

## Pengaruh komposisi campuran minyak jarak dan minyak kelapa terhadap interaksi antar molekul pelumas nabati dengan simulasi molekuler dinamik

Moch. Syamsul Ma'arif<sup>a,1</sup>, Yordan Harhar Barus<sup>a</sup>, ING Wardana<sup>a</sup>, Djarot B. Darmadi<sup>a</sup>,  
Oyong Novareza<sup>b</sup>, Sugiarto<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Departemen Teknik Mesin, Universitas Brawijaya, Malang

<sup>b</sup>Departemen Teknik Industri, Universitas Brawijaya, Malang

[lsyamsulm@ub.ac.id](mailto:lsyamsulm@ub.ac.id)

### ABSTRACT

The need for lubricants is currently increasing along with the development of the manufacturing industry. In manufacturing, lubricant is very important in the machining process. Machining processes that are carried out without the use of coolant will cause very large friction between the tool and the workpiece. Mineral-based lubricants are generally not environmentally friendly because the disposal of waste lubricants can cause contamination of the environment and the health of workers. Therefore, in this study, the researchers analyzed the effect of the composition of Jatropha oil and Coconut oil as lubricants on the intermolecular interactions that affect wetting on the surface of the material using the Hyperchem simulation program. The percentage of the ratio between Jatropha oil to coconut oil to the vegetable lubricant mixed with a percentage of 10%, 20%, 30%, 40%, 50%, 60%, 70%, 80%, 90% of the total volume of the vegetable lubricant mixture to be simulated, which is 1000 ml. It was found that the higher the concentration of Jatropha oil in the vegetable lubricant mixture, the lower the value of the dipole moment, polarizability, and bond energy. This is because as the composition of the castor oil and coconut oil mixture is added, the electronegativity and diversity of the constituent elements of the vegetable lubricant decreases, which results in a decrease in the bond energy of the vegetable lubricant and the more Jatropha oil concentration in the vegetable lubricant mixture causes an increase in wetting on the copper surface as seen from the smaller the contact angle formed and causes a lower wear rate. This is due to the decrease in the bond energy between the molecules and the bond energy to the copper crystal.

**Keywords:** Lubricant, Jatropha oil, Coconut oil, Intermolecular interaction, Hyperchem

**Received** 30 September 2023; **Presented** 5 October 2023; **Publication** 27 May 2024

### PENDAHULUAN

Di Indonesia, kebutuhan pelumas saat ini terus meningkat seiring dengan berkembangnya dunia industri manufaktur. Dalam dunia manufaktur, cairan pendingin atau yang sering disebut pelumas sangatlah penting pada proses permesinan. Permesinan yang dilakukan tanpa adanya pelumas akan menimbulkan gesekan antara pahat dan benda kerja yang sangat besar. Gesekan yang dimaksud ialah gaya mekanik yang berlawanan arah dengan gerak benda ataupun kecenderungan benda bergerak. Gesekan timbul akibat dua zat yang bersentuhan satu sama lain. Pemakaian pelumas pada proses permesinan akan mengurangi koefisien gesek dan gaya pemotongannya.

Saat ini, pelumas memiliki peranan yang sangat penting karena berfungsi untuk mengurangi gesekan dan keausan yang dapat memperpanjang umur dari suatu pahat dan menjaga agar kualitas hasil permesinan tersebut berada dalam kondisi yang optimal. Pelumas adalah zat

kimia yang umumnya berupa cairan yang diberikan diantara dua benda bergerak dengan tujuan untuk mengurangi gaya gesek. Sedangkan pelumasan adalah tindakan menempatkan pelumas antara permukaan yang saling bergeser (Sukirno, 2010).

Menurut Stribeck, berdasarkan derajat pemisahan permukaan oleh pelumas, pelumasan dibedakan menjadi tiga jenis, yaitu boundary lubrication, mixed lubrication, dan hydrodynamic lubrication. Pada boundary lubrication, terjadi kontak terus menerus antara kedua permukaan. Pada mixed lubrication, terjadi kontak pada beberapa puncak permukaan sedangkan pada bagian lain terbentuk lapisan pelumas. Pada hydrodynamic lubrication, tidak terjadi kontak pada kedua permukaan karena kedua permukaan sepenuhnya dipisahkan oleh pelumas. Faktor yang mempengaruhi ketebalan lapisan pelumas ialah sifat kimia dan fisika dari pelumas tersebut seperti viskositas(kekentalan) pelumas yang berhubungan dengan adsorpsi dan kondisi

permesinannya. Adsorpsi merupakan peristiwa penyerapan suatu zat pada permukaan zat lain.

Sejak terjadinya revolusi industri, kebutuhan akan bahan pelumas terus meningkat, sehingga ditemukanlah minyak bumi (mineral oil). Pemakaian minyak bumi menciptakan banyak efek negatif terhadap lingkungan akibat limbah pelumas yang dibuang ke lingkungan dan kesehatan terhadap para pekerja (Elmunafi et al., 2015). Terutama terkait penggunaannya yang tidak tepat, yang mengakibatkan kontaminasi air, polusi udara, kontaminasi tanah (Birova et al., 2002). Selain itu, pelumas memiliki peran 17% dari keseluruhan biaya produksi, yang artinya biaya tersebut terhitung besar dikarenakan biaya pahat hanya memakan sekitar 4% (Klocke et al., 1997). Oleh sebab itu dibutuhkan pelumas yang lebih ramah lingkungan serta memiliki nilai ekonomis tinggi untuk mengurangi biaya produksi [Aisyah et al, 2020], [Aisyah, et al, 2021].

Sehingga untuk menutupi kekurangan dari pelumas mineral tersebut, mulailah dimanfaatkan pelumas dengan bahan yang lebih ramah lingkungan sebagai bahan dasar pelumas seperti penggunaan minyak nabati. Minyak nabati bersifat nontoxic yang artinya bersih dan umum digunakan, serta memiliki harga yang relatif rendah (Cetin et al., 2011). Minyak nabati juga memiliki sifat pelumasan yang tinggi, yang ditentukan oleh struktur dasar molekul dan komponen kimianya (Asadaukas et al., 1997). Contoh minyak nabati yang dapat dimanfaatkan menjadi pelumas ialah minyak kelapa dan minyak jarak.

Umumnya penelitian mengenai minyak nabati dilakukan dengan metode penelitian nyata, dan masih jarang yang menggunakan metode simulasi. Metode simulasi dapat dipergunakan untuk memprediksi perilaku dan interaksi elemen-elemen yang disimulasikan. Simulasi merupakan salah satu cara untuk menggambarkan bagaimana molekul berinteraksi. Khusus untuk pelumas, dibutuhkan simulasi yang mampu memprediksi interaksi antara pelumas dan zat aditifnya terhadap kemampuan membentuk lapisan di permukaan benda kerja. Program Hyperchem adalah salah satu contoh program simulasi yang dapat menggambarkan interaksi antar molekul.

Hyperchem merupakan suatu program simulasi dan pemodelan molekular yang memungkinkan perhitungan kimiawi yang kompleks. Hyperchem dapat membuat sketsa dua dimensi

molekul atom-atom penyusunnya menjadi model tiga dimensi dengan perhitungan metode mekanika molekular maupun metode mekanika kuantum. Dalam penelitian ini, Hyperchem digunakan untuk mensimulasikan interaksi antara komponen minyak nabati dengan permukaan benda kerja.

Berdasarkan penjelasan di atas, dalam penelitian ini penulis ingin mensimulasikan pengaruh komposisi campuran asam lemak yang terdapat pada minyak jarak dan minyak kelapa terhadap interaksi antar molekul minyak nabati yang mempengaruhi pembentukan lapisan film pada permukaan material menggunakan program Hyperchem.

## METODE PENELITIAN

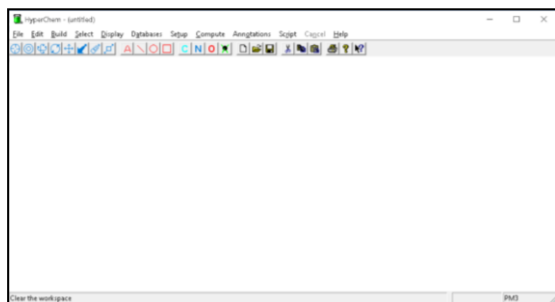
Penelitian ini menggunakan metode penelitian simulasi molekular dinamik untuk mendapatkan perilaku molekul asam lemak secara detail di tingkat atom. Untuk tujuan simulasi tersebut maka variabel bebas yang digunakan untuk penelitian ini adalah variasi konsentrasi minyak jarak terhadap minyak kelapa untuk membentuk minyak pelumas dengan perbandingan keduanya dalam persen volume sebesar 10:90, 20:80, 30:70, 40:60, 50:50, 60:40, 70:30, 80:20, dan 90:10. Untuk variabel terikat maka ditetapkan momen dipol, polarizabilitas, gaya London, dan energi ikatan. Sedangkan variabel terkontrol untuk penelitian ini adalah temperatur ruangan sebesar 300K.

Proses simulasi interaksi molekular menggunakan perangkat lunak simulasi (Hyperchem 8.0) dilakukan dengan memakai komputer dengan spesifikasi yang memadai. Prosesor memakai Intel Core i7 2,7 GHz serta RAM DDR4 8 GB 2133 MHz.

Secara sederhana proses simulasi molekular dinamik menggunakan pendekatan yang sangat lugas. Jika diketahui posisi dari semua atom yang membentuk sistem baik molekul atau kumpulan molekul yang saling berinteraksi maka dapat dihitung gaya-gaya yang dialami oleh sebuah atom sebagai akibat interaksinya dengan atom-atom lainnya.

Untuk tujuan simulasi, kedua minyak diwakili oleh komponen asam lemak pembentuknya. Untuk minyak kelapa maka komposisi asam lemaknya terdiri dari Lauric acid (12:0) sebesar sd 51%, Myristic acid (14:0) sebesar sd 18,5%, Palmitic acid (16:0) sebesar sd 10,5%, Capric acid (10:0) sebesar 9,7%, Caprylic acid (8:0) sebesar sd 9,5%, Oleic acid (18:1n-9) sebesar

8,2%, dan sisanya adalah asam lemak lainnya [Collins & Preedy, 2020]. Di lain pihak, minyak jarak mempunyai komposisi antara lain Oleic acid (18:1n-9) sebesar sd 45,8%, Linoleic acid (18:2n-6) sebesar sd 44,2%, dan Palmitic acid (16:0) sebesar sd 15,3% [Verma, 2016].



Gambar 1. Tampilan layar perangkat lunak Hyperchem 8.0

Asam lemak tersebut mempunyai struktur molekul yang diwakili oleh gambar sehingga di perangkat lunak Hyperchem 8.0 dikonversi ke dalam angka. Komputasi diawali dengan menggambar struktur kimia komponen pelumas. Struktur kimia ini mewakili bagaimana atom berikatan di bidang tiga dimensi dalam bentuk struktural yang paling optimal. Nilai optimal ini diwakili oleh keadaan komputasi mekanika molekuler melalui iterasi sampai pada keadaan dimana perubahan kecil sudut ikatan dan stretching tidak menyebabkan perubahan yang terlalu tajam di energinya. Titik berhenti untuk iterasi tersebut didefinisikan sebagai parameter *Root Mean Square (RMS)*. Konvergensi dicari dengan menggunakan metode gradien paling terjal (*steepest gradient methods*). Molekul dapat diwakili secara numerik melalui parameter-parameter tentang jumlah atom, permukaan molekul dan parameter lainnya dengan memakai metode pemodelan *Quantitative-Structure Property Relations (QSPR)*.

Untuk mendapatkan parameter lain seperti momen dipole, polarisabilitas, dan lain-lain, maka metode semi-empiris seperti metode DFT atau metode PM3 dapat dipakai. Metode lain seperti *Density Functional Theory (DFT)* digunakan untuk mengetahui sifat-sifat dari molekul tertentu melalui perhitungan densitas muatan (*charge density*) dengan mengakarkan fungsi gelombang. Hasil perhitungan DFT memberikan hasil yang sangat baik untuk data spektral dan geometri molekul. Meskipun demikian, jika strukturnya besar dan kompleks maka perhitungan DFT akan sangat memakan

waktu. Untuk kasus seperti ini maka metode lain seperti *Parametrized Method 3 (PM3)* bisa dilakukan yang memberikan kecepatan lebih dalam hal kalkulasi meskipun hasilnya kalah akurat dibanding dengan DFT. Oleh karena itu, karena keterbatasan hardware maka metode PM3 diambil dalam penelitian ini dengan pertimbangan kemudahan komputasi.

Selanjutnya setelah molekul asam lemak digambar, maka parameter-parameter yang ingin dicari seperti energi molekul, momen dipol, *inducible dipole moments*, dan lainnya didapat. Gambar 2, Gambar 3, dan Gambar 4 memberikan contoh tentang langkah-langkah komputasi untuk gambar 3D dari struktur molekul, struktur yang dioptimasi (*relaxed*) dengan metode mekanika molekuler QSAR dan hasilnya, serta energi yang diperlukan untuk optimasi (*relaxed*) dari keadaan Gambar 3 dengan memakai perhitungan PM3.

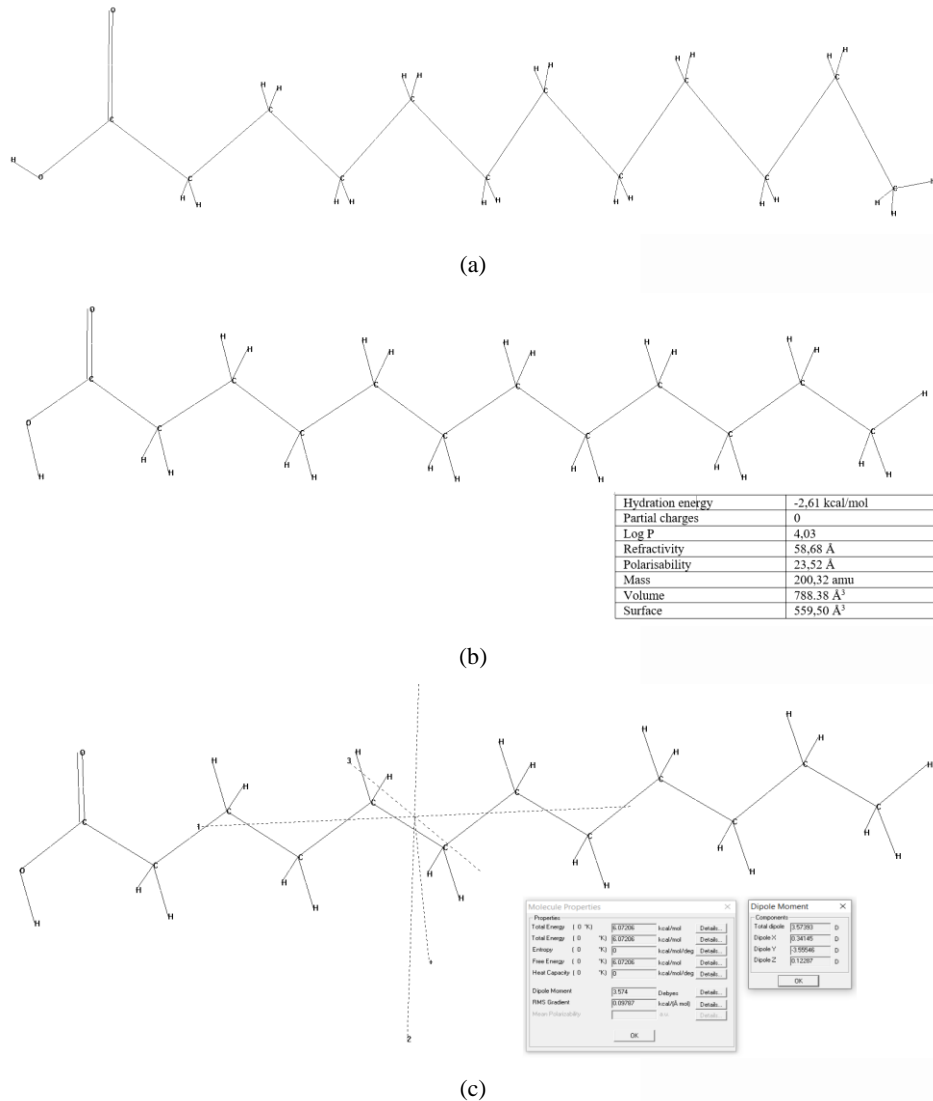
Untuk menentukan adsorpsi dari masing-masing komponen asam lemak maka parameter seperti momen dipol,  $E_{HOMO}$ ,  $E_{LUMO}$ , energi ikatan dan panas pembentukan ikatan dijadikan dasar dalam menentukan tingkat adsorpsi [Fang]. Secara umum maka tingkat energi orbital molekuler yang dinyatakan dalam *Highest Occupied Molecular Orbital (HOMO)* serta *Lowest Unoccupied Molecular Orbital (LUMO)* akan menyatakan tingkat adsorpsi dari masing-masing asam lemak pembentuk minyak jarak dan minyak kelapa. Untuk perhitungan HOMO+ dan LUMO- maka digunakan metode semi empiris MINDO/3 [Bingham, 1975], yang tersedia di program komputer komersial semisal Hyperchem 8.0.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

Tabel 1 memberikan informasi tentang tingkat energi orbital molekuler untuk HOMO dan LUMO untuk masing-masing asam lemak yang menjadi komponen dari minyak jarak dan minyak kelapa. Dari kalkulasi perbedaan energi HOMO dan LUMO maka bisa diperkirakan tingkat adsorpsi dari masing-masing asam lemak terhadap permukaan logam. Secara umum maka semakin tinggi energi HOMO ( $E_{HOMO}$ ) sebuah molekul maka semakin tinggi kemampuan molekul tersebut untuk memberikan elektronnya ke orbital molekuler kosong dari akseptor yang mempunyai tingkat energi yang rendah. Dengan demikian juga menyatakan tingkat adsorpsi ke permukaan logam melalui jumlah elektron yang diberikannya. Tingkat energi LUMO ( $E_{LUMO}$ ) diasosiasikan dengan kecenderungan

penerimaan elektron oleh sebuah molekul. Perbedaan energi orbital atau *band gap* ( $\Delta E = E_{LUMO} - E_{HOMO}$ ) menunjukkan kecenderungan molekul untuk teradsorpsi ke permukaan logam

serta menyatakan kereaktifan kimia dari asam lemak tersebut [Ituen et al, 2017].



Gambar 2. a. Perwakilan gambar 3D dari struktur molekul, b. Struktur yang dioptimasi (relaxed) dengan metode mekanika molekuler QSAR, Energi yang diperlukan untuk optimasi (relaxed) dari keadaan optimasi QSAR

Dari tabel tersebut maka dapat diketahui bahwa  $\Delta E$  untuk Pleic acid mempunyai nilai terbesar,

diikuti oleh Myristic acid selanjutnya adalah Linoleic acid, serta Capricacid sebesar 6,63 eV.

Tabel 1. Tingkat energi orbital molekuler HOMO+, LUMO-

No.	Asam Lemak	E (eV)		LUMO-HOMO (eV)
		HOMO+	LUMO-	
1	Lauric acid (12:0)	-50,5963	15,4931	43,2792
2	Myristic acid (14:0)	-36,9475	6,5617	43,5092
3	Palmitic acid (16:0)	-37,2357	5,6791	42,9148
4	Capric acid (10:0)	-37,1787	6,1758	43,3545



No.	Asam Lemak	E (eV)		LUMO-HOMO (eV)
5	Caprylic acid (8:0)	-37,0932	6,1702	43,2634
6	Oleic acid (18:1n-9)	-37,5483	6,2734	43,8217
7	Linoleic acid (18:2n-6)	-37,0786	6,2824	43,3610

Gambar 4.1 menunjukkan grafik nilai momen dipol ketika persentase minyak jarak ditambahkan kedalam pelumas nabati. Sumbu X menunjukkan perubahan persentase komposisi minyak jarak dan minyak kelapa pada pelumas nabati. Sumbu Y menunjukkan nilai momen dipol dalam satuan Debyes. Garis putus-putus berwarna merah menunjukkan kecenderungan nilai momen dipol terhadap penambahan konsentrasi minyak nabati.

Pada konsentrasi 10%, nilai momen dipol sebesar 12,95 Debyes. Konsentrasi 20% nilai momen dipol sebesar 7,81 Debyes. Pada konsentrasi 30% nilai momen dipol sebesar 4,1 Debyes. Pada konsentrasi 40% nilai momen dipol sebesar 2,2 Debyes. Pada konsentrasi 50% nilai momen dipol sebesar 3,55 Debyes. Pada konsentrasi 60% nilai momen dipol sebesar 2,79 Debyes. Pada konsentrasi 70% nilai momen dipol sebesar 3,42 Debyes. Pada konsentrasi 80% nilai momen dipol sebesar 3,42 Debyes. Pada konsentrasi 90% nilai momen dipol sebesar 3,42 Debyes.

Berdasarkan dasar teori yang telah dibahas sebelumnya, momen dipol merupakan polaritas yang dipengaruhi oleh keelektronegatifan molekul. Besarnya momen dipol suatu molekul dipengaruhi oleh besar perbedaan elektronegativitas unsur penyusunnya. Atom O memiliki elektronegativitas yang lebih tinggi dibandingkan dengan atom H dan atom C. Sehingga, semakin banyak atom O dengan elektronegativitas yang tinggi pada saat simulasi dilakukan, semakin besar pula nilai momen dipol yang akan terjadi. Pada kadar campuran minyak jarak 10% memiliki keragaman unsur penyusun yang cukup banyak sehingga memiliki momen dipol yang cukup tinggi juga.

Pada grafik diatas, dapat dilihat bahwa seiring bertambahnya konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati nilai momen dipolnya akan semakin menurun dan konstan pada titik tertentu. Kemudian pada grafik juga terlihat kecenderungan momen dipol yang dihasilkan ketika konsentrasi minyak jarak

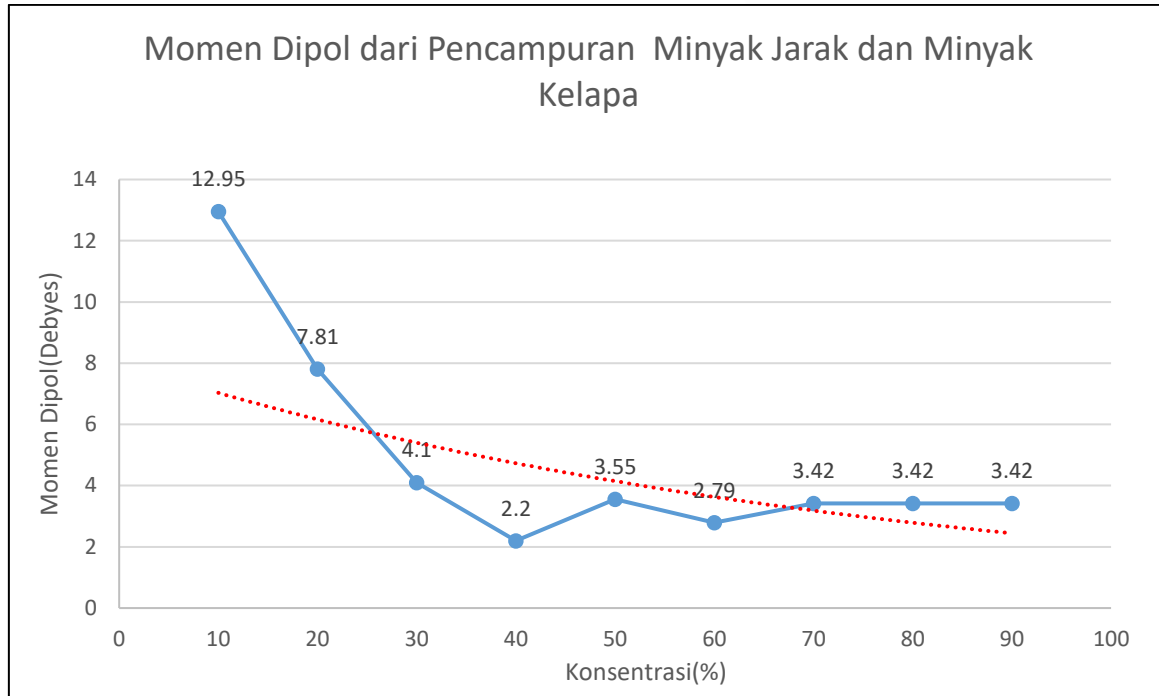
ditambahkan pada campuran pelumas nabati. Pada campuran pelumas nabati dengan persentase minyak jarak 40% hingga 60% dan 70% hingga 90% nilai momen dipol cenderung konstan. Hal ini dikarenakan pada persentase campuran pelumas nabati tersebut memiliki unsur penyusun yang sama sehingga mengakibatkan nilai momen dipol relatif sama. Dapat disimpulkan bahwa semakin tinggi penambahan minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati akan mengakibatkan turunnya nilai momen dipol hingga titik tertentu.

Gambar 4.2 menunjukkan grafik nilai polarisabilitas pelumas nabati ketika persentase minyak jarak ditambahkan kedalam pelumas nabati. Sumbu X menunjukkan perubahan persentase komposisi minyak jarak dan minyak kelapa pada pelumas nabati. Sumbu Y menunjukkan nilai polarisabilitas dalam satuan Å<sup>3</sup>. Garis putus-putus berwarna merah menunjukkan kecenderungan nilai polarisabilitas terhadap penambahan konsentrasi minyak nabati.

Pada konsentrasi 10%, nilai polarisabilitas sebesar 335,72 Å<sup>3</sup>. Konsentrasi 20% nilai polarisabilitas sebesar 187,28 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 30% nilai polarisabilitas sebesar 109,38 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 40% nilai polarisabilitas sebesar 35,16 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 50% nilai polarisabilitas sebesar 35,16 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 60% nilai polarisabilitas sebesar 23,52 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 70% polarisabilitas sebesar 35,16 Å<sup>3</sup>. Pada konsentrasi 80% polarisabilitas sebesar 35,16 Å<sup>3</sup> dan pada konsentrasi 90% nilai polarisabilitas sebesar 35,16 Å<sup>3</sup>.

Berdasarkan dasar teori yang telah dibahas sebelumnya, nilai polarisabilitas dipengaruhi oleh keragaman jenis atom penyusunnya. Keragaman atom penyusunnya akan menyebabkan nilai polarisabilitas semakin besar. Nilai polarisabilitas menunjukkan bahwa minyak pelumas dengan kadar minyak jarak 10% mempunyai nilai polarisabilitas yang paling besar dibandingkan minyak pelumas dengan kadar lainnya. Hal ini dikarenakan keragaman jenis atom pada pelumas nabati dengan kadar minyak

jarak 10% yang cukup besar, yaitu adanya atom yang bersifat penarik elektron dan adanya atom yang bersifat sebagai pemberi elektron.



Gambar 4.1 Analisa Data Momen Dipol dari Pencampuran Minyak Jarak dan Minyak Kelapa

Pada grafik diatas, dapat dilihat bahwa seiring bertambahnya konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati nilai polarisabilitasnya akan semakin menurun dan konstan pada titik tertentu. Kemudian pada grafik juga terlihat kecenderungan polarisabilitas yang dihasilkan ketika konsentrasi minyak jarak ditambahkan pada campuran pelumas nabati menurun. Dapat disimpulkan bahwa semakin tinggi penambahan minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati akan mengakibatkan turunnya nilai polarisabilitas hingga titik tertentu.

Gambar 4.3 menunjukkan grafik nilai energi ikatan pelumas nabati ketika persentase minyak jarak ditambahkan kedalam pelumas nabati. Sumbu X menunjukkan perubahan persentase komposisi minyak jarak dan minyak kelapa pada pelumas nabati. Sumbu Y menunjukkan nilai energi ikatan yang terjadi dalam satuan kJ/mol. Garis putus-putus berwarna merah menunjukkan kecenderungan nilai energi ikatan terhadap penambahan konsentrasi minyak nabati.

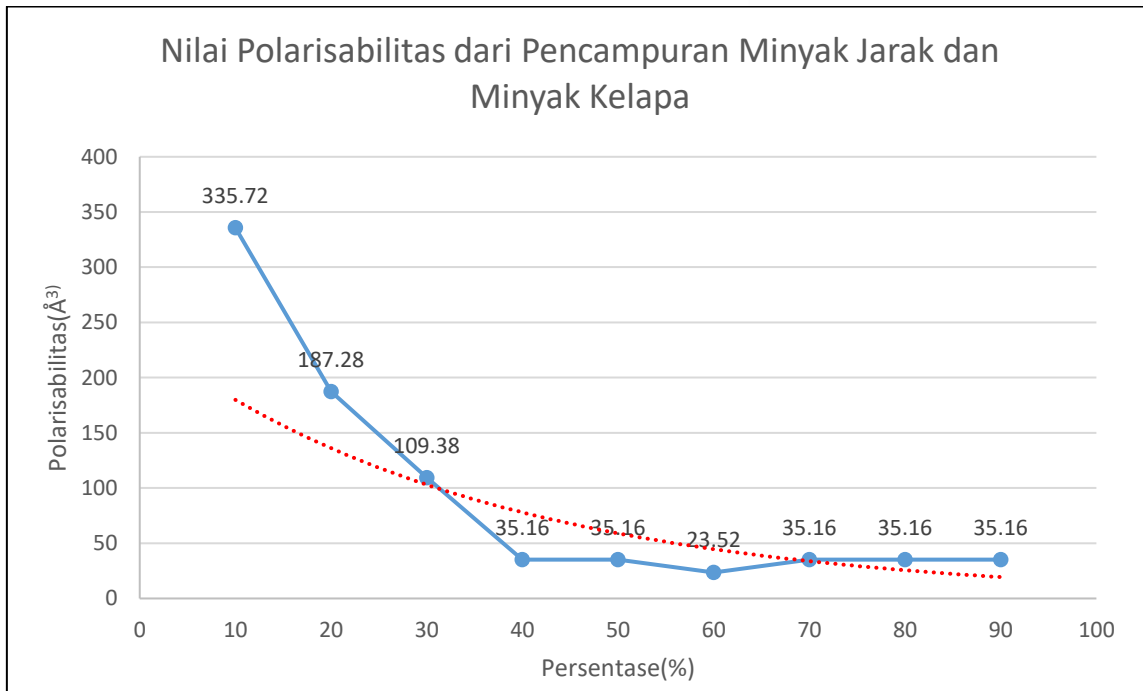
Pada konsentrasi 10%, nilai energi ikatan sebesar -213090,75 kJ/mol. Konsentrasi 20% nilai

energi ikatan sebesar -118983,54 kJ/mol. Pada konsentrasi 30% nilai energi ikatan sebesar -69317,53 kJ/mol. Pada konsentrasi 40% nilai energi ikatan sebesar -37240,68 kJ/mol. Pada konsentrasi 50% nilai energi ikatan sebesar -37221,34 kJ/mol. Pada konsentrasi 60% nilai energi ikatan sebesar -37263,88 kJ/mol. Pada konsentrasi 70% energi ikatan sebesar -22300,18 kJ/mol. Pada konsentrasi 80% energi ikatan sebesar -22300,18 kJ/mol dan pada konsentrasi 90% nilai energi ikatan sebesar -22300,18 kJ/mol.

Energi ikatan dapat diartikan sebagai jumlah suatu energi yang harus diserap oleh molekul atau atom – atom yang berikatan untuk memutuskan jenis ikatan kimia tertentu. Semakin tinggi nilai energi ikatan maka semakin sulit pula ikatan tersebut untuk dilepaskan karena dibutuhkan lebih banyak energi yang diperlukan untuk melepaskannya. Energi ikatan yang negatif mengartikan bahwa sistem ikatannya tidak terlepas. Momen dipol dan polarisabilitas berpengaruh pada energi ikatan. Semakin rendah momen dipol dan polarisabilitasnya, maka semakin rendah pula energi ikatannya. Sebaliknya

semakin tinggi momen dipol dan polarisabilitasnya, semakin tinggi pula energi ikatannya. Pelumas nabati dengan kadar minyak jarak 10% menunjukkan nilai energi ikatan paling besar dibandingkan dengan pelumas nabati dengan kadar lainnya. Hal ini dikarenakan pelumas nabati dengan kadar minyak jarak 10% memiliki momen dipol dan polarisabilitas yang cukup tinggi sehingga membutuhkan energi yang besar untuk

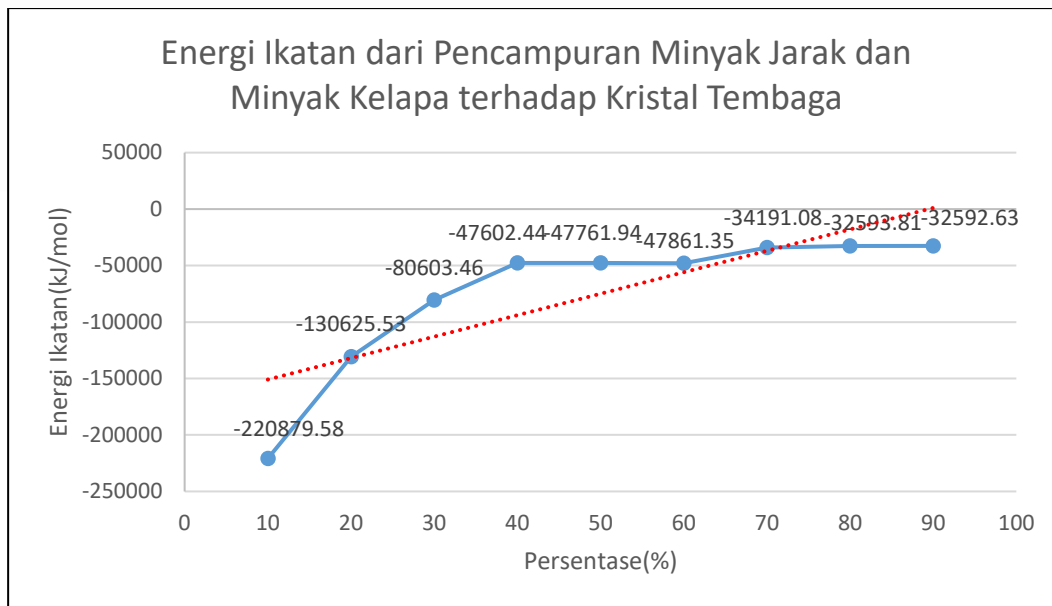
melepas ikatannya. Pada campuran pelumas nabati dengan persentase minyak jarak 40% hingga 60% dan 70% hingga 90% nilai momen dipol cenderung konstan. Hal ini dikarenakan pada persentase campuran pelumas nabati tersebut memiliki nilai momen dipol dan polarisabilitas yang cenderung sama yang berdampak pada energi ikatannya.



Gambar 4.2 Analisa Data Nilai Polarisabilitas dari Pencampuran Minyak Jarak dan Minyak Kelapa



Gambar 4.3 Analisa Data Energi Ikatan dari Pencampuran Minyak Jarak dan Minyak Kelapa



Gambar 4.4 Analisa Data Energi Ikatan dari Pencampuran Minyak Jarak dan Minyak Kelapa terhadap Kristal Tembaga Unit 1x2x2

Pada grafik diatas, dapat dilihat bahwa seiring bertambahnya konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati nilai energi ikatannya akan semakin menurun dan konstan pada titik tertentu. Kemudian pada grafik juga terlihat kecenderungan nilai energi ikatan yang dihasilkan ketika konsentrasi minyak jarak ditambahkan pada campuran pelumas nabati menurun. Penambahan konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati menyebabkan ikatan antar molekul yang terjadi semakin lemah. Dapat disimpulkan bahwa semakin tinggi penambahan minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati akan mengakibatkan turunnya nilai energi ikatannya hingga titik.

Gambar 4.4 menunjukkan grafik nilai energi ikatan pelumas nabati ketika persentase minyak jarak ditambahkan kedalam pelumas nabati terhadap kristal tembaga unit 1x2x2. Sumbu X menunjukkan perubahan persentase komposisi minyak jarak dan minyak kelapa pada pelumas nabati. Sumbu Y menunjukkan nilai energi ikatan yang terjadi antara pelumas nabati terhadap kristal tembaga dalam satuan kJ/mol. Garis putus-putus berwarna merah menunjukkan kecenderungan nilai energi ikatan terhadap penambahan konsentrasi minyak nabati.

Pada konsentrasi 10%, nilai energi ikatan sebesar -220879,58 kJ/mol. Konsentrasi 20% nilai energi ikatan sebesar -130625,53 kJ/mol. Pada konsentrasi 30% nilai energi ikatan sebesar -80603,46 kJ/mol. Pada konsentrasi 40% nilai

energi ikatan sebesar -47602,44 kJ/mol. Pada konsentrasi 50% nilai energi ikatan sebesar -47761,94 kJ/mol. Pada konsentrasi 60% nilai energi ikatan sebesar -47861,35 kJ/mol. Pada konsentrasi 70% energi ikatan sebesar -34191,08 kJ/mol. Pada konsentrasi 80% energi ikatan sebesar -32593,81 kJ/mol dan pada konsentrasi 90% nilai energi ikatan sebesar -32592,63 kJ/mol.

Energi ikatan pada permukaan suatu material dapat menjadi indikator atau penanda bahwa kemampuan suatu senyawa (absorbat) untuk melekat pada permukaan material (absorben). Besarnya energi ikatan menandakan banyaknya gaya interaksi molekuler yang terjadi. Besarnya energi ikatan pelumas nabati terhadap kristal tembaga dipengaruhi oleh besarnya momen dipol dan polarisabilitas dari pelumas nabati. Semakin kecil nilai momen dipol dan polarisabilitas campuran pelumas nabati, maka semakin kecil pula energi ikatan antara pelumas nabati terhadap kristal tembaga. Hal ini dikarenakan semakin kecil energi yang dibutuhkan untuk melepaskan ikatan antar molekulnya. Pada campuran pelumas nabati dengan persentase minyak jarak 40% hingga 60% dan 70% hingga 90% nilai momen dipol cenderung konstan. Hal ini dikarenakan pada persentase campuran pelumas nabati tersebut memiliki nilai momen dipol dan polarisabilitas yang cenderung sama yang berdampak pada energi ikatannya.

Menurut dasar teori, semakin kecil nilai sudut kontak, maka kemampuan membasahi dan



menempel di permukaan benda juga semakin besar. Hal ini dikarenakan menurunnya energi ikatan antar asam lemak akan memudahkan molekul ditarik oleh permukaan logam sehingga meningkatkan pembasahan dan sudut kontakannya. Semakin tinggi komposisi minyak jarak, semakin kecil sudut kontak yang terbentuk dan semakin luas pembasahan yang terjadi dikarenakan menurunnya energi ikatan pelumas terhadap kristal tembaga.

Pada grafik diatas, dapat dilihat bahwa seiring bertambahnya konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati terhadap kristal tembaga nilai energi ikatannya akan semakin menurun dan konstan pada titik tertentu. Kemudian pada grafik juga terlihat kecenderungan nilai energi ikatan terhadap permukaan tembaga yang dihasilkan ketika konsentrasi minyak jarak ditambahkan pada campuran pelumas nabati menurun. Penambahan konsentrasi minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati menyebabkan ikatan antar molekul yang terjadi semakin lemah sehingga energi yang dibutuhkan untuk melepaskan ikatan molekul semakin menurun. Dapat disimpulkan bahwa semakin tinggi penambahan minyak jarak pada komposisi campuran pelumas nabati akan mengakibatkan turunnya nilai energi ikatannya terhadap permukaan tembaga hingga titik tertentu.

## KESIMPULAN

Kesimpulan yang didapatkannya dari hasil penelitian, analisis, dan pembahasan untuk simulasi komposisi campuran minyak jarak dan minyak kelapa sebesar 10%, 20%, 30%, 40%, 50%, 60%, 70%, 80%, 90% terhadap interaksi antar molekul pada pelumas nabati yaitu semakin banyak konsentrasi minyak jarak pada campuran pelumas nabati, maka akan menurunkan nilai momen dipol, polarisabilitas, dan energi ikatannya. Hal ini disebabkan karena seiring penambahan komposisi campuran minyak jarak dan minyak kelapa, menurunkan keelektronegativitasan dan keragaman unsur penyusun pelumas nabati yang mengakibatkan turunnya energi ikatan pelumas nabati.

Semakin banyak konsentrasi minyak jarak pada campuran pelumas nabati maka akan menurunkan energi ikatan antar molekulnya yang akan menyebabkan peningkatan pembasahan pada permukaan tembaga yang dilihat dari semakin kecilnya sudut kontak yang terbentuk dan menyebabkan laju keausan semakin kecil.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Kegiatan Penelitian ini terlaksana melalui Program Penelitian PNPB Fakultas Teknik Universitas Brawijaya Tahun Anggaran 2023 dengan nomor kontrak No. 17/UN10.F07/PN/2023.

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] Sukirno, 2010, Kuliah Teknologi Pelumas 3, Departemen Teknik Kimia Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
- [2] Aisyah, I.S., Rusdianto, M., Fauzan Hery, A., 2020, Studi Pemesinan TI6246 Dengan *Jatropha Curcas* Sebagai Bio Lubricant Terhadap Surface Roughness dan Bentuk Geram, Prosiding Seminar Nasional Teknologi dan Rekayasa (SENTRA) 2020, ISSN 2527-6042
- [3] Aisyah IS, Caesarendra W, Kurniawati D, Maftuchah M, Agung D, Glowacz A, Oprzędkiewicz K, Liu H. Study of *Jatropha curcas* Linn and *Olea europaea* as Bio-Oil Lubricant to Physical Properties and Wear Rate. *Lubricants*. 2021; 9(4):39. <https://doi.org/10.3390/lubricants9040039>
- [4] Elmunafi MHS, Mohd Yusof N, Kurniawan D. Effect of cutting speed and feed in turning hardened stainless steel using coated carbide cutting tool under minimum quantity lubrication using castor oil. *Advances in Mechanical Engineering*. 2015;7(8). doi:10.1177/1687814015600666.
- [5] Bírová, A. & Pavlovičová, A. & Cvenroš, J.. (2002). Lubricating oils based on chemically modified vegetable oil. *Journal of Synthetic Lubrication*. 18. 291 - 299. 10.1002/jsl.3000180405.
- [6] Klocke, F. A. E. G., & Eisenblätter, G. (1997). Dry cutting. *Cirp Annals*, 46(2), 519-526.
- [7] M. Huseyin Cetin, Babur Ozcelik, Emel Kuram, Erhan Demirbas, Evaluation of vegetable based cutting fluids with extreme pressure and cutting parameters in turning of AISI 304L by Taguchi method, *Journal of Cleaner Production*, Volume 19, Issues 17–18, 2011, Pages 2049-2056, ISSN 0959-6526, <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2011.07.013>
- [8] Asadaukas, S., Perez, J.M., & Duda, J.L (1997). *Lubrication Properties of Castor*

Oil-potential basestock for biodegradable lubricants. Journal of Society of Tribologist and Lubrications Engineer.

- [9] Colin R Martin, Victor R Preedy (2020). Oxidative Stress and Dietary Antioxidants in Neurological Diseases, Elsevier.
- [10] Verma, G. (2016). FTIR Spectroscopy – A Technique for the Evaluation of Edible Oil Oxidation.
- [11] Ituen, Ekemini & Akaranta, Onyewuchi & James, Abosede. (2017). Evaluation of Performance of Corrosion Inhibitors Using Adsorption Isotherm Models: An Overview. Chemical Science International Journal. 18. 1-34. 10.9734/CSJI/2017/28976.
- [12] Richard C. Bingham and Michael J. S. Dewar (1977), A derivation of the shapes and energies of the molecular orbitals of 1,3-dipoles. Geometry optimizations of these species by MINDO/2 and MINDO/3, Journal of the American Chemical Society 1972 94 (26), 9107-9112. DOI: 10.1021/ja00781a020