

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER VARIASI LAJU
PENDINGINAN PADA PROSES SOLIDIFIKASI PADUAN NiTi**

SKRIPSI

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



Alif Mahendra Bagus Nurcahyo

15510993

PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO

2019

HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Alif Mahendra Bagus Nurcahyo
NIM : 15510993
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER VARIASI
LAJU PENDINGINAN PADA PROSES SOLIDIFIKASI PADUAN NiTi

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, 5 Agustus 2019

Menyetujui
Dosen Pembimbing,



(Rizal Arifin M.Si. Ph.D)

NIK. 1987092020120413

Dekan Fakultas Teknik,

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



(Dr. Ir. Aliyadi, MM, M.Kom)

NIK. 1964010319900912



(Wawan Trisnadi Putra, ST., MT)

NIK. 1980022020130913

PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Alif Mahendra Bagus Nurcahyo

NIM : 15510993

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Simulasi Dinamika Molekuler Variasi Laju Pendinginan Pada Proses Solidifikasi Paduan NiTi” 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 sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenarnya

Ponorogo, 5 Agustus 2019

Mahasiswa,



Alif Mahendra Bagus Nurcahyo

NIM. 15510993

HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Alif Mahendra Bagus Nurcahyo
NIM : 15510993
Program Studi : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Judul Skripsi : "Simulasi Dinamika Molekuler Variasi Laju Pendinginan Pada Proses Solidifikasi Paduan NiTi"

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

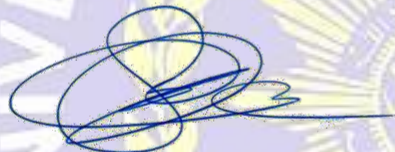
Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : *Selasa*
Tanggal : *13 Agustus 2019*
Nilai :


Dosen Penguji,

Dosen Penguji I,

Dosen Penguji II,



(Wawan Trisnadi Putra, ST., MT)
NIK. 1980022020130913

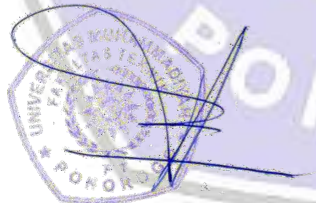


(Kuntang Winangun, S.Pd., M.Pd)
NIK. 1990042120170913

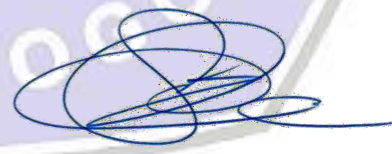
Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,

Ketua Program Studi Teknik Mesin,



(Dr. Ir. Atiyadi, MM, M.Kom)
NIK. 1964010319900912



(Wawan Trisnadi Putra, ST., MT)
NIK. 1980022020130913

BERITA ACARA
BIMBINGAN SKRIPSI

1. Nama : Alif Mahendra Bagus Nurcahyo
2. NIM : 15510993
3. Program Studi : Teknik Mesin
4. Fakultas : Teknik
5. Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Variasi Laju Pendinginan Pada Proses Solidifikasi Paduan NiTi
6. Dosen Pembimbing : Rizal Arifin M.Si. Ph.D
7. Konsultasi :
- 8.

NO.	TANGGAL	URAIAN	TANDA-TANGAN
1.	Selasa, 20-11-18	konwul BAB I	Rizal
2.	Selasa, 3-12-18	konwul BAB II	Rizal
3.	Jumat, 4-1-19	konwul BAB III	Rizal
4.	Jumat, 11-1-19	DCC seminar proposal	Rizal
5.	Sem, 29-7-19	konultasi BAB IV	Rizal
6.	Jumat, 2-8-19	finalisasi BAB IV	Rizal
7.	Sem, 5-8-19	DCC BAB V	Rizal
8.	Sem, 5-8-19	DCC sidang	Rizal
9.	Tgl. Pengajuan :		
10.	Tgl. Pengesahan :		

Ponorogo, 5 Agustus 2019

Pembimbing,

Rizal

(Rizal Arifin M.Si. Ph.D)

NIK. 1987092020120413

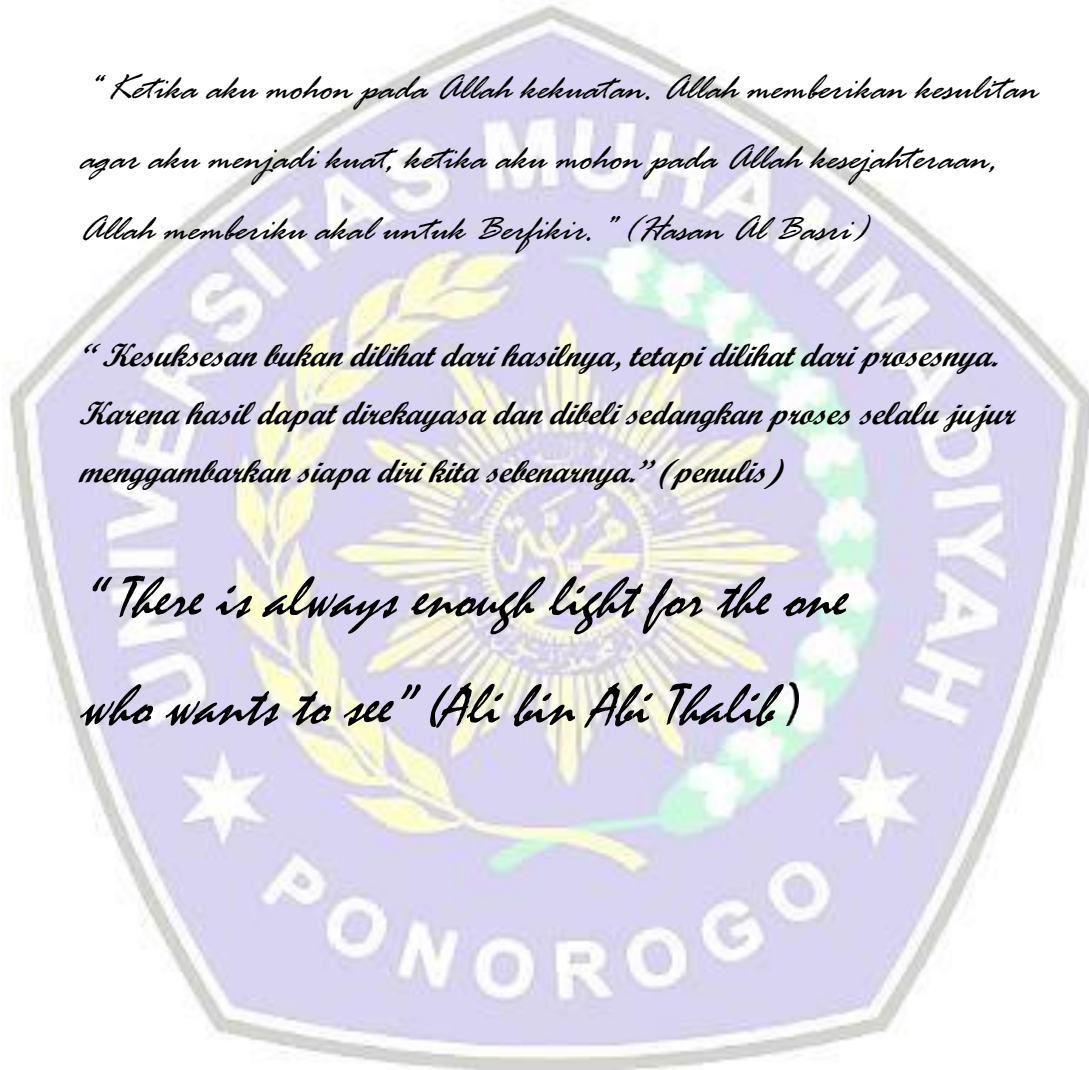
Motto:

“ Sesungguhnya bersama kesulitan pasti ada kemudahan.
Maka apabila engkau telah selesai (dari suatu urusan), tetaplah
bekerja keras (untuk urusan yang lain). Dan hanya kepada
Tuhan mu lah engkau berharap.” (QS. Al-Insyirah, 6-8)

*“ Ketika aku mohon pada Allah kekuatan, Allah memberikan kesulitan
agar aku menjadi kuat, ketika aku mohon pada Allah kesejahteraan,
Allah memberikan akal untuk Berfikir. ” (Hasan Al Basri)*

*“ Kesuksesan bukan dilihat dari hasilnya, tetapi dilihat dari prosesnya.
Karena hasil dapat direkayasa dan dibeli sedangkan proses selalu jujur
menggambarkan siapa diri kita sebenarnya.” (penulis)*

*“ There is always enough light for the one
who wants to see” (Ali bin Abi Thalib)*



KATA PENGANTAR

Puji syukur saya panjatkan kepada Allah SWT, karena atas berkat dan rahmat-Nya, saya dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Simulasi Dinamika Molekuler Variasi Laju Pendinginan Pada Proses Solidifikasi Paduan NiTi”.

Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik Jurusan Teknik Mesin pada Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo. Saya menyadari bahwa, tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan skripsi ini, sangatlah sulit bagi saya untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, saya mengucapkan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Dr. H. Sulton, M.Si selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Dr. Ir. Aliyadi, MM, M.Kom selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Wawan Trisnadi Putra, ST., MT selaku Ketua Prodi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin M.Si. Ph.D dan Munaji, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing yang selalu memberikan banyak bantuan serta bimbingan secara sabar kepada saya dalam menyusun tugas akhir ini.
5. Keluarga khususnya, Ibu dan almarhum bapak yang selalu memberikan motivasi dan nasihat kepada saya supaya belajar dengan jujur dan mengambil semua ilmu yang ada di bangku perkuliahan agar kelak ilmu yang telah saya terima dapat bermanfaat bagi orang banyak.
6. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
7. Ridwan selaku rekan satu angkatan dan kelas, serta partner dan guru saya dalam memahami ataupun bertukar pendapat mengenai ilmu-ilmu tentang material physics.

8. Rekan-rekan mahasiswa yang tetap solid dalam Tim “Bismillah Wisuda 2019” Ridwan, Moh. Darun Naim, Prengky, Sukron, Yossa, dan Lainnya yang tidak bisa saya sebutkan satu persatu.
9. Sahabat baik serta rekan-rekan mahasiswa satu angkatan dan satu Kelas B 2015 yang selalu memberikan dorongan serta motivasi dalam penyusunan skripsi ini.

Akhir kata, saya berharap Allah SWT berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu.

Sebuah kesadaran bahwa apa yang telah dihasilkan dari penelitian ini masih sangat jauh dari kesempurnaan, akan tetapi mudah-mudahan bisa menjadi suatu awal yang baik bagi pengembangan dan ide-ide penelitian selanjutnya.

Ponorogo, 5 Agustus 2019

Alif Mahendra Bagus Nurcahyo
15510993

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER VARIASI LAJU PENDINGINAN PADA PROSES SOLIDIFIKASI PADUAN NiTi

Alif Mahendra Bagus Nurcahyo, Rizal Arifin, Munaji
Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik,
Universitas Muhammadiyah Ponorogo
e-mail : alifmahendra4@gmail.com

Abstrak

Paduan NiTi adalah material yang tersusun dari Nikel dan Titanium. Paduan ini memiliki sifat yang mampu mengingat struktur awalnya atau *shape memory alloy* (SMA). Paduan NiTi sudah digunakan sebagai bahan biomaterial di bidang medis, dunia perindustrian, dan masih banyak lagi pengaplikasiannya. Pada dasarnya proses fabrikasi paduan NiTi sangat sulit dibuat, hal ini dikarenakan reaktivitas titanium yang luar biasa dan diperlukan kontrol komposisi paduan yang sangat ketat. Tujuan dari penelitian ini untuk menganalisis struktur paduan NiTi pada saat solidifikasi dengan beberapa variasi laju pendinginan yang diberikan. Penelitian ini dilakukan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler. Metode ini di pilih karena sangat efisien dalam waktu pengerjaannya serta biaya yang dikeluarkan. Teknik analisa data dari penelitian ini dengan cara menganalisis struktur lokal paduan NiTi serta struktur global dengan fungsi distribusi radial $g(r)$ dan faktor struktur $s(q)$. Struktur lokal dalam padatan diidentifikasi dengan menggunakan analisis sudut ikatan. Saat solidifikasi paduan NiTi, temperatur awal 300 K dinaikkan 2500 K kemudian di solidifikasi hingga 10 K dengan divariasi laju pendinginan mulai dari 0,1 ns sampai 1,0 ns. Hasil simulasi diperoleh selama penurunan laju pendinginan pada faktor struktur $s(q)$ membuat hasil grafik meningkat tetapi tidak begitu signifikan serta terdapat indikasi adanya *Face Short Range Tetrahedra*. Pada struktur lokal BCC dan Icosahedral mengalami peningkatan jumlah struktur Kristal selama penurunan laju pendinginan, sedangkan pada HCP menunjukkan jumlah struktur kristal dengan trend yang menurun dari grafik laju pendinginan. Pada struktur kristal FCC tidak mengalami perubahan yang signifikan seiring lamanya laju pendinginan.

Kata kunci : Paduan NiTi, Simulasi dinamika molekuler, Solidifikasi, Laju pendinginan.

DAFTAR ISI

Halaman Judul Proposal Skripsi	i
Halaman Pengesahan Skripsi	ii
Pernyataan Orisinalitas Skripsi	iii
Halaman Berita Acara Ujian	iv
Berita Acara Bimbingan Skripsi	v
Motto	vi
Kata Pengantar	vii
Abstrak	ix
Daftar Isi	x
Daftar Gambar	xii
Daftar Lampiran	xiii
BAB 1 PENDAHULUAN	
Latar Belakang	1
Rumusan Masalah	2
Tujuan Penelitian	2
Batasan Masalah	2
Manfaat Penelitian	2
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	
Struktur dan Karakter Paduan NiTi	4
Pemanfaatan Paduan NiTi	6
Fabrikasi Paduan NiTi	8
Simulasi Dinamika Molekuler	9
Perkembangan Riset Paduan NiTi	12
BAB 3 METODE PENELITIAN	
Alat dan Kelengkapan Penelitian	13
a. Perangkat Keras	13
b. Perangkat Lunak	13
1) Avogadro	13

2) LAMMPS.....	14
3) VMD	14
4) QT Grace.....	15
Diagram Alir Penelitian	16
Tahapan Penelitian.....	17
a. Pra-Riset / Persiapan	17
b. Riset	17
c. Analisis.....	17
Penjabaran Tahapan Penelitian	18
a. Evaluasi Kinerja Potensial	18
b. Membangun Struktur Awal NiTi	20
c. Mengubah Kristal menjadi Liquid	21
1) Ekuilibrasi sistem pada Temperatur 300 K	21
2) Menaikkan Temperatur dari 300 K sampai 2500 K.....	21
3) Ekuilibrasi pada Temperatur 2500 K.....	21
d. Solidifikasi	21
e. Analisis Data.....	22
BAB 4 ANALISIS DATA DAN PEMBAHASAN	
Data hasil Faktor Struktur $s(q)$ -Xrays & $s(q)$ Parsial.....	23
Data hasil rata-rata atom $g(r)$ & $g(r)$ Parsial	28
Koordinasi Atom.....	32
Sudut Ikatan	33
Struktur Lokal	34
BAB 5 KESIMPULAN	
Kesimpulan	37
	Saran 37
Daftar Pustaka	38
Lampiran	42

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Tampilan 3D dari struktur austenit dan martensit paduan NiTi	4
Gambar 2.2 Thermal histeresis transformasi fase nitinol	5
Gambar 2.3 Contoh penerapan material paduan NiTi.....	7
Gambar 2.4 Proses fabrikasi paduan NiTi.....	8
Gambar 3.1 Tahapan Proses Penelitian Paduan NiTi.....	16
Gambar 3.2 Struktur Kristal FCC Ni.....	17
Gambar 3.3 Struktur kristal BCC Ti dan B2 NiTi.....	18
Gambar 3.4 Konfigurasi awal struktur kristal B2 dari paduan NiTi	19
Gambar 4.1 Grafik $s(q)$ saat solidifikasi pada T 10 K	23
Gambar 4.2 Grafik $s(q)$ saat solidifikasi pada T 300 K	24
Gambar 4.3 Grafik $s(q)$ parsial NiNi saat solidifikasi pada T 10 K.....	25
Gambar 4.4 Grafik $s(q)$ parsial TiTi saat solidifikasi pada T 10 K.....	26
Gambar 4.5 Grafik $s(q)$ parsial NiTi saat solidifikasi pada T 10 K	27
Gambar 4.6 Grafik posisi koordinat $g(r)$ total	28
Gambar 4.7 Grafik posisi koordinat $g(r)$ parsial NiTi	29
Gambar 4.8 Grafik posisi koordinat $g(r)$ parsial NiNi	30
Gambar 4.9 Grafik posisi koordinat $g(r)$ parsial TiTi.....	31
Gambar 4.10 Rata-rata kordinasi Atom	32
Gambar 4.11 Angle grafik perbedaan sudut ikatan.....	33
Gambar 4.12 Grafik perbandingan struktur lokal HCP dan BCC.....	34
Gambar 4.13 Grafik perbandingan struktur lokal FCC dan Icosahedral.....	35
Gambar 4.14 Hasil struktur lokal saat T 300 K.....	36

DAFTAR LAMPIRAN

Lattice constant atom Ni	42
Lattice constant atom Ti.....	43
Lattice constant atom NiTi.....	44
Grafik Equilibrası sistem pada $T : 300 K$	
a. Temperatur dan Langkah.....	45
b. Total Energi dan Langkah.....	45
c. Tekanan dan Langkah.....	46
d. Volume dan Langkah.....	46
Grafik penaikan $T : 300 K$ sampai $T : 300 K$	
a. Temperatur dan Langkah.....	47
b. Total Energi dan Langkah.....	47
c. Tekanan dan Langkah.....	48
d. Volume dan Langkah.....	48
Grafik Equilibrası pada $T : 2500 K$	
a. Temperatur dan Langkah.....	49
b. Total Energi dan Langkah.....	49
c. Tekanan dan Langkah.....	50
d. Volume dan Langkah.....	50
Data tabel $s(q)$ & $s(q)$ parsial	
a. Tabel $s(q)$ -Xrays	51
b. Tabel $s(q)$ -Xrays	52
c. Tabel $s(q)$ -Xrays	53
d. Tabel $s(q)$ -Xrays	54
Data tabel $g(r)$ & $g(r)$ parsial	
a. Tabel $g(r)$ Total.....	55
b. Tabel $g(r)$ Total.....	56
c. Tabel $g(r)$ Total.....	57
d. Tabel $g(r)$ Total.....	58
Data tabel jumlah struktur lokal.....	59