



**PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DIRI BERGANTUNG  
TEMPERATUR BEBERAPA LOGAM MURNI PEMBENTUK BAJA  
PADUAN DENGAN METODE SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL  
DENGAN POTENSIAL MORSE**

**SKRIPSI**

**Oleh**

**Luq'il Ma'nun**

**NIM 151810201003**

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

**2019**



**PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DIRI BERGANTUNG  
TEMPERATUR BEBERAPA LOGAM MURNI PEMBENTUK BAJA  
PADUAN DENGAN METODE SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL  
DENGAN POTENSIAL MORSE**

**SKRIPSI**

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

Oleh

**Luq'il Ma'nun**

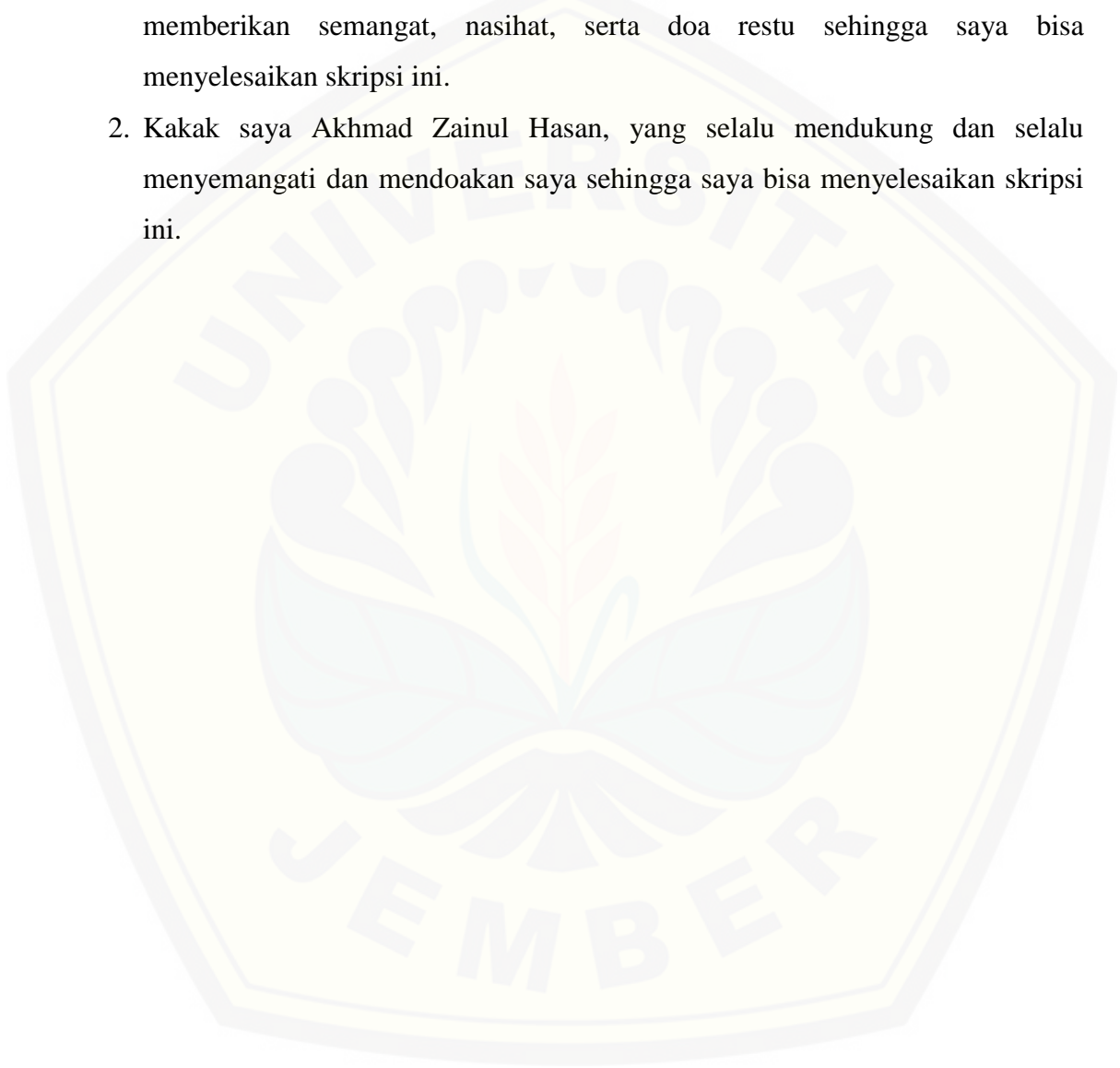
**NIM 151810201003**

**JURUSAN FISIKA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS JEMBER  
2019**

### **PERSEMBAHAN**

Skripsi ini saya persembahkan dengan segala syukur dan ucapan terimakasih untuk :

1. Kedua orang tua saya, Ayah M. Sholeh dan Ibu Lilik Amalia yang selalu memberikan semangat, nasihat, serta doa restu sehingga saya bisa menyelesaikan skripsi ini.
2. Kakak saya Akhmad Zainul Hasan, yang selalu mendukung dan selalu menyemangati dan mendoakan saya sehingga saya bisa menyelesaikan skripsi ini.



**MOTTO**

“ Barangsiapa bertaqwa kepada Allah, maka Allah memberikan jalan keluar kepadanya dan memberi rezeki dari arah yang tidak disangka-sangka”\*

(QS. Ath-Talaq: 2,3,4)



---

\* QS. Ath-Thalaq : 2, 3, 4

**PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Luq'il Ma'nun

NIM : 151810201003

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul "*Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur Beberapa Logam Murni Pembentuk Baja Paduan Dengan Metode Simulasi Dinamika Molekul Dengan Potensial Morse*" adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi mana pun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

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, Juli 2019

Yang menyatakan,

(Luq'il Ma'nun)

NIM 151810201003

**SKRIPSI**

**PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI DIRI BERGANTUNG  
TEMPERATUR BEBERAPA LOGAM MURNI PEMBENTUK  
BAJA PADUAN DENGAN METODE SIMULASI DINAMIKA  
MOLEKUL DENGAN POTENSIAL MORSE**

Oleh

Luq' il Ma'nun

NIM 151810201003

Pembimbing

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

Dosen Pembimbing Anggota : Ir. Misto, M.Si.

**PENGESAHAN**

Skripsi berjudul “Perhitungan Koefisien difusi Diri Bergantung Temperatur Beberapa Logam Murni Pembentuk Baja Paduan Dengan Metode Simulasi Dinamika Molekul Dengan Potensial Morse” karya Luq’il Ma’nun telah diuji dan disahkan pada:

Hari, tanggal :

Tempat : Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Universitas Jember

Tim Penguji:

Ketua,

Anggota I,

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

Ir. Misto, M.Si.  
NIP. 195911211991031002

Anggota II,

Anggota III,

Endhah Purwandari, S.Si., M.si.  
NIP. 198111112005012001

Drs. Sujito, Ph.D.  
NIP. 196102041987111001

Mengesahkan

Dekan,

Drs. Sujito, Ph.D.  
NIP. 196102041987111001

## RINGKASAN

**Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur Beberapa Logam Murni Pembentuk Baja Paduan Dengan Metode Simulasi Dinamika Molekul Dengan Potensial Morse;** Luq'il Ma'nun; 151810201003; 2019; 53 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Salah satu aplikasi metode simulasi dinamika molekul adalah untuk menghitung nilai koefisien difusi diri  $D_T$  bahan. Dalam menentukan nilai koefisien difusi diri dengan metode dinamika molekul perhitungannya memerlukan parameter potensial yang tepat untuk mampu menggambarkan interaksi atom-atom penyusun bahan. Dalam penelitian ini, dilakukan simulasi bahan logam-logam murni dengan parameter potensial Morse, yang memiliki tiga parameter potensial  $D$ ,  $\alpha$ , dan  $r_0$ . Perhitungan koefisien difusi diri menggunakan metode Green-Kubo dan untuk mendapatkan koefisien difusi diri bergantung temperatur  $D(T)$  digunakan formulasi Arrhenius berbentuk  $D(T) = D_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right)$ . Nilai koefisien difusi diri suatu bahan untuk setiap material/bahan belum tentu ada data lengkap koefisien difusi diri untuk berbagai temperatur baik yang diperoleh secara teori maupun eksperimen. Tujuan penelitian ini yaitu untuk menentukan nilai parameter potensial Morse beberapa logam murni pembentuk baja paduan yang sesuai untuk bahan tersebut dan selanjutnya digunakan untuk menghitung koefisien difusi diri bergantung temperatur logam murni Pb, Cr, Ni, dan Fe.

Penelitian ini diawali dengan studi literatur nilai koefisien difusi diri yang diperoleh secara eksperimen dan digunakan sebagai acuan untuk membandingkan hasil simulasi bahan dengan nilai koefisien difusi diri secara eksperimen. Jika nilai koefisien difusi diri hasil simulasi yang dihasilkan cukup jauh dengan nilai eksperimen maka perlu dilakukan verifikasi (koreksi) nilai parameter potensial Morse dengan cara mengubah secara sistematis nilai parameter potensial Morse



beberapa kali dan disimulasikan kembali untuk menghitung koefisien difusi diri sampai diperoleh hasil yang diinginkan yaitu selisih hasil simulasi dan eksperimen cukup kecil. Setelah didapatkan nilai parameter yang sudah terkoreksi dilanjutkan dengan perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur. Berdasarkan hasil penelitian didapatkan nilai koefisien difusi diri dengan nilai deskripsi kecil untuk logam Pb yaitu  $D_T = 4,38 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$  dengan nilai deskripsi sebesar 4% untuk nilai parameter potensial Morse  $a = 1,4795 \text{ \AA}^{-1}$ ,  $r_0 = 3,733 \text{ \AA}$ , dan nilai  $\mathcal{D} = 0,2348 \text{ eV}$  dan dihasilkan rumusan  $D(T) = 9,68 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{-3890,79}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$ . Untuk logam Cr dihasilkan nilai koefisien difusi diri sebesar  $D_T = 9,41 \times 10^{-4} \text{ m}^2/\text{s}$ , dengan parameter potensial Morse untuk logam kromium adalah  $\mathcal{D} = 0,3292 \text{ eV}$ ,  $a = 1,1005 \text{ \AA}^{-1}$ , dan nilai  $r_0 = 2,2032 \text{ \AA}$  dan nilai deskripsi yang diperoleh adalah 2,99% sehingga diperoleh rumusan  $D(T) = 1,73 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{-8725,54}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$ . Untuk logam nikel diperoleh nilai koefisien difusi diri sebesar  $D_T = 9,47 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$  dengan nilai parameter potensial Morse  $\mathcal{D} = 0,3784 \text{ eV}$ ,  $a = 1,0649 \text{ \AA}^{-1}$ , dan nilai  $r_0 = 2,085 \text{ \AA}$  dan rumusan  $D(T) = 8,5 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{-15794,9}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$ . Dan untuk logam besi didapatkan nilai koefisien difusi diri sebesar  $1,72 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$  dengan parameter potensial Morse untuk besi sebesar  $\mathcal{D} = 0,4174 \text{ eV}$ ,  $a = 1,5974 \text{ \AA}^{-1}$ , dan nilai  $r_0 = 2,840 \text{ \AA}$ , dan didapatkan diskrepansi terkecil yaitu 1,15% dengan rumusan  $D(T) = 4,22 \times 10^{-7} \exp\left(\frac{-5878,49}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$ . Secara keseluruhan penelitian ini, telah berhasil memperoleh nilai parameter potensial Morse terbaik dan rumusan koefisien difusi diri untuk logam Pb, Cr, Ni, dan Fe.

## PRAKATA

Puji syukur kehadiran Allah SWT. atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur Beberapa Logam Murni Pembentuk Baja Paduan Dengan Metode Simulasi Dinamika Molekul Dengan Potensial Morse”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

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

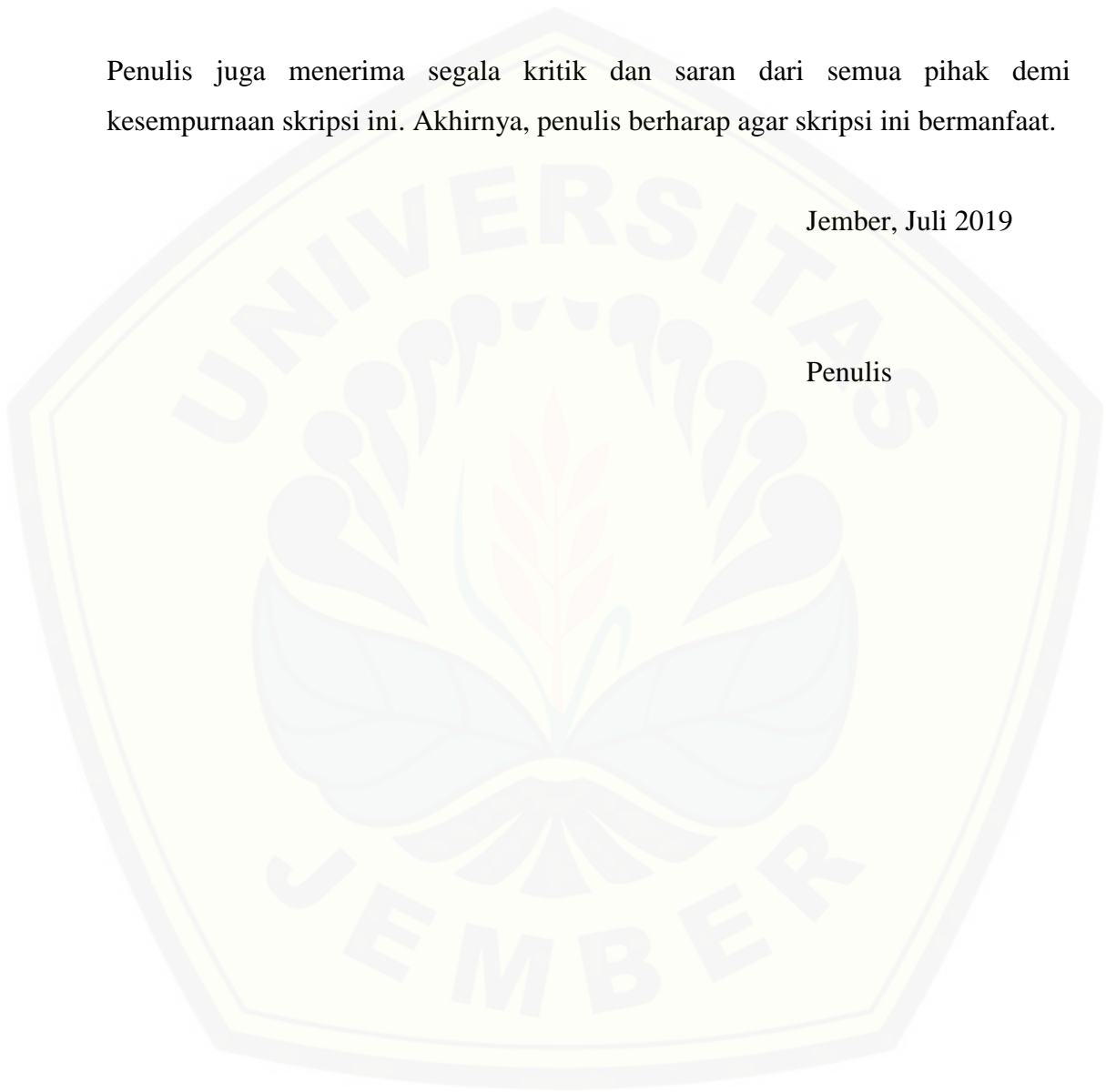
1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama, Ir. Misto, M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran serta ilmu yang sangat bermanfaat dalam penulisan skripsi ini;
2. Endhah Purwandari, S.Si., M.Si. selaku Dosen Penguji I dan Drs. Sujito, Ph.D., selaku Dosen Penguji II, yang telah memberikan nasehat serta kritik dan saran untuk kualitas isi dari skripsi ini;
3. Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah membimbing selama penulis menjadi mahasiswa;
4. Teman-teman TR (Tulang Rusuk): Prayunda Setia Prameswari, Rofiqoh Ulfatul Mardiyah, Ayu Triwardani, Pipin Okvitasari, Erni Emawati, Nur ifa Yuni Lensia, Dini Ayu Kusuma, Cut Yuniatul yang telah memberikan semangat dan dukungan;
5. Tim CMSE : Arief Maulana, Cut yuniatul, Ayu Triwardani, dan Rofiqoh Ulfatul Mardiyah yang selalu memberi support dan semangat;
6. Teman-teman saya: Dwi irawati Oktaria, Yeni Wahyuni, Alivia Nur Meiliza, Ahmad Imam Zainul Arifin, Akhmad Hisyam Bachtiar, Fajar Akbarullah, seluruh anggota Ganesha Phi 2015, yang telah menyemangati, mendukung dan membantu saya;

7. Afdiar Prambudi yang membuat saya termotivasi dalam segala hal dan keadaan;
8. LPMM ALPHA yang telah memberikan pengalaman dan kesan yang paling berharga;

Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya, penulis berharap agar skripsi ini bermanfaat.

Jember, Juli 2019

Penulis



**DAFTAR ISI**

	Halaman
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	i
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b> .....	iii
<b>HALAMAN MOTTO</b> .....	iv
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	v
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	vii
<b>RINGKASAN</b> .....	viii
<b>PRAKATA</b> .....	x
<b>DAFTAR ISI</b> .....	xii
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	xv
<b>DAFTAR GAMBAR</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 Batasan Masalah</b> .....	5
<b>1.4 Tujuan</b> .....	5
<b>1.5 Manfaat</b> .....	5
<b>BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	6
<b>2.1 Koefisien Difusi</b> .....	6
<b>2.2 Struktur Kristal</b> .....	8
<b>2.3 Besi (Fe)</b> .....	9
<b>2.4 Timbal (Pb)</b> .....	10
<b>2.5 Nikel (Ni)</b> .....	11
<b>2.6 Kromium (Cr)</b> .....	11
<b>2.7 Formulasi Green- Kubo</b> .....	12
<b>2.8 Formulasi Arrhenius</b> .....	12
<b>2.9 Potensial Morse</b> .....	13
<b>2.10 Program MOLDY</b> .....	14

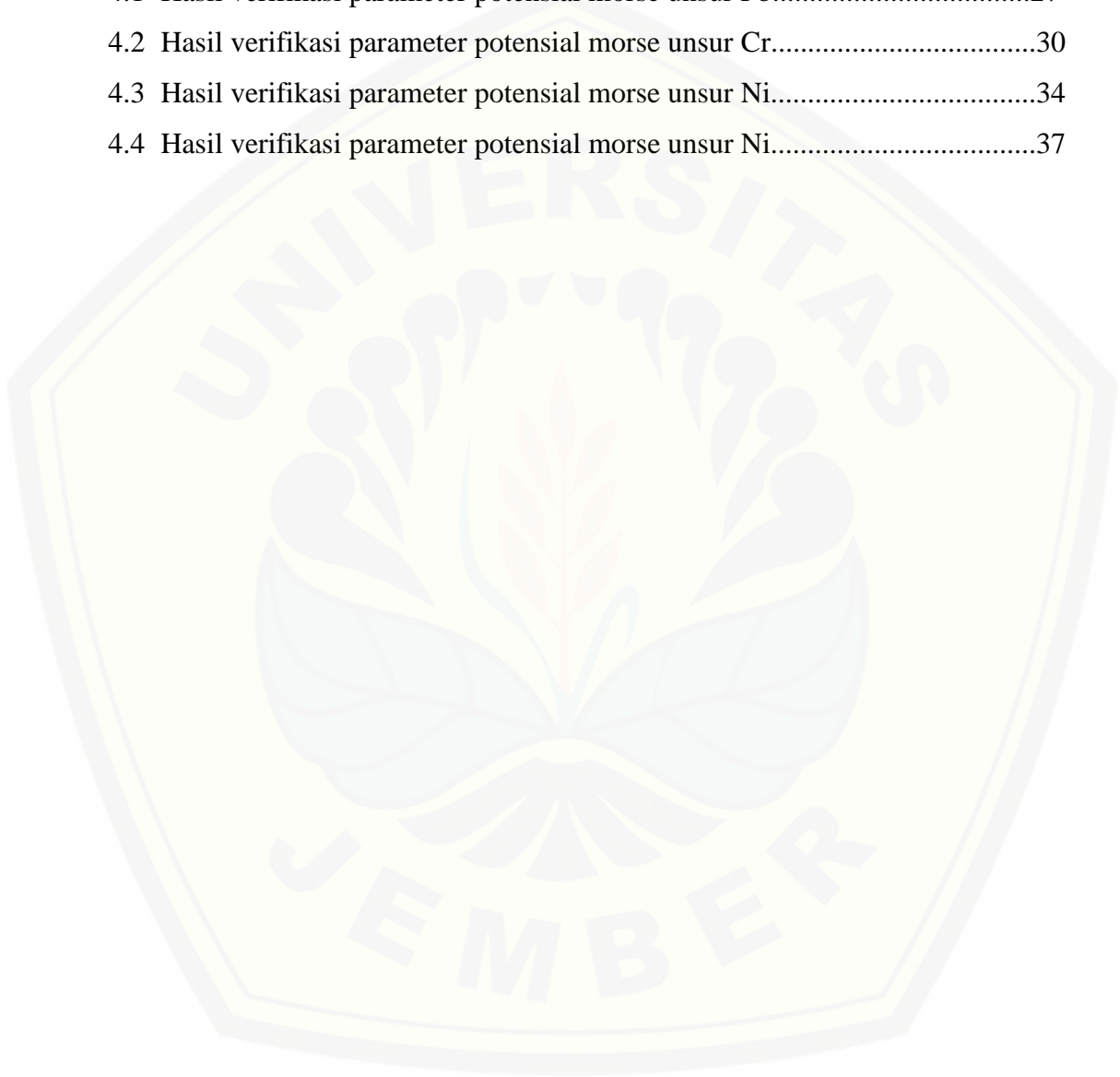
<b>BAB 3. METODE PENELITIAN</b> .....	16
<b>3.1 Rancangan Kegiatan Penelitian</b> .....	16
<b>3.2 Sumber Data Penelitian</b> .....	16
<b>3.3 Definisi Operasional Variabel</b> .....	17
3.3.1 Variabel Bebas .....	17
3.3.2 Variabel Terikat.....	17
3.3.3 Variabel kontrol.....	17
<b>3.4 Kerangka Pemecahan Masalah</b> .....	17
<b>3.5 Alat dan Bahan</b> .....	19
<b>3.6 Analisis Data</b> .....	20
<b>3.7 Prosedur Kerja</b> .....	20
3.7.1 <i>Step Pre-Processing</i> .....	20
3.7.2 <i>Step Simulasi</i> .....	22
3.7.3 <i>Step Post Processing</i> .....	23
<b>BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN</b> .....	25
<b>4.1 Verifikasi Nilai Parameter Potensial Morse</b> .....	25
4.1.1 Verifikasi Unsur Timbal (Pb).....	25
4.1.2 Verifikasi Unsur Kromium (Cr).....	27
4.1.3 Verifikasi Unsur Nikel (Ni).....	29
4.1.4 Verifikasi Unsur Besi (Fe) .....	31
<b>4.2 Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur <math>D(T)</math></b> .....	33
4.2.1 Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur $D(T)$ Unsur Timbal (Pb).....	33
4.2.2 Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur $D(T)$ Unsur Kromium (Cr).....	35
4.2.3 Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur $D(T)$ Unsur Nikel (Ni) .....	37
4.2.4 Perhitungan Koefisien Difusi Diri Bergantung Temperatur $D(T)$ Unsur Besi (Fe) .....	39
<b>BAB 5. PENUTUP</b> .....	42
<b>5.1 Kesimpulan</b> .....	42
<b>5.2 Saran</b> .....	42

<b>DAFTAR PUSTAKA</b> .....	44
<b>LAMPIRAN</b> .....	47



**DAFTAR TABEL**

2.1 Nilai koefisien difusi eksperimen.....	8
2.2 Tabel parameter potensial morse.....	14
4.1 Hasil verifikasi parameter potensial morse unsur Pb.....	27
4.2 Hasil verifikasi parameter potensial morse unsur Cr.....	30
4.3 Hasil verifikasi parameter potensial morse unsur Ni.....	34
4.4 Hasil verifikasi parameter potensial morse unsur Ni.....	37



DAFTAR GAMBAR

2.1 Struktur <i>Body Centered Cubic</i> (BCC).....	9
2.2 Struktur <i>face Centered Cubic</i> (FCC).....	9
2.4 Situs web <a href="http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU_v1_0.html">http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU_v1_0.html</a> .....	15
3.1 Diagram alir kerangka pemecahan masalah.....	18
3.2 File <i>control</i> simulasi.....	21
3.3 File <i>input</i> simulasi.....	22
3.4 Hasil data pada program MOLDY.....	23
4.1 Kurva ekuilibrasi Pb.....	25
4.2 Grafik <i>fitting</i> data $D(T)$ dengan formulasi arrhenius unsur Pb.....	27
4.3 Grafik hubungan $D(T)$ terhadap unsur Pb.....	28
4.4 Kurva ekuilibrasi Cr.....	29
4.5 Grafik <i>fitting</i> data $D(T)$ dengan formulasi arrhenius unsur Cr.....	31
4.6 Grafik hubungan $D(T)$ terhadap unsur Cr.....	32
4.7 Kurva ekuilibrasi Ni.....	33
4.8 Grafik <i>fitting</i> data $D(T)$ dengan formulasi arrhenius unsur Ni.....	34
4.9 Grafik hubungan $D(T)$ terhadap unsur Ni.....	35
4.10 Kurva ekuilibrasi Fe.....	36
4.11 Grafik <i>fitting</i> data $D(T)$ dengan formulasi arrhenius unsur Fe.....	38
4.12 Grafik hubungan $D(T)$ terhadap unsur Fe.....	39



## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1. Latar Belakang

Salah satu aplikasi simulasi dinamika molekul adalah untuk menghitung nilai koefisien difusi diri bahan. Dalam menentukan nilai koefisien difusi diri memerlukan parameter potensial yang tepat. Dalam penelitian ini akan digunakan parameter potensial Morse, dikarenakan parameter potensial Morse cocok untuk bahan logam. Koefisien difusi adalah besaran fisis yang cukup penting untuk diketahui. Contohnya adalah peristiwa korosi dapat dipelajari dengan menganggap adanya difusi (terlepasnya) atom-atom permukaan bahan yang mengalami korosi ke lingkungan (Arkundato, 2016). Salah satu alasan studi teori koefisien difusi adalah untuk menemukan metode yang akurat dalam penentuan tekanan uap larutan pada suhu tinggi. Penentuan tekanan uap larutan sangat penting, karena berhubungan dengan temperatur. Difusi merupakan proses dimana materi dipindahkan dari satu bagian ke bagian yang lain sebagai gerakan molekul secara acak. Biasanya, diilustrasikan secara eksperimen klasik dimana bejana silinder pada bagian bawahnya diisi dengan larutan yodium dan bagian atas diisi dengan air, kemudian ditemukan bagian atas dari yodium tersebut menjadi bewarna, setelah waktu yang cukup warna seluruhnya menjadi seragam. Dapat disimpulkan bahwa ada transfer yodium dan molekul-molekul yang ada dalam materi (Crank, 1975). Koefisien *self-diffusion* adalah koefisien difusi  $D_i^*$  dari unsur  $i$  sebuah material yang terdiri dari berbagai unsur. Unsur-unsur yang mengalami difusi secara umum atom-atomnya akan menyebar kesegala arah. Zhang (2014), pernah melakukan perhitungan *self-diffusion* besi dengan pendekatan secara eksperimental dan teoritik melalui eksperimennya menggunakan data modulus geser dari bahan polimorf Fe pada suhu tinggi dan pada tekanan tinggi. Xiun Liu (2013), telah melakukan riset tentang koefisien difusi dengan sistem molekular dinamik dalam campuran binary (dwi atom) dan

ternary (tri atom). Pada percobaannya dia mencari koefisien difusi dengan formulasi binary (dwi atom) dan juga dengan hukum Fick. Hukum Fick menunjukkan bahwa laju difusi berbanding lurus dengan gradien konsentrasinya.

Aplikasi dari koefisien difusi diri selain untuk mengukur tekanan uap pada suhu tinggi, juga dapat digunakan untuk memprediksi koefisien difusi air menjadi polikarbonat. Dalam industri elektronik informasi koefisien difusi diri sangat penting untuk mempelajari ketahanan komponen (Nasirabadi *et. al*, 2016). Aplikasi lainnya yaitu pada perancangan desain reaktor nuklir yang harus menyelesaikan persamaan koefisien difusi dimana diperlukan data koefisien difusi diri. Selain itu, untuk mengetahui benda terlarut atau tidak terlarut parameternya dapat menggunakan data-data koefisien difusi bahan/benda yang ditinjau.

Kendala untuk aplikasi koefisien difusi diri suatu bahan adalah untuk setiap material/bahan belum tentu ada data koefisien difusinya baik yang diperoleh secara teori maupun eksperimen. Pengukuran difusi diri secara eksperimental juga tidak mudah dilakukan untuk setiap material yang ingin diketahui nilai koefisien difusinya. Koefisien difusi diri nilainya bergantung pada temperatur, untuk temperatur tinggi secara eksperimental pengukuran nilai koefisien difusi diri tidak mudah dilakukan. Untuk itu, biasanya dilakukan kajian baik secara teoritik atau komputasi untuk menentukan koefisien difusi diri suatu bahan atau material. Secara komputasi untuk menentukan koefisien difusi diri dapat dilakukan menggunakan berbagai metode khususnya metode dinamika molekul.

Dinamika molekul didasarkan pada analisis dinamika atom dan interaksi atom-atom dalam materi yang dalam perhitungannya nanti dapat memprediksi struktur dan sifat termodinamika cairan, bahkan untuk kasus yang relatif kompleks. Dinamika molekul adalah teknik simulasi yang memungkinkan atom-atom bahan berinteraksi satu sama lain untuk berevolusi selama jangka waktu tertentu sedemikian hingga semua atom-atom bahan akan membentuk suatu lintasan tertentu yang disebut *trayektori*. Di dalam dinamika molekul terdapat beberapa skema perhitungan lintasan gerak atau *trayektori* ini dengan berbagai

code yang telah dibuat baik yang diperoleh secara gratis maupun berbayar. Moldy adalah sebuah program komputer gratis untuk melakukan simulasi dinamika molekul untuk sistem materi. Banyak penelitian menggunakan simulasi dinamika molekul untuk mempelajari fenomena misalnya, viskositas bergantung suhu misalnya untuk senyawa hidrokarbon dan cairan (Arkundato, 2015). Perhitungan koefisien difusi diri dengan metode simulasi dinamika molekul dapat dilakukan dengan dua cara yaitu melalui formula Einstein dan formulasi Green-Kubo. Formulasi Green-Kubo didefinisikan melalui fungsi VACF (*Velocity Autocorrelation Function*) yang merupakan formula untuk mengautokorelasi fungsi kecepatan atau dapat secara opsional menghitung fungsi total korelasi kecepatan dari sumber data yang sama. Sedangkan formulasi Einstein atau diketahui sebagai relasi Einstein adalah teori yang mempelajari sifat atom dan kinetika molekuler dimana koefisien difusi diperoleh dari slope nilai-nilai MSD (*Mean Square Displacement*) terhadap waktu. Pada formulasi ini, merupakan perhitungan jumlah molekul didalam zat cair. Kemudahan dari formulasi Einstein adalah pada formulasi ini, sangat cocok diterapkan untuk sistem cair dan gas karena dapat menghasilkan grafik linier antara MSD dan waktu ( $t$ ), akan tetapi pada sistem padat ataupun setengah padat formulasi ini tidak mudah diterapkan sehingga memerlukan evaluasi lebih lanjut. Formulasi Einstein ini menggunakan kurva MSD (*Mean Square Displacement*) dalam perhitungannya. Formulasi Green-Kubo memiliki kelebihan yaitu dapat diterapkan untuk sistem materi yang lebih umum baik padat, cair, dan gas. Mondello dan Grest menggunakan metode dinamika molekul setimbang untuk menghitung viskositas n-alkana dengan menggunakan kedua formulasi yaitu formulasi Green- Kubo dan formulasi Einstein.

Pada penelitian ini perhitungan koefisien difusi diri digunakan formulasi Green-Kubo untuk beberapa unsur logam komponen baja paduan misalnya Pb, Cr, Ni, dan Fe. Keempat unsur diatas akan diverifikasi nilai parameter potensial Morse, sehingga diperoleh nilai parameter potensial Morse yang sesuai untuk dilakukan simulasi perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur. Aplikasi penting dari perhitungan koefisien difusi diri adalah contohnya pada

kasus baja di dalam logam cair dalam reaktor nuklir dimana komponen-komponen baja mengalami difusi atau terlarut dalam logam cair Pb, yang dikenal dengan peristiwa korosi. Atom unsur Fe yang mengalami difusi perlu dihitung koefisien difusinya menggunakan metode dinamika molekul. Potensial Morse adalah salah satu model interaksi interatomik atom-atom yang menyusun bahan dengan bentuk energi potensial tertentu sistem molekul diatomik. Pada penelitian ini secara garis besar ingin dihitung koefisien difusi diri bahan bergantung pada temperatur  $D(T)$  menggunakan metode simulasi dinamika molekul, menggunakan potensial Morse. Untuk rumusan koefisien difusi diri dapat menggunakan potensial Morse, maka perlu ada verifikasi dahulu parameter potensial Morse menurut data eksperimen koefisien difusi diri bahan pada temperatur tertentu. Untuk dapat menentukan koefisien difusi diri  $D(T)$  ini maka digunakan formulasi Arrhenius. Hal yang paling penting dari penelitian ini adalah ingin mengetahui koefisien difusi diri bergantung temperatur untuk beberapa unsur logam komponen baja paduan, dimana data ini sangat penting untuk aplikasi secara umum karena secara eksperimental rumusan  $D(T)$  ini untuk bahan tersebut tidak selalu ada.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang diatas rumusan masalah penelitian yang diterapkan yaitu:

1. Berapa nilai parameter potensial Morse ( $\mathcal{D}$ ,  $\alpha$ , dan  $r_0$ ) yang sesuai untuk logam Pb, Cr, Ni, Fe yang mampu menggambarkan koefisien difusi logam tersebut dengan baik?
2. Apa rumusan koefisien difusi bergantung temperatur logam-logam tersebut?

### 1.3 Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini adalah:

1. Koefisien difusi diri dihitung dengan menggunakan metode Green-Kubo
2. Kebergantungan suhu dari koefisien difusi diri didekati dengan formulasi Arrhenius.

### 1.4 Tujuan

Penelitian yang dilakukan bertujuan untuk:

1. Menentukan nilai dari parameter potensial Morse beberapa unsur logam murni pembentuk baja paduan yang sesuai untuk bahan tersebut.
2. Mengetahui rumusan koefisien difusi diri bergantung temperatur logam murni Pb, Cr, Ni dan Fe.

### 1.5 Manfaat

Manfaat dari penelitian ini adalah dapat menentukan nilai parameter potensial Morse beberapa unsur logam komponen baja paduan yang cocok sehingga dapat digunakan untuk perhitungan-perhitungan besaran fisis secara umum yang menggunakan parameter potensial Morse seperti perhitungan koefisien difusi bergantung temperatur.

## BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 Koefisien Difusi

Nilai koefisien difusi sering digunakan untuk mengecek nilai penguatan pada logam atau senyawa yang dihasilkan. Proses difusi atomik pada material melibatkan perpindahan atom dari bagian konsentrasi tinggi menuju konsentrasi yang lebih rendah pada material. Dalam rekayasa bahan permukaan atom-atom donor diaktivasi sehingga mampu menembus permukaan material untuk membentuk permukaan baru melalui pembentukan molekul-molekul baru (Setiawan, 2015).

Transportasi difusi adalah fenomena yang terjadi karena adanya gradien potensial di dalam sistem bahan. Difusi merupakan proses yang lambat untuk proses perpindahan atom dalam sistem. Namun seiring dengan peningkatan temperatur, biasanya nilai koefisien difusi juga meningkat dalam banyak proses difusi banyak terjadi, seperti dalam hal reaksi kimia. Ketika difusi melambat maka membatasi tingkat keseluruhan proses. Oleh karena itu dalam memprediksi proses difusi dibedakan menjadi *self-diffusion* dan transport difusi. *Self-diffusion* adalah perpindahan rata-rata molekul, sedangkan transport difusi adalah kumpulan molekul karena adanya kekuatan pendorong. Proses tersebut dapat dirumuskan dalam hukum Fick sebagai berikut:

$$j_i = -c_t \sum_{j=1}^{n-1} D_{ij} \nabla x_j \quad (2.1)$$

dimana,  $c_t$  adalah total konsentrasi molar,  $D_{ij}$  adalah difusivitas Fick yang bergantung pada konsentrasi tetapi tidak bergantung terhadap gaya dan  $x_j$  adalah komponen fraksi mol. Di dalam gas koefisien difusi biasanya  $10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  sedangkan di dalam liquid koefisien difusi biasanya  $10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Persamaan 1 acuan difusi fluks adalah kecepatan molar rata-rata, maka  $\sum_{i=1}^n j_i = 0$ .

$$j_1 = -c_t D_{11} \nabla x_1 \quad (2.2)$$

$$j_2 = -c_t D_{22} \nabla x_2 \quad (2.3)$$

hukum Fick I dimana  $j_1 + j_2 = 0$  dan  $x_1 + x_2 = 1$  sehingga didapat  $D_{11} = D_{22} = D$ . Sehingga difusi dalam sistem dapat dijelaskan oleh satu koefisien transportasi. Koefisien difusi Fick dalam sistem adalah sama untuk semua kerangka acuan asalkan menggunakan gradien dari pengukuran konsentrasi yang sesuai. Simulasi dinamika molekul adalah teknik komputasi yang menggunakan medan gaya untuk menghitung besaran-besaran ekuilibrium dan transport dalam sistem. Medan gaya digunakan untuk menggambarkan interaksi antar partikel atom atau molekul. Simulasi dinamika molekul menggunakan persamaan gerak hukum kedua Newton dalam bentuk numerik. Hukum kedua Newton menyatakan bahwa percepatan suatu partikel adalah sebanding dengan gaya total pada partikel dan berbanding terbalik dengan massanya,

$$a_i = \frac{F_i}{m_i} = \frac{d^2 r_i}{dt^2} \quad (2.4)$$

dimana  $a_i$  adalah percepatan partikel  $i$ ,  $F_i$  adalah gaya total yang bekerja pada partikel,  $m_i$  adalah massa partikel  $i$ ,  $r_i$  adalah posisi partikel  $i$  dan  $t$  adalah waktu. (Xiun Liu et. al, 2013).

Penelitian ini dilakukan dengan memverifikasi terlebih dahulu parameter potensial Morse dari unsur Pb, Cr, Ni dan Fe yang akan dibandingkan dengan hasil simulasi nilai koefisien difusi diri dengan nilai koefisien difusi diri secara eksperimen dari berbagai sumber seperti pada tabel 2.1

Tabel 2.1 Nilai koefisien difusi diri bahan secara eksperimen

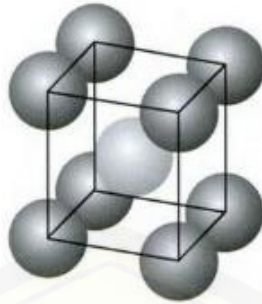
Referensi	Unsur	$T$ (K)	$D$ ( $m^2/s$ )
Basu <i>et al.</i> (1980)	Pb	743	$4,58 \times 10^{-9}$
Donald & Wendelin (2014)	Fe	3000	$1,74 \times 10^{-7}$
Maier <i>et al.</i> (1976)	Ni	813	$9,6 \times 10^{-5}$
Neumann (2009)	Cr	1369	$9,7 \times 10^{-4}$

## 2.2 Struktur Kristal

Simulasi MD memerlukan *input* sistem materi dalam bentuk struktur materi baik dalam bentuk kristal atau yang lain. Atom dalam struktur kristal saling terikat dengan atom terdekatnya pada jarak tertentu. Atom juga berinteraksi dengan atom terdekat lainnya baik secara langsung maupun melalui atom terdekat pertama. Pembentukan kristal selalu hasil dari interaksi antar atom yang disatukan oleh kisi kristal dan vibrasi termal (Vainshtein, 2013). Struktur kristal dapat digambarkan melalui bentuk kisinya, yang terdiri dari kelompok atom yang saling berdekatan di setiap titik kisinya. Kelompok dari atom disebut dengan basis, ketika terjadi pengulangan basis pada ruang tiga dimensi akan membentuk sebuah kristal (Kittel, 1996).

Menurut (Oxtoby, 2003), unsur-unsur tertentu ada dalam bentuk kristal struktur padatan yang sangat sederhana, dimana atom-atomnya menempati posisi dari kisi-kisinya. Polonium adalah salah satu unsur yang mengkristal dalam kisi kubik sederhana (*Simple Cubic Lattice*) yang atom-atomnya terletak pada perpotongan tiga pasang bidang yang berjarak sama dan membentuk sudut siku-siku setiap sel satuan. Logam alkali mengkristal dalam struktur *body centered cubic* (BCC). Sel satuan struktur ini mengandung dua titik kisi, satu dipusat kubus dan lainnya disalah satu dari kedelapan sisinya. Satu atom tunggal alkali terletak pada setiap kisi.

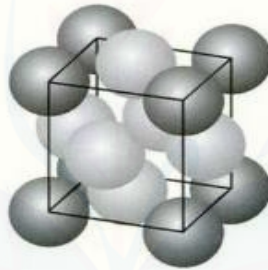




Gambar 2.1 Struktur *Body Centered Cubic* (BCC)

Sumber: (Oxtoby, 2003)

Logam aluminium, nikel, tembaga dan perak antara lain mengkristal dalam struktur *Face Centered Cubic* (FCC). Sel satuan ini mengandung empat titik kisi, dengan satu atom tunggal terletak pada setiap titik. Keseluruhan untuk struktur ini empat atom per sel satuan.



Gambar 2.2 Struktur *face Centered Cubic* (FCC).

Sumber: (Oxtoby, 2003).

### 2.3 Besi (Fe)

Besi merupakan logam yang sering digunakan diberbagai aplikasi dan mempunyai struktur kristal yang berbentuk BCC dan ada pula yang berstruktur FCC. Besi memiliki sifat fisik yang menarik banyak digunakan dalam material dan dianggap secara khusus sebagai komponen utama dari inti bumi (Zhang, 2014). Pada tabel periodik unsur, besi mempunyai simbol Fe dan bernomor atom 26. Besi merupakan logam yang relatif mudah pengolahannya tetapi, salah satu

kelemahan besi adalah mudah mengalami korosi. Logam murni sangat reaktif secara kimiawi dan cepat rusak, terutama pada kelembapan udara atau pada suhu tinggi (Winter, 1993).

Besi termasuk golongan ke 8 yang lebih reaktif dibandingkan dengan unsur golongan ke 8 lainnya. Logam besi tampak berkilauan dan bewarna perak, logam besi murni maka bersifat lunak dan mudah dibentuk. Besi memiliki sifat unik yaitu pada temperatur tinggi ( $> 910\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) besi memiliki struktur FCC dan pada temperatur sekitar  $1390\text{ }^{\circ}\text{C}$  berubah kembali menjadi struktur BCC. Besi memiliki titik leleh sebesar  $1535\text{ }^{\circ}\text{C}$  dan jari-jari atomik sebesar 126 pm. Besi sangat berperan penting dalam bidang biologi (Kristian & Retno, 2010).

#### 2.4 Timbal (Pb)

Timbal merupakan kelompok ke 14 dari tabel periodik dan juga termasuk C, Si, Ge, dan Sn. Timbal memiliki karakteristik yang paling metalik diantara unsur diatas. Unsur timbal memiliki nomor atom 82 dengan massa atom 207,19. Timbal adalah paling banyak dari unsur logam transisi. Timbal merupakan pembentuk elemen logam chalcopile dan beberapa mineral penting (Greenwood dan Earnshaw, 1984). Jumlah energi ionisasi pertama dan kedua timbal yaitu mirip dengan energi ionisasi timah, timbal merupakan golongan IVA yang memiliki struktur kubik yaitu FCC. Timbal memiliki titik leleh (Marcillac et al, 2003). Timbal memiliki massa jenis  $11,34\text{ g/cm}^3$  dan memiliki titik leleh sebesar  $1740\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Timbal merupakan logam yang berbahaya karena bersifat karsinogenik yang dapat menyebabkan mutasi dan terurai dalam jangka waktu yang lama, timbal juga merupakan logam yang bersifat neurotoksin yang dapat masuk kedalam tubuh manusia dan hewan (Kusnoputranto, 2006).

Timbal merupakan unsur-unsur golongan 14 (p) yang lebih bersifat logam dibandingkan dengan karbon, silikon, dan germanium. Timbal memiliki titik leleh sebesar  $327\text{ }^{\circ}\text{C}$  dengan jari-jari atomik sebesar 175 pm. Timbal sebagai logam berat merupakan unsur yang paling banyak di alam. Istilah logam berat pada timbal dikarenakan timbal memiliki densitas (rapatan) yang sangat tinggi yaitu sebesar  $11,34\text{ gcm}^{-3}$  jauh melebihi densitas logam transisi yang pertama

yaitu sebesar  $8,92 \text{ gcm}^{-3}$ . Timbal banyak manfaat dalam industri cat digunakan sebagai pigmen warna, selain itu timbal masih mempunyai banyak manfaat lainnya (Kristian & Retno, 2010).

## 2.5 Nikel (Ni)

Logam paduan nikel telah dikenal di Cina lebih dari 2000 tahun yang lalu, dan penambang Saxon telah terbiasa dengan biji NiAs yang berwarna kemerahan, yang secara sekilas mirip dengan senyawa  $\text{Cu}_2\text{O}$ . Para penambang tersebut tidak mampu mengekstrak “tembaga” dari bijinya sehingga diberi nama kupfernikel. Pada tahun 1751, A.F. Constedt mengisolasi logam tak murni dari biji yang berasal dari Swedia dan mengidentifikasi dengan logam kupfernikel sebagai logam baru atau yang biasa disebut dengan nikel. Nikel mempunyai titik leleh sebesar  $1455 \text{ }^\circ\text{C}$  dengan jari-jari atom sebesar 124 pm. Dalam keadaan pasif nikel tahan terhadap korosi atmosfer pada temperatur normal. Pada pemanasan nikel bereaksi dengan unsur-unsur B, Si, P, S dan halogen. Pada keadaan pemanasan nikel teroksidasi oleh uap air, larut dalam asam mineral (Kristian & Retno, 2010).

Nikel merupakan logam yang mempunyai struktur FCC dengan konstanta kisi  $3,5214 \text{ \AA}$  (Born, 1940). Salah satu kelebihan dari nikel adalah memiliki sifat tahan korosi namun dalam keadaan murni bersifat lunak sehingga ketika digabungkan dengan beberapa logam akan menjadi pilihan yang tepat untuk membentuk baja tahan korosi (Huheey & Keither, 1993).

## 2.6 Kromium (Cr)

Kromium adalah suatu unsur kimia dalam tabel periodik yang memiliki lambang Cr dan memiliki nomor atom 24. Kromium merupakan atom pertama golongan ke enam. Logam kromium adalah logam berwarna abu-abu seperti baja dan memiliki titik lebur tinggi. Logam ini, merupakan unsur yang melimpah ke-22 dikerak bumi (Walwork, 1976).

Konfigurasi untuk kromium menyimpang dari diagram aufbau. Kromium lebih mudah bereaksi dengan asam non oksidator. Kromium memiliki titik leleh

1900 °C dan titik didih 2690 °C. Logam golongan 6 tingkat oksidasi rendah semakin tidak stabil dengan naiknya nomor atom. Jadi, kromium mempunyai variasi tingkat oksidasi yang paling banyak sehingga, logam kromium lebih banyak membentuk berbagai senyawa (Kristian & Retno, 2010).

## 2.7 Formulasi Green- Kubo

Menurut (Refson, 2001), Formulasi Green- Kubo didefinisikan melalui fungsi VACF yang merupakan formula untuk mengautokorelasi fungsi kecepatan atau bisa juga disebut VTF (*Velocity Total Correlation Function*). Untuk partikel N, fungsi VACF atau  $Z(t)$  dapat didefinisikan :

$$Z(t) = \frac{1}{N N_t} \sum_{t_0=0}^{N_t} \sum_{n=1}^N v_n(t_0) \cdot v_n(t_0 + t) \quad (2.5)$$

$$VTF(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{t_0=0}^{N_t} \left( \sum_{n=1}^N q_n v_n(t_0) \right) \cdot \sum_{n=1}^N q_n v_n(t_0 + t) \quad (2.6)$$

dimana  $q$  adalah muatan total,  $v(t)$  adalah kecepatan pada waktu  $t$ . Koefisien *self-diffusion*,  $D$  dapat diperoleh dari hasil integrasi VACF maka:

$$D = \frac{1}{3} \int_0^{\infty} Z(t) dt \quad (2.7)$$

## 2.8 Formulasi Arrhenius

Reaksi kimia lebih cepat terjadi pada temperatur tinggi, karena energi panas menghubungkan arah pada tingkat molekul. Pada saat temperatur naik, molekul-molekul bergerak lebih cepat dan bertabrakan lebih kuat sehingga memungkinkan pembelahan ikatan dan penataan ulang. Pada tahun 1890, sudah menjadi rahasia umum bahwa temperatur yang tinggi dapat mempercepat reaksi, sering kali mengandakan kenaikan laju reaksi tetapi belum ada alasan yang jelas. Tahun 1899, ahli kimia Swedia Svante Arrhenius (1859-1927) menggabungkan konsep energi aktivasi dan hukum distribusi Boltzman kedalam salah satu hubungan paling penting dalam kimia fisik:

$$k = Ae^{-\frac{E_0}{RT}} \quad (2.8)$$

dimana,  $k$  adalah konstanta laju,  $T$  adalah suhu absolut dalam Kelvin,  $A$  adalah konstanta,  $E_0$  adalah energi aktivasi, dan  $R$  adalah konstanta gas universal (0,082 L atm/mol K). Koefisien difusi bergantung suhu dapat dirumuskan:

$$D(T) = D_0 \exp\left(\frac{-E_0}{RT}\right) \quad (2.9)$$

dimana  $D_0$  adalah nilai koefisien difusi diri pada saat  $T = 0$  K dalam  $m/s^2$ ,  $E_0$  adalah energi aktivasi dalam J/mol,  $T$  adalah suhu dalam Kelvin dan  $R$  adalah konstanta gas universal (0,082 L atm/mol K) (Ames, 2010).

## 2.9 Potensial Morse

Dalam dinamika molekul terdapat dua potensial yang sering digunakan yaitu potensial Lennard-Jones dan potensial Morse. Potensial Morse merupakan potensial yang cocok untuk sistem logam. Potensial Morse menggambarkan sistem diatomik yang menghubungkan energi potensial dan jarak pada sistem diatomik dan juga hubungan ikatan atom atau molekul dengan jaraknya (Chiang et. al, 2009). Potensial Morse merupakan potensial yang cocok dalam hal molekul diatomik yang ditemukan oleh Phillip M. Morse pada tahun 1929, dalam temuannya menyatakan bahwa potensial Morse memberikan gambaran yang lebih baik untuk molekul diatomik yang dapat dirumuskan sebagai berikut:

$$\varphi(r_{ij}) = \mathcal{D}[e^{-2a(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-a(r_{ij}-r_0)}] \quad (2.10)$$

dimana  $r$  merupakan jarak antar atom,  $\mathcal{D}$  adalah energi diasosiasi molekul (Pelepasan ikatan) dan  $a$  adalah parameter panjang yang merupakan kelengkungan potensial pada titik asal (Filho et. al, 2017).

Parameter potensial Morse dihitung menggunakan nilai eksperimental, dalam persamaan keadaan dan konstanta elastis yang dihitung menggunakan parameter potensial Morse dengan percobaan kedua logam FCC dan BCC. Hal ini, menunjukkan bahwa fungsi potensial dapat diterapkan secara akurat untuk

hal yang melibatkan semua jenis deformasi logam kubik (Girifalco dan Weizer, 1959). Tabel 2.2 adalah tabel parameter potensial Morse untuk beberapa logam.

Tabel 2.2 Parameter potensial Morse

Metal	$\alpha = A^{-1}$	$r_0 = \text{\AA}$	$\mathcal{D}$ (eV)
Pb	1,1836	3,733	0,2348
Ag	1,3690	3,115	0,3323
Ni	1,4199	2,780	0,4205
Cu	1,3588	2,866	0,3429
Al	1,1646	3,253	0,2703
Ca	0,80535	4,569	0,1623
Sr	0,73776	4,988	0,1513
Mo	1,5079	2,976	0,8032
W	1,4116	3,032	0,9906
Cr	1,5721	2,754	0,4414
Fe	1,3885	2,845	0,4174
Ba	0,65698	5,373	0,1416
K	0,49767	6,369	0,05424
Na	0,58993	5,336	0,06334
Cs	0,41569	7,557	0,04485
Rb	0,42981	7,207	0,04644

Sumber: (Girifalco dan Weizer, 1959)

Meskipun kita sudah mendapatkan parameter potensial Morse pada tabel di atas, akan tetapi penelitian ini akan diverifikasi lebih dalam akurasi dari nilai-nilai tersebut untuk dapat digunakan dalam simulasi dinamika molekul.

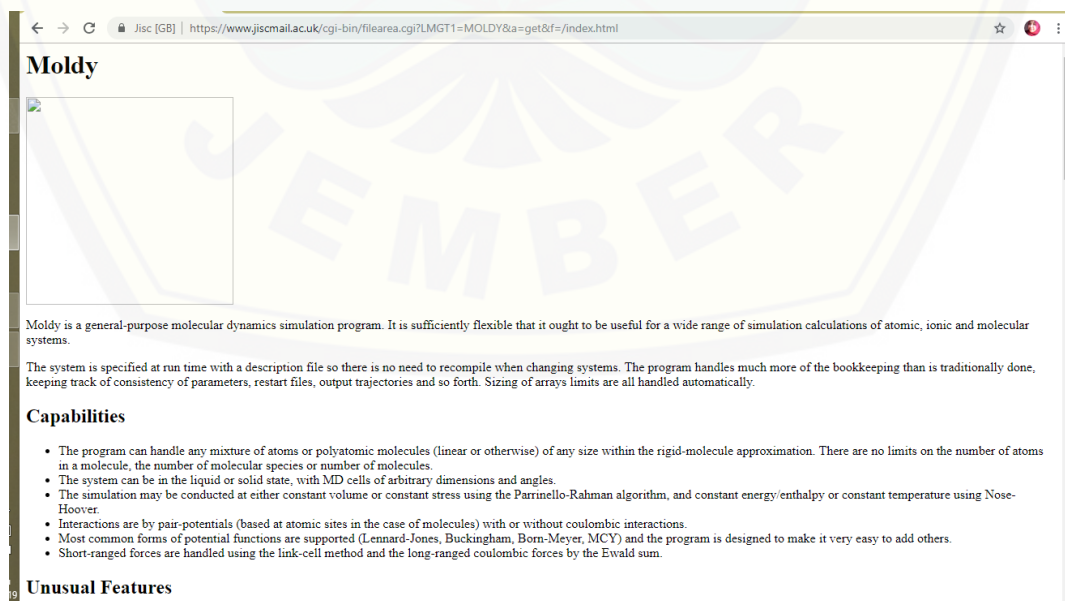
## 2.10 Program MOLDY

Metode dinamika molekul adalah salah satu metode komputasi yang sangat populer untuk mensimulasikan gerak atom, baik sistem molekul maupun obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi. Dengan metode dinamika molekul gerak atom-atom atau bahan dapat diamati dari waktu ke waktu akibat pengaruh dari luar seperti pemanasan, dan perubahan temperatur. Metode dinamika molekul memerlukan informasi koordinat awal atom, kondisi simulasi (temperatur, tekanan, rapat partikel, dan lain-lain). Metode dinamika molekul juga

memerlukan fungsi potensial yang menggambarkan interaksi antar partikel seperti yang telah dijelaskan di atas (Arkundato, 2013). Pada penelitian ini, simulasi MD direalisasikan dalam bentuk program MOLLY. Program ini dipilih karena sangat akurat dan masih digunakan dalam riset-riset aktual.

Metode MD adalah teknik simulasi komputer dengan meninjau perubahan waktu atom dan molekul yang berinteraksi secara teratur (Dwi et al., 2017). Kuantitas makroskopik yang paling berperan dalam program MOLLY adalah *Mean Square Displacement* (MSD). MSD adalah besaran fisis yang dapat dihitung dalam menentukan koefisien difusi, temperatur tinggi yang diberikan atom-atom yang bergerak setiap saat. Dinamika molekular adalah literasi pemecahan persamaan differensial dengan jumlah timestep tertentu. Dalam hal ini persamaan perpindahan kuadrat atom-atom dapat di rata-rata, sehingga kuantitas tersebut dapat dihubungkan dengan perhitungan koefisien difusi (Arkundato, 2016).

Pada penelitian ini akan menggunakan program MOLLY yang berbasis “*Free Code*”. Program ini mudah di instal baik dalam *OS Windows* maupun *Linux*. Program MOLLY dapat diunduh secara gratis melalui internet di alamat [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU_v1_0.html).



Gambar 2.3 Situs web [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU_v1_0.html)

## BAB 3. METODE PENELITIAN

### 3.1 Rancangan Kegiatan Penelitian

Pada kegiatan penelitian ini yang akan dilakukan dibagi dalam dua tahap simulasi: 1) Simulasi I yaitu memverifikasi nilai parameter potensial Morse untuk beberapa unsur logam komponen baja paduan. Tahap ini kita menyiapkan file *input* simulasi yaitu file spesifikasi dan file kontrol simulasi. Untuk verifikasi akan dilakukan perhitungan besaran fisis koefisien difusi diri dengan menggunakan formulasi Green-Kubo berbasis VACF. Pada hal ini, dilakukan komparasi data eksperimen koefisien difusi diri bahan pada  $T$  tertentu dengan hasil simulasi. 2) Simulasi II yaitu menghitung koefisien difusi diri bergantung temperatur dengan formulasi Arrhenius. Pelaksanaan penelitian dilakukan di Laboratorium Fisika Komputasi Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember. Kegiatan dilaksanakan mulai semester ganjil 2018 hingga semester genap 2019.

Kegiatan penelitian diawali dengan studi literatur dari berbagai sumber sebagai langkah observasi mengenai topik metode penelitian yang akan diteliti, dan juga menginstal *software* MOLDY sebagai *software* yang akan digunakan untuk melakukan simulasi. Penelitian ini dilakukan secara komputasi dengan menggunakan metode dinamika molekul untuk menentukan koefisien difusi bahan unsur logam komponen baja paduan.

### 3.2 Sumber Data Penelitian

Simulasi dinamika molekul merupakan metode yang digunakan untuk perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur dan memverifikasi nilai parameter potensial Morse dalam penelitian ini. Perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur diperoleh dari data sekunder, berupa massa atom, konstanta kisi atom, struktur kristal atom, dan nilai parameter potensial Morse.



Oleh karena data yang dihasilkan berupa angka, maka penelitian ini dikategorikan kedalam penelitian kuantitatif.

### 3.3 Definisi Operasional Variabel

Definisi operasional variabel dari penelitian ini, antara lain sebagai berikut:

1. Variabel Bebas

Variabel bebas dari penelitian ini meliputi temperatur yaitu dengan memvariasi temperatur (500- 2000) K.

2. Variabel Terikat

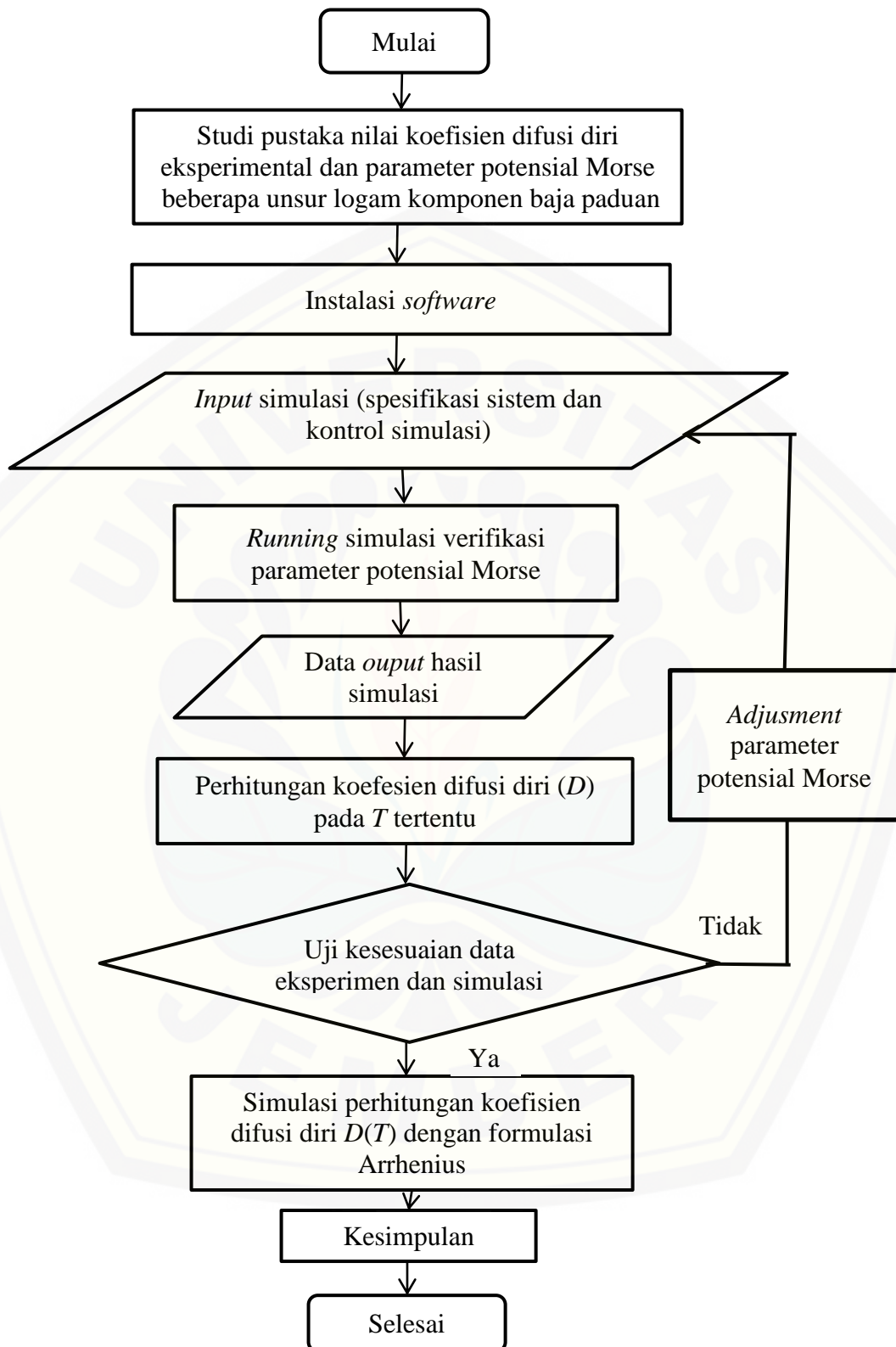
Variabel terikat yang dari penelitian ini adalah koefisien difusi diri  $D(T)$ .

3. Variabel kontrol

Variabel Kontrol yang diterapkan pada penelitian ini meliputi tekanan ( $P$ ), jumlah atom ( $N$ ), struktur kristal molekul dan jumlah integrasi  $n$  step.

### 3.4 Kerangka Pemecahan Masalah

Pada penelitian ini menghitung koefisien difusi diri bergantung temperatur, untuk mendapatkan nilai koefisien difusi diri diperlukan nilai parameter yang sesuai dengan bahan Pb, Cr, Ni, Fe, sehingga dapat digunakan dalam simulasi. Parameter potensial Morse diverifikasi terlebih dahulu dan dibandingkan dengan nilai koefisien difusi diri pada temperatur tertentu yang didapatkan secara eksperimen. Nilai parameter potensial Morse yang sesuai akan digunakan untuk perhitungan nilai koefisien difusi diri bergantung temperatur dengan menggunakan formulasi Arrhenius. Tahapan Simulasi dapat ditunjukkan pada gambar 3.1.



Gambar 3.1 Diagram alir kerangka pemecahan masalah

Verifikasi nilai parameter potensial Morse dilakukan dengan cara melihat data koefisien difusi diri hasil simulasi dengan temperatur yang sesuai dengan eksperimen. Setelah diperoleh data koefisien difusi diri tersebut maka, dibandingkan dengan nilai koefisien difusi diri yang didapat secara eksperimen. Nilai koefisien difusi diri hasil simulasi yang tidak sesuai dengan eksperimen maka perlu diverifikasi nilai parameter potensial Morse dengan melakukan simulasi ulang sehingga didapatkan nilai parameter potensial yang sesuai untuk logam Pb, Cr, Ni, dan Fe.

Proses selanjutnya adalah nilai parameter potensial Morse yang sesuai digunakan untuk perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur  $D(T)$  dengan menggunakan formulasi Arrhenius dengan variasi suhu (500-2000) K dengan melakukan *fitting* data menggunakan formulasi tersebut sehingga didapatkan nilai koefisien difusi diri  $D(T)$ .

### 3.5 Alat dan Bahan

Alat- alat yang digunakan dalam penelitian, antara lain:

1. Perangkat komputer yang terdiri atas layar monitor, CPU, dan *mouse* dengan spesifikasi :
  - a. Prosesor : Intel(R) Core (TM) i3 – 4170 CPU@ 3,70 GHz
  - b. Sistem : 64 bit
  - c. RAM : 2,00 GB (1,88 GB *usable*)
  - d. OS : *Linux Ubuntu*
2. Program yang digunakan dalam simulasi antara lain:.
  - a. Software MOLDY untuk memproses simulasi dinamika molekul dan mendapatkan data.
  - b. Microsoft Excell digunakan untuk mengolah dan mem-*fitting* data.

### 3.6 Analisis Data

Perhitungan koefisien difusi diri bergantung temperatur menggunakan formulasi Arrhenius pada bahan Pb, Cr, Ni, Fe, dengan variasi temperatur 500K-2000K. Formulasi Arrhenius ditunjukkan sebagai berikut:

$$D(T) = D_0 \exp\left(\frac{-E_0}{RT}\right) \quad (3.1)$$

dimana,

$E_0$  = energi aktivasi (J/mol)

$D_0$  = Koefisien difusi diri pada  $T = 0$  ( $\text{m}^2/\text{s}$ )

$T$  = suhu absolut (K)

$R$  = konstanta gas universal ( $\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}$ )

Perkiraan kesalahan atau nilai diskrepansi yang didapatkan dapat dihitung berdasarkan

$$\text{Diskrepansi} = \left| \frac{D_T^{\text{sim}} - D_T^{\text{eks}}}{D_T^{\text{eks}}} \right| \times 100\% \quad (3.2)$$

dimana  $D_T^{\text{sim}}$  adalah nilai koefisien difusi diri hasil simulasi,  $D_T^{\text{eks}}$  adalah nilai koefisien difusi diri eksperimen dari referensi yang ada. Kemudian, nilai koefisien difusi diri hasil simulasi dibandingkan dengan nilai koefisien difusi diri yang di dapat dari referensi.

### 3.7 Prosedur Kerja

Prosedur Kerja dalam penelitian ini menerangkan detail dari diagram alir gambar 3.1 pemecahan masalah:

#### 3.7.1 Step Pre-Processing

Pada *pre-processing step* dilakukan untuk menyiapkan *file* yang nantinya akan digunakan sebagai *input* spesifikasi material atau bahan yang akan digunakan. *File* yang perlu disiapkan adalah *file* spesifikasi yang memuat data struktur kristal, *lattice constant*, massa atom dan parameter potensial Morse ( $D$ ,  $\alpha$ ,  $r_0$ ) dari unsur logam komponen baja paduan dan kontrol simulasi. *Software*

MOLDY telah di instal atau *upgrade* dalam sistem OS *Linux Ubuntu* caranya dengan mengetik pada layar terminal *Linux* dengan perintah:

```
$ tar (spasi) -2xyf (spasi) moldy.tar.gz ↵
```

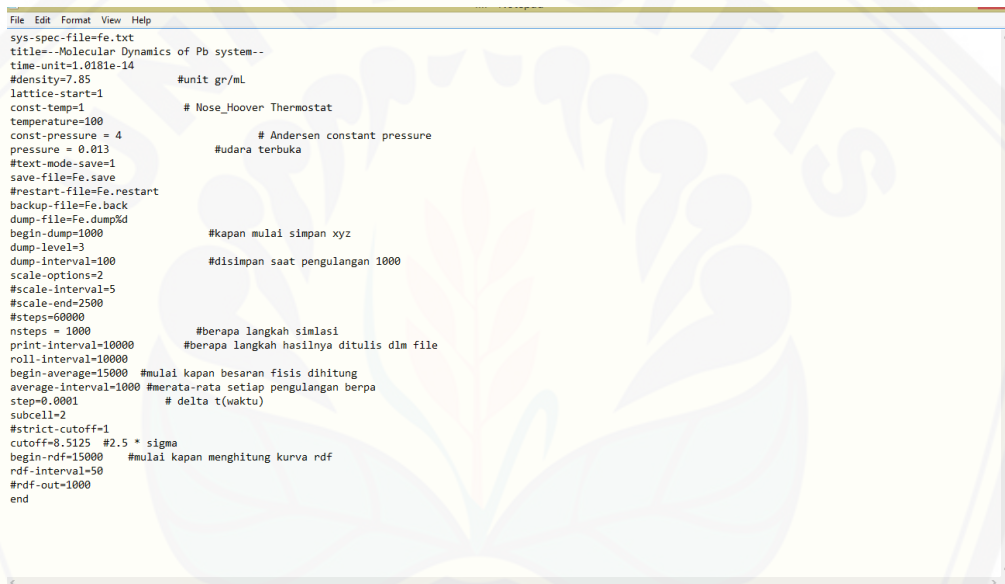
```
$ cd (spasi) moldy ↵
```

```
$ make ↵
```

```
$ sudo (spasi) make (spasi) install ↵
```

```
$ make (spasi) clean ↵
```

*file input* dan *file control* simulasi detailnya seperti pada Gambar 3.2 dan Gambar 3.3:



```
File Edit Format View Help
sys-spec-file=fe.txt
title--Molecular Dynamics of Pb 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=1000       #kapan mulai simpan xyz
dump-level=3         #disimpan saat pengulangan 1000
dump-interval=100
scale-options=2
#scale-interval=5
#scale-end=2500
#steps=60000
nsteps = 1000        #berapa langkah simlasi
print-interval=10000 #berapa langkah hasilnya ditulis dlm file
roll-interval=10000
begin-averages=15000 #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=15000      #mulai kapan menghitung kurva rdf
rdf-interval=50
rdf-out=1000
end
```

Gambar 3.2 *File Control* Simulasi

Pada kontrol *file* nanti dapat dilakukan variasi suhu dari 500 K – 2000 K, dengan tekanan 0,013MPa atau 1 atm seperti Gambar 3.2 di atas. *File input* spesifikasi dimasukkan nilai parameter potesial Morse seperti pada Gambar 3.3 berikut ini:

```

File Edit Format View Help
iron 3456 #1
1 0 0 55.847 0 Fe #2
end #3
Potensial Morse #4
1 1 0.4174 2.845 1.3885 #5
end #6
35 35 35 90 90 90 12 12 12 #7
iron 0.0 0.0 0.0 #8
iron 0.5 0.5 0.5 #9
end #10

```

Gambar 3.3 *File Input* Simulasi

Pada *file input* simulasi dimulai dengan nama atom dan diakhiri dengan perintah *end*. Tanda pagar (#) pada *file input* simulasi berarti setelah tanda ini tidak dianggap sebagai data *input*. Baris pertama menjelaskan tipe atom dan jumlah tipe atom. Baris ke dua menyatakan, 1 untuk kode atom Fe, angka 55,847 merupakan massa atom Fe, dan angka 0 adalah muatan atom netral. Baris keempat dan kelima adalah jenis potensial dan besar nilai dari parameter potensial yang digunakan dalam simulasi. Baris ke tujuh angka 12 menyatakan nilai penggandaan kristal, angka 35 menyatakan dimensi unit kristal, dan angka 90 menyatakan sudut  $\alpha, \beta, \gamma$  pada kristal BCC. Baris ke delapan dan ke sembilan adalah posisi atom-atom Fe dalam unit kristal BCC.

### 3.7.2 Step Simulasi

Pada tahap simulasi perlu dilakukan pengecekan konvergensi simulasi material atau bahan terlebih dahulu. Simulasi ini untuk melihat kondisi ekuilibrisasi sistem yang digunakan, karena dalam simulasi dinamika molekul pada saat perhitungan besaran fisis koefisien difusi diri keadaan sistem harus sudah setimbang. Hal ini dapat diketahui dari kurva ekuilibrisasi energi. Untuk melakukan simulasi dengan cara memanggil *file* kontrol dan *file input* pada terminal Linux dengan perintah:

```
$ Moldy (spasi) nama-file-kontrol (spasi) nama-file-output ↵
```

Setelah memanggil *file* dengan perintah di atas maka program MOLDY akan *merunning* sesuai dengan *file* kontrol dan *file input* yang telah diberikan. Setelah itu, untuk mengecek data yang dihasilkan dapat dilihat dari *file output* pada saat selesai *merunning* seperti yang ditunjukkan pada Gambar 3.4.

```

Sun Jun 03 12:00:48 2018  --Molecular Dynamics of Pb
system-- Page 2

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

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

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

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

System specification read in from file fe.txt
iron
Number of molecules      = 2662
Number of sites         = 1
Mass                    = 55.847 amu
Electric Charge         = 0 Qe
iron molecule has no rotational degrees of freedom

```

Gambar 3.4 Hasil Data Pada Program MOLDY

Untuk mengecek kurva ekuilibrasi dengan cara memanggil energi potensial yang dihasilkan dengan perintah sebagai berikut:

```
$ Moldyext (spasi) -f (spasi) 4 (spasi) nama-file-output ↵
```

Setelah melakukan perintah di atas maka akan muncul data energi potensial yang dihasilkan, lalu di plot dengan Microsoft Excell untuk melihat kurva ekuilibrasi yang dihasilkan. Kemudian, setelah melakukan simulasi awal dan tidak terjadi *error* pada sistem maka dilakukan tahap simulasi material atau bahan yang digunakan dalam penelitian.

### 3.7.3 Step Post Processing

Pada tahap *post processing step* dilakukan analisis data untuk data hasil simulasi yang menggunakan perhitungan utilitis moldy. Analisis data untuk menghitung koefisien difusi diri dengan mensimulasikan *file input* dan kontrol *file*, setelah itu ketikkan di terminal *linux* perintah:

```
$ mdvaf [-s system-specification | -r restart-file] [-d dump-file-format] [-t dump-range] [-f output-type] [-a] [-l] [-i] [-o output-file] ↵
```

Keterangan:

-s membaca *file* spesifikasi sistem.

-r membaca *file restart*, pilih salah satu untuk menggunakan -s atau -r.

-d membaca data konfigurasi dari *file dump* yang diberikan sebagai nama *prototipe*.

-t *range* dari *file dump* ke posisi rata-rata.

-f memberikan *output* dalam format yang ditentukan.

-a menghitung posisi rata-rata menggunakan koordinat Cartesian (absolut).

-lortonormalisasi MD rata-rata.

-i menggeser posisi rata-rata sehingga semua partikel berada di dalam sel MD.

-o nama opsional *file output*.

Fungsi *Mdvaf* untuk menghitung koefisien difusi diri seperti pada rumus (2.8) dan dilanjutkan menghitung koefisien dengan rumus (2.9).

Hasil simulasi perhitungan koefisien difusi diri (*D*) pada temperatur tertentu dibandingkan dengan hasil eksperimen, jika tidak sama perlu dilakukan koreksi nilai parameter  $\mathcal{D}$ ,  $\alpha$ , dan  $r_0$  dari potensial Morse. Untuk koreksi dapat diberi variasi naik atau turun sedikit demi sedikit, lalu dilakukan simulasi ulang sampai diperoleh % diskrepansi antara eksperimen dan simulasi % diskrepansi  $\leq 5\%$ . Setelah diperoleh nilai  $D$ ,  $\alpha$ , dan  $r_0$ , maka dilanjutkan menghitung koefisien difusi diri  $D(T)$  dengan formulasi Arrhenius pada persamaan (3.1)

Nilai  $D(T)$  dapat dicari dari logaritma natural Arrhenius kemudian dengan memasukkan data simulasi dari berbagai temperatur sehingga didapatkan beberapa titik data. Grafik dari titik data tersebut didapatkan persamaan koefisien difusi diri sehingga hasil koefisien difusi diri dapat di plot dan dapat dibahas sehingga diperoleh kesimpulan dari hasil penelitian.



## BAB 5. PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian dan analisa data simulasi yang telah dilakukan dalam penelitian ini, untuk koefisien difusi logam murni Pb, Cr, Ni, dan Fe (pembentuk baja paduan) dengan metode simulasi dinamika molekul dengan potensial Morse maka dapat disimpulkan penelitian ini telah menghasilkan hasil yang sangat baik sebagai berikut:

1. Data awal dengan input nilai parameter potensial Morse nilai koefisien difusi dari simulasi yang dihasilkan jauh dari nilai eksperimen, Sehingga perlu adanya verifikasi nilai parameter dan didapatkan nilai parameter potensial Morse terbaik untuk Pb, Cr, Ni, dan Fe sebagai berikut:
  - a. Pb :  $D = 0,2348 \text{ eV}$  ,  $a = 1,4795 \text{ \AA}^{-1}$  , dan nilai  $r_0 = 3,733 \text{ \AA}$  ,
  - b. Cr :  $D = 0,3291 \text{ eV}$  ,  $a = 1,1005 \text{ \AA}^{-1}$  , dan nilai  $r_0 = 2,203 \text{ \AA}$  ,
  - c. Ni :  $D = 0,3784 \text{ eV}$  ,  $a = 1,0649 \text{ \AA}^{-1}$  , dan nilai  $r_0 = 2,085 \text{ \AA}$  ,
  - d. Fe :  $D = 0,4174 \text{ eV}$  ,  $a = 1,5974 \text{ \AA}^{-1}$  , dan nilai  $r_0 = 2,840 \text{ \AA}$  .
2. Koefisien difusi dari bergantung temperatur untuk masing-masing unsur didapatkan nilai  $D(T)$  yang berbeda, maka dapat dituliskan sebagai berikut:
  - a. Pb :  $D(T) = 9,68 \times 10^{-9} \exp\left(\frac{-3890,79}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$  ,
  - b. Cr:  $D(T) = 1,73 \times 10^{-3} \exp\left(\frac{-8725,54}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$  ,
  - c. Ni :  $D(T) = 8,5 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{-1579,93}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$  ,
  - d. Fe:  $D(T) = 4,22 \times 10^{-7} \exp\left(\frac{-5878,49}{RT}\right) \text{ m}^2/\text{s}$  .

### 5.2 Saran

Penelitian ini dapat dilanjutkan dengan dilakukan verifikasi parameter potensial Morse untuk unsur-unsur yang lain, sehingga diperoleh data parameter

potensial Morse dan koefisien difusi diri bergantung temperatur lebih lengkap untuk berbagai unsur logam.



**DAFTAR PUSTAKA**

Ames, James. 2010. *Lecture Of Chem.* California : University Of California

Andreas K. Maier, H. Mehrer, E. Lessmann, W. Schule. 1976. Self- diffusion in Nickel at Low Temperatures. *Jurnal Basic Solid State Physic.* Vol: 78

Arkundato, Su'ud, dan Hasan. 2016. *Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikasinya.* Jember: Universitas Jember

Arkundato, Su'ud, dan Hasan. 2015. Molecular Dynamics Simulation of Corrosion Mitigation of Iron in Lead-Bismuth Eutectic Using Nitrogen as Corrosion Inhibitor. *Journal of Physics Conference Series.* Vol. 622 (1): 1-8.

Arkundato, Widiasih, Herawati, dan Safitri. 2013. Penerapan Metode Dinamika Molekul Untuk Pembelajaran Konsep Titik Leleh dan Perubahan Wujud. *Jurnal Teori dan Aplikasi Fisika.* Vol. 1: 171-175.

Basu, A., Changdar, S.N., Ghose, A.M. 1980. Self-diffusion Coefficient of Lead. *Journal Nuclear Physics Lab.* Vol 18: 87-90

Born, M. dalam Chen, S. J. dan Huang, H. L. 1981. Diffusion Activation Energies In Face-Centered Cubic Metals Using The Mors Potensial Funcion. *Journal of Physics* 19 (4).

Chiang, Chou, Wu, Huang, and Yew. 2009. *Analytical Solution for Estimation of Temperature-Dependent Material Properties of Metal Using Modified Morse Potential.* ICCES. Vol.9: 130-141.

Crank, J. 1975. *The Mathematics of Diffusion Second Edition.* Oxford : Clarendon Press.

Donald R. Askeland, Wendelin J. Wright .2014. *Essential Of Material Science & Engineering.* Boston: Cengage Learning

- Dwi, E, H. Baskoro, E. Nurul. 2017. *Simulation of Self Diffusion of Iron (Fe) and Chromium (Cr) in liquid lead by Molecular Dynamic*. IBSC: 207-208.
- Filho Costa, Raimundo.N, Jose S. Andrade Jr, & Geova Alencar. 2017. *Morse Potential Derived from First Principles*. Brazil. <https://www.researchgate.net/publication/224825521>.
- Gerhard, Neumann. 2009. *Self Diffusion and Impurity Diffusion in Pure Metal*. Oxford: British Library
- Girifalco, L. A. and Weizer, V. G. 1958. Application of The Morse Potential Function to Cubic Metals, *Phys. Rev.*, Vol.114 (3): 687-690.
- G.J. Ackland, M.C. Warren, S.J. Clark. 2011. *The MOLDY Short-Range Molecular Dynamics Package*. [http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU\\_v1\\_0.html](http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEJU_v1_0.html). [16 Januari 2015].
- Greenwood, N. N.; Earnshaw, A. (1998). *Chemistry of the Elements Edisi kedua*. Butterworth: Heinemann.
- Huheey, J. E. & Keither, R. L. 1993. *Inorganic Chemistry, Fourth Edition*. New York: Hampercollies College Publisher.
- Marcillac, P. de; Coron, N.; Dambier, G.; Jascues Lebland, Jeans-Pierre. (2003). "Experimental detection of particles from the radioactive decay of natural bismuth". *Nature Internasional Journal Of Science*. Vol 422 (6934): 876–78.
- Nasirabadi, M. Jabbari, and J.H. Hattel. 2016. *Estimation of Water Diffusion Coefficient Into Polycarbonate at Different Temperatures Using Numerical Simulation*. Denmark: Department of Mechanical Engineering Technical University Of Denmark.
- Kittel, C. 1996. *Introduction to Solid State Physics Seventh Edition*. USA: John Wiley & Sons.Inc.
- Kristian H. Sugiyanto & Retno D.Suyanti. 2010. *Kimia Anorganik Logam*. Yogyakarta: Graha Ilmu.

- Kusnoputranto, H. 2006. Toksikologi Lingkungan, Logam Toksik. Jakarta: Pusat Penelitian sumber daya & lingkungan dan FKM-UI press.
- Oxtoby, Gillis, dan Nachtrieb. *Prinsip- Prinsip Kimia Modern Edisi Kelima Jilid 2*. Terjemahan oleh Suminar. 2003. Jakarta: Erlangga.
- Refson, K. 2001. *Moldy User's Manual*. Oxford: Department of Earth Sciences.
- Setiawan, J. 2015. *Pengembangan Program Perhitungan Koefisien Difusi Material dalam Rekayasa Permukaan*. Tangerang: Pusat Teknologi Bahan Bakar Nuklir.
- Vainshtein Boris K., Vlameder M. 2013. *Structure of Crystal*. Newyork: Springer Science & Business Media.
- Winter, M. 1993. *Iron: The Essentials*. <http://www.webelements.com/iron/>. [15 Februari 2019].
- Wallwork, G.R. 1976. The Oxidation of Alloy. *Reports on The Progress Physics*. Vol 39 (5): 401-485.
- Xiun, Liu, S.K. Schnell, J.M. Simon, P. Kruger, D. Bideaux, A. Bardow. 2013. *Diffusion Coefficients from Molecular Dynamic Simulation in Binary dan Ternary Mixtures*. New York: Business Media New York 2013.
- Zhang, B. 2014. *Calculation of Self-Diffusion Coefficients in Iron*. <http://scitation.aip.org/content/aip/Journal/adva/4/1?ver=pdfcov>. [2 Februari 2019].

LAMPIRAN

A. Data Verifikasi Nilai Parameter Potensial Morse

A.1 Unsur Pb

A.1.1 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $a$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks} (m^2/s)$	$D_T^{sim} (m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,1836	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,11 \times 10^{-8}$	1453
2	1,6910	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,16 \times 10^{-10}$	84,37
3	1,5810	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$1,78 \times 10^{-9}$	70
4	1,4203	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,72 \times 10^{-9}$	18,81
5	1,4795	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$4,38 \times 10^{-9}$	4
6	1,0652	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,90 \times 10^{-9}$	15
7	1,0061	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,23 \times 10^{-9}$	29
8	0,9469	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,59 \times 10^{-9}$	22
9	0,8877	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$2,99 \times 10^{-9}$	35
10	0,8285	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,45 \times 10^{-9}$	25

A.1.2 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $r_0$ )

no	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks} (m^2/s)$	$D_T^{sim} (m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,4795	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$4,38 \times 10^{-9}$	4
2	1,4795	4,106	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,77 \times 10^{-9}$	18
3	1,4795	4,293	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$2,98 \times 10^{-9}$	35
4	1,4795	4,479	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,99 \times 10^{-9}$	13
5	1,4795	4,666	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,88 \times 10^{-9}$	15
6	1,4795	3,359	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$1,79 \times 10^{-9}$	61
7	1,4795	3,173	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,11 \times 10^{-9}$	32
8	1,4795	2,986	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$4,01 \times 10^{-9}$	12
9	1,4795	2,799	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,61 \times 10^{-9}$	66
10	1,4795	2,613	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,91 \times 10^{-9}$	73

A.1.3 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $D$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks} (m^2/s)$	$D_T^{sim} (m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,4795	3,733	0,2348	$4,58 \times 10^{-9}$	$4,38 \times 10^{-9}$	4
2	1,4795	3,733	0,2583	$4,58 \times 10^{-9}$	$4,89 \times 10^{-10}$	89
3	1,4795	3,733	0,2700	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,61 \times 10^{-9}$	66

4	1,4795	3,733	0,2818	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,92 \times 10^{-9}$	73
5	1,4795	3,733	0,2935	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,18 \times 10^{-9}$	57
6	1,4795	3,733	0,2113	$4,58 \times 10^{-9}$	$7,78 \times 10^{-9}$	70
7	1,4795	3,733	0,1996	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,02 \times 10^{-9}$	34
8	1,4795	3,733	0,1878	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,77 \times 10^{-9}$	18
9	1,4795	3,733	0,1761	$4,58 \times 10^{-9}$	$2,91 \times 10^{-9}$	37
10	1,4795	3,733	0,1644	$4,58 \times 10^{-9}$	$3,05 \times 10^{-9}$	33

## A.2 Unsur Cr

### A.2.1 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potential Morse ( $a$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$\mathcal{D}(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,5721	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$1,05 \times 10^{-6}$	99,89
2	1,7293	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$2,06 \times 10^{-4}$	72,6
3	1,8079	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$5,46 \times 10^{-4}$	44
4	1,8865	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$6,79 \times 10^{-4}$	30
5	1,9651	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$7,57 \times 10^{-4}$	22
6	1,4149	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$5,90 \times 10^{-4}$	39
7	1,3363	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$6,53 \times 10^{-4}$	33
8	1,2577	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$7,97 \times 10^{-4}$	18
9	1,1791	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,21 \times 10^{-4}$	15
10	<b>1,1005</b>	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,6 \times 10^{-4}$	10,7

### A.2.2 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potential Morse ( $r_0$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$\mathcal{D}(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,1005	2,754	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,6 \times 10^{-4}$	10,7
2	1,1005	3,029	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$4,90 \times 10^{-4}$	49,42
3	1,1005	3,167	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$1,56 \times 10^{-4}$	84
4	1,1005	3,305	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$2,75 \times 10^{-4}$	72
5	1,1005	3,443	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$1,30 \times 10^{-4}$	86,4
6	1,1005	2,479	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$2,89 \times 10^{-4}$	70
7	1,1005	2,341	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$2,76 \times 10^{-4}$	72
8	1,1005	<b>2,203</b>	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,90 \times 10^{-4}$	8
9	1,1005	2,065	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$6,34 \times 10^{-4}$	35
10	1,1005	1,928	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$3,00 \times 10^{-4}$	68,7

.2.3 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $D$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$\mathcal{D}(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,1005	2,203	0,4414	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,90 \times 10^{-4}$	8
2	1,1005	2,203	0,4526	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,91 \times 10^{-4}$	8
3	1,1005	2,203	0,4732	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,98 \times 10^{-4}$	7
4	1,1005	2,203	0,4938	$9,7 \times 10^{-4}$	$7,68 \times 10^{-4}$	20
5	1,1005	2,203	0,5143	$9,7 \times 10^{-4}$	$7,80 \times 10^{-4}$	20
6	1,1005	2,203	0,3703	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,90 \times 10^{-4}$	8
7	1,1005	2,203	0,3497	$9,7 \times 10^{-4}$	$8,97 \times 10^{-4}$	7
8	1,1005	2,203	0,3292	$9,7 \times 10^{-4}$	$9,41 \times 10^{-4}$	3
9	1,1005	2,203	0,3086	$9,7 \times 10^{-4}$	$9,21 \times 10^{-4}$	5
10	1,1005	2,203	0,2880	$9,7 \times 10^{-4}$	$9,32 \times 10^{-4}$	4

## A.3 Unsur Ni

A.3.1 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $a$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$\mathcal{D}(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,4199	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$4,47 \times 10^{-7}$	99,54
2	1,56189	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$1,74 \times 10^{-5}$	81,86
3	1,632885	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$1,24 \times 10^{-5}$	87,08
4	1,70388	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$5,79 \times 10^{-5}$	40
5	1,774875	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$6,99 \times 10^{-5}$	27
6	1,27791	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$5,98 \times 10^{-5}$	38
7	1,206915	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,35 \times 10^{-5}$	13
8	1,13592	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,90 \times 10^{-5}$	18
9	1,064925	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,95 \times 10^{-5}$	7
10	0,99393	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,71 \times 10^{-5}$	20

A.3.2 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $r_0$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$\mathcal{D}(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,064925	2,78	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,95 \times 10^{-5}$	7
2	1,064925	3,058	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,82 \times 10^{-5}$	19
3	1,064925	3,197	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,91 \times 10^{-5}$	18
4	1,064925	3,336	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$6,34 \times 10^{-5}$	34
5	1,064925	3,475	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,82 \times 10^{-5}$	19
6	1,064925	2,502	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$6,31 \times 10^{-5}$	34
7	1,064925	2,363	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$6,91 \times 10^{-5}$	28



8	1,064925	2,224	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,75 \times 10^{-5}$	9
9	1,064925	2,085	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$9,31 \times 10^{-5}$	3
10	1,064925	1,946	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$9,03 \times 10^{-5}$	6

#### A.3.3 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $D$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,064925	2,085	0,4205	$9,6 \times 10^{-5}$	$9,31 \times 10^{-5}$	3
2	1,064925	2,085	0,4625	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,61 \times 10^{-5}$	10
3	1,064925	2,085	0,4836	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,75 \times 10^{-5}$	9
4	1,064925	2,085	0,5046	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,98 \times 10^{-5}$	6
5	1,064925	2,085	0,5256	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,34 \times 10^{-5}$	13
6	1,064925	2,085	0,3784	$9,6 \times 10^{-5}$	$9,48 \times 10^{-5}$	1
7	1,064925	2,085	0,3574	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,91 \times 10^{-5}$	7
8	1,064925	2,085	0,3364	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,92 \times 10^{-5}$	7
9	1,064925	2,085	0,3154	$9,6 \times 10^{-5}$	$8,76 \times 10^{-5}$	9
10	1,064925	2,085	0,2944	$9,6 \times 10^{-5}$	$7,18 \times 10^{-5}$	25

### A.4 Unsur Fe

#### A.4.1 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $a$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,3885	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$7,07 \times 10^{-7}$	306
2	1,3890	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,88 \times 10^{-7}$	65,63
3	1,5279	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,96 \times 10^{-7}$	12
4	1,5974	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,62 \times 10^{-7}$	6
5	1,6668	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,16 \times 10^{-7}$	24
6	1,2051	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,37 \times 10^{-7}$	36
7	1,1806	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,17 \times 10^{-7}$	25
8	1,1112	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,18 \times 10^{-7}$	25
9	1,0418	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,84 \times 10^{-7}$	7
10	1,7363	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$3,17 \times 10^{-7}$	82

#### A.4.2 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $r_0$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,5974	2,845	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,62 \times 10^{-7}$	6
2	1,5974	2,840	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,72 \times 10^{-7}$	1
3	1,5974	2,556	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$3,15 \times 10^{-7}$	81
4	1,5974	2,414	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,19 \times 10^{-7}$	26

5	1,5974	2,272	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,90 \times 10^{-7}$	66
6	1,5974	3,124	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,09 \times 10^{-7}$	38
7	1,5974	3,266	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,33 \times 10^{-7}$	24
8	1,5974	3,408	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,50 \times 10^{-7}$	14
9	1,5974	3,550	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,69 \times 10^{-7}$	3
10	1,5974	3,692	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,64 \times 10^{-7}$	6

A.4.3 Data Hasil Simulasi Nilai Parameter Potensial Morse ( $D$ )

No	$a (A^{-1})$	$r_0(A)$	$D(ev)$	$D_T^{eks}(m^2/s)$	$D_T^{sim}(m^2/s)$	Diskrepansi(%)
1	1,5974	2,840	0,4174	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,72 \times 10^{-7}$	1
2	1,5974	2,840	0,417	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,76 \times 10^{-7}$	53
3	1,5974	2,840	1,5212	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,46 \times 10^{-7}$	42
4	1,5974	2,840	0,5004	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,31 \times 10^{-7}$	33
5	1,5974	2,840	0,4795	$1,74 \times 10^{-7}$	$1,58 \times 10^{-7}$	9
6	1,5974	2,840	0,3753	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,03 \times 10^{-7}$	17
7	1,5974	2,840	0,3545	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,02 \times 10^{-7}$	16
8	1,5974	2,840	0,3336	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,57 \times 10^{-7}$	48
9	1,5974	2,840	0,3128	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,20 \times 10^{-7}$	26
10	1,5974	2,840	0,2922	$1,74 \times 10^{-7}$	$2,12 \times 10^{-7}$	22

**B. Data Simulasi Perhitungan Koefisien Difusi Diri  $D(T)$**

**B.1 Unsur Pb**

Tabel B.1.1 Data Hasil Untuk Mencari Ln  $D$  dan  $1/T$

$T(K)$	$1/T$	$D(m^2/s)$	$\ln D$
500	0,002	$3,62 \times 10^{-9}$	-19,4351
700	0,001428571	$4,39 \times 10^{-9}$	-19,245
900	0,001111111	$5,78 \times 10^{-9}$	-18,9682
1100	0,000909091	$6,21 \times 10^{-9}$	-18,8968
1300	0,000769231	$6,41 \times 10^{-9}$	-18,8656
1500	0,000666667	$6,58 \times 10^{-9}$	-18,8382
1700	0,000588235	$6,81 \times 10^{-9}$	-18,8044
2000	0,0005	$7,21 \times 10^{-9}$	-18,7479

Tabel B.1.2 Data Perhitungan Koefisien Difusi Diri  $D(T)$

$T (K)$	$D(T) (m^2/s)$
10	$4,59 \times 10^{-29}$
50	$8,34 \times 10^{-13}$

$T$ (K)	$D(T)$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
200	$9,33 \times 10^{-10}$
300	$2,04 \times 10^{-9}$
350	$2,54 \times 10^{-9}$
400	$3,01 \times 10^{-9}$
450	$3,42 \times 10^{-9}$
500	$3,79 \times 10^{-9}$
550	$4,13 \times 10^{-9}$
600	$4,44 \times 10^{-9}$
650	$4,71 \times 10^{-9}$
700	$4,96 \times 10^{-9}$
750	$5,19 \times 10^{-9}$
800	$5,39 \times 10^{-9}$
850	$5,58 \times 10^{-9}$

## B.2 Unsur Cr

Tabel B.2.1 Data Hasil Untuk Mencari  $\ln D$  dan  $1/T$

$T$ (K)	$1/T$	$D(\text{m}^2/\text{s})$	$\ln D$
500	0,000329	0,002	-8,01832
700	0,000382	0,001429	-7,87109
900	0,000513	0,001111	-7,57447
1100	0,000689	0,000909	-7,27973
1300	0,000725	0,000769	-7,22881
1500	0,000805	0,000667	-7,12475
1700	0,00099	0,000588	-6,91807
2000	0,000979	0,0005	-6,92939

Tabel B.2.2 Data Perhitungan Koefisien Difusi  $D(T)$

$T$ (K)	$D(T)$ ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
10	$4,55 \times 10^{-49}$
50	$1,32 \times 10^{-12}$
100	$4,78 \times 10^{-8}$
200	$9,09 \times 10^{-6}$
300	$5,23 \times 10^{-5}$
350	$8,62 \times 10^{-5}$
400	$1,25 \times 10^{-4}$
450	$1,67 \times 10^{-4}$
500	$2,12 \times 10^{-4}$
550	$2,56 \times 10^{-4}$
600	$3,01 \times 10^{-4}$
650	$3,44 \times 10^{-4}$

700	$3,86 \times 10^{-4}$
750	$4,26 \times 10^{-4}$
800	$4,65 \times 10^{-4}$
850	$5,03 \times 10^{-4}$

### B.3 Unsur Ni

Tabel B.3.1 Data Hasil Untuk Mencari Ln  $D$  dan  $1/T$

$T(K)$	$1/T$	$D(m^2/s)$	$\ln D$
500	$2,60 \times 10^{-5}$	0,002	-10,557
700	$3,69 \times 10^{-5}$	0,001429	-10,2072
900	$9,93 \times 10^{-5}$	0,001111	-9,21662
1100	$1,20 \times 10^{-4}$	0,000909	-9,01989
1300	$1,48 \times 10^{-4}$	0,000769	-8,81843
1500	$2,90 \times 10^{-4}$	0,000667	-8,14287
1700	$3,47 \times 10^{-4}$	0,000588	-7,96619
2000	$3,69 \times 10^{-4}$	0,0005	-7,90452

Tabel B.3.2 Data Perhitungan Koefisien Difusi Diri  $D(T)$

$T (K)$	$D(T) (m^2/s)$
10	$2,66 \times 10^{-86}$
50	$2,69 \times 10^{-20}$
100	$4,80 \times 10^{-12}$
200	$6,41 \times 10^{-8}$
300	$1,52 \times 10^{-6}$
350	$3,75 \times 10^{-6}$
400	$1,25 \times 10^{-6}$
450	$1,25 \times 10^{-5}$
500	$1,91 \times 10^{-5}$
550	$2,70 \times 10^{-5}$
600	$3,60 \times 10^{-5}$
650	$4,60 \times 10^{-5}$
700	$5,66 \times 10^{-5}$
750	$6,79 \times 10^{-5}$
800	$7,95 \times 10^{-5}$
850	$9,15 \times 10^{-5}$

#### B.4 Unsur Fe

Tabel B.3.1 Data Hasil Untuk Mencari Ln  $D$  dan  $1/T$

$T(K)$	$1/T$	$D(m^2/s)$	$\ln D$
500	$1,10 \times 10^{-7}$	0,002	-16,0198
700	$1,31 \times 10^{-7}$	0,001429	-15,847
900	$1,66 \times 10^{-7}$	0,001111	-15,6117
1100	$2,12 \times 10^{-7}$	0,000909	-15,3641
1300	$2,24 \times 10^{-7}$	0,000769	-15,3115
1500	$2,59 \times 10^{-7}$	0,000667	-15,1656
1700	$2,70 \times 10^{-7}$	0,000588	-15,1232
2000	$3,14 \times 10^{-7}$	0,0005	-14,9742

Tabel B.2.2 Data Perhitungan Koefisien Difusi Diri  $D(T)$

$T(K)$	$D(T) (m^2/s)$
10	$8,29 \times 10^{-38}$
50	$3,05 \times 10^{-13}$
100	$3,59 \times 10^{-10}$
200	$1,23 \times 10^{-8}$
300	$4,00 \times 10^{-8}$
350	$5,60 \times 10^{-8}$
400	$7,21 \times 10^{-8}$
450	$8,77 \times 10^{-8}$
500	$1,03 \times 10^{-7}$
550	$1,16 \times 10^{-7}$
600	$1,30 \times 10^{-7}$
650	$1,42 \times 10^{-7}$
700	$1,53 \times 10^{-7}$
750	$1,64 \times 10^{-7}$
800	$1,74 \times 10^{-7}$
850	$1,83 \times 10^{-7}$

#### C. Rumusan Arrhenius Untuk Mencari $D_0$ dan $E$

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

$$\ln D(T) = \ln D_0 + \frac{-E_0}{RT} \cdot \ln e$$

$$\ln D(T) = \ln D_0 + \frac{-E}{RT}$$

$$y = C - mx$$

Maka,

$$\ln D_0 = C$$

$$\frac{-E}{RT} = \text{slope}$$

