



**PENGARUH PERUBAHAN TEMPERATUR TERHADAP  
PROSES PERTUMBUHAN BUTIR ALUMINA FASA GAMMA  
DENGAN METODE SIMULASI *MOLECULAR DYNAMICS***

**SKRIPSI**

Oleh :  
**Qodirun Salam Musaffa**  
**141910101022**

**PROGRAM STRATA 1 TEKNIK  
JURUSAN TEKNIK MESIN  
FAKULTAS TEKNIK  
UNIVERSITAS JEMBER  
2018**



**PENGARUH PERUBAHAN TEMPERATUR TERHADAP  
PROSES PERTUMBUHAN BUTIR ALUMINA FASA GAMMA  
DENGAN METODE SIMULASI *MOLECULAR DYNAMICS***

**SKRIPSI**

Diajukan untuk melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat  
untuk menyelesaikan Program Studi Teknik Mesin (S1)  
dan mencapai gelar Sarjana Teknik

Oleh :  
**Qodirun Salam Musaffa**  
**141910101022**

**PROGRAM STRATA 1 TEKNIK  
JURUSAN TEKNIK MESIN  
FAKULTAS TEKNIK  
UNIVERSITAS JEMBER  
2018**

## PERSEMBAHAN

Dengan segala puja dan puji syukur kepada Tuhan yang Maha Esa dan atas dukungan dan do'a dari orang – orang tercinta, akhirnya skripsi ini dapat dirampungkan dengan baik dan tepat pada waktunya. Oleh karena itu, dengan rasa bangga dan bahagia saya khaturkan rasa syukur dan terimakasih saya kepada:

1. Tuhan YME, karena hanya atas izin dan karuniaNya maka skripsi ini dapat dibuat dan selesai pada waktunya. Puji syukur yang tak terhingga pada Tuhan penguasa alam yang meridhoi dan mengabulkan segala do'a.
2. Bapak dan Ibu saya, yang telah memberikan dukungan moril maupun materi serta do'a yang tiada henti untuk kesuksesan saya, karena tiada kata seindah lantunan do'a dan tiada do'a yang paling khusuk selain do'a yang terucap dari orang tua. Ucapan terimakasih saja takkan pernah cukup untuk membalas kebaikan orang tua, karena itu terimalah persembahan bakti dan cinta ku untuk kalian bapak ibuku.
3. Bapak dan Ibu Dosen pembimbing, penguji dan pengajar, yang selama ini telah tulus dan ikhlas meluangkan waktunya untuk menuntun dan mengarahkan saya, memberikan bimbingan dan pelajaran yang tiada ternilai harganya, agar saya menjadi lebih baik. Terimakasih banyak Bapak dan Ibu dosen, jasa kalian akan selalu terpatrit di hati.
4. Saudara saya, yang senantiasa memberikan dukungan, semangat, senyum dan do'anya untuk keberhasilan ini, cinta kalian adalah memberikan kobaran semangat yang menggebu, terimakasih dan sayang ku untuk kalian.
5. Sahabat dan Teman Tersayang, tanpa semangat, dukungan dan bantuan kalian semua tak kan mungkin aku sampai disini, terimakasih untuk canda tawa, tangis, dan perjuangan yang kita lewati bersama dan terimakasih untuk kenangan manis yang telah mengukir selama ini. Dengan perjuangan dan kebersamaan kita pasti bisa! Semangat!!

Terimakasih yang sebesar-besarnya untuk kalian semua, akhir kata saya persembahkan skripsi ini untuk kalian semua, orang-orang yang saya sayangi. Dan semoga skripsi ini dapat bermanfaat dan berguna untuk kemajuan ilmu pengetahuan di masa yang akan datang, Aamiinnn.



## MOTO

*“Barangsiapa yang ingin dijauhkan dari an-naar (neraka) dan dimasukkan ke dalam jannah (surga) maka hendaknya datang kematiannya dalam keadaan ia beriman kepada Allah dan hari akhir dan hendaknya ia perlakukan manusia sebagaimana ia suka diperlakukan demikian (H.R Muslim)”*



## PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Qodirun Salam Musaffa

NIM : 141910101022

Judul Skripsi : “Pengaruh Perubahan Temperatur Terhadap Proses Pertumbuhan Butir Alumina Fasa Gamma dengan Metode Simulasi *Molecular Dynamics*”

Menyatakan dengan sebenarnya bahwa penulisan skripsi ini dengan judul Pengaruh Perubahan Temperatur Terhadap Proses Pertumbuhan Butir Alumina Fasa Gamma dengan Metode Simulasi *Molecular Dynamics* berdasarkan hasil penelitian, pemikiran dan pemaparan asli dari saya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya belum pernah diajukan pada insitusi manapun dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan an kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember 25 April 2018

Menyatakan,

Qodirun Salam Musaffa

141910101022

**SKRIPSI**

**PENGARUH PERUBAHAN TEMPERATUR TERHADAP PROSES  
PERTUMBUHAN BUTIR ALUMINA FASA GAMMA DENGAN METODE  
SIMULASI *MOLECULAR DYNAMICS***

Oleh

**Qodirun Salam Musaffa**

**NIM 141910101022**

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Sumarji, S.T., M.T.

Dosen Pembimbing Anggota : M. Fahrur Rozy Hentihu, S.T., M.T.

**PENGESAHAN**

Skripsi berjudul “Pengaruh Perubahan Temperatur terhadap Proses Pertumbuhan Butir Alumina Fasa Gamma dengan Metode Simulasi Molecular Dynamics” telah diuji dan disahkan pada:

Hari, Tanggal : Rabu, 30 Mei 2018

Tempat : Fakultas Teknik Universitas Jember

Tim Penguji

Ketua,

Sumarji, S.T., M.T.

NIP. 19680202 199702 1 001

Anggota I,

Dr. Agus Triono, S.T., M.T.

NIP. 19700807 200212 1 001

Sekretaris,

M. Fahrur Rozy H., S.T., M.T.

NIP. 19800307 201212 1 003

Anggota II,

Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T.

NIP. 19751006 200212 1 002

Mengesahkan

Dekan Fakultas Teknik Universitas Jember,

Dr. Ir. Entin Hidayah, M.U.M.

NIP. 19661215 199503 2 001



## RINGKASAN

**Pengaruh Perubahan Temperatur Terhadap Proses Pertumbuhan Butir Alumina Fasa Gamma dengan Metode Simulasi *Molecular Dynamics*;**  
Qodirun Salam Musaffa, 141910101022; 2018; 43 halaman, Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember

Pertumbuhan butir merupakan hal yang sangat penting dalam menentukan sifat mekanik  $\gamma$ -alumina. *Molecular dynamics* merupakan salah satu metode yang dapat digunakan dalam memprediksi pertumbuhan butir  $\gamma$ -alumina. Dalam penelitian ini, program aplikasi *molecular dynamics* yang digunakan adalah *LAMMPS* dibantu *software* visualisasi *OVITO*. Didapatkan prediksi transisi  $\gamma$ -alumina cair menjadi padat terjadi pada temperatur 2057,2 K, kemudian butir  $\gamma$ -alumina mengalami pertumbuhan hingga 228 °C. Pertumbuhan butir  $\gamma$ -alumina ditandai dengan membesarnya ukuran butir dan bergabungnya beberapa butir yang berdekatan. Munculnya struktur butir HCP mengindikasikan mulai terbentuknya  $\alpha$ -alumina. Juga dilakukan perbandingan pertumbuhan butir 3 fasa alumina berbeda, yaitu alfa, gamma, dan amorf. Dimana dipengaruhi oleh energi aktivasi dan densitas setiap fasa. Diketahui alumina fasa alfa mengalami pertumbuhan butir paling kecil dibandingkan fasa yang lain pada temperatur yang sama.

## SUMMARY

**Influence of Temperature Change in Grain Growth Process of Gamma Alumina with Molecular Dynamics Simulation Method;** Qodirun Salam Musaffa, 141910101022; 2018; 43 pages; Departement of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Jember University.

Grain growth is very important in determining the mechanical properties of  $\gamma$ -alumina. Molecular dynamics is one method that can be used in predicting growth of  $\gamma$ -alumina grains. In this research, molecular dynamics application program used is LAMMPS assisted OVITO visualization software. The predicted transition of  $\gamma$ -alumina liquid to solid occurs at a temperature of 2057.2 K, then  $\gamma$ -alumina grains grow up to 228 °C. The growth of  $\gamma$ -alumina grains is marked by the enlargement of grain size and the joining of several adjacent grains. The emergence of the HCP grain structure indicates the formation of  $\alpha$ -alumina. Comparison of 3-phase grains of different alumina, alpha, gamma, and amorphous were also compared. Where is influenced by activation energy and density of each phase. Given the alpha phase alumina has the smallest grain growth compared to the other phase at the same temperature.

## PRAKATA

Puji syukur kehadirat Allah SWT yang telah melimpahkan rahmat dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi berjudul “*Pengaruh Perubahan Temperatur Terhadap Proses Pertumbuhan Butir Alumina Fasa Gamma dengan Metode Simulasi Molecular Dynamics*”. Skripsi ini disusun untuk memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Jember.

Penyusunan skripsi ini tidak lepas dari bantuan berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis menyampaikan terima kasih kepada:

1. Allah SWT yang telah memberikan nikmat dan karunia yang tidak pernah henti dalam hidup ini.
2. Ayah dan ibu yang telah menjadi orang tua yang sangat baik dalam hal mendidik, mengarahkan, memberi nasehat demi kehidupan yang lebih baik, kasih sayang, perhatian, materi, dan yang terpenting adalah doa yang selalu beliau panjatkan setiap saat untuk penulis dan keluarga.
3. Kakak, yang selalu memberi semangat baik moral, motivasi, serta do'a-nya.
4. Bapak Sumarji, S.T., M.T selaku Dosen Pembimbing Utama, Bapak M. Fahrur Rozy Hentihu, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah meluangkan waktu, pikiran, dan perhatian dalam penulisan skripsi ini.
5. Bapak Dr. Agus Triono S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Utama dan Bapak Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Anggota yang telah banyak sekali memberikan saran dan berbagai pertimbangan menuju ke arah yang benar dalam penulisan skripsi ini.
6. Bapak Imam Sholahuddin. S.T., M.T selaku dosen pembimbing tim *Material Research Group* UNEJ yang selalu memberikan motivasi dan arahan yang lebih baik lagi.
7. Bapak Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si yang telah membantu dalam memahami simulasi *molecular dynamics*.

8. Seluruh dosen Universitas Jember khususnya Jurusan Teknik Mesin yang telah membimbing penulis selama menjadi mahasiswa;
9. Rekan tim skripsi MRG 4, yaitu Ramanda, Waldi, Fajar, dan Iqbal yang telah banyak membantu dan memberi masukan tentang penyelesaian skripsi.
10. Saudara teknik mesin 2014 semoga persaudaraan ini tetap terjaga hingga akhir waktu.
11. Semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu per satu. Penulis juga menerima segala kritik dan saran dari semua pihak demi kesempurnaan skripsi ini. Akhirnya penulis berharap, semoga skripsi ini dapat bermanfaat.

Jember, 25 April 2018

Penulis

**DAFTAR ISI**

<b>HALAMAN SAMPUL</b> .....	<b>i</b>
<b>HALAMAN JUDUL</b> .....	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b> .....	<b>iii</b>
<b>HALAMAN MOTO</b> .....	<b>v</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN</b> .....	<b>vi</b>
<b>HALAMAN PEMBIMBING</b> .....	<b>vii</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b> .....	<b>viii</b>
<b>RINGKASAN</b> .....	<b>ix</b>
<b>SUMMARY</b> .....	<b>x</b>
<b>PRAKATA</b> .....	<b>xi</b>
<b>DAFTAR ISI</b> .....	<b>xiii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR</b> .....	<b>xv</b>
<b>DAFTAR TABEL</b> .....	<b>xvi</b>
<b>BAB 1 PENDAHULUAN</b> .....	<b>1</b>
<b>1.1 Latar Belakang</b> .....	<b>1</b>
<b>1.2 Rumusan Masalah</b> .....	<b>3</b>
<b>1.3 Batasan Masalah</b> .....	<b>3</b>
<b>1.4 Tujuan Penelitian</b> .....	<b>3</b>
<b>1.5 Manfaat Penelitian</b> .....	<b>4</b>
<b>1.6 Hipotesa</b> .....	<b>4</b>
<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA</b> .....	<b>5</b>
<b>2.1 Aluminium</b> .....	<b>5</b>
<b>2.2 Alumina</b> .....	<b>7</b>
<b>2.3 Nukleasi</b> .....	<b>11</b>
<b>2.4 Grain Growth</b> .....	<b>12</b>
<b>2.5 Metode Sintesis Nanomaterial</b> .....	<b>13</b>
2.5.1 Sintesis Hidrotermal .....	14
2.5.2 Metode Solvotermal .....	14
2.5.3 Chemical Vapor Deposition (CVD).....	14

2.5.4 Dekomposisi Termal dan Ablasi Laser Pulsa .....	15
<b>2.6 Plasma Termal.....</b>	<b>15</b>
2.6.1 Jenis-jenis Plasma .....	18
<b>2.7 Dinamika Molekuler .....</b>	<b>19</b>
2.7.1 LAMMPS .....	20
2.7.2 Potensial EAM .....	21
<b>BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN .....</b>	<b>24</b>
<b>3.1 Metode Penelitian.....</b>	<b>24</b>
<b>3.2 Tempat dan Waktu Penelitian .....</b>	<b>24</b>
<b>3.3 Alat dan Bahan.....</b>	<b>24</b>
<b>3.4 Pelaksanaan Penelitian .....</b>	<b>24</b>
<b>3.5 Perhitungan Ukuran Butir .....</b>	<b>24</b>
<b>3.6 Prosedur Simulasi .....</b>	<b>25</b>
3.6.1 Prosedur LAMMPS.....	25
3.6.2 Visualisasi dengan OVITO .....	28
<b>3.7 Perubahan Energi Potensial.....</b>	<b>30</b>
<b>3.8 Metode Analisis .....</b>	<b>30</b>
<b>3.9 Diagram Alir Penelitian.....</b>	<b>30</b>
3.9.1 Tahap 1 Preparasi Parameter Simulasi.....	30
3.9.2 Tahap 2 Proses Pelaksanaan Simulasi.....	31
<b>BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN .....</b>	<b>33</b>
<b>4.1 Energi Potensial.....</b>	<b>33</b>
<b>4.2 Perhitungan Ukuran Butir <math>\gamma</math>-Alumina .....</b>	<b>35</b>
<b>4.3 Simulasi <i>Grain Growth</i> <math>\gamma</math>-Alumina .....</b>	<b>39</b>
<b>BAB 5 PENUTUP.....</b>	<b>43</b>
<b>5.1 Kesimpulan .....</b>	<b>43</b>
<b>5.2 Saran .....</b>	<b>43</b>
<b>DAFTAR PUSTAKA .....</b>	<b>44</b>
<b>LAMPIRAN</b>	

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Struktur $\alpha$ -alumina.....	8
Gambar 2.2 Api Plasma.....	16
Gambar 2.3 Distribusi temperatur <i>DC Thermal Plasma</i> .....	16
Gambar 2.4 <i>Flow chart</i> proses simulasi LAMMPS .....	20
Gambar 2.5 Model simulasi <i>grain growth</i> .....	21
Gambar 3.1 <i>Input script</i> LAMMPS .....	25
Gambar 3.2 Membuka <i>command prompt</i> .....	26
Gambar 3.3 Membuka file <i>input script</i> .....	27
Gambar 3.4 Menjalankan program LAMMPS .....	27
Gambar 3.5 Simulasi mulai berjalan .....	28
Gambar 3.6 Membuka program OVITO .....	28
Gambar 3.7 Membuka file dump .....	29
Gambar 3.8 Visualisasi <i>Grain Growth</i> di OVITO .....	29
Gambar 3.9 Diagram alir penelitian (Preparasi parameter simulasi).....	31
Gambar 3.10 Diagram Alir Penelitian (Pelaksanaan Simulasi) .....	32
Gambar 4.1 Grafik hubungan energi potensial terhadap temperatur .....	33
Gambar 4.2 Grafik perubahan fasa padat-cair logam Al (Widiasih et al, 2013) .....	34
Gambar 4.3 Cooling region mesin DC Thermal Plasma (Zhang et al, 2015).....	35
Gambar 4.4 Ukuran butir $\gamma$ -alumina terhadap penurunan temperatur .....	36
Gambar 4.5 Perbandingan pertumbuhan butir gamma, amorf, dan alfa alumina.....	37
Gambar 4.6 Visualisasi proses <i>grain growth</i> $\gamma$ -alumina.....	40

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Sifat Mekanik Alumina .....	9
Tabel 2.2 Sifat Termal Alumina .....	9
Tabel 2.3 Sifat Elektrik Alumina .....	9
Tabel 2.4 Pengelompokan <i>grade alumina</i> .....	10
Tabel 4.1 <i>Undercooling behavior of molten aluminum oxide</i> (Weber J.K. Richard et al, 1955) .....	34
Tabel 4.2 <i>Effect of cooling rate on Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> phase formation</i> (Levi et al, 1988)..	36
Tabel 4.3 <i>Values of kinetic parameter for alumina</i> (Trunov et al, 2006) .....	38
Tabel 4.4 Ukuran maksimum alumina .....	38
Tabel 4.5 Persentase Struktur $\gamma$ -alumina .....	41



## BAB 1 PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Pertumbuhan kristal dan nukleasi merupakan bagian yang penting dari semua material padat, meliputi struktur komponen dan kerangka benda mati maupun benda hidup (Anwar and Zahn 2011). Tidak mengherankan terdapat ketertarikan yang sangat besar lintas ilmu pengetahuan untuk mendapatkan pemahaman mendasar tentang proses ini, dengan tujuan untuk memprediksi, mengendalikan dan mengoptimalkan hasil dari tahapan ini. Kesulitan utama adalah keterbatasan metode eksperimental yang masih belum dapat mengakses proses pertumbuhan kristal yang terjadi dalam skala atom. Berkenaan dengan hal ini, simulasi *molecular dynamic* berbasis interaksi antar-atom dapat menyediakan gambaran molekular yang dibutuhkan untuk mendapatkan wawasan struktural, dinamika dan memprediksi keadaan termodinamik, seperti energi bebas nukleasi dan *grain growth* (Anwar and Zahn 2011).

Struktur butir dari material *polycrystalline* adalah salah satu kunci utama untuk menentukan sifat fisik dan mekanik material (Yin 2016). Dalam berbagai aplikasi, ukuran dan distribusi butir perlu dikontrol karena perubahan struktur butir memiliki dampak yang cukup besar pada sifat material (Frenkel, Smit et al. 2013). Terdapat keterbatasan informasi tentang mekanisme pertumbuhan butir, hal ini dikarenakan analisis eksperimental hanya dapat mencakup dan mengkaji bagian 2 dimensi dari spesimen 3 dimensi. Sedangkan dalam simulasi dinamika molekuler, proses terjadinya *grain growth* dapat dikaji secara 3 dimensi, dan digunakan metode numerik untuk mendapatkan fungsi distribusi ukuran butir secara menyeluruh (Frenkel, Smit et al. 2013). Oleh karena itu, analisis pertumbuhan butir dengan simulasi dinamika molekuler dianggap sebagai solusi yang menjanjikan.

Alumina dapat disintesa menggunakan mesin *non-transferred DC thermal plasma* dengan suhu api terionisasi berkisar 8.000 hingga 16.000 K pada keluaran *torch* (P. Fauchais dan Vardelle, 1997). Dalam proses eksperimental sintesa alumina berukuran nano, terdapat area yang masih menjadi misteri,

yaitu proses terjadinya *grain growth*. Pemahaman terjadinya proses *grain growth* dapat dilakukan dengan metode visualisasi menggunakan SEM (*Scanning Electron Microscope*). Tetapi pada proses ini terdapat keterbatasan, yaitu sampel yang divisualisasikan hanya tampak dalam bidang dua dimensi, dan terbatas pada ukuran sampel yang kecil. Selain itu, biaya untuk melakukan visualisasi *grain growth* menggunakan SEM memerlukan biaya yang tidak murah. Untuk menjawab permasalahan ini, metode simulasi dinamika molekuler dapat digunakan dalam menggambarkan proses *grain growth* secara lebih jelas dalam bentuk dua dimensi maupun tiga dimensi. Selain itu, simulasi dinamika molekuler juga tidak memerlukan biaya yang mahal dan hanya perlu bermodal laptop/komputer yang memadai serta program aplikasi dinamika molekuler yang dapat mensimulasikan proses *grain growth*, LAMMPS (*Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) sebagai contohnya yang dipakai pada penelitian ini.

Pada penelitian sebelumnya, Jielong Yin melakukan simulasi dinamika molekuler untuk peristiwa *grain growth* pada aluminium menggunakan LAMMPS, dengan keadaan NPT *ensemble*. Diperoleh visualisasi proses *grain growth* yang cukup baik, diakibatkan oleh perbedaan energi di batas butir pada saat proses annealing. Kemudian Yhang Zang, dalam thesisnya melakukan simulasi dinamika molekuler untuk paduan FeCu dengan menggunakan jenis potensial EAM dan thermo sebesar 10, dapat dihasilkan gambaran struktur butir FeCu yang cukup jelas dengan menggunakan metode visualisasi CNA (*Common Neighbor Analysis*).

Berdasarkan keterbatasan dan permasalahan yang ada untuk menggambarkan proses *grain growth* alumina di mesin *DC thermal plasma*, mengacu pada penelitian Jielong Yin, (2016); Bennison dan Harmer, (1985); Rodel dan Glaeser, (1990); Bae dan Baik, (1993); Yang Zhang, (2015), yang menjadi target pada penelitian ini yaitu analisis perubahan energi potensial yang diakibatkan oleh perubahan temperatur, hal ini berdampak pada migrasi atom batas butir saat proses *grain growth*, sehingga perubahan ukuran butir gamma-alumina juga perlu diteliti. Berkaitan dengan perubahan ukuran butir

gamma-alumina, mekanisme terjadinya proses *grain growth* juga perlu dianalisis. Semua hal ini dapat dicapai dengan metode simulasi *molecular dynamic*.

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang seperti di atas, maka dirumuskan masalah seperti berikut:

1. Bagaimana pengaruh penurunan temperatur api plasma terhadap perubahan energi potensial  $\gamma$ -alumina ?
2. Bagaimana pengaruh penurunan temperatur api plasma terhadap ukuran butir  $\gamma$ -alumina ?
3. Bagaimana pengaruh perbedaan fasa alumina terhadap pertumbuhan butir alumina saat menjauhi api plasma ?

## 1.3 Batasan Masalah

Untuk mencapai tujuan penelitian yang diinginkan, maka penelitian ini akan diberikan batasan masalah sebagai berikut:

1. Fasa alumina yang terjadi dianggap alumina fasa  $\gamma$ .
2. Mekanisme perubahan struktur kristal gamma-alumina tidak dibahas.
3. Simulasi yang dipakai adalah LAMMPS.
4. Jumlah atom partikel gamma-alumina dianggap tetap.
5. Atom mengalami perpindahan saja, dikarenakan LAMMPS menggunakan prinsip dinamika molekuler klasik.

## 1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui pengaruh penurunan temperatur api plasma terhadap perubahan energi potensial  $\gamma$ -alumina.
2. Mengetahui pertumbuhan butir  $\gamma$ -alumina saat partikel  $\gamma$ -alumina menjauhi api plasma.

3. Mengetahui pertumbuhan butir alumina fasa  $\gamma$ ,  $\alpha$ , dan amorf saat menjauhi api plasma.

### 1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Dapat mengetahui perubahan energi potensial yang terjadi antara atom  $\gamma$ -alumina saat proses penurunan temperatur api plasma.
2. Dapat mengetahui perubahan ukuran butir  $\gamma$ -alumina saat partikel  $\gamma$ -alumina menjauhi api plasma.
3. Dapat mengetahui pertumbuhan butir beberapa fasa alumina yang berbeda.

### 1.6 Hipotesa

Hipotesa yang dibuat pada penelitian ini sebagai berikut :

Penurunan temperatur partikel  $\gamma$ -alumina saat proses pendinginan api plasma akan menyebabkan menurunnya energi potensial  $\gamma$ -alumina, sehingga pergerakan atom  $\gamma$ -alumina juga menurun. Hal ini mengakibatkan proses migrasi batas butir  $\gamma$ -alumina dan pertumbuhan diameter butir  $\gamma$ -alumina semakin melambat. Kemudian diameter butir  $\gamma$ -alumina akan mengalami pengecilan hingga ukuran tetap pada penurunan temperatur api plasma tertentu.

## BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA

### 2.1 Aluminium

Aluminium merupakan salah satu jenis logam dengan densitas  $2,7 \text{ g/cm}^3$ , sekitar satu per-tiga densitas baja ( $7,83 \text{ g/cm}^3$ ). Satu kaki kubik baja memiliki massa 490lb; satu kubik aluminium memiliki massa 170 lb. Dengan massa yang ringan, dilengkapi kekuatan tinggi dari aluminium paduan (melampaui struktur baja), menjadikan aluminium sangat cocok untuk dipakai untuk desain dan konstruksi kuat yang ringan, serta memiliki banyak kelebihan dalam semua aplikasi struktur yang bergerak (ASM International, 2001).

Aluminium memiliki ketahanan korosi yang memakan besi baja. Permukaan aluminium yang ter-ekspos bereaksi dengan oksigen untuk membentuk lapisan inert aluminium oksida yang menghalau terjadinya korosi lebih lanjut. Berbeda dengan baja, lapisan aluminium oksida tidak pecah dan lepas diakibatkan oksidasi lanjut. Jika lapisan pelindung aluminium tergores, lapisan oksida tersebut akan menutup dengan sendirinya. Dengan perpaduan aluminium yang baik, aluminium dapat menahan korosi yang diakibatkan air, air laut, dan faktor lingkungan lain dengan lingkup area yang luas dari ketahanan bahan kimia (ASM International, 2001).

Aluminium menunjukkan konduktivitas termal dan elektrik yang sangat baik, namun terdapat paduan khusus yang dikembangkan dengan hambatan yang tinggi. Paduan ini sangat berguna, sebagai contohnya pada motor listrik torsi tinggi. Aluminium sering digunakan karena sifat konduktivitas listriknya yang baik mendekati dua kali konduktivitas tembaga pada basis berat yang sama. Sifat konduktivitas tinggi dan sifat mekanik aluminium paduan yang baik dapat diaplikasikan untuk kabel transmisi tegangan tinggi yang sangat panjang (ASM International, 2001).

Aluminium terbagi menjadi dua kategori utama, yaitu komposisi tempa dan komposisi cor. Pembedaan lebih lanjut untuk setiap kategori didasarkan pada pengembangan sifat-sifatnya. Baik aluminium tempa dan aluminium cor dapat menerima perlakuan panas untuk meningkatkan sifat yang dibutuhkan. Sangat

banyak aluminium tempa yang mengandalkan prosedur annealing untuk pengembangan sifat-sifat yang diinginkan daripada hardening melewati reduksi mekanik. Beberapa aluminium cor tidak dapat diperlakukan panas dan dapat langsung digunakan tanpa mengubah sifat-sifatnya lagi (ASM International, 2001).

Tata nama aluminium tempa dan cor telah dikembangkan. Sistem asosiasi aluminium secara luas dikenal di Amerika Serikat. Sistem identifikasi paduan aluminium Amerika memiliki tata nama berbeda untuk aluminium tempa dan aluminium cor, namun membedakan paduan aluminium menjadi beberapa seri untuk penyederhanaan. Untuk paduan aluminium tempa, digunakan sistem empat digit untuk penulisan setiap jenis serinya:

- a. 1xxx: Komposisi aluminium murni, digunakan untuk industri elektrik dan kimia.
- b. 2xxx: Paduan aluminium dengan tembaga merupakan elemen paduan aluminium utama. Seri paduan aluminium 2xxx secara luas digunakan untuk pesawat terbang dikarenakan kekuatannya yang tinggi (kekuatan tarik sebesar 455 MPa atau 66 ksi).
- c. 3xxx: Paduan aluminium dengan unsur mangan sebagai elemen paduan utama, secara umum digunakan untuk arsitektur dan berbagai produk.
- d. 4xxx: Paduan aluminium dengan unsur silikon sebagai elemen paduan utama, digunakan untuk elektroda las dan lembar patri.
- e. 5xxx: Paduan aluminium dengan unsur magnesium sebagai paduan utama, digunakan untuk lambung kapal, tangga geladak kapal, dan produk lainnya yang berkaitan dengan lingkungan laut.
- f. 6xxx: Paduan aluminium dengan unsur magnesium dan silikon sebagai paduan utama, biasanya digunakan untuk ekstrusi arsitektur dan komponen otomotif.
- g. 7xxx: Paduan aluminium dengan unsur zinc sebagai paduan utama, digunakan untuk komponen pesawat terbang dan aplikasi lain yang memerlukan kekuatan yang tinggi. Seri 7xxx merupakan seri aluminium yang paling kuat, dengan kekuatan tarik >500 MPa.

h. 8xxx: Paduan aluminum dengan berbagai macam komposisi unsur. Seri 8xxx dapat mengandung timah, litium dan/atau besi.

i. 9xxx: Diteliti untuk penggunaan masa depan.

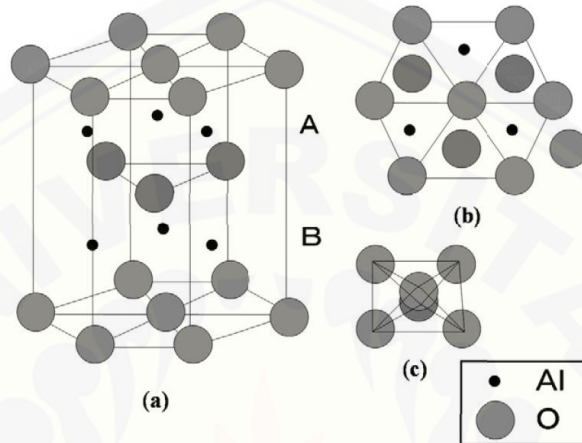
Untuk seri aluminum cor dituliskan dengan sistem tiga digit diikuti oleh nilai desimal. Desimal .0 pada semua seri berkenaan dengan batas paduan cor aluminum. Desimal .1 dan .2 berkenaan dengan komposisi ingot, dimana setelah soesifikasinya akan diatur saat peleburan paduan aluminum. Berikut ini adalah seri aluminum paduan cor:

- a. 1xx.x: Aluminum murni, biasanya digunakan untuk pembuatan rotor.
- b. 2xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur tembaga sebagai bahan paduan utama.
- c. 3xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur silikon sebagai bahan paduan utama. Juga terdapat unsur paduan lain seperti tembaga dan magnesium. Seri ini menyumbang sekitar 90% dari semua paduan aluminum yang dicor.
- d. 4xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur silikon sebagai bahan paduan utama.
- e. 5xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur magnesium sebagai bahan paduan utama.
- f. 6xx.x: Tidak digunakan.
- g. 7xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur zinc sebagai bahan paduan utama.
- h. 8xx.x: Paduan aluminum cor dengan unsur timah sebagai bahan paduan utama.
- i. 9xx.x: Tidak digunakan.(ASM International, 2001).

## 2.2 Alumina

Alumina merupakan material logam aluminum yang teroksidasi menjadi material keramik dengan sifat mekanik yang jauh lebih tinggi. Perkembangan penting tentang alumina adalah penyempurnaan proses *electrolyzing* alumina menjadi aluminium pada tahun 1886 oleh Herout di Prancis dan Hall di Amerika,

proses ini masih digunakan hingga sekarang. Selain itu, juga terdapat penyempurnaan proses ekstraksi alumina dari bauksit oleh orang Austria bernama Bayer pada tahun 1888. Proses Bayer, sesuai nama penemunya masih digunakan secara luas dalam proses manufaktur alumina di seluruh dunia (*“Historical Milestone”*, 2002).



Gambar 2.1 (a) Struktur  $\alpha$ -alumina, (b) Struktur  $\alpha$ -alumina tampak atas, (c) Struktur oktahedral  $\alpha$ -alumina (Shirai Takashi et al, 2009)

Alumina merupakan material yang sangat keras dan memiliki kekerasan yang hanya dapat diungguli oleh berlian dan beberapa material sintetis seperti korundum dan silikon karbida. Sifat-sifat ini menjadikan alumina sesuai untuk digunakan sebagai material abrasif. Sifat unggul lain dari alumina yaitu titik lelehnya yang tinggi di atas  $2000^{\circ}\text{C}$  ( $3632^{\circ}\text{F}$ ), dimana dapat digunakan sebagai material tahan panas dan pelapis tungku khusus (Davis Karen, 2010). Sifat mekanik, termal dan elektrik dari alumina (kemurnian 99,7%) sering digunakan dalam dunia industri keramik digambarkan dalam tabel berikut:



Tabel 2.1 Sifat Mekanik Alumina (Fernández-Garcia and Rodriguez 2007)

Properties	Conditions	Units	Values
Bulk Density	20 °C	g/cm <sup>3</sup>	3.96
Tensile Strength	20 °C	Mpa	220
Flexural Strength	20 °C	>Mpa	410
Elastic Modulus	20 °C	Gpa	375
Hardness	20 °C	Kg/mm <sup>2</sup>	14
Fracture Toughness	20 °C	Mpa.m <sup>1/2</sup>	4-5
Porosity	20 °C	%	0

Tabel 2.2 Sifat Termal Alumina (Fernández-Garcia and Rodriguez 2007)

Max. working temp.	-	°C	1700
Coef. Thermal Expansion	25-300 °C	10 <sup>-6</sup> /°C	7.8
Coef. Thermal Expansion	25-1000 °C	10 <sup>-6</sup> /°C	8.1
Thermal Conductivity	20 °C	W/moK	28

Tabel 2.3 Sifat Elektrik Alumina (Fernández-Garcia and Rodriguez 2007)

Dielectric Strength	2.5 mm tk	Ac-kv/mm	10
Dielectric Constant	1 MHz	-	9.7
Volume Resistivity	20 °C	Ohm-cm	>10 <sup>14</sup>
Volume Resistivity	300 °C	Ohm-cm	10 <sup>10</sup>
Volume Resistivity	1000 °C	Ohm-cm	10 <sup>6</sup>
Loss Factor	1 MHz	-	0.009
Dissipation Factor	1 MHz	-	0.0001

Sistem Kristal Al-O berpusat di stoikiometri alumina karena kegunaannya yang sangat penting sebagai komponen katalis dan material keramik dalam berbagai proses industri. Alumina berstruktur nano saat ini digunakan sebagai pendukung fasa aktif dalam bidang katalis ataupun sebagai pelapis pada material lain, seperti YAG atau nano-Ni/W untuk memproduksi material dengan sifat mekanik tidak terkalahkan terkait dengan ketahanan yang tinggi terhadap

deformasi pada suhu menengah (YAG) atau dengan kekerasan hingga diatas 30 GPa (Ni,W) (Fernández-Garcia and Rodriguez 2007).

Stabilitas kimia dan termal, kekuatan yang relatif baik, karakteristik insulasi elektrik dan termal serta mudah didapatkan telah menjadikan aluminum oksida atau alumina termasuk unsur yang memiliki tempat di bidang keteknikan. Namun, terdapat keterbatasan dalam pengelompokan kelas polikristalin dengan kemurnian paling tidak 80%  $Al_2O_3$  dan tanpa porositas. Praktik impermeabilitas pada temperatur ruang setidaknya memerlukan total porositas kurang dari 6% (Ryshkewitch 1960, Richerson 1982).

Tabel 2.4 Pengelompokan *grade* keramik alumina (kemurnian 99%  $Al_2O_3$ ) dan karakteristiknya (Morrell, 1987)

Grade	$Al_2O_3$ (min%)	Tipe	Porositas (%)	Densitas (g/cm <sup>3</sup> )	Aplikasi
A1	99.6	electrical & engineering	0.2-3.0	3.75-3.95	structural
A2	99.8	translucent	<1	3.97-3.99	Na lamps
A3	99.5	hot-pressed	<1	3.9-3.99	machine tools
A4	99.6	sintered recrystallized	3.0-6.0	3.75-3.85	refractory
A5	99	low dielectric loss	1.0-5.0	3.76-3.94	microwave
A6	96.5-99	electrical & engineering	1.0-5.0	3.71-3.92	mechanical & electrical
A7	94.5-96.5	electrical & engineering	2.0-5.0	3.6-3.9	insulator, wear parts
A8	86-94.5	electrical & engineering	2.0-5.0	3.4-3.9	insulator, wear parts, refractory
A9	80-86	electrical & engineering	3.0-6.0	3.3-3.6	insulator, wear parts, refractory

Alumina memiliki beberapa bentuk alotropik, namun hanya tipe  $\alpha$ -alumina yang ditinjau disini.  $\alpha$ -alumina memiliki struktur kristal dimana ion-ion oksigen tersusun membentuk *close-packed hexagonal* (cph) berikatan dengan ion-ion aluminum di dua per-tiga gugus octahedral. Alumina tidak banyak menyimpang dari stoikiometri namun sedikit ketidakmurnian dapat mempengaruhi laju difusi pada temperatur tinggi. (Auerkari Perti, 1996).

### 2.3 Nukleasi

Nukleasi merupakan salah satu bagian penting dari proses kristalisasi. Kristalisasi terjadi dalam dua langkah utama. Pertama nukleasi, dimana fasa kristalin mulai muncul dari material cair baik kondisi *supercooled* ataupun *supersaturated*. Kedua, pertumbuhan kristal/*grain growth*, dimana terjadi peningkatan ukuran partikel menuju keadaan kristal tetap. Kristalisasi juga merupakan teknik pemisah keadaan padat dan cair, dimana terjadi transfer massa dari larutan cair ke fasa kristal padat (A.Mersmann, 2001).

Nukleasi adalah langkah pertama dalam pembentukan fase termodinamika baru atau struktur baru. Nukleasi biasanya didefinisikan sebagai proses yang menentukan berapa lama pengamat harus menunggu sebelum strukt (2.2) muncul. Sebagai contoh, jika volume air didinginkan (pada tekanan atmosfer) di bawah 0 °C, maka air akan membeku menjadi es. Volume air yang didinginkan hanya beberapa derajat di bawah 0 °C akan menyebabkan nukleasi es berjalan lambat atau tidak terjadi sama sekali. Namun, pada suhu yang lebih rendah akan menyebabkan nukleasi es lebih cepat (Sear. R.P., 2007). Komputer modern cukup baik untuk menghitung laju nukleasi pada model atom sederhana. Ini telah dibandingkan dengan teori klasik, misalnya untuk kasus nukleasi fasa kristal dalam model bola padat. Untuk kristalisasi bola padat teori klasik adalah teori perkiraan yang sangat masuk akal (Auer.S dan D. Frenkel, 2004). Jadi, untuk mempelajari model sederhana, teori nukleasi klasik bekerja dengan cukup baik. Tetapi tidak diketahui apakah teori ini dapat bekerja sama baiknya untuk model molekul kompleks.

Banyak bahan yang kita produksi dan gunakan adalah kristalin yang terbuat dari cairan logam, misalnya kristalin besi terbuat dari besi cair yang dicetak menjadi cetakan, sehingga nukleasi material kristalin secara luas dipelajari dalam industri (K.F. Kelton, 2010). Material ini sangat banyak digunakan dalam industri kimia untuk kasus-kasus seperti dalam persiapan bubuk logam *ultradispersed* yang dapat berfungsi sebagai katalis. Misalnya, platinum yang disimpan ke dalam nanopartikel TiO<sub>2</sub> mengkatalisis pembebasan hidrogen dari air. Ini merupakan

faktor penting dalam dunia industri semikonduktor, karena energi celah pita dalam semikonduktor dipengaruhi oleh ukuran nanokolektor (Rajh et al, 1993).

#### 2.4 Grain Growth

Grain growth mulai terjadi setelah proses rekristalisasi terjadi (F.J.Humphreys dan M.Hatherly, 1995). Pada temperatur diatas rekristalisasi, kristal berukuran besar mengalami pertumbuhan dengan menyerap kristal yang lebih kecil (H.Avener dan Tata.M.G, 1997). Sebuah polikristal ditahan pada temperatur T selama waktu t, diameter butir rata-rata akan tumbuh hingga berukuran D. Secara empiris dapat dituliskan:

$$D^n = B \exp\left(-\frac{q}{kT}\right) t \quad (2.1)$$

Parameter B, q, dan n sesuai dengan data eksperimental. Contohnya eksponen  $n \approx 2$ , maka terjadi pertumbuhan yang lambat saat diameter rata-rata besar. Pertumbuhan pada saat ekspansi butir tetangga: butir kecil menghilang dan butir besar semakin membesar. Total jumlah atom adalah tetap. Pada saat ukuran butir tumbuh dan jumlah butir berkurang, maka jumlah dari batas butir berkurang serta energi bebas dari sistem berkurang. Sebuah butir adalah bagian dari Kristal tunggal. Pada sebuah polikristal, dua butir yang bertetangga dengan orientasi butir yang berbeda bertemu pada batas butir. Atom pada batas butir tersusun secara lemah dan tidak dimiliki oleh kisi kedua belah butir. Batas butir bergerak sesuai dengan pergerakan atom yang lepas dari kisi suatu butir dan berikat pada kisi butir yang lain. Struktur dari batas butir itu sendiri terjaga. Pergerakan batas butir difasilitasi oleh pengaturan lokal posisi atom, bukan difusi atom jarak panjang. Ukuran butir biasanya jauh lebih besar dibandingkan dimensi atom, batas butir dapat digambarkan secara matematika sebagai permukaan tanpa ketebalan. Dua butir bertemu pada sebuah permukaan (*grain boundary*). Tiga butir bertetangga bertemu pada sebuah garis (*triple junction*). 4 butir bertetangga bertemu pada sebuah titik (*vertex*). Saat *grain boundary* bergerak, *triple junction* dan *vertex* juga bergerak (Thompson, C.V. 1990).

Pada batas butir, sebuah atom melakukan pergerakan termal. Kebanyakan atom bergetar dengan kekuatan kecil. Seseekali, atom meloncat dengan getaran yang besar sehingga terlepas dari kisi suatu butir dan berikatan dengan kisi butir yang lain. Jika dua keadaan tersebut memiliki energi yang identik, loncatan atom ke depan dan ke belakang memiliki kemungkinan yang sama. Namun, jika dua keadaan tersebut memiliki jumlah energi yang berbeda kemungkinannya juga berbeda (Z.Suo 2004). Perbedaan inilah yang menyebabkan migrasi batas butir, menyebabkan berkurangnya energi dari sistem.

## 2.5 Metode Sintesis Nanomaterial

Ilmuwan metalurgi telah melakukan banyak penelitian untuk mengembangkan material dengan sifat-sifat yang lebih baik, lebih dapat diandalkan dan dengan biaya produksi yang lebih murah dibandingkan material yang telah ada. Beberapa metode fisikal dan kimia telah dikembangkan untuk meningkatkan performa dari nanomaterial, hal ini menunjukkan peningkatan dari sifat material dengan mengatur distribusi ukuran partikel yang dihasilkan.

Secara umum terdapat dua macam pendekatan yang dapat dipakai untuk sintesa nanomaterial, yaitu:

- a. *Top-down*: Pengurangan ukuran dari material yang lebih besar.
- b. *Bottom-up*: Penyusunan nanomaterial dari tingkat atom.

Metode *top-down* termasuk pemrosesan material padat. Cara ini didasarkan pada pengecilan ukuran material curah, dengan menghancurkan material curah dengan menggunakan proses fisikal seperti *crushing*, *milling*, atau *grinding*. Biasanya metode ini tidak cocok digunakan untuk memproduksi material dengan ukuran partikel yang seragam dan memerlukan konsumsi energi yang besar. Permasalahan terbesar dari metode *top-down* adalah struktur permukaan yang tidak sempurna. Ketidaktersempurnaan ini dapat mengakibatkan pengaruh yang cukup signifikan terhadap sifat fisikal dan kimia dari nanomaterial. Telah banyak diketahui bahwa teknik *top-down* konvensional dapat mengakibatkan kerusakan kristalografi dalam prosesnya.

Metode *bottom-up* berkaitan dengan penyusunan material dari ukuran yang lebih kecil: atom demi atom, molekul demi molekul, atau gugus demi gugus. Cara ini lebih sering digunakan untuk sintesa nanomaterial dengan ukuran partikel, bentuk dan distribusi yang seragam. Pada sintesa nanomaterial dengan proses kimia, dapat dilakukan pengontrolan pertumbuhan partikel yang presisi. Meskipun baru, metode *bottom-up* memiliki peranan penting dalam produksi nanomaterial.

Sintesa nanomaterial untuk mendapatkan kontrol distribusi ukuran, morfologi, kemurnian, jumlah, dan kualitas yang lebih baik dengan menggunakan biaya semurah mungkin telah menjadi tantangan bagi para peneliti. Berikut adalah beberapa jenis metode sintesa nanomaterial:

#### 2.5.1 Sintesis Hidrotermal

Sintesa hidrotermal adalah jenis sintesa yang menggunakan tabung bertekanan yang disebut *autoclave* disertai reaksi larutan aqueous. Temperatur didalam *autoclave* dapat dinaikkan hingga diatas temperatur didih air, mendekati tekanan saturasi uap. Sintesa hidrotermal secara luas digunakan untuk preparasi nanopartikel  $\text{TiO}_2$  yang dapat dengan mudah didapatkan melalui perlakuan hidrotermal prekursor titanium dengan air. Metode hidrotermal sangat berguna untuk mengontrol ukuran butir, morfologi partikel, dan fase kristalin.

#### 2.5.2 Metode Solvotermal

Metode solvotermal identik dengan metode hidrotermal kecuali pelarutnya dapat divariasikan menggunakan jenis larutan selain air. Metode solvotermal memiliki kontrol ukuran, distribusi bentuk dan kristalinitas yang lebih baik dibandingkan metode hidrotermal. Metode ini telah digunakan untuk sintesa nanopartikel  $\text{TiO}_2$  dan nanorod  $\text{TiO}_2$ .

#### 2.5.3 Chemical Vapor Deposition (CVD)

Proses CVD telah banyak digunakan oleh industri semikonduktor untuk produksi thin film dengan kemurnian dan performa yang tinggi. Pada proses CVD, substrat diekspos prekursor volatile, dimana bereaksi dan terjadi dekomposisi pada permukaan substrat untuk memproduksi lapisan yang diinginkan. Kualitas material terdekomposisi sangatlah bergantung pada temperatur reaksi, laju reaksi dan konsentrasi prekursor. Gracia et al. melakukan

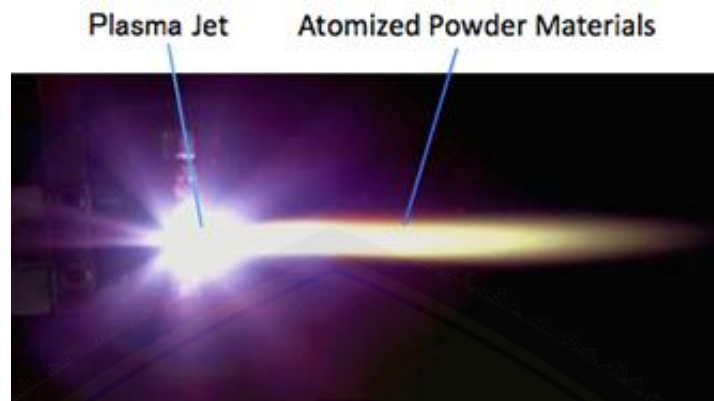
sintesa TiO<sub>2</sub> dengan doping Cr, V, Fe, & Co dengan menggunakan CVD dan menemukan bahwa sintesa TiO<sub>2</sub> bergantung pada jenis dan jumlah kation yang ada saat proses CVD. Keuntungan metode ini yaitu dapat memproduksi nanofilm dengan lapisan yang seragam.

#### 2.5.4 Dekomposisi Termal dan Ablasi Laser Pulsa

Nanomaterial logam yang murni dan doping dapat disintesa dengan cara dekomposisi metal alkoxida dan garam dengan menggunakan energi yang tinggi dengan pemanasan atau listrik. Namun, sifat dari nanomaterial yang diproduksi sangat bergantung pada konsentrasi prekursor, laju aliran prekursor dan lingkungan. Kim et al. telah melakukan sintesa nanopartikel TiO<sub>2</sub> dengan diameter kurang dari 30 nm menggunakan dekomposisi termal titanium alkoxida atau TiCl<sub>4</sub> pada temperatur 1200°C. Sedangkan Liang et al. telah memproduksi nanopartikel TiO<sub>2</sub> dengan diameter 3 hingga 8 nm menggunakan metode ablasi laser pulsa pada larutan air yang terionisasi. Namun, metode ini memerlukan biaya yang tinggi dan kontrol morfologi nanopartikel yang sulit dilakukan.

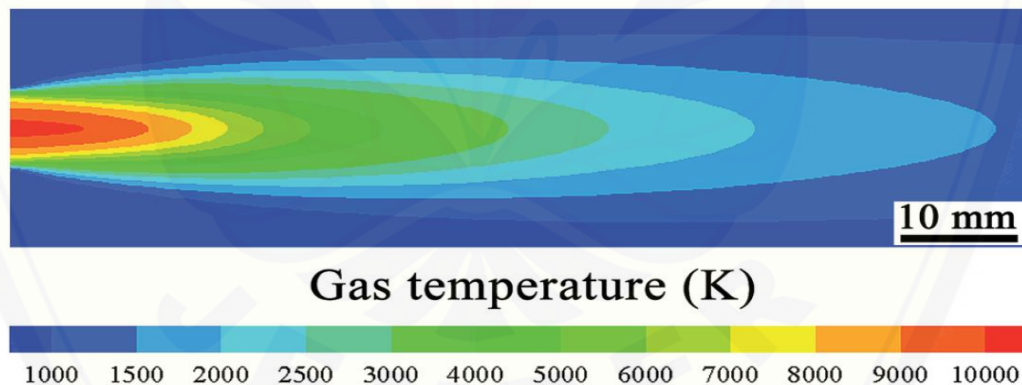
### 2.6 Plasma Termal

Plasma dapat dihasilkan dengan melewati arus listrik melewati gas. Dikarenakan sifat gas pada suhu ruangan adalah insulator yang baik, maka jumlah muatan *carrier* harus cukup untuk membuat sifat gas menjadi konduktor elektrik. Proses ini dinamakan “*Electrical Breakdown*”. Terdapat banyak cara yang memungkinkan untuk mencapai tahap ini. *Breakdown* dari gas yang semula *non-conducting* membentuk jalur koneksi antara sepasang elektroda. Arus listrik melalui gas terionisasi, yang mengarah pada serangkaian fenomena yang dikenal sebagai pelepasan gas, paling umum yang terjadi adalah plasma (Kavka M.T., 2006).



Gambar 2.2 Api plasma (TOCALO, 2017)

Keadaan plasma sering disebut sebagai keadaan keempat perubahan materi. Istilah plasma diberikan Irwing Langmuir pada tahun 1923. Dalam kondisi normal, gas adalah isolator yang baik. Sifat isolator dapat diganggu dengan menggunakan medan elektrik yang kuat membuat gas menjadi konduktor listrik. Plasma dapat memiliki konduktivitas tinggi melebihi logam pada suhu ruangan. Misalnya, plasma hydrogen pada satu atmosfer dipanaskan hingga temperatur 106 K memiliki konduktivitas listrik yang sama seperti Tembaga pada suhu kamar.



Gambar 2.3 Distribusi temperatur *DC Thermal Plasma* sebagai hasil ionisasi muatan elektroda dan gas *carrier* (Zhang Shan Lin, 2015)

Gas menjadi konduktor elektrik dikarenakan adanya muatan bebas. Plasma terdiri dari campuran electron, ion, partikel netral di ground, keadaan tereksitasi dan foton. Keadaan ini hanya memenuhi syarat sebagai plasma jika muatan negative dan positif saling menyeimbangkan, dengan kata lain keseluruhan muatan listrik plasma harus netral (Kavka M.T., 2006). Kandungan energi yang tinggi dari plasma dibandingkan fasa padat, cairan atau gas menyumbangkan



sejumlah aplikasi yang penting. Minat awal dalam pengembangan teknologi plasma termal berlangsung pada tahun 1960an dan dikaitkan dengan program pesawat ruang angkasa. Pada tahun 1970an terlihat perkembangan aplikasi industri di bidang pemotongan, pengelasan, penyemprotan, *transferred arc reclamation*, analisis plasma induktif dan perkembangan sementara di bidang peleburan dan pemurnian, metalurgi ekstraktif, sintesis partikel *ultrafine*, *powder spheroidisation* dan *lighting*. Kemudian pada tahun 1980an, aplikasi industri plasma termal mengalami peningkatan yang luar biasa dalam bidang ekonomi. Penelitian *fundamental* di bidang ini membuat kemajuan yang besar dalam memahami kondisi plasma termal. Upaya penelitian fundamental ini telah memperbarui minat terhadap pengaplikasian plasma termal dalam pemrosesan material dan pengolahan limbah, seperti yang ditunjukkan oleh kenaikan drastis jurnal dan paten yang dipublikasikan sejak pertengahan 1980an (Fauchais P dan Verdelle A., 1997). Teknologi plasma termal mencakup beragam aplikasi dan upaya pengembangan yang dapat diklasifikasikan sebagai berikut:

- a. *Thermal plasma coating technology*
- b. *Thermal plasma synthesis*
- c. *Thermal Plasma waste destruction*
- d. *Thermal plasma densification*

Teknik pelapisan terdiri dari *Plasma Spraying*, *Wire Arc Spraying*, dan *Thermal Plasma Chemical Vapor* (TPCV). Saat ini, aplikasi dari *Plasma Spraying* telah meliputi pelapis tahan korosi, tahan suhu, dan tahan abrasi.

Dalam sintesis plasma termal, api plasma dapat digunakan untuk sintesis serbuk (Girshick.S.L., 1994). Prekursor material yang dimasukkan mengalami penguapan dan penguraian. Quenching yang cepat di bawah zona panas menginduksi supersaturasi uap prekursor yang terdisosiasi, dimana menghasilkan partikel serbuk halus melalui nukleasi homogen. Selama sepuluh tahun terakhir, sintesis nanopartikel dan *nanotube* di bidang plasma termal memiliki perkembangan yang pesat (Fukler.I.L., 2005).

Selama beberapa tahun terakhir, proses industri menunjukkan kepedulian yang rendah terhadap aspek lingkungan dan konsekuensi akumulasi polusi dan

produk berbahaya yang sangat banyak. Kerapatan energi dan temperatur yang tinggi terkait dengan plasma termal serta waktu reaksi yang cepat telah menawarkan keuntungan yang unik untuk penghancuran limbah dalam reactor plasma termal (G. Van Oost, 2002). Densifikasi serbuk menggunakan teknologi plasma termal melibatkan *in-flight melting* dari material berbentuk partikulat. Proses ini berhasil dipakai untuk densifikasi dan spheroidisasi dari sejumlah besar bahan, mulai dari logam dengan titik leleh rendah (tembaga, nikel) hingga keramik oksida (alumina, yttria-zirkonium) dan logam tahan api (molybdenum dan tungsten) (E. Pfender, 1999).

### 2.6.1 Jenis-jenis Plasma

Ditinjau dari temperturnya plasma dapat diklasifikasikan menjadi tiga, yaitu:

#### a. Plasma Dingin

Plasma yang terjadi dalam keadaan ketidakseimbangan termal (non-thermal equilibrium) antara temperatur elektron dan gas. Temperatur elektron tinggi tetapi temperatur partikel gas relative rendah karena tumbukan elektron dan partikel gas sangat kecil. Pada plasma dingin ion dan atom-atom atau molekul-molekul netral tetap dalam suhu sekitar 1000 K. Elektron-elektron dalam plasma jenis ini mempunyai temperatur cukup tinggi sekitar 50000 K. Plasma dingin sering digunakan dalam bidang mikroelektronik, pembentukan materi baru dan pembersihan polutan.

#### b. Plasma Termik

Plasma jenis ini tergolong plasma dalam keadaan ketidakseimbangan termal (*non-thermal equilibrium*). Partikel-partikel berat di dalam plasma bersuhu lebih tinggi dari 3000 K. Elektron dalam plasma termik ini mempunyai temperatur cukup tinggi lebih besar dari  $10^5$  K. Plasma jenis ini sering digunakan untuk pengelasan, pemotongan logam, pembersihan polutan dan lain-lain.

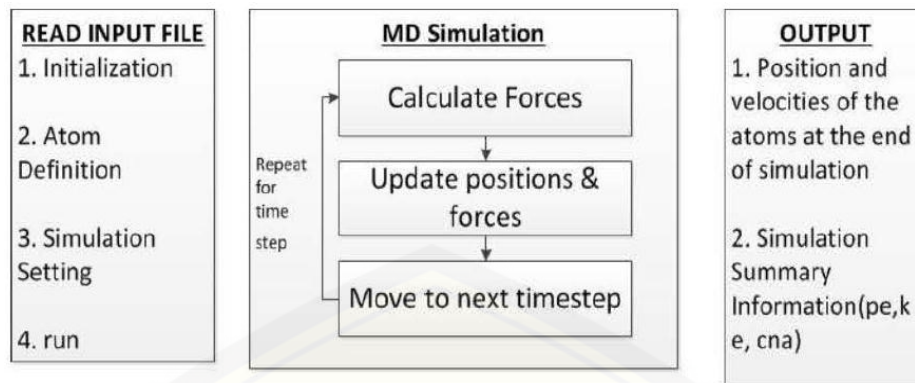
#### c. Plasma Panas

Plasma panas terjadi dalam keadaan kesetimbangan termal (*thermal equilibrium*). Pada pembangkitan plasma panas distribusi energi elektron dan molekul gas mendekati sama, karena frekuensi tumbukan antara elektron dan

molekul gas lebih besar. Plasma panas adalah plasma yang tersusun dari molekul gas yang bertemperatur tinggi. Plasma jenis ini memiliki temperatur diatas  $10^6$  K. Plasma panas digunakan untuk memproduksi energi listrik. (Muhammad Nur, 2011).

### **2.7 Dinamika Molekuler**

Terdapat 2 jenis teknik utama dalam simulasi molekul, yaitu Dinamika Molekuler (MD) dan Monte Carlo (MC). Selain itu, terdapat berbagai macam teknik hibrida yang menggabungkan fitur keduanya. Dinamika Molekul memiliki keuntungan dibandingkan metode Monte Carlo, yaitu dinamika molekul dapat memberikan gambaran sifat dinamis pada system seperti koefisien transport, sifat rheology dan spectrum. Simulasi komputer bertindak sebagai jembatan penghubung antara skala panjang dan waktu mikroskopik dan dunia makroskopik di laboratorium. Dinamika Molekul menyediakan perkiraan pada interaksi antar-molekul dan menghasilkan prediksi sifat gugus yang akurat (Allen 2004). Prediksi dapat dibuat seakurat mungkin sesuai dengan keakuratan parameter yang dipakai dan keterbatasan kemampuan komputer. Pada saat bersamaan, detil tersembunyi dibalik pengukuran gugus dapat terungkap. Contohnya adalah hubungan antara koefisien difusi dan fungsi kecepatan autokorelasi. Dengan kata lain, simulasi bertindak sebagai penghubung antara teori dan eksperimen. Simulasi Dinamika Molekul dapat digunakan untuk menguji sebuah teori dengan menggunakan model simulasi yang sama, membandingkan hasil simulasi dengan hasil eksperimental dan melakukan simulasi dengan keadaan system yang sulit atau tidak mungkin dilakukan di laboratorium (misalnya pada temperatur dan tekanan ekstrim).



Gambar 2.4 Flow chart proses simulasi LAMMPS (Yin Jielong, 2016)

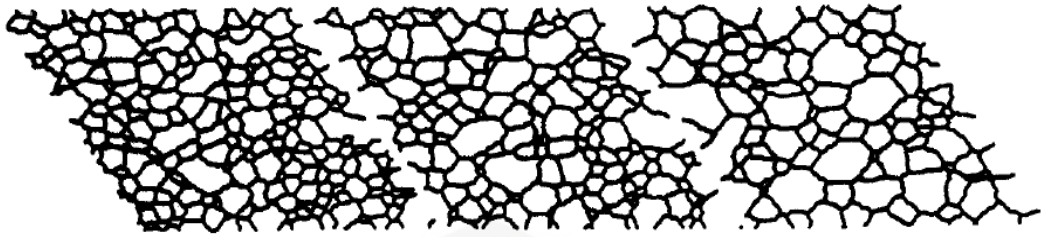
Simulasi Dinamika Molekuler terdiri dari penyelesaian numerik dan pemecahan persamaan gerak klasik, dimana untuk system atom sederhana dapat ditulis:

$$m_i \ddot{r}_i = f_i ; \text{dimana } f_i = - \frac{\partial}{\partial r_i} u \quad (2.2)$$

Untuk tujuan ini, diperlukan perhitungan gaya  $f_i$  yang bekerja pada atom-atom, perhitungan gaya biasanya diturunkan dari persamaan energy potensial  $u(r^N)$ , dimana  $r^N = (r_1, r_2, \dots, r_n)$  menunjukkan kordinat atom  $3N$  yang komplit.

### 2.7.1 LAMMPS

*Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) adalah program simulasi dinamika molekuler dari *Sandia National Laboratories*. LAMMPS menggunakan *Message Passing Interface* (MPI) untuk komunikasi parallel dan merupakan software *open-source* gratis, didistribusikan di bawah ketentuan lisensi publik GNU. LAMMPS awalnya dikembangkan di bawah naungan *Cooperative Research and Development Agreement* (CRADA) antara laboratorium dari departemen energi Amerika Serikat dan tiga laboratorium lainnya dari sektor swasta. Kemudian pada tahun 2016, LAMMPS didistribusikan oleh para peneliti di *Sandia National Laboratories* dan *Temple University*.



Gambar 2.5 Model simulasi *grain growth* (Anderson.M.P et al, 1983)

Gambar di atas merupakan contoh hasil dari simulasi proses *grain growth* aluminium, terlihat terjadi proses bergabungnya beberapa butir membentuk satu butir dengan ukuran yang lebih besar (*coalescence*). Untuk efisiensi perhitungan, LAMMPS menggunakan *Verlet List* untuk melacak pergerakan partikel yang dekat. *Verlet List* dioptimalkan untuk system dengan partikel yang tolak-menolak pada jarak dekat. Sehingga massa jenis partikel tidak tumbuh terlalu besar. Pada komputer paralel, LAMMPS menggunakan teknik penguraian spasial untuk memprediksi domain simulasi menjadi *sub-domain* 3d yang kecil, dimana dikirimkan ke setiap prosesor. Prosesor mengkomunikasikan dan menyimpan atom hantu untuk atom yang membatasi sub-domainnya. LAMMPS adalah simulasi yang paling efisien (dalam komputasi paralel) untuk sistem dimana partikel yang diamati mengisi kotak simulasi berbentuk segi empat 3D dengan massa jenis atau kerapatan yang seragam (Sandia National Laboratories, 2010).

### 2.7.2 Potensial EAM (*Embedded Atom Method*)

*Embedded Atom Method* (EAM) adalah salah satu metode perhitungan potensial antar-atom yang paling sering digunakan secara luas di dunia, untuk logam dan paduan. Secara konseptual, distribusi elektron dari masing-masing atom tidak merespon lingkungan atom di dalam EAM. Pada kenyataannya, distribusi setiap atom bergantung pada kondisi lingkungan atom. Potensial antar-atom adalah pondasi dari simulasi mekanika molekuler klasik (termasuk simulasi statis dan dinamis). Pada perbandingannya dengan perhitungan mekanika kuantum, simulasi mekanika molekuler klasik mampu menggambarkan waktu evolusi yang lebih lama pada sistem fisikal yang lebih besar. Contohnya interaksi dinamika dislokasi dan difusi permukaan yang terlalu sulit untuk perhitungan mekanika kuantum, tetapi akan lebih mudah dengan menggunakan simulasi

dinamika molekuler klasik. Dengan luasnya penggunaan simulasi mekanika molekuler, berbagai jenis potensial antar-atom telah dikembangkan, seperti (a) potensial pair-wise untuk atom *closed-shell* yang terkondisi, potensial *embedded atom method* (EAM) dan formulasi yang mirip untuk logam dan paduan, potensial *bond order* untuk benda padat kovalen, dan *force field* untuk sistem organik dan oksida (Zhou.L.G. dan Huang Hanchen, 2012).

Untuk logam dan paduan, potensial EAM mungkin merupakan pendekatan yang paling banyak digunakan dalam penelitian. Tiga formulasi lain yang secara efektif mirip dengan potensial EAM adalah teori efektif menengah, potensial *finnis-sinclair* dan potensial *glue model* (Ercolessi.F. et al., 1988). Potensial EAM dapat diformulasikan (oleh M.S. Daw dan M.L. Baskes, 1983) sebagai berikut:

$$E = \sum_i E_i = \sum_i F(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij(i \neq j)} \phi(r_{ij}) \text{ dimana } \rho_i = \sum_{j(\neq i)} \rho(r_{ij}) \quad (2.3)$$

Dimana  $E$  adalah total energi dari sistem atom,  $E_i$  adalah jumlah energi potensial atom  $i$ ,  $F$  adalah fungsi embedding,  $P_i$  adalah total densitas electron pada atom  $i$  meliputi kontribusi electron dari atom lain, dan  $\phi(r_{ij})$  adalah energi interaksi pasangan antara atom  $i$  dan atom  $j$ .

Potensial EAM digunakan sebagai salah satu data masukan pada simulasi LAMMPS untuk menggambarkan interaksi antar-atom alumina. Persamaan potensial EAM juga dapat dituliskan sebagai berikut:

$$E_N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=i_1}^N \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F_i(\rho_i) \quad (2.4)$$

Dimana  $\phi_{ij}(r_{ij})$  adalah *pair energy* antara atom  $i$  dan  $j$  dipisahkan oleh jarak sebesar  $r_{ij}$ . Sedangkan  $F_i$  merupakan embedding energy pada atom  $i$  dengan densitas electron  $\rho_i$ . *pair potential* dapat dihitung dengan rumus sebagai berikut:

$$\phi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-k)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \quad (2.5)$$

Dimana  $r$  adalah jarak antar-atom tetangga dan  $A$ ,  $B$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$  adalah parameter yang dapat diatur. Kemudian densitas elektron dapat dihitung dengan persamaan berikut:

$$\rho_i = \sum_{j=i_1}^N f_i(r_{ij}) \quad (2.6)$$

Dimana  $f_j(r_{ij})$  adalah densitas elektron dari atom  $j$  pada kedudukan atom  $i$ . Fungsi densitas elektron juga dapat dinyatakan dengan bagian yang sama dengan persamaan *pair potential*:

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-\lambda)^{20}} \quad (2.7)$$

Dimana  $f_e$  adalah parameter *fitting*. Kemudian untuk menghitung *embedding energy* dapat digunakan persamaan:

$$F(\rho) = F_e [1 - \ln(\frac{\rho}{\rho_s})^\eta], \quad (2.8)$$

Dimana  $\rho_e$  adalah densitas elektron pada kedudukan kisi dan  $\rho_s$ ,  $F_{ni}$ ,  $F_i^-$ ,  $F_i^+$ ,  $F_e$ , dan  $\eta$  merupakan parameter *fitting*. Perhitungan densitas elektron dan *embedding energy* diatas dapat digunakan untuk unsur logam. Perhitungan densitas elektron oksigen dapat digunakan persamaan sebagai berikut:

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\gamma(\frac{r}{r_e}-1)]}{1+(\frac{r}{r_e}-v)^{20}} \quad (2.9)$$

Dimana  $\gamma$  dan  $v$  adalah parameter *fitting*. Fungsi *embedding energy* untuk oksigen dapat dituliskan:

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_{i,j} (\frac{\rho}{\rho_{e,j}} - 1)^i, \quad (2.10)$$

Dimana  $\rho_{e,j}$  adalah densitas elektron pada kedudukan atom ke  $j$  dan  $F_{i,j}$  dan  $\rho_{e,j}$  adalah parameter *fitting* tambahan.

## BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

### 3.1 Metode Penelitian

Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah metode simulasi dan numerik, yaitu sebuah metode untuk memodelkan dan menggambarkan pertumbuhan butir alumina saat proses pendinginan dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler maupun perhitungan.

### 3.2 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian dilaksanakan di Laboratorium Teknologi Terapan, kampus Patrang Universitas Jember pada bulan Januari hingga selesai.

### 3.3 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan untuk melaksanakan penelitian ini adalah seperangkat laptop 32 bit dengan prosesor intel core i3.

Adapun bahan yang digunakan adalah program simulasi dinamika molekuler LAMMPS dan program Ovito untuk menggambarkan output hasil simulasi.

### 3.4 Pelaksanaan Penelitian

Penelitian dilaksanakan dengan dua metode, yaitu metode perhitungan numerik untuk menentukan perubahan ukuran butir rata-rata alumina saat pendinginan (temperatur 2000-27°C). Serta metode simulasi dinamika molekuler untuk mendapatkan visualisasi proses *grain growth* alumina (temperatur 773 K) dan perubahan energi potensial seiring menurunnya temperatur.

### 3.5 Perhitungan Ukuran butir (*grain size*)

Ukuran butir alumina pada proses pertumbuhan butir (*grain growth*) dapat dihitung dengan persamaan berikut (So Ik Bae et al, 1993):

$$G^3 - G_a^3 = kt \quad (3.1)$$

Keterangan:

G = ukuran butir



$G_a$  = ukuran butir akhir

$k$  = konstanta

$t$  = waktu

Perhitungan konstanta ( $k$ ) dapat dilakukan dengan persamaan:

$$k = k_0 \exp(-Q/RT) \quad (3.2)$$

Keterangan:

$k$  = konstanta

$k_0$  = konstanta awal

$Q$  = energi aktivasi *grain growth*

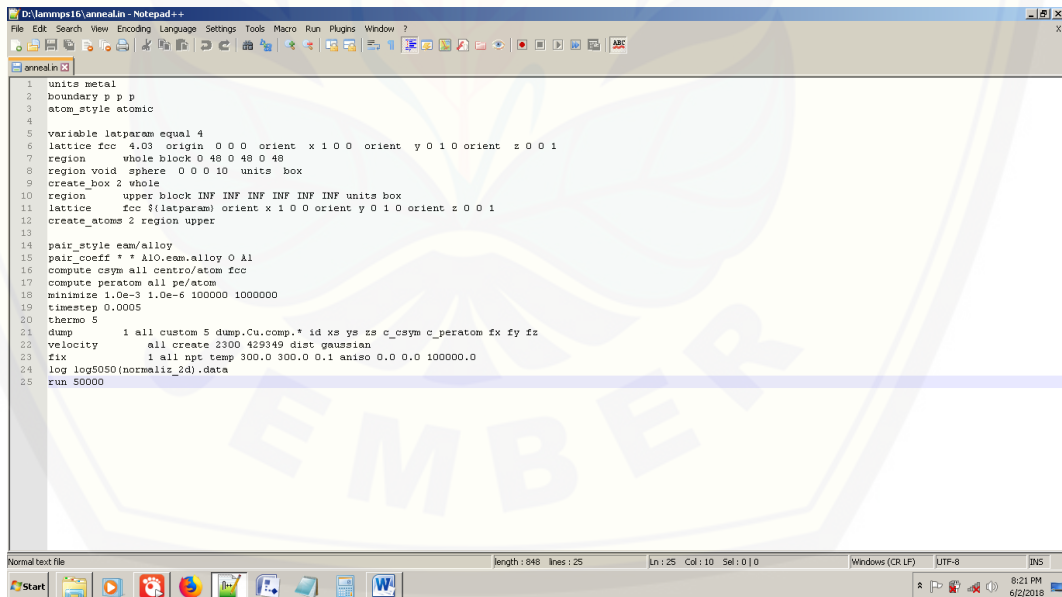
$R$  = konstanta gas ideal

$T$  = Temperatur

### 3.6 Prosedur Simulasi

#### 3.6.1 Prosedur LAMMPS

a. Menentukan input masukan yang akan digunakan dalam simulasi:



```

1 units metal
2 boundary p p p
3 atom_style atomic
4
5 variable latparam equal 4
6 lattice fcc 4.03 origin 0 0 0 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
7 region whole block 0 48 0 48 0 48
8 region void sphere 0 0 0 10 units box
9 create_box 2 whole
10 region upper block INF INF INF INF INF INF units box
11 lattice fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
12 create_atoms 2 region upper
13
14 pair_style eam/alloy
15 pair_coeff * * AlO_eam.alloy O Al
16 compute csym all centro/atom fcc
17 compute peratom all pe/atom
18 minimize 1.0e-3 1.0e-6 100000 1000000
19 timestep 0.0005
20 thermo 5
21 dump 1 all custom 5 dump.Cu.comp.* id xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
22 velocity all create 2300 429349 dist gaussian
23 fix 1 all npt temp 300.0 300.0 0.1 aniso 0.0 0.0 100000.0
24 log log5050(normaliz_2d).data
25 run 50000
  
```

Gambar 3.1 *Input script LAMMPS*

#### 1. Orientasi kristal

Orientasi kristal yang dipakai yaitu sumbu x (100), sumbu y (010), dan sumbu z (001).

## 2. Suhu Simulasi

Suhu yang diterapkan pada simulasi yaitu  $1977\text{ }^{\circ}\text{C}$ - $27\text{ }^{\circ}\text{C}$ .

## 3. Timestep

Timestep yang digunakan sebesar 200 ms, dengan *run* selama 50.000 langkah.

## 4. Ensemble

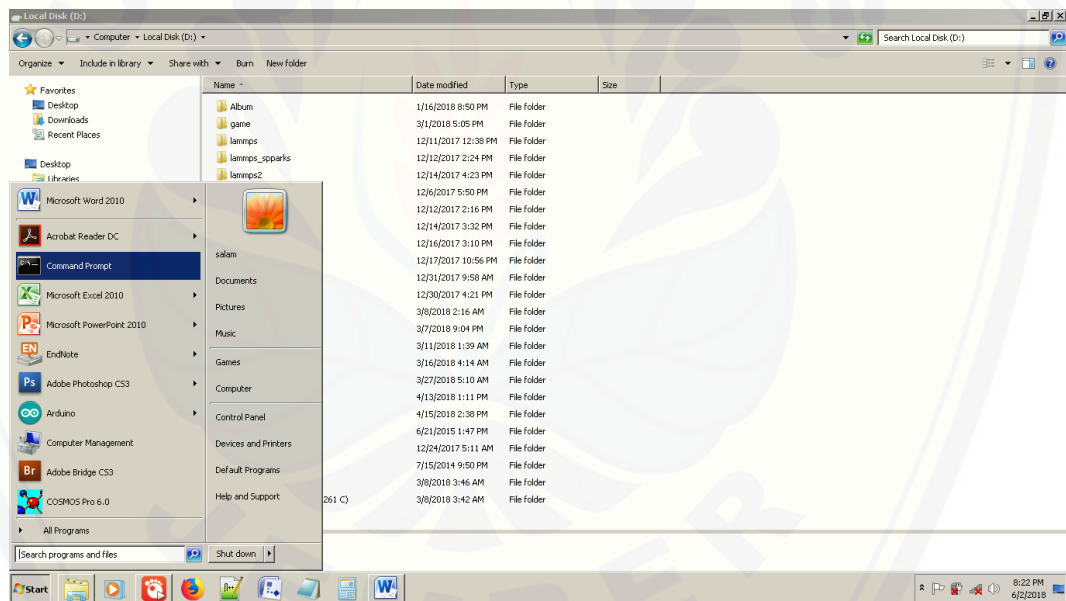
Keadaan yang digunakan saat proses simulasi yaitu *npt ensemble*.

## 5. Menentukan parameter dari potensial yang digunakan pada program simulasi. Potensial yang digunakan yaitu potensial EAM.

## 6. Masukkan semua parameter ke sebagai *input script* di notepad++.

### b. Pelaksanaan simulasi (LAMMPS)

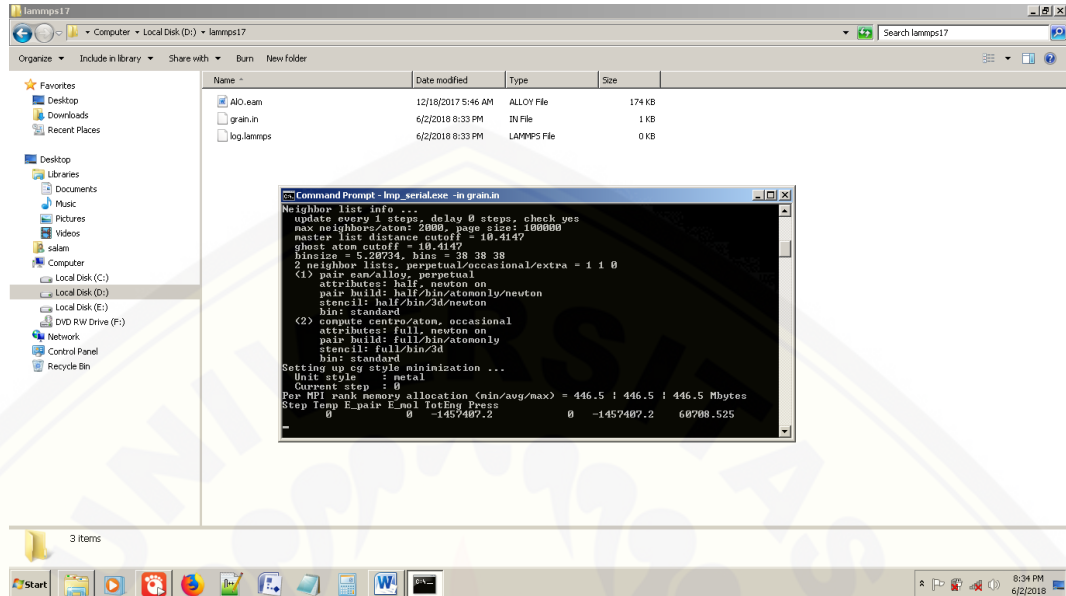
#### 1. Jalankan simulasi LAMMPS melalui *command prompt* (untuk windows).



Gambar 3.2 Membuka *command prompt*



#### 4. Tunggu program simulasi hingga selesai.

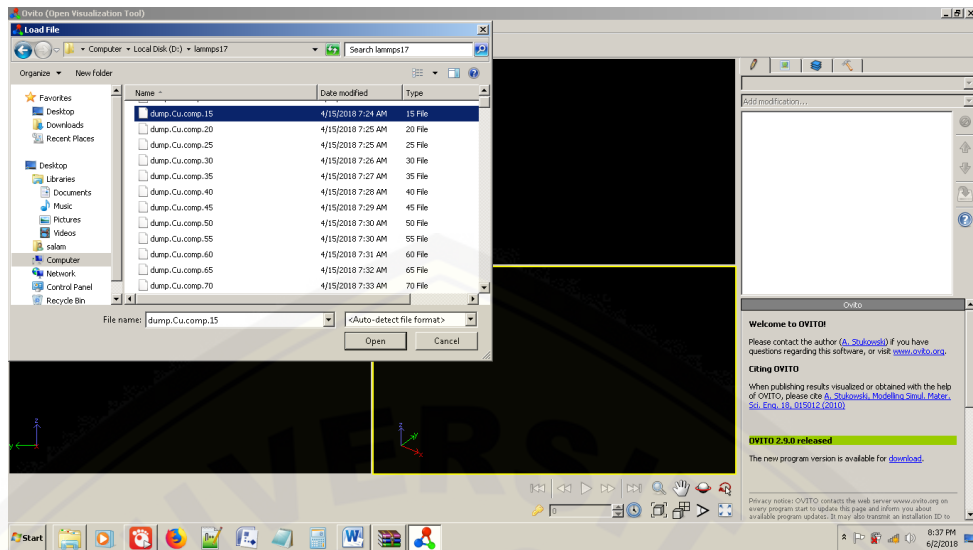


Gambar 3.5 Simulasi mulai berjalan

5. Setelah selesai, akan didapatkan dua jenis file, yaitu file dump. yang dapat digunakan untuk visualisasi *grain growth* menggunakan OVITO dan file loglammps untuk analisis perubahan energi potensial alumina.

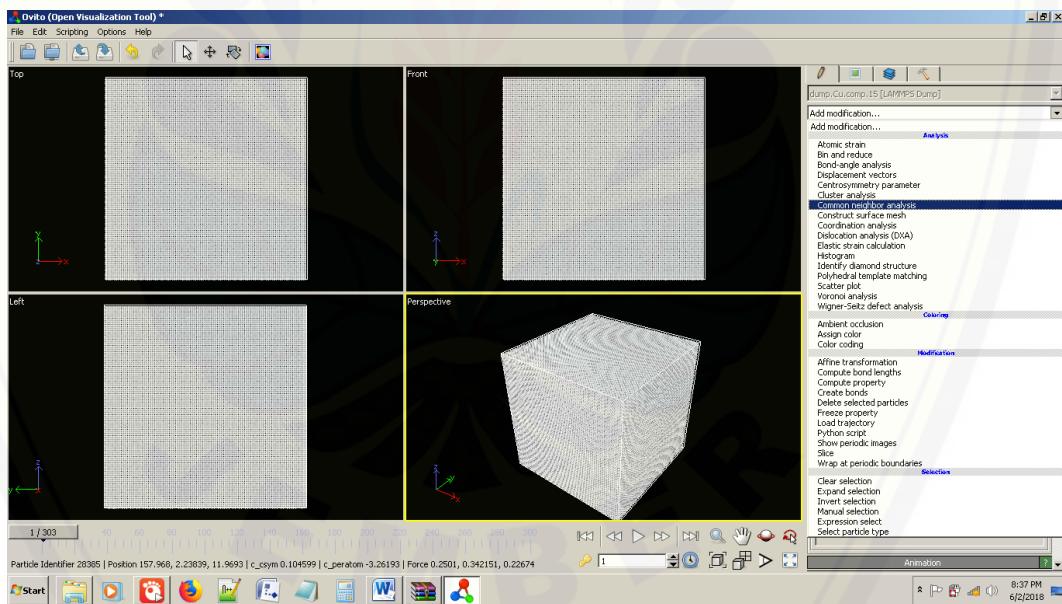
#### 3.6.2 Visualisasi dengan OVITO

1. Untuk mendapatkan visualisasi *grain growth*, digunakan program OVITO. Langkah pertama, buka program OVITO.



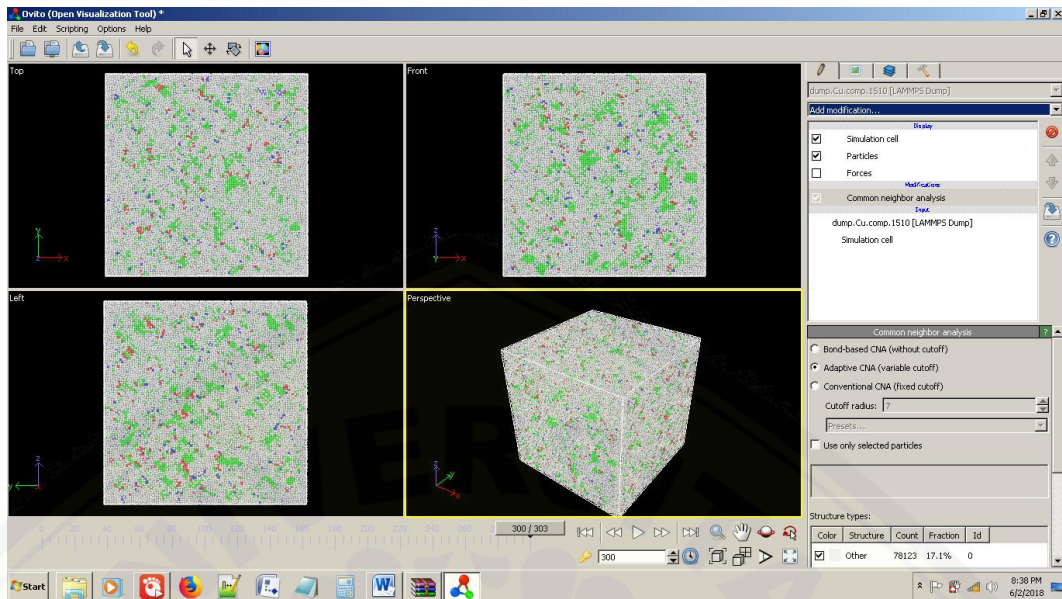
Gambar 3.6 Membuka program OVITO

- Setelah program OVITO terbuka, kemudian buka file dump. hasil simulasi LAMMPS.



Gambar 3.7 Membuka program OVITO

- Setelah itu, aktifkan fungsi CNA (*Common Neighbor Analysis*) di *add modification* untuk menampakkan struktur butir hasil simulasi.

Gambar 3.8 Visualisasi *Grain Growth* di OVITO

#### 4. Render dan simpan gambar hasil visualisasi.

### 3.7 Perubahan Energi Potensial

Energi potensial alumina dipengaruhi oleh perubahan temperatur dan jarak antar-atom. Pada penelitian ini, akan dianalisa perubahan energi potensial yang dipengaruhi oleh perubahan temperatur saat proses pendinginan. Data perubahan energi potensial diambil dari data log hasil simulasi LAMMPS, kemudian data diolah menggunakan microsoft excel dalam bentuk grafik untuk kemudian dapat dianalisa.

### 3.8 Metode Analisis

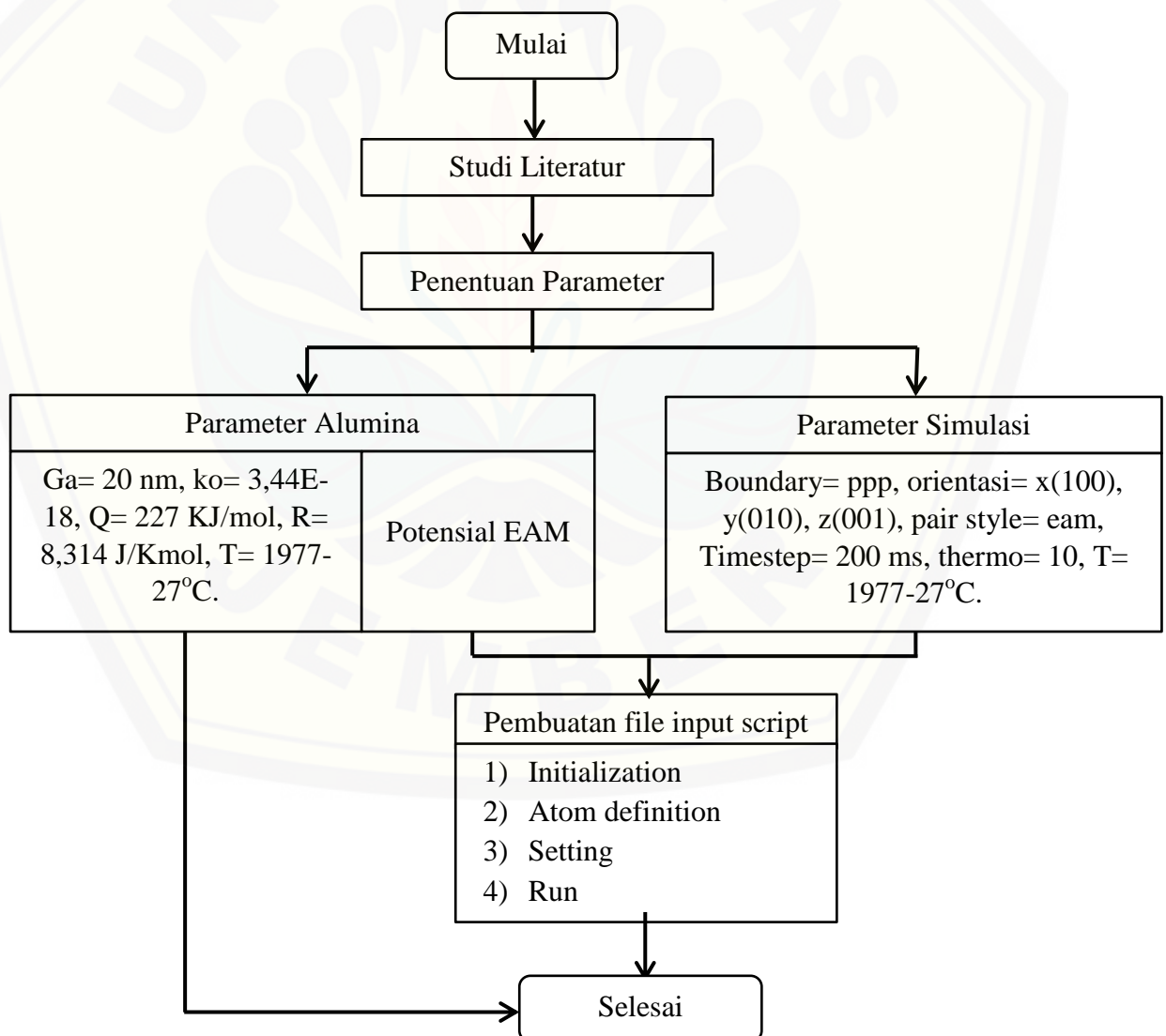
- Saat terjadi penurunan temperatur maka energi potensial alumina juga akan mengalami perubahan. Perubahan ini dapat dianalisis dari data log hasil simulasi.
- Seiring terjadinya proses pendinginan selama waktu  $t$  dengan temperatur  $T$  yang mengalami penurunan, maka ukuran butir alumina akan berubah. Keadaan ini akan dianalisis dari perubahan ukuran butir rata-rata alumina pada temperatur pendinginan ( $1977^{\circ}\text{C}$ - $27^{\circ}\text{C}$ ).

- c. Saat alumina mengalami pendinginan, terdapat sisa energi panas dari api plasma. Hal inilah yang menyebabkan terjadinya *grain growth* (migrasi batas butir) alumina, keadaan ini dapat divisualisasi dan dianalisa dengan menggunakan pemodelan dinamika molekuler LAMMPS dan OVITO.

### 3.9 Diagram Alir Penelitian

#### 3.9.1 Tahap 1 Preparasi parameter simulasi

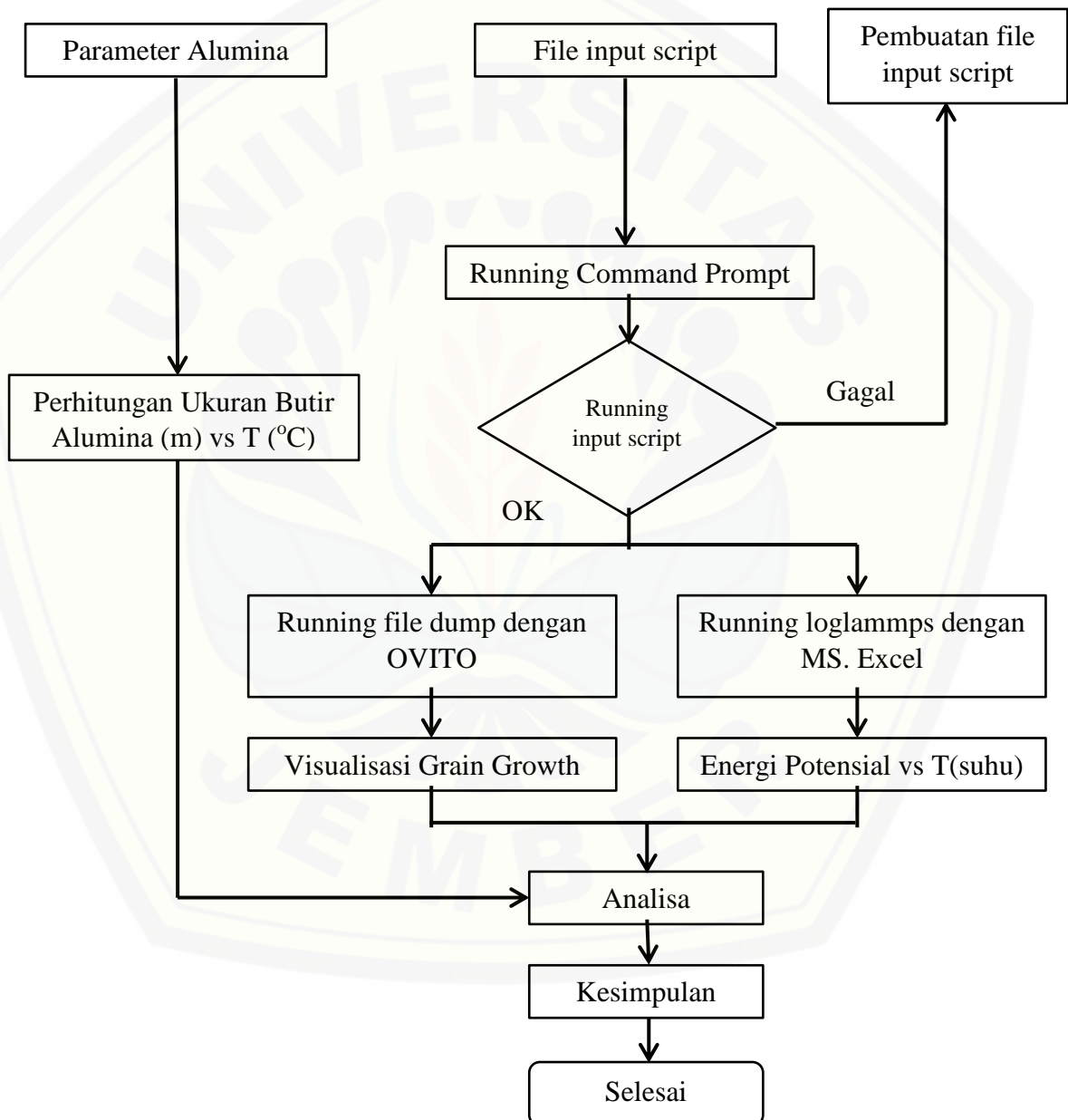
Pada tahap ini, ditentukan beberapa parameter penting yang diperlukan untuk menjalankan simulasi. Keluaran dari tahap ini yaitu berupa input script yang siap digunakan untuk menjalankan simulasi.



Gambar 3.9 Diagram alir penelitian (Preparasi parameter simulasi)

### 3.9.1 Tahap 2 Proses pelaksanaan simulasi

Pada tahap 2, setelah input script telah disusun, maka simulasi siap dilaksanakan. Keluaran dari tahap ini adalah file dump dan file loglammps.



Gambar 3.10 Diagram alir penelitian (Pelaksanaan Simulasi)



## BAB 5 PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

Dari hasil penelitian dan pembahasan, maka dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut:

1. Energi potensial  $\gamma$ -alumina dipengaruhi oleh penurunan temperatur api plasma. Energi potensial  $\gamma$ -alumina mengalami penurunan seiring dengan turunnya temperatur api plasma. Transisi  $\gamma$ -alumina cair menjadi padat mulai terjadi pada temperatur 2057,2 K.
2. Pertumbuhan butir  $\gamma$ -alumina dipengaruhi oleh penurunan temperatur api plasma. Pada temperatur 1977 °C-228 °C terjadi pertumbuhan  $\gamma$ -alumina dengan ukuran maksimum sebesar 372 nm. Setelah itu,  $\gamma$ -alumina mengalami penurunan ukuran dikarenakan adanya energi aktivasi sebesar 320 kJ/mol.
3. Perbedaan fasa alumina memiliki pengaruh terhadap pertumbuhan butir alumina.  $\alpha$ -alumina memiliki ukuran maksimum 367 nm,  $\gamma$ -alumina memiliki ukuran maksimum 372 nm, dan amorf-alumina memiliki ukuran maksimum 380 nm. Semakin sempurna fasa alumina, semakin kecil pertumbuhan butir maksimum didapatkan.

### 5.2 Saran

Setelah melaksanakan penelitian, diketahui metode simulasi dinamika molekuler dengan LAMMPS memiliki banyak bidang kajian, terutama tentang ilmu metalurgi. Metode ini dapat dimaksimalkan dalam memprediksi dan menggambarkan berbagai keadaan metalurgi. Sehingga perlu dilakukan penelitian lanjutan setelah penelitian ini dalam bidang dinamika molekuler, dikarenakan kajian tentang bidang ini dinilai masih kurang di Indonesia.

**DAFTAR PUSTAKA**

- A, Mersmann. (2001). "Crystallization Technology Handbook." Material Science and Engineering **25** 1-10
- Allen, M. P. (2004). "Introduction to Molecular Dynamics Simulation." Scientific computing and department of physics **23**: 1-28.
- ANDERSON, M. P., et al. (1984). "Computer Simulation of Grain Growth Kinetics." Acta Metal **32**: 783-791.
- Anwar, J. and D. Zahn (2011). "Uncovering Molecular Processes in Crystal Nucleation and Growth by Using Molecular Simulation." 1-18.
- BAE, S. I. and S. BAIK (1993). "Sintering and Grain Growth of Ultrapure Alumina." Material Science **28**: 4197-4204.
- BENNISON, S. J. and M. P. HARME (1985). "Grain-Growth Kinetics for Alumina in the Absence of a Liquid Phase." Communications of the American Ceramic Society **68(-)**: C22-C24.
- Chen, I.-W. and X.-H. Wang (2000). "Intering dense nanocrystalline ceramics without final-stage grain growth." Material Science and Engineering **404**: 168-171.
- Cubillas, P. and M. W. Anderson (2010). "Synthesis Mechanism: Crystal Growth and Nucleation." Zeolites and Catalysis, Synthesis, Reactions and Applications **1**: 1-56.
- Davis, J. R. (2001). "Aluminum and Aluminum Alloys." 66.
- Davis, K. (2010). "Material Review: Alumina." Aluminum Oxide (Alumina) Ceramics & Properties-Marketech International Inc.: 109-115.
- Dubrovskii, V. G. (2014). "Fundamentals of Nucleation Theory." NanoScience and Technology: 1-74.
- Fernández-García, M. and J. A. Rodríguez (2007). "Metal Oxide Nanoparticles." Nanomaterial: Inorganic and Bioinorganic perspectives: 1-60.
- Frenkel, D., et al. (2013). "Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications." **443**: 1-2.

- Halfon, A. and S. Kaliaguine (1976). "Alumina Trihydrate Crystallization." Canadian Journal of Chemical Engineering **54**: 160-167.
- HANDWERKER, C. A. and J. E. BLENDALL (1987). "Effect of a Liquid Phase on the Morphology of Grain Growth in Alumina." American Ceramic Society **70**: 339-343.
- Lab., S. (1999). "Basics of Molecular Dynamics."
- Moravec, J. (2015). "Determination of the Grain Growth Kinetics as a Base Parameter for Numerical Simulation Demand." SCIENCE JOURNAL: 649-653.
- Muhammad, N. (2011). Fisika Plasma dan Aplikasinya. Universitas Diponegoro Semarang, BADAN PENERBIT.
- Perti, A. (1996). "Mechanical and Physical Properties of Engineering Alumina Ceramics."
- Puneesh, P. and Y. Vigor (2007). "Effect of Particle Size on Melting of Aluminum at Nano Scales." J. Phys. Chem. **111**: 11776-11783.
- Rodel, J. and A. M. Glaeser (1990). "Anisotropy of Grain Growth in Alumina." American Ceramic Society **73**: 3292-3301.
- SEO, J.-H. and B.-G. HONG (2012). "THERMAL PLASMA SYNTHESIS OF NANO-SIZED POWDERS." Nuclear Engineering and Technology **44**: 9-20.
- Smothers, W. J. and H. J. Reynolds (1954). "Sintering and Grain Growth of Alumina." The American Ceramic Society **37**: 588-595.
- Takashi, S. (2009). "Structural Properties and Surface Characteristics on Aluminum Oxide Powders." **9**: 23-31.
- TRUNOV, M. A., et al. (2006). "Effect of polymorphic phase transformations in alumina layer on ignition of aluminium particles." Combustion Theory and Modelling **10**: 603-623.
- Widiasih, et al. (2013). "Penerapan Metode Dinamika Molekul untuk Pembelajaran: Konsep Titik Leleh dan Perubahan Wujud." Teori dan Aplikasi Fisika **01**: 171-175.
- YAMAKOV, V., et al. (2001). "LENGTH-SCALE EFFECTS IN THE NUCLEATION OF EXTENDED DISLOCATIONS IN

NANOCRYSTALLINE Al BY MOLECULAR-DYNAMICS SIMULATION." Acta Materialia inc.: 2713-2722.

Yin, J. (2016). Molecular Dynamics Study on the Grain Growth in Nanocrystalline Aluminum. Mechanical Engineering, Santa Clara University. **Master**: 50.

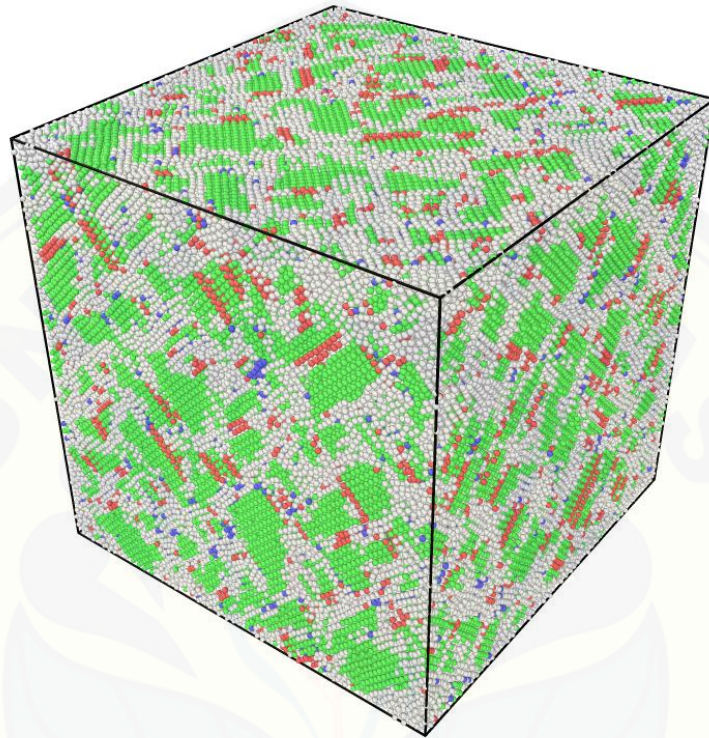
Z.Suo (2004). "Grain Growth." Material Science **20**: 1-7.

Zhang, Y. (2015). Stress-assisted Grain Growth in Nanocrystalline Metals Inhibited by Grain Boundary Segregation. Material Science and Engineering. USA, Stony Brook University. **Master of Science**: 60.

Zhou, X. W. and H. N.G.W (2005). "A charge transfer ionic-embedded atom method potential for the O-Al-Ni-Co-Fe system." Journal of Physics **17**: 3619-3635.

## LAMPIRAN

### A. Visualisasi tiga dimensi struktur butir $\gamma$ -alumina pada 563 K



### B. Kode *input* LAMMPS *grain growth* $\gamma$ -alumina

```
units metal
boundary p p p
atom_style atomic
variable latparam equal 4
lattice fcc 4.03 origin 0 0 0 orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region whole block 0 48 0 48 0 48
region void sphere 0 0 0 10 units box
create_box 2 whole
region upper block INF INF INF INF INF INF units box
```

```
lattice    fcc ${latparam} orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms 2 region upper
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * AIO.eam.alloy O Al
compute csym all centro/atom fcc
compute peratom all pe/atom
minimize 1.0e-3 1.0e-6 100000 1000000
timestep 0.0002
thermo 10
dump 1 all custom 20 dump.Cu.comp.* id xs ys zs c_csym c_peratom fx fy fz
velocity   all create 2300 429349 dist gaussian
fix        1 all npt temp 100.0 100.0 0.1 aniso 0.0 0.0 100000.0
log log5050(normaliz_2d).data
run 50000
```

### C. Visualisasi dua dimensi struktur butir $\gamma$ -alumina pada 563 K



Area diatas adalah bagian gambar visualisasi yang dipakai untuk menjelaskan mekanisme *grain growth*  $\gamma$ -alumina di bab 4 Hasil dan Pembahasan, subbab 4.3 Simulasi *grain growth*  $\gamma$ -alumina. Area observasi digunakan untuk mempermudah pengamatan proses terjadinya *grain growth*.

### D. Data perubahan energi potensial dari loglammps

NO	Temperatur (K)	EP (eV)	Perubahan (eV)
1	2238.5	-1266357.3	
2	2215.5	-1266909.7	-552.4
3	2181	-1268177.5	-1267.8
4	2140.5	-1270012	-1834.5
5	2097.8	-1272271.8	-2259.8
6	2060.9	-1274848	-2576.2
7	2053.5	-1303349.7	-28501.7
8	2051.6	-1305847	-2497.3
9	2040.9	-1308514.8	-2667.8
10	2027	-1311369	-2854.2

11	2001.8	-1314408.7	-3039.7
12	1975.4	-1317618	-3209.3
13	1948	-1320975.6	-3357.6
14	1918	-1324470	-3494.4
15	1885.6	-1328082	-3612
16	1854	-1331788	-3706
17	1823	-1335574.4	-3786.4
18	1791.6	-1339427	-3852.6
19	1760	-1343336.4	-3909.4
20	1728	-1347293	-3956.6
21	1693	-1351283.8	-3990.8
22	1661.4	-1355296.6	-4012.8
23	1628.5	-1359329	-4032.4
24	1594	-1363366	-4037
25	1562.7	-1367401.3	-4035.3
26	1532.7	-1371431.3	-4030
27	1499	-1375450.6	-4019.3
28	1467.6	-1379446	-3995.4
29	1436.8	-1383421.7	-3975.7
30	1405	-1387368.3	-3946.6
31	1372	-1391280	-3911.7
32	1341.9	-1395152.5	-3872.5
33	1312	-1398986.7	-3834.2
34	1282.5	-1402776.5	-3789.8
35	1250	-1406516.8	-3740.3
36	1219.6	-1410202.2	-3685.4
37	1194	-1413836.9	-3634.7
38	1163.6	-1417420.4	-3583.5
39	1135	-1420941.8	-3521.4
40	1107.5	-1424406.8	-3465
41	1077	-1427806.6	-3399.8
42	1049.8	-1431140.3	-3333.7
43	1022.8	-1434410.2	-3269.9
44	996	-1437613.4	-3203.2
45	972	-1440754.2	-3140.8
46	946.8	-1443831	-3076.8
47	921.4	-1446841.5	-3010.5
48	898.4	-1449787.5	-2946
49	876	-1452670.3	-2882.8
50	852	-1455489.3	-2819
51	830.5	-1458241.4	-2752.1



52	809	-1460931	-2689.6
53	787.4	-1463556.6	-2625.6
54	764.8	-1466115.6	-2559
55	743	-1468608	-2492.4
56	724.6	-1471037.4	-2429.4
57	707	-1473409	-2371.6
58	687.7	-1475722.3	-2313.3
59	665.5	-1477969.6	-2247.3
60	642	-1480145	-2175.4
61	615	-1482243.3	-2098.3
62	583.8	-1484254	-2010.7
63	548.7	-1486164	-1910
64	511.6	-1487963.3	-1799.3
65	473.8	-1489643.1	-1679.8
66	445.8	-1499693	-10049.9
67	443	-1501142.6	-1449.6
68	437	-1502574.3	-1431.7
69	428	-1503977.6	-1403.3
70	417.8	-1505344.7	-1367.1
71	406.8	-1506673.4	-1328.7
72	395.7	-1507962.5	-1289.1
73	385	-1509213.5	-1251
74	375	-1510427.6	-1214.1
75	364	-1511603.2	-1175.6
76	354	-1512740.1	-1136.9
77	344.8	-1513841.7	-1101.6
78	335.3	-1514909.8	-1068.1
79	326	-1515943.1	-1033.3
80	317.2	-1516943.5	-1000.4
81	308.8	-1517912.5	-969
82	300	-1518851.7	-939.2