

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER UJI TARIK BAHAN
PADUAN NiTiAl**

SKRIPSI

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



APRILIANDY FAJAR SYAH PUTRA

19511428

PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO

2021

HALAMAN PENGESAHAN

SKRIPSI

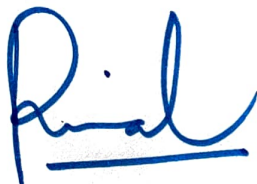
Nama : Apriliandy Fajar Syah Putra
NIM : 19511428
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Uji Tarik Bahan Paduan NiTiAl

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, 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,

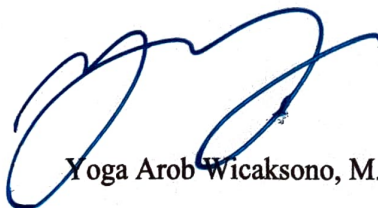
Dekan Fakultas Teknik



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 : Apriliandy Fajar Syah Putra

NIM : 19511428

Program Studi : Teknik Mesin

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



Mahasiswa,


Apriliandy Fajar Syah Putra

NIM. 19511428

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Apriliandy Fajar Syah Putra
NIM : 19511428
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Uji Tarik Bahan Paduan
NiTiAl

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,

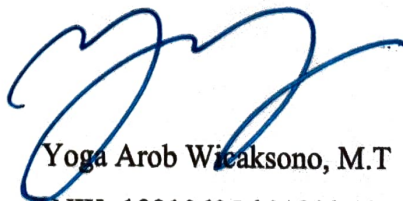
Dekan Fakultas Teknik,



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 : Apriliandy Fajar Syah Putra
NIM : 19511428
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Uji Tarik Bahan
Paduan NiTiAl
Dosen Pembimbing : Rizal Arifin, M. Si., Ph. D
Konsultasi :

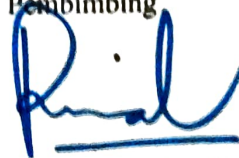
No	Tanggal	Uraian	Tanda Tangan
1	15 - 09 - 2020	Konsultasi judul	
2	15 - 10 - 2020	Konsultasi Bab I	
3	26 - 10 - 2020	Konsultasi Bab II	
4	13 - 11 - 2020	Konsultasi Bab III	
5	13 - 01 - 2021	Seminar Proposal	
6	16 - 03 - 2021	Konsultasi Bab IV	
7	02 - 07 - 2021	Konsultasi Bab V	
8	12 - 07 - 2021	Acc Sidang	

Tanggal Pengajuan :

Tanggal Pengesahan : 12 - 07 - 2021

Ponorogo, Juli 2021

Pembimbing

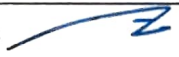









Rizal Arifin, M. Si., Ph. D

NIK. 19870920 201204 12

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Apriliandy Fajar Syah Putra
NIM : 19511428
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Uji Tarik Bahan Paduan NiTiAl
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 II	
3	26-10-2020	Konsultasi Bab II	
4	13-11-2020	Konsultasi Bab III	
5	13-01-2021	Seminar Proposal	
6	16-03-2021	Konsultasi Bab IV	
7	02-07-2021	Konsultasi Bab V	
8	12-07-2021	ACC Sidang	

Tanggal Pengajuan :

Tanggal Pengesahan : 12-07-2021

Ponorogo, Juli 2021

Pembimbing



Yoyok Winardi, S.T., M.T

NIK. 19860803 201909 13

MOTTO

“Boleh jadi kamu membenci sesuatu, padahal ia amat baik bagimu, dan boleh jadi (pula) kamu menyukai sesuatu, padahal ia amat buruk bagimu; Allah mengetahui, sedang kamu tidak mengetahui.” (QS. Al-Baqarah: 216).

“Raihlah ilmu, dan untuk meraih ilmu belajarlah untuk tenang dan sabar.” -(Umar Ibn Khattab)



SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER PENGUJIAN TARIK BAHAN PADUAN NiTiAl

Apriliandy, Rizal Arifin, Yoyok

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

ABSTRAK

Dalam skripsi ini dianalisis struktur kristal paduan NiTiAl karena pengaruh beberapa variasi komposisi paduan yang berbeda-beda selama proses uji tarik menggunakan teknik simulasi dinamika molekuler. Paduan NiTiAl termasuk dalam keluarga *shape memory alloy* dan memiliki karakteristik seperti material yang sangat keras atau kaku. Kebutuhan yang tidak sedikit dari paduan NiTiAl membutuhkan penelitian lebih lanjut tentang struktur kristal dari paduan NiTiAl. 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 tertinggi terdapat pada paduan Ni_{20%}, Ti_{50%}, Al_{30%}. Selain itu, terjadi rata-rata persentase yang fluktuasi untuk struktur kristal hcp. Di dalam skripsi ini juga membahas secara rinci tentang tegangan-regangan, modulus elastisitas, sifat mekanik paduan, penentuan sumbu x sebagai arah pengujian tarik dan proses sebelum terjadinya patahan atau area necking yang dihasilkan selama proses uji tarik tersebut.

Kata Kunci: Simulasi dinamika molekuler, uji tarik, paduan NiTiAl, struktur kristal, modulus elastisitas.

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 Pengujian Tarik Bahan Paduan NiTiAl”. 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, 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. Orang tua, Istri dan Anak dari penulis yang selalu memberikan bantuan dukungan materil dan moril;
6. Dadang Triawan selaku rekan kerja sekaligus rekan kuliah dan penelitian yang selalu menemani dan memberikan motivasi yang selalu memberikan semangat,
7. Alexander Levantovsky selaku pengembang perangkat lunak MagicPlot Student yang aplikasinya penulis gunakan untuk membuat grafik di dalam skripsi ini;
8. Teman-teman satu angkatan terima kasih atas do'a dan motivasinya;
9. 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, 2021

Penulis



DAFTAR ISI

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER UJI TARIK BAHAN PADUAN	
NiTiAl	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	vi
MOTTO	vii
ABSTRAK.....	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR	xiv
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1. Latar Belakang	1
1.2. Rumusan Masalah	3
1.3. Tujuan.....	3
1.4. Batasan Masalah.....	3
1.5. Manfaat.....	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	5
2.1 Struktur Kristal	5
a. Simple cubic	5
b. Body-centered cubic	5
c. <i>Face-centered cubic</i>	6
d. Hexagonal close-packed (hcp)	6
e. <i>Icosahedral</i>	7
2.2. Struktur Paduan NiTi-Al	8

2.3.	Penambahan Unsur Lain pada Paduan NiTi.....	9
2.4.	Simulasi Dinamika Molekuler.....	9
2.5.	Elastisitas dan Plastisitas Bahan.....	10
2.6.	Tegangan, Regangan dan Modulus Elastisitas	11
a.	Uji Tarik	11
b.	Tegangan-Regangan Teknis	12
c.	Kekuatan Tarik	16
d.	Modulus Elastisitas	16
2.7.	Energi Potensial Antar Atom	17
2.8.	Ensemble	18
a.	<i>Ensemble</i> Mikrokanonikal (NVE).....	18
b.	<i>Ensemble</i> Kanonik (NVT).....	19
c.	<i>Ensemble</i> Isobarik-isotermal (NPT).....	19
2.9.	Kondisi Batas Periodik.....	20
BAB 3 METODE PENELITIAN.....		21
3.1.	Alat Dan Kelengkapan Penelitian	21
a.	Perangkat keras.....	21
b.	Perangkat lunak	21
3.2.	Diagram Alur Penelitian.....	24
3.3.	Jadwal Penelitian	25
3.4.	Tahapan Penelitian	26
3.5.	Membangun Struktur Kristal.....	27
a.	Inisialisasi input file	29
b.	Membaca posisi dan kecepatan awal atom.....	29
c.	Menentukan interaksi antar atom	30
d.	Menjalankan simulasi.....	30
3.6.	Membangun Struktur Kristal Paduan NiTiAl	31
3.7.	Minimasi Struktur Paduan Menggunakan Metode <i>Conjugate Gradient</i>	31
3.8.	Pemberian Simulasi Uji Tarik	32
3.9.	Tempat Penelitian.....	33
BAB 4 ANALISIS DAN PEMBAHASAN		34
4.1.	Analisis Data	34

4.2. Pembahasan	35
a. Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ni _{10%} , Ti _{50%} , Al _{40%}	35
b. Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ni _{20%} , Ti _{50%} , Al _{30%}	38
c. Hasil Uji Simulasi Dinamika Molekuler Paduan Ni _{30%} , Ti _{50%} , Al _{20%}	41
4.3. Pengaruh Komposisi Ni Pada Sifat Mekanik Paduan NiTiAl.....	44
4.4. Coordination analysis atau Jarak Antar Atom pada Setiap Paduan	46
4.5. Energi Relatif pada Setiap Kondisi	49
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN	51
5.1. Kesimpulan.....	51
5.2. Saran.....	52
DAFTAR PUSTAKA.....	53
LAMPIRAN.....	57



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Konfigurasi stuktur kristal simple cubic	5
Gambar 2. 2 Konfigurasi struktur kristal body-centered cubic	6
Gambar 2. 3 Konfigurasi struktur kristal face-centered cubic	6
Gambar 2. 4 Konfigurasi struktur kristal hexagonal close-packed	7
Gambar 2. 5 Konfigurasi struktur kristal icosahedral	7
Gambar 2. 6 Ilustrasi deformasi dan pemulihan dari shape memory alloy	8
Gambar 2. 7 Alat uji tarik	12
Gambar 2. 8 Gambar singkat uji tarik	13
Gambar 2. 9 Kurva tegangan-regangan teknis	14
Gambar 2. 10 Perbandingan antara kurva tegangan regangan Teknik dengan kurva tegangan regangan sejati	15
Gambar 2. 11 Grafik tegangan terhadap regangan	17
Gambar 2. 12 Kondisi Batas Periodik. Saat partikel keluar dari bidang simulasi, partikel dari bidang berlawanan bergerak menggantikannya. Sumber: (Allen, 2004).	20
Gambar 3. 1 flowchart penelitian	24
Gambar 3. 2 Tahapan Penelitian	26
Gambar 3. 3 (a) Struktur kristal fcc dari Ni, (b) Struktur kristal hcp dari Ti dan (c) Struktur kristal B2 dari paduan NiTi, bola dengan warna biru mempresentasikan atom Ni dan merah sebagai Ti	27
Gambar 3. 4 Konfigurasi awal paduan NiTi dengan struktur kristal B2. Bola berwarna biru dan merah secara berurutan merepresentasikan atom nikel dan titanium	31
Gambar 4. 1 Grafik tegangan-regangan paduan Ni _{10%} , Ti _{50%} , Al _{40%}	35
Gambar 4. 2 Perubahan struktur pada tiap kondisi paduan Ni _{10%} , Ti _{50%} , Al _{40%} ...	35
Gambar 4. 3 Snapshot konfigurasi struktur atom paduan Ni _{10%} , Ti _{50%} , Al _{40%} pada saat : (a) awal simulasi, (b) kondisi titik luluh, (c) kondisi kekuatan tarik maksimum, (d) local necking	36
Gambar 4. 4 Grafik tegangan-regangan paduan Ni _{20%} , Ti _{50%} , Al _{30%}	38
Gambar 4. 5 Perubahan struktur pada tiap kondisi paduan Ni _{20%} , Ti _{50%} , Al _{30%} ...	38
Gambar 4. 6 Snapshot konfigurasi struktur atom paduan Ni _{20%} , Ti _{50%} , Al _{30%} pada saat : (a) awal simulasi, (b) kondisi titik luluh, (c) kondisi kekuatan tarik maksimum, (d) local necking	39
Gambar 4. 7 Grafik tegangan-regangan paduan Ni _{30%} , Ti _{50%} , Al _{20%}	41
Gambar 4. 8 Perubahan struktur pada tiap kondisi paduan Ni _{30%} , Ti _{50%} , Al _{20%} ...	41
Gambar 4. 9 Snapshot konfigurasi struktur atom paduan Ni _{30%} , Ti _{50%} , Al _{20%} pada saat : (a) awal simulasi, (b) kondisi titik luluh, (c) kondisi kekuatan tarik maksimum, (d) local necking	42

Gambar 4. 10 Visualisasi Jarak antar atom menggunakan mode Coordination Analysis..... 46
Gambar 4. 11 Perbandingan Jarak Antar Atom pada tiap-tiap kondisi..... 46
Gambar 4. 12 Grafik Jarak Antar Atom Pada Setiap Simulasi Paduan Pada Saat kondisi Awal Simulasi dan Saat Posisi Titik Luluh (yield point)..... 48



DAFTAR TABEL

Tabel 3. 1 Waktu Penelitian	25
Tabel 4. 1 Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler	44
Tabel 4. 2 Prosentase dari Paduan NiTiAl saat Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler	45
Tabel 4. 3 Jarak Antar Atom Pada Setiap Simulasi Paduan	47
Tabel 4. 4 Tabel Energi Pada Setiap Kondisi	49

