

PENGEMBANGAN PROGRAM PERHITUNGAN KOEFISIEN DIFUSI MATERIAL DALAM REKAYASA PERMUKAAN

DEVELOPMENT PROGRAM FOR CALCULATION OF MATERIAL DIFFUSION COEFFICIENT IN SURFACE ENGINEERING

Jan Setiawan

Pusat Teknologi Bahan Bakar Nuklir, Badan Tenaga Nuklir Nasional,
Kawasan Puspiptek Serpong, Tangerang 15310, Indonesia
pos-el: jansetiawan@batan.go.id

ABSTRACT

A program to calculate the diffusion coefficient and predicting the depth, time and temperature of diffusion has been developed. It is shown that the calculation result is in good agreement with the known conventional one. The program has been developed using Visual Basic based on the Fick's II law and the diffusion coefficient equation as an exponential function of temperature. It is argued that the program could improve the accuracy of the calculation of diffusion coefficient, depth, time and temperature which are important to improve the diffusion process efficiency.

Keywords: *Diffusion coefficient, Surface engineering, Calculation program*

ABSTRAK

Telah dikembangkan program perhitungan koefisien difusi material dan prediksi kedalaman, waktu serta temperatur difusi. Ditunjukkan bahwa hasil perhitungan sesuai dengan hasil konvensional yang telah diketahui. Program dibuat menggunakan Visual Basic melalui pendekatan hukum Fick II dan persamaan koefisien difusi sebagai fungsi eksponensial temperatur. Program ini dapat meningkatkan keakuratan perhitungan koefisien difusi, kedalaman, waktu, dan temperatur difusi yang penting untuk meningkatkan efisiensi proses difusi.

Kata kunci: Koefisien difusi, Rekayasa permukaan, Program perhitungan

PENDAHULUAN

Teknik perlakuan termokimia telah diteliti dengan baik dan digunakan di industri. Teknik perlakuan termokimia merupakan metode dengan logam atau nonlogam dipenetrasi oleh termodifusi diikuti oleh reaksi kimia pada permukaan. Melalui perlakuan termokimia, terjadi perubahan komposisi pada lapisan permukaan, struktur, dan sifat-sifatnya. Perlakuan termokimia sangat dipengaruhi atom donor dan material yang akan didifusikan.¹

Metode difusi merupakan metode yang efektif untuk penguatan seluruh permukaan

komponen dan umumnya digunakan untuk menguatkan permukaan komponen dalam jumlah yang besar.² Perhitungan yang akurat dalam proses difusi atomik merupakan hal terpenting untuk memperoleh informasi formasi dan sejarah pendinginan lanjutan dari material.

Penelitian sebelumnya telah melakukan simulasi perhitungan koefisien difusi menggunakan program MATLAB.³ Program ini terbatas pada simulasi perhitungan koefisien difusi, tetapi tidak memprediksikan kedalaman, waktu, dan temperatur difusi. Dalam penelitian ini dilakukan perhitungan koefisien difusi satu dimensi ditambah dengan modul perhitungan

untuk prediksi kedalaman, waktu, dan temperatur proses difusi. Perhitungan yang akan seluruhnya dilakukan dalam Visual Basic. Diharapkan dengan dibuatnya program ini dapat meningkatkan akurasi, efisiensi, dan efektivitas dalam proses rekayasa permukaan material.

MODEL

Proses difusi atomik pada material merupakan perpindahan atom dari konsentrasi yang tinggi menuju konsentrasi yang lebih rendah di dalam material. Dalam rekayasa permukaan atom-atom donor diaktivasi sehingga mampu menembus permukaan material. Proses difusi atomik *steady state* dituliskan dalam hukum Fick I^{2,4} sedangkan selama proses difusi atomik dalam rekayasa permukaan umumnya bersifat *non-steady state* yang dituliskan dalam hukum Fick II.^{2,4} Persamaan hukum Fick I dan Fick II satu dimensi dituliskan,

$$J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \dots\dots\dots(1)$$

dengan J adalah flux difusi (kg/m²s), D adalah koefisien difusi (m²/s), C adalah konsentrasi atom donor (kg/m³), dan x kedalaman difusi (m).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \dots\dots\dots(2)$$

dengan D adalah koefisien difusi (m²/s), C adalah konsentrasi atom donor (kg/m³), x adalah kedalaman difusi (m) dan t adalah waktu proses difusi (s). Persamaan *non-steady state* satu dimensi diselesaikan dengan penentuan asumsi kondisi batas, yaitu sebelum proses difusi, terdapat atom-atom pendonor yang terlarut di dalam material dan terdistribusi secara merata sebesar C₀. Nilai x pada permukaan adalah nol dan meningkat seiring dengan jarak ke dalam material. Nilai awal waktu diberi nilai nol sesaat sebelum proses difusi dimulai. Solusi *semi-infinite* untuk hukum Fick II adalah,^{2,5}

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \dots\dots\dots(3)$$

dengan C_x adalah konsentrasi atom donor pada kedalaman x dan waktu t (kg/m³), C₀ adalah konsentrasi atom donor di dalam material (kg/m³), C_s adalah konsentrasi atom donor di permukaan material (kg/m³), D adalah koefisien difusi (m²/s), x adalah kedalaman difusi (m), dan t adalah waktu proses difusi (s).

Koefisien difusi material merupakan fungsi eksponensial dari temperatur.⁵ Persamaan tersebut dituliskan sebagai,

$$\frac{C_x - C_0}{C_s - C_0} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right) \dots\dots\dots(4)$$

dengan D adalah koefisien difusi (m²/s), D₀ adalah koefisien preeksponensial (m²/s), Ea adalah Energi aktivasi atom donor (J/mol), R adalah konstanta gas ideal (J/mol K), dan T adalah temperatur (K).

Penyelesaian persamaan (3) diperlukan fungsi *error* yang merupakan kasus khusus dari fungsi gamma tak lengkap, dan fungsi *error* dituliskan sebagai,⁶

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{Ea}{RT}\right) \dots\dots\dots(5)$$

dan diselesaikan secara numerik menggunakan metode *Simpson-rule*. Persamaan untuk *inverse* dari fungsi *error* dituliskan sebagai,⁷

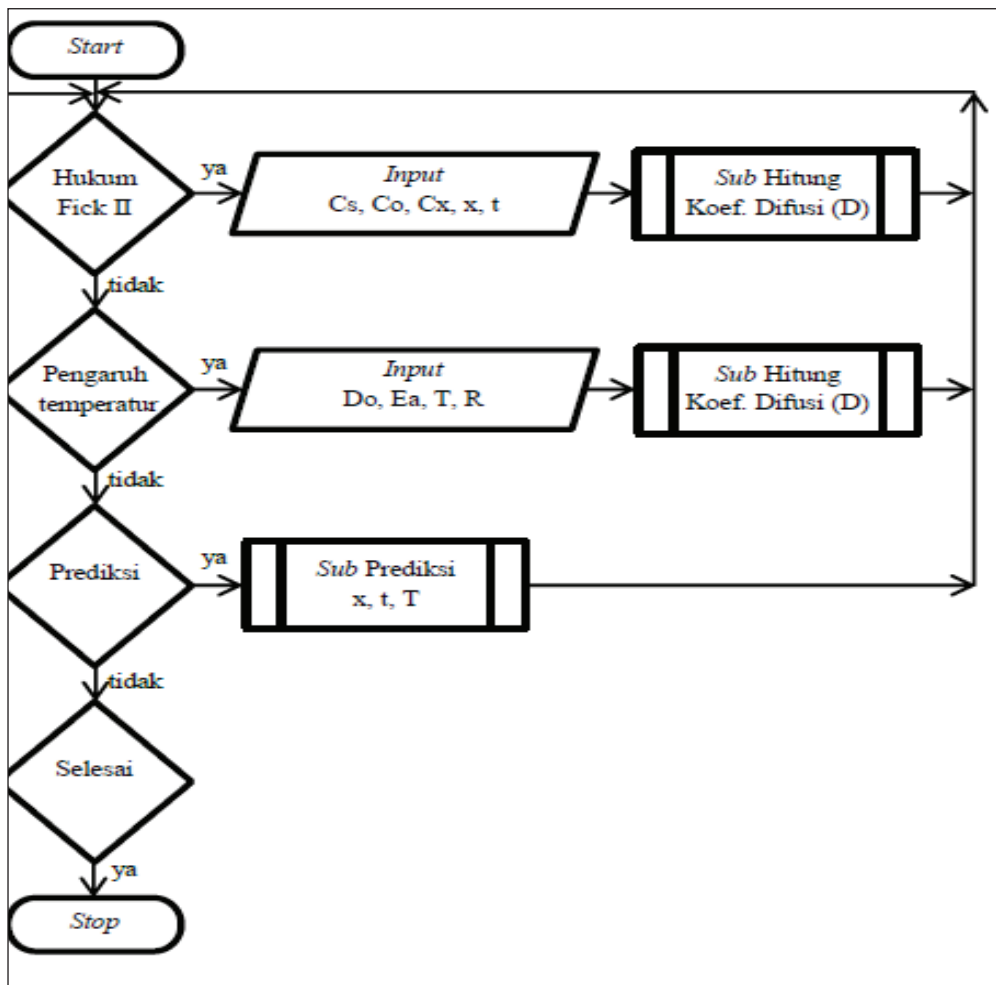
$$\operatorname{erf}^{-1}(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c_k}{2k+1} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{2} z\right)^{2k+1} \dots\dots(6)$$

dengan kondisi c₀ bernilai 1 dan

$$c_k = \sum_{m=0}^{k-1} \frac{c_m c_{k-1-m}}{(m+1)(2m+1)}$$

HASIL DAN PEMBAHASAN

Penyelesaian komputasi numerik koefisien difusi dibuat dalam aplikasi Visual Basic. Alur program dalam Visual Basic digambarkan pada Gambar 1. Program yang dibuat terdiri atas perhitungan koefisien difusi melalui pendekatan hukum Fick II dan persamaan koefisien difusi sebagai



Gambar 1. Diagram alir program perhitungan koefisien difusi.

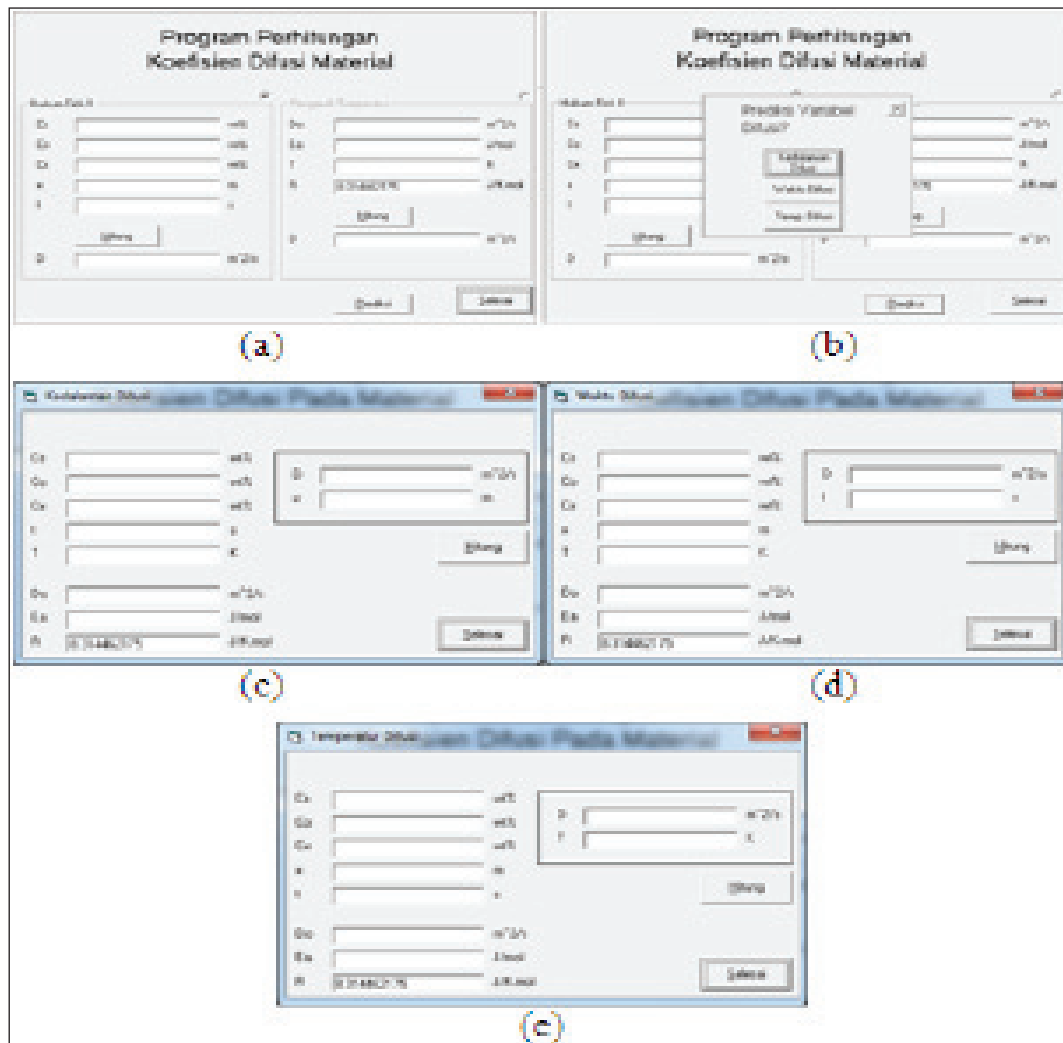
fungsi eksponensial temperatur, modul prediksi kedalaman, waktu, dan temperatur proses difusi.

Tampilan program komputasi numerik yang dibuat dalam Visual Basic ditampilkan pada Gambar 2.

Program dimulai dengan menampilkan pilihan perhitungan koefisien difusi dengan dua pendekatan, yaitu pilihan menampilkan menu prediksi dan pilihan untuk menutup program. Perhitungan dengan pendekatan Hukum Fick II diperlukan masukan parameter konsentrasi atom pendonor, baik di luar permukaan material, di permukaan dan kedalaman tertentu di dalam material, kedalaman difusi maupun waktu proses difusi. Perhitungan dilakukan dalam subprogram tersendiri berdasarkan persamaan 3 dan hasil perhitungannya ditampilkan pada menu utama seperti ditunjukkan pada Gambar 2.a. Perhitungan dengan pendekatan koefisien difusi sebagai fungsi

eksponensial dari temperatur diperlukan masukan parameter koefisien preeksponensial atom pendonor pada material tertentu, energi aktivasi atom donor, konstanta gas ideal, dan temperatur proses difusi. Perhitungan dilakukan dalam subprogram tersendiri berdasarkan persamaan 4 dan hasil perhitungannya ditampilkan pada menu utama seperti ditunjukkan pada Gambar 2.a.

Modul prediksi parameter kedalaman difusi yang ingin dicapai, waktu dan temperatur difusi yang diperlukan dalam proses difusi yang akan dilakukan dilakukan dalam subprogram tersendiri seperti ditunjukkan pada Gambar 2.b. Setiap modul prediksi diselesaikan dalam subprogram tersendiri. Gambar 2.c menampilkan subprogram untuk menentukan kedalaman difusi yang akan dicapai bila waktu dan temperatur proses difusi sudah ditentukan. Gambar 2.d menampilkan subprogram untuk menentukan waktu proses difusi yang diperlukan bila kedalaman



Gambar 2. Tampilan program perhitungan koefisien difusi. (a) Tampilan utama program untuk menghitung koefisien difusi satu dimensi. (b) Tampilan pilihan untuk memprediksi waktu, kedalaman, dan temperatur difusi. (c) Tampilan untuk memprediksi kedalaman difusi. (d) Tampilan untuk memprediksi waktu difusi. (e) Tampilan untuk memprediksi temperatur difusi.

dan temperatur proses difusi sudah ditentukan. Sedangkan Gambar 2.e menampilkan subprogram untuk menentukan temperatur proses difusi yang diperlukan bila kedalaman dan waktu proses difusi sudah ditentukan.

Komputasi numerik dilakukan menggunakan nilai-nilai yang diberikan dalam Tabel 1, yang berisi nilai-nilai parameter difusi dengan atom pendonor karbon yang didifusikan ke dalam baja. Perhitungan ini sudah dilakukan secara konvensional untuk menghitung kedalaman difusi.

Hasil perhitungan koefisien difusi yang disajikan pada Gambar 3 menunjukkan koefisien difusi yang dihitung menggunakan hukum Fick

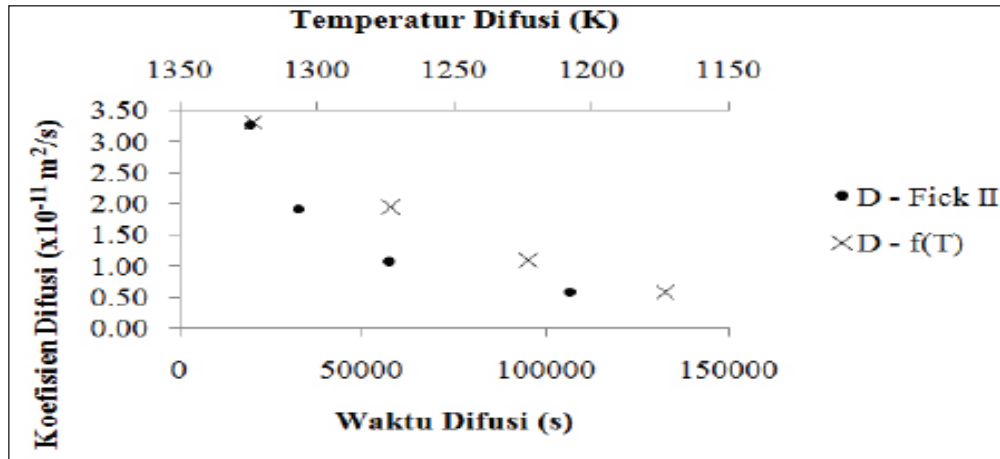
II dan persamaan koefisien difusi sebagai fungsi eksponensial temperatur mampu menghasilkan nilai koefisien difusi yang saling bersesuaian.

Gambar 4 menyajikan nilai prediksi ke dalam difusi dengan parameter waktu dan temperatur difusi seperti dalam Tabel 1. Nilai komputasi yang diperoleh sesuai dengan perhitungan konvensional, yakni pada parameter 4 dengan waktu difusi 19.000 detik dan temperatur difusi 1.323 K, menunjukkan hasil perhitungan yang paling mendekati nilai perhitungan konvensional. Hasil ini sangat dipengaruhi nilai koefisien difusi yang sebelumnya ditentukan menggunakan persamaan koefisien difusi sebagai fungsi eksponensial temperatur.

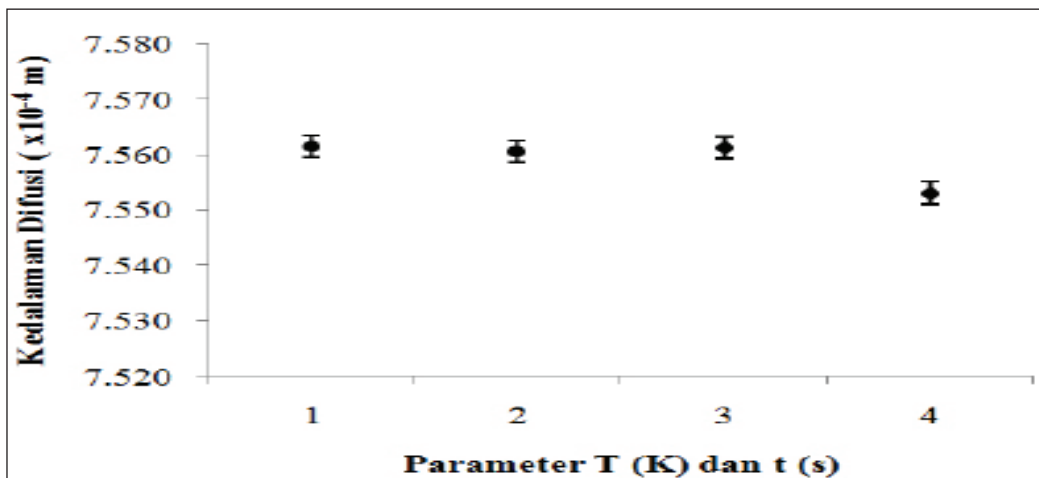
Tabel 1. Data yang digunakan untuk menguji program.

Co (wt%)	Cs (wt%)	Cx (wt%)	x (m)	D_0 (m^2/s)	E_a (J/mol)	Paramater	T (°C)	t (s)
0,20	1,00	0,60	$7,5 \times 10^{-4}$	$2,3 \times 10^{-5}$	148.000	1	900	106.400
						2	950	57.200
						3	1.000	32.300
						4	1.050	19.000

Sumber: Callister⁶.



Gambar 3. Grafik hasil perhitungan koefisien difusi menggunakan hukum Fick II dan persamaan sebagai fungsi eksponensial temperatur.

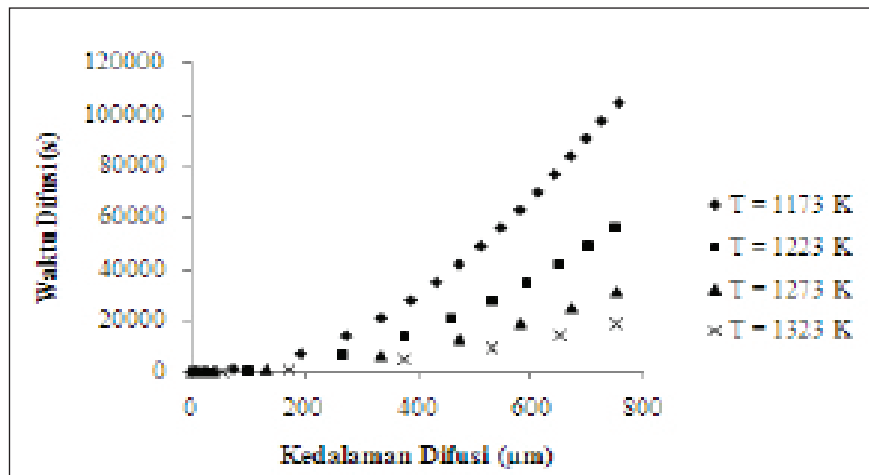


Gambar 4. Grafik hasil perhitungan prediksi kedalaman difusi, bila parameter temperatur dan waktu diketahui.

Gambar 5 menyajikan hasil prediksi waktu difusi sampai tercapainya kedalaman $7,4 \times 10^{-4}$ m untuk temperatur difusi berturut-turut 1.173 K, 1.223 K, 1.273 K, dan 1.323 K. Kecenderungan waktu yang diperlukan untuk pencapaian kedalaman difusi yang sama akan lebih cepat pada temperatur tinggi dibandingkan pada temperatur rendah.

KESIMPULAN

Koefisien difusi telah mampu dihitung dengan komputasi numerik menggunakan hukum Fick II dan persamaan koefisien difusi sebagai fungsi eksponensial temperatur. Program perhitungan yang dibuat dalam Visual Basic telah sesuai dengan perhitungan konvensional yang diketahui,



Gambar 5. Grafik hasil perhitungan prediksi waktu difusi untuk beberapa temperatur sampai kedalaman $7,5 \times 10^{-4}$ m ($750 \mu\text{m}$).

sehingga mampu meningkatkan keakuratan perhitungan koefisien difusi, kedalaman, waktu, dan temperatur difusi yang penting untuk meningkatkan efisiensi proses difusi.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada Dr. L.T Handoko yang telah membimbing dengan penuh kesabaran. Ucapan terima kasih kepada Dr. Patuan L.P Siagian sebagai narasumber yang telah memperkaya materi penulisan.

DAFTAR PUSTAKA

¹Petrova, Roumiana S. and Naruemon Suwattananont. 2005. Surface Modification of Ferrous Alloys with Boron. *Journal of Electronic Materials*, 34 (5): 575–582.

²Davis, J.R. 2002. *Surface Hardening of Steels*. ASM International.

³Zghair, Hayder Raheem. 2010. Development An Computer Software for Calculation The Diffusion Coefficient of Material. *Journal of Applied Sciences Research*, 6(11): 1781–1787.

⁴Keddam, M. 2006. Computer Simulation of Monolayer Growth Kinetics of Fe_2B Phase During the Paste-Boriding Process: Influence of the Paste Thickness. *Applied Surface Science*, 253: 757–761.

⁵Callister, William. D and David G Rethwisch. 2010. *Materials Science and Engineering An Introduction 8th Edition*. John Wiley & Sons, Inc.

⁶Abramowitz, Milton and Irene A. Stegun. 1970. *Handbook of Mathematical Function: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications.

⁷Carlitz, L. 1963. The Inverse of the Error Function. *Pacific J. Math*, 13(2):459–470.