

Efek Hidrogen Pada Void *Coalescence* : Sebuah Studi Numerik (Hydrogen Effects on Void Coalescence : A Numerical Study)

Agung Premono

Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Negeri Jakarta
Jl. Rawamangun Muka Jakarta Timur 13220
E-mail : premono.agung@gmail.com

Abstrak

Hidrogen merupakan salah satu sumber energi yang dikembangkan sebagai energi alternatif. Ada banyak kelebihan hidrogen, tetapi ada juga kekurangannya. Sesuai dengan teori *Hydrogen Enhanced Localized Plasticity* (HELP), salah satu sifat negatif hidrogen adalah mempercepat kegagalan material ulet (*ductile fracture*), yang dikenal dengan fenomena *hydrogen embrittlement*. Studi ini bertujuan untuk mensimulasikan efek hidrogen pada salah satu tahapan kegagalan material ulet yaitu void *coalescence*. Metode yang digunakan adalah simulasi berbasis metode elemen hingga dengan *coupled analysis* antara elastoplastic dan difusi hidrogen. Ada dua model yang digunakan dalam simulasi tersebut yaitu model yang hanya dibebani gaya sampai tahapan elastoplastic tanpa adanya difusi hidrogen dan model yang diberikan pembebanan elastoplastic analisis ditambah dengan difusi hidrogen. Hasil simulasi menunjukkan bahwa *ultimate stress* (saat terjadinya *necking*) pada model yang ditambah dengan beban hidrogen terjadi lebih cepat dibandingkan dengan model yang tanpa diberikan beban hidrogen. Dari hasil ini terlihat bahwa hidrogen akan mempercepat *ductile fracture*.

Keywords: Hidrogen Embrittlement, Void *Coalescence*, HELP theory, Ductile Fracture, Coupled Analysis

Pendahuluan

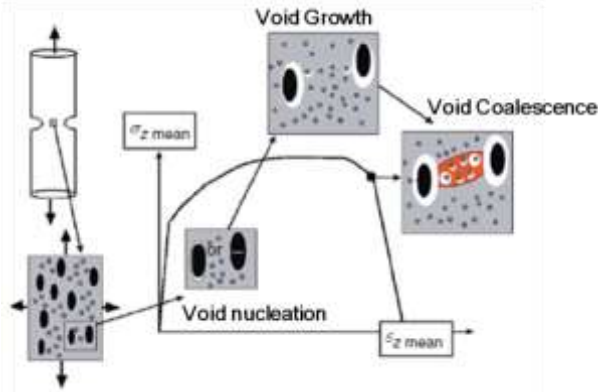
Hidrogen merupakan salah satu energi alternatif yang sedang dikembangkan di beberapa Negara, seperti Jepang, Jerman, dan Amerika. Beberapa kelebihan hidrogen antara lain : dapat diproduksi secara local pada lokasi tertentu dari berbagai sumber yang ada, tidak tergantung kepada waktu, dan ketika dapat diproduksi dari air akan menjadi energi yang tidak memiliki limbah, serta yang paling utama adalah elemen terbanyak yang ada di bumi. Tetapi, bukan berarti hidrogen tidak memiliki kekurangan. Satu dari masalah penggunaan hidrogen sebagai energi alternative adalah fenomena *hydrogen embrittlement*. Fenomena ini terjadi ketika hidrogen berinteraksi dan berdifusi dengan material logam. Pada kondisi yang demikian maka hidrogen memiliki efek yang tidak diinginkan pada logam yang dapat dicirikan dengan : (1) berkurangnya sifat kekuatan material, (2) melemahnya keuletan dan ketangguhan terhadap patahan, (3) mempercepat rambatan retak, serta (4) mengubah mode *fracture*. Sehingga dengan kondisi yang demikian, dapat dikatakan hidrogen mempengaruhi kerusakan material ulet. Kegagalan material ulet dalam skala mikro terbagi atas tiga tahapan, yaitu inisiasi void, void *growth*, dan void *coalescence* (Pineau & Pardeon, 2007).

Setelah tahapan void *coalescence*, maka terjadilah rambatan retak. Dengan demikian, void *coalescence* merupakan tahapan kritis terjadinya kegagalan material ulet. Banyak penelitian tentang void *coalescence* telah dilakukan (Koplik & Nedleman, 1988, Pardeon & Hutchinson, 2000, Thomason, 1985a) tetapi semua penelitian tersebut meneliti tentang void *coalescence* akibat pembebanan gaya sebagai sumber utama beban. Beberapa peneliti lain telah melakukan adanya eksternal efek terhadap void *coalescence*. Ahn (2007) melakukan penelitian tentang efek hidrogen pada void *coalescence*. Tetapi model yang digunakan adalah void tunggal. Kelemahan model ini adalah adanya asumsi bahwa void seragam. Sementara, Premono & Kanayama (2013) telah mensimulasikan karakteristik void *coalescence* akibat difusi hidrogen. Pada studi tersebut, tidak tampak jelas terjadinya fenomena *necking* sebagai tahapan krusial dalam skala makro dari kegagalan material ulet. Sehingga, studi ini dilakukan dengan tujuan untuk mencari terjadinya fenomena *necking* pada simulasi kegagalan material ulet akibat beban gaya saja maupun akibat pembebanan ganda (*coupled analysis*) antara elastoplastic dan difusi hidrogen.

Teori Dasar

Ductile fracture merupakan proses kegagalan yang paling sering ditemui pada material logam. Ciri utama dari

ductile fracture secara makroskopik adalah adanya proses pengecilan penampang (*necking*) sebelum material tersebut patah. Secara makroskopik, *ductile fracture* terbagi atas tiga tahapan yaitu void nucleation, void growth, dan void coalescence seperti yang direpresentasikan pada gambar 1. (Pineau & Pardeon, 2007)



Gambar 1. Skema dari proses inisiasi void, void growth, dan void coalescence. (Pineau & Pardeon, 2007)

Banyak factor yang mempengaruhi terjadinya *ductile fracture*, baik factor internal (sifat material) maupun eksternal (gaya luar/pembebanan). Salah satu factor yang mempengaruhi adalah difusi hidrogen pada material yang dikenal dengan istilah *hydrogen embrittlement*. Persamaan dasar difusi hidrogen pada pembebanan elastoplastis adalah (Krom, 1988) :

$$\frac{C_L + C_T(1-\theta_T)}{C_L} \frac{\partial C_L}{\partial t} - \nabla \cdot (D_L \nabla C_L) + \nabla \cdot \left(\frac{C_L D_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \sigma_h \right) + \theta_T \frac{dN_T}{d\varepsilon_p} \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t} = 0. \quad (1)$$

Dengan skema *time-implicit* dan perubahan waktu Δt , maka persamaan difusi hidrogen (1) menjadi.

$$\left(\left[1 + \frac{N_L K_T N_T (\varepsilon_p^n)}{(K_T C_L^n + N_L)^2} \right] \left(\frac{C_L^{n+1} - C_L^n}{\Delta t} \right), C_L^* \right)_{\Omega} + (D_L \nabla C_L^{n+1}, \nabla C_L^*)_{\Omega} - \left(\frac{C_L^{n+1} D_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \sigma_h^n, \nabla C_L^* \right)_{\Omega} + \left(\left(\frac{C_L^{n+1} K_T}{K_T C_L^n + N_L} 29.508 N_T \right) \left(\varepsilon_p^n \right) e^{-5.5 \varepsilon_p^n} \frac{\varepsilon_p^{n+1} - \varepsilon_p^n}{\Delta t}, C_L^* \right)_{\Omega} = 0. \quad (2)$$

Penurunan persamaan (1) menjadi (2) terdapat pada

Kanayama et.al. (2008) Selanjutnya, dengan mendiskretisasi domain menjadi beberapa elemen dengan metode elemen hingga, maka pendekatan persamaan (2) pada polyhedral domain Ω menjadi:

$$\left(\left[1 + \frac{N_L K_T N_T (\varepsilon_p^n)}{(K_T C_L^n + N_L)^2} \right] \left(\frac{C_L^{n+1} - C_L^n}{\Delta t} \right), C_L^* \right)_{\Omega} + (D_L \nabla C_L^{n+1}, \nabla C_L^*)_{\Omega} - \left(\frac{C_L^{n+1} D_L \bar{V}_H}{RT} \nabla \sigma_h^n, \nabla C_L^* \right)_{\Omega} + \left(\frac{C_L^{n+1} K_T}{K_T C_L^n + N_L} 29.508 N_T \left(\varepsilon_p^n \right) e^{-5.5 \varepsilon_p^n} \frac{\varepsilon_p^{n+1} - \varepsilon_p^n}{\Delta t}, C_L^* \right)_{\Omega} = 0, \quad (3)$$

dimana adalah C_L^* adalah test function untuk C_L pada domain Ω .

Local softening yang digunakan pada analisis ini merujuk pada Sofronis (2001) dengan persamaan:

$$\sigma_Y = \sigma_0(c) \left(1 + \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_0} \right)^n \quad (4)$$

dimana yield stress yang mempertimbangkan adanya hidrogen didefinisikan dengan persamaan:

$$\sigma_0(c) = (\xi c + 1) \sigma_0 \quad (5)$$

Metoda Penelitian dan Skema Numerik

Metoda penelitian yang digunakan dalam studi ini adalah simulasi numerik menggunakan metode elemen hingga. Skema numerik yang digunakan adalah *coupled analysis* yang digunakan untuk menganalisis hidrogen transport pada model void *coalescence* dengan memperhitungkan efek difusi hidrogen pada material (*local softening*), dan efek analisis elastoplastis pada konsentrasi hidrogen di *lattice* dan *trap sites*. Analisis elastoplastis dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak komersial MSC MARC, elemen heksahedral 8-nodal, dan formula updated Lagrange (UL) (MSC Marc, 2006). Sedangkan untuk analisis difusi hidrogen menggunakan program yang disusun oleh tim Laboratorium *Computational Mechanics, Mechanical Engineering Dept., Kyushu University* dengan elemen quadratic tetrahedral 10-nodal. Pada tahap pertama, yang pertama kali dilakukan adalah analisis elastoplastis dengan beban gaya dan difusi hidrogen yang ada di *lattice sites*. Hidrogen di *trap sites* untuk tahapan ini diasumsikan diabaikan. Dengan asumsi tersebut maka konsentrasi hidrogen pada NILS (*Number of interstitial lattice sites*)

sama dengan konsentrasi hidrogen total yang akan digunakan untuk analisis tahap pertama untuk menghitung inisial *yield stress* yang mempertimbangkan adanya difusi hidrogen. Dari analisis tersebut diperoleh nilai perpindahan, hydrostatic stress, dan total equivalent plastic strain pada setiap nodal. Nilai-nilai tersebut kemudian ditransfer ke analisis difusi hidrogen untuk menghitung konsentrasi hidrogen di lattice dan trap sites yang baru akibat adanya pembebanan struktur. Pada setiap akhir analisis, maka hidrogen konsentrasi yang baru diperbarui dan ditransfer ke analisis struktur untuk menghitung analisis struktur pada tahap berikutnya. Skema tersebut akan diulang sampai dengan waktu pembebanan selesai. Metode ini dapat digambarkan secara diagram pada gambar 2.

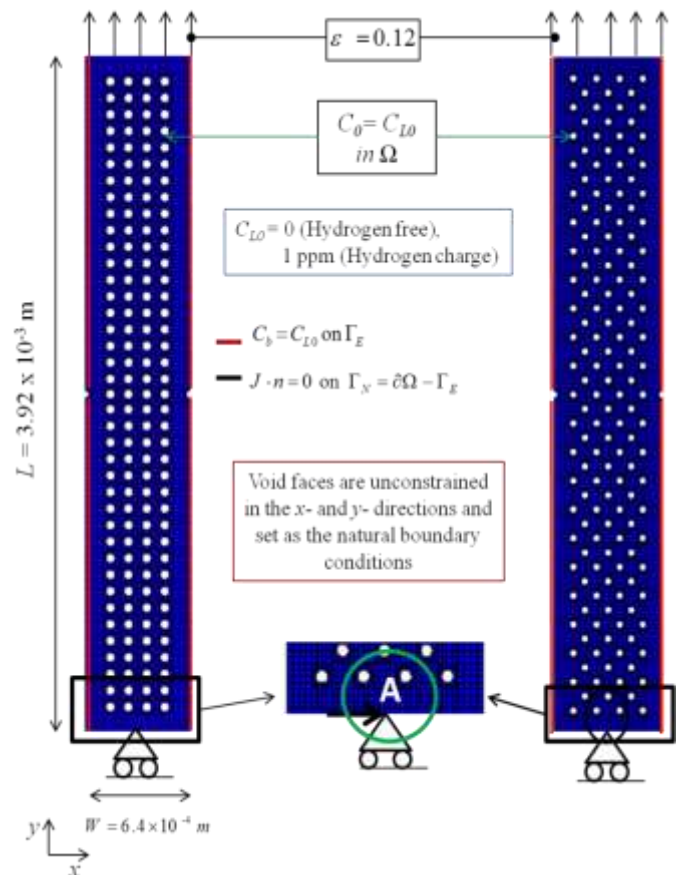


Gambar 2. Diagram alir (Premono, 2013)

Model dan Kondisi Batas

Model yang digunakan dalam penelitian adalah model uji tarik dengan *notch* yang mengandung *voids*. Inisial void volume fraction (f_0) = 0.14 dengan inisial radius 27 μm . Jarak antara voids sama baik dalam arah x dan y, yaitu 80 μm . Panjang, lebar, dan jari-jari notch untuk model adalah $3.92 \times 10^{-3} \text{ m}$, $6.4 \times 10^{-4} \text{ m}$, dan $20 \times 10^{-6} \text{ m}$. Untuk kondisi batas, model diberikan beban regangan sebesar 19 % *strain* dalam waktu 100 detik dan perubahan waktu pembebanan setiap 0.5 detik. Beban tersebut diberikan pada salah satu ujung model (bagian atas) pada arah y, sedangkan ujung yang satunya (bagian bawah) ditahan pada arah yang sama. Pada ujung bawah ada satu nodal yang ditahan pada arah x. Untuk mensimulasikan

model dalam kondisi pembebanan plane strain, maka kita model dibuat sangat tipis dengan menahan semua perpindahan nodal ke arah z sepanjang analisis. Konsentrasi hidrogen diasumsikan konstan pada bagian luar yang diindikasikan dengan garis merah pada gambar, dan akan diberikan nilai 0 ppm untuk model pembebanan tanpa hidrogen dan 1 ppm untuk model yang diberikan pembebanan hidrogen. Diasumsikan juga bahwa permukaan radius void dan notch tidak diberi hidrogen. Inisial hidrogen diberikan secara seragam pada NILS di semua area model sebelum adanya pembebanan regangan. Kondisi batas ini dapat dilihat secara visual pada gambar 3. Bahan yang digunakan dalam simulasi tersebut adalah baja karbon. Adapun nilai parameter konstan baik dari material maupun hidrogen dapat dilihat pada tabel 1



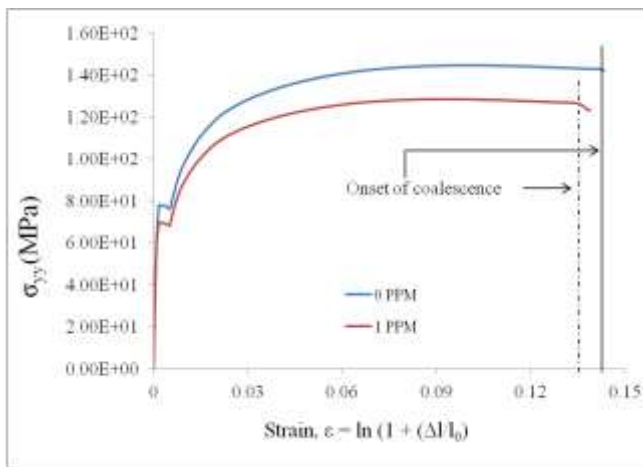
Gambar 3. Model dan kondisi batas (Premono, 2013)

Tabel 1. Parameter bahan dan hydrogen (Premono, 2013)

Young's modulus, E	207 Gpa
Poisson ration, ν	0.3
Initial yield stress, σ_Y	250 MPa
The work hardening exponent, n	0.2
Gas constant, R	8.3144 J / mol K
Partial molar volume of hydrogen, \bar{V}_H	$2 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$
Lattice sites per unit volume N_L	$5.1 \times 10^{29} \text{ m}^{-3}$
Trap binding energy, ΔE_T	$-6 \times 10^3 \text{ J / mol}$

Hasil dan Pembahasan

Grafik tegangan-regangan dari hasil simulasi dapat dilihat pada gambar 5. Grafik tersebut menunjukkan bahwa ultimate stress terjadi pada regangan yang berbeda antara yang diberikan beban hidrogen dan tanpa diberikan beban hidrogen dimana $\epsilon_p=0.13$ dan $\epsilon_p=0.15$ untuk yang tanpa dan dengan hidrogen. Dari grafik tersebut dapat disimpulkan bahwa hidrogen memperlemah kekuatan material dan mempercepat terjadinya ultimate stress. Untuk memvalidasi hasil simulasi, maka grafik gambar 4 dibandingkan secara kualitatif dengan hasil penelitian yang sudah dipublikasi (Matsuoka, 2006).

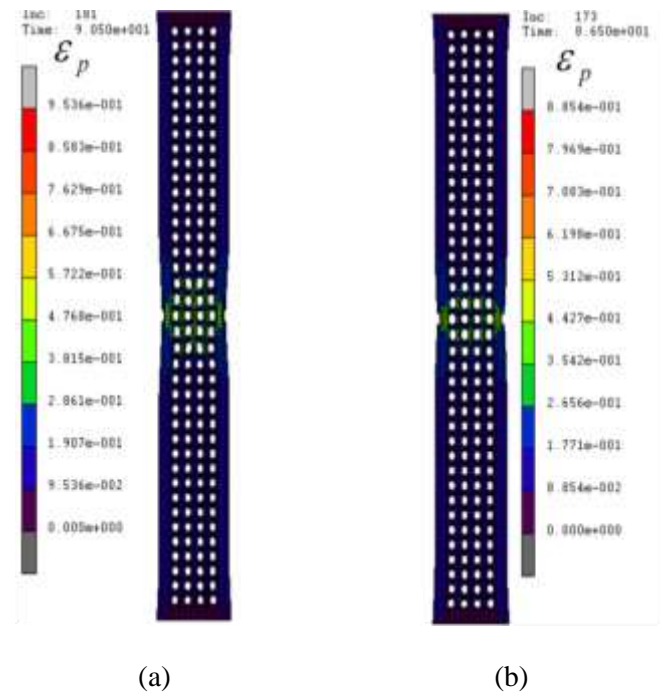


Gambar 4. Grafik Stress-Strain

Plot kontur total equivalent plastic strain dapat dilihat pada gambar 5, dimana gambar 5 (a) adalah kondisi tanpa adanya hidrogen dan 5 (b) adalah kondisi dengan adanya difusi hidrogen. Simulasi model yang hanya diberikan pembebanan gaya akan berhenti pada waktu 90.5 detik, sedangkan untuk model yang ditambah difusi hidrogen akan berhenti pada waktu 86.5 detik. Dari dua kondisi ini terlihat bahwa hidrogen akan mempercepat terjadinya kerusakan.

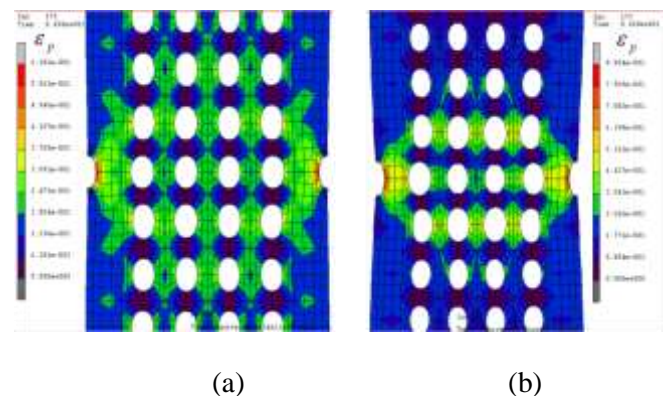
Untuk membandingkan nilai total equivalent plastic strain, maka diambil proses simulasi pada waktu 86.5 detik seperti yang terlihat pada gambar 6. Gambar tersebut diambil pada bagian tengah model yang mengalami total equivalent plastic strain maksimal. Pada gambar 6 (a) dimana hidrogen tidak diberikan pada model, nilai total equivalent plastic strain yang terjadi adalah 0.62, sedangkan untuk model yang diberikan pembebanan difusi hidrogen menghasilkan total equivalent plastic strain maksimal sebesar 0.89. Dari kedua nilai tersebut dapat dilihat bahwa hidrogen akan menaikkan nilai total equivalent plastic strain maksimal. Kondisi ini mengindikasikan bahwa

hidrogen akan mempercepat proses kerusakan material ulet (*ductile fracture*).



Gambar 5. kontur total equivalent plastic strain

Jika diperhatikan secara lebih seksama, kontur equivalent plastic strain pada model yang tanpa diberikan hidrogen lebih tersebar pada void, sedangkan untuk model yang diberikan hidrogen akan lebih terlokalisasi pada bagian yang memiliki total equivalent plastic strain maksimal. Selain itu, hasil simulasi menunjukkan bahwa lebar penampang bagian tengah model yang diberikan pembebanan hidrogen lebih kecil dibandingkan dengan model yang tanpa diberikan hidrogen. Hasil ini menunjukkan bahwa *necking area* model yang diberikan beban difusi hidrogen akan lebih besar. Dua kondisi yang terakhir ini menunjukkan bahwa hidrogen akan mengisolasi proses kegagalan material pada titik yang terkonsentrasi, yang biasanya terjadi pada daerah yang mengalami tegangan maksimal. Hasil ini sesuai dengan hasil simulasi sebelumnya (Ahn et.al., 2007)



Gambar 6. Kontur total equivalent plastic strain pada waktu 86.5 detik untuk (a) tanpa hidrogen; dan (b) dengan hidrogen

Kesimpulan

Dari beberapa hasil simulasi dapat disimpulkan bahwa hidrogen akan menurunkan kekuatan material dan mempercepat terjadinya *ultimate stress* dimana tegangan tersebut akan terjadi pada level regangan 0.13 untuk model yang diberikan pembebanan difusi hidrogen dan 0.15 untuk model yang tanpa diberikan beban hidrogen. Selain itu, hidrogen akan melokalisasi regangan dan mempercepat terjadinya *necking*.

Nomenklatur

C_L	Konsentrasi hidrogen pada lattice sites
C_T	Konsentrasi hidrogen pada trap sites
θ_L	Occupancy pada lattice sites
θ_T	Occupancy pada trap sites
R	Konstanta gas (J/(mol K))
T	Temperatur (K)
D_L	Konsentrasi ($D_L = M_L RT$)
M_L	Mobilitas hidrogen pada lattice sites
σ_h	Tegangan hidrostatik (Nm^{-2})

Referensi

Pineau, A. & Pardeon, T., Failure of Metal, Comprehensive Structural Integrity, Ho, C.A. & Sommerfeld, Elsevier, Vol. 2 (2007), pp. 684-797

Koplik, J., & Needleman, A., Void growth and coalescence in a porous plastic solids, *Int. J. Solids Structures*, 24 (8) (1988), pp. 835 - 853.

Pardeon, T., & Hutchinson, J.W., An extended model for void growth and coalescence, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 48 (2000), pp. 2467 – 2512.

Thomason, P.F., Three-dimensional models for the plastic limit-load at incipient failure of the intervoid matrix in ductile porous solids, *Acta Metallurgica* 33, (1985a) pp. 1079 – 1085.

Ahn, D.C., Sofronis, P., Dodds Jr., R.H., On hydrogen-induced plastic flow localization during void growth and coalescence, *International Journal of Hydrogen Energy*, 32 (2007), pp. 3734 – 3742.

Ahn, D.C., Sofronis, P., and Dodds Jr., R.H., Modeling of hydrogen-assisted ductile crack propagation in metals and alloys, *Int J Fract* 145, (2007), pp. 135-157.

Krom, A. H. M., Koers, R. W. J., Bakker, A., Hydrogen transport near a blunting crack tip, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, Vol. 47, (1999), pp. 971-992

Kanayama, H., Shingoh, T., Ndong-mefane, S., Ogino, M., Shioya, R., Kawai, H., Numerical Analysis of Hydrogen diffusion problems using the finite element method, *Theoretical and Applied Mechanics Japan*, Vol.56, (2008), pp. 389-400.

Sofronis, P., Liang, Y., Aravas, N., Hydrogen induced shear localization of the plastic flow in metals and alloys, *European Journal of Mechanics - A/Solids*, Vol. 20, (2001), pp. 857-872

Premono A., & Kanayama H., Characterization of Void Coalescence in Alpha-Iron in the Presence of Hydrogen, *Journal of Computational Science and Technology*, Vol.7 No. 3 (2013) pp. 395 – 409.

MSC Marc 2005 r3 volume A: theory and user information, *MSC Software Corporation*, (2006).

Matsuoka, S., Homma, N., Tanaka, H., Fukushima Y., and Murakami, Y., Effect of hydrogen on the tensile properties of 900-MPa-class JIS-SCM435 low-alloy-steel, *J. Japan Inst. Metals*, Vol. 70, No. 12, (2006), pp. 1002-1011, (In Japanese)