

# BAB 1

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Dalam perkembangan zaman yang semakin modern kehidupan manusia tidak terlepas dari perangkat dan mesin yang terbuat dari logam. Logam besi adalah salah satu logam yang sering dijumpai dan memiliki banyak peran dalam kehidupan manusia. Logam besi umumnya digunakan dalam konstruksi bangunan, komponen suku cadang kendaraan sampai peralatan rumah tangga. Namun dalam proses penggunaannya besi sering kali terkait dengan masalah korosi.

Korosi merupakan suatu peristiwa kerusakan atau penurunan kualitas material logam akibat terjadi reaksi dengan lingkungan. Kerusakan akibat korosi terjadi hampir pada semua lingkungan namun memiliki tingkat korosif tertentu. Beberapa yang memengaruhi korosi pada logam – logam seperti oksigen, air, suhu, tekanan, dan arus listrik [1]. Dalam banyak kasus korosi terjadi karena pengaruh air yang sering berinteraksi dengan logam dalam lingkungan sehari-hari. Hal ini membuat interaksi antara air dan logam menjadi perhatian akademis dan industri dalam beberapa dekade terakhir.

Dengan menggunakan *Ultraviolet Photoemission Spectroscopy* (UPS), Dwyer dkk., untuk mempelajari interaksi H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (110) yang bersih dan teroksidasi. Berdasarkan hasil penelitian, ditemukan pada suhu 160 K molekul H<sub>2</sub>O mengalami adsorpsi dan pada suhu 225 K, terbentuk gugus hidroksil pada permukaan. Pada 360 K, terjadi proses desorpsi dimana H<sub>2</sub> mengalami desorpsi dari permukaan Fe (110) yang awalnya bersih dan H<sub>2</sub>O mengalami desorpsi dari permukaan Fe (110) yang teroksidasi. Selain itu, penelitian ini juga menemukan bahwa penutupan oksigen pada permukaan Fe(110) mencapai sekitar 0,4 *monolayer* (ML). Selama paparan tambahan dengan H<sub>2</sub>O, lapisan permukaan mengalami hidroksilasi [2].

Pada penelitian Baro´ dkk yang mempelajari adsorpsi H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (110) menggunakan EELS menunjukkan bahwa pada suhu 130K molekul H<sub>2</sub>O teradsorpsi secara disosiasi pada paparan rendah dan

menghasilkan spesies hidroksil di permukaan Fe (110) sementara pada paparan yang lebih tinggi H<sub>2</sub>O teradsorpsi secara molekuler. Ditemukan dua konfigurasi yang berbeda untuk molekul yang teradsorpsi yaitu ikatan OH-O dan OH-Fe. Selain itu, perlakuan panas H<sub>2</sub>O membentuk lapisan oksigen dan atom oksigen teradsorpsi pada situs *long bridge* [3].

Liu dkk, mempelajari agregasi dan disosiasi air dengan cakupan tinggi pada Fe (100) dengan metode DFT dan termodinamika ab initio, menemukan bahwa adsorpsi dan disosiasi air lebih disukai pada permukaan Fe (100) yang bersih daripada pada permukaan yang telah ditutupi dengan air. Selain itu, energi adsorpsi H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (100) dipengaruhi langsung oleh interaksi antara H<sub>2</sub>O, Fe dan ikatan hidrogen [4]. Selain penelitian-penelitian yang telah diuraikan sebelumnya, sejumlah studi juga telah dilaksanakan untuk menyelidiki interaksi antara molekul H<sub>2</sub>O dengan permukaan Fe [5] - [6].

Dalam kajian literatur, peneliti menemukan bahwa masih sedikitnya studi yang mempelajari dekomposisi H<sub>2</sub>O pada permukaan nanopartikel Fe<sub>55</sub> yang menggunakan simulasi dinamika molekuler untuk mengungkap mekanisme reaksi yang terjadi. Simulasi dinamika molekuler memiliki keunggulan dibandingkan dengan metode lain karena mampu menyajikan gambaran yang terperinci tentang atom dalam sistem molekuler, memungkinkan pemahaman lebih mendalam terhadap pergerakan dan interaksi partikel individu yang kompleks. Selain itu dapat digunakan pada berbagai sistem seperti gas, cairan, dan padat. Oleh karena itu, dalam penelitian ini penulis mengajukan judul “Studi Simulasi Dekomposisi Molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan Nanopartikel Fe<sub>55</sub>”.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas, rumusan masalah yang pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Bagaimana mekanisme adsorpsi molekul H<sub>2</sub>O di permukaan nanopartikel Fe<sub>55</sub>?
2. Bagaimana dinamika interaksi molekul H<sub>2</sub>O dengan nanopartikel Fe pada temperatur tinggi?

### 1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan yang ingin dicapai dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Mengetahui mekanisme adsorpsi molekul  $H_2O$  di permukaan nanopartikel  $Fe_{55}$ .
2. Mengetahui dinamika interaksi molekul  $H_2O$  dengan nanopartikel Fe pada temperatur tinggi.

### 1.4 Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Simulasi dilakukan pada temperatur antara 500K, 800K dan 900K untuk mempercepat reaksi.
2. Nanopartikel Fe terbentuk dari 55 atom dengan struktur icosahedral.
3. Molekul yang terlibat dalam reaksi adalah  $H_2O$ .

### 1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Dapat memahami mekanisme adsorpsi molekul  $H_2O$  di permukaan nanopartikel  $Fe_{55}$ .
2. Dapat memahami dinamika interaksi molekul  $H_2O$  dengan nanopartikel Fe pada temperatur tinggi.
3. Dapat dijadikan referensi untuk penelitian selanjutnya dibidang korosi khususnya molekul  $H_2O$  pada permukaan  $Fe_{55}$ .

