

BAB 2

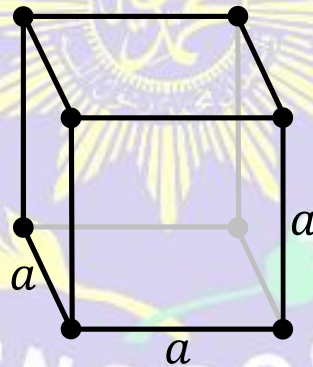
TINJAUAN PUSTAKA

2.1 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).

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 2.1 dibawah ini. Oleh karena itu, sel satuan *simple cubic* mengandung total satu atom ($\frac{1}{8} \times 8$).

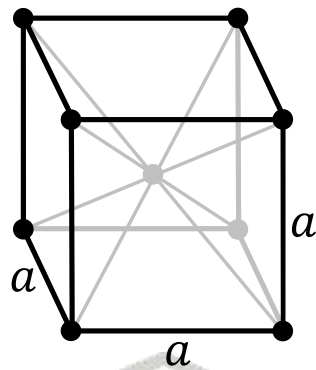


Gambar 2. 1 Konfigurasi stuktur kristal simple cubic

Sumber : (Mayer, 2007)

b. Body-centered cubic

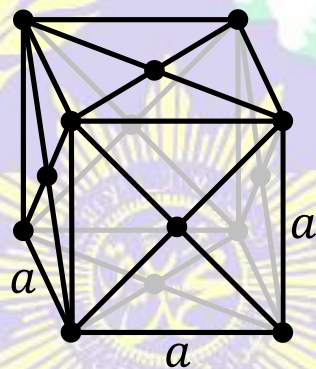
Pada gambar 2.2 di bawah ini menunjukkan konfigurasi struktur kristal *body centered-cubic* yang terdiri dari satu atom yang berada di tengah kubus dan 1/8 atom terletak di delapan sudut kubus. Struktur kristal *body centered-cubic* ini memiliki total bersih 2 atom per *unit cell* ($\frac{1}{8} \times 8 + 1$).



Gambar 2. 2 Konfigurasi struktur kristal *body-centered cubic*

Sumber : (Mayer, 2007)

c. *Face-centered cubic*



Gambar 2. 3 Konfigurasi struktur kristal *face-centered cubic*

Sumber : (Mayer, 2007)

Gambar 2.3 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)

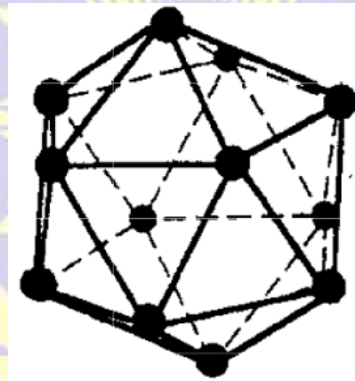
Struktur kristal *hexagonal close-packed (hcp)* merupakan *unit cell* dengan bentuk segi enam dan memiliki 2 atom yang terbagi disetiap sudut-sudut di bagian atas dan bawah *unit cell* yang terbagi menjadi $\frac{1}{6}$ atom setiap sudut. $\frac{1}{2}$ atom berada di atas dan bawah *unit cell*. *Hexagonal 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 2.4.



Gambar 2. 4 Konfigurasi struktur kristal *hexagonal close-packed*

e. *Icosahedral*



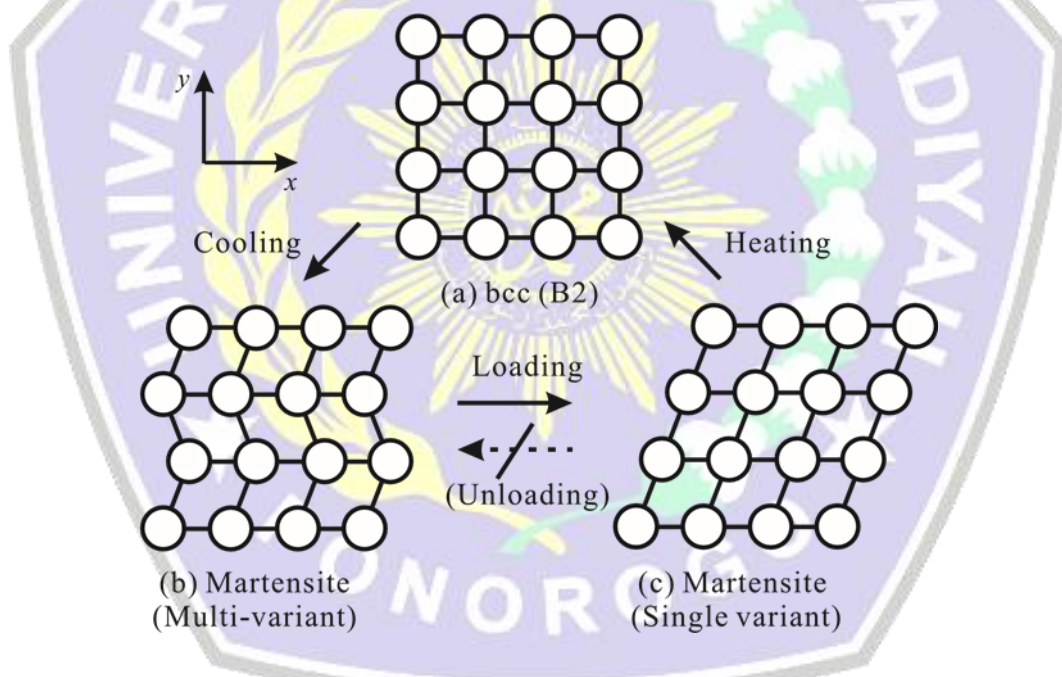
Gambar 2. 5 Konfigurasi struktur kristal *icosahedral*

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 2.5 diatas. Terdapat total 12 atom yang terletak pada setiap puncak atau sudut-sudut struktur kristal *icosahedral* (Hiraga, Ohsuna, & Sugiyama, 1999).

2.2. Struktur Paduan NiTi-Al

Paduan NiTi-Al merupakan paduan logam yang tersusun dari atom-atom *nikel (Ni)* dan *titanium (Ti)* serta *Aluminium (Al)*. Dalam tabel periodik, unsur *nikel dan titanium serta Aluminium (Al)* berturut-turut memiliki nomor atom 28 dan 22 serta 13 dengan massa atom 58.7 g/mol untuk nikel dan 47.9 g/mol untuk titanium serta 26.9 g/mol untuk Aluminium. Pada temperatur rendah dan tinggi struktur kristal NiTi-Al disebut dengan *martensite* dan *austenite* (Kneissl, dkk., 2008). Paduan logam NiTi mempunyai titik leleh pada temperatur sekitar 1300°C atau 1573 K (Barras & Myers, 2000). Logam ini termasuk dalam keluarga *shape memory alloy (SMA)* atau logam yang dapat mengingat bentuk struktur kristalnya selama proses solidifikasi. Ilustrasi mekanisme dari *shape memory alloy* bisa dilihat pada gambar 2.6.



Gambar 2. 6 Ilustrasi deformasi dan pemulihan dari *shape memory alloy*

Sumber: (Uehara, 2010)

Struktur kristal yang dimiliki paduan NiTi ini adalah *body-centered cubic* atau B2. Gambar 2.6 (b) di atas menunjukkan struktur kristal B2 pada fase *martensite* yang mempunyai arah tegangan positif dan negatif pada struktur kristalnya sepanjang sumbu-x setelah proses pendinginan selesai tanpa merusak ikatan atom atau biasa disebut *twinning*. Sedangkan pada gambar 2.6 (c)

menunjukkan perubahan arah tegangan pada struktur kristal B2 saat diberikan beban. Ketika beban dilepaskan, tegangan pada struktur kristal tidak kembali pada kondisi semula (kondisi pada gambar 2.6 (b)) kecuali sedikit pemulihan elastis. Ketika logam ini dipanaskan, struktur kristal B2 *martensite* mengalami perubahan menjadi struktur kristal B2 *austenite* yang ditunjukkan pada gambar 2.6 (a) (Uehara, 2010).

Logam paduan NiTi 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 NiTi (Saitoh, dkk., 2010).

2.3. Penambahan Unsur Lain pada Paduan NiTi

Penambahan unsur lain pada paduan NiTi antara lain adalah dengan unsur Zr, Cu, Al (Debdutta Lahiri, dkk, 2014). Penambahan unsur Al pada paduan NiTi ini akan disimulasikan dengan berbagai variasi konsentrasi sebagaimana penelitian ini ditulis.

2.4. 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 .

2.5. Elastisitas dan Plastisitas Bahan

Menurut Soedjo (2004:33) yang menyatakan bahwa bahan elastis adalah bahan yang mudah diregangkan serta cenderung pulih ke keadaan semula, dengan mengenakan gaya reaksi elastisitas atas gaya tegangan yang meregangkannya. Pada hakekatnya semua bahan memiliki sifat elastik meskipun boleh jadi amat sukar diregangkan. Sedangkan menurut Saroyo (2002:318) sifat elastik adalah kemampuan benda untuk kembali ke bentuk awalnya segera setelah gaya luar yang diberikan benda itu dihilangkan. Elastisitas adalah sifat perubahan yang permanen, yaitu sifat untuk melawan deformasi yang terjadi. Sebuah benda

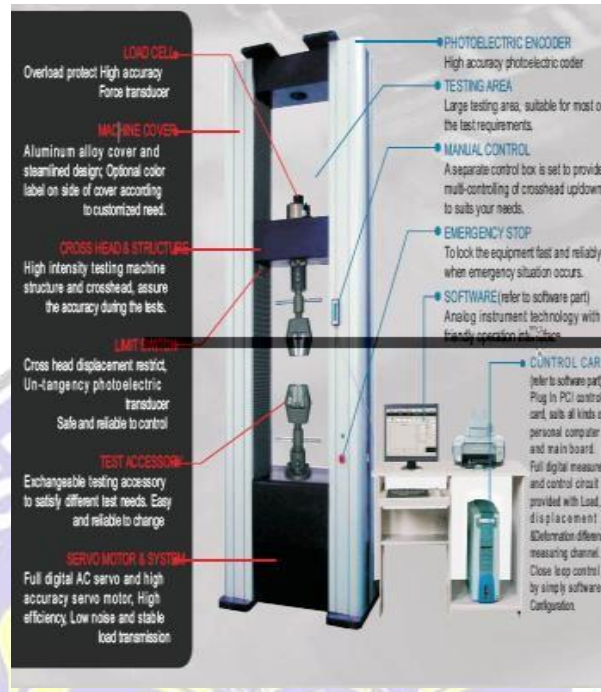
dikatakan elastik sempurna jika setelah gaya penyebab perubahan bentuk dihilangkan benda akan kembali ke bentuk semula. Sekalipun tidak terdapat benda yang elastik sempurna, tetapi banyak benda yang hampir elastik sempurna, yaitu sampai deformasi yang terbatas disebut limit elastik. Jika benda berdeformasi diatas limit elastiknya, dan apabila gaya-gaya dihilangkan, maka benda tersebut tidak lagi kembali ke bentuk semula. Sebenarnya perbedaan antara sifat elastis dan plastis hanyalah terletak pada tingkatan dalam besar atau kecilnya deformasi yang terjadi. Blatt (1986:179) menyatakan bahwa suatu deformasi dikatakan elastik jika (i) deformasi merupakan proposional dengan gaya penyebabnya, (ii) bekerjanya gaya, maka deformasi diabaikan.

2.6. Tegangan, Regangan dan Modulus Elastisitas

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 (*tensile strength*) 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. Hasil uji tarik tersebut mencatat fenomena hubungan antara tegangan-regangan yang terjadi selama proses uji tarik dilakukan. Mesin uji tarik sering diperlukan dalam kegiatan *engineering* untuk mengetahui sifat- sifat mekanik suatu material. Mesin uji tarik terdiri dari beberapa bagian pendukung utama, diantaranya : kerangka, mekanisme pencekam spesimen, sistem penarik dan mekanisme, sertasistem pengukur. Uji tarik banyak dilakukan untuk melengkapi informasi rancangan dasar kekuatan suatu bahan dan sebagai data pendukung bagi spesifikasi bahan. Pada uji tarik benda uji diberi beban gaya tarik sesumbu yang bertambah secara kontiniu, bersamaan dengan itu dilakukan

pengamatan mengenai perpanjangan yang dialami benda uji, seperti terlihat pada Gambar 2.7.



Gambar 2. 7 Alat uji tarik

(<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.

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

Dimana,

P = gaya yang diberikan pada benda uji (N)

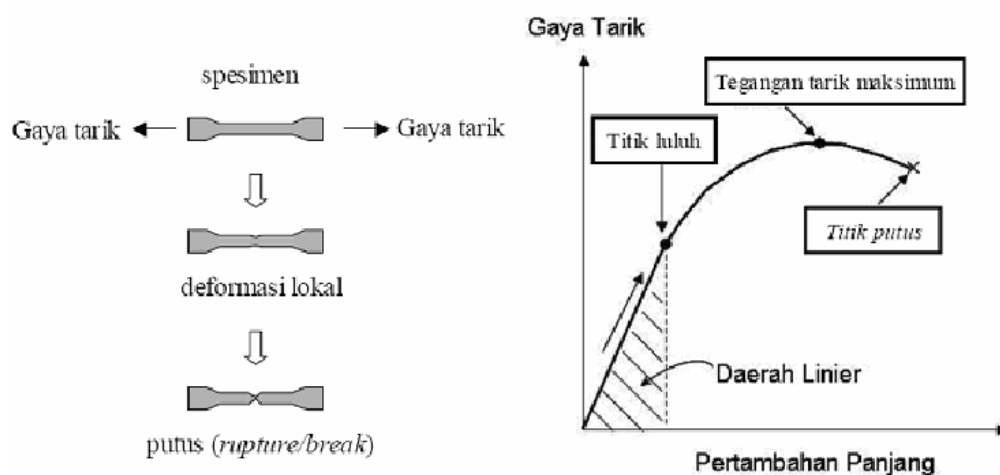
A_0 = luas penampang awal benda uji (mm^2)

- Regangan Teknis

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

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L - L_0}{L_0}$$

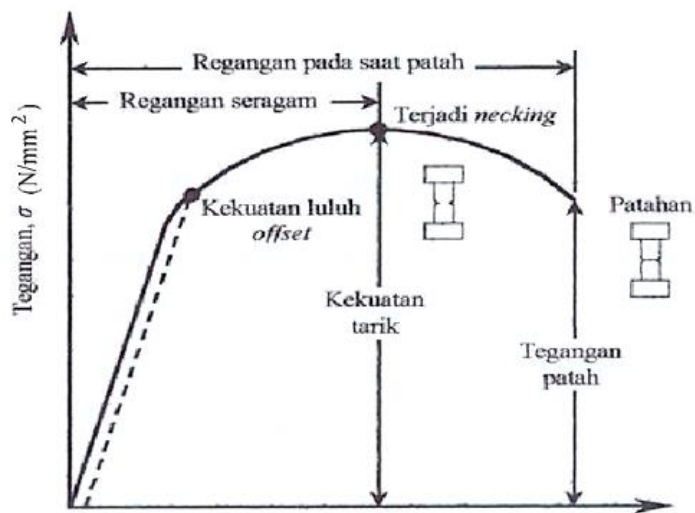
Jika terus menarik suatu benda uji sampai putus, akan mendapatkan profil tarikan yang lengkap yang berupa kurva seperti digambarkan pada Gambar 2.8. Kurva ini menunjukkan hubungan antara gaya tarikan dengan perubahan panjang. Profil ini sangat diperlukan dalam desain yang memakai bahan tersebut.



Gambar 2. 8 Gambar singkat uji tarik

- Tegangan-Regangan Sejati

Tegangan-regangan teknik tidak memberikan indikasi karakteristik deformasi yang sesungguhnya, karena kurva tersebut semuanya berdasarkan pada dimensi awal benda uji, sedangkan selama pengujian terjadi perubahan dimensi. Pada tarik untuk logam liat, akan terjadi penyempitan setempat pada saat beban mencapai harga maksimum. Karena pada tahap ini luas penampang lintang benda uji turun secara cepat, maka beban yang dibutuhkan untuk melanjutkan deformasi akan segera mengecil



Gambar 2. 9 Kurva tegangan-regangan teknis

Tegangan-regangan teknik juga menurun setelah melewati beban maksimum. Keadaan sebenarnya menunjukkan, logam masih mengalami pengerasan regangan sampai patah sehingga tegangan yang dibutuhkan untuk melanjutkan deformasi juga bertambah besar. Tegangan yang sesungguhnya adalah beban pada saat manapun dibagi dengan luas penampang lintang benda uji, A_0 dimana beban itu bekerja.

Tegangan-regangan rekayasa didasarkan atas dimensi awal (luas area dan panjang) dari benda uji, sementara untuk mendapatkan tegangan-regangan sejati diperlukan luas area dan panjang aktual pada saat pembebanan setiap saat terukur. Perbedaan kedua kurva tidaklah terlampaui besar pada regangan yang kecil, tetapi menjadi signifikan pada rentang terjadinya pengerasan regangan, yaitu setelah

titik luluh terlampaui. Secara khusus perbedaan menjadi demikian besar di dalam daerah *necking* (pengecilan penampang). Pada tegangan-regangan rekayasa, dapat diketahui bahwa benda uji secara aktual mampu menahan turunnya beban karena luas area awal A_0 bernilai konstan pada saat penghitungan tegangan $\sigma = P/A_0$. Sementara pada kurva tegangan-regangan sejati luas area aktual adalah selalu turun hingga terjadinya perpatahan dan benda uji mampu menahan peningkatan tegangan karena $\sigma' = P/A_i$ (fhianunikoe.blogspot.com).

Hubungan tegangan-regangan sejati dan tegangan-regangan teknis, yaitu dengan persamaan sebagai berikut:

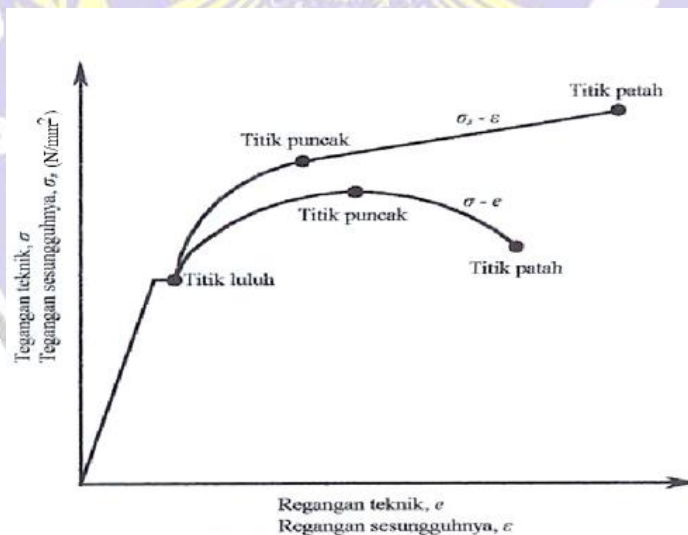
$$\sigma' = \sigma(1 + \varepsilon), \left(\frac{N}{mm^2}\right)$$

$$\varepsilon' = \ln(1 + \varepsilon), (\%)$$

Dimana :

$$\sigma' = \text{tegangan sejati } \left(\frac{N}{mm^2}\right)$$

$$\varepsilon' = \text{regangan sejati } (\%)$$



Gambar 2. 10 Perbandingan antara kurva tegangan regangan Teknik dengan kurva tegangan regangan sejati

c. Kekuatan Tarik

Kekuatan tarik atau kekuatan tarik maksimum (*ultimate tensile strength*) adalah nilai yang paling sering dituliskan sebagai hasil suatu uji tarik, tetapi padakenyataannya nilai tersebut kurang bersifat mendasar dalam kaitannya dengan kekuatan material. Untuk logam ulet, kekuatan tariknya harus dikaitkan dengan beban maksimum, dimana logam dapat menahan beban sesumbu untuk keadaan yang sangat terbatas. Pada tegangan yang lebih kompleks, kaitan nilai tersebut dengan kekuatan logam kecil sekali kegunaannya. Kecenderungan yang banyak ditemui adalah mendasarkan rancangan statis logam ulet pada kekuatan luluhnya. Tetapi karena jauh lebih praktis menggunakan kekuatan tarik untuk menentukan kekuatan bahan, maka metode ini lebih banyak dipakai.

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

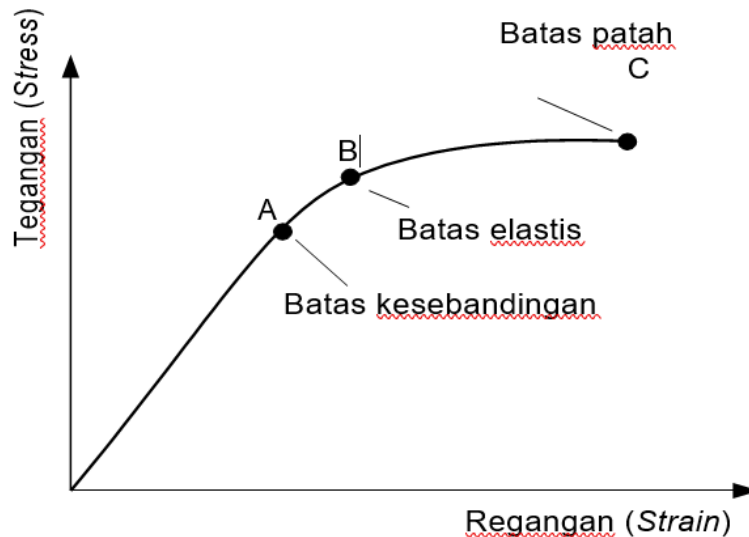
$$\sigma_u = \frac{P_{maks}}{A_0} \text{ (N/mm}^2\text{)}$$

Korelasi empiris yang diperluas antar kekuatan tarik dengan sifat mekanik lainnya seperti kekerasan dan kekuatan leleh, sering dipergunakan. Hubungan tersebut hanya terbatas pada hasil penelitian beberapa jenis material. *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. (Yonghao Zhao, dkk, 2021)

d. Modulus Elastisitas

Gambar 2.11 menunjukkan grafik tegangan dan regangan untuk batang padat biasa. Grafik tersebut linier sampai titik A. Hasil bahwa regangan berubah secara linier dengan tegangan dikenal sebagai hukum Hooke. Titik B adalah batas elastik. Jika batang ditarik melampaui titik ini batang tidak

akan kembali ke panjangnya semula, tetapi berubah bentuk secara tetap. Jika tegangan yang bahkan lebih besar diberikan, bahan akhirnya patah. Seperti ditunjukkan oleh titik C.



Gambar 2. 11 Grafik tegangan terhadap regangan

2.7. 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 .

2.8. Ensemble

Suatu *ensemble* adalah kumpulan dari semua sistem yang mungkin memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki satu keadaan makroskopik atau termodinamika (McQuarrie, 1976). Dalam simulasi dinamika molekuler terdapat beberapa ensemble yang banyak digunakan seperti *ensemble* mikrokanonikal, *ensemble* kanonikal dan *ensemble* isobarik-isotermal.

a. Ensemble Mikrokanonikal (NVE)

Ensemble mikrokanonikal (NVE) adalah keadaan termodinamika dalam suatu sistem yang dikarakteristikan dengan jumlah atom N , volume V dan energi E yang tetap. *Ensemble* ini memiliki kesamaan dengan suatu sistem yang tertutup misalnya terisolasi karena tidak ada interaksi antara sistem dengan lingkungan

sehingga total energinya tetap karena tidak dapat keluar ataupun masuk kedalam sistem.

b. *Ensemble* Kanonik (NVT)

Ensemble kanonik (NVT) merupakan keadaan termodinamik dimana suatu sistem yang dikarakteristikkan dengan jumlah atom N , volume V dan temperatur T berada pada nilai yang tetap.

c. *Ensemble* Isobarik-isotermal (NPT)

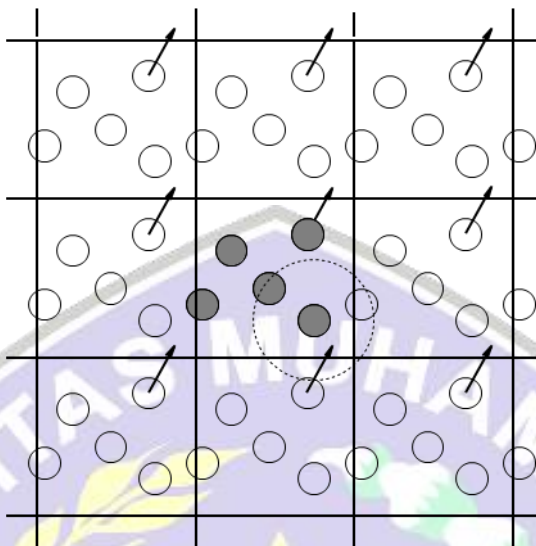
Ensemble isobarik-isotermal (NPT) adalah keadaan termodinamika dimana suatu sistem dengan jumlah atom N , tekanan P dan temperatur T berada pada nilai yang tetap. Dalam *ensemble isobarik-isotermal* (NPT), volume pada sistem dapat berubah-ubah. Pada simulasi ini, *ensemble* yang digunakan adalah *ensemble isobarik-isotermal* NPT yang menggunakan pengaturan temperatur dari skema Nosé-Hoover (Nose, 1984 dan Hoover, 1985):

$$\dot{x} = \frac{p}{mV^{1/D}}, \dot{p} = F - (\dot{\epsilon} + \zeta)p, \dot{\zeta}Q = \sum \frac{p^2}{m} - XkT, \quad (2.9)$$

$$\dot{\epsilon} = \frac{\dot{V}}{DV}, \dot{\epsilon} = \frac{(P - P_{ext})V}{\tau^2 kT}, \quad (2.10)$$

Di mana \dot{x} adalah turunan posisi terhadap waktu, p adalah momentum, m adalah massa dan V adalah volume. Sedangkan ζ adalah koefisien gesek, Q adalah parameter energi dimensi dikalikan (waktu)², F adalah gaya dan k adalah konstanta Boltzmann. X adalah derajat kebesaran sistem, T adalah temperatur. P merupakan tekanan dan τ adalah waktu relaksasi.

2.9. Kondisi Batas Periodik



Gambar 2. 12 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 2.12, 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.