

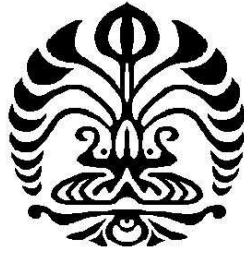
UNIVERSITAS INDONESIA

**SIMULASI DENGAN METODE MONTE CARLO UNTUK
PROSES PEMBUATAN NANOMATERIAL MENGGUNAKAN
BALL-MILL**

SKRIPSI

**FAHLEFI NUR DIANA
0305020381**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI FISIKA
DEPOK
JUNI 2010**



UNIVERSITAS INDONESIA

**SIMULASI DENGAN METODE MONTE CARLO UNTUK
PROSES PEMBUATAN NANOMATERIAL MENGGUNAKAN
BALL-MILL**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana sains

**FAHLEFI NUR DIANA
0305020381**

**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PROGRAM STUDI FISIKA
DEPOK
JUNI 2010**

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri,
dan semua sumber yang dikutip maupun dirujuk
telah saya nyatakan dengan benar.

Nama : Fahlefi Nur Diana

NPM : 0305020381

Tanda Tangan :

Tanggal : 16 Juni 2010

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh

Nama : Fahlefi Nur Diana
NPM : 0305020381
Program Studi : Fisika
Judul Skripsi : Simulasi dengan Metode Monte Carlo untuk Proses Pembuatan Nanomaterial Menggunakan Ball-mill

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian dari persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Indonesia.

DEWAN PENGUJI

Pembimbing : Dr. L. T. Handoko ()

Pembimbing : Dr. Budhy Kurniawan ()

Penguji : Dr. Azwar Manaf ()

Penguji : Dr. Djoko. T ()

Ditetapkan di : Depok
Tanggal : 16 Juni 2010

KATA PENGANTAR

Nanomaterial memiliki pengaruh yang sangat besar dalam perkembangan teknologi saat ini. Hal ini tidak dapat dipungkiri karena hampir disetiap sektor industri, nanomaterial menunjukkan peranannya yang sangat dominan. Pembuatan nanomaterial ini dapat dilakukan dengan berbagai macam cara, tentunya membutuhkan ketelitian. Salah satu alat yang dapat digunakan untuk memproduksi nanomaterial secara mekanik ialah ball-mill. Adanya pengoptimalan proses mekanik ini akan memberikan keuntungan dalam memproduksi nanomaterial. Namun banyaknya parameter yang mungkin terlibat pada proses ini akan cukup menyulitkan untuk memprediksi dinamika *milling* ini. Sebelumnya, banyak penulis yang telah memaparkan dinamika *milling* ini, diantaranya dengan menggunakan persamaan gerak mekanik. Tetapi penggunaan metode ini tidak efisien karena berbagai faktor.

Skripsi ini membahas mengenai dinamika *milling* pada proses pembuatan nanomaterial menggunakan metode Hamiltonian, dimana metode ini belum pernah dilakukan. Suatu pendekatan baru untuk menjabarkan dinamika *milling*.

Puji syukur saya panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmat-Nya, saya dapat menyelesaikan skripsi ini. Penulis secara khusus mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang telah membantu penulis menyelesaikan skripsi ini baik secara langsung maupun tidak langsung, antara lain:

1. Dr. L. T. Handoko selaku pembimbing yang telah membimbing penulis dari awal diskusi hingga penyelesaian tugas akhir ini, serta ide-ide, dukungan, saran dan semangat yang selalu diberikan.
2. Dr. Budhy Kurniawan selaku pembimbing akademis yang selalu memberikan dukungannya.
3. Orang tua tercinta dan keluarga atas doa dan dukungannya. Nasehat-nasehatnya yang selalu memberikan semangat kepada penulis.
4. Gagus Ketut di LIPI yang sudah mau bersabar mengajarkan pemrograman. Para sahabat yang setia, yaitu Gustina Aida Putri, Dian Puspitasari, Efma

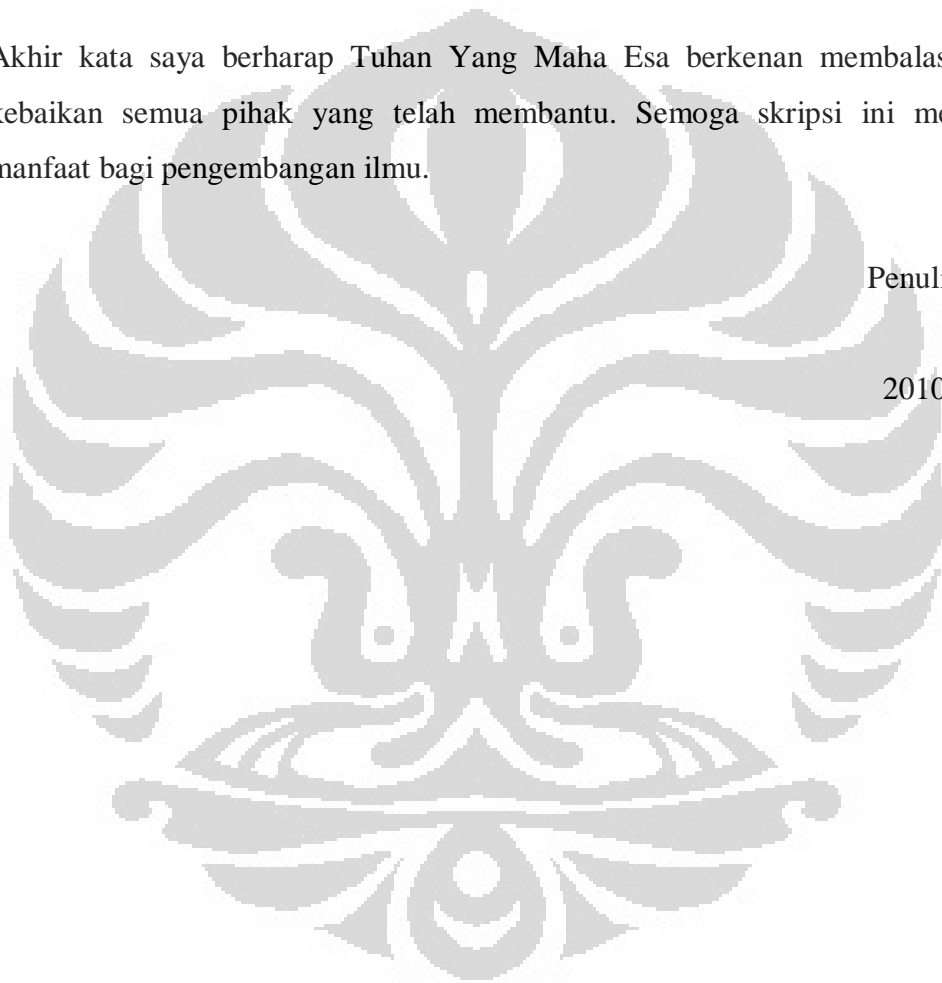
Rosyanti juga Gayatri Farma Novenita. Juga rekan-rekan di Lab Teori: Hans, Fathia, Andi dan Krisna.

5. *Special thanks*, untuk Anindito Suangga Mangawe, “Hun, terima kasih banyak atas semuanya”.
6. Teman-teman fisika angkatan 2005 dan teman-teman di UPP-IPD.
7. Juga semua pihak yang membantu penulis, terima kasih atas dukungan dan doanya selama ini.

Akhir kata saya berharap Tuhan Yang Maha Esa berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu.

Penulis

2010



HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Fahlefi Nur Diana
NPM : 0305020381
Program Studi : Fisika Material Terkondensasi
Departemen : Fisika
Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Jenis Karya : Skripsi

Demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia Hak Bebas Royalti Noneklusif (*Non-exclusive Royalty Free Right*) atas karya ilmiah saya yang berjudul:

Simulasi dengan Metode Monte Carlo untuk Proses Pembuatan Nanomaterial Menggunakan Ball-mill

beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (database), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya,

Dibuat di : Depok
Pada Tanggal : 16 Juni 2010
Yang menyatakan

(Fahlefi Nur Diana)

ABSTRAK

Nama : Fahlefi Nur Diana
Program Studi : Fisika
Judul : Simulasi dengan Metode Hamiltonian untuk Proses Pembuatan Nanomaterial Menggunakan Ball-mill

Metode Hamiltonian secara langsung digunakan untuk menghitung dinamika internal pada proses *milling* menggunakan ball-mill, baik keseluruhan gerak mekanik di dalam vial dan efek eksternal lainnya. Dengan merangkum keseluruhan interaksi yang terjadi di dalam sistem ball-mill, diperoleh total Hamiltonian untuk sistem ini. *Observable* fisisnya diperoleh dengan mengekstrak fungsi partisi. Fungsi partisinya dapat berupa fungsi temperatur maupun fungsi tekanan. Analisa numerik menggunakan metode Monte Carlo telah dilakukan untuk menggambarkan pengaruh ukuran dan jumlah material terhadap energi bebas sistem.

Kata Kunci : pemodelan, ball-mill, Hamiltonian, fungsi partisi, Monte Carlo.
x+32 halaman ; 10 gambar.
Daftar Acuan : 17 (1965-2009)

ABSTRACT

Name : Fahlefi Nur Diana
Program Study : Physics
Title : Simulation with Monte Carlo Method for Nanomaterial Manufacturing Process Using Ball-mill

Hamiltonian method directly applied to calculate internal dynamics, both overall mechanic motions inside the vial and other external effects on milling process, using ball-mill. Total Hamiltonian for the ball-mill system obtained by summarizing overall interactions which are happened in the system. Physical observables are resulted by extracting partition function. The partition function can be represented as a temperature function or pressure function. Numerical analysis using Monte Carlo method has been done to depict the influence of scale and number of materials upon free energy of the system.

Key Words : modelling, ball-mill, Hamiltonian, partition function, Monte Carlo.
x+32 pages : 10 pictures.
Bibliography : 17 (1965-2009)

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
LEMBAR PERNYATAAN ORISINALITAS	ii
LEMBAR PENGESAHAN	iii
KATA PENGANTAR	iv
LEMBAR PERSETUJUAN PUBLIKASI	vi
ABSTRAK	vii
DAFTAR ISI	ix
DAFTAR GAMBAR	x
1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	2
1.3 Pembatasan Masalah	3
1.4 Metode Penelitian	3
1.5 Tujuan Penelitian	3
2 DINAMIKA INTERNAL SISTEM BALL-MILL	4
2.1 Mekanisme <i>Milling</i> Menggunakan Ball-mill	4
2.2 Dinamika Internal Sistem Ball-mill	5
2.3 Observasi Fisis	10
3 SIMULASI DENGAN METODE MONTE CARLO	13
3.1 Model Simulasi	13
3.2 Sistem Koordinat	13
3.3 Teknik Simulasi	16
4 HASIL DAN PEMBAHASAN	18
5 KESIMPULAN	23
A Perhitungan Nilai \mathcal{F} menggunakan Metode Monte Carlo (Pemograman dengan Phyton)	25
DAFTAR ACUAN	32

DAFTAR GAMBAR

2. 1	Mekanisme proses <i>milling</i>	4
2. 2	Skema geometris tumbukan antara material dengan dinding vial	7
2. 3	Normalisasi tekanan sebagai fungsi temperatur sistem	12
3. 1	Skema sederhana pergerakan Spex mixer.	14
4. 1	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) nikel	19
4. 2	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) silika	19
4. 3	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) baja	20
4. 4	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) nikel	20
4. 5	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) silika	21
4. 6	\mathcal{F} sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) baja	21



BAB I PENDAHULUAN

1. 1 Latar Belakang

Mekanisme pembuatan nanomaterial dapat dilakukan melalui tiga cara, yaitu: (1) secara kimiawi, (2) secara fisis atau mekanik, (3) kombinasi antara kimiawi dan fisis. Untuk pembuatan nanomaterial (perusakan struktur material menjadi ukuran yang lebih kecil; powder/koloid) secara mekanik, tekniknya terbagi menjadi *mechanical alloying* dan *mechanical milling*. Teknik *mechanical milling* biasanya menggunakan instrumen seperti ball-mill, roller-mill, hammer-mill dan sebagainya.

Teknik *mechanical milling* menggunakan ball-mill, sistemnya terdiri atas vial dengan material powder serta bola penghancur didalamnya, gerakannya dapat divariasikan sesuai kebutuhan misalnya sentrifugal. Observasi fisis pada mekanisme pembuatan nanomaterial menggunakan ball-mill dapat dilakukan dengan bermacam cara. Namun, karena banyaknya parameter pada mekanisme ini, kemungkinan adanya parameter-parameter yang tidak terprediksi menjadi menyulitkan untuk mengobservasinya. Sebagai contoh, dari persamaan gerak diperoleh *observable* fisis seperti ukuran material (*grain-size*) dan sebagainya, tetapi kesulitannya adalah persamaan gerak tersebut harus mampu menggambarkan secara keseluruhan kemungkinan dinamika sistem, dari pergerakan mekanik sampai evolusi distribusi *grain-size* material. Tentu, model persamaan gerak ini memerlukan penyelesaian dan simulasi yang cukup panjang. Ketidak-teraturan (*chaos*) pada mekanisme sistem ini juga tidak bisa diabaikan, misal pergerakan bola selama proses milling.

Model empiris yang dapat dibuat untuk mekanisme ini, pendekatannya berdasarkan tiga aspek : (1) evaluasi terhadap dinamika milling bodies dan energi input yang ditransfer ke material (powder); (2) mendeskripsikan efek dari energi input yang menyebabkan struktur powder berubah; (3) mendeskripsikan evolusi powder kedalam distribusi ukuran partikel.

Banyak model konvensional seperti yang dicontohkan diatas, justru tidak memberikan keuntungan. Karena secara eksperimental, hampir tidak mungkin

untuk memposisikan secara tepat geometris perpindahan seluruh material didalam vial tiap waktu (*proper time*) yang mengacu pada persamaan gerak klasik. Jika penyelesaian persamaan gerak dilakukan secara numerik, kemudian mensimulasikan dengan akurasi yang tinggi, tentunya memerlukan kapasitas komputer yang besar dan waktu yang lama. Penghitungan pengaruh eksternal disekitar vial, misal medan elektromagnetik dan sebagainya akan menjadi lebih kompleks dilevel nanometer.

Pendekatan lain yang memungkinkan untuk memaparkan mekanisme ini adalah model Hamiltonian. Model ini lebih sederhana dibandingkan dengan penyelesaian persamaan gerak klasik. Karena pada model ini, cukup dijelaskan interaksi-interaksi yang bekerja pada mekanisme sistem ball-mill tanpa harus menyelesaikan banyak persamaan. Selain itu, observasi fisis terhadap besaran termodinamik sistemnya dapat dilakukan dengan bantuan fungsi partisi setelah Hamiltonian sistem diperoleh karena sistem ini dapat dipandang sebagai sebuah ensemble kanonik secara mekanika statistik.

1. 2 Perumusan Masalah

Pemodelan sistem ball-mill dengan Hamiltonian menggambarkan bagaimana interaksi keseluruhan material penyusun sistem. Observasi terhadap besaran termodinamik dan besaran fisika lainnya pada sistem ball-mill ini dilakukan dalam beberapa tahapan. Dengan memandang sistem ball-mill ini sebagai ensemble kanonik akan diperoleh besaran termodinamik dengan menggunakan fungsi partisi. Analisa numerik menggunakan metode Monte Carlo dilakukan untuk melihat perilaku energi bebasnya pada proses pembuatan material ini jika diberikan ukuran dan jumlah material yang berbeda.

1. 3 Pembatasan Masalah

Pada pemodelan Hamiltonian yang dibuat ini diasumsikan bahwa material podwernya sejenis dan ukurannya sudah cukup kecil yaitu $\sim 100 \mu m$, tidak terjadi koagulasi, hanya terjadi perubahan ukuran material powder tanpa perubahan jenis materi dan dinamikanya difokuskan pada proses penghancuran material.

1. 4 Metode Penelitian

Penelitian ini bersifat teoritik. Teori yang digunakan ialah Hamiltonian untuk menggambarkan keseluruhan interaksi sistem. *Observable* fisis, seperti tekanan, temperatur dan sebagainya diperoleh dengan mengekstrak fungsi partisi. Baik sebagai fungsi temperatur maupun tekanan. Analisa numerik menggunakan metode Monte Carlo digunakan untuk memberikan gambaran energi bebasnya pada proses pembuatan nanomaterial.

1. 5 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari bagaimana model Hamiltonian mampu memberikan penggambaran yang lebih sederhana proses *milling* material menjadi ukuran yang lebih kecil dengan menggunakan ball-mill. Dengan mengekstrak fungsi partisi sistem diperoleh beberapa besaran fisis dari sistem, seperti temperatur dan tekanan. Simulasi dengan metode Monte Carlo memberikan gambaran bagaimana perilaku energi bebas pada proses pembuatan nanomaterial.

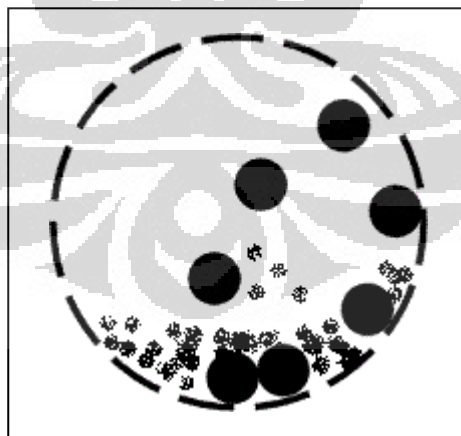
BAB II

DINAMIKA INTERNAL SISTEM BALL-MILL

Pada awal bab ini akan dijelaskan mengenai sistem ball-mill dan dinamika internal sistemnya pada proses milling. Diakhir bab dijelaskan pula mengenai observasi fisis yang dilakukan terhadap dinamika sistem.

2. 1 Mekanisme *Milling* Menggunakan Ball-mill

Ball-mill merupakan salah satu instrumen/alat yang dapat digunakan untuk memproduksi nanomaterial. Komponen ball-mill ini terdiri atas sebuah tabung (vial) penampung material dan bola-bola penghancur. Pada proses pembuatan nanomaterial menggunakan ball-mill ini, material yang akan dibuat ukurannya menjadi skala nano dimasukkan kedalam vial bersama bola-bola penghancur, lihat Gambar 2.1. Kemudian ball-mill digerakan bisa secara rotasi maupun vibrasi dengan frekuensi tinggi. Gerakan rotasi atau vibrasi ini dapat divariasasi sesuai kebutuhan. Akibatnya material yang terperangkap antara bola penghancur dan dinding vial akan saling bertumbukkan menghasilkan deformasi pada material tersebut. Deformasi material tersebut menyebabkan fragmentasi struktur material sehingga terpecah menjadi susunan yang lebih kecil [1,2].



Gambar 2.1: Material dan bola penghancur didalam vial (dinding vial = lingkaran dengan garis putus-putus, bola penghancur = bulat hitam besar, material = bulat hitam kecil).

2. 2 Dinamika Internal Sistem Ball-mill

Banyak parameter yang terlibat pada proses *milling* material ini. Jadi, memang agak sulit untuk memprediksi parameter apa saja yang menyebabkan fragmentasi material secara langsung. Misal, adanya pengaruh temperatur akibat tumbukan secara mekanik ataupun tekanan didalam vial [3]. Maka untuk menjelaskan proses *milling* ini akan lebih baik jika dibuat sebuah pemodelan walaupun tetap akan sulit untuk mencakup seluruh parameter.

Pemodelan yang memungkinkan dibuat berdasarkan pendekatan realistik antara lain dengan memaparkan pengaruh karakteristik (*impact*) tumbukan [4,5]. Pada skripsi ini, pemodelan yang dibuat untuk sistem ball-mill menggunakan pendekatan yang berdasarkan tiga aspek : (1) evaluasi terhadap dinamika internal sistem saat proses *milling* dan energi input yang ditransfer ke material; (2) mendeskripsikan efek dari energi input yang menyebabkan struktur material berubah; (3) mendeskripsikan evolusi material kedalam distribusi ukuran partikel [6]. Sebagai tambahan untuk pemodelan pada skripsi ini, sistem ball-millnya memiliki pengaruh medan elektromagnetik eksternal yang dapat diatur *on/off* pada saat *milling*.

Dinamika internal sistem ini merupakan interaksi-interaksi yang dialami oleh setiap material saat terjadi proses *milling* [7,8,9,10]. Dan seperti telah diketahui bahwa Hamiltonian merupakan penggambaran besarnya energi dari sebuah sistem. Total energinya merupakan penjumlahan energi kinetik dan energi potensial sistem. Sistem ball-mill pun memiliki suatu energi yang besarnya bergantung dari dinamika sistemnya. Maka dinamika internal sistem ball-mill ini dapat dimodelkan secara empiris menggunakan metode Hamiltonian, caranya dengan menjumlahkan keseluruhan interaksi yang dialami setiap material saat proses *milling* kedalam Hamiltonian total sistemnya.

Pada pemodelan Hamiltonian yang dibuat ini diasumsikan bahwa material podwernya sejenis dan ukurannya sudah cukup kecil yaitu $\sim 100 \mu m$, tidak terjadi koagulasi, hanya terjadi perubahan ukuran material powder tanpa perubahan jenis materi dan dinamikanya difokuskan pada proses penghancuran material.

Penyusun sistem ini ialah dinamika tiap material yang terdapat di dalam sistem, seperti powder dan bola didalam vial. Dimana tiap dinamikanya

digambarkan dengan sebuah Hamiltonian $H_m(\vec{r}, t)$. Indeks m menunjukkan material powder (p) atau bola (b) dan $r = (x, y, z)$. Hamiltonian ini terdiri atas beberapa bagian yang merepresentasikan interaksi-interaksi yang bekerja pada material. Hamiltonian ini tersusun sebagai berikut:

$$H_m = H_0 + V_{m-m} + V_{m-v} + V_{m-m'} + V_{ext} \quad (2.1)$$

dimana v menunjukkan vial, sedangkan H_0 menggambarkan Hamiltonian material bebas penyusun energi kinetik,

$$H_0 = \frac{1}{2m_m} \sum_{i=1}^{n_m} |(\vec{p}_m)_i|^2 \quad (2.2)$$

dengan n_m adalah jumlah material, m_m dan \vec{p}_m adalah massa material dan momentum. Pada kasus ini, diasumsikan bahwa massa dan ukuran evolusi material adalah sama untuk tiap material sejenis.

Selain energi kinetik tadi, energi lain yang memungkinkan ada pada sistem ini adalah potensial tumbukan dan potensial Coulomb. Interaksi antar-material sejenis V_{m-m} , interaksi antara material dengan vial V_{m-v} dan interaksi antara material yang berbeda $V_{m-m'}$ dapat dijabarkan kedalam potensial tumbukan (V^{imp}) dan potensial Coulomb (V^{Coul}) sebagai berikut;

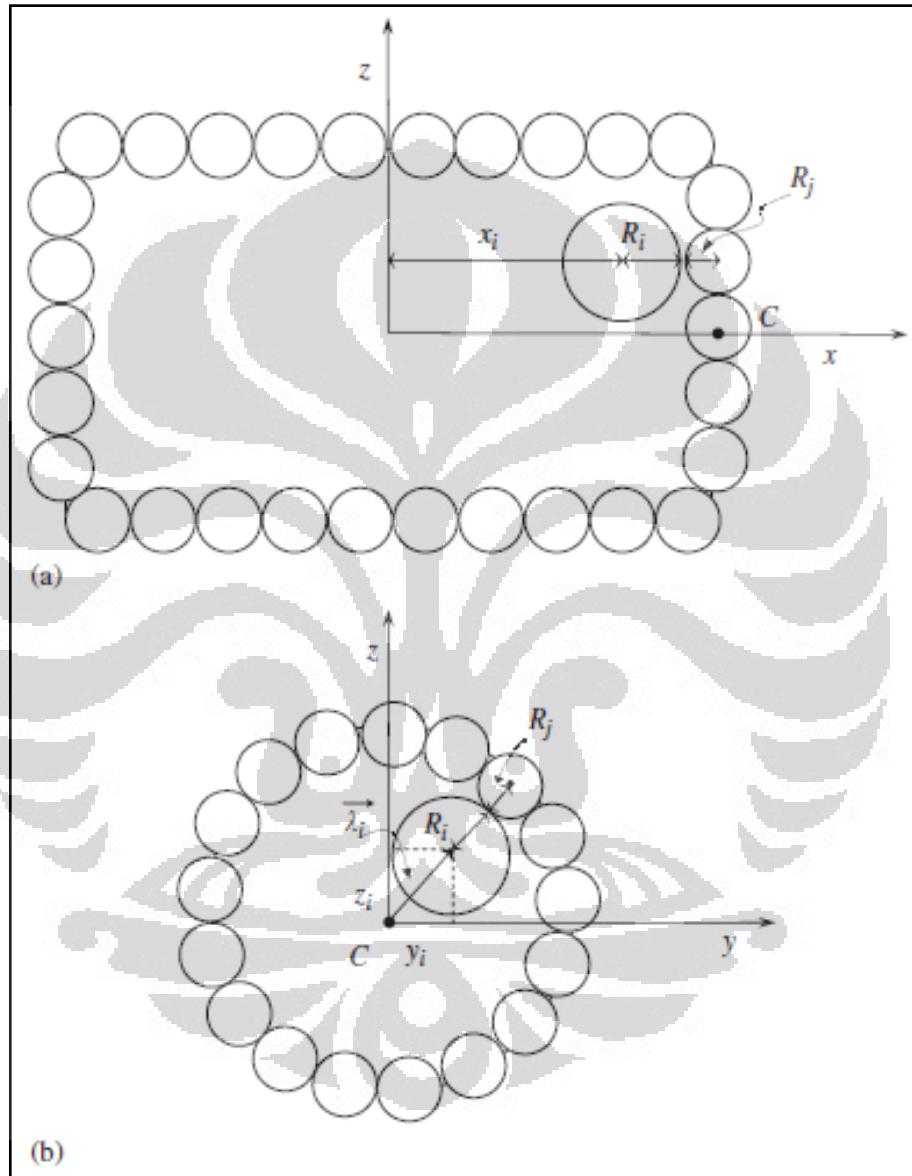
$$V_{m-m'}^{Coul}(\vec{r}) = Q_m Q_{m'} \sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^{n_{m'}} \frac{1}{|(\vec{r}_m)_i - (\vec{r}_{m'})_j|} \quad (2.3)$$

$$V_{m-m}^{imp}(\vec{r}, t) = - \sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^{n_{m'}} \int_0^{\xi_{mm'}} d(\xi_{mm'})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{mm'})_{ij} \quad (2.4)$$

dengan Q_m adalah muatan material, sedangkan $m, m' : v, p, b$ dan \vec{n} adalah vektor normal satuan.

Potensial ini mendeksripsikan sifat mekanik dan elektrik statis dari materialnya. Potensial tumbukan/impact secara jelas menggambarkan keseluruhan dinamika klasik seluruh materialnya, seperti gaya tumbuk antara bola dengan powder. Potensial Coulomb tidak akan muncul jika interaksi antar-materialnya memiliki muatan netral. Dan jika jarak antar-materialnya terlalu jauh, maka potensial Coulomb ini memiliki nilai yang sangat kecil sehingga dapat diabaikan. Potensial Coulomb ini hanya akan memberikan nilai jika interaksinya terjadi pada jarak yang dekat. Oleh karena itu, potensial Coulomb ini dapat diabaikan untuk beberapa kasus fisika pada skala-nano. Pada kasus ini, potensial Coulomb diabaikan.

Gaya-gaya yang bekerja pada sistem ball-mill ini, seperti gaya tumbuk antara permukaan vial dengan bola atau powder dikerjakan dengan cara yang sama seperti Pers. (2.3) dan Pers. (2.4). Petimbangannya adalah dengan mengumpakan permukaan vialnya tersusun atas bola-bola pada Gambar 2.2 [6].



Gambar 2. 2: Skema geometris tumbukan antar material dengan permukaan vial (a) dan (b) sebagai tumbukan antar dua bola.

Disisi lain Pers. (2.4) dapat digantikan sebagai sebuah “potensial efektif” sederhana seperti osilator harmonik $V_{m-m'}^{osc}(\vec{r}) = \frac{1}{2}k_{mm'}\Delta\vec{r}^2$ untuk menggambarkan keseluruhan sifat mekanik sebagai “*effective coupling*” $k_{mm'}$. Pada kasus ini, jika $m_m \gg m_{m'}$, maka potensialnya dapat dituliskan sebagai $V_{m-m'} = \frac{1}{2}m_m\omega_m^2\Delta\vec{r}^2$ karena $\omega_m \equiv \sqrt{k_{mm'}/m_m}$. Ini merupakan penggambaran kasus secara real dimana $m_b \gg m_p$. Dan V^{osc} mengabsorb pengaruh waktu dan beberapa parameter fisis lainnya seperti karakteristik viskoelastisitas material, modulus Young dan sebagainya. Pengaruh waktu sangat penting karena dampaknya secara langsung terhadap temperatur sistem dan *observable* fisis lainnya. Dari potensial *impact* ini dapat dilihat bagaimana sifat mekanik sistem.

Potensial *impact* pada Pers. (2.4) diperoleh dari gaya tumbuk yang terdiri dari komponen normal dan tangensial [6], $\vec{F}_{mm'}^{imp}(\vec{r}, t) = \vec{F}_{mm'}^N(\vec{r}, t) + \vec{F}_{mm'}^T(\vec{r}, t)$. Komponen normalnya dituliskan sebagai [11],

$$\vec{F}_{mm'}^N(\vec{r}, t) = \left[\frac{2Y_{mm'}}{3(1-\nu_{mm}^2)} \sqrt{R_{mm'}^{eff}} \left(\xi_{mm'}^{3/2} + \frac{3}{2}A_{mm'}\sqrt{\xi_{mm'}}\frac{d\xi_{mm'}}{dt} \right) \right] \vec{n} \quad (2.5)$$

dimana pada bagian pertama persamaan merupakan bagian elastik yang berdasarkan hukum kontak Hertz, dan bagian kedua adalah bagian dissipasi untuk menghitung viskositas. $Y_{mm'}$ merupakan modulus Young dan $\nu_{mm'}$ merepresentasikan Poisson rasio dari material bola. Pada bagian $R_{mm'}^{eff} = (R_m R_{m'})/(R_m + R_{m'})$ merepresentasikan radius efektif, dimana $\xi_{mm'} = R_m + R_{m'} - |\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}|$ merupakan perpindahan dengan R_m adalah radius material yang berinteraksi. A adalah parameter dissipasi [11,12,13],

$$A_{mm'} = \frac{1}{3} \frac{3\eta_{m'} - \nu_m^2}{3\eta_{m'} + 2\eta_m} \left[\frac{(1-\nu_{mm'}^2)(1-2\nu_{mm'})}{Y_{mm'}\nu_{mm'}^2} \right] \quad (2.6)$$

konstanta viskos η_m dan $\eta_{m'}$ berkaitan dengan tensor *dissipative stress* [11,12].

Ada beberapa formulasi yang diperuntukan untuk komponen tangensial $\vec{F}_{mm'}^T(\vec{r}, t)$. Seperti viskositas, elastisitas juga gaya gravitasi merupakan penyusun komponen tangensial ini. Formulasi ini selalu diasumsikan bahwa material saling *sliding* satu sama lain pada kasus dimana kondisi potensial Coulomb $\mu|\vec{F}_{mm'}^N| \leq |\vec{F}_{mm'}^T|$ muncul, dan beberapa hambatan viskos juga bisa muncul [14]. Ini menunjukkan bahwa $\vec{F}_{mm'}^T(\vec{r}, t) \propto m_{mm'}^{eff}$, dimana massa efektifnya ialah $m_{mm'}^{eff} \equiv$

$m_m m_{m'}/(m_m + m_{m'})$ [6]. Karena pada kasus ini, perbandingan yang sangat jauh antara massa bola dengan massa powder $m_p/m_b \sim 0$ maka $m_{bp}^{eff} \sim m_p$, maka gaya tumbuk tangensial dapat diabaikan untuk pendekatan yang lebih baik. Potensial *impact* normalnya hampir mendominasi keseluruhan potensial *impact*, yaitu $\vec{F}_{mm'}^{imp}(\vec{r}, t) \sim \vec{F}_{mm'}^N(\vec{r}, t)$. Hal ini menghasilkan potensial *impact* seperti tertulis pada Pers. (2.4) yang berhubungan dengan persamaan Euler – Lagrange,

$$\vec{F} = -\frac{dV}{d\vec{r}} + \frac{d}{dt} \left(\frac{dV}{d\vec{v}} \right) \quad (2.7)$$

karena pengaruh kecepatan material muncul hanya pada komponen tangensial $\vec{F}_{mm'}^T(\vec{r}, t)$ [12].

Disamping interaksi antar-material itu sendiri, juga dimungkinkan adanya potensial eksternal yang bekerja didalam sistem. Misalnya pada bola, karena ukurannya yang cukup besar maka potensial gravitasi akan muncul,

$$V_{ext}^{grav} = m_m G \sum_{i=1}^{n_m} (z_m)_i \quad (2.8)$$

disini, G adalah konstanta gravitasi. Sedangkan untuk material powder potensial ini menjadi tidak begitu berarti karena ukurannya yang sangat kecil.

Disamping itu, bisa juga dengan sengaja diberikan medan elektromagnetik eksternal yang menyelimuti sistem untuk memberikan pengaruh muatan pada material. Potensial ini dihasilkan oleh gaya Lorentz, $\vec{F}_m^{EM} = Q_m(\vec{E} + \vec{v}_m \times \vec{B})$, menghasilkan,

$$V_{ext}^{EM} = Q_m \sum_{i=1}^{n_m} [\phi - (\vec{v}_m)_i \cdot \vec{A}] \quad (2.9)$$

yang sesuai dengan Pers. (2.7). ϕ dan \vec{A} adalah elektromagnetik skalar dan potensial vektor yang terkait dengan medan listrik dan magnet $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi - \partial\vec{A}/\partial t$ dan $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Cakupan potensial *shift* elektromagnetik bagian kinetik pada Pers. (2.2) seperti berikut,

$$H_0 \rightarrow H_{0+EM} = \frac{1}{2m_m} \sum_{i=1}^{n_m} |(\vec{p}_m)_i - Q_m \vec{A}|^2 + n_m Q_m \phi \quad (2.10)$$

Fokus pada pembahasan proses terbentuknya material dengan ukuran baru, maka dinamika powder akan lebih dikhususkan. Dari Pers. (2.1), (2.2), (2.3), (2.4) dan (2.9), Hamiltonian total untuk powder menjadi,

$$\begin{aligned}
H_p = & \\
& \frac{1}{2m_p} \sum_{i=1}^{n_p} \left| (\vec{p}_p)_i - Q_m \vec{A} \right|^2 + n_p Q_m \phi - \\
& \frac{1}{2} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \int_0^{(\xi_{pp})_{ij}} d(\xi_{pp})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pp}^{imp})_{ij} - \\
& \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \int_0^{(\xi_{pm})_{ij}} d(\xi_{pm})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pm}^{imp})_{ij} \quad (2.11)
\end{aligned}$$

untuk $Q_p \neq 0$. Dua potensial terakhir merepresentasikan potensial impact total seluruh powder; powder dengan vial; powder dengan bola. Interaksi antar-bola V_{b-b}^{imp} dan interaksi antara bola dengan vial V_{b-v}^{imp} tidak perlu dihitung karena tidak berpengaruh pada powder. Disini terlihat kemudahan dari metode Hamiltonian.

2.3 Observasi Fisis

Pada mekanika statistik, fungsi partisi Z merupakan sebuah kuantitas penting yang menunjukkan sifat sebuah sistem pada keadaan equilibrium. Fungsi partisi ini dapat berupa fungsi temperatur maupun dalam bentuk fungsi lainnya seperti fungsi volume. Kebanyakan variabelnya berupa variabel termodinamik seperti energi total, energi bebas, entropi dan tekanan yang dapat diturunkan secara langsung dari persamaan fungsi partisi.

Setelah memperoleh Hamiltonian sistem secara lengkap, maka dapat dibentuk fungsi partisi sebagai ensemble kanonik untuk material m ,

$$Z_m = \int \prod_{i=1}^{n_m} d\vec{p}_i d\vec{r}_i \exp \left[- \int_0^\beta dt H_m \right] \quad (2.12)$$

disini $\beta = -1/(k_B T)$ dengan k_B dan T adalah konstanta Boltzman dan temperatur absolut. Dengan diperolehnya fungsi partisi, maka beberapa variabel termodinamik sistem dapat diperoleh dengan hubungan,

$$F_m = -\frac{1}{\beta} \ln Z_m \quad (2.13)$$

untuk energi bebas,

$$P_m = -\frac{\partial F_m}{\partial V} = -\frac{F_m}{V} \quad (2.14)$$

untuk tekanan didalam vial dengan volume V .

Untuk melihat kontribusinya, maka dapat dilakukan normalisasi fungsi partisinya yaitu,

$$Z'_m = \frac{Z_m}{Z_{0m}} = \frac{\int \prod_{i=1}^{n_m} d\vec{p}_i d\vec{r}_i \exp \left[- \int_0^\beta dt H_m \right]}{\int \prod_{i=1}^{n_m} d\vec{p}_i \exp \left[- \int_0^\beta dt H_m \right]} \quad (2.15)$$

dan selanjutnya,

$$P'_m = F'_m \equiv \frac{F_m}{F_{0m}} = \frac{\ln Z_m}{\ln Z_{0m}} \quad (2.16)$$

Dengan mengintegrasikan terhadap waktu (t), secara langsung dapat diperoleh fungsi partisi bergantung waktu. Integral \vec{p}_i merupakan integral Gaussian decoupled. Untuk kasus Pers. (2.11) dihasilkan,

$$Z_p = \left(\frac{2m_p \pi}{\beta} \right)^{n_p/2} \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \exp \left[- \int_0^\beta dt H'_p \right] \quad (2.17)$$

$$Z'_p = \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \exp \left[- \int_0^\beta dt H'_p \right] \quad (2.18)$$

dimana normalisasi Hamiltonian interaksinya menjadi,

$$H'_p = n_p Q_p \phi - \frac{1}{2} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \int_0^{(\xi_{pp})_{ij}} d(\xi_{pp})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pp}^{imp})_{ij} - \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \int_0^{(\xi_{pm})_{ij}} d(\xi_{pm})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pm}^{imp})_{ij} \quad (2.19)$$

Dari persamaan diatas, jelas bahwa hanya potensial skalar pada medan elektromagnetik eksternal yang memberikan kontribusi pada energi total sistemnya. Dengan kata lain medan magnet \vec{B} tidak memberikan pengaruh kepada sistem ball-mill, sedangkan medan listrik \vec{E} berpengaruh.

Untuk mengobservasi lebih jauh, maka diperlukan integrasi terhadap ξ_{ij}

$$Z'_p = \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \exp \left[- \beta \left(Q_p \phi - \frac{2}{15} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pp}^2} \sqrt{R_{pp}^{eff}} (\xi_{pp})_{ij}^{5/2} - \frac{4}{15} \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \frac{Y_{pm}}{1-v_{pm}^2} \sqrt{R_{pm}^{eff}} (\xi_{pm})_{ij}^{5/2} \right) \right] \quad (2.20)$$

Dari hasil diatas, besaran termodinamik terlihat jelas tidak dipengaruhi oleh bagian dissipasi, bagian kedua pada Pers. (2.5). Kemudian juga dihasilkan,

$$P'_p = 1 - \beta \mathcal{F} \ln^{-1} \left(\frac{2m_p \pi}{\beta} \right) \quad (2.21)$$

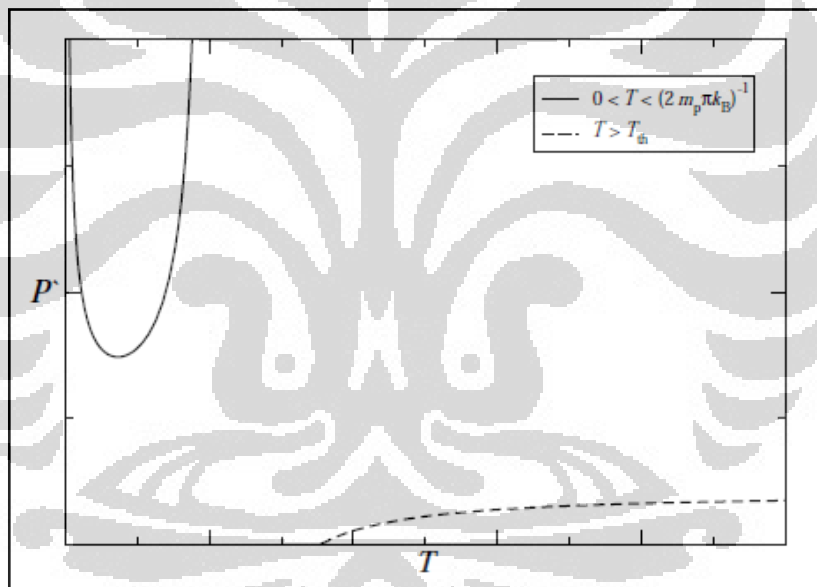
untuk pengintegralan yang sama. Berurutan dengan,

$$\mathcal{F} \equiv 2 \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \left[Q_p \phi - \frac{2}{15} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pp}^2} \sqrt{R_{pp}^{eff}} (\xi_{pp})_{ij}^{5/2} - \frac{4}{15} \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \frac{Y_{pm}}{1-v_{pm}^2} \sqrt{R_{pm}^{eff}} (\xi_{pm})_{ij}^{5/2} \right] \quad (2.22)$$

Persamaan diatas mengisyaratkan perilaku umum untuk tekanan bergantung-temperatur, struktur geometris dan pergerakan vial yang terangkum didalam fungsi energi bebas, \mathcal{F} . Dari Pers. (2.21) juga terlihat daerah dengan arti fisis untuk $0 < T < (2m_p \pi k_B)^{-1}$ dan $T \geq T_{th}$. Kondisi ini equivalent dengan,

$$\mathcal{F} \leq k_B T_{th} \ln(2m_p \pi k_B T_{th}) \quad (2.23)$$

dan T_{th} nilainya selalu lebih besar dari $(2m_p \pi k_B)^{-1}$. Perilaku tekanan bergantung-temperatur terlihat jelas pada Gambar 2.3.



Gambar 2.3: Penggambaran umum normalisasi tekanan sebagai fungsi temperatur sistem.

BAB III

SIMULASI DENGAN MONTE CARLO

Pencapaian simulasi ini adalah penggambaran perilaku energi bebas \mathcal{F} terhadap ukuran dan jumlah powder. Simulasi ini dibentuk dengan mengilustrasikan dinamika powder didalam sistem ball-mill seperti yang telah dijelaskan pada bab sebelumnya. Kerangka sistem yang dibuat harus memenuhi kriteria sistem ball-mill.

Simulasi dengan metode Monte Carlo ini ditujukan untuk tipe ball-mill jenis Spex-mixer/mill. Pemodelan yang dibuat pada prinsipnya dapat digunakan untuk berbagai tipe ball-mill, caranya dengan mengubah sistem koordinat yang digunakan [15,16,17].

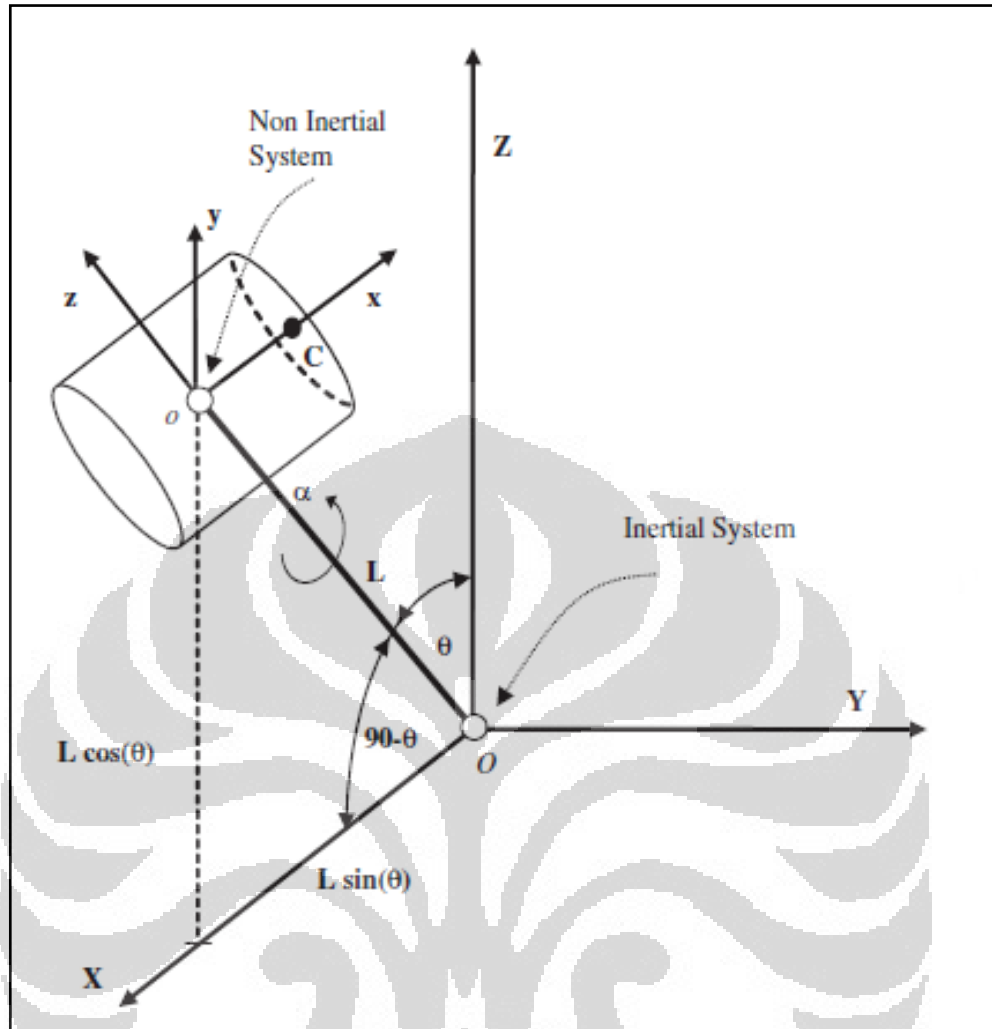
3. 1 Model Simulasi

Pada simulasi ini, kerangka sistem ball-mill dibentuk mengilustrasikan sebuah sistem material powder dan bola yang berada di dalam sebuah vial. Tiap material powder dan bola digambarkan sebagai bola-bola dengan posisi random, sedangkan vialnya digambarkan sebagai susunan bola yang berurutan seperti Gambar 2.2. Interaksi yang dapat digambarkan secara jelas pada sistem ini adalah tumbukan antar-material. Interaksi antar-material tadi dapat lebih disederhanakan dengan mensyaratkan hanya tumbukan yang memberi dampak pada powder yang diperhitungkan.

Kemudian memasukkan kriteria masing-masing material seperti Modulus Young dan Poisson rasio kedalam fungsi energi bebas \mathcal{F} . Dari fungsi tersebut terlihat bagaimana pengaruh tekanan, struktur geometri, pergerakan vialnya dan sebagainya.

3. 2 Sistem Koordinat

Pada simulasi Spex-mixer ini, sistem terdiri atas sebuah vial yang terus berpindah pada sistem non-inersial [6]. Penggambaran lebih jelas terdapat pada Gambar 3.1.



Gambar 3. 1 : Skema sederhana pergerakan Spex-mixer.

Karena dinamika didalam vial pemodelan ini ada pada kerangka (vial) non-inersial $\vec{r} = (x, y, z)$ maka perlu dilakukan transformasi koordinat kedalam sistem inersial (X, Y, Z) dimana titik *origin* terletak pada lengan batang mekanik yang menjadi pusat translasi.

Rotasi pertama untuk sistem ini ditunjukkan oleh θ yang mengelilingi sumbu- Y (sistem inersial) dengan

$$\theta = \theta_0 \sin(\omega t + \varphi) \quad (3.1)$$

Rotasi kedua α muncul mengelilingi sumbu- z pada sistem non-inersial, dengan

$$\alpha = \alpha_0 \sin(\omega t + \varphi), \quad (3.2)$$

dimana θ dan α adalah sudut rotasi yang mengelilingi sumbu-Y dan sumbu-z sedangkan θ_0 dan α_0 adalah amplitudo gerak angular. Frekuensi sudut ω dan φ faktor fase yang bergantung pada kondisi awal.

Masing-masing rotasi digambarkan oleh matriks sebagai berikut;

$$\mathcal{R}_{\theta,Y} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

untuk rotasi pada sumbu-Y ,

$$\mathcal{R}_{\alpha,z} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha) & \sin(\alpha) & 0 \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

untuk rotasi pada sumbu-z. Vektor translasi pada lengan batang mekanik, dengan L adalah panjang lengan batang mekanik.

$$\vec{T} = \begin{bmatrix} L \sin(\theta) \\ 0 \\ L \cos(\theta) \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

Dari tiga perpindahan diatas, diperoleh matriks roto-translasi yang mensimulasikan gerak tiap titik didalam vial pada sistem inersial,

$$\mathcal{RT}^{o \rightarrow o} = \begin{bmatrix} [\mathcal{R}_{\theta,Y} \times \mathcal{R}_{\alpha,z}] & [\vec{T}] \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\alpha) & \cos(\theta) \sin(\alpha) & \sin(\theta) & L \sin(\theta) \\ -\sin(\alpha) & \cos(\alpha) & 0 & 0 \\ -\sin(\theta) \cos(\alpha) & -\sin(\theta) \sin(\alpha) & \cos(\theta) & L \cos(\theta) \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Matriks diatas menghasilkan koordinat tiap titik di dalam vial pada sistem inersial sebagai fungsi sistem non-inersial.

$$\begin{aligned} X(t) &= x \cos \theta(t) \cos \alpha(t) + y \cos \theta(t) \sin \alpha(t) + z \sin \alpha(t) + \\ &\quad L \sin \theta(t) \\ Y(t) &= -x \sin \alpha(t) + y \cos \alpha(t) \\ Z(t) &= -x \sin \theta(t) \cos \alpha(t) - y \sin \theta(t) \sin \alpha(t) + z \cos \alpha(t) + \\ &\quad L \cos \theta(t) \end{aligned} \quad (3.7)$$

3. 3 Teknik Simulasi

Fungsi energi bebas \mathcal{F} pada Pers. (2.22) menggambarkan dinamika powder yang tersusun dari integral berdimensi banyak dengan parameter yang cukup banyak pula. Simulasi yang digunakan untuk merepresentasikan dinamika sistem ball-mill ini menggunakan metode Monte Carlo. Dimana metode ini sangat baik jika digunakan untuk menghitung integral berdimensi banyak seperti persamaan diatas.

Algoritma komputasi untuk integral mutidimensi, secara umum dapat dituliskan:

$$I = \int_{a_1}^{b_1} dx_1 \int_{a_2}^{b_2} dx_2 \dots \int_{a_n}^{b_n} dx_n f(x_1, x_2, \dots, x_n) \equiv \int_V f(\bar{x}) d\bar{x} \quad (3.8)$$

dengan metode Monte Carlo integrasinya dilakukan dengan pendekatan:

$$I \approx Q \equiv V \frac{1}{N} \prod_{i=1}^N f(\bar{x}_i) = V \langle f \rangle \quad (3.9)$$

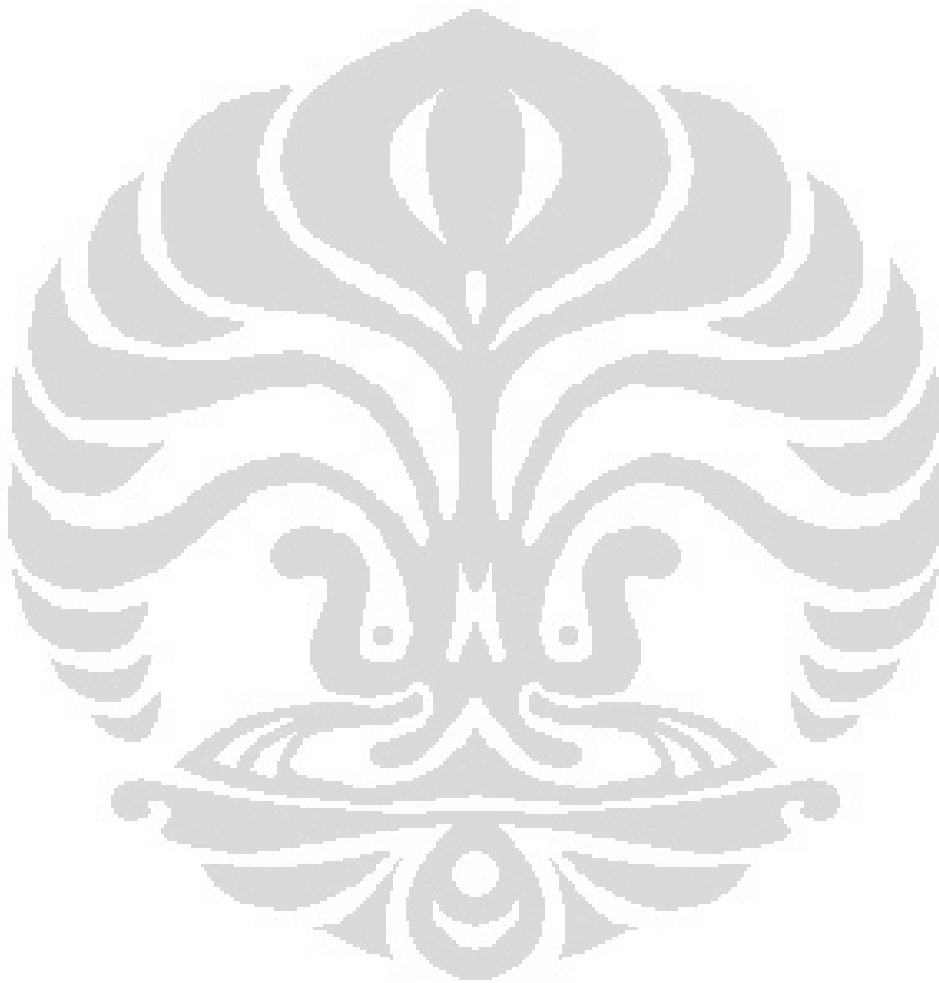
$\langle f \rangle$ adalah sampel rata-rata, N ialah banyaknya sampel.

Integrasi Monte Carlo ini memerlukan resolusi ruang 3-dimensi yang tepat ketika dibandingkan dengan ukuran powder yang sangat kecil. Pada simulasi ini, untuk ukuran powder $100 \mu m$ maka resolusi yang memungkinkan ialah $\sim 10^4 \times 10^4 \times 10^4$. Resolusi ini akan semakin meningkat ketika ukuran powder yang digunakan juga semakin kecil. Ukuran lengan vial yang digunakan $L_v = 50mm$, radius vial $R_v = 10mm$, panjang lengan mekanik $L = 200mm$ dan radius bola $R_b = 5mm$. Simulasi ini diset untuk satu waktu tertentu yang equivalent dengan posisi statis tertentu pergerakan vial dan juga tanpa diberikan medan listrik.

Pemodelan dinamika powder pada sistem ball-mill yang telah dibuat tadi kemudian dievaluasi untuk menentukan syarat terjadinya interaksi dengan powder. Kriteria sistem ball-mill yang memungkinkan terjadinya tumbukan dan adanya energi input yang mempengaruhi powder adalah:

- Tumbukan antara bola powder ke- i dengan radius R_i dan permukaan silinder (vial) harus memenuhi $|\vec{\lambda}_i| \geq R_v - R_i$, dimana R_v adalah radius vial, $R_i = R_b$ dan $|\vec{\lambda}_i| \geq \sqrt{(y_i)^2 + (z_i)^2}$ vektor posisi radial bola dengan sistem non-inersial, y_i dan z_i adalah koordinat bola pada sistem non-inersial.

- Tumbukan antara bola powder dengan basis vial akan muncul jika $|x_i| \geq |(L_v/2) - R_i|$ dengan x_i adalah posisi bola disepanjang sumbu- x non-inersial.
- Evaluasi tumbukan dengan bola powder $R_{pm'}^{eff} = (R_p R_{m'}) / (R_p + R_{m'})$ dan $\xi_{mm'} = R_m + R_{m'} - |\vec{r}_m - \vec{r}_{m'}|$.



BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN

Pembuatan nanomaterial yang dimodelkan dengan Hamiltonian ini cukup memberikan kemudahan dalam merepresentasikan dinamika internal saat proses *milling* menggunakan ball-mill. Terutama pada dinamika penghancuran material menjadi ukuran yang lebih kecil. Dengan beberapa asumsi yang disyaratkan pada model ini memang belum sepenuhnya menggambarkan fenomena yang terjadi pada sistem, namun cukup baik dalam memberikan pemahaman mengenai pembuatan nanomaterial.

Untuk Hamiltonian powdernya, terangkum menjadi:

$$H_p = \frac{1}{2m_p} \sum_{i=1}^{n_p} \left| (\vec{p}_p)_i - Q_m \vec{A} \right|^2 + n_p Q_m \phi - \frac{1}{2} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \int_0^{(\xi_{pp})_{ij}} d(\xi_{pp})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pp}^{imp})_{ij} - \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \int_0^{(\xi_{pm})_{ij}} d(\xi_{pm})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pm}^{imp})_{ij}$$

dengan gaya-gaya yang bekerja pada sistem antara lain, untuk gaya normal interaksinya adalah kontak Hertz dan bagian dissipasi, sedangkan untuk gaya tangensial interaksinya adalah viskositas, elastisitas dan gaya gravitasi. Namun untuk dinamika powder, gaya gravitasi diabaikan karena ukuran powder yang sangat kecil. Medan elektromagnetik eksternal yang berinteraksi dengan powder hanya komponen medan listrik saja.

$$\mathcal{F} \equiv 2 \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \left[Q_p \phi - \frac{2}{15} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pp}^2} \sqrt{R_{pp}^{eff}} (\xi_{pp})_{ij}^{5/2} - \frac{4}{15} \sum_{m:b,v} \sum_{i=1}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_m} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pm}^2} \sqrt{R_{pm}^{eff}} (\xi_{pm})_{ij}^{5/2} \right]$$

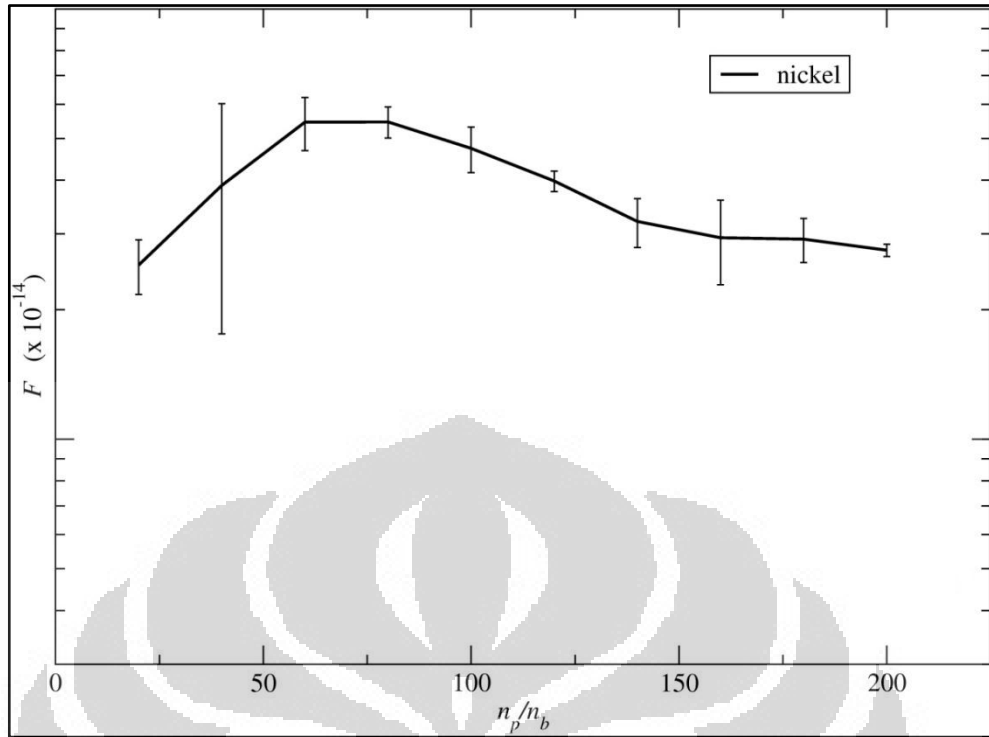
Fungsi energi bebas \mathcal{F} ini merangkum seluruh dinamika material powder seperti struktur geometris, tekanan bergantung temperatur, dinamika pergerakan vial juga *observable* fisis lainnya.

Simulasi energi bebas \mathcal{F} ditujukan untuk beberapa variasi rasio jumlah material (n_p/n_b) dan rasio ukuran material (R_p/R_b). Simulasi ini juga

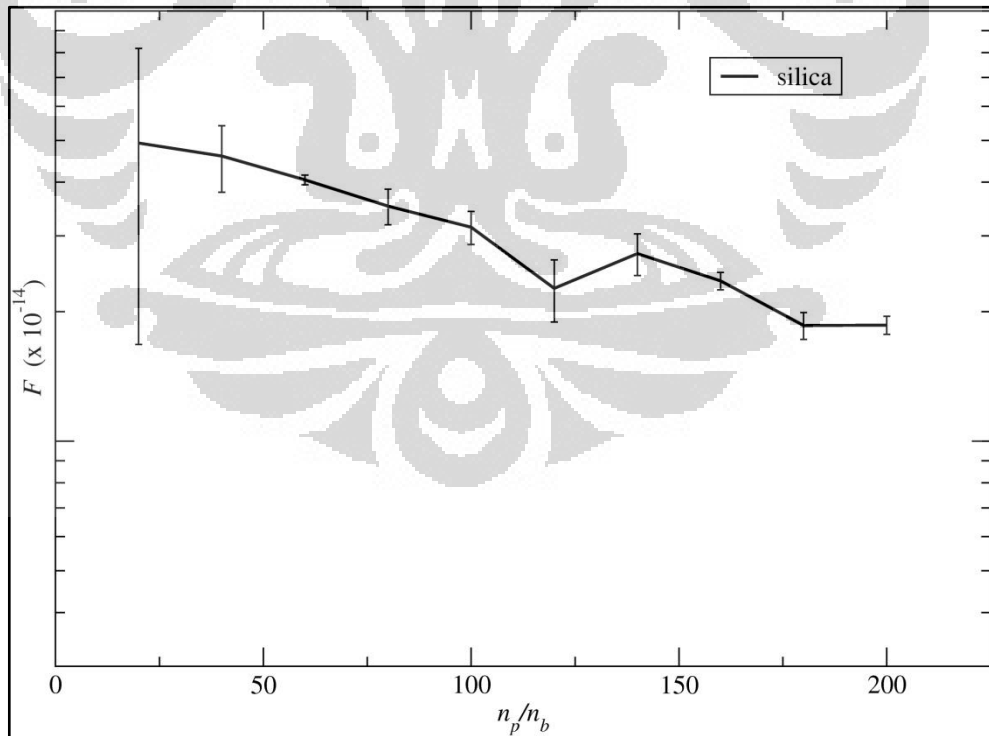
dikerjakan untuk beberapa variasi material powder dengan karakteristik modulus Young (Y) dan Poisson rasio (ν). Hasilnya secara lengkap terangkum dalam Gambar 4.1 hingga Gambar 4.6.

Gambar 4.1 hingga Gambar 4.3 menunjukkan grafik skala logaritmik nilai energi bebas \mathcal{F} untuk powder silica, baja dan nikel terhadap rasio jumlah bola dan powder. Gambar 4.4 hingga Gambar 4.6 menunjukkan grafik skala logaritmik nilai energi bebas \mathcal{F} untuk powder silica, baja dan nikel terhadap rasio ukuran bola dan powder. Error bar yang muncul merupakan akibat adanya error statistic yang berhubungan dengan modulus Young dan Poisson rasio tiap material. Nilai error ini menjadi lebih signifikan untuk rasio jumlah material yang kecil dan rasio ukuran material yang besar. Hal ini sangat wajar karena makin besar rasio jumlah material dan semakin kecil rasio ukuran material, kemungkinan peningkatan terjadinya tumbukan antara bola dengan powder juga akan semakin besar.

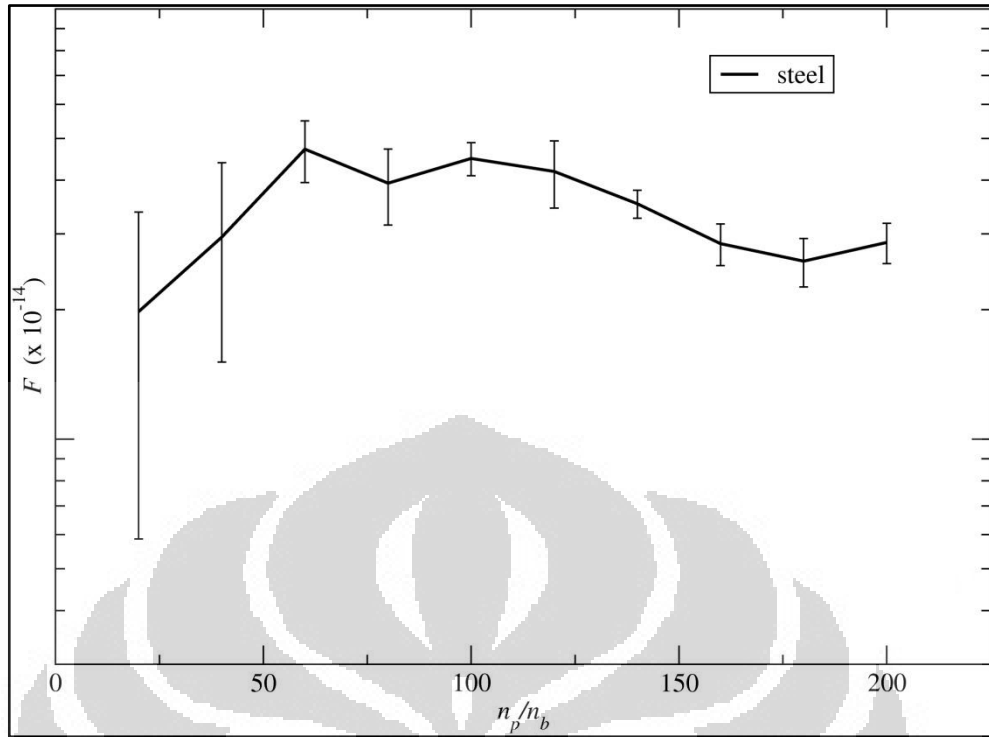
Grafik nilai energi bebas \mathcal{F} terhadap rasio jumlah bola dan powder ternyata menunjukkan hasil bahwa rasio jumlah material memberikan pengaruh yang tidak terlalu signifikan terhadap nilai energi bebasnya, hal ini dapat terlihat jelas pada Pers. (2.11), karena nilai energi bebasnya ini bergantung pada nilai total Hamiltonian. Jadi, walaupun rasio jumlah materialnya besar belum tentu total Hamiltoniannya menjadi besar pula. Grafik nilai energi bebas \mathcal{F} terhadap rasio ukuran bola dan powder justru menunjukkan kondisi yang sebaliknya, nilai energi bebasnya sangat dipengaruhi oleh rasio ukuran material. Nilai energi bebasnya akan besar jika rasio ukuran bola dan powdernya kecil. Nilai energi bebasnya akan semakin kecil jika rasio ukuran bola dan powdernya semakin membesar.



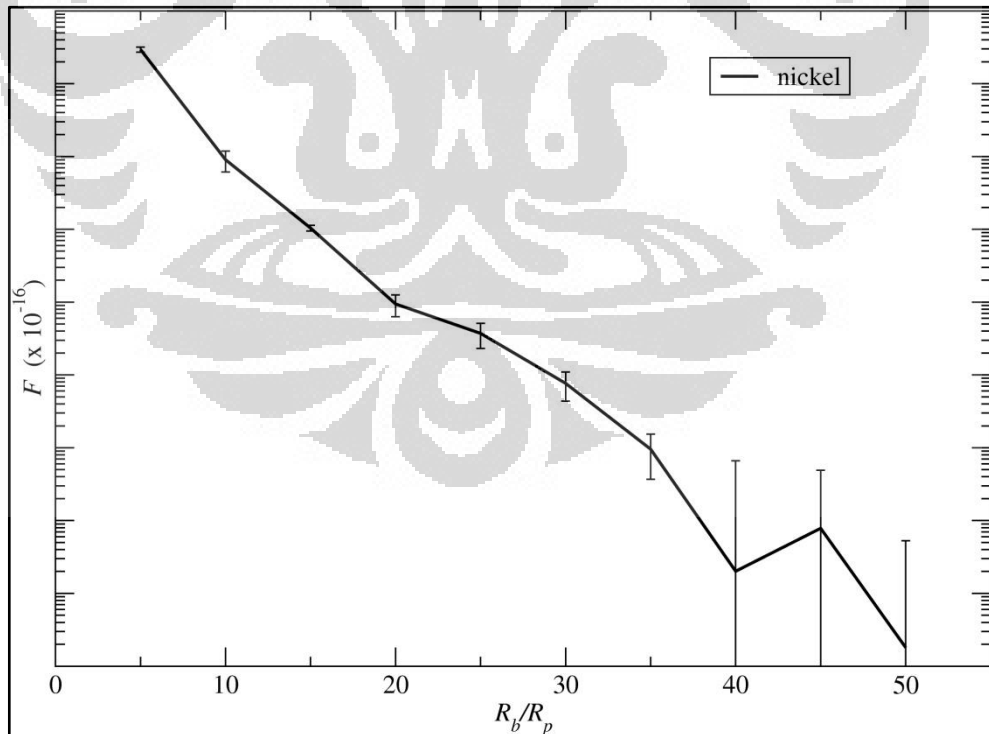
Gambar 4. 1: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) untuk powder nikel dengan nilai $R_p/R_b = 50/3$.



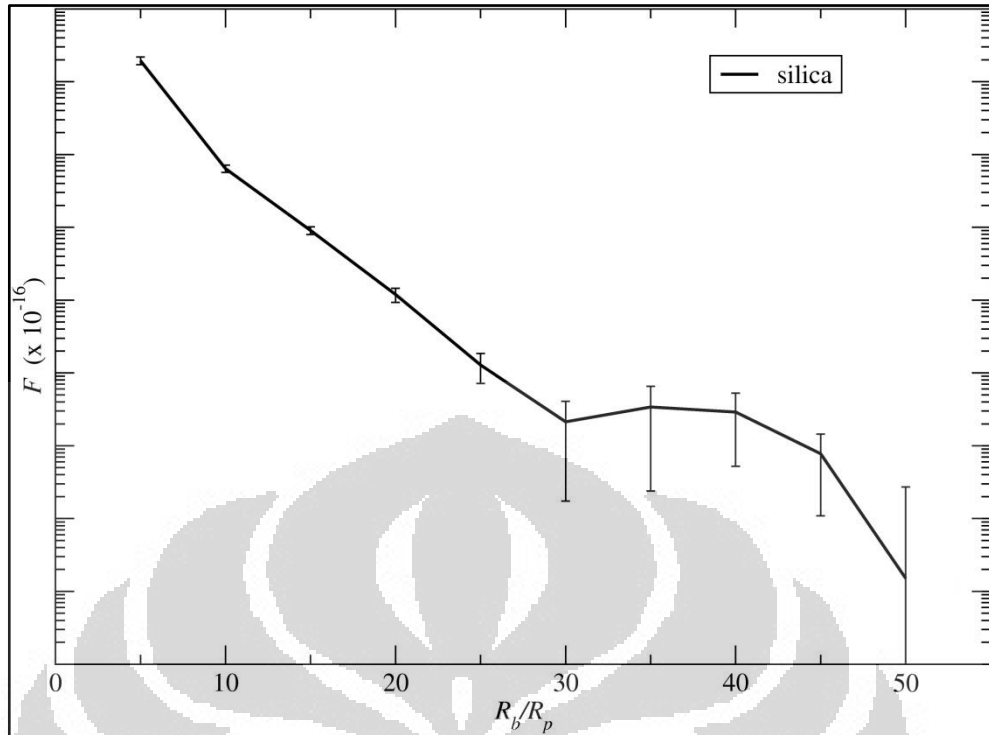
Gambar 4. 2: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) untuk powder silika dengan nilai $R_p/R_b = 50/3$.



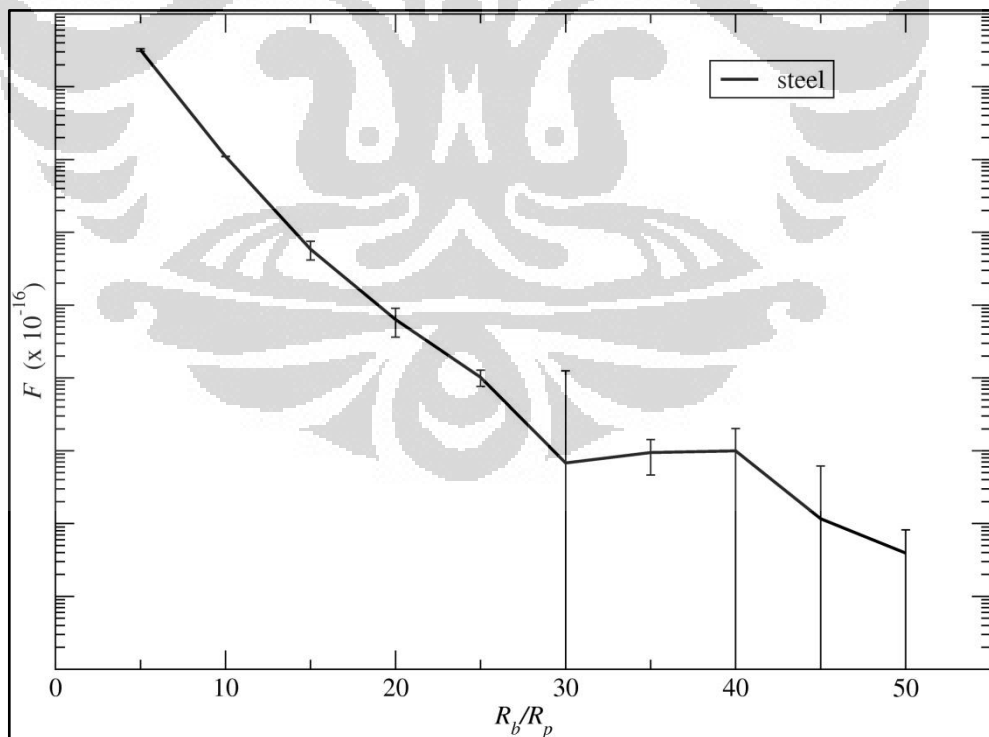
Gambar 4. 3: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio jumlah material (n_p/n_b) untuk powder baja dengan nilai $R_p/R_b = 50/3$.



Gambar 4. 4: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) untuk powder nikel dengan nilai $n_p/n_b = 30$.



Gambar 4. 5: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) untuk powder silika dengan nilai $n_p/n_b = 30$.



Gambar 4. 6: Grafik energi bebas sistem (\mathcal{F}) sebagai fungsi rasio ukuran material (R_p/R_b) untuk powder baja dengan nilai $n_p/n_b = 30$.

BAB V

KESIMPULAN

Model Hamiltonian cukup memberikan kemudahan dalam merepresentasikan dinamika internal saat proses *milling* menggunakan ball-mill. Pembahasan difokuskan untuk mencari potensial yang relevan dengan Hamiltonian pada sistem ball-mill, seperti potensial Coulomb dan potensial *impact*. Kemudian mengekstrak *observable* fisis seperti tekanan, temperatur dan energi bebasnya tanpa harus menghitung perpindahan geometris didalam vial. *Observable* fisisnya diperoleh dari mekanika statistik fungsi partisi.

Secara teoritik, dapat diambil beberapa point penting dari pemodelan diatas;

- Struktur geometris terangkum didalam fungsi \mathcal{F} ,

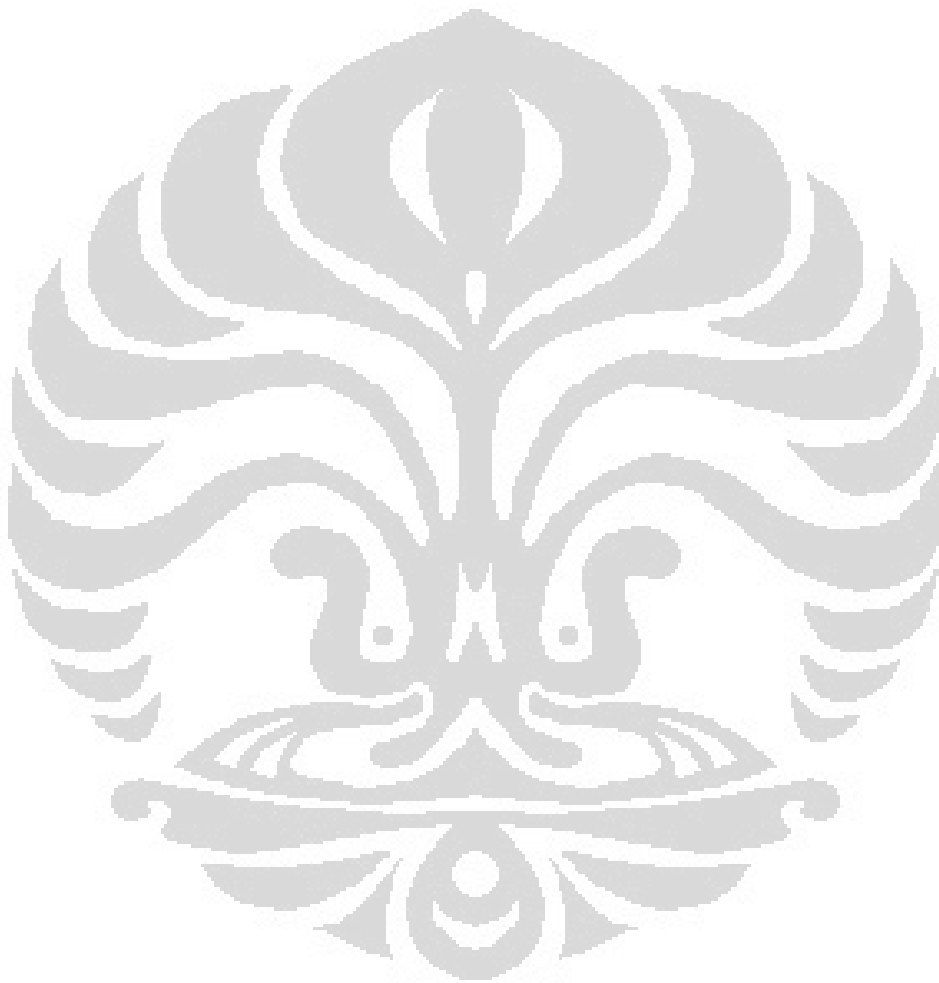
$$\mathcal{F} \equiv 2 \int \prod_{i=1}^{n_p} d\vec{r}_i \left[Q_p \phi - \frac{2}{15} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pp}^2} \sqrt{R_{pp}^{eff}(\xi_{pp})_{ij}}^{5/2} - \frac{4}{15} \sum_{m:b,v}^{n_p} \sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^{n_m} \frac{Y_{pp}}{1-v_{pm}^2} \sqrt{R_{pm}^{eff}(\xi_{pm})_{ij}}^{5/2} \right]$$

dari normalisasi tekanan pada Pers. (2.21) terlihat bahwa tiap material powder di dalam vial memiliki ketergantungan yang sama terhadap temperatur.

- Medan magnet eksternal tidak memberikan pengaruh terhadap dinamika internal powder di dalam vial, tetapi medan listrik eksternal berpengaruh, karena ukuran powdernya yang kecil.

$$H'_p = n_p Q_p \phi - \frac{1}{2} \sum_{i(\neq j)}^{n_p} \sum_{j=1}^{n_p} \int_0^{(\xi_{pp})_{ij}} d(\xi_{pp})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pp}^{imp})_{ij} - \sum_{m:b,v}^{n_p} \sum_{i=1}^{n_m} \sum_{j=1}^{n_m} \int_0^{(\xi_{pm})_{ij}} d(\xi_{pm})_{ij} \vec{n} \cdot (\vec{F}_{pm}^{imp})_{ij}$$

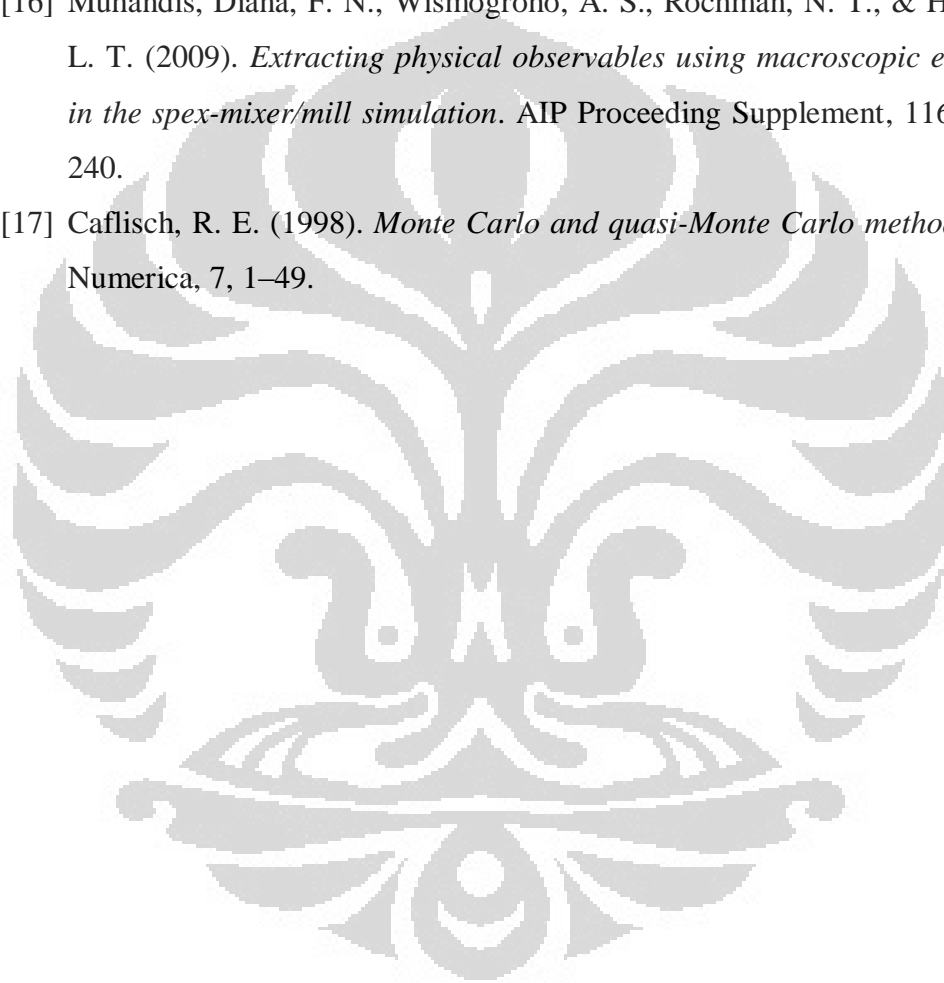
Dari hasil simulasi menggunakan metode Monte Carlo menunjukkan bahwa rasio jumlah material di dalam vial tidak selalu menunjukkan perubahan nilai energi bebas yang signifikan, karena bergantung nilai total Hamiltoniannya. Sedangkan untuk rasio ukuran material memiliki pengaruh yang signifikan terhadap nilai energi bebasnya.



DAFTAR ACUAN

- [1] Davis, R. M., McDermott, B., & Koch, C.C. (1988). *Mechanical alloying of brittle materials*, Metallurgical Transactions, A19, 2867.
- [2] Chen, W., Scoenitz, M., Ward, T. S., & Dreizen, E. L. (2005). *Numerical Simulation of Mechanical Alloying in a Shaker Mill by Discrete Element Method*. KONA, No.23.
- [3] Chen, W., Scoenitz, M., Ward, T. S., & Dreizen, E. L. (2005). *A study of mechanical alloying processes using reactive milling and discrete element modeling*. Acta Materialia, 53, 2909-2918.
- [4] Delogu, F., Monagheddu, F., Mulas, G., Schiffini, L., & Cocco, G. (2000). *Impact characteristic and mechanical alloying processes by ball milling*. International Journal of Non-Equilibrium Processing, 11, 235–269.
- [5] Wang, W. (2000). *Modeling and simulation of the dynamics process in high energy ball milling of metal powders*. University of Waikato. Ph.D. thesis.
- [6] Concas, A., Lai, N., Pisu, M., & Cao, G. (2006). *Modelling of comminution processes in spex mixer/mill*. Chemical Engineering Science, 61, 3746–3760.
- [7] B. K. Mishra, “Charge dynamics in planetary mill”, *Kona Powder Particle* 13 (1995) 151-158.
- [8] Mishra, B. K., & Rajamani, R. K. (1994). *Simulation of charge motion in ball mills*. International Journal of Mineral Processing, 40, 171-186.
- [9] Mishra, B. K., & Murty, C. V. R. (2001). *On the determination of contact parameters for the realistic {DEM} simulations of ball mills*. Powder Technology, 115, 290-297.
- [10] Mishra, B. K., & Rajamani, R. K. (1992). *The discrete element method for the simulation of ball mills*. Applied Mathematical Modeling, 16, 598-604.
- [11] Brilliantov, N. V., Spahn, F., Martin Hertzsch, J., & Pöschel, T. (1996). *Model for collision in granular gases*. Physical Review, E53, 5382–5392.
- [12] Landau, L. D., Lifschitz, E. M. (1965). *Theory of Elasticity*. Oxford University Press.

- [13] Hertzsch, H., Sepahan, F., & Brilliantov, N. V. (1995). *On low-velocity collisions of viscoelastic particles*. *Journal de Physique*, 5, 1725–1738.
- [14] Saluena, C., Pöschel, T., & Esipov, S. E. (1999). *Dissipative properties of vibrated granular materials*. *Physical Review*, E59, 4422–4427.
- [15] Maurice, D., & Courtney, T.H. (1996). *Milling dynamics, Part II : dynamic of a spex mill in a one dimensional mill*. *Metallurgical Transactions*, A27 1981.
- [16] Muhandis, Diana, F. N., Wismogroho, A. S., Rochman, N. T., & Handoko, L. T. (2009). *Extracting physical observables using macroscopic ensemble in the spex-mixer/mill simulation*. *AIP Proceeding Supplement*, 1169, 235–240.
- [17] Caflisch, R. E. (1998). *Monte Carlo and quasi-Monte Carlo methods*. *Acta Numerica*, 7, 1–49.



LAMPIRAN A

Perhitungan Nilai \mathcal{F} menggunakan Metode Monte Carlo (Pemograman dengan Phyton)

```
from visual import *
from random import *
from math import *

jumlah_bola = input(' jumlah bola = ')
jumlah_powder = input(' jumlah powder = ')
jari_bola = float(input(' jari-jari bola = '))
jari_powder = float(input(' jari-jari powder = '))
L1 = float(input(' L1 = '))
L2 = float(input(' L2 = '))
Rv = float(input(' Rv = '))
teta = input(' theta = ')
alfa = input(' alfa = ')
young = input(' Modulus Young = ')
poisson = float(input(' Poisson Ratio = '))
N = input('jumlah pembangkitan = ')

if jumlah_bola <= jumlah_powder:
    n_sedikit = jumlah_bola
    n_banyak = jumlah_powder
else:
    n_sedikit = jumlah_powder
    n_banyak = jumlah_bola

jj=-0.5*L1*0.001*cos(pi*teta/180)*cos(pi*alfa/180)-Rv*0.001*cos(pi*teta/180)*sin(pi*alfa/180)-
Rv*0.001*sin(pi*alfa/180)+L2*0.001*sin(pi*teta/180)
kk=0.5*L1*0.001*cos(pi*teta/180)*cos(pi*alfa/180)+Rv*0.001*cos(pi*teta/180)*sin(pi*alfa/180)
+Rv*0.001*sin(pi*alfa/180)+L2*0.001*sin(pi*teta/180)
ll=0.5*L1*0.001*sin(pi*alfa/180)-Rv*0.001*cos(pi*alfa/180)
mm=-0.5*L1*0.001*sin(pi*alfa/180)+Rv*0.001*cos(pi*alfa/180)
nn=0.5*L1*0.001*sin(pi*teta/180)*cos(pi*alfa/180)+Rv*0.001*sin(pi*teta/180)*sin(pi*alfa/180)-
Rv*0.001*cos(pi*alfa/180)+L2*0.001*cos(pi*teta/180)
oo=-0.5*L1*0.001*sin(pi*teta/180)*cos(pi*alfa/180)-
Rv*0.001*sin(pi*teta/180)*sin(pi*alfa/180)+Rv*0.001*cos(pi*alfa/180)+L2*0.001*cos(pi*teta/180)
80)
```

```

total_nilai_F = 0.0
for i in range(N):
    r_kecil = jari_powder
    r_besar = jari_bola
    x_data_sedikit = []
    y_data_sedikit = []
    z_data_sedikit = []
    r_data_sedikit = []
    x_data_banyak = []
    y_data_banyak = []
    z_data_banyak = []
    r_data_banyak = []

    total_efektif_radius_bb = 0.0
    total_tumbukan_bb = 0.0
    banyak_tumbukan_bb = 0.0
    efektif_radius_bb = 0.0
    tumbukan_bb = 0.0

    total_efektif_radius_pp = 0.0
    total_tumbukan_pp = 0.0
    banyak_tumbukan_pp = 0.0
    efektif_radius_pp = 0.0
    tumbukan_pp = 0.0
    for i in range(n_banyak):
        if i < n_sedikit:
            x_sedikit = uniform(-L1/float(2),L1/float(2))
            y_sedikit = uniform(-Rv,Rv)
            z_sedikit = uniform(-Rv,Rv)
            r_sedikit = r_besar
            x_data_sedikit.append(x_sedikit)
            y_data_sedikit.append(y_sedikit)
            z_data_sedikit.append(z_sedikit)
            r_data_sedikit.append(r_sedikit)
            #sedikit = sphere(pos=(x_sedikit,y_sedikit,z_sedikit), radius=r_besar,color=(0,1,0))
            if len(x_data_sedikit) > 1:
                for j in range(len(x_data_sedikit)-1):
                    jarak_x_sedikit = x_data_sedikit[j]-x_sedikit

```

```

    jarak_y_sedikit = y_data_sedikit[j]-y_sedikit
    jarak_z_sedikit = z_data_sedikit[j]-z_sedikit
    jumlah_jari_sedikit = r_data_sedikit[j] + r_sedikit
    jarak_sedikit = sqrt(jarak_x_sedikit**2 + jarak_y_sedikit**2 + jarak_z_sedikit**2)
if jumlah_jari_sedikit == jarak_sedikit:
    print' catat tumbukan antar bola '
    print'*45
    efektif_radius_bb = r_data_sedikit[j]*r_sedikit/float(r_data_sedikit[j]+r_sedikit)
    tumbukan_bb = r_data_sedikit[j]+r_sedikit-jarak_sedikit
    banyak_tumbukan_bb=banyak_tumbukan_bb+1
    total_efektif_radius_bb = total_efektif_radius_bb + efektif_radius_bb
    total_tumbukan_bb = total_tumbukan_bb + tumbukan_bb
    print' bola 1 ',x_data_sedikit[j],'\t',y_data_sedikit[j],'\t',z_data_sedikit[j]
    print' bola 2 ',x_sedikit,'\t',y_sedikit,'\t',z_sedikit
    print' effective radius b-b = ',efektif_radius_bb
    print' tumbukan b-b= ', tumbukan_bb
    print'*45
    #sedikit = sphere(pos=(x_data_sedikit[j],y_sedikit[j],z_sedikit[j]),
radius=r_besar,color=(1,0,0))
    #sedikit = sphere(pos=(x_sedikit,y_sedikit,z_sedikit), radius=r_besar,color=(1,0,0))
else:
    pass
x_banyak = uniform(-L1/float(2),L1/float(2))
y_banyak = uniform(-Rv,Rv)
z_banyak = uniform(-Rv,Rv)
r_banyak = r_kecil
x_data_banyak.append(x_banyak)
y_data_banyak.append(y_banyak)
z_data_banyak.append(z_banyak)
r_data_banyak.append(r_banyak)
#banyak = sphere(pos=(x_banyak,y_banyak,z_banyak), radius=r_kecil,color=(0,0,1))
if len(x_data_banyak) > 1:
    for k in range(len(x_data_banyak)-1):
        jarak_x_banyak = x_data_banyak[k]-x_banyak
        jarak_y_banyak = y_data_banyak[k]-y_banyak
        jarak_z_banyak = z_data_banyak[k]-z_banyak
        jumlah_jari_banyak = r_data_banyak[k] + r_banyak
        jarak_banyak = sqrt(jarak_x_banyak**2 + jarak_y_banyak**2 + jarak_z_banyak**2)
        if jumlah_jari_banyak > jarak_banyak:

```



```

print 'catat tumbukan antar powder '
print '='*45
efektif_radius_pp = r_data_banyak[k]*r_banyak/float(r_data_banyak[k]+r_banyak)
tumbukan_pp = r_data_banyak[k]+r_banyak-jarak_banyak
banyak_tumbukan_pp = banyak_tumbukan_pp+1
total_efektif_radius_pp = total_efektif_radius_pp + efektif_radius_pp
total_tumbukan_pp = total_tumbukan_pp + tumbukan_pp
print' powder 1 ',x_data_banyak[k],\t',y_data_banyak[k],\t',z_data_banyak[k]
print' powder 2 ',x_banyak,\t',y_banyak,\t',z_banyak
print "effective radius p-p =",efektif_radius_pp
print " tumbukan p-p=", tumbukan_pp
print '='*45
#banyak = sphere(pos=(x_data_banyak[k],y_data_banyak[k],z_data_banyak[k]),
radius=r_kecil,color=(1,0,0))
#banyak = sphere(pos=(x_banyak,y_banyak,z_banyak), radius=r_kecil,color=(1,0,0))

print
print'*'*45
print 'total efektif radius b-b = ',total_efektif_radius_bb
print 'total tumbukan b-b = ',total_tumbukan_bb
print 'banyak tumbukan b-b = ',banyak_tumbukan_bb
if banyak_tumbukan_bb !=0:
    print 'ave lendutan b-b =',total_lendutan_bb/float(banyak_lendutan_bb)

print'*'*45
print

print
print'*'*45
print 'total efektif radius p-p = ',total_efektif_radius_pp
print 'total lendutan p-p = ',total_lendutan_pp
print 'banyak lentingan p-p = ',banyak_lentingan_pp
if banyak_lentingan_pp !=0:
    print ' ave lentingan p-p =',total_lentingan_pp/float(banyak_lendutan_pp)
print'*'*45

total_efektif_radius_bp = 0.0
total_lentingan_bp = 0.0
banyak_lentingan_bp = 0.0
efektif_radius_bp = 0.0

```

```

lentingan_bp = 0.0
ambil_x_banyak = []

for l in range(n_banyak):
    ambil_x_banyak = x_data_banyak[l]
    ambil_y_banyak = y_data_banyak[l]
    ambil_z_banyak = z_data_banyak[l]
    ambil_jari_banyak = r_data_banyak[l]
    for m in range(n_sedikit):
        ambil_x_sedikit = x_data_sedikit[m]
        ambil_y_sedikit = y_data_sedikit[m]
        ambil_z_sedikit = z_data_sedikit[m]
        ambil_jari_sedikit = r_data_sedikit[m]
        selisih_x = x_data_banyak[l] - x_data_sedikit[m]
        selisih_y = y_data_banyak[l] - y_data_sedikit[m]
        selisih_z = z_data_banyak[l] - z_data_sedikit[m]
        jumlah_jari_besar_kecil = r_data_banyak[l] + r_data_sedikit[m]
        jarak_selisih = sqrt(selisih_x**2 + selisih_y**2 + selisih_z**2)
        if jumlah_jari_besar_kecil > jarak_selisih:
            print
            print 'catat lentingan bola dengan powder'
            print '='*45
            efektif_radius_bp =
r_data_banyak[l]*r_data_sedikit[m]/float(r_data_banyak[l]+r_data_sedikit[m])
            lentingan_bp = r_data_banyak[l]+r_data_sedikit[m]-jarak_selisih
            if lentingan_bp <= r_data_banyak[l]:
                print " lentingan b-p =", lentingan_bp
                total_lentingan_bp = total_lentingan_bp + lentingan_bp
                banyak_lentingan_bp=banyak_lentingan_bp+1
                total_efektif_radius_bp = total_efektif_radius_bp + efektif_radius_bp
            print ' powder 1 ',x_data_banyak[l],'\t',y_data_banyak[l],'\t',z_data_banyak[l]
            print ' bola 1 ',x_data_sedikit[m],'\t',y_data_sedikit[m],'\t',z_data_sedikit[m]
            print "effective radius b-p =",efektif_radius_bp
            #print " lentingan b-p=", lentingan_bp
            print '='*45
            #banyak = sphere(pos=(x_data_banyak[l],y_data_banyak[l],z_data_banyak[l]),
radius=r_kecil)
            #sedikit = sphere(pos=(x_data_sedikit[m],y_data_sedikit[m],z_data_sedikit[m]),
radius=r_besar)

```

```

print'*'*45
print 'total efektif radius b-p = ',total_efektif_radius_bp
print 'total lentingan b-p = ',total_lentingan_bp
print 'banyak lentingan b-p =',banyak_lentingan_bp
if banyak_lentingan_bp !=0 :
    print 'ave lentingan b-p =',total_lentingan_bp/float(banyak_lentingan_bp)
else:
    pass
print'*'*45

print'*'*40
print"~~~ Menghitung Nilai F ~~- "
print'*'*40

konstanta =
cos(pi*teta/180)*pow(cos(pi*alfa/180),3)+cos(pi*teta/180)*cos(pi*alfa/180)*pow(sin(pi*alfa/180
),2)+sin(pi*alfa/180)*sin(pi*teta/180)
syarat_batas = (jj-kk)*(ll-mm)*(nn-oo)
try:
    nilai_F = 2 * konstanta * syarat_batas * 2/float(15*jumlah_powder)*young/float(1-
pow(poisson,2))*sqrt(total_efektif_radius_pp*0.001)*pow(total_lendutan_pp*0.001/float(banyak_
lendutan_pp),5/float(2))+4/float(15*jumlah_powder)*young/float(1-
pow(poisson,2))*sqrt(total_efektif_radius_bp*0.001)*pow(total_lendutan_bp*0.001/float(banyak_
lendutan_bp),5/float(2))
    print 'Nilai F =',nilai_F
    total_nilai_F = total_nilai_F+nilai_F
except ZeroDivisionError:
    print 'Nilai F tidak bisa dihitung'
print'total_nilai_F = ',total_nilai_F
print' Monte carlo integration '
print'*'*40
monte_carlo = total_nilai_F/N
print ' F dengan monte carlo integration adalah = ',monte_carlo

```