

**STUDI PENGARUH TEMPERATUR TERHADAP KEKUATAN
TARIK TiAI NANORODS 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



TAUFAN PANJI SUKMA

17511172

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO
2022**

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Taufan Panji Sukma
NIM : 17511172
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik TiAl
Nanorods 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, 31 Januari 2022

Menyetujui

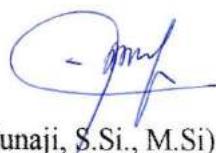
Dosen Pembimbing I,



(Rizal Arifin, M.Sc., 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,



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

NIK. 19860803 201909 13

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Taufan Panji Sukma

NIM : 175111172

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul: "Studi Pengaruh Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik TiAl Nanorods Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler" bahwa berdasarkan hasil pene-lusuran 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.

Ponorogo, 31 Januari 2022

Mahasiswa



Taufan Panji Sukma

NIM. 175111172

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Taufan Panji Sukma
NIM : 17511172
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Studi Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik TiAl Nanorods Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

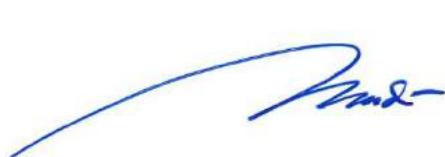
Telah diuji dan dipertahankan dihadapan
Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Kamis
Tanggal : 27 Januari 2022
Nilai :

Dosen Penguji

Dosen Penguji I,

Dosen Penguji II,



(Ir. Muh Malyadi, MM)

NIK. 19601117 199009 12



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

NIK. 19860803 201909 13

Mengetahui

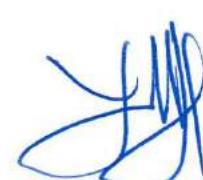
Dekan Fakultas Teknik,

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



(Edy Kurniawan, S.T., M.T)

NIK. 19771026 200810 12



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

NIK. 19860803 201909 13

BERITA ACARA

BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Taufan Panji Sukma
 NIM : 17511172
 Judul Skripsi : Studi Pengaruh Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik
 TiAl Nanorods Menggunakan Simulasi Dinamika
 Molekuler
 Dosen Pembimbing I : Rizal Arifin, M.Sc., M.Si., Ph.D

PROSES BIMBINGINGAN

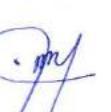
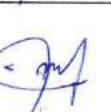
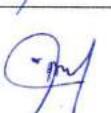
No.	Tanggal	Materi yang dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	15 Juni 2021	Konsultasi Judul	Penambahan temperatur pada variasi 100 K - 600 K	Rizal
2	10 Oktober 2021	BAB 1 latar belakang dan bahan riset	Penambahan penelitian. setidaknya dibacakan makalah tambahan arah wajib	Rizal
3	10 Oktober 2021	BAB 2 Penambahan struktural kerakal	Cantik ditambahkan tentang penjelasan struktur kerakal	Rizal
4	10 Oktober 2021	BAB 3 tahapan penelitian	Merubah Flow chart	Rizal
5	28 Desember 2021	BAB 4 Proses simulasi	Penambahan gambar simulasi dari awal simulasi hingga proses patch	Rizal
6	28 Desember 2021	BAB 4 Proses simulasi	- Fitting daerah linear - Penambahan grafik hubungan temperatur	Rizal
7	18 Januari 2022	BAB 5 kesimpulan	Penambahan hasil pengujian dc kesimpulan	Rizal

BERITA ACARA

BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Taufan Panji Sukma
NIM : 17511172
Judul Skripsi : Studi Pengaruh Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik TiAl Nanorods Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler
Dosen Pembimbing II: Munaji, S.Si., M.Si

PROSES BIMBINGAN

No.	Tanggal	Materi yang dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	13 Oktober 2021	Konsultasi judul	Pembahasan variasi temperatur 100 K - 600 K	
2	25 Oktober 2021	BAB 1 Metodik penulisan	Pembahasan klasifikasi Pada metodik penulisan	
3	25 Oktober 2021	BAB 2 Penulisan rancangan	Penulisan rancangan bercetak di tengah	
4	25 Oktober 2021	BAB 3 Tatacara penulisan	Pembahasan pada Flow chart	
5	29 Oktober 2021	Penulisan daftar pustaka	Tersebutkan model tarif pustaka menjadi IEEE	
6	28 Desember 2021	BAB 4 Proses Simulasi	Pembahasan gambar proses Simulasi dari awal simulasi hingga titik setah	
7	18 Januari 2022	BAB 5 kesimpulan	Pembahasan hasil perujukan ke dalam Penulisan kesimpulan	

MOTTO

“Keberhasilan bukanlah milik orang yang pintar, tapi milik mereka yang senatiasa berusaha.” — B.J Habibie

“The individual is ephemeral, races and nations come and pass away, but man remains.” — Nikola Tesla

“Logic will get you from A to Z; imagination will get you everywhere.”
— Albert Einstein



**STUDI PENGARUH TEMPERATUR TERHADAP KEKUATAN TARIK
TiAl NANORODS MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKULER**

Taufan Panji Sukma, Rizal Arifin, Munaji

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : taufanpanjisukma25@gmail.com

Abstrak

Paduan TiAl adalah material bahan yang tersusun dari paduan Titanium dan Aluminium. Paduan TiAl ini memiliki karakteristik yang keras atau kaku. Pengaplikasian paduan TiAl ini sudah banyak digunakan pada industri otomotif seperti turbin bilah, turbocharger, dan katup buang pada formula satu dan mobil sport. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui pengaruh temperatur dan kelakuan paduan TiAl Nanorods pada saat pembebanan tarik dengan temperatur 100 K, 200 K, 300 K, 400 K, 500 K, dan 600 K. Penelitian ini menggunakan teknik simulasi dinamika molekuler yang merupakan perhitungan pada skala atomik. Dari hasil yang sudah diperoleh, peneliti menemukan bahwa semakin tinggi pengaruh temperatur terhadap paduan TiAl Nanorods maka nilai dari sifat mekanik paduannya akan semakin kecil, ataupun sebaliknya. Dalam penelitian ini juga membahas secara rinci tentang tegangan-regangan, modulus elastisitas, hubungan temperatur dengan sifat mekanik paduan, dan proses awal simulasi hingga proses terjadinya patahan pada saat pengujian tarik tersebut.

Kata Kunci : Paduan TiAl Nanorods, Simulasi Dinamika Molekuler, Uji Tarik, Temperatur, Gambar Struktur Paduan

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat rahmat dan karunianya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Temperatur Terhadap Kekuatan Tarik TiAl Nanorods Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler”.

Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat sebelum pembuatan laporan skripsi dan akhirnya untuk mencapai gelar Sarjana Teknik Prodi Teknik Mesin pada Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Dipenulisan skripsi penulis menyadari tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak sangat sulit bagi penulis untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, diucapkan banyak terimakasih 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. Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Ketua Prodi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Munaji, S.Si., M.Si selaku Dosen Pembimbing yang selalu memberikan arahan, serta bimbingan secara sabar kepada penulis dalam menyusun skripsi.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Keluarga khususnya kepada Bapak, Ibu, dan Adek yang selalu mendoakan, memberi motivasi dan semangat kepada saya untuk segera menyelesaikan skripsi serta kuliah.
7. Septien Tri C selaku rekan satu angkatan dan partner saya dalam memahami ataupun bertukar pendapat mengenai ilmu-ilmu tentang simulasi dinamika molekuler.

8. Seluruh teman-teman Prodi Teknik Mesin Angkatan 2017 yang selalu memberi dorongan serta motivasi dalam menyelesaikan skripsi.

Akhir kata, saya berharap Allah SWT berkenan membalaik kebaikan semua pihak yang telah membantu dalam penggerjaan skripsi ini.

Sebuah kesadaran bagi saya bahwa penelitian ini sangat jauh dari sempurna, akan tetapi semoga dapat menjadi suatu awal yang baik bagi pengembangan dipenelitian-penelitian selanjutnya.

Ponorogo, 31 Januari 2022



Taufan Panji Sukma

17511172

DAFTAR ISI

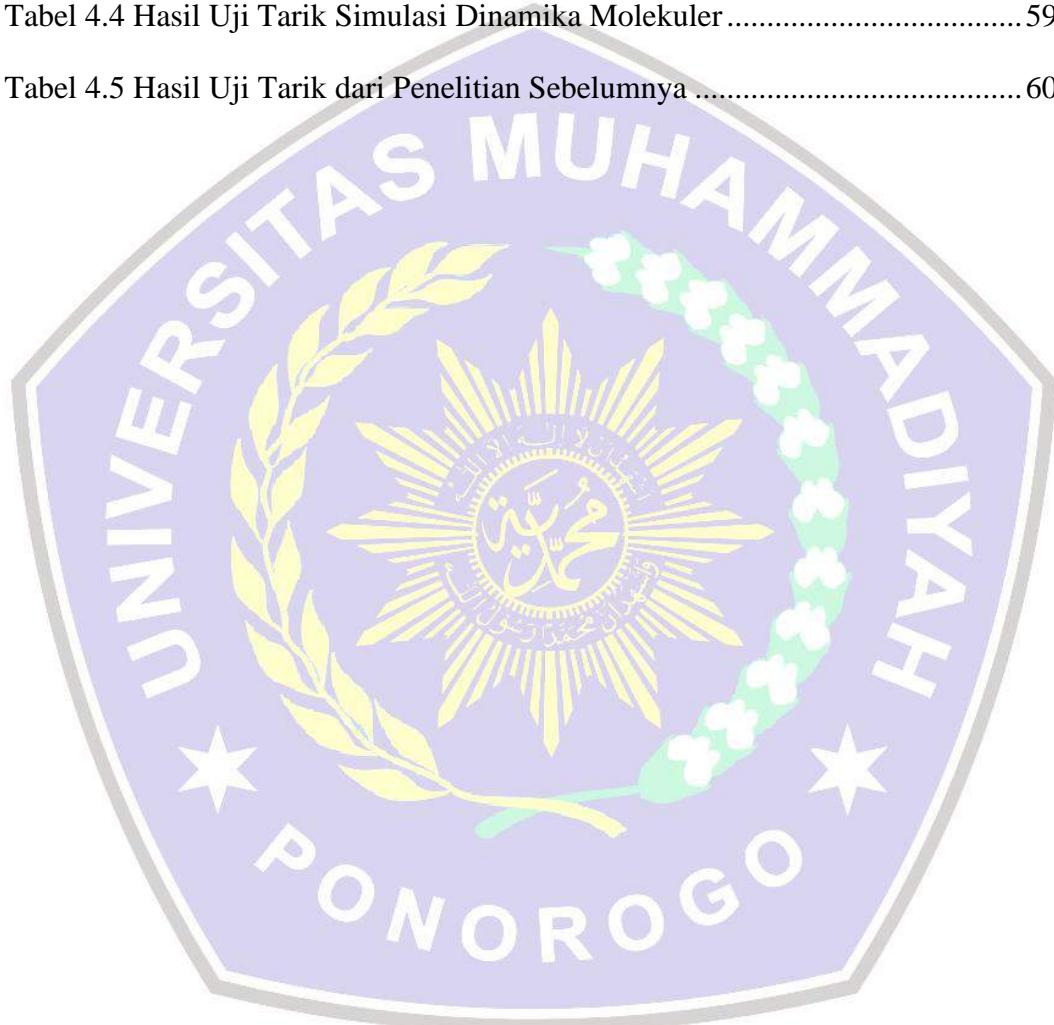
HALAMAN JUDUL SKRIPSI.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO	vii
ABSTRAK	viii
KATA PENGANTAR	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL.....	xiv
DAFTAR GAMBAR	xv
DAFTAR LAMPIRAN	xvii
BAB 1 PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	4
1.4 Batasan Masalah.....	4
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	
2.1 Titanium	5
2.2 Aluminium	5
2.3 Paduan TiAl	6

2.4 Perkembangan Riset Paduan TiAl	7
2.5 Struktur Kristal.....	8
2.5.1 Struktur Body Centered-Cubic (BCC).....	10
2.5.2 Struktur Face Centered-Cubic (FCC).....	10
2.5.3 Struktur Heksagonal Closed Packed (HCP)	11
2.6 Nanomaterial	11
2.7 Nanorods	12
2.8 Uji Tarik.....	12
2.9 Simulasi Dinamika Molekuler	14
2.10 Energi Potensial Antar Atom	15
BAB 3 METODE PENELITIAN	
3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	17
3.2 Peralatan dan Perlengkapan	17
3.2.1 Perangkat Keras	17
3.2.2 Perangkat Lunak.....	18
3.3 Tahapan Penelitian.....	21
3.4 Studi Literatur	21
3.5 Membuat Struktur Awal Paduan TiAl	22
3.6 Pemberian Simulasi Uji Tarik	23
3.7 Ploting Grafik.....	24
BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN	
4.1 Analisa Data	25
4.2 Ekuilibrasi Pada Sistem Energi	25
4.3 Ekuilibrasi Pada Sistem Temperatur	26

4.4 Pembahasan.....	28
4.4.1 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 100 K.....	28
4.4.2 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 200 K.....	32
4.4.3 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 300 K.....	36
4.4.4 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 400 K.....	40
4.4.5 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 500 K.....	44
4.4.6 Hasil Uji Tarik TiAl Nanorods 600 K.....	48
4.5 Fitting Daerah Linier.....	52
4.6 Hubungan Temperatur Dengan Sifat Mekanik	53
4.6.1 Temperatur Dengan Modulus Elastisitas	53
4.6.2 Temperatur Dengan Kekuatan Tarik Maksimum	55
4.6.3 Temperatur Dengan Titik Luluh	57
4.7 Sifat Mekanik	59
4.8 Perbandingan hasil Simulasi Paduan TiAl.....	60
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN	
5.1 Kesimpulan	61
5.2 Saran	62
DAFTAR PUSTAKA	63
LAMPIRAN	66

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Nilai Regresi Temperatur Dengan Modulus Elastisitas	54
Tabel 4.2 Nilai Regresi Temperatur Dengan Kekuatan Tarik Maksimum	56
Tabel 4.3 Nilai Regresi Temperatur Dengan Titik Luluh	58
Tabel 4.4 Hasil Uji Tarik Simulasi Dinamika Molekuler	59
Tabel 4.5 Hasil Uji Tarik dari Penelitian Sebelumnya	60



DAFTAR GAMBAR

Gambar : 2.1 Titanium	5
Gambar : 2.2 Aluminium	6
Gambar : 2.3 Tetragonal Ti-Al.....	6
Gambar : 2.4 Grafik tegangan regangan pada uji tekuk.....	7
Gambar : 2.5 Susunan atom kristal dan susunan atom morf.....	9
Gambar : 2.6 Susunan struktur kristal BCC.....	10
Gambar : 2.7 Susunan struktur kristal FCC	10
Gambar : 2.8 Susunan struktur kristal HCP	11
Gambar : 2.9 Grafik tegangan-regangan	13
Gambar : 3.1 Diagram alur penelitian.....	21
Gambar : 3.2 Struktur atom TiAl Nanorods	22
Gambar : 4.1 Grafik ekuilibrasi total sistem pada energi.....	26
Gambar : 4.2 Grafik ekuilibrasi total sistem pada temperatur	27
Gambar : 4.3 Grafik tegangan-regangan temperatur 100 K.....	28
Gambar : 4.4 Konfigurasi struktur atom temperatur 100 K	29
Gambar : 4.5 Grafik tegangan-regangan temperatur 200 K.....	32
Gambar : 4.6 Konfigurasi struktur atom temperatur 200 K	33
Gambar : 4.7 Grafik tegangan-regangan temperatur 300 K.....	36
Gambar : 4.8 Konfigurasi struktur atom temperatur 300 K.....	37
Gambar : 4.9 Grafik tegangan-regangan temperatur 400 K.....	40
Gambar : 4.10 Konfigurasi struktur atom temperatur 400 K	41
Gambar : 4.11 Grafik tegangan-regangan temperatur 500 K.....	44
Gambar : 4.12 Konfigurasi struktur atom temperatur 500 K	45

Gambar : 4.13 Grafik tegangan-regangan temperatur 600 K.....	48
Gambar : 4.14 Konfigurasi struktur atom temperatur 600 K	49
Gambar : 4.15 Contoh fitting daerah linier	52
Gambar : 4.16 Regresi linier temperatur dan modulus elastisitas.....	53
Gambar : 4.17 Regresi linier temperatur dan kekuatan tarik maksimum	55
Gambar : 4.18 Regresi linier temperatur dan titik luluh	57



DAFTAR LAMPIRAN

1.1 Proses Menjalankan Simulasi Dengan MobaXterm	66
1.2 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 100 K	67
1.3 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 100 K	67
1.4 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 200 K	68
1.5 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 200 K	68
1.6 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 300 K	69
1.7 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 300 K	69
1.8 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 400 K	70
1.9 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 400 K	70
1.10 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 500 K	71
1.11 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 500 K	71
1.12 Log LAMMPS Optimasi TiAl Nanorods Temperatur 600 K	72
1.13 Log LAMMPS Uji Tarik TiAl Nanorods Temperatur 600 K	72
1.14 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 100 K	73
1.15 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 200 K	73
1.17 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 300 K	74
1.18 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 400 K	74
1.19 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 500 K	75
1.20 Fitting Daerah Linier TiAl Nanorods Temperatur 600 K	75