



**VERIFIKASI POTENSIAL LENNARD-JONES BESI DAN
TIMBAL SERTA APLIKASINYA UNTUK STUDI KOROSI
BESI DALAM LOGAM CAIR**

SKRIPSI

Oleh

**Ayu Triwardani
NIM 151810201052**

JURUSAN FISIKA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS JEMBER

2019



**VERIFIKASI POTENSIAL LENNARD-JONES BESI DAN
TIMBAL SERTA APLIKASINYA UNTUK STUDI KOROSI
BESI DALAM LOGAM CAIR**

SKRIPSI

diajukan untuk melengkapi tugas akhir dan memenuhi syarat
untuk menyelesaikan studi pada Program Studi Fisika (S-1)
dan mencapai gelar Sarjana Sains

Oleh

Ayu Triwardani
NIM 151810201052

JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS JEMBER

2019

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk :

1. Kedua orang tuaku, Ibu Titik Pujianti dan Bapak Agus Triasmaranto, S. Pd. yang telah mencurahkan segalanya demi tercapainya pendidikan saya, yang tiada henti memberikan motivasi agar selalu berusaha dan bersabar dalam meraih cita-cita, serta atas segala doa, motivasi dan kasih sayang yang tiada henti diberikan.
2. Kedua kakakku, Andhis Purnomo dan Dading Marantika yang telah memotivasi untuk bertahan dalam segala kondisi perkuliahan.
3. Guru-guru TK PGRI 3 Sumbersari, SDN 4 Sumbersari, SMPN 2 Srono, SMAN 1 Genteng dan dosen-dosen di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember yang telah memberikan ilmu yang sangat berguna dan tiada lelah membimbing dengan kesabaran.
4. Almamater tercinta Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember

MOTTO

Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Maka apabila engkau telah selesai (dari sesuatu urusan), tetaplah bekerja keras (untuk urusan yang lain)
(Terjemahan Surat Al-Insyirah ayat 6-7)^{*)}

Wahai orang-orang yang beriman, jadikanlah sabar dan sholat sebagai penolongmu, sesungguhnya Allah beserta orang-orang yang sabar
(Terjemahan Surat Al-Baqarah ayat 153)^{*)}



^{*)}Kementerian Agama Republik Indonesia. 2007. Al-Qur'an dan Terjemahannya. Jakarta : Penerbit Sahifa.

PERNYATAAN

Saya yang bertandatangan di bawah ini:

Nama : Ayu Triwardani

NIM : 151810201052

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Verifikasi Potensial Lennard-Jones Besi dan Timbal serta Aplikasinya untuk Studi Korosi Besi dalam Logam Cair” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah disebutkan sumbernya, 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.

Penelitian ini merupakan penelitian bersama dosen dan mahasiswa dan hanya dapat dipublikasi dengan mencantumkan nama dosen pembimbing.

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

Jember, 26 Juli 2019
Yang menyatakan,

Ayu Triwardani
151810201052

SKRIPSI

**VERIFIKASI POTENSIAL LENNARD-JONES BESI DAN
TIMBAL SERTA APLIKASINYA UNTUK STUDI KOROSI
BESI DALAM LOGAM CAIR**

Oleh

Ayu Triwardani
NIM 151810201052

Pembimbing

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

Dosen Pembimbing Anggota : Dr. Sutisna, S.Pd.,M.Si.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Verifikasi Potensial Lennard-Jones Besi dan Timbal serta Aplikasinya untuk Studi Korosi Besi dalam Timbal Cair” telah diuji dan disahkan pada :

hari, tanggal : **SELASA 20 AUG 2019**

tempat : Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Jember.

Tim Penguji :

Dosen Pembimbing Utama



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

Dosen Pembimbing Anggota



Dr. Sutisna, S.Pd., M.Si.
NIP.197301152000031001

Dosen Penguji I



Dra. Arry Yuariatun Nurhayati, M.Si.
NIP. 196109091986012001

Dosen Penguji II



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

Mengesahkan,
Dekan Fakultas MIPA
Universitas Jember




Drs. Sujito, Ph.D
NIP. 196102041987111001

RINGKASAN

Verifikasi Potensial Lennard-Jones Besi dan Timbal serta Aplikasinya untuk Studi Korosi Besi dalam Logam Cair; Ayu Triwardani, 151810201052; 2019 : 50 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

Penggunaan bahan bakar nuklir sebagai pembangkit listrik mulai gencar dilakukan karena bahan bakar nuklir dianggap menjadi metode yang efektif untuk menghasilkan energi listrik dalam jumlah besar. Namun dalam penggunaannya terdapat beberapa kekurangan salah satunya yaitu adanya korosi pada material besi yang berinteraksi dengan timbal cair, sehingga untuk memecahkan masalah tersebut dilakukan metode untuk menghambat korosi dengan menambahkan gas nitrogen yang diinjeksikan ke dalam timbal cair.

Penelitian ini dilakukan untuk memahami fenomena korosi dan cara penghambatannya secara komputasi. Bahan yang digunakan yaitu besi, timbal, dan nitrogen. Pada sistem ini korosi terjadi pada temperatur 1023 K dengan penghambatannya menggunakan penginjeksian gas nitrogen dengan konsentrasi disesuaikan. Metode komputasi yang digunakan yaitu metode dinamika molekul dengan program MOLDY, sedangkan potensial untuk menggambarkan interaksi antar logam menggunakan potensial Lennard-Jones. Besaran fisis yang digunakan untuk meninjau korosi yaitu nilai koefisien difusi. Sebelum menganalisis korosi, penelitian ini juga bertujuan untuk memverifikasi parameter potensial Lennard-Jones yang terdiri atas (σ) dan (ϵ). Hal ini dilakukan untuk mengetahui kesesuaian parameter dengan sistem yang digunakan, dimana dalam penelitian-penelitian yang telah ada parameter potensial ini digunakan untuk banyak jenis sistem namun tidak pernah diverifikasi terlebih dahulu untuk melihat kesesuaian dengan sistem yang digunakan. Verifikasi parameter potensial dilakukan dengan membandingkan nilai koefisien difusi hasil simulasi dengan eksperimen, dengan cara memvariasikan nilai parameter potensial. Variasi dilakukan dengan cara mengubah terlebih dahulu salah satu parameter sedangkan yang lain tetap, dan begitupun sebaliknya hingga diperoleh nilai koefisien difusi dengan diskrepansi

yang terkecil. Semakin kecil nilai diskrepansi maka dapat disimpulkan bahwa parameter potensial yang digunakan merupakan yang paling sesuai dengan sistem. Pada penelitian ini didapatkan nilai parameter potensial besi hasil verifikasi yaitu $\varepsilon = 0.4007$ eV dan $\sigma = 2.3894$ Å sedangkan pada timbal $\varepsilon = 0.1910$ eV dan $\sigma = 2.9578$ Å. Nilai koefisien difusi bergantung temperatur untuk besi yaitu $D(T) = 1.9069 \times 10^{-7} \exp\left(\frac{-135766}{RT}\right)$ (m²/s) dan untuk timbal yaitu $D(T) = 1.399 \times 10^{-8} \exp\left(\frac{-8885,76}{RT}\right)$ (m²/s). Sedangkan untuk studi korosi didapatkan hasil yang menunjukkan bahwa koefisien difusi besi dalam timbal cair mengalami kenaikan seiring dengan peningkatan temperatur untuk sistem simulasi. Penghambatannya dilakukan dengan menginjeksikan atom-atom gas nitrogen dengan konsentrasi yang sesuai. Diperoleh nilai penghambatan korosi yang secara signifikan dapat dicapai apabila nitrogen diinjeksikan dengan konsentrasi 0.29 wt% dalam sistem korosi besi dalam timbal cair.

PRAKATA

Puji syukur kami panjatkan pada Tuhan Yang Maha Esa atas berkat, rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi berjudul “Verifikasi Potensial Lennard-Jones Besi dan Timbal serta Aplikasinya untuk Studi Korosi Besi dalam Logam Cair”. Skripsi ini ditujukan untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam menyelesaikan persyaratan pendidikan strata satu (S-1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan dan bimbingan dari banyak pihak. Oleh karena itu Penulis menyampaikan terimakasih kepada :

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si.,M.Si. selaku dosen pembimbing utama dan Dr. Sutisna, S.Pd., M.Si. selaku dosen pembimbing anggota yang telah membimbing dengan meluangkan waktu, tenaga, pikiran dan perhatian dalam penulisan skripsi ini.
2. Dra. Arry Yuariatun Nurhayati, M.Si. dan Supriyadi, S.Si., M.Si. selaku dosen penguji yang telah memberikan kritik dan saran demi terbentuknya skripsi yang lebih baik lagi.
3. Bowo Eko Cahyono, S.Si.,M.Si., Ph.D. selaku dosen pembimbing akademik yang telah meluangkan waktu untuk membimbing dan mengarahkan segala permasalahan akademik selama penulis menempuh pendidikan (S-1).
4. Bapak-Ibu dosen FMIPA Universitas Jember yang telah memberi ilmu pengetahuan yang bermanfaat.
5. Keluargaku Fisika 2015 (Ganesha Phi) yang telah memberi dukungan serta kebersamaan selama kurang lebih 4 tahun.
6. Pengurus Himpunan Mahasiswa Fisika (HIMAFI) 2017-2018 FMIPA Universitas Jember yang telah memberikan pengalaman berorganisasi yang sangat berharga.

7. Sahabat seperjuanganku TR (Dini, Ifa, Lugil, Vika, Junda, Cuty, Erni, Pipin, Anis), KKN 212 Wonosuko, Tim Komputasi, sahabat terbaik (Yayang, Dinah, Sindy)
8. Hendro Wicaksono, S.T. yang telah memberikan dukungan maksimal kepada penulis serta selalu ada dalam setiap kondisi.
9. Semua pihak yang telah berkontribusi namun tidak dapat disebutkan satu persatu.

Akhir kata Penulis mengucapkan terimakasih, semoga skripsi ini dapat dimanfaatkan sebagaimana mestinya.

Jember, 26 Juli 2019

Penulis

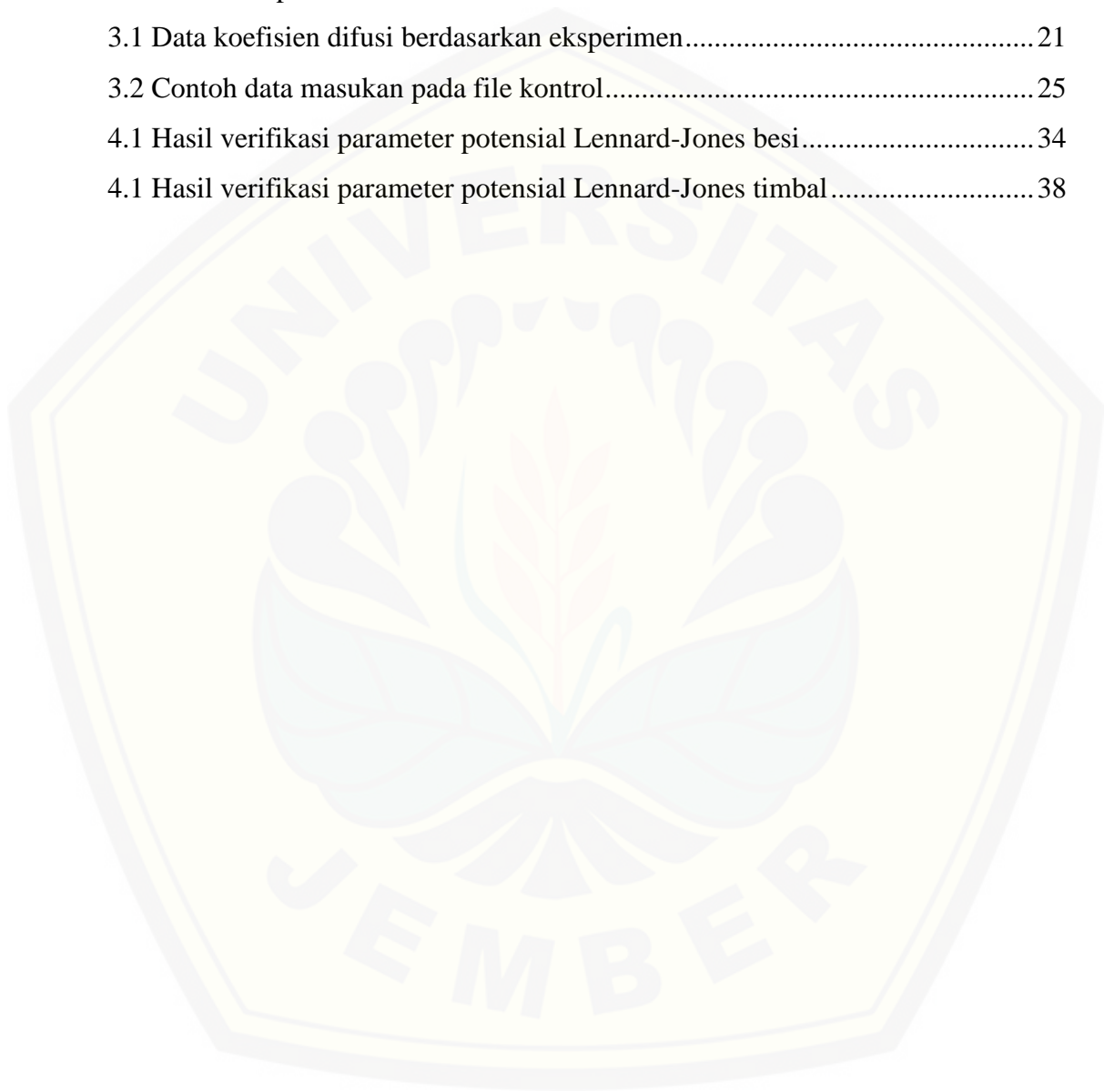
DAFTAR ISI

	Halaman
PERSEMBAHAN	ii
MOTTO	iii
PERNYATAAN	iv
PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan	5
1.5 Manfaat	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Besi	6
2.2 Timbal	6
2.3 Nitrogen	7
2.4 Struktur Kristal	8
2.5 Korosi	10
2.6 Koefisien Difusi	12
2.7 Dinamika Molekul	13
2.7.1 Potensial Lennard-Jones	14
2.7.2 Program MOLDY	16
2.7.3 Program OVITO	17
BAB 3. METODE PENELITIAN	19

3.1 Rancangan Penelitian	19
3.2 Jenis dan Sumber Data Penelitian	20
3.3 Definisi Operasional Variabel	21
3.4 Kerangka Pemecahan Masalah	21
3.5 Prosedur Penelitian	24
3.5.1 <i>Pre-Processing Step</i>	24
3.5.2 <i>Simulation Step</i>	26
3.5.3 <i>Post Processing Step</i>	28
3.6 Metode Analisis Data	29
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	31
4.1 Verifikasi Parameter Potensial Lennard-Jones	31
4.1.1 Verifikasi Nilai Parameter Potensial Lennard-Jones Unsur Besi	31
4.1.2 Verifikasi Nilai Parameter Potensial Lennard-Jones Unsur Timbal.....	36
4.2 Studi Korosi Besi dalam Timbal Cair dan Penghambatannya	39
4.2.1 Simulasi Korosi Besi dalam Timbal Cair	40
4.2.2 Simulasi Penginjeksian Nitrogen untuk Menghambat Korosi.....	42
BAB 5. PENUTUP	47
5.1 Kesimpulan	47
5.2 Saran	47
DAFTAR PUSTAKA	48
<i>Lampiran</i>	51

DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Parameter potensial Lennard-Jones.....	15
3.1 Data koefisien difusi berdasarkan eksperimen.....	21
3.2 Contoh data masukan pada file kontrol.....	25
4.1 Hasil verifikasi parameter potensial Lennard-Jones besi.....	34
4.1 Hasil verifikasi parameter potensial Lennard-Jones timbal.....	38



DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Struktur kristal BCC.....	9
2.2 Struktur kristal FCC	10
2.3 Skema proses terjadinya korosi logam padat dalam logam cair	11
2.4 Plot fungsi potensial Lennard-Jones	16
2.5 Tampilan MOLYD	17
2.6 Tampilan OVITO	18
3.1 Diagram alir rancangan penelitian	19
3.2 Diagram alir verifikasi potensial Lennard-Jones besi dan timbal.....	22
3.3 Diagram alir korosi besi dalam timbal cair dan penghambatannya	23
4.1 Kurva ekuilibrase besi	32
4.2 Grafik hubungan waktu dengan MSD besi	33
4.3 Grafik hubungan $1/T$ dengan $\ln D$ simulasi besi	35
4.4 Grafik hubungan T dengan $D(T)$ pada simulasi besi.....	36
4.5 Kurva ekuilibrase timbal.....	36
4.6 Grafik hubungan waktu dengan MSD timbal	37
4.7 Grafik hubungan $1/T$ dengan $\ln D$ simulasi timbal	38
4.8 Grafik hubungan T dengan $D(T)$ pada simulasi timbal.....	39
4.9 Kurva ekuilibrase besi dalam timbal cair	40
4.10 Grafik hubungan $1/T$ dengan $\ln D$ simulasi besi dalam timbal cair	41
4.11 Grafik Hubungan T dengan $D(T)$ Pada Simulasi Besi dalam Timbal Cair..	42
4.12 Grafik hubungan penambahan nitrogen 0.05 – 0.33 wt% dengan $D(T)$	43
4.13 Grafik hubungan penambahan nitrogen 0.1 – 0.29 wt% dengan $D(T)$	43
4.14 Struktur besi pada temperatur 2000K.....	44
4.15 Struktur besi pada temperatur 3500K.....	45
4.16 Struktur besi dalam timbal cair pada temperatur 1023 K.....	45
4.17 Struktur besi dalam timbal cair pada temperatur 1023 K dengan penambahan nitrogen 0.12 wt%	46

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Ilmu pengetahuan dan teknologi dewasa ini telah berkembang sedemikian pesat. Peningkatan ilmu pengetahuan dan teknologi semakin mempermudah pekerjaan manusia dengan beragamnya metode guna menghasilkan energi. Hal ini gencar dilakukan di berbagai negara salah satunya Indonesia. Salah satu cara yang efektif untuk menghasilkan energi dalam jumlah besar yaitu penggunaan bahan nuklir sebagai pembangkit listrik. Bahan bakar nuklir diolah sedemikian rupa dalam suatu reaktor nuklir untuk menghasilkan energi listrik. Namun dibalik pengolahan tersebut, penggunaan bahan bakar nuklir dalam penyediaan energi memiliki beberapa kekurangan, salah satunya yaitu adanya korosi pada material yang digunakan akibat adanya difusi partikel pada temperatur yang sangat tinggi. Material tersebut berfungsi sebagai bahan pembungkus bahan bakar pada sistem reaktor nuklir yang umumnya terbuat dari baja. Pada suhu yang sangat tinggi material ini dapat berinteraksi dengan logam cair dan dapat mengalirkan panas yang berasal dari reaksi fisi reaktor nuklir. Interaksi tersebut menyebabkan terjadinya difusi atom-atom material baja pembungkus menuju logam cair yang mengakibatkan terjadinya korosi (Sekimoto, 2007).

Korosi secara umum memiliki pengertian sebagai kerusakan yang terjadi pada material akibat adanya reaksi kimia. Proses tersebut terjadi apabila adanya zat yang bersifat sebagai elektrolit yang berfungsi sebagai penghantar listrik (Ashadi *et al.*, 2002). Korosi juga diartikan sebagai proses elektrokimia kompleks yang dapat merusak logam melalui reaksi dengan lingkungannya. Kerusakan logam tersebut disebabkan oleh reaksi kimia yang secara umum menunjukkan adanya transfer elektron (Arkundato *et al.*, 2013). Namun korosi pada logam cair adalah korosi khusus yang disebut *hot corrosion* dimana fenomenanya tidak terdapat transfer elektron (reaksi kimia) karena adanya kelarutan logam padat, sehingga untuk menelitinya dengan melihat sifat-sifat fisis bahan seperti koefisien difusi.

Koefisien difusi adalah besaran fisis yang menunjukkan kemampuan suatu bahan untuk berdifusi pada gradien konsentrasi. Besaran ini bergantung pada komposisi atom dalam bahan dan sifat zat lainnya yang dapat menyebar. Nilai koefisien difusi dapat ditentukan melalui metode eksperimen yang selanjutnya disajikan dalam tabel referensi dan dapat pula menggunakan metode simulasi komputer. Salah satu metode simulasi yang digunakan yaitu simulasi dinamika molekul (Dipojono, 2001). Simulasi dengan menggunakan metode dinamika molekul memerlukan fungsi potensial yang menggambarkan interaksi atom yang dalam penelitian ini menggunakan potensial Lennard-Jones.

Potensial Lennard-Jones adalah potensial yang menggunakan pendekatan matematika untuk menggambarkan energi interaksi antara dua atom atau molekul *nonbonding* yang didasarkan pada jarak pemisah. Potensial ini memiliki dua parameter yaitu parameter jarak (σ) dan energi (ϵ). Parameter-parameter potensial Lennard-Jones sering diperoleh berdasarkan pada data-data pengukuran eksperimen misalnya viskositas bahan (Rodgers, 2012).

Nilai parameter masing-masing bahan telah diketahui dan digunakan dalam berbagai simulasi dengan berbagai sistem. Namun berdasarkan penelitian-penelitian sebelumnya tidak pernah dilakukan pengecekan terlebih dahulu apakah nilai parameter tersebut telah sesuai dengan masing-masing sistem simulasi. Oleh karena itu, pada penelitian ini dilakukan verifikasi parameter potensial Lennard-Jones untuk melihat kesesuaian nilai parameter potensial dengan sistem simulasi yang digunakan selain itu verifikasi perlu dilakukan agar parameter potensial tersebut akurat ketika menggunakan suatu sistem tertentu, dimana verifikasi dilakukan dengan meninjau nilai koefisien difusi bahan.

Besar koefisien difusi dari suatu bahan dapat diketahui dengan menggunakan berbagai formulasi salah satunya yaitu relasi Einstein. Relasi Einstein adalah teori yang mempelajari sifat atom dan kinematika molekuler dimana nilai koefisien difusi diperoleh melalui *slope* nilai MSD (*Mean Square Displacement*) terhadap waktu. Dengan menggunakan formulasi ini, dapat dilakukan simulasi dengan metode dinamika molekul yang nantinya gerak atom dapat dipelajari lebih lanjut

dan divisualisasikan sehingga mampu menggambarkan proses fisis yang terjadi secara mikroskopis (Allen, 2004).

Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode komputasi fisika yang digunakan untuk menjalankan program simulasi gerak atom dan molekul, dengan meninjau gaya interatomik. Selain itu, dapat pula digunakan untuk meninjau atom dan molekul yang mendapat pengaruh dari luar seperti adanya pemanasan (Dipojono, 2001). Metode dinamika molekul juga digunakan untuk simulasi pergerakan atom-atom dalam sistem mikroskopis dengan fungsi potensial tertentu dalam bentuk simulasi komputer selama periode waktu tertentu. Simulasi dinamika molekul memberi informasi besaran statis dan dinamis pada skala atomik berdasarkan prinsip-prinsip fisika statistik (Cuendet, 2008).

Realisasi dari simulasi dinamika molekul memerlukan program komputer untuk dapat menangani sistem banyak partikel salah satunya MOLLY. MOLLY adalah salah satu program komputer yang dapat menangani setiap sekumpulan molekul atom atau ion serta campuran keduanya. Dalam program ini terdapat file spesifikasi sistem yang berisi informasi jumlah atom dan parameter potensial yang digunakan pada simulasi. Fungsi potensial yang dapat digunakan di MOLLY misalkan Lennard-Jones, Buckingham dan tipe potensial lain yang dapat ditambahkan (Refson, 2001).

Penelitian ini merujuk pada penelitian sebelumnya yaitu adanya fenomena korosi pada baja dalam reaktor nuklir cepat bersuhu tinggi. Menurut Arkundato *et al.* (2013), korosi yang terjadi akibat adanya proses difusi dengan memodelkan besi (unsur penyusun baja) sebagai logam cladding yang dikelilingi oleh logam cair timbal bismut (PbBi) pada temperatur tinggi. Hasil yang didapatkan menunjukkan koefisien difusi besi yang juga menunjukkan laju difusi atom-atom logam padat dalam logam cair mengalami kenaikan seiring kenaikan temperatur. Penelitian lainnya yang digunakan sebagai rujukan yaitu penelitian oleh Arkundato *et al.* (2013), menghitung koefisien *self-diffusion* besi murni menggunakan simulasi dinamika molekul dengan potensial Lennard-Jones. Hasilnya, simulasi bahan besi mengalami korosi yang sangat cepat, hal ini berdampak pada koefisien *self-diffusion* besi juga mengalami kenaikan. Pada

penelitian tersebut Arkundato *et al.* (2013), menggunakan potensial Lennard-Jones berdasarkan hasil penelitian orang lain (eksperimen), dimana parameter yang digunakan tidak atau belum pernah dilakukan verifikasi terlebih dahulu apakah cocok dengan program MOLDY yang digunakan.

Pada penelitian ini simulasi dilakukan untuk mendapatkan nilai koefisien difusi bahan (D) dan koefisien difusi bergantung temperatur $D(T)$ dengan formulasi Arrhenius. Nilai koefisien difusi tersebut digunakan untuk memverifikasi nilai parameter potensial Lennard-Jones bahan besi dan timbal. Selain itu, nilai koefisien difusi juga digunakan sebagai analisis studi korosi besi pada timbal cair serta penghambatannya melalui penginjeksian gas nitrogen dengan konsentrasi tertentu.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang, rumusan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Berdasarkan hasil verifikasi berapakah nilai parameter potensial Lennard-Jones (σ, ϵ) yang paling tepat untuk perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur ?
2. Berapakah nilai koefisien difusi diri sebagai fungsi temperatur menurut formulasi Arrhenius $D(T)$ untuk bahan besi dan timbal menggunakan parameter potensial hasil verifikasi ?
3. Pada aplikasi korosi besi dalam timbal cair berapakah konsentrasi nitrogen yang paling tepat untuk menghambat terjadinya korosi ?

1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah :

1. Simulasi dilakukan dengan metode dinamika molekul dengan program MOLDY
2. Bahan yang disimulasikan untuk diverifikasi nilai parameter potensialnya meliputi besi dan timbal

3. Bahan yang disimulasikan untuk sistem korosi meliputi besi, timbal cair, dan gas nitrogen

1.4 Tujuan

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk :

1. Mengetahui hasil verifikasi nilai parameter potensial Lennard-Jones (σ, ϵ) yang paling tepat untuk perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur.
2. Mengetahui nilai koefisien difusi diri sebagai fungsi temperatur menurut formulasi Arrhenius $D(T)$ untuk bahan besi dan timbal menggunakan parameter potensial hasil verifikasi.
3. Mengetahui konsentrasi nitrogen yang paling tepat untuk menghambat terjadinya korosi pada aplikasi korosi besi dalam timbal cair.

1.5 Manfaat

Secara umum manfaat dari penelitian yang dilakukan yaitu menyelesaikan permasalahan fisika menggunakan simulasi dinamika molekul. Beberapa manfaat yang diharapkan dalam penelitian adalah :

1. Melalui simulasi dinamika molekul dapat dihitung nilai koefisien difusi bahan dengan parameter potensial Lennard-Jones untuk berbagai temperatur melengkapi data-data eksperimen yang ada, sehingga dapat digambarkan untuk mempelajari sistem yang lebih kompleks seperti korosi.
2. Hasil dari penelitian dapat digunakan sebagai acuan dalam penelitian selanjutnya dengan riset-riset bahan berbasis komputasi

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Besi

Besi merupakan logam yang berasal dari bijih besi (tambang) yang paling beragam penggunaannya. Hal itu disebabkan oleh beberapa hal seperti kelimpahan besi di kulit bumi yang cukup besar, pengolahannya relatif lebih mudah dan murah, serta memiliki sifat-sifat yang menguntungkan dan mudah dimodifikasi. Besi memiliki nilai ekonomis yang tinggi terutama dalam bidang industri. Besi memiliki simbol Fe dengan nomor atom 26. Besi memiliki massa jenis sebesar $7,9 \text{ gr/cm}^3$. Besi murni memiliki struktur BCC (*Body-Centered Cubic*) pada suhu dibawah 910°C dan di atas 1400°C , namun pada suhu menengah terdapat pula yang berstruktur FCC (*Face-Centered Cubic*) (Talbot, 1998).

Besi adalah salah satu material logam yang memiliki beberapa sifat seperti dapat berubah menjadi magnet, dapat menghantarkan listrik, dapat dengan cepat mengalami korosi dan beberapa sifat lainnya. Besi murni bersifat agak lunak dan kenyal. Oleh karena itu, dalam industri besi selalu dipadukan menjadi baja. Baja adalah berbagai macam paduan logam yang dibuat dari besi tuang yang ke dalamnya ditambahkan unsur-unsur lain tergantung keperluannya. Besi terlebih dahulu ditempa kemudian dilelehkan pada suhu yang relatif tinggi yaitu sekitar suhu 1535°C , kemudian besi dapat dicampurkan dengan berbagai logam lain seperti nikel, kromium, mangan atau titanium. Percampuran ini dapat menjadikan baja bersifat lebih kuat, tidak mudah korosi dan dapat menghantarkan listrik. Selain dapat diaplikasikan dalam pembuatan baja, besi juga dapat dibentuk menjadi benda-benda yang dapat digunakan dalam kehidupan sehari-hari (Australian Geological Survey Organization, 1999).

2.2 Timbal

Timbal merupakan salah satu logam berat yang beracun dengan tingkat paparan yang sangat rendah. Timbal berbentuk lembut dan merupakan logam terberat dari seluruh logam karbon, memiliki warna biru keabuan dengan

permukaan yang mengkilat, memiliki bilangan oksidasi sebesar +2, dan berstruktur FCC. Timbal memiliki beberapa sifat diantaranya yaitu memiliki titik leleh pada suhu 327°C, tidak menghantarkan arus listrik, suara dan getaran dengan baik. Timbal sering disebut dengan istilah timah hitam yang memiliki titik lebur tergolong rendah, mudah untuk dibentuk, memiliki sifat kimia yang aktif sehingga biasa digunakan dalam melapisi logam agar tidak terjadi perkaratan (Sunarya, 2007).

Timbal adalah unsur kimia dengan lambang Pb dan memiliki nomor atom 82, dengan berat atom 207,20 g/cm³ dan memiliki massa jenis 11,34 g/cm³ yang tergolong tinggi dibandingkan bahan lain yang sering ditemui sehari-hari (Palar, 1994). Timbal pada suhu 500 – 600 °C dapat menguap dan membentuk oksigen di udara dalam bentuk timbal oksida (PbO). Timbal merupakan salah satu logam berat yang berbahaya bagi makhluk hidup karena bersifat karsinogenik, dapat menyebabkan mutasi, terurai dalam jangka waktu lama dan toksisitasnya tidak berubah (Brass dan Strauss, 1981).

2.3 Nitrogen

Nitrogen adalah komponen penyusun utama atmosfer bumi, dimana komposisinya dalam udara mencapai 78%. Nitrogen memiliki karakteristik tidak berwarna, tidak berasa, tidak berbau, tidak dapat terbakar dan tidak beracun. Pada tekanan atmosfer nitrogen dapat berbentuk cair pada suhu –196°C dengan massa jenis sebesar 1,2151 g/cm³. Nitrogen adalah salah satu unsur yang termasuk ke dalam golongan VA yang merupakan unsur nonlogam dengan simbol N dan nomor atom 7. Nitrogen memiliki struktur kristal berupa HCP (*Hexagonal Close Pack*). Nitrogen dapat membentuk molekul diatomik, yang berarti bahwa ada dua atom nitrogen per molekul gas nitrogen (N₂), sedangkan dalam konfigurasi nitrogen tergolong sangat inert yaitu sangat sulit bereaksi dengan senyawa lain (Greenwood, 1997).

Nitrogen adalah unsur yang paling berlimpah di atmosfer, namun penggunaannya pada bidang biologis sangatlah terbatas. Nitrogen merupakan unsur yang tidak reaktif atau sulit bereaksi dengan unsur lain sehingga dalam

penggunaan nitrogen pada makhluk hidup diperlukan berbagai proses, seperti fiksasi nitrogen, mineralisasi, nitrifikasi dan denitrifikasi (Hanafiah, 2010).

Nitrogen memiliki massa dan jari-jari atom yang ukurannya lebih kecil dibandingkan besi, hal ini memudahkan terjadinya proses difusi ketika gas nitrogen mengalami kontak langsung dengan besi (dengan adanya perpindahan molekul gas). Difusi atom nitrogen pada besi dikenal dengan *interstitial diffusion* (Mohalik *et al.*, 2005).

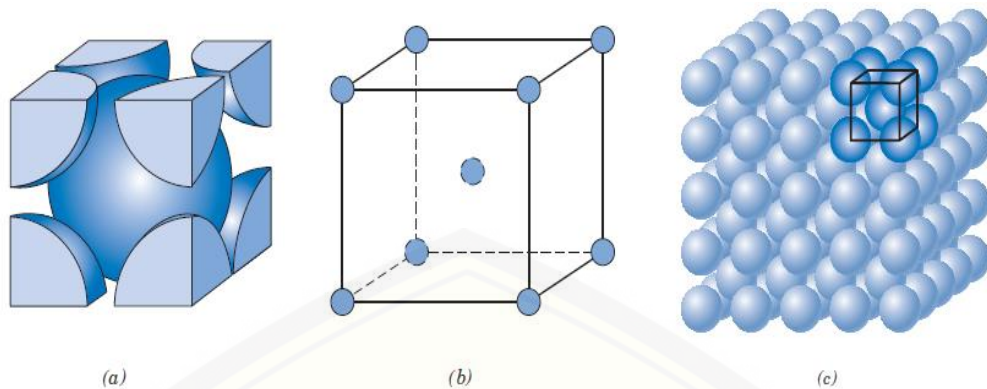
2.4 Struktur Kristal

Suatu material dapat diklasifikasikan dalam beberapa bentuk seperti kristalin, non kristalin atau campuran dari kedua jenis struktur tersebut. Perbedaan antara struktur kristalin dan non kristalin yaitu dengan menerapkan konsep yang berhubungan dengan susunan atom-atom yang saling berikatan. Kristal adalah bahan padat yang atom-atomnya tersusun dalam satu pola yang berulang dalam tiga dimensi yang juga disebut sebagai padatan kristalin. Susunan atom-atom yang beraturan tersebut disebut struktur kristal. Keteraturan atau kekristalan suatu struktur tidak hanya dijumpai pada material padat (Mangonon, 1999).

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

1. Struktur *Body Centered Cubic* (BCC)

Kristal jenis ini terbentuk oleh satu atom pusat yang utuh di tengah sel satuan dan $1/8$ atom lain terdapat pada tiap-tiap sudut sel satuan, sehingga dikatakan BCC memiliki bilangan koordinasi 8 dan dalam satu sel satuan BCC terdapat 2 atom. Contoh logam yang memiliki struktur kristal BCC antara lain besi (Fe), kromium (Cr), litium (Li), molibdenum (Mo), vanadium (V) (Chung, 2007). Struktur BCC ditunjukkan pada Gambar 2.1.



Gambar 2.1 Struktur kristal BCC (a) *hard-sphere*, (b) *reduced-sphere*, dan (c) gabungan sel satuan BCC (Sumber : Callister, 2001)

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:

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

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

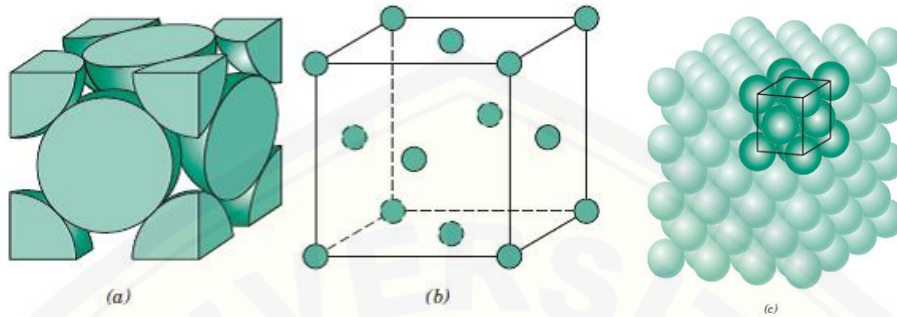
$$APF = \frac{\text{Volume atom-atom dalam sel satuan}}{\text{volume sel satuan}} \quad (2.2)$$

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, 1998).

2. Struktur *Face Centered Cubic* (FCC)

Kristal FCC memiliki $1/2$ 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 buah atom. Contoh logam yang mempunyai struktur kristal FCC antara lain besi (Fe), aluminium (Al), tembaga (Cu), nikel (Ni), timbal (Pb). Pada gambar di bawah terlihat bahwa sel satuan FCC terdiri dari satu titik *lattice* pada setiap sudut dan satu titik *lattice* pada setiap sisi kubus. Setiap atom pada struktur kristal FCC dikelilingi oleh 12 atom, jadi bilangan koordinasinya adalah 12 (Borg, 1992).

Struktur kristal berbentuk kubus (termasuk BCC dan FCC) memiliki besar vektor translasi a_1 , a_2 dan a_3 yang sama. Atom-atom atau inti ion bersentuhan satu sama lain sepanjang diagonal sisi yang ditunjukkan dalam :



Gambar 2.2 Struktur Kristal FCC (a) *hard-sphere*, (b) *reduced-sphere*, dan (c) gabungan sel satuan FCC (Sumber : Callister, 2001)

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

$$a = \frac{4R}{\sqrt{2}} \quad (2.3)$$

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.

2.5 Korosi

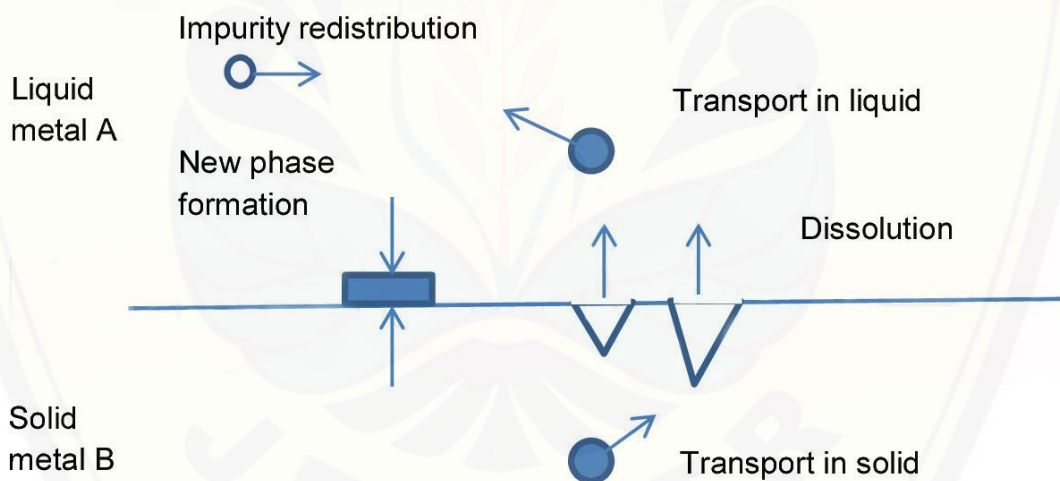
Korosi secara umum diartikan sebagai kerusakan yang terjadi pada material akibat adanya reaksi kimia. Proses korosi yang terjadi pada material yang terbuat dari bahan logam disebabkan oleh adanya proses transfer elektron tertentu yaitu pelepasan elektron pada logam (anoda) yang kemudian elektron tersebut diterima oleh logam lain (katoda). Proses tersebut terjadi apabila terdapat zat yang bersifat sebagai elektrolit yang berfungsi sebagai penghantar listrik. Korosi adalah suatu fenomena kompleks yang terjadi tidak hanya pada material yang terbuat dari logam dan non logam (Ashadi *et al.*, 2002).

Korosi yang terjadi pada logam cair diartikan sebagai kerusakan logam padat akibat kelarutan logam padat pada logam cair. Kelarutan tersebut menunjukkan adanya proses difusi yang terjadi yaitu perpindahan atom-atom dari logam padat

menuju logam cair yang prosesnya dipengaruhi beberapa faktor. Faktor-faktor tersebut antara lain temperatur, impuritas pada logam cair dan rasio luas permukaan antara logam padat dan logam cair (Manly, 1958).

Korosi dapat dicegah atau dihambat melalui berbagai cara salah satunya yaitu dengan penggunaan inhibitor. Inhibitor adalah senyawa tertentu yang dapat ditambahkan untuk membatasi terjadinya korosi. Inhibitor terdiri dari anion atom ganda yang proses kerjanya melalui permukaan logam untuk menghasilkan selaput lapisan tunggal. Lapisan inilah yang bekerja untuk menghalangi terjadinya korosi pada permukaan logam (Djaprie, 1995).

Pada reaktor nuklir sering digunakan pendingin berupa timbal cair. Timbal cair ini sangat korosif terhadap besi atau baja yang digunakan sehingga memungkinkan terjadi korosi pada besi atau baja. Berikut adalah skema terjadinya korosi besi sebagai logam padat dengan timbal cair sebagai logam cairnya :



Gambar 2.3 Skema proses terjadinya korosi logam padat dalam logam cair (sumber : Czerwinski, 2014)

Perilaku korosi ini dapat dilihat dari seberapa besar difusi elemen-elemen baja atau besi yang terlarut dalam timbal cair dengan meninjau nilai koefisien difusinya. Semakin besar koefisien difusi besi dalam timbal cair maka semakin rusak atau korosi material besi tersebut. Sehingga dilakukan upaya untuk menghambat korosi besi dalam timbal cair dengan menambahkan inhibitor yang

dalam penelitian ini menggunakan gas nitrogen. Gas nitrogen yang ditambahkan memiliki konsentrasi tertentu agar maksimal untuk menghambat korosi. Korosi sebelum dan setelah ditambahkan gas nitrogen dapat dianalisis dengan meninjau nilai koefisien difusi besi (Arkundato *et al.*, 2016).

2.6 Koefisien Difusi

Difusi merupakan suatu proses aliran partikel seperti ion, atom, elektron, dan molekul pada suatu material karena pengaruh besaran fisis seperti tekanan, suhu, dan lain-lain yang berasal dari lingkungan. Sedangkan koefisien difusi adalah besaran fisis yang menunjukkan kemampuan suatu bahan untuk berdifusi pada gradien konsentrasi. Kemampuan suatu atom untuk berdifusi berbanding lurus dengan kenaikan suhu yang diberikan pada atom atau material tersebut (Allen, 2004). Askeland *et al.* (2010), menyatakan bahwa secara umum difusi dapat diartikan sebagai fluks atau aliran dari beberapa ion, atom, elektron atau molekul. Besar fluks yang mengalir bergantung pada gradien konsentrasi dan 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. Kemampuan suatu atom untuk berdifusi meningkat seiring bertambahnya temperatur, yaitu ketika energi termal yang didapatkan oleh atom atau molekul meningkat. Hubungan antara koefisien difusi dan temperatur ditunjukkan oleh persamaan Arrhenius berikut:

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

Keterangan :

D = koefisien difusi (m^2/s)

D_0 = koefisien difusi saat $T = 0\text{K}$ (m^2/s)

T = temperatur (K)

R = konstanta gas (8,32 J/mol K)

Q = energi aktivasi (J/mol)

Energi aktivasi merupakan energi ambang yang harus dimiliki suatu atom agar dapat berpindah dengan kecepatan tertentu. Besar energi aktivasi merupakan

selisih energi potensial yang harus dimiliki oleh atom agar dapat berpindah pada sisi lain dengan melewati daerah di bawah pengaruh energi potensial maksimum (Campbell, 2008).

Ketika temperatur dari material meningkat maka koefisien difusi (D) juga meningkat. Energi termal akan mendorong atom untuk melewati energi ambang pada temperatur tinggi, sedangkan pada temperatur rendah 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 (r_0) dalam waktu t menuju posisi (r_t) akan memiliki kuadrat rata-rata pergerakan MSD (*Mean Square Displacement*) :

$$MSD = (r_i(t) - r_i(0))^2 \quad (2.5)$$

sedangkan besar koefisien difusi atom dalam tiga dimensi adalah sebagai berikut :

$$D = \frac{1}{3} \int_0^\infty dt (v_i(t) \cdot v_0(t)) \quad (2.6)$$

dengan $v_i(t)$ adalah kecepatan pusat massa, sehingga hubungan antara MSD dan koefisien difusi (D) dapat dirumuskan menurut relasi Einstein sebagai berikut :

$$2tD = \frac{1}{3} ((r_i(t) - r_i(0))^2) \quad (2.7)$$

$$D = \frac{1}{2t} \frac{1}{3} ((r_i(t) - r_i(0))^2) \quad (2.8)$$

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

(Allen, 2004).

2.7 Dinamika Molekul

Metode dinamika molekul adalah salah satu metode komputasi fisika yang digunakan dalam program simulasi gerak atom dan molekul. Dengan menggunakan metode dinamika molekul gerak atom dapat diamati apabila mengalami pengaruh dari luar salah satunya seperti pemanasan dari waktu ke waktu. Simulasi dengan menggunakan dinamika molekul dimulai dengan terlebih dahulu menentukan konfigurasi awal atom-atom yang ditinjau (Dipojono, 2001).

Dinamika molekul pada dasarnya memecahkan persamaan gerak dengan menggunakan mekanika klasik (persamaan Newton) untuk simulasi gerakan

sistem molekuler. Persamaan yang terlibat sangat besar (bergantung dari ukuran sistem yang diteliti) sehingga untuk penyelesaiannya dapat menggunakan algoritma numerik yang diimplementasi pada komputer. Salah satu parameter yang penting dalam dinamika molekuler adalah energi potensial. Gaya yang bekerja pada partikel didefinisikan yaitu :

$$F = \frac{m d^2r}{dt^2} \quad (2.10)$$

sehingga posisi $r(t)$ sebuah partikel diperoleh dari integrasi solusi persamaan (2.9) secara praktis untuk N partikel akan dipecahkan secara komputasi (Maulana *et al.*, 2006).

Pemahaman dasar tentang sifat material memerlukan informasi pada keadaan mikroskopis. Namun informasi tersebut sering tidak mudah diperoleh dengan peralatan eksperimental sehingga dengan adanya metode dinamika molekul menjadi alternatif untuk diterapkan pada kajian yang lebih luas (Aral, 2003).

Dinamika molekul diterapkan pada bahan sistem seperti kumpulan partikel, atom atau molekul. Dinamika molekul juga dapat diaplikasikan untuk mengatur interaksi antar atom yang sesuai. Secara umum dari solusi persamaan (2.10) berupa koordinat atom $r(t)$ kemudian dengan menggabungkan mekanika statistik dapat dihitung berbagai besaran fisis seperti entalpi, energi, viskositas, koefisien difusi dan sebagainya. Dalam metode dinamika molekul, trayektori biasanya diperoleh dari solusi persamaan gerak klasik seperti hukum gerak Newton (Arkundato *et al.*, 2016).

2.7.1 Potensial Lennard-Jones

Pada penelitian ini digunakan potensial Lennard-Jones untuk menggambarkan interaksi logam-logam. Parameter potensial Lennard-Jones terdiri atas (σ) dan (ϵ) yang diperoleh berdasarkan pada *fitting* data eksperimen. Potensial Lennard-Jones secara sederhana menggambarkan interaksi sepasang atom atau molekul netral yang berupa gaya tarik-menarik pada jarak yang saling berjauhan dan tolak-menolak pada jarak dekat (Rodgers, 2012). Secara umum persamaan potensial Lennard-Jones sebagai berikut :

$$U(r) = k\varepsilon \left[\frac{\sigma^n}{r} - \frac{\sigma^m}{r} \right] \quad (2.11)$$

Keterangan :

$U(r)$ = potensial Lennard-Jones (eV)

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

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

k = koefisien fungsi potensial Lennard-Jones

r = jarak antar atom(Å)

$n = 12$

$m = 6$

Nilai koefisien k pada persamaan di atas ditentukan menggunakan persamaan :

$$k = \frac{n}{n-m} \frac{n^{m/n-m}}{m} \quad (2.12)$$

Sehingga persamaan potensial Lennard-Jones (12-6) :

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\frac{\sigma^{12}}{r} - \frac{\sigma^6}{r} \right] \quad (2.13)$$

(Zhen dan Davies, 1983).

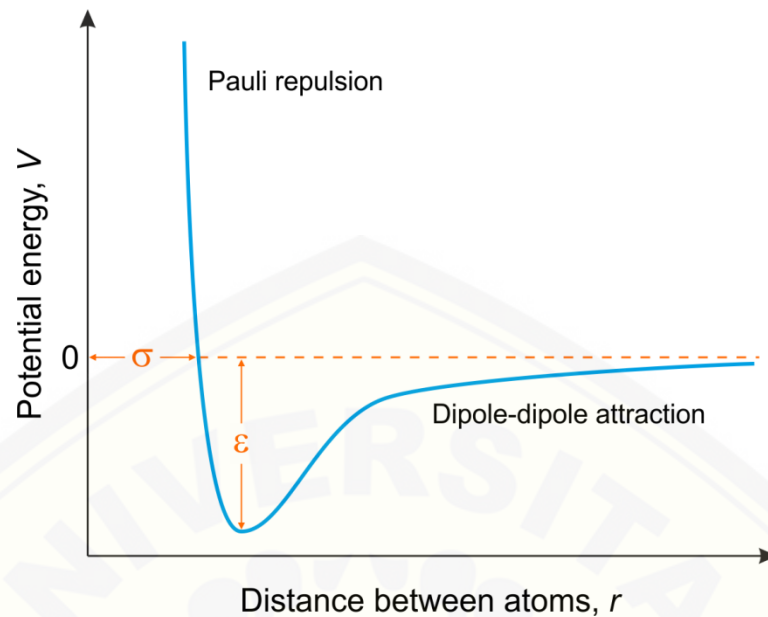
Berikut adalah tabel daftar parameter Lennard-Jones beberapa bahan yang digunakan dalam penelitian ini :

Tabel 2.1 Parameter potensial Lennard-Jones

Interaksi Pasangan	ε (eV)	σ (Å)
Fe – Fe	0.4007	2.3193
Pb – Pb	0.1910	3.1888
N – N	0.0085	3.6560

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

Berikut adalah plot fungsi potensial Lennard-Jones secara umum menurut persamaan (2.13) yaitu hubungan jarak (r) dengan energi potensial Lennard-Jones $U(r)$:



Gambar 2.4 Plot fungsi potensial Lennard-Jones (Generalic, 2018)

Pada gambar tersebut terlihat bahwa ϵ menggambarkan seberapa kuat interaksi tarik-menarik pada ikatan antar pasangan inti atom. Sedangkan parameter σ menggambarkan jarak seberapa dekat pasangan inti atom boleh berdekatan. Apabila kurang dari σ maka pasangan inti atom akan saling tolak menolak dan begitupun sebaliknya. Namun, saat jarak r menuju tak hingga maka gaya tarik-menarik akan asimtotik menuju titik nol (Arkundato *et al.*, 2016).

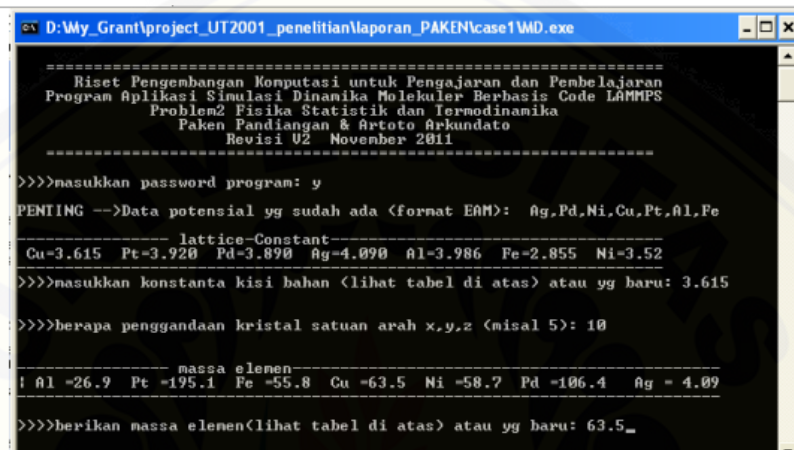
2.7.2 Program MOLLY

MOLLY adalah salah satu program komputer yang dapat menangani sistem dengan banyak partikel. MOLLY dapat menangani setiap sekumpulan molekul atom atau ion serta campuran keduanya. MOLLY tergolong sebuah program simulasi dinamika molekul untuk keperluan umum. Hal ini cukup fleksibel karena berguna untuk berbagai macam perhitungan simulasi atom, ionik dan sistem molekuler. Sistem ditentukan pada jangka waktu dengan file deskripsi sehingga tidak perlu untuk mengkompilasi ulang sistem (Refson, 2001).

File spesifikasi pada MOLLY berisi informasi mengenai jenis dan jumlah atom yang akan disimulasikan serta parameter potensial yang akan digunakan pada simulasi. Terdapat pula file kontrol yang berisi parameter untuk mengontrol

jalannya simulasi. File kontrol terdiri dari data temperatur, tekanan, jumlah step integrasi dan lain-lain (Refson, 2001).

Pada penelitian ini MOLDY akan menghitung nilai koefisien difusi yang penentuannya dapat diperoleh dari analisis kurva MSD (*Mean-Square Displacement*). Nilai MSD diperoleh pada perangkat Ubuntu program Linux yang terinstal MOLDY sebelumnya. Berikut adalah tampilan MOLDY :



```

=====
Riset Pengembangan Komputasi untuk Pengajaran dan Pembelajaran
Program Aplikasi Simulasi Dinamika Molekuler Berbasis Code LAMMPS
Problem2 Fisika Statistik dan Termodinamika
Paken Pandiangan & Artoto Arkundato
Revisi U2 November 2011
=====
>>>masukkan password program: y
PENTING -->Data potensial yg sudah ada <format EAM>: Ag,Pd,Ni,Cu,Pt,Al,Fe
----- lattice-constant-----
Cu=3.615 Pt=3.920 Pd=3.890 Ag=4.090 Al=3.986 Fe=2.855 Ni=3.52
>>>masukkan konstanta kisi bahan <lihat tabel di atas> atau yg baru: 3.615
>>>berapa penggandaan kristal satuan arah x,y,z <misal 5>: 10
----- massa elemen-----
Al -26.9 Pt -195.1 Fe -55.8 Cu -63.5 Ni -58.7 Pd -106.4 Ag -4.09
>>>berikan massa elemen<lihat tabel di atas> atau yg baru: 63.5_

```

Gambar 2.5 Tampilan MOLDY (Sumber : Adler, 2003)

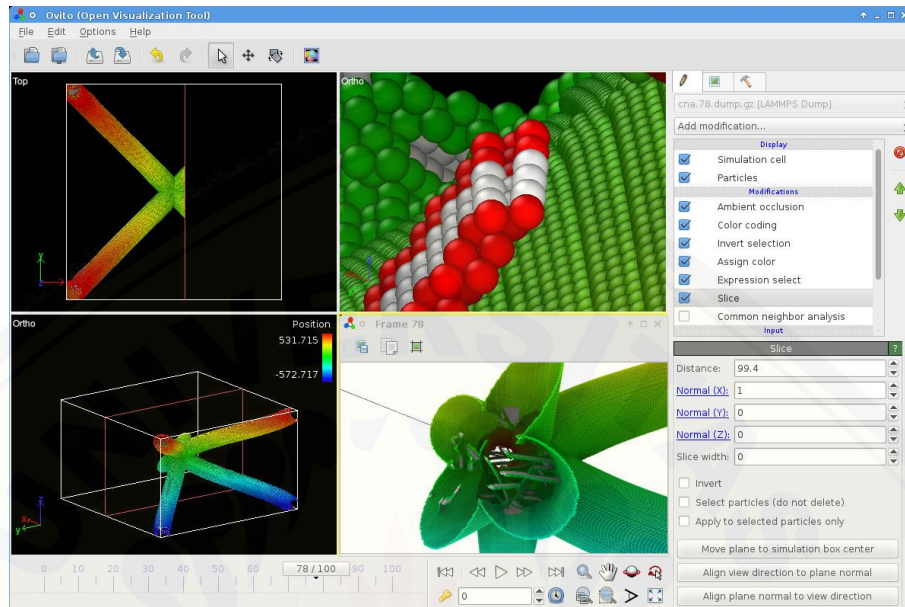
Program moldy dapat diunduh secara gratis melalui internet di alamat website http://cc-icpc.icp.ac.ru/Moldy_2_16.html.

2.7.3 Program OVITO

OVITO merupakan singkatan dari (*Open Visualisation Tool*) dibuat oleh Alexander Stukowski, merupakan perangkat lunak yang berfungsi dalam visualisasi dan analisis data ilmiah untuk skala besar. Program ini memungkinkan untuk memvisualisasikan dan menganalisis data output dari simulasi partikel atomik. Area aplikasi utama adalah simulasi skala besar berdasarkan interaksi potensial. Tugas paket visualisasi OVITO adalah menerjemahkan koordinat atom menjadi representasi grafis (Stukowski, 2013).

OVITO adalah salah satu program yang digunakan dalam visualisasi dan analisis hasil-hasil simulasi dinamika molekul. Program ini dapat diinstal dengan perintah `sudo apt-get install` pada program MOLDY. Program ini merupakan program visualisasi standar dengan banyak kelebihan dalam hal visualisasi struktur molekul dan struktur kristal, serta dalam hal fasilitas analisis untuk hasil

simulasi komputasi. Program ini dapat diunduh melalui website <http://www.ovito.org/> (Arkundato *et al.*, 2013).



Gambar 2.6 Tampilan OVITO (Sumber : *Stukowski*, 2013)

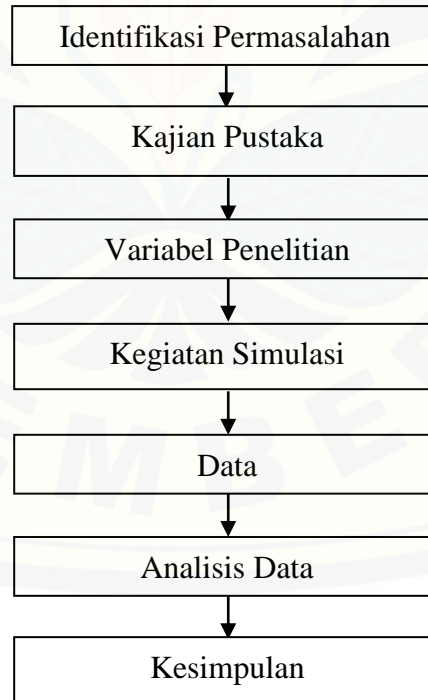
OVITO tersedia secara gratis dalam bentuk perangkat lunak. OVITO menerjemahkan koordinat atom kemudian mempresentasikan dalam bentuk grafik atomik sebagai outputnya. Berbagai fasilitas untuk analisis seperti CNA (*Common Neighbor Analysis*), *calculate displacement* dan lain-lain. OVITO juga digunakan untuk visualisasi berbagai fasilitas manipulasi seperti *slice* untuk memotong-motong tampilan struktur molekul atau kristal, rotasi, *rendering*, dan sebagainya. Program ini masih terus diupdate dan dikembangkan hingga sekarang (Stukowski, 2013).

BAB 3. METODE PENELITIAN

Dalam bab 3 ini dipaparkan metode yang digunakan dalam penelitian. Rancangan penelitian, jenis dan sumber data, definisi operasional variabel dan kerangka pemecahan masalah akan dijelaskan secara berurutan. Langkah kerja penelitian dan teknik pengambilan data dijelaskan pada bagian prosedur penelitian sedangkan metode untuk menganalisis hasil dan data yang diperoleh terdapat pada bagian terakhir metode penelitian.

3.1 Rancangan Penelitian

Rancangan penelitian diperlukan untuk memperjelas langkah-langkah yang akan dilakukan dalam sebuah penelitian sehingga dalam pelaksanaannya dapat berjalan sesuai tujuan penelitian. Secara garis besar, skema dari rancangan penelitian ditampilkan dalam bentuk diagram alir yang ditunjukkan sebagai berikut:



Gambar 3.1 Diagram Alir Rancangan Penelitian

Penelitian ini dimulai dengan mencari studi literatur hingga didapatkan sebuah permasalahan. Kemudian dilanjutkan dengan pengkajian teori-teori yang berkaitan dengan permasalahan tersebut. Melalui pengkajian teori ini, peneliti mengumpulkan dan mendapatkan sumber dan variabel penelitian sebagai data input di awal simulasi. Selanjutnya dilakukan simulasi untuk menyelesaikan permasalahan penelitian dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekul program MOLLY. Simulasi dilakukan dalam dua tahapan, yang pertama yaitu memverifikasi nilai parameter potensial Lennard-Jones untuk logam besi dan timbal. Pada tahap ini dilakukan persiapan file input berupa file spesifikasi dan file kontrol simulasi. Verifikasi dilakukan dengan melakukan perhitungan besaran fisis koefisien difusi (D) dengan relasi Einstein dilanjutkan dengan menghitung koefisien difusi bergantung temperatur $D(T)$ dengan formulasi Arrhenius. Simulasi yang kedua yaitu studi korosi besi dalam logam cair dan penghambatannya. Hasil tersebut kemudian dapat ditarik kesimpulan yang selanjutnya dapat dikemas dalam bentuk karya tulis ilmiah berupa laporan tugas akhir. Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Fisika Komputasi, Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember yang dimulai dari bulan Maret – Juni 2019.

3.2 Jenis dan Sumber Data Penelitian

Jenis data yang digunakan dalam penelitian ini berupa data kuantitatif yaitu jenis data yang dapat dihitung atau diukur secara langsung dan dapat dinyatakan dalam sebuah angka. Sedangkan sumber data pada penelitian terdiri dari data primer dan data sekunder. Data primer yaitu data yang dihitung oleh peneliti sendiri berdasarkan simulasi. Data yang diperoleh selama simulasi adalah nilai koefisien difusi (D) dan koefisien difusi bergantung temperatur $D(T)$. Sedangkan data sekunder adalah data yang diperoleh peneliti dari sumber data yang telah ada. Data tersebut yaitu nilai koefisien difusi bahan (D) hasil eksperimen yang nantinya akan digunakan sebagai pembanding dalam verifikasi. Data koefisien difusi hasil eksperimen disajikan pada tabel berikut :

Tabel 3.1 Data koefisien difusi berdasarkan eksperimen

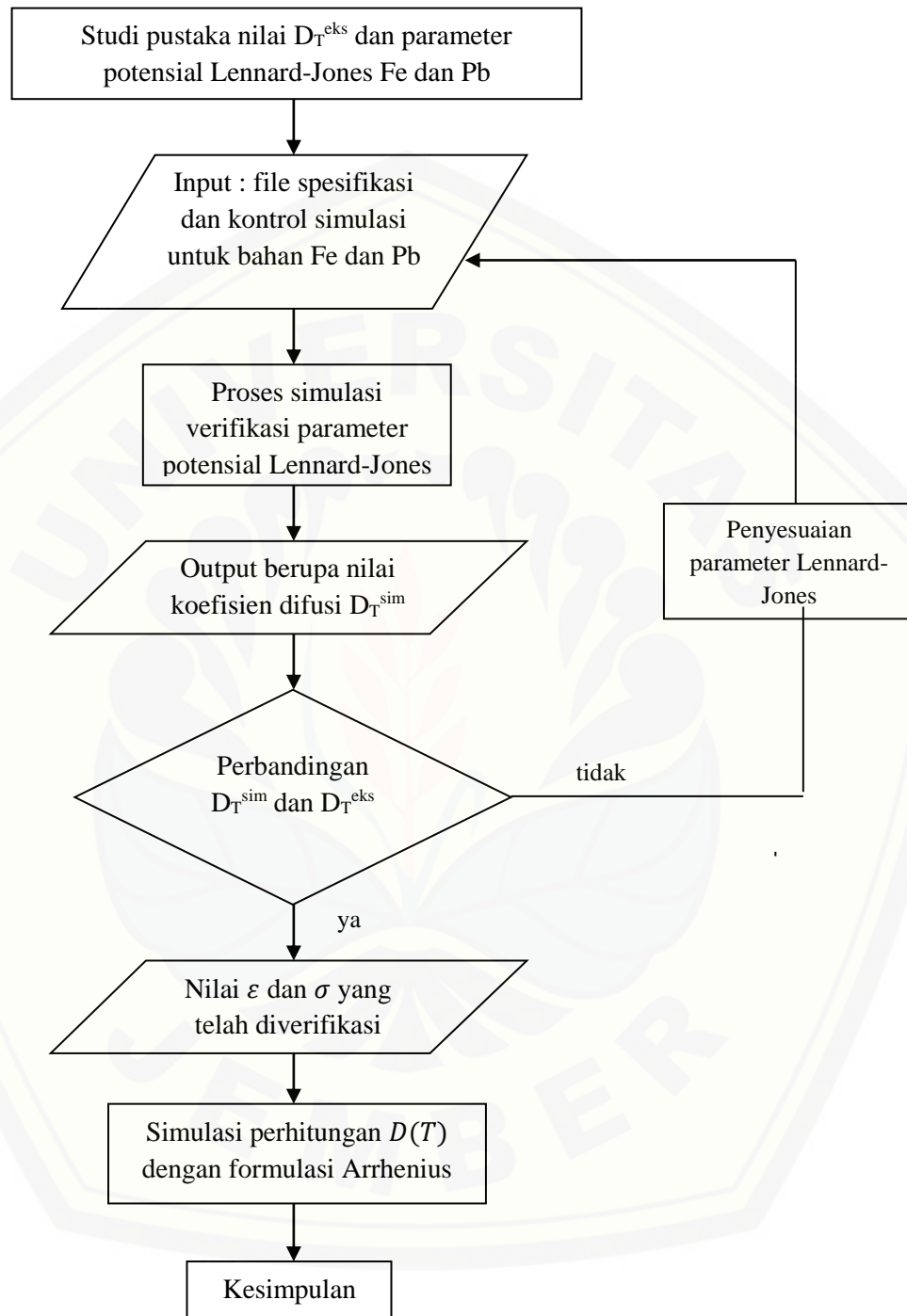
Referensi	Bahan	$D(T)$
Askeland & Wendelin (2014)	Besi	$D(2000 K) = 1.557 \times 10^{-10}$
J. Winkelmann (2017)	Timbal	$D(743 K) = 2.427 \times 10^{-9}$

3.3 Definisi Operasional Variabel

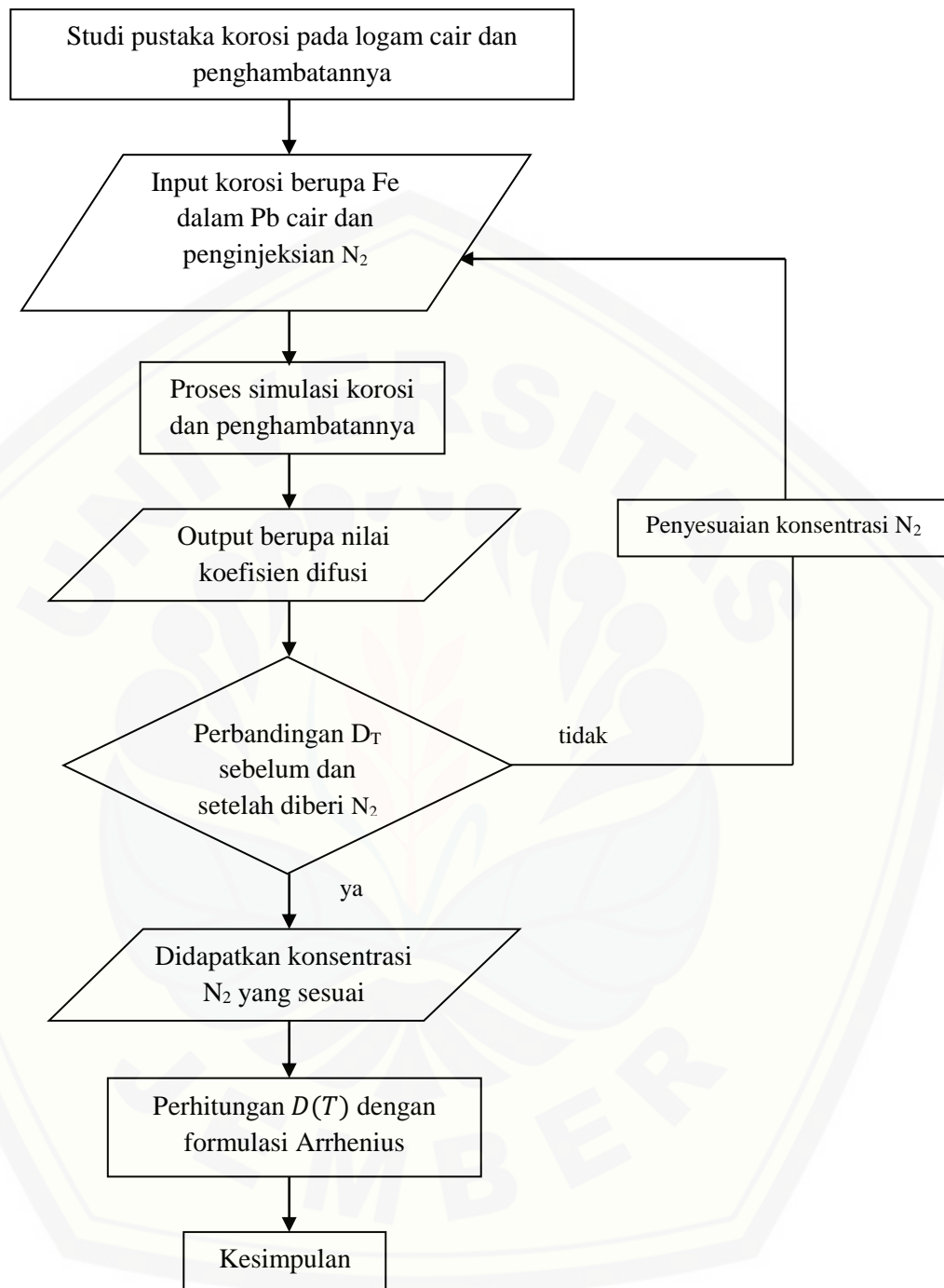
Variabel adalah faktor yang berpengaruh dalam penelitian dan memiliki nilai yang dapat berubah atau diubah. Variabel yang digunakan dalam penelitian ini adalah variabel terikat, variabel bebas dan variabel kontrol. Variabel terikat yaitu variabel yang diamati dan diukur oleh peneliti dalam sebuah penelitian. Variabel terikat pada penelitian ini adalah nilai koefisien difusi bahan (D) dan koefisien difusi bergantung temperatur $D(T)$. Variabel bebas yaitu variabel yang mempengaruhi timbulnya variabel terikat. Variabel bebas yang dapat ditinjau dari penelitian ini adalah temperatur (T). Sedangkan variabel kontrol yaitu variabel yang dikendalikan atau dibuat konstan dalam penelitian. Variabel kontrol pada penelitian ini adalah jumlah atom (N), tekanan (P), jumlah step integrasi (n) dan struktur kristal atom.

3.4 Kerangka Pemecahan Masalah

Kerangka pemecahan masalah dalam penelitian ini dilakukan dalam tahapan kegiatan penelitian yang digambarkan pada diagram alir yang ditunjukkan pada Gambar 3.2 dan 3.3 berikut :



Gambar 3.2 Diagram alir verifikasi potensial Lennard-Jones besi dan timbal



Gambar 3.3 Diagram alir korosi besi dalam timbal cair dan penghambatannya

3.5 Prosedur Penelitian

Prosedur yang dilakukan pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

3.5.1 Pre-Processing Step

Pre-processing step adalah kegiatan yang dilakukan sebelum proses simulasi berlangsung. Pada tahapan ini dilakukan studi pustaka dan pengkajian teori-teori yang berkaitan dengan permasalahan yakni mengenai koefisien difusi bahan, korosi besi dalam timbal cair serta penghambatannya. Melalui pengkajian teori ini, didapatkan sumber-sumber data yang akan digunakan sebagai data input di awal simulasi seperti data nilai parameter potensial Lennard-Jones pada Tabel 2.1 serta didapatkan pula sumber data yang akan digunakan sebagai pembanding atau acuan dalam simulasi yakni nilai koefisien difusi bahan hasil eksperimen (D_T^{eks}) pada Tabel 3.1. Data input yang akan digunakan dalam simulasi meliputi file spesifikasi sistem dan file kontrol simulasi. File spesifikasi sistem berisi informasi mengenai bahan yang akan disimulasikan, jumlah atomnya, struktur kristal, dan lain-lain. berikut adalah file spesifikasi yang digunakan dalam penelitian :

```
#
Fe 3456
1 0 0 0 55.847 0 Fe
end
Lennard-Jones
1 1 0.4007 2.3193
end
2.8665 2.8665 2.8665 90 90 90 12 12 12
Fe 0 0 0
Fe 0.5 0.5 0.5
end
|
```

Tampilan file spesifikasi untuk simulasi besi

Sedangkan file kontrol simulasi yaitu file yang berisi data-data untuk mengontrol jalannya simulasi yang terdiri atas tekanan, jumlah step simulasi dan lain-lain. berikut adalah contoh file kontrol yang digunakan dalam penelitian :

```

sys-spec-file=Fe.in
# title--Molecular Dynamics of Fe system--
time-unit=1.0181e-14
#density=7.85 #unit gr/mL
lattice-start=1
const-temp=1 # Nose_Hoover Thermostat
temperature=100
const-pressure = 4 # Andersen constant pressure
pressure = 0.013 #udara terbuka
#text-mode-save=1
save-file=Fe.save
#restart-file=Fe.restart
backup-file=Fe.back
dump-file=Fe.dump%d
begin-dump=1 #kapan mulai simpan xyz
dump-level=3
dump-interval=1000 #disimpan saat pengulangan 1000
scale-options=2
#scale-interval=5
#scale-end=2500
#steps=84000
nsteps = 60000 #berapa langkah simulasi
print-interval=1000 #berapa langkah hasilnya ditulis dlm file
roll-interval=1000
begin-average=10000 #mulai kapan besaran fisis dihitung
average-interval=1000 #merata-rata setiap pengulangan berpa
step=0.0001 # delta t(waktu)
subcell=2
#strict-cutoff=1
cutoff=8.5125 #2.5 * sigma
begin-rdf=10000 #mulai kapan menghitung kurva rdf
rdf-interval=50
rdf-out=1000
end

```

Tampilan file kontrol untuk simulasi besi

Pada penelitian ini file kontrol yang digunakan untuk simulasi hampir sama, yang membedakan adalah nilai dari beberapa data yang disesuaikan dengan sistem simulasi. Berikut adalah data masukan yang dapat diubah sesuai sistem :

Tabel 3.2 Contoh data masukan pada file kontrol

Nama	Nilai	Fungsi
<i>Temperature</i>	500-5000 K	Konfigurasi awal suhu
<i>Pressure</i>	0	Tekanan eksternal yang diberikan pada sistem
<i>Begin-dump</i>	20000	Timestep awal proses penyalinan hasil simulasi
<i>Dump-interval</i>	1000	Frekuensi pencetakan hasil proses penyalinan
<i>Step</i>	0,001	Lamanya waktu tiap step
<i>Nstep</i>	80000	Jumlah proses integrasi numerik yang dijalankan

(Sumber : Refson, 2001)

Selanjutnya, dilakukan penginstalan *software* atau *upgrade software*, dimana *software* yang digunakan yaitu MOLLY. Data-data eksperimen koefisien difusi

bergantung nantinya akan digunakan sebagai pembanding hasil simulasi. Berikut adalah alat dan bahan yang digunakan dalam penelitian ini, antara lain:

1. Perangkat komputer dengan spesifikasi :
 - a. Prosesor : Intel (R) Core (TM) i3 – 3240 CPU @3,40 GHz x4
 - b. Sistem : 64 bit
 - c. RAM : 4,00 GB
 - d. OS : Linux Ubuntu
2. Program yang digunakan dalam simulasi antara lain:
 - a. *Software* MOLDY untuk memproses simulasi dinamika molekul
 - b. OVITO berfungsi untuk membuat visualisasi 3D dan mengetahui jumlah struktur kristal suatu sistem.
 - c. Microsoft Excell digunakan untuk *plotting* data.

3.5.2 Simulation Step

Simulation step adalah tahapan dijalankannya simulasi dengan file input yang telah disesuaikan dengan sistem. Tahap simulasi diawali dengan dilakukan pengecekan konvergensi simulasi terlebih dahulu. Simulasi singkat dilakukan untuk menguji kesesuaian file input dengan meninjau keadaan ekuilibriasi sistem yang digunakan melalui kurva ekuilibriasi energi potensial. Keadaan ekuilibriasi adalah keadaan yang dicapai sistem untuk dapat melanjutkan simulasi, yang biasanya ditunjukkan dengan nilai kurva yang cukup stabil. Kurva ekuilibriasi digunakan untuk menentukan nilai *begin dump* pada file kontrol sistem dengan nilai *begin dump* diambil dari mulainya grafik menunjukkan keadaan stabil. Perintah untuk mengetahui tingkat ekuilibriasi sistem di MOLDY yaitu :

[moldyext (spasi) -f (spasi) 4 (spasi) file output]

Setelah dilakukan uji ekuilibriasi maka sistem dapat dilanjutkan pada tahap simulasi koefisien difusi dengan perintah :

[moldy (spasi) file kontrol (spasi) file ouput]

kemudian MOLDY akan melakukan proses *running* sesuai dengan file kontrol dan file input yang diberikan untuk menghasilkan data output seperti pada gambar berikut :

```

Tue Jan 22 11:50:02 2019      Test Simulation Page 2

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

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

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

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

System specification read in from file Fe.in
fe
  Number of molecules      = 2000
  Number of sites         = 1
  Mass                    = 55.847 amu
  Electric Charge         = 0 Qe
  fe molecule has no rotational degrees of freedom

MD cell vectors
  a                       = 28.665 0 0 A
  b                       = 7.6065e-16 28.665 0 A
  c                       = 7.6065e-16 7.6065e-16 28.665 A
Run parameters
  Final step              = 60000
  Size of step            = 0.0001 ps
  CPU limit               = 1e+20 s
Temperature will be scaled using instantaneous kinetic energy
(for transl. and rotl. individually)
  No. steps between scalings = 10
  End scaling at step      = 1000000
Nose-Hoover thermostat will be used

```

Tampilan file output untuk simulasi besi

Setelah file output dihasilkan, maka dilakukan perhitungan MSD untuk mendapatkan nilai koefisien difusi bahan berdasarkan relasi Einstein. Perintah yang diberikan di MOLDY adalah :

[msd (spasi) -r (spasi) file save (spasi) -d (spasi) file dump (spasi) 0-50 (spasi) -t (spasi) 0-50 (spasi) -o (spasi) output msd]

Nilai 0-50 menyesuaikan sistem, dimana nilai tersebut diambil dari nilai maksimum yang dapat terbaca dari output simulasi.

#	fe			
0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000	0.0000000
0.1322665	0.1349120	0.1327794	0.3999579	
0.2078906	0.2151917	0.2092757	0.6323580	
0.2648612	0.2774515	0.2678837	0.8101964	
0.3183298	0.3351275	0.3217975	0.9752549	
0.3721909	0.3917511	0.3757809	1.1397229	
0.4266385	0.4502811	0.4320054	1.3089249	
0.4823959	0.5091105	0.4887364	1.4802428	
0.5396195	0.5695055	0.5483088	1.6574339	
0.5993266	0.6300307	0.6098349	1.8391921	
0.6612119	0.6932839	0.6720828	2.0265786	
0.7251022	0.7595928	0.7365843	2.2212793	
0.7935080	0.8280071	0.8063780	2.4278931	
0.8642796	0.9007130	0.8783024	2.6432950	
0.9374774	0.9769267	0.9520838	2.8664879	
1.0144452	1.0556744	1.0288402	3.0989598	
1.0958509	1.1372554	1.1090556	3.3421619	
1.1786196	1.2239383	1.1928543	3.5954122	
1.2642382	1.3144752	1.2790576	3.8577710	
1.3518890	1.4081516	1.3686413	4.1286818	
1.4423198	1.5056229	1.4635224	4.4114651	
1.5367105	1.6049595	1.5625527	4.7042227	
1.6360769	1.7067993	1.6653426	5.0082188	
1.7376967	1.8108875	1.7714281	5.3200123	
1.8434355	1.9171456	1.8783875	5.6389686	
1.9509183	2.0261943	1.9877679	5.9648805	
2.0617814	2.1349955	2.0977779	6.2945548	
2.1741990	2.2469735	2.2096201	6.6307925	
2.2885617	2.3582053	2.3235566	6.9703236	
2.4018677	2.4704784	2.4378557	7.3102018	
2.5146852	2.5850174	2.5523191	7.6520217	

Tampilan file MSD untuk simulasi besi

3.5.3 Post Processing Step

Post processing step adalah tahapan yang dilakukan setelah simulasi yaitu menganalisis data output MSD untuk mendapatkan nilai koefisien difusi. Data MSD tersebut digambarkan dalam grafik hubungan antara $1/T$ dan $\ln D$ untuk mendapatkan parameter dari persamaan koefisien difusi bergantung temperatur yaitu D_0 dan Q . Setelah didapatkan kedua parameter tersebut dilakukan *fitting* data dengan persamaan Arrhenius dan dilakukan *plotting* data dalam grafik hubungan koefisien difusi bergantung temperatur $D(T)$ dengan temperatur (T). Berdasarkan persamaan dan grafik tersebut dapat diketahui nilai koefisien difusi suatu bahan.

Setelah didapatkan nilai koefisien difusi masing-masing bahan D_T^{sim} , dilakukan verifikasi dengan membandingkannya dengan hasil eksperimen D_T^{eks} . Verifikasi dilakukan untuk mendapatkan nilai parameter potensial Lennard-Jones yang sesuai dengan sistem, dimana acuannya yaitu nilai diskrepansi dari hasil perbandingan D_T^{sim} dan D_T^{eks} . Diskrepansi yang baik adalah bernilai kurang dari 5%, sehingga nilai parameter potensial diubah dengan variasi mencapai 50 pasang

nilai parameter potensial tiap bahan untuk mendapatkan nilai diskrepansi yang paling minimum. Diskrepansi yang paling minimum menandakan telah didapatkan nilai parameter potensial yang paling sesuai dengan sistem.

Variasi dilakukan pada parameter potensial Lennard-Jones yang telah diketahui dengan cara mengubah salah satu nilai parameter sedangkan parameter lainnya tetap, misalnya mengubah terlebih dahulu nilai (σ) dan nilai (ϵ) tetap. Yaitu dengan menambahkan atau mengurangi nilainya pada kisaran angka 0.1; 0.01; 0.001; dan 0.0001. Hal tersebut juga berlaku untuk nilai (ϵ) yang diubah sedangkan nilai (σ) tetap.

Nilai parameter potensial yang telah diverifikasi tersebut digunakan dalam studi korosi besi dalam timbal cair. Korosi yang terjadi ditinjau dari nilai koefisien difusi besi yang terkorosi. Kemudian dilakukan penambahan nitrogen untuk menghambat korosi. Nitrogen yang ditambahkan harus memiliki konsentrasi yang sesuai agar dapat bekerja menghambat korosi, apabila tidak sesuai maka tidak akan bekerja dalam penghambatan. Hal ini ditinjau pula dari nilai koefisien difusi besi yang terkorosi dengan membandingkan nilai koefisien difusi sebelum dan setelah diberi penambahan nitrogen. Struktur kristal besi yang terkorosi dalam dilihat melalui OVITO untuk menunjukkan analisis struktur kristalnya.

3.6 Metode Analisis Data

Metode analisis data yang digunakan dalam penelitian ini meliputi analisis nilai parameter potensial Lennard-Jones dan besar koefisien difusi suatu bahan. Analisis parameter potensial Lennard-Jones dilakukan dengan memverifikasi koefisien difusi yang didapatkan dari simulasi dengan koefisien difusi hasil eksperimen, dimana dengan dilakukan verifikasi dapat dihasilkan nilai parameter yang paling sesuai sehingga didapatkan nilai diskrepansi yang semakin kecil. Sedangkan analisis besar koefisien difusi dilakukan untuk studi korosi besi dalam logam cair ditinjau dari besar koefisien difusinya.

Persamaan yang digunakan dari penentuan nilai koefisien difusi (D) dari grafik MSD adalah :

$$MSD = (r_i(t) - r_i(0))^2 \quad (3.1)$$

Hubungan antara MSD dan koefisien difusi (D) dapat dirumuskan menurut relasi Einstein sebagai berikut :

$$D = \frac{1}{6t} MSD \quad (3.2)$$

Verifikasi nilai parameter potensial Lennard-Jones dilakukan dengan membandingkan hasil koefisien difusi saat simulasi dengan eksperimen, dengan nilai diskrepansinya dapat diketahui dengan persamaan :

$$|\Delta D| = \frac{D_{\text{simulasi}} - D_{\text{eksperimen}}}{D_{\text{eksperimen}}} \times 100 \% \quad (3.3)$$

Sehingga dapat diketahui berapa persen nilai diskrepansinya. Selanjutnya dilakukan perhitungan nilai koefisien difusi bergantung temperature menggunakan formulasi Arrhenius dengan persamaan :

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

Berdasarkan persamaan tersebut untuk mendapatkan nilai $D(T)$ diperlukan nilai D_0 dan Q yaitu dengan cara menyatakan persamaan koefisien difusi dalam bentuk logaritma natural sehingga menghasilkan persamaan :

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

Q merupakan energi aktivasi dan R adalah konstanta gas. Persamaan 3.5 merupakan persamaan linear yang dapat direpresentasikan dalam grafik hubungan $(1/T)$ dan $(\ln D)$.

Untuk permasalahan korosi, digunakan konsentrasi nitrogen dengan rumus :

$$wt\% = \frac{(m \times n)_{\text{nitrogen}}}{(m \times n)_{\text{nitrogen}} + (m \times n)_{\text{timbal}}} \quad (3.6)$$

Keterangan :

m : massa
n : jumlah atom
wt% : persen berat

Semakin besar nilai koefisien difusi (D) besi dalam logam cair, maka semakin korosi atau rusak besi tersebut. Oleh karena itu, ditambahkan nitrogen untuk menghambat korosi ditinjau dari nilai koefisien difusi yang mengecil.

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan diperoleh kesimpulan sebagai berikut :

1. Hasil verifikasi didapatkan nilai parameter potensial Lennard-Jones untuk bahan besi bernilai $\varepsilon = 0.4007$ (eV) dan $\sigma = 2.3894$ (Å), sedangkan untuk bahan timbal bernilai parameter $\varepsilon = 0.1910$ (eV) dan $\sigma = 2.9578$ (Å).
2. Nilai koefisien difusi diri bergantung temperatur dengan menggunakan parameter potensial hasil verifikasi yaitu untuk besi $D(T) = 1.9069 \times 10^{-7} \exp \frac{-135766}{RT}$ (m²/s), sedangkan untuk timbal yaitu $D(T) = 1.399 \times 10^{-8} \exp \frac{-8885,76}{RT}$ (m²/s)
3. Pada aplikasi korosi besi dalam timbal cair didapatkan konsentrasi nitrogen untuk menghambat korosi secara optimal adalah sebesar 0.29 wt% ditandai dengan nilai koefisien difusi yang terkecil.

5.2 Saran

Sebaiknya dilakukan perumusan cara memverifikasi nilai parameter potensial Lennard-Jones agar memudahkan dalam memverifikasi dengan sistem simulasi lainnya. Selain itu untuk perbandingan hasil korosi sebaiknya dilakukan pada temperatur yang sama, agar keadaan sebelum dan setelah terjadi korosi dapat dibandingkan. Saran lain yaitu dalam menganalisis hendaknya dilakukan dengan langkah-langkah yang sesuai.

DAFTAR PUSTAKA

- Adler, J. 2003. Molecular Dynamic Simulation of Copper Using Moldy. *Research Experience for Undergraduates National High Magnetic Field Laboratory*. Florida State University.
- Allen, M. P. 2004. Introduction to Molecular Dynamics Simulation. *NIC Series*. 23 (4): 1-28.
- Aral, G. 2003. Parallel Molecular Dynamics Simulation of Dynamics of Oxidation and Reactive Wetting in Metal/Ceramic System. *Disertasi*. USA : Illinois Institute of Technology.
- Arkundato, Su'ud, Abdullah, Sutrisno, dan Cellino. 2013. Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead. a molecular dynamics study. *Annals of Nuclear Energy* 62 (2013) 298-306. Elsevier: Netherland.
- Arkundato, Moh. Hasan, dan Zaki Su'ud. 2016. *Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya*. Jember : UPT Penerbitan Universitas Jember.
- Ashadi H.E, Sulistyoweni W, Guniani I. 2002. Pengaruh Unsur-Unsur Kimia Korosi. *Jurnal Korosi*. Makara Teknologi.
- Askeland, D.R., P.P Fulay, dan J.W Wrihy. 2010. *The Sciece and Engineering of Materials*. USA : Cengage Learning, Inc.
- Askeland, D. R. dan Wendelin J. Wright. 2014. *Essential of Material Science and Engineering Solution Manual*. USA : Cengage Learning, Inc.
- Australian Geological Survey Organization. 1999. *Iron*. Australia : www.agso.gov.au/education/factsheet/. [Diakses pada 20 Januari 2019].
- Borg, R. J. 1992. *The Physical Chemistry of Solids*. USA : Academic Press, Inc.
- Brass, G.M. dan W. Strauss. 1981. *Air Pollution Control*. New York : John Willey & Sons.
- Callister, W. 2011. *Fundamentals of Materials Science and Engineering*. New York : John Willey & Sons.
- Campbell, F.C. 2008. *Elements of Metallurgy and Engineering Alloys*. United Statesof America : ASM International.
- Chung, Y. 2007. *Introduction to Material Science and Engineering*. USA : CRC Press Taylor & Ffrancis Group.

- Cuendet, M.A. 2008. *Molecular Dynamics Simulation*. Switzerland : EMBL.
- Czerwinski. 2014. *Corrosion of Materials in Liquid Magnesium Alloy and Its Prevention*. Articles : ASM International.
- Dipojono, H.K. 2001. Simulasi Dinamika Molekul. *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 4* ISSN 1410-7686.
- Djaprie, S. 1995. *Ilmu dan Teknologi Bahan Edisi ke-5*. Jakarta : Erlangga.
- Generalic, Eni. 2018. "Lennard-Jones potential." *Croatian-English Chemistry Dictionary & Glossary*.
<https://glossary.periodni.com/glossary.php?en=Lennard-Jones+potential> KTF-Split. [Diakses pada 30 Juni 2019]
- Greenwood. 1997. *Chemistry of The Elements (Edisi ke 2)*. Oxford : Butterworth-Heinemann.
- Mangonon, P.L. 1999. *The Principle of Materials Selection for Engineering Design*. Principle-Hall International, Inc.
- Manly, W.D. 1958. *Fundamentals of Liquid-Metal Corrosion*. U.S : Oak Ridge.
- Maulana, Su'ud, Hermawan, dan Khairurijal. 2006. Aplikasi Paket Moldy untuk Karakteristik Sifat Bahan Fe, Pb, Bi dan Pendingin Reaktor Pb-Bi. *Risalah Lokakarya Komputasi dan Sains dan Teknologi Nuklir XVII*.
- Mohalik, N.K, Singh, R.V.K, Pandey J. 2005. Application of Nitrogen as Preventive and Controlling Subsurface File. *J. Of Sci & Industrial Research*.
- Refson, K. 2001. *Moldy User's Manual*. Departemen of Earth Science : Oxford.
- Rodgers, T. 2012. *Soft Matter Simulation*. Manchester : University of Manchester.
- Sekimoto, H. 2007. *Nuclear Reactor Theory*. Tokyo : Tokyo Institute of Technology.
- Stukowski, A. 2013. OVITO (Open Visualization Tool). Germany : <http://OVITO.org/>. [Diakses pada 20 Januari 2019].
- Sunarya. 2007. *Kimia Umum*. Bandung: PT. Setia Inves.
- Talbot, D. 1998. *Corrosion Science and Technology*. United Stated of America : CRC Press LLC.

Winkelmann, J. 2017. Self Diffusion Coefficient of Lead : *Diffusion in Gases, Liquid and Electrolytes* pp 539.

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



Lampiran

A.1 Hasil Verifikasi Parameter Potensial Lennard-Jones Besi

No	ϵ	σ	$D_T^{sim}(m^2/s)$	diskrepansi (%)	keterangan
1	0.4007	2.3193	2.9153×10^{-10}	87.22%	Penambahan 0,1
2	0.4007	2.4193	1.9395×10^{-10}	24.56%	
3	0.4007	2.5193	1.0898×10^{-10}	30.01%	
4	0.4007	2.6193	6.3109×10^{-11}	59.47%	
5	0.4007	2.7193	1.4085×10^{-10}	9.54%	
6	0.4007	2.2193	6.6105×10^{-09}	4145.36%	Pengurangan 0,1
7	0.4007	2.1193	1.0742×10^{-08}	6798.72%	
8	0.4007	2.0193	1.5388×10^{-08}	9782.35%	
9	0.4007	1.9193	1.6316×10^{-08}	10378.83%	
10	0.4007	2.4293	2.0969×10^{-10}	34.67%	Penambahan 0,01
11	0.4007	2.4393	2.5922×10^{-10}	66.47%	
12	0.4007	2.4493	6.5588×10^{-11}	57.88%	
13	0.4007	2.4093	1.6777×10^{-10}	7.75%	Pengurangan 0,01
14	0.4007	2.3993	1.8231×10^{-10}	17.08%	
15	0.4007	2.3893	1.5934×10^{-10}	2.34%	
16	0.4007	2.3883	1.7092×10^{-10}	9.77%	Pengurangan 0,001
17	0.4007	2.3873	1.7119×10^{-10}	9.95%	
18	0.4007	2.3863	1.3529×10^{-10}	13.12%	
19	0.4007	2.3903	2.1627×10^{-10}	38.89%	Penambahan 0,001
20	0.4007	2.3913	2.1729×10^{-10}	39.55%	
21	0.4007	2.3892	2.7137×10^{-10}	74.28%	Pengurangan 0,0001
22	0.4007	2.3891	1.7222×10^{-10}	10.60%	
23	0.4007	2.389	2.6127×10^{-10}	67.79%	
<u>24</u>	<u>0.4007</u>	<u>2.3894</u>	<u>1.5906×10^{-10}</u>	<u>2.16%</u>	Penambahan 0,0001
25	0.4007	2.3895	2.3014×10^{-10}	47.80%	
1	0.5007	2.3894	7.0531×10^{-11}	54.70%	Penambahan 0,1
2	0.6007	2.3894	5.2596×10^{-11}	66.22%	
3	0.7007	2.3894	4.3270×10^{-11}	72.21%	
4	0.8007	2.3894	3.8360×10^{-11}	75.36%	
5	0.3007	2.3894	1.4075×10^{-10}	9.60%	Pengurangan 0,1
6	0.2007	2.3894	4.7888×10^{-09}	2975.45%	
7	0.1007	2.3894	8.8312×10^{-09}	5571.47%	
8	0.0007	2.3894	5.0045×10^{-08}	32039.64%	

No	ε	σ	$D_T^{sim}(m^2/s)$	diskrepansi (%)	Keterangan
9	0.3907	2.3894	2.9320×10^{-10}	88.30%	Pengurangan 0,01
10	0.3807	2.3894	1.94×10^{-10}	24.59%	
11	0.3707	2.3894	1.8564×10^{-10}	19.22%	
12	0.4107	2.3894	3.3560×10^{-10}	115.53%	Penambahan 0,01
13	0.4207	2.3894	2.8094×10^{-10}	80.42%	
14	0.4307	2.3894	2.1016×10^{-10}	34.97%	
15	0.3997	2.3894	2.2812×10^{-10}	46.50%	Pengurangan 0,001
16	0.3987	2.3894	1.8969×10^{-10}	21.82%	
17	0.3977	2.3894	2.7580×10^{-10}	77.13%	
18	0.4017	2.3894	2.1466×10^{-10}	37.86%	Penambahan 0,001
19	0.4027	2.3894	1.8602×10^{-10}	19.47%	
20	0.4037	2.3894	1.4805×10^{-10}	4.92%	
21	0.4006	2.3894	2.2771×10^{-10}	46.24%	Pengurangan 0,0001
22	0.4005	2.3894	2.3586×10^{-10}	51.47%	
23	0.4004	2.3894	1.9322×10^{-10}	24.09%	
24	0.4008	2.3894	1.6344×10^{-10}	4.96%	Penambahan 0,0001
25	0.4009	2.3894	2.0006×10^{-10}	28.48%	
26	0.401	2.3894	2.5669×10^{-10}	64.85%	

A.2 Hasil Verifikasi Parameter Potensial Lennard-Jones Timbal

No	ε	σ	$D_T^{sim}(m^2/s)$	diskrepansi (%)	Keterangan
1	0.191	3.1888	1.1029×10^{-10}	95.46%	Pengurangan 0,1
2	0.191	3.0888	2.7983×10^{-10}	88.47%	
3	0.191	2.9888	1.9352×10^{-9}	20.26%	
4	0.191	2.8888	3.0051×10^{-9}	23.82%	
5	0.191	2.7888	4.0397×10^{-9}	66.45%	
6	0.191	2.6888	5.2968×10^{-9}	118.24%	
7	0.191	3.2888	4.8811×10^{-11}	97.99%	Penambahan 0,1
8	0.191	3.3888	2.2369×10^{-11}	99.08%	
9	0.191	3.4888	1.3313×10^{-11}	99.45%	
10	0.191	3.5888	7.5210×10^{-12}	99.69%	
11	0.191	3.6888	3.6690×10^{-12}	99.85%	
12	0.191	2.9788	2.0627×10^{-9}	15.01%	Pengurangan 0,01
13	0.191	2.9688	2.1985×10^{-9}	9.41%	
14	0.191	2.9588	2.4007×10^{-9}	1.08%	

No	ε	σ	$D_T^{sim}(m^2/s)$	diskrepansi (%)	Keterangan
15	0.191	2.9988	1.7682×10^{-9}	27.14%	Penambahan 0,01
16	0.191	3.0088	1.4507×10^{-9}	40.22%	
<u>17</u>	<u>0.191</u>	<u>2.9578</u>	<u>2.408×10^{-9}</u>	<u>0.78%</u>	Pengurangan 0,001
18	0.191	2.9567	2.373×10^{-9}	2.22%	
19	0.191	2.9598	2.3276×10^{-9}	4.09%	Penambahan 0,001
20	0.191	2.9608	2.2561×10^{-9}	7.04%	
21	0.191	2.9579	2.3341×10^{-9}	3.83%	Penambahan 0,0001
22	0.191	2.9576	2.3963×10^{-9}	1.26%	Pengurangan 0,0001
1	0.091	2.9578	3.7755×10^{-9}	55.57%	Pengurangan 0,1
2	0.291	2.9578	7.9803×10^{-10}	67.12%	Penambahan 0,1
3	0.391	2.9578	2.8787×10^{-10}	88.14%	
4	0.491	2.9578	1.9364×10^{-10}	92.02%	
5	0.591	2.9578	1.3569×10^{-10}	94.41%	
6	0.101	2.9578	3.5703×10^{-9}	47.11%	Penambahan 0,01
7	0.111	2.9578	3.3778×10^{-9}	39.18%	
8	0.121	2.9578	3.1603×10^{-9}	30.22%	
9	0.081	2.9578	3.9903×10^{-9}	64.42%	Pengurangan 0,01
10	0.071	2.9578	4.2514×10^{-9}	75.17%	
11	0.061	2.9578	4.5414×10^{-9}	87.12%	
12	0.122	2.9578	3.1296×10^{-9}	28.95%	Penambahan 0,001
13	0.123	2.9578	3.1361×10^{-9}	29.22%	
14	0.124	2.9578	3.15×10^{-9}	29.79%	
15	0.12	2.9578	3.2242×10^{-9}	32.85%	Pengurangan 0,001
16	0.119	2.9578	3.3327×10^{-9}	37.32%	
17	0.118	2.9578	3.3174×10^{-9}	36.69%	
18	0.1221	2.9578	3.2108×10^{-9}	32.30%	Penambahan 0,0001
19	0.1222	2.9578	3.1759×10^{-9}	30.86%	
20	0.1223	2.9578	3.1353×10^{-9}	29.19%	
21	0.1219	2.9578	3.1668×10^{-9}	30.48%	Pengurangan 0,0001
22	0.1218	2.9578	3.1798×10^{-9}	31.02%	
23	0.1217	2.9578	3.1833×10^{-9}	31.16%	

A.3 Perhitungan $D(T)$ Besi

No	T (K)	D (m^2/s)	$1/T$ (K)	$\ln D(\text{m}^2/\text{s})$
1	1000	1.0937×10^{-10}	0.001	-22.9362
2	2000	1.5906×10^{-10}	0.0005	-22.5617
3	2500	1.7058×10^{-10}	0.0004	-22.4918
4	3000	2.4023×10^{-10}	0.000333	-22.1494
5	3200	4.0798×10^{-10}	0.000313	-21.6198
6	3500	4.7181×10^{-10}	0.000286	-21.4744
7	3700	6.376×10^{-10}	0.00027	-18.8706
8	4000	6.8060×10^{-10}	0.00025	-18.8055
9	4500	8.5278×10^{-10}	0.000222	-18.5799
10	5000	9.4557×10^{-10}	0.0002	-18.4766

No	D_0 (m^2/s)	Q	R	T (K)	$D(T)$ (m^2/s)
1	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	10	0
2	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	100	2.57309×10^{-78}
3	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	500	1.27378×10^{-21}
4	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	700	1.42794×10^{-17}
5	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	1000	1.55569×10^{-14}
6	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	1200	2.36082×10^{-13}
7	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	1500	3.58262×10^{-12}
8	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	1700	1.28834×10^{-11}
9	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	2000	5.43674×10^{-11}
10	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	2200	1.14148×10^{-10}
11	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	2500	2.77985×10^{-10}
12	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	2700	4.50819×10^{-10}
13	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	3000	8.25044×10^{-10}
14	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	3500	1.79451×10^{-9}
15	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	4000	3.214×10^{-9}
16	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	4500	5.05711×10^{-9}
17	1.9069×10^{-7}	-135766	8.32	5000	7.26754×10^{-9}

A.4 Perhitungan $D(T)$ Timbal

No	T (K)	$D(\text{m}^2/\text{s})$	$1/T$ (K)	$\ln D(\text{m}^2/\text{s})$
1	500	1.6778×10^{-9}	0.002	-20.206
2	550	1.9944×10^{-9}	0.00182	-20.033
3	700	2.7628×10^{-9}	0.00143	-19.707
4	900	3.7342×10^{-9}	0.00111	-19.406
5	950	3.9483×10^{-9}	0.00105	-19.35
6	1100	4.5473×10^{-9}	0.00091	-19.209
7	1300	5.6698×10^{-9}	0.00077	-18.988
8	1500	6.4032×10^{-9}	0.00067	-18.866
9	1700	7.4983×10^{-9}	0.00059	-18.709
10	2000	9.0491×10^{-9}	0.0005	-18.521

No	$D_0(\text{m}^2/\text{s})$	Q	R	T (K)	$D(T)(\text{m}^2/\text{s})$
1	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	10	5.79809×10^{-55}
2	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	50	7.40296×10^{-18}
3	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	100	3.21863×10^{-13}
4	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	200	6.71125×10^{-11}
5	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	300	3.97967×10^{-10}
6	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	350	6.61785×10^{-10}
7	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	400	9.69102×10^{-10}
8	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	450	1.3038×10^{-9}
9	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	500	1.65304×10^{-9}
10	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	550	2.00731×10^{-9}
11	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	600	2.35989×10^{-9}
12	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	650	2.70618×10^{-9}
13	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	700	3.04317×10^{-9}
14	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	750	3.36899×10^{-9}
15	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	800	3.68258×10^{-9}
16	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	850	3.98343×10^{-9}
17	1.399×10^{-8}	-8885.76	8.32	900	4.27143×10^{-9}

B.1 Perhitungan $D(T)$ Besi dalam Timbal Cair

No	$T(K)$	$D(m^2/s)$	$1/T(K)$	$\ln D(m^2/s)$
1	400	5.3885×10^{-10}	0.0025	-21.342
2	500	1.0599×10^{-9}	0.002	-20.665
3	650	1.6698×10^{-9}	0.00154	-20.211
4	750	2.4938×10^{-9}	0.00133	-19.809
5	850	3.1028×10^{-9}	0.00118	-19.591
6	950	3.7147×10^{-9}	0.00105	-19.411
7	1023	4.5172×10^{-9}	0.00098	-19.215
8	1273	6.3549×10^{-9}	0.00079	-18.874
9	1400	7.1379×10^{-9}	0.00071	-18.758

No	$D_0(m^2/s)$	Q	R	$T(K)$	$D(T)(m^2/s)$
1	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	10	8.2333×10^{-71}
2	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	50	6.4156×10^{-21}
3	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	100	1.1059×10^{-14}
4	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	200	1.4519×10^{-11}
5	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	300	1.5898×10^{-10}
6	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	350	3.15×10^{-10}
7	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	400	5.2607×10^{-10}
8	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	450	7.8393×10^{-10}
9	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	500	1.0786×10^{-9}
10	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	550	1.4004×10^{-9}
11	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	600	1.7408×10^{-9}
12	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	650	2.0927×10^{-9}
13	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	700	2.4504×10^{-9}
14	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	750	2.8095×10^{-9}
15	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	800	3.1666×10^{-9}
16	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	850	3.5193×10^{-9}
17	1.906×10^{-8}	-11947.5	8.32	900	$3,8656 \times 10^{-9}$

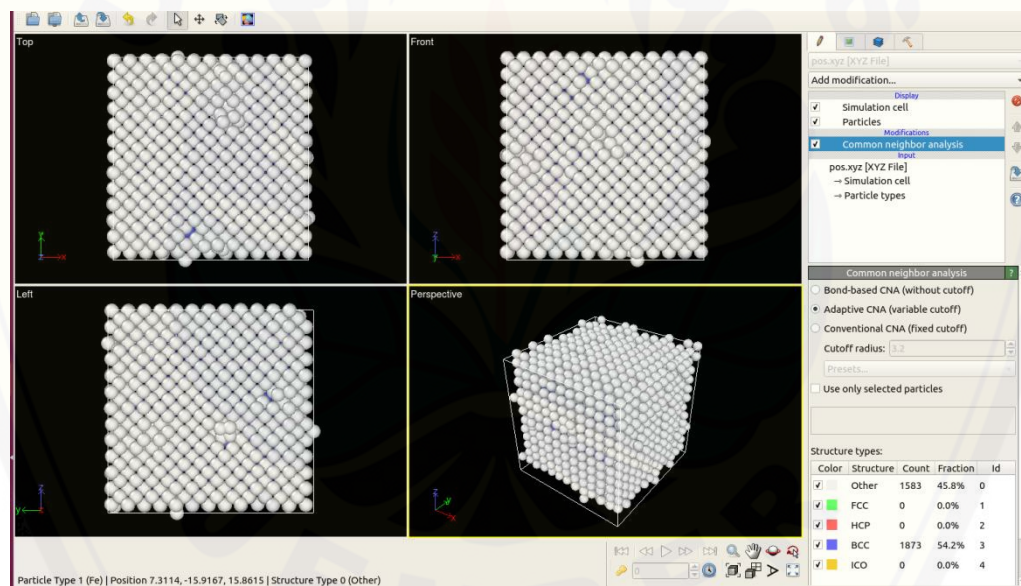
B.2 Penghambatan Nitrogen

No	$m (Pb)$	$m (N)$	$n (Pb)$	$n (N)$	$n (Pb + N)$	$m \times n (Pb)$	$m \times n (N)$	$m \times n (Pb + N)$	wt% Pb	wt% N
1	207.19	14.007	5577	40	5617	1155498.6	560.28	1156058.91	99.95%	0.05%
2	207.19	14.007	5577	80	5657	1155498.6	1120.56	1156619.19	99.90%	0.10%
3	207.19	14.007	5577	100	5677	1155498.6	1400.7	1156899.33	99.88%	0.12%
4	207.19	14.007	5577	120	5697	1155498.6	1680.84	1157179.47	99.85%	0.15%
5	207.19	14.007	5577	140	5717	1155498.6	1960.98	1157459.61	99.83%	0.17%
6	207.19	14.007	5577	160	5737	1155498.6	2241.12	1157739.75	99.81%	0.19%
7	207.19	14.007	5577	180	5757	1155498.6	2521.26	1158019.89	99.78%	0.22%
8	207.19	14.007	5577	200	5777	1155498.6	2801.4	1158300.03	99.76%	0.24%
9	207.19	14.007	5577	220	5797	1155498.6	3081.54	1158580.17	99.73%	0.27%
10	207.19	14.007	5577	238	5815	1155498.6	3333.666	1158832.296	99.71%	0.29%
11	207.19	14.007	4697	210	4907	973171.43	2941.47	976112.9	99.70%	0.30%
12	207.19	14.007	4697	215	4912	973171.43	3011.505	976182.935	99.69%	0.31%
13	207.19	14.007	4697	220	4917	973171.43	3081.54	976252.97	99.68%	0.32%
14	207.19	14.007	4697	230	4927	973171.43	3221.61	976393.04	99.67%	0.33%

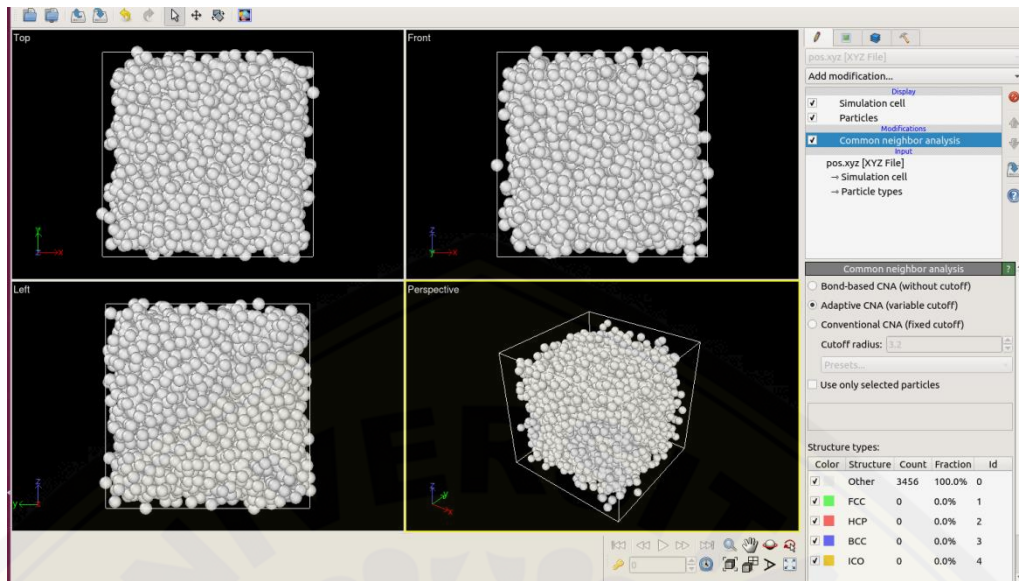
Catatan

- Pb : Unsur Timbal
 N : Unsur Nitrogen
 m : massa
 n : jumlah atom
 wt% : persen berat
 D (1023K) : Koefisien difusi saat $T = 1023K$

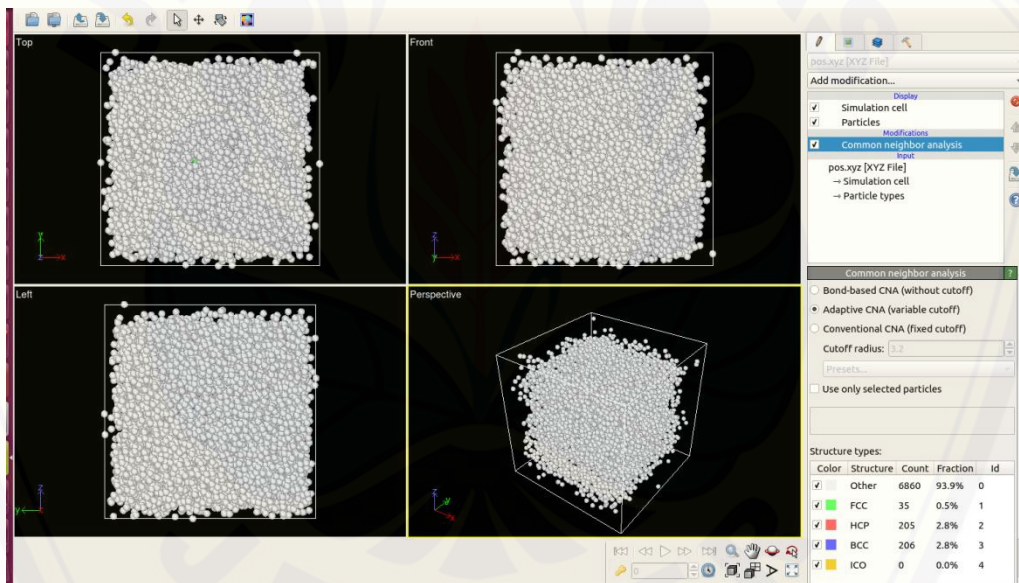
No	wt%	$D (T) 1023K$
1	0.05	4.656×10^{-9}
2	0.1	1.7161×10^{-11}
3	0.12	1.4115×10^{-11}
4	0.15	1.2496×10^{-11}
5	0.17	1.0603×10^{-11}
6	0.19	1.0260×10^{-11}
7	0.22	9.5894×10^{-12}
8	0.24	8.7515×10^{-12}
9	0.27	8.0918×10^{-12}
10	0.29	7.4552×10^{-12}
11	0.3	4.8942×10^{-9}
12	0.31	5.0823×10^{-9}
13	0.32	4.87×10^{-9}
14	0.33	4.8978×10^{-9}



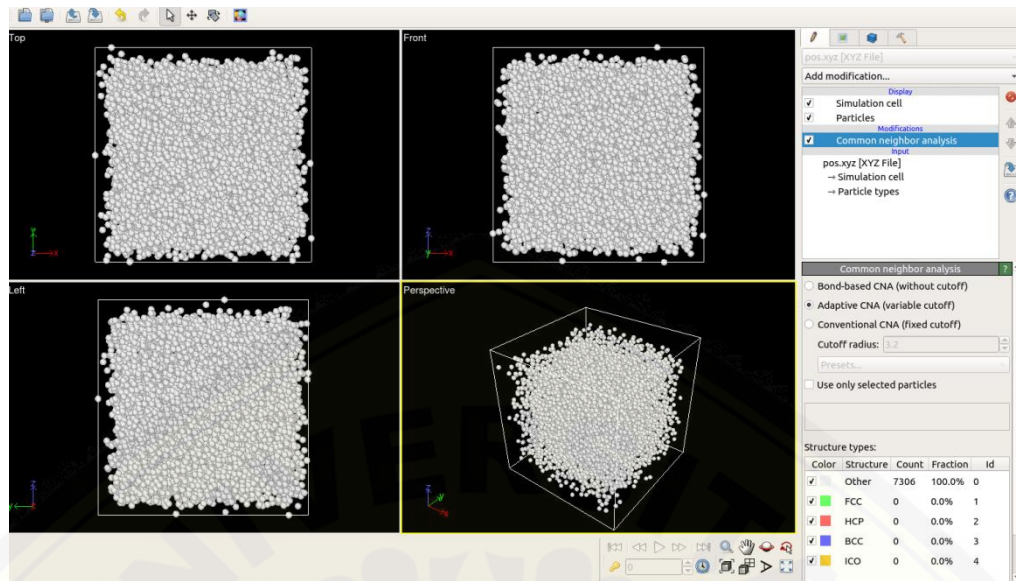
Gambar B1 : Besi pada temperatur 3000K



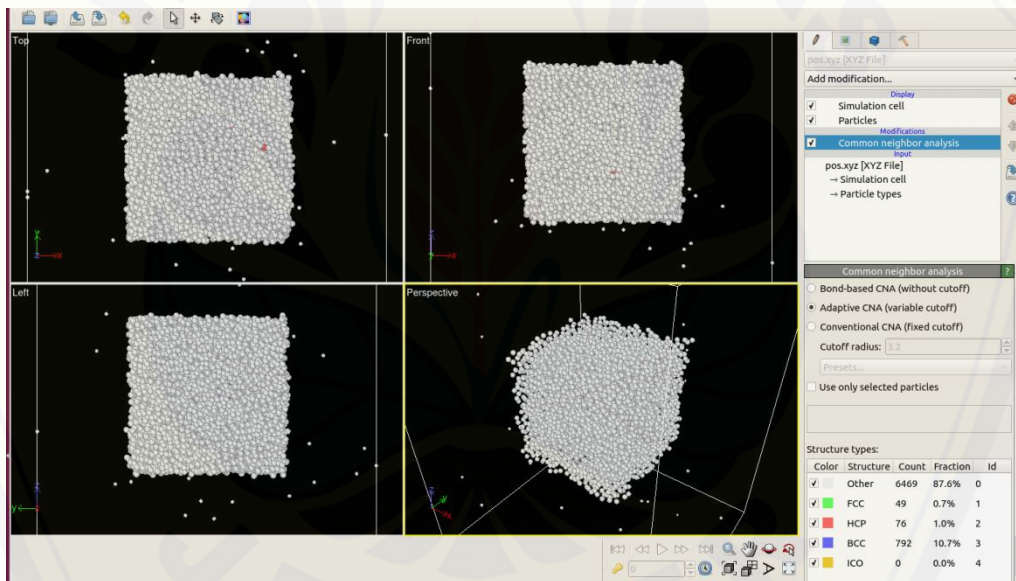
Gambar B2 : Besi pada temperatur 3700K



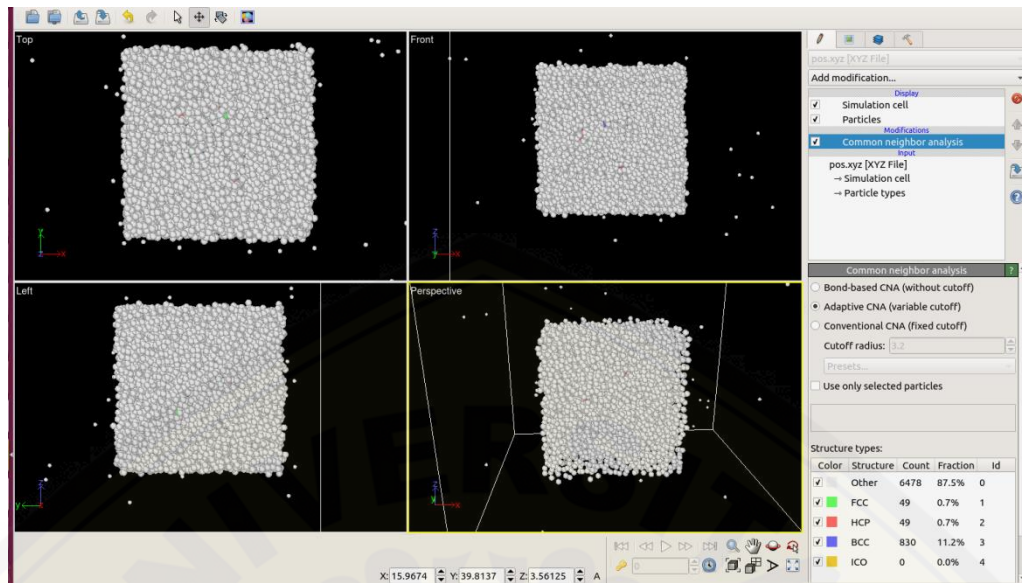
Gambar B3 : Besi dalam timbal cair pada temperatur 500K



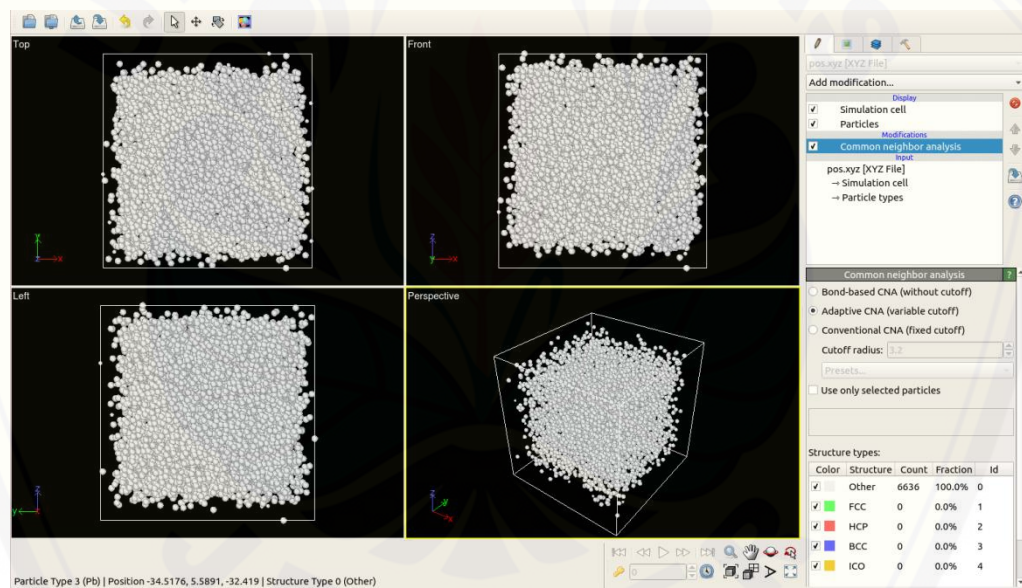
Gambar B4. Besi dalam timbal cair pada temperatur 1023K



Gambar B5. Besi dalam timbal cair pada temperatur 1023K (nitrogen 0.1wt%)



Gambar B6. Besi dalam timbal cair pada temperatur 1023K (nitrogen 0.12wt%)



Gambar B7. Besi dalam timbal cair pada temperatur 1023K (nitrogen 0.3wt%)