

# PEMODELAN PERILAKU KOROSI BAJA PADUAN (Fe-Cr-Ni) MENGUNAKAN METODA DINAMIKA MOLEKULAR

Yanyan Dwiyanti

Jurusan Teknik Metalurgi Fakultas Teknik  
Universitas Sultan Ageng Tirtayasa  
Email : yanyan\_dwiyanti@yahoo.com

## ABSTRAK

Korosi adalah proses degradasi logam akibat interaksi dengan lingkungan secara elektrokimia. Korosi fisik pada umumnya disebabkan adanya destruksi pada material. Serangan korosi terhadap struktur-struktur tersebut dapat menimbulkan kerugian yang besar baik dari segi teknis maupun ekonomis. Dalam penelitian ini, dilakukan simulasi untuk mengetahui sifat korosif pasir silika ( $\text{SiO}_2$ ) terhadap baja paduan besi, krom dan nikel (56%Fe-13%Cr-31%Ni) dengan menggunakan program komputer DL\_POLY. Potensial interaksi diasumsikan memenuhi model potensial Lennard-Jones. Parameter-parameter Lennard-Jones diperoleh dengan *fitting* data dari literatur. Algoritma Verlet digunakan untuk persamaan gerak dalam simulasi. Sel simulasi yang dipakai berupa struktur BCC (*Body Centre Cubic*) untuk sistem baja paduan dan Triclinic untuk sistem pasir silika yang masing-masing diisi oleh 432 atom dan 324 atom. Kecepatan awal atom-atom dibuat dengan generator random dan temperaturnya dikontrol menggunakan metoda Nose-Hoover *thermostat*. Temperatur yang digunakan dalam pengukuran adalah 300K, 450K, 600K, dan 750K. Dalam simulasi ini menunjukkan bahwa interaksi Si lebih kuat dibandingkan oksigen terhadap baja paduan, sehingga Si dapat merusak permukaan baja paduan sebelum terjadinya oksidasi oleh oksigen. Koefisien difusi mengalami peningkatan dalam setiap kenaikan temperatur. Koefisien difusi Si untuk temperatur 300K, 450K, 600k, dan 750K adalah  $9.29628\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ ,  $1.40897\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ ,  $1.61842\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ , dan  $5.90994\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ .

**Kata kunci** : dinamika molekular, potensial Lennard-Jones, fungsi distribusi radial, pasir silika, korosi.

## ABSTRACT

*Corrosion is the degradation process of the metal due to the electrochemical interaction with the environment. Physical corrosion is generally caused by the destruction of the material. Corrosion attack of these structures can cause large losses in terms of both technical and economical. In this study, carried out simulations to determine the corrosive properties of silica sand ( $\text{SiO}_2$ ) of the steel alloy of iron, chromium and nickel (56%Fe-13%Cr-31%Ni) by using this computer program DL\_POLY. Interaction potential is assumed to meet the Lennard-Jones potential model. The parameters of Lennard-Jones obtained by fitting the data from the literature. Verlet algorithm is used for the equations of motion in the simulation. Simulation cells are constructed based on BCC structure (Body Centre Cubic) for alloy steel and Triclinic for silica sand system, each filled with 432 atom and 324 atom. Initial velocity of the atoms are made with a random generator and its temperature is controlled using the Nose-Hoover thermostat method. Used in the measurement temperature is 300K, 450K, 600K, and 750K. In this simulation shows that the interaction of Si is stronger than the oxygen of the steel alloy, so it can damage the surface Si alloy prior to oxidation by oxygen. The diffusion coefficient linearly proportional to the temperature. The diffusion coefficient for the silicon at 300K, 450K, 600K, and 750K is  $9.29628\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ ,  $1.40897\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ ,  $1.61842\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ , and  $5.90994\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ , respectively.*

**Keywords:** *molecular dynamics, Lennard-Jones potential, radial distribution function,*

## 1. PENDAHULUAN

Korosi merupakan proses elektrokimia sehingga korosi dapat terjadi jika terdapat adanya anoda, katoda, elektrolit penghantar ion juga koneksi anoda dan katoda yang dapat menghantar elektron. Korosi fisik pada umumnya disebabkan adanya destruksi pada material. Salah satu proses fisis pada korosi adalah korosi pada jaringan perpipaan industri. Jaringan perpipaan dalam industri sering digunakan sebagai sarana untuk memindahkan fluida. Perpindahan fluida dalam jaringan perpipaan dapat mengalami kebocoran. Salah satu penyebab kebocoran jaringan adalah proses korosi yang melibatkan oksidasi logam di anoda dan reduksi air di katoda. Proses elektrokimia tersebut mengakibatkan material berpindah dari logam ke elektrolit, sehingga pipa mengalami kebocoran di daerah terjadinya korosi dan aliran arus listrik dari katoda ke anoda. Serangan korosi terhadap struktur-struktur tersebut dapat menimbulkan kerugian yang besar baik dari segi teknis maupun ekonomis.

Dalam metode dinamika molekular tidak terjadi perpindahan elektron, yang berakibat adanya faktor luar yang dapat menyebabkan korosi. Pasir silika mendestruksi baja paduan sehingga korosi berlangsung tanpa proses oksidasi. Beberapa hasil simulasi yang diperoleh dalam kaitannya dengan korosi adalah difusi. Pemodelan ini menitikberatkan pada simulasi untuk mengetahui sifat korosif pasir silika ( $SiO_2$ ) terhadap baja paduan (56%Fe-13%Cr-31%Ni) dengan menggunakan metode dinamika molekular. Pemodelan ini dapat mengetahui mekanisme korosi yang terjadi pada bahan struktur baja paduan (Fe-Cr-Ni) yang permukaannya berinteraksi dengan pasir silika ( $SiO_2$ ) pada beberapa temperatur secara simulasi, fungsi distribusi radial  $SiO_2$  dalam simulasi, untuk mengindikasikan atom yang dapat merusak permukaan baja paduan dan nilai koefisien difusi untuk  $Si$  pada beberapa temperatur, agar terlihat adanya peningkatan koefisien difusi pada  $Si$ .

## 2. TINJAUAN PUSTAKA

Penelitian yang lebih mengarah pada level atomik juga telah dilakukan dengan metode dinamika molekul terhadap Baja Paduan Fe-Cr-Ni dengan Pasir Silika (T.M. Wang, et al., 1992). Perkembangan komputer yang sangat cepat memungkinkan perhitungan sifat makroskopik dari level mikroskopik seperti massa atom dan interaksi di antara atom-atomnya. Dalam metode ini sistem dimodelkan terdiri dari sejumlah atom yang saling berinteraksi dengan energi potensial tertentu. Kecepatan dan posisi atom-atomnya dapat disusun terhadap waktu. Atom-atom ini diasumsikan merupakan partikel klasik dan gerakannya memenuhi hukum Newton. Dengan mengasumsikan sistem logam terdiri dari  $N$  atom, maka persamaan gerak untuk atom ke- $i$  adalah :

$$\mathbf{F}_i = m_i \frac{\partial \mathbf{v}_i}{\partial t} = m_i \frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial^2 t}, (i = 1, \dots, N) \quad (1)$$

$\mathbf{F}_i$  adalah gaya yang dialami atom ke- $i$  dengan massa, kecepatan dan posisi berturut-turut adalah  $m_i$ ,  $\mathbf{v}_i$  dan  $\mathbf{r}_i$ . Gaya  $\mathbf{F}$  ditentukan negatif gradien potensial pasangan antar atom :

$$\mathbf{F} = -\nabla \phi(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$\phi(\mathbf{r})$  adalah energi potensial. Dengan demikian gaya yang dialami oleh atom ke- $i$  adalah :

$$\mathbf{F}_i = \sum_{j \neq i} \mathbf{F}_{ij} = -\nabla_{\mathbf{r}_i} \phi(\mathbf{r}_{ij}) \quad (3)$$

yaitu jumlah gaya  $\vec{F}_{ij}$  atom ke- $i$  karena berinteraksi dengan atom ke- $j$  ( $j \neq i$ ).

Persamaan diferensial (1) dipecahkan dengan metode beda hingga dengan interval waktu  $\Delta t$ . Untuk integrasi persamaan gerak itu digunakan algoritma *leap-frog*. Solusinya adalah sebagai berikut :

$$\begin{aligned}
\mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t) &= \mathbf{v}_i(t - \frac{1}{2}\Delta t) + \Delta t \frac{\mathbf{F}_i(t)}{m_i} \\
\mathbf{v}_i(t) &= \frac{1}{2}(\mathbf{v}_i(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \mathbf{v}_i(t - \frac{1}{2}\Delta t)) \\
\mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t \mathbf{v}_i(t - \frac{1}{2}\Delta t)
\end{aligned} \tag{4}$$

Batas atas untuk  $\Delta t$  ditentukan oleh frekwensi Debye. Sifat makroskopik bahan dihitung, diantaranya adalah temperatur, tekanan dan koefisien difusi diri. Temperatur sistem dihitung dengan memakai teorema:

$$T = \frac{1}{k_B(3N - N_C)} \sum_i m_i \mathbf{v}_i^2 \tag{5}$$

$k_B$  : konstanta Boltzmann,  $N$  jumlah atom dan  $N_C$  adalah jumlah kendala. Tekanan juga dihitung dengan teorema :

$$PV = NK_B T + W \tag{6}$$

$V$  adalah volume dan  $W$  adalah suku virial dengan persamaan :

$$W = -\frac{1}{3} \sum_i \sum_{j>i} w(\mathbf{r}_{ij}) \tag{7}$$

dan

$$w(\mathbf{r}_{ij}) = \mathbf{r}_{ij} \frac{\partial \phi(\mathbf{r}_{ij})}{\partial \mathbf{r}_{ij}}$$

Koefisien difusi diri dihitung dengan persamaan berikut :

$$D = \frac{1}{6Nt} \left\langle \sum_{i=1}^N |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \right\rangle \tag{8}$$

tanda  $\langle \rangle$  adalah rata-rata perpindahan atom untuk seluruh periode waktu.

### 3. PEMODELAN DAN SIMULASI

Dalam penelitian ini penulis memakai kode program yang merupakan *open source code* DL\_POLY. Program Simulasi DL\_POLY adalah memori terdistribusi paralel program berdasarkan Data Replikasi, dalam DL\_POLY terdapat beberapa direktori tempat penyimpanan data baik yang berupa file temporer maupun file yang dapat dieksekusi (W.Smith, et.al, 2002). Dasar-dasar teori untuk membuat program ini adalah mekanika klasik dan mekanika statistik. Dinamika molekular akan menghasilkan lintasan ruang fasa (*phase space trajectory*) yang berupa kumpulan data posisi dan kecepatan atau momentum dari atom-atom dalam sistem yang ditinjau. Data-data ini tidak akan mempunyai arti jika tidak dihubungkan dengan kuantitas makroskopik dari bahan melalui rata-rata, oleh karena itu akan dijabarkan unsur-unsur yang mengakibatkan kenapa sifat mikroskopik dan makroskopik dapat di hubungkan untuk memahami sifat-sifat bahan.

#### 3.1 Persamaan Dinamika Newton

Dalam dinamika Newton, gerak molekul ke- $i$  yang disebabkan oleh gaya eksternal  $\mathbf{F}_i$  memenuhi hukum Newton kedua (Haile, 1997;Goldstein, 1980) :

$$\mathbf{F}_i = m_i \ddot{\mathbf{r}}_i \tag{9}$$

di sini  $m$  adalah massa molekul yang diasumsikan tidak bergantung pada posisi, kecepatan dan waktu. Percepatan dapat dituliskan dengan persamaan berikut :

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} \tag{10}$$

dengan  $\mathbf{r}_i$  adalah vektor posisi molekul.

Persamaan di atas mempunyai arti bahwa molekul yang semula diam akan tetap diam dan molekul yang mempunyai kecepatan akan terus bergerak dengan kecepatan tersebut sampai ada gaya yang bekerja padanya, sehingga ada interpretasi Hukum Newton I. Berdasarkan hukum Newton ini, dapat didefinisikan energi kinetik sebagai usaha yang diperlukan untuk menggerakkan molekul dalam keadaan diam menjadi bergerak dengan kecepatan sebagai berikut :

$$E_k = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 \quad (11)$$

$E_k$  adalah energi kinetik sistem.

### 3.2 Lintasan Ruang Fasa (*Phase Space Trajectory*)

Lintasan ruang fasa pada dasarnya merupakan suatu kumpulan data posisi dan momentum sistem  $N$  atom. Pergerakan atom-atom tersebut akan memenuhi hukum Newton dan lintasannya dapat digambarkan sebagai vektor posisi yang bergantung pada waktu  $\mathbf{r}_i(t)$ . Demikian juga momentum atom-atomnya dengan adanya interaksi tersebut, akan berubah dengan waktu dan dituliskan oleh  $\mathbf{p}_i(t)$ . Pada suatu saat tertentu, posisi dan momentum  $N$  atom-atom tersebut dapat digambar dalam suatu ruang yang berdimensi enam. Ruang ini dinamakan sebagai ruang fasa, terdiri dari  $3N$  dimensi ruang posisi yang mana koordinat sumbunya merupakan vektor posisi  $\mathbf{r}_i(t)$  dan  $3N$  dimensi ruang momentum yang sumbu koordinatnya merupakan vektor momentum  $\mathbf{p}_i(t)$ .

Posisi dan momentum sistem  $N$  atom pada suatu saat dapat digambarkan sebagai satu titik dalam ruang ini. Bila posisi dan momentum tersebut berubah terhadap waktu maka titik tersebut akan bergerak yang menggambarkan lintasan dalam ruang fasa. Tujuan utama dari simulasi dinamika molekul adalah menghitung lintasan ruang fasa tersebut. Lintasan diperoleh dengan memecahkan hukum Newton kedua atau persamaan Hamilton secara numerik.

### 3.3 Penentuan Sifat Makroskopik

Berdasarkan teorema ekuipartisi energi kinetik sistem partikel dapat dinyatakan oleh :

$$\langle E_k \rangle = \frac{3}{2} NkT \quad (12)$$

Sedangkan energi kinetik untuk sistem dapat pula dihitung dengan:

$$\langle E_k \rangle = \frac{1}{2} \left\langle \sum_i^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{m_i} \right\rangle \quad (13)$$

$$\text{Maka : } \frac{1}{2} \left\langle \sum_i^N \frac{1}{m_i} \mathbf{p}_i^2 \right\rangle = \frac{3}{2} NkT \quad (14)$$

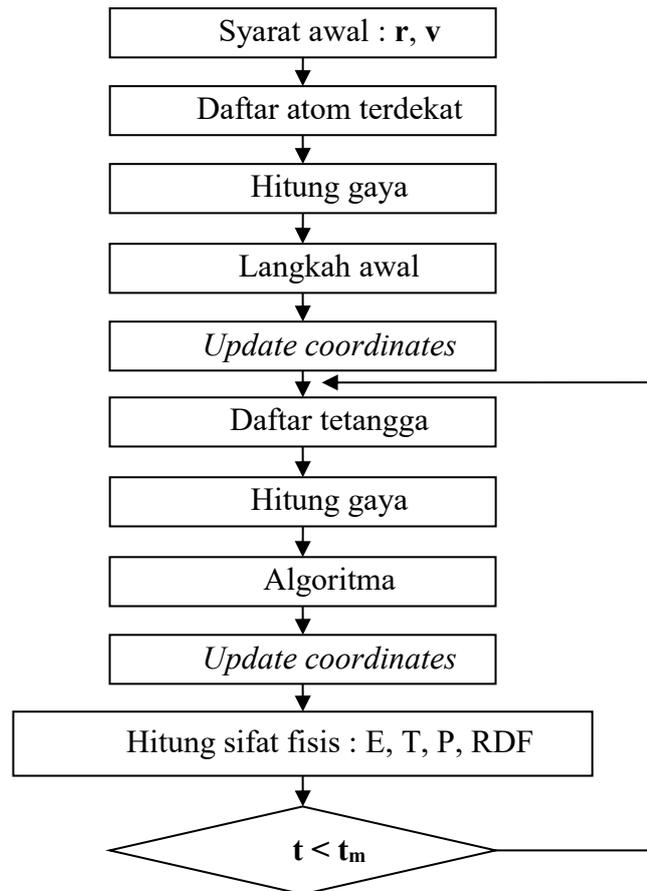
$N$  adalah banyaknya atom total,  $k$  konstanta Boltzmann dan  $T$  temperatur. Dengan demikian temperatur dapat dituliskan oleh persamaan :

$$T = \frac{1}{3Nk} \left\langle \sum_i m_i \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_i \right\rangle \quad (15)$$

### 3.4 Dinamika Molekular dan Fungsi Distribusi Radial

Dinamika molekular adalah suatu teknik untuk menghitung lintasan ruang fasa  $N$  atom-atom yang terdapat dalam suatu ruang terisolasi. Dalam keseimbangan termodinamika pada temperatur tertentu sifat makroskopik atau sifat-sifat fisis dari sistem yang ditinjau dapat dihitung melalui perata-rataan terhadap waktu. Syarat batas periodik diterapkan dalam simulasi dinamika molekul agar suatu sistem yang di hitung dapat mendekati obyek makroskopiknya. Dalam sebuah simulasi dinamika molekul bagian yang membutuhkan banyak waktu adalah pada saat menghitung gaya-gaya yang bekerja pada sebuah atom. Daftar tetangga dan daftar sel dapat meminimalisir perhitungan gaya dalam simulasi, misalkan sistem yang berinteraksi dengan potensial pasangan terdapat  $N$  buah atom maka perhitungan gaya yang bekerja pada atom-atom pada dasarnya akan melibatkan sebanyak  $\frac{1}{2} \{N(N-1)\}$  buah pasangan atom. Konsekuensinya jika seluruh pasangan atom dilibatkan dalam menghitung gaya maka jumlah perhitungan akan sebanding dengan  $N^2$  atom. Namun jika digunakan fungsi potong (*cut off*)

pada radius potong ( $r_c$ ), sehingga gaya itu besarnya akan sama dengan nol, maka waktu yang dibutuhkan untuk menghitung gaya menjadi berkurang (Allen.M.P, 2004). Secara umum metoda dinamika molekular dapat digambarkan dalam diagram alir berikut :



Gambar 1. Diagram Alir metoda dinamika molekular (Maulana.A, 2005).

Syarat awal adalah kondisi awal sistem yang akan ditinjau yang meliputi posisi awal dan kecepatan yang diberikan terhadap sistem. Kondisi ini sedapat mungkin harus mendekati keadaan sistem yang ditinjau. Hal ini diperlukan untuk mendapatkan hasil simulasi yang sesuai dengan keadaan riilnya.

Sistem yang akan disimulasikan mula-mula harus ditentukan posisi awal atom-atomnya yang biasanya diperoleh dari struktur kristalnya. Data posisi yang diperlukan satu sel satuan yang selanjutnya akan dikembangkan atau direplikasikan secara periodik dalam arah tiga dimensi dengan persamaan berikut :

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_{uc} + n_x \mathbf{a} + n_y \mathbf{b} + n_z \mathbf{c} \quad (16)$$

dengan  $\mathbf{r}_{uc}$  adalah vektor posisi sel satuan,  $n_x, n_y, n_z$  jumlah sel dalam arah x,y,z dan  $\mathbf{a}, \mathbf{b}$ , dan  $\mathbf{c}$  adalah vektor satuan. Bahan-bahan baja paduan (Fe-cr-Ni) mempunyai struktur BCC (*Body Centre Cubic*), sedangkan SiO<sub>2</sub> di asumsikan berstruktur *Triclinic* ( Le Page, Y.; Donnay, G., 2008). Energi potensial pasangan antara Fe-Fe, Ni-Ni, Cr-Cr, Si-Si dan O-O dalam simulasi ini diasumsikan memenuhi persamaan Lennard Jones :

$$u(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (17)$$

Dengan  $\varepsilon$  adalah kedalaman sumur potensial dengan satuan eV dan  $\sigma$  adalah parameter potensial dengan satuan Å, untuk masing-masing bahan nilainya khas. Gaya berdasarkan persamaan Lennard Jones (17) adalah :

$$|\mathbf{F}| = -\frac{du(r)}{dr} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (18)$$

Parameter-parameter Lennard-Jones diperoleh dengan mencocokkan (*fitting*) data kurva energi potensial terhadap jarak antar atom dengan persamaan Lennard-Jones. Data energi potensial sebagai fungsi jarak antar atom-atom Fe-Fe yang dipakai dalam penelitian ini diperoleh dengan metoda *ab-initio*. Sedangkan untuk Cr-Cr dan Ni-Ni, parameter Lennard-Jones diperoleh dengan *fitting* data yang masing-masing dihitung dengan metoda EAM (*embedded atomic methods*) dan Finis-Sinclair. Data energi potensial antar atom-atom Si-Si, dan O-O diperoleh dengan *fitting* data (Maeda.K, 2003; Bowron, Daniel T, 2008) dengan metode *ab-initio*. Hasil yang diperoleh terdapat dalam Tabel 1.

**Tabel 1. Parameter Lennard Jones yang digunakan**

No	Unsur	$\varepsilon$ (eV)	$\sigma$ (Å)
1	Fe-Fe	0.62	2.26
2	Cr-Cr	0.2	2.5
3	Ni-Ni	0.6	1.9
4	Si-Si	0.8	0.76
5	O-O	0.65	3.69

Perhitungan parameter Lennard-Jones untuk atom-atom yang berbeda dihitung dengan menggunakan kaidah campuran Lorentz-Berthelet (Zhdanov dan Fakhretdinov, 2005):

$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_{AA} + \sigma_{BB}) \quad (19)$$

dan

$$\varepsilon_{AB} = (\varepsilon_{AA} \varepsilon_{BB})^{1/2} \quad (20)$$

Parameter Lennard-Jones untuk elemen yang berbeda ditunjukkan pada Tabel 2. Hasil ini dihitung dengan persamaan 17 dan 18 berdasarkan data dalam Tabel 1.

**Tabel 2. Parameter Lennard-Jones untuk elemen yang berbeda**

No	Unsur	$\varepsilon$ (eV)	$\sigma$ (Å)
1	Fe-Cr	0.352	2.38
2	Fe-Ni	0.6099	2.08
3	Fe-Si	0.704	1.51
4	Fe-O	0.6348	2.975
5	Cr-Ni	0.346	2.2
6	Cr-Si	0.4	1.63
7	Cr-O	0.3605	3.095
8	Ni-Si	0.6928	1.33
9	Ni-O	0.624	2.795
10	Si-O	0.721	2.225

Dari parameter Lennard-Jones dapat digambarkan kurva antara energi potensial terhadap jarak antar atom. Pada daerah energi negatif pasangan atom yang dipisahkan pada jarak tersebut akan saling tarik menarik. Makin besar kedalaman sumur potensial makin besar energi ikat pasangan atom tersebut.

Fungsi distribusi radial  $g(r)$  merupakan indikator bagaimana atom-atom tersusun dalam sistem, di mana susunan ini bisa acak atau teratur, yang besarnya sebanding dengan probabilitas menemukan dua atom yang terpisah sejauh  $r \pm \Delta r$ . Besaran ini berperan penting dalam teori mekanika statistik dan dapat dibandingkan dengan percobaan difraksi sinar-x dan neutron, karena teknik dinamika molekular menghasilkan posisi atom-atom individual sebagai fungsi waktu, maka  $g(r)$  dapat di hitung dari data tersebut. Fungsi distribusi radial didefinisikan sebagai berikut (Haile 1997,D.C. Rapaport 1995):

$$g(r) = \frac{2V}{N^2} \left( \sum_{i < j} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{ij}) \right) \quad (21)$$

Dengan  $V$  adalah volume sistem dan  $N$  jumlah atom. Berdasarkan definisi ini maka  $\rho g(r) dV$  sebanding dengan probabilitas mendapatkan atom di dalam elemen volume  $dV$  sejauh  $\mathbf{r}$  dari atom acuan. Dalam sistem 3-dimensi maka  $4\pi\rho g(r)r^2\Delta r$  menyatakan jumlah rata-rata molekul yang berada dalam ruang antara bola berjari-jari  $r$  dan  $\Delta r$  dengan pusat di acuan. Di sini  $\rho$  adalah rapat atom rata-rata atau jumlah rata-rata atom per satuan volume.

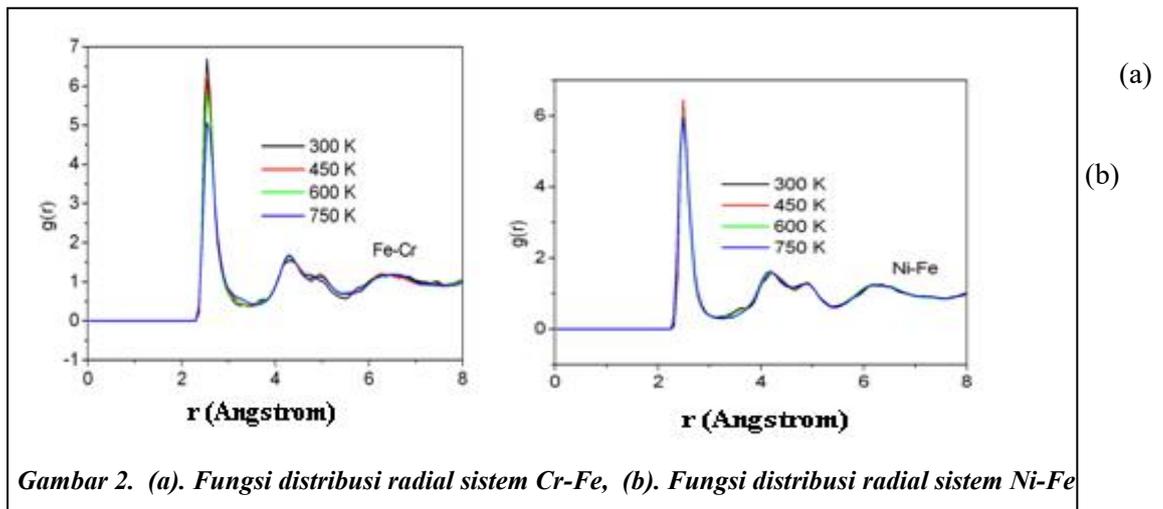
Secara teknis  $g(r)$  dapat dihitung menggunakan histogram interaksi pasangan atom. Jika  $h_n$  adalah jumlah pasangan atom  $(i,j)$  dimana  $(n-1)\Delta r \leq r_{ij} < n\Delta r$  maka untuk  $\Delta r$  yang amat kecil :

$$g(r) = \frac{Vh_n}{2\pi N^2 r^2 \Delta r} \quad (22)$$

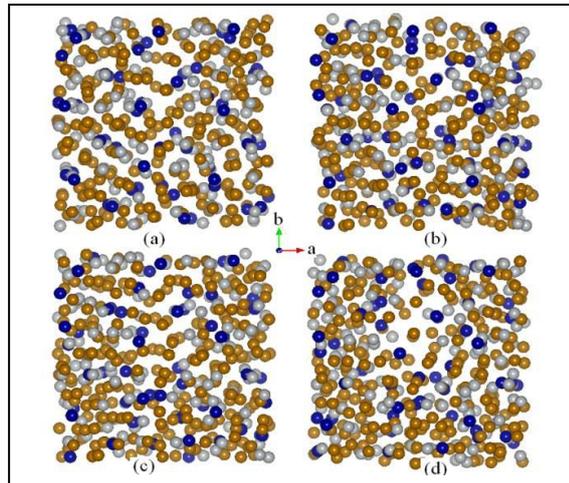
$$\text{Dengan } r = \left(n - \frac{1}{2}\right)\Delta r \quad (23)$$

#### 4. HASIL SIMULASI DAN PEMBAHASAN

Hasil simulasi untuk fungsi distribusi radial sistem paduan antara Fe dengan Cr dan Fe dengan Ni diperlihatkan dalam Gambar 2. Tampak bahwa interaksi antar atom Fe-Cr dan Fe-Ni pada temperatur 300K, 450K, 600K, dan 750K masih berada pada fasa solid.



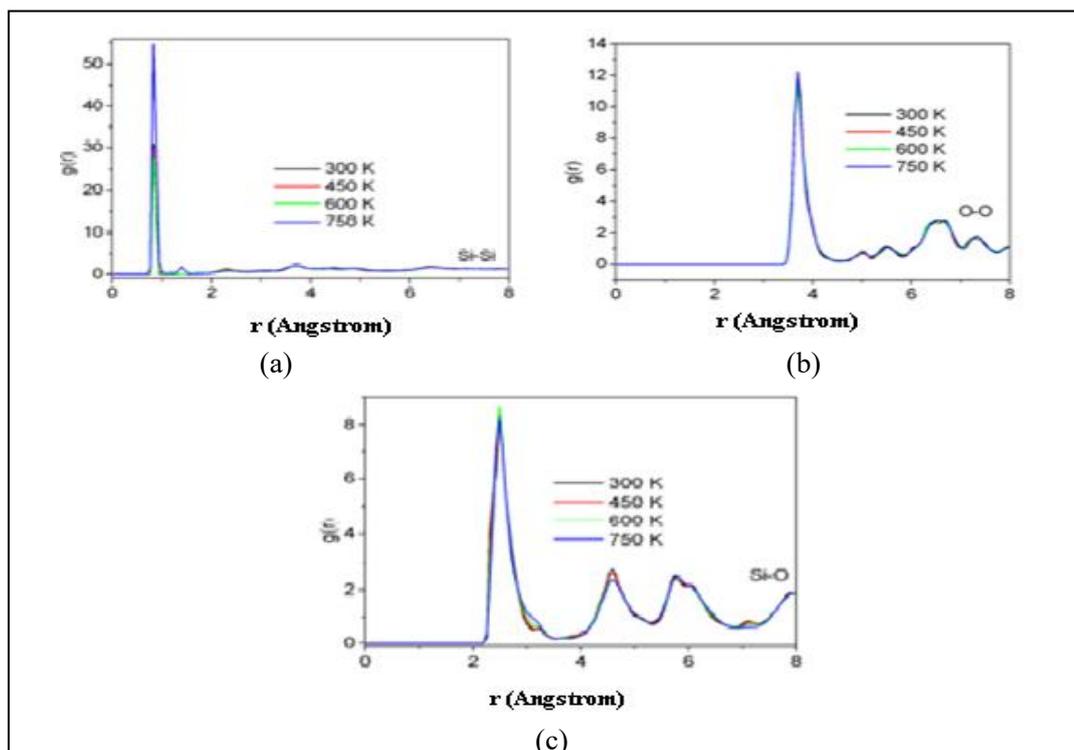
Hasil simulasi dinamika molekular terhadap baja paduan (Fe-Ni-Cr) pada Gambar 3 dapat dijelaskan bahwa atom-atom Fe (warna coklat) lebih banyak dibandingkan Ni (warna abu-abu) maupun Cr (warna biru), hal tersebut di dasarkan pada besarnya perbandingan dari sistem yang digunakan yaitu 56%Fe31%Ni13%Cr.



**Gambar 3.** Posisi atom-atom baja paduan pada temperatur (a) 300 K, (b) 450K (c) 600 K dan (d) 750 K

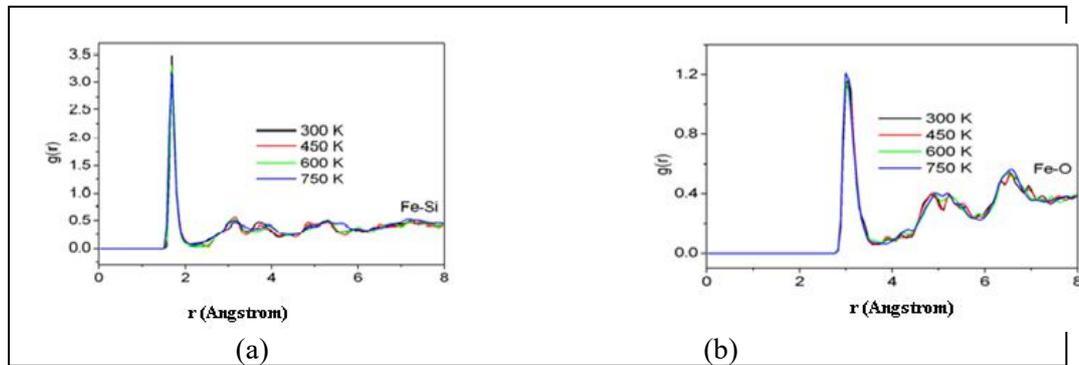
Berdasarkan Gambar 3, semakin meningkatnya temperatur yang disimulasikan mengakibatkan jarak antar atom semakin renggang, sehingga apabila atom-atom baja paduan tersebut berinteraksi dengan pasir silika akan memudahkan atom-atom dalam pasir silika menembus masuk baja paduan.

Fungsi distribusi radial sistem Baja Paduan dengan Pasir Silika yang disimulasikan diperlihatkan dalam Gambar 4. Gambar tersebut memperlihatkan fungsi distribusi radial dari pasir silika yang terdiri dari Silika (Si-Si), oksigen (O-O) dan pasir silika (Si-O).



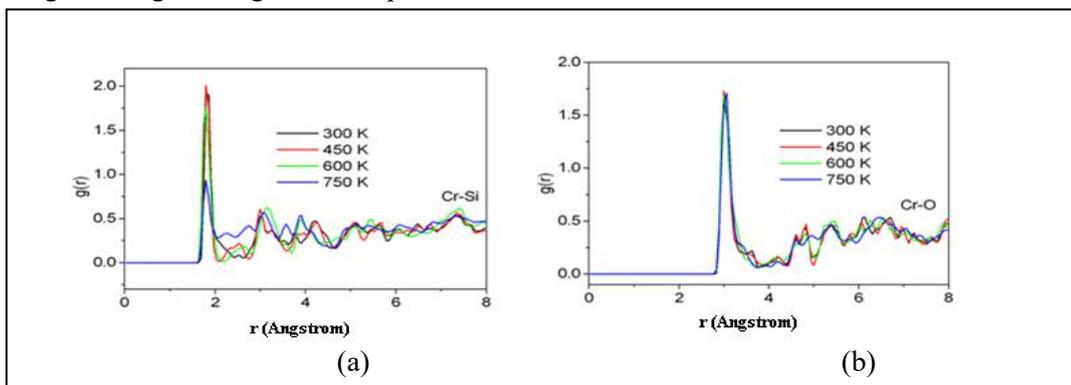
**Gambar 4.** (a) Fungsi distribusi radial sistem Si-Si, (b) Fungsi distribusi radial sistem O-O, (c) Fungsi distribusi radial sistem Si-O

Fungsi distribusi radial sistem Fe dengan Si dan Fe dengan O yang disimulasikan diperlihatkan dalam Gambar 5. Silikon memiliki fungsi distribusi radial yang lebih tinggi di dibandingkan dengan oksigen terhadap besi. Dengan kondisi seperti ini, maka pada temperatur yang semakin meningkat dan jarak atom yang relatif saling berdekatan, ternyata silika lebih berinteraksi dengan besi dibandingkan dengan oksigen terhadap besi.



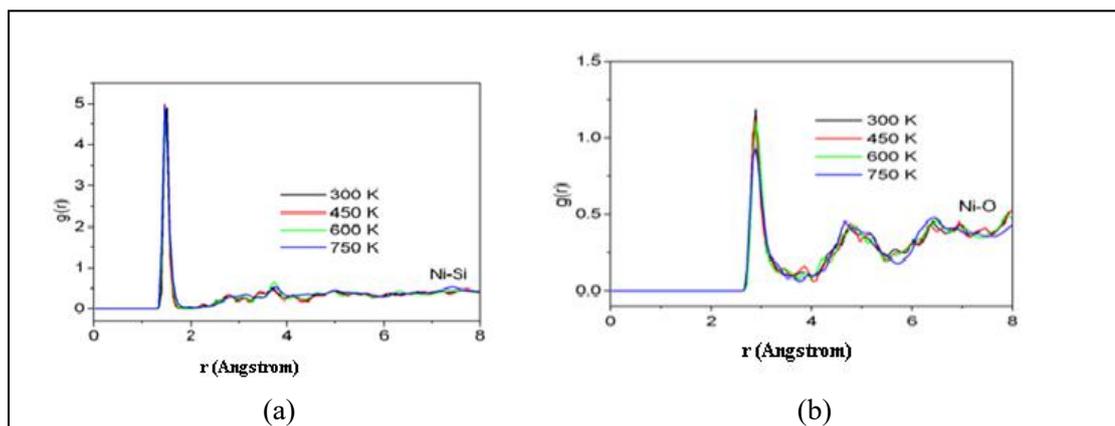
Gambar 5. (a) Fungsi distribusi radial sistem Fe-Si, (b) fungsi distribusi radial sistem Fe-O

Fungsi distribusi radial sistem Cr dengan Si dan Cr dengan Oksigen yang disimulasikan diperlihatkan dalam Gambar 6. Silikon memiliki fungsi distribusi radial yang lebih tinggi di bandingkan dengan oksigen terhadap krom. Dengan kondisi seperti ini, maka pada temperatur yang semakin meningkat ternyata silikon lebih cepat berinteraksi atau menembus atom-atom krom dibandingkan dengan oksigen terhadap atom-atom krom.



Gambar 6. (a) Fungsi distribusi radial sistem Cr-Si, (b) Fungsi distribusi radial sistem Cr-O

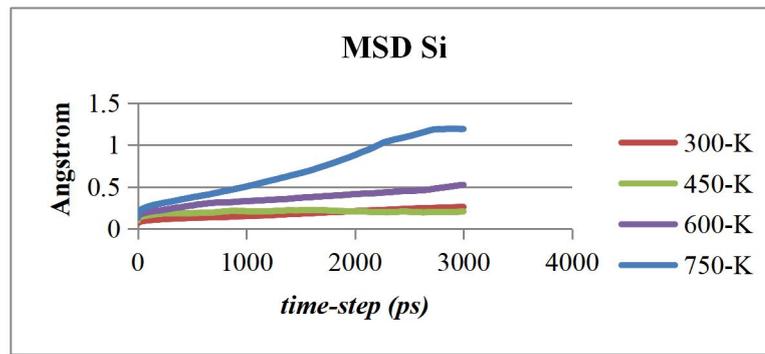
Fungsi distribusi radial sistem Nikel dengan Silika dan Oksigen yang disimulasikan diperlihatkan dalam Gambar 7.



Gambar 7. (a). Fungsi distribusi radial sistem Ni-Si, (b). Fungsi distribusi radial sistem Ni-O

Silikon memiliki fungsi distribusi radial yang lebih tinggi di bandingkan dengan oksigen terhadap nikel. Dengan kondisi seperti ini, maka pada temperatur yang semakin meningkat ternyata silikon lebih cepat menembus atom-atom nikel dibandingkan dengan oksigen terhadap atom nikel.

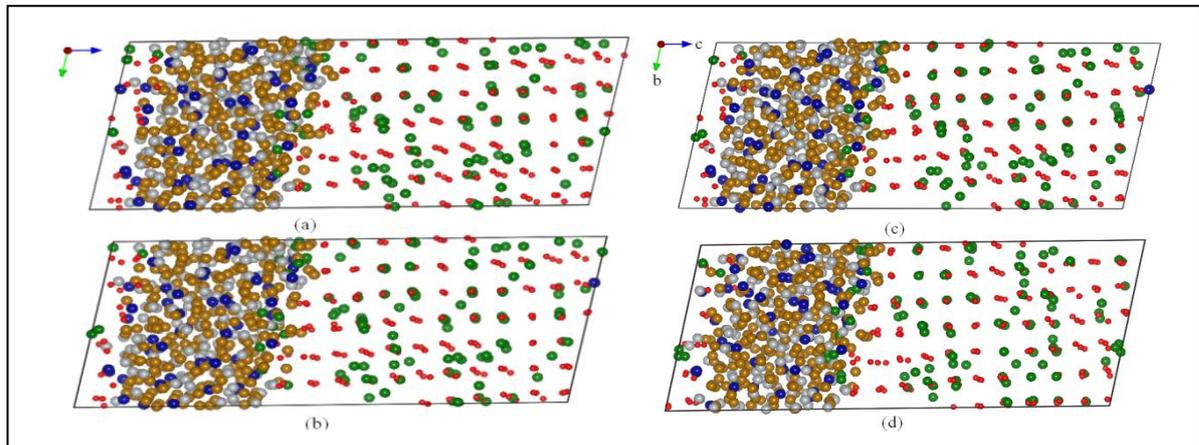
Means square displacement (MSD) yang terjadi pada silikon dalam Gambar 8. dapat dijelaskan bahwa yang memiliki kemiringan terbesar Silikon terdapat pada saat temperatur 750 K.



Gambar 8. Means Square Displacement Silikon (Si) pada beberapa temperatur

Peningkatan MSD Silikon tidak hanya terjadi pada temperatur 750 K, mulai dari temperatur 300 K pola peningkatannya terlihat begitu jelas.

Pada Gambar 9. (a), (b) (c) dan (d) ditunjukkan hasil simulasi bahan pasir silika yang permukaannya didekatkan dengan bahan baja paduan pada temperatur 300K, 450 K, 600 K dan 750 K. Atom nikel dan krom dalam gambar tersebut masing-masing berwarna biru dan abu-abu, sedangkan itu atom Fe berwarna coklat. Dalam simulasi ini silikon yang berwarna hijau dapat menembus permukaan bahan-bahan baja paduan. Hal ini menunjukkan bahwa adanya interaksi pasir silika dengan baja paduan pada saat didekatkan dengan jarak 2.80Å.



Gambar 9 Posisi atom-atom setelah simulasi dinamika molekular pada beberapa temperatur (a)300K, (b) 450K, (c) 600K, (d)750

Dengan nilai koefisien difusi untuk temperatur 300 K adalah  $9.29628E-10 \text{ ps}^{-1}$ , pada 450 K adalah  $1.40897E-10 \text{ ps}^{-1}$ , pada temperatur 600 K adalah  $1.61842E-09 \text{ ps}^{-1}$ , dan pada temperatur 750 K adalah  $5.90994E-09 \text{ ps}^{-1}$ .

## 5. KESIMPULAN

Berdasarkan uraian dalam hasil dan pembahasan mengenai simulasi dinamika molekular dari Baja Paduan (56%Fe-31%Ni-13%Cr) dengan Pasir Silika ( $\text{SiO}_2$ ) dapat ditarik beberapa simpulan sebagai berikut :

1. Dalam metode dinamika molekular tidak terjadi perpindahan elektron, yang berakibat adanya faktor luar yang dapat menyebabkan korosi. Pasir silika mendestruksi baja paduan sehingga korosi berlangsung tanpa proses oksidasi, namun terjadi karena adanya penetrasi, difusi, dan substitusi oleh pasir silika terhadap baja paduan.
2. Dalam simulasi ini menunjukkan bahwa Si memiliki fungsi distribusi radial yang lebih tinggi dari oksigen terhadap baja paduan. Hasil ini mengindikasikan bahwa interaksi Si lebih kuat dibandingkan dengan oksigen terhadap baja paduan, sehingga Si dapat merusak permukaan baja paduan sebelum terjadinya oksidasi oleh oksigen.

3. Silikon mengalami peningkatan koefisien difusi dalam setiap kenaikan temperatur. Atom Si lebih cepat mengalami difusi dan dapat berinterstisi terhadap baja paduan dibandingkan dengan oksigen, dengan nilai koefisien difusi untuk temperatur 300 K adalah  $9.29628\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ , pada 450 K adalah  $1.40897\text{E-}10 \text{ ps}^{-1}$ , pada temperatur 600 K adalah  $1.61842\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ , dan pada temperatur 750 K adalah  $5.90994\text{E-}09 \text{ ps}^{-1}$ .

## 6. DAFTAR PUSTAKA

- Allen.M.P, 2004, *Introduction to Molecular Dynamics Simulation*. Institute for Computing. Julich.
- Haile, J.M., 1997, *Molecular Dynamics Simulation : Elementary Methods*, John Wiley&Sons, New York.
- Le Page, Y.; Donnay, G., 2008, *Refinement of The Crystal Structure of Lowquartz*, ICSD No. 174.
- Maeda. K., et.al., 2003, S. Solid-Liquid Phase Transitions of Binary Lennard Jones Mixtures on Molecular Dynamics Simulation, *Journal of Molecular Liquids*, pp. 102, 1-3, 1-9.
- Maulana.Alan, dkk., 2005, Study Sifat Pb-Bi dengan Metode Molekular Dinamik “*Risalah Lokakarya Komputasi dalam Sains dan Teknologi Nuklir XVI*”, Hal 55-63, ITB. Bandung.
- Rapaport. D.C, 1995, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, Cambridge University Press.
- Wang. T. M et al., 1992, Study of the Crystal Defect in FeCrNi Alloy, *phys. Stat. sol. (a)* pp. 134, 127.
- W. Smith, T.R. Forester and I.T. Todorov, 2009, *The DL\_POLY\_2 User Manual*, STFC Daresbury Laboratory, Warrington WA4 4AD Cheshire, UK, version 2.20.
- Zhdanov, E. R, and Fakhretdinov, 2005, Molecular Dynamic Simulation of The Liquid-Vapor Interface of Binary Mixtures, *J. Mol. Liq.*, 120: 1-3, 51-53.