

**STUDI PENGARUH PERBEDAAN RASIO JUMLAH ATOM
PADUAN NiTi TERHADAP KEKUATAN TEKAN
BAHAN MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKULER**

SKRIPSI

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



**PROGRAMSTUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO
(2021)**

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Dian Rifka Puja Setiawan
NIM : 16511021
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan NiTi Terhadap Kekuatan Tekan Bahan 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, 12 Juli 2021

Menyetujui

Dosen Pembimbing I

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

NIK. 19870920 201204 12

Dosen Pembimbing II

(Munaji, S.Si., M.Si)

NIK. 19840805 201309 13

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik



(Edy Kurniawan, ST., M.T)
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin

(Yoga Arob Wicaksono, M.T)
NIK. 19910605 201909 13

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Dian Rifka Puja Setiawan

NIM : 16511021

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: "Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan Nitrogen Terhadap Kekuatan Tekan Bahan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler" bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang / teliti didalam 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 sebenarnya benarnya.

Ponorogo, 12 Juli 2021

Mahasiswa,



Dian Rifka Puja

NIM. 16511021

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Dian Rifka Puja Setiawan
NIM : 16511021
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan NiTi Terhadap Kekuatan Tekan Bahan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

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

Hari : Kamis
Tanggal : 29 Juli 2021
Nilai :

Dosen Penguji

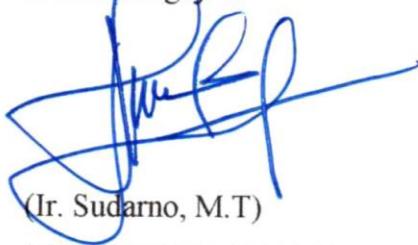
Dosen Penguji I



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

NIK. 19800220 201309 13

Dosen Penguji II



(Ir. Sudarno, M.T)

NIK. 19680705 199904 11

Mengetahui

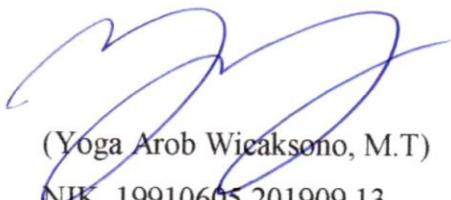
Dekan Fakultas Teknik



(Edy Kurniawan, ST., M.T)

NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin



(Yoga Arob Wicaksono, M.T)

NIK. 19910605 201909 13

BERITA ACARA

BIMBINGAN SKRIPSI

1. Nama : Dian Rifka Puja Setiawan
2. NIM : 16511021
3. Program Studi : Teknik Mesin
4. Fakultas : Teknik
5. Judul Skripsi : Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan NiTi Terhadap Kekuatan Tekan Bahan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler
6. Dosen Pembimbing : Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D
7. Konsultasi :

NO	TANGGAL	URAIAN	TANDA TANGAN
1.	4 November 2019	Pengajuan Judul	Rizal
2.	12 November 2019	Bab II Penelitian Terdahulu	Rizal
3.	1 Desember 2020	ACC Sempro	Rizal
4.	4 Februari 2021	Optimasi Struktur	Rizal
5.	12 Februari 2021	Mekanisme Uji Tekan	Rizal
6.	12 Maret 2021	Laporan Progres Simulasi MD	Rizal
7.	14 Juli 2021	ACC Sidang	Rizal

8. Tgl, Pengajuan : 4 November 2019

9. Tgl, Pengesahan : 14 Juli 2021

Ponorogò, 12 Juli 2021

Pembimbing I



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

NIK. 19870920 201204 12

BERITA ACARA

BIMBINGAN SKRIPSI

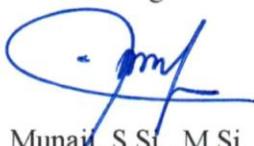
1. Nama : Dian Rifka Puja Setiawan
2. NIM : 16511021
3. Program Studi : Teknik Mesin
4. Fakultas : Teknik
5. Judul Skripsi : Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan NiTi Terhadap Kekuatan Tekan Bahan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler
6. Dosen Pembimbing : Munaji, S.Si., M.Si
7. Konsultasi :

NO	TANGGAL	URAIAN	TANDA TANGAN
1.	15 September 2020	Judul Uji Tekan MD	
2.	29 September 2020	Asistensi Jurnal Penelitian	
3.	1 Desember 2020	ACC Sempro	
4.	7 April 2021	Penjelasan Grafik Tegangan – Regangan	
5.	10 Mei 2021	Bab IV Metode ACJ	
6.	16 Juni 2021	Hasil Bab IV- Bab V	
7.	14 Juli 2021	ACC Sidang	

8. Tgl, Pengajuan : 4 November 2019
9. Tgl, Pengesahan : 14 Juli 2021

Ponorogo, 12 Juli 2021

Pembimbing II



Munaji, S.Si., M.Si

NIK. 19840805 201309 13

MOTTO

“Hanya kepada Engkaulah kami meyembah dan hanya kepada Engkaulah kami mohon pertolongan”.

(Al-Quran Surat Al-Fatiyah ayat 5)



**STUDI PENGARUH PERBEDAAN RASIO JUMLAH ATOM PADUAN
NiTi TERHADAP KEKUATAN TEKAN BAHAN MENGGUAKAN SIMU-
LASI DINAMIKA MOLEKULER**

Dian Rifka Puja Setiawan, Rizal Arifin, Munaji

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e- mail: dianrifkapujasetiawan@gmail.com

Abstrak

Paduan NiTi adalah material bahan yang terdiri dari paduan nikel-titanium. Paduan NiTi tergolong keluarga paduan *shape memory alloy*. Dalam skripsi ini di-analisis struktur kristal paduan NiTi karena pengaruh beberapa variasi rasio jumlah komposisi paduan yang berbeda-beda selama proses uji tekan menggunakan simulasi dinamika molekuler. Kebutuhan bahan material yang banyak dari paduan NiTi membutuhkan investigasi lebih dalam tentang pengaruh perbedaan variasi rasio jumlah komposisi paduan NiTi. Dari hasil yang sudah diperoleh, penulis menemukan bahwa komposisi terbaik pada Ni₅₀Ti₅₀ jumlah struktur bcc sebesar 88,9% kondisi awal, 83,6% kondisi *yield point*, 42,5% kondisi *ultimate tensile strength*, 17,5 kondisi *local necking*. Di dalam skripsi ini juga membahas secara rinci tentang tegangan-regangan, modulus elastisitas, sifat mekanik paduan NiTi, selama proses uji tekan tersebut.

Kata Kunci: Simulasi dinamika molekuler, uji tekan, paduan NiTi, struktur kristal, modulus elastisitas

KATA PENGANTAR

Puji Syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT atas rahmat-Nya, penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul “Studi Pengaruh Perbedaan Rasio Jumlah Atom Paduan NiTi Terhadap Kekuatan Tekan Bahan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler”. Penulisan skripsi ini dilakukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1) pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Penulis menyadari bahwa, tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, sangatlah sulit bagi penulis untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terimakasih kepada:

- 
1. Dr. Happy Susanto, M.A selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
 2. Dr. Edy Kurniawan, ST., M.T selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
 3. Yoga Arab wicaksono, M.T selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
 4. Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D dan Munaji, S.Si., M.Si., selaku dosen pembimbing penulis yang telah menyediakan waktu, tenaga dan pikiran untuk mengarahkan penulis dalam penyusunan skripsi ini hingga akhir penyusunan.
 5. Orang tua penulis yang selalu memberikan bantuan dukungan materil.
 6. Sahabat penulis yang selalu memberikan semangat, memotivasi dan menemani.
 7. Semua pihak yang tidak dapat penulis sebut satu persatu yang telah memberikan bantuan dukungan semangat.

Akhir kata, penulis berharap semoga Allah SWT membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Sebuah kesadaran bahwa apa yang dihasilkan dari skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan. Oleh karena itu, penulis mengharap kritik dan saran yang membangun dari pembaca. Semoga skripsi ini bisa menjadi awal yang baik untuk penelitian selanjutnya.

Ponorogo, 12 Juli 2021

Penulis



DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL SKRIPSI	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO.....	vii
ABSTRAK	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR LAMPIRAN	xvi
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1.Latar Belakang	1
1.2.Rumusan Masalah	2
1.3.Tujuan.....	3
1.4.Batasan Masalah.....	3
1.5.Manfaat.....	3
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1.Shape Memoory Alloy	4
2.2.Struktur Kristal.....	4
a) Simple cubic.....	6

b) Body-centered cubic.....	7
c) Face-centered cubic.....	7
d) Hexagonal close-packed (hcp)	8
2.3.Nickel	8
2.4.Titanium	9
2.5.Paduan NiTi.....	10
2.6.Simulasi Dinamika Molekuler	11
2.7.Energi Potensial Antar Atom	12
2.8.Ensemble	14
a. Ensemble Mikrokanonikal (NVE).....	14
b. Ensemble Kanonik (NVT)	14
c. Ensemble Isobarik-isotermal (NPT).....	14
2.9.Uji Tekan.....	15
 BAB 3 METODE PENELITIAN.....	16
3.1.Alat Dan Kelengkapan Penelitian	16
a. Perangkat Keras.....	16
b. Perangkat Lunak.....	17
1) LAMMPS	17
2) VMD (Visual Molecular Dynamics).....	17
3) Avogadro.....	18
4) qtGrace dan MagicPlot Student	18
5) Ovito.....	19
6) R.I.N.G.S.....	18
3.2.Diagram Alur Penelitian	19
 BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN.....	20
4.1 Ekuilibrasi Sistem	20
4.2 Grafik Tegangan Regangan	22
4.3 Sifat Mekanik.....	35
 BAB 5 PENUTUP.....	37

5.1 Kesimpulan	37
5.2 Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN	45



DAFTAR TABEL

Tabel 4.1. Hasil Uji Tekan Simulasi Dinamika Molekuler.....35

Tabel 4.2. Presentase Struktur pada saat simulasi Uji Tekan36



DAFTAR GAMBAR

Gambar : 2.1 Sifat ingat bentuk <i>shape memory alloy</i>	4
Gambar : 2.2 Struktur martensit & austenit	5
Gambar : 2.3 struktur kristal <i>simple cubic</i>	6
Gambar : 2.4 struktur kristal <i>body-centered cubic</i>	7
Gambar : 2.5 struktur kristal <i>face-centered cubic</i>	7
Gambar : 2.6 Struktur kristal <i>hexagonal close-packed</i>	8
Gambar : 2.7 Ilustrasi deformasi dan pemulihan dari <i>shape memory alloy</i>	7
Gambar : 2.8 Grafik tegangan-regangan.....	9
Gambar : 3.1 Flowchart penelitian.....	19
Gambar : 4.1 Energi total sistem.....	20
Gambar : 4.2 Temperatur dari paduan NiTi.....	21
Gambar : 4.3 Grafik tegangan-regangan dari paduan NiTi.....	22
Gambar : 4.4 Grafik tegangan-regangan paduan Ni ₃₀ % Ti ₇₀ %	22
Gambar : 4.5 2D Konfigurasi struktur paduan Ni ₃₀ % Ti ₇₀ %	23
Gambar : 4.6 3D Konfigurasi struktur paduan Ni ₃₀ % Ti ₇₀ %	23
Gambar : 4.7 Grafik tegangan-regangan paduan Ni ₄₀ % Ti ₆₀ %	25
Gambar : 4.8 2D Konfigurasi struktur paduan Ni ₄₀ % Ti ₆₀ %	25
Gambar : 4.9 3D Konfigurasi struktur paduan Ni ₄₀ % Ti ₆₀ %	25
Gambar : 4.10 Grafik tegangan-regangan paduan Ni ₅₀ % Ti ₅₀ %	27
Gambar : 4.11 2D Konfigurasi struktur paduan Ni ₅₀ % Ti ₅₀ %	28

Gambar : 4.12 3D Konfigurasi struktur paduan Ni _{50%} Ti _{50%}	28
Gambar : 4.13 Grafik tegangan-regangan paduan Ni _{60%} Ti _{40%}	30
Gambar : 4.14 2D Konfigurasi struktur paduan Ni _{60%} Ti _{40%}	30
Gambar : 4.15 3D Konfigurasi struktur paduan Ni _{60%} Ti _{40%}	31
Gambar : 4.16 Grafik tegangan-regangan paduan Ni _{70%} Ti _{30%}	32
Gambar : 4.17 2D Konfigurasi struktur paduan Ni _{70%} Ti _{30%}	33
Gambar : 4.18 3D Konfigurasi struktur paduan Ni _{70%} Ti _{30%}	33

