

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Nikel aluminium diketahui memiliki ketahanan oksidasi dan sifat mekaniknya yang sangat bagus, sehingga penggunaannya mudah ditemukan pada biomedis, penukar panas, dan turbin gas. Tetapi, ada juga kelemahan yang dimilikinya seperti kekurangan kekuatan patah dan regangan patah pada suhu pas atau hangat. Hal ini karena terdapatnya macam cacat, seperti cacat titik, garis, dan volume. Di berbagai sektor industri berusaha untuk mengatasi kekurangan karakteristik mekanis dengan pengurangan macam-macam cacat dengan metode komputasi [1]. *Bulk* Ni<sub>3</sub>Al sudah diketahui terdapat kekuatan suhu tinggi dan mempunyai efek memori bentuk, namun cukup rapuh dan menampilkan keuletan tarik yang terbatas. Selain itu, kekuatannya akan mengurang pada suhu yang lebih tinggi lagi [2]. Ni<sub>3</sub>Al yaitu salah satu material yang sering digunakan secara luas dalam pengaplikasian mesin dirgantara. Alasan mengapa penggunaan Ni<sub>3</sub>Al lebih banyak digunakan daripada *superalloy* berbasis nikel yang lainnya adalah : densitas 5,95 g/cm<sup>3</sup>, yaitu sekitar  $\frac{1}{3}$  rd merupakan densitas *superalloy* berbasis nikel yang canggih, konduktivitas termal adalah 4 – 8 kali *superalloy* berbasis nikel (tergantung pada komposisi dan suhu), ketahanan oksidasi yang sangat baik dan sederhana, struktur kristal B2 membuat deformasi plastis berpotensi lebih mudah dibandingkan dengan banyak senyawa intermetalik lainnya [3].

Paduan ini sangat menarik karena penguatan fase padat dalam *superalloy* berbasis nikel yang memungkinkan kekuatan suhu tinggi hingga 0,7-0,8 dari suhu lelehnya. Sementara itu, Ni<sub>3</sub>Al menampilkan sifat yang sangat baik seperti densitas rendah (lebih rendah dari Ni<sub>3</sub>Al), konduktivitas termal yang baik, ketahanan oksidasi, dan suhu leleh yang tinggi. Sifat-sifat ini, membuatnya ideal untuk aplikasi suhu tinggi khususnya seperti pelapis pada bilah di turbin gas dan mesin jet. Namun, kedua paduan ini memiliki kelemahan yaitu cukup rapuh pada suh

rendah maupun tinggi, meskipun telah ditunjukkan bahwa  $\text{Ni}_3\text{Al}$  dapat dibuat ulet ketika diproduksi sebagai kristal tunggal yang bertentangan dengan polikristalin [4].

Paduan nikel ini telah menarik banyak perhatian dari perusahaan penambangan batubara, permesinan logam, pengeboran minyak, pemotongan batu, dan pasangan bata atau ubin keramik [5]. Paduan berbasis  $\text{Ni}_3\text{Al}$  telah menarik banyak perhatian sebagai kandidat untuk bahan struktural suhu tinggi karena sifat komprehensifnya yang sangat baik. Struktur mikro dan sifat mekanik yang sesuai dari paduan berbasis  $\text{Ni}_3\text{Al}$  diketahui rentan terhadap perlakuan panas. Dengan demikian, langkah penting yang harus diambil adalah menggunakan berbagai perlakuan panas untuk memperoleh sifat mekanik paduan yang diinginkan [6].

Komputasi dinamika molekuler menjadi penghubung antara studi eksperimen dan teoritis. Dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler, sifat-sifat dari material tertentu dapat diinvestigasi pada skala atomik. Dari hasil investigasi dapat diungkap mekanisme perubahan kelakuan material akibat berbagai perlakuan, seperti pembebanan tarik pada fase kristal dan amorf.

Mekanisme perubahan atom struktur biasanya dilibatkan untuk memahami proses yang menyebabkan kegagalan material atau patahan material. Tujuan dari pekerjaan ini adalah untuk menyelidiki proses nukleasi fraktur dan cacat pada uji tarik uniaksial dengan sumbu regangan tegak lurus terhadap antarmuka. Pandangan atomistik seperti yang diberikan dalam dinamika molekuler memberikan wawasan yang realistis ke dalam fenomena ini pada antarmuka yang dianalisis. Karena enduksi yang rendah dari paduan intermetalik  $\text{Ni}_3\text{Al}$  dan B2-NiAl sistem Ni/ $\text{Ni}_3\text{Al}$  dan NiNi/B2-NiAl adalah sistem model untuk antarmuka getas/ulet. Mereka dipilih dalam pekerjaan ini karena ketersediaan potensi interatomik akurat yang tinggi antara atom dan fase yang terlibat.

Sistem NiAl sering diteliti secara konvensional dengan metode *Molecular Dynamics* (MD) di masa lalu karena beberapa alasan, seperti tegangan permukaan dalam Ni cair, paduan Ni-Al cair dan padatan, peleburan  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , mekanisme difusi pada NiAl, kekasaran permukaan pada Al, kinetika pengurutan pada  $\text{Ni}_3\text{Al}$ , investigasi perubahan struktur Al dan Ni pada permukaan Ni (111), kristalisasi

paduan amorf (Ti-)Al dan perhitungan diagram pada Ni dan Al menggunakan simulasi dinamika molekul [7].

Meskipun telah banyak dilakukan penelitian tentang bahan NiAl, tetapi pengetahuan tentang bagaimana respon bahan material paduan NiAl terhadap pembebanan dan tarik, serta bagaimana perubahan peningkatan tegangan struktur kristal dan amorf selama pembebanan tarik dan tekan masih sangat terbatas. Sehingga kajian Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan NiAl pada fase kristal dan amorf, yang kami ajukan ini diharapkan dapat memperbaiki dan melengkapi kekurangan dari hasil penelitian-penelitian sebelumnya.

## 1.2 Perumusan Masalah

Pada penelitian ini, perumusan masalah diuraikan sebagai berikut :

- a. Bagaimana nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas paduan NiAl pada fase kristal dan amorf;
- b. Bagaimana mekanisme perubahan struktur bahan paduan NiAl dengan adanya pembebanan tarik; dan
- c. Bagaimana perbedaan nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas paduan NiAl pada fase kristal dan amorf.

## 1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini memiliki tujuan sebagai berikut :

- a. Untuk mengetahui nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas paduan NiAl pada fase kristal dan amorf;
- b. Untuk mengetahui mekanisme perubahan struktur bahan paduan NiAl dengan adanya pembebanan tarik; dan
- c. Untuk mengetahui perbedaan nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas paduan NiAl pada fase kristal dan amorf

#### **1.4 Batasan Masalah**

Pada simulasi dinamika molekuler ini memiliki batasan masalah sebagai berikut :

- a. Simulasi dilakukan pada suhu 300 K yang merupakan suhu ruang; dan
- b. Sumbu x, y, dan z berfungsi sebagai tiga arah koordinat batas periodik yang digunakan dalam simulasi ini.

#### **1.5 Manfaat Penelitian**

Sebagai acuan untuk menentukan peningkatan tegangan pada struktur kristal dan paduan NiAl amorf selama pembebanan tarik dan tekan, hasil simulasi dinamika molekul ini diharapkan dapat bermanfaat bagi peneliti dan mahasiswa. Selain itu, simulasi ini diharapkan dapat menjadi dasar penelitian selanjutnya dan dapat dikembangkan lebih lanjut.

