

**STUDI SIMULASI DEKOMPOSISI MOLEKUL H₂O PADA
PERMUKAAN NANOPARTIKEL Fe₅₅**

SKRIPSI

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



RIDO FIRMANSYAH

19511393

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

2024

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Rido Firmansyah
NIM : 19511393
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Proposal Skripsi : Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H₂O Pada Permukaan Nanopartikel Fe₅₅

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, 12 Februari 2024

Menyetujui,

Dosen Pembimbing I,

Dosen Pembimbing II,



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

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

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



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



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

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Rido Firmansyah

Nim : 19511393

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul “Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H₂O Pada Permukaan Nanopartikel Fe₅₅” 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 plagiarisme, 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, 12 Februari 2024



Rido Firmansyah

NIM.19511393

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

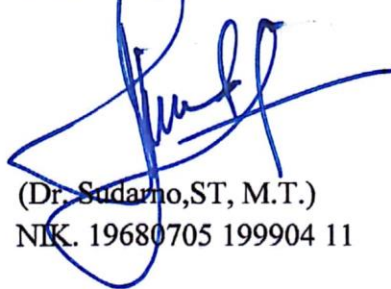
Nama : Rido Firmansyah
NIM : 19511393
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H₂O Pada Permukaan Nanopartikel Fe₅₅

Telah diuji dan dipertahankan di hadapan
Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Senin
Tanggal : 12 Desember 2023
Nilai :

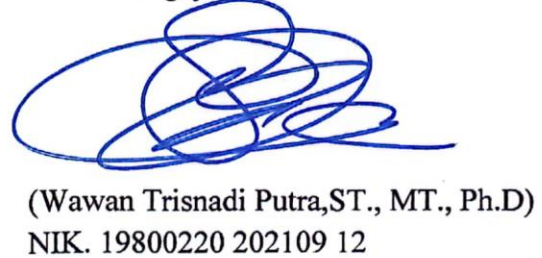
Dosen Penguji

Dosen Penguji I,



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

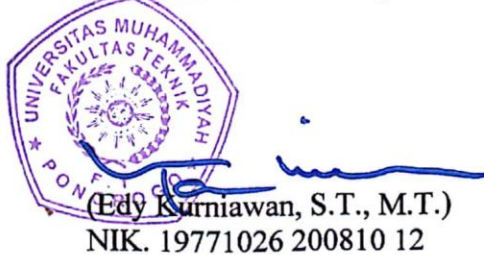
Dosen Penguji II,



(Wawan Trisnadi Putra, ST., MT., Ph.D)
NIK. 19800220 202109 12

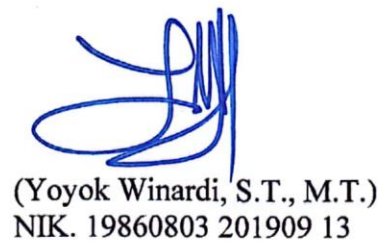
Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



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

Ketua Program Studi Teknik Mesin,










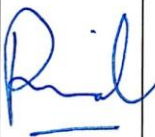


(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)
NIK. 19860803 201909 13

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Rido firmansyah
 NIM : 19511393
 Judul Skripsi : Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H_2O
 Pada Permukaan Nanopartikel Fe
 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	9/23 /1	BAB 1	<ul style="list-style-type: none"> - Penambahan penelitian terdahulu minimal 5. - Penambahan batasan masalah temperatur tinggi dan bentuk struktur icosahehedral. 	
3	25/23 /1	BAB ii	<ul style="list-style-type: none"> - Penambahan minimal 5 penelitian terdahulu - Penambahan reaksi antara H_2O dan Fe. 	
4	27/23 /3	BAB ii	<ul style="list-style-type: none"> - Penambahan algoritma verlet dan Energi Potensial. 	





No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	3/3 ²³	BAB i	- Penambahan mekanisme stimulasi, dan pembuatan konfigurasi awal.	
6	15/5 ²³	BAB ii	- Penambahan elastisitas dan optimasi struktur.	
7	22/5 ²³	Aec	Sempurna	
8	13/6 ²³	BAB iii	- Konfigurasi awal dan optimasi struktur.	
9	19/6 ²³	BAB iv	- Melanjutkan konfigurasi awal dan optimasi struktur - Menghubungkan nilai energi adsorpsi	
10	03/7 ²³	BAB v	- Melanjutkan energi adsorpsi - Menentukan jarak h untuk atom permukaan. - Penambahan tabel dan grafik optimasi struktur.	







No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	10/23 /7	BAB IV	- Memvisualisasikan hasil simulasi dengan aplikasi Citu	<u>Pial</u>
12	25/23 /7	BAB IV	- konversi satuan kcal/mol ke eV, konversi step ke femtosecond (fs) - Penambahan atom yang mudah teradsorpsi	<u>Pial</u>
13	31/23 /7	BAB IV	- Penambahan mekanisme disosiasi dan reaksi molekul. - Penambahan dinamika interaksi molekul dan reaksi molekul.	<u>Pial</u>
14	29/23 /8	BAB IV	- Melanjutkan dinamika interaksi molekul dan reaksi molekul.	<u>Pial</u>
15	13/23 /9	BAB V	- Penambahan kesimpulan dan saran.	<u>Pial</u>
16	10/23 /11	Acc Sidang.		<u>Pial</u>

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Rido Firmansyah
 NIM : 19511393
 Judul Skripsi : Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H_2O Pada Permukaan Nanopartikel Fe
 Dosen Pembimbing II : Yoyok Winardi, ST, M.T

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	14/ 23. 1	Bab I Pendahuluan	studi literatur tentang reaksi $H_2O + Fe$.	
2	5/ 23. 2	Bab I latar belakang	urutkan hal-hal yang umum di dasarkan pada literatur terkin. tujuan penelitian disesuaikan dengan permasalahan.	
3	12/ 23. 3	Bab I rumusan masalah	rumusan masalah & tujuan masalah hendaknya sama & sah pakket.	
4	15/ 23. 4	Bab II tujuan pustaka	➤ tambahkan hasil pustaka terbaru pada point 2.1. dan urutkan pokok pustaka & lacakannya	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	3/23 5	Bab II Dasar teori.	ditambahkan teori dasar yang membahas tentang reaksi antara partikel $H_2O + Fe$.	
6	12/23 5	Bab III metode pengolahan pulpitium.	• uraikan mekanisme proses granulasi & alat yang digunakan. • uraikan cara menggunakan hasil granulasi.	
7	23/23. 5	Bab III	• tambahkan flow chart pulpitium.	
8	22/23 6	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	
9	30/23 6	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	
10	7/23 7	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	13 / 23 7	BAB <u>IV</u>	Penambahan visualisasi	
12	28 / 23 7	BAB <u>IV</u>	Penambahan dinamika molekul	
13	15 / 23 8	BAB <u>IV</u>	Penambahan reaksi molekul	
14	5 / 23 9	BAB <u>V</u>	Penambahan kesimpulan dan saran	
15	12 / 23 10	BAB <u>V</u>	Penambahan kesimpulan dan saran.	
16	22 / 23 11	Acc sidang		

MOTTO

“Beranilah untuk memilih suatu hal, beranilah untuk mengejar impian, dan beranilah untuk menghargai perbedaan karena dengannya mimpi tak lagi dibatasi dan masa depan terbentang penuh warna.”

(Catatan Penulis)



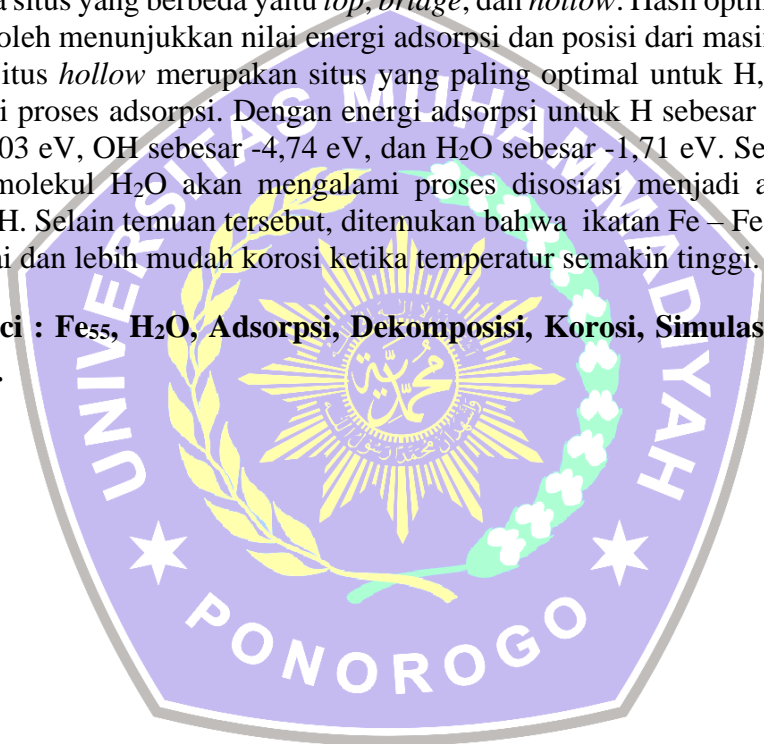
STUDI SIMULASI DEKOMPOSISI MOLEKUL H₂O PADA PERMUKAAN NANOPARTIKEL Fe₅₅

Rido Firmansyah, Rizal Arifin, Yoyok Winardi
Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas
Muhammadiyah Ponorogo
e-mail : ridofirmansyah52@gmail.com

ABSTRAK

Korosi merupakan peristiwa kerusakan atau penurunan kualitas material logam akibat terjadi reaksi dengan lingkungan. Besi (Fe) adalah salah satu logam yang sering korosi akibat berinteraksi dengan air (H₂O). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui mekanisme adsorpsi dan dinamika interaksi molekul H₂O pada permukaan nanopartikel Fe₅₅. Penelitian ini menggunakan simulasi dinamika molekuler untuk memodelkan interaksi molekul H₂O dengan permukaan nanopartikel Fe₅₅. Avogadro digunakan untuk memvisualisasikan konfigurasi awal dari Fe, O, dan H. Kemudian dilakukan optimasi struktur untuk H, O, OH dan H₂O dengan tiga situs yang berbeda yaitu *top*, *bridge*, dan *hollow*. Hasil optimasi struktur yang diperoleh menunjukkan nilai energi adsorpsi dan posisi dari masing – masing molekul. Situs *hollow* merupakan situs yang paling optimal untuk H, O, OH dan H₂O terjadi proses adsorpsi. Dengan energi adsorpsi untuk H sebesar -7,14 eV, O sebesar -7,03 eV, OH sebesar -4,74 eV, dan H₂O sebesar -1,71 eV. Setelah proses adsorpsi, molekul H₂O akan mengalami proses disosiasi menjadi atom H dan molekul OH. Selain temuan tersebut, ditemukan bahwa ikatan Fe – Fe kluster Fe₅₅ akan terurai dan lebih mudah korosi ketika temperatur semakin tinggi.

Kata Kunci : Fe₅₅, H₂O, Adsorpsi, Dekomposisi, Korosi, Simulasi Dinamika Molekuler



KATA PENGANTAR

Dengan memanjatkan puji syukur kepada Allah SWT yang telah memberikan segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H₂O Pada Permukaan Nanopartikel Fe₅₅”. Penulisan skripsi ini dilakukan sebagai salah satu syarat untuk menyelesaikan gelar Sarjana (S1) pada Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

Dalam proses penulisan skripsi ini penulis menyadari tanpa bantuan, dukungan dan bimbingan dari berbagai pihak sangat sulit untuk dapat menyelesaikannya. Oleh karena itu dalam kesempatan ini penulis dengan senang hati menyampaikan ucapan terima kasih kepada :

1. Bapak Dr. Happy Susanto, M.A selaku rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Bapak Edy Kurniawan S.T., M.T ,selaku dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T selaku ketua Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Bapak Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Yoyok Winardi, S.T., M.T selaku dosen pembimbing yang selalu memberikan bimbingan dan arahan yang terbaik secara sabar kepada penulis.
5. Bapak dan Ibu Dosen Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Orang tua penulis yaitu Bapak Taman dan Ibu Suparti atas segala perjuangan, ketulusan, semangat, kasih sayang dan doa kepada penulis sehingga dapat menyelesaikan skripsi ini.
7. Berliana Tabitha Putri selaku adik perempuan penulis yang telah membantu dan menjadi bagian dalam segala proses pendidikan saya.
8. Diky Satria Permana dan Khoirul Anwar sebagai rekan mahasiswa dan sahabat penulis yang selalu mendampingi, memahami dan bertukar pendapat terkait dengan ilmu simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi untuk menyelesaikan skripsi ini.

9. Aryudita Maulana Irza dan Icha Rahma Putri selaku saudara sekaligus sahabat penulis yang selalu memberikan dukungan moral, menghibur, memberikan semangat dan motivasi.
10. Para teman dan rekan-rekan mahasiswa Program Studi Teknik Mesin yang telah memberikan dukungan semangat dan berbagi informasi.
11. Semua pihak yang secara langsung maupun tidak langsung telah membantu dalam penyelesaian skripsi ini.

Dengan segala kerendahan hati penulis bahwa skripsi ini masih memiliki banyak kekurangan dan ketidaksempurnaan. Penulis mengharapkan kritik dan saran untuk perbaikan dan penyempurnaan isi skripsi ini. Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat dan kontribusi bagi semua pihak yang membutuhkan.

Ponorogo, 29 November 2023



Rido Firmansyah
NIM.19511393

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN	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	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	3
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Penelitian Terdahulu.....	4
2.2 Besi (Fe)	6
2.3 Molekul H ₂ O	9
2.4 Adsorpsi.....	10
2.5 Dekomposisi	11
2.6 Korosi (Reaksi antara H ₂ O dan Fe).....	11
2.7 Nanopartikel	12
2.8 Simulasi Dinamika Molekuler.....	12
2.9 Model.....	13
2.10 Algoritma verlet	13
2.11 Kondisi Batas Periodik	14
2.12 Temperatur Kontrol	14
BAB 3 METODE PENELITIAN.....	16
3.1 Alat Dan Kelengkapan Penelitian	16

3.2 Mekanisme Penelitian	18
3.3 Membuat Konfigurasi Awal Simulasi	19
3.4 Optimasi Struktur	19
3.5 Ekuilibrasi Sistem dan Simulasi Dinamika Molekuler.	19
3.6 Analisa Data dan Visualisasi	20
BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN.....	21
4.1 Mekanisme Adsorpsi Molekul H ₂ O Pada Permukaan Nanopartikel Fe ₅₅ ...	21
4.2 Dinamika Interaksi Molekul H ₂ O Dengan Nanopartikel Fe	33
BAB 5 PENUTUP	37
5.1 Kesimpulan.....	37
5.2 Saran	37
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN.....	43



DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Hasil Optimasi dan energi Adsorpsi Atom H dan Fe ⁵⁵	23
Tabel 4. 2 Hasil Optimasi dan energi Adsorpsi Atom O dan Fe ⁵⁵	25
Tabel 4. 3 Hasil Optimasi dan Energi Adsorpsi Molekul OH dan Fe ⁵⁵	28
Tabel 4. 4 Hasil Optimasi dan Energi Adsorpsi Molekul H ₂ O dan Fe ⁵⁵	31



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Diagram Fase Besi [11]	7
Gambar 2.2	Struktur Kristal BCC [12]	8
Gambar 2.3	Struktur Kristal FCC [12]	8
Gambar 2.4	Struktur Kristal HCP [12]	9
Gambar 2.5	Molekul H ₂ O	9
Gambar 2.6	Ikatan Hidrogen dalam Molekul H ₂ O	10
Gambar 2.7	Nanopartikel silika mesopori. [18].	12
Gambar 2.8	Kondisi Batas Periodik [22]	14
Gambar 3.1	Mekanisme penelitian	18
Gambar 3.2	Konfigurasi awal simulasi dimana bola berwarna orange menunjukkan atom Fe, merah menunjukkan atom O, dan putih menunjukkan atom H.	19
Gambar 4.1	Grafik Optimasi Struktur Atom H dan Fe ₅₅	22
Gambar 4.2	Situs awal struktur atom H dengan Fe ₅₅ (a) Situs <i>top</i> , (b) Situs <i>bridge</i> , (c) Situs <i>hollow</i> . Bola berwarna jingga mewakili atom Fe dan bola berwarna putih mewakili atom H.	23
Gambar 4.3	Situs akhir struktur atom H dengan Fe ₅₅	24
Gambar 4.4	Grafik Optimasi Struktur Atom O dan Fe ₅₅	25
Gambar 4.5	Situs awal struktur atom O dan Fe ₅₅	26
Gambar 4.6	Situs akhir struktur atom O dan Fe ₅₅	26
Gambar 4.7	Grafik Optimasi Struktur Molekul OH dan Fe ₅₅	28
Gambar 4.8	Situs awal struktur molekul OH dan Fe ₅₅	29
Gambar 4.9	Situs akhir struktur molekul OH dan Fe ₅₅	29
Gambar 4.10	Grafik Optimasi Struktur Molekul H ₂ O dan Fe ₅₅	31
Gambar 4.11	Situs awal struktur Molekul H ₂ O dan Fe ₅₅	32
Gambar 4.12	Situs akhir struktur Molekul H ₂ O dan Fe ₅₅	32
Gambar 4.13	Disosiasi molekul H ₂ O (a) Molekul H ₂ O teradsorpsi , (b) Molekul H ₂ O terdisosiasi , (c) Molekul H ₂ O terdisosiasi akhir	34
Gambar 4.14	Disosiasi molekul H ₂ O (a) Posisi molekul saat 38240 fs, (b) Posisi molekul saat 42820 fs, (c) Posisi molekul saat 50000 fs	35

Gambar 4.15 Molekul Fe55 terpecah pada waktu 40000 fs..... 36



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Log optimasi atom H	43
Lampiran 2	Log optimasi atom O	43
Lampiran 3	Log optimasi atom OH	44
Lampiran 4	Log optimasi atom H ₂ O	44
Lampiran 5	Log H ₂ O pada suhu 500K.....	45
Lampiran 6	Log H ₂ O pada suhu 800K.....	45
Lampiran 7	Log H ₂ O pada suhu 900K.....	46
Lampiran 8	Hasil simulasi (a) suhu 500K, (b) suhu 800K dan (c) suhu 900K.....	47

