

# Simulasi atom mekanika retakan material aluminium dengan pembebanan singkat

Andres Budiono<sup>1</sup>, Erdiansyah<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Fakultas Teknologi, Jurusan Teknik Mesin, Universitas Kebangsaan Republik Indonesia  
Jl. Halimun No. 37 Bandung 40132  
E-mail korespondensi: andresbudiono@gmail.com

## Abstrak

Kajian ini bertujuan untuk memvalidasi hasil percobaan pada uji ketangguhan retak material aluminium di bawah pembebanan dinamis dengan simulasi atom. Model retakan yang digunakan adalah material aluminium dengan orientasi atom [111], [110] dan [112], jumlah atom 17.402 dan kondisi batas periodik untuk mempresentasikan kondisi regangan bidang. Hasil yang diperoleh menunjukkan beberapa dislokasi yang dipancarkan dari ujung retak, pengintian dan pertumbuhan lubang kecil terjadi di depan ujung retak. Lubang kecil terbentuk dari pengintian dislokasi saat beban dijaga konstan yang tidak pernah bersatu dengan retak utama karena jarak antara lubang kecil dan celah utama terlalu jauh secara atom sehingga pertumbuhan lubang menjadi stabil. Validasi secara kualitatif dapat diberikan oleh simulasi atom ini untuk menjelaskan hipotesis yang dibangun dari hasil percobaan.

**Kata kunci:** simulasi atom, pembebanan singkat, aluminium, emisi dislokasi.

## Abstract

This research aims to validate the experimental results on a fracture toughness test of aluminum material under dynamic loading by atomistic simulation. The crack model uses aluminum material with [111], [110], and [112] atomic orientation, 17,402 atom number and periodic boundary conditions to represent plane strain condition. The simulation results show some dislocations emitted from the crack tip, void nucleation and growth take place in front of the crack tip while the load is kept constant which never coalesce with the main crack as the distance of the micro void and the main crack is too far atomically resulting stable void growth. Qualitative validation can be provided by this atomic simulation to explain the hypothesis developed in the experiment.

**Keywords:** atomistic simulation, short pulse loading, aluminum, dislocation emission.

## 1. Pendahuluan

Aluminium merupakan unsur yang paling melimpah di bumi dan banyaknya kegunaannya diantaranya karena kerapatannya yang rendah dan konduktivitas listriknya yang baik [1]. Homma, dkk. [2],[3] telah melakukan serangkaian percobaan pada retakan material aluminium paduan yang disebabkan oleh beban dinamis (*short pulse loading*). Menurut kajian ini, mekanisme retakan terjadi ketika dislokasi yang berasal dari ujung retak menumpuk di batas lapisan perlit yang dihasilkan oleh tegangan yang diterapkan pada retak dan tegangan yang disebabkan oleh tumpukan dislokasi melebihi nilai kritis di dekat tepi terdapan dari dislokasi yang bertumpuk. Dislokasi yang dipancarkan dari ujung retak bergerak ke tempat pengintian (*nucleation*) pembelahan yang membutuhkan waktu tertentu. Jika jarak tempuh dislokasi adalah 30 hingga 120  $\mu\text{m}$  dan dislokasi bergerak pada kecepatan 1 m/detik, akan membutuhkan waktu 30 hingga 120  $\mu\text{detik}$  untuk dislokasi mencapai lokasi pengintian. Hal ini berarti pembelahan retakan di bawah pembebanan dinamis terjadi sementara beberapa dislokasi yang berasal dari ujung retak masih bergerak ke lokasi pengintian, yaitu

tidak mencapai posisi penumpukannya. Oleh karena itu, suatu simulasi sangat penting dilakukan untuk menyelidiki bagaimana perilaku dislokasi dan pengintian retakan di bawah beban dinamis seperti yang dilaporkan oleh hasil percobaan.

Banyak peneliti yang telah melakukan simulasi atom untuk memahami fenomena yang terjadi di dekat ujung suatu retakan. Solemany, dkk. [4] menyelidiki fenomena dislokasi di material aluminium dengan berbagai *potential atom* model untuk mendapatkan hasil yang paling akurat. Yamakov, dkk. [5] menyelidiki proses pembentukan dislokasi di sekitar ujung retakan dengan berbagai variasi arah kristalografi dan temperatur. Yun Long, dkk. [6] menggunakan simulasi atom dengan skala nano meter untuk mengamati proses pecahnya lubang retakan pada kristal aluminium tunggal di bawah tekanan satu dan tiga dimensi dengan laju regangan yang sangat tinggi. Yung Long, dkk. [7] juga menggunakan simulasi atom untuk mengamati respon dinamik dari sebuah cacat lubang di material aluminium dengan tiga pola pembebanan yaitu laju regangan tetap, tegangan tetap, dan pembebanan tiba-tiba (*impact load*). Hasil kajian ini menunjukkan bahwa respon dinamis mempunyai ketergantungan yang kecil

terhadap pola pembebanan dengan amplitudo kecil. Walaupun kajian-kajian tersebut menunjukkan bahwa simulasi atom dapat memberikan hasil yang akurat dan detail untuk menjelaskan fenomena retakan, tetapi beberapa kajian ini hanya fokus melakukan simulasi mekanika retakan statis saja, belum ada simulasi atom untuk pembebanan dinamis seperti dilakukan percobaan.

Tujuan dari kajian ini adalah untuk menyelidiki perilaku gerakan dislokasi yang dipancarkan oleh ujung retak di bawah pembebanan dinamis dalam aluminium dalam skala atom. Hasil simulasi menunjukkan bahwa beberapa dislokasi yang dipancarkan dari ujung retak yang menghasilkan pengintian dan pertumbuhan lubang mikro (*micro void*) di depan ujung retak. Lubang mikro dimulai dari inti dislokasi saat pembebanan dijaga konstan yang tidak pernah bersatu dengan retak utama karena jarak antara lubang kecil dan celah utama terlalu jauh secara atom yang menghasilkan pertumbuhan lubang yang stabil. Validasi dapat memberikan validasi secara kualitatif yang bisa menjelaskan hipotesis yang dibangun dari hasil percobaan yang dilakukan oleh Rizal dan Homma [2].

## 2. Metode

### Persamaan Dasar

Persamaan dasar yang digunakan dalam simulasi atom merupakan persamaan dasar Hukum Mekanika Newton [8] seperti ditunjukkan pada Persamaan 1 berikut.

$$m \frac{d^2 r_i}{dt^2} = F_i = - \frac{\partial \Phi}{\partial r_i} \quad (1)$$

Di mana  $m$  adalah massa atom,  $r_i$  adalah posisi atom  $i$ ,  $F_i$  adalah gaya antar atom, dan  $\Phi$  adalah potensial antar atom. Potensial antar atom menggunakan *Embedded Atomic Method* (EAM) yang didasarkan pada Teorema Hohenber-Kohn [9] yang menyatakan bahwa kontribusi energi dari atom pada tetangga sekitarnya adalah fungsi dari kerapatan elektron lokal karena semua atom di sekitarnya.

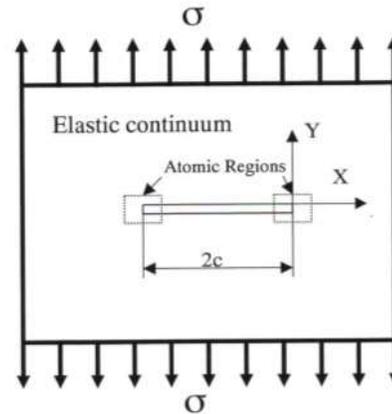
Aluminium mempunyai struktur *face centered cubic* (*fcc*) dengan delapan sudut oktan berkontribusi total dalam satu atom, dan enam atom *fcc* berkontribusi pada total atom untuk sel satuan. Dalam logam, konstanta kisi ( $a$ ) berhubungan dengan jari-jari atom ( $R$ ) dengan hubungan pada Persamaan 2 berikut.

$$(a_{fcc})_{metal} = \frac{4R}{\sqrt{2}} \quad (2)$$

Faktor *packing* untuk logam *fcc* adalah 0,74, di mana nilainya lebih besar dari pada factor *packing* logam *body centered cubic* (*bcc*) yaitu 0,68.

Kajian ini hanya menyelidiki area kecil di dekat ujung retak di daerah material elastis-kontinum yang sangat besar dengan modulus  $I$  pembukaan retakan. Karena area atom sangat kecil yaitu dalam skala angstrom jika dibandingkan dengan panjang retak, maka masalah ini

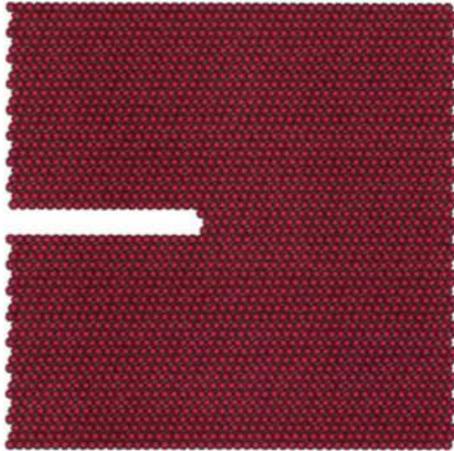
bisa diklasifikasikan ke *small scale yield* (SSY) seperti yang dijelaskan pada Gambar 1. Ketika suatu beban diterapkan pada model ini, maka atom-atom akan berperilaku non-linier, di mana garis putus-putus adalah batas antara area atom dan daerah elastis kontinum, di mana selama simulasi pergerakan atom akan mengikuti solusi elastis untuk bahan tidak isotropik [10].



Gambar 1. Domain simulasi atom.

Model simulasi yang digunakan berasal dari konfigurasi atom tunggal yang mempunyai susunan orientasi atom seperti yang dijelaskan pada Gambar 2, di mana susunan orientasi atom berdasarkan sistem slip *fcc* seperti dijelaskan di atas. Sumbu x diatur sebagai arah [110] karena diharapkan bahwa dislokasi akan bergerak sepanjang sumbu ini dan sumbu y dan z diatur masing-masing sebagai arah [111] dan [112].

Model material yang dipakai adalah aluminium dengan jumlah atom 17,407 buah, temperatur material 300°K, dan tekanan 0 Pa. Potensial antar atom yang digunakan adalah model potensial EAM yang diusulkan oleh Diana Farkas, dkk. [11], Integrator yakni *finite difference method, step* waktu yang digunakan adalah  $10^{-15}$  detik,  $K_{IG}$  sebesar 0,2219 MPa, dan ukuran atom adalah (30 x 30 x 4,5). Notasi  $a_0$ , di mana adalah konstanta kisi aluminium dengan nilai  $a_0$  yakni 4,04 Å. Kondisi batas yang digunakan yaitu kondisi batas tetap yang diterapkan pada sumbu x dan y, kondisi batas periodik diterapkan pada sumbu z untuk mengakomodasi kondisi regangan bidang seperti ditunjukkan oleh Gambar 2. Kemudian, semua parameter simulasi dan kondisi batas di atas diinput ke dalam *in-house Molecular Dynamics Program* (MDP) yang dikembangkan dengan Bahasa C++ untuk mendapatkan posisi atom setelah dilakukan pembebanan dengan jangka waktu yang sudah ditentukan.



Gambar 2. Kondisi awal.

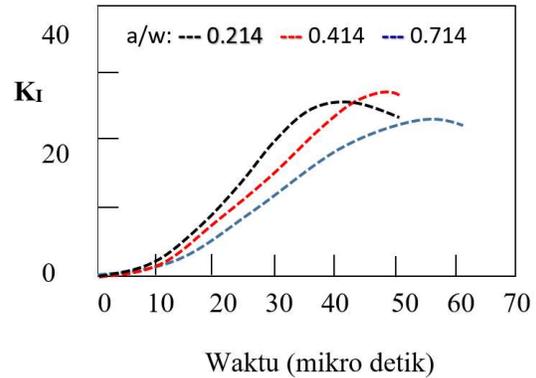
**Kondisi Pembebanan**

Kondisi pembebanan digunakan dalam simulasi adalah pembebanan dinamis yang berbeda secara signifikan dengan pembebanan statis atau kuasi-statis. Ketika beban diterapkan hanya dalam periode waktu yang sangat singkat atau berubah dengan cepat, efek penyebaran gelombang tegangan harus dipertimbangkan. Dalam hal ini, ketika deformasi diberikan dari luar dengan kecepatan sangat tinggi maka satu bagian material akan tertekan sedangkan bagian lainnya belum mengalami tekanan ini. Dengan kata lain, tekanan terkait dengan deformasi dan regangan harus melakukan perjalanan melalui material pada kecepatan yang ditentukan.

Karena mekanika retakan dinamis dalam beberapa hal dianggap sebagai perpanjangan logis dari mekanika retakan statis, perilaku retakan dinamis cenderung diperlakukan secara semi-empiris berdasarkan perilaku retakan statis. Sebagai contoh, intensitas tegangan ujung retak juga digunakan sebagai parameter retakan dinamis untuk menjelaskan kriteria ketidakstabilan retak di bawah pembebanan cepat. Salah satu kriteria yang diusulkan didasarkan pada mekanika retakan statis klasik, retak itu menjadi tidak stabil ketika intensitas tegangan dinamis maksimum melebihi nilai kritisnya,  $K_{Dyn,Max}$ . Ketangguhan patah dinamis ditentukan dari ukuran retak kritis, amplitudo tarik berdasarkan rumus mekanika perpatahan statis,  $K=\sigma.f(a/w)$ . Jadi, dalam kriteria ini, parameter ketidakstabilan hanya panjang retak dan tingkat tegangan.

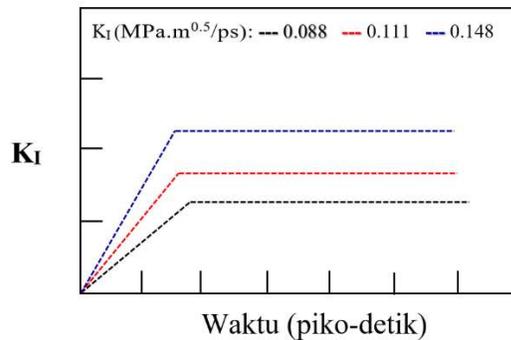
Selain itu, data eksperimen oleh Homma, dkk. [2] pada Gambar 3 menunjukkan bahwa nilai maksimum intensitas tegangan dinamis  $K_{Dyn,Max}$ , yang dihasilkan untuk inisiasi retak tidak dapat dianggap sebagai ketangguhan patah dinamis,  $K_{ID}$ . Hal ini menunjukkan bahwa  $K_{Dyn,Max}$  bervariasi dengan panjang retak untuk

material dan karenanya tidak dapat diambil sebagai properti material.



Gambar 3. Pembebanan pada percobaan [2].

Pembebanan pada simulasi didekati pembebanan singkat bertahap (*step wise loading*) seperti yang ditunjukkan dalam Gambar 4. Laju pembebanan diatur bertambah dengan kecepatan gradient tertentu sampai mencapai amplitudo tertentu kemudian dijaga konstan.



Gambar 4. Pembebanan pada simulasi.

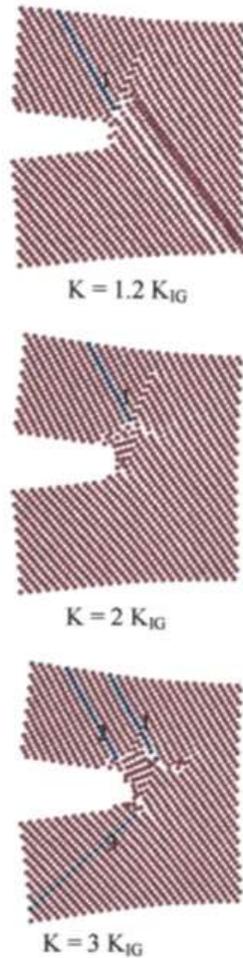
**3. Hasil dan Pembahasan**

Setelah dilakukan simulasi dengan kondisi batas dan pembebanan di atas, hasil simulasi menunjukkan terjadinya beberapa fenomena setelah proses kesetimbangan. Hal ini meliputi emisi dislokasi dari ujung retak, pertumbuhan lubang retak dan efek laju pembebanan pada pertumbuhan lubang. Karena simulasi atom mengikuti gaya aktual pada atom ketika mereka berpindah, retakan mikroskopis dan mekanisme plastik dapat diidentifikasi dengan pengamatan langsung.

**Dislokasi**

Dislokasi tepi dipancarkan dari ujung retak selama simulasi. Berdasarkan pengamatan, dislokasi tepi pertama dipancarkan ketika beban  $1,2K_{IG}$ , dan kemudian dislokasi ini pindah sepanjang bidang slip dengan vektor Burgers  $a_0/2\langle 110 \rangle$ , ketika beban mencapai  $3K_{IG}$ , dua dislokasi tepi dipancarkan dari ujung retak, satu di bagian atas dan yang lain di bagian bawah. Dislokasi terus bergerak ketika beban meningkat dan ketika dislokasi mencapai kondisi

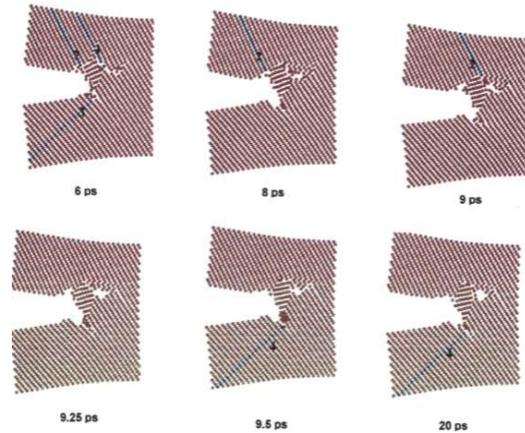
batas, dislokasi tertahan oleh lapisan batas sehingga atom-atom tersebut tidak bisa bergerak lagi seperti ditunjukkan oleh Gambar 5 yang menunjukkan proses emisi dislokasi.



Gambar 5. Emisi dislokasi tepi.

#### Pertumbuhan Lubang (Void Growth)

Ketika beban mencapai tingkat tertentu seperti yang ditunjukkan pada Gambar 6 dan beban dijaga konstan untuk jangka waktu tertentu, kekosongan atom terbentuk sebelum ujung retak. Dislokasi pertama yang terjadi menjadi inti lubang kecil di depan ujung retak sekitar  $15^\circ$  miring dari sumbu x pada waktu 6 ps. Sementara itu, dislokasi kedua bergerak menjauh dari ujung retakan untuk membentuk lubang kecil yang baru, dan dislokasi ketiga yang terletak di bagian bawah bergabung menyatu dengan retakan utama. Pada waktu 9,5 ps, dislokasi keempat dipancarkan dan lubang terus tumbuh. Akhirnya, pertumbuhan lubang mencapai ukuran stabil setelah 20 ps. Evolusi pertumbuhan lubang retak ini diperlihatkan di plot Gambar 6, di mana titik awal adalah waktu ketika tepi dislokasi menjadi inti mikro kosong.



Gambar 6. Evolusi pertumbuhan void.

#### Variasi Pembebanan

Tiga jenis laju pembebanan dilakukan pada simulasi ini yaitu  $0,088 \text{ MPa.m}^{0.5}/\text{ps}$ ,  $0,111 \text{ MPa.m}^{0.5}/\text{ps}$ , dan  $0,148 \text{ MPa.m}^{0.5}/\text{ps}$ . Hasil simulasi menunjukkan bahwa semakin tinggi tingkat pembebanan yang diberikan maka semakin kecil lubang retak yang tumbuh, hal ini sesuai dengan teori plastisitas bahwa ketika suatu beban diterapkan pada suatu material dengan laju pembebanan yang sangat tinggi, maka waktu bagi material untuk mengalami deformasi plastis tidak cukup. Inilah sebabnya mengapa ukuran lubang retakan menjadi lebih kecil di bawah laju pembebanan yang lebih tinggi.

#### 4. Kesimpulan

Hasil simulasi atom dapat memberikan beberapa penjelasan kualitatif bagaimana perilaku retakan, pergerakan dislokasi dan evolusi pengintian lubang retak pada aluminium di bawah pembebanan dinamis seperti yang dihipotesiskan di hasil percobaan. Kajian lanjut yang melibatkan jumlah atom yang lebih besar dan kondisi batas yang lebih realistis perlu dilakukan untuk bisa memberikan validasi secara kuantitatif.

#### Ucapan Terima Kasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Prof. Hiroomi Homma (pensiun) dari Toyohashi University of Technology, Jepang, atas bimbingan dan masukan teknis selama melakukan penelitian.

#### Daftar Pustaka

- [1] A. I. Nafilli, Sri Mulyo Bondan Respati, Budi Santoso, "Pengaruh kandungan alumina terhadap kekasaran permukaan dan foto mikro permesinan pada komposit Al-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>," Jurnal Teknik Mesin Indonesia, Vol. 12, No. 2, hal. 94-97, 2017.
- [2] D. A. Shockey, D. C. Erlich, J. F. Kalthoff, and H. Homma, "Short-pulse fracture mechanics," *Eng. Fract. Mech.*, vol. 23, no. 1, pp. 311-319, 1986.

- [3] S. Rizal and H. Homma, "Dimple fracture under short pulse loading," *Int. J. Impact Eng.*, vol. 24, no. 1, pp. 69–83, 2000.
- [4] M. Soleymani, M. H. Parsa, and H. Mirzadeh, "Molecular dynamics simulation of stress field around edge dislocations in Aluminum," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 84, pp. 83–96, Mar. 2014.
- [5] V. I. Yamakov, D. H. Warner, R. J. Zamora, E. Saether, W. A. Curtin, and E. H. Glaessgen, "Investigation of crack tip dislocation emission in aluminum using multiscale molecular dynamics simulation and continuum modeling," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 65, no. 1, pp. 35–53, Apr. 2014.
- [6] Y. L. Guan, J. L. Shao, and W. Song, "Molecular dynamics study on nanoscale void collapse in single crystal aluminum under 1D and 3D compressions," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 161, pp. 385–393, Apr. 2019.
- [7] Y. L. Guan, J. L. Shao, and W. D. Song, "Molecular dynamics study on dynamic response of void-included aluminum under different loading patterns," *Int. J. Mech. Sci.*, vol. 181, p. 105707, Sep. 2020.
- [8] D. C. Rapaport, Rapaport, "The Art of Molecular Dynamics Simulation . D. C. Rapaport," *Cambridge Univ. Press*, 2004.
- [9] P. Hohenberg, W. Kohn, and S. Abstract, "PHYSICAL REVIEW JOURNALS ARCHIVE" Volume 136 , Issue 3B, vol. 19, no. November, 1964.
- [10] J. Rose, J., Smith, J. and Ferrante, "Physical Review B," vol. 28, 1983.
- [11] Y. Mishin, D. Farkas, M. J. Mehl, and D. A. Papaconstantopoulos, "Interatomic potentials for Al and Ni from experimental data and ab initio calculations," *Mater. Res. Soc. Symp. - Proc.*, vol. 538, no. 5, pp. 535–540, 1999.