

**ANALISIS DIFUSI ATOM PADA PENYAMBUNGAN LOGAM
Fe DENGAN VARIASI ORIENTASI PERMUKAAN
MENGUNAKAN 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



MUHAMMAD SHOLEH SUBEKHI

18511267

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

**ANALISIS DIFUSI ATOM PADA PENYAMBUNGAN LOGAM
Fe DENGAN VARIASI ORIENTASI PERMUKAAN
MENGUNAKAN 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



MUHAMMAD SHOLEH SUBEKHI

18511267

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

HALAMAN PENGESAHAN

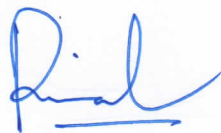
Nama : Muhammad Sholeh Subekhi
NIM : 18511267
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan variasi orientasi permukaan menggunakan simulasi dinamika molekuler

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, 20 Juli 2022

Menyetujui

Dosen Pembimbing I



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

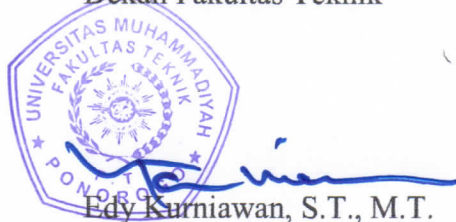
Dosen Pembimbing II



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



Yoyok Winardi, S.T., M.T.
NIK. 19860803 201909 13

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Muhammad Sholeh Subekhi

NIM : 18511267

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Analisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan variasi orientasi permukaan menggunakan simulasi dinamika molekuler” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah yang saya rancang/teliti 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 sebenar-benarnya.

Ponorogo, 20 Juli 2022

Mahasiswa,



Muhammad Sholeh Subekhi

NIM. 18511267

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Muhammad Sholeh Subekhi
NIM : 18511267
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan variasi orientasi permukaan menggunakan simulasi dinamika molekuler

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

Hari : Rabu
Tanggal : 27 Juli 2022
Nilai :

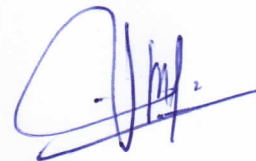
Dosen Penguji

Dosen Penguji I



Ir. Fadelan, M.T.
NIK. 19610509 199009 12

Dosen Penguji II



Kuntang Winangun, S.Pd., M.Pd.
NIK. 19900421 201709 13

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik



Edy Kurniawan, S.T., M.T.
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin


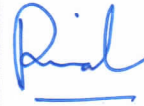
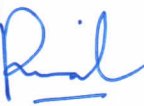





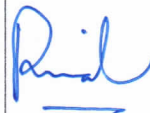

Yoyok Winardi, S.T., M.T.
NIK. 19860803 201909 13

**BERITA ACARA
BIMBINGAN SKRIPSI**

Nama : Muhammad Sholeh Subekhi
NIM : 18511267
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan variasi orientasi permukaan menggunakan simulasi dinamika molekuler
Dosen pembimbing I : Rizal Arifin, S.Si, M.Si, Ph.D

PROSES BIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing /Hasil	Tanda Tangan
1	04-03-2022	Konsultasi Judul	ACC Judul	
2	05-04-2022	Konsultasi Bab I	Parafrase penulisan kutipan dari Jurnal	
3	27-04-2022	Konsultasi Bab II	1. Menambahkan Penelitian Terdahulu 2. Menambahkan Rumus MSD dan Koefisien Difusi	
4	16-05-2022	Konsultasi Bab III	1. Memperbaiki Flow Chart 2. Memberikan Penjelasan Pada tahapan Skripsi	
5	02-06-2022	Seminar Proposal		
6	09-06-2022	Konsultasi Bab IV	1. Menyusun Struktur Kristal 2. Menghitung Koefisien difusi dan energy aktivasi	

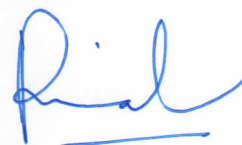
7	15-07-2022	Konsultasi Bab V	Plagiasi Bab 1-5	
8	20-07-2022	ACC Ujian Skripsi		

Tanggal Pengajuan : 04-03-2022

Tanggal Pengesahan : 20-07-2022

Ponorogo, 20 Juli 2022

Dosen Pembimbing I



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

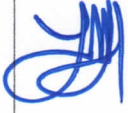

**BERITA ACARA
BIMBINGAN SKRIPSI**

Nama : Muhammad Sholeh Subekhi
NIM : 18511267
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam Fe dengan variasi orientasi permukaan menggunakan simulasi dinamika molekuler

Dosen pembimbing II : Yoyok Winardi, S.T., M.T.

PROSES BIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing /Hasil	Tanda Tangan
1	04-03-2022	Konsultasi Judul	ACC Judul	
2	05-04-2022	Konsultasi Bab I	Parafrase penulisan kutipan dari Jurnal	
3	27-04-2022	Konsultasi Bab II	1. Menambahkan Penelitian Terdahulu 2. Menambahkan Rumus MSD dan Koefisien Difusi	
4	16-05-2022	Konsultasi Bab III	1. Memperbaiki Flow Chart 2. Memberikan Penjelasan Pada tahapan Skripsi	
5	02-06-2022	Seminar Proposal		
6	09-06-2022	Konsultasi Bab IV	1. Menyusun Struktur Kristal 2. Menghitung Koefisien difusi dan energy aktivasi	

7	15-07-2022	Konsultasi Bab V	Plagiasi Bab 1-5	
8	20-07-2022	ACC Ujian Skripsi		

Tanggal Pengajuan : 04-03-2022

Tanggal Pengesahan : 20-07-2022

Ponorogo, 20 Juli 2022

Dosen Pembimbing II



Yoyok Winardi, S.T., M.T.

NIK. 19860803 201909 13

MOTTO

“Sedikit lebih berbeda lebih baik daripada sedikit lebih baik.”–Pandji Pragiwaksono

“Tidak mustahil bagi orang biasa untuk memutuskan menjadi luar biasa.” – Elon Musk



**ANALISIS DIFUSI ATOM PADA PENYAMBUNGAN LOGAM Fe
DENGAN VARIASI ORIENTASI PERMUKAAN MENGGUNAKAN
SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER**

Muhammad Sholeh Subekhi

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : sholehsubekhi@gmail.com

Abstrak

Simulasi dinamika molekul adalah teknik simulasi yang menggunakan komputer yang memungkinkan untuk merepresentasikan interaksi antara molekul dan atom selama periode waktu tertentu. Metode ini didasarkan pada persamaan hukum Newton dan hukum mekanika klasik. Pada penelitian ini atom Fe yang digunakan yaitu Fe δ yang memiliki struktur kristal BCC. Struktur atom Fe disusun bertingkat dengan jarak antar permukaan 2,5 Å, dengan variasi permukaan Fe (001) – Fe (001) dan Fe (001) – Fe (111). Hasil Uji simulasi pada struktur kristal Fe δ dengan permukaan Fe (001) – Fe (001), pada tempertaur 1670K dan temperatur 1973K dilihat dari kemiringan grafik MSD bahwa hasil pengujian tersebut tidak memiliki nilai koefisien difusi, pada struktur kristal Fe δ dengan permukaan Fe (001) – Fe (111), pada tempertaur 1670K, 1973K dan 2173K. Pada hasil simulasi diketahui temperatur dibawah titik lebur logam Fe tidak terjadi proses difusi. Semakin tinggi temperature yang digunakan semakin besar nilai koefisien difusi yang diperoleh.

Kata Kunci : Simulasi dinamika molekul, Struktur kristal, MSD, Koefisien difusi.

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT atas limpahan rahmat dan hidayahnya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini yang berjudul "Analisis Difusi Atom Pada Penyambungan Logam Fe Dengan Variasi Orientasi Permukaan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler". Penulisan skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik jenjang strata satu (S1) pada program studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

Penulis menyadari bahwa penyusunan proposal skripsi ini tidak dapat diselesaikan tanpa bantuan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini kami 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. Yoyok Winardi, S.T., M.T selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. 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 selesai.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Orang Tua tercinta, kakak dan adik, yang selama ini selalu memberikan nasihat,doa,bimbingan,serta dukungan lahir dan batin.
7. Sigit Setiawan sebagai rekan mahasiswa yang selalu mendampingi, memahami atau bertukar pendapat terkait dengan ilmu simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi untuk menyelesaikan skripsi ini.
8. Para teman dan rekan-rekan mahasiswa S1 Teknik Mesin Prosus yang telah memberikan dukungan semangat dan berbagi informasi.
9. Semua pihak yang secara langsung maupun tidak langsung telah membantu dalam penyelesaian skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini bukan tanpa kekurangan. Kritik dan saran sangat penulis harapkan untuk perbaikan dan penyempurnaan lebih lanjut sehingga pada akhirnya skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi dunia pendidikan dan aplikasi di bidang ini serta dapat berkembang lebih lanjut.

Ponorogo, 20 Juli 2022

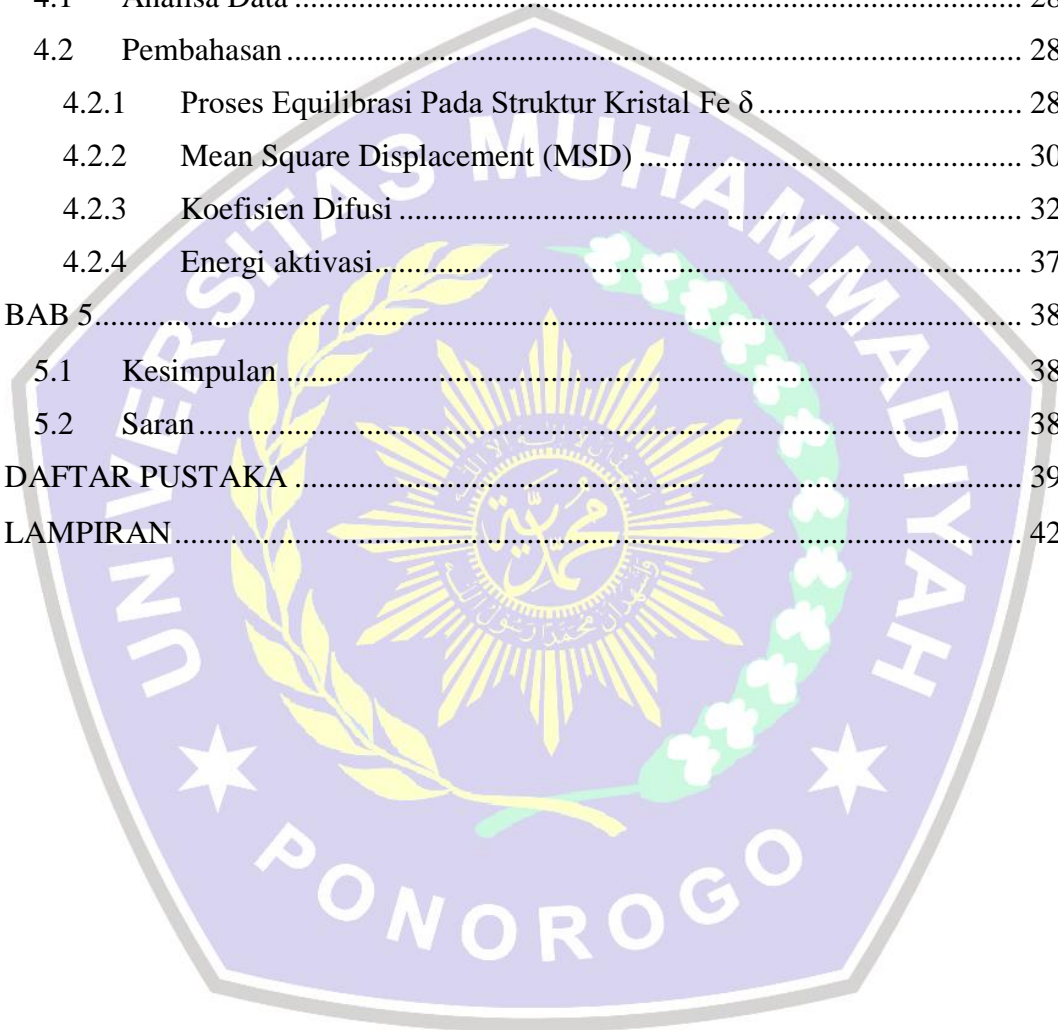


Muhammad Sholeh Subekhi
NIM. 18511267

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPEL DEPAN.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO.....	ix
ABSTRAK	x
KATA PENGANTAR	xi
DAFTAR ISI.....	xiii
DAFTAR TABEL.....	xv
DAFTAR GAMBAR	xvi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xvii
BAB 1.....	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.....	4
2.1 Penelitian Terdahulu.....	4
2.2 Struktur Logam Fe.....	5
2.3 Struktur Kristal	6
2.4 Penyambungan Logam Difusi	11
2.5 Koefisien Difusi (<i>Diffusion coefficient</i>)	14
2.6 Perkembangan Riset Penyambungan Logam Difusi	16
2.7 Simulasi Dinamika Molekuler.....	19
2.8 Energi Potensial Antar Atom.....	20
2.9 Kondisi Batas Periodik	21
BAB 3.....	22

3.1	Alat Dan Kelengkapan Penelitian	22
3.1.1	Perangkat Keras	22
3.1.2	Perangkat Lunak.....	22
3.2	Diagram Alur Penelitian.....	24
3.3	Tahapan Proses Simulasi.....	25
BAB 4	28
4.1	Analisa Data	28
4.2	Pembahasan	28
4.2.1	Proses Equilibrase Pada Struktur Kristal Fe δ	28
4.2.2	Mean Square Displacement (MSD)	30
4.2.3	Koefisien Difusi	32
4.2.4	Energi aktivasi.....	37
BAB 5	38
5.1	Kesimpulan.....	38
5.2	Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN	42



DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Koefisien Difusi dihitung dari MSD dengan $t = 1000 - 1500$ ps35



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Struktur Kristal SC	7
Gambar 2. 2 Struktur Kristal BCC	8
Gambar 2. 3 Struktur kristal FCC	9
Gambar 2. 4 Struktur kristal HCP	11
Gambar 2. 5 Mekanisme interdiffusion	12
Gambar 2. 6 Tahapan Mekanisme difusi	13
Gambar 2. 7 Mekanisme difusi Vacancy	14
Gambar 2. 8 Mekanisme difusi Intersitial	14
Gambar 2. 9 Eksperimental untuk proses ikatan TLP.....	18
Gambar 2. 10 Kondisi Batas Periodik	21
Gambar 3. 1 Diagram Alur Penelitian.....	24
Gambar 3. 2 Struktur Kristal Fe - Fe.....	25
Gambar 3. 3 Optimasi struktur atom.....	26
Gambar 4. 1 Grafik Proses Equilibراسي	29
Gambar 4. 2 Grafik MSD permukaan Fe (001) – Fe (001).....	30
Gambar 4. 3 Grafik MSD permukaan Fe (001) – Fe (111).....	32
Gambar 4. 4 Nilai Koefisien Difusi dari MSD	35
Gambar 4. 5 Visualisai hasil simulasi pada waktu 0 ps , 750 ps dan 1500 ps	36
Gambar 4. 6 Plot ln D dengan 1/T	37

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Data Log Temperatur 1670K Fe (001) - Fe (001)	42
Lampiran 2 Data Log Temperatur 1973K Fe (001) - Fe (001)	42
Lampiran 3 Data Log Temperatur 2173K Fe (001) - Fe (001)	43
Lampiran 4 Data Log Temperatur 2373K Fe (001) - Fe (001)	43
Lampiran 5 Data Log Temperatur 2573K Fe (001) - Fe (001)	44
Lampiran 6 Data Log Temperatur 1670K Fe (001) - Fe (111)	44
Lampiran 7 Data Log Temperatur 1973K Fe (001) - Fe (111)	45
Lampiran 8 Data Log Temperatur 2173K Fe (001) - Fe (111)	45
Lampiran 9 Data Log Temperatur 2373K Fe (001) - Fe (111)	46
Lampiran 10 Data Log Temperatur 2573K Fe (001) - Fe (111)	46
Lampiran 11 Data Log Temperatur 2573K Fe (001) - Fe (111)	47

