



**REDUKSI KOROSI BESI DALAM LOGAM PbBi CAIR DENGAN
INHIBITOR GAS MULIA MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh

**Umi Sa'adah
NIM 111810201048**

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



**REDUKSI KOROSI BESI DALAM LOGAM PbBi CAIR DENGAN
INHIBITOR GAS MULIA MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

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

Oleh

**Umi Sa'adah
NIM 111810201048**

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

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. kedua orang tuaku (Bapak Sumardi dan Ibu Jumainah) yang selalu ada untukku dalam suka maupun duka;
2. kedua kakakku (Kholilur Rohman dan Inayah) yang selalu memberi semangat dan motivasi;
3. guru-guruku sejak taman kanak-kanak hingga perguruan tinggi yang telah mendidikku selama ini;
4. seluruh keluarga besar Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTO

Man Jadda Wajada (siapa yang bersungguh-sungguh, akan berhasil!).^{*)}

Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan.^{**)}



^{*)} Fuadi, A. 2009. *Negeri 5 Menara*. Jakarta: PT Gramedia Pustaka Utama.

^{**)} QS. Asy-Syarah, terjemahan ayat 6, Departemen Agama RI. 2010. *Al-Qur'an Terjemah dan Tafsir Per Kata*. Bandung: JABAL.

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Umi Sa'adah

NIM : 111810201048

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Reduksi Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Inhibitor Gas Mulia Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang telah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan di institusi mana pun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

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

Jember, 24 Agustus 2015
Yang menyatakan,

Umi Sa'adah
NIM 111810201048

SKRIPSI

**REDUKSI KOROSI BESI DALAM LOGAM PbBi CAIR DENGAN
INHIBITOR GAS MULIA MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh

Umi Sa'adah
NIM 111810201048

Pembimbing:

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

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

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Reduksi Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Inhibitor Gas Mulia Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” telah diuji dan disahkan pada:

hari, tanggal :

tempat : Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

Tim Penguji:

Ketua

Sekretaris

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

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

Anggota I

Anggota II

Supriyadi, S.Si., M.Si.
NIP 198204242006041001

Puguh Hiskiawan, S.Si., M.Si.
NIP 197412152002121001

Mengesahkan

Dekan,

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

RINGKASAN

Reduksi Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Inhibitor Gas Mulia Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul; Umi Sa'adah, 111810201048; 2015: 62 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Pada penelitian ini diteliti fenomena korosi besi yang disebabkan oleh adanya pengaruh lingkungan logam cair (PbBi). Peneliti menganggap korosi besi tersebut terjadi melalui mekanisme difusi kuat atom-atom besi ke dalam lingkungan logam cair di sekitarnya. Korosi besi yang tidak lain adalah mencerminkan kerusakan struktur (permukaan) besi yang ditunjukkan oleh perubahan posisi atom-atom penyusun besi.

Pada penelitian ini, simulasi korosi besi dilakukan dengan meletakkan besi di tengah logam PbBi cair dan korosi yang terjadi dapat dihambat dengan menggunakan inhibitor gas mulia yang diinjeksikan ke dalam logam cair pada konsentrasi tertentu. Penelitian fenomena korosi besi dalam logam cair mayoritas dilakukan secara eksperimen yang memerlukan biaya sangat besar. Penelitian seperti ini tampaknya belum memungkinkan dilakukan di Indonesia karena fasilitas yang belum memadai. Oleh karena itu, peneliti melakukan penelitian melalui simulasi komputer.

Metode simulasi korosi yang digunakan adalah metode dinamika molekul dengan potensial Lennard-Jones. Metode ini sangat populer untuk mengamati pergerakan molekul-molekul yang saling berinteraksi. Penelitian ini bertujuan untuk memahami fenomena korosi besi dan menganalisis pengaruh gas mulia sebagai inhibitor korosi besi dalam logam PbBi cair.

Sistem simulasi korosi dimodelkan dalam bentuk kubus dimana besi yang memiliki struktur kristal BCC diletakkan di tengah logam PbBi cair yang kemudian diinjeksi gas mulia secara acak: Helium (He), Neon (Ne), dan Argon (Ar) ke dalam cairan logam cair. Gas yang diinjeksikan harus dapat dicapai dalam jumlah tertentu

yang dapat diketahui/diprediksi dari hasil simulasi ini. Tingkat efektivitas penggunaan jumlah konsentrasi gas mulia dinyatakan melalui variasi persentase dari keseluruhan jumlah atom gas mulia. Temperatur sistem simulasi material terkorosi (besi dalam logam PbBi cair) yang digunakan untuk memverifikasi hasil simulasi dan eksperimen adalah 1023 K. Penelitian dilakukan dalam dua tahap. Pada tahap pertama, simulasi dilakukan ketika besi diletakkan di tengah logam PbBi cair tanpa inhibitor gas mulia. Pada tahap kedua, simulasi dilakukan ketika besi diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan inhibitor gas mulia.

Beberapa analisis data yang digunakan dalam simulasi penghambatan korosi besi antara lain: MSD (*Mean Square Displacement*), koefisien difusi, dan visualisasi struktur kristal besi. Berdasarkan analisis data hasil simulasi dapat disimpulkan bahwa Argon merupakan salah satu unsur gas mulia yang memiliki potensi paling baik untuk menghambat korosi besi dalam logam PbBi cair. Hal ini dapat ditunjukkan bahwa besi diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan diinjeksi gas Argon sebanyak 1,09% memiliki koefisien difusi sebesar $2,70 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$, sedangkan besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair tanpa diinjeksi gas mulia memiliki koefisien difusi sebesar $1,37 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Jadi, Argon mampu mereduksi laju korosi besi sebesar 80,29% dimana struktur kristal BCC besi yang tersisa setelah dilakukan simulasi adalah 42,3%.

PRAKATA

Alhamdulillah, puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan hidayahNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Reduksi Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Inhibitor Gas Mulia Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Jember. Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama dan Dr. Lutfi Rohman, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu di tengah kesibukan untuk memberikan arahan, perbaikan, motivasi dan dukungan dalam penyelesaian skripsi ini;
2. Supriyadi, S.Si., M.Si, selaku Dosen Penguji Utama dan Puguh Hiskiawan, S.Si., M.Si., selaku Dosen Penguji Anggota yang telah meluangkan waktu untuk menguji dan memberikan masukan demi kesempurnaan skripsi ini;
3. segenap dosen Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Jember yang telah mentransfer ilmunya selama perkuliahan;
4. KH. Hamam, M.Ag., dan Hj. Isnatul Ulya, selaku Pengasuh Ponpes. Al-Husna yang telah memberikan bekal hidup dunia dan akhirat;
5. kedua orang tuaku (Bapak Sumardi dan Ibu Jumainah), yang telah mendidik dengan penuh kasih sayang, meneteskan ribuan keringat dalam kerja kerasmu demi mencukupi kebutuhanku, dan tak pernah henti menyebut namaku serta mendoakanku dalam setiap sujudmu.
6. kedua kakakku (Kholilur Rohman dan Inayah) yang selalu memberikan perhatian dan dukungan untukku;
7. teman-teman klub fisika komputasi yang telah menyumbangkan ide, pikiran, dan tenaga dalam membantu menyelesaikan skripsi ini;

8. teman-teman seangkatan GP '11 dan sahabat kepompong (Ira, Fina, Vita, Puput, Putri, Novdi, dan Ima) yang telah berjuang bersamaku untuk memasuki dunia fisika serta telah mengajarkan arti persahabatan bahwa kita boleh berbeda arah dan tujuan tapi tetap menjaga tali silaturahmi;
9. teman-teman Al-Husna khususnya kamar F4 (Sofi, Ika, Ulfi, Muhas) yang telah memberikan dukungan dan semangat selama ini;
10. semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu.

Sejauh apapun usaha yang telah dilakukan penulis, tentunya masih terdapat beberapa kekurangan dalam penulisan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran demi kesempurnaan skripsi ini. Semoga apa yang telah dilakukan penulis selama menyelesaikan skripsi ini mendapatkan barokah dan memberikan manfaat yang berkelanjutan. Amin.

Jember, Agustus 2015

Penulis

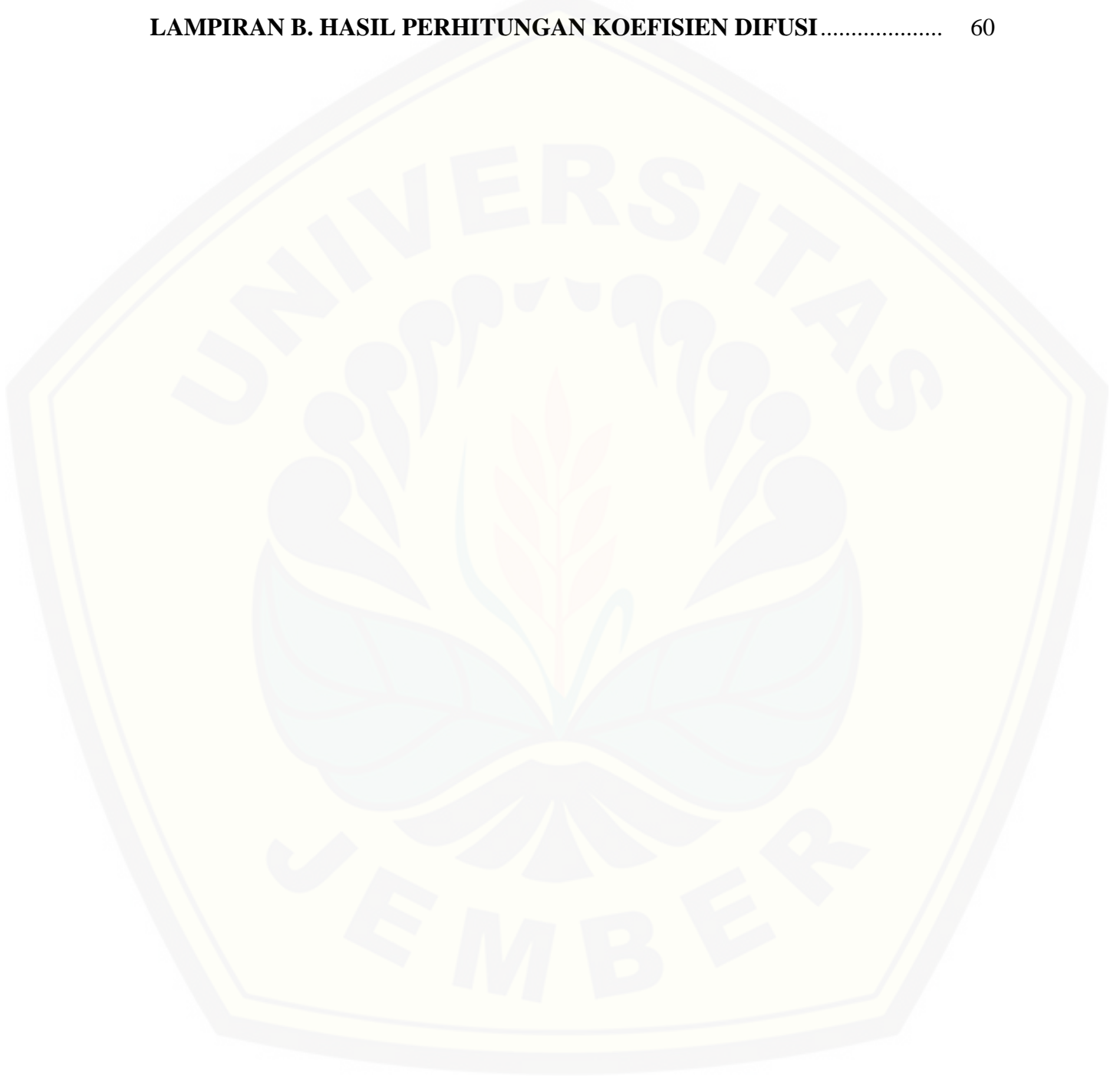
DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
PERSEMBAHAN	ii
MOTO	iii
PERNYATAAN	iv
HALAMAN PEMBIMBING	v
HALAMAN PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah	4
1.4 Tujuan	4
1.5 Manfaat	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
2.1 Struktur Kristal	6
2.2 Besi	7
2.3 Gas Mulia	9
2.4 Pendingin Logam Cair (Logam Timbal Bismut Cair)	11
2.5 Dinamika Molekul	12

2.5.1	Program <i>Molecular Dynamics</i> (MOLDY).....	12
2.5.2	Model Interaksi Antar Molekul	14
2.5.3	Potensial Lennard-Jones	14
2.6	Korosi dan Difusi	17
2.7	<i>Open Visualization Tool</i> (OVITO)	19
BAB 3.	METODE PENELITIAN.....	21
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	21
3.2	Alat Penelitian	21
3.3	Prosedur Penelitian.....	21
3.3.1	Studi Pustaka.....	22
3.3.2	Pemodelan Sistem Simulasi.....	23
3.3.3	Input Simulasi	23
3.3.4	<i>Running</i> Simulasi.....	24
3.3.5	Uji Kurva Equilibrasi.....	25
3.3.6	Analisis Hasil Simulasi.....	26
3.4	Analisis Data.....	28
BAB 4.	HASIL DAN PEMBAHASAN.....	31
4.1	Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair Sebelum Diinjeksi Gas Mulia	31
4.2	Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair Setelah Diinjeksi Gas Mulia	35
4.2.1	Analisis <i>Mean Square Displacement</i> (MSD).....	34
4.2.2	Analisis Kurva Koefisien Difusi.....	37
4.2.3	Analisis Struktur Kristal Menggunakan Program OVITO	39
BAB 5.	PENUTUP.....	45
5.1	Kesimpulan.....	45
5.2	Saran	45
DAFTAR PUSTAKA	47

LAMPIRAN-LAMPIRAN

LAMPIRAN A. HASIL PENENTUAN MSD.....	48
LAMPIRAN B. HASIL PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI.....	60



DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Sifat struktural kisi kubik.....	7
2.2 Beberapa sifat fisika logam besi	8
2.3 Karakteristik kristal gas mulia	9
2.4 Perbandingan karakteristik pendingin logam cair untuk reaktor cepat.....	12
2.5 Parameter potensial Lennard-Jones.....	17
3.1 Input simulasi.....	24
4.1 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Helium yang berbeda	40
4.2 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Neon yang berbeda	41
4.3 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon yang berbeda	41

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Struktur kristal dalam ruang kubus	6
2.2 Struktur kristal FCC untuk gas mulia (Ne, Ar, Kr, Xe)	9
2.3 Langkah-langkah simulasi dinamika molekul	13
2.4 Potensial Lennard-Jones.....	16
2.5 Tahapan visualisasi data menggunakan OVITO.....	19
2.6 Visualisasi 3D struktur Graphene menggunakan OVITO	19
2.7 Kode warna struktur kristal pada CNA	20
3.1 Prosedur penelitian.....	22
3.2 Tampilan <i>command window</i> (<i>running</i> simulasi) pada <i>cmd</i>	25
3.3 Tampilan CNA pada program OVITO	27
3.4 Kurva MSD	28
3.5 Kurva koefisien difusi.....	29
4.1 Kurva kesetimbangan energi sistem simulasi	31
4.2 Kurva MSD besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia	32
4.3 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia.....	34
4.4 Kurva MSD besi dengan kandungan Helium yang berbeda	35
4.5 Kurva MSD besi dengan kandungan Neon yang berbeda	36
4.6 Kurva MSD besi dengan kandungan Argon yang berbeda.....	37
4.7 Koefisien difusi besi dalam logam PbBi cair dengan injeksi gas mulia	38
4.8 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon 1,63% ..	42
4.9 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon 1,09% .	42

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Kebutuhan energi merupakan salah satu masalah yang dihadapi oleh semua negara. Manusia tidak dapat hidup tanpa energi. Banyak kebutuhan hidup manusia yang menggunakan teknologi ditopang oleh energi listrik. Negara Indonesia adalah negara dengan jumlah penduduk yang besar. Energi listrik yang dibutuhkan semakin hari semakin bertambah, mulai dari kebutuhan rumah tangga hingga kebutuhan industri. Jika Indonesia ingin menjadi negara industri tentunya dibutuhkan harga listrik yang murah dan dalam jumlah yang cukup. Adanya pemenuhan kebutuhan listrik diharapkan industri-industri di Indonesia cepat berkembang dan mampu bersaing hingga skala Internasional (Achmad, 1992).

Sejauh ini, Indonesia banyak memanfaatkan Pembangkit Listrik Tenaga Air (PLTA) yang mengandalkan air. Ketersediaan air sangat bergantung pada iklim dan cuaca yang seringkali mengalami perubahan sehingga lama-kelamaan PLTA akan dinilai kurang produktif. Selain itu, energi dari batu bara dan minyak bumi juga relatif mempunyai sedikit cadangan sumber energi.

Kelangkaan energi dapat diatasi dengan upaya penyediaan energi baru. Salah satu energi baru yang sangat menjanjikan adalah sumber energi nuklir. Sebagaimana di negara-negara maju (seperti Jerman dan Jepang) perkembangan teknologinya yang pesat tidak terlepas dari besarnya sumber energi listrik di dalam negeri dan hal itu dapat dicukupi dengan Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir (PLTN) mereka. Penelitian untuk mengembangkan teknologi nuklir terus dilakukan untuk memperoleh keselamatan dan efisiensi yang tinggi dari alat-alat nuklir yang digunakan (Achmad, 1992).

Reaktor nuklir merupakan tempat terjadinya reaksi inti berantai penghasil panas. Reaksi inti akan menghasilkan energi dalam jumlah yang cukup besar. Energi

tersebut berupa energi panas, dimana energi panas ini nantinya dapat digunakan untuk memutar turbin generator sehingga bisa menghasilkan listrik melalui proses konversi energi. Panas dari dalam reaktor dapat dialirkan ke luar menggunakan *coolant* (pendingin). *Coolant* berfungsi sebagai medium pertukaran panas yang biasanya berupa air atau logam cair (Beiser, 1990).

Bahan yang digunakan sebagai *coolant* sebaiknya memiliki titik didih yang tinggi dan konduktivitas termal yang baik karena panas yang terjadi di dalam reaktor dapat mencapai temperatur yang sangat tinggi. Jika *coolant* tersebut berupa air maka sangat tidak memungkinkan bahwa air mampu bertahan pada temperatur yang sangat tinggi. Air memiliki titik didih sebesar 100°C sehingga lebih dari temperatur tersebut air akan cepat menguap. Adapun besar konduktivitas termal air jauh lebih kecil dibandingkan dengan konduktivitas termal timbal, sehingga dapat dipastikan bahwa air kurang mampu menyerap panas dari dalam reaktor untuk dialirkan ke luar (Tipler, 1998). Hal ini berpotensi munculnya tekanan yang besar di dalam reaktor meskipun energi panas belum sempat dikirim ke luar secara keseluruhan. Oleh karena itu akan lebih efektif jika bahan yang digunakan sebagai *coolant* berupa logam PbBi (timbal dan bismut) cair. Kedua bahan (PbBi) tersebut mempunyai sifat-sifat kimia dan fisika yang unggul yaitu tidak terlalu reaktif terhadap air dan udara, memiliki titik leleh rendah dan titik didih tinggi, serta konduktivitas termal yang baik (Winter, 1993). Berdasarkan sifat-sifat tersebut, tentunya *coolant* yang berbahan logam PbBi cair dapat menyerap panas lebih baik daripada air sehingga dapat meningkatkan tingkat keselamatan pada reaktor nuklir cepat.

Satu hal yang menjadi permasalahan dalam reaktor nuklir cepat yaitu logam cair yang digunakan bersifat sangat korosif terhadap material *cladding* (pembungkus) bahan bakar reaktor nuklir. Korosi tersebut perlu dikontrol dan perlu adanya upaya mitigasi agar tidak menyebabkan permasalahan keselamatan reaktor dan kerugian ekonomi. Salah satu upayanya adalah menghambat laju korosi. Model terjadinya korosi dapat digambarkan dengan adanya difusi atom-atom penyusun baja yang

menyebar ke arah logam cair dan sebaliknya atom-atom logam cair dapat menembus baja sehingga menimbulkan kerusakan baja (Arkundato *et al.*, 2013a).

Menurut penelitian Arkundato *et al.* (2013b), korosi besi yang diletakkan di tengah logam cair dapat dihambat dengan menginjeksikan oksigen. Oksigen dibawa ke permukaan baja untuk membentuk lapisan pelindung melalui konveksi dan difusi. Transport massa oksigen dapat menentukan kinematika proses simulasi. Penelitian tersebut dilakukan dengan menggunakan simulasi dinamika molekul. Metode dinamika molekul ini dapat diterapkan dengan mempelajari pergerakan molekul-molekul yang saling berinteraksi. Program yang digunakan pada simulasi dinamika molekul disebut program *Molecular Dynamics* (MOLDY) (Refson, 2001). Berdasarkan simulasi tersebut, atom-atom oksigen yang diinjeksikan dalam jumlah tertentu ternyata memang mampu menghambat korosi besi sampai laju korosi yang sangat rendah (Arkundato *et al.*, 2013b).

Unsur-unsur yang terdapat di alam selain oksigen sangatlah banyak, misalnya gas mulia. Unsur-unsur dalam gas mulia sangat stabil dan sukar bereaksi (Keenan *et al.*, 1992). Pada penelitian ini, sebagai studi awal simulasi bukan menggunakan objek baja melainkan besi (Fe). Besi memiliki struktur yang lebih sederhana dibandingkan dengan struktur baja. Selain itu, besi juga merupakan komponen utama penyusun baja (Linsley, 2004). Bahan-bahan yang digunakan dalam proses simulasi telah terdapat dalam input simulasi sehingga bahan-bahan tersebut bukan merupakan bahan nyata yang perlu diuji dalam laboratorium.

Pada dasarnya simulasi dinamika molekul dimulai dengan menentukan konfigurasi awal atom-atom bahan yang ditinjau. Masing-masing atom tersebut akan saling berinteraksi satu sama lain dimana interaksi tersebut disebabkan oleh gaya yang mempengaruhinya. Gaya yang bekerja pada sekumpulan sistem tertutup adalah gaya interaksi yang diturunkan dari fungsi potensial (Refson, 2001). Fungsi potensial yang digunakan dalam program MOLDY misalnya potensial Lennard-Jones. Potensial Lennard-Jones merupakan model fisis sederhana namun berguna untuk menjelaskan interaksi antar atom, molekul, atau ion (Kittel, 2005).

Penelitian fenomena korosi besi dalam logam cair umumnya dilakukan secara eksperimen. Kegiatan ini tampaknya belum memungkinkan di Indonesia karena fasilitas yang belum memadai. Oleh karena itu, peneliti melakukan penelitian dengan menggunakan simulasi komputer. Penelitian ini bertujuan untuk memahami fenomena korosi besi dan menganalisis pengaruh gas mulia sebagai inhibitor korosi besi dalam logam PbBi cair.

1.2 Rumusan Masalah

Berikut ini permasalahan yang dibahas pada penelitian korosi besi dalam logam PbBi cair, antara lain:

1. Bagaimana fenomena korosi besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia ?
2. Bagaimana pengaruh gas mulia sebagai inhibitor korosi besi dalam logam PbBi cair ?

1.3 Batasan Masalah

Berikut ini batasan masalah pada penelitian korosi besi dalam logam PbBi cair, antara lain:

1. Metode dinamika molekul dengan menggunakan program MOLDY
2. Interaksi antar partikel dijelaskan melalui konsep fungsi potensial Lennard-Jones
3. Difusi atom-atom dalam sistem simulasi ditinjau dari segi fisika (klasik) bukan proses kimiawi

1.4 Tujuan

Tujuan penelitian korosi besi dalam logam cair yang diinjeksi dengan gas mulia adalah mengetahui keunggulan dan potensi gas mulia sebagai bahan inhibitor korosi besi dalam logam PbBi cair.

1.5 Manfaat

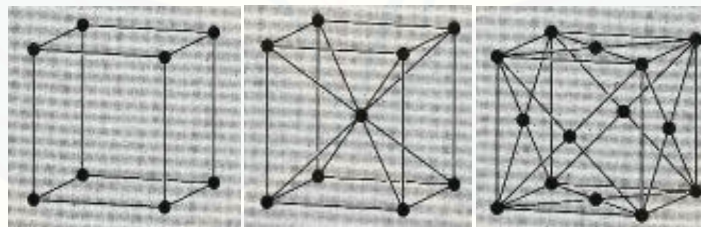
Manfaat hasil penelitian simulasi penghambatan korosi besi dapat digunakan sebagai acuan desain pembuatan reaktor nuklir cepat yang berkaitan dengan penghambatan korosi besi dalam logam cair.



BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Struktur Kristal

Unsur-unsur tertentu dapat mengkristal dalam struktur padatan yang sangat sederhana, dimana atom terletak pada setiap titik kisi. Susunan atom atau molekul yang sangat teratur dan periodik disebut kristal. Sedangkan atom atau molekul penyusun kristal yang letaknya sangat teratur disebut kisi (Kusminarto, 2011). Kisi kristal dapat dibedakan menjadi dua macam yaitu kisi Bravais dan kisi non-Bravais. Pada kisi Bravais, semua atom memiliki jenis yang sama dan semua titik kisi ekuivalen. Sedangkan kisi non-Bravais, atom-atom dapat berbeda jenis dan beberapa titik kisi tidak ekuivalen serta gabungan dua atau lebih kisi Bravais. Salah satu contoh bentuk kristal yang berada dalam ruang tiga dimensi adalah kubus (Puri dan Babbar, 2001). Terdapat tiga macam struktur kristal dalam ruang kubus antara lain: *Simple Cubic* (SC), *Body Centered Cubic* (BCC), dan *Face Centered Cubic* (FCC).



(a) SC; (b) BCC; (c) FCC

Gambar 2.1 Struktur kristal dalam ruang kubus (Sumber: Kittel, 2005)

1. *Simple Cubic* (SC)

Atom-atom terletak pada perpotongan tiga pasang bidang yang berjarak sama yang membentuk sudut siku-siku.

2. *Body Centered Cubic* (BCC)

Sel satuan struktur ini mengandung dua titik kisi, satu di pusat kubus dan lainnya di salah satu dari kedelapan sudutnya.

3. *Face Centered Cubic* (FCC)

Sel satuan ini mengandung empat titik kisi, dengan satu atom tunggal terletak pada setiap titik. Tidak ada atom yang sepenuhnya terletak di dalam sel satuan, ada sejumlah atom di pusat muka yang jumlahnya enam, masing-masing berbagi dengan sel lainnya, dan satu atom di setiap ujung sel, sehingga keseluruhannya adalah empat atom per sel satuan.

Lokasi atom dalam sel satuan dapat ditentukan dengan menggunakan seperangkat (satu set) tiga bilangan yang diukur dalam satuan parameter kisi. Satu sudut sel satuan dianggap berada pada titik pusat sumbu koordinat yang sesuai dengan sistem kristal tersebut, dan satu atom pada kisi tersebut mempunyai koordinat (0, 0, 0).

Tabel 2.1 Sifat struktural kisi kubik

	<i>Simple Cubic</i> (SC)	<i>Body Centered</i> <i>Cubic</i> (BCC)	<i>Face Centered</i> <i>Cubic</i> (FCC)
Titik kisi per sel satuan	1	2	4
Jumlah tetangga terdekat	6	8	12
Jarak tetangga terdekat	a	$\frac{a\sqrt{3}}{2} = 0.866a$	$\frac{a\sqrt{2}}{2} = 0.707a$
Jari-jari atom	$\frac{a}{2}$	$\frac{a\sqrt{3}}{4} = 0.433a$	$\frac{a\sqrt{2}}{4} = 0.354a$
Fraksi kemasan	$\frac{\pi}{6} = 0.524$	$\frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 0.680$	$\frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 0.740$

Sumber: Oxtoby *et al.* (2003).

2.2 Besi

Logam murni seringkali ditemukan dalam perdagangan namun biasanya terdapat campuran karbon dan logam lain di dalamnya. Secara kimiawi, logam murni

sangatlah reaktif dan mudah mengalami korosi. Salah satu contoh logam murni adalah besi. Besi merupakan unsur yang relatif paling banyak di alam semesta. Inti besi sangatlah stabil. Besi termasuk komponen hemoglobin dan unsur pokok yang diperlukan oleh tumbuhan dan binatang. Logam besi berwarna abu-abu seperti perak yang berkilauan (Winter, 1993). Besi disebut juga sebagai logam *ferrous* (bersifat magnetik) (Linsley, 2004).

Struktur kristal besi dibedakan menjadi dua macam, yaitu: *Body Centered Cubic* (BCC) dan *Face Centered Cubic* (FCC). Perbedaan struktur kristal besi ini didasarkan pada tekanan atmosfer. Ketika temperatur besi ≤ 1184 K, maka struktur kristal besi adalah BCC. Sementara ketika besi berada di atas temperatur tersebut ($1184 \text{ K} < \text{besi} \leq 1665 \text{ K}$), maka struktur kristal besi adalah FCC. Jika besi mengalami kenaikan temperatur $> 1665 \text{ K}$ maka besi akan kembali ke fase BCC. Kondisi pada fase BCC ini dapat dipertahankan hingga besi mencapai titik leleh. (Pepperhoff dan Acet, 2001). Titik leleh besi berada pada temperatur 1811 K sedangkan titik didih besi berada pada temperatur 3134 K (Winter, 1993).

Tabel 2.2 Beberapa sifat fisika logam besi

Lambang	Besi (Fe)
Nomor atom	26
Massa atom relatif	55,847
Konfigurasi elektron	$3d^6 4s^2$
Jari-jari atom (nm)	0,116
Kerapatan (g/cm^3)	7,87

Sumber: Achmad (1992).

Besi terdiri dari dua macam yaitu besi cetak dan besi lunak. Besi cetak juga disebut sebagai besi alat atau baja berkarbon tinggi. Material ini adalah suatu logam campuran dari besi dan karbon yang dicairkan dalam wadah kedap udara, kemudian dituangkan ke dalam cetakan untuk membentuk batangan baja. Batangan baja ini kemudian digulung atau ditekan menjadi berbagai macam bentuk. Selain besi cetak juga terdapat besi lunak. Besi lunak merupakan suatu logam campuran dari besi dan

karbon tetapi mengandung lebih sedikit karbon daripada besi cetak. Besi lunak memiliki kekuatan dan kekakuan tanpa bersifat rapuh (Linsley, 2004).

2.3 Gas Mulia

Gas mulia merupakan unsur-unsur golongan VIIIA dalam tabel periodik (Winter, 1993). Salah satu sifat yang paling penting dari unsur-unsur gas mulia adalah memiliki ketahanan yang luar biasa terhadap setiap penggabungan secara kimia. Hal inilah yang menyebabkan unsur-unsur tersebut sangat stabil dan sukar bereaksi (Keenan *et al.*, 1992). Selain itu, gas mulia memiliki bentuk kristal yang paling sederhana. Karakteristik gas mulia pada temperatur nol ditunjukkan pada tabel 2.3. Kristal gas mulia adalah insulator transparan, memiliki ikatan yang lemah dengan temperatur leleh yang rendah. Kulit elektron terluar atom secara lengkap terisi dan distribusi muatan elektron dalam atom bebas adalah simetri bola. Atom-atom gas mulia memiliki energi ionisasi yang sangat besar. Semua struktur kristal gas mulia berupa FCC kecuali He³ dan He⁴.



Gambar 2.2 Struktur kristal FCC untuk gas mulia (Ne, Ar, Kr, Xe) (Sumber: Kittel, 2005)

Tabel 2.3 Karakteristik kristal gas mulia

	Jarak tetangga terdekat (Å)	Energi kohesif eksperimen		Titik leleh (K)	Potensial ionisasi atom bebas (eV)
		kJ/mol	eV/atom		
He		(cairan pada tekanan nol)			24.58
Ne	3.13	1.88	0.020	24.56	21.56
Ar	3.76	7.74	0.080	83.81	15.76
Kr	4.01	11.20	0.116	115.80	14.00
Xe	4.35	16.00	0.170	161.40	12.13

Sumber: Kittel (2005).

Semua gas mulia dapat dijumpai di atmosfer diantaranya Argon terbanyak, sedangkan Radon sangat sedikit. Perbandingan gas mulia di udara dalam bagian per sejuta volumenya yaitu: He \rightarrow 5,24; Ne \rightarrow 18,2; Ar \rightarrow 9340; Kr \rightarrow 1,14; Xe \rightarrow 0,08; dan Rn \rightarrow 6×10^{-14} . Jumlah Radon yang sangat sedikit inilah yang menyebabkan Radon terkadang jarang disebut dalam pembahasan gas mulia (Achmad, 1992).

Berikut ini beberapa penggunaan unsur-unsur dalam gas mulia, antara lain:

1. Helium

Gas mulia Helium terdapat dalam mineral radioaktif dan tercatat sebagai salah satu gas alam di Amerika Serikat. Keseluruhan gas ini terdiri atas peluruhan isotop Uranium atau Thorium yang memancarkan partikel α . Inti Helium ini menerima elektron dari unsur di sekitarnya dan kemudian mengoksidasinya (Cotton dan Wilkinson, 1989). Jumlah Helium yang besar digunakan dalam sistem tekanan bahan bakar untuk roket. Helium memiliki kerapatan paling kecil dari semua unsur kecuali hidrogen. Helium lebih disukai untuk pengisian balon meteorologi karena helium tidak mudah terbakar. Selain itu Helium juga digunakan sebagai gas untuk terowongan angin supersonik.

2. Neon

Neon digunakan untuk membuat indikator tegangan tinggi, penangkal petir, tabung-tabung televisi, dan laser gas. Penggunaan Neon yang umum adalah untuk lampu-lampu Neon.

3. Argon

Argon dapat digunakan untuk mengisi bola lampu pijar karena tidak bereaksi dengan kawat wolfram (tungsten) yang panas sampai putih, tidak seperti oksigen atau nitrogen. Selain itu, Argon juga dapat berperan dalam menyediakan lingkungan yang *inert* dalam peralatan laboratorium dan pengelasan.

4. Kripton

Kripton digunakan dalam lampu kilat foto untuk fotografi berkecepatan tinggi.

5. Xenon

Xenon digunakan dalam pembuatan tabung elektron, lampu stroboskopik dan lampu bakterisid. Salah satu isotop Xenon yang diproduksi secara sintetik adalah Xenon-133 yang sangat bermanfaat sebagai radioisotop.

(Keenan *et al.*, 1992).

Distribusi elektron dalam kristal tidak berubah secara signifikan dari distribusi elektron di sekeliling elektron bebas karena energi yang tersedia tidak cukup untuk mengubah distribusi muatan atom bebas. Energi kohesif atom dalam kristal hanya 1% atau kurang dari energi ionisasi elektron atom. Bagian distorsi ini diketahui dalam interaksi Van der Waals (Kittel, 2005).

2.4 Pendingin Logam Cair (Logam Timbal Bismut Cair)

Reaktor nuklir merupakan tempat terjadinya reaksi berantai yang berkaitan dengan fisi nuklir. Reaktor yang dibuat terdahulu, termasuk yang pertama kali (yang dibangun pada tahun 1942 di Universitas Chicago oleh Enrico Fermi, Walter Zinn, dan kawan-kawannya) memakai Uranium alamiah dengan grafit sebagai moderator. Reaktor dengan pendingin gas lebih aman daripada pendingin air. Sistem pendingin dalam setiap reaktor merupakan unsur kritis. Hasil fisi radioaktif yang disebabkan oleh reaksi berantai dalam bahan bakar akan terus meluruh dan menimbulkan kalor meskipun reaksi berantai tersebut telah dihentikan oleh batang pengendali. Batang pengendali dalam reaktor yang diberi pendingin air akan cepat meleleh dan menimbulkan akibat yang berbahaya (Beiser, 1990).

Menurut penelitian Arkundato *et al.* (2014), material yang digunakan sebagai pendingin (*coolant*) pada sistem transport panas reaktor berupa logam timbal-bismut cair. Material tersebut mempunyai sifat-sifat kimia dan fisika yang unggul yaitu tidak reaktif terhadap air dan udara, memiliki titik leleh rendah dan titik didih tinggi, serta memiliki koefisien hantaran panas yang baik. Namun, logam cair untuk pendingin tersebut bersifat sangat korosif terhadap baja yang digunakan pada pipa-pipa sistem transfer panas dan baja pembungkus bahan bakar reaktor. Sebelumnya pernah

dilakukan penelitian dengan memberikan injeksi atom-atom oksigen dalam konsentrasi kecil tertentu. Injeksi dengan kadar $5,32 \times 10^{-2}$ wt% pada pendingin timbal-bismut cair mampu menurunkan laju korosi 92,16%, untuk temperatur 750°C .

Tabel 2.4 Perbandingan karakteristik pendingin logam cair untuk reaktor cepat

Bahan Pendingin	Titik Leleh ($^{\circ}\text{C}$)	Titik Didih ($^{\circ}\text{C}$)	Reaksi dengan Air dan Udara
Pb	327	1737	Lemah
PbBi	125	1670	Lemah

Sumber: Haryani dan Fitriyani (2013).

Tabel 2.4 merupakan tabel yang menyatakan perbandingan karakteristik logam cair Pb dan PbBi. Kedua bahan baik Pb maupun PbBi sama-sama memiliki reaksi yang lemah dengan air dan udara. Titik leleh PbBi lebih rendah daripada titik leleh Pb sehingga logam PbBi lebih mudah mencair daripada logam Pb.

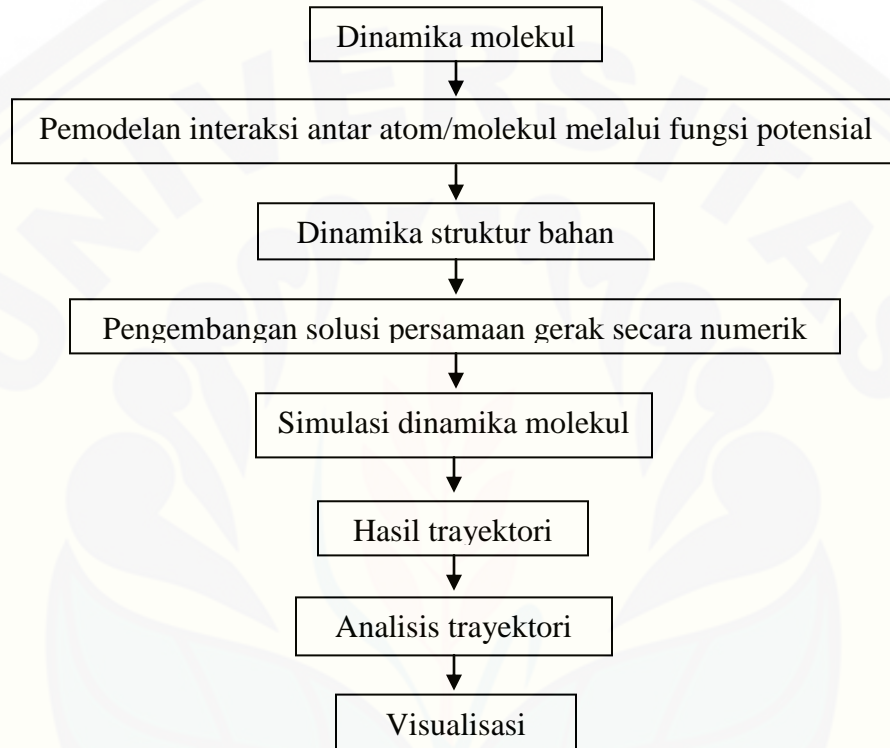
2.5 Dinamika Molekul

Dinamika molekul merupakan metode komputasi fisika yang populer untuk mengamati pergerakan molekul-molekul yang saling berinteraksi. Metode ini mensimulasikan sekumpulan sistem yang tersusun atas molekul-molekul, atom-atom atau ion-ion yang saling berinteraksi satu sama lain. Gaya yang bekerja pada sekumpulan sistem adalah gaya interaksi yang diturunkan dari fungsi potensial. Adapun program yang digunakan untuk simulasi dinamika molekul disebut program *Molecular Dynamics* (MOLDY) (Refson, 2001).

2.5.1 Program *Molecular Dynamics* (MOLDY)

MOLDY merupakan program komputer yang digunakan untuk simulasi dinamika molekul suatu material baik cair, padat, maupun gas (Refson, 2001). Untuk menjalankan simulasi dinamika molekul dibutuhkan beberapa komponen mekanika statistik seperti thermostat, integrasi solusi numerik persamaan Newton, dan fungsi energi potensial (Adler, 2003). Tujuan simulasi dinamika molekul adalah

menghasilkan trayektori molekul-molekul dalam waktu tertentu. Setiap waktu, molekul-molekul dalam simulasi memiliki posisi dan momentum tertentu. Berdasarkan hasil trayektori tersebut dapat dihitung besaran-besaran fisis yang ingin diketahui menggunakan persamaan tertentu.



Gambar 2.3 Langkah-langkah simulasi dinamika molekul (Sumber: Haile, 1992)

Dinamika molekul dapat dilakukan dengan langkah-langkah sebagai berikut:

1. Pengembangan Model

Pengembangan model harus dilakukan sebagai persiapan simulasi dinamika molekul. Model interaksi antar molekul dibutuhkan ketika molekul berinteraksi satu sama lain. Interaksi antara sistem dan lingkungan dibutuhkan ketika sistem dalam keadaan tidak terisolasi. Sistem merupakan sejumlah materi dan volume yang ditinjau atau yang diamati, sedangkan materi dan volume di luar

sistem disebut lingkungan. Contoh model interaksi adalah besi ditempatkan di tengah logam cair (3D).

2. Simulasi Dinamika Molekul

Simulasi dinamika molekul digunakan untuk menghasilkan trayektori pergerakan molekul. Kemudian dilakukan analisis terhadap hasil trayektori untuk menentukan nilai besaran fisis yang dicari.

(Haile, 1992).

2.5.2 Model Interaksi Antar Molekul

Pemodelan interaksi antar molekul memerlukan hukum gaya antar molekul yang ekuivalen dengan fungsi energi potensial antar molekul. Terdapat dua macam gaya antar molekul, antara lain:

1. Gaya tarik-menarik (*attractive forces*)

Molekul-molekul yang berinteraksi dengan jenis yang berbeda akan saling tarik-menarik. Gaya ini akan menyebabkan penurunan energi potensial.

2. Gaya tolak-menolak (*repulsive forces*)

Molekul-molekul yang berinteraksi dengan jenis yang sama akan tolak-menolak. Gaya ini akan menyebabkan kenaikan energi potensial.

(Puri dan Babbar, 2001).

2.5.3 Potensial Lennard-Jones

Potensial Lennard-Jones dikenal sebagai potensial LJ (12-6) yang merupakan model fisis sederhana untuk menjelaskan interaksi antar atom, molekul, atau ion.

$$U(r) = \text{penurunan energi potensial} + \text{kenaikan energi potensial} \quad (2.1)$$

$$U(r) = -\frac{A}{r^m} + \frac{B}{r^n} \quad (2.2)$$

dimana,

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

A = konstanta interaksi tarik-menarik

B = konstanta interaksi tolak-menolak

r = jarak interatomik (m)

m = 6 \rightarrow konstanta masing-masing ikatan dan struktur atom

n = 12 \rightarrow konstanta masing-masing ikatan dan struktur atom

Persamaan di atas menunjukkan penurunan dan kenaikan energi dalam jarak interatomik. Jika $n > m$ maka kenaikan energi tolak menolak lebih cepat daripada kenaikan energi tarik menarik untuk jarak interatomik yang sangat kecil. Gaya tolak menolak disebut sebagai *short forces range*, karena interaksi tolak menolak antar inti atom menjadi cukup besar ketika berada dalam jarak yang sangat kecil (Puri dan Babbar, 2001).

$$U(r) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^m \right] \quad (2.3)$$

dimana,

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

σ = panjang ikatan (\AA) \rightarrow parameter potensial Lennard-Jones

ε = energi ikat (eV) \rightarrow parameter potensial Lennard-Jones

k = koefisien fungsi potensial Lennard-Jones

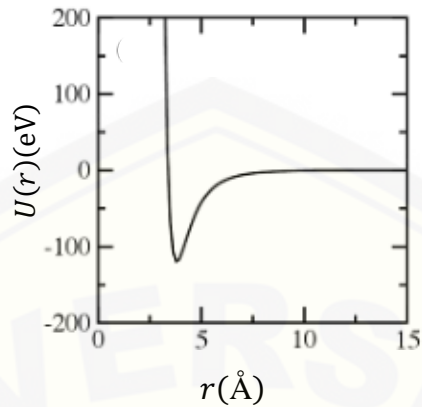
Koefisien fungsi potensial Lennard-Jones dapat diperoleh dari persamaan berikut ini,

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (2.4)$$

Berdasarkan persamaan (2.4), maka persamaan potensial Lennard-Jones (2.3) berubah menjadi,

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.5)$$

(Zhen dan Davies, 1983).



Gambar 2.4 Potensial Lennard-Jones (Sumber: Tuckerman, 2010)

Gambar 2.4 menunjukkan fungsi potensial Lennard-Jones yang memiliki parameter $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$ dan $\epsilon = 119.8 \text{ k}_B\text{K}$. Potensial tersebut berfungsi untuk membatasi gerak atom agar bertahan dalam keadaan setimbang. Jarak untuk mencapai kesetimbangan atom tergantung besarnya σ yang telah ditetapkan dalam parameter potensial Lennard-Jones sehingga dapat diketahui seberapa besar jarak dua atom boleh berdekatan. Sumbu x dalam gambar 2.4 menunjukkan jarak antar atom. Pada program MOLDY, jarak antar atom ini dituliskan dalam input simulasi sebagai *cutoff*. Sumbu y menunjukkan energi yang dibutuhkan partikel untuk mencapai jarak r . Parameter (potensial Lennard-Jones) σ dan ϵ dapat dihitung dengan menggunakan aturan Lorentz-Berthelot:

$$\sigma_{AB} = \frac{(\sigma_{AA} + \sigma_{BB})}{2} \quad (2.6)$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_{AA} \cdot \epsilon_{BB}} \quad (2.7)$$

dimana,

A = indeks untuk partikel pertama

B = indeks untuk partikel kedua

σ_{AA} atau σ_{BB} = panjang ikatan antar partikel yang sejenis (\AA)

σ_{AB} = panjang ikatan antara partikel pertama dan kedua (\AA)

ϵ_{AA} atau ϵ_{BB} = energi ikat antar partikel yang sejenis (eV)

ϵ_{AB} = energi ikat antara partikel pertama dan kedua (eV)

Interaksi pasangan antar atom dapat berupa atom yang sejenis maupun atom yang berbeda jenis (lihat Tabel 2.5). Beberapa interaksi pasangan atom yang sejenis antara lain:

1. Fe-Fe, Pb-Pb (Zhen dan Davies, 1983)
2. Bi-Bi (Belashchenko dan Ostrovskii, 2006)
3. He-He, Ne-Ne, Ar-Ar, (Griebel *et al.*, 2007)

Adapun interaksi pasangan atom yang berbeda jenis antara lain: Fe-Pb, Fe-Bi, Fe-He, Fe-Ne, Fe-Ar, Pb-Bi, Pb-He, Pb-Ne, Pb-Ar, Bi-He, Bi-Ne, dan Bi-Ar.

Tabel 2.5 Parameter potensial Lennard-Jones

Interaksi pasangan	ϵ (eV)	σ (Å)	Interaksi pasangan	ϵ (eV)	σ (Å)
Fe-Fe	0,4007	2,3193	Fe-Ne	0,0840	1,5954
Pb-Pb	0,1910	3,1888	Fe-Ar	0,1546	1,9004
Bi-Bi	0,0590	3,0500	Pb-Bi	0,1061	3,1194
He-He	0,0009	2,6400	Pb-He	0,0547	1,4155
Ne-Ne	0,0030	2,7900	Pb-Ne	0,0985	1,4905
Ar-Ar	0,0103	3,4000	Pb-Ar	0,1812	1,7955
Fe-Pb	0,2766	2,7540	Bi-He	0,0535	1,4155
Fe-Bi	0,1538	2,6846	Bi-Ne	0,0963	1,4245
Fe-He	0,0467	1,5204	Bi-Ar	0,1772	1,7295

2.6 Korosi dan Difusi

Menurut Bolind *et al.* (dalam Arkundato *et al.*, 2013b), korosi suatu logam didefinisikan sebagai degradasi/kerusakan struktur logam yang ditunjukkan oleh perubahan posisi atom-atom penyusunnya. Hal ini terjadi karena adanya interaksi antara logam dengan lingkungan di sekitarnya. Contoh logam yang mudah mengalami korosi adalah besi. Sebagaimana pada reaktor nuklir, kerusakan besi

disebabkan oleh pendingin logam cair yang mengelilinginya dengan temperatur yang tinggi. Fenomena kerusakan besi dapat diamati dengan menggunakan konsep difusi.

Difusi adalah kecenderungan molekul untuk menyebar ke seluruh bagian medium atau wadah yang menampungnya (Fried dan Hademenos, 2005). Berikut ini penjelasan penentuan koefisien difusi dalam fenomena korosi besi. Salah satu kuantitas makroskopik yang penting dalam dinamika molekul adalah *Mean Square Displacement* (MSD). MSD merupakan besaran fisis yang dapat dihitung untuk menentukan nilai difusi besi menggunakan relasi Einstein. Pada temperatur tinggi atom-atom dalam sistem bergerak setiap saat. Dalam dinamika molekuler ini berarti merupakan iterasi dari pemecahan persamaan differensial dengan jumlah *timestep* tertentu. Dengan demikian perpindahan kuadrat dari atom-atom setiap saat dapat dirata-ratakan. Kuantitas ini dapat dikaitkan dengan perhitungan koefisien difusi. Persamaan untuk *Mean Square Displacement* (MSD) adalah sebagai berikut (Kupryazhkin *et al.*, 2008),

$$MSD = \langle |\vec{R}(t) - \vec{R}(0)|^2 \rangle \quad (2.8)$$

dimana,

$\vec{R}(t)$ = posisi atom pada waktu t

$\vec{R}(0)$ = posisi atom mula-mula

Koefisien difusi dapat dihitung menggunakan persamaan Arrhenius (Tilley, 2013),

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} MSD/6t \quad (2.9)$$

dimana,

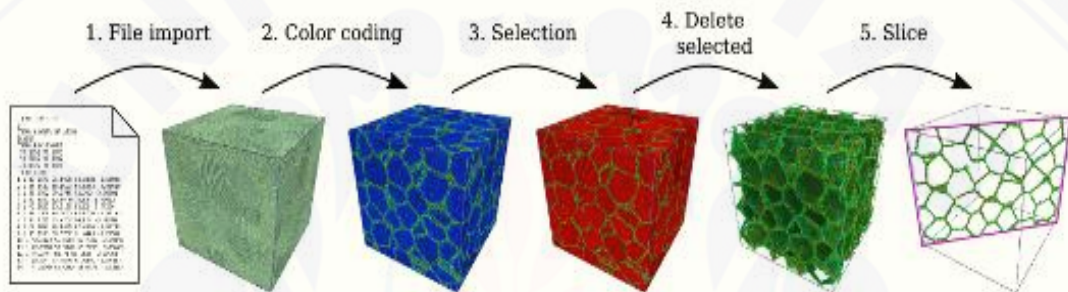
D = koefisien difusi (tidak bergantung temperatur)

t = waktu Bergeraknya atom (ps)

Berdasarkan persamaan 2.9 dapat diketahui bahwa koefisien difusi berbanding lurus dengan nilai MSD. Semakin besar nilai MSD maka nilai koefisien difusi juga semakin besar.

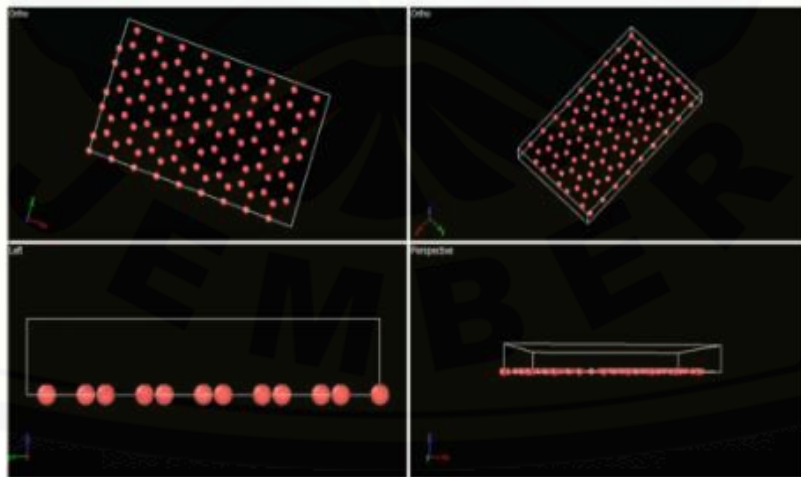
2.7 Open Visualization Tool (OVITO)

Open Visualization Tool (OVITO) merupakan sebuah program visualisasi dan analisis data untuk sekumpulan data atomik seperti output dinamika molekul (Stukowski, 2010). Pada program OVITO terdapat istilah *Common Neighbor Analysis (CNA)*. CNA digunakan untuk menganalisis struktur atom tetangga, misalnya jumlah atom-atom tetangga yang paling dekat, jumlah ikatan antar tetangga, dan rantai terpanjang ikatan atom yang saling terhubung. Berikut ini contoh proses yang terjadi dalam visualisasi data menggunakan program OVITO,



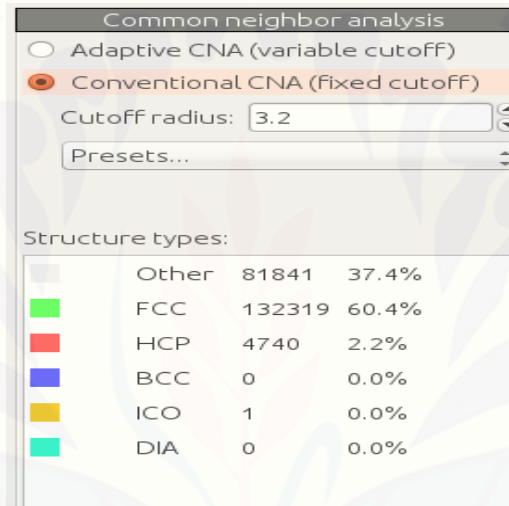
Gambar 2.5 Tahapan visualisasi data menggunakan OVITO (Sumber: Stukowski, 2010)

Gambar 2.5 merupakan tahapan visualisasi data hasil simulasi menggunakan program OVITO. Hasil visualisasi data atomik suatu sistem dapat diperoleh melalui fungsi-fungsi yang terdapat dalam program OVITO (Stukowski, 2010).



Gambar 2.6 Visualisasi 3D struktur Graphene menggunakan OVITO (Sumber: Miisra, 2015)

Gambar 2.6 merupakan contoh visualisasi menggunakan program OVITO. Berdasarkan gambar tersebut dapat dilakukan analisis CNA. Analisis CNA menggunakan program OVITO dapat menentukan bentuk dan jumlah struktur kristal yang terdapat dalam sistem simulasi. Analisis CNA sangat efektif untuk mengetahui struktur suatu material yang disimulasikan. Beberapa jenis struktur kristal yang dapat ditentukan dalam program OVITO antara lain: FCC, BCC, HCP, dan lain sebagainya. Struktur kristal dalam sistem dapat dianalisis dengan menggunakan kode warna di bawah ini,



Gambar 2.7 Kode warna struktur kristal pada CNA (Sumber: Stukowski, 2010)

Keterangan:

Other = struktur kristal yang tidak diketahui bentuknya

FCC = *Face Centered Cubic*

HCP = *Hexagonal Close Packed*

BCC = *Body Centered Cubic*

ICO = *Icosahedral*

DIA = struktur diamond

(Stukowski, 2010).

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilaksanakan pada bulan Januari 2015 – Agustus 2015 di Laboratorium Fisika Komputasi, Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Jember.

3.2 Alat Penelitian

Berikut ini alat yang digunakan dalam penelitian, antara lain:

1. Komputer

Processor : Intel (R) Core (TM) i5-3470 CPU @ 3.20GHz
3.60GHz

Installed memory (RAM) : 4.00 GB (3.90 GB usable)

System type : 64-bit *Operating System*

Sistem Operasi : *Windows* dan *Linux*

2. Program simulasi yang digunakan dalam penelitian antara lain:

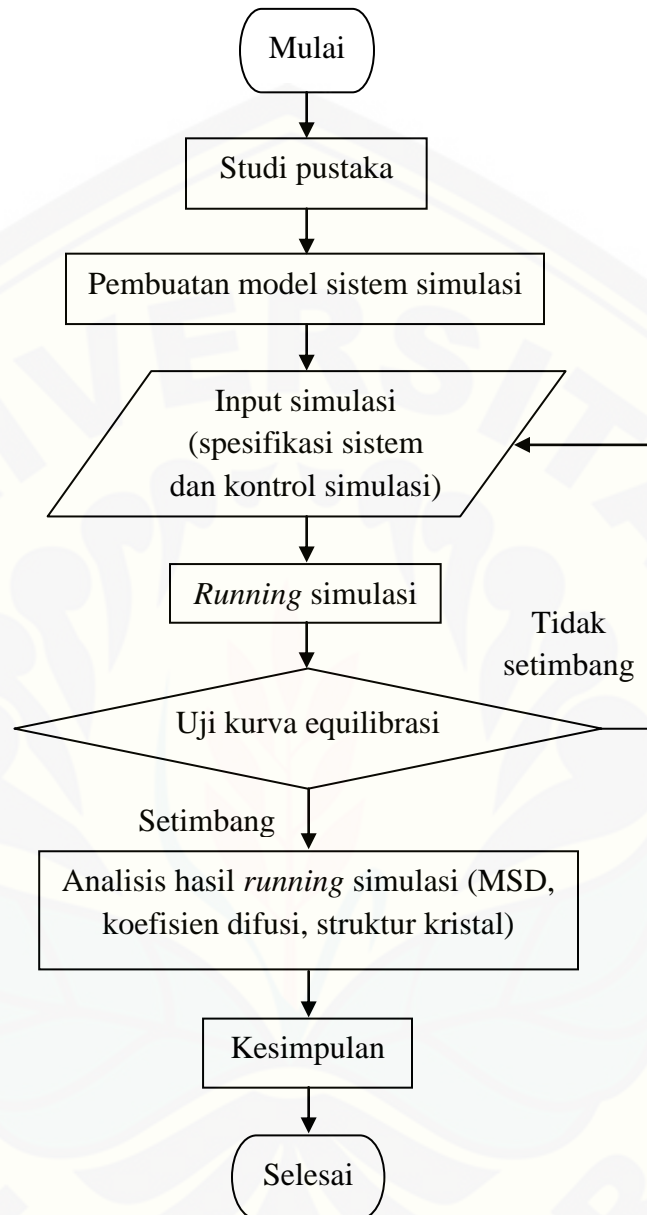
a. MOLDY, berfungsi untuk *running* simulasi

b. OVITO (ovito-2.3.3-win64), berfungsi untuk mengetahui jumlah struktur kristal suatu bahan

(Versi ovito-2.3.3-win64 dapat dijalankan pada komputer yang memiliki spesifikasi *system type* 64-bit. Penggunaan versi OVITO ini disesuaikan dengan *system type* komputer.)

3.3 Prosedur Penelitian

Prosedur penelitian simulasi penghambatan korosi besi dalam logam PbBi cair dengan injeksi gas mulia disajikan dalam gambar 3.1.



Gambar 3.1 Prosedur penelitian

3.3.1 Studi Pustaka

Pada tahap awal penelitian dilakukan studi pustaka untuk memperoleh informasi-informasi terkait karakteristik bahan simulasi dan metode dinamika molekul. Informasi-informasi tersebut dapat diperoleh dari berbagai referensi, antara

lain: buku, jurnal, internet, maupun karya ilmiah yang tidak dipublikasikan (misalnya: skripsi, tesis, dan disertasi).

3.3.2 Pembuatan Model Sistem Simulasi

Beberapa bahan yang digunakan dalam simulasi penghambatan korosi besi antara lain: Besi (Fe), Timbal (Pb), Bismuth (Bi), Helium (He), Neon (Ne), dan Argon (Ar). Bahan-bahan tersebut bukan merupakan bahan yang berbentuk nyata melainkan telah terdapat dalam sistem simulasi. Sistem simulasi dimodelkan dalam bentuk kubus berdimensi $123 \times 123 \times 123 \text{ \AA}^3$ dimana material besi (Fe) diletakkan di tengah logam PbBi cair yang diinjeksi dengan gas mulia. Jumlah atom Fe adalah 10745 atom dan logam cair tersusun atas 18309 (45%) atom Pb dan 22374 (55%) atom Bi. Tingkat efektivitas penggunaan jumlah konsentrasi gas mulia dapat dinyatakan melalui variasi persentase dari keseluruhan jumlah atom gas mulia. Adapun variasi jumlah atom gas mulia yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair adalah: 0 (0%) atom, 226 (0,55%) atom, 340 (0,83%) atom, 450 (1,09%) atom, 674 (1,63%) atom, 906 (2,18%) atom, 1132 (2,71%) atom, dan 1348 (3,21%) atom.

3.3.3 Input Simulasi

Pada tahap input simulasi terdapat dua file yang digunakan yaitu file spesifikasi sistem dan file kontrol simulasi. Beberapa variabel dalam file spesifikasi sistem berfungsi sebagai variabel input (variabel yang koefisiennya dapat diubah) dan variabel dalam file kontrol simulasi berfungsi sebagai variabel kontrol (variabel yang koefisiennya tidak dapat diubah). Input simulasi memiliki peranan penting dalam mengatur jalannya simulasi. Ketika simulasi sedang berjalan maka terjadi pergerakan atom di dalam sistem simulasi. Pergerakan atom-atom tersebut disebabkan oleh gaya yang mempengaruhinya, dimana gaya tersebut diturunkan dari fungsi potensial

Lennard-Jones. Potensial ini telah diatur dalam struktur program MOLDY sehingga peneliti hanya perlu memasukkan parameter potensial Lennard-Jones.

Tabel 3.1 Input simulasi

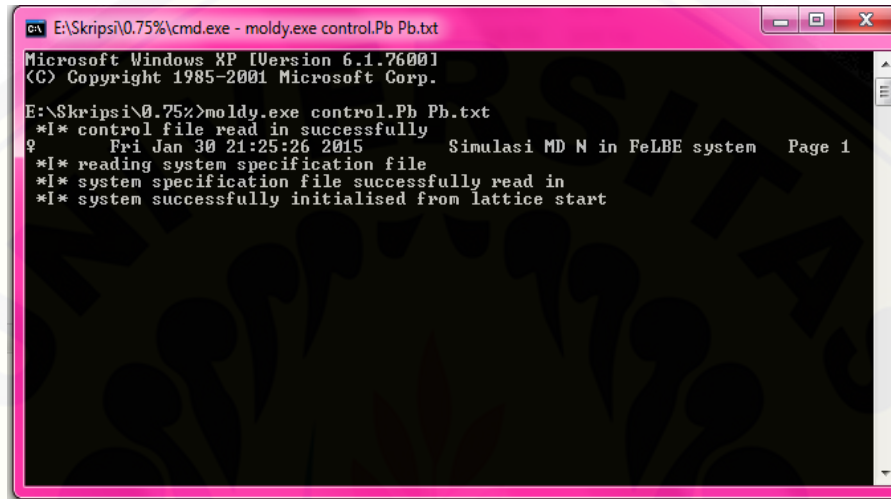
Variabel	Nilai	Keterangan
- Spesifikasi sistem		
ϵ (energi)	0.00094 eV (He) 0.00304 eV (Ne) 0.01030 eV (Ar)	Parameter potensial gas mulia
σ (jarak)	3.40 Å (He) 2.79 Å (Ne) 3.40 Å (Ar)	Parameter potensial gas mulia
m (massa)	4.0026 amu (He) 20.183 amu (Ne) 39.948 amu (Ar)	Massa atom gas mulia
- Kontrol simulasi		
temperatur	1023 K	Temperatur yang digunakan dalam proses simulasi
begin-dump	60000	Batas awal proses <i>dumping</i>
dump-interval	1000	Interval yang digunakan dalam <i>dumping</i>
Step	0.0001	Ukuran <i>timestep</i> (satuan ps)
nstep	160000	Jumlah <i>step</i> simulasi

3.3.4 *Running* Simulasi

Running simulasi hanya dapat dilakukan ketika telah memiliki file input simulasi (file spesifikasi sistem dan file kontrol simulasi). Simulasi dapat dijalankan di komputer yang memiliki sistem operasi *Windows* dengan menggunakan program MOLDY. Adapun langkah-langkah untuk menjalankan simulasi penghambatan korosi besi, antara lain:

1. File spesifikasi sistem, file kontrol simulasi, dan program MOLDY dijadikan dalam satu folder

2. Data dalam file spesifikasi sistem harus disesuaikan dengan referensi, sedangkan data dalam file kontrol simulasi dapat diubah-ubah
3. *Running* simulasi dengan cara menuliskan perintah pada jendela *cmd*:
moldy.exe control.filename filename-out.txt



```
E:\Skripsi\0.75%\cmd.exe - moldy.exe control.Pb Pb.txt
Microsoft Windows XP [Version 6.1.7600]
(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

E:\Skripsi\0.75%>moldy.exe control.Pb Pb.txt
*I* control file read in successfully
  Fri Jan 30 21:25:26 2015      Simulasi MD N in FeLBE system   Page 1
*I* reading system specification file
*I* system specification file successfully read in
*I* system successfully initialised from lattice start
```

Gambar 3.2 Tampilan *command window* (*running* simulasi) pada *cmd*

3.3.5 Uji Kurva Equilibrasi

Kurva equilibrasi merupakan kurva yang menunjukkan kesetimbangan energi sistem selama simulasi berlangsung. Energi sistem dapat dikatakan telah mencapai kesetimbangan jika atom-atom yang bergerak dalam sistem simulasi telah mengalami kenaikan energi dan pada saat tertentu energi yang dimiliki tersebut telah stabil. Jika kurva equilibrasi tercapai bentuk kesetimbangan maka simulasi dapat dilanjutkan untuk seluruh tahapan simulasi. Jika tidak tercapai bentuk kesetimbangan maka perlu diulang untuk dilakukan perubahan-perubahan input simulasi. Ketidaksetimbangan energi sistem berpengaruh terhadap rekaman informasi selama simulasi berlangsung. Berikut ini tahapan uji kurva equilibrasi, antara lain:

1. Data hasil *running* simulasi dipanggil pada jendela *cmd* dengan cara menuliskan perintah:
moldyext.exe -f 1,4 filename-out.txt

Perintah *moldyext* digunakan untuk mengetahui nilai sesaat (energi) selama simulasi berlangsung.

2. Data yang muncul pada jendela *cmd* dicopy dan diolah dalam *Microsoft Excel*

3. *Plot* kurva hasil *copy* data tersebut

Pada kurva ekuilibrasi menunjukkan hubungan antara waktu simulasi (sumbu horisontal) dan energi total (sumbu vertikal).

3.3.6 Analisis Hasil Simulasi

Berikut ini merupakan analisis hasil simulasi yang digunakan pada penelitian penghambatan korosi besi dalam logam PbBi cair.

a. Penentuan MSD

Berikut ini prosedur penentuan MSD, antara lain:

1. Data hasil *running* simulasi diekstrak dengan cara menulis perintah pada jendela terminal Linux:

```
msd -r filename.save -d filename.dump0 -t 0-100 -m 0-100 -o filename-out.txt
```

2. Data MSD akan muncul dalam bentuk *.txt*

3. Data MSD dicopy ke dalam *Microsoft Excel*

4. Data tersebut direpresentasikan dalam kurva MSD yang menunjukkan hubungan antara MSD dan *time* (ps)

b. Perhitungan Koefisien Difusi

Berikut ini prosedur perhitungan koefisien difusi, antara lain:

1. Data MSD diolah pada *Microsoft Excel* dengan menggunakan persamaan koefisien difusi

2. Hasil perhitungan koefisien difusi direpresentasikan dalam bentuk kurva koefisien difusi yang menunjukkan hubungan antara konsentrasi (%) dan koefisien difusi

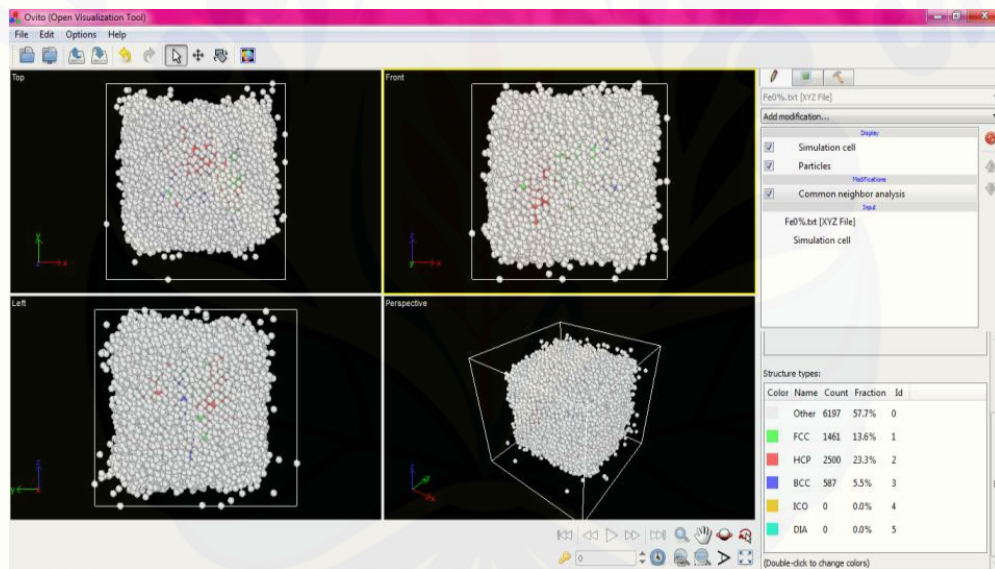
c. Analisis Struktur Kristal Besi

Analisis struktur kristal/CNA digunakan untuk memvisualisasikan dan mengetahui jumlah struktur kristal suatu sistem menggunakan program OVITO.

Berikut ini prosedur analisis struktur kristal besi menggunakan program OVITO, antara lain:

1. Data dalam file *dump* (hasil *running* simulasi) diekstrak dengan cara menuliskan perintah pada jendela terminal Linux:

```
mdavpos -r filename.save -c -f xyz -d filename.dump0 -t 0-100 -o filename-out.txt
```
2. Data hasil ekstrak file *dump* berupa input posisi XYZ, kemudian data tersebut dimasukkan dalam program OVITO sehingga dapat diamati bentuk dan jumlah struktur kristal BCC besi yang masih tersisa dari hasil *running* simulasi melalui kode warna analisis CNA.



Gambar 3.3 Tampilan CNA pada program OVITO

Gambar 3.3 merupakan contoh tampilan CNA pada program OVITO. Sebelah kanan gambar bentuk struktur kristal, terdapat tulisan “*Structure types*”. Di bawah tulisan tersebut dapat diketahui kode warna, jenis struktur kristal, jumlah atom, dan jumlah struktur kristal besi setelah simulasi berlangsung. Selain itu, bentuk struktur kristal juga dapat dilihat dari berbagai sisi.

3.4 Metode Analisis Data

Berikut ini metode analisis data yang digunakan dalam penelitian, antara lain:

1. Mean Square Displacement (MSD)

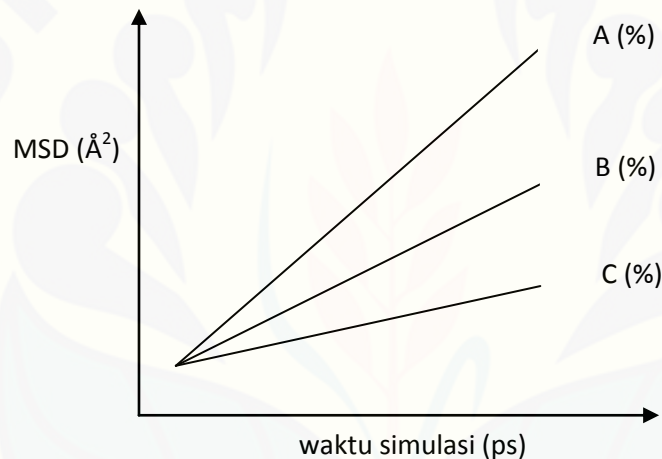
MSD merupakan besaran fisis yang berfungsi untuk menentukan rata-rata perpindahan gerak atom.

$$MSD = \langle |\vec{R}(t) - \vec{R}(0)|^2 \rangle \quad (3.1)$$

dimana,

$\vec{R}(t)$ = posisi atom pada waktu t

$\vec{R}(0)$ = posisi mula-mula atom



Gambar 3.4 Kurva MSD

Keterangan:

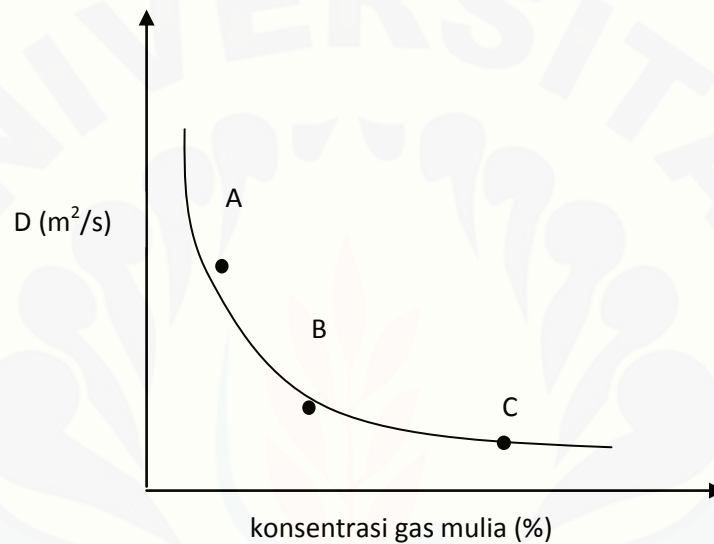
Gambar 3.4 merupakan kurva MSD yang menunjukkan hubungan antara MSD (Å^2) dan waktu (ps). Garis A, B, C dimisalkan sebagai jumlah konsentrasi (%) gas mula. Analisis MSD dilihat melalui perhitungan slope/kemiringan kurva. Semakin tinggi kemiringan kurva MSD maka susunan atom dalam suatu material semakin acak. Jadi penghambatan korosi besi paling efektif digambarkan oleh kemiringan kurva MSD yang paling rendah.

2. Koefisien difusi

Persamaan koefisien difusi adalah:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} MSD/6t \quad (3.2)$$

Berdasarkan persamaan (3.2), dapat dilihat bahwa terdapat hubungan antara nilai MSD dengan koefisien difusi (D). Di bawah ini merupakan contoh representasi kurva koefisien difusi.



Gambar 3.5 Kurva koefisien difusi

Keterangan:

Gambar 3.5 merupakan kurva koefisien difusi yang menunjukkan hubungan antara koefisien difusi dan konsentrasi gas mulia. Titik A, B, dan C dimisalkan sebagai variasi konsentrasi (%) gas mulia. Hasil koefisien difusi dari beberapa variasi injeksi konsentrasi gas mulia dibandingkan dengan koefisien difusi sebelum diinjeksi gas mulia (0%). Variasi konsentrasi gas mulia yang memiliki nilai koefisien difusi paling kecil secara tidak langsung menggambarkan bahwa laju difusi juga kecil. Pada penelitian ini, laju difusi diasumsikan sebagai laju korosi besi.

3. Reduksi laju korosi besi

Besar reduksi (penurunan) laju korosi besi dihitung berdasarkan nilai koefisien difusi.

$$\text{reduksi} = \left| \frac{D_{awal} - D_{terbaik}}{D_{awal}} \right| \times 100\% \quad (3.3)$$

dimana:

reduksi = besar penurunan laju korosi (%)

D_{awal} = koefisien difusi besi ketika konsentrasi gas mulia 0% (m^2/s)

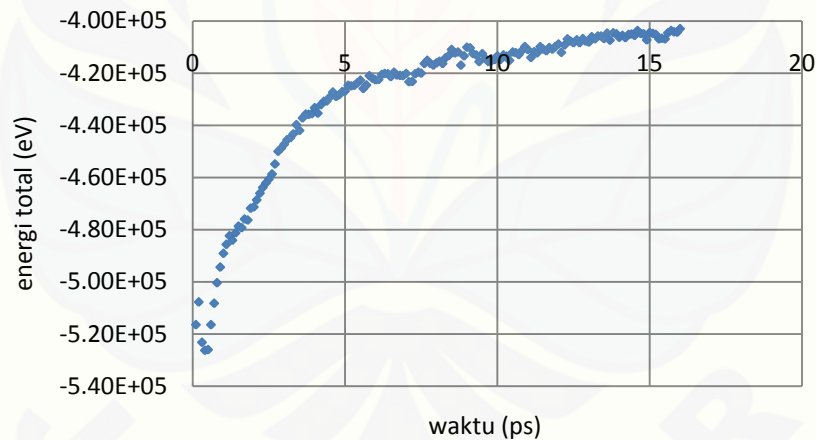
$D_{terbaik}$ = koefisien difusi besi yang paling kecil (m^2/s)

BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN

Simulasi dinamika molekul pada penelitian ini dapat digunakan untuk memprediksi potensi gas mulia sebagai penghambat korosi besi dalam logam PbBi cair. Data-data yang diperoleh dari hasil simulasi dianalisis menggunakan kurva MSD, koefisien difusi dan visualisasi struktur kristal besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair.

4.1 Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair Sebelum Diinjeksi Gas Mulia

Atom-atom yang bergerak dalam sistem simulasi dapat dinyatakan mencapai kesetimbangan jika telah mengalami kenaikan energi dan pada saat tertentu energi yang dimiliki tersebut telah stabil.



Gambar 4.1 Kurva kesetimbangan energi sistem simulasi

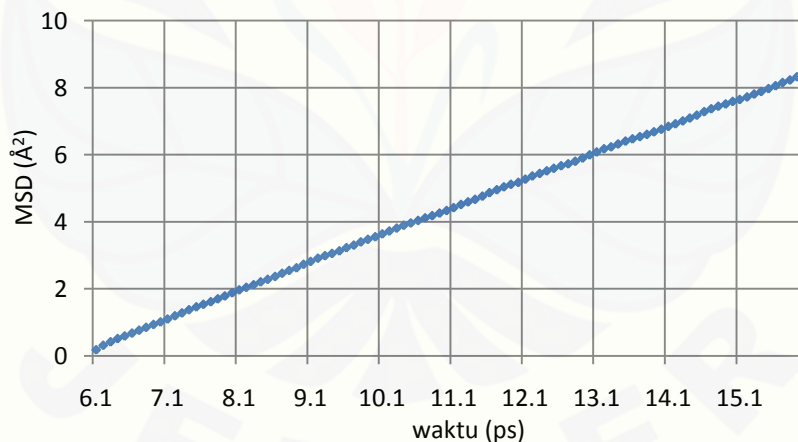
Gambar 4.1 menunjukkan bahwa pergerakan atom dalam sistem simulasi mencapai kesetimbangan energi pada waktu 6ps – 16ps. Kurva kesetimbangan ini bukan merupakan hasil akhir simulasi, namun sangat berpengaruh terhadap analisis data hasil simulasi. Jadi, analisis data hasil simulasi dilakukan sesuai dengan interval waktu tersebut.

Sumbu horizontal dalam gambar 4.1 menyatakan waktu yang dibutuhkan atom untuk bergerak selama simulasi berlangsung. Besarnya waktu tersebut diperoleh dari hasil perkalian antara $nstep$ dan $step$, dimana nilai $nstep$ dan $step$ telah ditentukan dalam input simulasi.

$$\text{waktu} = nstep \times step \quad (4.1)$$

Sedangkan energi total dalam sumbu vertikal diperoleh dari jumlah energi kinetik dan energi potensial.

Atom-atom dalam sistem simulasi tidak keseluruhan diam pada suatu tempat tetapi beberapa atom bergerak secara terus-menerus, terutama atom-atom dalam material cair dan gas. Pembatasan waktu pada sistem simulasi digunakan untuk membatasi periode gerak atom. Rata-rata perpindahan atom dikenal dengan istilah *Mean Square Displacement* (MSD). Pada kurva MSD, sumbu x menunjukkan waktu yang dibutuhkan atom untuk bergerak selama simulasi berlangsung. Satuan waktu pergerakan atom adalah ps. Sumbu y menunjukkan MSD yaitu perpindahan atom dalam skala luasan. Satuan MSD adalah \AA^2 .



Gambar 4.2 Kurva MSD besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia

Gambar 4.2 menunjukkan nilai MSD besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia. Penentuan nilai MSD dilakukan berdasarkan interval step simulasi (6ps – 16ps) dimana energi sistem telah mencapai kesetimbangan. Secara

fisis, step simulasi tersebut menyatakan waktu Bergeraknya atom selama simulasi berlangsung. Berdasarkan gambar 4.2, diperoleh bahwa kemiringan kurva MSD sebesar 0,820 (lihat lampiran A). Ketika simulasi dijalankan selama 6ps, nilai MSD masih mendekati nol. Sedangkan ketika waktu simulasi mencapai 16ps, nilai MSD mengalami kenaikan sekitar 9\AA^2 .

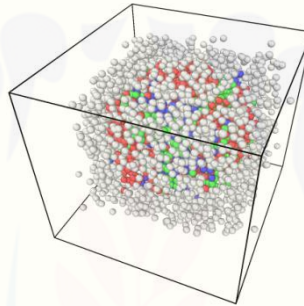
Analisis hasil simulasi yang lain dilihat melalui perhitungan nilai koefisien difusi. Adapun perhitungan nilai koefisien difusi ini dilakukan berdasarkan perolehan nilai MSD. Koefisien difusi pada konsentrasi 0% adalah $1,37 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Konsentrasi 0% artinya belum ada injeksi gas mulia terhadap logam PbBi cair. Menurut penelitian Arkundato *et al.* (2013a), diperoleh bahwa koefisien difusi besi dalam logam PbBi cair pada temperatur 750°C adalah $2,331 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Sedangkan menurut data hasil eksperimen Zhang dan Li (dalam Arkundato *et al.*, 2013a), diperoleh bahwa koefisien difusi besi dalam logam PbBi cair pada temperatur 750°C adalah $(2,27 \pm 0,11) \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Hal ini berarti koefisien difusi berada dalam rentang $(2,16 - 2,38) \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$. Berdasarkan kedua penelitian tersebut, ternyata hasil simulasi korosi besi dalam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia ini memiliki koefisien difusi dengan orde (10^{-9}) yang sama namun nilainya lebih kecil.

Pada penelitian ini, pergerakan atom yang dilihat melalui analisis data MSD dan koefisien difusi ternyata mampu mengubah struktur kristal besi. Salah satu hal yang mempengaruhi perubahan struktur tersebut adalah pemberian temperatur yang tinggi (1023 K) pada sistem simulasi. Temperatur ini dibuat konstan karena temperatur bukan merupakan besaran yang ditinjau dalam sistem simulasi.

Perubahan struktur kristal besi dapat dilihat melalui posisi atom-atom penyusunnya. Bentuk dan jumlah struktur kristal besi divisualisasikan menggunakan program OVITO. Pada temperatur 1023K struktur kristal besi adalah BCC. Jadi struktur kristal besi yang ditinjau dari hasil *running* simulasi adalah struktur kristal

BCC. Korosi besi dapat dihambat sepenuhnya jika struktur kristal besi masih utuh berbentuk BCC.

Pada hasil simulasi terdapat *file* yang berisi rekaman selama simulasi berlangsung yang disebut dengan *dump file*. *Dump file* ini memberikan informasi perubahan gerak atom berupa titik koordinat dalam sumbu XYZ. Koordinat posisi atom tersebut dapat menggambarkan bentuk dan jumlah struktur kristal besi setelah dilakukan *running* simulasi. Bentuk dan jumlah struktur kristal besi ini dapat dilihat melalui analisis CNA pada program OVITO.



Gambar 4.3 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia

Hasil visualisasi struktur kristal besi bukan hanya terdiri atas satu macam struktur kristal melainkan bermacam-macam struktur kristal. Macam-macam struktur kristal tersebut antara lain: BCC, HCP, dan FCC. Selain itu juga terdapat struktur kristal yang bentuknya tidak beraturan sehingga disebut sebagai struktur tak beraturan. Gambar 4.3 menunjukkan visualisasi fenomena korosi besi sebelum diinjeksi gas mulia. Adapun struktur kristal besi yang masih tersisa setelah dilakukan simulasi selama 16ps adalah 5,5% struktur BCC; 23,3% struktur HCP; 13,6% struktur FCC; dan 57,7% struktur tak beraturan.

Menurut penelitian Arkundato *et al.* (2013a), material besi berinteraksi sangat kuat dengan logam PbBi cair di sekitarnya. Atom-atom PbBi mampu menembus permukaan besi sehingga menyebabkan terjadinya korosi (kerusakan) besi. Pada penelitian ini besi dikatakan telah mengalami korosi jika setelah dilakukan simulasi, besi tidak dapat mempertahankan bentuk struktur kristalnya. Berdasarkan gambar 4.3

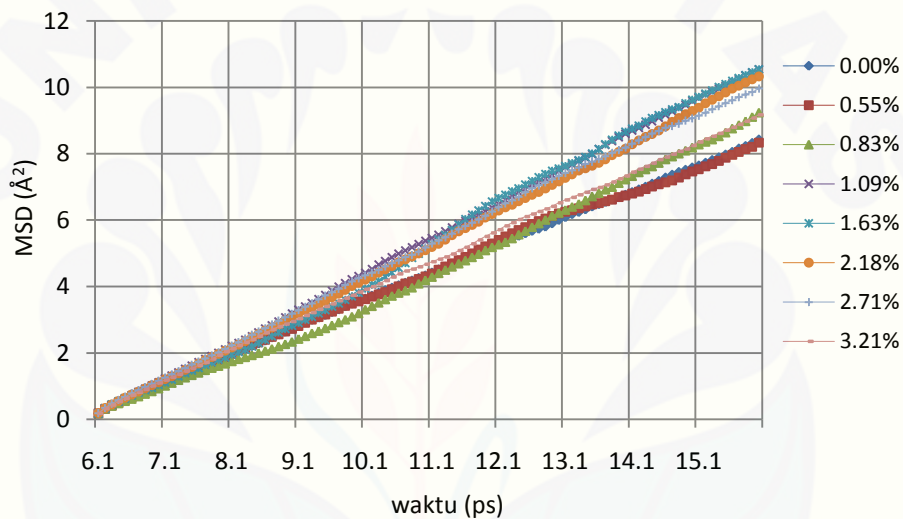
jumlah struktur kristal yang tidak beraturan lebih besar daripada jumlah struktur kristal yang masih dapat dipertahankan bentuknya (BCC, HCP, dan FCC).

4.2 Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair Setelah Diinjeksi Gas Mulia

4.2.1 Analisis *Mean Square Displacement* (MSD)

Berikut ini beberapa macam gas mulia yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair untuk menghambat korosi besi, antara lain:

1. Helium

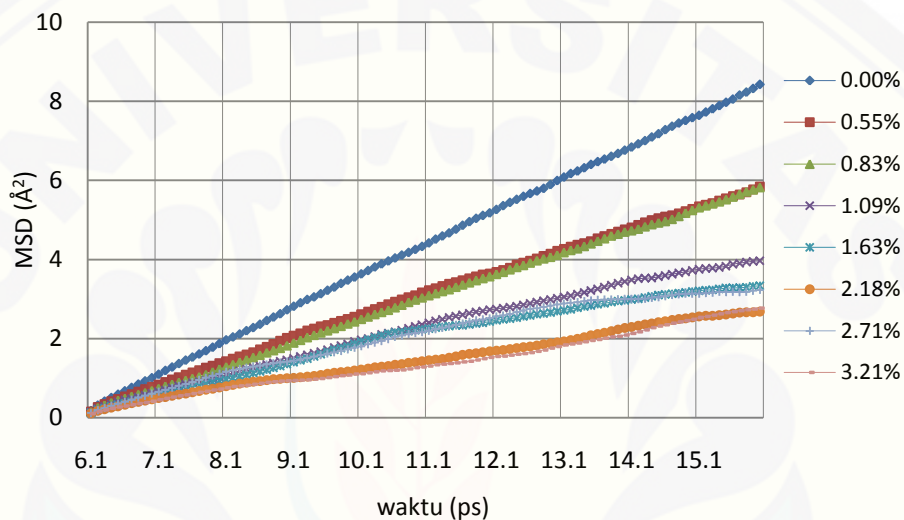


Gambar 4.4 Kurva MSD besi dengan kandungan Helium yang berbeda

Gambar 4.4 merupakan kurva MSD dari besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan 7 variasi konsentrasi Helium. Variasi konsentrasi Helium yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair diperoleh dari variasi persentase jumlah atom logam PbBi cair dan jumlah Helium secara keseluruhan. Keterangan variasi konsentrasi Helium dapat dilihat di sebelah kanan kurva MSD. Berdasarkan gambar 4.4 diperoleh bahwa bahwa kemiringan kurva MSD yang paling rendah ditunjukkan oleh konsentrasi Helium 0,55% dengan nilai kemiringan sebesar 0,816 (lihat lampiran A.1). Laju korosi yang rendah digambarkan oleh kemiringan kurva MSD yang paling rendah (Arkundato *et al.*, 2013b). Konsentrasi > 0,55%

justru memiliki kemiringan kurva MSD yang lebih tinggi (lihat lampiran A.1) dibandingkan dengan keadaan awal besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair sebelum diinjeksi Helium. Jadi berdasarkan analisis data hasil simulasi menggunakan MSD, Helium dapat diasumsikan sangat kurang efektif dalam menghambat korosi besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair.

2. Neon

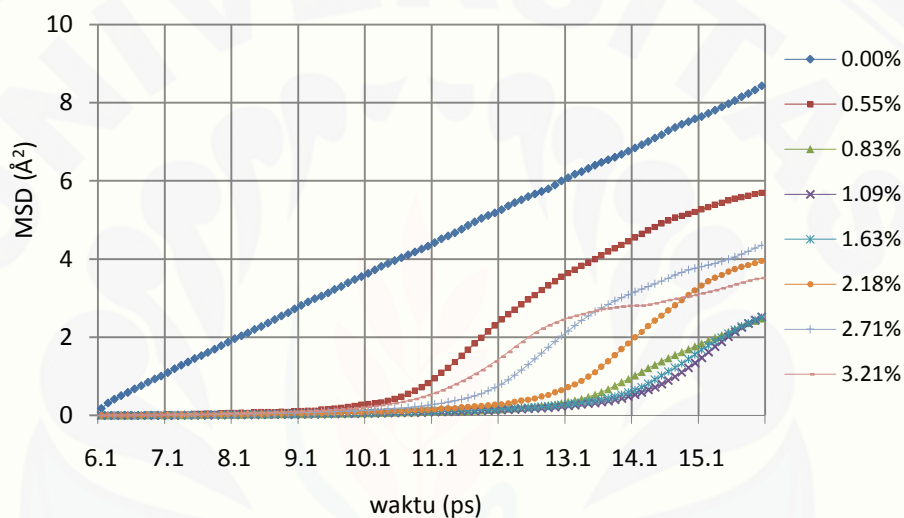


Gambar 4.5 Kurva MSD besi dengan kandungan Neon yang berbeda

Gambar 4.5 merupakan kurva MSD besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan 7 variasi konsentrasi Neon. Berdasarkan gambar tersebut, kemiringan kurva MSD paling rendah ditunjukkan oleh konsentrasi Neon 3,21% dengan nilai kemiringan sebesar 0,249 (lihat lampiran A.2). Hal ini berarti korosi besi dapat dihambat dengan menginjeksikan Neon ke dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi sekitar 3,21%. Pada gambar tersebut terlihat bahwa injeksi konsentrasi Neon ke dalam logam PbBi memiliki kemiringan kurva MSD yang lebih rendah daripada sebelum diinjeksi konsentrasi Neon. Jika dibandingkan dengan Helium, maka kemiringan kurva MSD dengan injeksi Neon lebih rendah daripada kemiringan kurva MSD dengan injeksi Helium. Jadi dapat diasumsikan bahwa Neon cukup lebih baik dalam menghambat korosi besi dalam logam PbBi cair.

3. Argon

Argon merupakan salah satu unsur gas mulia yang paling banyak dijumpai di atmosfer dibandingkan dengan Helium dan Neon (Achmad, 1992). Selain itu massa Argon lebih besar daripada massa Helium atau massa Neon (Winter, 1993). Jumlah kandungan Argon yang digunakan dalam sistem simulasi diperoleh dari variasi persentase jumlah atom logam PbBi cair dan jumlah atom Argon secara keseluruhan.

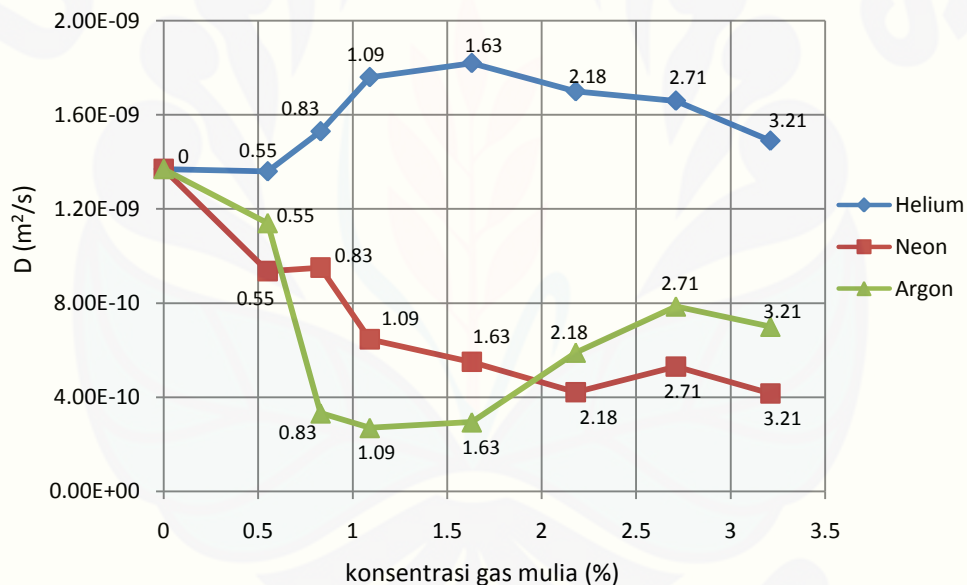


Gambar 4.6 Kurva MSD besi dengan kandungan Argon yang berbeda

Gambar 4.6 merupakan kurva MSD dari besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan 7 variasi konsentrasi Argon. Berdasarkan gambar tersebut, ketika atom bergerak dalam interval waktu 6ps – 12ps kemiringan kurva MSD sangat rendah bahkan mendekati nilai nol. Adapun kemiringan kurva MSD yang paling rendah ditunjukkan oleh konsentrasi Argon 1,09% dimana nilai kemiringan kurva MSD besi adalah 0,162 (lihat lampiran A.3). Kemiringan kurva MSD besi dengan kandungan Argon yang berbeda memiliki nilai yang lebih rendah daripada kemiringan kurva MSD besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia. Jika dibandingkan dengan Helium dan Neon, kemiringan MSD besi dengan kandungan Argon juga memiliki nilai kemiringan lebih rendah.

4.2.2 Analisis Kurva Koefisien Difusi

Analisis data hasil simulasi selain menggunakan MSD juga menggunakan koefisien difusi. Hasil trayektori pergerakan atom setelah dilakukan simulasi dapat digunakan untuk menghitung nilai koefisien difusi dalam menganalisis korosi besi dalam logam PbBi cair. Nilai koefisien difusi secara tidak langsung telah menggambarkan laju difusi. Laju difusi tersebut berbanding lurus dengan laju korosi besi. Semakin rendah nilai koefisien difusi maka semakin rendah laju korosi besi. Sebaliknya semakin tinggi nilai koefisien difusi maka semakin tinggi pula laju korosi besi (Arkundato *et al.*, 2013b). Menurut persamaan Arrhenius, koefisien difusi merupakan perbandingan antara MSD dan waktu simulasi (Tilley, 2013).



Gambar 4.7 Koefisien difusi besi dalam logam PbBi cair dengan injeksi gas mulia

Gambar 4.7 menunjukkan nilai koefisien difusi besi yang direpresentasikan melalui kurva. Logam PbBi cair yang diinjeksi Helium memiliki koefisien difusi paling kecil dengan nilai $1,36 \times 10^{-9} m^2/s$ dimana konsentrasi Helium adalah 0,55%. Hasil analisis data menggunakan koefisien difusi pada Helium ini sesuai dengan analisis data menggunakan kurva MSD. Berdasarkan persamaan 3.3, laju korosi besi yang

dapat direduksi oleh Helium hanya sebesar 0,73%. Reduksi ini dihitung dengan membandingkan nilai koefisien difusi besi sebelum diinjeksi gas mulia dan nilai koefisien difusi yang paling rendah. Konsentrasi > 0,55% justru menaikkan tingkat korosi besi. Jadi dapat diasumsikan bahwa Helium sangatlah kurang efektif dalam menghambat korosi besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair.

Logam PbBi cair yang diinjeksi gas Neon memiliki koefisien difusi paling kecil dengan nilai $4,16 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$ dimana konsentrasi Neon adalah 3,21%. Berdasarkan persamaan 4.2, reduksi laju korosi besi yang diinjeksi Neon pada konsentrasi 3,21% adalah 69,64%. Pada konsentrasi 2,18% juga memiliki koefisien difusi yang cukup kecil yaitu $4,21 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Reduksi laju korosi besi yang diinjeksi Neon pada konsentrasi 2,18% adalah 69,27%. Perbandingan reduksi korosi besi antara konsentrasi 3,21% dan 2,18% memiliki selisih yang cukup kecil. Jadi berdasarkan perhitungan reduksi dan analisis koefisien difusi, korosi besi dapat dihambat dengan menginjeksikan Neon dalam rentang konsentrasi 2,18% – 3,21% ke dalam logam PbBi cair. Pada konsentrasi tersebut, reduksi korosi besi yang diperoleh adalah 69,27% – 69,64%. Jadi dapat dikatakan bahwa Neon cukup efektif dalam menghambat korosi besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair.

Berdasarkan gambar 4.7 ditunjukkan bahwa koefisien difusi paling rendah ketika diberi injeksi Argon dengan konsentrasi 1,09% – 1,63%. Pada interval tersebut terjadi penghambatan laju korosi yang cukup stabil. Dari gambar 4.7 dapat dikelompokkan menjadi tiga daerah penghambatan korosi besi antara lain: (1) injeksi Argon di bawah konsentrasi 1,09% menunjukkan koefisien difusi masih tergolong tinggi, (2) injeksi Argon di antara konsentrasi 1,09% – 1,63% menunjukkan terjadi penghambatan korosi secara maksimum, (3) injeksi Argon di atas konsentrasi 1,63% muncul kembali kenaikan laju korosi. Jadi korosi besi dalam logam PbBi cair dapat dihambat dengan menginjeksikan konsentrasi Argon paling sedikit 1,09% dan paling banyak 1,63%.

Koefisien difusi paling kecil berada dalam rentang $2,70 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{s}$ – $2,94 \times 10^{-10} \text{m}^2/\text{s}$. Berdasarkan persamaan 4.2, konsentrasi Argon sebanyak 1,09% dapat mereduksi laju korosi besi sebesar 80,29%. Sedangkan ketika konsentrasi Argon 1,63% laju korosi besi dapat tereduksi sebesar 78,54%. Dengan demikian Argon dapat mereduksi laju korosi besi dalam rentang 78,54% – 80,29%. Perhitungan laju korosi besi tersebut menunjukkan bahwa masih terjadi korosi pada besi meskipun logam PbBi cair di sekitar besi telah diinjeksi gas mulia. Jadi peran gas mulia yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair ini hanya sebatas menghambat terjadinya korosi besi.

4.2.3 Analisis Struktur Kristal Menggunakan Program OVITO

Analisis data hasil simulasi selain menggunakan kurva MSD dan koefisien difusi juga menggunakan visualisasi struktur kristal besi dalam logam PbBi cair. Proses visualisasi dilakukan menggunakan program OVITO. Berdasarkan program tersebut kemudian dapat dianalisis bentuk dan jumlah struktur kristal besi melalui CNA.

Tabel 4.1 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Helium yang berbeda

Konsentrasi Helium (%)	Struktur kristal			
	BCC (%)	HCP (%)	FCC (%)	Struktur tak beraturan (%)
0,55	2,3	20,2	17,6	60,0
0,83	6,0	21,8	13,9	58,3
1,09	1,3	18,2	16,6	63,9
1,63	3,6	18,6	15,8	62,0
2,18	1,0	25,4	9,1	64,5
2,71	0,4	26,4	11,4	61,8
3,21	0,3	31,6	10,6	57,6

Tabel 4.1 menunjukkan visualisasi jumlah struktur kristal besi setelah dilakukan simulasi selama 16ps. Pada tabel tersebut diketahui bahwa jumlah struktur kristal

BCC besi paling banyak adalah 6% dengan konsentrasi Helium yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair adalah 0,83%.

Tabel 4.2 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Neon yang berbeda

Konsentrasi Neon (%)	Struktur kristal			
	BCC (%)	HCP (%)	FCC (%)	Struktur tak beraturan (%)
0,55	1,0	37,4	15,1	46,5
0,83	5,5	31,4	17,3	45,8
1,09	1,2	47,5	10,7	40,5
1,63	1,7	43,1	15,8	39,4
2,18	0,6	42,8	18,8	37,8
2,71	0,8	40,1	21,1	38,0
3,21	1,2	45,6	16,6	36,6

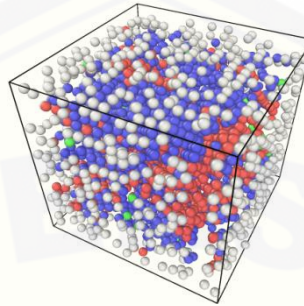
Tabel 4.2 menunjukkan jumlah struktur kristal besi setelah dilakukan simulasi selama 16ps dimana besi diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan injeksi konsentrasi Neon yang bervariasi. Pada tabel tersebut terlihat bahwa struktur kristal BCC besi yang paling banyak adalah 5,5% dimana konsentrasi Neon yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair adalah 0,83%.

Tabel 4.3 Jumlah struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon yang berbeda

Konsentrasi Argon (%)	Struktur kristal			
	BCC (%)	HCP (%)	FCC (%)	Struktur tak beraturan (%)
0,55	28,7	33,1	3,3	34,9
0,83	41,7	26,7	3,4	28,2
1,09	42,3	25,9	4,1	27,7
1,63	43,2	26,9	2,2	27,7
2,18	37,6	30,6	4,6	27,3
2,71	34,5	34,0	3,1	28,4
3,21	33,1	33,4	5,8	27,7

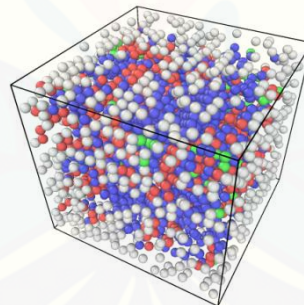
Tabel 4.3 menunjukkan jumlah struktur kristal besi setelah dilakukan simulasi selama 16ps dimana besi diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan injeksi konsentrasi Argon yang bervariasi. Pada tabel tersebut terlihat bahwa struktur kristal BCC besi

yang paling banyak ketika konsentrasi Argon sebesar 1,63%. Berikut ini visualisasi struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon sebesar 1,63%.



Gambar 4.8 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon 1,63%

Struktur kristal BCC besi ditunjukkan oleh warna biru. Pada konsentrasi 1,63% (gambar 4.8), jumlah struktur kristal BCC besi yang tersisa setelah dilakukan simulasi selama 16ps adalah 43,2%. Selain konsentrasi Argon 1,63%, terdapat konsentrasi lain yang memiliki jumlah struktur kristal BCC cukup besar yaitu konsentrasi Argon 1,09%.



Gambar 4.9 Struktur kristal besi dalam logam PbBi cair dengan konsentrasi Argon 1,09%

Pada konsentrasi 1,09% (gambar 4.9), jumlah struktur kristal BCC besi yang tersisa setelah dilakukan simulasi selama 16ps adalah 42,3%. Berdasarkan ketiga macam visualisasi struktur kristal besi, ternyata Argon paling baik dalam mempertahankan struktur kristal BCC besi. Hal ini terbukti ketika besi yang diletakkan di tengah

logam PbBi cair dengan diinjeksi Argon memiliki jumlah struktur kristal BCC yang paling banyak dibandingkan dengan injeksi Helium dan Neon.

Hasil penghambatan korosi besi menggunakan analisis CNA memiliki sedikit perbedaan dengan analisis menggunakan kurva MSD dan koefisien difusi. Pada analisis MSD dan koefisien difusi, korosi besi dapat dihambat secara optimal dengan menginjeksikan Argon pada konsentrasi 1,09%. Namun pada analisis CNA, korosi besi dapat dihambat secara optimal dengan menginjeksikan Argon pada konsentrasi 1,63%. Selisih kedua perbedaan konsentrasi ini tidak terlalu jauh ketika dibandingkan dengan keadaan awal besi sebelum diinjeksi gas mulia. Jika struktur kristal (BCC, HCP, dan FCC) pada konsentrasi 1,09% dan 1,63% dijumlahkan dan dirata-ratakan maka diperoleh jumlah struktur kristal yang sama. Ketika dua konsentrasi Argon yang diinjeksikan memiliki jumlah struktur kristal yang sama maka lebih baik menggunakan konsentrasi Argon yang memiliki jumlah lebih kecil. Secara logika, semakin sedikit jumlah konsentrasi yang digunakan maka dapat diasumsikan semakin efisien.

Berdasarkan ketiga analisis data hasil simulasi, struktur kristal besi hanya dapat diamati dengan jelas menggunakan program OVITO. Pada program tersebut, selain dapat mengetahui bentuk struktur kristal juga dapat menentukan jumlah struktur kristal. Sedangkan pada analisis data menggunakan kurva MSD, cukup sulit untuk menentukan jumlah konsentrasi gas mulia yang paling efektif dalam menghambat korosi besi. Garis-garis MSD yang menunjukkan variasi konsentrasi gas mulia sedikit saling berhimpit satu sama lain, misalnya pada kurva MSD besi dengan kandungan Argon yang berbeda (gambar 4.6). Pada gambar tersebut cukup sulit untuk membedakan garis MSD yang paling mendekati garis nol (sumbu x). Nilai MSD berpengaruh terhadap perhitungan koefisien difusi. Analisis data menggunakan koefisien difusi hanya dapat memperkirakan laju korosi besi tanpa melihat secara langsung struktur kristal besi. Jadi, pada penelitian ini program OVITO dapat dikatakan lebih efektif dalam menganalisis data hasil simulasi.

Menurut penelitian Arkundato *et al.* (2013a), simulasi korosi besi dalam logam PbBi cair dengan inhibitor oksigen pada temperatur 750°C dapat mengalami reduksi hingga 92,16%. Reduksi tersebut diperoleh ketika besi telah mengalami korosi pada permukaannya sehingga injeksi oksigen dalam logam PbBi cair tersebut hanya untuk menghambat korosi bagian dalam besi bukan korosi dari permukaan besi. Selain itu, oksigen merupakan salah satu unsur yang mudah bereaksi dengan unsur-unsur lain di sekitarnya (Winter, 1993). Jadi diperkirakan bahwa oksigen lama-kelamaan juga akan bereaksi dengan besi maupun logam PbBi cair.

Berdasarkan sifat fisika gas mulia, Argon memiliki titik leleh rendah, titik didih tinggi dan kalor penguapan yang rendah menunjukkan bahwa terdapat ikatan Van der Waals yang sangat lemah antar atom (Achmad, 1992). Selain itu, jumlah elektron valensi Argon juga telah terisi penuh. Elektron valensi merupakan elektron yang berada di kulit terluar suatu atom. Ketika elektron valensi suatu atom telah terisi penuh, maka atom tersebut cenderung sangat sukar untuk melepas satu elektronnya (Chang, 2005). Hal inilah yang diduga menjadi salah satu penyebab bahwa Argon sangat sukar bereaksi dengan unsur-unsur di sekitarnya. Jadi Argon yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair hanya membentuk lapisan pelindung pada permukaan besi tanpa bereaksi dengan besi maupun logam PbBi cair.

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Beberapa kesimpulan yang diperoleh berdasarkan hasil penelitian korosi besi dalam logam PbBi cair dengan inhibitor gas mulia menggunakan simulasi dinamika molekul, antara lain:

1. Besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair sebelum diinjeksi gas mulia memiliki tingkat korosi yang lebih tinggi jika dibandingkan dengan besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair setelah diinjeksi gas mulia.
2. Berdasarkan ketiga macam unsur gas mulia (Helium, Neon, dan Argon) yang diinjeksikan ke dalam logam PbBi cair diperoleh bahwa Argon paling efektif dalam menghambat korosi besi. Argon mampu mereduksi laju korosi besi hingga 80,29%. Perolehan nilai ini dapat dikatakan cukup baik jika dibandingkan dengan penelitian yang menggunakan inhibitor oksigen. Hal ini karena oksigen mudah bereaksi dengan unsur-unsur lain di sekitarnya sedangkan Argon sangat sukar bereaksi dengan unsur-unsur di sekitarnya. Jadi, Argon hanya membentuk lapisan pelindung pada permukaan besi tanpa bereaksi dengan besi tersebut. Selain itu, Argon merupakan salah satu gas mulia di atmosfer yang memiliki jumlah paling banyak.

5.2 Saran

Penelitian penghambatan korosi besi kebanyakan dilakukan dengan cara simulasi. Pada dasarnya simulasi menggunakan metode dinamika molekul hanyalah sebatas pendekatan. Jadi hasil simulasi yang diperoleh pun belum bisa dikatakan akurat sepenuhnya. Oleh karena itu perlu dilakukan penelitian lebih lanjut, misalnya simulasi dengan jumlah atom yang lebih banyak, waktu yang lebih lama, atau

penelitian secara eksperimen. Selain itu juga dapat dilakukan simulasi dengan pemberian injeksi konsentrasi gas mulia yang lebih banyak. Hal ini bertujuan supaya hasil yang diperoleh dapat dikatakan lebih akurat.



DAFTAR PUSTAKA

Buku

- Achmad, H. 1992. *Kimia Unsur dan Radiokimia*. Bandung: PT Citra Aditya Bakti.
- Beiser, A. 1990. *Konsep Fisika Modern Edisi Keempat*. Jakarta: Erlangga.
- Chang, R. 2005. *Kimia Dasar Jilid 1 Edisi 3*. Jakarta: Erlangga.
- Cotton dan Wilkinson. 1989. *Kimia Anorganik Dasar*. Jakarta: UI-Press.
- Fried, G.H., dan Hademenos, G.J. 2005. Terjemahan oleh Damaring Tyas. *Schaum's Outlines Biologi Edisi Kedua*. Jakarta: Erlangga.
- Griebel, M., Knapek, S., dan Zumbusch, G., 2007. *Numerical Simulation in Molecular Dynamics*. Germany: Springer Berlin Heidelberg New York.
- Keenan, Kleinfelter, dan Wood. 1992. Terjemahan oleh Aloysius Hadyana Pudjaatmaka. *Ilmu Kimia untuk Universitas*. Jakarta: Erlangga.
- Kittel, C. 2005. *Introduction to Solid State Physics*. Amerika: John Wiley & Sons, Inc.
- Kusminarto. 2011. *Esensi Fisika Modern*. Yogyakarta: CV Andi Offset.
- Linsley, T. 2004. *Instalasi listrik Dasar*. Jakarta: Erlangga.
- Miisra, P. 2015. *Applied Spectroscopy and The Science of Nanomaterials*. New York: Springer.
- Oxtoby, Gillis, dan Nachtrieb. 2001. Terjemahan oleh Suminar. *Prinsip-Prinsip Kimia Modern Edisi Keempat Jilid 1*. Jakarta: Erlangga.
- Oxtoby, Gillis, dan Nachtrieb. 2003. *Prinsip-Prinsip Kimia Modern Edisi Keempat Jilid 2*. Jakarta: Erlangga.

- Pepperhoff, W. dan Acet, M. 2001. *Constitution and Magnetism of Iron and Its Alloys*. Germany: Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.
- Puri, R.K. dan Babbar, V.K. 2001. *Solid State Physics and Electronics*. New Delhi: S. Chand & Company Ltd.
- Refson, K. 2001. *Moldy User's Manual*. Oxford: Revision 2.25.2.6 for release 2.16.
- Tipler. 1998. Terjemahan oleh Lea Prasetio dan Rahmad W. Adi. *Fisika untuk Sains dan Teknik*. Jakarta: Erlangga.
- Tilley, R.J.D. 2013. *Understanding Solids: The Sciences of Materials*. Amerika: John Wiley & Sons Ltd.
- Tuckerman, M.E. 2010. *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*. New York: Oxford University Press Inc.

Jurnal

- Adler, J. 2003. Molecular Dynamic Simulations of Cooper using Moldy. Cornell University, National High Magnetic Field Laboratory.
- Arkundato, Su'ud, Abdullah, dan Sutrisno. 2013a. Molecular Dynamic Simulation on Iron Corrosion-Reduction in High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic. *Turk J Physc. Tubitak*. No. 37: 132-144.
- Arkundato, Su'ud, Abdullah, Sutrisno, dan Cellino. 2013b. Inhibition of Iron Corrosion in High Temperature Stagnant Liquid Lead: A Molecular Dynamics Study. *Annals of Nuclear Energy* 62 (2013) 298-306. Elsevier Ltd.
- Belashchenko, D.K. dan Ostrovskii, O.I. 2006. The Embedded Atom Model for Liquid Metas: Liquid Gallium and Bismuth Chemical Thermodynamics and Thermo-Chemistry. *Russian Journal of Physical Chemistry* 80, No. 4 pp 509-522, Pleiades Publishing Inc.
- Haryani, N dan Fitriyani, D. 2013. Pengaruh Variasi Bahan Pendingin Jenis Logam Cair Terhadap Kinerja Termalhidrolik Pada Reaktor Cepat. *Jurnal Fisika Unand* Vol. 2, No. 3. ISSN 2302-8491.
- Kupryazhkin, Zhiganov, Risovany, Nekrassov, dan Golovanov. 2008. Simulation of Diffusion of oxygen and Uranium in Uranium Dioxide Nanocrystals. *J. Nucl. Mater.* 372, 233.

Stukowski, A. 2010. Visualization and Analysis of Atomic Simulation Data with OVITO-the Open Visualization Tool. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 18 015012.

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

Tesis

Arkundato, Su'ud, Abdullah, dan Sutrisno. 2014. "Study of Corrosion Inhibition of Pure Iron in Liquid Pb and PbBi Coolant of Fast Reactor by Molecular Dynamics Simulation Method". Bandung: ITB.

Disertasi

Arkundato, A. 2013. "Pengembangan Komputasi Skala Besar dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja Pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul". Disertasi. Jember: Universitas Jember.

Internet

Winter, M. 1993. *Web Elements Periodic Table* [online]. The University of Sheffield and Webelements Ltd. www.webelements.com [23 Maret 2015].

LAMPIRAN A. HASIL PENENTUAN MSD

A.1 MSD Besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan injeksi Helium

Nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
61000	6.1	0.176576	0.1782469	0.1762373	0.1800232	0.1788834	0.18326	0.187335	0.1816102
62000	6.2	0.3168807	0.3157735	0.3164468	0.3297229	0.3368303	0.336379	0.345258	0.3272539
63000	6.3	0.4178282	0.4093315	0.4029098	0.4364298	0.4449222	0.446673	0.471447	0.4319029
64000	6.4	0.5090543	0.4999348	0.4776312	0.541291	0.544809	0.547001	0.579139	0.5345092
65000	6.5	0.5928226	0.5801227	0.5472785	0.6315675	0.6340194	0.643716	0.677035	0.6314523
66000	6.6	0.678828	0.6649987	0.6120543	0.7262785	0.7206766	0.739192	0.78093	0.7288415
67000	6.7	0.7645334	0.7468872	0.6868474	0.8252651	0.8074111	0.833057	0.880633	0.8178826
68000	6.8	0.8485067	0.8300432	0.7630584	0.9242877	0.8811004	0.924855	0.97133	0.909049
69000	6.9	0.9300989	0.923696	0.8414576	1.018487	0.9530515	1.018612	1.065349	1.0085783
70000	7	1.009797	1.0106368	0.9249415	1.118786	1.0346874	1.111853	1.157774	1.1006972
71000	7.1	1.0987063	1.090933	1.008812	1.2196214	1.1122465	1.204115	1.254335	1.1869094
72000	7.2	1.1946789	1.1683462	1.0940708	1.3167715	1.2016784	1.290993	1.357666	1.2716515
73000	7.3	1.2808048	1.2540914	1.1803456	1.4163228	1.2986834	1.382726	1.452285	1.3586831
74000	7.4	1.3677909	1.3440118	1.2548496	1.5151889	1.3909035	1.480491	1.544253	1.4524344
75000	7.5	1.4547396	1.4290855	1.3288328	1.6197171	1.469101	1.575411	1.645244	1.5423768
76000	7.6	1.5315233	1.5223203	1.4004836	1.7236452	1.5519495	1.673498	1.738831	1.6247259
77000	7.7	1.6099756	1.6086898	1.4787432	1.8190246	1.6406735	1.77889	1.832882	1.713926
78000	7.8	1.692861	1.6978454	1.5440607	1.9064398	1.723935	1.870383	1.926921	1.8180462
79000	7.9	1.7818607	1.7847042	1.6041173	1.9987197	1.7949819	1.962104	2.01533	1.9312499
80000	8	1.8745092	1.8744545	1.674262	2.111783	1.8667543	2.0617	2.117508	2.0433712
81000	8.1	1.967351	1.9730067	1.7465728	2.211896	1.9515771	2.160859	2.222079	2.1274616
82000	8.2	2.0404992	2.0757939	1.8117351	2.2993884	2.0260229	2.248177	2.326327	2.2230527
83000	8.3	2.1146442	2.1560107	1.8694121	2.397434	2.0955163	2.355978	2.433991	2.3204122
84000	8.4	2.1995631	2.2364808	1.9295726	2.5063897	2.1898157	2.464705	2.547556	2.4072526
85000	8.5	2.2777212	2.320219	1.9942435	2.6211323	2.3000994	2.566685	2.644042	2.5024938
86000	8.6	2.361965	2.3994805	2.0598148	2.7357193	2.398946	2.667571	2.745415	2.6073683

Lanjutan		Konsentrasi							
nstep	waktu (ps)	0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
87000	8.7	2.4570975	2.4811106	2.1231483	2.8338733	2.5050796	2.754432	2.856913	2.7047021
88000	8.8	2.5432772	2.5598344	2.1932631	2.9437305	2.6161808	2.866588	2.972794	2.7935386
90000	9	2.7264909	2.727724	2.3338718	3.1867425	2.8229836	3.083772	3.179325	2.9477262
91000	9.1	2.8168906	2.8092519	2.4200094	3.2990142	2.9062941	3.180392	3.287564	3.0362763
92000	9.2	2.9048348	2.9081058	2.5025729	3.4007075	2.9985948	3.276039	3.388752	3.1301941
93000	9.3	2.9880845	3.0023461	2.5918751	3.5066858	3.0939516	3.367667	3.492607	3.2142941
94000	9.4	3.0529044	3.0750219	2.6578829	3.6172617	3.1913347	3.452176	3.616659	3.3135817
95000	9.5	3.1331191	3.1588526	2.742148	3.7441005	3.2930518	3.55447	3.727439	3.4005808
96000	9.6	3.2206119	3.2482768	2.8312974	3.8692019	3.3940872	3.675999	3.827741	3.4783485
97000	9.7	3.3007449	3.3291718	2.9203002	3.993756	3.4938537	3.781474	3.931972	3.5714945
98000	9.8	3.3954336	3.4153634	3.0012934	4.1067535	3.6040573	3.897289	4.047965	3.6560167
99000	9.9	3.4766966	3.4834519	3.0933325	4.2189605	3.7103615	4.007402	4.154625	3.7406798
100000	10	3.5535645	3.5498396	3.1907413	4.3138329	3.815196	4.107403	4.249059	3.8335002
101000	10.1	3.6350882	3.6191664	3.3045278	4.4143366	3.9375641	4.198891	4.335709	3.9169915
102000	10.2	3.7202434	3.6930009	3.4092354	4.5271852	4.0486534	4.299872	4.410928	3.9968028
103000	10.3	3.8105991	3.7629513	3.5122613	4.6571672	4.1612243	4.411234	4.501054	4.0813069
104000	10.4	3.8880899	3.8315987	3.6122265	4.7670674	4.2965208	4.508891	4.602982	4.1798567
105000	10.5	3.9621895	3.9218757	3.718293	4.8823263	4.4227325	4.610165	4.700264	4.28524
106000	10.6	4.0370298	4.0097334	3.8079859	4.9899559	4.5639352	4.727694	4.789197	4.3819899
107000	10.7	4.1105	4.0940868	3.8778483	5.0840672	4.7068138	4.814107	4.885009	4.4700559
108000	10.8	4.1783748	4.1492056	3.9670016	5.1813014	4.8609449	4.893577	4.951091	4.5323701
109000	10.9	4.2553079	4.2250143	4.0864677	5.2807346	4.9903991	4.989524	5.053846	4.5970493
110000	11	4.3300239	4.3072	4.1896429	5.3720656	5.1302276	5.088681	5.179785	4.6716688
111000	11.1	4.4166887	4.3953792	4.2886444	5.4570614	5.279343	5.186844	5.293161	4.7498586
112000	11.2	4.5135323	4.5071007	4.4013455	5.5562125	5.4121556	5.284798	5.384765	4.8248781
113000	11.3	4.5927564	4.6029471	4.5007316	5.6661932	5.5503608	5.413079	5.484186	4.8951643
114000	11.4	4.6694438	4.6992381	4.5972707	5.7760867	5.6975972	5.543329	5.595848	4.977346
115000	11.5	4.7645797	4.7964832	4.6918618	5.8815121	5.8622724	5.662732	5.722102	5.0828443
116000	11.6	4.8640153	4.89566	4.7843594	5.972009	6.0246367	5.757429	5.825416	5.1852373

Lanjutan									
nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
117000	11.7	4.9545495	5.0026185	4.8833455	6.0685896	6.1590352	5.85429	5.91898	5.2856096
118000	11.8	5.0391285	5.1155142	4.9804479	6.1530879	6.2850839	5.950451	6.024045	5.4011903
119000	11.9	5.1129073	5.2069558	5.089727	6.2648596	6.4196216	6.072333	6.129483	5.5129652
120000	12	5.1760818	5.2962189	5.1850337	6.3756142	6.5587096	6.175573	6.259425	5.6130201
121000	12.1	5.2631122	5.3989684	5.2654046	6.4814267	6.6627945	6.28641	6.388212	5.7114523
122000	12.2	5.3593531	5.5079004	5.3404743	6.6070516	6.762963	6.381344	6.50287	5.8262262
123000	12.3	5.4426513	5.6059603	5.4504174	6.7266615	6.8668448	6.463271	6.59128	5.9226434
124000	12.4	5.5186634	5.6999668	5.5650739	6.8378561	6.9567936	6.566293	6.70074	6.0216524
125000	12.5	5.5954301	5.7905346	5.6719352	6.9396741	7.068516	6.665042	6.843221	6.1095238
126000	12.6	5.6666181	5.8835379	5.7911572	7.0627594	7.1775633	6.762357	6.959326	6.1842797
127000	12.7	5.7296534	5.9731492	5.9011503	7.1521319	7.2911055	6.849381	7.042786	6.266118
128000	12.8	5.7973138	6.0508436	6.0092988	7.2532404	7.3825665	6.950399	7.135142	6.3368568
129000	12.9	5.8936247	6.1297277	6.1313792	7.3617305	7.4814916	7.05472	7.233622	6.4210995
130000	13	5.9943613	6.2045805	6.2199922	7.4815597	7.5490087	7.160271	7.335664	6.5249926
131000	13.1	6.0821942	6.2511698	6.3085762	7.5971382	7.6260784	7.269833	7.418637	6.6124151
132000	13.2	6.1713013	6.2990454	6.4021882	7.681513	7.7165702	7.379611	7.500998	6.6863945
133000	13.3	6.2352594	6.3553661	6.4899323	7.7873783	7.8040698	7.487605	7.588749	6.7682109
134000	13.4	6.3160799	6.4152457	6.5957555	7.8797449	7.8995834	7.557548	7.690207	6.8397236
135000	13.5	6.4021407	6.4686814	6.7154568	7.9839169	8.0076802	7.634973	7.75857	6.9243334
136000	13.6	6.4717861	6.5145667	6.8168588	8.1394763	8.1358258	7.724235	7.840603	6.9865826
137000	13.7	6.5362532	6.571682	6.9206287	8.265279	8.2803367	7.826663	7.926267	7.0599715
138000	13.8	6.6072827	6.6198671	6.9995195	8.3853444	8.4195623	7.955068	8.02557	7.1507552
139000	13.9	6.6783387	6.6967473	7.1179697	8.4993739	8.5467744	8.05105	8.111974	7.2504231
140000	14	6.7605831	6.7469979	7.225934	8.5997984	8.6629119	8.151245	8.187973	7.335923
141000	14.1	6.8398496	6.7971165	7.3282671	8.6974018	8.7565013	8.277988	8.298142	7.4487862
142000	14.2	6.9206634	6.8609155	7.4420985	8.7818538	8.8401624	8.395097	8.407478	7.5401173
143000	14.3	7.0023782	6.9332219	7.5313762	8.8783167	8.9716966	8.506599	8.500177	7.6259272
144000	14.4	7.0946974	7.0128115	7.6202889	8.9843554	9.0756647	8.592776	8.604127	7.7164323
145000	14.5	7.1769046	7.0814128	7.7250631	9.0852258	9.1578338	8.691787	8.687445	7.8201492

Lanjutan		Konsentrasi							
nstep	waktu (ps)	0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
146000	14.6	7.2795048	7.1361771	7.83265	9.1759007	9.2427255	8.825369	8.781553	7.898512
147000	14.7	7.3660796	7.1957629	7.9193543	9.2809868	9.3377294	8.959444	8.83785	7.9909689
148000	14.8	7.4472848	7.2795848	8.0073578	9.3807781	9.4018465	9.076725	8.903583	8.0740386
149000	14.9	7.5137295	7.3785738	8.0966779	9.4739966	9.5160349	9.190364	8.994749	8.1430482
150000	15	7.5833287	7.4612658	8.1893276	9.5825685	9.6191195	9.281188	9.067696	8.24538
151000	15.1	7.642803	7.5338688	8.2795015	9.6878872	9.7085732	9.383442	9.14551	8.3593333
152000	15.2	7.7252026	7.621855	8.3620121	9.7877898	9.8083788	9.512343	9.237544	8.4503885
153000	15.3	7.8077608	7.6916143	8.4324432	9.8709586	9.9001787	9.622824	9.342515	8.5326179
154000	15.4	7.8880008	7.7798266	8.5296579	9.9600074	10.010842	9.726199	9.429597	8.6140456
155000	15.5	7.9718005	7.878023	8.6411642	10.038816	10.095734	9.839605	9.528886	8.7069931
156000	15.6	8.051785	7.9648908	8.7624833	10.121507	10.193959	9.956558	9.613324	8.7958372
157000	15.7	8.1538097	8.0499769	8.8711516	10.246342	10.275461	10.04245	9.706501	8.8858983
158000	15.8	8.2295584	8.1361119	8.9822309	10.361762	10.36072	10.13997	9.786298	8.9851148
159000	15.9	8.3212887	8.2101191	9.1106718	10.447005	10.456004	10.24067	9.857742	9.0808626
160000	16	8.4254422	8.3334833	9.242773	10.54125	10.538171	10.32541	9.963298	9.1740749

A.2 MSD Besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan injeksi Neon

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
61000	6.1	0.176576	0.1607567	0.1483461	0.1439676	0.1244734	0.111944	0.119768	0.1047918
62000	6.2	0.3168807	0.2714496	0.2519713	0.2325813	0.1938819	0.174166	0.192631	0.1592959
63000	6.3	0.4178282	0.3492035	0.3164658	0.2888169	0.2347586	0.214711	0.247569	0.1981077
64000	6.4	0.5090543	0.4187555	0.3795111	0.347357	0.283552	0.253928	0.303633	0.2387271
65000	6.5	0.5928226	0.4786364	0.4371964	0.4010856	0.3256254	0.290398	0.354185	0.2709571
66000	6.6	0.678828	0.5371005	0.4855924	0.4473922	0.3622922	0.328676	0.403967	0.2987992
67000	6.7	0.7645334	0.5985726	0.5363646	0.4851136	0.3988694	0.368065	0.457065	0.3268356
68000	6.8	0.8485067	0.6599335	0.5842609	0.5257829	0.4347348	0.402312	0.509985	0.3600354
69000	6.9	0.9300989	0.7250302	0.6323966	0.5713223	0.473889	0.432933	0.559954	0.3896522
70000	7	1.009797	0.7853319	0.6827636	0.6213373	0.513608	0.466577	0.609107	0.4226993
71000	7.1	1.0987063	0.8408201	0.7365652	0.6649203	0.5554553	0.496931	0.659647	0.4558241
72000	7.2	1.1946789	0.9023805	0.794893	0.7044855	0.5963787	0.528527	0.70829	0.4906538
73000	7.3	1.2808048	0.9666874	0.8429369	0.758478	0.6380226	0.55909	0.756583	0.5271992
74000	7.4	1.3677909	1.0293553	0.8936559	0.806413	0.6783956	0.590945	0.807235	0.5567789
75000	7.5	1.4547396	1.0917767	0.9407598	0.8477955	0.7193395	0.617395	0.853093	0.5844774
76000	7.6	1.5315233	1.146023	0.9900011	0.8874692	0.7659433	0.647687	0.902526	0.6125038
77000	7.7	1.6099756	1.2048023	1.0336734	0.9220328	0.805783	0.678602	0.958033	0.642864
78000	7.8	1.692861	1.264793	1.0894776	0.9554468	0.8542004	0.710709	1.011828	0.6730752
79000	7.9	1.7818607	1.3159331	1.1586261	0.9886403	0.8968425	0.734938	1.061539	0.6987135
80000	8	1.8745092	1.3780129	1.229323	1.0363862	0.9322794	0.767898	1.109818	0.7277557
81000	8.1	1.967351	1.4328125	1.2841029	1.0865372	0.9693178	0.801052	1.162193	0.7565914
82000	8.2	2.0404992	1.4976997	1.3426672	1.1370891	1.0096558	0.831965	1.198402	0.7874991
83000	8.3	2.1146442	1.549877	1.4038088	1.1864656	1.0474176	0.861325	1.230969	0.8090517
84000	8.4	2.1995631	1.5966726	1.4627325	1.2266251	1.0871245	0.892485	1.268717	0.8255656
85000	8.5	2.2777212	1.6532228	1.5221002	1.2684003	1.1323517	0.914377	1.297279	0.8443415
86000	8.6	2.361965	1.72493	1.581233	1.3086396	1.1710213	0.933188	1.319352	0.8712973
87000	8.7	2.4570975	1.7920429	1.6439485	1.3451794	1.2135095	0.955472	1.351759	0.8979112
88000	8.8	2.5432772	1.8677588	1.6991303	1.3896974	1.256898	0.974846	1.37999	0.9128592

Lanjutan

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
89000	8.9	2.6272829	1.9445447	1.7572763	1.4252119	1.3095237	0.989086	1.396688	0.925644
90000	9	2.7264909	2.0157401	1.8220128	1.4642976	1.3555437	1.002895	1.417552	0.9332589
91000	9.1	2.8168906	2.074717	1.8924024	1.5050476	1.4022399	1.01422	1.441193	0.9410513
92000	9.2	2.9048348	2.1357912	1.9602849	1.5505528	1.4513204	1.030184	1.474847	0.9490542
93000	9.3	2.9880845	2.2051564	2.0284191	1.5908652	1.4972271	1.043976	1.509769	0.9613902
94000	9.4	3.0529044	2.2563461	2.0871335	1.6307159	1.5521694	1.061342	1.548411	0.9771742
95000	9.5	3.1331191	2.3089994	2.1482883	1.6699825	1.6085601	1.087105	1.584818	0.9932055
96000	9.6	3.2206119	2.3469065	2.2011775	1.7224415	1.6671893	1.112481	1.619142	1.0143545
97000	9.7	3.3007449	2.3972145	2.2581583	1.7776171	1.7210454	1.137695	1.653306	1.0429237
98000	9.8	3.3954336	2.4477883	2.3141505	1.8229419	1.7635272	1.156702	1.689861	1.0634473
99000	9.9	3.4766966	2.4980141	2.3742281	1.8658069	1.8048178	1.170858	1.729439	1.0826843
100000	10	3.5535645	2.5525867	2.4269542	1.9266527	1.8631876	1.193311	1.76958	1.1017302
101000	10.1	3.6350882	2.6157139	2.491195	1.968915	1.9206221	1.221048	1.805153	1.1153976
102000	10.2	3.7202434	2.6837381	2.5511441	2.0040701	1.9785572	1.248949	1.857533	1.1393632
103000	10.3	3.8105991	2.7491541	2.6129037	2.0504299	2.0305987	1.27564	1.900999	1.1633463
104000	10.4	3.8880899	2.8039795	2.6665356	2.1045046	2.0764427	1.29473	1.940624	1.1828187
105000	10.5	3.9621895	2.8703384	2.7203882	2.144001	2.126271	1.312991	1.988343	1.1952529
106000	10.6	4.0370298	2.9292468	2.7850277	2.1765361	2.1589495	1.340805	2.043096	1.2032885
107000	10.7	4.1105	2.9894882	2.8504731	2.2112874	2.1697262	1.358865	2.07597	1.214099
108000	10.8	4.1783748	3.0450646	2.9203344	2.2587731	2.1861478	1.388065	2.113657	1.2352987
109000	10.9	4.2553079	3.0964264	2.9806651	2.3071223	2.213458	1.405641	2.138602	1.2634895
110000	11	4.3300239	3.1675361	3.0345043	2.3492004	2.237081	1.433395	2.161185	1.2828317
111000	11.1	4.4166887	3.2233279	3.0899287	2.4023632	2.2522026	1.452995	2.198557	1.3058167
112000	11.2	4.5135323	3.2695327	3.1432012	2.4456177	2.2796537	1.47106	2.240137	1.3357619
113000	11.3	4.5927564	3.3316279	3.194882	2.4901017	2.3059059	1.487495	2.272108	1.3567342
114000	11.4	4.6694438	3.3856501	3.2414979	2.5397982	2.3227148	1.516679	2.304204	1.3711834
115000	11.5	4.7645797	3.4276567	3.3037015	2.5724911	2.3344616	1.555771	2.346397	1.390103
116000	11.6	4.8640153	3.4731293	3.3618649	2.6003119	2.3394883	1.591648	2.385871	1.4108597

Lanjutan

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
117000	11.7	4.9545495	3.5235358	3.415517	2.6433033	2.3572141	1.613767	2.424571	1.430435
118000	11.8	5.0391285	3.5692847	3.4717271	2.6724329	2.3813139	1.635223	2.459118	1.4602916
119000	11.9	5.1129073	3.6174404	3.5232403	2.6975687	2.4039978	1.655969	2.484398	1.4914888
120000	12	5.1760818	3.6470897	3.5702227	2.7274335	2.432744	1.678027	2.513406	1.5228612
121000	12.1	5.2631122	3.6811697	3.6289647	2.7479511	2.4666343	1.694678	2.560739	1.5452963
122000	12.2	5.3593531	3.7328674	3.6818177	2.774504	2.4886797	1.716501	2.586425	1.5602902
123000	12.3	5.4426513	3.7922274	3.745488	2.799148	2.5076775	1.740728	2.622839	1.5824997
124000	12.4	5.5186634	3.8703006	3.8049155	2.8219536	2.5323247	1.763699	2.667131	1.6017379
125000	12.5	5.5954301	3.9178671	3.8546271	2.8520112	2.5608319	1.787704	2.709291	1.6228207
126000	12.6	5.6666181	3.9676124	3.9164098	2.8899857	2.5874732	1.807123	2.74814	1.6478462
127000	12.7	5.7296534	4.0223889	3.9732653	2.9272889	2.6166872	1.829533	2.765431	1.6754766
128000	12.8	5.7973138	4.0869472	4.0218564	2.9547137	2.6326202	1.856679	2.796444	1.7131027
129000	12.9	5.8936247	4.1466024	4.0614775	2.9921147	2.6560187	1.88713	2.831933	1.7571938
130000	13	5.9943613	4.2166526	4.1116424	3.0230099	2.6886051	1.905654	2.860872	1.7984088
131000	13.1	6.0821942	4.267159	4.1796202	3.0544029	2.7169797	1.931361	2.88408	1.8370643
132000	13.2	6.1713013	4.3201285	4.2348639	3.0866176	2.7446932	1.965018	2.90542	1.864073
133000	13.3	6.2352594	4.3695205	4.2761891	3.1253009	2.7827747	1.996448	2.923368	1.8861511
134000	13.4	6.3160799	4.4110993	4.3356214	3.1670283	2.8132304	2.037301	2.948127	1.9186535
135000	13.5	6.4021407	4.4572175	4.4021515	3.2123843	2.8413008	2.083027	2.96599	1.9528727
136000	13.6	6.4717861	4.5300958	4.4685504	3.2528236	2.8682493	2.118707	2.979471	1.9797027
137000	13.7	6.5362532	4.5939439	4.5313177	3.3053221	2.8951581	2.147872	2.985432	2.0110352
138000	13.8	6.6072827	4.6427513	4.600081	3.3533829	2.9255205	2.19228	2.988936	2.0394315
139000	13.9	6.6783387	4.7027879	4.6460428	3.3993066	2.9524577	2.236247	2.996428	2.0588619
140000	14	6.7605831	4.7604484	4.6990676	3.4430141	2.9661876	2.272318	3.000773	2.0892133
141000	14.1	6.8398496	4.8061015	4.7330711	3.4862557	2.994932	2.295518	3.001991	2.1271167
142000	14.2	6.9206634	4.8700948	4.7742979	3.5120733	3.0108519	2.325552	3.000562	2.1719913
143000	14.3	7.0023782	4.9343042	4.8327407	3.5274083	3.0370258	2.357877	3.006848	2.2213016
144000	14.4	7.0946974	4.9947944	4.8874125	3.5343967	3.0736736	2.387949	3.033105	2.2744981
145000	14.5	7.1769046	5.0424251	4.9301047	3.5642823	3.1038249	2.416015	3.046282	2.3128817

Lanjutan

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
146000	14.6	7.2795048	5.0849788	4.9665547	3.599447	3.1195576	2.444437	3.071406	2.3486707
147000	14.7	7.3660796	5.1139448	5.0218531	3.6268855	3.141674	2.471791	3.098283	2.386716
148000	14.8	7.4472848	5.164818	5.0953851	3.6590028	3.1571307	2.49893	3.11967	2.4202196
149000	14.9	7.5137295	5.2214978	5.1767206	3.6868459	3.1718456	2.519078	3.132074	2.4508384
150000	15	7.5833287	5.2794847	5.2462534	3.7229431	3.1920569	2.543482	3.134467	2.4878353
151000	15.1	7.642803	5.3413563	5.3150762	3.7531362	3.2131212	2.563768	3.137332	2.5294474
152000	15.2	7.7252026	5.3784153	5.3639644	3.7753777	3.2302191	2.578075	3.149205	2.5602353
153000	15.3	7.8077608	5.4219964	5.4137842	3.7836926	3.2359026	2.581771	3.159831	2.5913242
154000	15.4	7.8880008	5.4894345	5.464534	3.7992057	3.2559295	2.599528	3.182416	2.6259576
155000	15.5	7.9718005	5.5457427	5.5186598	3.8327125	3.2797009	2.616353	3.178184	2.652892
156000	15.6	8.051785	5.6041742	5.5857966	3.8795326	3.2824413	2.634567	3.182443	2.6809508
157000	15.7	8.1538097	5.6382901	5.6554412	3.9066694	3.2898401	2.662992	3.178137	2.7049644
158000	15.8	8.2295584	5.6973046	5.7159107	3.9319911	3.3003817	2.668732	3.179522	2.7243145
159000	15.9	8.3212887	5.771936	5.7677873	3.9531644	3.3224061	2.66661	3.207461	2.7421809
160000	16	8.4254422	5.8429746	5.8248911	3.9673069	3.3403764	2.685418	3.230882	2.7674028

A.3 MSD Besi yang diletakkan di tengah logam PbBi cair dengan injeksi Argon

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
61000	6.1	0.176576	0.0011516	0.000478	0.0005418	0.0002888	0.000234	0.000402	0.0005973
62000	6.2	0.3168807	0.0033008	0.0011602	0.0007759	0.0006539	0.000512	0.000974	0.0012156
63000	6.3	0.4178282	0.0052362	0.0017282	0.0011179	0.0009264	0.00103	0.001493	0.0020278
64000	6.4	0.5090543	0.0069658	0.0031813	0.001588	0.0013913	0.001523	0.002246	0.0028454
65000	6.5	0.5928226	0.0083847	0.003569	0.0020429	0.0019385	0.002255	0.00308	0.0037983
66000	6.6	0.678828	0.0106373	0.0038298	0.0026968	0.0024971	0.00284	0.004059	0.0050305
67000	6.7	0.7645334	0.0117666	0.0043068	0.0036251	0.0033482	0.003671	0.005078	0.0063543
68000	6.8	0.8485067	0.0137019	0.0046742	0.0041961	0.0040014	0.004512	0.006221	0.0078734
69000	6.9	0.9300989	0.0144383	0.0053846	0.0049784	0.0047566	0.005583	0.007437	0.0096319
70000	7	1.009797	0.0188714	0.006308	0.0057776	0.0054991	0.006736	0.008815	0.0118052
71000	7.1	1.0987063	0.0237974	0.0069501	0.006634	0.0064288	0.00793	0.010452	0.0139172
72000	7.2	1.1946789	0.026531	0.0081318	0.0080082	0.0075008	0.009245	0.012345	0.0165432
73000	7.3	1.2808048	0.026133	0.0098357	0.008736	0.0086304	0.010453	0.014178	0.0194691
74000	7.4	1.3677909	0.0270595	0.0109259	0.0095196	0.0096511	0.01209	0.016298	0.0223533
75000	7.5	1.4547396	0.0292284	0.0115333	0.0108637	0.0107951	0.013781	0.018202	0.0255335
76000	7.6	1.5315233	0.031279	0.0127379	0.0119913	0.0119489	0.015298	0.020369	0.0282912
77000	7.7	1.6099756	0.0373771	0.0136989	0.0131972	0.0133905	0.016977	0.023132	0.0315371
78000	7.8	1.692861	0.0427736	0.0147265	0.0142035	0.0152223	0.018643	0.02589	0.0348286
79000	7.9	1.7818607	0.0489421	0.016012	0.0154062	0.0166087	0.020515	0.02852	0.0382906
80000	8	1.8745092	0.0536007	0.0170289	0.0164411	0.018172	0.022524	0.031368	0.0424305
81000	8.1	1.967351	0.0576372	0.0181101	0.0179157	0.0198109	0.02492	0.0346	0.0465268
82000	8.2	2.0404992	0.0645291	0.0199493	0.0197297	0.0214168	0.026861	0.037531	0.0503931
83000	8.3	2.1146442	0.0675177	0.0211755	0.0208288	0.0230587	0.029116	0.040835	0.0546693
84000	8.4	2.1995631	0.0742821	0.0226555	0.0223303	0.0249271	0.031393	0.04406	0.059349
85000	8.5	2.2777212	0.07868	0.02484	0.0242	0.0266616	0.034016	0.047245	0.0640218
86000	8.6	2.361965	0.0817225	0.026231	0.0260802	0.0281359	0.036508	0.050781	0.0691162
87000	8.7	2.4570975	0.0846531	0.0283285	0.0274332	0.0299657	0.039043	0.054684	0.0750479
88000	8.8	2.5432772	0.0889946	0.0296241	0.0289357	0.0318246	0.041919	0.059012	0.0806349

Lanjutan

nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
89000	8.9	2.6272829	0.0938801	0.0305199	0.0309166	0.0338859	0.044726	0.063346	0.0864298
90000	9	2.7264909	0.0986625	0.0324212	0.0325092	0.0362047	0.047482	0.067356	0.0920407
91000	9.1	2.8168906	0.1029247	0.034543	0.0341896	0.0383333	0.050335	0.072189	0.0994157
92000	9.2	2.9048348	0.1141297	0.0367694	0.0364299	0.0404024	0.052991	0.077087	0.1072571
93000	9.3	2.9880845	0.1259695	0.0394215	0.0386641	0.0423904	0.056169	0.082148	0.1163998
94000	9.4	3.0529044	0.1451065	0.0406804	0.0407854	0.0444807	0.060048	0.087626	0.1245551
95000	9.5	3.1331191	0.1587395	0.0418706	0.0431527	0.0473019	0.063982	0.094393	0.1340323
96000	9.6	3.2206119	0.1703728	0.04413	0.0459215	0.0497895	0.067539	0.099951	0.1443765
97000	9.7	3.3007449	0.189312	0.04693	0.0488453	0.0522249	0.071815	0.104717	0.155208
98000	9.8	3.3954336	0.2121585	0.0497449	0.0516055	0.0551961	0.076465	0.111052	0.167427
99000	9.9	3.4766966	0.2386316	0.0516977	0.0535161	0.0578694	0.080854	0.117411	0.1821234
100000	10	3.5535645	0.2676018	0.0540873	0.0560214	0.0604981	0.084738	0.124474	0.1987312
101000	10.1	3.6350882	0.285998	0.0574621	0.0585305	0.0638272	0.089127	0.132126	0.2174766
102000	10.2	3.7202434	0.3029952	0.0607754	0.0608876	0.0669054	0.094738	0.141334	0.2385479
103000	10.3	3.8105991	0.3265827	0.0642614	0.0636742	0.0705374	0.09999	0.151672	0.2607338
104000	10.4	3.8880899	0.3667489	0.0682498	0.0661855	0.0744645	0.105008	0.163482	0.284062
105000	10.5	3.9621895	0.4170909	0.0707358	0.0688336	0.0783262	0.111215	0.176566	0.3119592
106000	10.6	4.0370298	0.4737267	0.07901	0.0711323	0.0814071	0.117166	0.189635	0.3439888
107000	10.7	4.1105	0.5453694	0.0820585	0.0747971	0.0879606	0.124354	0.203014	0.3779798
108000	10.8	4.1783748	0.6281832	0.0839171	0.0775762	0.0920118	0.130933	0.219045	0.41892
109000	10.9	4.2553079	0.7204951	0.0881836	0.0815978	0.0972668	0.137925	0.23648	0.464244
110000	11	4.3300239	0.8305018	0.0920801	0.0852098	0.1011596	0.145892	0.258455	0.5158499
111000	11.1	4.4166887	0.9524036	0.0965027	0.0919993	0.1043608	0.156907	0.283078	0.5735941
112000	11.2	4.5135323	1.0850138	0.101387	0.0966959	0.1078875	0.169342	0.310688	0.6405054
113000	11.3	4.5927564	1.2224688	0.1055399	0.1001724	0.113583	0.181006	0.339899	0.7135402
114000	11.4	4.6694438	1.3680736	0.1108126	0.1039299	0.1203699	0.191448	0.373423	0.7925668
115000	11.5	4.7645797	1.518804	0.1140406	0.1082154	0.1258313	0.20307	0.410325	0.8740985
116000	11.6	4.8640153	1.673745	0.1182453	0.1155292	0.131807	0.214029	0.451278	0.9606978
117000	11.7	4.9545495	1.8376805	0.1232122	0.1206015	0.1394605	0.225412	0.498581	1.0550994

Lanjutan									
nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
118000	11.8	5.0391285	1.9904296	0.1329185	0.1250082	0.1465829	0.238517	0.556851	1.1551364
119000	11.9	5.1129073	2.1419343	0.1402687	0.1295567	0.1522974	0.252851	0.627109	1.2626457
120000	12	5.1760818	2.2995855	0.1470197	0.1355742	0.1591482	0.269081	0.709292	1.3744105
121000	12.1	5.2631122	2.4512514	0.158722	0.1428217	0.1683342	0.288764	0.801593	1.4958248
122000	12.2	5.3593531	2.5820797	0.1712267	0.1522744	0.1777883	0.314772	0.909118	1.6242759
123000	12.3	5.4426513	2.7118951	0.1822114	0.1615717	0.1849315	0.344783	1.031176	1.751613
124000	12.4	5.5186634	2.8372446	0.1955362	0.1690153	0.1919459	0.375687	1.162933	1.8774719
125000	12.5	5.5954301	2.9630745	0.2116019	0.1780876	0.2003531	0.40486	1.301384	2.0004262
126000	12.6	5.6666181	3.0793113	0.2302319	0.1863861	0.2109982	0.437464	1.446927	2.1123553
127000	12.7	5.7296534	3.2113344	0.2506743	0.1944493	0.2233611	0.4788	1.59462	2.2142316
128000	12.8	5.7973138	3.322517	0.2681185	0.204271	0.2368625	0.527627	1.744992	2.3024691
129000	12.9	5.8936247	3.4309891	0.2876954	0.2181231	0.2542624	0.58571	1.88836	2.376339
130000	13	5.9943613	3.5438528	0.3181005	0.2360805	0.2707798	0.648549	2.025585	2.4395428
131000	13.1	6.0821942	3.6449146	0.3514442	0.252805	0.2899039	0.71909	2.164071	2.4920911
132000	13.2	6.1713013	3.7329981	0.3858373	0.268728	0.3101967	0.797756	2.297456	2.5431983
133000	13.3	6.2352594	3.8178984	0.4259986	0.2870856	0.3303248	0.887408	2.42797	2.5892538
134000	13.4	6.3160799	3.9139173	0.4752432	0.3078614	0.3513601	0.989632	2.544478	2.6316618
135000	13.5	6.4021407	3.9946578	0.53307	0.3271757	0.3771971	1.107448	2.64979	2.677988
136000	13.6	6.4717861	4.0888634	0.5989217	0.345651	0.4077935	1.241047	2.748834	2.7154817
137000	13.7	6.5362532	4.1874231	0.6749564	0.3749446	0.4438135	1.383709	2.842385	2.7371644
138000	13.8	6.6072827	4.2757015	0.7643316	0.402116	0.4833107	1.536014	2.930484	2.7577014
139000	13.9	6.6783387	4.3647245	0.853359	0.4374434	0.5300797	1.691335	3.008625	2.7792369
140000	14	6.7605831	4.452878	0.9333652	0.485471	0.5864225	1.845121	3.083306	2.7955086
141000	14.1	6.8398496	4.5485782	1.0226957	0.5381694	0.6490186	1.993932	3.15766	2.8054391
142000	14.2	6.9206634	4.6395846	1.1166519	0.5958053	0.7202982	2.139649	3.228979	2.8107962
143000	14.3	7.0023782	4.7308381	1.2095578	0.6563324	0.8104965	2.280686	3.294917	2.828549
144000	14.4	7.0946974	4.8218579	1.2949804	0.7237793	0.9170147	2.42082	3.364274	2.8637881
145000	14.5	7.1769046	4.9077697	1.3813539	0.8030199	1.0179344	2.554847	3.43701	2.908218
146000	14.6	7.2795048	4.9828255	1.466632	0.8942734	1.1185291	2.683403	3.513481	2.9485145

Lanjutan									
nstep	waktu (ps)	Konsentrasi							
		0.00%	0.55%	0.83%	1.09%	1.63%	2.18%	2.71%	3.21%
147000	14.7	7.3660796	5.053888	1.5480172	0.9933649	1.2212353	2.814686	3.590639	2.9820615
148000	14.8	7.4472848	5.1080029	1.6230125	1.1049972	1.3290051	2.942541	3.659454	3.0114407
149000	14.9	7.5137295	5.1574945	1.6978593	1.2224029	1.4422208	3.072897	3.720155	3.0418611
150000	15	7.5833287	5.2070592	1.7682122	1.3458896	1.5583045	3.202531	3.767766	3.0765242
151000	15.1	7.642803	5.2694819	1.842604	1.479692	1.6761307	3.324384	3.806783	3.1153774
152000	15.2	7.7252026	5.329948	1.9162656	1.622996	1.7868903	3.429024	3.846921	3.155841
153000	15.3	7.8077608	5.3846611	1.9855811	1.7641006	1.8890041	3.515734	3.888754	3.1984003
154000	15.4	7.8880008	5.4436692	2.0578905	1.8901615	1.9847024	3.594617	3.94088	3.2462405
155000	15.5	7.9718005	5.497492	2.1350034	2.0166617	2.0866214	3.670449	3.997169	3.3007998
156000	15.6	8.051785	5.5387598	2.2129341	2.1423313	2.1863089	3.73717	4.053633	3.3454688
157000	15.7	8.1538097	5.5851437	2.2882377	2.2507495	2.276655	3.79634	4.120997	3.3939836
158000	15.8	8.2295584	5.6235886	2.3618632	2.3527206	2.3602513	3.848604	4.199307	3.4421104
159000	15.9	8.3212887	5.6666431	2.4240198	2.4435428	2.4344098	3.898346	4.278323	3.4821411
160000	16	8.4254422	5.6987546	2.481332	2.5233835	2.501517	3.95502	4.355695	3.5076704

LAMPIRAN B. HASIL PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI**B.1 Koefisien Difusi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Injeksi Helium**

Konsentrasi	Slope/Kemiringan	Koefisien Difusi (m ² /s)
0.00%	0.8202162	1.37E-009
0.55%	0.816083	1.36E-009
0.83%	0.9190087	1.53E-009
1.09%	1.0588778	1.76E-009
1.63%	1.0941881	1.82E-009
2.18%	1.0218078	1.70E-009
2.71%	0.9975963	1.66E-009
3.21%	0.8945915	1.49E-009

B.2 Koefisien Difusi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Injeksi Neon

Konsentrasi	Slope/Kemiringan	Koefisien Difusi (m ² /s)
0.00%	0.8202162	1.37E-009
0.55%	0.5615182	9.36E-010
0.83%	0.570615	9.51E-010
1.09%	0.3874097	6.46E-010
1.63%	0.3301108	5.50E-010
2.18%	0.2527645	4.21E-010
2.71%	0.3180095	5.30E-010
3.21%	0.2495417	4.16E-010

B.3 Koefisien Difusi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Injeksi Argon

Konsentrasi	Slope/Kemiringan	Koefisien Difusi (m ² /s)
0.00%	0.8202162	1.37E-009
0.55%	0.6843357	1.14E-009
0.83%	0.1991801	3.32E-010
1.09%	0.1622949	2.70E-010
1.63%	0.1763138	2.94E-010
2.18%	0.3542006	5.90E-010
2.71%	0.4713924	7.86E-010
3.21%	0.4198462	7.00E-010