

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGUJIAN
KEKUATAN PADUAN Ni–Al PADA FASE
KRISTAL DAN AMORF**

SKRIPSI

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



ANGGI ANDREAN
19511373

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

HALAMAN PENGESAHAN

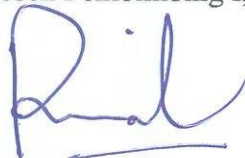
Nama : Anggi Andean
NIM : 19511373
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan Ni–Al Pada Fase Kristal dan Amorf

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, 17 Juli 2023

Menyetujui

Dosen Pembimbing I,



(Rizal Arifin, M.Si., M.Sc., Ph.D.)

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 : Anggi Andrean

NIM : 19511373

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan Ni-Al Pada Fase Kristal Dan Amorf” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan, dan masalah ilmiah yang saya rancang atau 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, 5 Juli 2023

Mahasiswa,



Anggi Andrean

NIM 19511373

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Anggi Andrian
NIM : 19511373
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan
Ni–Al Pada Fase Kristal dan Amorf

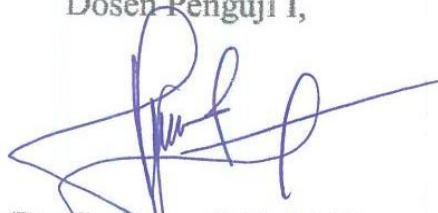
Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Rabu
Tanggal : 5 Juli 2023
Nilai :

Dosen Penguji


Dosen Penguji I,



(Dr. Sudarno, S.T., M.T.)

NIK. 19680705 199904 11

Dosen Penguji II,



(Wawan Trisnadi P, S.T., M.T., Ph.D.)

NIK. 19800220 201309 13

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



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

NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,




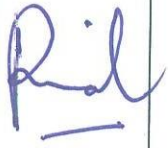
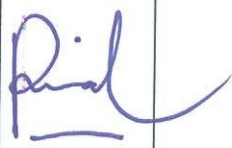
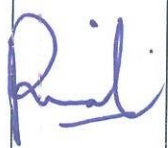
(Yoyok Winardi, S.T., M.T.)



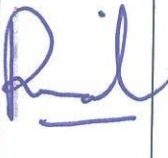



NIK. 19860803 201909 13







BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI


Nama : Anggi Andrean
 NIM : 19511373
 Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan NiAl pada fase kristal dan amorf
 Dosen Pembimbing I : Rizal Arifin, M.Si, M.Sc, Ph.D.

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	1/9/2022	Pengajuan Judul	* ACC Judul skripsi * studi literatur	
2	16 September 2022	Bab I	* Parafrase Jurnal * Pembahasan mendalam latar belakang dan pemilihan kata yang sesuai * Studi Literatur	
3	02 November 2022	Bab I	* memilih perumusan masalah yang akan diteliti * menguraikan batas masalah pada point penting dan tidak berbelit - belit	
4	15 Desember 2022	Bab I	* ACC Bab I	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	01 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * Menambahkan penelitian terdahulu sebagai referensi * melakukan pemilihan kata secara tepat, beserta penulisannya * Memberikan sumber pada gambar 	
6	20 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * menambahkan pemaparan materi Simulasi dinamika molekul * menambahkan keterangan pada rumus yang ada 	
7	21 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * memperbaiki agar semua rumus tertulis dgn format pada equation * ACC Bab II 	
8	25 Januari 2023	Bab III	<ul style="list-style-type: none"> * Flow Chart * Menjelaskan tahapan skripsi * ACC Sempro 	
9	27 Februari 2023	Bab I s/d Bab <u>III</u>	Revisi Sempro	
10	07 Maret 2023	Bab <u>IV</u>	Pembuatan struktur kristal untuk simulasi uji tarik	





No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	13 Maret 2023	Bab <u>IV</u>	Pembuatan struktur amorf untuk simulasi uji tarik	
12	28 Maret 2023	Bab <u>IV</u>	Plotting grafik pembuatan struktur kristal dan amorf	
13	10 April 2023	Bab <u>IV</u>	Pemberian pembebanan tarik pada struktur kristal untuk simulasi uji tarik	
14	03 Mei 2023	Bab <u>IV</u>	Pemberian pembebanan tarik pada struktur kristal untuk simulasi uji tarik	
15	17 Mei 2023	Bab <u>IV</u>	Evaluasi plotting grafik pembuatan struktur dan pemberian pembebanan pada struktur kristal dan amorf	
16	31 Mei 2023	Bab <u>V</u>	Kesimpulan dan saran	






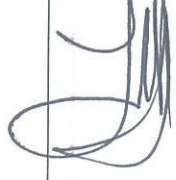
No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
17	13 Juni 2023	Bab <u>IV</u> dan Bab <u>V</u>	Evaluasi dan Acc sidang skripsi	
18				
19				
20				
21				
22				



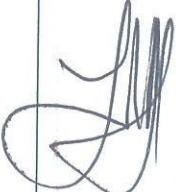
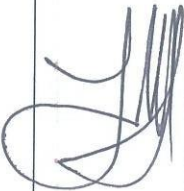
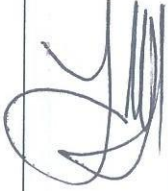
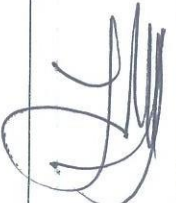
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI


Nama : Anggi Andrean
 NIM : 19511373
 Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian kekuatan Paduan NiAl pada fase kristal dan amorf
 Dosen Pembimbing II : Yoyok Winardi, S.T, M.T

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	01 September 2022	Pengajuan Judul	* Acc Judul skripsi * Studi literatur	
2	16 September 2022	Bab I	* Parafrase Jurnal * Pembahasan mendalam latar belakang dan pemilihan kata yang sesuai * studi literatur	
3	02 November 2022	Bab I	* Memilih perumusan masalah yang akan diteliti * Menguraikan batasan masalah pada point - point penting saja	
4	15 Desember 2022	Bab I	* Acc Bab I	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	01 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * menambahkan penelitian terdahulu sebagai referensi * melakukan pemilihan kata secara tepat * memberikan sumber pada gambar 	
6	20 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * Menambahkan pemaparan materi simulasi dinamika molekuler * menambahkan keterangan pada rumus yang ada 	
7	31 Januari 2023	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> * memperbaiki agar semua rumus tertulis dgn format pada equation * Acc Bab II 	
8	25 Januari 2023	Bab III	<ul style="list-style-type: none"> * flow chart * menjelaskan tahapan skripsi * acc sempro 	
9	27 Feb 2023	Bab I s/d Bab III	Revisi sempro	
10	07 maret 2023	Bab IV	Pembuatan struktur kristal untuk simulasi uji tarik	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	13 maret 2023	Bab <u>IV</u>	Pembuatan struktur amorf untuk simulasi uji tarik	
12	28 maret 2023	Bab <u>IV</u>	ploting grafik pembuatan struktur kristal dan amorf	
13	10 April 2023	Bab <u>IV</u>	Pemberian pembebanan tarik pada struktur kristal untuk simulasi uji tarik	
14	03 Mei 2023	Bab <u>IV</u>	Pemberian pembebanan tarik pada struktur amorf untuk simulasi uji tarik	
15	17 mei 2023	Bab <u>IV</u>	Evaluasi ploting grafik pembuatan struktur dan pemberian pembebanan pada struktur kristal dan amorf	
16	31 mei 2023	Bab <u>V</u>	kesimpulan dan saran	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
17	13 Juni 2023	Bab <u>IV</u> dan Bab <u>V</u>	Evaluasi dan Acc sidang Skripsi	
18				
19				
20				
21				
22				

MOTTO DAN PERSEMBAHAN

“Cukuplah Allah (menjadi penolong) bagi kami dan Dia sebaik-baiknya pelindung”

(Q.S Ali Imran:173)

“Maybe i made a mistake yesterday, but yesterday’s me is still me. Today, i am who i am with all of my faults and my mistakes. Tomorrow i might be a tiny bit wiser, and that would be me too. These faults and mistakes are what i am making up the brightest stars in the constellation of my life” – Kim Namjoon speech at the United Nations 2018

“This is the path you’ve chosen, don’t get scared. This is only your first flight” (BTS – Outro:Wings)

Skripsi ini saya persembahkan untuk istri saya Nisa Latifa Sakti dan anak saya Alessia Yuki Kinasih yang senantiasa memberikan dukungan, semangat, doa terbaik, cinta dan kasih sayang, sehingga saya bisa menyelesaikan masa studi saya. Terima kasih banyak, kalian selalu nomor satu dan segalanya bagi saya.

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGUJIAN KEKUATAN PADUAN Ni-Al PADA FASE KRISTAL DAN AMORF

Anggi Andrian, Rizal Arifin, Yoyok Winardi, Sudarno, dan Wawan Trisnadi Putra

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik,

Universitas Muhammadiyah Ponorogo

E-mail : anggigates9@gmail.com

Abstrak

Nikel aluminium diketahui memiliki densitas rendah, konduktivitas termal yang baik, ketahanan oksidasi, dan suhu leleh yang tinggi. Sehingga mendapat perhatian dari perusahaan penambangan batubara, permesinan logam, pengeboran minyak, pemotongan batu, dan pemasangan bata atau ubin keramik.

Penelitian saat ini dilakukan untuk mengetahui nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas lalu dibandingkan nilainya antara struktur kristal dan amorf serta mengetahui mekanisme perubahan struktur paduan NiAl saat dilakukan simulasi uji tarik.

Metode penelitian yang digunakan yaitu simulasi dinamika molekuler dengan tahapan : mempersiapkan komputer dan *software*, studi literatur, membuat struktur awal paduan NiAl kristal dan amorf, pemberian simulasi uji tarik.

Grafik nilai tegangan dari struktur kristal lebih tinggi dari pada struktur amorf, hal tersebut dikarenakan struktur amorf memiliki keteraturan atom yang tidak merata yang menyebabkan mobilisitas molekul dan energi besar yang ada pada struktur amorf. Nilai tegangan maksimum kristal yaitu $20,08 \pm 0,02\%$ GPa dengan modulus elastisitas bcc $58,54 \pm 0,001\%$ GPa dan fcc $94,66 \pm 0,003\%$ GPa dan amorf nilai tegangan maksimum yaitu $3,1 \pm 0,1\%$ GPa serta modulus elastisitasnya yaitu $67,02 \pm 0,003\%$ GPa. Struktur kristal mengalami 4 mekanisme perubahan struktur yaitu bcc, fcc, hcp dan amorf, sedangkan amorf tidak mengalami mekanisme perubahan struktur. Perbandingan dari nilai tegangan maksimum dan modulus elastisitas dari kristal dan amorf $6,48 \pm 0,04\%$ GPa. Perbandingan

modulus elastisitas dari bcc dengan fcc $1,62 \pm 0,2\%$ GPa. Bcc dengan amorf $1,14 \pm 0,4\%$ GPa. Fcc dengan amorf $1,41 \pm 0,2\%$ GPa.

Kata Kunci : Paduan NiAl, nikel aluminium, amorf, kristal, simulasi dinamika molekuler, tegangan maksimum, modulus elastisitas, mekanisme perubahan struktur.



KATA PENGANTAR

Segala puji dan syukur atas kehadiran Allah SWT dan juga berkah rahmat serta hidayah-Nya yang senantiasa diberikan kepada penulis, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Simulasi Dinamika Molekuler Pengujian Kekuatan Paduan Ni-Al Pada Fase Kristal Dan Amorf” sebagai salah satu syarat untuk memperoleh Gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1) Pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

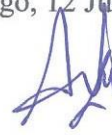
Penulis menyadari tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak akan sangat sulit untuk menyusunnya. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang membantu penulis dalam proses penyusunan skripsi ini baik secara moral maupun material sehingga skripsi ini dapat terwujud dengan baik. Penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada :

1. Dr. Happy Susanto, M.A. selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Edi 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, M.Si., M.Sc., 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. Istri saya Nisa Latifa Sakti dan anak saya Alessia Yuki Kinasih yang selalu mendoakan, memberikan semangat, memberikan motivasi kepada penulis untuk segera menyelesaikan kuliah.
7. Kedua orang tua saya dan Ibu mertua saya yang tidak henti mendoakan kelancaran kepada penulis dalam menyelesaikan kuliah hingga selesai.
8. Seluruh pihak terkait yang tidak bisa saya sebutkan satu persatu.

Penulis sangat berharap semoga skripsi ini dapat menambah pengetahuan dan pengalaman bagi pembaca, khususnya Mahasiswa Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Bahkan penulis berharap lebih jauh lagi agar skripsi ini bisa pembaca praktekkan dalam kehidupan sehari-hari.

Penulis telah berusaha menyelesaikan skripsi ini sebaik mungkin, akan tetapi penulis menyadari bahwa skripsi ini masih ada banyak kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran yang membangun dari para pembaca guna menyempurnakan segala kekurangan dalam penyusunan skripsi ini.

Ponorogo, 12 Juli 2023



Anggi Andrian

19511373

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO DAN PERSEMBAHAN	xiii
Abstrak	xiv
KATA PENGANTAR	xvi
DAFTAR ISI.....	xviii
DAFTAR TABEL.....	xx
DAFTAR GAMBAR	xxi
BAB I	1
PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah.....	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	4
1.5 Manfaat Penelitian.....	4
BAB II.....	5
TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Penelitian Terdahulu.....	5
2.2 Struktur Kristal dan Amorf.....	11
2.3 Paduan NiAl	15
2.4 Simulasi Dinamika Molekuler.....	16
2.5 Elastisitas dan Plastisitas	18

2.6 Tegangan dan Regangan.....	19
2.7 Energi Potensial Antar Atom.....	27
2.8 Metode Ensemble	28
2.9 Kondisi Batas Periodik (PBC).....	31
BAB III.....	33
METODE PENELITIAN	33
3.1 Peralatan dan Kelengkapan	33
3.2 Tahapan Penelitian	35
3.3 Studi Literatur.....	35
3.4 Membuat Struktur Awal Paduan	36
3.5 Pemberian Simulasi Uji Tarik	37
3.6 Ploting Grafik.....	38
BAB IV	40
ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN	40
4.1 Proses Pembuatan Struktur Kristal dan Pembuatan Struktur Amorf NiAl..	40
4.2 Uji Tarik Pada Struktur Kristal dan Struktur Amorf Paduan NiAl	54
4.3 Perbandingan Grafik dan Nilai Modulus Elastisitas Hasil Simulasi Uji Tarik Paduan NiAl Struktur Kristal dan Amorf	64
BAB V.....	66
KESIMPULAN	66
5.1 Kesimpulan.....	66
5.2 Saran	67
DAFTAR PUSTAKA	68

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Modulus elastis beberapa zat26

Tabel 4.1 Perbandingan nilai modulus elastisitas hasil simulasi uji tarik paduan NiAl struktur kristal bcc, struktur kristal fcc, dan struktur amorf . 65



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Kurva tegangan regangan Ni	6
Gambar 2.2 Kurva tegangan regangan sampel NiAl dengan kekosongan awal.....	7
Gambar 2.3 Kurva tegangan regangan Ni/Ni ₃ Al di depan Al dengan Ni terminasi (001).....	8
Gambar 2.4 Energi sebagai fungsi rasio tetragonalitas <i>c/a</i> sepanjang jalur Bain untuk beberapa komposisi paduan NiAl	9
Gambar 2.5 Susunan atom (a) kristal dan (b) amorf.....	12
Gambar 2.6 Konfigurasi struktur kristal <i>Hexagonal Close-Packed</i>	12
Gambar 2.7 Konfigurasi struktur kristal <i>Icosahedron</i>	13
Gambar 2.8 Sel <i>Rhombohedral</i> Primitif pada kristal kubus pusat muka (<i>Face – Centered Cubic</i>)	13
Gambar 2.9 <i>Body – Centered Cubic (CBC) Crystal Structure</i>	14
Gambar 2.10 Struktur kubik sederhana.....	15
Gambar 2.11 Simulasi sebagai jembatan antara.....	17
Gambar 2.12 Diameter spesimen berbentuk cakram	19
Gambar 2.13 Mesin Uji Tarik	20
Gambar 2.14 Contoh bekerjanya tegangan normal dan geser.....	22
Gambar 2.15 Regangan normal dengan menerima beban tarik P	23
Gambar 2.16 Regangan akibat gaya geser pada elemen batang	23
Gambar 2.17 Sistem pembebanan pada pengujian tarik lentur	24
Gambar 2.18 Perbandingan antara tegangan tarik (stress) dan regangan (strain) .	25
Gambar 2.19 Representasi skematis dari gagasan kondisi batas periodis.....	32
Gambar 3.1 Diagram alur penelitian	35
Gambar 3.2 Struktur atom Ni, Al, dan NiAl	37
Gambar 3.3 Proses pembuatan grafik hasil simulasi uji tarik paduan NiAl struktur kristal dan amorf (Aplikasi <i>MagicPlot Student</i>)	39
Gambar 4.1 Bentuk hasil optimasi Struktur Kristal NiAl	41
Gambar 4.2 Grafik optimasi tekanan struktur kristal	41

Gambar 4.3 Grafik optimasi energi total struktur kristal	42
Gambar 4.4 Struktur amorf hasil dari simulasi <i>quenching</i>	43
Gambar 4.5 Plot grafik temperatur pembentukan struktur amorf pada suhu ruang temperatur awal 300 K	44
Gambar 4.6 Plot grafik energi total pembentukan struktur amorf pada suhu ruang temperatur awal 300 K.....	45
Gambar 4.7 Plot grafik temperatur struktur amorf ketika suhu ruang dinaikkan dari 300 K menjadi 2.500 K	46
Gambar 4.8 Plot grafik energi total struktur amorf ketika suhu ruang dinaikkan dari 300 K menjadi 2.500 K	47
Gambar 4.9 Plot grafik temperatur struktur amorf ketika dilakukan ekuilibrase pada temperatur suhu ruang 2.500 K.....	48
Gambar 4.10 Plot grafik energi total struktur amorf ketika dilakukan ekuilibrase pada temperatur suhu ruang 2.500 K.....	49
Gambar 4.11 Plot grafik temperatur struktur amorf ketika suhu ruang diturunkan dari 2.500 K menjadi 300 K.....	50
Gambar 4.12 Plot grafik energi total struktur amorf ketika suhu ruang diturunkan dari 2.500 K menjadi 300 K.....	51
Gambar 4.13 Plot grafik temperatur pembentukan struktur amorf ketika dilakukan ekuilibrase kembali pada suhu ruang	52
Gambar 4.14 plot grafik energi total pembentukan struktur amorf ketika dilakukan ekuilibrase kembali pada suhu ruang	53
Gambar 4.15 Visualisasi konfigurasi struktur paduan NiAl akibat pembebanan tarik pada : (a) regangan 0,054; (b) regangan 0,14;.....	55
Gambar 4.16 Grafik uji tarik struktur kristal.....	56
Gambar 4.17 Perubahan Struktur Kristal selama pembebanan tarik paduan NiAl pada arah (001).....	58
Gambar 4.18 Hasil <i>fitting curva</i> pada daerah linier bcc	59
Gambar 4.19 Hasil <i>fitting curva</i> daerah linier fcc	60
Gambar 4.20 Visualisasi konfigurasi struktur paduan NiAl akibat pembebanan tarik pada : (a) regangan 0,0256; (b) regangan 0,0381;	61

Gambar 4.21 Grafik uji tarik amorf 62
Gambar 4.22 Hasil *fitting curva* pada daerah linier amorf..... 63
Gambar 4.23 Grafik uji tarik kristal dan amorf..... 64

