

**STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER  
MEKANISME ADSORPSI DAN DISOSIASI MOLEKUL H<sub>2</sub>O  
PADA PERMUKAAN LOGAM Fe (111)**

**SKRIPSI**

Diajukan Sebagai Salah satu Syarat  
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1)  
Pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo



**KHOIRUL ANWAR**

19511391

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN**

**FAKULTAS TEKNIK**

**UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

**2023**

## HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Khoirul Anwar  
NIM : 19511391  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme  
Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan  
Logam Fe (111)

Isi dan formatnya telah disetujui dan dinyatakan memenuhi syarat  
Untuk melengkapi persyaratan guna memperoleh Gelar Sarjana  
Pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo

Ponorogo, 1 Agustus 2023


Menyetujui

Dosen pembimbing I,



(Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D)  
NIK. 19870920 201204 12

Dosen Pembimbing II,



(Munaji, S.Si., M.Si.)  
NIK. 19840805 201701 11

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



(Edy Kurniawan, S.T., M.T.)  
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)  
NIK. 19860803 201909 13

## PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Khoirul Anwar

Nim : 19511391

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul “Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam Fe (111)” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang / teliti di dalam Naskah skripsi ini adalah asli dari pemikiran saya. Tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar Pustaka.

Apabila ternyata dalam Naskah Skripsi ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur plagiatisme, saya bersedia Ijazah saya dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Ponorogo, 1 Agustus 2023



Khoirul Anwar

Nim. 19511391

## HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Khoirul Anwar  
NIM : 19511391  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme  
Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan  
Logam Fe (111)

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Kamis  
Tanggal : 4 Agustus 2023  
Nilai :

### Dosen Penguji

Dosen Penguji I,



(Dr. Sudarno, ST., M.T.)  
NIK. 19680705 199904 11

Dosen Penguji II,



(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)  
NIK. 19860803 201909 13

### Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



(Edy Kurniawan, S.T., M.T.)  
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Pogram Studi Teknik Mesin,








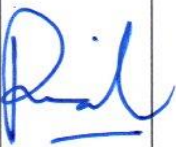
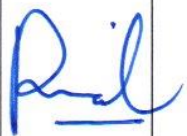

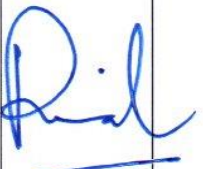
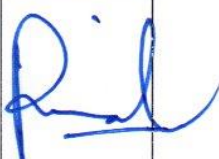
(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)  
NIK. 19860803 201909 13

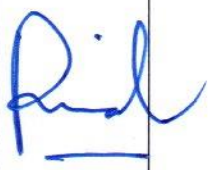
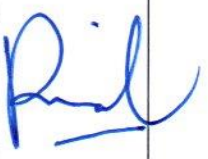
## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Khoirul Anwar  
 NIM : 19511391  
 Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Disosiasi Molekul  $H_2O$  Pada Permukaan Logam Fe (111)  
 Dosen Pembimbing I : Rizal Arifin, S. Si., M. Si., Ph. D

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	21/22 /12	Konsultasi Judul		
2	13/23 /1	BAB I	- Penambahan penelitian terdahulu - Penambahan batasan masalah dengan suhu antara $1667^{\circ}K$ - $1811^{\circ}K$ dan arah orientasi Fe (111)	
3	10/23 /2	BAB II	- Penambahan minimal 5 penelitian terdahulu - Penambahan reaksi antara $H_2O$ dan Fe.	
4	22/23 /2	BAB III	- Penambahan integrasi numerik dan temperatur bath	





No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	30/23 3	BAB <u>iii</u>	- Penambahan mekanisme simulasi dan pembuatan konfigurasi awal simulasi	
6	12/23 4	BAB <u>iii</u>	- Penambahan ekuilibrium	
7	22/23 5		Ace Sempura.	
8	13/23 6	BAB <u>IV</u>	- Pembentukan struktur awal atom H-OH, molekul OH dan molekul H <sub>2</sub> O	
9	19/23 6	BAB <u>IV</u>	- Konversi hasil energi adsorpsi dan perambatan tentang mekanisme Adsorpsi dan Desorpsi.	
10	6/23 7	BAB <u>IV</u>	- Penambahan mekanisme disosiasi dan reaksi molekul.	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	25/2023 /7	BAB V	- Penambahan kesimpulan tentang Adsorpsi, disosiasi dan pembentukan H <sub>2</sub>	
12	1/23 /8	BAB V	Acc Sidang Skripsi	
13				
14				
15				
16				


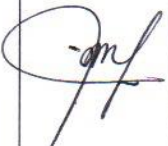




## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

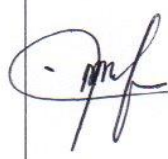

Nama : Khoirul Anwar  
 NIM : 19511393  
 Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Disosiasi Molekul  $H_2O$  Pada Permukaan Logam Fe (111)  
 Dosen Pembimbing II : Munaji, S.Si, M.Si.

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	30/22 /12	Konsultasi Judul		
2	20/23 /1	BAB 1	- Penambahan penelitian terdahulu - Penambahan tentang batasan masalah	
3	28/23 /2	BAB II	- Penambahan gambar $H_2O$ , struktur kristal dan fase diagram besi	
4	6/23 /3	BAB II	- Koreksi tentang penulisan unsur atom, penulisan dan penomoran persamaan rumus.	



No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	17/23 /3	BAB <u>II</u>	- Penambahan reaksi, penulisan cite, (sitasi) - Penambahan persamaan dasar simulasi dinamika molekuler	
6	8/23 /5	BAB <u>II</u>	- Penambahan tentang mekanisme simulasi, penjelasan tentang diagram alir simulasi	
7	16/23 /6	BAB <u>IV</u>	- Penambahan tentang Mekanisme Adsorpsi pada Permukaan Fe (III)	
8	23/23 /6	BAB <u>IV</u>	- Penambahan referensi tentang Penelitian terdahulu yang sesuai.	
9	16/23 /7	BAB <u>IV</u>	Penambahan satuan dalam Penulisan hasil Energi	
10	26/23 /7	BAB <u>IV</u>	Penambahan reaksi molekul	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	31/23 7	BAB V	Penambahan Metode Rendaman H <sub>2</sub>	
12	1/23 8		Penyempurnaan majalah sidang skripsi	
13				
14				
15				
16				

## MOTTO

*“It’s fine to fake it until you make it, until you do, until it true”*

(Taylor Swift)

*“If you change nothing, nothing will change”*

(Tony Robin)

*“Tiada yang lebih indah dalam skripsi ini kecuali lembar persembahan, skripsi ini saya persembahkan sebagai tanda bukti kepada orang tua tercinta, sahabat, pasangan, dan teman-teman yang selalu memberi support bagi saya untuk menyelesaikan skripsi ini”*



**STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER  
MEKANISME DISOSIASI MOLEKUL AIR  
PADA PERMUKAAN LOGAM Fe (111)**

Khoirul Anwar, Rizal Arifin, Munaji

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : [anwar.khoiruli472@gmail.com](mailto:anwar.khoiruli472@gmail.com)

---

**ABSTRAK**

Korosi adalah proses penurunan kualitas yang disebabkan oleh reaksi kimia antara logam dengan unsur-unsur lain yang ada di lingkungan alam. Sebagian besar korosi pada Fe terjadi karena interaksi dengan H<sub>2</sub>O. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari proses awal terjadinya korosi yaitu mekanisme adsorpsi dan disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (111). Metode penelitian yang digunakan dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler yang digunakan untuk memodelkan interaksi antara molekul H<sub>2</sub>O dan Fe (111). Pada tahap awal penelitian ini sebuah konfigurasi awal dibuat dan di visualisasikan dengan menggunakan software avogadro, dimana dalam sistem konfigurasi awal terdapat Fe, posisi awal atom O dan H. Selanjutnya dilakukan optimasi struktur pada atom H, O, molekul OH dan H<sub>2</sub>O dengan empat permukaan yang berbeda-beda yaitu *top*, *bridge*, *hollow 1* dan *hollow 2*. Hasil dari optimasi struktur akan digunakan untuk mencari energi adsorpsi. Situs *hollow 1* dan *hollow 2* merupakan situs yang paling optimal untuk atom H teradsorpsi pada permukaan Fe (111) dengan energi adsorpsi -0.56 eV. Untuk atom O berada di situs *hollow 1* dengan energi adsorpsi -6.27 eV, molekul OH berada pada situs *hollow 1* dan molekul H<sub>2</sub>O berada pada situs *top* dengan energi adsorpsi -1.68 eV. Setelah molekul H<sub>2</sub>O teradsorpsi, selanjutnya akan terjadi disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (111). Proses disosiasi dibagi menjadi dua tahap, yang pertama yaitu disosiasi H<sub>2</sub>O menjadi OH dan H, lalu disosiasi dari OH menjadi atom O dan H. Setelah atom H<sub>2</sub>O teradsorpsi dan terdisosiasi pada permukaan Fe (111) terdapat satu fenomena menarik yang dapat diamati yaitu pembentukan H<sub>2</sub>. Proses ini terjadi karena setelah terdisosiasi, atom H bergerak mendekati ke molekul OH. Kemudian atom H membentuk ikatan dengan atom H yang berada pada OH, akibatnya ikatan pada molekul OH terputus dan terganti dengan ikatan H<sub>2</sub>.

**Kata Kunci : Fe (111), H<sub>2</sub>O, Korosi, adsorpsi, Disosiasi, Simulasi Dinamika Molekuler.**

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam Fe (111)”.

Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik Prodi Teknik Mesin pada Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Dalam penulisan skripsi ini penulis menyadari tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak sangat sulit untuk dapat menyelesaikannya. Oleh karena itu, penulis mengucapkan banyak terimakasih kepada :

1. Dr. Happy Susanto, M.A. selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Edy Kurniawan S.T., M.T. selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Ketua Prodi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Munaji, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing yang selalu memberikan arahan, serta bimbingann secara sabar kepada penulis dalam menyusun skripsi ini.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Orang tua penulis, Bapak Sukarni dan Ibu Katilah yang senantiasa memberi motivasi dan semangat kepada penulis untuk segera menyelesaikan kuliah.
7. Diky Satria dan Rido Firmansyah sebagai rekan mahasiswa yang selalu mendampingi, memahami atau bertukar pendapat terkait dengan ilmu simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi untuk menyelesaikan skripsi ini.
8. Para teman dan rekan-rekan mahasiswa S1 Teknik Mesin yang telah memberikan dukungan semangat dan berbagi informasi.
9. Semua pihak yang secara langsung maupun tidak langsung telah membantu dalam penyelesaian skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa penulisan skripsi ini jauh dari kesempurnaan. Oleh karena itu, saran dan kritik yang bersifat membangun sangat penulis harapkan guna perbaikan dan pengembangan penelitian ini di masa yang akan datang. Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat dan sumbangsih bagi perkembangan ilmu pengetahuan, khususnya di bidang mekanisme adsorpsi dan disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe. Semoga juga dapat menjadi inspirasi dan sumber referensi bagi penelitian selanjutnya yang berhubungan dengan topik serupa.



Ponorogo, 1 Agustus 2023

Khoirul Anwar  
NIM. 19511391

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI .....	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN .....	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI .....	v
MOTTO .....	xi
ABSTRAK .....	xii
KATA PENGANTAR .....	xiii
DAFTAR ISI.....	xv
DAFTAR TABEL.....	xvii
DAFTAR GAMBAR .....	xviii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xx
BAB 1 PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA .....	5
2.1 Penelitian Terdahulu.....	5
2.2 Adsorpsi.....	9
2.3 Disosiasi .....	10
2.4 Molekul H <sub>2</sub> O .....	10
2.5 Besi (Fe) .....	12
2.6 Reaksi Molekul H <sub>2</sub> O dengan Fe.....	13

2.7 Simulasi Dinamika Molekuler.....	14
2.8 Model.....	15
2.9 Kondisi Batas Periodik.....	15
2.10 Integrasi Numerik.....	16
2.11 Temperatur <i>Bath</i> .....	16
<b>BAB 3 METODE PENELITIAN.....</b>	<b>18</b>
3.1 Alat penelitian dan Kelengkapan Penelitian.....	18
3.2 Mekanisme Penelitian .....	20
3.3 Membuat Konfigurasi Awal Simulasi.....	20
3.4 Optimasi Struktur .....	21
3.5 Ekuilibrasi dan Simulasi Dinamika Molekuler .....	21
3.6 Analisis Data dan Visualisasi .....	22
<b>BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>23</b>
4.1 Mekanisme Adsorpsi Molekul H <sub>2</sub> O Pada Permukaan Fe (111).....	23
4.2 Mekanisme Disosiasi Molekul H <sub>2</sub> O pada Permukaan Fe (111).....	35
4.3 Pembentukan H <sub>2</sub> .....	38
<b>BAB 5 KESIMPULAN.....</b>	<b>40</b>
5.1 Kesimpulan.....	40
5.2 Saran.....	40
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>42</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>45</b>



## DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Hasil Optimasi dan energi adsorpsi atom H pada Fe (111) .....	25
Tabel 4. 2 Hasil Optimasi dan energi adsorpsi atom O dan Fe (111) .....	28
Tabel 4. 3 Hasil optimasi dan energi adsorpsi molekul OH dan Fe (111) .....	31
Tabel 4. 4 Hasil optimasi dan energi adsorpsi molekul H <sub>2</sub> O dan Fe (111) .....	34



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Molekul H <sub>2</sub> O .....	11
Gambar 2. 2 Ikatan hidrogen dan Ikatan Kovalen .....	11
Gambar 2. 3 Diagram fase Fe .....	12
Gambar 2. 4 Struktur BCC (a) Representasi sel satuan hard-sphere, (b) sel satuan recudedsphere, (c) gabungan dari banyak atom.....	13
Gambar 2.5 Kondisi batas periodik.....	16
Gambar 3. 1 Diagram Alir Penelitian .....	20
Gambar 3. 2 Konfigurasi awal system simulasi dimana bola berwarna orange, merah, dan putih masing-masing menunjukkan atom Fe, O, dan H.....	21
Gambar 4. 1 Grafik optimasi atom H dan Fe (111) .....	24
Gambar 4. 2 Struktur awal atom H dan Fe (111).....	25
Gambar 4. 3 Posisi atom H setelah teradsorpsi pada permukaan Fe (111). (a) situs top, (b) situs bridge, (c) situs hollow 1, (d) situs hollow 2.....	26
Gambar 4. 4 Grafik optimasi atom O dan Fe (111) .....	27
Gambar 4. 5 Struktur awal atom O dan Fe (111).....	28
Gambar 4. 6 Posisi atom O setelah teradsorpsi pada permukaan Fe (111). (a) situs top, (b) situs bridge, (c) situs hollow 1, (d) situs hollow 2.....	28
Gambar 4. 7 Grafik Optimasi Molekul OH dan Fe (111).....	30
Gambar 4. 8 Struktur awal molekul OH pada permukaan Fe (111) .....	31
Gambar 4. 9 Posisi molekul OH setelah teradsorpsi pada permukaan Fe (111). (a) situs top, (b) situs bridge, (c) situs hollow 1, (d) situs hollow 2.....	31
Gambar 4. 10 Grafik Optimasi molekul H <sub>2</sub> O dan Fe (111).....	33
Gambar 4. 11 Struktur awal molekul H <sub>2</sub> O pada permukaan Fe (111).....	34
Gambar 4. 12 Posisi molekul H <sub>2</sub> O setelah teradsorpsi pada permukaan Fe (111). (a) situs top, (b) situs bridge, (c) situs hollow 1, (d) situs hollow 2.....	34

Gambar 4. 13 Disosiasi molekul  $H_2O$  menjadi  $OH + H$  (a) molekul  $H_2O$  teradsorpsi, (b) disosiasi pertama  $H_2O$ ..... 36

Gambar 4. 14 Disosiasi pada Molekul  $OH$  menjadi  $H + O$  (a) molekul  $OH$  dari disosiasi pertama (b) disosiasi kedua ..... 36

Gambar 4. 15 Posisi atom H, O dan H pada akhir simulasi..... 38

Gambar 4. 16 Proses pembentukan  $H_2$ ..... 39



## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Log optimasi struktur atom H.....	45
Lampiran 2 Log optimasi struktur atom O.....	46
Lampiran 3 Log optimasi struktur atom OH.....	47
Lampiran 4 Log optimasi struktur atom H <sub>2</sub> O.....	48
Lampiran 5 Log H <sub>2</sub> O pada suhu 500K.....	49
Lampiran 6 Log H <sub>2</sub> O pada suhu 700K.....	50
Lampiran 7 Log H <sub>2</sub> O pada suhu 1700K.....	51
Lampiran 8 Hasil simulasi (a) suhu 700K, (b) suhu 900K dan (c) suhu 1700K.....	52

