

**PENGARUH KOMPOSISI ATOM PADA NILAI TEMPERATUR  
LEBUR PADUAN Ni<sub>x</sub>% Ti<sub>y</sub>% MENGGUNAKAN 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



Aris Bayu Prasetyo

15510999

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN**

**FAKULTAS TEKNIK**

**UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

**2020**

**PENGARUH KOMPOSISI ATOM PADA NILAI TEMPERATUR  
LEBUR PADUAN Ni<sub>x</sub>% Ti<sub>y</sub>% MENGGUNAKAN 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



Aris Bayu Prasetyo

15510999

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN**

**FAKULTAS TEKNIK**

**UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

**2020**

## HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Aris Bayu Prasetyo  
NIM : 15510999  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Proposal Skripsi : Pengaruh Komposisi Atom Pada Nilai  
Temperatur Lebur Paduan Ni<sub>x</sub>% Ti<sub>y</sub>%  
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, 14 Agustus 2020

Menyetujui

Dosen Pembimbing 1



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

NIK : 19870920 201204 12

Dosen Pembimbing 2



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

NIK : 19860803 201909 13

Mengetahui

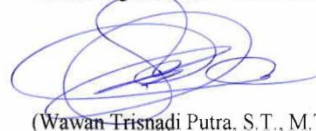
Dekan Fakultas Teknik



(Dr. Ir. Aliyadi, MM, M.Kom)

NIK : 19640103 199009 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin



(Wawan Trisnadi Putra, S.T., M.T.)

NIK: 19800220 201309 13

## PERNYATAAN ORISINILITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Aris Bayu Prasetyo

NIM : 15510999

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul : "Pengaruh Komposisi Atom Pada Nilai Temperatur Lebur Paduan  $Ni_x\% Ti_y\%$  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, 14 Agustus 2020

Mahasiswa,



Aris Bayu Prasetyo

NIM. 15510999

### HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Aris Bayu Prasetyo  
NIM : 15510999  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Proposal Skripsi : Pengaruh Komposisi Atom Pada Nilai Temperatur  
Lebur Paduan Ni<sub>x%</sub> Ti<sub>y%</sub> Menggunakan Simulasi  
Dinamika Molekuler

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

Hari : Rabu  
Tanggal : 19 Agustus 2020  
Nilai : (A)

#### Dosen Penguji

Dosen Penguji 1



(Ir. Fadelan, M.T.)

NIK : 19610509 199009 12

Dosen Penguji 2



(Ir. Muh Malyadi, M.M.)

NIK : 19601117 199009 12

#### Mengetahui

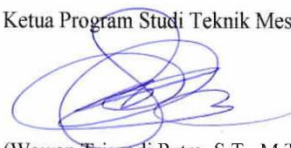
Dekan Fakultas Teknik



(Dr. Ir. Aliyadi, M.M., M.Kom.)

NIK : 19640103 199009 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin



(Wawan Trisnadi Putra, S.T., M.T.)

NIK : 19800220 201309 13

**BERITA ACARA  
BIMBINGAN SKRIPSI**

1. Nama : Aris Bayu Prasetyo
2. NIM : 15510999
3. Program Studi : Teknik Mesin
4. Fakultas : Teknik
5. Judul Skripsi : Pengaruh Komposisi Atom Pada Nilai Temperatur  
Lebur Paduan Ni<sub>x%</sub>Ti<sub>y%</sub> Menggunakan Simulasi  
Dinamika Molekuler
6. Dosen pembimbing : Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D
7. Konsultasi :

NO	TANGGAL	URAIAN	TANDA TANGAN
1	15/02 2020	Mengembangkan Simulasi	Rizal
2	14/03 2020	Membilkan & Menurunkan Temperatur	Rizal
3	22/06 2020	Analisa Rata	Rizal
4	25/07 2020	Analisa Data	Rizal
5	3/09 2020	Revisi Bab IV dan V	Rizal
6	14/8 2020	Acc Sidang	Rizal

8. Tgl. Pengajuan :
9. Tgl. Pengasahan :

Ponorogo, 14 Agustus 2020

Pembimbing,



(Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D)  
NIK. 19870920 201204 12

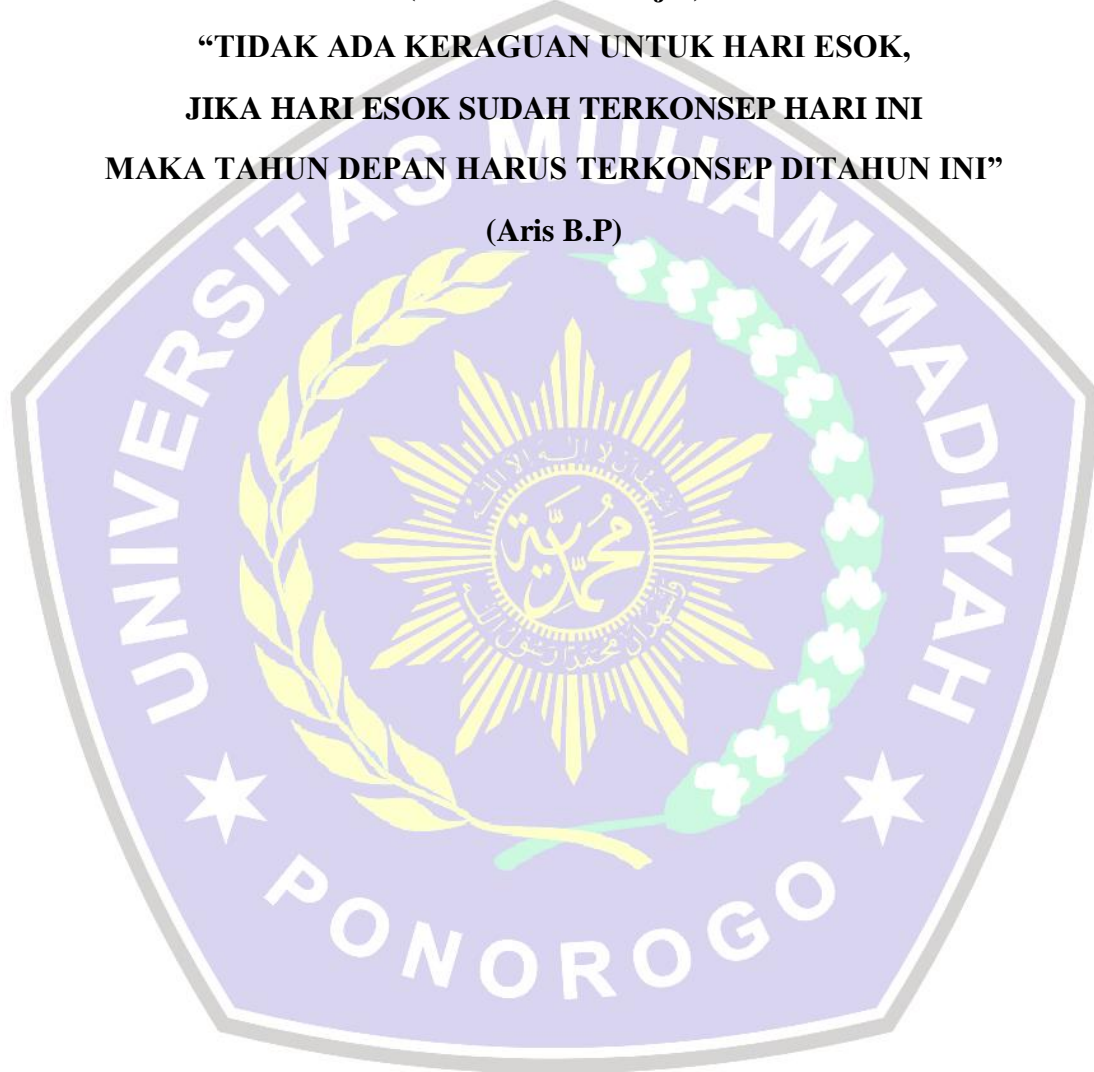
## MOTTO

**“KEBEBASAN BUKAN TUJUAN, TETAPI  
JALAN UNTUK MENEMUKAN BATASAN-BATASAN”**

**(Emha Ainun Nadjib)**

**“TIDAK ADA KERAGUAN UNTUK HARI ESOK,  
JIKA HARI ESOK SUDAH TERKONSEP HARI INI  
MAKA TAHUN DEPAN HARUS TERKONSEP DITAHUN INI”**

**(Aris B.P)**



## KATA PENGANTAR

*Assalamu'alaikum Wr., Wb.*

Puji syukur penulis panjatkan kepada Alloh SWT, karena atas berkat dan rahmat-Nya , penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul “Pengaruh Komposisi Atom Pada Nilai Temperatur Lebur Paduan  $Ni_x\% Ti_y\%$  Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler”. Skripsi ini di lakukan sebagai salah satu syarat untuk mendapatkan gelar Sarjana Teknik jenjang strata satu (S1) pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Penulis menyadari tanpa ada bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, sangatlah sulit bagi penulis untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu penulis mengucapkan terimakasih kepada :

1. Dr. Heppy Susanto, M.A selaku rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Dr. Ir. Aliyadi, MM., M.Kom selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Bapak Wawan Trisnadi Putra, ST.,MT selaku Kepala jurusan program studi Teknik Mesin
4. Bapak Rizal Arifin, S. Si, M.Si., Ph.D. selaku dosen pembimbing skripsi Mesin yang selalu memberikan tanggapan, arahan dan penyusunan skripsi ini.
5. Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku dosen pembimbing II skripsi, terimakasih telah memberikan arahan dan masukan dalam penyusunan skripsi ini.
6. Bapak dan Ibu Dosen beserta staf fakultas teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
7. Orang tua yang senantiasa mendo'akan penulis tiada henti mendukung dan memberi motivasi dalam menuntut ilmu.
8. Serta teman-teman sekelas dan seangkatan yang selalu menyemangati dalam penyusun skripsi ini.



9. Seluruh pihak yang turut serta membantu yang tidak bisa disebutkan satu persatu.

Penulis menyadari bahwa penyusunan laporan skripsi ini jauh dari kata sempurna. Oleh sebab itu, penulis terbuka untuk menerima masukan yang dapat meningkatkan kualitas dari penyusun secara keseluruhan. Akhir kata dengan segala kerendahan hati, semoga dapat bermanfaat bagi banyak pihak terutama bagi penulis sendiri dalam meningkatkan ilmu pengetahuan selanjutnya. Aamiin.

*Wassalamu'alaikum Wr., Wb.*

Ponorogo, 14 Agustus 2020

Aris Bayu Prasetyo

15510999



**PENGARUH KOMPOSISI ATOM PADA NILAI TEMPERATUR LEBUR  
PADUAN Ni<sub>x</sub>% Ti<sub>y</sub>% MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA  
MOLEKULER**

Aris Bayu Prasetyo, Rizal Arifin, Yoyok Winardi  
Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik,  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo  
e-mail : [arisbayu807@gmail.com](mailto:arisbayu807@gmail.com)

---

**Abstrak**

Paduan NiTi adalah material yang tersusun dari Nikel dan Titanium. Paduan ini memiliki sifat yang mampu mengingat struktur awalnya sehingga masuk dalam kategori *shape memory alloy*. Paduan digunakan sebagai bahan biomaterial di bidang medis dan di bidang engineering. Sifat paduan NiTi sangat sensitif terhadap perbandingan komposisi atom Ni dan Ti yang menyusunnya, sehingga perlu dilakukan kajian secara eksperimen maupun simulasi terkait isu tersebut. Tujuan dari penelitian ini untuk menambah pengetahuan tentang pengaruh komposisi atom pada nilai temperatur lebur terhadap struktur paduan NiTi yang dihasilkan. Penelitian ini dilakukan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler. Metode ini dipilih karena sangat efisien dalam waktu pengerjaannya serta biaya yang dikeluarkan. Simulasi dimulai pada temperatur 300K dan dinaikkan secara bertahap setiap 100K sampai dengan 2200K. Dengan laju yang sama, temperatur diturunkan secara bertahap sampai dengan 300K. Dari grafik hubungan antara temperatur dan volume sistem, kita dapat menghitung temperatur lebur sistem. Cara ini disebut dengan 1-fase. Temperatur lebur juga dapat ditentukan dengan metode 2-fase, dimana kita membuat sistem yang terdiri dari 2-fase, yaitu fase padat dan likuid. Kemudian, simulasi dinamika molekuler dijalankan pada temperatur tertentu, dimana jika temperatur yang dipilih lebih tinggi daripada temperatur lebur, maka fase padat pada sistem akan berubah menjadi liquid, dan sebaliknya untuk temperatur yang lebih rendah daripada temperatur lebur. Dari hasil penentuan temperatur lebur  $T_m$  menggunakan metode 1-fase, dibandingkan dengan perhitungan temperatur lebur  $T_m$  menggunakan metode 2-fase dapat diketahui bahwa metode 2-fase lebih akurat daripada metode 1-fase, dengan nilai akurasi di atas 90% untuk semua komposisi yang diuji.

Kata kunci : Paduan NiTi, Simulasi dinamika molekuler, , Komposisi Paduan NiTi, Temperatur lebur

## DAFTAR ISI

Halaman Judul Proposal Skripsi.....	i
Halaman Pengesahan Skripsi .....	ii
Pernyataan Orisinalitas Skripsi.....	iii
Halaman Berita Acara Ujian .....	iv
Berita Acara Bimbingan Skripsi .....	v
Motto.....	vi
Kata Pengantar.....	vii
Abstrak .....	ix
Daftar Isi.....	x
Daftar Gambar .....	xii
Daftar Lampiran.....	xiii
<b>BAB 1 PENDAHULUAN</b>	
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
<b>BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA</b>	
2.1 Penelitian Terdahulu .....	4
2.2 Paduan NiTi.....	5
2.3 Manfaat Paduan NiTi .....	7
a. Pelat Untuk Tulang Yang Patah.....	7
b. Stent (Ring Jantung).....	8
c. Kawat Pemandu .....	9
d. Kawat Ortodontik.....	9
e. Kabel tetap Mekanik .....	10
f. Aktuator Otomotif.....	10
2.4 Fabrikasi Paduan NiTi.....	11
2.5 Simulasi Dinamika Molekuler .....	12
2.6 Energi Potensial Antar Atom.....	13
<b>BAB 3 METODE PENELITIAN</b>	

3.1	Peralatan dan Kelengkapan.....	15
1)	Perangkat Keras .....	15
2)	Perangkat Lunak .....	15
a.	LAMMPS.....	15
b.	Moba Xterm.....	16
c.	Avogadro .....	16
d.	QT Grace.....	16
e.	Notepad++ .....	16
3.2	Tahapan Penelitian.....	17
3.3	Analisis Tahapan Penelitian .....	20
<b>BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN</b>		
4.1	Ekuilibrasi Sistem .....	21
1.	Grafik Hubungan Antara Waktu Dengan Total Energi .....	21
2.	Grafik Hubungan Antara Waktu Dengan Temperatur.....	22
3.	Grafik Hubungan Antara Waktu Dengan Tekanan .....	23
4.2	Penentuan Temperatur Lebur Dari Kurva <i>T-V</i> .....	23
1.	Ni <sub>30%</sub> Ti <sub>70%</sub> .....	24
2.	Ni <sub>40%</sub> Ti <sub>60%</sub> .....	25
3.	Ni <sub>60%</sub> Ti <sub>40%</sub> .....	25
4.	Ni <sub>70%</sub> Ti <sub>30%</sub> .....	26
4.3	Peta Komposisi NiTi dDengan Titik Lebur.....	27
4.4	Metode Dua Fase Paduan NiTi.....	27
4.5	Perbandingan Akurasi Temperatur Lebur Hasil Simulasi.....	29
<b>BAB 5 KESIMPULAN</b>		
5.1	Kesimpulan.....	30
5.2	Saran.....	30
Daftar Pustaka .....		31
Lampiran .....		34

## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Ilustrasi perubahan dari shape memory alloy .....	6
Gambar 2.2 Pelat untuk tulang yang patah .....	8
Gambar 2.3 Stent (ring jantung) .....	8
Gambar 2.4 Kawat pemandu .....	9
Gambar 2.5 Kawat ortodontik .....	9
Gambar 2.6 Kabel tetap mekanik .....	10
Gambar 2.7 Penggunaan bahan SMA pada pesawat terbang .....	11
Gambar 2.8 Vacuum induction melting dan vacuum arc remelting .....	19
Gambar 3.1 Diagram alir proses penelitian paduan NiTi .....	17
Gambar 3.2 Struktur atom nikel .....	18
Gambar 3.3 Struktur atom titanium .....	18
Gambar 3.4 Struktur atom nikel dan titanium .....	19
Gambar 4.1 Grafik hubungan antara $t-E$ .....	21
Gambar 4.2 Grafik hubungan antara $t-T$ .....	22
Gambar 4.3 Grafik hubungan antara $t-P$ .....	23
Gambar 4.4 Grafik nilai $T_+$ dan $T_-$ Ni <sub>30%</sub> Ti <sub>70%</sub> .....	24
Gambar 4.5 Grafik nilai $T_+$ dan $T_-$ Ni <sub>40%</sub> Ti <sub>60%</sub> .....	25
Gambar 4.6 Grafik nilai $T_+$ dan $T_-$ Ni <sub>60%</sub> Ti <sub>40%</sub> .....	25
Gambar 4.7 Grafik nilai $T_+$ dan $T_-$ Ni <sub>70%</sub> Ti <sub>30%</sub> .....	26
Gambar 4.8 Perbandingan komposisi NiTi dengan temperatur lebur .....	27
Gambar 4.9 Profil kerapatan dan persebaran atom saat $T < T_m$ .....	28
Gambar 4.10 Profil kerapatan dan persebaran atom saat $T > T_m$ .....	28

## DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Nilai perbandingan temperatur lebur ..... 29



