

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR PENGUJIAN TARIK
BAHAN PADUAN TiAl**

SKRIPSI

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



DADANG TRIAWAN

19511429

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

2021

HALAMAN PENGESAHAN
SKRIPSI

Nama : Dadang Triawan
NIM : 19511429
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Uji Tarik Bahan Paduan TiAl

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



Yoyok Winardi, S.T., M.T

NIK. 19860803 201909 13

Mengetahui,

Dekan Fakultas Teknik



Edy Kurniawan, S.T., 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 : Dadang Triawan

NIM : 19511429

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Simulasi Dinamika Molekular Pengujian Tarik Bahan Paduan TiAl” 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, 12 Juli 2021

Mahasiswa,



Dadang Triawan

NIM. 19511429

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Dadang Triawan
NIM : 19511429
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Pengujian Tarik Bahan
Paduan TiAl

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

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

Hari : Rabu
Tanggal : 21 Juli 2021
Nilai : A

Dosen Penguji,

Dosen Penguji I,



Ir. Fadelan, M.T

NIK. 19610509 199009 12

Dosen Penguji II,



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

NIK. 19800220 201309 13

Mengetahui,

Dekan Fakultas Teknik,



Edy Kurniawan, S.T., M.T

NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,

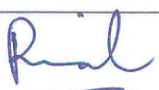









Yoga Arob Wicaksono, M.T

NIK. 19910605 201909 13

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Dadang Triawan
NIM : 19511429
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Pengujian Tarik Bahan Paduan TiAl
Dosen Pembimbing : Rizal Arifin, M. Si., Ph. D
Konsultasi :

No	Tanggal	Uraian	Tanda Tangan
1.	15-09-2020	konsultasi judul	
2.	15-10-2020	konsultasi BAB I	
3.	26-10-2020	konsultasi BAB II	
4.	13-11-2020	konsultasi BAB III	
5.	13-01-2021	seminar proposal	
6.	18-02-2021	konsultasi BAB IV	
7.	19-05-2021	konsultasi BAB V	
8.	12/7 ²¹	Acc.	

Tanggal Pengajuan :

Tanggal Pengesahan : 12/07/2021

Ponorogo, 12 Juli 2021

Pembimbing I



Rizal Arifin, M. Si., Ph. D

NIK. 19870920 201204 12

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Dadang Triawan
NIM : 19511429
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Pengujian Tarik Bahan Paduan TiAl
Dosen Pembimbing : Yoyok Winardi, S.T., M.T
Konsultasi :

No	Tanggal	Uraian	Tanda Tangan
1.	15-09-2020	konsultasi judul	
2.	15-10-2020	konsultasi BAB I	
3.	26-10-2020	konsultasi BAB II	
4.	13-11-2020	konsultasi BAB III	
5.	13-01-2021	Seminar Proposal	
6.	18-02-2021	konsultasi BAB IV	
7.	19-06-2021	konsultasi BAB V	
8.	12-07-2021	ACC sidang	

Tanggal Pengajuan :

Tanggal Pengesahan : 12/07/2021

Ponorogo, 12 Juli 2021

Pembimbing II



Yoyok Winardi, S.T., M.T

NIK. 19860803 201909 13

MOTTO

“Sesungguhnya sesudah kesulitan itu ada kemudahan. Maka apabila kamu telah selesai (dari suatu urusan), kerjakanlah dengan sungguh-sungguh (urusan) yang lain.” (Al-Qur’an surah Ash-Syarh: 6-7)

“A winner is a dreamer who never gives up.” — Nelson Mandela

“Don’t compare yourself to others. Compare yourself to the person yesterday.” —
Anonymous



KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat dan rahmat-Nya, penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul “Simulasi Dinamika Molekuler Pemberian Variasi Tekanan Pada Proses Solidifikasi Paduan NiTi”. Penulisan skripsi ini dilakukan sebagai salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik 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 terima kasih 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. Yoga Arob Wicaksono, M.T selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo;
4. Dr. Rizal Arifin, S.Si.,M.Si., Ph.D dan Yoyok Winardi, S.T., M.T selaku dosen pembimbing penulis yang telah menyediakan waktu, tenaga dan pikiran untuk mengarahkan penulis dalam penyusunan skripsi ini hingga akhir penyusunan;
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo;
6. Keluarga khususnya kepada Bapak yang sudah almarhum dan ibu yang selalu mendoakan saya, Istri dan anak penulis yang selalu memberikan bantuan dukungan materil dan moril;
7. Apriliandy Fajar Syahputra dan Dian Rifka Puja Setiawan selaku rekan mahasiswa yang selalu menemani, memahami ataupun bertukar pendapat mengenai ilmu tentang simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi semangat menyelesaikan skripsi ini;

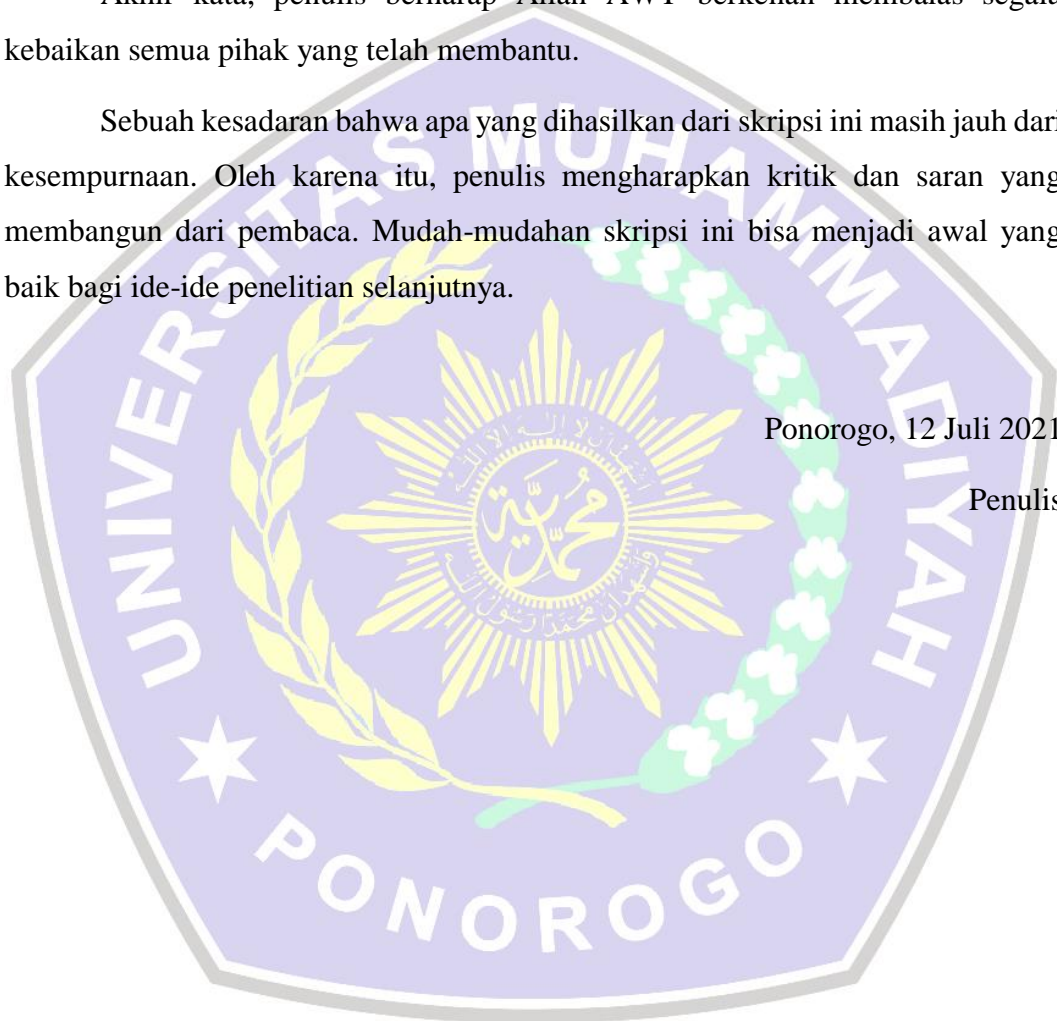
8. Alexander Levantovsky selaku pengembang perangkat lunak MagicPlot Student yang aplikasinya penulis gunakan untuk membuat grafik di dalam skripsi ini;
9. Teman-teman satu angkatan terima kasih atas do'a dan motivasinya;
10. Semua pihak yang yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu yang telah memberikan bantuan baik secara moril maupun materilnya;

Akhir kata, penulis berharap Allah SWT berkenan 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 mengharapkan kritik dan saran yang membangun dari pembaca. Mudah-mudahan skripsi ini bisa menjadi awal yang baik bagi ide-ide penelitian selanjutnya.

Ponorogo, 12 Juli 2021

Penulis



SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGUJIAN TARIK BAHAN PADUAN TiAl

Dadang, Rizal Arifin, Yoyok

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik,
Universitas Muhammadiyah Ponorogo
Email: dadang.triawan22@gmail.com

ABSTRAK

Dalam skripsi ini dianalisis struktur kristal paduan TiAl karena pengaruh beberapa variasi komposisi paduan yang berbeda-beda selama proses uji tarik menggunakan teknik simulasi dinamika molekuler. Paduan TiAl termasuk dalam keluarga *shape memory alloy* dan memiliki karakteristik seperti material yang sangat keras atau kaku. Kebutuhan yang tidak sedikit dari paduan TiAl membutuhkan penelitian lebih lanjut tentang struktur kristal dari paduan TiAl. Salah satu kesulitan dalam memproduksi material ini adalah karena titanium cair sangat reaktif terhadap oksigen selain itu juga biaya yang digunakan dalam proses produksi juga cukup banyak. Seperti yang diketahui bahwa material yang baik harus menyesuaikan kriteria yang dibutuhkan dalam penggunaannya. Oleh karena itu, untuk memberikan struktur kristal yang sesuai dengan keinginan atau kebutuhan dari pengguna, mengetahui pengaruh tekanan pada struktur kristal selama proses uji tarik menjadi sangat penting. Skripsi ini menggunakan teknik simulasi dinamika molekuler yang merupakan suatu teknik perhitungan pada skala atomik dengan menerapkan hukum fisika klasik untuk memperagakan gerak antar atom. Dari hasil yang sudah diperoleh, penulis menemukan bahwa jumlah struktur lokal fcc dan bcc secara rata-rata mengalami kenaikan presentase seiring bertambahnya tekanan. Selain itu, terjadi rata-rata persentase yang fluktuasi untuk struktur kristal hcp dan *icosahedral*. Di dalam skripsi ini juga membahas secara rinci tentang tegangan-regangan, modulus elastisitas, sifat mekanik paduan, penentuan sumbu z sebagai arah pengujian tarik dan proses sebelum terjadinya patahan yang dihasilkan selama proses uji tarik tersebut.

Kata Kunci: Simulasi dinamika molekuler, Pengujian tarik, Paduan TiAl, Struktur kristal, Modulus elastisitas.

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO	vii
KATA PENGANTAR	viii
ABSTRAK	x
DAFTAR ISI	xi
DAFTAR TABEL	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	4
1.4 Batasan Masalah	4
1.5 Manfaat	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1. Struktur Paduan TiAl	5
2.2. Struktur Kristal	6
a. Simple Cubic	7
b. Body-Centered Cubic	7
c. Face-Centered Cubic	8

d.	Hexagonal Close-Packed (HCP)	8
e.	Icosahedral	9
2.3.	Pengujian Tarik	9
a.	Uji Tarik	9
b.	Tegangan-Regangan Teknis	10
c.	Kekuatan Tarik	13
2.4.	Perkembangan Riset Paduan TiAl	13
2.5.	Simulasi Dinamika Molekuler	14
2.6.	Energi Potensial Antar Atom	16
2.7.	Kondisi Batas Periodik	17
BAB 3	METODE PENELITIAN	18
3.1.	Alat Dan Kelengkapan Penelitian	18
3.1.1	Perangkat Keras	18
3.1.2	Perangkat Lunak	18
3.2.	Diagram Alur Penelitian	20
3.4.	Tahapan Penelitian	21
3.5.	Membangun Struktur Kristal	21
a.	Inisialisasi Input File	24
b.	Membaca Posisi Dan Kecepatan Awal Atom	24
c.	Menentukan Interaksi Antar Atom	24
d.	Menjalankan Simulasi	25
3.6.	Optimasi struktur Kristal Paduan Logam TiAl	25
3.7.	Metode Conjugate Gradient	26
3.8.	Pemberian Simulasi Uji Tarik	26
3.9.	Tempat Penelitian	27
BAB 4	ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN	28

4.1. Analisa Data	28
4.2. Pembahasan	29
4.2.1 Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan TiAl	29
4.2.2 Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ti _{60%} Al _{40%}	32
4.2.3 Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ti _{70%} Al _{30%}	35
4.2.4 Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ti _{40%} Al _{60%}	38
4.2.5 Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ti _{30%} Al _{70%}	41
4.2.6 Sifat Mekanik Pada Komposisi Paduan TiAl.....	44
4.2.7 Jarak Antar Atom Pada Komposisi Paduan TiAl.....	47
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN	50
5.1. Kesimpulan	50
5.2. Saran	51
DAFTAR PUSTAKA	52
LAMPIRAN	56

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1. Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler.....	44
Tabel 3.2. Prosentase dari Paduan TiAl saat Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler.....	45
Tabel 3.3. Hasil Jarak Antar Atom saat Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler.....	48



DAFTAR GAMBAR

Gambar : 2.1 Tahapan pemaduan proses metalurgi bubuk	5
Gambar : 2.2 Konfigurasi stuktur kristal <i>simple cubic</i>	7
Gambar : 2.3 Konfigurasi struktur kristal <i>body-centered cubic</i>	7
Gambar : 2.4 Konfigurasi struktur kristal <i>face-centered cubic</i>	8
Gambar : 2.5 Konfigurasi struktur kristal <i>hexagonal close-packed</i>	8
Gambar : 2.6 Konfigurasi struktur kristal <i>icosahedral</i>	9
Gambar : 2.7 Alat Uji Tarik	10
Gambar : 2.8 Gambar singkat uji tarik	11
Gambar : 2.9 Kurva tegangan-regangan teknis	12
Gambar : 2.10 Kurva TiAl hasil uji korosi	14
Gambar : 2.11 Kondisi Batas Periodik.....	17
Gambar : 3.1 Flowchart Penelitian.....	20
Gambar : 3.2 Tahapan Penelitian	21
Gambar : 3.3 (a) Struktur kristal fcc dari Al	22
Gambar : 3.4 Konfigurasi awal paduan logam TiAl dengan struktur kristal	25
Gambar : 4.1 Grafik Tegangan Regangan Paduan TiAl	29
Gambar : 4.2 Potret 2D konfigurasi struktur atom paduan TiAl.....	29
Gambar : 4.3 Potret 3D konfigurasi struktur atom paduan TiAl.....	30
Gambar : 4.4 Grafik Tegangan Regangan Paduan Ti _{60%} Al _{40%}	32
Gambar : 4.5 Potret 2D konfigurasi struktur atom paduan Ti _{60%} Al _{40%}	32
Gambar : 4.6 Potret 3D konfigurasi struktur atom paduan Ti _{60%} Al _{40%}	33
Gambar : 4.7 Grafik Tegangan Regangan Paduan Ti _{70%} Al _{30%}	35

Gambar : 4.8 Potret 2D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{70\%}Al_{30\%}$	35
Gambar : 4.9 Potret 3D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{70\%}Al_{30\%}$	36
Gambar : 4.10 Grafik Tegangan Regangan Paduan $Ti_{40\%}Al_{60\%}$	38
Gambar : 4.11 Potret 2D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{40\%}Al_{60\%}$	38
Gambar : 4.12 Potret 3D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{40\%}Al_{60\%}$	39
Gambar : 4.13 Grafik Tegangan Regangan Paduan $Ti_{30\%}Al_{70\%}$	41
Gambar : 4.14 Potret 2D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{30\%}Al_{70\%}$	41
Gambar : 4.15 Potret 3D konfigurasi struktur atom paduan $Ti_{30\%}Al_{70\%}$	42
Gambar : 4.16 Grafik konfigurasi jarak antar atom struktur paduan $TiAl$	47
Gambar : 4.17 Grafik jarak antar atom kelima struktur paduan $TiAl$	49



DAFTAR LAMPIRAN

1.1 Proses Menjalankan Simulasi dengan Aplikasi MobaXterm.....	56
1.2 Log LAMMPS Optimasi TiAl	57
1.3 Log LAMMPS Uji Tarik	58
1.4 Log LAMMPS Optimasi Ti _{60%} Al _{40%}	59
1.5 Log LAMMPS Uji Tarik Ti _{60%} Al _{40%}	60
1.6 Log LAMMPS Optimasi Ti _{70%} Al _{30%}	61
1.7 Log LAMMPS Uji Tarik Ti _{70%} Al _{30%}	62
1.8 Log LAMMPS Optimasi Ti _{40%} Al _{60%}	63
1.9 Log LAMMPS Uji Tarik Ti _{40%} Al _{60%}	64
1.10 Log LAMMPS Optimasi Ti _{30%} Al _{70%}	65
1.11 Log LAMMPS Uji Tarik Ti _{30%} Al _{70%}	66

