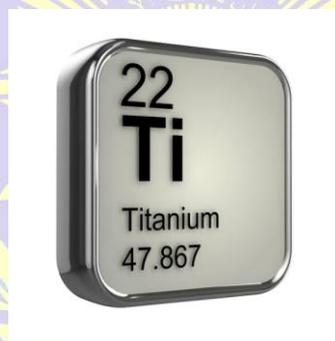


BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Titanium

Titanium adalah material logam berwarna putih-cerah dalam keadaan murni, titanium merupakan peringkat ke empat dalam kerak bumi yaitu 0,86% setelah aluminium, besi, dan magnesium. logam ini memiliki berat jenis yang rendah, kekuatan yang bagus, mudah dibentuk dan juga memiliki resistansi korosi yang baik. Titanium memiliki sifat yang sama kuat dengan baja tetapi hanya 40% lebih ringan dibanding dengan baja dan 60% lebih berat dibandingkan dengan aluminium. Titik lebur pada titanium ini adalah 1668°C. Titanium juga bersifat paramagnetik (lemah dengan magnet) serta memiliki konduktivitas listrik dan konduktivitas termal yang cukup rendah. [8]

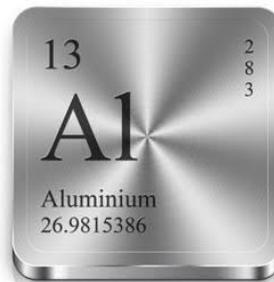


Gambar 2.1. Titanium (<https://www.thermofisher.com>)

2.2 Aluminium

Aluminium adalah unsur non ferro yang merupakan logam berwarna putih keperakan yang mempunyai sifat yang ringan, ketahanan korosi yang baik serta hantaran listrik dan panas yang baik, mudah dibentuk melalui proses pembentukan maupun permesinan, dan sifat-sifat yang baik lainnya sebagai sifat logam. [9]. Aluminium merupakan logam yang paling banyak terdapat di kerak bumi 8,3%, dan unsur ketiga terbanyak setelah oksigen 45,5%, dan silikon sebanyak 25,7 %. Aluminium murni mempunyai sifat lunak dan kurang kuat

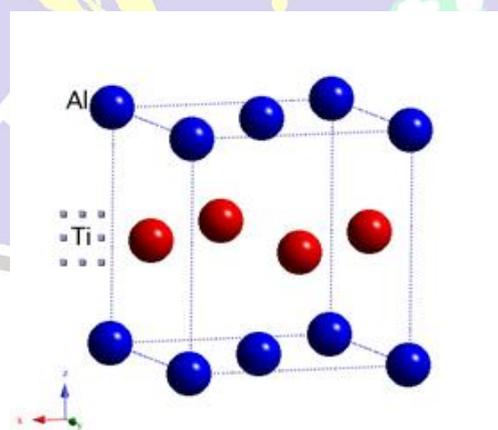
terhadap gesekan. Berat jenis aluminium murni yaitu $2,643 \text{ kg/m}^3$ sedangkan titik cair aluminium mencapai 660°C dan kekerasan permukaan aluminium murni 17 BHN sedangkan kekuatan tarik maksimum adalah 70 GPa. [10]



Gambar 2.2. Aluminium (<https://fridapermanal1.wixsite.com/>)

2.3 Paduan TiAl

Titanium-Aluminium (Ti-Al) adalah senyawa intermetalik yang digunakan karena ikatan kimia yang terbentuk lebih kuat jika dibandingkan dengan unsur tunggalnya, paduan Ti-Al cenderung memiliki sifat mekanik dan sifat termal yang tinggi, selain itu TiAl juga memiliki sifat kekuatan temperatur yang tinggi, ketahanan pembakaran yang sangat baik dan ketahanan oksidasi yang cukup baik, Paduan intermetalik ini dianggap kandidat kuat untuk material substitusi di bagian kompresor dari mesin turbin gas pada pesawat. [11]

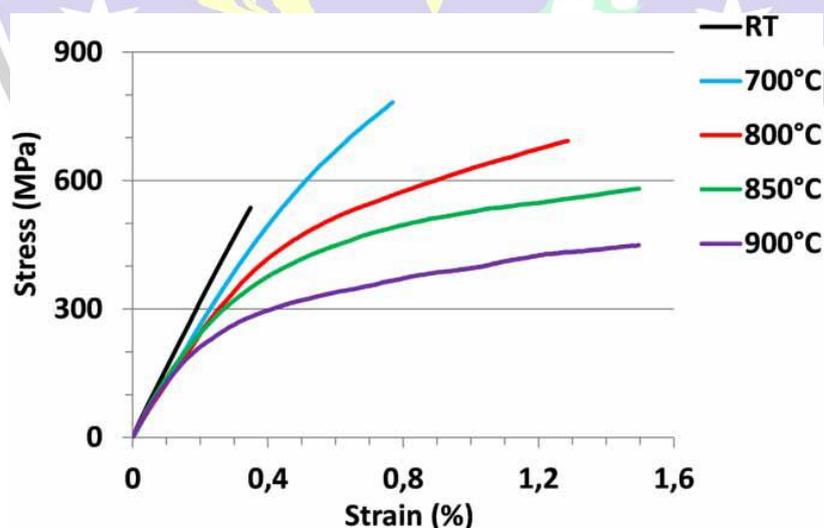


Gambar 2.3. Tetragonal Ti-Al (<https://www.phase-trans.msm.cam.ac.uk>)

Karena sifatnya yang menarik, seperti kepadatan rendah, kekuatan tinggi, kekakuan tinggi, dan korosi, mulur, dan oksidasi yang baik. Karena kekuatan spesifiknya yang tinggi, paduan berbasis TiAl berpotensi untuk meningkatkan rasio dorong terhadap berat mesin pesawat. Baru-baru ini, General Electric mengumumkan bahwa bilah turbin tekanan rendah g-TiAl buatan Precion Castpart Corp telah digunakan pada mesin Genx, yang melengkapi pesawat Boeing 787 dan Boeing 747-8. Ini adalah penggunaan skala besar pertama dari paduan berbasis TiAl pada mesin jet komersial. Dibidang otomotif, penggunaan komersial paduan berbasis TiAl diwujudkan dalam turbocharger berkinerja tinggi dan katup buang untuk formula satu dan mobil sport lainnya. Selain itu, paduan berbasis TiAl telah menemukan aplikasi dalam penerbangan militer dan industri nuklir. [12]

2.4 Perkembangan Riset Paduan TiAl

Perkembangan pada aplikasi TiAl masih sangat terbatas dalam beberapa tahun terakhir, karena sifat kelenturannya yang rendah (rapuh) pada suhu ruang. Permasalahan tersebut telah mendorong para peneliti untuk mengembangkan metode alternatif pembuatan bahan paduan TiAl. Salah satunya dengan menambahkan unsur Cr dan Nb pada paduan TiAl yaitu Ti-47 Al-3 Cr-3 Nb (at.-%).



Gambar 2.4 Grafik tegangan regangan pada uji tekuk. [13]

Dengan melakukan uji tekuk pada yang dilakukan untuk menentukan sifat mekanik paduan TiAl pada suhu ruangan dan diatas kisaran suhu 700–900°C dengan tujuan mengevaluasi efek dari suhu pada modulus Young, kekuatan luluh, dan kekuatan lentur TiAl tersebut. Suhu mempengaruhi modulus elastisitas yang nilainya menurun dari 154 GPa pada suhu kamar menjadi 128 GPa pada suhu 900°C, perilaku paduan yang diuji benar-benar rapuh, seiring dengan meningkatnya suhu, keuletan paduan meningkat dengan hilangnya kekuatan dalam kisaran suhu tinggi. Perilaku paduan yang dipelajari menjadi ulet pada temperatur 800°C.

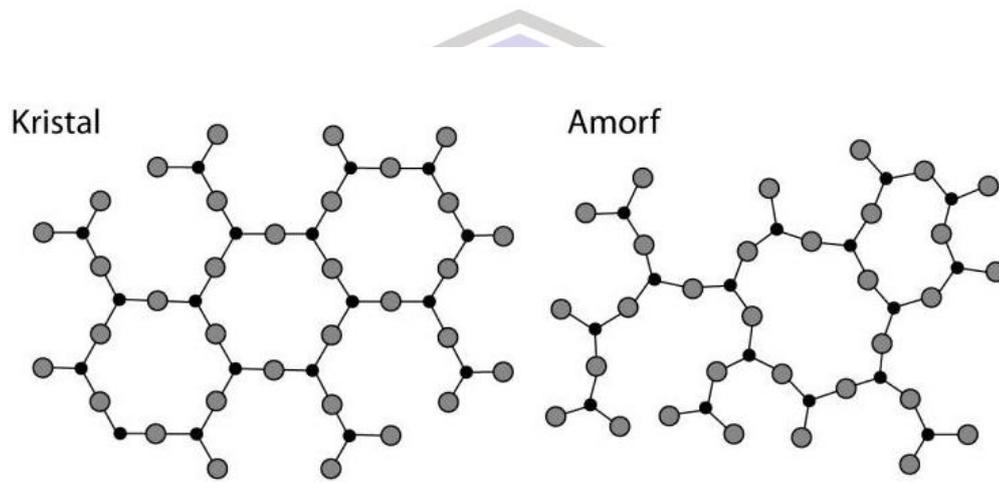
Sejauh menyangkut uji suhu ruangan, spesimen tampaknya dicirikan oleh kekuatan yang lebih rendah. Hal ini disebabkan fakta bahwa paduan pada suhu kamar, rapuh dan sangat rentan terhadap patah dengan adanya diskontinuitas seperti penyusutan mikro. Selanjutnya kekuatan luluh pada suhu kamar lebih rendah yang ditemukan pada suhu 700°C karena adanya cacat susut. Dalam kisaran suhu tinggi dari 700°C hingga 900°C, kekuatan luluh menurun dengan meningkatnya suhu 700°C adalah 703 MPa, sedangkan pada suhu 900°C adalah 263 MPa. Sejauh tes suhu tinggi yang bersangkutan, spesimen diuji pada tikungan 850°C dan 900°C selama uji lentur dan tanpa mencapai titik patahan akhir, ini dikarenakan deformasi plastis spesimen pada suhu tinggi. Kemudian setelah pengujian mekanik dilakukan pada 800°C, 850°C dan 900°C spesimen tidak menemukan perubahan mikrostruktur karena sifatnya yang permanen pada suhu tinggi. Hasil yang bagus terdapat pada suhu 850°C dan 900°C, setelah dilakukan uji tekukan pada beban dengan kisaran 10-20 N. Hasil yang diperoleh pada suhu ini menyoroti bahwa meskipun paduannya rapuh pada suhu kamar, tetapi keuletanya jauh meningkat seiring meningkatnya suhu. [13]

2.5 Struktur Kristal

Struktur kistal merupakan material zat padat yang dapat klasifikasikan berdasarkan keteraturan, dimana atom atau ion tersusun secara teratur antara atom satu dengan atom lainnya. Sebuah material kristal terletak dalam susunan yang berulang dalam jarak atomik yang besar, oleh karena itu, muncul urutan yang

panjang. Seperti pada saat terjadi proses pemadatan (solidifikasi), atom-atom akan menempatkan diri sendiri ke dalam pengulangan pola tiga dimensi dimana masing-masing atom akan terikat dengan atom yang lain.

Sedangkan amorf merupakan material yang tidak bersifat kristalin, amorf terbentuk dari pendinginan yang terlalu cepat, sehingga atom-atom tidak dapat menempati lokasi kisinya (tersusun secara tidak tersusun). [14]



Gambar 2.5 Susunan atom kristal dan susunan atom morf. [14]

Struktur kristal yang sempurna merupakan susunan atom secara teratur dalam ruang, maka dapat dinyatakan posisi atom dalam suatu kesatuan yang berulang atau bisa disebut dengan (*unit cell*). Jenis-jenis kisi kristal tersebut ialah : *Struktur Simple Cubic (SC)*, *Struktur Body Centered-Cubic (BCC)*, *Struktur Face Centered-Cubic (FCC)*, dan *Struktur Heksonal Closed Packed (HCP)*. Tetapi yang paling umum terdapat pada logam murni adalah FCC, BCC, dan HCP.

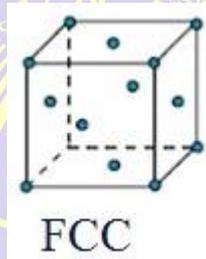
2.5.1 Struktur Body Centered-Cubic (BCC)



Gambar 2.6 Susunan struktur kristal BCC. [14]

Dalam struktur ini terdapat atom-atom yang terletak di semua sudut (8 sudut) dan atom tunggal di bagian pusat kubus. Masing-masing unit sel BCC memiliki 2 atom, dengan 1 atom berasal dari penjumlahan $1/8$ atom yang terletak di 8 sudut kubus dan satu lagi berasal dari atom yang terletak di pusat kubus. Dengan demikian, struktur kristal BCC memiliki bilangan koordinasi yang jumlah total 8 atom.

2.5.2 Struktur Face Centered-Cubic (FCC)

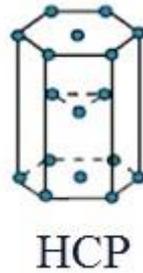


Gambar 2.7 Susunan struktur kristal FCC. [14]

Dalam struktur kristal FCC atom-atom terletak pada bagian sudut dan juga di pusat dari semua permukaan kubus. Untuk struktur kristal FCC, masing-masing atom yang terletak disudut dibagi-bagi ke 8 unit cell, oleh karena itu atom *face-centered* yang terletak pada bagian sisi terbagi menjadi 2. Total atom yang dimiliki oleh struktur kristal FCC ada 4 yang diperoleh dari penjumlahan $1/8$ dari masing-

masing atom yang terletak di 8 sudut dengan 1/2 bagian atom yang terletak di 6 sisi kubus.

2.5.3 Struktur Heksonal Closed Packed (HCP)



Gambar 2.8 Susunan struktur kristal HCP. [14]

Struktur kristal yang terakhir ini memiliki struktur kristal yang terdiri atas atom yang membentuk *hexagon* (segi enam). Dimana permukaan atas dan bawah *unit cell* yang terbagi menjadi $\frac{1}{6}$ atom di setiap sudut. Sedangkan $\frac{1}{2}$ atom yang berada di atas dan bawah *unit cell*. Selain itu *Heksonal Closed Packed* memiliki tiga atom yang terletak di tengah *unit cell*. Dengan demikian, struktur kristal HCP memiliki bilangan koordinasi yang jumlah total 6 atom.

2.6 Nanomaterial

Nanomaterial adalah bidang material dengan pendekatan berbasis Nanoteknologi. Nanoteknologi adalah ilmu yang mempelajari tentang desain, karakteristik, produksi, dan aplikasi dari struktur, instrumen, dan sistem dengan cara mengontrol ukuran dan bentuk dalam skala nanometer yang akan menghasilkan material, instrumen, dan sistem yang mempunyai sifat yang jauh lebih baik dibandingkan material "*bulk'nya*". Nanoteknologi merupakan teknologi yang dibangun dengan orde 10^{-9} m atau 0.000000009 m. Dapat dibayangkan sebuah ukuran yang sangat kecil dan hampir sama dengan ukuran diameter atom yang berkisar 0.0000000010 m atau 10^{-10} m. Jadi dalam fabrikasi dan karakteristiknya dibutuhkan alat yang juga resolusinya berskala nano.

Sebagian cabang nanoteknologi juga mengadaptasi pembentukan organisme dari sel. Sel bergabung dan saling bekerjasama menjadi kumpulan sel (jaringan). Kumpulan jaringan bekerjasama menjadi organ. Kumpulan organ bekerjasama menjadi sistem organ. Kumpulan sistem organ yang bekerjasama menjadi organisme. Pada hakekatnya, kumpulan materi yang dimulai ukuran satu nano akhirnya menjadi satu “organisme buatan” yang memiliki karakteristik tertentu. Ukuran yang lebih kecil dari nanometer adalah Angstrom. 1 Angstrom = 1/10 nanometer (nm) sedangkan inti dari atom – 0.00001 nm. Karakteristik nano sekarang ini sudah sangat maju, karena dapat terlihat struktur kristal dari material. Dengan demikian, dari alat karakteristik tersebut diperkenalkan berbagai jenis ukur nanostruktur, seperti : nanotube, nanowire, nanopilar, nanorod, nanocomb, nanoflower, dan sebagainya. [15]

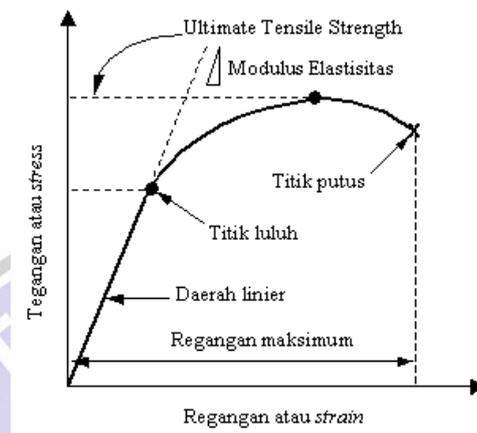
2.7 Nanorods

Dalam nanoteknologi, nanorod merupakan salah satu morfologi benda berskala nano. Masing-masing dimensinya berkisar dari 1-100 nm. Mereka dapat disintesis dari logam atau bahan semikonduktor. Rasio aspek standar (panjang dibagi lebar) adalah 3-5. Nanorods diproduksi oleh sintesis kimia langsung. Kombinasi ligan bertindak sebagai agen pengontrol bentuk dan mengikat berbagai aspek nanorod dengan kekuatan yang berbeda. Hal ini memungkinkan wajah yang berbeda dari nanorod dengan kekuatan yang berbeda, menghasilkan objek memanjang. [16]

2.8 Uji tarik

Uji tarik merupakan salah satu proses pengujian bahan yang paling mendasar. Pengujian dengan uji tarik dapat digunakan untuk mengetahui sifat mekanik bahan, parameter yang berpengaruh dalam pengujian tarik adalah beban tarik dan luas penampang. Beberapa sifat mekanis bahan yang akan diketahui dengan pengujian tarik yaitu untuk mengetahui kekuatan mulur, kekuatan tarik, kekuatan putus, keuletan dan ketangguhan bahan. [17]

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 Grafik tegangan regangan [18]

Hasil yang didapatkan saat pengujian tarik ini juga sangat penting untuk rekayasa teknik dan desain produk, karena menghasilkan data kekuatan material pengujian tarik yang digunakan untuk mengukur ketahanan suatu material. Untuk mendapatkan hasil data pengujian dan mengkonversikan ke kurva tegangan-tegangan berdasarkan *hukum Hooke* dimana tegangan *true stress* merupakan perbandingan antara gaya yang dialami benda dengan luas penampang pada saat pembebanan berlangsung, sedangkan regangan *true strain* merupakan perbandingan antara pertambahan panjang benda terhadap panjang awal yang saat itu terjadi. [18]. Tegangan regangan dapat dirumuskan sebagai berikut.

$$\text{Stress} : \sigma = F/A \quad (2.1)$$

$$\text{Strain} : \varepsilon = \Delta L/L \quad (2.2)$$

Dimana :

F = Gaya Tekan (N)

A = Luas Penampang (m^2)

ΔL = Pertambahan Panjang (m^2)

L = Panjang Awal (m)

Hubungan antara tegangan dan regangan ini adalah modulus elastisitas. Modulus elastisitas adalah ukuran kekakuan dari suatu bahan. Dimana semakin besar nilai modulus elastisitas suatu benda maka semakin sulit benda tersebut dapat memanjang ataupun sebaliknya. Persamaan dari modulus elastisitas pada temperatur adalah dapat tulis sebagai berikut :

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \quad (2.3)$$

Dimana :

E = Modulus Elastisitas (N/m^2)

σ = Tegangan (N/m^2)

ε = Regangan

2.9 Simulasi Dinamika Molekuler

Simulasi dinamika molekuler (MD) merupakan suatu teknik simulasi yang dilakukan pada atomik dengan menggunakan persamaan hukum-hukum dalam fisika teknik. Salah satu contohnya adalah perangkat lunak yang menggunakan metode ini adalah *Large Scale Atomic/Molecular Massively Paraller Simulator* (LAMMPS). [19]. Simulasi dinamika molekuler digunakan untuk menyelesaikan persamaan Newton tentang gerak, dimana gaya ditentukan oleh massa dan percepatan. Partikel-partikel pada molekuler dinamik bergerak secara random dan berinteraksi satu dengan yang lainnya. [20]

Dalam dinamika molekuler, besar gaya antar molekul dihitung secara eksplisit dan pergerakan molekul dikomputasi dengan metode integrasi. Metode ini digunakan untuk menyelesaikan persamaan newton pada atom yang konstituen. Dimana kondisi awal digambarkan dengan posisi dan kecepatan atom. Berdasarkan persepsi newton, dari posisi awal, dapat dilakukan penghitung posisi dan kecepatan selanjutnya dalam interval waktu yang kecil serta penghitungan gaya pada posisi yang baru. Hal ini berulang untuk berapa saat, bahkan hingga ratusan kali. [21]

Persamaan dari gerak Newton untuk semua atom di dalam sistem adalah :

$$\ddot{r}_i = f_i/m_i \quad (2.4)$$

Di mana r_i dan m_i adalah posisi dan massa dari atom i , dan f_i adalah gaya pada atom i . F_i pada persamaan 2.1 dapat di presentasikan sebagai :

$$f_i = -\partial\phi/\partial r_i \quad (2.5)$$

Dimana Φ adalah energi potensial yang ada di dalam sistem. Persamaan ini diselesaikan dengan menggunakan perhitungan numerik.

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:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + F_i(t)\Delta t^2/(2m_i) \quad (2.6)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + (F_i(t + \Delta t) + F_i(t))\Delta t/(2m_i) \quad (2.7)$$

Di mana t adalah nilai waktu saat t dan Δt adalah selang waktu, dan v merupakan kecepatan sedangkan F_i merupakan gaya yang bekerja pada atom i . [22]

2.10 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 metode Modified Embedded Atom Method (MEAM). Modified Embedded Atom Method adalah metode yang menggambarkan energi antar atom yang mencakup gaya sudut. Metode ini sering digunakan dalam simulasi dinamika molekuler. Cara menghitung energi potensial dari system adalah dengan menggunakan persamaan berikut :

$$E_{total} = \sum_i F_i(\rho h, i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (2.8)$$

$i \neq j$

Disini ϕ_{ij} adalah potensial pasangan jarak dekat dan R_{ij} adalah jarak atom i dan j . [23]

Semua algoritma integrasi mengasumsikan posisi, kecepatan dan percepatan dapat didekati oleh deret Taylor :

$$r(t - \Delta t) = r(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2} a(t) \Delta t^2 \dots \quad (2.9)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a(t) \Delta t + \frac{1}{2} b(t) \Delta t^2 \dots \quad (2.10)$$

$$a(t - \Delta t) = a(t) + b(t) \Delta t \dots \quad (2.11)$$

Dimana r disini adalah posisi atom, v adalah kecepatan (turunan pertama terhadap waktu), sedangkan a adalah percepatan (turunan kedua terhadap waktu).

Di simulasi dinamika molekuler ini juga menggunakan algoritma verlet. Algoritma verlet adalah metode numerik yang digunakan untuk mengintegrasikan persamaan gerak Newton. Algoritma verlet sering digunakan untuk menghitung lintasan partikel dalam simulasi dinamika molekuler dan grafik komputer. Persamaan dari algoritma verlet adalah sebagai berikut :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t) \Delta t + \frac{1}{2} a(t) \Delta t^2 + \left(\frac{1}{6}\right) b(t) \Delta t^3 + 0(\Delta t^4) \quad (2.12)$$

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t) \Delta t + \frac{1}{2} a(t) \Delta t^2 - \left(\frac{1}{6}\right) b(t) \Delta t^3 + 0(\Delta t^4) \quad (2.13)$$

Kemudian dua persamaan ini dijumlahkan menjadi satu.

$$r(t + \Delta t) = 2r(t) - r(t - \Delta t) + a(t) \Delta t^2 + 0(\Delta t^4) \quad (2.14)$$

Persamaan diatas adalah dasar dari algoritma verlet. Dimana keuntungan dari persamaan diatas ialah mempermudah perhitungan pada simulasi dinamika molekuler. [24]