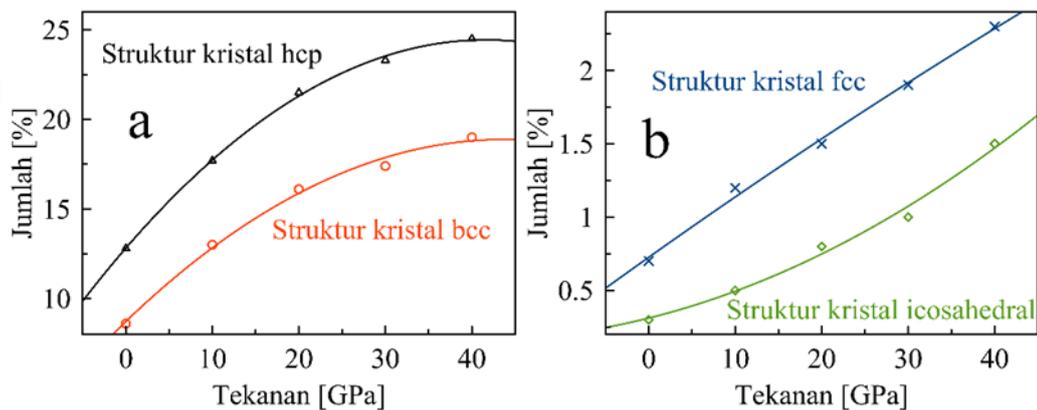


## BAB 2

### TINJAUAN PUSTAKA

#### 2.1 Penelitian Terdahulu

Penelitian sebelumnya pada paduan NiTi telah dilakukan menggunakan simulasi dinamika molekuler adalah tentang pengaruh tekanan terhadap struktur kristal saat kondisi likuid. Grafik pada gambar 2.1 bawah ini merupakan hasil simulasi dinamika molekuler yang telah dilakukan oleh Arifin dkk, dimana tekanan dari 0 GPa sampai dengan 40 GPa di terapkan saat paduan NiTi masih dalam kondisi likuid pada temperatur 2500 °K dan kemudian dianalisis struktur kristalnya.



Gambar :2.1 Grafik struktur Kristal paduan NiTi saat kondisi liquid. (a) grafik struktur kristal hcp dan bcc; (b) grafik struktur Krista lfcc dan icosahedral

Sumber: (Arifin, dkk., 2019)

Seperti yang terlihat pada gambar 2.1 di atas, seluruh struktur kristal hcp, bcc, fcc dan icosahedral rata-rata mengalami kenaikan persentase seiring bertambahnya tekanan.

Penelitian lain yang dilakukan Ridwan (2019) adalah tentang solidifikasi paduan NiTi dengan variasi tekanan mulai dari 0 GPa sampai dengan 100 GPa dan dianalisa struktur kristalnya pada saat kondisi solid. Hasil dari penelitian itu menunjukkan struktur kristal bcc dan fcc di dalam paduan NiTi, rata-rata terjadi

kenaikan jumlah persentase seiring bertambahnya tekanan, dimana masing-masing mengalami kenaikan 3.7% dan 0.6% saat 100 Gpa dibandingkan dengan 0 Gpa yang sebelumnya 23.8% untuk bcc menjadi 27.5% dan 4.8% untuk fcc menjadi 5.4%. Untuk rata-rata persentase struktur kristal hcp dan ico mengalami fluktuasi, dimana rata-rata jumlah persentase icosahedral naik saat tekanan 0 Gpa hingga 50 Gpa. Namun dari 60 Gpa hingga 100 Gpa menurun, sebaliknya untuk struktur hcp turun dari 0 Gpa hingga 50 Gpa kemudian naik saat 60 Gpa hingga 100 Gpa.

Alif (2019) juga melakukan penelitian tentang NiTi ini, mereka melakukan penelitian tentang variasi laju pendinginan pada saat solidifikasi paduan NiTi. Dari hasil penelitian yang dilakukan Alif dapat menunjukkan bahwa pada saat solidifikasi paduan NiTi dengan menurunkan laju pendinginan yang semakin lama, struktur local BCC mengalami peningkatan jumlah atom yang signifikan sebesar 25.3% sedangkan struktur lokal HCP mengalami penurunan jumlah atom sebesar 22.5%. Struktur lokal icosahedral mengalami peningkatan jumlah atom menjadi 12% pada saat laju pendinginan semakin lama, sedangkan struktur lokal FCC tidak mengalami perubahan yang signifikan dari pemberian variasi laju pendinginan saat solidifikasi paduan NiTi.

## 2.2 Paduan NiTi

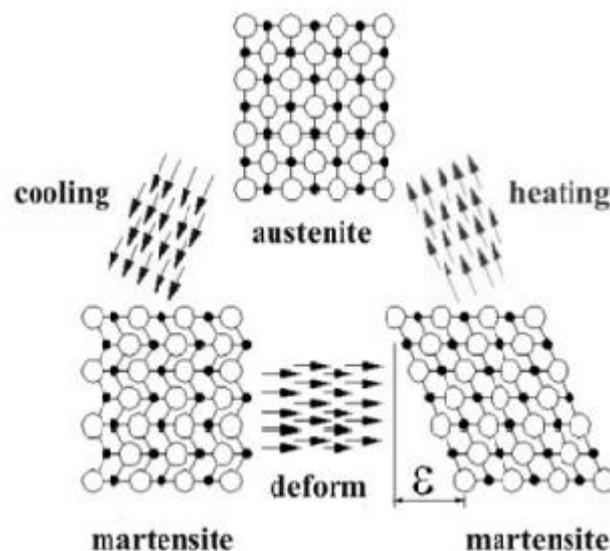
Sebagaimana diketahui, paduan NiTi tersusun dari atom-atom Ni dan Ti. Nikel merupakan unsur ataupun logam yang memiliki sifat lembek, berwarna keabu-abuan dan memiliki struktur kristal *face centered cubic* (FCC). Nilai titik didih dan titik leburnya 2730°C dan 1445°C (Van Vlack, 1991). Nikel ini tahan terhadap temperatur tinggi dan tidak rusak oleh air kali ataupun air laut, tetapi akan rusak oleh asam nitrat (Surdia, 2000).

Titanium merupakan logam aktif yang bersifat stabil diudara, dan dalam keadaan murni tidak bereaksi dengan air. Titanium memiliki struktur kristal *hexagonal close packed* (HCP). Nilai titik leburnya 2000°C, dan titik didihnya 2800°C- 3400°C (Van Vlack, 1991). Pada temperatur di atas 890°C, titanium mempunyai struktur kristal *body centered cubic* (BCC). Titanium mampu

membentuk lapisan pelindung  $TiO_2$  yang halus sehingga memiliki ketahanan yang baik terhadap korosi. Selain itu juga memiliki kekerasan yang tinggi (Surdia, 2000).

Paduan NiTi adalah salah satu bahan perpaduan antara logam Ni (nikel) dengan logam Ti (titanium) yang sangat fungsional digunakan untuk rekayasa. Paduan NiTi ini memiliki sifat biokompabilitas yang bagus terhadap jaringan tubuh serta memiliki pori yang sesuai dengan jaringan tubuh manusia sehingga saat ini banyak digunakan untuk implan.

Paduan NiTi memiliki karakteristik tersendiri. Meskipun telah menjadi paduan, dengan sifat-sifat dan biokompatibilitas paduan NiTi secara tidak langsung masih berkaitan dengan sifat-sifat logam penyusunnya. Paduan NiTi dapat mengalami perubahan bentuk sesuai temperturnya, pada saat temperatur tinggi strukturnya disebut austenite, dan akan berubah menjadi martensite ketika didinginkan (Kneissl, 2005). Paduan NiTi mempunyai titik lebur pada temperatur sekitar  $1300\text{ }^\circ\text{C}$  (Barras & Myers, 2000). Ilustrasi terjadinya proses perubahan fase NiTi ditunjukkan pada Gambar 2.1 dibawah ini.



Gambar : 2.1 Ilustrasi perubahan dari shape memory alloy

Sumber : (Kneissl, 2005)

Transformasi start dan suhu akhir adalah AS (start austenite) dan AF (finish austenite), dan MS (start martensite), serta MF (finish martensite) selama proses pemanasan dan pendinginan. Mulai dari austenite penuh, martensite mulai terbentuk ketika paduan didinginkan pada suhu awal martensite dengan suhu sekitar ( $\pm 290^{\circ}\text{K}$ ) (MS), dan selesai (MF) pada suhu ( $\pm 210^{\circ}\text{K}$ ). Ketika pada kondisi martensite dan terjadi pemanasan austenite terbentuk pada suhu ( $\pm 390^{\circ}\text{K}$ ) dan selesai (AF) pada suhu ( $\pm 435^{\circ}\text{K}$ ) (Otsuka, dkk., 2005). Perbandingan atom-atom Ni dan Ti idealnya yaitu 50% : 50%. NiTi sangat sensitif terhadap perubahan komposisi. Komposisi atom-atomnya mempengaruhi temperatur perubahan fasenya secara signifikan. Selain itu ketidakmurnian atom-atom penyusunnya juga mempengaruhi temperatur perubahan fase dan elastisitasnya (Pelton, 2003).

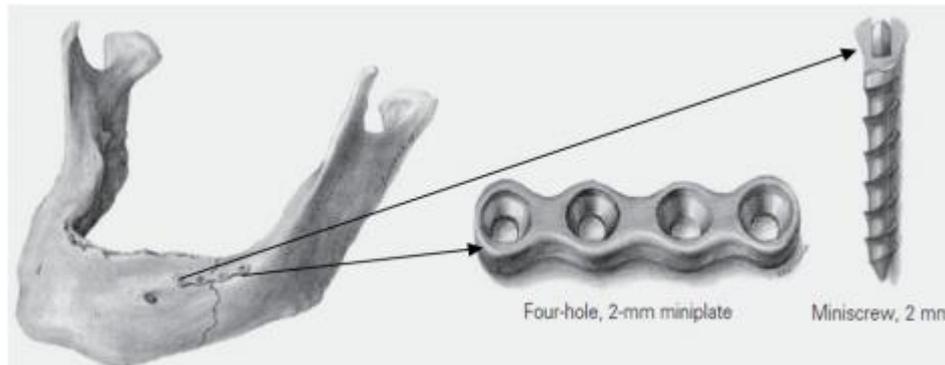
### **2.3 Manfaat Paduan NiTi**

Sifat superelastisitas yang membentuk efek memori, kompatibilitas biologis yang baik, dan ketahanan aus, paduan NiTi telah banyak digunakan dalam berbagai aplikasi, seperti pemanfaatan pada bidang teknik penerbangan, sipil, mikroelektronika, dan biomedis (Gouzheng Kang, 2015). Paduan NiTi saat ini banyak digunakan untuk implan medis dalam operasi trauma, ortopedi, dan obat gigi (Alexander, dkk., 2013). Paduan NiTi berpori menunjukkan potensi yang menjanjikan dalam penerapan implan tulang karena struktur berpori memungkinkan pertumbuhan jaringan tulang baru bersama dengan pengangkutan cairan tubuh, dengan demikian memastikan ikatan yang harmonis antara implan dan tubuh. Beberapa contoh penerapan paduan NiTi adalah sebagai berikut:

#### **a. Pelat Untuk Tulang Yang Patah**

Bentuk pelat memori digunakan untuk menyembuhkan dan memulihkan tulang yang patah pada bagian tertentu, dimana tidak mungkin untuk menerapkan gips seperti daerah wajah, hidung, rahang, dan mata. Pelat ini dimasukkan dengan fraktur dan diperbaiki dengan skrup perantara. Pelat ini mempertahankan penyelarasan asli tulang dan memungkinkan regenerasi sel. Ketika pelat ini dipanaskan, pelat paduan NiTi ini cenderung untuk memulihkan bentuk sebelumnya (karena bentuknya SMA), mengerahkan

kekuatan konstan dan seragam pada dua tulang yang rusak, sehingga tulang dapat bergabung membantu dalam proses penyembuhan (Bahraminasab, dkk., 2013). Bentuk pelat SMA dapat dilihat pada Gambar 2.2 di bawah ini.

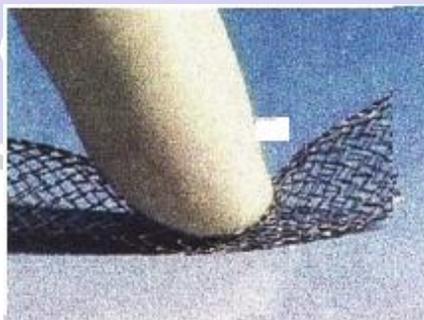


Gambar 2.2 Pelat untuk tulang yang patah

Sumber : (Bahraminasab, dkk., 2013)

**b. Stent (Ring Jantung)**

Stent digunakan dalam biomedis dimasukkan ke pembuluh darah arteri untuk membuat pembuluh darah jantung tetap terbuka sehingga pembuluh darah yang tadinya tersumbat (beku) akibat penumpukan kolesterol atau zat lain yang menempel pada dinding pembuluh dapat memperlancar peredaran darah (Wadood, 2016). Pada Gambar 2.3 di bawah ini menunjukkan bentuk sten (ring jantung) yang digunakan dalam bidang biomedis.



Gambar 2.3 Stent (Ring jantung)

Sumber : (Wadood, 2016)

**c. Kawat Pemandu**

Kawat pemandu, atau biasa disebut seperti selang lentur yang dilengkapi kamera diujungnya, sehingga dapat digunakan untuk memproyeksikan gambar didalam tubuh manusia seperti rongga mulut, tenggorokkan, usus, anus, dan lainnya (Wadood, 2016). Bentuk dari kawat pemandu dapat dilihat pada Gambar 2.4 di bawah ini.



Gambar 2.4 Kawat pemandu  
Sumber : (Wadood, 2016)

**d. Kawat Ortodontik**

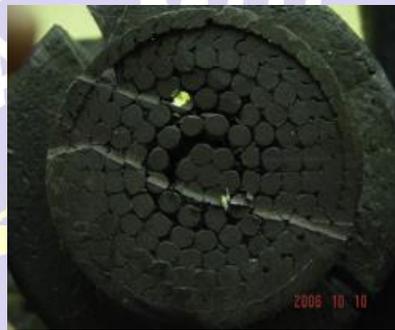
Kawat gigi digunakan untuk mengikat atau mengurung gigi. Gigi yang tidak rata, dapat tertata kembali dengan melakukan pemasangan kawat ortodontik ini. Dengan suhu dalam tubuh, kawat nitinol ini dapat berkontraksi ke bentuk aslinya, sehingga dapat menerapkan gaya konstan untuk menggerakkan gigi (Wadood, 2016). Kawat gigi yang biasa digunakan dalam memperbaiki gigi yang tidak rata dapat dilihat pada Gambar 2.5 di bawah ini.



Gambar 2.5 Kawat ortodontik  
Sumber : (Wadood, 2016)

**e. Kabel Tetap Mekanik**

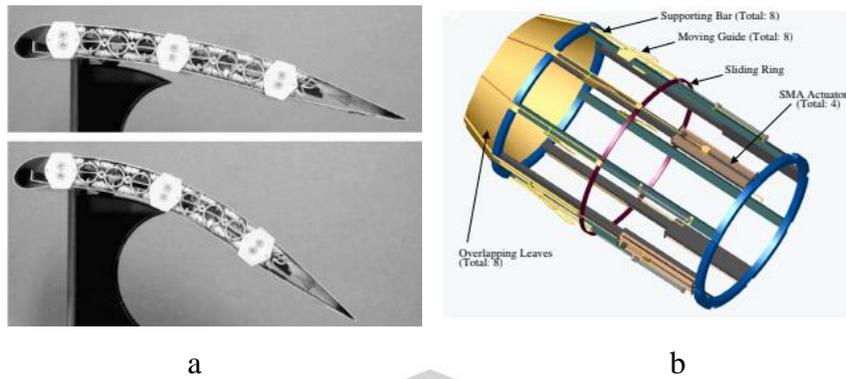
Penggunaan bahan SMA dalam rendaman di jembatan bentang ganda, dapat mengatasi beberapa keterbatasan perangkat konvensional berbasis baja, termasuk penahan kabel baja dan batang baja. Banyak insrastruktur sipil yang melibatkan penggunaan kabel struktural ini. Kabel redaman berbasis SMA telah digunakan sebagai redaman eksternal pada konstruksi jembatan gantung pada umumnya. (Menna, dkk., 2015). Bentuk dari kabel tetap mekanik dapat dilihat pada Gambar 2.6 dibawah ini.



Gambar 2.6 Kabel tetap mekanik  
Sumber : (Menna, dkk., 2015)

**f. Aktuator Otomotif**

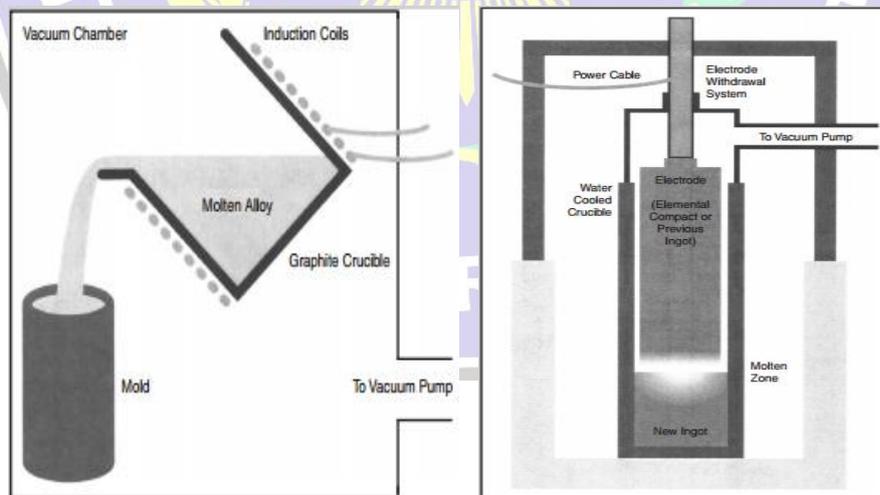
Paduan NiTi juga banyak dimanfaatkan sebagai aktuator dalam industri permesinan dan pesawat, karena sifatnya yang mempunyai laju respons regangan yang tinggi, lebih fleksibel dan tahan untuk siklus penggunaan yang lama. Paduan NiTi dipilih sebagai aktuator otomotif karena dapat menyesuaikan kondisi udara panas dan dingin. Pada pesawat terbang, sayap pesawat yang fleksibel dan nozzle yang digunakan untuk pengurangan kebisingan dalam mesin turbin gas juga terbuat dari bahan SMA, sebagaimana yang ditunjukkan pada Gambar 2.7. Paduan NiTi ini mendapat panas melalui pemanasan joule untuk mendapatkan kembali posisi semula. Dengan resistivitas listrik yang tinggi dari paduan NiTi, pemanasan joule disediakan dengan melewatkan arus listrik pada paduan NiTi tersebut (Sharma, dkk., 2015).



Gambar 2.7 Penggunaan bahan SMA pada pesawat terbang sebagai (a) morphing wing (Sofla, dkk., 2009) (b) Nozzel (Song, dkk., 2007)

## 2.4 Fabrikasi Paduan NiTi

Fabrikasi paduan NiTi merupakan proses produksi logam dengan melakukan beberapa tahap tertentu, dalam hal ini biasanya dilakukan untuk menyelidiki pengaruh komposisi Nikel (Ni) dan Titanium (Ti), terhadap karakter SME nitinol. Ada dua metode biasa digunakan dalam proses fabrikasi paduan NiTi yaitu *vacuum induction melting* (VIM), dan *vacuum arc remelting* (VAR). Ilustrasi proses produksi dari metode *vacuum induction melting* (VIM), dan *vacuum arc remelting* (VAR) dapat dilihat dari Gambar 2.7 di bawah ini.



Gambar 2.8 *Vacuum Induction Melting* (VIM), dan *Vacuum Arc Remelting* (VAR)

Sumber : (Pelton, dkk., 2003)

Sensitivitas suhu transformasi untuk komposisi paduan merupakan pertimbangan yang penting dalam memilih metode peleburan paduan. Metode peleburan harus menjadi satu dimana bahan lebur harus tercampur dengan baik untuk mencapai ingot homogenitas dan sifat keseragaman. Pada prinsipnya, kedua metode *vacuum induction melting* (VIM), dan *vacuum arc remelting* (VAR) ini hampir sama, yaitu sama-sama mencampurkan Ni dan Ti di dalam ruang vakum hingga komponen menjadi homogen, kemudian didinginkan hingga temperatur ruang (Pelton,dkk., 2003).

Proses peleburan pada metode VIM menggunakan induksi listrik yang berada di sekitar tabung tempat pencairan logam pada ruang vakum. Saat logam mencair dan paduan menjadi homogen kemudian dituang pada cetakan samapai temperatur ruang. Peleburan dengan metode VAR, NiTi digunakan sebagai elektroda yang bertindak sebagai katode, sedangkan cetakan dalam ruang vakum bertindak sebagai anode. Setelah mendapat energi listrik bertekanan tinggi, logam NiTi ini dapat mencair menjadi paduan pada cetakan. Dalam metode VAR air digunakan sebagai pendingin yang berada disekeliling cetakan dalam ruang vakum. Pencairan logam dengan metode VAR dapat menghasilkan kemurnian paduan yang sangat tinggi.

Kekurangan dari metode ini adalah seluruh logam tidak mencair pada waktu yang sama. Karena itu, logam dicairkan ulang beberapa kali untuk mendapatkan cairan logam yang sama. *Vacuum arc remelting* juga digunakan untuk proses lanjutan dari metode VIM (Pelton, dkk., 2003).

## **2.5 Simulasi Dinamika Molekuler**

Simulasi dinamika molekuler (MD) adalah suatu teknik simulasi computer untuk mempelajari gerakan fisik atom dan molekul, seperti posisi atom dan kecepatan pada tingkat mikroskopis. Kondisi batas periodik diberikan pada sisi-sisi terluar bidang simulasi. Dengan kondisi tersebut, atom-atom yang berada pada posisi terluar salah satu bidang simulasi dapat melintas dan berinteraksi dengan atom-atom lain pada bidang yang berlawanan. Simulasi dilakukan dengan skema NVT (Nose, 1984 dan Hoover, 1985). Skema NVT mengkondisikan simulasi

dilakukan dengan jumlah atom  $N$ , volume  $V$ , dan temperatur  $T$  konstan. Perangkat lunak yang digunakan dalam simulasi dinamika molekuler yaitu *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) (Plimpton, 1995).

Metode simulasi Dinamika molekuler didasarkan pada persamaan gerak newton yaitu persamaan gerak,  $F = m \cdot a$  dimana  $F$  adalah gaya yang diberikan pada partikel,  $m$  adalah massa, dan  $a$  adalah akselerasinya. Persamaan dasar dari metode dinamika molekuler adalah sebagai berikut:

$$\ddot{r}_i = f_i/m_i \quad (2.1)$$

Di mana  $r_i$  dan  $m_i$  adalah posisi dan massa dari atom  $i$ , dan  $f_i$  adalah gaya pada atom  $i$  (Uehara, 2010).  $f_i$  pada persamaan 2.1 dapat direpresentasikan sebagai:

$$f_i = -\partial\phi/\partial r_i \quad (2.2)$$

Di mana  $\Phi$  adalah energi potensial yang ada di dalam sistem. Persamaan ini diselesaikan dengan menggunakan perhitungan numerik (Uehara, 2010). Sedangkan algoritma yang sering digunakan dalam simulasi dinamika molekuler untuk menghitung nilai posisi atom  $r_i$  dan kecepatan atom  $v_i$  pada saat  $t+\Delta t$  adalah algoritma Verlet dengan persamaan:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + F_i(t)\Delta t^2/(2m_i) \quad (2.3)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + (F_i(t + \Delta t) + F_i(t))\Delta t/(2m_i) \quad (2.4)$$

Di mana  $(t)$  adalah nilai waktu pada  $t$  dan  $\Delta t$  adalah selang waktu (Uehara, 2010).  $v$  adalah kecepatan dan  $F_i$  adalah gaya yang bekerja pada atom  $i$ .

## 2.6 Energi Potensial Antar Atom

Dalam simulasi dinamika molekuler, atom-atom dapat berinteraksi dengan atom yang lain karena pengaruh suatu medan gaya seperti gaya potensial. Jika atom-atom itu memiliki jarak yang terlalu dekat maka gaya resultannya adalah

saling tolak menolak dan jika keadaan sebaliknya jika jarak atom terlalu jauh maka gaya resultannya akan saling tarik menarik. Dalam menghitung interaksi pasangan atom dari logam dan paduan logam, penelitian ini menggunakan persamaan Embedded Atom Method (EAM) dari Daw dan Baskes (Daw dan Baskes, 1984). Dengan demikian, total energi  $E_i$  pada atom  $i$  diberikan oleh:

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (2.5)$$

Di mana  $F_i$  adalah energi yang melekat pada atom  $i$  yang mana dari pengaruh  $\rho_{h,i}$  atau kerapatan elektron pada atom.  $\phi_{ij}$  adalah interaksi energi potensial dari atom sekitar dan  $i, j$  adalah tipe dari atom.  $R_{ij}$  adalah jarak antara atom  $i$  dan  $j$  dan  $\rho_{h,i}$  adalah densitas atau kerapatan elektron yang terdapat pada atom  $i$  (Daw dan Baskes, 1984).

Sedangkan energi total dalam sistem merupakan penjumlahan dari total energi potensial dan total energi kinetik. Untuk energi kinetik pada atom  $i$  memiliki persamaan:

$$K_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad (2.6)$$

Untuk energi kinetik keseluruhan dalam sistem:

$$K = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 \quad (2.7)$$

Di mana  $m_i$  dan  $v_i$  merupakan massa dan kecepatan dari atom  $i$ .