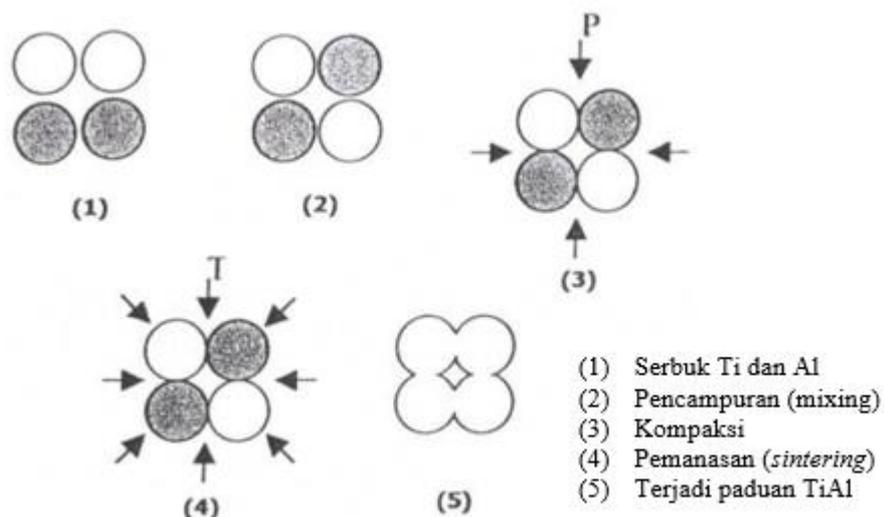


BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA

2.1. Struktur Paduan TiAl

Senyawa TiAl tercipta sebab kekuatan jalinan antar atom yang tidak sejenis lebih kokoh daripada jalinan atom yang sejenis. Kuatnya jalinan yang tidak sejenis menimbulkan senyawa TiAl membentuk struktur tertib. Kedatangan susunan oksida yang tipis serta kokoh pada permukaannya menciptakan ketahanan terhadap area suasana serta area korosif semacam laut (Fortnum & Mikola, 1986). Proses pembuatan serta pembuatan paduan titanium relatif susah sebab watak titanium yang gampang terserang faktor pengganggu (*impurities*) semacam hidrogen, oksigen serta nitrogen yang menimbulkan kerapuhan, hingga pemrosesan dengan temperatur besar, ialah metalurgi serbuk (*sintering*) wajib dicoba pada keadaan yang bisa menjauhi difusi gas ke dalam logam (Millet & Bourne, 2001). Metalurgi bubuk artinya metode pembuatan material yg membentuk suatu produk melalui proses pencampuran material bubuk (pembuatan bubuk), kompaksi serta pemanasan melalui proses *sintering* buat memperoleh ikatan antar atom, secara grafis ditampilkan di gambar 2.1 di bawah ini.



Gambar : 2.1 Tahapan pepaduan proses metalurgi bubuk.

Sumber: (Raharsetyadi, 2003)

Korosi didefinisikan sebagai penurunan mutu logam akibat reaksi reaksi elektrokimia menggunakan lingkungan yang hampir selalu mengandung air. Korosi pada bagian atas logam ternyata masih dapat terjadi meskipun elektrolit cair tidak terdapat, hal ini dianggap korosi kering (Maziarz, dkk., 2004), prosedur oksidasi logam merupakan logam dan oksigen oksida logam. Oksida yang praktis menguap terbentuk pada permukaan logam. tetapi segera berubah sebagai gas. Akibatnya permukaan logam habis sama sekali. Laju reaksi tersebut tidak menurun, bahkan umumnya bertambah Bila suhu meningkat (Widharto, 2001). Bahan Titanium sangat reaktif terhadap oksigen, sebagai akibatnya praktis teroksidasi. Oksida titanium tidak simpel menguap, sebagai akibatnya di bagian atas logam selalu tertutup oleh lapisan oksida pelindung karena itu bahan ini sangat sesuai buat konstruksi peralatan yg bertenaga dan tahan karat. pada paduan TiAl yg di bentuk menggunakan proses metalurgi serbuk pada suhu tinggi terbentuk lapisan oksida di permukaannya (Millet & Bourne, 2001)

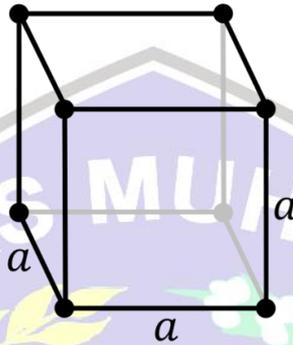
Logam paduan TiAl merupakan salah satu material yang baik digunakan untuk kebutuhan mekanik. Transisi antara fase *austenite* dan *martensite* mempunyai mekanisme yang sangat penting pada logam *shape memory alloy*. Fakta-fakta ini memberi kebutuhan penelitian dasar yang lebih menyeluruh tentang mekanisme transisi pada fase *austenite* dan *martensite* dari paduan logam TiAl (Saitoh, dkk., 2010).

2.2. Struktur Kristal

Struktur kristal merupakan susunan atom-atom, ion atau molekul di dalam suatu material. Struktur kristal dibagi menjadi lebih kecil lagi yang disebut dengan *unit cell*. Sedangkan *unit cell* merupakan kelompok partikel terkecil di dalam material yang membentuk pola berulang dalam sumbu x, y, z. Panjang lengan sumbu x, y, z pada *unit cell* disebut dengan konstanta kisi (*a*) (Hook & Hall, 2010). Amorf adalah jenis padatan yang susunan atom atau partikelnya tersusun secara acak serta tak teratur. misalnya kaca, karet serta plastik (Surya,2009).

a. Simple Cubic

Struktur kristal *simple cubic* merupakan *unit cell* yang terdiri dari satu atom yang terbagi di delapan sudut kubus seperti yang ditunjukkan pada gambar 2.2 di bawah ini. Oleh karena itu, sel satuan *simple cubic* mengandung total satu atom ($\frac{1}{8} \times 8$).

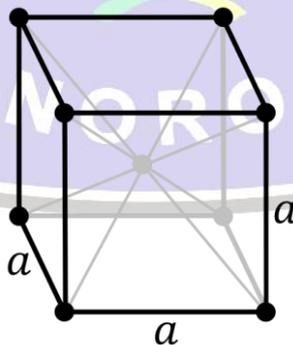


Gambar : 2.2 Konfigurasi struktur kristal *simple cubic*

Sumber : (Mayer, 2007)

b. Body-Centered Cubic

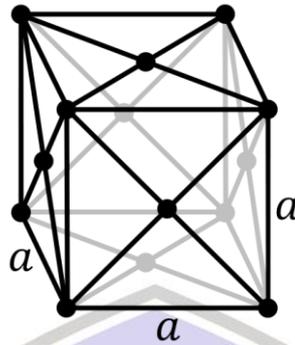
Pada gambar 2.3 di bawah ini menunjukkan konfigurasi struktur kristal *body centered-cubic* yang terdiri dari satu atom yang berada di tengah kubus dan 1/8 atom terletak di delapan sudut kubus. Struktur kristal *body centered-cubic* ini memiliki total bersih 2 atom per *unit cell* ($\frac{1}{8} \times 8 + 1$).



Gambar : 2.3 Konfigurasi struktur kristal *body-centered cubic*

Sumber : (Mayer, 2007)

c. Face-Centered Cubic



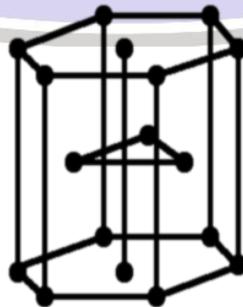
Gambar : 2.4 Konfigurasi struktur kristal *face-centered cubic*

Sumber : (Mayer, 2007)

Gambar 2.4 diatas menunjukkan konfigurasi struktur kristal *face-centered cubic* yang terdiri dari $\frac{1}{2}$ atom yang terletak disetiap sisi kubus dan 1 atom yang terbagi di 8 sudut kubus. Jumlah seluruh atom pada struktur *face-centered cubic* adalah 4 atom.

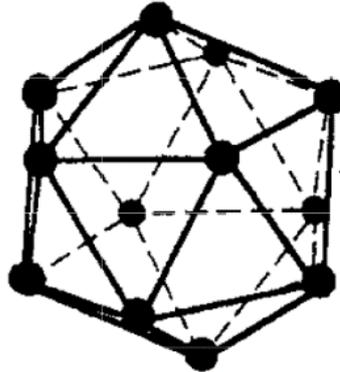
d. Hexagonal Close-Packed (HCP)

Struktur kristal *hexagonal close-packed (HCP)* merupakan *unit cell* dengan bentuk segi enam dan memiliki 2 atom yang terbagi disetiap sudut-sudut di bagian atas dan bawah *unit cell* yang terbagi menjadi $\frac{1}{6}$ atom setiap sudut. $\frac{1}{2}$ atom berada di atas dan bawah *unit cell*. *Hexagonal close-packed* memiliki 3 atom yang terletak di tengah-tengah *unit cell*. Total atom dalam struktur kristal *hexagonal close-packed* adalah 6 atom (Hook & Hall, 2010). Konfigurasi struktur kristal *hexagonal close-packed* dapat dilihat pada gambar 2.5.



Gambar : 2.5 Konfigurasi struktur kristal *hexagonal close-packed*

e. Icosahedral



Gambar : 2.6 Konfigurasi struktur kristal *icosahedral*

Sumber: (Hiraga, dkk., 1999)

Struktur kristal *icosahedral* terbentuk dari 20 segitiga yang saling berhubungan satu sama lain antara setiap sudutnya seperti yang ditunjukkan pada gambar 2.6 di atas. Terdapat total 12 atom yang terletak pada setiap puncak atau sudut-sudut struktur kristal icosahedral (Hiraga, Ohsuna, & Sugiyama, 1999).

2.3. Pengujian Tarik

a. Uji Tarik

Uji tarik adalah pemberian gaya atau tegangan tarik kepada material dengan maksud untuk mengetahui atau mendeteksi kekuatan dari suatu material. Tegangan tarik yang digunakan adalah tegangan aktual eksternal atau perpanjangan sumbu benda uji. Uji tarik dilakukan dengan cara penarikan uji dengan gaya tarik secara terus menerus, sehingga bahan (perpajangannya) terus menerus meningkat dan teratur sampai putus, dengan tujuan menentukan nilai tarik. Untuk mengetahui kekuatan tarik suatu bahan dalam pembebanan tarik, garis gaya harus berhimpit dengan garis sumbu bahan sehingga pembebanan terjadi beban tarik lurus. Tetapi jika gaya tarik sudut berhimpit maka yang terjadi adalah gaya lentur.

Pada uji tarik benda uji diberikan beban gaya tarik satu sumbu yang bertambah secara kontinyu, bersamaan dengan itu dilakukan pengamatan mengenai perpanjangan yang dialami benda uji. seperti terlihat pada gambar 2.7 di bawah ini ([http:// belajar.metalurgi.blogspot.com](http://belajar.metalurgi.blogspot.com)).



Gambar : 2.7 Alat Uji Tarik

Sumber: (<http://www.scribd.com>)

b. Tegangan-Regangan Teknis

Sifat-sifat mekanik material yang dikuantifikasikan salah satunya dengan kuat tarik dapat diperoleh dengan pengujian tarik. Pada pengujian tarik uniaksial atau uji satu arah, benda uji diberi beban atau gaya tarik pada satu arah dan gaya yang diberikan bertambah besar secara kontinu. Pada saat bersamaan benda uji akan bertambah panjang dengan bertambah gaya yang diberikan.

Berdasarkan hasil pengujian tarik yaitu berupa data gaya dan perpanjangan, maka dapat dianalisis untuk menentukan tegangan dan regangan secara teknis, yaitu persamaannya:

- Tegangan Teknis

Tegangan yang didapatkan dari kurva tegangan teoritik adalah tegangan yang membujur rata-rata dari pengujian tarik. Tegangan tersebut diperoleh dengan

cara membagi beban dengan luas awal penampang lintang benda uji itu. (fhianunikoe.blogspot.com)

$$\sigma = \frac{P}{A_0} \quad (\text{N/mm}^2) \dots\dots\dots(2.1)$$

Dimana,

P = gaya yang diberikan pada benda uji (N)

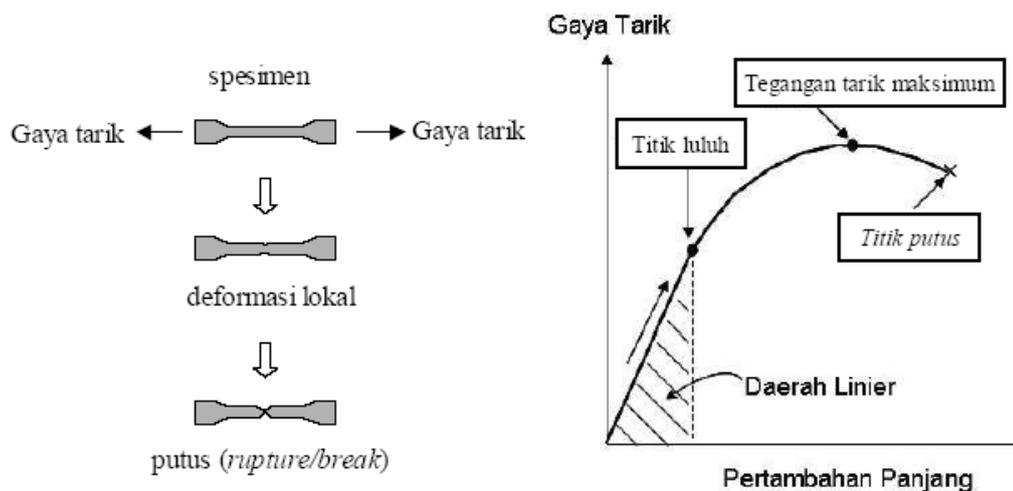
A_0 = luas penampang awal benda uji (mm^2)

- Regangan Teknis

Regangan yang didapatkan adalah regangan linear rata-rata, yang diperoleh dengan cara membagi perpanjangan (*gage length*) benda uji dengan panjang awal.

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L - L_0}{L_0} \dots\dots\dots(2.2)$$

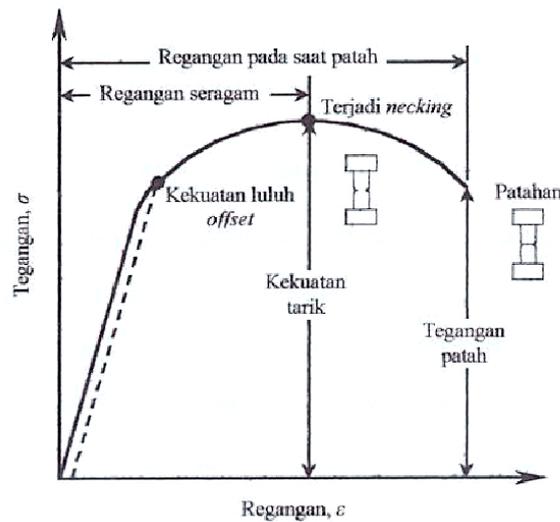
Jika terus menarik suatu benda uji sampai putus, akan mendapatkan profil tarikan yang lengkap yang berupa kurva seperti digambarkan pada Gambar 2.8. Kurva ini menunjukkan hubungan antara gaya tarikan dengan perubahan panjang. Profil ini sangat diperlukan dalam desain yang memakai bahan tersebut.



Gambar 2.8 Gambar singkat uji tarik

Sumber: (<http://fhianunikoe.blogspot.com>)

Memudahkan pembahasan, Gambar 2.8 dimodifikasi dari hubungan antara gaya tarikan dan pertambahan panjang menjadi hubungan antara tegangan mekanik dan regangan (*stress vs strain*), seperti diperlihatkan pada gambar 2.9. berikut ini.



Gambar 2.9 Kurva tegangan-regangan teknis

Sumber: (<http://fhianunikoe.blogspot.com>)

Dalam kondisi tarik normal, deformasi biasanya tidak stabil, necking lokal spesimen terjadi setelah deformasi plastis yang relatif kecil dan kemudian deformasi terkonsentrasi di zona necking. Deformasi yang tidak homogen seperti itu secara alami menyebabkan penurunan perpanjangan dan fraktur berikutnya. Oleh karena itu, deformasi stabil, deformasi homogen sepanjang panjang pengukur spesimen tanpa leher, adalah kondisi yang diperlukan untuk superplastisitas. *Local necking*, yaitu suatu proses penurunan secara local diameter bahan yang dinamakan penyempitan. Hal ini terjadi karena kenaikan kekuatan yang disebabkan oleh pengerasan regangan yang akan berkurang, untuk mengimbangnya penurunan permukaan penampang melintang. Pembentukan penyempitan menimbulkan keadaan tegangan triaksial pada daerah yang bersangkutan.

c. Kekuatan Tarik

Kekuatan tarik atau kekuatan tarik maksimum (*Ultimate Tensile Strength*) merupakan nilai yang paling tak jarang dituliskan menjadi hasil suatu uji tarik, namun dalam kenyataannya nilai tadi kurang bersifat fundamental pada kaitannya menggunakan kekuatan material. Untuk logam ulet, kekuatan tariknya wajib dikaitkan menggunakan beban maksimum, dimana logam bisa menunda beban sesumbu buat keadaan yg sangat terbatas. Pada tegangan yg lebih kompleks, kaitan nilai tadi menggunakan kekuatan logam mini sekali kegunaannya. Kecenderungan yang sering ditemui merupakan, mendasarkan rancangan tidak aktif logam giat dalam kekuatan luluhnya. Namun lantaran jauh lebih mudah memakai kekuatan tarik buat memilih kekuatan bahan, maka metode ini lebih sering dipakai.

Kekuatan tarik adalah besarnya beban maksimum dibagi dengan luas penampang lintang awal benda uji. (<http://belajar.metalurgi.blogspot.com>)

$$\sigma_u = \frac{P_{max}}{A_o}, \text{ (N/mm}^2\text{) } \dots\dots\dots(2.3)$$

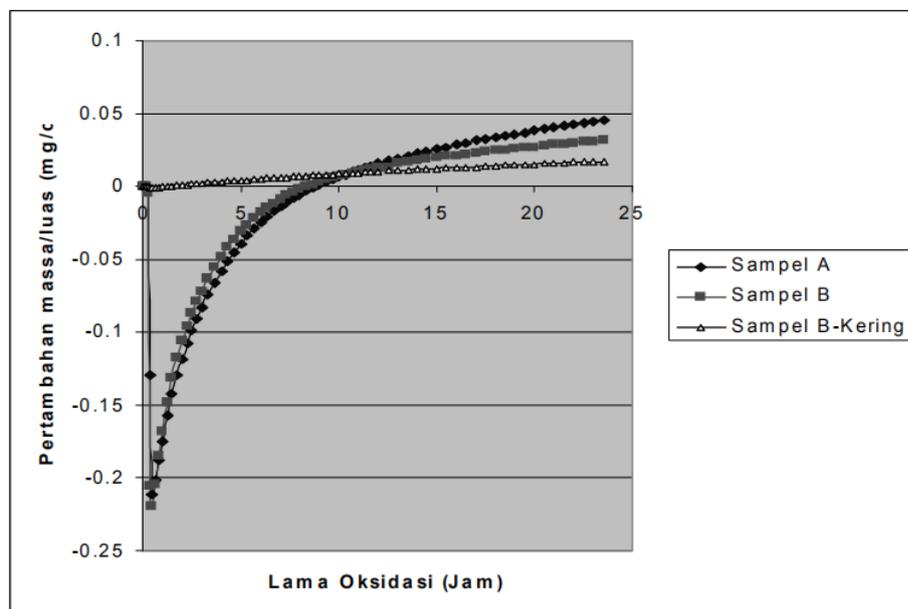
Korelasi empiris yang diperluas antar kekuatan tarik dengan sifat mekanik lainnya seperti kekerasan dan kekuatan lelah, sering dipergunakan. Hubungan tersebut hanya terbatas pada hasil penelitian beberapa jenis material.

2.4. Perkembangan Riset Paduan TiAl

Sample paduan TiAl setelah *disintering* menghasilkan pori pada permukaannya, sehingga menyebabkan masuknya air saat pengamplasan. Hal ini mengakibatkan pada awal proses oksidasi 850°C, terjadi penurunan kurva yang drastis. Artinya sampel TiAl ini mengalami penurunan massa.

Pada dasarnya sampel TiAl sudah terjadi proses oksidasi sejak awal, akan tetapi terjadinya penurunan kurva menggambarkan bahwa penguapan yang terjadi lebih besar dibandingkan oksidasinya atau pengurangan massa akibat penguapan lebih besar dibandingkan penambahan massa akibat proses oksidasi. Setelah mencapai titik tertentu penambahan massa sampel mulai tampak, hal ini

menunjukkan bahwa proses penguapan sudah selesai. Uji korosi ini dilakukan selama 24 jam pada suhu 850°C.



Gambar : 2.10 Kurva TiAl hasil uji korosi

Sumber: (Sulistioso, dkk., 2007)

Jika dilakukan lebih lama lagi maka akan terbentuk kurva dimana pertambahan beratnya menjadi cenderung konstan, artinya tidak terjadi lagi oksidasi pada material seiring dengan kenaikan suhu. Hal ini menunjukkan bahwa lapisan oksidasi yang terbentuk melindungi lapisan bawah dari permukaan material TiAl, dari pengamatan uji korosi pada sampel B yang di amplas kering, yaitu saat pengamplasan tidak menggunakan air. Terlihat bahwa tidak terjadi penurunan berat di awal pemanasan. Pada suhu 1200°C selama 2 jam dengan menggunakan gas argon, paduan TiAl dengan komposisi Al 2% ketahanan korosinya tidak memberikan perubahan yang signifikan.

2.5. Simulasi Dinamika Molekuler

Simulasi dinamika molekuler (MD) merupakan suatu teknik simulasi yang dilakukan pada tingkat atomik dengan menggunakan persamaan hukum-hukum dalam fisika klasik. Salah satu contoh perangkat lunak yang menggunakan metode

dinamika molekuler adalah *Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)* (Plimpton, 1995). Simulasi dinamika molekuler ini dapat digunakan untuk memahami berbagai jenis perubahan fase dan transformasi dari sudut pandang atomik (Shimono, dkk., 2013). Metode dinamika molekuler mulai disusun pada tahun 1950an dan sampai sekarang ini telah dikembangkan menjadi lebih kompleks. Pada masa saat ini, simulasi ini dapat diterapkan dalam bidang ilmu material (Adcock dan McCammon, 2006).

Persamaan dasar dari simulasi dinamika molekuler adalah persamaan gerak Newton untuk semua atom di dalam sistem:

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

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 Φ 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 saat t dan Δt adalah selang waktu (Uehara, 2010). v merupakan kecepatan dan F_i merupakan 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 antar atom, 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 merupakan pengaruh dari $\rho_{h,i}$ atau kerapatan elektron pada atom i . ϕ_{ij} merupakan interaksi energi potensial dari atom sekitar, sedangkan i, j merupakan tipe dari atom. R_{ij} merupakan jarak antara atom i dan j (Daw dan Baskes, 1984). Kerapatan elektron dari atom i diperoleh dari jumlah kerapatan elektron dari atom tetangga j .

$$\rho_{h,i} = \sum_{j(\neq i)} \rho_j^a(R_{ij}) \quad (2.6)$$

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

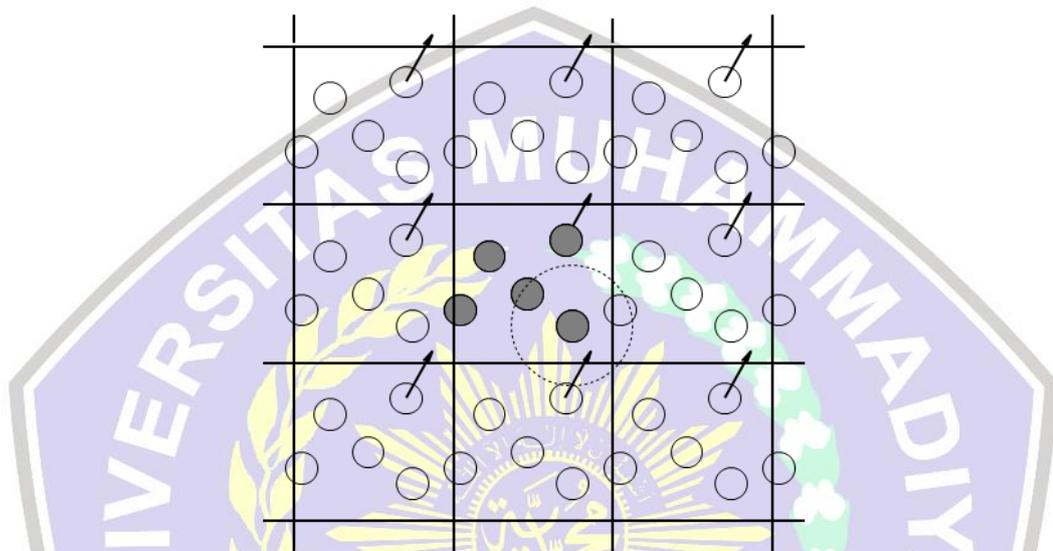
$$K_i = \frac{1}{2} m_i v_i^2 \quad (2.7)$$

Persamaan untuk energi kinetik keseluruhan di dalam sistem:

$$K = \frac{1}{2} \sum_i^N m_i v_i^2 \quad (2.8)$$

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

2.7. Kondisi Batas Periodik



Gambar : 2.11 Kondisi Batas Periodik. Saat partikel keluar dari bidang simulasi, partikel dari bidang berlawanan bergerak menggantikannya

Sumber: (Allen, 2004)

Kondisi batas periodik dalam simulasi dinamika molekuler memungkinkan atom pada suatu sisi bidang simulasi dapat keluar dan digantikan oleh atom pada sisi bidang yang berlawanan. Oleh karena itu, sistem simulasi seolah-olah mempunyai dimensi yang sangat besar atau tidak terbatas dengan menggunakan jumlah atom yang terbatas. Sebagai contoh pada gambar 2.11, partikel berwarna abu-abu dengan anak panah menunjukkan atom yang keluar dari sistem simulasi dan atom berwarna putih dengan anak panah menunjukkan atom yang masuk menggantikannya dari arah yang berlawanan.