

Bidang Ilmu: MIPA

**EXECUTIVE SUMMARY
PENELITIAN DISERTASI DOKTOR**



**PENGEMBANGAN KOMPUTASI SKALA BESAR DAN PEMODELAN
REDUKSI LAJU KOROSI BAJA PADA SISTEM TRANSFER PANAS
REAKTOR BERBASIS *COOLANT* LOGAM CAIR
MENGUNAKAN METODE DINAMIKA MOLEKUL**

Tahun 1 dari rencana 1 tahun

Artoto Arkundato

(NIDN 0025126901)

UNIVERSITAS JEMBER

Desember 2013

Pengembangan Komputasi Skala Besar Dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja Pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul

Peneliti : Artoto Arkundato, S.Si., M.Si¹⁾.

Mahasiswa Yang Terlibat : -

Sumber Dana : DIPA Universitas Jember 2013

¹⁾Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian korosi pada bahan besi berstruktur fcc yang ditempatkan dalam logam cair timbal dan timbal-bismuth menggunakan metode simulasi dinamika molekul. Pada penelitian ini ingin diteliti mekanisme dan cara efektif untuk penghambatan korosi yang terjadi. Korosi besi yang terjadi dipandang sebagai korosi melalui mekanisme difusi oleh karena pengaruh panas yang sangat tinggi logam cair. Pada korosi jenis ini maka dari simulasi terlihat bahwa pemberian atom-atom oksigen pada konsentrasi yang cukup kecil yang diinjeksikan ke dalam logam cair, ternyata mampu menghambat korosi sampai hanya 30%, sementara jika tanpa injeksi oksigen maka logam besi dalam struktur fcc dengan sangat cepat mengalami kerusakan dan habis karena korosi. Dari hasil simulasi terlihat konsentrasi oksigen yang diinjeksikan harus mampu dipertahankan pada jumlah kecil tertentu ($5,35 \times 10^{-2}$ s/d $8,95 \times 10^{-2}$ wt%) untuk besi dalam timbal cair agar diperoleh penghambatan korosi yang maksimum, sepanjang waktu. Penghambatan korosi dapat terjadi melalui dua cara: (1) pembentukan lapisan oksida besi pelindung yang menutupi permukaan besi lebih lanjut agar tidak terjadi korosi tinggi, (2) pembentukan dinding tipis yang disusun oleh atom-atom oksigen yang mampu berperan sebagai pemisah antara permukaan besi (dan oksida besi) dengan atom-atom timbal dan bismuth cair.

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

Pengembangan Komputasi Skala Besar Dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja Pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul

Peneliti : Artoto Arkundato, S.Si., M.Si¹⁾.
Mahasiswa Yang Terlibat : -
Sumber Dana : DIPA Universitas Jember 2013
Kontak Email : a.arkundato@gmail.com
Diseminasi : Konferensi Internasional ICANSE ke-4
Denpasar Bali, 16 – 19 September 2013

¹⁾Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

PENDAHULUAN

LATAR BELAKANG PENELITIAN

Kebutuhan Energi Dunia

Pada waktu sekarang ini perkembangan industri dan bidang-bidang lain sangat cepat sehingga sangat terasa kebutuhan energi listrik yang besar dan mendesak. Namun sumber energi listrik yang ada sekarang sangat terbatas. Energi listrik PLTA yang mengandalkan tenaga air sangat bergantung pada ketersediaan air sementara iklim dan cuaca dunia sekarang ini sedang mengalami perubahan besar. Demikian juga energi dari batubara suatu saat yang relatif tidak terlalu lama akan habis. Energi dari minyak bumi adalah hal yang paling mengkhawatirkan, karena sangat dipengaruhi oleh perkembangan politik dunia, sehingga konflik politik di negara-negara Timur Tengah misalnya, bisa mempengaruhi harga minyak dunia seperti yang terjadi sekarang ini yang berakibat langsung pada harga jual bahan bakar minyak yang semakin tinggi mengikuti harga pasar dunia, termasuk Indonesia sehingga PLTD (Diesel) yang mengandalkan bahan bakar minyak juga terimbas kinerjanya.

Untuk mengatasi kelangkaan energi Pemerintah Pusat mengupayakan adanya energi baru yang dapat menggantikan ketergantungan terhadap energi fosil dengan biaya operasional yang rendah sehingga dapat menekan anggaran negara. Salah satunya adalah mengembangkan PLTN (Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir). Di Negara-negara maju perkembangan teknologinya yang

pesat tidak terlepas dari besarnya dukungan sumber listrik dalam negeri dan itu dicukupi dari PLTN. Indonesia sebagai salah satu tujuan pasar terbuka dunia begitu menikmati hasil-hasil industri negara-negara maju yang tidak lain hasil adanya dukungan PLTN yang besar.

Pengembangan PLTN di Indonesia telah diamanatkan dalam UU No. 17/2007 tentang Rencana Pembangunan Jangka Panjang Nasional, bahwa listrik nuklir sudah harus mulai dimanfaatkan pada periode 2015-2019. **Indonesia, cepat atau lambat harus segera menggunakan PLTN**, demi menjaga keberlangsungan dan ketahanan energi. Dalam hal energi ini, seharusnya Indonesia perlu memandang jauh ke depan, 50 hingga 100 tahun, bukan satu atau dua dasa warsa saja, untuk mengantisipasi perkembangan teknologi dan persaingan global yang demikian dahsyat.

Desain Reaktor Nuklir Masa Depan

Dalam rangka utilisasi sumber daya alam (uranium) secara efektif, pengembangan reaktor nuklir generasi baru – seperti reaktor pembiak cepat (Fast Breeder Reactor, disingkat FBR) – adalah salah satu desain yang telah diusulkan. Reaktor FBR menggunakan neutron cepat untuk menghasilkan rasio pembiakan tinggi, yang salah satu desainnya menggunakan logam berat sodium (*liquid metal sodium*) sebagai pendingin reaktor (*coolant*) sebagai ganti air seperti yang sering digunakan pada desain reaktor termal. Dewasa ini riset material nuklir sebagai bahan pendingin reaktor cepat pengganti sodium difokuskan sekaligus untuk dapat meningkatkan **tingkat keselamatan reaktor**. Material pendingin dengan komposisi 45% Pb dan 55% Bi atau yang dikenal sebagai *lead bismuth eutectic* (LBE) dewasa ini adalah kandidat material pendingin yang utama (Ahmed, 2008). Telah diketahui logam paduan Pb-Bi ini mempunyai sifat tidak bereaksi aktif dengan air dan udara dibanding sodium. Titik didih (*boiling point*) LBE juga lebih tinggi (Zelenskii, 2007). Sifat-sifat yang paling relevan dari Pb atau LBE adalah mempunyai selisih yang besar antara titik leleh (*melting point*) T_M dan titik didih (*boiling point*) T_B nya. Logam Pb mempunyai $T_M = 601\text{ }^\circ\text{K}$ dan $T_B = 2022\text{ }^\circ\text{K}$ sedangkan untuk LBE mempunyai $T_M = 396\text{ }^\circ\text{K}$ serta $T_B = 1943\text{ }^\circ\text{K}$. Sifat-sifat ini menyebabkan **reliabilitas dan keselamatan** untuk instalasi reaktor yang tinggi dibanding penggunaan sodium (Sapundjiev, 2006). Demikian pula logam cair ini mempunyai kemampuan mendukung sistem transfer panas yang baik pada sistem *thermal hydrolics* karena timbal dan LBE adalah **media transfer panas yang efisien karena mempunyai konduktivitas termal dan kapasitas panasnya yang tinggi**. Oleh sebab itu

penggunaan timbal cair/LBE sebagai pendingin reaktor cepat termasuk riset unggulan untuk mewujudkan desain reaktor yang unggul yang memiliki tingkat **keselamatan melekat** (*inherent safety*) tinggi serta **berumur panjang** (longlife). Namun demikian desain reaktor cepat mempunyai sebuah problem serius yaitu logam cair Pb/LBE yang digunakan bersifat korosif terhadap material baja yang digunakan sebagai *cladding* pembungkus bahan bakar uranium reaktor. Korosi tersebut **perlu dikontrol dan perlu ada upaya mitigasi** agar tidak menyebabkan adanya permasalahan keselamatan reaktor dan kerugian ekonomi.

Banyak riset juga dilakukan untuk mencari cara **memperlambat laju korosi**. Salah satu upaya adalah mengontrol laju korosi yang terjadi secara hati-hati dengan mengontrol kandungan **oksigen yang diinjeksikan** kedalam timbal cair atau LBE saat reaktor bekerja. Dalam sistem LBE oksigen terkontrol maka oksigen yang terlarut dalam LBE dibawa ke permukaan baja untuk membentuk, menjaga dan mengembalikan lapisan oksida pelindung melalui konveksi dan difusi. **Karena reaksi kimia adalah cepat pada suhu operasi reaktor yang tinggi, maka transport massa oksigen menentukan kinetika proses**. Untuk memahami proses transport massa oksigen terlarut dalam LBE maka perlu mengetahui koefisien difusi dan sifat-sifat transport oksigen dalam LBE (Jinsuo, 2008).

Model Korosi

Salah satu model terjadinya korosi dapat digambarkan dengan adanya difusi atom-atom penyusun baja yang menyebar kearah LBE (transport massa) dan juga sebaliknya atom-atom Pb/Bi yang dapat menembus ke dalam baja yang dapat memicu adanya retak. Metode simulasi *molecular dynamics* (MD) dapat diterapkan disini dengan mempelajari dinamika atom-atom baja yang berinteraksi dengan LBE.

TUJUAN PENELITIAN

Pada penelitian ini difokuskan untuk mencari mekanisme korosi dan mencari cara penghambatan korosi yang efektif menggunakan metode simulasi dinamika molekul

METODE PENELITIAN

Metode penelitian yang digunakan dalam penelitian ini adalah **Metode Dinamika Molekul Klasik** menggunakan potensial Lennard-Jones (Arkundato et al, 2010, 2011). Simulasi dinamika

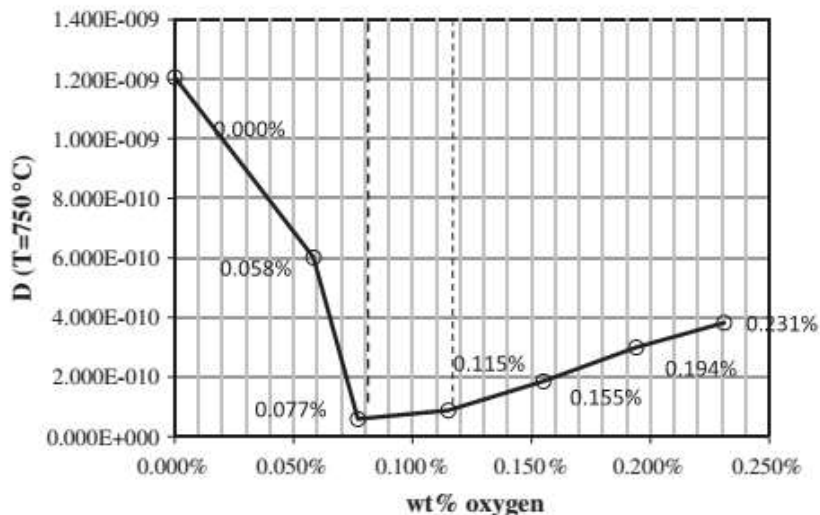
molekul digunakan untuk memprediksi nilai besaran-besaran fisis yang ingin diketahui (koefisien difusi) berdasarkan model material yang dirancang dan berdasarkan input data simulasi yang diberikan. Pada intinya metode dinamika molekul adalah menghitung trayektori dinamika atom secara numerik (dikerjakan oleh program MOLDY pada penelitian ini). Pada dasarnya metode dinamika molekul klasik ini memecahkan atau mencari solusi persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai, dengan hasil solusi trayektori atom. Selanjutnya menggunakan mekanika statistic dapat dihitung besaran-besaran termodinamik yang ingin diketahui. Selanjutnya berdasarkan data hasil simulasi ini dan formula Arrheniuss akan dapat dihitung koefisien difusi yang merupakan petunjuk untuk laju korosi.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Dengan metode simulasi dinamika molekul maka mekanisme penghambatan korosi dapat dipelajari dan diprediksi sifat-sifatnya. Pada penelitian ini ada dua hal yang menjadi perhatian yaitu penghambatan korosi besi dalam Pb dan dalam PbBi. Berikut adalah hasil-hasil yang diperoleh.

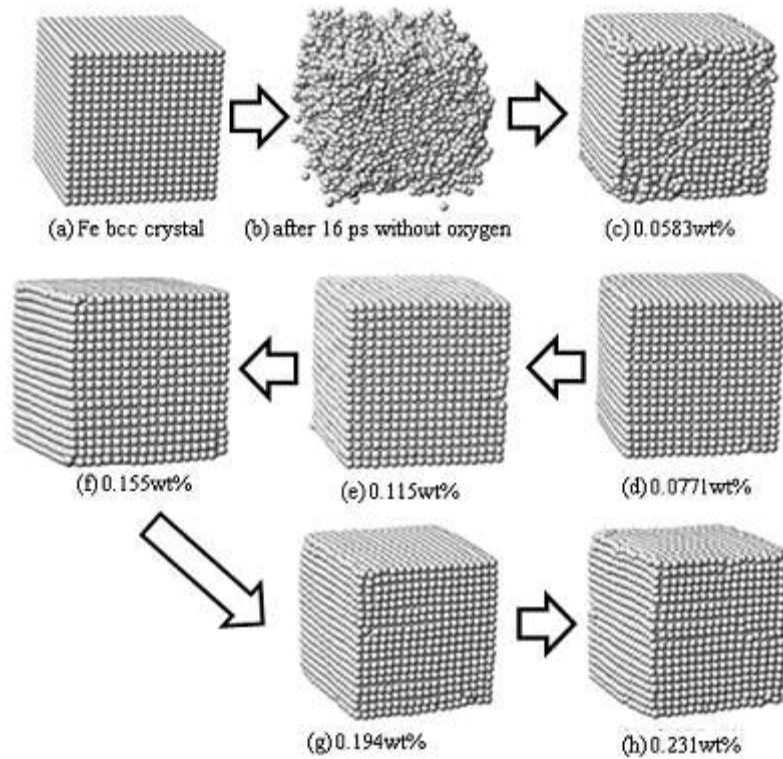
Penghambatan korosi besi dalam Pb cair

Korosi besi dapat dihambat jika kedalam logam cair Pb diinjeksikan oksigen $5,35 \times 10^{-2}$ s/d $8,95 \times 10^{-2}$ wt% (Arkundato et al, 2013).



Korosi paling kecil terjadi pada ineksi 0,077wt%

Gambaran struktur bahan besi selama terjadinya korosi dan selama penghambatan korosi adalah seperti pada gambar di bawah ini.



Kedaaan struktur dari besi selama penghambatan korosi

Terlihat pada gambar (d) bahwa dengan injeksi 0,0771wt% maka korosi dapat dihambat maksimum. Kemudian dari analisa CNA (common neighbor analysis) maka dapat diketahui bahwa struktur bcc besi jika ada penghambatan korosi dengan injeksi oksigen 0,0771wt% maka akan dicapai 70% struktur besi bagian dalam masih dapat dipertahankan tidak mengalami kerusakan yang berarti dapat dicegah korosinya. Korosi dapat dicegah tidak terjadi jika oksigen dapat dipertahankan diinjeksi pada jumlah tersebut. Ini adalah pencapaian yang sangat luar biasa untuk mekanisme penghambatan korosi.

KESIMPULAN PENELITIAN

Dari penelitian yang telah dilakukan maka dapat diambil kesimpulan-kesimpulan berikut:

- (1) Model simulasi korosi yang diperoleh dalam penelitian sudah cukup baik paling tidak dari sisi hasil kualitatif dan kuantitatif sudah dapat menggambarkan bagaimana dinamika

atom-atom bahan (besi) oleh adanya interaksi kuat dengan atom-atom logam cair. Yaitu dari hasil simulasi terlihat bahwa atom-atom besi terlarut dengan sangat hebat jika besi berada dalam lingkungan logam cair Pb/PbBi.

- (2) **Terlarutnya** atom-atom besi ke dalam (masuk) logam cair Pb/Bi menunjukkan adanya degradasi yang hebat dari logam besi. Degradasi ini adalah salah satu bentuk korosi yang terjadi melalui mekanisme disolusi.
- (3) **Dari** simulasi maka jika atom-atom oksigen dengan jumlah tertentu dimasukkan ke dalam logam cair maka atom-atom besi tersebut ternyata mampu menghambat korosi sampai dalam laju korosi yang sangat rendah sehingga secara perhitungan nilai CNA dapat dihitung bahwa dengan memasukkan oksigen dalam kadar kecil (baca lampiran artikel) maka struktur BCC besi dapat dipertahankan stabil sampai 70%. Artinya 30% struktur BCC besi pada daerah permukaan besi mengalami korosi namun bagian dalam akan stabil. Dari 30% atom-atom besi tersebut sebagaimana digunakan untuk pembentukan lapisan oksida besi dipermukaan besi yang sekaligus menjadi lapisan penahan korosi berikutnya.

SARAN

- (1) Masih perlu usaha pengembangan perangkat komputasi yang lebih baik untuk menjalankan simulasi orde sejuta atom yang akurat.
- (2) Perlunya pengembangan potensial interaksi antar atom yang lebih akurat, dengan melakukan analisis teori yang lebih mendalam.

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

DAFTAR PUSTAKA

1. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin, 2010, Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb By Molecular Dynamics Methods, AIP Conference Proceedings, Volume 1244, hal. 136-144.

5. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino, 2011, Proceedings: Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method, International Conference ICANSE 2011, Denpasar, Bali, Indonesia
6. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Proceedings: Computational Study: Reduction of Iron Corrosion in Lead Coolant of Fast Nuclear Reactor, Internatioanl Conference ICPAP 2011, Bandung, Indonesia.
7. Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino, Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study Volume 62, December 2013, Pages 298–306, Annals of Nuclear Energy, Elsevier, Netherlands
8. D. Sapundjiev, S. Van Dyck, W. Bogaerts, 2006, Liquid Metal Corrosion of T91 and A316L Materials in Pb–Bi Eutectic at Temperatures 400–600 °C, Corrosion Science, 48, hal. 577–594.
9. Jinsuo Zhang, 2008, Ning Li Review Of The Studies on Fundamental Issues In LBE Corrosion', Journal of Nuclear Materials, 373, hal. 351-377.