

## BAB 2

### TINJAUAN PUSTAKA

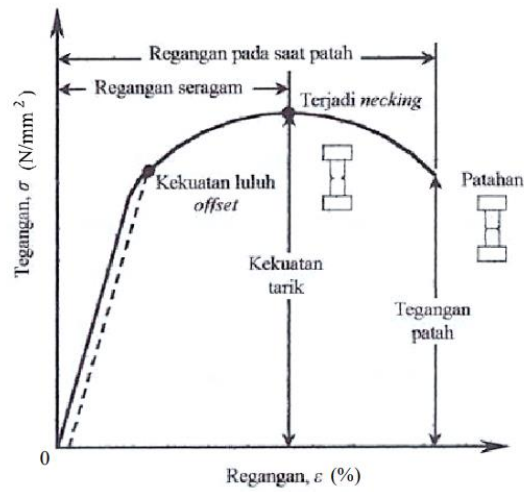
#### 2.1. Penelitian Terdahulu

Penelitian dari Wang dkk (2017) yang berjudul “Simulasi Dinamika Molekul Terhadap Elastisitas Semu Dari Nano-Pilar Paduan Memori Bentuk Niti Yang Mengalami Kompresi Siklik” penelitian ini menjelaskan elastisitas semu dari nanopilar SMA NiTi yang mengalami pembongkaran kompresi siklik diselidiki oleh simulasi MD. Di dalam penelitian ini ditemukan bahwa pada proses unloading, transformasi kebalikan dari fase induksi martensit ke fase austenit asli merupakan proses restrukturisasi yang didominasi slipping. Ketika regangan terakumulasi sampai batas tertentu regangan tekan hingga 5,89%, transformasi martensit termasuk dalam proses yang didominasi koalesensi dari dua batas fase yang berlawanan yang dimulai dari permukaan bebas [4].

#### 2.2. Kekuatan dan Uji Tarik

Kekuatan tarik adalah tegangan maksimum yang dapat ditahan suatu bahan sebelum putus pada saat diregangkan. Kekuatan tarik dapat dibaca dari kurva tegangan-regangan hasil uji tarik [5]. Benda padat yang mengalami gaya akan berubah ukurannya. Jika gaya itu menarik, maka benda akan meregang. Sebaliknya, jika gaya itu menekan, benda akan memendek. Hal ini terjadi ketika panjang benda lebih besar dari lebarnya. Maka pada saat yang bersamaan, jika panjang dan lebar benda hampir sama aksi gaya akan menyebabkan terjadinya regangan geser [5].

Uji tarik yaitu sesuatu proses pengujian bahan yang sangat mendasar. Dengan melaksanakan proses pengujian tarik ini bisa dikenal seberapa kokoh bahan bereaksi terhadap tarikan serta juga bisa diketahui sejauh mana bahan bertambah panjang. Kurva tegangan-regangan teknis ialah kurva yang menunjukkan ikatan antara tegangan serta regangan dimana luas penampang yang digunakan merupakan luas penampang awal. Pada gambar 2.1 di bawah ini menunjukkan kurva tegangan-regangan teknis.



Gambar 2.1 Kurva tegangan-regangan teknis [5].

Di dalam pengujian tarik ini kita bisa mencontoh ketentuan dari hukum Hooke dimana perbandingan tegangan dan regangan yaitu stabil. Tegangan merupakan besar energi yang diberikan terhadap luas penampang. Regangan merupakan pertambahan panjang awal mula akibat gaya luar yang mempengaruhi benda. Dimana tegangan regangan bisa diformulasikan yaitu:

Tegangan/*stress*:

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (2.1)$$

Dimana:

- $\sigma$  = tegangan (N/m<sup>2</sup>)
- F = gaya (N)
- A = luas penampang (m<sup>2</sup>)

Regangan/*strain*:

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L} \quad (2.2)$$

Dimana:

- $\epsilon$  = regangan (%)
- $\Delta L$  = pertambahan panjang (m)
- L = panjang mula-mula (m)

Dimana ikatan antara tegangan dan regangan ini merupakan modulus elastisitas. Modulus elastisitas merupakan dimensi gaya dari sesuatu material. Persamaan dari modulus elastisitas pada temperatur bisa tulis sebagai berikut:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

Dimana:

$E$  = Modulus elastisitas ( $\text{N/m}^2$ )

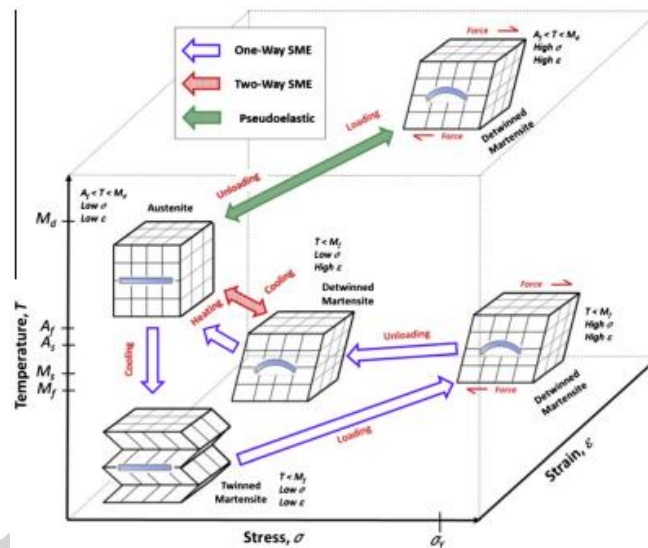
$\sigma$  = tegangan ( $\text{N/m}^2$ )

$\varepsilon$  = regangan (%)

### 2.3. Shape Memory Alloy

*Shape Memory Alloy* yaitu sebuah material cerdas yang bentuk dan susunannya berubah terhadap kalor dan sudah ada sejak tahun 1930-an menurut Otsuka dan Wayman. Sedangkan menurut sumber lain *Shape memory alloy* (SMA) atau "*smart alloy*" pertama kali ditemukan oleh Arne Lander pada tahun 1932, dan istilah "*shape-memory*" pertama kali dijelaskan oleh Vernon pada tahun 1941 untuk bahan gigi polimeriknya [6]. SMA termasuk dalam kelas bahan pintar atau cerdas yang juga mencakup bahan piezoelektrik, cairan elektroeologi, dan bahan elektrostriktif dan magnetostriktif. Fenomena pertama diamati jika SMA mengalami pendinginan yang menghasilkan transformasi fase induk (austenit) menjadi martensit. Suhu yang sesuai dengan awal dan akhir transformasi ini disebut suhu awal dan akhir martensit. Ketika material telah ditransformasikan ke fase martensit, material tersebut dapat mengalami deformasi plastis yang signifikan [7].





Gambar 2.2 Mekanisme sifat ingat bentuk shape memory alloy [6].

Pada gambar 2.2 di atas menjelaskan ilustrasi mekanisme sifat ingat bentuk *shape memory alloy*. Struktur martensit mempunyai struktur BCT (*body centered tetragonal*). Satuan ini mempunyai satu atom pada pusat kubus serta 8 titik pada sudutnya. Struktur austenit memiliki struktur FCC (*face central cubic*) dimana satu atom terletak di muka atom posisinya ditengah kubus. Pada saat bahan austenit berganti menjadi fasa martensit yang diketahui sebagai martensite start ( $M_s$ ) yang berlangsung terus sampai fasa martensit konstan pada temperatur martensit finish ( $M_f$ ). Pada saat bahan dipanaskan dan fasa berganti menjadi fasa austenit diketahui sebagai temperatur austenit start ( $A_s$ ), dimana transformasi ini berlangsung sampai temperatur austenit finish ( $A_f$ ) [8].

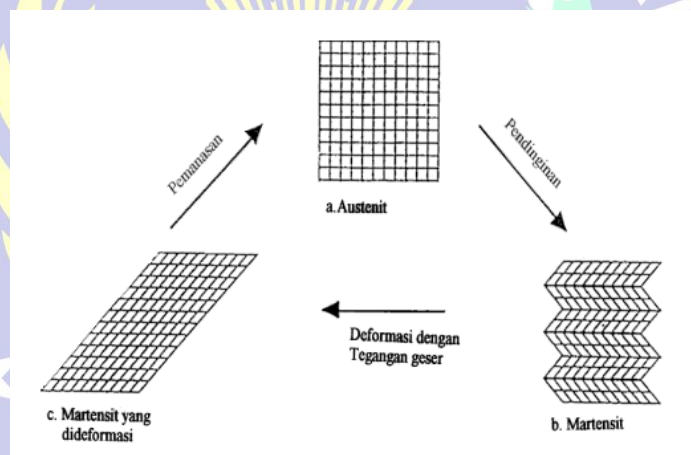
#### 2.4. Paduan NiTi

Paduan NiTi merupakan paduan yang terbentuk dari atom Ni dan Ti. Nikel adalah komponen logam yang tercipta secara natural serta mempunyai karakteristik mengkilap (*lustrous*) dan berupa putih keperak-perakan (*silvery white*). Di alam nikel bisa berbentuk senyawa sulfida ataupun senyawa oksida. Sumber energi nikel di dunia sebesar 60% berupa laterit serta 40% berupa endapan sulfide [9]. Nikel ini kekal terhadap suhu tinggi serta tidak mudah rusak oleh air kali atau air laut, akan tetapi tidak tahan oleh asam nitrat. Titanium adalah unsur

logam dalam kelompok IV B Tabel Periode Unsur dengan no atom 22. Titanium murni bisa larut dalam larutan asam pekat, misalnya pada larutan asam sulfat, namun tidak larut dalam air. Titanium memiliki sifat ringan, temperature lebur tinggi, kuat, dan daya tahan korosi yang tinggi.

Paduan NiTi merupakan salah satu bahan perpaduan antara logam Ni dan logam Ti yang bisa digunakan untuk rekayasa. Paduan NiTi ini mempunyai karakter biokompabilitas yang baik terhadap jaringan badan manusia sehingga disaat ini banyak digunakan untuk alat- alat kedokteran [10].

Paduan NiTi mempunyai karakteristik tertentu. Walaupun sudah menjadi campuran, sifat biokompatibilitas paduan NiTi masih bisa berkaitan dengan sifat-sifat logam penyusunnya. Pada suhu rendah dan tinggi komposisi kristal NiTi disebut sebagai martensit dan austenite [11]. Paduan NiTi memiliki titik lebur pada *temperature* kurang lebih 1300°C. Gambar 2.3 menunjukkan tentang contoh terjadinya reaksi pergantian fase NiTi.

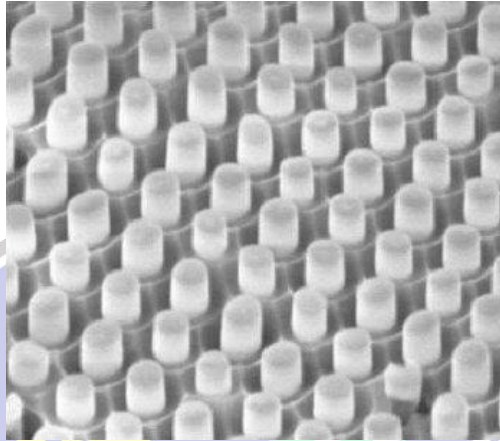


Gambar 2.3 Ilustrasi perubahan dari *Shape Memory Alloy* [12].

## 2.5. Nanopillar

Nanopillar merupakan struktur nano berupa pilar dengan diameter kurang lebih 10 nanometer yang bisa dikelompokkan bersama dalam lapisan semacam kisi. Setiap nanopillar mempunyai wujud pilar di bagian dasar serta ujung runcing yang meruncing di bagian atas. Nanopillars mempunyai banyak aplikasi tercantum efisienpanel surya, analisis resolusi besar, serta permukaan antibakteri.

Nanopillar merupakan jenis metamaterial, yang berarti, nanopilar memperoleh atributnya dari pengelompokan ke dalam struktur yang dirancang secara artifisial serta bukan watak alaminya [13]. Ilustrasi struktur nanopillar ditunjukkan pada Gambar 2.4.



Gambar 2.4 Ilustrasi Nanopillar [13].

## 2.6. Simulasi Dinamika Molekuler

Simulasi dinamika molekuler yaitu metode yang bisa digunakan untuk mengaplikasikan prediksi terhadap sifat-sifat statik ataupun dinamik yang diturunkan secara langsung dari interaksi ditingkat atom ataupun molekul. Keadaan batasan periodik diberikan pada bagian terluar bidang simulasi. Pada keadaan tersebut, atom-atom yang terletak pada kondisi terluar dari salah satu bagian simulasi bisa berjalan serta berhubungan dengan atom-atom lain pada sisi yang bertentangan. *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) adalah contoh salah satu perangkat lunak yang dapat dipakai untuk simulasi dinamika molekuler [14].

Pada dasarnya simulasi dinamika molekuler menggunakan persamaan gerak Newton adalah  $F = m \cdot a$  dimana  $F$  merupakan energi yang diberikan atas partikel,  $m$  merupakan massa, serta  $a$  merupakan akselerasinya. Berikut adalah persamaan dasar metode dinamika molekuler:

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

Dimana  $r_i$  merupakan posisi dari atom  $i$  dan  $m_i$  merupakan massa dari atom  $i$  serta  $f_i$  merupakan energi atom  $i$  [15].  $f_i$  pada persamaan 2.1 bisa ditulis sebagai berikut:

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

Dimana  $\Phi$  merupakan energi potensial yang terdapat dalam struktur. Persamaan ini diselesaikan dengan memakai perhitungan numeric [15]. Algoritma yang sering digunakan dalam simulasi molekuler adalah menghitung posisi atom  $r_i$  dan kecepatan atom  $v_i$  pada  $t + \Delta t$  yaitu algoritma Verlet dan persamaanya adalah:

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

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

Dinamika ( $t$ ) merupakan nilai waktu pada  $t$  dan  $\Delta t$  merupakan interval waktu [15].  $v$  yaitu kecepatan dan  $F_i$  merupakan energi yang bekerja pada atom  $i$ .

## 2.7. Energi Potensial Antar Atom

Pada saat simulasi dinamika molekuler, atom-atom bisa berhubungan dengan atom yang lain karena akibat sesuatu medan gaya semacam gaya potensial. Apabila atom-atom itu mempunyai jarak yang sangat dekat sehingga gaya resultannya yaitu 14 saling tolak menolak serta apabila kondisi kebalikannya apabila jarak atom sangat jauh sehingga gaya resultannya akan saling tarik menarik. Penelitian ini memakai persamaan metode *Modified Embedded Atom Method* (MEAM). Modified Embedded Atom Method adalah metode yang



mengambarkan energi antar atom yang mencakup gaya sudut [16]. Dengan demikian, persamaan energi total  $E_{tot}$  pada atom  $i$  bisa ditulis sebagai berikut:

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

$i \neq j$

Di mana  $F_i$  merupakan gaya yang menempel pada atom  $i$  yang merupakan akibat dari  $\rho h, i$  ataupun kerapatan elektron pada atom  $i$ .  $\phi_{ij}$  ialah hubungan energi potensial dengan atom sekitar, sebaliknya  $i, j$  yaitu jenis dari atom.  $R_{ij}$  yaitu jarak antara atom  $i$  serta  $j$  [16]. Kerapatan elektron dari atom  $i$  didapatkan dari jumlah kerapatan elektron dari atom tetangga  $j$ .

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

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

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

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

Dimana  $r$  merupakan posisi atom,  $v$  merupakan kecepatan (turunan awal terhadap waktu), sebaliknya  $a$  merupakan percepatan (turunan kedua terhadap waktu).

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

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



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

Selanjutnya kedua persamaan tersebut 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 merupakan dasar dari algoritma verlet. Dimana keuntungan dari persamaan diatas yaitu memudahkan perhitungkan pada simulasi dinamika molekuler.

