

**STUDI ANALISIS DIFUSI PADUAN UNSUR MgZnAl
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKULER**

SKRIPSI

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



MUHAMMAD ILYAS GHIFARI
22511637

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO
2026**

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Muhammad Ilyas Ghifari
Nim : 22511637
Program studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul skripsi : Studi Analisis Difusi Paduan Unsur MgZnAl 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, 22 Juli 2026

Menyetujui,

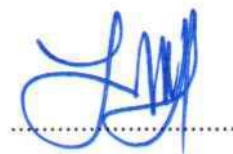
Rizal Arifin S.Si., M.Si., M.Sc., Ph.D. (Dosen Pembimbing Utama)

NIK. 19870920 201204 12



Yoyok Winardi, S.T., M.T. (Dosen Pembimbing Pendamping)

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

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan dibawah ini

Nama : Muhammad Ilyas Ghifari

Nim : 22511637

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul " Analisis Difusi Pada Paduan MgZnAl 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 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 plagiarisme, 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, 25 Juli 2026



Muhammad Ilyas Ghifari

NIM. 22511637

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Muhammad Ilyas Ghifari
NIM : 22511637
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul skripsi : Studi Analisis Difusi Paduan Unsur MgZnAl Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Telah diuji dan dipertahankan di hadapan

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

Hari : Rabu
Tanggal : 22 Juli 2026

Dosen Penguji

Rizal Arifin, S.Si., M.Si., M.Sc., Ph.D. (Ketua Penguji)
NIK. 19870920 201204 12

Dr. Kuntang Winangun, S.Pd., M.Pd. (Anggota Penguji I)
NIK. 19900421 202109 12

Prof. Dr. Ir. Sudarno, S.T., M.T. (Anggota Penguji II)
NIK.19680705 199904 11

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 : Muhammad Ilyas Ghifari

NIM : 22511637

Judul Skripsi : Studi Analisis Difusi paduan unsur Mg, Zn, Al pada
simulasi dinamika molekuler

Dosen Pembimbing Utama : Rizal Arfin, S.Si, M.Sc, Ph.D

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	7/11/25	Konsultasi Judul	Saran Judul	
2	13/11/25	Konsultasi Judul	Acc Judul	
3	19/11/25	BAB I	- Revisi latar belakang - Rumusan masalah - Batasan masalah - Manfaat penelitian	
4	4/12/25	BAB II	- Penelitian terdahulu - Formulasi penelitian	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	9/12/25	BAB II	- Rens. Gombot - Rens. Tabel	<u>Pil</u>
6	18/12/25	BAB III	Rens. diagram Atr	<u>Pil</u>
7	22/12/25	BAB III	Rens. Daftar Pustaka	<u>Pil</u>
8	6/2026 1		Acc Lempar.	<u>Pil</u>
9	13/03 2026	BAB 4	- Instal Mobaxterm - Belajar Command	<u>Pil</u>
10	31/03 2026	BAB 4	- Pembuatan Struktur awal	<u>Pil</u>

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	09/04 2026	BAB 4	- Konsultasi Hki Poster	
12	16/04 2026	BAB 4	- Melakukan optimasi	
13	30/04 2026	BAB 4	- Melakukan Simulasi Difusi	
14	05/05 2026	BAB 4	- Mengecek Hasil Simulasi Running - Olah data hasil Simulasi	
15	02/06 2026	BAB 4	- Pembuatan gambar pada Ovito	
16	11/06 2026	BAB 4	- Analisis data menggunakan magio plot guna mengetahui nilai MSD	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
17	01 / 07 2026	BAB 5	- Revisi kesimpulan dan saran	
18	13 / 7 2026		Ace Indang	
19				
20				
21				
22				

BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Muhammad Rasyid Gilfan

NIM : 22511637

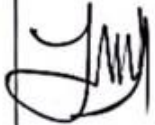
Judul Skripsi : Studi Analisis Difusi Paduan unsur Mg, Zn, Al pada
simulasi dinamika molekuler

Dosen Pembimbing Pendamping : Yoyot Winardi, S.T.M.T

PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	2/4/25	Konsultasi Judul	Acc Judul	
2	14/4/25	BAB I	- Revisi format pendisain - Revisi Latar belakang	
3	20/4/25	Revisi BAB I	- Tambahkan batasan masalah yang relevan - Tujuan penelitian	
4	5/12/25	Konsultasi BAB II	Penambahan rumus	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	10/12/25	Revisi BAB II	format kutipan	
6	19/12/25	Konsultasi BAB III	- Menambahkan diagram alir penelitian	
7	23/12/25	Revisi BAB III	- Mengubah langkah - langkah	
8	6/1/26		Acc Sempurna	
9	13/03 2026	BAB 4	- Revisi format penulisan - Perombakan Teori difusi	
10	31/03 2026	BAB 4	- Tambahkan penjelasan bagaimana materi akan dibuat	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	09/04 2026	BAB 4	- Nomer gambar - Nomer halaman - Output Simulasi	
12	16/04 2026	BAB 4	- Penjelasan mengenai MD di paragraf - Penjelasan visualisasi Software	
13	30/04 2026	BAB 4	- Sitasi - format IEEE	
14	9/05 2026	BAB 4	- Revisi Daftar Pustaka - Tata letak Tabel - Jurnal pembimbing	
15	15/06 2026	BAB 4	- Tambahkan keterangan pada gambar hasil visualisasi - Penambahan peneliti terdahulu - Meringkas kesimpulan	
16	03/07 2026	BAB 5	ACE Sidang	

MOTTO

**"BEKERJALAH DENGAN KERAS, NIKMATI PROSESNYA, DAN
CIPTAKAN SEJARAH."**

---Jeff Bezos---



Studi Analisis Difusi Paduan Unsur MgZnAl Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Muhammad Ilyas Ghifari, Rizal Arifin, Yoyok Winardi.

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah

Ponorogo

e-mail : ilyasghifari129@gmail.com

Abstrak

Paduan magnesium seng aluminium MgZnAl merupakan material ringan yang banyak dikembangkan pada industri otomotif dan manufaktur karena memiliki massa jenis rendah serta sifat mekanik yang baik. Namun, informasi mengenai mekanisme difusi atom pada komposisi $Mg_{25}Zn_{25}Al_{50}$ masih terbatas, padahal karakteristik difusi berperan penting terhadap stabilitas dan performa material pada temperatur tinggi. Penelitian ini bertujuan menganalisis mekanisme difusi, mobilitas atom, dan koefisien difusi pada paduan $Mg_{25}Zn_{25}Al_{50}$ menggunakan metode dinamika molekuler (Molecular Dynamics/MD). Model paduan dibuat menggunakan Avogadro dan disimulasikan menggunakan LAMMPS dengan potensial Modified Embedded Atom Method (MEAM) pada ensemble NVT dengan variasi temperatur 1000 K, 1100 K, 1200 K, dan 1300 K. Hasil simulasi dianalisis menggunakan OVITO untuk memperoleh nilai Mean Square Displacement (MSD), visualisasi difusi atom, dan koefisien difusi berdasarkan persamaan Einstein. Hasil penelitian menunjukkan bahwa model kristal memiliki kesalahan parameter kisi kurang dari 1% terhadap data referensi. Peningkatan temperatur menyebabkan nilai MSD dan koefisien difusi seluruh unsur meningkat, yang menunjukkan mobilitas atom semakin tinggi. Koefisien difusi atom Mg meningkat dari $0,300 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ menjadi $2,811 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, atom Zn dari $0,147 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ menjadi $1,243 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$, dan atom Al dari $1,545 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ menjadi $2,883 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ pada rentang temperatur 1000-1300 K. Penelitian ini diharapkan dapat menjadi referensi dalam pengembangan paduan MgZnAl berbasis simulasi untuk mendukung aplikasi material ringan pada industri otomotif dan manufaktur.

Kata Kunci : Dinamika Molekuler, MgZnAl, *Mean Square Displacement*, Koefisien Difusi.

KATA PENGANTAR

Puji syukur kehadiran Allah Swt. atas segala rahmat, taufik, hidayah, serta karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul "Analisis Difusi Pada Paduan MgZnAl Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler". Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik (S.T.) pada Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

Penyusunan skripsi ini bertujuan untuk mengkaji karakteristik difusi atom pada paduan MgZnAl melalui pendekatan simulasi dinamika molekuler. Penulis berharap hasil penelitian ini dapat memberikan kontribusi terhadap pengembangan ilmu pengetahuan, khususnya di bidang ilmu material dan simulasi komputasi, serta dapat menjadi referensi bagi penelitian selanjutnya.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih memiliki keterbatasan dan belum sepenuhnya sempurna. Oleh karena itu, kritik dan saran yang bersifat membangun sangat diharapkan demi penyempurnaan karya ilmiah ini di masa mendatang.

Akhir kata, penulis berharap semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi pembaca, dunia akademik, serta perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi.

Ponorogo, 25 Juli 2026



Muhammad Ilyas Ghifari

NIM.22511637

UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur ke hadirat Allah SWT atas segala rahmat, karunia, dan hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik. Penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari doa, bantuan, bimbingan, motivasi, serta dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan rasa hormat dan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah memberikan kontribusi, baik secara langsung maupun tidak langsung, selama proses penyusunan skripsi hingga penyelesaiannya. Semoga Allah SWT membalas segala kebaikan dengan pahala yang berlipat ganda. Oleh karena itu, penulis menyampaikan ucapan terima kasih kepada :

1. Keluarga tercinta orang tua yang telah memberikan dukungan dan doa.
2. Bapak Dr. Rido Kurnianto, M.Ag, selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Bapak Edy Kurniawan, S.T., M.T, selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T, selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
5. Bapak Rizal Arifin, S.Si., M.Si., M.Sc., Ph.D , selaku dosen pembimbing I yang telah memberikan arahan serta masukan kepada penulis dalam penyusunan skripsi.
6. Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T, selaku dosen pembimbing II yang telah memberikan arahan serta masukan kepada penulis dalam penyusunan skripsi.
7. Kepada teman-teman seangkatan yang telah memberikan dukungan dan semangat dalam penyusunan skripsi.
8. Kepada seluruh pihak yang telah membantu dalam keberhasilan penyusunan skripsi ini yang tidak bisa disebutkan satu persatu.

DAFTAR ISI

HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI.....	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN	iv
KATA PENGANTAR.....	xiv
UCAPAN TERIMA KASIH	xv
DAFTAR ISI	xv
DAFTAR GAMBAR.....	xviii
DAFTAR TABEL.....	xix
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	5
2.1 Penelitian Terdahulu.....	5
2.2 Magnesium.....	6
2.3 Seng.....	7
2.4 Alumunium.....	9
2.5 Paduan MgZnAl	11
2.6 Strukur Kristal.....	11
2.6.1 <i>Face- Cenntered Cubic</i> (FCC)	12
2.6.2 <i>Hexagonal Close-Packed</i> (HCP).....	12

2.6.3 <i>Body-Centered Cubic</i> (BCC)	13
2.7 Simulasi Dinamika Molekuler	14
2.8 Energi Potensial Antar Atom.....	15
2.9 Batas Periodik	16
2.10 Ansambel Simulasi Dinamika Molekuler	16
2.11 <i>Mean Square Displacement</i> (MSD)	17
2.12 Koefisien Difusi	18
2.13 Difusi.....	19
BAB III METODE PENELITIAN.....	21
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian.....	21
3.2 Alat Dan Kelengkapan Penelitian	21
3.1.1 perangkat keras.....	21
3.1.2 Perangkat Lunak.....	22
3.3 Diagram Alir Penelitian.....	23
3.4 Membuat Struktur Awal MgZnAl	24
3.5 Analisis Data	28
BAB IV	30
ANALISIS DATA DAN PEMBAHASAN	30
4.1 Analisa Data	30
4.2 Validasi Model Kristal.....	30
4.3 Optimasi Struktur Kristal	31
4.3.1 Difusi Atom Dari Berbagai Temperatur	32
4.3.2 <i>Mean Square Displacement</i> (MSD)	34
4.4 Pengaruh Temperatur Terhadap Koefisien Difusi & Mobilitas Atom.....	41
4.5 Perbandingan Hasil Penelitian Terdahulu	43

BAB V.....	47
KESIMPULAN DAN SARAN.....	47
5.1 Kesimpulan	47
5.2 Saran.....	47
DAFTAR PUSTAKA	49



DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Magnesium [15]	6
Gambar 2.2 Logam Seng[19].....	8
Gambar 2.3 Alumunium [21], [22]	10
Gambar 2.4 Struktur Kristal FCC [26].....	12
Gambar 2.5 Struktur Kristal HCP[26]	13
Gambar 2.6 Struktur Kristal BCC [26]	13
Gambar 2.7 Kondisi Batas Periodik [30]	16
Gambar 2.8 Representasi Skematis (a) Difusi Kekosongan	19
Gambar 2.9 Representasi Skematis (b) Difusi Interstitial.....	20
Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian.....	23
Gambar 3.2 Diagram Alir Proses Simulasi	25
Gambar 3.3 Visualisasi Paduan MgZnAl	27
Gambar 4.1 Grafik Hubungan Antara Temperatur Dan Wanktu Simulasi.....	32
Gambar 4.2 Grafik Hubungan Antara MSD Dan Waktu Logam MgZnAl	32
Gambar 4.3 Visualisasi 3D proses difusi pada temperature 1000K.....	38
Gambar 4.4 Visualisasi 3D proses difusi pada temperature 1100K.....	39
Gambar 4.5 Visualisasi 3D proses difusi pada temperature 1200K.....	40
Gambar 4.6 Visualisasi 3D proses difusi pada temperature 1300K.....	41

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Karakteristik Magnesium [18]	7
Tabel 2.2 Karakteristik Seng [20]	9
Tabel 2.3 Karakteristik Alumunium [23].	10
Tabel 3.1 Spesifikasi Perangkat Keras	21
Tabel 3.2 Teknik Analisis Koefisien Difusi D (m ² /s)	28
Tabel 4.1 Validasi Model Kristal.....	32
Tabel 4.2 Optimasi Struktur Kristal.....	33
Tabel 4.3 Koevisien Difusi.....	37

