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>26</b>
<b>4.1 Keseimbangan Energi Sistem Simulasi.....</b>	<b>26</b>
<b>4.2 Difusi Besi (Fe) dalam Timbal Cair (FePb).....</b>	<b>28</b>
<b>4.3 Pengaruh Kromium pada Baja FeCr.....</b>	<b>31</b>
4.3.1 Baja FeCr dalam Timbal Cair.....	31
4.3.2 Baja FeCr dalam Timbal Cair dengan Injeksi <i>Inhibitor</i> Gas Oksigen.....	37
<b>4.4 Pengaruh Nikel pada Baja FeNi.....</b>	<b>40</b>
4.4.1 Baja FeNi dalam Timbal Cair.....	40
4.4.2 Baja FeNi dalam Timbal Cair dengan Injeksi <i>Inhibitor</i> Gas Oksigen.....	45
<b>BAB 5. PENUTUP.....</b>	<b>48</b>

<b>5.1 Kesimpulan</b> .....	48
<b>5.2 Saran</b> .....	49
<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	50
<b>LAMPIRAN</b> .....	53



**DAFTAR GAMBAR**

	<i>Halaman</i>
2.1 Korosi baja pada reaktor Davis-Besse .....	6
2.2 Penampang lapisan oksida pelindung.....	9
2.3 (a)Struktur kristal FCC (b)Struktur kristal BCC (c)Struktur kristal HCP..	10
2.4 Grafik fungsi potensial Lennard-Jones.....	13
2.5 (a)Paduan sebelum terdifusi (b)Paduan setelah terdifusi.....	15
2.6 Tampilan OVITO .....	19
3.1 Diagram alir penelitian.....	20
3.2 Visualisasi (a)Timbal cair (b)Paduan Baja Fe-36%Cr (c)Hasil pemodelan baja paduan FeCr dalam timbal cair.....	21
4.1 Kurva kesetimbangan energi pada sistem FeCrPb.....	27
4.2 Kurva kesetimbangan energi pada sistem FeNiPb.....	27
4.3 Kurva log (D) terhadap (1/T) pada besi yang diletakkan ke dalam timbal cair.....	28
4.4 Kurva difusi besi terhadap perubahan temperatur dalam sistem besi yang diletakan dalam timbal cair.....	30
4.5 Kurva difusi besi terhadap konsentrasi atomik kromium pada baja FeCr di dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	31
4.6 Visualisasi baja Fe-48%Cr dalam timbal cair pada temperatur 1023 K....	32
4.7 Visualisasi struktur baja setelah diletakkan dalam timbal cair pada temperatur 1023 K (a)Fe (b)Fe-48%Cr.....	33
4.8 Visualisasi struktur kristal baja setelah diletakan dalam timbal cair pada temperatur 1023 K (a)Fe (b)Fe-8%Cr.....	34
4.9 Kurva struktur kristal BCC baja FeCr terhadap konsentrasi atomik kromium pada baja FeCr dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	35
4.10 Kurva struktur atom tak terdefinisi baja FeCr terhadap konsentrasi atomik kromium baja FeCr dalam timbal cair pada temperatur 1023 K...	36
4.11 Kurva difusi besi baja FeCr terhadap jumlah atom oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	37

4.12	Visualisasi struktur baja setelah diletakkan dalam timbal cair dengan injeksi gas oksigen pada temperatur 1023 K (a)FeCrPbO (b)FeCrO.....	38
4.13	Visualisasi struktur kristal baja FeCr setelah diletakkan dalam timbal cair dengan penginjeksian gas oksigen pada temperatur 1023 K.....	39
4.14	Kurva struktur kristal BCC baja FeCr terhadap jumlah atom oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair.....	39
4.15	Kurva difusi besi terhadap konsentrasi atomik nikel pada baja FeNi dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	41
4.16	Visualisasi hasil simulasi baja setelah diletakkan dalam timbal cair pada temperatur 1023 K (a)Fe (b)Fe-18%Ni.....	42
4.17	Visualisasi struktur kristal baja setelah diletakkan dalam timbal cair pada temperatur 1023 K (a)Fe (b)Fe-14%Ni.....	42
4.18	Kurva struktur kristal BCC baja FeNi terhadap konsentrasi atomik nikel pada paduan FeNi di dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	43
4.19	Kurva jumlah struktur atom tak terdefinisi baja FeNi terhadap konsentrasi atomik nikel pada paduan FeNi di dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	44
4.20	Kurva difusi besi terhadap jumlah atom oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	45
4.21	Visualisasi struktur kristal setelah diletakkan dalam timbal cair dengan injeksi oksigen pada temperatur 1023 K (a)FeNiPbO (b)FeNiO.....	46
4.22	Visualisasi struktur kristal baja FeNi setelah diletakkan dalam timbal cair dengan penginjeksian gas oksigen pada temperatur 1023 K.....	46
4.23	Kurva struktur kristal BCC baja FeNi terhadap jumlah atom oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	47

**DAFTAR LAMPIRAN**

	<i>Halaman</i>
4.1 Reduksi Korosi dengan Penambahan Kromium (Cr).....	54
4.2 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium (Cr).....	54
4.3 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-24%CrPbO.....	55
4.4 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-26%CrPbO.....	55
4.5 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-34%CrPbO.....	56
4.6 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-36%CrPbO.....	56
4.7 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-38%CrPbO.....	56
4.8 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-48%CrPbO.....	56
4.9 Reduksi Korosi dengan Penambahan Cr pada Fe-50%CrPbO.....	57
4.10 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-24%CrPbO.....	57
4.11 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-26%CrPbO.....	57
4.12 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-34%CrPbO.....	57
4.13 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-36%CrPbO.....	58
4.14 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-38%CrPbO.....	58
4.15 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-48%CrPbO.....	58
4.16 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Kromium Fe-50%CrPbO.....	58
4.17 Reduksi Korosi dengan Penambahan Nikel (Ni).....	59
4.18 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Nikel (Ni).....	59
4.19 Reduksi Korosi dengan Penambahan Nikel (Ni) pada Konsentrasi Atomik 18%Ni.....	60
4.20 Keutuhan Struktur Kristal BCC dengan Penambahan Nikel (Ni) pada	



Konsentrasi Atomik 18%Ni..... 60

.....



## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Peningkatan jumlah reaktor secara internasional terjadi setiap tahunnya dan saat ini terdapat sekitar 800 reaktor yang beroperasi di seluruh dunia. Sejak awal pemanfaatan reaktor nuklir hingga sekarang terdapat tiga jenis reaktor yang telah digunakan yaitu reaktor termal, reaktor cepat, dan reaktor pembiak cepat (*fast breeder reactor*). Reaktor pembiak cepat merupakan salah satu reaktor jenis baru (generasi IV) yang masih terus dikembangkan. Pemilihan material yang digunakan dalam reaktor harus berdasarkan pada sifat-sifat keteknikan konvensional tertentu seperti kekuatan mekanik, keliatan, keuletan, integritas struktur, penghantar panas, kestabilan termal, dan ketahanan terhadap korosi (Soentono, 1998).

Ketahanan terhadap kerusakan material misalnya korosi menjadi salah satu fokus penelitian saat ini pada reaktor pembiak cepat, karena sifat korosif yang tinggi pada timbal cair yang digunakan sebagai pendingin terhadap baja yang digunakan. Sementara reaktor jenis ini sangat menjanjikan dikembangkan untuk menghasilkan kestabilan pasokan energi. Interaksi yang kuat antara atom-atom penyusun baja dengan logam cair pada temperatur yang tinggi menyebabkan terjadinya proses difusi yang sangat tinggi antara baja dan material pendingin. Proses difusi ini menyebabkan korosi yang dapat menimbulkan kerusakan struktur material pada baja (Zhang, 2009). Dalam perkembangannya, dikenal logam paduan yang memiliki ketahanan yang baik terhadap korosi. Jenis baja yang terdiri dari besi (Fe) dan nikel (Ni) yang ditambah dengan unsur padu diantaranya yaitu aluminium (Al) dan kromium (Cr) yang dikenal dengan nama *stainless steel* (baja antikorosi) dan *super alloy* (Dients dalam Baiyinah dan Hidayat, 2005).

Penelitian untuk penghambatan korosi pada reaktor nuklir secara komputasi terus dilakukan sampai saat ini untuk melengkapi penelitian-penelitian eksperimen sebelumnya. Penghambatan korosi pada material reaktor nuklir

pernah diteliti secara simulasi sebelumnya diantaranya oleh Maulana *et al.* (2007) yang meneliti fenomena korosi pada baja tahan karat dalam logam cair PbBi. Penelitian ini menunjukkan bahwa penambahan unsur kromium (Cr) dan nikel (Ni) mampu meningkatkan ketahanan perembasan atom Pb ke dalam dinding penetrasi Fe.

Baja tahan karat yang baik pada temperatur tinggi diperoleh dengan cara menambahkan nikel dan kromium untuk menghasilkan suatu struktur yang berlapis (Indiyanto, Tanpa Tahun). Kromium dan nikel dikenal sebagai material *super alloy* yang memiliki sifat mekanik yang baik pada temperatur dan tekanan tinggi dengan ketahanan korosi yang cukup tinggi (Dients dalam Baiyinah dan Hidayat, 2005). Penambahan kromium di atas 12% mampu menghambat korosi dengan bersifat sebagai penstabil fase *ferrit*, sedangkan penambahan nikel dengan konsentrasi rendah mampu menghambat baja tahan karat *ferrit* dan penambahan nikel di atas 20% untuk baja *superaunstenit* (Wessman, 2003).

Pada penghambatan korosi, selain penambahan material komponen lain pada material baja yang digunakan, telah ditemukan *inhibitor* korosi melalui injeksi oksigen untuk menurunkan tingkat korosi pada baja. Penambahan *inhibitor* melalui injeksi oksigen dalam mekanisme penghambatan korosi juga telah dilakukan diantaranya oleh Zhang (2009), Arkundato *et al.* (2013), dan Bahar (2015) untuk menghambat korosi baja yang digunakan dalam reaktor nuklir. Berdasarkan pada penelitian Zhang (2009) menunjukkan bahwa oksigen merupakan jenis *inhibitor* efektif dalam membentuk lapisan pelindung korosi pada baja. Mekanisme penghambatan korosi melalui injeksi oksigen dipengaruhi oleh konsentrasi oksigen, temperatur, dan komposisi material.

Mekanisme korosi terjadi akibat difusi yang tinggi terjadi antara atom-atom baja pelapis reaktor dan atom-atom material pendingin (logam cair). Difusi merupakan salah satu parameter fisis yang dapat digunakan untuk mengidentifikasi mekanisme korosi yang terjadi pada baja. Sebagai upaya untuk melengkapi penelitian sebelumnya mengenai korosi yang terjadi pada pendingin reaktor pembiak cepat terhadap baja yang digunakan, maka dalam penelitian ini

penulis akan mencoba menyimulasikan baja FeCr dan baja FeNi yang dimasukkan ke dalam timbal cair dengan injeksi *inhibitor*.

Pada penelitian ini akan meninjau pengaruh penambahan unsur padu kromium (Cr) dan nikel (Ni) terhadap nilai difusi besi dan struktur kristal baja Fe-Cr/Ni sebagai parameter terjadinya proses korosi. Penelitian ini akan menggunakan metode dinamika molekul untuk menyimulasikan gerak atom yang terjadi dalam sistem. Metode dinamika molekul bekerja berdasarkan prinsip mekanika klasik yaitu penyelesaian hukum Newton yang dikerjakan menggunakan simulasi komputer berdasarkan algoritma integrasi tertentu (Refson dalam Arkundato, 2013). Dalam simulasi ini akan menggunakan program MOLLY (*Molecular Dynamics*) yang bersifat *open source* sehingga *software* mudah untuk diperoleh. Program MOLLY dilengkapi dengan panduan yang memudahkan untuk dipelajari. Dalam proses simulasi akan digunakan interaksi potensial Lennard-Jones untuk mendefinisikan interaksi yang terjadi antara atom-atom selama simulasi. Interaksi Lennard-Jones merupakan interaksi antara atom yang dipengaruhi oleh parameter jarak pisah dan energi antar atom. Pada penelitian ini juga akan menggunakan program OVITO (*Open Visualization Tools*) untuk membantu visualisasi perubahan struktur atom selama simulasi.

Penelitian ini akan membandingkan nilai difusi dari unsur Fe terhadap pengaruh variasi konsentrasi atomik unsur padu (Cr, Ni) dalam baja Fe-Cr/Ni dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekul program MOLLY. Hasil simulasi ini akan digunakan untuk mengidentifikasi pengaruh penambahan unsur padu (Cr, Ni) terhadap nilai difusi besi pada baja Fe-Cr/Ni yang dimasukan ke dalam timbal cair, hal ini sebagai upaya dalam menghambat korosi pada baja. Melalui simulasi ini diharapkan dapat memberikan informasi untuk melengkapi penelitian sebelumnya mengenai pengaruh penambahan unsur paduan baja dalam pengembangan reaktor pembiak cepat (*Fast Breeder Reactor*).

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah yang muncul adalah:

1. Bagaimana pengaruh unsur padu kromium (Cr) dan nikel (Ni) dalam menghambat korosi ditinjau dari nilai difusi besi?.
2. Bagaimana pengaruh unsur padu kromium (Cr) dan nikel (Ni) terhadap struktur kristal baja Fe-Cr/Ni setelah diletakkan dalam timbal cair?.
3. Bagaimana pengaruh *inhibitor* gas oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair dalam menghambat korosi baja Fe-Cr/Ni?.

## 1.3 Tujuan

Tujuan dari penelitian ini untuk mengetahui pengaruh unsur padu yaitu kromium (Cr) dan nikel (Ni) terhadap nilai difusi besi (Fe) dan struktur kristal baja Fe-Cr/Ni sebagai parameter terjadinya proses penghambatan korosi pada baja yang diletakkan dalam logam cair dengan temperatur tinggi.

## 1.4 Manfaat

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah memberikan sumbangan informasi pengaruh unsur padu (Cr, Ni) terhadap proses penghambatan korosi pada baja yang diletakkan dalam logam cair. Parameter yang digunakan untuk mengidentifikasi proses penghambatan korosi yaitu nilai difusi besi dan struktur kristal paduan. Penelitian ini dilakukan secara simulasi untuk mengidentifikasi karakteristik baja paduan dalam reaktor nuklir secara mikroskopik. Informasi ini sangat bermanfaat untuk melengkapi penelitian yang telah dilakukan secara eksperimen yang hanya meninjau sifat makroskopik pada baja paduan reaktor nuklir. Simulasi ini diharapkan dapat bermanfaat untuk melengkapi informasi mengenai karakteristik material dalam pemanfaatan reaktor nuklir sebagai sumber energi yang berkelanjutan.

## 2.1 Korosi Logam

Logam merupakan salah satu jenis material yang bersifat reaktif terhadap udara bebas dengan membentuk lapisan oksida. Lapisan ini akan bersifat merusak dan menyebabkan penurunan dari fungsi kerja logam maupun paduan logam yang bersangkutan (Smalman dan Bishop, 2000). Korosi merupakan gejala degradasi atau kerusakan material melalui reaksi elektrokimia yang spontan terhadap lingkungan.

Menurut Smalman dan Bishop (2000) korosi logam pada lingkungan yang berair terjadi oleh mekanisme yang melibatkan pelarutan logam seperti ion yang dapat dijelaskan melalui reaksi di bawah ini:

(2.1)

Pada korosi logam mengalami reaksi oksidasi dengan udara yang menyebabkan logam terionisasi. Ion logam akan berikatan dengan  $O_2$  dan membentuk besi(II) oksida yang bersifat korosif (Smalman dan Bishop, 2000). Korosi dapat ditinjau secara kimia melalui reaksi yang terjadi dan secara fisika melalui interaksi antara atom-atom pembentuk logam. Misalnya pada korosi yang terjadi pada selongsong bahan bakar reaktor nuklir yang terbuat dari baja dengan timbal cair yang berfungsi sebagai pendingin reaktor. Secara fisika, korosi ditinjau akibat interaksi yang kuat antara atom-atom baja dengan atom timbal cair yang menyebabkan terlarutnya atom-atom besi ke dalam timbal cair (Martinelli dalam Bahar, 2015). Proses pelarutan ini akan menimbulkan difusi atom-atom penyusun baja yang akan menyebar pada larutan timbal cair dan sebaliknya atom-atom timbal cair akan berdifusi ke dalam permukaan baja. Atom-atom timbal cair yang berdifusi dan menembus permukaan baja akan menyebabkan keretakan dan kerusakan pada struktur baja. Kelajuan difusi atom-atom akan mempengaruhi proses korosi yang terjadi, semakin cepat kecepatan proses difusi akan mempercepat laju korosi yang terjadi (Arkundato, 2013).



Gambar 2.1 Korosi baja pada reaktor Davis-Besse (Sumber: *Crpytome*, 2006)

Korosi yang terjadi secara berkelanjutan akan menyebabkan perubahan struktur material meliputi sifat mekanik dan sifat fisik. Perubahan struktur material akan menyebabkan kegagalan fungsi kerja material seperti terjadinya retakan atau kerusakan pada material akibat korosi (Zhang, 2009). Pada korosi baja yang terjadi akibat interaksi dengan lingkungannya yaitu timbal cair pada temperatur tinggi dapat dianggap tidak melibatkan reaksi kimia seperti terjadinya transfer elektron. Pada kasus ini korosi ditinjau secara fisika menggunakan metode dinamika molekul dengan hanya memandang interaksi antara benda netral melalui interaksi Lennard-Jones.

## 2.2 Material

### 2.2.1 Besi (Fe)

Besi merupakan salah satu unsur kimia yang banyak ditemukan dalam bentuk paduan dan memiliki sifat-sifat seperti kuat, liat, dan keras (Sari, 2011). Kekuatan besi ini bergantung pada susunan dari kristal besi. Besi merupakan salah satu jenis logam yang memiliki fenomena alotrofik yaitu fenomena perubahan bentuk susunan atomik besi ke bentuk susunan atom yang lain (Rohim, 1994). Struktur kristal besi terdiri dari struktur BCC (*Body-Centered Cubic*) pada temperatur rendah dan struktur FCC (*Face-Centered Cubic*) pada temperatur tinggi.

### 2.2.2 Besi(II)-Kromium (FeCr)

Kromium (Cr) merupakan salah satu paduan yang digunakan dalam pembentukan baja tahan karat. Kromium dapat membentuk lapisan pasif dengan kadar kromium 10,5% yang berfungsi untuk menghambat korosi. Kromium dikenal sebagai material *super alloy* yang memiliki sifat mekanik yang baik pada temperatur tinggi dan memiliki ketahanan yang tinggi terhadap korosi (Dients dalam Baiyinah dan Hidayat, 2005). Dalam jurnal (Wessman, 2003) menunjukkan bahwa kromium sebagai pengotor dalam paduan baja bersifat sebagai penstabil *ferrit* yang dapat menurunkan korosi dengan komposisi di atas 12%. Sedangkan komposisi kromium di atas 20% dibutuhkan untuk menghambat oksidasi gas pada temperatur yang tinggi.

Paduan FeCr dipilih sebagai komponen pelapis dalam reaktor karena memiliki kemampuan yang baik pada tekanan dan temperatur yang tinggi, serta memiliki kemampuan dalam menghambat korosi pada baja (Takasawa, 2002). Dalam penelitian Maulana *et al.* (2007) menunjukkan bahwa pada penambahan kromium sebanyak 16% (Fe-16%Cr) mampu menghambat korosi dengan menghasilkan kedalaman penetrasi sedalam 2,48Å. Dalam penelitian tersebut menjelaskan bahwa penambahan kromium (Cr) mampu meningkatkan dinding penetrasi dengan penurunan kemampuan difusi.

### 2.2.3 Besi(II)-Nikel (FeNi)

Nikel merupakan unsur yang memiliki sifat fisis dan mekanik yang baik seperti ketahanan terhadap oksidasi, membentuk larutan padat yang ulet dan kuat, serta memiliki ketahanan yang tinggi terhadap korosi pada temperatur tinggi. Penambahan nikel pada baja mampu meningkatkan ketahanan temperatur dengan menurunkan temperatur transformasi yang menghasilkan struktur *austenit* (Indiyanto, Tanpa Tahun). Kemampuan nikel beroperasi pada temperatur tinggi menjadikan nikel menjadi salah satu komponen penting pembuatan perangkat nuklir seperti sistem pendingin nuklir (Lister dan Cook, 2004).

Nikel sebagai salah satu unsur paduan baja mampu menghambat korosi dengan konsentrasi nikel rendah untuk baja tahan karat *ferrit* dan penambahan



nikel di atas 20% untuk baja *superaunstenit* (Wessman, 2003). Nikel mampu menghambat korosi dengan mempetahankan fase *aunstenit* pada baja serta membentuk lapisan pelindung pasif pada baja (Tran, 2015). Menurut James dan Trotman dalam Zhang (2009) menjelaskan bahwa baja yang mengandung nikel dan mangan mampu menghambat korosi ketika diletakkan dalam logam cair bismut karena memiliki kelarutan yang cukup tinggi. Penambahan nikel dalam paduan baja pernah diteliti secara simulasi sebelumnya oleh Maulana *et al.* (2007) yang menunjukkan bahwa penambahan nikel dengan konsentrasi atomik 10% mampu menghambat kedalaman penetrasi logam cair PbBi ke dalam baja sedalam 1,66Å.

#### 2.2.4 Timbal Cair (Pb)

Timbal merupakan unsur kimia yang memiliki simbol atomik Pb dengan nomor atom 82. Timbal dikenal sebagai salah satu jenis logam berat yang memiliki sifat lunak dan mudah dibentuk dengan sifat konduksi listrik. Timbal banyak dimanfaatkan sebagai pelindung karena sifat ketahanannya terhadap pancaran radioaktif maupun getaran. Timbal tersusun atas struktur kristal FCC (*Face-Centered Cubic*) dengan titik leleh 327 °C dan titik didih 1740 °C (Bentor dan Yinon dalam Arkundato, 2013). Timbal memiliki karakteristik yang sesuai sebagai material pendingin pada reaktor nuklir diantaranya memiliki titik didih tinggi, tekanan uap rendah, dan transfer panas yang baik (Hatta *et al.* dalam Maulana, 2007). Namun, sebagai pendingin reaktor nuklir timbal cair bersifat korosif terhadap baja yang digunakan dalam reaktor pada temperatur operasi yang tinggi (Zhang, 2009).

### 2.3 Penghambatan Korosi

Mekanisme penghambatan korosi dilakukan melalui pembentukan lapisan pelindung yang berfungsi untuk melindungi baja dari kontak langsung dengan logam cair sebagai pendingin dalam reaktor nuklir yang bersifat korosif. Penghambatan korosi ini dilakukan misalnya melalui injeksi *inhibitor* yang diberikan pada logam cair, pada penelitian ini pendingin yang digunakan yaitu

timbangan. Menurut Zhang (2009) *inhibitor* didefinisikan sebagai zat kimia yang saat ditambahkan dalam konsentrasi yang cukup kecil pada suatu sistem akan efektif dalam menurunkan kelajuan korosi yang terjadi. Oksigen selama ini dianggap sebagai salah satu jenis *inhibitor* yang efektif dalam mengurangi korosi akibat logam cair seperti timbal.

Gambar 2.2 Penampang lapisan oksida pelindung (Sumber: Furukawa *et al.*, 2004)

Oksigen bereaksi dengan komponen utama dari baja seperti Fe, Cr dan Ni untuk membentuk lapisan oksida pelindung. Film oksida yang terbentuk akan memisahkan baja dari logam cair. Setelah film oksida terbentuk difusi logam cair pada baja yang digunakan akan menurun karena terhalang oleh lapisan pelindung (Zhang, 2009).

Penelitian Arkundato (2013) secara simulasi mengenai besi murni yang diletakkan dalam logam cair. Penelitian tersebut menunjukkan atom-atom oksigen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair berkumpul dan mengelilingi besi membentuk lapisan tertentu. Lapisan tersebut merupakan lapisan tipis yang melindungi interaksi besi dan timbal cair. Penginjeksian oksigen ke dalam logam cair menghambat korosi dengan membentuk lapisan pelindung pada besi.

## 2.4 Struktur Kristal

Sifat dan karakteristik dalam zat padat ditentukan oleh struktur kristal yang terdapat dalam material tersebut. Kristal merupakan salah satu jenis struktur atom yang tersusun secara teratur dan periodik (berulang) dalam bentuk tiga dimensi dengan setiap atom saling berikatan dengan atom-atom lain yang memiliki jarak terdekat (Calister dan Retwisch, 2009). Susunan kristal menentukan karakteristik yang dimiliki oleh material tersebut seperti sifat mekanik, sifat magnetik, dan sifat kelistrikan material.

Menurut Calister dan Retwisch (2009), untuk material jenis logam struktur kristalnya digambarkan dalam bentuk bola pejal dengan struktur yang meliputi *Face-Centered Cubic* (FCC), *Body-Centered Cubic* (BCC), dan *Hexagonal-Closed Cubic* (HCP) seperti pada Gambar 2.3.

Gambar 2.3 (a) Struktur kristal FCC (b) Struktur kristal BCC (c) Struktur kristal HCP

(Sumber: Calister dan Retwisch dalam Lister dan Cook, 2004)

Struktur FCC merupakan struktur kristal geometri kubik dengan atom-atom yang memiliki  $\frac{1}{8}$  di setiap sudut dan  $\frac{1}{2}$  atom pada permukaan kubus. Untuk struktur BCC merupakan struktur kristal geometri kubik dengan  $\frac{1}{8}$  atom yang terletak di setiap sudut dan 1 atom pada pusat dari badan kubus. Sedangkan HCP memiliki struktur dengan 3 atom di tengah,  $\frac{1}{2}$  atom pada permukaan dan  $\frac{1}{6}$  atom titik-titik sudutnya. Kristal FCC tersusun dari 4 atom, kristal BCC tersusun 2 atom, dan HCP tersusun dari 6 atom (Calister dan Retwisch, 2009).

## 2.5 Dinamika Molekul

Dinamika molekul (MD) merupakan teknik simulasi komputer dengan meninjau perubahan waktu dari kelompok atom-atom atau molekul yang berinteraksi secara teratur (Car dan Parrinello, 1985). Metode dinamika molekul bekerja berdasarkan prinsip mekanika klasik yaitu penyelesaian hukum Newton. Total gaya yang bekerja dalam interaksi atom  $i$  dituliskan sebagai:

(2.2)

persamaan gerak Newton dituliskan:

(2.3)

dimana merupakan posisi dari atom  $i$  dan adalah percepatan yang bekerja dalam sistem dengan adalah masa dari atom  $i$ . Secara umum sistem yang terdiri dari jumlah  $N$  atom memiliki fungsi potensial yang bergantung pada posisi antar atom adalah:

(2.4)

Gerak mekanika klasik menyatakan bahwa gaya merupakan negatif dari gradien fungsi potensial. Partikel dengan jumlah  $N$  dalam sebuah sistem dan interaksi yang dilakukan menghasilkan potensial antara atom sebesar  $V$ , maka persamaan gaya yang bekerja untuk setiap partikel adalah:

(2.5)

Penyelesaian dari hukum Newton dapat dihubungkan bahwa:

(2.6)

(2.7)

Gaya yang bekerja pada sebuah sistem dengan jumlah atom sebanyak  $N$  dapat diidentifikasi nilainya dengan menghitung negatif gradien dari potensial yang dihasilkan dari interaksi antar atom (Fransson dan Hakansson, 2014). Simulasi dinamika molekul menghasilkan informasi mikroskopik berupa koordinat dan kecepatan atom – atom.

### 2.5.1 Algoritma Beeman

Algoritma Beeman merupakan salah satu algoritma yang digunakan untuk mengintegrasikan persamaan Newton dari gerak benda. Algoritma ini digunakan untuk menghitung trayektori dalam simulasi dinamika molekul berdasarkan interaksi antar partikel. Sistem dengan jumlah  $N$  partikel menghasilkan 3 gambaran dari posisi, kecepatan, dan percepatan pada waktu  $t$  (Zhang, 2015).

Menurut Beeman dalam Sadus (2002), algoritma Beeman digunakan untuk menghitung posisi dan kecepatan sebagai fungsi waktu dalam sistem yang dapat dituliskan sebagai berikut:

(2.8)

(2.9)

Persamaan ini dikenal sebagai algoritma Beeman yang dimanfaatkan untuk sistem dengan persamaan menggunakan perubahan waktu ( $\Delta t$ ) untuk menentukan posisi dari atom (Saljie, 1987). Kelebihan algoritma Beeman yaitu menggunakan ekspresi yang lebih teliti untuk kecepatan dan konservasi energi yang lebih baik, sehingga menghasilkan akurasi nilai posisi yang lebih baik dibandingkan dengan algoritma lainnya. Nilai posisi  $r(t)$  dan kecepatan  $v(t)$  yang diperoleh selanjutnya

dapat digunakan untuk menghitung besaran-besaran fisika lain yang ingin diketahui.

### 2.5.2 Interaksi Atom

Besarnya potensial untuk setiap atom bergantung berdasarkan kedudukan atom itu sendiri serta kedudukannya relatif terhadap atom-atom lain yang berdekatan.

#### a. *Non-Bonded interaction*

Potensial yang hanya bergantung pada kedudukan atom tersebut sendiri tanpa pengaruh dari atom-atom lain dengan energi potensial yang dimiliki hanya bergantung pada nilai atom itu sendiri. Menurut Car dan Parrinello (1985) persamaan *non-bonded interaction* dapat dituliskan :

(2.10)

dengan  $u(r)$  merupakan medan potensial yang dihasilkan oleh permukaan atom.

#### b. *Bonded interaction*

Atom yang melakukan interaksi dengan atom lain memiliki nilai energi potensial yang sebanding dengan gaya yang bekerja antar atom :

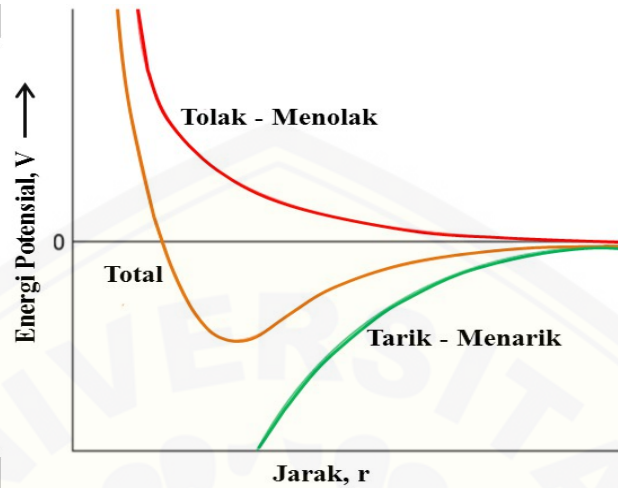
(2.11)

Ketika antar atom memiliki jarak yang berdekatan maka akan terbentuk interaksi antar atom akibat gaya yang disebabkan oleh atom satu terhadap yang lainnya. Pada interaksi atom terdapat dua jenis interaksi yang terjadi antar atom yaitu interaksi tarik-menarik dan interaksi tolak-menolak yang besarnya bergantung pada jarak yang memisahkan antar atom (Calister dan Retwisch, 2009).

### 2.5.3 Fungsi Potensial Lennard-Jones

Fungsi potensial Lennard-Jones dimodelkan dengan dua gaya yang terpisah antara molekul dan atom netral. Gaya-gaya ini dihasilkan berdasarkan jarak antara molekul. Gaya tarik menarik menyebabkan atom-atom berpindah mendekat sedangkan gaya tolak-menolak membuat molekul berpisah menjauh. Hal ini

menyebabkan molekul mempertahankan keseimbangan alamiah dengan memberikan interaksi tarik-menarik dan tolak-menolak (Spears *et al.*, 1998).



Gambar 2.4 Grafik fungsi potensial Lennard-Jones (Sumber: Paulo dan Atkins, 2013)

Gambar 2.4 menunjukkan kurva fungsi potensial Lennard-Jones dengan garis berwarna merah merupakan interaksi tolak-menolak dan garis berwarna hijau merupakan interaksi tarik-menarik. Pada jarak sangat dekat antar atom akan saling tolak-menolak sesuai dengan prinsip Pauli. Ketika berada pada jarak yang cukup jauh akan muncul interaksi tarik menarik antar atom yang dipengaruhi oleh gaya Van Der Waals akibat oleh interaksi dipole-dipole (Bharadwaja, 2012).

Menurut Bharadwaja (2012), persamaan potensial Lennard-Jones dapat dituliskan sebagai fungsi potensial yang bergantung pada jarak dan energi:

$$(2.12)$$

dimana merupakan parameter energi (*well dept*) dalam satuan (eV) dan adalah parameter jarak (diameter atom) dalam satuan angstrom ( $\text{\AA}$ ) dengan  $r$  adalah jarak yang memisahkan antar atom. Besarnya medan potensial yang dihasilkan oleh interaksi atom bergantung pada nilai *cut off* yang terbentuk dari interaksi. Nilai *cut off* ini menunjukkan jarak batas medan yang masih dipengaruhi oleh interaksi antar atom.

Menurut Li dalam Vita (2015) menyatakan bahwa Potensial Lennard-Jones memiliki karakteristik potensial tertentu sebagai berikut:

1. merupakan titik interaksi tolak-menolak antar atom. Ketika  $r < r_0$  maka kedua atom akan saling menjauh akibat interaksi tolak-menolak karena jarak yang sangat dekat.
2.  $r_0$  dan  $E_0$  merupakan titik dengan nilai potensial yang paling rendah. Ketika  $r = r_0$  nilai  $E$  merupakan titik terjadinya interaksi tarik-menarik antar atom.
3.  $E_0$  akan menyebabkan terbentuknya gaya tarikan ketika  $r > r_0$  dan meluruh ketika  $r \rightarrow \infty$ .  $E_0$  akan menyebabkan terbentuknya gaya tolakan ketika  $r < r_0$ .

Parameter Lennard-Jones untuk atom dari jenis yang berbeda dimodelkan dengan kombinasi persamaan Lorentz-Berthelot. Berdasarkan persamaan Lorentz-Berthelot menyatakan bahwa parameter jarak yang terbentuk antara dua jenis atom yang berbeda menghasilkan persamaan:

$$(2.13)$$

Sedangkan untuk parameter energi yang dihasilkan dari campuran atom-atom yang memiliki jenis berbeda adalah:

$$(2.14)$$

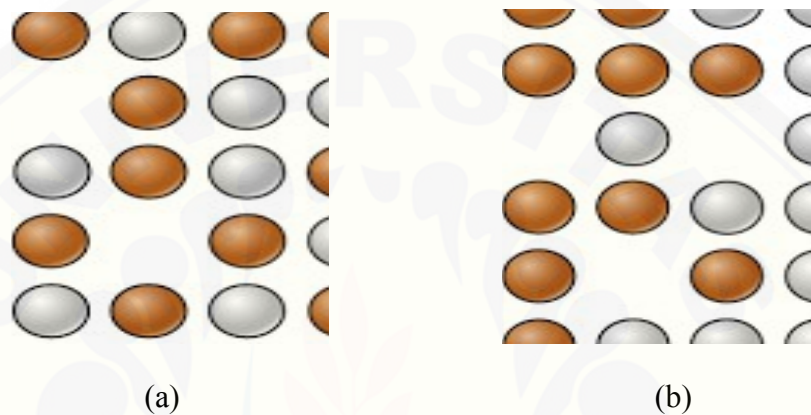
dimana indek  $i$  menunjukkan atom jenis pertama dengan parameter  $\sigma_i$  dan indek  $j$  merupakan atom kedua dengan parameter  $\sigma_j$  (Blyverket, 2015).

## 2.6 Difusi Material

Difusi secara mikroskopik didefinisikan sebagai perpindahan atom dari satu kisi ke kisi yang lainnya, sedangkan secara makroskopik difusi didefinisikan sebagai proses aliran material (baik dalam bentuk ion, atom, maupun molekul) karena pengaruh besaran fisis yang dikerjakan kepada material tersebut. Untuk membuat sebuah atom dapat berpindah maka harus terpenuhi kondisi (1) terdapat sisi yang kosong yang berdekatan dengan atom, dan (2) atom harus memiliki energi yang cukup untuk memecah ikatannya dengan atom-atom lain yang berdekatan dan menyebabkan beberapa kisi mengalami perubahan selama perpindahan atom (Calister dan Retwisch, 2009).

### 2.6.1 Mekanisme Difusi

Difusi terjadi ketika terdapat kekosongan dalam sebuah material akibat atom yang berpindah atau melompat dari salah satu kisi ke posisi yang lainnya (Askeland dan Wright, 2011). Difusi interstisial yaitu difusi yang terjadi pada atom dari unsur yang berbeda. Difusi ini terjadi ketika atom atau ion berpindah dari satu lubang ke lubang lain yang muncul dari struktur kristal (Calister dan Retwisch, 2009).



Gambar 2.5 (a)Paduan sebelum terdifusi (b)Paduan setelah terdifusi  
(Sumber: Askeland dan Wright, 2011)

Difusi kekosongan yaitu difusi yang terjadi ketika atom berpindah dari letak kisi yang normal ke kisi yang berdekatan yang memiliki kekosongan. Pada gambar di atas menunjukkan bahwa terjadi proses difusi antar atom pada paduan dari jenis atom yang berbeda. Setelah terjadinya proses difusi atom-atom yang berwarna coklat yang terletak di sebelah kiri bercampur dengan atom-atom yang berwarna perak yang terletak di sebelah kanan. Proses difusi ini akan memunculkan kekosongan baru pada kisi yang ditinggalkan akibat perpindahan atom.

### 2.6.2 Koefisien Difusi

Koefisien difusi merupakan sifat dinamik yang penting dari jenis zat fluida. Secara makroskopik difusi dideskripsikan dalam hukum Fick sebagai berikut:

$$(2.15)$$



dimana  $D_0$  merupakan konstanta kesebandingan atau disebut juga sebagai koefisien difusi dengan  $j$  adalah flux dan merupakan gradien konsentrasi.

Menurut Askeland dan Wright (2011) perpindahan rata-rata atom yang bergantung pada temperatur dituliskan dalam persamaan Arrhenius :

$$(2.16)$$

Menurut Calister dan Retwisch (2009), persamaan Arrhenius untuk nilai difusi sebagai perpindahan rata-rata atom dapat dituliskan sebagai berikut:

$$(2.17)$$

$$(2.18)$$

dimana  $D_0$  adalah keadaan awal atau koefisien difusi yang tidak bergantung pada temperatur ( $m^2/s$ ),  $Q_d$  adalah energi aktivasi untuk berdifusi (J/mol. Cal/mol atau eV/atom),  $R$  adalah konstanta gas (8.31 J/mol.K atau 1.987 cal/mol.K), dan  $T$  adalah temperatur absolut (K).

### 2.6.3 Faktor-Faktor yang Mempengaruhi Difusi

Energi aktivasi atau energi penghalang ( $Q_d$ ) merupakan energi yang dibutuhkan suatu atom untuk berpindah dari posisi awalnya. Ketika dalam keadaan netral atom akan memiliki energi yang cukup rendah yang menyebabkan atom tersebut memiliki letak atau posisi yang stabil. Untuk membuat atom tersebut berpindah letak atau posisi dari kisi yang satu ke kisi yang lainnya maka dibutuhkan energi yang cukup tinggi untuk melewati keadaan stabilnya (penghalang).

Peningkatan temperatur akan menyebabkan peningkatan difusi sebuah material. Ketika temperatur meningkat maka energi panas yang diberikan kepada atom-atom juga akan meningkat sehingga mempermudah atom dalam melewati energi aktivasi dalam berpindah ke sisi yang lainnya. Semakin besar temperatur yang diberikan semakin mudah atom dalam berpindah posisi atau terjadi peningkatan dalam aliran atom. Peningkatan kecepatan difusi atom memberikan nilai koefisien difusi yang semakin besar (Askeland dan Wright, 2011).

#### 2.6.4 Mean Square Displacement (MSD)

*Mean Square Displacement* (MSD) didefinisikan sebagai kuadrat rata-rata perpindahan atom dalam sistem. Difusi dalam simulasi komputer dihitung sebagai fungsi korelasi terhadap MSD. Menurut Fransson dan Hakansson (2014), MSD mendeskripsikan proses difusi dalam sistem:

(2.19)

dimana tanda menunjukkan rata-rata dari sistem dan  $r_i(t)$  sebagai posisi dari atom  $i$  pada waktu  $t$ . Nilai MSD berkembang sebagai fungsi dari waktu dan memiliki hubungan dengan difusi sebagai berikut:

(2.20)

Nilai difusi diperoleh dengan menghubungkan MSD terhadap waktu sehingga diperoleh persamaan yang sesuai dengan trayektori yang terbentuk. Berdasarkan persamaan diatas maka gradien yang dihasilkan didefinisikan sebagai nilai difusi (Kumar, 2014).

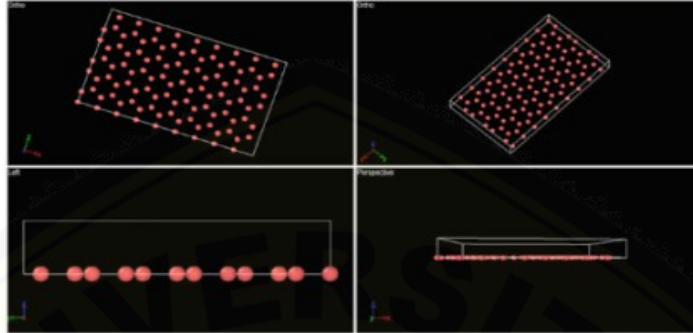
## 2.7 MOLDY

MOLDY (*Molecular Dynamic*) merupakan salah satu jenis kode dinamika molekul yang bersifat *open source* dan dilengkapi dengan panduan yang mudah untuk dipelajari. MOLDY dirancang untuk menyimulasikan kelompok dari pemodelan sistem atomik maupun molekuler. MOLDY dapat dijalankan untuk berbagai sistem seperti molekul poliatomik yang keras, atom atau ion, maupun campuran yang lainnya. MOLDY menampilkan simulasi dalam ensemble NVE atau NVT dan ensemble N $\sigma$ H atau N $\sigma$ T menggunakan thermostat Nöser-Hoover (Refson, 2010).

## 2.8 OVITO

OVITO (*Open Visualization Tools*) merupakan program yang digunakan untuk membuat visualisasi dan mengidentifikasi data simulasi. OVITO dapat digunakan untuk membuat visualisasi data atomik simulasi melalui 2 dimensi maupun 3 dimensi. OVITO merupakan salah satu jenis *open source* yang

berfungsi sebagai perangkat pendukung dalam menganalisis data yang dihasilkan dari simulasi menggunakan program MOLDY.



Gambar 2.6 Tampilan OVITO (Sumber: Misra, 2015)

Gambar 2.6 menunjukkan contoh visualisasi yang dihasilkan melalui OVITO. Pada gambar di atas menunjukkan susunan atomik berdasarkan trayektori selama simulasi. Pada OVITO terdapat berbagai perangkat pendukung untuk mengoptimalkan analisis informasi yang diinginkan. Misalnya seperti perintah CNA (*Common Neighbor Analysis*) untuk menganalisis struktur mikro material berdasarkan jarak tetangga terdekat atom sampai pada radius tertentu.

### 3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Simulasi pengaruh unsur pepadu (Cr, Ni) pada baja Fe-Cr/Ni yang diletakkan dalam timbal cair telah dilakukan mulai bulan Oktober 2016 sampai bulan Februari 2017 yang bertempat di Laboratorium Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

### 3.2 Alat dan Bahan Penelitian

Alat dan bahan simulasi yang digunakan pada penelitian, antara lain:

3.2.1 Alat yang digunakan yaitu komputer 1 set yang terdiri dari monitor, CPU, *keyboard*, dan *mouse* dengan program yang digunakan:

- a. MOLDY (*Molecular Dynamics*) berfungsi untuk menjalankan simulasi dengan metode dinamika molekul menggunakan interaksi potensial Lennard-Jones.
- b. OVITO (*Ovito Visualization tools*) berfungsi untuk memvisualisasikan data simulasi.

3.2.2 Bahan simulasi yang digunakan antara lain:

- a. Baja FeCr yang diletakkan ke dalam timbal cair
- b. Baja FeNi yang diletakkan ke dalam timbal cair

### 3.3 Prosedur Pelaksanann

Prosedur pelaksanaan yang akan dilakukan untuk mendapatkan gambaran proses simulasi ini adalah:

### 3.3.1 Diagram Alir Penelitian

Penelitian telah dilakukan digambarkan melalui diagram alir sebagai berikut:



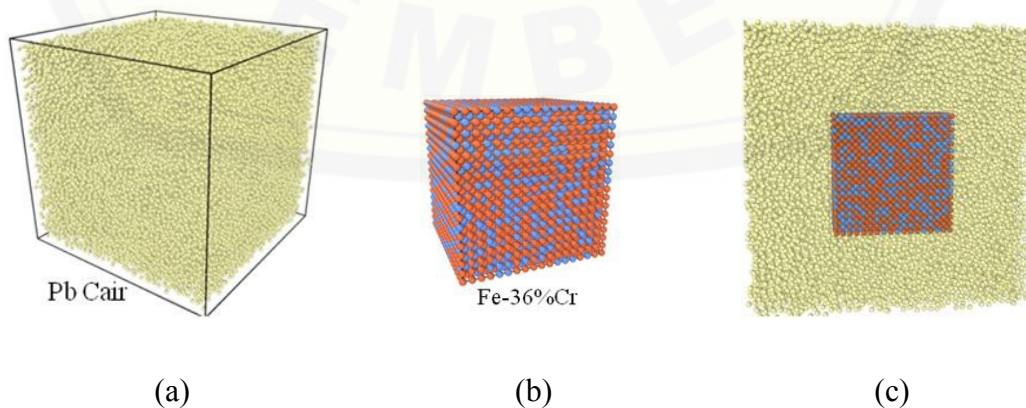
Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

Berdasarkan diagram alir di atas, secara umum tahapan simulasi yang dilakukan adalah:

- Sistem dimodelkan dengan membuat sistem simulasi yang terdiri dari baja Fe-Cr/Ni yang diletakkan dalam timbal cair.
- Input* simulasi dijalankan berdasarkan file spesifikasi dan file kontrol menggunakan program MOLDY.
- Kesetimbangan energi sistem diuji, ketika sistem belum mencapai kesetimbangan simulasi diulangi untuk perubahan *input* simulasi.
- Output* simulasi berupa nilai MSD terhadap *timestep*. Nilai difusi besi ditentukan melalui hubungan nilai MSD terhadap *timestep*. *Output* simulasi divisualisasi menggunakan OVITO dan dianalisis.
- Nilai difusi besi terendah dilakukan simulasi kembali dengan penginjeksian *inhibitor* ke dalam timbal cair.
- Output* simulasi divisualisasi menggunakan OVITO dan dianalisis.
- Nilai difusi dan hasil analisis melalui visualisasi ditarik kesimpulan untuk penelitian simulasi yang telah dilakukan.

### 3.3.2 Pemodelan Sistem Simulasi

Sistem simulasi dimodelkan dengan *box* simulasi yang berukuran  $123\text{\AA} \times 124\text{\AA} \times 125.1\text{\AA}$ . *Box* simulasi berisi timbal cair yang berjumlah 45006 atom dengan bagian tengah berisi baja besi-kromium/Nikel (Fe-Cr/Ni) dengan jumlah total atom 10745 atom.



Gambar 3.2 Visualisasi (a)Timbal cair (b)Baja paduan Fe-36%Cr (c)Hasil pemodelan baja FeCr dalam timbal cair

Gambar 3.2 menunjukkan pemodelan sistem simulasi dalam penelitian ini, atom berwarna kuning merupakan timbal cair, merah tua merupakan atom besi, dan kebiruan merupakan unsur padu (Cr/Ni). Gambar 3.2(a) merupakan timbal cair yang dengan bagian tengah berlubang membentuk bangun kubus, Gambar 3.2(b) merupakan baja yang akan diletakkan ke dalam bagian timbal cair dalam *box* simulasi yang berlubang. Setelah digabungkan, hasil pemodelan seperti pada Gambar 3.2(c). Pada Gambar 3.2(c) merupakan irisan dari bagian *box* simulasi.

### 3.3.3 Parameter Input

Parameter yang digunakan dalam simulasi antara lain:

Tabel 3.1 Parameter input *file* spesifikasi dan *file* kontrol

Parameter	Nilai	Parameter	Nilai
$\sigma$ (jarak)	2,3193 Å (Fe-Fe)	m (masa)	55,8450 amu(Fe)
	2,3357 Å (Cr-Cr)		51,9961 amu(Cr)
	3,4280 Å (Pb-Pb)		58.6934 amu(Ni)
	2,7541 Å (O-O)		207,19 amu(Pb)
	2.2808 Å (Ni-Ni)		15,9994 amu(O)
Step integrasi	100000	at%(Cr, Ni)	2% sampai 50% dengan interval 2%
$\mathcal{E}$ (energi)	0,4007 eV (Fe-Fe)	Timestep	0,001ps
	0,41295 eV (Cr-Cr)	Wt% Oksigen	0,0583%, 0,077%, 0,1152%, 0,1552%, 0,1938%, 0,02307%
	0,0102 eV (Pb-Pb)	Wt% Nitrogen	0,037%, 0,056%, 0,074%, 0,111%, 0,150%, 0,187%
	0,2766 eV (O-O)		
	0.5189 eV (Ni-Ni)		
Temperatur	750°C		
Ukuran <i>cell</i>	123Å×124Å×125.1Å		

Sistem dalam simulasi ini menggunakan konstanta dan temperatur yang konstan, yaitu pada tekanan 1 atm dan temperatur 1023K. Simulasi dijalankan menggunakan program MOLDY (*Molecular Dynamics*) dengan interaksi potensial Lennard-Jones. MOLDY dijalankan dengan menggunakan 2 *file input* yaitu: (a)*File* spesifikasi yang memuat data spesifikasi atom seperti masa, batas minimum dan maksimum sel, dan koordinat atom pada kondisi awal dan (b)*File* kontrol yang memuat kondisi dan perintah simulasi seperti temperatur, parameter Lennard-Jones, jumlah step integrasi, dan konsentrasi atomik (Cr, Ni) dalam baja.

### 3.3.4 Langkah Kerja

- a. *File Input* tanpa penginjeksian *inhibitor* dijalankan menggunakan program MOLDY pada temperatur 1023K. Simulasi dijalankan dengan mengetikkan pada jendela cmd:

```
"moldy controlfile.txt fileoutput.txt"
```

- b. Kesetimbangan energi sistem simulasi diuji dengan membuat grafik hubungan energi terhadap waktu simulasi. Sistem simulasi dikatakan mencapai kesetimbangan ketika energi yang dimiliki sistem telah stabil.

- c. Kesetimbangan energi sistem selama simulasi diuji dengan mengetikkan perintah pada jendela terminal Linux:

```
"moldyext -f 1,4 fileoutput.txt"
```

- d. *Output* simulasi berupa nilai MSD terhadap *timestep*. Nilai MSD diekstrak dengan mengetikkan perintah pada jendela terminal Linux:

```
"msd [-r file.save] [-d file.dump] [-t time-range] [-m msd-time-range] [-o fileoutput.txt]"
```

- e. Nilai difusi diperoleh berdasarkan nilai gradien dari hubungan MSD terhadap *timestep*.

- f. Posisi koordinat atom-atom setelah simulasi diekstrak dengan mengetikkan perintah pada jendela terminal Linux:

```
"mdavpos [-r file.save] [-c -f xyz] [-d file.dump] [-t time-range] [-o fileoutput.txt]"
```

*Output* simulasi hasil ekstraksi berupa posisi koordinat atom-atom divisualisasi menggunakan OVITO.

- g. Grafik hubungan nilai difusi besi terhadap nilai konsentrasi atomik unsur pepadu (Cr, Ni) dibuat berdasarkan hasil simulasi.

- h. Analisis hasil simulasi nilai difusi besi dan struktur atom baja Fe-Cr/Ni terhadap pengaruh penambahan unsur pepadu (Cr, Ni).



- i. Simulasi dijalankan kembali dengan penambahan *inhibitor* yang diinjeksikan ke dalam timbal cair menggunakan program MOLDY pada temperatur 1023K.
- j. Nilai difusi besi diekstrak dan posisi koordinat atom-atom dengan penginjeksian penambahan *inhibitor* divisualisasi menggunakan OVITO.
- k. Analisis hasil simulasi nilai difusi besi dan keutuhan struktur kristal baja Fe-Cr/Ni ketika diberikan injeksi *inhibitor* gas oksigen.
- l. Analisis hasil simulasi ditarik kesimpulan mengenai pengaruh penambahan unsur pepadu (Cr, Ni) dalam baja Fe-Cr/Ni.

### 3.4 Metode Analisis

Konsentrasi *inhibitor* yang digunakan dalam simulasi ini merupakan konsentrasi atomik. Sedangkan dalam literatur, penulis mendapatkan nilai konsentrasi *inhibitor* dalam konsentrasi berat. Oleh karena itu, perlu dilakukan konversi konsentrasi berat ke konsentrasi atomik dengan persamaan:

$$(3.1)$$

dengan %at merupakan persen atomik, %wt sebagai persen berat, Ar merupakan masa atom relatif unsur, indeks X sebagai fraksi yang dicari, dan indeks Y sebagai fraksi total dikurangi fraksi yang dicari.

Nilai difusi besi pada baja Fe-Cr/Ni dalam timbal cair diperoleh melalui hubungan *output* simulasi MSD terhadap *timestep* melalui persamaan:

$$(3.2)$$

MSD merupakan perpindahan rata-rata atom besi pada waktu tertentu,  $t$  sebagai waktu simulasi, dan  $D$  merupakan difusi yang dicari. Pada simulasi ini akan diperoleh nilai difusi besi terhadap penambahan *inhibitor* untuk setiap variasi konsentrasi atomik unsur pepadu. Nilai difusi yang diperoleh digunakan untuk menentukan prosentase besar reduksi korosi baja melalui persamaan:

$$(3.3)$$

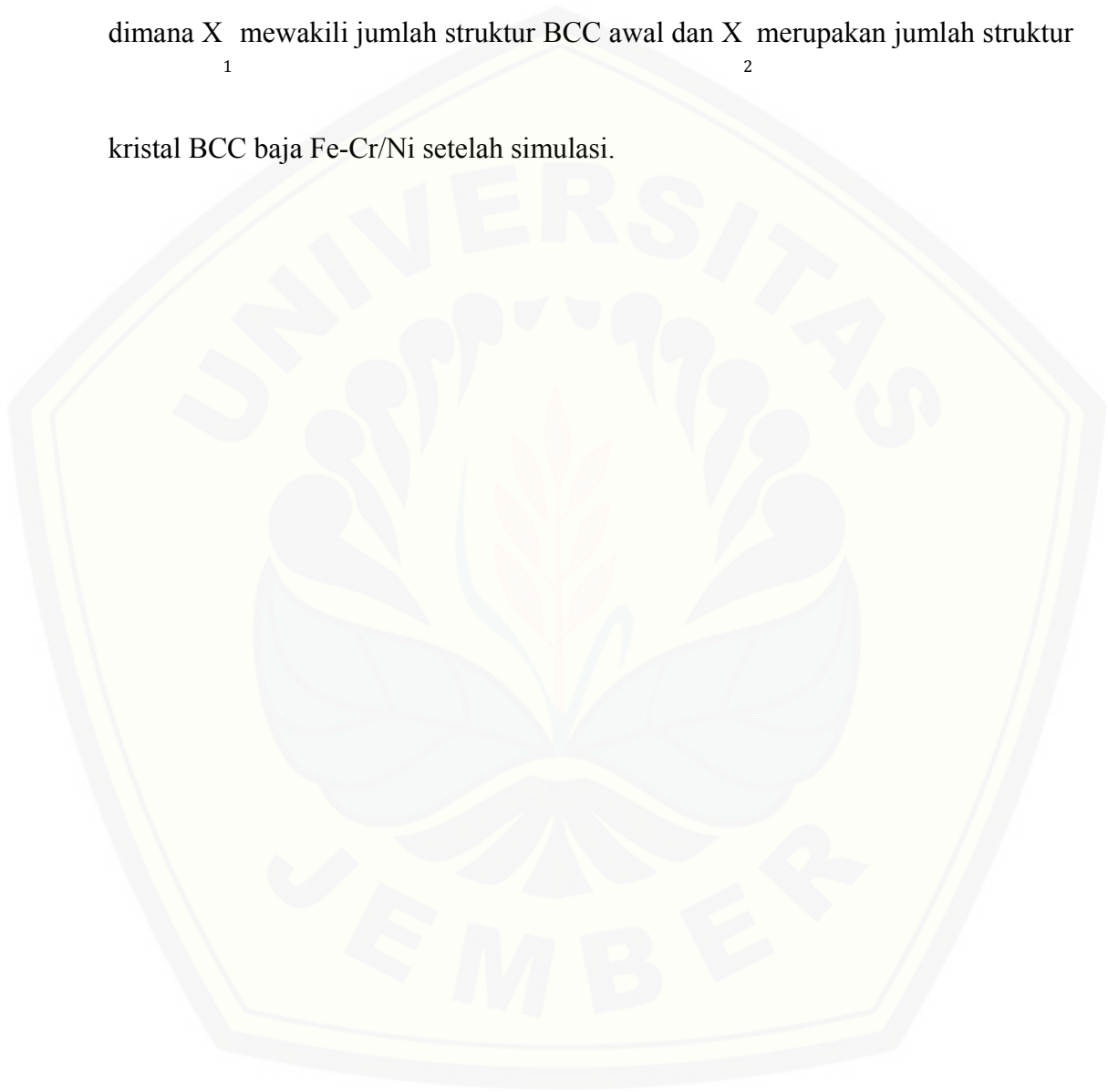
Dimana  $D_1$  merupakan difusi besi murni (Fe) dan  $D_2$  merupakan difusi besi setelah diberikan perlakuan. *Output* yang dihasilkan divisualisasi menggunakan OVITO melalui analisis *Common Neighbour Analysis* (CNA) pada menu

*modified* OVITO. Analisis perubahan struktur atomik dilakukan melalui peninjauan keutuhan struktur awal bahan (BCC) yang mampu dipertahankan:

(3.4)

dimana  $X_1$  mewakili jumlah struktur BCC awal dan  $X_2$  merupakan jumlah struktur

kristal BCC baja Fe-Cr/Ni setelah simulasi.



## BAB 5. PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

Kesimpulan yang diperoleh berdasarkan simulasi pengaruh unsur (Cr, Ni) pada baja Fe-Cr/Ni yang diletakkan dalam timbal cair adalah:

1. Penambahan unsur pepadu kromium (Cr) dan nikel (Ni) mampu mereduksi korosi baja Fe-Cr/Ni dalam timbal cair dengan menurunkan nilai difusi besi. Difusi besi terendah dihasilkan pada baja Fe-48%Cr yang mampu mereduksi korosi sampai 49,225% dan baja Fe-18%Ni yang mencapai 78,199%.
2. Penambahan unsur pepadu kromium (Cr) dan nikel (Ni) mampu mempertahankan struktur baja Fe-Cr/Ni dengan menurunkan jumlah kerusakan struktur atom dan meningkatkan jumlah struktur kristal BCC yang mampu dipertahankan. Jumlah kerusakan struktur paling sedikit terdapat pada baja Fe-48%Cr dan baja Fe-20%Ni. Sedangkan untuk jumlah tertinggi struktur BCC yang mampu dipertahankan dihasilkan baja Fe-8%Cr mencapai 46,175% dan Fe-14%Ni mencapai 37,987%.
3. Penginjeksian gas oksigen ke dalam timbal cair menurunkan nilai difusi besi pada baja Fe-Cr/Ni dengan membentuk lapisan pelindung. Reduksi korosi tertinggi dihasilkan pada baja Fe-24%Cr dan Fe-18%Ni dengan injeksi oksigen sebanyak 1310 atom oksigen. Gas oksigen yang diinjeksikan melindungi struktur baja dengan mempertahankan struktur kristal BCC, struktur kristal tertinggi yang mampu dipertahankan mencapai 99,813% pada Fe-24%Cr dan 99,906% pada Fe-18%Ni.

## 5.2 Saran

Saran untuk penelitian selanjutnya berdasarkan penelitian ini adalah:

1. Hasil yang diperoleh dari simulasi ini masih dalam rentang nilai peksperimen, namun selisih dari sistem simulasi dengan sistem eksperimen masih cukup besar yaitu 18,92%. Sistem simulasi untuk FeCr dan FeNi yang diletakkan dalam timbal cair perlu diuji kembali, diantaranya yaitu ditinjau dari penggunaan fungsi potensial yang sesuai dengan sistem.
2. Simulasi pada penelitian ini merupakan upaya untuk melengkapi penelitian sebelumnya yang hanya menggunakan besi murni untuk mewakili baja pada reaktor nuklir. Untuk penelitian selanjutnya diharapkan sistem ini perlu diterapkan pada baja paduan yang lebih kompleks yang terdiri lebih dari dua unsur.

- Arkundato, A., Su'ud, Z., Abdullah, M., Sutrisno, W., dan Celino, M. 2013. Inhibition of Iron Corrosion in High Temperature Stagnant Liquid Lead: A Molecular Dynamics Study. *Elsevier Annals of Nuclear Energy* 62: 298-306.
- Arkundato, A., Su'ud, Z., dan Abdullah., M. 2010. Corrosion Study of Fe in A Stagnant Liquid Pb by Molecular Dynamics Methods. *AIP Conference Proceeding* 1244: 136-144.
- Arkundato, A., Su'ud, Z., dan Sutrisno. 2013. Study of Liquid Lead Corrosion of Fast Nuclear Reactor and Its Mitigation by Using Molecular Dynamics Method. *Interntional Journal of Applied Physics and Mathematics* 3(1): 1-7.
- Arkundato, A., Su'ud, Z., Sudarko, Hasan, M., dan Celino, M. 2015. Molecular Dynamics Simulation of Corrosion Mitigation of Iron in Lead-Bismuth Eutectic Using Nitrogen as Corrosion Inhibitor. *ScieTech Journal of Physics Series* 622: 1-7.
- Askelad, D. R. dan Wright, W. J. 2011. *The Science and Engineering of Material, Seveth Edition*. United Stated: Global Engineering Timothy L. Anderson.
- Atkin, P. dan Paulo, J.D. 2013. *Element of Physics Chemistry 6th Edition*. Oxford: Oxford University.
- Baiyinah, F. dan Hidayat, S. 2005. Analisis Paduan Logam FeNiCr Menggunakan Difraksi Sinar-X. *Prosiding Seminar Nasional Sains dan Teknik Nuklir P3KTN*. 14-15 Juni 2005. Batan: 498-506.
- Bharadwaja, S. 2012. Molecular Dynamics Simulation of Si Binding and Diffusion on Native and Thermal Silicon Oxide Surface. *Tesis*. United States: University of Toledo.
- Blyverket, J. 2016. Molecluar Dynamics Modeling of Clay-Fluid Interface. *Tesis*. Denmark: University of Oslo.
- Calister, W.D. dan Retwisch, D.G. 2009. *Fundamental of Material Science and engineering 8th Edition*. New York: John Willey & Sons, inc.
- Car, R. dan Parinello, M. 1985. Unified Approach for Molecular Dynamisc and Density Functional Theory. *Physical Review Letter* 55: 2471-2474.
- Cryptome. 2016. Eyeballing 63 Nuclear Power Plants for overhead photos. <https://cryptome.org/eyeball/npp2/npp2-eyeball.htm> \_ [Diakses pada 4 Juni 2017].
- Franson, E. dan Hakansson, L. 2014. Local and Global Ordering in Barium Zirconate, a Model Potential Study. *Tesis*. Sweden: Chalmes University of Technology.

- Furukawa, T., Müller, G., Schumacher, G., Weisenburger, A., Heinzl, A., Zimmermann, F., dan Aoto, K. 2003. Corrosion Behavior of FBR Candidate Materials in Stagnant Pb-Bi at Elevated Temperature. *Journal of Nuclear Science and Technology* 41: 265-270.
- Indiyanto, R. Tanpa Tahun. *Diktat Pengantar Pengetahuan Bahan Teknik*. Surabaya: Universitas Pembangunan Nasional "Veteran".
- Kumar, N. 2014. Diffusivity Studies in Fe-Cr Alloys by Molecular Dynamics Simulation. *Tesis*. India: National Institute of Technology.
- Lestari, V. P. 2015. Studi Suku "cross-interaction" pada Simulasi Dinamika Molekul Lennard-Jones Material Besi dalam Logam Cair Timbal-Bismuth. *Skripsi*. Jember: Universitas Jember.
- Lister, D.H. dan Cook, W.G. 2004. *Nuclear Plant Material and Corrosion*. Canada: University of New Brunswick.
- Maulana, A., Su'ud, Z., Hermawan, dan Khairurrijal. 2007. Corrosion Study of Steels In Liquid Lead-Bismuth Cooled Nuclear Reactors by Computer Simulation. *Internal Conference on Advances in Nuclear Science and Engineering in Conjunction* 397-401.
- Sadus, R.J. 2002. *Molecular Simulation of Fluids: Theory, Algorithms, and Object-Oriented*. Australia: Elsevier Science.
- Saljie, E.K.H. 1987. *Physics Properties and Thermodynamics Behavior of Mineral*. Holland: D. Reidel Publishing Company.
- Sari, N.P. 2011. Nitridasi pada Paduan Berbasis FeCrNi sebagai Kandidat Bahan Struktur Reaktor Guna Meningkatkan Ketahanan Korosi Temperatur Tinggi. *Skripsi*. Surakarta: Universitas Sebelas Maret.
- Smalman, R.E dan Bishop, R.J. 2000. *Metalurgi Fisika Modern dan Rekayasa Material Edisi Ke-Enam*. Jakarta: Erlangga.
- Soentono, S. 1998. Bahan - Bahan Industri Reaktor Nuklir. *Prosiding Pertemuan Ilmiah Sains Materi III*. 20-21 Oktober 1998. 22-31.
- Spears, W.M. dan Spears, D.F. 1998. *Physicomimetic Physics-based Swarm Intelligence*. New York: Springer Heiderberg Dordrecht.
- Takasawa, K., Yamazaki, Y., Takaki, S., Abiko, K., dan Lijima, Y. 2002. Diffusion of Cr and Fe in a High-Purity Fe-50 mass%Cr-8mass%W Alloy. *Material Translation The Japan Institute of Metals* 43(2): 178-181.

Tran, U.V. 2015. Corrosion Behaviour of Hardfacing Alloys Used in The Mining Industry. *Tesis*. Australia: Charles Darwin University.

Wessman, S. 2013. Application of Computational Thermodynamics and Kinetics on Transformation in Stainless Steels. *Tesis*. Sweden: Science Stockholm.

Zhang, J. 2009. A Review of Steel Corrosion by Liquid Lead and Lead Bismuth. *Corrosion Resistance* 51: 1207–1227.

Zhang, X. 2015. Computational Modeling of Li Diffusion Using Molecular Dynamics. *Tesis*. Sweden: Wake Forest University.

