



**FORMULASI MASSA JENIS TIMBAL CAIR SEBAGAI FUNGSI
TEMPERATUR DAN TEKANAN MENGGUNAKAN METODE
SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh

**MUHAMAD ABUL BASYAR IMANULLAH
NIM 111810201026**

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



**FORMULASI MASSA JENIS TIMBAL CAIR SEBAGAI FUNGSI
TEMPERATUR DAN TEKANAN MENGGUNAKAN METODE SIMULASI
DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh

**MUHAMAD ABUL BASYAR IMANULLAH
NIM 111810201026**

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



**FORMULASI MASSA JENIS TIMBAL CAIR SEBAGAI FUNGSI
TEMPERATUR DAN TEKANAN MENGGUNAKAN METODE
SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

SKRIPSI

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

Oleh

**MUHAMAD ABUL BASYAR IMANULLAH
NIM 111810201026**

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

PERSEMBAHAN

Skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Ayahanda Suparno dan Ibunda Heryanti, terima kasih telah memberikan segala yang saya butuhkan;
2. kakak Muhammad Bahruddin Y dan adik saya Rizky Adhi K dan keluarga besar lainnya yang selalu memberi semangat;
3. guru-guru yang telah membimbing dan mendidik secara formal maupun non-formal sejak taman kanak-kanak sampai perguruan tinggi;
4. Almamater Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

MOTTO

“Sesungguhnya Allah tidak akan mengubah suatu kaum kecuali kaum itu sendiri yang mengubah apa-apa yang ada pada diri mereka”

(QS. Ar-Ra'd:11)*



*) Departemen Agama Republik Indonesia. 2012. QS. Al-Hadi: terjemahan Terjemahan Per Kata Latin dan Kode Tajwid. Jakarta: Penerbit Satu Warna

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Muhamad Abul Basyar Imanullah

NIM : 111810201026

menyatakan dengan sesungguhnya bahwa karya ilmiah yang berjudul “Formulasi Massa Jenis Timbal Cair Sebagai Fungsi Temperatur dan Tekanan Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul” adalah karya ilmiah bersama dosen pembimbing dan saya sebagai mahasiswa, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Penelitian ini merupakan bagian dari penelitian bersama dosen dan mahasiswa, dan hanya dapat dipublikasikan dengan mencantumkan nama dosen pembimbing. Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak mana pun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata di kemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, Juni 2017

Yang menyatakan,

Muhamad Abul Basyar I
NIM 111810201026

SKRIPSI

**FORMULASI MASSA JENIS TIMBAL CAIR SEBAGAI FUNGSI
TEMPERATUR DAN TEKANAN MENGGUNAKAN METODE
SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh

**Muhamad Abul Basyar Imanullah
NIM 111810201026**

Pembimbing:

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

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Formulasi Massa Jenis Timbal Cair Sebagai Fungsi Temperatur Dan Tekanan Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul” karya Muhamad Abul Basyar Imanullah telah diuji dan disahkan secara akademis pada

hari, tanggal :

tempat : FMIPA Universitas Jember

Tim Penguji:

Ketua

Anggota I

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

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

Anggota II

Anggota III

Drs. Yuda C. Hariadi, M.Sc., Ph.D.
NIP196203111987021001

Wenny Maulina, S.Si, M.Si
NIP 198711042014042001

Mengesahkan
Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Drs. Sujito, Ph.D.
NIP 196102041987111001

RINGKASAN

Formulasi Massa Jenis Timbal Cair Sebagai Fungsi Temperatur dan Tekanan Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul; Muhamad Abul Basyar Imanullah, 111810201026; 2017; 31 halaman; Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember.

Perkembangan industri dan bidang lainnya mengalami peningkatan yang sangat cepat sehingga mengakibatkan kebutuhan energi listrik yang sangat besar pula. Hal ini mengakibatkan kekurangan sumber daya listrik untuk memenuhi kebutuhan listrik. Salah satu alternatif untuk memenuhi kebutuhan listrik tersebut adalah dengan membangun pembangkit listrik tenaga nuklir. Pembangkit listrik tenaga nuklir *fast breeder reactor* (FBR) merupakan solusi alternatif sumber daya listrik. Salah satu komponen utama dari PLTN model ini adalah pendingin cairnya. Salah satu pendingin cair dari model pembangkit ini adalah timbal cair. Timbal cair digunakan sebagai pendingin reaktor agar reaktor tidak mengalami panas yang berlebih. Investigasi tentang karakteristik pendingin reaktor pada berbagai keadaan temperatur dan tekanan sistem perlu dilakukan, agar dapat membuat sebuah sistem kontrol pendingin reaktor yang sesuai.

Pada penelitian ini, dilakukan simulasi perhitungan massa jenis timbal cair, sebagai salah satu karakteristik dasar dari bahan dengan variasi temperatur dan tekanan. Penelitian ini bertujuan untuk mendapatkan formulasi perhitungan massa jenis sebagai fungsi temperatur dan tekanan, pada keadaan ukuran dimensi sistem kubus $50 \times 50 \times 50$. Adapun variasi temperatur diberikan mulai dari temperatur 323 K hingga 1023 K dengan interval 100 K untuk setiap variasi tekanan sistem sebesar 1, 5 dan 7 atm. Simulasi dilakukan dengan menggunakan metode dinamika molekul, berbasis program LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*), dan OVITO (*Open Visualization Tools*), sebagai program pendukung untuk memvisualisasikan hasil yang diperoleh pada program LAMMPS. Adapun interaksi antar atom yang diaplikasikan dalam simulasi ini menggunakan fungsi potensial Morse.

Hasil simulasi menunjukkan bahwa massa jenis timbal cair sangat dipengaruhi oleh keadaan temperatur sistem. Analisis CNA menunjukkan bahwa kenaikan temperatur yang diberikan dapat merubah struktur kristal dari bahan, yang semula didominasi oleh struktur FCC sebesar 100%, menjadi hanya memiliki (54,1 - 55,6) % FCC saja pada temperatur 923K. Formulasi perhitungan massa jenis timbal cair sebagai fungsi temperatur dan tekanan diperoleh $\rho_{Pb} = 11233 - 0,9217 \times T$ pada variasi temperatur 323 K hingga 923 K, baik pada saat tekanan 1 atm maupun 5 atm. Adapun keadaan sistem pada saat tekanan 7 atm memiliki formulasi perhitungan massa jenis $\rho_{Pb} = 11233 - 0,9213 \times T$. Hasil tersebut didapatkan saat simulasi dilakukan dengan menggunakan sistem berukuran $50 \times 50 \times 50$. Secara umum, diperoleh hasil bahwasanya perubahan temperatur akan menyebabkan perubahan ukuran dari sistem kubus, sehingga mengakibatkan massa jenis mengalami perubahan secara teratur. Adapun perubahan tekanan pada sistem tidak menyebabkan perubahan yang cukup berarti pada massa jenis timbal,

sehingga tidak diperoleh formulasi umum untuk massa jenis sebagai fungsi dari tekanan. Potensial morse yang digunakan sebagai potensial interaksi antar atom telah dapat memberikan hasil simulasi yang baik terhadap perhitungan massa jenis sebagai fungsi temperatur.



PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT atas segala limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Formulasi Massa Jenis Timbal Cair Sebagai Fungsi Temperatur dan Tekanan Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata (S-1) pada jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember. Penulisan skripsi tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Dr.Artoto Arkundato, S.Si., M.Si., selaku Dosen Pembimbing Utama dan Endhah Purwandari, S.Si., M.Si ., selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu dan pikiran di tengah kesibukan untuk memberikan arahan, perbaikan dan dukungan dalam penyelesaian skripsi ini;
2. Drs. Yuda Cahyoargo Hariadi, M.Sc., Ph.D., selaku Dosen Penguji Utama dan Wenny Maulina, S.Si, M.Si, selaku Dosen Penguji Anggota yang telah meluangkan waktu dan pikiran di tengah kesibukan untuk menguji dan memberikan masukan demi perbaikan skripsi ini;
3. segenap dosen Jurusan Fisika Fakultas MIPA Universitas Jember yang telah menyalurkan ilmu dan memberikan motivasi selama perkuliahan;
4. Ayahanda Suparno, Ibunda Heryanti, Kakak Muhammad Bahrudin Y adik Rizky Adhi K dan Diah ayu K serta keluarga besar tercinta yang selalu memberikan doa dan semangat demi terselesaikannya skripsi ini;
5. teman-teman Fisika angkatan 11 (GP 11), teman-teman Lorenz, teman-teman komputasi, dan keluarga besar HIMAFI;
6. kakak-kakak alumni Jurusan Fisika terutama bidang komputasi terima kasih untuk arahan dan ilmunya;
7. seluruh staf dan karyawan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Jember yang telah membantu dalam hal administrasi maupun non-administrasi.

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

Jember, Juni 2017

Penulis



DAFTAR ISI

	<i>Halaman</i>
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSEMBAHAN	ii
HALAMAN MOTTO	iii
HALAMAN PERNYATAAN.....	iv
HALAMAN PEMBIMBING	v
HALAMAN PENGESAHAN.....	vi
RINGKASAN	vii
PRAKATA.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiv
DAFTAR TABEL	xv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	3
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan.....	3
1.4 Manfaat.....	3
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Dinamika molekul.....	4
2.1.1 Interaksi Antar Atom	5
2.1.2 Potensial Morse.....	5
2.1.3 LAMMPS.....	7
2.1.4 OVITO	8
2.1.5 Ensemble.....	8

2.1.6 Pengendalian Temperatur	9
2.1.7 Pengendalian Tekanan	9
2.2 Struktur Kristal	10
2.3 Timbal	12
2.4 Massa Jenis	13
BAB 3. METODE PENELITIAN	15
3.1 Rancangan penelitian	15
3.2 Jenis Sumber Data	16
3.3 Definisi Operasional Variabel dan Skala Pengukurannya....	16
3.4 Kerangka Pemecahan masalah.....	17
3.4.1 Mekanisme kegiatan simulasi.....	17
3.4.2 Metode Analisis Data.....	19
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	21
4.1 Massa Jenis Pb Cair pada Variasi Temperatur dan Tekanan pada Ukuran Sistem 50 x 50 x 50.....	21
BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN	31
5.1 Kesimpulan.....	31
5.2 Saran	31
DAFTAR PUSTAKA	33
LAMPIRAN.....	36

DAFTAR GAMBAR

	<i>Halaman</i>
2.1 Tampilan Halaman Awal Program LAMMPS.....	7
2.2 Tampilan Halaman Awal Program OVITO	8
2.3 Pemasangan Reservoir tekanan dan Kalor	10
2.4 Struktur Kristal <i>Simple Cubic</i>	11
2.5 Struktur kristal <i>Body centered cubic</i>	11
2.6 Struktur kristal <i>Face Centered Cubic</i>	11
2.7 Struktur kristal <i>Hexagonal close packed</i>	12
3.1 Rancangan kegiatan penelitian.....	15
3.2 Diagram alir mekanisme kegiatan simulasi	17
4.1 Massa jenis timbal cair dengan variasi temperatur pada tekanan 1, 5 atm dan 7 atm dengan ukuran sistem 50 x 50 x 50	23
4.2 Massa jenis timbal cair dengan variasi temperatur 323 K hingga 923 K (a) saat tekanan 1 atm, 5 atm dan tekanan 7 atm	25
4.3 Visualisasi sistem timbal cair pada variasi temperatur pada tekanan 1atm, 5 atm dan 7 atm.....	28

DAFTAR TABEL

	<i>Halaman</i>
2.1 Tabel konstanta potensial morse pada kubik metal.....	6
2.2 Sifat-sifat fisika timbal (Pb) cair.....	13
2.3 Massa jenis beberapa material	14
3.1 Variabel untuk simulasi program.....	18
4.1 Massa jenis Pb cair dengan variasi tekanan dan variasi temperatur mulai dari 323 K hingga 1023 K dengan ukuran box 50 x 50 x 50.....	22
4.2 Nilai diskrepansi massa jenis timbal cair berdasarkan formulasi dalam simulasi dan formulasi pada referensi	26
4.3 Nilai perbedaan massa jenis sistem timbal cair pada tekanan 1 atm dan 7 atm	27
4.4 Analisis CNA dari sistem timbal cair dengan ukuran sistem 50 x 50 x 50 pada beberapa tekanan	29

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan industri dan bidang lain yang relatif sangat cepat, mengakibatkan terjadinya kenaikan pula akan kebutuhan energi listrik. Namun demikian hal tersebut tidak dibarengi dengan dibangunnya sumber daya listrik untuk memenuhinya. Energi listrik tenaga air (PLTA) yang hanya mengandalkan air sebagai sumber pembangkit pada saat ini kurang diminati, karena perubahan cuaca dan iklim yang cepat berubah pada beberapa tahun belakangan ini. Demikian juga dengan energi batubara dan minyak bumi yang saat ini cadangannya semakin sedikit (Arkundato, 2013a).

Pembangkit Listrik Tenaga Nuklir (PLTN) adalah salah satu solusi alternatif pengganti sumber energi listrik yang ada. Reaktor pembiak cepat FBR adalah salah satu tipe reaktor masa depan yang menggunakan logam berat cair sebagai pendingin reaktor (*coolant*) dan tidak menggunakan air sebagai pendingin. Material pendingin Pb cair merupakan kandidat material pendingin untuk desain reaktor nuklir karena sangat menguntungkan dalam segi kimia, fisika maupun termodinamika (Zhang dan Li, 2008). Pendingin logam cair Pb bersifat tidak bereaksi aktif dengan air maupun udara sehingga tidak memicu adanya ledakan akibat proses reaksi kimia. Selain itu logam cair ini merupakan media transfer panas yang efisien yang mempunyai konduktivitas termal dan kapasitas panas yang tinggi.

Pada penelitian sebelumnya pengukuran nilai massa jenis timbal cair hanya dilakukan pada keadaan standar dan belum ada informasi tentang kemurnian dari bahan yang digunakan dalam pengukuran nilai massa jenis timbal cair yang digunakan. Penelitian ini akan mencoba menyimulasikan sistem timbal cair yang mempunyai kemurnian 100%, sehingga didapatkan data yang lebih rinci tentang pengukuran nilai massa jenis timbal cair tersebut.

Pada penelitian tugas akhir ini dilakukan pemodelan dan penghitungan nilai massa jenis dari bahan Pb cair dengan menggunakan simulasi metode dinamika molekul. Informasi ini sangat diperlukan dalam skala eksperimen, khususnya bagi

perancang reaktor nuklir. Dalam hal ini, massa jenis Pb cair akan disimulasikan untuk mendapatkan profil kebergantungannya pada nilai suhu dan tekanan $\rho(T, P)$ dari bahan. Perlu diketahui bahwa informasi ini tidak dapat diperoleh melalui kegiatan eksperimen. Oleh karena itu, hasil simulasi diharapkan dapat mendukung pemanfaatannya sebagai bahan pendingin cair dalam reaktor nuklir.

Metode dinamika molekul merupakan sebuah teknik yang digunakan untuk mensimulasikan pergerakan atom atau molekul dan sistem makroskopis seperti galaksi, di bawah fungsi potensial tertentu. Simulasi dinamika molekul memberikan informasi tentang besaran statik dan dinamik pada skala atomik. Secara umum simulasi dengan menggunakan metode dinamika molekul membutuhkan beberapa informasi terkait kondisi awal yang harus diketahui, diantaranya adalah posisi dan kecepatan awal dari seluruh atom serta energi potensial antar atom (Maulana *et al.*, 2005). Deskripsi mengenai gaya-gaya yang mempengaruhi dinamika sistem secara prinsip harus didasarkan pada mekanika kuantum, namun pendekatan mekanika klasik dapat digunakan yaitu dengan memperlakukan atom-atom atau molekul-molekul sebagai suatu titik massa, dalam batas tertentu. Model paling sederhana yang dapat digunakan untuk menjelaskan suatu materi didasarkan pada konsep atom-atom berbentuk bola yang saling berinteraksi, yang dalam hal ini disebut sebagai atom.

Pada penelitian ini, potensial Morse akan digunakan sebagai dasar interaksi antar atom, di dalam perhitungan massa jenis dari bahan Pb cair. Potensial Morse merupakan potensial yang relatif mudah digunakan dan cukup sesuai diaplikasikan pada bahan logam. Program dinamika molekul yang digunakan adalah program LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*), dimana program ini diterapkan untuk menentukan nilai massa jenis bahan Pb cair, dan program OVITO (*Open Visual Tools*) yang digunakan untuk menggambarkan stuktur dari bahan Pb cair. Analisis mendalam selanjutnya dilakukan untuk mengkaji pengaruh temperatur dan tekanan dalam mengkarakterisasi massa jenis bahan.

Pada program LAMMPS, *input* data yang biasa digunakan antara lain adalah struktur kristal bahan, massa atom bahan, *lattice* kristal bahan, dan variasi

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Dinamika molekul

Dinamika molekul merupakan metode komputasi yang dapat digunakan untuk memprediksi sifat statik maupun dinamik sebuah system, yang diturunkan secara langsung dari interaksi di tingkat atom atau molekul. Dibutuhkan dua aspek untuk dapat menjalankan program dinamika molekul. Pertama adalah menentukan model energi potensial yang mengatur hubungan antar atom atau molekul. Dari model energi potensial ini, gaya-gaya yang mempengaruhi dinamika dapat ditentukan. Kedua, menentukan numerik dan algoritma yang tepat dan efisien untuk digunakan sebagai pemecah masalah dari dinamika yang kompleks (Dipojono, 2001). Keunggulan dari simulasi dinamika molekul adalah sifat yang deterministik, artinya jika pada waktu tertentu sudah diketahui keadaannya, maka untuk waktu yang lain akan didapat nilai yang tepat untuk waktu yang lain.

Dinamika molekul pada dasarnya digunakan untuk memprediksi besaran-besaran fisis yang ingin diketahui berdasarkan model yang dirancang dan berdasarkan *input* yang diberikan. Pada dasarnya metode ini memecahkan atau mencari persamaan gerak Newton menggunakan fungsi potensial yang sesuai dengan trayektori atom (Arkundato, 2013b). Pada dinamika molekul model materi di tatanan makroskopis sangat ditentukan oleh pemahaman mengenai materi dari komponen tersebut. Meskipun deskripsi tersebut berdasarkan pada mekanika kuantum akan tetapi pendekatan menggunakan mekanika klasik, yaitu dengan memperlakukan atom sebagai suatu titik massa, yang dalam batas tertentu yang dapat digunakan (Maulana *et al*, 2005). Interaksi dalam tatanan yang paling sederhana terjadi pada pasangan atom yang memenuhi dua kriteria dasar hubungan antar atom. Kriteria yang pertama adalah interaksi tersebut harus dapat menahan tekanan pasangan yang saling berinteraksi dan akan mengalami konsekuensi yaitu pasangan yang mendekat akan merasakan gaya tolak menolak. Kriteria yang kedua adalah interaksi itu mempunyai sifat mengikat pasangan atom, sehingga akan mengalami gaya tarik-menarik jika atom itu menjauh (Lestari, 2015).

2.1.1 Interaksi Antar Atom

Ketika sebuah atom dan atom yang lain berada pada posisi yang saling berdekatan, maka akan terjadi sebuah gaya di antara kedua atom tersebut. Gaya diantara atom-atom tersebut akan menyebabkan sebuah interaksi antar atom yang dikenal sebagai ikatan antar atom. Beberapa jenis ikatan antar atom antara lain:

1. Gaya Tarik menarik (*attractive forces*) yaitu ketika molekul-molekul berinteraksi dengan jenis yang berbeda sehingga akan terjadi gaya Tarik menarik sehingga menurunkan energi potensial.
2. Gaya tolak-menolak (*repulsive forces*) yaitu ketika molekul-molekul yang mempunyai jenis yang sama akan terjadi interaksi tolak menolak akan tetapi energi potensial akan naik Karena hal tersebut (Puri dan Babbar, 2001).

2.1.2 Potensial Morse

Morse adalah nama seorang fisikawan yaitu Philip M. Morse. Potensial Morse adalah model interaksi antar atom untuk energi potensial yang berasal dari molekul diatomik. Potensial Morse adalah pendekatan terbaik untuk struktur getaran dari QHO (*Quantum Harmonic Oscillator*), karena secara eksplisit mencakup dampak hancurnya ikatan, seperti adanya kondisi terikat. Potensial Morse juga dapat digunakan untuk model interaksi antar atom. Meskipun potensial ini sangat sederhana (hanya ada 3 parameter), akan tetapi tidak digunakan dalam spektroskopi modern (Abajingin, 2012). Potensial Morse dapat ditulis sebagai berikut,

$$V(r)=D_e(1-e^{-a(r-r_e)})^2 \quad (2.1)$$

Dimana r merupakan jarak antar atom sedangkan r_e adalah jarak ikatan kesetimbangan dari atom. D_e merupakan kesetimbangan energi ikat dari sebuah atom. Energi disosiasi ikatan dapat dihitung dengan mengurangkan energi titik nol $E(0)$. Gaya konstan dari obligasi dapat ditemukan dengan ekspansi Taylor $V(r)$ dimana $r = r_e$ dari fungsi potensial energi kedua, sehingga dapat dituliskan parameter a adalah,

$$a = \sqrt{\frac{k_e}{2D_e}} \quad (2.2)$$

dengan

k_e = gaya konstan dari sumur potensial minimum

Jika potensial energi nol berubah menjadi acak, maka persamaan potensial Morse dapat ditulis ulang dengan cara menambah atau mengurangi nilai konstanta. Jika digunakan untuk model interaksi atom permukaan. Energi nol dapat didefinisikan ulang (Abajingin, 2012). sehingga potensial Morse menjadi,

$$V(r)=D_e((1-e^{-a(r-r_e)})^2-1) \quad (2.3)$$

Persamaan (3) dapat juga dituliskan sebagai berikut,

$$V(r)=D_e((e^{-2a(r-r_e)}-2e^{-a(r-r_e)}) \quad (2.4)$$

dengan r adalah koordinat yang tegak lurus ke permukaan (Morse dalam Chen, 2011). Tabel 1 merupakan nilai konstanta potensial Morse pada kubik metal.

Tabel 2.1 Konstanta potensial morse pada kubik metal

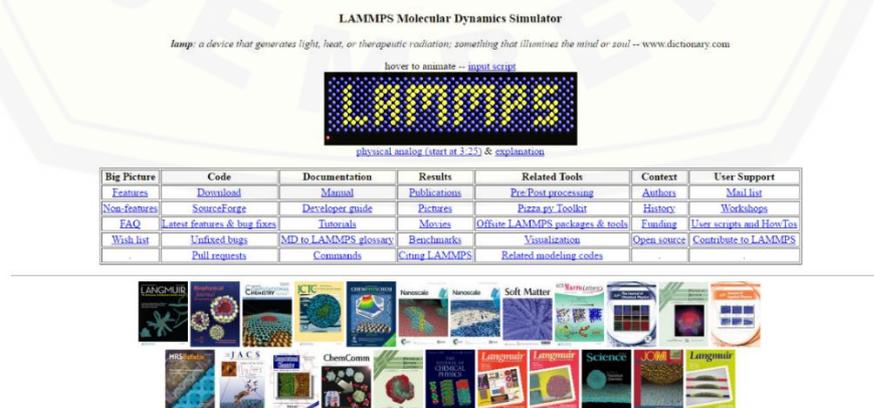
Metal	aa_0	B	$L(ev)\times 10^{-22}$	$a=A^{-1}$	$r_0=A$	$D(ev)$
Pb cair	2,921	83,02	7,073	1,1836	3,733	0,23480
Ag	2,788	71,17	10,012	1,3690	3,115	0,33230
Ni	2,500	51,78	12,667	1,4199	2,780	0,42050
Cu	2,450	2,450	49,11	10,330	1,3588	0,34290
Al	2,347	4417	8,144	1,1646	3,253`	0,27030
Ca	2,238	39,63	4,888	0,80535	4,569	0,16230
Sr	2,238	39,63	4,557	0,73776	4,988	0,15130
W	2,225	72,19	29,843	1,4116	3,032	0,9906
Cr	2,260	75,92	13,297	1,5721	2,754	0,4414
Fe	1,988	51,97	12,573	1,3885	2,845	0,4174
Ba	1,650	34,12	4,266	0,65698	5,373	0,1416
K	1,293	2,80	1,634	0,49767	6,369	0,05424
Na	1,267	23,28	1,908	0,58993	5,336	0,06334
Cs	1,260	23,14	1,351	0,41569	7,557	0,04485

(sumber: Girifalco dan Weizer, 1958)

2.1.3 LAMMPS

LAMMPS adalah sebuah program yang berisi sekumpulan kode dinamika molekul klasik, yang dapat digunakan untuk menyimulasikan perilaku partikel hingga berjumlah milyaran, baik dalam keadaan padat, cair maupun gas. Program ini dapat juga digunakan untuk model atom, polimer, biologi, logam, granular, dan sistem *coarse-grained*, menggunakan berbagai medan gaya dan kondisi batas. LAMMPS berjalan efisien pada computer atau laptop prosesor tunggal, tetapi dirancang untuk komputer paralel. LAMMPS berjalan pada mesin paralel yang mengkompilasi C++ dan mendukung pesan lewat MPI. Kode yang tersedia dalam program ini bersifat *open source* (di bawah ketentuan GNU *Public License*), yang dapat dimodifikasi sesuai keinginan. LAMMPS mengintegrasikan persamaan gerak newton untuk koleksi atom, molekul dan partikel makroskopis yang berinteraksi dengan gaya dengan kondisi awal atau kondisi batas (Camprubi, 2011)

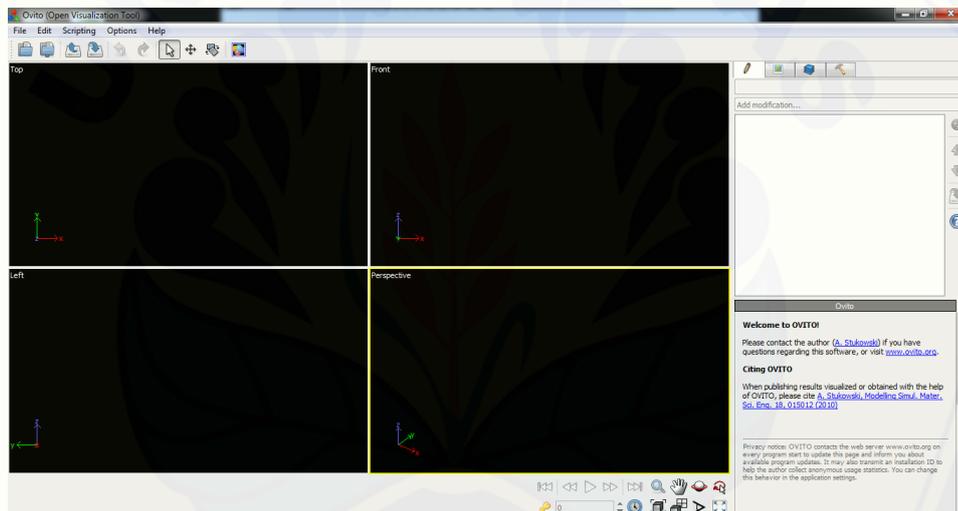
Pada halaman awal LAMMPS disuguhkan beberapa menu antara lain adalah menu Tutorial, Mail list, Feature dan lain-lain. Di dalam fitur tersebut kita dapat memperoleh informasi lebih dalam lagi tentang program LAMMPS sehingga ketika kita menggunakan LAMMPS sebagai program untuk simulasi metode dinamika molekul, kita dapat menggunakan fitur tersebut untuk membantu kita agar dapat menggunakan program LAMMPS yang benar sehingga didapatkan nilai *output* yang sesuai. Program LAMMPS dapat diunduh di halaman <http://lammps.sandia.gov/>. Gambar 2.1 merupakan halaman awal dari program LAMMPS



Gambar 2.1 Tampilan halaman awal program LAMMPS (Sumber: lammps.sandia.gov)

2.1.4 OVITO

OVITO adalah program visualisasi dan analisis ilmiah hasil data atomik dari data simulasi, OVITO dapat digunakan untuk visualisasi model 2D maupun dalam 3D. OVITO merupakan *software open source* yang digunakan sebagai pendukung dalam menganalisis data hasil simulasi dinamika molekuler, seperti LAMMPS. Program OVITO dapat digunakan untuk pengguna Windows, Linux, Mac OS. OVITO dikembangkan oleh Alexander Stukowski dari Departemen Material Sains Darmstadt University of Technology, Jerman (Stukowski, 2010). Gambar 2.2 merupakan tampilan awal dari program OVITO yang digunakan untuk memvisualisasikan data hasil simulasi.



Gambar 2.2 Tampilan awal program OVITO

2.1.5 Ensemble

Gibbs pada tahun 1902 telah memperkenalkan konsep *Ensemble*, yang berasal dari bahasa Perancis, yang berarti perakitan sistem (Das, 2011). *Ensemble* merupakan kumpulan dari sistem *independent*, yang secara makro memiliki karakteristik sama, akan tetapi secara mikro berbeda. Berikut adalah 3 *Ensemble* yang biasa digunakan, yaitu:

1. *Ensemble* Mikrokanonikal (E, V, N), merupakan *Ensemble* yang memiliki jumlah atom N dan volume yang sama dan energi potensial yang tidak berubah.

Ensemble ini diperoleh dari sistem yang terisolasi sehingga nilai (E, V, N) tidak akan terpengaruh oleh sistem lain dari luar.

2. *Ensemble* Kanonial, merupakan *Ensemble* yang mempunyai nilai suhu (T) volume dan N partikel yang sama. Dalam *Ensemble* kanonik, sistem dapat bertukar energi tetapi tidak dengan partikelnya.
3. *Ensemble* Isobarik-Isotermal. Pada *Ensemble* ini nilai tekanan (P), suhu (T), dan jumlah atom (N) dipertahankan dalam harga konstan. Dalam *Ensemble* ini nilai volume sistem dapat berubah atau menjadi variabel (Maginn, 1997).

2.1.6 Pengendalian Temperatur

Pengendalian temperature biasa digunakan pada metode dinamika molekul baik itu pada *Ensemble* kanonikal (T, V, N) maupun *Ensemble* isobarik-isotermal (N, P, T). Namun demikian, pengendalian temperatur paling baik adalah dengan melakukan eksperimen dalam laboratorium pada suhu yang konstan. Hal ini dikarenakan suhu akan lebih mudah dikendalikan dalam skala makroskopis.

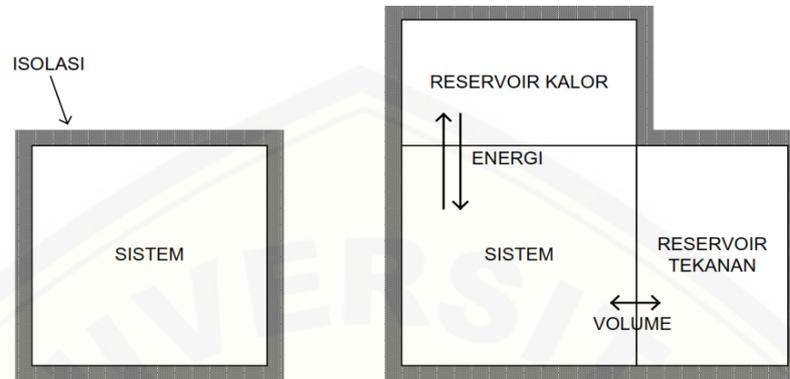
Untuk *Ensemble* isobarik-isotermal diperlukan fungsi tambahan untuk menjaga nilai temperatur tetap. Fungsi ini merupakan interaksi antara sistem dengan lingkungan. Model interaksi antara sistem dan lingkungan melibatkan adanya reservoir kalor yang berinteraksi dengan sistem. Reservoir merupakan sesuatu yang terdapat di luar system, yang mempunyai nilai temperatur tertentu dan tidak akan mengalami perubahan ketika menerima atau mendapatkan kalor dari sistem. Beberapa pengendalian temperatur yang dapat digunakan antara lain:

1. *Velocity scaling*
2. *Thermostat Nose-Hoover*
3. *Thermostat Berendsen*

2.1.7 Pengendalian Tekanan

Tekanan adalah fungsi dari volume dan temperatur sistem, pengendalian tekanan digunakan untuk model simulasi menggunakan *Ensemble* isobaric-isotermal (P, T, N). Pada *Ensemble* ini perubahan terjadi pada nilai volume sedangkan nilai tekanan dipertahankan. Sistem dijadikan fleksibel ketika mengalami pembesaran atau pengecilan dalam volumenya. Kemudian Reservoir

tekanan ditambahkan diluar sistem untuk menstabilkan nilai tekanan didalam sistem ketika terjadi perbedaan tekanan. Gambar 2.3 merupakan pemasangan reservoir tekanan dan reservoir kalor pada sistem



Gambar 2.3 Pemasangan reservoir tekanan dan reservoir kalor pada sistem (sumber: Witoelar, 2002).

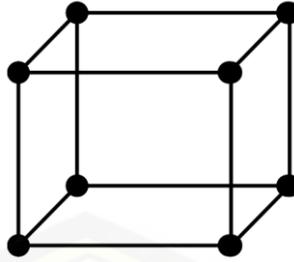
2.2 Struktur Kristal

Material tersusun atas beberapa atom. Atom-atom yang tersusun secara teratur dan juga memiliki ikatan antar atom yang teratur dapat membentuk sebuah kristal. Susunan kristal dengan pola yang teratur dan periodik dalam 3 dimensi, pada umumnya terdapat pada material padat (Askeland, 2010). Salah satu contoh bentuk kristal yang berada pada ruang 3 dimensi adalah kubus (Puri dan Babbar, 2001). Terdapat 3 macam sktruktur kristal dalam ruang kubus yaitu *Simple Cubic* (SC), *Body Centered Cubic* (BCC), *Face Centered Cubic* (FCC), dan *Hexagonal Close Packed* (HCP).

1. *Simple Cubic* (SC)

Struktur kristal ini mempunyai $1/8$ atom di setiap sudut sel satuan, sehingga dalam satu sel SC terdapat 1 atom. Struktur sel SC dapat ditunjukkan pada Gambar

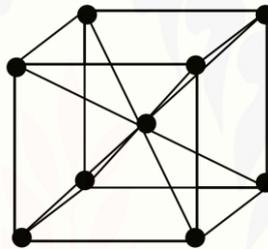
2.4



Gambar 2.4 Struktur kristal SC (sumber: Kittel, 2005)

2. *Body Centered Cubic (BCC)*

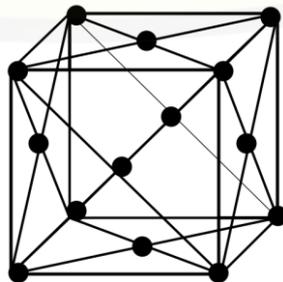
Struktur kristal ini merupakan struktur kristal dimana 1 atom terletak di tengah sel dan 1/8 atom terletak di masing-masing sudut sel. Dengan demikian, struktur BCC memiliki 2 atom. Struktur sel BCC dapat ditunjukkan pada Gambar 2.5



Gambar 2.5 Struktur kristal BCC (sumber: Kittel,2005)

3. *Face centered Cubic (FCC)*

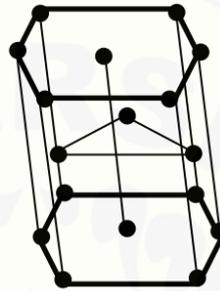
Struktur kristal ini mengandung empat titik kisi, dengan satu atom tunggal terletak pada setiap titik. Tidak ada atom yang sepenuhnya terletak di dalam sel satuan. Sejumlah atom berada di pusat muka yang jumlahnya enam, dimana masing-masing berbagi dengan sel lainnya, dan satu atom terdapat di setiap ujung sel, sehingga keseluruhannya FCC memiliki empat atom per sel satuan. Struktur sel FCC dapat ditunjukkan pada Gambar 2.6



Gambar 2.6 Struktur kristal FCC (sumber: Kittel, 2005)

4. *Hexagonal close packed (HCP)*

Struktur ini merupakan struktur kristal yang terdiri dari 3 atom di tengah, 1/2 atom pada atas dan bawah, serta 1/6 atom pada masing-masing titik sudutnya. Dengan demikian, struktur kristal HCP akan memiliki 6 atom. Struktur HCP dapat ditunjukkan pada Gambar 2.7



Gambar 2.7 Struktur kristal HCP (sumber: Kittel,2005)

2.3 Timbal

Timbal (Pb) cair merupakan salah satu jenis logam berat. Timbal memiliki titik lebur rendah, mudah dibentuk, serta memiliki sifat kimia yang aktif sehingga dapat digunakan sebagai pelapis logam lain agar tidak timbul karat. Timbal mempunyai sifat lunak berwarna abu-abu kebiruan mengkilat dan memiliki bilangan oksidasi +2 (Sunarya, 2007). Timbal dimanfaatkan sebagai pelindung karena sifat ketahanannya terhadap pancaran radioaktif maupun getaran. Timbal tersusun atas struktur kristal FCC (*Face-Centered Cubic*) dengan titik leleh 327 °C dan titik didih 1740 °C (Winter, 1993). Timbal memiliki karakteristik yang sesuai sebagai material pendingin pada reaktor nuklir diantaranya memiliki titik didih tinggi, tekanan uap rendah, dan transfer panas yang baik. Namun, sebagai pendingin reaktor nuklir timbal cair bersifat korosif terhadap baja yang digunakan dalam reaktor pada temperatur operasi yang tinggi (Zhang, 2009). Tabel 2.2 merupakan tabel informasi tentang sifat-sifat fisika dari timbal (Pb) cair.

Tabel 2.2 Sifat-sifat fisika timbal (Pb) cair

Sifat Fisika Timbal	Keterangan
Nomer atom	82
Massa atom relative	207,2
Densitas (g/cm ³)	11,34
Titik lebur (°C)	327,46
Titik didih (°C)	1.749

(Sumber: rsc.org/periodic-table/element/82/lead)

2.4 Massa Jenis

Massa jenis dapat didefinisikan sebagai massa persatuan volume. Simbol dari massa jenis adalah (ρ). Bahan yang berbeda akan memiliki nilai massa jenis yang berbeda pula. Rumus dari massa jenis adalah:

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (2.5)$$

dengan,

m = massa (kg)

V = volume (m³)

Dalam benda yang tidak homogen, massa jenis (disebut juga dengan istilah kepadatan) merupakan fungsi dari posisi. Dalam batas volume sangat kecil kepadatan suatu obyek homogen pada suatu titik menjadi $\rho(r) = dm/dV$ dimana dV adalah volume pada posisi r (tanpa nama, 1999). Dengan demikian, massa total dari benda dapat dinyatakan,

$$m = \int_v \rho(r) dV \quad (2.6)$$

Pada umumnya, massa jenis dapat diubah dengan merubah tekanan atau suhu. Dengan meningkatkan tekanan akan meningkatkan pula nilai dari massa jenis zat tersebut. Adapun peningkatan suhu, akan membuat massa jenis mengalami penurunan. Namun demikian, terdapat pengecualian untuk air pada titik leleh 0°C dan 4°C, yang mengalami peningkatan massa jenis. Hal yang sama juga terjadi pada bahan silikon pada suhu rendah. Jika kita lihat dari formulasi gasi idel bahwa :

$$\rho = \frac{MP}{RT} \quad (2.7)$$

dengan,

M = Massa molar

P = Tekanan

R = Konstanta gas

T = Suhu absolut

Berdasarkan persamaan (2.7), nampak bahwa massa jenis (kepadatan) gas akan bertambah apabila tekanan diperbesar, atau suhu mutlak diperkecil. Dari formulasi persamaan 2.7, maka dapat dianggap bahwa ada hubungan antara tekanan dan temperatur ada nilai massa jenis. Oleh karena itu pada penelitian ini akan dicari formulasi melalui nilai massa jenis logam cair sebagai fungsi temperatur yaitu $\rho = \rho(T)$. Data ini sangat diperlukan untuk merancang reaktor nuklir. Table 2.3 merupakan table beberapa nilai massa jenis material

Tabel 2.3 Massa jenis beberapa material

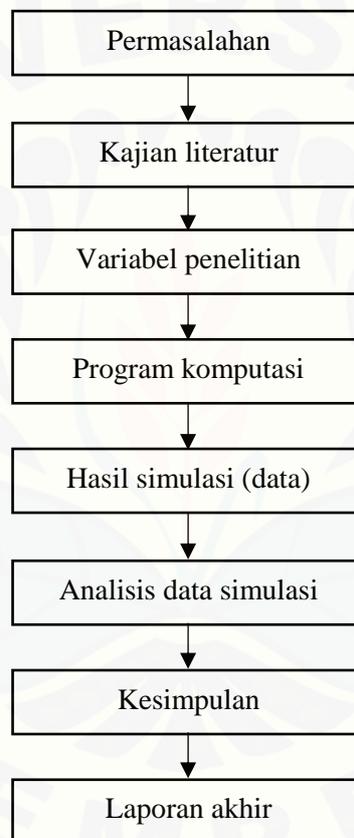
Material	ρ dalam kg/m^3	Keterangan
Timah	7310	Pada keadaan standar
Besi	7870	Pada keadaan standar
Niobium	8570	Pada keadaan standar
Kobalt	8900	Pada keadaan standar
Nikel	8900	Pada keadaan standar
Tembaga	8920 - 8960	Pada sekitar suhu ruang
Bismuth	9750	Pada keadaan standar
Perak	10500	Pada keadaan standar
Timbal	11340	Pada sekitar suhu ruang

(sumber: Robinson, tanpa tahun)

BAB 3. METODE PENELITIAN

3.1 Rancangan penelitian

Rencana umum dari kegiatan penelitian yang dilakukan tercakup ke dalam rancangan penelitian. Adapun rancangan penelitian secara terstruktur disampaikan pada skema yang ditunjukkan pada Gambar 3.1



Gambar 3.1 Rancangan kegiatan penelitian

Tahap awal yang akan dilakukan dalam penelitian ini adalah melakukan identifikasi terhadap permasalahan yang akan diselesaikan. Permasalahan yang diangkat dalam penelitian ini adalah mengetahui nilai massa jenis dari logam cair timbal sebagai fungsi temperatur dan tekanan. Berdasarkan perumusan masalah tersebut, diperlukan kajian literatur guna mengetahui metode yang dapat dilakukan untuk menghitung massa jenis bahan dalam skala atomik. Kegiatan penelitian

digolongkan ke dalam bidang teori komputasi, sehingga solusi terhadap permasalahan dari penelitian diperoleh berdasarkan kegiatan simulasi. Pada tahap ini, dilakukan proses *running* pada program yang dibuat. Terdapat dua buah bahasa pemrograman yang digunakan yakni program LAMMPS, yang digunakan untuk simulasi perhitungan massa jenis Pb cair, dan program OVITO, yang berfungsi untuk menerjemahkan koordinat dan atom-atom yang telah dimodelkan menjadi grafik 3 dimensi yang dapat diinterpretasikan oleh peneliti.

Data yang diperoleh dari hasil simulasi selanjutnya dilakukan analisis untuk mengetahui apakah terdapat pengaruh temperatur dan tekanan pada massa jenis dari bahan Pb cair. Penarikan kesimpulan menjadi bagian akhir dari kegiatan penelitian, yang diharapkan dapat menjawab permasalahan yang diberikan.

3.2 Jenis Sumber Data

Data kuantitatif dalam penelitian ini antara lain adalah nilai parameter yang digunakan, nilai massa dari cair Pb, serta nilai jarak antar atom (*lattice*). Pada penelitian ini sumber- sumber tersebut diperoleh dari data sekunder, yang dikumpulkan dari beberapa penelitian yang sudah ada.

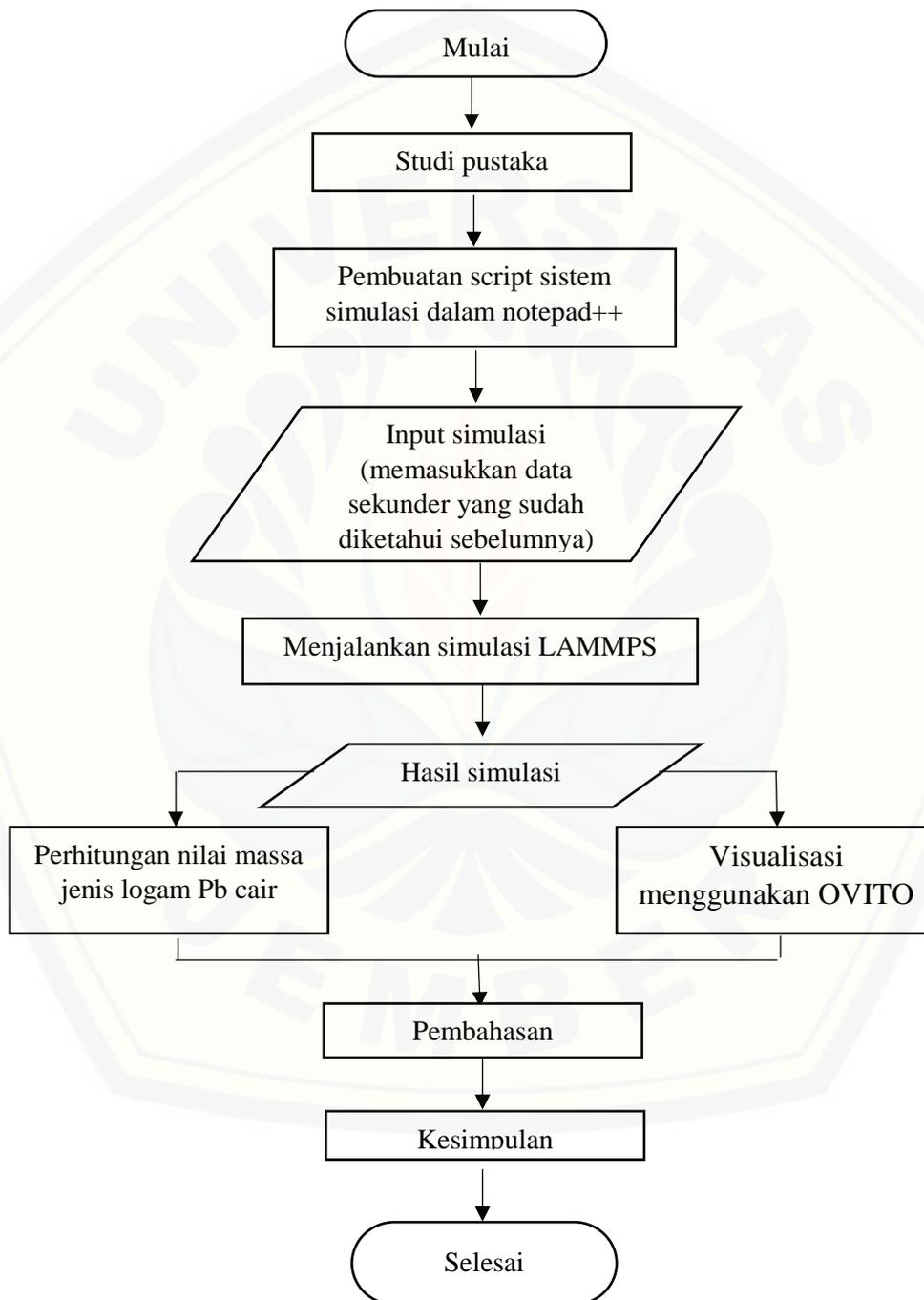
3.3 Definisi Operasional Variabel

Variabel pertama diklasifikasikan ke dalam variabel terikat, dimana variabel yang akan dikaji bergantung pada parameter lain yang menjadi variabel bebas. Parameter yang menjadi variabel terikat disini adalah massa jenis dari Pb cair. Jenis variabel kedua adalah variabel bebas, yakni parameter temperatur dan tekanan, yang diindikasikan dapat mempengaruhi karakteristik dari massa jenis logam cair Pb. Variabel lain berupa parameter-parameter yang bernilai tetap, yang dibutuhkan selama kegiatan simulasi, yakni massa atom Pb, konstanta kisi Pb, D , r_0 dan α . Parameter D , r_0 dan α merupakan tetapan dari potensial Morse.

3.4 Kerangka Pemecahan masalah

3.4.1 Mekanisme kegiatan simulasi

Mekanisme dari kegiatan simulasi disusun seperti pada diagram alir yang ditunjukkan pada Gambar 3.2



Gambar 3.2 Diagram alir mekanisme kegiatan simulasi

BAB 5. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Dari hasil simulasi dan perhitungan yang telah dilakukan dalam penelitian ini maka dapat disimpulkan bahwa, pada sebuah keadaan tekanan tertentu yang konstan, massa jenis timbal cair merupakan fungsi temperatur. Perubahan tekanan yang cukup besar pada sistem dari 1 atm hingga 7 atm tidak cukup memberikan perbedaan besar pada perubahan massa jenis yang dihasilkan, dimana pada saat tekanan 1 atm didapatkan formulasi $\rho_{pb} = 11233 - 0.9217 \times T$ dan pada keadaan 7 atm formulasinya adalah $\rho_{pb} = 11233 - 0.9213 \times T$. Hubungan linier yang diperoleh antara massa jenis dan temperatur sistem tersebut didapatkan pada rentang temperatur 323 K hingga 923 K. Hasil simulasi ini memberikan nilai diskrepansi tidak lebih dari 2%, ketika dibandingkan dengan referensi. Hasil simulasi juga didukung dengan hasil analisis CNA, yang menunjukkan bahwa peningkatan temperatur pada sistem dapat menyebabkan perubahan yang cukup besar pada volume sistem, sehingga mempengaruhi struktur kristal dari timbal. Pada temperatur 1023 K, diperoleh bahwasanya ikatan FCC yang tersisa dalam sistem timbal cair hanya tinggal 33,8 %. Selain itu berdasarkan penelitian ini dapat diketahui bahwa simulasi dinamika molekul dapat digunakan untuk mencari formulasi dari massa jenis bahan sebagai fungsi temperatur. Penelitian ini untuk temperatur 323 K hingga 923 K dapat menggunakan pendekatan linier seperti pada formulasi diatas, untuk temperatur yang lebih tinggi dari 923 K perlu penelitian lebih lanjut.

5.2 Saran

1. Perlu dilakukan kegiatan simulasi dengan menggunakan potensial interatomik yang lain, agar dapat memperkuat penelitian tentang massa jenis dari bahan timbal cair.
2. Hasil penelitian ini dapat digunakan untuk mensimulasikan unsur lain dengan menggunakan bahan yang berbeda. Oleh karena itu, penelitian selanjutnya

dapat diarahkan untuk menganalisis kesesuaian metode simulasi pada saat diterapkan pada bahan pendingin logam cair yang lain.



DAFTAR PUSTAKA

- Abajingin, D. D. 2012. Solution Of Morse Potential for Face Centre Cube Using Embedded Atom Method. *Advance in Physics Theories and Applications*. 8. 36-44
- Anonim. 2017. Lead. <http://www.rsc.org/periodic-table/element/82/lead>. [Diakses pada 27 maret 2017].
- Anonim. 1999. *Density*. http://www.dcu.ie/sites/default/files/mechanical_engineering/pdfs/manuals/DensityDeterminationManual.pdf Weighing Technology. [Diakses pada 27 maret 2017].
- Al-Shemmeri. Tarik, 2010, *Engineering Thermodynamic*. UK: Ventus Publishing ApS
- Arini, F. L. 2015. *Studi Titik Leleh Besi (Fe) dan Timbal (Pb) menggunakan Metode Dinamika Molekul*. Skripsi. Jember: Universitas Jember.
- Arkundato, A. 2013a. Pengembangan Komputasi Skala Besar dan Pemodelan Reduksi Laju Korosi Baja pada Sistem Transfer Panas Reaktor Berbasis Coolant Logam Cair Menggunakan Metode Dinamika Molekul. *Disertasi*. Bandung: Institut Teknologi Bandung.
- Arkundato. A, Su'ud. Z, Abdullah, Widayani, 2013b. Molecular Dynamic Simulation on Iron Corrosion Reduction in High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic, *Turk. J. Phys.* 37. 132-144
- Askeland, D. R., Fulay, P. P., & Wright, J. W. 2010. *The Science and Engineering of Materials*. USA: Cengage Learning, Inc.
- Camprubi, G. S. 2011. *Mechanical Properties at Nano-Level*. Tesis. Sweden: Lund University.

- Das, P. 2011. An introduction to Equilibrium Statistical Mechanics. New Delhi: I.K. International Publishing House Pvt. Limited.
- Dipojono, H. K. 2001. Simulasi Dinamika Molekul (Sebuah Pengantar). *Prosiding Seminar Nasional Hamburan Neutron dan Sinar X ke 4* ISSN 1410-7686.
- Girifalco, L. A. Weizer V. G. 1959. Application Of The Morse Potential Function To Cubic Metals. *Physical Review*. 114(3). 687-690
- Kittel, C. 2005. *Introduction to Solid State Physics*. Amerika: John Wiley & Sons, Inc.
- Lestari, V. P. 2015. Studi Suku “*cross-interaction*” pada Simulasi Dinamika Molekul Lennard-Jones Material Besi dalam Logam Cair Timbal-Bismuth. *Skripsi*. Jember: Universitas Jember.
- Maginn, E. J. 1997. Molecular theory and modeling chemical engineering. USA: University of Notre Dame.
- Maulana, Su’ud, Hermawan, dan Khairurijal. 2005. Studi Sifat Pb-Bi dengan Metoda Molekular Dinamik. *Risalah Lokakarya Komputasi dalam Sains dan Teknologi Nuklir XVI* (55-63).
- Mark, Winter, 1993, Lead. UK. <http://www.webelements.com/lead/physics.html>. [30 maret 2017]
- Markins, Samuel, 2017, How Does Temperature Affect Metal?. UK. <http://sciencing.com/temperature-affect-metal-4845.html> [Diakses pada 10 juni 2017].
- Pazurikova, J. 2014. Large-Scale Molecular Dynamics Simulations for Highly Parallel Infrastructures. *Tesis*. Masaryk University.
- Puri, R.K. dan Babbar, V.K. 2001. *Solid State Physics and Electronics*. New Delhi: S. Chand & Company Ltd.

Sobolov, V. 2011. Database of Thermophysical Properties of Liquid of Metal Coolants for GEN-IV. Belgium. SKC.CEN

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

Sunarya, Yayan. 2007. *Mudah dan Aktif Belajar Kimia*. Bandung: PT. Setia Purna Invers.

Wang, S. 2006. Molecular Dynamic Simulation of Grain Boundary Migration in Nanocrystalline Pd. *Tesis*. Beijing: University of Science and Technology.

Witoelar, A. 2002. Perancangan dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones. *Skripsi* Bandung: Institut Teknologi Bandung.

Zhang, J., Li, N. 2008. Review of the Studies on Fundamental Issues in LBE. *Journal Nuclear Mater.* 373. 351-377.

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

LAMPIRAN

4.1 Tabel Spesifikasi Sistem Timbal Cair

Ukuran Box	Jumlah atom	Massa sistem
50 x 50 x 50	500.000	$1,7209 \times 10^{-19}$ kg
20 x 20 x 20	32.000	$1,1014 \times 10^{-20}$ kg

4.2 Tabel massa jenis timbal cair pada temperatur 323 K – 1023 K pada tekanan 1 atm dengan ukuran box 50 x 50 x 50

Temperatur (K)	Tekanan (atm)	Volume (m^3)	massa jenis (kg/m^3)
323	1	$1,57615 \times 10^{-23}$	10918,59013
423	1	$1,58759 \times 10^{-23}$	10839,89903
523	1	$1,59956 \times 10^{-23}$	10758,77752
623	1	$1,61230 \times 10^{-23}$	10673,75396
723	1	$1,62619 \times 10^{-23}$	10582,58427
823	1	$1,64211 \times 10^{-23}$	10479,97194
923	1	$1,66161 \times 10^{-23}$	10356,97857
1023	1	$1,68886 \times 10^{-23}$	10189,90371

4.3 Tabel massa jenis timbal cair pada temperatur 323 K – 1023 K pada tekanan 5 atm dengan ukuran box 50 x 50 x 50

Temperatur (K)	Tekanan (atm)	Volume (m^3)	massa jenis (kg/m^3)
323	5	$1,57613 \times 10^{-23}$	10918,71963
423	5	$1,58757 \times 10^{-23}$	10840,03266
523	5	$1,59954 \times 10^{-23}$	10758,90916
623	5	$1,61226 \times 10^{-23}$	10674,02894
723	5	$1,62617 \times 10^{-23}$	10582,73939
823	5	$1,64209 \times 10^{-23}$	10480,13611
923	5	$1,66158 \times 10^{-23}$	10357,16451
1023	5	$1,68883 \times 10^{-23}$	10190,05928

4.4 Tabel massa jenis timbal cair pada temperatur 323 K – 1023 K pada tekanan 7 atm dengan ukuran box 50 x 50 x 50

Temperatur (K)	Tekanan (atm)	Volume (m ³)	massa jenis (kg/m ³)
323	7	1,57612 x 10 ⁻²³	10918,78437
423	7	1,58756 x 10 ⁻²³	10840,09959
623	7	1,61225 x 10 ⁻²³	10674,10180
723	7	1,62616 x 10 ⁻²³	10582,81616
823	7	1,64216 x 10 ⁻²³	10479,66200
923	7	1,66168 x 10 ⁻²³	10357,58981
1023	7	1,68876 x 10 ⁻²³	10190,47230

4.5 Tabel perubahan massa jenis pada kenaikan temperatur pada sistem berukuran 50 x 50 x 50

Kenaikan Temperatur	Perubahan Massa Jenis (kg/m ³)		
	1 atm	5 atm	7 atm
323 - 423	78,69110	78,68697	78,68478
423 - 523	81,12151	81,1235	81,12006
523 - 623	85,02356	84,88022	84,87773
623 - 723	91,16969	91,28955	91,28564
723 - 823	102,61233	102,60328	103,15416
823 - 923	122,99337	122,97160	123,07219
923 - 1023	167,07486	167,10523	166,11751