

ABSTRAK

Vera Khoirunisa, 2011. **Perhitungan Numerik Konduktivitas Termal Single-Wall Carbon Nanotube terhadap Temperatur Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler.** Skripsi ini di bawah bimbingan Drs. Adri Supardi, M.S. dan Herri Trilaksana, S.Si., M.Si. Departemen Fisika, Fakultas Sains Dan Teknologi, Universitas Airlangga

Perhitungan konduktivitas termal 1,5 nm SWCNT (10, 10) telah dilakukan pada temperatur 100-350 K menggunakan simulasi dinamika molekuler dengan potensial Lennard Jones untuk interaksi ikatan atom C-C. Simulasi ini dilakukan dengan timestep sebesar 1 fs dengan *Equilibration time* sebesar 40 ps dan *production time* sebesar 400 ps. Nilai konduktivitas termal didapatkan dengan menggunakan persamaan Green kubo. Dalam penelitian ini, didapatkan nilai konduktivitas termal SWCNT (10, 10) pada temperatur kamar sekitar 9,14 W/mK. Hasil perhitungan menunjukkan kebergantungan nilai konduktivitas terhadap temperatur. Nilai konduktivitas termal meningkat sebanding dengan $1/T$.

Kata Kunci : Konduktivitas termal, SWCNT, Green kubo, Simulasi dinamika molekuler

ABSTRACT

Vera Khoirunisa, 2011. Numerical Calculation of Thermal Conductivity Single-Wall Carbon Nanotube Depent on Temperature Using Molecular Dynamics Simulation.

This thesis is under the guidance of Drs. Adri Supardi, M.S. and Herri Trilaksana, S.Si.,M.Si. Physics Department , Faculty of Science and Technology , Airlangga University.

The thermal conductivity of single-wall carbon nanotubes has been calculated over a temperature range of 100-350 K using molecular dynamics simulations with the Lennard Jones potential for C-C interactions. This simulation is done with 1 fs timestep with Equilibration time about 40 ps and production time about 400 ps. Thermal conductivity is calculated using Green Kubo Formula. The thermal conductivity in near room temperature is approximately 9,14 W/mK. This result shows that thermal conductivity depend on temperature. Thermal conductivity increase proportional to $1/T$.

Keyword : Termal Conductivity, SWCNT, Green kubo, Molecular dynamics simulation