

## ANALISIS KRISTALINITAS NANO ALPHA-ALUMINA (SPHERE) PADA PROSES PENDINGINAN MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL

Ivan Permadi Mahfud<sup>1\*</sup>, Agus Triono<sup>2</sup>, Santoso Mulyadi<sup>2</sup>, Gaguk Jati Sukamto<sup>2</sup>  
M Dimiyati Nashrullah<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Mahasiswa Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Jember

<sup>2</sup>Staf Pengajar Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Jember

\*email: ivanpermadimahfud@gmail.com

### ABSTRACT

*Nanomaterials are nano-meter (nm) sized materials, and have become increasingly important in the past decade because of their special characteristics compared to larger materials [3]. In the process of forming nano alumina material there are several phases, one of which is a very important solidification process in the formation of nano alumina. In this study using computer simulations with the help of LAMMPS applications (Large-scale atomic molecular massively parallel simulators) and OVITO as supporting applications. Variations used in the Solidification Rate are  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s,  $10^{12}$  K/s, and after simulating the variation of  $10^{10}$  K/s produces the highest radial distribution function with a peak value of around 550.000, while at the rate of 1011 K/s peak the radial distribution function is 45.000 and the variation of 1012 K/s produces a peak of 15.000.*

*Keywords: nano alumina, molecular dynamics, solidification rate, crystallinity.*

### PENDAHULUAN

Nanomaterials yaitu bahan yang berukuran nano meter (nm), dan telah menjadi semakin penting dalam dekade terakhir karena karakteristik khusus mereka dibandingkan dengan bahan berukuran lebih besar (bulk material). Hal khusus yang mereka miliki yaitu peningkatan sifat fisik jauh lebih tinggi dibandingkan bahan berukuran mikro (Roco, M. C., 1999). *Nanotech* adalah untuk menyelidiki desain, fabrikasi, dan pemanfaatan bahan fungsional dengan setidaknya satu dimensi unggulan diukur dalam nanometer (nm) yaitu 1-100 nm Bashir, S. dan Liu, J., 2015).

Alumina merupakan senyawa Aluminium dimana bereaksi terhadap oksigen, dan dituliskan secara ilmiah  $Al_2O_3$ . Alumina ( $Al_2O_3$ ) secara luas digunakan dalam berbagai aplikasi karena memiliki sifat fisik dan kimia yang unggul seperti tahan terhadap panas yang tinggi, isolator listrik yang baik, tahan abrasi dan memiliki ketahanan korosi yang tinggi (Fujiwara, S. Y. dkk., 2007). Pada proses pembentukan material nano alumina terdapat beberapa fasa

salah satunya yaitu proses solidifikasi yang sangat penting dalam pembentukan nano alumina (Stuart, A., Shankar, K., dan Weber, J. K. R., 1997).

Dalam fisika komputasi, simulasi komputer dikategorikan menjadi dua yaitu dinamika molekul (*molecular dynamic/MD*) dan Monte Carlo (MC). Dinamika molekul merupakan suatu teknik simulasi komputer dimana perubahan waktu dari interaksi antar atom yang diikuti dengan mengintegrasikan persamaan gerak antar atom. Oleh karena itu, berbeda dengan metode Monte Carlo, dinamika molekul adalah teknik deterministik yaitu memberikan pengaturan awal dari parameter-parameter, dan perubahan waktu berikutnya keadaan sistem dapat ditentukan

### METODOLOGI

Metode yang digunakan pada penelitian ini yaitu metode simulasi untuk memodelkan dan menggambarkan proses Kristalinitas Alpha-Alumina, metode simulasi prinsip pertama seperti teori fungsional kerapatan memecahkan elektronik untuk menghitung total energi dari sistem atom. Perawatan

mekanika kuantum ini memungkinkan elektron satu untuk mempelajari materi pada skala atom sangat akurat. Namun, disana banyak proses fisik yang panjang dan skala waktunya berada di luar domain saat ini dapat diakses oleh metode utama pertama (Trunov, M. A., Schoenitz, M., dan Dreizin, E. L., 2006). Potensial yang digunakan yaitu Lennard-Jones yang berfungsi untuk menggambarkan interaksi antara kedua atom atau molekul netral. Potensial tersebut menolak bila jarak terlalu dekat dan menarik bila jarak menjauh. Titik seimbang yang potensialnya minimum terletak pada posisi  $r_{min}$  memenuhi  $F(r_{min}) = 0$ . Ketika jarak antar partikel terlampaui jauh maka interaksi antara partikel-partikel diabaikan diberi nilai rcutoff. Potensial Lennard-Jones pada interaksi antar atom yang berjarak lebih besar dari nilai rcutoff dituliskan sebagai berikut :

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

Dimana:

- $r_{ij}$  = jarak atom i dengan atom j
- $V_{ij}$  = energi dispersi
- $\sigma$  = jarak energi interaksi antar partikel
- $\epsilon$  = Kedalaman potensial

Variasi yang digunakan laju temperatur solidifikasi  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s,  $10^{12}$  K/s dengan timestep 100.000 ps, temperatur 10.000 K – 300 K dan jumlah atom sebanyak 2630

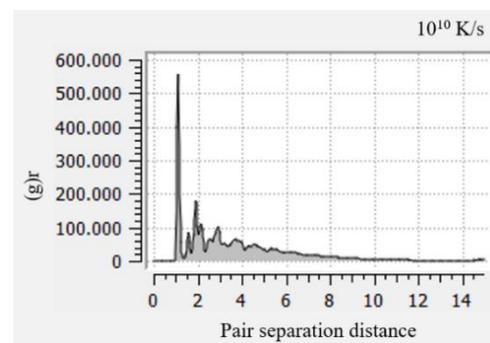
## HASIL DAN PEMBAHASAN

Sebagai pembuktian hasil dari simulasi maka dibutuhkan perbandingan data antara simulasi dengan hasil experimental. Proses simulasi dinamika molekul merupakan suatu teknik untuk mencontoh proses yang terjadi dalam suatu sistem pada keadaan lingkungan yang nyata dengan bantuan perangkat komputer dan dilandasi oleh beberapa asumsi tertentu sehingga sistem tersebut bisa dipelajari secara ilmiah (Yua, I. K., dkk., 2009).

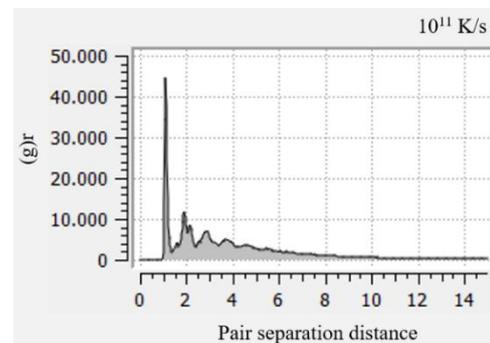
Variabel yang digunakan yaitu struktur kristal Alpha-Alumina dengan massa unsur atom aluminium 28,99 kg/kmol dan massa unsur atom oksigen 15,9 kg/kmol, serta menggunakan potensial Lennard-Jones. Pada proses simulasi ini laju temperatur

pendinginan yang digunakan adalah  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s dan  $10^{12}$  K/s dengan temperatur sebesar 5000 K – 300 K serta jumlah atom sebesar 2630 atom. Proses menjalankan simulasi nano alumina yaitu selama 5 jam - 10 jam pada setiap variasi. Waktu yang bervariasi ini disebabkan oleh beberapa faktor yang mempengaruhi yaitu jumlah atom, timestep, proses komputasi serta spesifikasi komputer atau laptop yang digunakan.

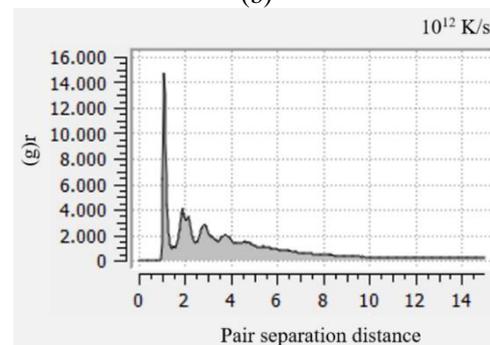
## Analisis Laju Pendinginan Terhadap Kristalinitas Nano Alumina



(a)



(b)



(c)

Gambar 1. Fungsi distribusi radial nano Alumina dengan variasi laju temperatur

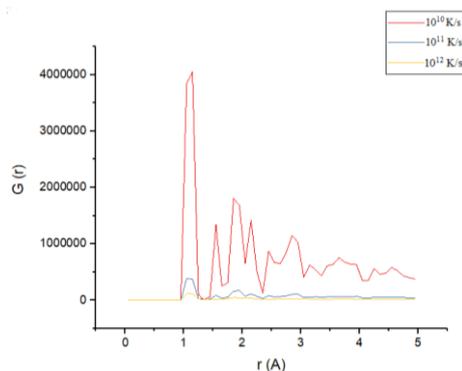
pendinginan (a)  $10^{10}$  K/s, (b)  $10^{12}$  K/s, dan (c)  $10^{12}$  K/s

Pada kajian molekular dinamik metode yang digunakan untuk menganalisa kristalinitas suatu material yaitu megacu pada fungsi distribusi radial (*Radial Distribution Function*) yang dimiliki oleh suatu material. Grafik RDF dari 3 variasi yang sudah ditentukan ditampilkan dalam Gambar 1.

Pada Gambar (a) dengan variasi 1010 K/s menghasilkan fungsi distribusi radial dengan angka *peak* sekitar 550.000, pada gambar (b) dengan variasi laju  $10^{11}$  K/s *peak* yang dihasilkan 45.000 dan pada gambar (c) dengan variasi  $10^{12}$  K/s menghasilkan *peak* sekitar 15.000. Dari hasil tersebut dapat dikatakan bahwa tingkat kristalinitas dari material nano alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s menghasilkan *peak* yang lebih tinggi dibandingkan dengan variasi yang lain. Hal ini disebabkan oleh energi yang diterima oleh atom-atom, jadi semakin rendah nilai laju temperatur pendinginan maka energi yang diterima oleh atom-atom akan semakin besar.

### Analisis Laju Pendinginan Terhadap Radial Distance

*Radial Distance* merupakan suatu metode untuk mengetahui kristalinitas pada proses kristalin material nano Alumina, ketika laju pendinginan sangat cepat aluminium oksida amorf dapat terbentuk, sedangkan pada tingkat pendinginan yang sangat lambat Alpha-Alumina dapat terbentuk (Ansell, dkk., 1997).



Gambar 2. Perbandingan fungsi distribusi radial nano alumina pada variasi laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s, dan  $10^{12}$  K/s

Pada Gambar 2. menunjukkan perbedaan tinggi *peak*, variasi pertama  $10^{10}$  K/s berada pada *peak* yang paling tinggi dan variasi ketiga  $10^{10}$  K/s berada pada *peak* paling rendah, perbedaan tinggi rendahnya *peak* pada grafik tersebut menunjukkan jumlah ikatan atom  $Al_2O_3$ , semakin tinggi *peak* maka jumlah ikatan atom akan semakin banyak dan semakin rendah *peak* maka ikatan atom yang terbentuk semakin sedikit.

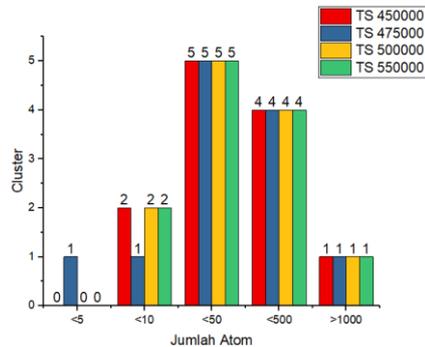
Dari gambar grafik juga menunjukkan lebar *peak* yang berarti menunjukkan sisa energi dan jarak antara atom - atom, jika di bandingkan antara ketiga variasi  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s, dan  $10^{12}$  K/s *peak* yang paling lancip yaitu ada pada variasi  $10^{10}$  K/s dan *peak* yang paling lebar ada pada variasi  $10^{12}$  K/s, yang membuktikan bahwa pada variasi pertama sisa energi sangat sedikit sehingga terbenetuk ikatan atom  $Al_2O_3$  karena dengan semakin sedikitnya sisa energi maka jarak antar atom - atom akan berdekatan dan akan mambentuk struktur atom  $Al_2O_3$ , sedangkan pada varaisi  $10^{12}$  K/s menunjukkan *peak* yang paling lebar diantara ketiga variasi yang berarti sisa energi pada atom - atom masih banyak, ini membuktikan bahwa ikatan atom  $Al_2O_3$  belum sepenuhnya terbentuk karena jarak antar atom - atom yang berdekatan masih sedikit dan belum memungkinkan untuk terbentuknya struktur atom  $Al_2O_3$ .

### Laju Temperatur Terhadap Distribusi Partikel

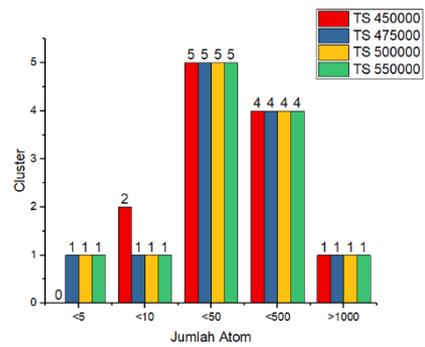
Ketika suatu ikatan atom diberi energi maka atom - atom yang sudah berikatan sebagian lepas dan hilang sedangkan yang lainnya akan berdekatan dan membentuk ikatan atom kembali, seperti visualisasi berikut ini yang menunjukkan interaksi atom - atom lepas dan saling berikatan.

Gambar 3. menunjukkan grafik distribusi atom, dan distribusi atom tersebut hanya terjadi pada gambar (a) variasi  $10^{10}$  K/s yaitu pada *cluster* yang jumlah atomnya  $<10$ , sedangkan pada *cluster* yang jumlah atomnya  $<5$  berkurang atau sebagian besar lepas, ini di karenakan atom- atom yang berada pada *cluster* yang memiliki jumlah sedikit akan melepaskan ikatannya dan berikatan dengan *cluster* yang memiliki jumlah atom lebih banyak, karena *cluster* dengan jumlah atom yang lebih banyak masih memiliki energi yang cukup untuk mengikat atom dan ketika

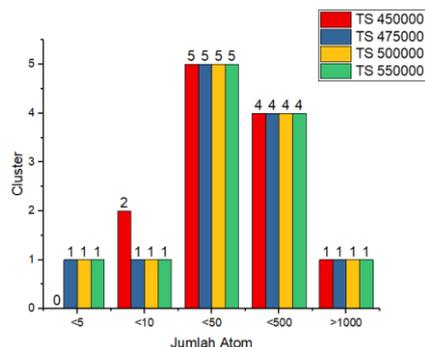
sisa energi pada semua *cluster* sudah habis maka atom yang sudah mempunyai ikatan bisa dikatakan sudah mengkristal sedangkan atom yang tidak berikatan dengan atom lain akan lepas.



(a)



(b)



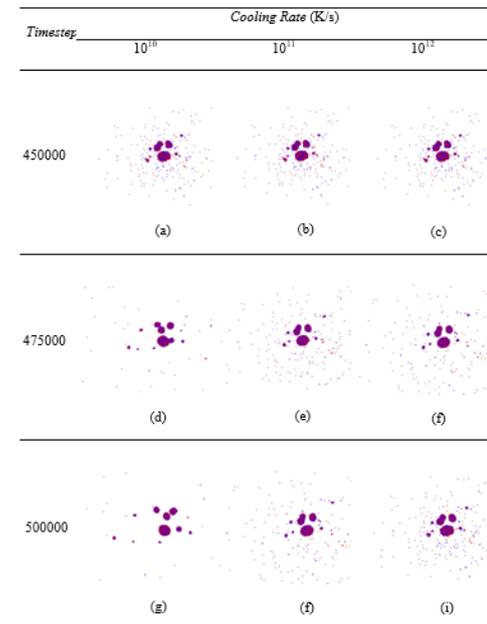
(c)

Gambar 3. Grafik distribusi partikel nano Alumina pada variasi laju pendinginan (a)  $10^{10}$  K/s, (b)  $10^{11}$  K/s, dan (c)  $10^{12}$  K/s

### Visualisasi Kristalinitas Nano Alumina

Visualisasi dari hasil simulasi bertujuan untuk mengetahui dan menganalisis bagaimana pergerakan atom selama simulasi yang dilakukan. Pada simulasi ini digunakan aplikasi OVITO (Open Visualization Tool)

untuk melihat pergerakan atom selama simulasi berjalan.



Gambar 4. Visualisasi solidifikasi nano alumina

Gambar 4. menunjukkan visualisasi atom alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s, dan  $10^{12}$  K/s. Pada gambar visualisasi awal memang perbedaan tidak begitu nampak, tetapi jika dilihat pada gambar (g) dengan laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s dan (i)  $10^{12}$  K/s terlihat jika ada perbedaan, pada gambar (g) atom membentuk *cluster* yang lebih banyak dan atom yang tidak terbentuk *cluster* semakin menjauh sedangkan pada gambar (i) masih ada *cluster* atom yang belum pecah dan belum mengkristal. Hal ini membuktikan bahwa kristalinitas nano partikel alumina meningkat jika nilai laju pendinginan semakin kecil, hal tersebut dapat dilihat dari hasil visualisasi yang menunjukkan bahwa semakin tinggi nilai laju pendinginan maka atom-atom tidak membentuk *cluster* atom.

### KESIMPULAN

Berdasarkan hasil penelitian tentang simulasi dinamika molekular pada nanopartikel Alpha-Alumina dengan variasi laju pendinginan  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s, dan  $10^{12}$  K/s dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut:

1. Dari hasil simulasi pada variasi  $10^{10}$  K/s menghasilkan fungsi distribusi radial tertinggi dengan angka *peak* sekitar 550.000, sedangkan variasi  $10^{11}$  K/s *peak* yang dihasilkan pada fungsi distribusi radial adalah 45.000 dan pada variasi  $10^{12}$  K/s menghasilkan *peak* pada angka 15.000. Dari hasil tersebut dapat dikatakan bahwa tingkat kristalinitas dari material nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s menghasilkan *peak* yang lebih tinggi dibandingkan dengan variasi yang lain.
  2. Dari hasil simulasi di dapatkan nilai *Radial Distance* menunjukkan lebar *peak* yang berarti menunjukkan sisa energi dan jarak antara atom – atom, *peak* yang paling lancip yaitu ada pada variasi  $10^{10}$  K/s dan *peak* yang paling lebar ada pada variasi  $10^{12}$  K/s.
  3. Hasil simulasi menunjukkan distribusi atom tersebut hanya terjadi pada variasi  $10^{10}$  K/s yaitu pada *cluster* yang jumlah atomnya <10, sedangkan pada *cluster* yang jumlah atomnya <5 berkurang atau sebagian besar lepas.
  4. Visualisasi dari simulasi dinamika molekul pada partikel material nano Alumina dengan menggunakan variasi laju temperatur pendinginan  $10^{10}$  K/s,  $10^{11}$  K/s, dan  $10^{12}$  K/s berhasil memvisualisasikan proses kristalin yang ditandai dengan terbentuknya *cluster cluster* kecil pada partikel alumina.
- Roco, M. C., 1999. *Nanoparticles and nanotechnology research*. Journal of Nanoparticle Research. 1-6.
- Trunov, M. A., M. Schoenitz., dan E. L. Dreizin, 2006. *Effect of polymorphic phase transformations in alumina layer on ignition of aluminium particles*. Combustion Theory and Modelling. 10 603-623.
- Yua, I. K., dkk., 2009. *Design and installation of DC plasma reactor for SiC nanoparticle production*. Journal of Nuclear Materials. 386-388.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Ansell, S., Krishnan, S., dan Weber, J. K. R., 1997. *Structure*
- Bashir, S., dan J. Liu. 2015. *Nanomaterials and Their Application*. Kingsville. Department of Chemistry Texas A&M University-Kingsville.
- Fujiwara, S., dkk., 2007. *Development of New High-Purity Alumina*. Sumitomo Kagaku. 1 1-10.