

**STUDI PENGARUH CACAT KEKOSONGAN TERHADAP
KEKUATAN TARIK NiTi DAN TiAl NANOPILLAR
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER**

SKRIPSI

Diajukan Sebagai Salah Satu Syarat
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1)
Pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik
Universitas Muhammadiyah Ponorogo



DAFIT RIYANTO

16511034

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO
(2023)**

HALAMAN PENGESAHAN

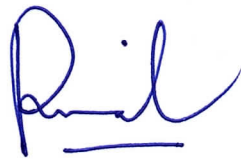
Nama : Dafit Riyanto
NIM : 16511034
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Pengaruh Cacat Kekosongan Terhadap
Kekuatan Tarik NiTi Dan TiAl Nanopillar
Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Isi dan formatnya telah disetujui dan dinyatakan memenuhi syarat
untuk melengkapi persyaratan guna memperoleh Gelar Sarjana
pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik
Universitas Muhammadiyah Ponorogo

Ponorogo, 31 Januari 2023

Menyetujui

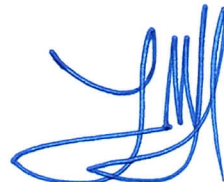
Dosen Pembimbing I,



(Rizal Arifin, S.Si., M.Si., P.hD.)

NIK. 19870920 201204 12

Dosen Pembimbing II,



(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)

NIK. 19860803 201909 13

Mengetahui

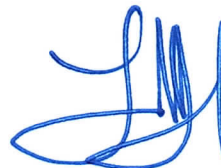
Dekan Fakultas Teknik,



(Edi Kurniawan, S.T., M.T.)

NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)

NIK. 19860803 201909 13

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Dafit Riyanto

NIM : 16511034

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Studi Pengaruh Cacat Kekosongan Terhadap Kekuatan Tarik NiTi dan TiAl Nanopillar Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang/teliti di dalam Naskah Skripsi ini adalah asli dari pemikiran saya. Tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka.

Apabila ternyata di dalam Naskah Skripsi ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur plagiatisme, saya bersedia Ijazah saya dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Ponorogo, 31 Januari 2023

Mahasiswa,



Dafit Riyanto

NIM. 16511034

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Dafit Riyanto
NIM : 16511034
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Pengaruh Cacat Kekosongan Terhadap Kekuatan Tarik NiTi Dan TiAl Nanopillar Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan
Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Jumat
Tanggal : 27 Januari 2023
Nilai :

Dosen Penguji


Dosen Penguji I,



(Ir. Fadelan, M.T.)

NIK. 19610509 199009 12

Dosen Penguji II,



(Ir. Nanang Suffiadi A., M.T.)

NIK. 19660626 199309 14

Mengetahui

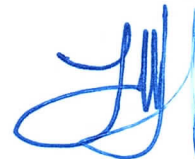
Dekan Fakultas Teknik,



(Edi Kurniawan, S.T., M.T.)

NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,





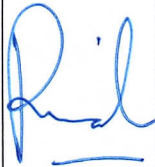
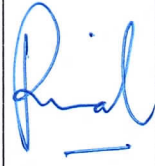
(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)


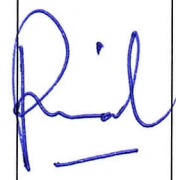
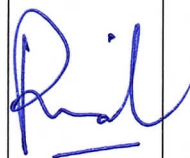

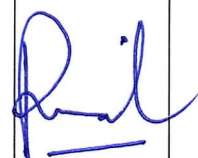
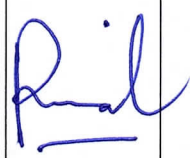
NIK. 19860803 201909 13

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : DAFIT RIYANTO
 NIM : 16511034
 Judul Skripsi : STUDI PENGARUH cacat KEKOSONGAN TERHADAP
 KEKUATAN TARIK NITI dan TIAL NANOPILLAR MENGGUNAKAN
 SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER
 Dosen Pembimbing I : Rizal Arifin

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	26-01-2022	Konsultasi Judul	Diberikan judul "studi Pengaruh cacat kekosongan terhadap kekuatan tarik Niti dan TIAL Nanopillar menggunakan simulasi Dinamika Molekuler"	
2	14-02-2022	Konsul BAB I	Acc BAB I	
3	08-04-2022	Konsul BAB II	Acc BAB II	
4	30/6/22	Bab 1-3.	Acc <u>Sempro</u>	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	12/07/22	Pembuatan cacat atom	Konsultasi cara membuat cacat pada struktur atom diberikan pengarahannya	
6	22/08/22	grafik tegangan regangan	Diberikan pengarahannya terkait grafik tegangan - regangan	
7	13/09/22	Fitting grafik daerah linear	Diberikan pengarahannya terkait cara fitting grafik.	
8	08/11/22	Data hasil penelitian	Diberikan pengarahannya terkait hasil penelitian	
9	29/12/22	BAB IV	Konsultasi BAB 4 perlu penambahan gambar	
10	24/01/23	Bab IV	-Pembetulan axis pada grafik -Penataan sub-bab di bab 4.	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	25 / 23 / 01	Cek Masalah.	Ace Sidang	<u>Pil</u>
12	26 / 23 / 01	Revisi batasan masalah	Batasan Masalah diperjelas	<u>Pil</u>
13	26 / 23 / 01	Revisi gambar paduan	gambar paduan cacat dibuat lebih detail	<u>Pil</u>
14	27 / 23 / 01	Revisi penulisan sitasi	Penulisan sitasi beberapa perlu diperbaiki	<u>Pil</u>
15	30 / 23 / 01	Revisi daftar pustaka	beberapa daftar pustaka perlu diperbaiki	<u>Pil</u>
16	31 / 23 / 01	Cek naskah hasil revisi	Acc Naskah	<u>Pil</u>

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

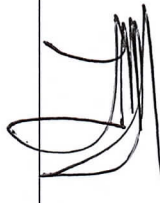



Nama : DAFIT RYANTO

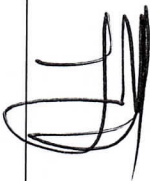





NIM : 16511034







Judul Skripsi : STUDI PENGARUH CAKAT KEKORONGAN TERHADAP KEKUATAN TARIK
KARDUAN NI dan TAI NANOPILLAR MENGGUNAKAN SIMULASI

Dosen Pembimbing II : Yoyok Winardi, S.T., M.T. DINAMIKA MOLEKULER

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	31-01-2022	Konsultasi Judul	Judul disetujui Pembimbing II	
2	14-02-2022	Konsul BAB I	Acc BAB I	
3	08-04-2022	Konsul BAB II	Acc BAB II	
4	30-06-2022	BAB I - III	Acc Sempro	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	12/22 09	pembuatan cacat atom	diberikan pengarahan terkait cara pembuatan cacat atom.	
6	22/22 08	grafik tegangan regangan	diberikan pengarahan terkait grafik tegangan regangan	
7	13/22 09	fitting grafik daerah linear	diberikan pengarahan terkait cara fitting grafik.	
8	08/22 11	Data hasil	Diberikan pengarahan terkait hasil penelitian.	
9	29/22 12	BAB IV & V	perlu penambahan gambar	
10	25/22 10	Cek Naskah	Acc Sidang	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	26/23 /01	Revisi batasan masalah	Batasan masalah diperjelas	
12	26/23 /01	Revisi gambar paduan	Gambar paduan cacat dibuat lebih detail	
13	27/23 /01	Revisi gambar struktur atom	Gambar paduan struktur atom BCC, FCC, HCP, perlu ditambahkan.	
14	27/23 /01	Revisi penulisan sitasi	Penulisan sitasi beberapa perlu diperbaiki	
15	30/23 /01	Revisi daftar pustaka	Beberapa daftar pustaka perlu diperbaiki	
16	31/23 /01	Cek naskah hasil revisi	ACC Naskah	

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

“Jadi orang tidak boleh berhenti belajar dan jangan mudah cepat puas”

“Kerja kerasmu hari ini menentukan kesuksesanmu esok hari”

Dafit Riyanto

Skripsi ini saya persembahkan untuk keluarga saya terutama ibu saya.



STUDI PENGARUH CACAT KEKOSONGAN TERHADAP KEKUATAN TARIK NiTi DAN TiAl NANOPILLAR MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Dafit Riyanto

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : dafitriyanto46@gmail.com

Abstrak

Jenis paduan berjenis *shape memory alloy* saat ini banyak dimanfaatkan pada berbagai bidang karena sifatnya yang unik. Paduan NiTi dan TiAl adalah termasuk di dalamnya karena memiliki sifat *shape memory effect*. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis bagaimana pengaruh cacat kekosongan terhadap kekuatan tarik paduan NiTi dan TiAl nanopillar dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler. Variasi cacat kekosongan dilakukan dengan menghilangkan atom Ni dan Ti pada sumbu x dan y untuk membentuk cacat garis (*line defect*) pada struktur atom paduannya. Dari simulasi pengujian tarik yang dilakukan didapatkan bahwa kekuatan tarik dan beberapa sifat mekanik lain dapat dipengaruhi oleh cacat kekosongan yang terjadi pada struktur atom paduannya. Modulus elastisitas dan kekuatan tarik maksimum tertinggi diperoleh pada varian paduan NiTi dan TiAl tanpa cacat sedangkan hasil terendah diperoleh pada varian paduan NiTi dan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x dan y. Hal ini berarti semakin sedikit cacat kekosongan yang terjadi pada paduan NiTi dan TiAl nanopillar maka modulus elastisitas dan kekuatan tariknya akan semakin besar.

Kata Kunci : Paduan NiTi, Paduan TiAl, Cacat kekosongan, Kekuatan tarik maksimum, Modulus elastisitas, Simulasi dinamika molekuler

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Pengaruh Cacat Kekosongan Terhadap Kekuatan Tarik NiTi dan TiAl Nanopillar Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler”.

Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik Prodi Teknik Mesin pada Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Dalam penulisan skripsi ini penulis menyadari tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak sangat sulit untuk dapat menyelesaikannya. Oleh karena itu, penulis mengucapkan banyak terimakasih kepada :

1. Dr. Happy Susanto, M.A. selaku rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Edy Kurniawan S.T., M.T. selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Ketua Prodi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing yang selalu memberikan arahan, serta bimbingan secara sabar kepada penulis dalam menyusun skripsi ini.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Keluarga yang selalu mendoakan, memberi motivasi dan semangat kepada penulis untuk segera menyelesaikan kuliah.
7. Seluruh teman-teman Program Studi Teknik Mesin yang selalu memberi dorongan dalam menyelesaikan skripsi ini.
8. Rekan kerja Perangkat Desa Miricinde yang selalu memberikan dorongan untuk menyelesaikan studi.
9. Serta seluruh pihak yang turut serta membantu dan tidak bisa penulis sebutkan satu persatu.

Penulis berharap Allah SWT berkenan membalas kebaikan semua pihak yang telah membantu dalam pengerjaan skripsi ini. Sebuah kesadaran bagi penulis bahwa penelitian ini sangat jauh dari sempurna, akan tetapi semoga dapat menjadi suatu awal yang baik bagi pengembangan di penelitian-penelitian selanjutnya.

Ponorogo, 31 Januari 2023



Dafit Riyanto

16511034

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	1
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN SKRIPSI	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	xi
ABSTRAK	xii
KATA PENGANTAR	xiii
DAFTAR ISI	xv
DAFTAR TABEL	xvii
DAFTAR GAMBAR	xviii
DAFTAR LAMPIRAN	xx
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
1.4 Batasan Masalah	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Penelitian Terdahulu	4
2.2 Paduan NiTi	5
2.3 Paduan TiAl	8
2.4 Cacat Kekosongan	10
2.5 Simulasi Dinamika Molekuler	12
2.6 Struktur Kristal	13
2.7 Nanomaterial	14
2.8 Energi Potensial Antar Atom	14
2.9 Pengujian Tarik	16
BAB 3 METODE PENELITIAN	18
3.1 Alat dan Kelengkapan Penelitian	18

a. Perangkat Keras.....	18
b. Perangkat Lunak.....	18
3.2 Tahapan Penelitian	20
3.3 Studi Literatur.....	21
3.4 Membuat Struktur Awal Paduan	21
3.5 Membuat Variasi Paduan NiTi dan TiAl.....	22
a. Paduan NiTi nanopillar tanpa cacat.....	22
b. Paduan NiTi nanopillar dengan cacat garis pada sumbu sumbu x	22
c. Paduan NiTi nanopillar dengan cacat garis pada sumbu x dan y.....	23
d. Paduan TiAl nanopillar tanpa cacat.....	23
e. Paduan TiAl nanopillar dengan cacat garis pada sumbu sumbu x.....	24
f. Paduan TiAl nanopillar dengan cacat garis pada sumbu x dan y.....	24
3.6 Simulasi Pengujian Tarik	25
3.7 Membuat Grafik	27
BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN	28
4.1 Ekuilibrase Temperatur dan Energi dalam Sistem.....	28
4.2 Hasil Simulasi Pengujian Tarik.....	30
a. Pengujian tarik paduan NiTi tanpa cacat.....	30
b. Pengujian tarik paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x.....	31
c. Pengujian tarik paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x dan y... 33	
d. Pengujian tarik paduan TiAl tanpa cacat.....	34
e. Pengujian tarik paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x.....	36
f. Pengujian tarik paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x dan y... 37	
4.3 Modulus Elastisitas.....	38
4.4 Hubungan Cacat Kekosongan dengan Sifat Mekanik	40
4.5 Perbandingan dengan Hasil Penelitian Terdahulu.....	42
BAB 5 PENUTUP	43
5.1 Kesimpulan.....	43
5.2 Saran	44
DAFTAR PUSTAKA	45
LAMPIRAN.....	50

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Modulus elastisitas paduan NiTi dan TiAl hasil simulasi.....	55
Tabel 4.2 Kekuatan tarik maksimum paduan NiTi dan TiAl hasil simulasi	56
Tabel 4.3 Titik patah paduan NiTi dan TiAl hasil simulasi.....	57



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Diagram hubungan tegangan, regangan, dan temperatur NiTi	5
Gambar 2.2 Mekanisme dari <i>shape memory effect</i>	6
Gambar 2.3 Mekanisme dari <i>superelasticity</i>	7
Gambar 2.4 Bentuk fisik paduan TiAl	9
Gambar 2.5 Perbandingan kekuatan tarik spesifik paduan TiAl tempa.....	9
Gambar 2.6 Baling-baling kompresor yang terbuat dari paduan TiAl.....	10
Gambar 2.7 Jenis cacat titik pada atom.....	11
Gambar 2.8 Macam-macam struktur kristal.....	13
Gambar 2.9 Struktur nanopillar.....	14
Gambar 2.10 Kurva tegangan-regangan	17
Gambar 3.1 Diagram alur penelitian.....	20
Gambar 3.2 Struktur awal paduan.....	21
Gambar 3.3 Struktur awal paduan NiTi tanpa cacat	22
Gambar 3.4 Struktur awal paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x	22
Gambar 3.5 Struktur awal paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x dan y.	23
Gambar 3.6 Struktur awal paduan TiAl tanpa cacat	23
Gambar 3.7 Struktur awal paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x	24
Gambar 3.8 Struktur awal paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x dan y.	24
Gambar 3.9 Proses pencarian indeks atom	25
Gambar 3.10 Proses optimasi setelan input simulasi dinamika molekuler	26
Gambar 3.11 Proses visualisasi simulasi pengujian tarik	27
Gambar 3.12 Proses pembuatan grafik tegangan regangan data hasil simulasi....	27
Gambar 4.1 Grafik ekuilibrisasi temperatur dalam sistem	28
Gambar 4.2 Grafik ekuilibrisasi energi dalam sistem.....	29
Gambar 4.3 Grafik tegangan regangan paduan NiTi tanpa cacat	30
Gambar 4.4 Konfigurasi struktur atom paduan NiTi tanpa cacat	30
Gambar 4.5 Grafik tegangan regangan paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x	31
Gambar 4.6 Konfigurasi struktur atom paduan NiTi dengan cacat baris pada sumbu x	32

Gambar 4.7 Grafik tegangan regangan paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x dan y	33
Gambar 4.8 Konfigurasi struktur atom paduan NiTi dengan cacat baris pada sumbu x dan y	33
Gambar 4.9 Grafik tegangan regangan paduan TiAl tanpa cacat	34
Gambar 4.10 Konfigurasi struktur atom paduan TiAl tanpa cacat	35
Gambar 4.11 Grafik tegangan regangan paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x	36
Gambar 4.12 Konfigurasi struktur atom paduan TiAl dengan cacat baris pada sumbu x	36
Gambar 4.13 Grafik tegangan regangan paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x dan y	37
Gambar 4.14 Konfigurasi struktur atom paduan TiAl dengan cacat baris pada sumbu x dan y	38
Gambar 4.15 Proses <i>fitting</i> grafik daerah linier	39



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Log LAMMPS proses ekuilibrasi.....	50
Lampiran 2 Proses <i>fitting</i> grafik paduan NiTi tanpa cacat.....	51
Lampiran 3 Proses <i>fitting</i> grafik paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x.	52
Lampiran 4 Proses <i>fitting</i> grafik paduan NiTi dengan cacat garis pada sumbu x dan y.....	53
Lampiran 5 Proses <i>fitting</i> grafik paduan TiAl tanpa cacat.....	54
Lampiran 6 Proses <i>fitting</i> grafik paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x.	55
Lampiran 7 Proses <i>fitting</i> grafik paduan TiAl dengan cacat garis pada sumbu x dan y.....	56

