

Kinerja zat aditif nanopartikel 2D dalam biopelumas berbasis dasar Palm Oil Methyl Ester: Tinjauan simulasi dinamika molekuler = Performance of 2D nanoparticle in Palm Oil Methyl Ester-based biolubricant: Molecular dynamics simulation perspective

Rizky Ruliandini, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20525471&lokasi=lokal>

Abstrak

Biopelumas berbasis dasar metil ester dari minyak kelapa sawit (POME) adalah salah satu pelumas alternatif yang paling mungkin dikembangkan saat ini karena berasal dari minyak tumbuhan yang ketersediaannya tidak terbatas. Sementara itu, MXene, material baru berdimensi dua, belum banyak diaplikasikan sebagai zat aditif ke dalam pelumas terutama biopelumas. Menggunakan pendekatan simulasi dinamika molekuler, kestabilan MXene didalam POME beserta sifat termofisika campurannya akan diprediksikan. Kedalam campuran POME-MXene kemudian ditambahkan juga partikel nano unggul lainnya yaitu Al₂O₃. Dengan visualisasi, fenomena interaksi secara atomik yang terjadi diantara; POME-MXene, MXene- Al₂O₃ dan POME-MXene/Al₂O₃ dapat diketahui. Prediksi kestabilan, densitas, koefisien difusi dan konduktivitas termal dihasilkan dengan metode Equilibrium Molecular Dynamics (EMD) sedangkan metode Non-Equilibrium Molecular Dynamics (NEMD) diterapkan untuk memprediksikan nilai viskositas. Potensial Condensed-phase Optimized Molecular Potential for Atomistic Potential Studies (COMPASS) yang dihibridisasi dengan potensial sederhana LJ 12-6 digunakan untuk mendefinisikan interaksi intra dan inter-molekular pada molekul MXene, Al₂O₃ serta campuran POME-MXene/Al₂O₃. Dibandingkan dengan hasil uji laboratorium, didapatkan deviasi rata-rata kurang dari 10% sehingga sifat termofisika pada POME dapat diprediksikan dengan baik. Hasil visualisasi yang diperoleh mampu menjawab bagaimana mekanisme dan bentuk agregasi nanopartikel dalam POME, sehingga dapat menjelaskan sifat termofisika yang khas pada campuran POME dan MXene beserta hibridisasinya. Terutama nilai konduktivitas termal yang semakin turun seiring naiknya temperatur.

.....Due to its sustainable resources, Palm Oil Methyl Ester-based lubricants (POME) is one of the alternative lubricants most likely to be developed today. In this study, POME was reinforced by a novel 2D nanomaterial, MXene and other prominent nano material Al₂O₃. Using molecular dynamics simulation, the stability of MXene in POME and its thermophysical properties were predicted. The predicted interaction between two different dimension (MXene-Al₂O₃) were also covered. With visualization, other phenomenon of atomic interactions that occur between; POME-MXene and POME-MXene/Alumina were revealed. Predictions of stability, density, diffusion coefficient and thermal conductivity were generated by EMD method while the NEMD method was applied to predict viscosity values. COMPASS which was used to define intra-molecular interactions of POME was hybridized with the simple potential LJ 12-6 which defines the intra and inter-molecular interactions of MXene, Alumina and POME-MXene/Alumina molecules. Compared to laboratory test results, the average deviation is less than 10% so that the thermophysical properties of POME in a good agreement. The visualization results obtained were able to answer how the mechanism and form of nanoparticle aggregation in POME, so as to explain the thermophysical properties typical of the mixture of POME and MXene and its hybridization. Especially the value of thermal conductivity that decreases as the temperature rises.