

REACTION RESULT PREDICTION OF UO_2 OXIDATION IN THERMOGRAVIMETRIC USE OF REGRESSION POLYNOMIAL

Prediksi Hasil Reaksi Oksidasi UO_2 secara Thermogravimetri dengan Regresi Polinomial

Sahat Simbolon*

National Nuclear Energy Agency
Centre For Research and Development of Advanced Technology
Jl. Babarsari P.O.Box 6101 Yk bb, Yogyakarta 55281, Indonesia

Received 14 March 2005; Accepted 15 April 2005

ABSTRACT

Thermogravimetric curve of UO_2 oxidation reaction with oxygen from room temperature 25 °C to 425 °C had been depicted in three dimensions. The temperature oxidation reaction of UO_2 sample was arranged 5 °C / minute and it was found that increasing of sample weight was 1.3 mg. Uranium dioxide (UO_2) had not been reacted yet, reacted UO_2 , UO_3 and U_3O_8 as the result of oxidation reaction were depicted in three dimensions. The nonlinear relationships between temperature and time of oxidation reaction of UO_2 were simulated in three dimensions using MATLAB Version 5.3 software version.

Key words : Thermogravimetry curve, UO_2 , UO_3 , U_3O_8 , oxidation, non linear

PENDAHULUAN

Senyawa uranium dioksida UO_2 banyak digunakan sebagai bahan bakar nuklir di dalam reaktor nuklir, sehingga sifat kation uranium dan oksida uranium sangat penting untuk dipelajari terutama pada reaksi oksidasi. Atom uranium mempunyai empat jenis kation, yaitu kation U(III) dan U(V) tidak stabil terhadap oksigen, kation U(IV) relatif stabil terhadap oksigen, sedangkan U(VI) sangat stabil terhadap udara.

Serbuk UO_2 dapat mengalami reaksi oksidasi dengan udara pada suhu kamar, tetapi laju reaksinya sangat lambat. Laju reaksi ini dapat dipercepat dengan memperbesar akses reaksi kimianya, misalnya dengan memperbesar luas muka dari serbuk UO_2 dan menambahkan gas oksigen secara langsung serta menaikkan suhu reaksi [1].

Reaksi antara cuplikan UO_2 dengan oksigen pada suhu yang naik secara kontinyu dan terukur perubahan berat cuplikan UO_2 -nya dipelajari sebagai metoda analisis termogravimetri atau *Thermogravimetric Analysis (TGA)* [2]. Metoda analisis termogravimetri ini semata-mata hanya berdasarkan perbedaan berat cuplikan selama pemanasan cuplikan. Senyawa UO_2 akan bereaksi dengan gas oksigen yang sengaja dialirkan ke dalam sistim tungku pemanasan di mana suatu krus kecil tempat cuplikan UO_2 berada dan didapatkan hasil akhirnya berupa pertambahan berat cuplikan UO_2 . Selama proses reaksi oksidasi berlangsung

sebagian atau seluruh cuplikan UO_2 akan menjadi UO_3 dan akan tertimbang sekaligus secara bersama-sama dengan UO_2 yang belum bereaksi dengan oksigen.

Reaksi antara serbuk UO_2 dengan gas oksigen pada suhu yang berbeda-beda dapat dipandang sebagai reaksi sederhana, yaitu reaksi antara U(IV) di dalam UO_2 menjadi U(VI) di dalam UO_3 . Secara stoikiometri gabungan antara 2 molekul UO_3 dengan satu molekul UO_2 di dalam suatu kristal dapat menjadi satu molekul U_3O_8 dan merupakan oksida uranium yang stabil pada suhu yang relatif tinggi. Oleh karena itu senyawa ini dapat dianggap sebagai hasil akhir dari oksidasi UO_2 dengan gas oksigen. Akan tetapi senyawa oksida uranium yang paling stabil terhadap udara atau gas oksigen pada suhu yang tinggi adalah senyawa UO_3 , senyawa ini sudah tidak dapat menerima oksigen lagi baik pada suhu yang sangat tinggi. Reaksi oksidasi antara serbuk uranium dioksida dengan gas oksigen dengan metoda analisis termogravimetri bukan reaksi yang singkat tetapi membutuhkan waktu yang cukup lama, maka hubungan antara waktu dan suhu reaksi oksidasi UO_2 dapat berlangsung secara linear, tetapi dapat pula berlangsung secara tak linear (*non linear*).

Makalah ini akan memprediksi reaksi pembentukan UO_3 atau U_3O_8 dari hasil oksidasi UO_2 dengan gas oksigen sebagai hasil reaksi berturut-turut (*consecutive reaction*) dengan menggunakan perangkat lunak komputer baik dalam bentuk dimensi dua atau tiga. Di samping itu

* Email address : p3tm@batan.go.id

juga dibahas perubahan berat cuplikan UO_2 kalau hubungan antara suhu dan waktu pemanasan tak linear (*non linear*) dalam bentuk dimensi tiga dengan menggunakan perangkat lunak komputer MATLAB Versi 5.3

METODE PENELITIAN

Bahan

Senyawa UO_2 (P3TM), $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (Merck)
Gas oksigen (PT Gas)

Peralatan

1. Timbangan Sartorius
2. Instrumen kimia analisis termogravimetri (SETARAM)

Prosedur Kerja

Senyawa kristal $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ sebanyak 40 mg ditimbang dan dimasukkan ke dalam sebuah krus kecil, sebagai wadah, yang terbuat dari platina. Senyawa kristal $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ini terlebih dahulu disimpan di dalam eksikator agar jumlah air kristalnya tidak bertambah atau berkurang. Sebelum digunakan sebuah krus kecil di atas dicuci beberapa kali dengan air dan akhirnya dengan alkohol agar tidak terjadi reaksi kimia antara debu yang tertinggal di dalam wadahnya dengan $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Setelah kristal $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ dimasukkan ke dalam krus kecil sebagai wadahnya, kemudian wadah tersebut dimasukkan ke dalam tungku dan laju pemanasan sistem diatur 5°C / menit. Hasil reaksi dekomposisi $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ adalah berupa grafik dimulai dari suhu kamar sampai 1000°C dan didapatkan tiga kali perubahan berat yang mencolok. Percobaan reaksi dekomposisi $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ini dilakukan untuk kalibrasi suhu dan validasi suhu dari instrumen termogravimetri yang digunakan untuk senyawa UO_2 yang bereaksi dengan gas oksigen

Kemudian ditimbang sebanyak 40 mg UO_2 dan dimasukkan ke dalam suatu krus kecil yang terbuat dari logam platina dan dimasukkan ke dalam tungku pemanasnya. Laju pemanasan diatur seperti reaksi dekomposisi $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ yaitu 5°C / menit sampai didapatkan kurva termogravimetri yang sudah stabil. Hasil percobaan yang didapatkan berupa gambar grafik antara suhu dan perubahan atau penambahan berat cuplikan UO_2 . Selanjutnya berat akhir cuplikan UO_2 ditimbang kembali dan didapatkan berat akhir percobaan 41,3 mg. Reaksi oksidasi UO_2 dilakukan mulai suhu kamar 25°C sampai 425°C dan ke dalam sistem tersebut dialirkan gas oksigen.

Hasil percobaan dalam bentuk grafik diolah ke dalam bentuk matriks yang menggambarkan hubungan antara suhu, perubahan berat dan dibuat matriks antara suhu dengan waktu. Masing-masing hasil oksidasi dan sisa yang belum teroksidasi

dihitung dengan menggunakan stoikiometri reaksi oksidasi. Hasil reaksi oksidasi dan sisanya tergantung pada waktu dan suhu, maka hubungan antara UO_3 , U_3O_8 dan UO_2 sebagai senyawa yang terdapat di dalam cuplikan digambarkan dengan dalam bentuk dimensi dua dan tiga. Persamaan polinomial dari masing-masing senyawa dihitung dengan menggunakan *library polyfit* dan *polyval* pangkat 2, 4 dan 6 dan digambarkan dengan menggunakan fasilitas yang ada pada perangkat lunak MATLAB versi 5.3.[7] Akhirnya dibuat simulasi dari hubungan antara suhu dan waktu yang tak linear dan diprediksi hasil oksidasinya dalam bentuk dimensi dua dan tiga.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Reaksi pemanasan senyawa kalsium oksalat monohidrat $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ yang sudah diketahui masing-masing suhu reaksi dekomposisinya, mulai melepaskan air hidrat, gas CO dan gas CO_2 . Reaksi peruraian pertama dari senyawa $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ melepaskan molekul H_2O sehingga di dalam wadahnya hanya tinggal senyawa CaC_2O_4 , kemudian reaksi peruraian kedua CaC_2O_4 melepaskan gas CO dan di dalam wadahnya tinggal molekul CaCO_3 , reaksi dekomposisi yang ketiga CaCO_3 melepaskan gas CO_2 dan meninggalkan CaO di dalam wadahnya. Reaksi dekomposisi pertama pada suhu 183°C , sedangkan reaksi dekomposisi kedua pada suhu 540°C dan reaksi dekomposisi yang ketiga terjadi pada suhu 883°C . Dari hasil eksperimen dengan menggunakan $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ terlihat dengan jelas bahwa penurunan berat $\text{CaC}_2\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ yang berlangsung dalam tiga tingkat sesuai dengan suhu reaksi dekomposisi dan penurunan beratnya pun sudah sesuai. Dengan demikian metoda ini dapat digunakan untuk menganalisis bahan yang mengalami reaksi dekomposisi atau reaksi kimia sampai suhu 900°C .

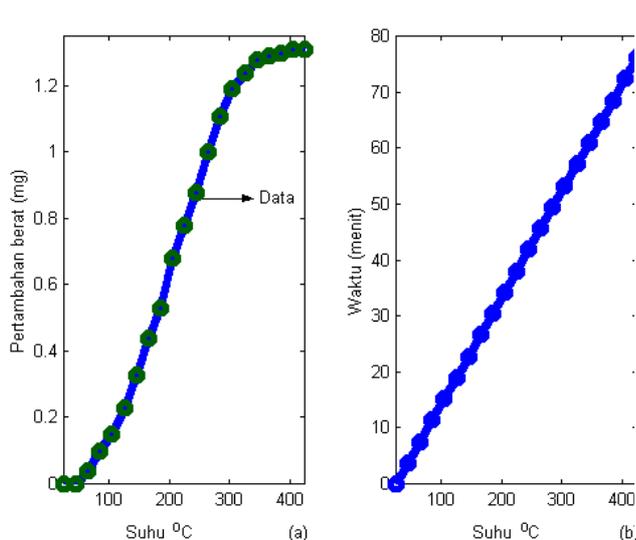
Reaksi antara molekul UO_2 dengan udara (oksigen) dalam bentuk serbuk di dalam suatu krus kecil yang terbuat dari platina dan suhunya dapat divariasikan mulai suhu kamar sampai suhu 900°C dapat dilakukan. Hasil reaksi antara UO_2 dengan udara dapat dilihat dari perubahan berat cuplikan UO_2 tersebut karena terekam dalam bentuk grafik, yaitu perubahan berat cuplikan lawan suhu. Perubahan atau penambahan berat cuplikan UO_2 mengekspresikan terjadinya reaksi kimia antara UO_2 dengan gas oksigen di dalam wadah platina yang tertimbang beratnya selama eksperimen dilakukan.

Kurva perubahan berat dan waktu UO_2 oksidasi lawan suhu serta uji derajat polinomial

Pada pemanasan awal perubahan berat cuplikan UO_2 tidak begitu mencolok, kemudian

secara perlahan-lahan perubahan beratnya naik terus. Pada saat mencapai suhu 425 °C perubahan berat cuplikan UO_2 sudah stabil. Pada kondisi seperti ini cuplikan UO_2 sudah tidak mengalami reaksi oksidasi lagi meskipun suhu sistem dinaikkan terus dan gas oksigen terus dialirkan ke dalam sistem. Karena indikasi terjadinya reaksi oksidasi UO_2 dengan oksigen adalah perubahan berat cuplikan UO_2 . Perubahan berat cuplikan UO_2 mulai suhu kamar sampai suhu 425 °C dan kurva antara suhu pemanasan lawan waktu tergambar sebagai garis lurus atau *linear* terlihat pada Gambar 1 a dan 1 b.

Hasil eksperimen yang didapatkan seperti pada Gambar 1a antara suhu dan perubahan berat di atas jelas dalam bentuk tak linear. Menurut Harius [4] ada 18 persamaan yang mungkin dapat digunakan untuk menerangkan secara matematis hubungan antara suhu dan pertambahan berat cuplikan, misalnya persamaan hukum pangkat (*power law*) dengan rumus $Y = a X^k$, persamaan ini sangat tergantung pada nilai k , hanya nilai $k = 0$ atau 1 saja yang akan menghasilkan garis linear, di luar itu akan menghasilkan bentuk kurva lengkung. Persamaan ini akan linear kalau dalam bentuk $\log - \log$. Untuk memilih salah satu dari 18 persamaan yang tersedia yang sesuai dengan hasil eksperimen tidak mudah, dengan pendekatan regresi polinomial menggunakan perangkat lunak komputer MATLAB versi 5.3 dapat dengan mudah dikerjakan dan didapatkan suatu bentuk persamaan polinomial yang sangat presisi.

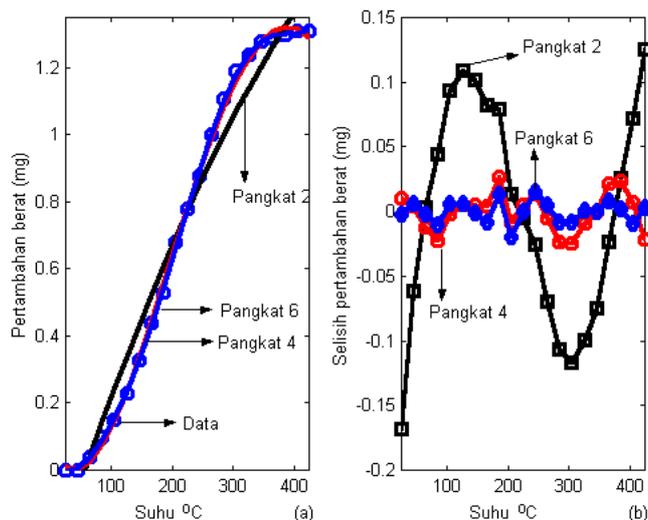


Gambar 1 (a) Perubahan berat UO_2 hasil oksidasi dengan gas oksigen mulai suhu kamar (25 °C) sampai 425 °C dan (b) kurva suhu (°C) lawan waktu (menit) oksidasi UO_2 dengan gas oksigen

Untuk mencari bentuk persamaan polinomial hubungan antara suhu dan perubahan berat cuplikan UO_2 digunakan perangkat lunak MATLAB Versi 5.3. Keandalan persamaan polinomial yang didapatkan juga sekaligus dapat diuji dengan menghitung selisih antara nilai polinomial dengan nilai aslinya, seperti pada Gambar 2a dan 2b.

Berdasarkan Gambar 2a ternyata bahwa polinomial pangkat dua tidak sesuai (*fit*) dengan data eksperimen, sementara itu kalau derajat polinomialnya pangkat 4 atau 6 sudah lebih sesuai (*fit*). Hal ini dapat terlihat dari selisih antara polinomial pangkat 4 dan 6 dengan data eksperimen cukup kecil, seperti pada Gambar 2 b. Perbedaan antara polinomial pangkat 4 dan pangkat 6 untuk data tersebut tidak terlalu nyata sehingga dapat dipilih salah satu dari keduanya.

Di dalam eksperimen ini reaksi fasa UO_2 dalam bentuk serbuk dan oksigen dalam bentuk gas, maka reaksi oksidasi UO_2 di atas tidak sesempurna kalau reaksinya dalam bentuk larutan dengan larutan. Reaksi larutan dengan larutan, semua kation U(IV) di dalam larutan mempunyai akses yang sama untuk bereaksi dengan oksigen. Pada eksperimen ini hanya sebagian saja molekul UO_2 yang dapat bereaksi dengan gas oksigen, yaitu terutama pada bagian luar dari serbuk UO_2 saja. Bagian sebelah dalam dari serbuk UO_2 tidak mempunyai akses berinteraksi dengan gas oksigen meskipun suhunya sudah cukup untuk bereaksi dengan gas oksigen, maka molekul UO_2 tersebut tetap saja sebagai molekul UO_2 , meskipun molekul yang lain sudah teroksidasi.



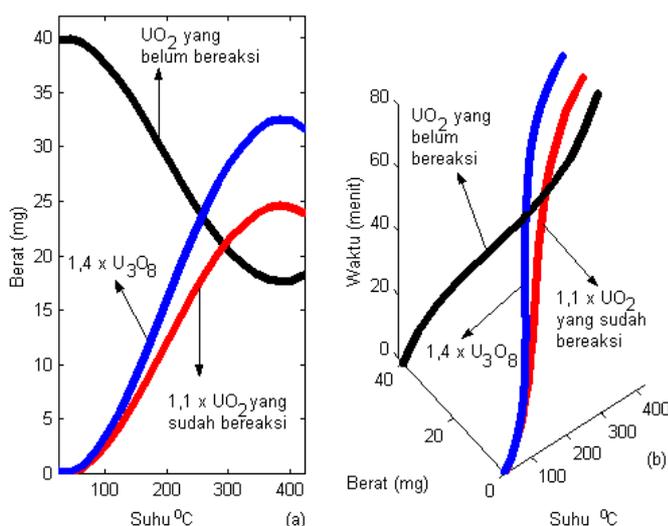
Gambar 2 (a) Penyuaian lengkung (*curve fitting*) data asli dengan polinomial pangkat 2, 4 dan 6; (b) selisih masing-masing polinomial pangkat 2, 4 dan 6 dengan data asli.

Hasil reaksi antara UO_2 dengan oksigen dianggap sebagai U_3O_8

Ditinjau dari sudut kestabilan oksida uranium, ada dua kemungkinan reaksi yang ideal yang mungkin terjadi antara serbuk UO_2 dengan gas oksigen yang akan terjadi. Salah satu kemungkinannya adalah berupa hasil oksida uranium U_3O_8 , dengan persamaan reaksi sebagai berikut.



Secara teori stoikhiometri kalau 40 mg cuplikan UO_2 bereaksi dengan gas oksigen dan menghasilkan suatu senyawa oksida uranium yang stabil pada suhu yang relatif tinggi yaitu U_3O_8 , maka berat cuplikannya menjadi 41,58 mg. Akan tetapi hasil eksperimen reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen menunjukkan berat total cuplikan adalah 41,3 mg atau penambahan berat cuplikan UO_2 hanya 1,3 mg. Dengan demikian didapatkan suatu oksida uranium U_3O_{8-x} , atau senyawa tri uranium okta oksida hipostoiokhiometri. Dari data eksperimen dan koefisien stoikhiometri oksida uranium yang didapatkan bahwa suhu dan waktu oksidasi sangat berpengaruh. Dengan bantuan perangkat lunak komputer MATLAB Versi 5.3, data dari Gambar 2 a dapat diolah menjadi suatu gambar perubahan UO_2 dan terbentuknya U_3O_8 dalam bentuk dimensi dua dan tiga seperti Gambar 3 a dan 3 b.



Gambar 3 (a) Hasil oksidasi UO_2 menjadi U_3O_8 mulai suhu kamar sampai suhu 425 °C dalam bentuk dimensi dua dan (b) Hasil oksidasi UO_2 menjadi U_3O_8 mulai suhu kamar sampai suhu 25 °C dalam bentuk dimensi tiga.

Senyawa UO_2 digambarkan 2 jenis, yaitu bagian yang turun adalah UO_2 yang belum bereaksi sedangkan bagian yang naik konsentrasinya adalah UO_2 yang sudah berubah menjadi U_3O_8 . Secara keseluruhan sebagian besar UO_2 belum bereaksi dengan oksigen terutama pada suhu yang relatif rendah, sedangkan pada suhu yang tinggi sudah banyak UO_2 yang bereaksi dengan oksigen juga terlihat dengan jelas pada Gambar 3a dan 3b. Sementara itu jumlah kandungan U_3O_8 sebagai hasil "akhir" juga terlihat dengan jelas perubahan konsentrasinya sesuai dengan suhu dan waktu di dalam gambar dimensi tiga. Agar perbedaan kurva U_3O_8 dan UO_2 yang sudah bereaksi dapat dilihat dengan jelas, maka masing-masing kurva dikalikan dengan suatu bilangan tertentu.

Hasil reaksi antara UO_2 dengan oksigen dianggap sebagai UO_3

Kemungkinan yang kedua adalah reaksi oksidasi seluruh U(IV) menjadi U(VI), dengan persamaan reaksi

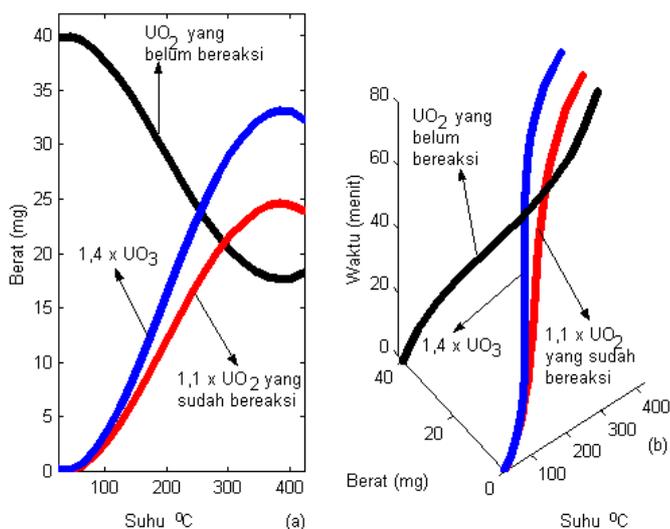


Seandainya seluruh cuplikan molekul UO_2 dengan berat 40 mg bereaksi dengan gas oksigen hasil akhirnya menjadi UO_3 dengan berat 42,37 mg. Akan tetapi seperti sudah disebutkan bahwa reaksi antara UO_2 dalam bentuk serbuk dengan gas oksigen tidak akan sempurna karena akses untuk bereaksi antara semua molekul UO_2 dengan gas oksigen tidak sama, maka hanya sebagian saja cuplikan dari UO_2 yang bereaksi dengan gas oksigen membentuk UO_3 . Jumlah kandungan cuplikan UO_2 yang dapat bereaksi dengan gas oksigen dan kandungan UO_2 yang belum bereaksi dengan oksigen terlihat dengan jelas. Kandungan UO_3 sebagai hasil reaksi oksidasi UO_2 terlihat dengan jelas perubahannya, baik di dalam gambar berdimensi dua dan tiga, seperti Gambar 4a dan 4b.

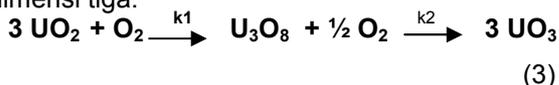
Mengingat jumlah oksigen yang bereaksi dengan senyawa UO_2 baik dianggap menghasilkan U_3O_8 , seperti reaksi (1) ataupun UO_3 seperti reaksi (2) tidak terlalu banyak, maka Gambar 3a, 3b dan 4a, 4b tidak terlalu besar perbedaannya, bahkan cenderung sama. Sama seperti Gambar 3a dan Gambar 4a dan 4b juga perlu diperlakukan perbedaan pembesaran agar dapat memisahkan kurva UO_2 dan UO_3 lebih jelas

Simulasi reaksi berurutan

Dari sudut perbandingan oksigen dan uranium atau ratio O/U antara senyawa UO_3 dan U_3O_8 relatif besar, maka reaksi 1 dan 2 dapat digabungkan menjadi satu reaksi berturutan (*consecutive reaction*) dengan persamaan reaksi

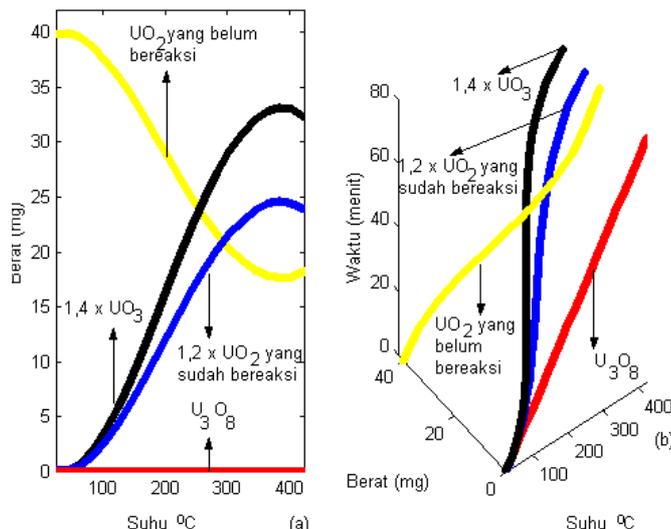


Gambar 4 (a) Hasil reaksi UO_2 menjadi UO_3 mulai suhu kamar sampai suhu $425\text{ }^\circ\text{C}$ dalam bentuk dimensi dua dan (b) Hasil reaksi UO_2 menjadi UO_3 mulai suhu kamar sampai suhu $425\text{ }^\circ\text{C}$ dalam bentuk dimensi tiga.



Masing-masing reaksi oksidasi (3) mempunyai nilai tetapan kecepatan reaksi k_1 dan k_2 . Apabila reaksi 3 dapat berjalan dan hasilnya dianggap sebagai U_3O_8 , maka nilai k_1 jauh lebih besar daripada k_2 atau ($k_1 \gg k_2$). Reaksi pertama sangat cepat dan reaksi kedua sangat lambat, sehingga U_3O_8 dianggap sebagai hasil akhirnya. Sebaliknya kalau hasil akhir reaksi adalah UO_3 , maka nilai k_1 jauh lebih kecil daripada k_2 atau ($k_1 \ll k_2$), reaksi kedua lebih cepat daripada reaksi pertama [6]. Dari data hasil eksperimen, koefisien stoikiometri reaksi 3 dan dengan menggunakan perangkat lunak MATLAB Versi 5.3, maka perubahan yang terjadi di dalam cuplikan selama reaksi oksidasi dapat digambarkan seperti Gambar 5 a dan b.

Pada bagian ini senyawa U_3O_8 yang terjadi terus bereaksi dengan oksigen dan menjadi UO_3 , sehingga konsentrasi U_3O_8 nol untuk semua kondisi. Kalau konsentrasi U_3O_8 seperti digambarkan pada gambar 5 a dan 5 b maka kondisi UO_3 dan UO_2 pada gambar 4 a dan 4 b tidak berbeda sama sekali. Sama seperti sebelumnya, karena perbedaan antara UO_3 dan UO_2 tidak begitu besar sehingga kalau digambarkan secara bersama-sama maka kedua kurva tersebut akan sangat dekat dan sukar dibedakan satu sama lain. Agar kurva UO_3 dan UO_2 dapat dibedakan satu sama lain, maka nilai UO_3 diperbesar 1,4 kali sedangkan nilai UO_2 yang sudah bereaksi dikalikan 1,2 kali, pembedaan ini hanya di dalam gambar saja.



Gambar 5 (a) Hasil reaksi oksidasi UO_2 dengan hasil akhir UO_3 dalam dimensi dua dan (b) Hasil reaksi oksidasi UO_2 dengan hasil akhir UO_3 dalam dimensi tiga

Simulasi perubahan suhu dan waktu yang tak linear

Tidak semua instrumen analisis termogravimetri dapat dirancang perubahan suhu yang linear terhadap waktu untuk waktu eksperimen yang relatif lama, adakalanya karena suatu bagian tidak berfungsi sempurna atau memang dirancang untuk maksud tertentu sehingga hubungan antara suhu dan waktu menjadi tak linear, berbeda dengan eksperimen di atas. Di lain pihak reaksi kimia dengan menggunakan metoda analisis termogravimetri lebih dominan akibat perubahan suhu selama reaksi oksidasi atau reaksi peruraian. Seandainya didapatkan suatu hasil analisis termogravimetri di mana kurva suhu lawan waktu untuk reaksi oksidasi UO_2 dengan oksigen tak linear, maka akan didapatkan hubungan antara suhu, perubahan berat yang lebih kompleks.

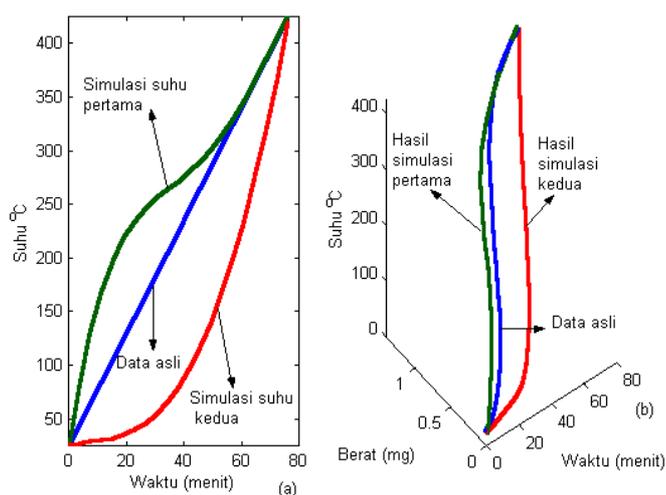
Kalau suatu eksperimen reaksi oksidasi UO_2 suhu awalnya atau pemanasannya naik sangat cepat, kemudian agak lambat dan akhirnya sesuai dengan yang linear atau sesuai dengan eksperimen, katakanlah ini sebagai simulasi I atau simulasi pertama. Sudah dapat dipastikan bahwa perubahan berat cuplikan reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen tidak sama dengan hasil eksperimen. Demikian pula sebaliknya kalau selama reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen, suhu pemanasan awal naik dengan sangat lambat dan kemudian kecepatannya naik dengan sangat cepat maka reaksi oksidasinya juga akan sangat sangat tinggi, akhirnya didapatkan suhu yang sesuai dengan eksperimen di atas dan ini dianggap sebagai simulasi II. Untuk melihat perubahan suhu simulasi I dan II Demikian pula

sebaliknya kalau selama reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen, suhu pemanasan awal naik dengan sangat lambat dan kemudian kecepatan suhunya naik dengan sangat cepat maka reaksi oksidasinya juga akan sangat tinggi, akhirnya didapatkan suhu yang sesuai dengan eksperimen di atas dan ini dianggap sebagai simulasi II. Untuk melihat perubahan suhu simulasi I dan II dengan jelas, hubungan antara suhu dan waktunya terlihat seperti pada gambar 6 a.

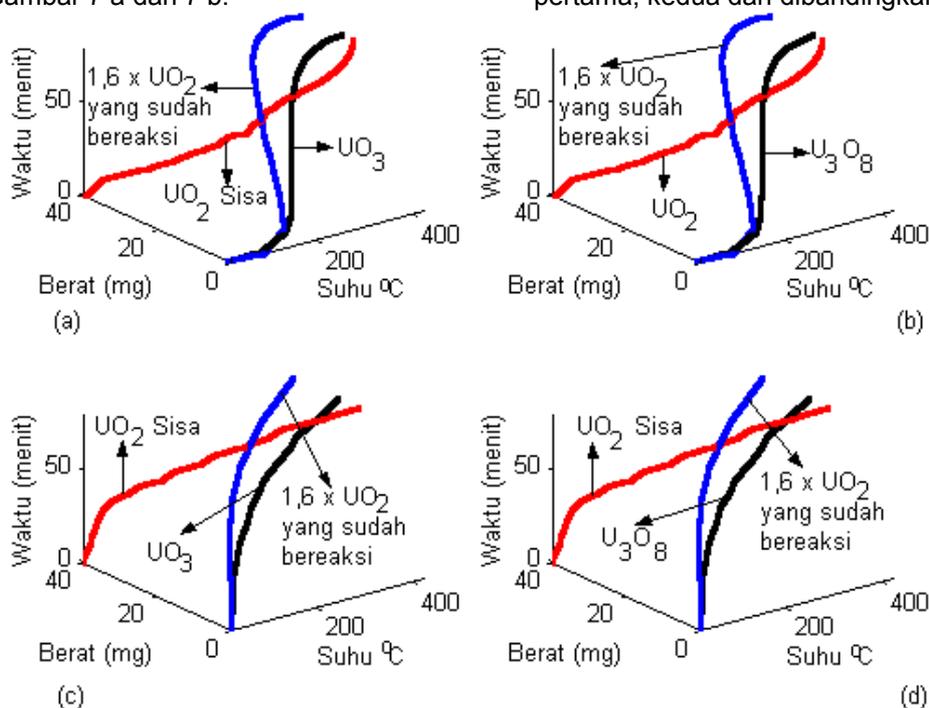
Dengan menggunakan perbandingan antara suhu simulasi dan eksperimen akan didapatkan perubahan berat cuplikan UO_2 dalam bentuk simulasi. Hasil perhitungan tersebut dapat digambarkan dalam bentuk dimensi tiga, yaitu waktu, suhu dan perubahan berat. Untuk melihat perbandingan antara nilai yang dihasilkan melalui simulasi I dan II dan dibandingkan pula dengan hasil eksperimen atau data asli dapat terlihat dengan jelas pada gambar 6 b.

Reaksi UO_2 dengan gas oksigen dapat dianggap hanya menghasilkan U_3O_8 saja atau senyawa UO_3 saja. Dengan menggunakan pemanasan simulasi pertama (I) akan didapatkan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan UO_3 atau pasangan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan U_3O_8 . Masing-masing oksida uranium tersebut digambarkan perubahannya dalam bentuk dimensi tiga pada Gambar 7 a dan 7 b.

Demikian pula halnya dengan menggunakan simulasi kedua (II) akan didapatkan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan UO_3 atau pasangan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan U_3O_8 . Masing-masing oksida uranium tersebut digambarkan perubahannya dalam bentuk dimensi tiga pada Gambar 7 c dan 7 d.



Gambar 6 (a) Perbandingan kenaikan suhu pemanasan UO_2 dengan oksigen yang linear dan tak linear, simulasi pertama dan kedua; (b) hasil prediksi dengan menggunakan data simulasi pertama, kedua dan dibandingkan dengan data asli.



Gambar 7 (a) Perbandingan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan UO_3 sebagai hasil oksidasi UO_2 hasil simulasi pertama; (b) Perbandingan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan U_3O_8 sebagai hasil oksidasi UO_2 hasil simulasi pertama; (c) Perbandingan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan UO_3 sebagai hasil oksidasi hasil simulasi kedua; dan (d) Perbandingan UO_2 sisa, UO_2 yang sudah bereaksi dan U_3O_8 sebagai hasil oksidasi UO_2 hasil simulasi kedua

Masing-masing pasangan tidak berbeda jauh, akan tetapi hasil simulasi (I) dan simulasi (II) kurjanya berbeda cukup jelas. Perbedaan antara hasil reaksi oksidasi dengan menggunakan simulasi (I) dan simulasi (II) menggambar dengan jelas bahwa perubahan suhu sangat memegang peranan yang cukup besar.

Kurva hasil pemanasan serbuk UO_2 dengan gas oksigen yang terjadi karena reaksi oksidasi mulai suhu kamar sampai pada suhu tinggi terdapat cukup banyak variabel sehingga kurjanya tidak selalu identik antara satu eksperimen dengan eksperimen yang lain. Meskipun bentuk kurva dari masing-masing oksida uranium tidak sama akan tetapi dengan membandingkan kurva hasil simulasi (I) atau (II) dapat diperkirakan bahwa selama pemanasan reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen berlangsung linear atau tak linear. Dengan menggunakan metoda di atas secara terbalik, yaitu dengan mendapatkan kurva metoda analisis termogravimetri "yang tak linear" kemudian dibandingkan perubahan beratnya lawan suhu dan perubahan berat lawan waktu, maka akhirnya didapat hubungan antara suhu dan waktu.

KESIMPULAN

1. Reaksi oksidasi senyawa UO_2 dan gas oksigen dengan metoda analisis termogravimetri, baik untuk hasil eksperimen, simulasi I dan II dapat digambarkan dalam bentuk perubahan berat lawan waktu dari masing-masing oksida U_3O_8 dan UO_3 , sebagai hasil dan UO_2 sebagai sisa dan UO_2 telah bereaksi.
2. Hubungan antara suhu, waktu dan perubahan berat masing-masing oksida uranium hasil eksperimen, hasil simulasi I dan II sangat

didominasi oleh peranan hubungan suhu dan waktu reaksi oksidasi UO_2 dengan gas oksigen.

3. Data dari dimensi dua, perubahan berat UO_2 dan suhu dan simulasi I dan II dapat diubah menjadi dimensi tiga, karena hubungan antara perubahan berat dan waktu dapat digambarkan dengan baik dan disamping itu perangkat lunak komputer MATLAB Versi 5.3 sangat unggul dalam bentuk numeris dan grafis.
4. Dengan menggunakan logika simulasi I dan II di atas perubahan berat cuplikan UO_2 lawan waktu atau suhu dapat digunakan untuk mencari hubungan antara suhu lawan waktu yang linear atau tak linear.

DAFTAR PUSTAKA

1. Raouf, Sh.M and Robens,E., 1983, *Microstructure and Thermal Analysis of Solid Surface*, John Wiley and Sons Ltd, Toronto
2. Keatch,C.J and Dollimore, D., 1975, *An Introduction to Thermogravimetry*, 2nd Edition. Heyden & Sons Ltd
3. Allen.T., 1975, *Particle Size Measurement*, 2nd Edition, Chapman and Hall, London
4. Harius,P.J (Ed.), 2002, *Principles of Thermal Analysis and Colorimetry*, RSC Royal Society of Chemistry, Cambridge
5. Lipkowitz, K,B and Boyd, B D (Ed.), 2001 *Review in Computational Chemistry* Volume 17 Wiley – VCH , New York
6. Fogler, S.H., 1992, *Elements of Chemical Reaction Engineering*, 2nd ed, Prentice-Hall International,Inc, London .
7. Hanselman D and Littlefield B., 1995, *MATLAB, Student Edition, Version 4 User's Guide*, Prentice Hall, New Jersey