

url : <http://studentjournal.umpo.ac.id/index.php/komputek>

---

## STUDI PENGARUH TEMPERATUR TERHADAP KEKUATAN TARIK NiTi NANOPILLAR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

**Septien Tri Cahyono\*, Rizal Arfin, Munaji**

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

E-mail Korespondensi : septiantc8@gmail.com

History Artikel

Diterima : 17 Januari 2022 Disetujui : 02 Maret 2022 Dipublikasikan : 16 April 2022

---

### **Abstract**

*NiTi alloy is a highly functional alloy of Ni (nickel) metal and Ti (titanium) metal used for engineering. This NiTi alloy has good biocompatibility properties against human body tissues so that currently it is widely used for medical devices. This study aims to determine the effect of temperature on the tensile strength of NiTi Nanopillars and to investigate the behavior of the atoms making up NiTi nanopillars due to tensile loading. From the results obtained, the authors found the greatest value of the modulus of elasticity for the NiTi Nanopillar alloy with a temperature of 100 K, which is 80.4321 GPa. Meanwhile, the lowest modulus of elasticity is the NiTi Nanopillar alloy with a temperature of 600 K, which is 65.5847 GPa. So it can be concluded that the greater the effect of temperature on the NiTi Nanopillar alloy, the smaller the modulus of elasticity will be. This thesis also discusses the stress-strain and mechanical properties of NiTi Nanopillar alloys during the simulation process.*

**Keyword:** *NiTi Nanopillar Alloy, Molecular Dynamics Simulation, Elasticity Modulus, Temperature, Tensile Strength Test*

## Abstrak

Paduan NiTi merupakan salah satu bahan perpaduan antara logam Ni dan logam Ti yang bisa digunakan untuk rekayasa. Paduan NiTi ini mempunyai sifat biokompabilitas yang baik terhadap jaringan tubuh manusia sehingga disaat ini banyak digunakan untuk alat- alat kedokteran. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh temperatur terhadap kekuatan tarik NiTi Nanopillar dan untuk menyelidiki perilaku atom-atom penyusun NiTi nanopillar akibat pemberian pembebanan tarik. Dari hasil yang didapatkan, penulis menemukan nilai modulus elastisitas terbesar pada paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 100 K yaitu 80,4321 GPa. Sedangkan untuk nilai modulus elastisitas paling rendah pada paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 600 K yaitu 65,5847 GPa. Jadi dapat disimpulkan bahwa semakin besar pengaruh temperatur terhadap paduan NiTi Nanopillar maka semakin kecil nilai modulus elastisitasnya. Di dalam skripsi ini juga membahas tentang tegangan-regangan dan sifat mekanik paduan NiTi Nanopillar selama proses simulasi.

**Keyword:** Paduan NiTi Nanopillar, Simulasi Dinamika Molekuler, Modulus Elastisitas, Temperatur, Uji Kekuatan Tarik.

**How to Cite:** E.S, Julhija (2022). Studi Pengaruh Temperatur terhadap Kekuatan Tarik NiTi Nanopillar Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler. KOMPUTEK : Jurnal Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo Vol 6 (1): Halaman 9-22

© 2022 Universitas Muhammadiyah Ponorogo. All rights reserved

---

ISSN 2614-0985 (Print)  
ISSN 2614-0977 (Online)

## 1. PENDAHULUAN

Bahan logam bisa terbentuk dari satu tipe bahan ataupun lebih. Bahan logam yang terdiri dari paling sedikit 2 macam disebut juga bahan campuran. Salah satunya yaitu *Nickel* dan *Titanium* yang kerap disebut dengan nitinol atau paduan NiTi. NiTi serta paduannya mempunyai bermacam aplikasi seperti dalam bidang kedirgantaraan, industri kimia, dan metode medis karena kekuatan spesifiknya yang besar serta ketahanan korosi yang sangat baik. Baru-baru ini, NiTi serta paduannya sudah diusulkan sebagai sistem mikro-elektromekanis berbasis semikonduktor (MEMS) yang cocok untuk sifat listrik dan mekaniknya yang cerdas [1].

Paduan NiTi merupakan senyawa biomaterial karena material ini dapat diaplikasikan bersentuhan langsung dengan organ badan manusia. Biomaterial memiliki 2 sifat antara lain biofungsionalitas dan biokompatibilitas. Dan juga pada tahun-tahun belakangan ini, nanomaterial sudah menarik banyak perhatian sebab sifat mekanik, listrik, optik, serta lainnya yang unik. Sebagai salah satu bahan nano khas, kawat nano logam (NWs) mempunyai prospek aplikasi yang luas dalam membuat sistem *nanoelectromechanical* (NEMS) dan fitur biomedis, optik, serta listrik [2].

Kajian simulasi atau komputasi banyak dilakukan oleh para peneliti di bidang material mulai dari skala makroskopis sampai dengan skala atomik untuk mempelajari sifat-sifat bahan pada kondisi tertentu. Simulasi juga dapat digunakan untuk mendesain material dengan sifat-sifat tertentu sesuai kebutuhan. Salah satu metode komputasi bahan skala atomik yang populer diantara para peneliti adalah simulasi dinamika molekuler. Metode ini dapat digunakan untuk mensimulasikan bahan pada ukuran nanometer yang tersusun dari ribuan sampai dengan ratusan ribu atom. Kelebihan metode ini adalah dapat diamatinya dinamika atom penyusun bahan pada kondisi tertentu yang diberikan. Simulasi ini juga dapat dilakukan pada perangkat komputer dengan kemampuan sedang, bahkan pada berbagai kasus umumnya dapat dilakukan pada personal komputer atau workstation. Dengan berbagai alasan inilah sehingga metode simulasi dinamika molekuler digunakan dalam penelitian ini.

Beberapa tahun belakangan ini penelitian tentang sifat mekanik bahan skala nano banyak menarik atensi studi yang signifikan. Parameter non-Schmid menggambarkan sikap nukleasi dislokasi yang dihitung untuk orientasi kristal tunggal di bawah tegangan, kompresi, serta tegangan yang dibutuhkan untuk nukleasi homogen dislokasi parsial dalam kristal

tunggal Cu di bawah pembebanan uniaksial [3]. Uji kompresi uniaksial mengungkapkan jika kekuatan mekanik kadmium dan Ti sensitif terhadap dimensi specimen [1]. Dalam skala nanometer, simulasi Dinamika Molekuler (MD) sudah menjadi metode yang sangat berharga untuk mempelajari perilaku deformasi kristal logam.

Berdasarkan studi literatur, penulis belum menemukan studi yang mendalam terkait dengan pengaruh temperatur terhadap kekuatan tarik Nikel dan Titanium Nanopillar yang bersumber pada hasil simulasi. Oleh karena itu, dalam riset ini penulis melaksanakan studi.

## TINJAUAN PUSTAKA

### a. Kekuatan Tarik 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. 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 [4].

pengaruh temperatur terhadap kekuatan tarik NiTi Nanopillar menggunakan simulasi dinamika molekuler. Dengan banyaknya penelitian tentang NiTi diharapkan agar menjadi acuan tentang NiTi, dan selanjutnya agar dikembangkan dalam berbagai bidang seta aplikasi.

Dalam penelitian ini, penulis melakukan simulasi dinamika molekuler kekuatan tarik NiTi Nanopillar dengan mengubah temperatur mulai dari temperature 100, 200, 300, 400, 500 dan 600 K serta bagaimana perilaku atom-atom penyusun NiTi nanopillar akibat adanya pembebanan tarik.

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. 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.

### **b. Paduan NiTi**

Paduan NiTi merupakan paduan yang terbentuk dari atom Ni dan Ti. *Nickel* 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 [5].

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 [6]. Paduan NiTi memiliki titik lebur pada *temperature* kurang lebih 1300°C.

### **c. 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 [7].

### **d. Simulasi Dinamika Molekuler**

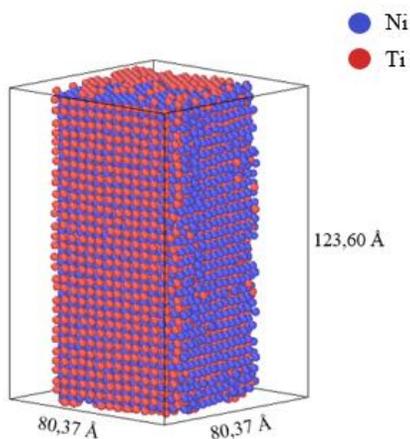
Simulasi dinamika molekuler yaitu sistem yang bisa dipakai untuk mengaplikasikan prediksi terhadap sifat-sifat statik ataupun dinamik yang diturunkan secara langsung dari interaksi ditingkat atom ataupun molekul. Keadaan batasan periodik diberikan pada bagian terluar bidang simulasi. Pada keadaan tersebut, 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 Dissipatively Parallel Simulator* (LAMMPS) adalah contoh salah satu perangkat lunak yang dapat dipakai untuk simulasi dinamika molekuler [8].

## **METODE PENELITIAN**

### **a. Pembuatan Struktur Awal Paduan NiTi**

Langkah selanjutnya adalah membuat struktur awal paduan NiTi terlebih dahulu dengan menggunakan aplikasi Avogadro.

Dimana struktur NiTi ini mempunyai struktur kristal FCC (*Face Centeres Cubic*) karena dalam struktur ini terdapat atom-atom terletak pada bagian sudut dan juga di pusat dari semua permukaan kubus. Untuk setiap unit sel FCC mempunyai 4 atom yaitu diperoleh dari penjumlahan satu per delapan ( $1/8$ ) dari masing-masing atom yang terletak di delapan sudut dengan setengah bagian atom yang terletak di enam permukaan sel. Sedangkan untuk jumlah atom dalam superselnya ada 12. Pembuatan struktur awal paduan NiTi pada Gambar 1.



Gambar 1. Struktur Atom Paduan Niti Nanopillar

Ukuran cell parameternya yaitu  $80,37 \text{ \AA} \times 80,37 \text{ \AA} \times 123,60 \text{ \AA}$ , dan  $\alpha = 90,00000^\circ$ ,  $\beta = 90,00000^\circ$ ,  $\gamma = 90,00000^\circ$ . Jumlah atom keseluruhan yaitu 24000 atom dengan langkah waktu laju peregangan nanopillar  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  dan

langkah intergrasi yang digunakan ialah 1 femtosecond, peregangan NiTi nanopillar dilakukan pada platform Skala Besar *Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS) sedangkan untuk perhitungan hubungan antar atom, penelitian ini memakai metode *Modified Embeded Atom Method* (MEAM). Setelah selesai membuat struktur awal paduan NiTi menggunakan aplikasi Avogadro, langkah selanjutnya yaitu menuju proses ke pengujian.

## b. Variable Penelitian

### 1. Variabel Bebas

Variabel bebas pada penelitian ini menggunakan *software* Avogadro sebagai alat untuk membuat struktur paduan NiTi Nanopillar.

### 2. Variabel Terkait

Variabel terkait pada penelitian ini yaitu:

- a. Penelitian ini dilaksanakan menggunakan simulasi dinamika molekuler dengan mengubah temperature dari 100 K sampai 600 K.
- b. Laju peregangan nanopillar adalah  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$
- c. Langkah intergrasi yang digunakan adalah 1fs.

### 3. Variabel Terkontrol

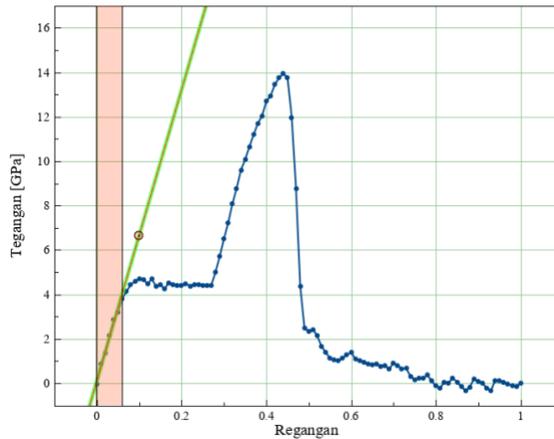
Variabel terkontrol pada penelitian ini adalah suatu hal yang bisa mengubah hasil selama proses pengujian secara simulasi, apabila proses pengujian terjadi eror maka dilakukan perhitungan Kembali.

### c. Prosedur Penelitian

1. Langkah pertama yang dilakukan untuk proses pengujian tarik ini di mulai dengan membuat komposisi awal paduan NiTi memakai aplikasi Avogadro.
2. Setelah selesai menggambar komposisi awal paduan NiTi. Langkah selanjutnya masuk ke aplikasi mobaXterm untuk melaksanakan proses optimasi pada struktur paduan NiTi dengan pengaruh temperature 100 K, 200 K, 300 K, 400 K, 500 K, dan 600 K dengan menggunakan sistem *conjugate gradient* sebelum memasuki proses uji tarik.
3. Sebelum masuk ke langkah RUN, setting optimasi mulai dari setting *equilibration*, menyetting output termometernya, selanjutnya jalankan setidaknya 10 picosecond (dengan asumsi langkah waktu 1 fs).
4. Langkah sekanjutnya menyetting *deformation*, setting output regangan dan stress info ke file, setting satuan logam, tekanan dalam (bar) = 100 = (kPa) = 1/1000 (GPa), menampilkan thermometer yang akan dijalankan.
5. Setelah proses optimasi selesai, langkah selanjutnya dilakukan proses RUN atau menjalankan simulasi pada aplikasi MobaXterm untuk mengetahui hasil dari simulasinya.
6. Langkah selanjutnya hasil dari proses *RUN* kemudian di unduh untuk mendapatkan data dari simulasi.
7. Setelah data hasil simulasi sudah selesai di download, langkah berikutnya memasuki proses pengujian tarik memakai aplikasi OVITO untuk mengetahui komposisi awal paduan sampai proses terjadinya patah.
8. Langkah berikutnya yaitu dari data hasil pengujian tarik ini dapat juga dipakai untuk memvisualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

### a. Fitting Daerah Linier

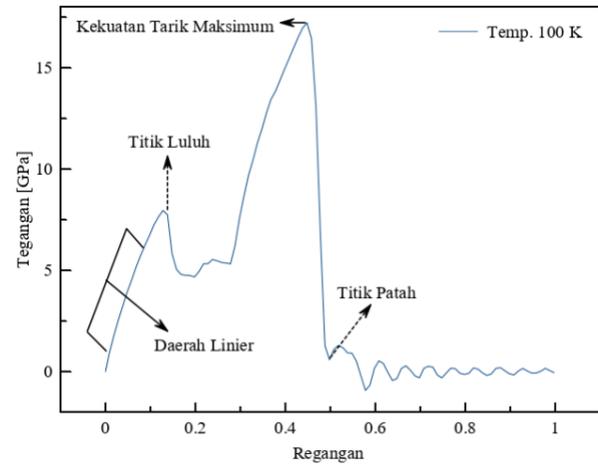


Gambar 2 Contoh grafik *fitting* daerah linier paduan NiTi Nanopillar

Dari gambar 2 di atas menjelaskan saat proses *fitting* daerah linier pada daerah sebelum *Yield Point* yang dilakukan dengan aplikasi MagicPlot Student untuk menentukan nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar variasi *temperature* 100 K sampai 600 K. Dari proses *fitting* daerah linier tersebut ditemukan persamaan fungsi linier pada daerah *Yield Point* yaitu  $y(x) = a.x + b$ . Sehingga dapat diketahui nilai modulus elastisitasnya adalah nilai  $a$  dari persamaan tersebut.

### b. Grafik Tegangan-Regangan Tarik

#### 1. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Temperatur 100 K



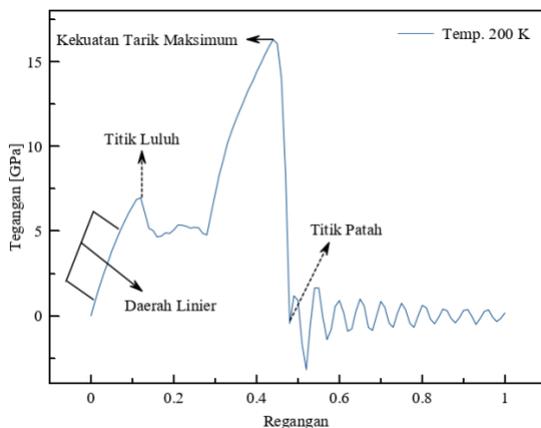
Gambar 3 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 100 K

Pada hasil pengujian tarik yang pertama simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 100 K diperoleh data, selanjutnya di visualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang ditampilkan pada gambar 3. Dimana grafik tersebut memperlihatkan beragam informasi dari hasil uji tarik antara lain daerah linier yang bisa digunakan untuk mengetahui nilai modulus elastisitas, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 3 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 100 K adalah 80,4321 GPa. Setelah

nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui, selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik luluh dengan nilai tegangan sebesar 7,737 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini didapat saat tegangan berada pada nilai 17,215 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai tegangan berada pada 0,5814 GPa dan regangan putusnya berada pada nilai 0,498.

## 2. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Nanopillar Temperatur 200 K



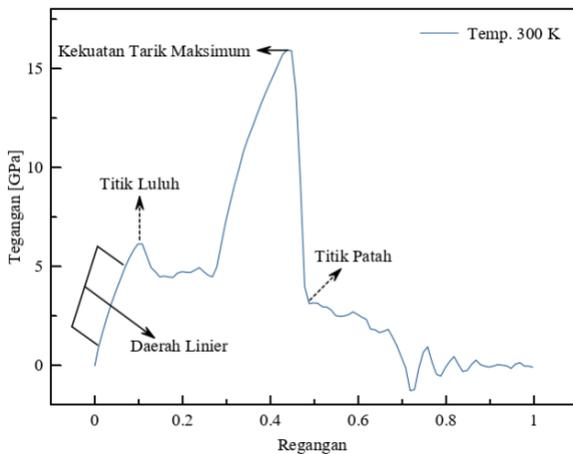
Gambar 4 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 200 K

Pada hasil pengujian tarik yang kedua simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 200 K diperoleh data, yang kemudian di visualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang

ditampilkan pada gambar 4. Dimana grafik di atas memperlihatkan berbagai informasi dari hasil uji tarik diantaranya yaitu daerah linier, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 4 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 200 K adalah 75,7934 GPa. Setelah nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui, selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik luluh dengan nilai tegangan sebesar 6,859 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini didapat saat tegangan berada pada nilai 16,293 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai regangan putusnya berada pada nilai 0,48.

## 3. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Nanopillar Temperatur 300 K



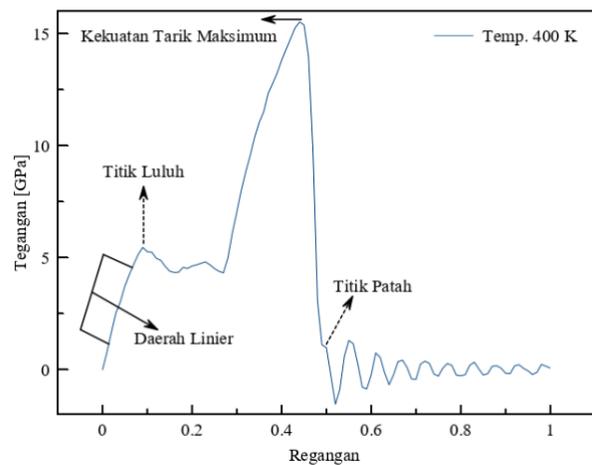
Gambar 5 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 300 K

Pada hasil pengujian tarik yang ketiga simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 300 K diperoleh data, yang kemudian di visualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang ditampilkan pada gambar 5. Dimana grafik tersebut memperlihatkan berbagai informasi dari hasil uji tarik diantaranya yaitu daerah linier, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 5 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 300 K adalah 73,8702 GPa. Setelah nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui,

selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik dengan nilai tegangan sebesar 6,126 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini didapat saat tegangan berada pada nilai 15,927 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai tegangan berada pada 3,1091 GPa dan regangan putusnya berada pada nilai 0,488.

#### 4. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Nanopillar Temperatur 400 K



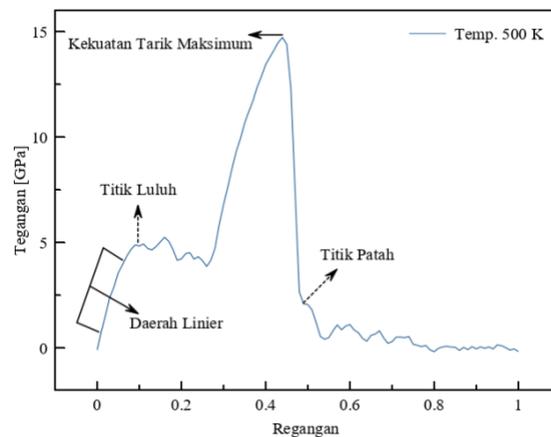
Gambar 6 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 400 K

Pada hasil pengujian tarik yang keempat simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 400 K diperoleh data, yang kemudian di visualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang ditampilkan pada gambar 6. Dimana grafik di

atas memperlihatkan berbagai informasi dari hasil uji tarik diantaranya yaitu daerah linier, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 6 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 400 K adalah 71,6202 GPa. Setelah nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui, selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik luluh dengan nilai tegangan sebesar 5,452 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini diperoleh saat tegangan berada pada nilai 15,516 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai tegangan berada pada 0,9707 GPa dan regangan putusnya berada pada nilai 0,5.

### 5. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Nanopillar Temperatur 500 K



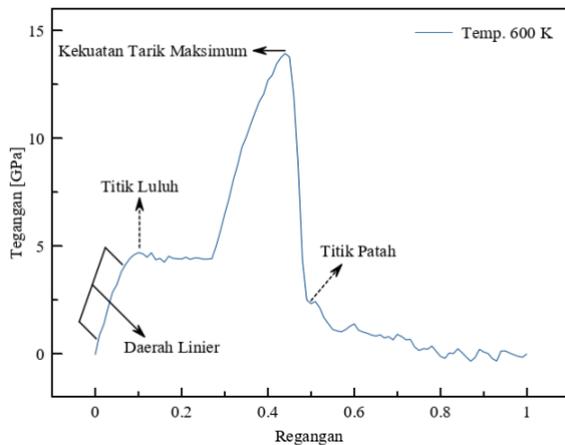
Gambar 7 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 500 K

Dari hasil pengujian tarik simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 500 K yang di lakukan oleh peneliti diperoleh data, yang kemudian di visualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang ditampilkan pada gambar 7. Dimana grafik tersebut memperlihatkan berbagai informasi dari hasil uji tarik diantaranya yaitu daerah linier yang bisa digunakan untuk menghitung nilai modulus elastisitas, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 7 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 500 K adalah 67,7526 GPa. Setelah

nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui, selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik luluhnya (*yield point*) dengan nilai tegangan sebesar 4,882 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini didapat saat tegangan berada pada nilai 14,726 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai tegangan berada pada 2,09 GPa dan regangan putusnya berada pada nilai 0,49.

## 6. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler Paduan NiTi Nanopillar Temperatur 600 K



Gambar 8 Grafik tegangan-regangan paduan NiTi Nanopillar temperatur 600 K

Dari hasil pengujian tarik simulasi dinamika molekuler paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 600 K yang dilakukan oleh peneliti diperoleh data, yang selanjutnya

divisualisasikan ke bentuk grafik tegangan-regangan seperti yang ditampilkan pada gambar 8. Dimana grafik di atas memperlihatkan berbagai informasi dari hasil uji tarik diantaranya yaitu daerah linier yang bisa digunakan untuk menghitung nilai modulus elastisitas, *yield point* (titik luluh), *ultimite tensile strenght* (kekuatan tarik maksimum), dan kondisi *fracture* (patah).

Untuk nilai modulus elastisitasnya dapat dihitung di daerah linier yang bisa dilihat pada gambar 8 dengan menggunakan teknik *fitting* daerah linier yang ada di aplikasi MagicPlot Student, kemudian diketahui untuk nilai modulus elastisitas paduan NiTi Nanopillar temperatur 600 K adalah 65,5847 GPa. Setelah nilai modulus elastisitasnya sudah diketahui, selanjutnya paduan ditarik dengan penambahan tegangan sampai pada kondisi titik luluhnya (*yield point*) dengan nilai tegangan sebesar 4,691 GPa. Untuk kekuatan tarik maksimum paduan ini didapat saat tegangan berada pada nilai 13,929 GPa. Pada kondisi patah (*fracture*) paduan NiTi Nanopillar Temperatur 100 K nilai tegangan berada pada 2,3245 GPa dan regangan putusnya berada pada nilai 0,5.

## PENUTUP

### a. Kesimpulan

Dari hasil pengujian tarik paduan NiTi Nanopillar menggunakan simulasi dinamika

molekuler yang dilaksanakan dengan memvariasi temperatur memperoleh kesimpulan:

1. Paduan NiTi Nanopillar dengan memvariasi temperatur dari 100 K, 200 K, 300 K, 400 K, 500 K, dan 600 K nilai modulus elastisitas paling besar terdapat pada paduan NiTi Nanopillar temperatur 100 K yaitu 80,4321 GPa, artinya paduan NiTi Nanopillar yang memiliki sifat paling kaku yaitu dengan temperatur 100 K, kerana dimana material dengan nilai modulus elastisitas semakin besar jika diberi gaya maka perubahan bentuknya semakin sedikit atau bisa dikatakan material tersebut kaku.
2. Dari hasil pengujian tarik yang telah dilaksanakan jika menambah temperatur paduan NiTi Nanopillar sangat berpengaruh terhadap kekuatan suatu material.
3. Tegangan yang paling tinggi dengan nilai 17,215 GPa diperoleh pada paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 100 K sedangkan untuk tegangan terendah diperoleh hasil 13,929 GPa pada paduan NiTi Nanopillar dengan temperatur 600 K, artinya semakin besar temperatur paduan NiTi Nanopillar maka kuat tarik tegangannya semakin kecil, sebaliknya semakin kecil temperatur paduan NiTi

Nanopillar maka kuat tarik tegangannya semakin besar.

#### **b. Saran**

Setelah melaksanakan penelitian dan pengambilan data, peneliti masih jauh dari kata sempurna. Oleh sebab itu masih banyak kesempatan untuk mengembangkan penelitian ini dan saran untuk peneliti selanjutnya agar memperoleh hasil yang lebih baik adalah:

1. Mevariasi komposisi dan memvariasi temperatur paduan NiTi Nanopillar dalam satu penelitian, supaya lebih paham seberapa kuat paduan NiTi Nanopillar bertahan.
2. Memakai 3 paduan berbeda dengan komposisi yang sama untuk membandingkan kekuatan dari ketiga paduan tersebut dengan memvariasi temperaturnya.
3. Saat proses uji kekuatan tarik paduan NiTi Nanopillar dengan variasi *temperature* 100 K, 200 K, 300 K, 400 K, 500 K, dan 600 K masih jauh dari kata sempurna, selanjutnya bisa lebih disempurnakan lagi proses ujikekuatan tariknya agar bisa mendapatkan hasil yang lebih sempurna.

## DARTAR PUSTAKA

- [1] Ren, J., Sun, Q., Xiao, L., Ding, X., & Sun, J. (2014). Phase transformation behavior in titanium single-crystal nanopillars under [0 0 0 1] orientation tension: A molecular dynamics simulation. *Computational Materials Science*, 92, 8–12.
- [2] Joshi, S. K., Pandey, K., Singh, S. K., & Dubey, S. (2019). Molecular dynamics simulations of deformation behaviour of gold nanowires. *Journal of Nanotechnology*, 2019, 1–5.
- [3] Chaves, F. A., & Jiménez, D. (2018). Mechanical properties and mechanism of single crystal Cu pillar by insitu TEM compression and molecular dynamics simulation. *Nanotechnology*, 29(27).
- [4] Salindeho, R. D., Soukota, J., Poeng, R. (2013). *Pemodelan pengujian tarik untuk menganalisis sifat mekanik material*. Teknik Mesin Universitas Sam Ratulangi, 1–11.
- [5] Zhao, S., Xu, Z., Xu, C., He, Q., & Yang, G. (2021). Ecotoxicology and Environmental Safety Nickel sulfate exposure induces ovarian inflammation and fibrosis and decreases oocyte quality in mice. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 224, 112634.
- [6] Eyercioglu, O., Kanca, E., & Pala, M. (2007). *Prediction of martensite and austenite start temperatures of the Fe-based shape memory alloys by artificial neural*. Mechanical Engineering Department, University of Gaziantep, Gaziantep, Turkey, 146–152.
- [7] Fan, Z., Kapadia, R., Leu, P. W., Zhang, X., Chueh, Y. L., Takei, K., Yu, K., Jamshidi, A., Rathore, A. A., Ruebusch, D. J., Wu, M., & Javey, A. (2010). Ordered arrays of dual-diameter nanopillars for maximized optical absorption. *Nano Letters*, 10(10), 3823–3827.
- [8] Shimono, M., Tsuhiya, K., & Onodera, H. (2013). *Molekular Dynamics Study on Amorphization of NiTi by Serve Plastic Deformation*. Materials Transaction, 54(9), 1572–1579.