

Analisis Hasil Simulasi Sifat Mekanik *Single Walled Carbon Nanotube* dengan Metode Elemen Hingga

Ayu Furoidah, Mas Irfan P. Hidayat, dan Diah Susanti

Departemen Teknik Material, Fakultas Teknologi Industri, Institut Teknologi Sepuluh Nopember (ITS)

e-mail : irfan@mat-eng.its.ac.id

Abstrak—Carbon nanotube merupakan material allotropi carbon yang memiliki sifat mekanik, thermal dan elektrik cukup baik. Saat ini para peneliti masih banyak menganalisa kebutuhan sifat mekanik yang tepat untuk dapat diterapkan lebih diberbagai bidang. Ukurannya yang nano membuat sulitnya pengujian untuk menganalisa sifat dan perilaku CNT. Sehingga diperlukan adanya simulasi komputasi untuk menyederhanakan penelitian. Hasil simulasi dibuat untuk menganalisa sifat mekanik berupa modulus elastisitas SWCNT dengan membandingkan variasi struktur tipe zigzag dan armchair menggunakan software ANSYS 17.1 Mechanical APDL. Hasil simulasi juga digunakan untuk menganalisa pengaruh diameter, ketebalan, dan aspek rasio terhadap nilai Young's modulus SWCNT. Diperoleh bahwa struktur yang sesuai untuk aplikasi yang membutuhkan tingkat kelenturan yang tinggi akibat pembebanan bending dan buckling adalah struktur armchair. Dimana semakin besar diameter single walled carbon nanotube maka nilai Young's modulusnya. Semakin meningkat. Dan semakin tinggi aspek rasio dan ketebalan struktur SWCNT maka semakin rendah nilai Young's modulusnya.

Kata Kunci—Carbon nanotube, *Bending*, *Buckling*, Young's Modulus

I. PENDAHULUAN

CARBON nanotube merupakan struktur yang berukuran nano dan menjadi hal yang menarik dari allotropi karbon karena dikenal memiliki sifat mekanik dan elektronik yang sangat baik. [1] Penemuan dari berbagai bentuk carbon nanotube (CNT) telah memotivasi researcher untuk mengaplikasikannya dalam berbagai bidang. Seperti bidang medis, nanoteknologi, manufaktur, konstruksi, elektronik, dan lain sebagainya. Penemuan Lee dkk [2] misalnya dalam bidang komposit yang menggunakan tambahan karbon nanotube sebagai serat karbon dapat meningkatkan kekuatan mekanik dan elektrik dari komposit yang terbentuk.[2] Carbon nanotube baik single walled maupun multi walled juga dapat digunakan sebagai implant buatan tanpa respon penolakan dari host, rekayasa jaringan organ, identifikasi sel kanker, dan sebagainya

Teknologi untuk penelitian dan pengembangan material seperti bahan allotropi dari carbon, salah satunya carbon nanotube, masih membutuhkan dana yang cukup tinggi. Sehingga dapat diambil terobosan lain yaitu dengan

melakukan simulasi finite element method. Metode elemen hingga (finite element method) merupakan suatu metode diskrit dimana massa dapat direpresentasikan dalam nodal struktur, sehingga dapat memodelkan distribusi massa yang kontinyu pada struktur. Member struktur dibagi-bagi menjadi elemen-elemen yang lebih kecil dengan jumlah yang secara teoretis tak berhingga. Salah satu software dengan prinsip tersebut adalah ANSYS. Penggunaan simulasi dengan ANSYS dilakukan karena lebih efisien waktu dan harga.

Beberapa penelitian telah dilakukan untuk menganalisa sifat mekanik carbon nanotube menggunakan simulasi dengan berbagai metode, antara lain molecular dinamik, *finite element*, dan prediksi analitik. Menggunakan perhitungan mekanika continuum dan interaksi interatomik untuk menentukan tingkat elastisitas atau kekakuan carbon nanotube. Kemudian juga menganalisa berbagai pengaruh variabel muai dari diameter, aspek rasio, kiralitas, dan ketebalan yang dinyatakan belum ada nilai spesifik yang pasti akan nilai ketebalan dari carbon nanotube.

Penelitian berikut dilakukan untuk menganalisa struktur single walled carbon nanotube tipe zigzag dan armchair dengan orientasi tertentu menggunakan ANSYS *Mechanical ADPL 17.1* agar dapat menggambarkan sifat mekanik berupa nilai Young's modulus dan nilai maksimum pembebanan *bending* dan *buckling* yang diberikan.

II. METODE PENELITIAN

A. Struktur Dasar SWCNT

Struktur SWNT menggambarkan one-atom-thick layer dari graphene yang digulung menjadi sebuah silinder. Karakteristik dasar nanotube dapat digambarkan oleh dua vektor, Ch dan T (Gambar 1). Ch dianggap sebagai vektor dalam lembar graphene yang menggambarkan keliling permukaan tube yang menghubungkan dua atom karbon yang sejenis. Persamaan panjang chiral berupa $Ch = n\hat{a}_1 + m\hat{a}_2$. Sedangkan T dinotasikan sebagai axis, dengan \hat{a}_1 dan \hat{a}_2 sebagai 2 basis vektor grafit dan n serta m merupakan bilangan bulat n dan m juga disebut dengan index untuk menentukan sudut chiral [3]

$$\pi = \tan^{-1} \left[\frac{\sqrt{3}n}{(2m+n)} \right] \quad (1)$$

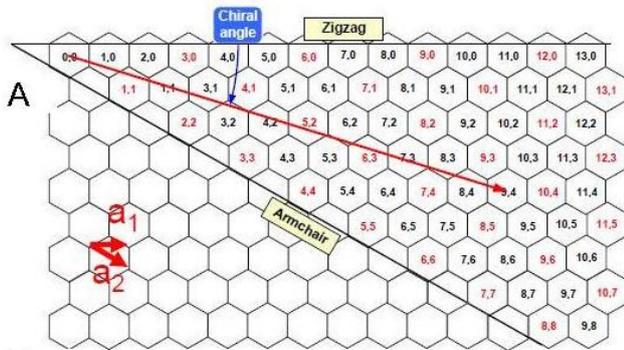
Sudut chiral digunakan untuk memisahkan carbon nanotube menjadi tiga kelas berbeda berdasarkan sifat elektroniknya:

armchair ($n = m, \pi = 30^\circ$), contoh (8,8)
 zig-zag ($m = 0, n > 0, \pi = 0^\circ$), contoh (10,0)
 chiral ($0 < |m| < n, 0 < \pi < 30^\circ$), contoh (7,9)

Diameter nanotube dapat ditunjukkan dengan persamaan berikut,

$$d_t = \sqrt{\frac{3 \times a_{c-c} \cdot (m^2 + mn + n^2) \cdot 0,5}{\pi}} = \frac{Ch}{\pi} \quad (2)$$

Ch adalah panjang Ch, dan a_{c-c} adalah panjang ikatan C-C (1.42 Å)[4]



Gambar 1. Lembaran graphene ditandai dengan bilangan bulat/integer (n,m).Diameter sudut chiral dan jenisnya diketahui dengan bilangan

B. Pembuatan Geometri dan Pembebanan

Dalam studi simulasi numerik, Geometri SWCNT dibangun menggunakan penulisan makro dalam software Parametric Design Language (APDL). Element BEAM 188 dipilih untuk analisis non linier beam element. SWCNT dimodelkan menggunakan keypoint dan line. Dengan menggunakan 6 titik koordinat sesuai dengan ukuran primitive vector.

$$a_1 = \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) a\sqrt{3} \quad (3)$$

$$a_2 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right) a\sqrt{3} \quad (4)$$

Proses penyusunan geometri armchair berdasarkan variasi diameter ditentukan dari jumlah hexagonal dalam satu lingkaran. Gambar 2 menggambarkan geometri armchair (5,5) yang diwakilkan dengan 4 buah lingkaran dasar berjarak 1Å dan berdiameter 6.9Å. Menggunakan command DIVIDE pada Modelling-Operate-Boolean membagi masing-masing lingkaran menjadi 60 bagian. Dengan dibagi skala 4:8 untuk garis tertutup dan terbuka dihubungkan garis antar lingkaran dan dihapus garis semu lingkaran yang tidak terpakai guna menyempurnakan bentuk hexagonal. Selanjutnya dilakukan penambahan sejumlah pasang dengan command COPY hingga mencapai panjang simulasi (17Å) yang menggambarkan komponen structural space frame carbon nanotube.

Geometri Zigzag juga dibuat dengan proses yang sama dengan armchair, namun skala perbandingannya berbeda meski berdiameter sama dengan armchair (5,5) untuk zigzag (9,0). Lingkaran dasar digambarkan dengan diameter sesuai tipe (9,0) dicopy sebanyak dua kali lipat dari penggandaan lingkaran dasar untuk armchair. Kemudian dengan command sama yaitu Modelling-Operate-Boolean membagi masing-masing lingkaran menjadi 9 bagian. Lalu dihubungkan garis antar potongan membentuk hexagonal-hexagonal berjajar. Dan disempurnakan dengan penghapusan garis dasar lingkaran. Setelah terbentuk sempurna dua baris hexagonal melingkar, lalu digandakan ke arah z=h.

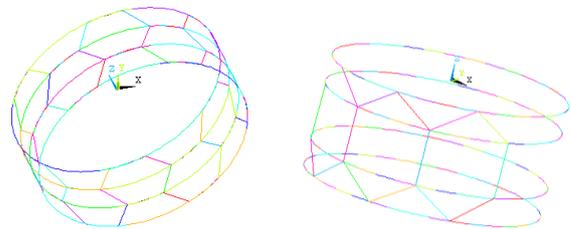
Kemudian dilakukan analisis sifat mekanik pada dua jenis SWCNT yaitu tipe zigzag dan armchair dengan pembebanan *bending* (pemberian gaya secara axial pada titik tekuk) dan *buckling* (pemberian gaya kompresi sampai pada titik tekuk material), sehingga dapat terlihat kelenturan dan nilai Young's modulus lembar CNT tersebut.

Kondisi batas diterapkan. Semua derajat kebebasan setiap *keypoint* ditangkap di salah satu ujung struktur sementara gaya kompresi (*buckling*) mengarah pada komponen Z dan *bending* yang mengarah pada komponen X diterapkan pada setiap ujung *keypoint*. POST PROCESSING, solution nodal diperoleh dan perpindahan pada arah komponen X dan Z diperoleh. (Gambar 3) Terakhir Modulus Young dihitung.

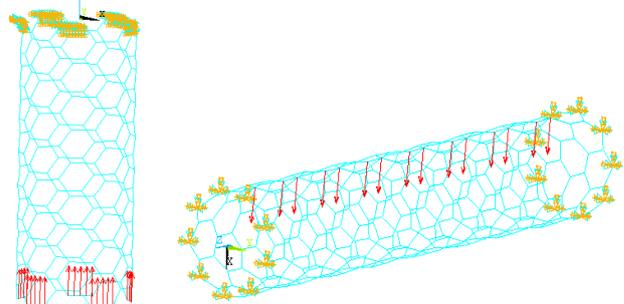
Sifat mekanik dari struktur space-frame CNT dianalisa menggunakan metode mekanika classic struktural dengan memodelkan ikatan, digunakan jenis elemen elastis 3D dan digambarkan oleh titik/ *nodes* yang dinyatakan dalam

$$(x,y,z) = \left(R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y'\right) \quad (5)$$

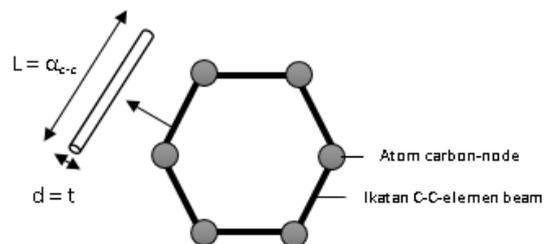
Nodes menghubungkan elemen beam, menunjukkan gaya interatomic. (Gambar 4)



Gambar 2. Lingkaran dasar dan membagi menjadi beberapa hexagonal tipe armchair dan zigzag.



Gambar 3. Pembebanan *Bending* dan *Buckling* pada masing-masing tipe armchair dan zigzag



Gambar 4. Struktur 3D Space-frame CNT [5]

III. HASIL DAN DISKUSI

A. *Bending* dan *Buckling*

Terdapat 2 jenis pembebanan yang dilakukan pada simulasi ini, yaitu pembebanan buckling dan bending (Gambar 3). *Buckling* adalah kondisi dimana carbon

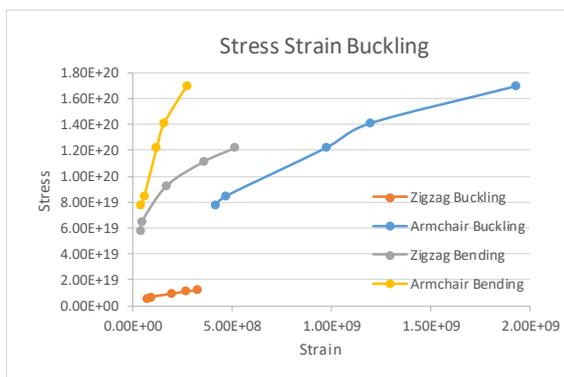
nanotube mengalami ketidakstabilan saat dikenai pembebanan yang mengarah pada kegagalan akibat ketidampuannya mempertahankan struktur awal. Sehingga akan terjadi deformasi yang biasa dikenal sebagai kondisi tekuk. Sedangkan *bending* adalah proses penekukan pada carbon nanotube setelah diberikan pembebanan.

Pada penelitian ini pembebanan buckling tipe armchair dilakukan ke arah sumbu z pada semua node $z=h$ dengan nilai F_z sebesar $1.25E+11$ Pa, sedangkan sisi lainnya di constraint tepatnya pada $z=0$. Pembebanan bending dilakukan di setiap node dalam satu garis lurus yang searah sumbu x dengan besar nilai F_x yang sama untuk tipe armchair sebesar $1.25E+11$ Pa.

Sedangkan pada SWCNT tipe zigzag pembebanan buckling dilakukan di setiap node yang melingkar pada $z=h$ dan diberi pembebanan F_x sebesar $9.40E+10$ Pa. Dan untuk pembebanan bending dilakukan dengan cara yang sama seperti bending pada tipe armchair dilakukan di setiap node dalam satu garis lurus yang searah sumbu x dengan besar nilai F_x sebesar $9.40E+10$ Pa.

Data yang diperoleh menunjukkan nilai tekuk maksimum pada setiap tipe yang dilakukan pembebanan. Pembebanan *buckling* didapatkan nilai ϵ pada tipe armchair sebesar $1.19E+09$ nm dan pada tipe zigzag sebesar $2.68E+08$ nm. Hal ini bernilai sama pada pembebanan *bending*. Nilai tersebut didapatkan dari simulasi yang hanya pada ketebalan spesifik 0.34 nm.

Jika melihat hasil simulasi dari tiap perbedaan diameter dari lima jenis tipe kiral armchair dan zigzag, dapat digambarkan oleh kurva pada gambar 5. Dari grafik terlihat nilai Young's modulus dimana berarti perbandingan stress strain akan meningkat seiring dengan peningkatan diameter dari kedua tipe SWCNT tersebut. Dan terlihat bahwa tipe armchair memiliki nilai Young's modulus lebih besar dibandingkan tipe zigzag.



Gambar 5. Hasil simulasi Pembebanan *Bending* dan *Buckling* pada SWCNT

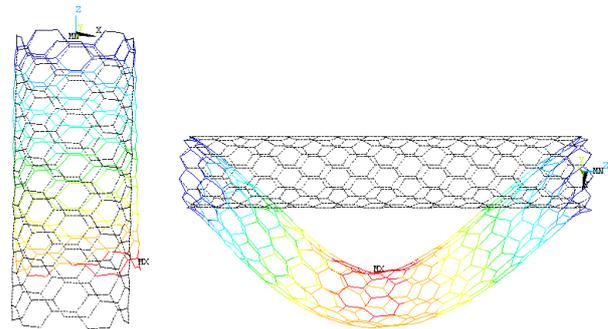
B. Interaksi Interatomik

Dalam perhitungan mekanika molecular, penting untuk mendeskripsikan gaya pada struktur material nano antaratom. Hal tersebut dikarakteristikan ke dalam *force field*. *Force field* ini dinyatakan dalam bentuk energi potensial *steric*. Energi potensial yang menghilangkan interaksi elektrostatik, didefinisikan sebagai total energi interaksi interatomik.

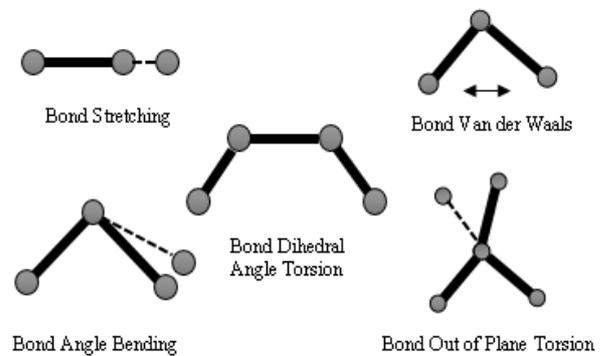
$$U = \sum U_r + \sum U_{\theta} + \sum U_{\phi} + \sum U_{\omega} + \sum U_{vdw} \tag{6}$$

U_r merupakan energi yang dikarenakan *bond stretching*, sedangkan U_{θ} merupakan energi *bond angle bending*, U_{ϕ}

merupakan energi yang dikarenakan *dihedral angle torsion*, U_{ω} adalah energi yang diakibatkan oleh *plane torsion* dan U_{vdw} adalah energi yang dikarenakan interaksi van der Waals yang tidak berikatan. (Gambar 7)



Gambar 6. Hasil simulasi Pembebanan *Bending* dan *Buckling* pada SWCNT



Gambar 7. Interaksi interatomic dalam mekanika molekular

Dengan asumsi deformasi yang kecil, perkiraan harmonik cukup digunakan untuk mendefinisikan energi potensial dan selanjutnya disebut dengan *force field*. Dengan mengambil bentuk harmonik sederhana dan mengkombinasikan dengan sudut dihedral, torsi dengan *out of plane torsion* menjadi fungsi single ekuivalen dan dilanjutkan dengan fungsi deskripsi total.

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \tag{7}$$

$$U_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\Delta \theta)^2 \tag{8}$$

$$U_{\tau} = U_{\phi} + U_{\omega} = \frac{1}{2} k_{\tau} (\Delta \phi)^2 \tag{9}$$

k_r , k_{θ} , k_{τ} adalah *bond stretching*, ikatan sudut *bending* dan resistansi gaya torsi tetap. Sedangkan Δr , $\Delta \theta$, $\Delta \phi$ adalah panjang ikatan, sudut ikatan dan variasi ikatan sudut *twisting*.

C. Young's Modulus Elemen Beam

Luas permukaan melintang dari ikatan diasumsikan sebagai circular. Dan modulus elastis didefinisikan sebagai energi karena interaksi interatomic dan energi akibat deformasi struktur elemen space frame.

Pada penelitian ini model finite element digunakan untuk mengetahui efek ketebalan, diameter dan kiralitas pada Young's modulus SWCNT. Young's modulus material merupakan perbandingan stress dengan normal strain yang diketahui dari uji uni-axial kompresi (*buckling*) dan *bending*. Didefinisikan sebagai berikut:

$$Y = \frac{\sigma}{\epsilon} = \frac{\frac{F}{A_0}}{\frac{\Delta h}{h}} \tag{10}$$

F merupakan besar total gaya yang diberikan, A0 luas permukaan, h panjang CNT, dan Δh merupakan elongation yang didapat dari simulasi ANSYS 17.1 Mechanical APDL plot hasil DOF displacement dalam koordinat x untuk nilai *bending* dan koordinat z untuk nilai *buckling*. $A_0 = \pi \cdot d \cdot t$ dan D merupakan diameter rata-rata tube.

Dalam simulasi SWCNT Armchair dan zigzag ini, panjang awal telah ditentukan sebesar 1.7 nm untuk armchair dan 4.5 nm untuk zigzag. Dari hasil pembebanan *bending* dan *buckling*, Hasilnya menunjukkan countur warna yang menggambarkan tingkat kelenturan hasil dari displacement setiap titik atau dalam hal ini disebut atom carbon dalam SWCNT. Semakin mendekati titik constraint, maka tingkat kelenturan semakin rendah. Kelenturan maksimum berada ditengah. (Gambar 6)

D. Pemodelan dengan Metode Elemen Hingga

Penelitian ini menggunakan dimensi seperti pada tabel 1 untuk hasil simulasi dengan variasi diameter, sedangkan pada variasi ketebalan divariasikan menjadi 0.34, 0.6, 1.06, 1.4, 3.4 nm. Geometri disimulasikan dengan pembebanan *bending* dan *buckling* dan diambil nilai displacement DOF sebagai nilai delta strain. Kemudian data diolah dengan menghitung Young's modulus menggunakan persamaan(10).

Pembebanan *bending* diameter antara 0.69–1.51 nm, didapatkan nilai Young's modulus sebesar 0.63–2.04 TPa untuk tipe armchair dan 0.24-1.58 Tpa untuk tipe zigzag. Sedangkan saat pembebanan *buckling*, didapatkan nilai Young's sebesar 0.09-0.19 Tpa untuk tipe armchair dan 0.04-0.09 Tpa untuk tipe zigzag.

Pembebanan *bending* ketebalan antara 0.34-3.4 nm, didapatkan nilai Young's modulus sebesar 0.91-0.09 TPa untuk tipe armchair dan 0.35-0.035 Tpa untuk tipe zigzag. Sedangkan saat pembebanan *buckling*, didapatkan nilai Young's modulus sebesar 9.5-0.9 Tpa untuk tipe armchair dan 0.46-0.046 Tpa untuk tipe zigzag.

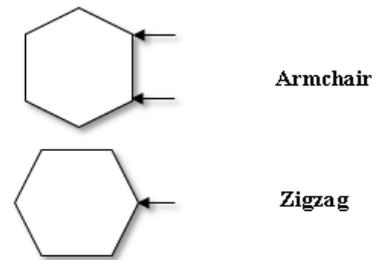
Pembebanan *bending* dengan aspek rasio rentang 1.126-2.464 didapatkan nilai Young's modulus sebesar 0.63–2.04 TPa untuk tipe armchair dan rentang 2.98-6.25 didapatkan nilai Young's sebesar 0.24-1.58 Tpa untuk tipe zigzag. Sedangkan saat pembebanan *buckling*, dengan aspek rasio rentang 1.126-2.464 didapatkan nilai Young's modulus sebesar 0.09-0.19 Tpa untuk tipe armchair. Rentang 2.98-6.25 didapatkan nilai Young's sebesar 0.04-0.09 Tpa untuk tipe zigzag.

Tabel 1
Informasi finite elemen yang digunakan dalam ansys

Chiral Indeks	D (nm)	t (nm)	h (nm)	F (N)	L/D (nm)
Armchair					
(5,5)	0.69	0.34	1.7E-08	1.25E+11	2.464
(6,6)	0.83	0.34	1.7E-08	1.25E+11	2.048
(7,7)	0.96	0.34	1.7E-08	1.25E+11	1.771
(10,10)	1.38	0.34	1.7E-08	1.25E+11	1.232

(11,11)	1.51	0.34	1.7E-08	1.25E+11	1.126
Zigzag					
(9,0)	0.72	0.34	4.5	9.4E+10	6.250
(10,0)	0.79	0.34	4.5	9.4E+10	5.696
(12,0)	0.95	0.34	4.1	9.4E+10	4.211
(18,0)	1.35	0.34	4.0	9.4E+10	3.037
(19,0)	1.51	0.34	4.5	9.4E+10	2.890

Tipe Armchair mampu menahan beban *bending* dan *buckling* mencapai 125 Gpa, sedangkan tipe Zigzag mampu menahan beban maksimum 94 GPa. Dari keseluruhan simulasi pada tiga variabel berbeda menunjukkan bahwa tipe armchair memiliki nilai Young's modulus lebih besar dibandingkan tipe zigzag. Hal ini tentunya dipengaruhi oleh orientasi dari masing-masing tipe saat dikenai pembebanan. Seperti pada gambar 7. Hal ini seperti yang telah dijelaskan pada jurnal Prabhu, 2012 [5] dimana tipe zigzag gaya bereaksi hanya pada satu node hexagon saja, sedangkan tipe armchair terdapat dua gaya yang besarnya sama bereaksi pada dua node sebuah hexagon. (Gambar 8) Hal ini menunjukkan perbedaan pola struktur pembebanan meski gaya yang diberikan tetap. Sehingga besar Young's modulus dari kedua tipe CNT akan berbeda.



Gambar 8. Orientasi pembebanan SWCNT

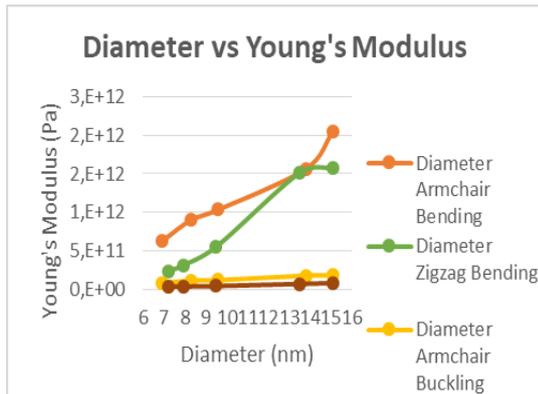
E. Pengaruh Variasi Diameter

Modulus elastisitas secara fungsi dan variabel convergen dengan Young's modulus pada lembar graphene pada diameter yang besar pada CNT. Alasan utamanya adalah karena murni dari kelengkungan tertinggi pada diameter yang kecil. Hal ini akan mengakibatkan distorsi atau perpindahan yang besar pada atom C-C pada diameter kecil CNT dibandingkan dengan diameter besar. Semakin besar diameter CNT, pengaruh kelengkungan akan semakin berkurang. [6] Hal ini juga ditunjukkan pada penelitian Giannopoulos et al, [7] Meo dan Rossi, [8] serta Lu dan Hu. [9] yang menyatakan pengaruh diameter atau jari-jari pada hasil Young's modulus akibat kesensitivannya pada tingkat kelengkungan. Semakin besar diameter tube, maka shear modulus kecil karena menjadi kurang sensitive terhadap variasi jari-jari tabung namun meningkatkan nilai Young's modulusnya. Hal tersebut dapat ditunjukkan oleh hasil penelitian ini yang tergambar dalam grafik (gambar 9).

F. Pengaruh Variasi Ketebalan

Penelitian ini juga membahas mengenai efek ketebalan terhadap nilai Young's modulus. Penelitian ini mengambil variabel ketebalan berdasarkan perbedaan ketebalan pada mekanikal elemen yang digunakan, yaitu beam188, yang

terletak pada section. Hal ini dilakukan dengan dasar penelitian Tserpes dan Papanikos [10] yang menggunakan model finite elemen 3D untuk armchair, zigzag dan chiral pada SWCNT yang berdasarkan asumsi SWCNT berperilaku seperti struktur beam dibawah kondisi pembebanan. Mereka menyatakan nilai Young's modulus yang bervariasi antara 0.952 hingga 1.066 TPa dan modulus geser dari 0.242 hingga 0.504 TPa dengan ketebalan yang digunakan adalah sebesar 0.34 nm. Kemudian penelitian Pantato et al yang memodelkan tube individu menggunakan elemen shell dengan ketebalan spesifik 0.075 nm dan menghasilkan nilai Young's Modulus sebesar 4.84 TPa.



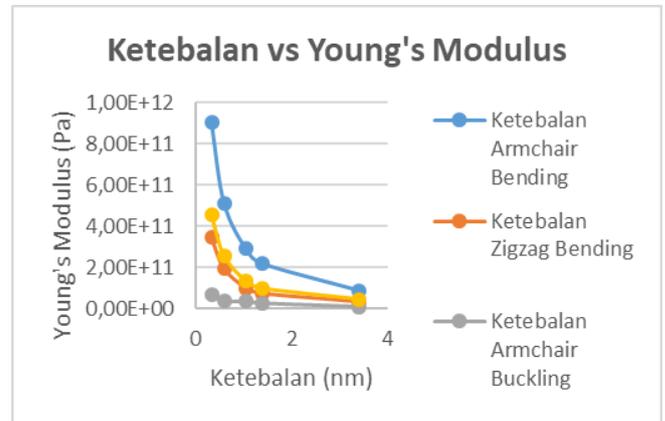
Gambar 9. Grafik perbandingan pengaruh diameter terhadap Young's modulus

Kemudian dijelaskan pula oleh penelitian Vodenitcharova and Zhang [10] yang mengenalkan konsep efektifitas ketebalan dinding dalam lingkup mekanika kontinum. Berdasarkan pertimbangannya akan gaya ekuilibrium, mereka mengusulkan mengenai kondisi yang diperlukan bahwa efektifitas ketebalan dinding SWCNT harus lebih kecil dari teori diameter atom karbon, yaitu sekitar 0.142 nm. Argumennya mengenai cross-section nanotube berisi hanya jumlah atom dan gaya pada tube ditransmisikan melalui atom-atom tersebut. Namun model mekanika kontinum, gaya yang sama ditransmisikan melalui luas area dinding. Oleh karenanya, efektifitas ketebalan dinding harus lebih kecil dari diameter atom karbon secara teoritis. Dengan kata lain, tube ekuilibrium tidak dapat dirubah. Berdasarkan kondisi tersebut, model continuum menggunakan ketebalan dinding lebih dari atau sama dengan diameter karbon adalah suatu hal yang tidak beralasan. Namun tentunya masih diperlukan validasi kembali mengenai hal tersebut.

Dari penelitian-penelitian tersebut dapat diketahui bahwa validitas dari ketebalan SWCNT sendiri masih dalam tahap penelitian, namun yang pasti ukurannya sendiri akan lebih kecil dari ukuran diameter atom karbon sebesar 3.4nm dan merupakan hasil perubahan dari ikatan antar dua karbon yang diberikan gaya. Hal ini mendasari peneliti untuk bervariasi ketebalan antara 0.34 hingga 3.4 nm. Variasi tersebut diambil dari 10, 20, 30, 40 dan 100 persen dari besar atom karbon.

Gambar 10 menggambarkan grafik hasil pembebanan bending dan buckling pada tipe armchair (6,6) dan tipe zigzag (9,0) yang masing-masing divariasikan dengan ketebalan 0.34, 0.6, 1.06, 1.4, dan 3.4 nm. Simulasi tersebut menunjukkan nilai Young's modulus yang terus menurun ketika ketebalan CNT meningkat. Di perjelas lagi dengan tipe CNT yang

berpengaruh yaitu ketebalan armchair pada saat bending lebih rendah tingkat kekakuannya dibanding saat diberikan pembebanan buckling. Berbeda dengan tipe zigzag yang lebih rendah kekakuannya saat diberikan pembebanan buckling dibanding pembebanan bending. Hal ini tentunya menggambarkan bahwa ketebalan berpengaruh pada tingkat kekakuan CNT yang akan berpengaruh pula pada nilai Young's modulusnya.



Gambar 10. Grafik perbandingan pengaruh ketebalan terhadap Young's

Hal ini diperkuat oleh penelitian Gao et al [11] dan Odegard et al. [12] yang melakukan penelitian dengan finite model deformasi continuum menyatakan nilai Young's modulus inverse atau berkebalikan dengan luas permukaan A0 dan ketebalan t.

IV. KESIMPULAN/RINGKASAN

Penelitian ini telah memformulasikan komputasi 3D *finite element* untuk respon mekanik elastisitas dari SWCNT tipe armchair dan zigzag dalam variasi diameter dan ketebalan. Dalam memodelkan material nano, digunakan tipe linear elastis elemen beam yang disimulasikan secara efektif *force field* dan interaksi interatomic antar atom karbon. Pembebanan *bending* dan *buckling* digunakan untuk menghitung besar nilai Young's modulus. Tipe armchair mampu memberikan nilai Young's modulus lebih besar dibandingkan dengan tipe zigzag. Hasilnya cenderung konvergen untuk diameter yang lebih besar dengan ketebalan 0.34 nm. Hasilnya pun dapat dikatakan sesuai dengan literature. Sangat diharapkan adanya penelitian lebih lanjut untuk aplikasi dari masing-masing tipe struktur single walled carbon nanotube berdasarkan nilai Young's Modulus dari penelitian-penelitian yang sudah ada.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] P. J. F. Harris, *Carbon Nanotube Composites*. 2004.
- [2] S. . Lee, J.-H, Rhee, K.Y., & Park, "Silane modification of carbon nanotubes and its effects on the material properties of carbon/CNT/epoxy three-phase composites," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 42, no. 5, pp. 478-483, 2011.
- [3] I. T. Iijima S, "Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter," 1993.
- [4] O'Connel, *Carbon Nanotubes Properties and Application*. California: Senior Research scientist, Theranos, Inc. 2006.
- [5] and V. Prabhu, S. Shubrajit, "Finite Element Modeling and

- Anslys of Zigzag and Armchair Type Single Wall Carbon Nanotube,” vol. 4, no. 8, pp. 260–266, 2012.
- [6] R. . Prabhu, “Finite Element Modelling of Multiwalled Carbon Nanotube,” National Institute of Technology Rourkela, 2010.
- [7] Giannopoulos, “Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach,” *Comput. Mater. Sci.*, pp. 561–569, 2008.
- [8] R. M. Meo M, “Prediction of Young’s modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modeling,” *Compos Sci Technol*, pp. 1597–605, 2006.
- [9] L. dan Hu, “Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling,” pp. 1902–1913, 2012.
- [10] Z. and Wang, “Effective Wall Thickness of Single-Walled Carbon Nanotube for Multi-Scale Analysis: The Problem and a Possible Solution,” in *IUTAM symposium*, 2009, pp. 53–61.
- [11] B. Gao, *Chem. Phys. Lett.* 2000.
- [12] N. L. M. and W. K. E. Odegard G M, Gates T S, “Equivalent-continuum modelling of nanostructured materials,” *Compos. Sci. Technol*, pp. 1869–80, 2002.