

**ANALISIS DIFUSI ATOM PADA PENYAMBUNGAN LOGAM
BEDA JENIS Fe-Ni 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

Telah sisahkan oleh
Ketua Program Studi Teknik Mesin



[Handwritten signature] 9/8 22

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

SIGIT SETIAWAN

18511248

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK**

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO

(2022)

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Sigit Setiawan
NIM : 18511248
Program studi : Teknik mesin
Fakultas : Teknik
Judul skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam beda jenis Fe-Ni 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, 23 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 Prodi Teknik Mesin



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

NIK.198608032019093

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini :

Nama : Sigit Setiawan

NIM : 18511248

Program studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul :” analisis difusi atom pada penyambungan logam beda jenis Fe-Ni menggunakan simulasi dinamika molekuler” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah , gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang /teliti di dalam Naskah skripsi ini adalah hasil 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 dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Ponorogo, 23 Juli 2022

Mahasiswa



Sigit Setiawan

NIM.18511248

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Sigit Setiawan
NIM : 18511248
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam beda jenis Fe-Ni 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

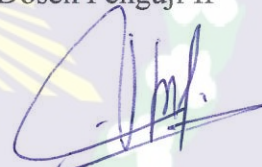
Dosen Penguji I



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 Nurniawan, S.T., M.T.

NIK.19771026 200810 12

Ketua Prodi Teknik Mesin



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

NIK. 19860803 201909 13





BERITA ACARA
BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Sigit Setiawan
NIM : 18511248
Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam
beda jenis Fe-Ni 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	● Menambahkan Penelitian Terdahulu ● Menambahkan Rumus MSD dan Koefisien Difusi	
4	16-05-2022	Konsultasi Bab III	● Memperbaiki Flow Chart ● Memberikan Penjelasan Pada tahapan Skripsi	

5	02-06-2022	Seminar Proposal	<ul style="list-style-type: none"> ● ACC Seminar Proposal 	
6	23-06-2022	Konsultasi Bab IV	<ul style="list-style-type: none"> ● Optimasi struktur kristal ● Menjalankan simulasi ● Pengamatan dan analisis 	
7	07-07-2022	Konsultasi Bab V	<ul style="list-style-type: none"> ● Kesimpulan ● Saran 	
8	21-07-2022	ACC Ujian Skripsi	<ul style="list-style-type: none"> ● ACC sidang 	

Tanggal Pengajuan : 04-03-2022

Tanggal Pengesahan :

Ponorogo, 23 Juli 2022

Dosen Pembimbing I



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

NIK. 19870920 201204 12




**BERITA ACARA
BIMBINGAN SKRIPSI**

Nama : Sigit Setiawan
 NIM : 18511248
 Judul Skripsi : Analisis difusi atom pada penyambungan logam
 beda jenis Fe-Ni 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	● Menambahkan Penelitian Terdahulu ● Menambahkan Rumus MSD dan Koefisien Difusi	
4	16-05-2022	Konsultasi Bab III	● Memperbaiki Flow Chart ● Memberikan Penjelasan Pada tahapan Skripsi	

5	02-06-2022	Seminar Proposal	<ul style="list-style-type: none"> ● ACC Seminar Proposal 	
6	23-06-2022	Konsultasi Bab IV	<ul style="list-style-type: none"> ● Optimasi struktur kristal ● Menjalankan simulasi ● Pengamatan dan analisis 	
7	07-07-2022	Konsultasi Bab V	<ul style="list-style-type: none"> ● Kesimpulan ● Saran 	
8	21-07-2022	ACC Ujian Skripsi	<ul style="list-style-type: none"> ● ACC sidang 	

Tanggal Pengajuan : 04-03-2022

Tanggal Pengesahan :

Ponorogo, 23 Juli 2022

Dosen Pembimbing I



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

NIK. 19860803 201909 13

MOTTO

“Jangan biarkan ketetapan hatimu melemah . Ketahuilah bahwa pertolongan Allah datang sesuai dengan keinginanmu . Jangan ada yang ditakutkan oleh orang - orang islam selama ada pertolongan Allah .”-----Khalid Bin Walid



KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Allah SWT berkat Rahmat, Hidayah, dan Karunia-Nya kepada kita semua sehingga kami dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “**Analisi difusi atom pada penyambungan logam beda jenis Fe-Ni menggunakan simulasi dinamika molekuler**”. Penulisan skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk mengerjakan skripsi pada program Strata-1 di Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Penulis menyadari dalam penyusunan skripsi ini tidak akan selesai tanpa bantuan dari berbagai pihak. Karena itu pada kesempatan ini kami ingin mengucapkan terima kasih kepada :

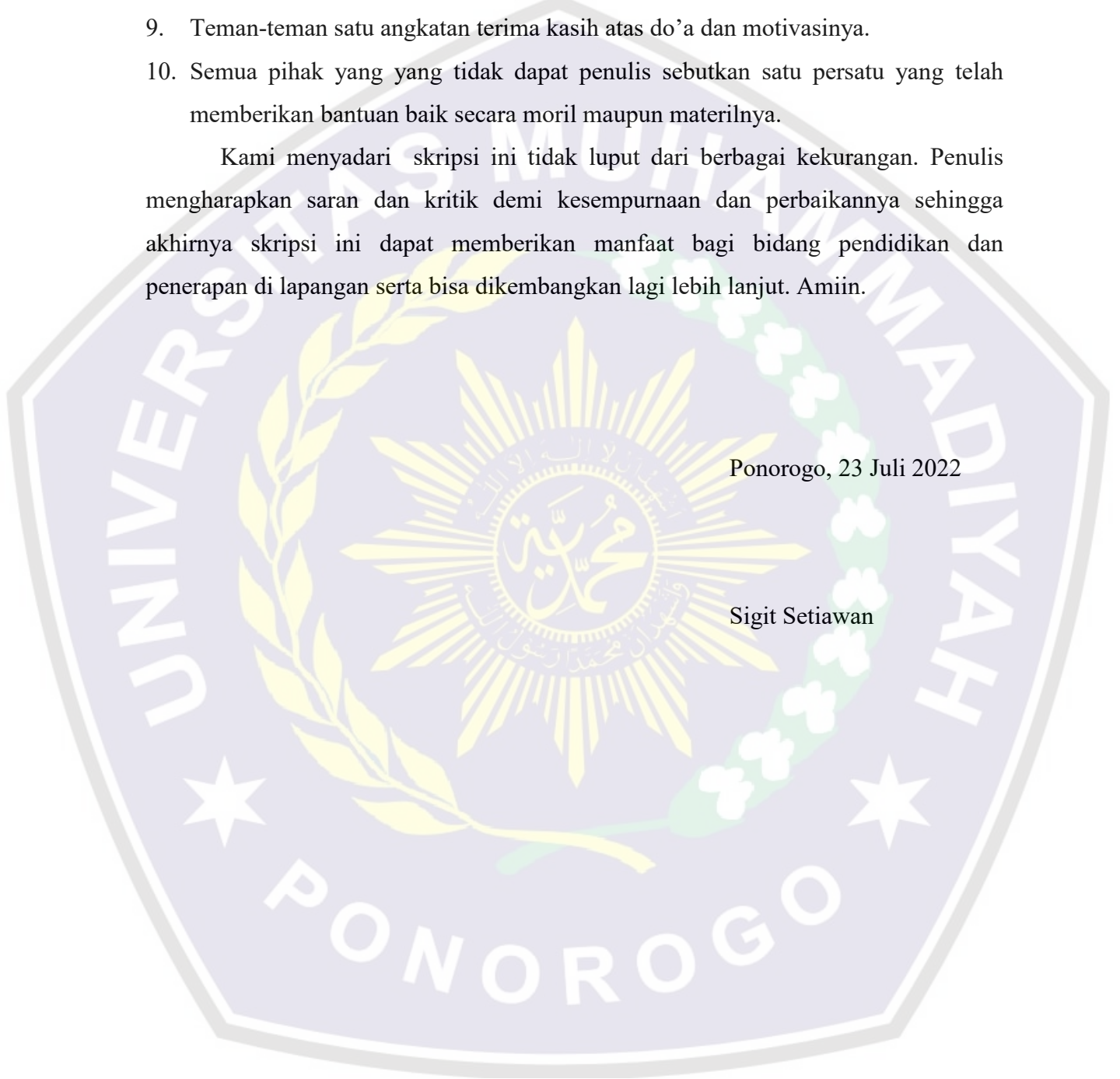
1. Dr. Happy Susanto, M.A selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Edy Kurniawan S.T., M.T, selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Yoyok Winardi, S.T., M.T selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin, 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 proposal skripsi ini hingga akhir penyusunan.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Keluarga khususnya kepada Istri saya Faradilarizki Oktaviani dan anak saya Kamila Rizki Nurayda , budhe dan pakde , mertua serta kakak - kakak saya yang selalu mendoakan dan memberikan bantuan dukungan materil dan moril.
7. Muhammad Sholeh Subheki selaku rekan mahasiswa yang selalu menemani, memahami ataupun bertukar pendapat mengenai ilmu tentang simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi semangat menyelesaikan proposal skripsi ini.

8. Teman - teman terbaik saya , Ary Mukti Sandya , Agung Eko Nurcahyo , Fajar Abdurokhman , Ardi Waryadi yang selalu mendukung serta mendoakan saya.
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.

Kami menyadari skripsi ini tidak luput dari berbagai kekurangan. Penulis mengharapkan saran dan kritik demi kesempurnaan dan perbaikannya sehingga akhirnya skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi bidang pendidikan dan penerapan di lapangan serta bisa dikembangkan lagi lebih lanjut. Amiin.

Ponorogo, 23 Juli 2022

Sigit Setiawan



ANALISIS DIFUSI ATOM PADA PENYAMBUNGAN LOGAM BEDA JENIS Fe - Ni MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Sigit Setiawan

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik , Universitas Muhammadiyah Ponorogo

Email : hitokiridensetsu32@gmail.com

ABSTRACT

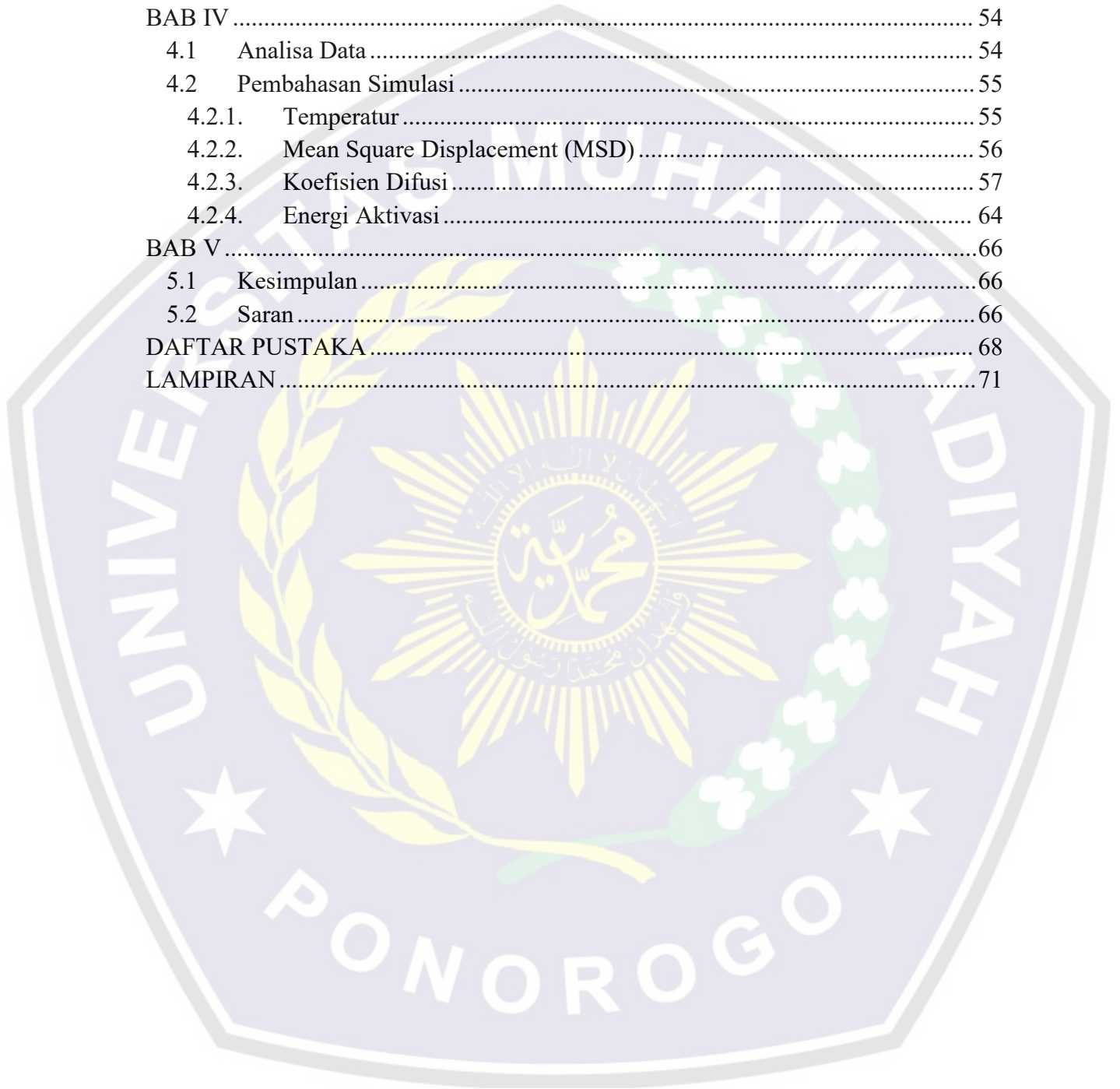
Simulasi dinamika molekuler merupakan salah satu metode yang digunakan menganalisa maupun mengamati bagaimana proses difusi atom pada penyambungan logam beda jenis Fe-Ni dalam skala atomik. Yang kemudian divisualisasikan kedalam bentuk grafik maupun 3D agar mempermudah proses analisisnya . Persamaan hukum newton serta hukum fisika klasik menjadi dasar dari simulasi ini. Dalam penelitian ini kita menggunakan simulasi dinamika molekuler dimana sebelum melakukan simulasi terlebih dahulu menentukan struktur kristal awal dari sistem tersebut dengan menggunakan avogadro. Pada simulasi ini sistem tersusun dari material Fe dan material Ni yang disusun bertingkat dengan jarak antar muka 2,5 Å . Simulasi terbagi menjadi 3 fase yaitu *delta* , *gamma* dan *liquid* . Pada fase *gamma* tidak terjadi proses difusi , dikarenakan difusi tidak terjadi pada temperatur yang rendah. Nilai koefisien terendah terjadi pada fase *delta* di temperatur 1670 K sebesar $4,65 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ pada logam Fe dan $6,23 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ untuk logam Ni dan nilai koefisien tertinggi terjadi pada fase *liquid* di temperatur 1931 K sebesar $19,95 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ untuk logam Fe dan $21,97 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$ pada logam Ni , dengan demikian semakin tinggi temperatur yang digunakan maka semakin tinggi pula nilai koefisien tingginya serta semakin cepat proses difusinya.

Kata kunci : Simulasi MD , struktur kristal , difusi atom , mean square displacement, energi aktivasi

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL DEPAN	1
HALAMAN PENGESAHAN	2
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	2
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	4
BERITA ACARA	5
MOTTO	9
KATA PENGANTAR	10
ABSTRACT	12
DAFTAR ISI	13
DAFTAR TABEL	15
DAFTAR GAMBAR	16
DAFTAR LAMPIRAN	18
BAB I	19
1.1 Latar belakang	19
1.2 Rumusan masalah	21
1.3 Tujuan penelitian	21
1.4 Batasan masalah	22
1.5 Manfaat penelitian dan perancangan	22
BAB II	23
2.1 Penelitian terdahulu	23
2.2 Struktur logam Fe-Ni	24
2.3 Struktur kristal	27
2.4 Klasifikasi proses penyambungan	32
2.5 Penyambungan logam difusi	35
2.6 Koefisien difusi (<i>diffusion coefficient</i>)	39
2.7 Perkembangan Riset penyambungan logam	41
2.8 Simulasi Dinamika Molekuler	44
2.9 Energi Potensial Antar Atom	45
2.10 Kondisi Batas Periodik	47
BAB III	48
3.1 Alat dan Kelengkapan Penelitian	48
3.1.1 Perangkat Keras	48
3.1.2 Perangkat lunak	48

3.2	Alur Diagram Penelitian.....	50
3.3	Tahapan proses simulasi.....	50
BAB IV	54
4.1	Analisa Data.....	54
4.2	Pembahasan Simulasi.....	55
4.2.1.	Temperatur.....	55
4.2.2.	Mean Square Displacement (MSD).....	56
4.2.3.	Koefisien Difusi.....	57
4.2.4.	Energi Aktivasi.....	64
BAB V	66
5.1	Kesimpulan.....	66
5.2	Saran.....	66
DAFTAR PUSTAKA	68
LAMPIRAN	71



DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 tabel koefisien difusi pada fase delta dan liquid yang dihitung dari MSD pada rentan waktu $(t) = 1000 \text{ ps} - 1500 \text{ ps}$ 63



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Diagram fasa Fe-Ni	26
Gambar 2. 2 Simple Cubic	28
Gambar 2. 3 Body - Centered Cubic (BCC)	29
Gambar 2. 4 Face - Centered Cubic (FCC)	30
Gambar 2. 5 Hexagonal close packed (HCP)	31
Gambar 2. 6 Mekanisme penyambungan difusi	36
Gambar 2. 7 Mekanisme pada Interdiffusion	37
Gambar 2. 8 Mekanisme difusi vacancy	38
Gambar 2. 9 Mekanisme difusi Interstitial	38
Gambar 2. 10 Diagram skema dari pengaturan eksperimental untuk proses ikatan TLPDB	43
Gambar 2. 11 Deskripsi skema mekanisme ikatan TLPDB	44
Gambar 2. 12 Kondisi Batas Periodik	47
Gambar 3. 1 Diagram Alur Penelitian	50
Gambar 3. 2 Struktur kristal Fe (warna ungu) dan Ni (warna kuning)	51
Gambar 3. 3 Contoh optimasi atom Fe	52
Gambar 4. 1 Grafik hubungan antara temperatur dan waktu pada fase <i>gamma</i> (A) , fase <i>delta</i> (B) dan fase <i>liquid</i> (C)	55
Gambar 4. 2 Grafik hubungan antara MSD dan waktu logam Fe-Ni pada fase <i>gamma</i> (A) , <i>delta</i> (B) dan <i>liquid</i> (C)	56
Gambar 4. 3 Grafik koefisien difusi logam Fe-Ni pada fase <i>gamma</i>	57
Gambar 4. 4 Visualisasi 3D proses difusi pada fase <i>gamma</i> dalam rentan waktu (t) 0 <i>ps</i> , 750 <i>ps</i> dan 1500 <i>ps</i> , dimana warna ungu merupakan logam Fe dan warna kuning adalah logam Ni	58
Gambar 4. 5 Grafik koefisien difusi logam Fe-Ni pada fase <i>delta</i>	58

Gambar 4. 6 Visualisasi 3D proses difusi pada fase delta dalam rentan waktu (t) 0 ps , 750 ps dan 1500 ps, dimana warna ungu merupakan logam Fe dan warna kuning adalah logam Ni.....	58
Gambar 4. 7 Gambar 4.8 Grafik nilai koefisien difusi pada masing-masing logam Fe dan Ni pada temperatur 1670K (A) , 1710K (B), 1750K (C) dan 1790K (D) pada fase <i>delta</i>	60
Gambar 4. 8 grafik koefisien difusi logam Fe-Ni pada fase <i>liquid</i>	60
Gambar 4. 9 Visualisasi 3D proses difusi pada fase <i>delta</i> dalam rentan waktu (t) 0 ps , 750 ps dan 1500 ps ,dimana warna ungu merupakan logam Fe dan warna kuning adalah logam Ni.....	61
Gambar 4. 10 Grafik nilai koefisien difusi pada masing-masing logam Fe dan Ni pada temperatur 1811K (A) ,1851K (B) , 1891K (C) dan 1931K (D) pada fase <i>liquid</i>	62
Gambar 4.11 Plot $\ln D$ dengan $1/T$ dari logam Fe (A) dan Ni (B) pada fase <i>delta</i>	64
Gambar 4.12 Plot $\ln D$ dengan $1/T$ dari logam Fe (A) dan Ni (B) pada fase <i>liquid</i> ..	64

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Data Log Temperatur 1223K.....	71
Lampiran 2 Data Log Temperatur 1323K.....	71
Lampiran 3 Data Log Temperatur 1423K.....	72
Lampiran 4 Data Log Temperatur 1523K.....	72
Lampiran 5 Data Log Temperatur 1670K.....	73
Lampiran 6 Data Log Temperatur 1710K.....	73
Lampiran 7 Data Log Temperatur 1750K.....	74
Lampiran 8 Data Log Temperatur 1790K.....	74
Lampiran 9 Data Log Temperatur 1811K.....	75
Lampiran 10 Data Log Temperatur 1851K.....	75
Lampiran 11 Data Log Temperatur 1891K.....	76
Lampiran 12 Data Log Temperatur 1931K.....	76