

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER
PROSES DIFUSI ATOM PADA ANTAR MUKA Ni-Al**

SKRIPSI

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



ALZAIS SAFII
19511364

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO
(2024)**

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Alzais Safii
NIM : 19511364
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Proses Difusi Atom Pada
Antar Muka Ni-Al.

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, 15 Agustus 2024

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, ST., M.T.
NIK. 19771026 200810.12

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



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

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Alzais Safii
NIM : 19511364
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Proses Difusi Atom Pada
Antar Muka Ni-Al

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

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

Hari : Kamis
Tanggal : 15 Agustus 2024
Nilai :

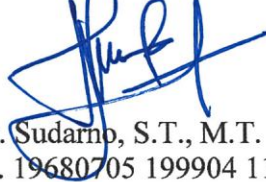
Dosen Penguji

Ketua Penguji,



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

Dosen Penguji I,



Dr. Sudarno, S.T., M.T.
NIK. 19680705 199904 11

Dosen Penguji II,



Wawan Trisnadi Putra, S.T., M.T., Ph.D.
NIK. 19800220 202109 12

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 : Alzais Safii
NIM : 19511364
Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul : “Simulasi Dinamika Molekuler Proses Difusi Atom Pada Antar Muka Ni-Al” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang/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 dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

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

Ponorogo, 15 Agustus 2024

Mahasiswa



Alzais Safii

19511364

MOTTO

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

-----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 **“Simulasi Dinamika Molekuler Proses Difusi Atom Pada Antar Muka Ni-Al”**. 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. Rido Kurnianto, M.Ag 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 Eka Trisnani Nur Aisyah dan anak saya Azora Shaqueena Humaira , orang tua, mertua serta teman - teman saya yang selalu mendoakan dan memberikan bantuan dukungan materil dan moril.
7. Teman-teman satu angkatan terima kasih atas do'a dan motivasinya.
8. 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

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, 15 Agustus 2024

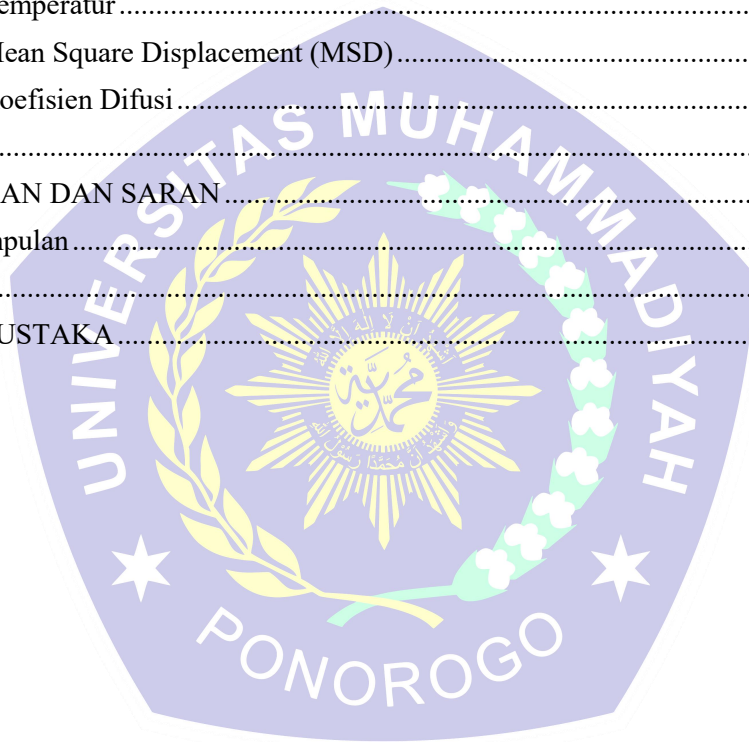
A handwritten signature in black ink, consisting of a series of loops and a long horizontal stroke extending to the right.

Alzais Safii

DAFTAR ISI

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
BERITA ACARA	v
BIMBINGAN SKRIPSI	v
MOTTO	xi
ABSTRACT	xii
KATA PENGANTAR	xiii
DAFTAR ISI	xv
DAFTAR GAMBAR	xvii
DAFTAR TABEL	xvii
BAB 1	1
PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian	3
1.4 Batasan Masalah	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
BAB 2	4
TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Penelitian Terdahulu	4
2.2 Struktur Logam Ni dan Al	7
2.3. Paduan NiAl	8
2.4. Struktur Kristal	8
a. Struktur <i>Simple cubic</i> (SC)	9
b. Struktur <i>Body- Centered Cubic</i> (BCC)	10
c. Struktur <i>Face - Centered Cubic</i> (FCC)	10
d. Struktur <i>Hexagonal Close Packed</i> (HCP)	11
2.5 Simulasi Dinamika Molekuler	12
2.6 Energi Potensial Antar Atom	13
2.7 Kondisi Batas Periodik	14
2.8 Koefisien Difusi	14
BAB 3	16

METODE PENELITIAN	16
3.1 Alat dan Kelengkapan Penelitian	16
3.1.1 Perangkat Keras	16
3.1.2 Perangkat Lunak	16
3.2 Alur Diagram Penelitian	18
3.3 Tahapan Proses Simulasi	18
BAB 4	22
ANALISA DAN PEMBAHASAN DATA	22
4.1 Analisa Data	22
4.2 Pembahasan Simulasi	23
4.2.1 Temperatur	23
4.2.2 Mean Square Displacement (MSD)	24
4.2.3 Koefisien Difusi	26
BAB 5	32
KESIMPULAN DAN SARAN	32
5.1 Kesimpulan	32
5.2 Saran	32
DAFTAR PUSTAKA	33



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Kurva Energi Perpindahan Siklus Lompatan dari (a) Kekosongan Ni dan (b) Kekosongan Al [5]	5
Gambar 2. 2 Simple Cubic (SC)	9
Gambar 2. 3 Body Centered Cubic (BCC)	10
Gambar 2. 4 Face Centered Cubic (FCC)	10
Gambar 2. 5 Face Centered Cubic (FCC)	11
Gambar 2. 6 Kondisi Batas Periodik	14
Gambar 3. 1 Diagram Alur Penelitian	18
Gambar 3. 2 Konfigurasi Ni dengan struktur kristal FCC	19
Gambar 3. 3 Konfigurasi Al dengan struktur kristal FCC	19
Gambar 3. 4 Skema konfigurasi awal antar muka Ni-Al	20
Gambar 4. 1 Grafik hubungan antara temperatur dan waktu selama simulasi.	23
Gambar 4. 2 Grafik hubungan antara MSD dan waktu logam Ni - Al	24
Gambar 4. 3 Grafik koefisien difusi logam Ni dan Al	26
Gambar 4. 4 Visualisasi 3D proses difusi pada suhu 1200K	27
Gambar 4. 5 Visualisasi 3D proses difusi pada suhu 1300K	28
Gambar 4. 6 Visualisasi 3D proses difusi pada suhu 1400K	29
Gambar 4. 7 Visualisasi 3D proses difusi pada suhu 1500K	30

DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Koefisien Difusi	24
-----------------------------------	----



SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

PROSES DIFUSI ATOM PADA ANTAR MUKA Ni-Al

Alzais Safii

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik , Universitas Muhammadiyah Ponorogo

Email : alzais48@gmail.com

ABSTRACT

Simulasi dinamika molekuler merupakan salah satu metode yang digunakan menganalisa maupun mengamati bagaimana proses difusi atom pada penyambungan logam beda jenis dalam skala atomik. Yang kemudian divisualisasikan kedalam bentuk grafik maupun 3D agar mempermudah proses analisisnya. Dalam penelitian ini kita menggunakan simulasi dinamika molekuler, dimana sebelum melakukan simulasi terlebih dahulu menentukan struktur kristal awal dari atom tersebut dengan menggunakan aplikasi Avogadro. Material Ni dan material Al digunakan dalam simulasi ini, disusun bertingkat dengan jarak antar muka 2,5 Å. Pada simulasi ini struktur Ni padat dan Al cair. Terdapat empat varian suhu yang digunakan, pada suhu 1200K, 1300K, 1400K dan 1500K. Nilai koefisien terendah terjadi pada suhu 1200K untuk Ni dan Al, sedangkan koefisien difusi tertinggi terjadi pada suhu 1500K. Menurut data yang di dapat semakin tinggi temperatur yang digunakan maka semakin tinggi pula nilai koefisiennya. Dan semakin tingginya nilai koefisiennya maka semakin cepat juga proses difusinya.

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