

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 (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 temperturnya 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 $9.29628\text{E-}10 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $1.40897\text{E-}10 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $1.61842\text{E-}09 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, dan $5.90994\text{E-}09 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$.

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 (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 propotional to the temperature. The diffution coefficient for the silicon at 300K, 450K, 600K, and 750K is $9.29628\text{E-}10 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $1.40897\text{E-}10 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, $1.61842\text{E-}09 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, and $5.90994\text{E-}09 \text{ m}^2\text{s}^{-1}$, respectively.

Keywords: molecular dynamics, Lennard-Jones potential, radial distribution function, silica sand, corrosion.