

PENGARUH LAJU TEMPERATUR SOLIDIFIKASI TERHADAP KRISTALINITAS NANO SENG OKSIDA DENGAN METODE SIMULASI MOLEKULAR DINAMIK

Novel Bagas Satrio W¹, Agus Triono¹, Sumarji¹, Rahma Rei Sakura¹,
Dedi Dwilaksana¹, Robertoes Koekoeh KW¹, Hary Sutjahjono¹, M Asrofi¹.

¹ Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember
e-mail: iamnovelbgs@gmail.com

ABSTRACT

The presence of nano technology has an important role in utilizing a material, considering the use of nanotechnology in Indonesia has been applied in various fields, in the formation of nano zinc oxide (ZnO) there is a solidification process where this process is the final stage in ZnO nano formation. In the dynamic molecular simulation method, the nano ZnO solidification process will be observed with variations in the solidification temperature rates of $10^{10}K/s$, $10^{11}K/s$, $10^{12}K/s$, using LAMMPS software (Large-scale atomic / molecular massively parallel simulators) and OVITO as Help software from the results of the simulation process and VESTA-JP Minerals. From the simulation results, it can be concluded that the greater the solid temperature rate value the lower the nano ZnO crystallinity will be (amorphous).

Keywords: Molecular Dynamics, Simulation, Nano ZnO, Nanotechnology, Crystallinity

PENDAHULUAN

Aplikasi nanoteknologi di Indonesia semakin berkembang luas sehingga kehadiran dari nanoteknologi sudah dapat kita rasakan, nanoteknologi sudah mulai di aplikasikan sebagai teknologi yang digunakan untuk memenuhi kebutuhan masyarakat Indonesia, teknologi nano sudah di aplikasikan pada bidang agraris, komputer, kosmetik, produk elektronik, kesehatan dan masih banyak lainnya [1][5]. Sehingga hadirnya teknologi nano menjadi peluang untuk memunculkan potensi energi sumber terbarukan [6].

Hadirnya teknologi nano memiliki peranan penting dalam pemanfaatan suatu material khususnya dalam skala nano, material nano memiliki kelebihan dimana luas aktif area yang dimiliki nano lebih besar dibandingkan dengan material yang memiliki ukuran diatas skala nano [2]. Dalam pembentukan nanomaterial seng oksida terdapat proses solidifikasi yang mana merupakan proses dimana nanomaterial seng oksida terbentuk, [4] pada saat 2 atau lebih nanopartikel berada pada kondisi *melting* maka material tersebut akan bergabung

menjadi partikel yang lebih besar dan mengalami rekristalinasi, pada proses ini temperatur memiliki peranan penting pada struktur kristal yang dihasilkan pada nanomaterial seng oksida. Proses solidifikasi terjadi pada saat suhu pendinginan (*cooling phase*) yang artinya proses ini merupakan mulai terbentuknya nanopartikel seng oksida dan proses ini terjadi pada skala atomik. Maka dibutuhkan kajian molekular dinamik untuk dapat membahas fenomena yang terjadi.

Molekular dinamik merupakan kajian yang digunakan untuk mengamati pergerakan antar molekul yang saling berinteraksi pada saat proses pembentukan nano partikel karena pada proses pembentukan nano partikel tidak dapat diamati oleh mata telanjang. Pergerakan partikel yang terjadi karena energi yang diberikan kepada material, sehingga memaksa molekul-molekul pada material bergerak dan saling melepaskan diri seiring dengan besarnya energi yang diberikan pada material. Dengan menggunakan kajian molekular dinamik kita dapat mengetahui proses yang terjadi pada saat perubahan serbuk seng oksida menjadi

serbuk seng oksida berukuran nano, dan juga dengan bantuan aplikasi yang dapat memudahkan untuk menjelaskan serta mengamati proses yang terjadi pada proses pembentukan nano partikel dengan jalan *visualisasi* proses yang terjadi.

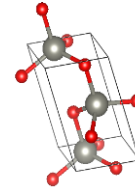
Penelitian ini berfokus pada proses solidifikasi nanopartikel seng oksida dengan menggunakan metode simulasi molekular dinamik, dimana laju temperatur solidifikasi memiliki pengaruh terhadap tingkat kristalinitas nanopartikel seng oksida, metode ini berupa simulasi berbasis komputasi sehingga dapat mengetahui fenomena solidifikasi pada proses pembentukan nanopartikel seng oksida. Sehingga hasil penelitian ini ditujukan sebagai penunjang analisis berbasis komputasi pada proses solidifikasi nano seng oksida.

METODOLOGI

Pada penelitian ini digunakan metode simulasi molekular dinamik dengan menggunakan bantuan perangkat lunak LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) dan perangkat visualisasi OVITO yang menggambarkan proses solidifikasi nano ZnO, serta perangkat lunak VESTA JP-Minerals sebagai software modifikasi atom yang digunakan. Digunakan material partikel nano seng oksida Wurtzite seperti ditunjukkan pada gambar 1, digunakan jumlah atom 5806 atom dan menggunakan potensial Lennard-Jones dimana persamaan LJ dapat dituliskan dengan:

$$V^{LJ}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right)$$

Dimana r_{ij} Merupakan jarak atom i dengan atom j V_{ij} adalah energi dispersi, σ adalah jarak energi interaksi antar partikel dan ϵ adalah kedalaman potensial. Lennard-Jones potensial merupakan potensial energi yang digunakan untuk menjelaskan interaksi antar 2 atom/molekul, fungsi empiris LJ menjelaskan tentang energi dispersi pada interaksi antar atom i dengan atom j yang terpisah sejauh r_{ij} .



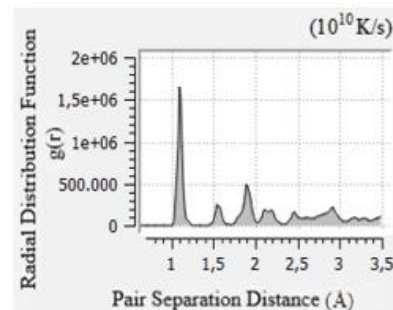
Gambar 1. Struktur Atom ZnO wurtzite

Digunakan variasi laju temperatur solidifikasi 10^{10} K/S, 10^{11} K/S, 10^{12} K/S dengan timestep 100.000 ps dan temperatur 10.000 K – 300 K.

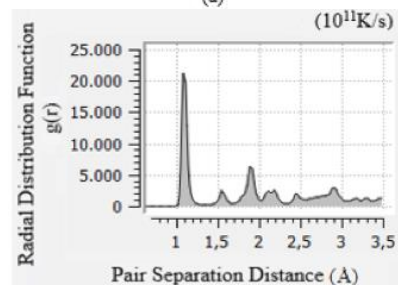
HASIL DAN PEMBAHASAN

Kristalinitas Nano ZnO

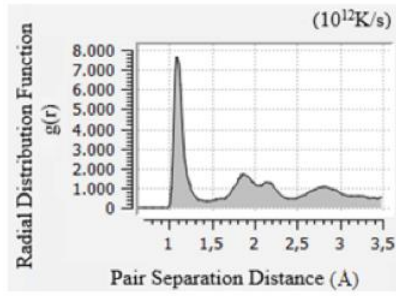
Tingkat kristalinitas suatu material dapat ditentukan melalui grafik fungsi distribusi radial (RDF), secara umum fungsi distribusi radial menjelaskan bagaimana interaksi antara perubahan densitas terhadap perubahan jarak atom[1][3]. Jadi pada pembahasan simulasi molekular dinamik peak yang dihasilkan pada data fungsi distribusi radial dapat digunakan sebagai tolak ukur kristalinitas nano seng oksida.



(a)



(b)



(c)

Gambar 2. Grafik fungsi distribusi radial nano ZnO (a) laju 10^{10} K/s, (b) laju 10^{11} K/s, (c) laju 10^{12} K/s

Pada gambar 2. Dapat dilihat bahwa peak tertinggi dihasilkan oleh variasi laju 10^{10} K/s dan semakin tinggi nilai laju temperatur kristalinitas akan semakin rendah hal ini disebabkan oleh energi yang diterima oleh material tersebut dengan nilai laju yang kecil maka material menerima energi lebih besar sehingga kristalinitas yang dihasilkan oleh material begitu sebaliknya semakin besar laju yang dikankan pada proses solidifikasi maka energi yang diterima semakin kecil. Hal ini selaras dengan penelitian yang dilakukan oleh Bharati & Duin 2010.

Pertumbuhan Partikel Nano ZnO

Pada pertumbuhan partikel analisa dilakukan dengan pengamatan perubahan ukuran kluster atom yang terbentuk pada saat proses solidifikasi berlangsung dapat dilihat pada tabel 1.

Tabel 1. Perubahan ukuran kluster pada proses solidifikasi ZnO

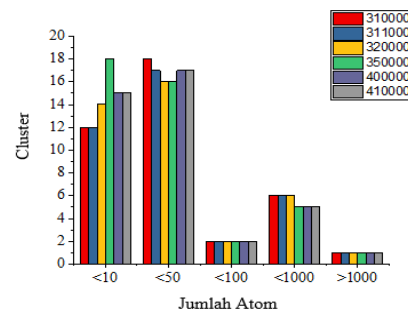
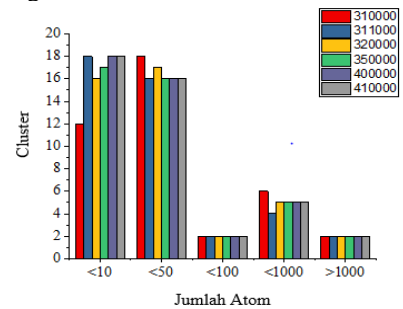
No.	Material	Laju Temperatur Solidifikasi (K/s)	Ukuran Kluster (melting) (nm)	Ukuran Kluster(solid) (nm)
1.		10^{10}	3,318	3,394
2.	ZnO (Wurtzite)	10^{11}	3,318	3,351
3.		10^{12}	3,318	3,317

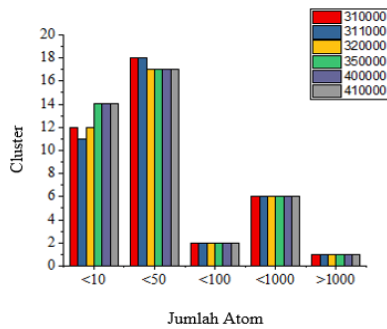
Pada variasi 10^{10} K/s dihasilkan diameter kluster atom sebesar 3,394 nm, pada diameter 10^{11} K/s terbentuk kluster atom dengan ukuran 3,351 sedangkan pada variasi 10^{12} K/s dihasilkan kluster atom dengan ukuran 3,317 nm, dari hasil tersebut terbukti bahwa semakin besar nilai laju temperatur

solidifikasi maka pertumbuhan partikel pada partikel nano seng oksida akan semakin kecil hal ini disebabkan karena, atom-atom membutuhkan waktu dan energi yang cukup untuk berikatan antara satu atom dengan atom lain atau satu kluster atom dengan satu kluster atom yang lain maka seperti dijelaskan pada pembahasan kristalinitas bahwa semakin besar nilai laju temperatur solidifikasi maka energi yang dihasilkan semakin kecil maka secara otomatis partikel ZnO dengan variasi 10^{10} K/s mengalami perubahan ukuran kluster yang paling dominan karena energi dan waktu yang dimiliki oleh atom ZnO, begitu sebaliknya partikel ZnO dengan variasi 10^{12} K/s bahkan mengalami penurunan ukuran kluster atom hal ini disebabkan nilai laju yang terlalu besar sehingga atom-atom tidak sempat mengalami proses pertumbuhan (*grain growth*).

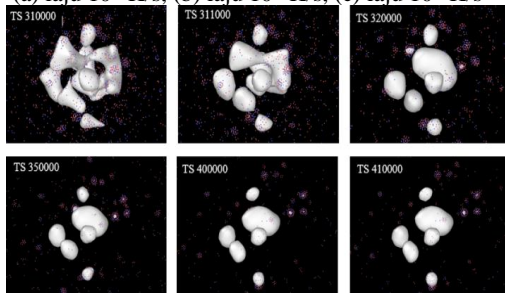
Distribusi Partikel Nano Seng Oksida

Pada proses solidifikasi nano seng oksida material berada pada fasa leleh (melting) sesaat setelah memasuki fasa leleh atom atom akan mengalami proses rekombinasi setelah melewati fasa evaporasi. Pada fasa ini atom-atom akan mulai berkumpul dan membentuk ikatan yang mana atom atom yang berada pada cluster kecil akan berikatan dengan atom-atom yang berada pada cluster yang besar (memiliki banyak jumlah atom). Seperti ditampilkan pada gambar 3.

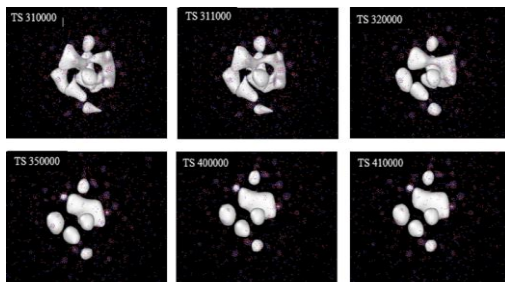




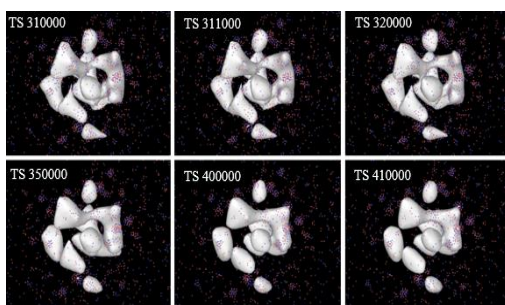
Gambar 3. Grafik distribusi partikel nano ZnO (a) laju 10^{10} K/s, (b) laju 10^{11} K/s, (c) laju 10^{12} K/s



(a)



(b)



(c)

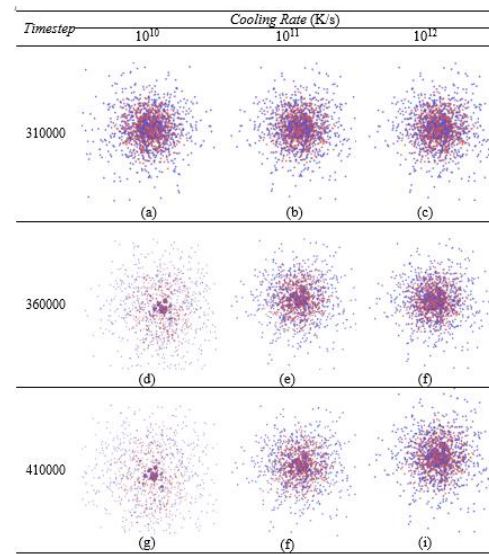
Gambar 4. Visualisasi distribusi partikel nano ZnO (a) laju 10^{10} K/s, (b) laju 10^{11} K/s, (c) laju 10^{12} K/s

Pergerakan distribusi atom dapat dilihat melalui visualisasi seperti pada gambar 4. dimana proses rekombinasi terlihat seiring dengan berubahnya timestep. terlihat bahwa

proses rekombinasi terlihat jelas pada material nano seng oksida dengan variasi laju 10^{10} K/s dan 10^{11} K/s sedangkan pada variasi 10^{12} K/s pada gambar 4. Proses rekombinasi tidak terlihat hal ini disebabkan akibat laju yang terlalu cepat yang mengakibatkan atom atom tidak sempat mengalami proses rekombinasi. Maka dari grafik dan hasil visualisasi membuktikan bahwa jika laju yang diberikan pada material terlalu besar maka proses rekombinasi atom pada solidifikasi nano ZnO akan terganggu dan tidak stabil[8].

Visualisasi Solidifikasi Nano Seng Oksida

Pada proses solidifikasi nano seng oksida terdapat fenomena-fenomena yang terjadi di dalamnya dan fenomena tidak dapat diamati oleh mata telanjang sehingga dibutuhkan bantuan metode simulasi dan visualisasi untuk mengetahui fenomena yang terjadi pada proses solidifikasi nano seng oksida.

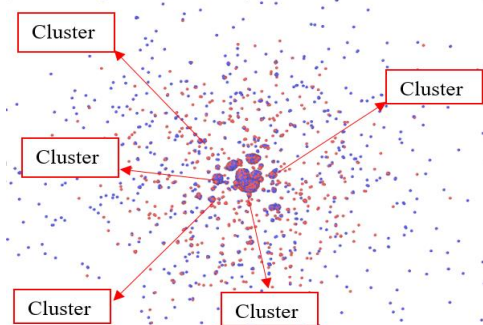


Gambar 5. Visualisasi Solidifikasi Nano ZnO

Pada gambar 5. Menunjukkan visualisasi solidifikasi nano seng oksida dengan variasi laju temperatur solidifikasi 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, 10^{12} K/s. Dari hasil visualisasi terlihat bahwa laju temperatur solidifikasi sangat mempengaruhi hasil akhir dari nano seng oksida yang terbentuk, hal ini membuktikan bahwa semakin tinggi nilai laju temperatur solidifikasi maka kondisi kristalinitas akan semakin rendah hal ini dapat dibuktikan dari

hasil fungsi distribusi radial (RDF) pada gambar 5. dan juga hasil visualisasi yang menunjukkan bahwa semakin tinggi nilai laju maka atom-atom tidak membentuk *cluster atom* seperti terlihat pada gambar 5 (i).

Sedangkan pada variasi 10^{10} K/s seperti pada gambar 5 (g) atom-atom nano partikel seng oksida terlihat membentuk *cluster atom*, begitu pula pada variasi 10^{11} K/s pada gambar 5. (h) atom-atom terlihat membentuk *cluster atom*. Melihat dari hasil visualisasi maka dapat dikatakan pada atom nano seng oksida pada variasi 10^{10} K/s dan 10^{11} K/s menerima cukup energi untuk membentuk suatu *cluster atom* dan hal ini juga berpengaruh pada tingkat kristalinitas yang dihasilkan. Sedangkan pada variasi 10^{12} K/s pada gambar 5. (i) belum menunjukkan adanya *cluster atom* yang terbentuk dari hasil visualisasi, hal ini disebabkan karena nilai laju temperatur solidifikasi yang digunakan pada variasi ini terlalu besar sehingga energi yang diterima oleh atom-atom akan semakin berkurang dan secara otomatis atom-atom ZnO tidak memiliki energi dan waktu yang cukup untuk membentuk *cluster atom* yang mana pada kondisi ini tingkat kristalinitas yang dihasilkan rendah [6].



Gambar 6. Cluster atom partikel nano ZnO

Pada gambar 6 terlihat bahwa dalam proses solidifikasi terdapat fenomena rekombinasi dan pertumbuhan partikel (*grain growth*) sehingga atom-atom dapat membentuk suatu cluster atom. Proses ini terjadi pada kisaran temperatur 2700- 300 K dan terjadi pada fasa leleh (*melting*) menuju fasa padat (*solid*), hal ini selaras dengan penelitian yang dilakukan oleh savka, dkk, 2017. Bahwa dalam proses kondensasi nano seng oksida dapat diklasifikasikan menjadi beberapa tahapan yang diantaranya terdapat proses rekombinasi atom dan pertumbuhan partikel pada suatu kelompok atom (kluster).

KESIMPULAN

Dari penelitian yang telah dilakukan maka peneliti dapat menarik kesimpulan sebagai berikut:

1. Dari hasil simulasi solidifikasi nano seng oksida di dapat data fungsi distribusi radial (RDF) yang menunjukkan bahwa semakin besar nilai laju temperatur solidifikasi maka tingkat kristalinitas nano seng oksida akan semakin menurun hal tersebut dapat dibuktikan pada hasil fungsi distribusi radial (RDF). Pada variasi 10^{10} K/s *peak* sekitar 1.800.000, variasi laju 10^{11} K/s menghasilkan *peak* 22.000 dan pada variasi 10^{12} K/s menghasilkan *peak* pada angka 8.000.
2. Dari hasil simulasi, pada pertumbuhan kluster nano seng oksida dihasilkan data dengan diameter kluster atom awal solidifikasi sebesar 3,318 nm dan menghasilkan ukuran akhir kluster atom sebesar 3,394 nm menggunakan laju 10^{10} K/s, 3,351 nm dengan laju 10^{11} K/s, sedangkan menggunakan laju 10^{12} K/s menghasilkan kluster atom sebesar 3.17 nm.
3. Pada distribusi partikel solidifikasi nano seng oksida dapat di ambil kesimpulan semakin besar nilai temperatur solidifikasi maka distribusi partikel akan semakin menurun.
4. Visualisasi dari simulasi dinamika molekul pada partikel material nano seng oksida dengan menggunakan laju temperatur solidifikasi sebesar 10^{10} K/s, 10^{11} K/s dan 10^{12} K/s berhasil menggambarkan serta menjelaskan fenomena yang terjadi pada proses solidifikasi nano seng oksida yang ditandai dengan terjadinya proses rekombinasi pada atom-atom yang dibuktikan melalui data-data hasil simulasi dan ditunjang dengan hasil visualisasi yang ditampilkan.

DAFTAR PUSTAKA

- [1]. Bharathi, A. K. dan Duin, A. V. 2010. Analysis Of The Thermal Properties Of Zinc Oxide Using The Reaxff Reactive Force Field. *thesis*, Pennsylvania, Mechanical Engineering, The Pennsylvania State University.

- [2]. Carruthers, J. 2006. Fabrication and Characterization of Nanomaterials. Portland, Physics Department, Portland State University.
- [3]. Dianat, A. dan Medrano, L. 2015. Computersimulation in der Materialwissenschaft. Germany, Institut für Werkstoffwissenschaft.
- [4]. Hu, M., Poulikakos, D., Grigoropoulos, C. P. dan Pan, H. 2010. Recrystallization of picosecond laser-melted ZnO nanoparticles in a liquid: A molecular dynamics study. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 182, (1): 164504.
- [5]. Ramsden, J. J. 2010. Nanotechnology An Introductions. Cranfield, Elsevier.
- [6]. Savka, S. S., Popovych, D. I. dan Serendnytski, A. S. 2017. Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes of Zinc Oxide Nanoclusters in Oxygen Environment. Springer Proceedings in Physics, 195.
- [7]. Sholahuddin, I. 2014. Peningkatan Unjuk Kerja Nanogenerator Zno Berbasis Serat Nano Melalui Penumbuhan Nanowire Pada Permukaan Serat. *Penelitian Dosen pemula*, Jember, Teknik Mesin, Universitas Jember.
- [8]. Suh, D. dan Yasuoka, K. 2014. Nanoscale Droplet Vaporisation By Molecular Dynamics. Proceedings Of The 3RD International Conference On Molecular Simulations