

**LAPORAN PENELITIAN KERJASAMA ANTAR PERGURUAN TINGGI  
(PEKERTI)**



**DESAIN INOVATIF MODEL BELAJAR MENGAJAR FISIKA BERBASIS  
METODE DINAMIKA MOLEKUL UNTUK MENJELASKAN PROSES-  
PROSES FISIKA MIKROSKOPIK**

Heni Safitri,S.Pd.,M.Si. (NIDN. 0010037706)

Herawati,S.Pd.,M.Si (NIDN. 0009127709)

Dra.Widiasih, M.Pd. (NIDN.0012016516)

Dr. Artoto Arkundato,S.Si.,M.Si. (NIDN. 0025126901)

Drs.Sudarko,Ph.D (NIDN. 0012036905)

**UNIVERSITAS TERBUKA  
DESEMBER 2013**

HALAMAN PENGESAHAN

**Judul Kegiatan** : Desain Inovatif Model Belajar Mengajar Fisika Berbasis Metode Dinamika Molekul untuk Menjelaskan Proses-proses Fisika Mikroskopik

**Peneliti / Pelaksana**

Nama Lengkap : HENI SAFITRI S.Pd., M.Si  
NIDN : 0010037706  
Jabatan Fungsional :  
Program Studi : Pendidikan Fisika  
Nomor HP :  
Surel (e-mail) : henip@ut.ac.id

**Anggota Peneliti (1)**

Nama Lengkap : HERAWATI S.Pd., M.Si  
NIDN : 0009127709  
Perguruan Tinggi : UNIVERSITAS TERBUKA

**Anggota Peneliti (2)**

Nama Lengkap : Dra. WIDIASIH M.Pd.  
NIDN : 0012016516  
Perguruan Tinggi : UNIVERSITAS TERBUKA

**Institusi Mitra (jika ada)**

Nama Institusi Mitra :  
Alamat :  
Penanggung Jawab :  
Tahun Pelaksanaan : Tahun ke 1 dari rencana 2 tahun  
Biaya Tahun Berjalan : Rp. 60.000.000,00  
Biaya Keseluruhan : Rp. 155.020.000,00



Mengetahui  
Dekan FKIP Universitas Terbuka

(Dr. Udin Kasmawan, M.A., Ph.D.)  
NIP/NIK 196904051994031002

Tangerang Selatan, 31 - 12 - 2013  
Ketua Peneliti,

(HENI SAFITRI S.Pd., M.Si)  
NIP/NIK 197703102002122002



Menyetujui,  
Ketua Lembaga Penelitian

(Dra. Dewi A Padmo Putri, M.A., Ph.D.)  
NIP/NIK 196107241987012001

## DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN SAMPUL	1
HALAMAN PENGESAHAN	2
RINGKASAN	3
PRAKATA	4
DAFTAR ISI	
DAFTAR TABEL	
DAFTAR GAMBAR	
DAFTAR LAMPIRAN	
BAB 1. PENDAHULUAN	5
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	6
BAB 3. TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN	12
BAB 4. METODE PENELITIAN	17
BAB 5. HASIL DAN PEMBAHASAN	18
BAB 6. RENCANA TAHAPAN BERIKUTNYA	19
BAB 7. KESIMPULAN DAN SARAN	
DAFTAR PUSTAKA	
LAMPIRAN	20
Lampiran 1. Instrumen	20
Lampiran 2. Personalia Tenaga Peneliti beserta Kualifikasinya	23
Lampiran 3. Publikasi	58

## RINGKASAN

Proses-proses fisika fundamental mikroskopis yang melibatkan interaksi atom-atom sulit sekali diamati dengan mata telanjang. Hal ini karena perangkat pengamatan yang memadai belum ada atau sulit untuk dibuat dan tidak murah. Oleh karena itu pada umumnya pengajaran fisika terutama di SMA untuk proses-proses yang melibatkan atom-atom (abstrak) belum mampu dilakukan di laboratorium sekolah. Hal ini berpotensi gambaran proses mikro fisika yang diajarkan kurang difahami dan dimengerti siswa. Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode komputasi dalam fisika yang populer untuk mensimulasikan gerak partikel, atom, molekul sampai untuk obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi. Dengan metode dinamika molekul gerak atom-atom suatu cairan dapat diprediksi dengan baik bahkan dapat divisualisasikan dengan sangat menarik dan informatif. Penelitian ini bertujuan untuk merancang model pembelajaran interaktif untuk mata pelajaran fisika khususnya mengenai konsep fisika misalkan perubahan wujud zat dengan besaran fisis titik leleh (*melting point*), yang merupakan informasi sangat penting dari fenomena tersebut. Kelebihan dari model pembelajaran ini adalah siswa dapat lebih memahami gambaran mikroskopik seperti struktur bahan selama proses perubahan wujud zat, pergerakan atom-atom selama proses pelelehan dapat dianalisis dan diperagakan secara visual. Dengan model pembelajaran yang interaktif dan inovatif ini maka diyakini akan memberi dampak meningkatkan minat dan kemampuan siswa dalam memahami salah satu konsep fisika tersebut dengan lebih baik. Penerapan metode dinamika molekuler di tingkat SMA sepengetahuan penulis belum banyak (pernah) dilakukan. Dengan memperkenalkan lebih dini salah satu metode komputasi ini, maka sekaligus juga akan menumbuhkan daya kreasi siswa SMA untuk mempelajari dan mengembangkan metode-metode fisika komputasi yang lain pada problem-problem fisika lain.

**Kata Kunci:** desain inovatif pembelajaran fisika, metode dinamika molekul, fisika mikroskopik

## **PRAKATA**

Puji syukur kehadiran Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan hidayah-Nya. Penelitian dengan judul “Desain Inovatif Model Belajar Mengajar Fisika Berbasis Metode Dinamika Molekul Untuk Menjelaskan Proses-Proses Fisika Mikroskopik” ini disusun selama kurang lebih delapan bulan (diluar masa penulisan proposal). Dilatar belakangi oleh ketertarikan Tim Peneliti terhadap perkembangan serta dampak yang besar ICT dalam dunia pendidikan, akhirnya penelitian ini dapat selesai tepat pada waktunya setelah juga memperoleh berbagai saran, kritik, dan masukan dari kalangan rekan sejawat di Universitas Terbuka (UT) dan Universitas Jember (UNEJ).

Ucapan Terimakasih dari Tim Peneliti dihaturkan kepada Dikti dan Rektor Universitas Terbuka beserta jajarannya yang telah mengijinkan Kami turut berpartisipasi dalam Hibah Penelitian Pekerti. Terimakasih juga kami sampaikan kepada Ketua LPPM UT beserta stafnya yang selalu membantu tim Peneliti dalam sisi administratif penelitian. Selanjutnya terimakasih diucapkan Tim Peneliti kepada Kepala Pusat Komputer dan Jurusan Fisika di Universitas Jember serta beserta jajaran dan stafnya, karena atas bantuan Beliau-Beliau-lah Kami dapat memperoleh informasi yang memadai sebagai intisari dari kegiatan penelitian ini. Kepada pihak lain yang

belum disebutkan karena keterbatasan, kami turut menyampaikan ungkapan terimakasih. Semoga segala budi baik yang ditujukan kepada kami dapat menjadi berkah bagi pihak-pihak bersangkutan.

Semoga laporan penelitian ini dapat dibaca dan dimanfaatkan dalam khasanah implementasi ICT dalam pengembangan mutu pendidikan di Indonesia pada umumnya di pendidikan menengah di Indonesia pada khususnya.

Tangerang Selatan, Desember 2013

Tim Peneliti

## BAB 1. PENDAHULUAN

Proses-proses fisika tidak semuanya dapat diamati secara visual. Terutama proses-proses fisika fundamental mikroskopis yang melibatkan interaksi atom-atom sulit sekali diamati dengan mata telanjang. Hal ini karena perangkat pengamatan yang memadai belum ada atau sulit untuk dibuat dan tidak murah. Oleh karena itu pada umumnya pengajaran fisika terutama di SMA untuk proses-proses yang melibatkan atom-atom (abstrak) belum mampu dilakukan di laboratorium sekolah. Hal ini berpotensi gambaran proses mikro fisika yang diajarkan kurang difahami dan dimengerti siswa.

Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode komputasi dalam fisika yang populer untuk mensimulasikan gerak partikel, atom, molekul sampai untuk obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi. Dengan metode dinamika molekul gerak atom-atom suatu cairan dapat diprediksi dengan baik bahkan dapat divisualisasikan dengan sangat menarik dan informatif. Secara ringkas metode simulasi dinamika molekul ini memerlukan informasi posisi-posisi (koordinat) awal partikel, atom atau obyek penyusun sistem sebelum simulasi, kondisi lingkungan yang akan disimulasikan (temperatur, tekanan, rapat partikel, dan lain-lain), fungsi potensial untuk interaksi antar partikel, atom, molekul atau obyek yang akan disimulasikan dan spesifikasi obyek yang disimulasikan (massa, muatan, jumlah atom, dan lain-lain). Pada dasarnya dinamika molekul memerlukan informasi yang akurat untuk fungsi potensial interaksi tersebut. Semakin akurat fungsi potensial yang menggambarkan interaksi antar partikel, atom dan molekul maka semakin akurat hasil simulasi yang kita dapatkan. Di lain pihak, metode dinamika molekul sebenarnya berangkat dari pemikiran menyelesaikan persamaan gerak Newton kedua ( $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$ ) untuk sistem dinamik yang dievaluasi dengan syarat awal yang diketahui, dengan gaya interaksi dapat diperoleh dari diferensial negatif fungsi potensial. Solusi persamaan gerak Newton ini adalah *trayektori* sistem yaitu kumpulan koordinat partikel/atom/molekul

yang membentuk lintasan gerak sepanjang waktu. Dengan demikian metode dinamika molekul secara prinsip dapat diterapkan untuk sistem yang sangat kecil (mikroskopis atomistik) sampai untuk sistem sangat besar seperti gerak planet menurut orbit tertentu. Berdasarkan informasi trayektori sistem dan teori fisika statistik selanjutnya dapat diprediksi besaran-besaran termodinamik sistem seperti temperatur akhir, tekanan akhir, energi total, enthalpi sistem dan sebagainya.

Pelajaran fisika adalah salah satu dari beberapa mata pelajaran yang dianggap sulit bagi siswa SMA. Salah satu prediksi mengapa siswa sulit mempelajari fisika adalah siswa dituntut harus dapat memahami fenomena fisis yang terjadi lebih dulu, kemudian baru berusaha memecahkan problem fisis terkait dengan rumusan matematika yang tepat dan solusinya. Dilain pihak minat siswa mempelajari fisika juga sangat ditentukan apakah siswa tertarik dengan konsep fisika yang diajarkan guru di sekolah. Untuk semua pelajaran, kesuksesan siswa mempelajari matapelajaran tentu juga bergantung pada minat siswa pada mata pelajaran itu sendiri. Hal ini seperti yang dikemukakan oleh Druxes dan Slemsen (1986) bahwa ada beberapa masalah pada pelajaran fisika antara lain: (a) Pelajaran fisika “tidak disukai“, (b) Pelajaran fisika itu berat, (c) Pelajaran fisika tidak “aktual“, (d) Pelajaran fisika itu eksperimental.

Penelitian ini bertujuan untuk merancang model pembelajaran interaktif untuk mata pelajaran fisika khususnya mengenai konsep fisika perubahan wujud zat dengan besaran fisis titik leleh (*melting point*) yang merupakan informasi sangat penting dari fenomena tersebut. Kelebihan dari model pembelajaran ini adalah siswa dapat lebih memahami gambaran mikroskopik struktur bahan selama proses perubahan wujud zat, pergerakan atom-atom selama proses pelelehan dapat dianalisis dan diperagakan secara visual. Dengan model pembelajaran yang interaktif dan inovatif ini maka diyakini akan memberi dampak meningkatkan minat dan kemampuan siswa dalam memahami salah satu konsep fisika tersebut dengan lebih baik. Penerapan metode dinamika molekuler di tingkat SMA sepengetahuan penulis belum banyak (pernah) dilakukan. Dengan memperkenalkan lebih dini salah satu metode komputasi ini,

maka sekaligus juga akan menumbuhkan daya kreasi siswa SMA untuk mempelajari dan mengembangkan metode-metode fisika komputasi yang lain pada problem-problem fisika lain. Sebagai gambaran, kemajuan dan perkembangan sains dan teknologi modern tidak terlepas dari penerapan dan pengembangan metode-metode fisika komputasi yang menuntut solusi yang semakin kompleks yang hanya dapat ditangani oleh kemampuan komputasi dan komputer. Adapun penelitian yang relevan tentang simulasi dinamika molekul diwaktu yang lalu dan menunjukkan kesinambungan pemikiran dapat divisualisasikan sebagai berikut. Pertama, Artoto Arkundato,dkk (2009) meneliti tentang perhitungan koefisien difusi logam Fe dalam Pb cair dengan metode dinamika molekuler, kemudian dilanjutkan dengan Artoto Arkundato,et al. (2010) meneliti tentang *Corrosion study of Fe in a stagnant liquid Pb by molecular dynamics methods*. Sehingga untuk usulan penelitian selanjutnya diharapkan terdapat kesinambungan pemikiran dengan penelitian sebelumnya namun lebih diarahkan dalam dunia kependidikan yaitu simulasi metode dinamika molekul jika diterapkan untuk membantu pembelajaran dikelas.

Dari sekumpulan hasil-hasil penelitian tersebut nampak alur pemikiran dan kegiatan penelitian yang saat ini diusulkan merupakan kelanjutan dari penelitian yang sudah pernah dilakukan. Perlu disampaikan di sini bahwa disamping penelitian yang dilakukan oleh peneliti sendiri, banyak juga topik atau judul penelitian yang dilakukan oleh para peneliti lainnya yang nanti akan dikaji relevansinya. Berdasarkan latar belakang di atas, maka rumusan masalah dalam penelitian ini adalah : Bagaimana merancang pembelajaran fisika interaktif dengan menggunakan Metode Dinamika Molekul Kode dalam mata pelajaran fisika Sekolah Menengah Atas pada materi proses-proses fisika mikroskopik, Mengujicoba Metode Dinamika Molekul pada mata pelajaran fisika untuk siswa Sekolah Menengah Atas untuk materi yang berkaitan dengan proses-proses fisika mikroskopik. Materi yang ditampilkan dalam Metode Dinamika Molekul adalah materi fisika proses-proses fisika mikroskopik untuk Sekolah Menengah Atas sesuai dengan kurikulum yang berlaku. Pembelajaran interaktif yang dibuat hanya dalam model tutorial dan simulasi. Pembelajaran

interaktif Fisika yang dibahas dari sisi siswa. Materi pembelajaran fisika dalam bentuk tutorial dan simulasi.

## **BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA**

### **A. Model Pembelajaran Fisika Interaktif**

Model pembelajaran fisika yang tepat sangat diperlukan untuk dapat meningkatkan kemampuan siswa dalam memahami pelajaran fisika. Model tradisional yaitu memberikan pelajaran fisika di kelas dan di laboratorium secara umum sudah baik, namun banyak sekali proses-proses fisika yang tidak dapat diberikan kepada siswa dengan mudah seperti proses-proses atom (mikroskopis dan abstrak) yang tidak dapat dilihat dan diamati langsung oleh siswa di laboratorium, terutama karena alat yang digunakan untuk pengamatan tidak ada karena pada umumnya peralatan pengukuran proses-proses mikroskopis adalah sangat mahal. Untuk itu perlu ada rancangan model pembelajaran lain yang dapat membantu untuk pembelajaran proses-proses mikroskopis fisika selain model tradisional.

Pembelajaran fisika yang interaktif merupakan model pembelajaran yang diharapkan mampu meningkatkan minat belajar siswa. Secara umum pelajaran Fisika adalah pelajaran yang termasuk sulit dipelajari oleh siswa SMA. Hal ini karena menuntut siswa untuk memiliki kemampuan matematika sekaligus logika yang baik untuk dapat memahami dan menjelaskan proses-proses fisika yang terjadi. Dalam hal ini sering sekali gambaran proses fisika yang terjadi bersifat abstrak seperti halnya interaksi antar atom-atom selama terjadinya proses pelelehan zat. Untuk itu model pembelajaran yang bersifat interaktif dan memudahkan proses belajar-mengajar perlu dirancang. Salah satu model pembelajaran interaktif adalah penggunaan program komputer untuk dapat menghitung dan mensimulasikan proses fisika. Simulasi dinamika molekul adalah metode simulasi yang salah satunya dapat menggambarkan proses-proses mikroskopis atom dengan menggunakan program komputer yang dirancang.

### **B. Simulasi Dinamika Molekul dalam Fisika Mikroskopik**

## 1. Persamaan Gerak dan Fungsi Potensial

Gerak partikel klasik dapat diprediksi evolusi gerakanya berdasarkan hukum gerak Newton yang kedua yang sangat terkenal yaitu,

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i \quad (1)$$

dengan  $\vec{F}_i$  adalah gaya total yang bekerja pada partikel ke  $i$ . Untuk sistem yang konservatif, gaya total tersebut dapat diturunkan dari fungsi potensial  $U$ ,

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \quad (2)$$

Potensial antar-atom (*interatomic potential*)  $U(r)$  seperti telah disampaikan diatas adalah hal yang krusial untuk simulasi dinamika molekul. Problem fisis dengan demikian telah disederhanakan dengan hanya mencari rumusan yang tepat untuk *fungsi energi potensial* tersebut sebagai fungsi dari hanya koordinat-koordinat atom. Untuk sistem 3D, pers.(1) untuk  $N$  atom yang saling berinteraksi dapat dituliskan menjadi:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N) \quad (3)$$

Dengan vektor jarak  $\vec{r}_i = \{\vec{x}_i, \vec{y}_i, \vec{z}_i\}$  dan gaya yang bekerja pada atom ke  $i$  adalah  $\vec{F}_i = \{F_i^x, F_i^y, F_i^z\}$  dengan  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ . Dengan demikian dapat kita pisahkan  $3N$  buah persamaan:

$$m_i \frac{d^2 x_i(t)}{dt^2} = F_i^x$$

(4a)

$$m_i \frac{d^2 y_i(t)}{dt^2} = F_i^y$$

(4b)

$$m_i \frac{d^2 z_i(t)}{dt^2} = F_i^z$$

(4c)

Percepatan partikel selanjutnya dapat diberikan oleh persamaan berikut,

$$\vec{a}_i = \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i/m_i \quad (5)$$

Berdasarkan pers.(1) atau (4) maka trayektori sistem  $\{(\vec{r}_i, t)\}$  dapat diperoleh dengan mengintegrasikan persamaan orde dua tersebut, dengan memberikan posisi-posisi awal semua atom dan juga kecepatan-kecepatan awal atom. Pada umumnya potensial untuk sistem material adalah rumit sehingga persamaan gerak Newton perlu dipecahkan secara numerik. Berdasarkan Ackland (2011) salah satu fungsi potensial yang sangat terkenal yang sering digunakan adalah *potensial Lennard-Jonnes* yang dapat dikonversi menjadi gaya berbentuk

$$\vec{f}_i^L = \frac{4}{\sigma^2} \epsilon \sum_{j \neq i} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (6)$$

Pada persamaan tersebut  $r$  adalah jarak antar partikel/atom/molekul ke  $i$  dan  $j$ ,  $\epsilon$  adalah parameter potensial untuk jarak, dan  $\sigma$  adalah parameter energi.

Untuk menggambarkan interaksi antar atom-atom logam, digunakan fungsi potensial EAM (embedded atomic methods). Fungsi potensial ini merupakan energi potensial yang diformulasikan cocok untuk logam [9] yang berbentuk,

$$U_i = F_\alpha \left( \sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (7)$$

Dengan  $r_{ij}$  adalah jarak antaran atom ke  $i$  dan  $j$ ,  $\phi_{\alpha\beta}$  adalah fungsi potensial pasangan,  $\rho_\beta$  adalah kontribusi untuk rapat muatan elektron dari atom  $j$  tipe  $\beta$  pada lokasi atom  $i$ , dan  $F$  adalah fungsi (embedding) yang menggambarkan energi yang diperlukan untuk menempatkan atom  $i$  tipe  $\alpha$  ke dalam awan elektron. Untuk menyederhanakan problem, maka perhitungan hanya diperhitungkan untuk radius tertentu dari sekian banyak atom dan elektron yang ada. Untuk sistem dari satu jenis elemen, seperti yang dilakukan pada penelitian ini, maka ada tiga fungsi scalar yang harus ditentukan: Fungsi interaksi pasangan, fungsi embedding dan fungsi kontribusi

awan elektron. Untuk sistem alloy dua jenis elemen maka potensial EAM memerlukan tujuh fungsi: tiga untuk interaksi pasangan (A-A, A-B, B-B), dua fungsi embedding, dan dua fungsi kontribusi awan elektron. Umumnya fungsi-fungsi ini diberikan dalam format tabel. Berdasarkan IPRP (2012) Berbagai potensial EAM untuk logam dapat diunduh dari website NIST [10].

Selanjutnya yang tak kalah penting adalah algoritma yang digunakan untuk memecahkan secara numerik persamaan gerak partikel, pers.(4). Salah satu algoritma yang digunakan adalah algoritma *Verlet-Velocity* yang sangat populer dimana kecepatan, percepatan dan posisi dihitung bersama pada waktu  $t$ :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 \quad (8)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \Delta t)]\Delta t \quad (9)$$

dengan  $\Delta t$  adalah selisih waktu antara dua posisi yang berturutan (*time mesh*),  $a$  adalah percepatan dan  $v$  adalah kecepatan. Percepatan didefinisikan berdasarkan pers.(5).

## 2. Metode Dinamika Molekul

Metode MD adalah termasuk metode simulasi atom yang menelaah fenomena mikroskopis (atom) menggunakan pendekatan makroskopik (menggunakan hukum Newton). Dinamika molekul adalah salah satu bentuk simulasi atomistik, yaitu menggambarkan atom-atom dan molekul-molekul yang berinteraksi dalam periode waktu tertentu berdasarkan rumusan fundamental fisika tertentu, untuk memberikan satu gambaran gerak atom-atom tersebut. Sistem kompleks dapat mengandung sejumlah besar atom, yang secara analitik persamaan matematik yang mengaturnya sulit/tidak mungkin dipecahkan, namun dengan pendekatan numerik MD dapat ditangani. Oleh karena itu simulasi MD menjembatani antara “teori” dan “eksperimen” dan dapat

dipandang sebagai “eksperimen virtual”. Dinamika molekul adalah disiplin khusus dari pemodelan molekul dan simulasi komputer , dan ditangani berdasarkan mekanika statistik. Secara mendasar simulasi MD sangat bergantung pada bentuk **fungsi potensial** yang digunakan untuk mewakili model interaksi sistem. ([http://en.wikipedia.org/wiki/Dynamics\\_\(mechanics\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Dynamics_(mechanics))).

Dalam metode dinamika molekul, maka hal yang paling pokok adalah bagaimana memecahkan persamaan gerak newton ( $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ ) secara numeric yang sesuai dengan sistem yang sedang diteliti. Dalam hal ini gaya untuk sistem yang konservatif dapat diperoleh dari rumusan potensial sistem. Ada berbagai bentuk fungsi potensial dan yang paling sederhana adalah **potensial setangkup** (*pair potential*) sehingga energi potensial total dapat diambil sebagai jumlah dari kontribusi energi pasangan-pasangan atom. Salah satu contoh potensial ini yang sering digunakan adalah **potensial Lennard-jones**

### **BAB 3. TUJUAN PENELITIAN DAN MANFAAT PENELITIAN**

#### **A. Tujuan Penelitian**

- 1) Sebagai alat bantu visual untuk membantu guru dalam menjelaskan proses-proses fisika mikroskopik pada pembelajaran fisika

- 2) Sebagai panduan dan pelengkap dalam proses kegiatan belajar mengajar fisika khususnya proses-proses fisika mikroskopik untuk siswa Sekolah Menengah Atas.
- 3) Sebagai alat bantu siswa dalam belajar yang dapat digunakan secara mandiri.
- 4) Pengganti sarana alat bantu eksperimen yang tidak tersedia di laboratorium.

Luaran penelitian terdiri atas

- 1) prototipe media pembelajaran fisika yang berupa simulasi yang dapat diterapkan dalam pembelajaran fisika di SMA,
- 2) makalah yang akan disajikan pada seminar nasional di dalam negeri, dan
- 3) artikel yang dimuat di jurnal nasional/internasional.

## **B. Manfaat Penelitian**

Manfaat yang diharapkan dari hasil penelitian adalah

- (1) merupakan sumbangan pemikiran untuk bidang fisika dan pembelajaran fisika,
- (2) sebagai bahan masukan pengembangan bahan pengayaan dan bantuan belajar, khususnya untuk mata kuliah yang terkait dengan pembelajaran fisika, dan
- (3) latihan melakukan penelitian dan pengembangan kualifikasi dosen dalam bidang penelitian dan penulisan karya ilmiah.

### BAB 3. METODE PENELITIAN

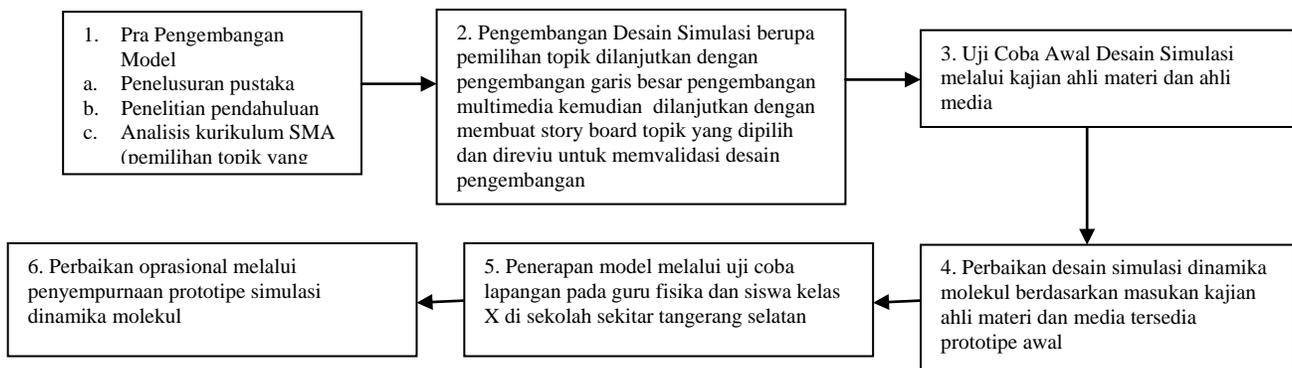
Penelitian ini merupakan penelitian dan pengembangan (*Research and Development*) model pembelajaran, khususnya berupa produk pembelajaran melalui simulasi dinamika molekul untuk mata pelajaran fisika topik perubahan wujud benda. Penelitian & pengembangan (*Research and Development*) ini terdiri dari tiga tahap, dengan uraian penjelasan yang telah dimodifikasi dan diselaraskan dengan tujuan dan kondisi penelitian yang sebenarnya, seperti yang digambarkan secara ringkas pada tabel 1.

**Tabel .1**

Tahapan Pengembangan Model

Tahap	Langkah	Aktivitas
Pra Pengembangan Model	1	Penelusuran pustaka Penelitian pendahuluan Analisa kebutuhan
Pengembangan Model	2	Pembuatan Desain Simulasi Evaluasi Formatif
	3	<b>Uji Coba Awal</b> Kajian ahli dengan ahli materi dan ahli media
	4	<b>Perbaikan</b>
Dikarenakan terbatasnya waktu untuk penerapan model dilakukan pada tahun kedua penelitian		
Penerapan Model	5	<b>Uji Coba Lapangan</b> Uji coba pada guru fisika dan siswa kelas X di sekolah sekitar tangerang selatan
	6	<b>Perbaikan Operasional</b> Penyempurnaan simulasi dinamika molekul

Rangkaian pengembangan model pembelajaran fisika yang menggunakan simulasi dinamika molekul tercantum pada gambar 1.



Gambar 1. Prosedur Pengembangan Desain Simulasi Dinamika Molekul untuk Pembelajaran Fisika

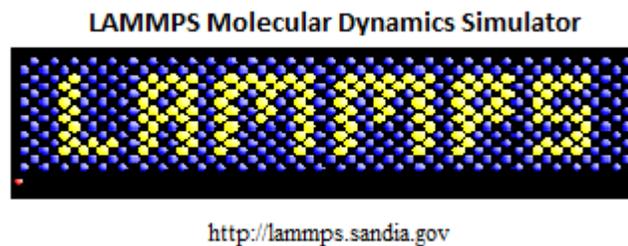
Untuk tahun pertama tahapan penelitian dilakukan sampai dengan tahapan pengembangan model yaitu sampai dengan langkah ke empat. Pengembangan prototipe awal simulasi dinamika molekul dilakukan di 2 tempat TPP dari bulan mei-november 2013 dan di TPM pada semester ganjil tahun ajaran 2013.

### 1. Pengembangan Simulasi

Metode simulasi yang salah satunya dapat menggambarkan proses-proses mikroskopik atom dirancang dengan menggunakan program komputer. Program simulasi dinamika yang digunakan adalah LAMMPS, yang dapat diunduh dari website <http://lammps.sandia.gov>. Kode LAMMPS dipilih karena mempunyai banyak fasilitas untuk perhitungan-perhitungan besaran fisis yang ingin diketahui [11]. Berikut adalah tahapan pengembangan simulasi dan implementasinya serta diagram alur untuk mengoperasikan simulasi tersebut. Simulasi MD (*molecule*

*dynamic*) umumnya mengandung beberapa tahapan: (a) Konstruksi model potensial interaksi  $U(r)$  untuk sistem material, (b) Inisiasi posisi-posisi  $r_0$  dan kecepatan-kecepatan  $v_0$  (momentum), (c) Perhitungan gaya dan trayektori atom-atom dengan metode numerik, (metode Verlet) (d) Analisis trayektori-trayektori atom-atom sistem untuk mendapatkan besaran-besaran termodinamika/fisis yang diinginkan.

Pada penelitian ini untuk mensimulasikan sistem logam yaitu memecahkan persamaan gerak Newton dengan algoritma Verlet kita menggunakan code (program komputer) yang sudah diakui kehandalannya. Program simulasi dinamika yang digunakan adalah LAMMPS, yang dapat diunduh dari website <http://lammmps.sandia.gov>. Menurut Plimpton, S. (1995) Kode LAMMPS dipilih karena mempunyai banyak fasilitas untuk perhitungan-perhitungan besaran fisis yang ingin diketahui. Gambar 1 adalah tampilan depan dari website LAMMPS tersebut.



Gambar 1. Tampilan depan website LAMMPS

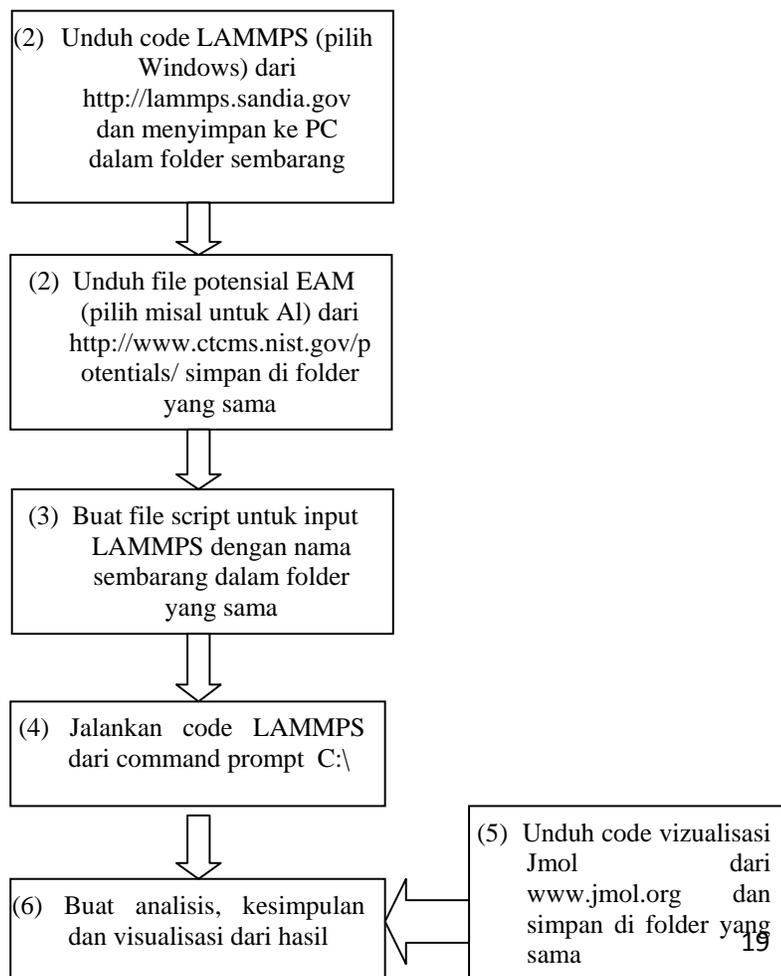
Tabel 1 adalah berbagai fitur dalam website LAMMPS dan dapat diunduh dengan mudah,

**Tabel 1.** Berbagai fitur yang diberikan oleh website LAMMPS

<b>Big Picture</b>	<b>Code</b>	<b>Documentation</b>	<b>Results</b>	<b>Related Tools</b>	<b>Context</b>	<b>User Support</b>
<u>Features</u>	<u>Download</u>	<u>Manual</u>	<u>Publications</u>	<u>Offsite LAMMPS packages</u>	<u>Authors</u>	<u>Mail list</u>
<u>Non-features</u>	<u>SourceForge</u>	<u>Developer Guide</u>	<u>Pictures</u>	<u>Pizza.py Toolkit</u>	<u>History</u>	<u>MD to LAMMPS</u>

						<u>glossary</u>
<u>FAQ</u>	<u>Latest Features &amp; Bug Fixes</u>	<u>Tutorials</u>	<u>Movies</u>	<u>Other codes</u>	<u>Funding</u>	<u>User Scripts and HowTos</u>
<u>Wish list</u>	<u>Unfixed bugs</u>	<u>Commands</u>	<u>Benchmarks</u>	.	<u>Open source</u>	<u>Workshops</u>

Selanjutnya bagaimana simulasi sistem logam Aluminium dapat dilakukan langkah-langkahnya dapat diringkas dalam diagram alur sebagai berikut (Gambar 2):



Gambar 2. Diagram alir langkah-langkah pengembangan simulasi

- (1) Buat folder sembarang terlebih dahulu misal dengan nama SIMULASI dengan cara: klik icon **Start** Windows di pojok kiri bawah layar komputer, pilih **All Programs**, pilih **Accessories**, klik **Command Prompt** lalu ketikkan perintah `mkdir SIMULASI`, maka kita akan mendapatkan folder bernama SIMULASI. Semua pekerjaan simulasi akan dilakukan dalam folder ini. Kode LAMMPS Windows kemudian dapat diunduh dari website <http://lammps.sandia.gov> seperti pada Tabel 1 untuk fitur **Download**. Untuk dapat mengunduh maka PC harus terhubung ke internet. Pilih kode lammps windows yaitu **imp\_win\_no-mpi.exe** untuk mode serial (bukan parallel). Simpan kode ini dalam folder SIMULASI.
- (2) Untuk menjalankan simulasi dinamika molekuler dengan code LAMMPS maka memerlukan dua file penting yaitu (1) File potensial dan (2) File script input untuk semua parameter dan konfigurasi awal atom serta kontrol simulasi yang diinginkan. Buatlah nama file script dalam ekstensi (\*.txt) atau (\*.dat). Dalam studi ini potensial EAM untuk Aluminium (Al\_FM.eam.fs) di unduh dari *Laboratory for Materials Modeling and Simulations* dengan website <http://cms.sjtu.edu.cn/>....[12]. Simpan file Al\_FM.eam.fs dalam folder SIMULASI setelah diunduh.
- (3) Script input untuk simulasi yang dijalankan untuk memprediksi temperatur leleh dari logam Aluminium adalah seperti di bawah ini. Salin script ini dan simpan file script input ini dengan nama input\_Al.dat atau input\_Al.txt (jika file dibuat dengan notepad) dalam folder SIMULASI. Untuk memahami

script input ini dapat dibaca pada manual LAMMPS secara lengkap yang dapat diunduh dari website LAMMPS.

- (4) Untuk menjalankan simulasi LAMMPS sangat mudah. Setelah code LAMMPS windows diunduh (file **imp\_win\_no-mpi.exe**) dan file potensial Al\_FM.eam.fs diperoleh serta script input dibuat (**input\_Al.txt**) dan ketiganya diletakkan dalam satu folder SIMULASI, lalu jalankan dari Command prompt C:\User\.... Atau lebih lengkapnya dari icon Start, All Programs, Accessories, Command Prompt, lalu setelah muncul C:\Users\ ... dst ketik `imp_win_no-mpi.exe < input_Al.txt` (lalu tekan enter). Maka simulasi lammps akan berjalan. Untuk memahami lebih details tentang file script di atas, bisa dibaca di manual LAMMPS yang dapat diunduh. Pada website Lammps juga banyak sekali contoh-contoh program yang dapat dipelajari. Selanjutnya simulasi akan berjalan sesuai dengan kontrol simulasi dan parameter yang ditentukan dalam script input yang dibuat.
- (5) Untuk visualisasi unduh code Jmol (jmol.jar) untuk windows dari [www.jmol.org](http://www.jmol.org) dan simpan di folder SIMULASI. Kode jmol ini membaca file trayektori yang dihasilkan oleh kode LAMMPS, yaitu file DUMP. Untuk menjalankan jmol.jar sangat mudah yaitu klik dua kali file ini dan kemudian file DUMP dibuka setelah jmol.jar aktif. Bacalah manual untuk jmol ini dari website.
- (6) Untuk Analisis atau memprediksi titik leleh suatu bahan dapat digunakan konsep perubahan fase dalam fisika statistik yaitu suhu dimana terjadi perubahan fase atau wujud zat adalah suhu dimana ada perubahan tiba-tiba volume zat (atau juga energi total sistem). Perubahan tiba-tiba yang dimaksud adalah adanya satu titik (nilai) suhu yang sama maka ada beberapa titik (nilai) volume (atau energi total) yang berbeda. Jadi dari grafik volume vs suhu atau energy vs. suhu maka dapat dicari titik leleh ini. Hasil kode LAMMPS diantaranya adalah data volume, energi dan suhu.

## **2. Uji Coba Model Pembelajaran Interaktif**

Langkah-langkah dalam uji coba model pembelajaran interaktif adalah sebagai berikut.

- 1). Uji coba pembelajaran interaktif dapat dilakukan untuk beberapa siswa terlebih dahulu. Siswa diminta menjalankan tahap-tahap seperti pada Gambar 2, dengan membaca manual LAMMPS terlebih dahulu dengan petunjuk guru. Bagian manual LAMMPS yang dibaca hanya pada bagian yang diperlukan saja, yaitu bagian menjalankan LAMMPS, bagian perintah (commands) yang digunakan dalam file input\_Al.txt. Guru terlebih dahulu mempelajari manual LAMMPS dan fitur-fitur website lammps secukupnya. Kemudian siswa belajar untuk menjalankan simulasi LAMMPS menurut Gambar 2 dan petunjuk guru.
- 2). Setelah siswa dapat menjalankan simulasi Al, maka siswa dapat mengubah berbagai nilai yang ada di file script input\_Al. txt dan kemudian menjalankan lagi. Kemudian siswa diminta membuat laporan sederhana mengenai cara kerja LAMMPS.
- 3). Setelah kelompok siswa ini dapat menjalankan LAMMPS kemudian melakukan analisis dan pembahasan didampingi guru. Setelah itu siswa membuat laporan akhir mengenai titik leleh bahan aluminium. Setelah kelompok siswa ini berhasil untuk uji coba yang pertama, kemudian uji coba dilanjutkan untuk siswa dalam kelas.

## **3. Objek Penelitian**

Untuk mengetahui pengaruh penggunaan pembelajaran fisika dengan metode dinamik kode LAMMPS dilakukan uji coba kepada siswa SMA dengan cara siswa diberikan perlakuan pembelajaran interaktif dengan topik tertentu. Sampel penelitian ini terbagi guru dan siswa. untuk tahap pertama 3 orang guru dan 3 orang siswa dari 3 sekolah yang berbeda memberikan penilaian. Untuk keperluan generalisasi ke populasi yang lebih luas, diusahakan mereka terkonsentrasi di tiga sampai lima

sekolah untuk memfasilitasi kemudahan dalam pengambilan data. Data hasil pembelajaran interaktif fisika dengan metode dinamik kode LAMMPS diperoleh dari hasil wawancara dengan siswa dan pemberian kuesioner siswa setelah siswa diberikan perlakuan.

#### **4. Metode Pengumpulan Data**

Data hasil pembelajaran interaktif fisika dengan metode dinamik kode LAMMPS diperoleh dari hasil wawancara dengan siswa dan pemberian kuesioner siswa setelah siswa diberikan perlakuan.

#### **5. Metode Analisis Data**

Analisis data dilakukan secara kuantitatif. Analisis kuantitatif dilengkapi dengan statistik deskriptif dalam bentuk mean dan standar deviasi dari hasil yang diperoleh dari instrumen yang digunakan untuk mengukur kepuasan siswa (dilihat dari perilaku siswa selama menggunakan simulasi, persepsi dan opini siswa selama mengikuti pembelajaran secara interaktif). Untuk validasi butir instrumen dilakukan uji Pearson Bivariat yaitu uji untuk mengukur hubungan diantara hasil-hasil pengamatan dari populasi yang memiliki dua varian. Sedangkan reliabilitas instrumen dilakukan analisis cronbach. Sedangkan untuk validasi instrumen penilaian hasil simulasi dilakukan dengan bantuan validitas ahli.

## **BAB 5. HASIL DAN PEMBAHASAN**

### **A. Pengembangan Desain Simulasi Fisika Mikroskopik Metode Dinamika Molekul**

Penelitian kerjasama perguruan tinggi ini dilaksanakan dengan pertimbangan bahwa tim mitra di Universitas Jember memiliki kapabilitas di bidang Fisika dan komputasi. Perlu dijelaskan bahwa Ketua dan Anggota TPM merupakan Kepala dan koordinat Pusat Komputer di Universitas Jember. Hal ini menunjukkan kepeloporan tim TPM dalam bidangnya yang memberikan pertimbangan pada TPP untuk memilih tim TPM dari Universitas Jember. Penelitian ini akan dilaksanakan selama 2 tahun yaitu pada tahun pertama pengembangan model simulasi MD dan tahun kedua merupakan uji coba keterpakaian model simulasi MD dalam pembelajaran fisika di SMA. Penelitian sebelumnya telah mencoba untuk menampilkan simulasi MD dari bahan aluminium namun dari segi keterpakaiannya untuk pembelajaran di sekolah belum dilakukan sehingga perlu dilakukan penelitian lanjutan yang dapat memperluas penggunaan simulasi MD ini dalam pembelajaran terutama fisika di SMA dan institusi pengusul yaitu Universitas Terbuka sebagai salah satu institusi yang berwenang dalam meningkatkan kualifikasi guru-guru di Indonesia.

Berikut merupakan langkah-langkah pembuatan desain yang telah dilaksanakan.

Tabel 3. Prosedur Pengembangan Prototipe Simulasi Dinamika Molekul

No	Kegiatan
1.	Penelusuran Pustaka dan analisis kurikulum fisika SMA
2.	Pemilihan topik materi yang sesuai untuk dikembangkan simulasinya
3.	Mengembangkan draft garis besar pengembangan multi media
4.	Mereviu draft garis besar pengembangan multi media
5.	Merevisi draft garis besar pengembangan multimedia
6.	Instalasi program simulasi MD dikomputer
7.	Mereviu hasil keluaran program
8.	Mengembangkan draft flowchart dan story board untuk pembelajaran
9.	Mereviu draft flowchart dan story board untuk pembelajaran
10.	Merevisi draft flow chart dan story board untuk pembelajaran
11.	Perancangan Simulasi berdasarkan flowchart dan storyboard

## B. Tampilan Simulasi

Setelah program LAMMPS dipanggil dan dijalankan maka lembar/layar pertama yang ditampilkan adalah informasi seperti pada Gambar 3. Hasil dari simulasi menurut Gambar 2 adalah seperti di bawah ini.

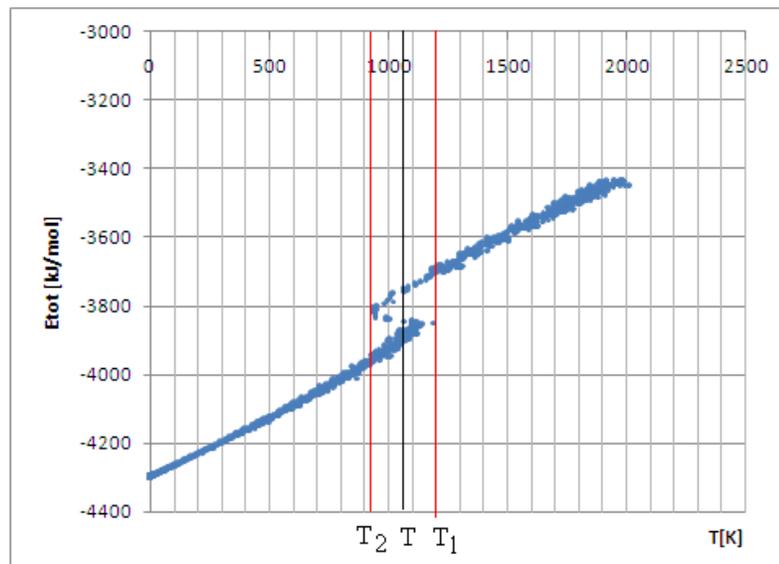
```

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]
(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.
LAMMPS (21 Dec 2010)
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05
Created orthogonal box = (0 0 0) to (32.4 32.4 20.25)
  1 by 1 by 1 processor grid
Created 1280 atoms
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.31123 Mbytes
Step Temp E_pair E_mol TotEng Press
  0          2.5 -4299.8646          0 -4299.4513 -10496.323
100 1.269560655 21257.64 -4299.636088 -4299.4262 -10488.70844
200 1.397134931 21257.64 -4299.634825 -4299.403845 -10483.84415
300 1.384916473 21257.64 -4299.605354 -4299.376394 -10483.13836
400 1.575923002 21257.64 -4299.609008 -4299.34847 -10481.22533
500 1.580183413 21257.64 -4299.57934 -4299.318098 -10480.76711
600 1.695820925 21257.64 -4299.567221 -4299.286862 -10476.73168
700 1.686191216 21257.64 -4299.534038 -4299.255271 -10476.17223
800 1.856723918 21257.64 -4299.531392 -4299.224432 -10470.24152

```

Gambar 3. Tampilan step awal simulasi LAMMPS

Data-data hasil simulasi meliputi step integrasi, temperatur, energi potensial, energi total dan sebagainya sesuai script input. Pada penelitian ini simulasi dijalankan dalam 130000 step integrasi dengan algoritman Verlet. Untuk mengetahui temperatur titik lebur logam Al, maka kita buka file **log,lammps** dan kita plot data temperatur  $T$  (sumbu horizontal) dengan energi total sistem  $E_T$  (sumbu vertikal) dengan Microsoft Excel. Dari grafik  $T-E_T$  terlihat bahwa daerah dimana terjadi perubahan tiba-tiba energi total. Gambar 4 memperlihatkan grafik  $T-E_T$  untuk logam Al.



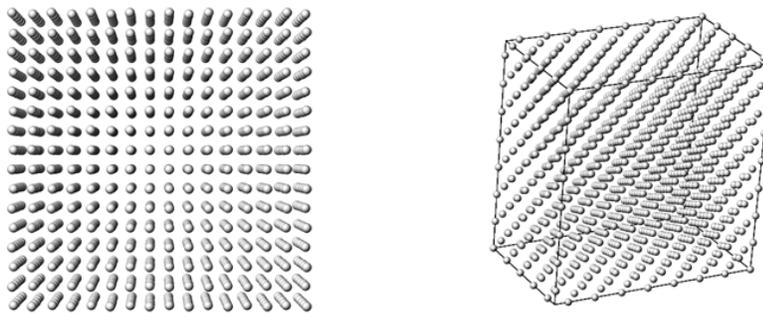
Gambar 4. Grafik  $T-E_T$  untuk perubahan fase padat-cair logam Al

Dari Gambar 4 perubahan fase terjadi antara  $T_1$  dan  $T_2$ . Untuk hasil simulasi terbaik maka seharusnya perubahan hanya terjadi pada satu garis, yaitu pada satu nilai  $T$ . Pada hasil simulasi terdapat dua titik  $T_1$  dan  $T_2$ . Namun bisa diambil pendekatan dengan nilai tengahnya yaitu:

$$T = T_1 - \frac{|T_2 - T_1|}{2} \quad (10)$$

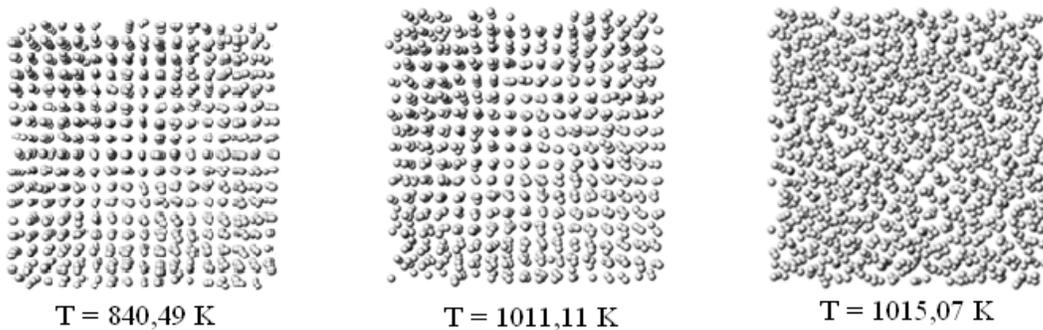
Dari data hasil simulasi dan berdasarkan penafsiran terhadap grafik  $T-E_T$  pada Gambar 4, dan menggunakan pers.(7) maka dapat dihitung temperatur titik lebur logam Al adalah sekitar  $T = 1059,75$  K pada step integrasi ke 78200.

Perubahan fase dari padat menjadi cair dapat digambarkan lebih informatif berdasarkan gambaran struktur mikroskopik material, yaitu dengan melihat posisi atom-atom penyusun material. Pada studi ini material aluminium sebelum diberikan panas yang makin meningkat adalah kristal berstruktur FCC seperti pada Gambar 5 di bawah ini. Konstanta kisi untuk Al dapat dilihat pada file script input. Gambar struktur mikro dikerjakan dengan program code **Jmol** yang dapat diunduh dari website [www.jmol.org](http://www.jmol.org). File yang diplot adalah posisi-posisi 1280 atom Al yang menyusun material untuk berbagai temperatur. File-file koordinat (x,y,z) dapat dilihat pada file dump dengan nama **Al.xyz**).



**Gambar 5.** Konfigurasi awal logam Al struktur kristal FCC untuk simulasi (dengan code vizualisasi Jmol)

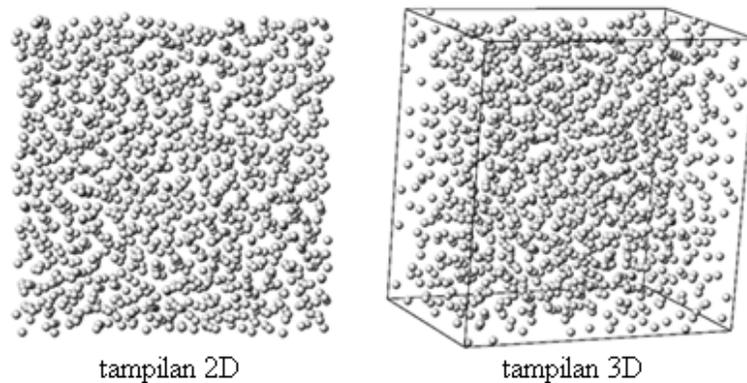
Simulasi dijalankan dan dimulai dari temperatur  $T$  nol absolut pada step ke nol kemudian temperatur dinaikan secara gradual sepanjang simulasi sampai mencapai temperatur 1950,51 K pada step ke 130000. Pada Gambar 6 memperlihatkan hasil simulasi setelah step ke 60000 ( $T = 840,49$  K) struktur aluminium masih belum sepenuhnya mencair, sedangkan pada step ke 70000 ( $T = 1011,11$  K) sudah lebih acak atom-atomnya. Pada step ke 80000 terlihat material Al sudah meleleh seluruhnya.



**Gambar 6.** Gambaran struktur mikro dari Aluminium untuk berbagai temperatur

Dari gambar 6 dapat kita lihat antara  $T = 1011,11$ K dan  $T = 1015,07$  K terjadi perubahan struktur yang dramatis dari cenderung padat ke keadaan fase cair. Oleh karena itu prediksi **temperatur titik lebur dicapai pada  $T = 1059,75$  K** adalah beralasan. Gambar 7 memperlihatkan struktur mikro aluminium pada  $T = 1950,51$  K (pada step 130000) jauh diatas titik lebur. Namun terlihat bahwa struktur mikro bahan Al pada step 130000 mirip dengan struktur bahan pada  $T = 1015,07$  K pada step 80000. Oleh karena itu pada step ke 80000 bahan diprediksi sudah masuk fase

cair, sedangkan titik lebur dimana terjadi perubahan dari padat ke cair diprediksi pada  $T = 1059,75 \text{ K}$ .



Gambar 7. Struktur mikro Aluminium pada  $T = 1950,51 \text{ K}$  pada step 130000

Hasil simulasi sudah dapat di akses pada alamat [lims.unja.ac.id/MolDyn.html](http://lims.unja.ac.id/MolDyn.html).

Simulasi dinamika molekul untuk sistem real dan kompleks adalah kerja komputasi yang sangat berat, sehingga sangat memerlukan fasilitas komputasi yang memadai.

(<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Computers/>). Diperlukan processor yang sangat cepat dan tangguh pada instalasi. Anggaran penelitian sangat diperlukan untuk *upgrading* kemampuan komputasi. Sebelum *upgrading*, simulasi MD dengan potensial sederhana Lennard-Jones hanya untuk 5 jenis atom (FeNiCrPbBi) memerlukan waktu evaluasi sekitar satu minggu untuk studi satu kandidat bahan material (Arkundato *et.al* 2009). Hasil yang dicapai masih dalam rentang terbatas temperatur. Pada penelitian berikutnya seperti yang diajukan dalam proposal ini, menggunakan potensial EAM, maka dengan komputer yang sama yang sudah ada, waktu yang diperlukan jauh lebih lama untuk jumlah jenis atom yang lebih banyak berkaitan dengan komposisi atom. Untuk efektivitas dan akurasi hasil penelitian maka perlu dilakukan *upgrading* pada kemampuan komputer yang sudah ada.

## **BAB 6. RENCANA TAHAPAN BERIKUTNYA**

Rencana yang akan dilakukan pada penelitian berikutnya adalah (1) mengujicobakan hasil simulasi dinamika molekul pada pembelajaran di sekolah (2) mengumpulkan data hasil belajar, (3) mengumpulkan data pendukung lainnya (4) menganalisis data, (5) menentukan seminar yang akan diikuti dan jurnal yang dituju untuk pengiriman artikel dan (6) membuat artikel dari laporan penelitian.

## **BAB 7. KESIMPULAN DAN SARAN**

Studi pengembangan simulasi komputer dan perangkat pembelajarannya telah dilakukan. Penelitian ini baru pada tahap hasil simulasi dinamika molekul yang menghasilkan visualisasi yang sangat baik dan informative serta realtime. Simulasi ini telah menghasilkan simulasi penggambaran perwujudan zat Aluminium. Untuk saran selanjutnya akan dilakukan tahap uji coba produk media pembelajaran sehingga dapat diterapkan dan digunakan dalam pembelajaran fisika. Bahwa penggunaan media pembelajaran ini masih memiliki banyak kekurangan, untuk itu diperlukan saran dan masukan dari para ahli media dan materi guna penyempurnaan produk yang lebih baik.

## DAFTAR PUSTAKA

- Arkundato, A. , Suud, Z., and Abdullah, M. (2010) ‘Corrosion study of Fe in a stagnant liquid Pb by molecular dynamics methods’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1244, pp.136 - 144.
- Arkundato, A. , Suud, Z., Abdullah, M., Widayani, S., and Massimo, C. (2012) ‘[Numerical study: Iron corrosion-esistance in lead-bismuth eutectic coolant by molecular dynamics method](#)’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1448, pp.155.
- Arkundato, A. , Suud, Z., Abdullah, M., Widayani, S. (2012) ‘Computational study: reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1454.
- Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani (2009), Perhitungan Koefisien Difusi Logam Fe Dalam Pb Cair Dengan Metode Dinamika Molekuler: Studi Awal Korosi Dalam Reaktor Cepat, *SPEKTRA:Jurnal Fisika dan Aplikasinya*, Vol. 8, No.2 Desember 2009.
- Ackland, G. J., D’Mellow, K., Daraszewicz, S. L., Hepburn, D. J., Uhrin, M.K., and Stratford (2011) ‘The MOLLY short-range molecular dynamics package’, *Computer Physics Communications*, Vol. 182, pp.2587-2604.
- Belonoshko, A.B. (1998) ‘Melting of corundum using conventional and two-phase molecular dynamic simulation method’, *Phys Chem Minerals*, Vol. 25, pp. 138-141.
- Brodholt, J. and Wood, B. (1993) ‘Molecular dynamics simulations of the properties of CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O mixtures at high pressures and temperatures’, *American Mineralogist*, Vol. 78, pp. 558-564.
- Lemmon, E.W. and Jacobsen, R.T. (2004) ‘Viscosity and thermal conductivity equations for nitrogen, oxygen, argon and air’, *International Journal of Thermophysics*, Vol. 25(1), pp.21 - 69.

Embedded atom model. [http://en.wikipedia.org/wiki/Embedded\\_atom\\_model](http://en.wikipedia.org/wiki/Embedded_atom_model) di akses 7 Juli 2012

Interatomic Potentials Repository Project, <http://www.ctcms.nist.gov/> Di akses 7 Juli 2012

Plimpton,S. (1995) *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*, J Comp Phys, 117, 1-

Laboratory for Materials Modeling and Simulations, <http://cms.sjtu.edu.cn/...>  
Diakses 7 Juli 2012

## Lampiran 2. Personalia Tenaga Peneliti beserta Kualifikasinya

### Ketua Peneliti

#### A. Identitas Diri

1.	Nama Lengkap	Heni Safitri,S.Pd.,M.Si.
2.	Jenis Kelamin	Perempuan
3.	Jabatan Fungsional	Lektor
4.	NIP/NIK	197703102002122002
5.	NIDN	0010037706
6.	Tempat & Tanggal Lahir	Jakarta, 10 Maret 1977
7.	E-mail	henip@ut.ac.id
8.	Nomor Telepon/HP	081908082432
9.	Alamat Kantor	Program Studi Pendidikan Fisika Jurusan PMIPA FKIP-UT Jl.Cabe Raya Pondok Cabe Tangerang Selatan
10.	Nomor Telepon/Faks	021-7434590
11.	Mata Kuliah Yang Diampu	1. Fisika Kuantum 2. Gelombang 3. Praktikum Fisika 4. Teori Relativitas 5. Pembelajaran Fisika

#### B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2
Nama PT	Universitas Negeri Jakarta	Universitas Indonesia
Bidang Ilmu	Pendidikan Fisika	Ilmu Fisika
Tahun Masuk- Lulus	1996-2002	2008-2010
Judul	Peningkatan Temperatur Air	Pergeseran Fase Hamburan

Skripsi/Tesis	dengan menggunakan Kolektor Pelat Datar	Kaon Nukleon
Nama Pembimbing	Satwiko Sidopekso, Ph.D	Dr.rer.nat. Agus Salam, M.Si

### C. Pengalaman Penelitian

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jml (Juta Rp)
1.	2010	Analisis Bahan Ajar Praktikum Fisika	UT	30
2.	2011	Analisis Bahan Ajar Evaluasi Pembelajaran Fisika	UT	20
3	2012	Pengaruh Pemanfaatan Media Sederhana terhadap Hasil Belajar Sains	UT	20

### D. Pengalaman Pengabdian kepada Masyarakat

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jml (Juta Rp)
1.	2011	Pemanfaatan Alat Peraga IPA dalam Pembelajaran	UT	
2.	2012	Pemanfaatan Lingkungan Sekitar dalam Pembelajaran Sains dalam kegiatan Profesional Development School di Pulau Pramuka 29-30 Juni 2012	UT	

### E. Publikasi Artikel Ilmiah dalam Jurnal

No	Judul Artikel Ilmiah	Nama	Volume/Nomor/Tahun
----	----------------------	------	--------------------

		<b>Jurnal</b>	
1.	Persepsi Siswa Terhadap Pemanfaatan Laboratorium Virtual dalam Pembelajaran Fisika Topik Gerak Lurus	Jurnal Pendidikan UT	Vol. 12, No. 2, September 2011, ISSN: 1411-1942, 8 halaman

#### **F. Pemakalah Seminar Ilmiah**

<b>No</b>	<b>Nama Pertemuan Ilmiah/Seminar</b>	<b>Judul Artikel</b>	<b>Waktu dan Tempat</b>
1.	Seminar Internasional Fisika Kentingan	Phase Shift of Kaon-Nucleon Scattering with Separable Interaction	14 Juli 2010, UNS Solo
2.	International Conference ICDE	The Use Open Educational Resources (OERs) to support the Quality of Learning Teachers: Case Study of Universitas Terbuka	2-5 Oktober 2011 Nusa Dua Bali
3	Simposium Nasional Inovasi Pembelajaran Dan Sains (SNIPS)		7-8 Juni 2012, ITB Bandung
4	Seminar Nasional Fisika Terapan III	Pemanfaatan Pembelajaran Berbasis Web dalam Fisika	15 September 2012 UNAIR Surabaya

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenar-benarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Pekerti

Tangerang Selatan, 11 Maret 2013

Pengusul,

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Heni Safitri', written in a cursive style.

Heni Safitri, S.Pd.,M.Si.

## Anggota Peneliti (1)

### A. Identitas Diri

1	Nama Lengkap	Herawati, S.Pd, M.Si
2	Jenis Kelamin	Perempuan
3	Jabatan Fungsional	Lektor
4	NIP/NIK	197712092002122001
5	NIDN	0009127709
6	Tempat & Tanggal Lahir	Jakarta, 9 Desember 1977
7	E-mail	hera@ut.ac.id
8	Nomor Telepon/HP	085697906968
9	Alamat Kantor	Jl. Cabe Raya, Pamulang, Tangerang Selatan
10	Nomor Telepon/Faks	021 7490941
11	Mata Kuliah Yang Diampu	1. Pengantar Fisika Statistik 2. Fisika Statistik 3. Mekanika 4. Pembelajaran Fisika 5. Praktikum

### B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2
Nama PT	Universitas Negeri Jakarta	Institut Teknologi Bandung
Bidang Ilmu	Pendidikan Fisika	Fisika
Tahun Masuk-Lulus	1996-2002	2009-2012
Judul Skripsi/Tesis	Penggunaan IC LM335 untuk mengukur kelembaban udara	Analisis Termalhidrolik dan Sirkulasi Alamiah pada Reaktor

		IRIS
Nama Pembimbing	Sadwiko Sidopekso, Ph.D.	Prof. Dr. Zaki Su'ud

### C. Pengalaman Penelitian Dalam Lima Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jml (Juta Rp)
1.	2009	Pengaruh Penggunaan Laboratorium Virtual Fisika Terhadap Hasil Belajar Dan Keterampilan Psikomotorik Siswa Dengan Topik Gerak Lurus	UT	10
2.	2012	Analisis pola interaksi mahasiswa dalam pembelajaran online fisika	UT	20

### D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (juta Rp)
1	Tahun 2011		Universitas Terbuka	

### E. Publikasi Artikel Ilmiah dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/ Nomor/Tahun
1	Persepsi Siswa Terhadap Pemanfaatan Laboratorium Virtual dalam Pembelajaran Fisika Topik Gerak	Jurnal LPPM UT	Vol. 12, No. 2, September

	Lurus		2011, ISSN: 1411-1942, 8 halaman
--	-------	--	--

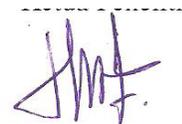
**F. Pemakalah Seminar (Oral Presentation) dalam 5 Tahun terakhir**

No.	Nama Pertemuan Ilmiah/ Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	Simposium Nasional Inovasi Pembelajaran Dan Sains (SNIPS)	“Pengembangan Computer Assisted Instruction (CAI) Interaktif Dalam Pembelajaran Fisika”	ITB, 7-8 Juni 2012, Bandung, Indonesia
2	Seminar Nasional Fisika Terapan III (SNAFT-III-2012),	“Pengembangan Program Dry Lab Dalam Pembelajaran Fisika Sebagai Media Pembelajaran Jarak Jauh”	UNAIR, 15 September 2012

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenar-benarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Pekerti

Anggota Peneliti,



Herawati, S.Pd, M.Si  
NIP. 19771209 2002122001



## Anggota Peneliti (2)

### A. Identitas Diri

1.	Nama Lengkap	Dra. Widiasih, M.Pd.
2.	Jenis Kelamin	Perempuan
3.	Jabatan Fungsional	Lektor
4.	NIP/NIK	196603131991032001
5.	NIDN	00122016516
6.	Tempat & Tanggal Lahir	Kebumen, 13 Maret 1966
7.	E-mail	widiasih@ut.ac.id
8.	Nomor Telepon/HP	08161874206
9.	Alamat Kantor	Jl. Cabe Raya, Pamulang, Tangerang Selatan
10.	Nomor Telepon/Faks	021 7490941 ext 2025
11.	Lulusan yang telah dihasilkan	S-1
12.	Mata Kuliah Yang Diampu	1. Pembelajaran Fisika
		2. Fisika Dasar
		3. Fisika Terapan
		4. Praktikum Fisika

### B. Riwayat Pendidikan

	S-1	S-2
Nama PT	Universitas Negeri Jakarta	IKIP Negeri Bandung
Bidang Ilmu	Pendidikan Fisika	Pendidikan IPA
Tahun Masuk-Lulus	1985-1990	1995-1997
Judul Skripsi/Tesis	Perbandingan hasil belajar antara siswa yang mengembangkan ringkasan materi dengan yang tidak mengembangkan ringkasan materi	Pemanfaatan Peralatan IPA dari Lingkungan Sekitar sebagai Sumber Belajar IPA

Nama Pembimbing	Drs. D.L.Tobing	Drs. Edy Hidayat, Ph.D
-----------------	-----------------	------------------------

### C. Pengalaman Penelitian Dalam Lima Tahun Terakhir

No	Tahun	Judul Penelitian	Pendanaan	
			Sumber	Jml (Juta Rp)
1	2008	Evaluasi Terhadap Materi Inisiasi Dan Pelaksanaan Tutorial Online Tugas Akhir Program (TAP) (sebagai anggota)	UT	10
2	2009	Evaluasi Terhadap Kualitas Latihan Mandiri Online Universitas Terbuka (sebagai Ketua)	UT	20
3	2010	Kajian Terhadap Bahan Ajar PEFI4424 Biofisika Ditinjau Dari Perkembangan Iptek (sebagai ketua)	UT	20
4	2010	Kajian Terhadap Substansi & Media Pefi4309 Praktikum Fisika 1 (sebagai anggota)	UT	20
5	2011	Kajian terhadap substansi BA PEFI4201 Strategi Pembelajaran Fisika ditinjau dari BA SBJJ dan kebermanfaatannya bagi mahasiswa dalam mengajar (sebagai ketua)	UT	20
6	2011	Evaluasi Keterlaksanaan Kebijakan Baru Tentang Entry Nilai Pemantapan Kemampuan Profesional (PKP) Program Pendas di UPBJJ (sebagai ketua)	UT	20
7	2012	Peningkatan Angka Partisipasi Mahasiswa Pendidikan Fisika Aktif Melalui Pemberian Model Layanan Terpadu (sebagai ketua)	UT	30
8	2012	Pengembangan Model Pembimbingan PKP dalam Rangka	UT	30

		Meningkatkan Profesionalisme Guru Program Nonpendas FKIP-UT (sebagai anggota)		
--	--	---	--	--

#### D. Pengalaman Pengabdian Kepada Masyarakat dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Tahun	Judul Pengabdian Kepada Masyarakat	Pendanaan	
			Sumber*	Jml (juta Rp)
1	2011	Pemanfaatan Alat Peraga Matematika dan Kit Sains untuk Mengkonstruksi Pengetahuan Siswa SD terhadap Matematika dan Sains	Universitas Terbuka	--
2	2012	Pemanfaatan Lingkungan sebagai Sumber Belajar	Universitas Terbuka	--

#### Publikasi Artikel Ilmiah dalam 5 Tahun Terakhir

No.	Judul Artikel Ilmiah	Nama Jurnal	Volume/ Nomor/Tahun
	----		

#### F. Pemakalah Seminar (Oral Presentation) dalam 5 Tahun terakhir

No.	Nama Pertemuan Ilmiah/ Seminar	Judul Artikel Ilmiah	Waktu dan Tempat
1	Yusintec	Strengthening Institutional Capacity in Elementary Teacher Education. Makalah yang diseminarkan dalam Usintec	2008, UNES Semarang

		Internasional Workshop. (Tahun 2008)	
2	Temu Ilmiah Guru IV	Pembelajaran Fisika tentang Gelombang dan Bunyi dengan Memanfaatkan Budaya Lokal sebagai Salah Satu Upaya Pembentukan Karakter Peserta Didik	2012, Universitas Terbuka, Jakarta

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenar-benarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Pekerti

Anggota Peneliti,

Dra. Wideasih, M.Pd.

NIP. 196603131991032001

## **KETUA TPM**

### **A. Identitas Diri**

**Nama** : Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si.  
**Tempat/tanggal Lahir** : Blitar, 25 Desember 1969  
**Agama** : Islam  
**Pekerjaan** : PNS/Dosen Fisika  
**NIP** : 196912251999031001  
**NIDN** : 0025126901  
**Jabatan** : Lektor/IIIC  
**Institusi/Instansi** : Jurusan Fisika  
Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam  
Universitas Jember  
**Alamat Kantor** : FMIPA UNEJ : Jl. Kalimantan III/25 Jember (68121)  
Jawa Timur  
Telp. 0331 334293, Fax. 0331 330225  
UPT-TI UNEJ : Jl. Kalimanta 37 Jember  
**Alamat Rumah** : Perumnas Patrang  
Jl. Mundu I/7 Patrang Jember (68111) Jawa Timur  
HP. 081220688963  
**Email** : (1) [a.arkundato@gmail.com](mailto:a.arkundato@gmail.com)  
(2) a\_arkundato@uj.ac.id

---

### **A. PENDIDIKAN**

<b>S1</b>	Sarjana Fisika FMIPA UGM, Yogyakarta (1995)	
	Judul Skripsi	Aspek Klasik dan Kuantum Optika Nonlinear

	Bidang Kajian	Fisika
	Pembimbing	Prof. Muslim, PhD

<b>S2</b>	Magister Fisika FMIPA ITB Bandung (2003)	
	Judul Thesis	Perhitungan Mikroskopik Group-Constant Nuklir dengan Metode Brueckner Hartree-Fock
	Bidang Kajian	Fisika Komputasi
	Pembimbing	Prof. Dr. Zaki Suud

<b>S3</b>	Program Doktor Fisika FMIPA ITB Bandung (2008 – 2012)	
	Judul Disertasi	Studi Korosi Dalam Reaktor Cepat Berpendingin Logam Cair Menggunakan Metode Simulasi Dinamika Molekul
	Bidang Kajian	Komputasi Material
	Pembimbing	Prof. Dr. Zaki Suud, Prof. Dr. Mikrajuddin Abdullah, Dr. Widayani Sutrisno

## B. WORKSHOP/TRAINING

DALAM NEGERI			
1	Oktober 2001	<i>Workshop on Physics and Kinetics of Rector</i>	BATAN, Bandung
2	April 2002	<i>TOEFL Training</i> , Language Center	ITB
3	Desember 2003	<i>Workshop on "Learning Methods in Higher Education"</i>	Universitas Jember
4	Januari 2004	<i>International Short Course on "Molecular Dynamics and Quantum"</i>	Teknik Fisika, ITB

		<i>Chemistry</i>	
5	Juni 2004	<i>Short Course on “ Computational Physics And Chemistry, The Installation and Usage of Debian GNU-Linux. Diberikan oleh Dr. Sudarko</i>	Fisika FMIPA Universitas Jember
6	Februari 2005	<i>Laboratory Management Training</i>	Universitas Jember
7	September 2005	<i>Workshop on “Computational Science 2k5</i>	FMIPAUGM
8	Desember 2005	<i>Workshop on “ Developing Curriculum, Syllabi, Instructional Design and Handout on Hypermedia Models for Assignment Activity</i>	SAC, Universitas Jember
9	2006	<i>Workshop ANSN (Asean Nuclear Safety Network)</i>	BAPETEN, Surabaya
10	Mei 2006	<i>Pelatihan Calon Reviewer Buku Ajar SD-SMP, BSNP-PusBuk</i>	Safari GardenBogor
11	Agustus 2009	<i>The Asia Computational Materials Design (Asia CMD) Workshop</i>	Teknik Fisika, ITB
12	Desember 2009	<i>Workshop on High Performance Computing (HPC)</i>	Fisika, FMIPA, UNPAD, Bandung
13	21-24 Juni 2010	<i>Workshop PEKERTI (Pelatihan Ketrampilan Dasar Teknik Instruksional)</i>	LP3 Univ. Jember
14	7&14 Mei 2011	<i>Pelatihan Pemrograman Mikrokontroler AVR dengan code Vision AVR</i>	PPI, Gd. Dapensos, Bandung Ir. Mairodi, MT

15	20-21 Mei 2011	<i>Pelatihan Mikrokontroler AT89S52</i> <i>Prof. Dr. Khairurijal</i>	Lab. Elektronika dan Instrumentasi, Fisika, ITB
16	18 Nov 2011	<i>Pelatihan Penulisan Karya Tulis Ilmiah.</i> Diberikan oleh Prof.Mikrajuddin, Dr. Sparisoma V, Dr. Ferry Iskandar	HFI Ketu: Dr. Bambang Widiyatmoko

#### LUAR NEGERI

1	November 1997	<i>Basic Training Curriculum of Automation Specialist, Siemens Component Inc.</i>	Franklin, Kentucky, USA
2	Juli 2006	<i>Workshop on Electronics Structure Methods and Their Applications</i>	JNCASR, Bangalore, India
3	Sept-Des 2010	Program Sandwich Dikti: <i>Advanced Molecular Dynamics</i>	ENEA, CR, Cassacia, Roma, Italy

#### C. SEMINAR/SIMPOSIUM/CONFERENCES

##### NASIONAL

1	Agustus 2003	Lutfi R, I. Sugiharto, Budi K, <b>A. Arkundato</b> , <i>Study of Ferromagnetic Material Characteristic By Heisenberg Spin1/2 1D Model Employing Bethe I Ansatz</i>	<i>Seminar Nasional Bahan Magnet</i> FMIPA, Fisika, Univ. Indonesia
2	Maret 2009	Partisipan, <i>Pengembangan Kebijakan,</i>	Aula Barat, ITB

		<i>Manajemen dan Teknologi di Bidang Energi dan Lingkungan: Sarasehan Nasional Mencari Solusi Untuk Bangsa</i>	
3	06 Oktober 2011	Seminar Nasional Program Sandwich-Like Prof. Dr. Supriadi Rustam	Dir Pendidik dan Tenaga Kependidikan Kemendiknas

<b>INTERNASIONAL</b>			
1	Februari 2001	Participant: <i>International Symposium on Modern Optics and Applications</i>	Fisika, ITB
2	Nov 2007	Participant: <i>National Seminar on Non-equilibrium Statistical Mechanics</i>	INSA, New Delhi, India
3	22-23 Juli 2009	Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, <i>Corrosion Study of Fe in Lead-Bismuth Eutectic: Self-Diffusion Calculation by Molecular Dynamics Methods</i>	Dalam 3 <sup>rd</sup> APS 2009 International Conference, ITB, Bandung
4	3-4 Oktober 2009	Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, <i>Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb by Molecular Dynamics Methods</i>	Dalam 2 <sup>nd</sup> ICANSE 2009 Intl Conference, Grand Aquila, Bandung
5	2-5 Oktober 2011	<b>Artoto Arkundato, Paken Pandiangan, Application of Visual Basic Application Program (VBAP) for an Interactive in Open and Distance Learning (IODL)</b>	24th ICDE World Conference, Westin, Nusa Dua, Denpasar, Bali, 2011
6	10-11 Nov 2011	Artoto Arkundato, Zaki Suud, Widayani, <i>Computational Study: Reduction of Iron Corrosion in Lead</i>	Dalam ICPAP 2011 International Conference, ITB,

		<i>Coolant of Fast Nuclear Reactor</i>	Bandung
7	14-17 Nov 2011	Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino, <i>Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method</i>	Dalam 3 <sup>rd</sup> ICANSE 2011 Intl Conference, Hotel Aston, Denpasar, Bali

## E. PENELITIAN

1	2001	<i>Synthesis And Critical Current Density of NBCO Superconductor</i>	Ketua, Dana RUTIN, Universitas Jember
2	2006	<i>Studi Eksperimen dan Simulasi Gerak Bola Dalam Permainan Bola Basket</i>	Ketua, BBI, Dana DP2M
3	2007- 2008	<i>Pembuatan Membran Komposit Berbasis Kitosan Untuk DMFC Fuel Cell</i>	Anggota, Dana RISTEK KMRT
4	2008- 2010	<i>Perancangan Patient Care Technology Systems (PCTS) Untuk Peningkatan Mutu Pelayanan Pasien Pada Rumah Sakit</i>	Anggota, Dana RISTEK, KMRT
5	2008- 2009	<i>Rancang-Bangun Tensiometer Terkomputerisasi untuk Tegangan Interfasial dan Sudut Kontak Liquid-liquid/solid Menurut Model ADSA</i>	Ketua, Hibah Bersaing Dana DP2M
6	2009- 2010	<i>Desain Dan Pengembangan CAR (Computerized Advanced-Reactometer):Integrasi Metode Spektroskopi Optik dan SFT (Stopped</i>	Anggota, Dana Hibah Bersaing, DP2M, DIKTI

		<i>Flow Technique) Untuk Aplikasi Pengukuran Reaksi Kimia Cepat (Fast Reaction)</i>	
--	--	---	--

## F. JURNAL ILMIAH

### F1. Nasional

- (a) Lutfi R, I. Sugiharto, Budi K, **A. Arkundato**, *Study of Ferromagnetic Material Characteristic By Heisenberg Spin $1/2$  1D Model Employing Bethe I Ansatz*, IJMS, Vol. 5, No.1., October, 2003
- (b) Artoto Arkundato, *Numerical Calculation of (n,C) Elastic Scattering Cross-Section by Brueckner Hartree-Fock Method*, JID, Vol5., No.1., 2004
- (c) P. Pandiangan, Suhartono, A. Arkundato, *Numerical Calculation of Differential Cross-Section (e,Ar) of 10.4 eV by Partial Wave Methods*, JMST, Vol.6., September, 2004
- (d) P. Pandiangan, Artoto Arkundato, *Solusi Persamaan Schrodinger Osilator Harmonik dalam Ruang Momentum*, JMST, Vol6 No.1, Maret, 2005
- (e) P. Pandiangan, Supriyadi, A. Arkundato, *Finite element Method for Solution of Hydrogenic Atom Schrodinger Equation*, JMST, Vol.7. No.1., Maret 2006
- (f) Artoto Arkundato, Zaki uud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, *Perhitungan Koefisien Difusi Logam Fe Dalam Pb Cair Dengan Metode Dinamika Molekuler: Studi Awal Korosi Dalam Reaktor Cepat*, SPEKTRA: jurnal Fisika dan Aplikainya, volume VIII, No.2 Desember 2009  
ISSN: 1411-8823

### F2. Internasional

- a. Artoto Arkundato et al., *Si-xC1-xO2 Alloys: A Possible Route to Stabilize Carbon-Base Silica-Like Solids*, *Solid State Communication*, 144,(2007) 273-276, Elsevier

- b. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method. Diterima untuk diterbitkan di *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, Vol.3 No.1, 2013.
- c. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani Sutrisno, Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic. *Turkish Journal of Physics*, DOI: 10.3906/fiz-1112-12.
- d. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah (2010), Corrosion Study of Fe in a Stagnant Liquid Pb By Molecular Dynamics Methods, *AIP Conference Proc.*, Vol.1244, pp. 136-144.
- e. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, (2012), Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor, *AIP Conference Proc.*, Vol.1454, pp. 65.
- f. Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani, Massimo Celino (2012), Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method, *AIP Conf. Proc.*, Vol. 1448.

**G. PENGABDIAN MASYARAKAT**

- 1. 2000, Pelatihan Fisika di SMA Genteng Banyuwangi
- 2. 2005, Pelatihan Guru-Guru SMA Jenggawah, Jember

**H. PEMROGRAMAN/SOFTWARE**

1	Pemrograman C, C++
2	Pemrograman Fortran
3	Pemrograman Basic/TBasic

4	Pemrograman Delphi
5	Visual Basic Application (VBA)
6	Linux Os
7	Dinamika Molekuler dgn code: MOLDY, LAMMPS, ISSACS, Packmol, Jmol, VMD, Rasmol, Stick&Ball
8	Windows Movie Maker
9	GNUPLOT
10	GIMP

## I. LAIN-LAIN

1. 14-17 November 2011, Organizing Comete in The 3rd International Conference on Advances In Nuclear Sciences and Engineering (ICANSE) 2011, Hotel Aston, Denpasar, Bali, Indonesia.
2. 03-04 Oktober 2009, Organizing Comete in The 2rd International Conference on Advances In Nuclear Sciences and Engineering (ICANSE) 2009, Hotel Grant Aquilla, Bandung, Indonesia
3. Ketua Revenue Generating (RG), Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember, 2005 – 2006
4. Ketua Lab. Fisika Modern dan Optoelektronika, Fisika, MIPA, Universitas Jember, 2003-2006

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenar-benarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Pekerti

Tangerang Selatan, 11 Maret 2013

Ketua TPM,

A handwritten signature in purple ink, appearing to be 'A. Arkundato', written over a light blue grid background.

Dr. Artoto Arkundato,M.Si.

## ANGGOTA TPM

### Personal Information

Name : Sudarko  
NIDN : 0012036905  
NIP : 196903121992031002  
Place of Birth : Blitar  
Date of Birth : 12 March 1969  
Occupation : Lecturer/Chemistry  
Employer : Faculty of Sciences and Mathematics (FMIPA)  
The University of Jember

Field of interest : Computational Chemistry  
Additional Job : Head of UPT-Teknologi Informasi, Jember University  
Home/Mailing : Jl. Bangka IV/32  
Address : Jember 68121  
Business Address : Faculty of Sciences and Mathematics  
The University of Jember  
Jl. Kalimantan 37  
Jember 68121

Home Phone : +62 331 330592  
Mobile Phone : +62 81332800892  
Business Fax : +62 331 330225  
Email Address : [sudarko@gmail.com](mailto:sudarko@gmail.com), darko@unej.ac.id  
Language : Indonesian and English  
Computer Programming language : Fortran, c, PHP, perl, sed, awk, bash script, javascript

### Educational Background

No	Degree	University	Year	Research Project	Sponsor
1.	Under-graduate	IKIP Malang	1986-1991	Studi pembuatan alkohol dari ubi jalar	-
2.	Master (Preliminary)	The University of Sydney, Australia	1995-1996	Simulation of Polymerization of Methyl-Methacrylate	AUSAID (Australian Gov.)
3.	Master Leading to PhD	The University of Newcastle, Australia	1996-2000	Computational Chemistry (Infrared Spectroscopy of Triatomic Helides)	AUSAID (Australian Gov.)
7.	Post-Doctoral	EML Research, Heidelberg	July – December 2003	Random Expulsion Molecular Dynamics (REMD) – Protein Modelling	DAAD
8.	Post-Doctoral	University Paris 12	April 2008- April 2009	Computational Chemistry (Infrared Spectroscopy of Triatomic H <sub>2</sub> F <sup>+</sup> )	Digiteo

### Short Course/Training Program

No	Place	Training Project	Year	Sponsor
1.	ITB Bandung	Basic Sciences Bridging Program and English Course	Nov. 1993 – Dec. 1994	IAPUDP (Australian Gov)
2.	Yogyakarta	University Strategic Planning	2002	TPSDP

3.	Padang	Academic Planning	2002	TPSDP
4.	Heidelberg, Germany	Methods of Molecular Simulations '03 at Interdisciplinary Center for Scientific Computing (IWR)	2003	-

### Management and IT Capability

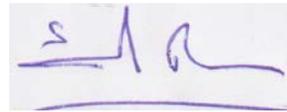
No	Institution	Activity/Position	Year
1.	The University of Newcastle	Unix Administrator for the LAMS Group	1998 - 2000
2.	The University of Jember	Team Leader for University INTRANET installation	Jan 2001- July 2001
3.	The University of Jember	Member of University Quality Assurance Team Q (Tim Q)	June 2001 – June 2002
4.	University of Jember	Director of Sub Project Management Unit TPSDP	October 2002 – August 2005
5.	FMIPA UNEJ	Tim Leader for the development of management information system of the faculty of MIPA UNEJ	2004-2006
6.	JOSSCenter (IGOS Center Jember)	Team Leader/ Decalrator of “ Jember Go Open Source”	2007 – present
7	PTPN X Persero	Team Leader for the Development of Management Information System for Sugar Plantation	November 2009 – Present

Semua data yang saya isikan dan tercantum dalam biodata ini adalah benar dan dapat dipertanggungjawabkan secara hukum. Apabila dikemudian hari ternyata dijumpai ketidaksesuaian dengan kenyataan, saya sanggup menerima sanksi.

Demikian biodata ini saya buat dengan sebenar-benarnya untuk memenuhi salah satu persyaratan dalam pengajuan Hibah Pekerti

Jember, 9 Maret 2013

Anggota TPM,

A handwritten signature in blue ink, appearing to be 'Sudarko', written on a light-colored background.

Drs.Sudarko,Ph.D.

## Aplikasi Metode Dinamika Molekul Kode LAMMPS untuk Studi Titik Leleh dan Perubahan Wujud Zat

Widiasih<sup>1</sup>, Herawati<sup>2</sup>, Heni Safitri<sup>3</sup>, Artoto Arkundato<sup>4</sup>

<sup>1,2,3</sup>Institusi: Pendidikan Fisika, Jurusan Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan, Universitas Terbuka

<sup>4</sup>Jurusan Fisika, FMIPA, Universitas Jember

Email: (1) widiasih@ut.ac.id, (2) hera@ut.ac.id, (3) henip@ut.ac.id, (4) a.arkundato@gmail.com/a\_arkundato@uj.ac.id

### Abstrak

Simulasi dinamika molekuler adalah salah metode komputasi material yang handal untuk memprediksi sifat-sifat fisis termodinamik padatan, cairan dan gas. Dengan metode dinamika molekuler gerak atom-atom dan hasil perubahan wujud zat dapat dipelajari dan divisualisasikan dengan sangat baik dan informatif karena mampu menggambarkan susunan atom-atom bahan selama proses perubahan wujud berlangsung, dimana hal ini susil diamati secara eksperimen. Penelitian ini bertujuan untuk menggambarkan aplikasi metode dinamika molekuler pada studi perubahan wujud zat. Untuk mengamati adanya perubahan wujud zat, simulasi dijalankan dan dimulai dari temperatur  $T$  nol absolut pada step ke nol kemudian temperatur dinaikan secara gradual sepanjang simulasi sampai mencapai temperatur 1950,51 K pada step ke 130000. Perubahan wujud dari padat ke cair yang tidak lain adalah berkaitan dengan temperatur leleh bahan, dapat diamati dengan melihat adanya perubahan yang tajam pada kurva Temperatur-Energi Total. Dari hasil simulasi dengan program MD Lammmps setelah step ke 60000 ( $T= 840,49$  K) memperlihatkan bahwa dengan bantuan program Jmol untuk analisis struktur bahan diketahui bahwa struktur aluminium masih belum sepenuhnya mencair, sedangkan pada step ke 70000 ( $T = 1011,11$  K) sudah lebih acak atom-atomnya yang memperlihatkan kecenderungan sifat-sifat struktur cair. Oleh karena itu temperatur titik lebur logam Al pada penelitian ini diprediksi pada nilai sekitar  $T = 1059,75$  K pada step integrasi ke 78200. Selanjutnya metode dinamika selain dapat digunakan untuk menghitung titik leleh bahan, metode ini mempunyai kelebihan dapat digunakan untuk membantu dalam proses belajar-mengajar Fisika di kelas karena hasil simulasi dapat divisualisasikan dengan sangat baik dan informative serta *realtime*.

**Kata Kunci:** Metode Dinamika Molekul, Perubahan Wujud Zat, Titik Leleh Bahan, LAMMPS, Jmol.

## PENDAHULUAN

Metode dinamika molekul merupakan salah satu metode komputasi dalam fisika yang populer untuk mensimulasikan gerak partikel, atom, molekul sampai untuk obyek berukuran besar seperti planet dalam galaksi. Dengan metode dinamika molekul gerak atom-atom bahan jika mengalami pengaruh dari luar seperti pemanasan, dapat amati dengan mudah. Secara ringkas metode simulasi dinamika molekul ini memerlukan informasi posisi-posisi (koordinat) awal partikel, atom atau obyek penyusun sistem sebelum simulasi, kondisi lingkungan yang akan disimulasikan (temperatur, tekanan, rapat partikel, dan lain-lain), fungsi potensial untuk interaksi antar partikel, atom, molekul atau obyek yang akan disimulasikan dan spesifikasi obyek yang disimulasikan (massa, muatan, jumlah atom, dan lain-lain). Pada dasarnya dinamika molekul memerlukan informasi yang akurat untuk fungsi potensial interaksi tersebut. Semakin akurat fungsi potensial yang menggambarkan interaksi antar partikel, atom dan molekul maka semakin akurat hasil simulasi yang kita dapatkan. Di lain pihak, metode dinamika molekul sebenarnya berangkat dari pemikiran menyelesaikan persamaan gerak Newton kedua ( $\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}$ ) untuk sistem dinamik yang dievaluasi dengan syarat awal yang diketahui, dengan gaya interaksi dapat diperoleh dari diferensial negatif fungsi potensial. Solusi persamaan gerak Newton ini dapat digunakan mengetahui *trayektori* sistem yaitu kumpulan koordinat partikel/atom/molekul yang membentuk lintasan gerak sepanjang waktu. Dengan demikian metode dinamika molekul secara prinsip dapat diterapkan untuk sistem yang sangat kecil (mikroskopis atomistik) sampai untuk sistem sangat besar seperti gerak planet. Berdasarkan informasi trayektori sistem dan teori fisika statistik selanjutnya dapat diprediksi besaran-besaran termodinamik sistem seperti temperatur akhir, tekanan akhir, energi total, enthalpi sistem dan sebagainya. Tulisan ini memaparkan bagaimana metode dinamika molekul diterapkan untuk merancang model pembelajaran interaktif untuk mata pelajaran fisika khususnya mengenai

konsep fisika perubahan wujud zat dengan besaran fisis titik leleh (*melting point*). Kelebihan dari model ini gambaran mikroskopik struktur bahan selama proses perubahan wujud zat, pergerakan atom-atom selama proses pelelehan dapat dianalisis dan diperagakan secara visual.

## KAJIAN PUSTAKA

### Persamaan Gerak dan Fungsi Potensial

Gerak partikel klasik dapat diprediksi evolusi gerakanya berdasarkan hukum gerak Newton yang kedua yang sangat terkenal yaitu,

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i \quad (1)$$

dengan  $\vec{F}_i$  adalah gaya total yang bekerja pada partikel ke  $i$ . Untuk sistem yang konservatif, gaya total tersebut dapat diturunkan dari fungsi potensial  $U$ ,

$$\vec{F}_i = - \frac{\partial U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \vec{r}_N)}{\partial \vec{r}_i} \quad (2)$$

Potensial antar-atom (*interatomic potential*)  $U(r)$  seperti telah disampaikan diatas adalah hal yang krusial untuk simulasi dinamika molekul. Problem fisis dengan demikian telah disederhanakan dengan hanya mencari rumusan yang tepat untuk *fungsi energi potensial* tersebut sebagai fungsi dari hanya koordinat-koordinat atom. Pada umumnya potensial untuk sistem material adalah rumit sehingga persamaan gerak Newton perlu dipecahkan secara numerik. Salah satu fungsi potensial yang sangat terkenal yang sering digunakan adalah *potensial Lennard-Jonnes* yang dapat dikonversi menjadi gaya berbentuk [1,2,3,4,5,6,7,8].

$$\vec{f}_i^L = \frac{4}{\sigma^2} \varepsilon \sum_{j \neq i} (\vec{r}_i - \vec{r}_j) \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (3)$$

Pada persamaan tersebut  $r$  adalah jarak antar partikel/atom/molekul ke  $i$  dan  $j$ ,  $\sigma$  adalah parameter potensial untuk jarak, dan  $\epsilon$  adalah parameter potensial untuk energi.

Metode dinamika molekuler dapat juga diterapkan untuk sistem logam, yaitu mendemonstrasikan adanya perubahan wujud (fase) zat dari padatan logam menjadi cairan, dan memprediksi titik leleh (lebur) logam. Logam yang diteliti adalah logam Aluminium (Al). Untuk menggambarkan interaksi antar atom-atom logam, digunakan fungsi potensial EAM (*embedded atomic methods*). Fungsi potensial ini merupakan energi potensial yang diformulasikan cocok untuk logam [9] yang berbentuk,

$$U_i = F_\alpha \left( \sum_{i \neq j} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_\alpha(r_{ij}) \quad (4)$$

Dengan  $r_{ij}$  adalah jarak antaran atom ke  $i$  dan  $j$ ,  $\phi_{\alpha\beta}$  adalah fungsi potensial pasangan,  $\rho_\beta$  adalah kontribusi untuk rapat muatan elektron dari atom  $j$  tipe  $\beta$  pada lokasi atom  $i$ , dan  $F$  adalah fungsi (embedding) yang menggambarkan energi yang diperlukan untuk menempatkan atom  $i$  tipe  $\alpha$  ke dalam awan elektron. Untuk menyederhanakan masalah, maka perhitungan hanya diperhitungkan untuk radius tertentu dari sekian banyak atom dan elektron yang ada. Untuk sistem dari satu jenis elemen, seperti yang dilakukan pada penelitian ini, maka ada tiga fungsi scalar yang harus ditentukan: Fungsi interaksi pasangan, fungsi embedding dan fungsi kontribusi awan elektron. Untuk sistem alloy dua jenis elemen maka potensial EAM memerlukan tujuh fungsi: tiga untuk interaksi pasangan (A-A, A-B, B-B), dua fungsi embedding, dan dua fungsi kontribusi awan elektron. Umumnya fungsi-fungsi ini diberikan dalam format tabel. Berbagai potensial EAM untuk logam dapat diunduh dari website NIST [10].

## Solusi Numerik

Selanjutnya yang tak kalah penting adalah algoritma yang digunakan untuk memecahkan secara numerik persamaan gerak partikel. Salah satu algoritma yang digunakan adalah algoritma *Verlet-Velocity* yang sangat populer dimana kecepatan, percepatan dan posisi dihitung bersama pada waktu  $t$ :

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 \quad (5)$$

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \Delta t)]\Delta t \quad (6)$$

dengan  $\Delta t$  adalah selisih waktu antara dua posisi yang berturutan (*time mesh*),  $a$  adalah percepatan dan  $v$  adalah kecepatan.

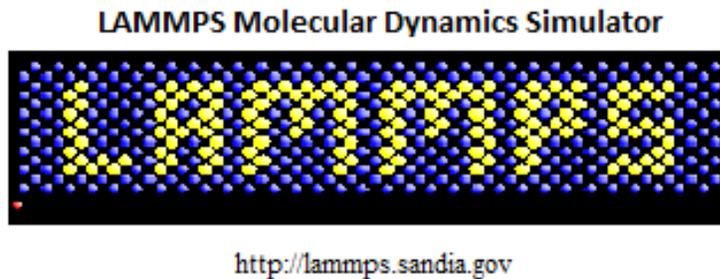
## **METODOLOGI**

Simulasi dinamika molekul adalah metode simulasi yang salah satunya dapat menggambarkan proses-proses mikroskopik atom dengan menggunakan program komputer yang dirancang. Program simulasi dinamika yang digunakan adalah LAMMPS, yang dapat diunduh dari website <http://lammps.sandia.gov>. Kode LAMMPS dipilih karena mempunyai banyak fasilitas untuk perhitungan-perhitungan besaran fisis yang ingin diketahui [11].

Berikut adalah tahapan pengembangan simulasi dan implementasinya serta diagram alur untuk mengoperasikan simulasi tersebut. Simulasi MD (*molecule dynamic*) umumnya mengandung beberapa tahapan:

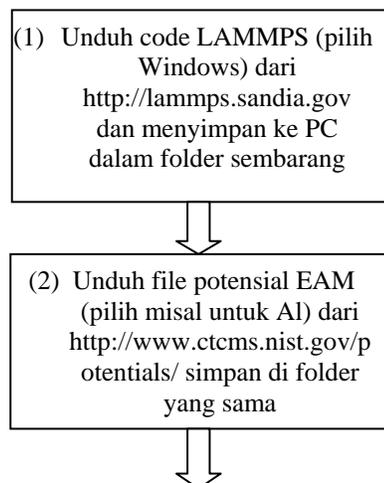
- (a) Konstruksi model potensial interaksi  $U(r)$  untuk sistem material,
- (b) Inisiasi posisi-posisi  $r_0$  dan kecepatan-kecepatan  $v_0$  (momentum),
- (c) Perhitungan gaya dan trayektori atom-atom dengan metode numerik, (metode Verlet)
- (d) Analisis trayektori-trayektori atom-atom sistem untuk mendapatkan besaran-besaran termodinamika/fisis yang diinginkan.

Gambar 1 adalah tampilan depan dari website LAMMPS tersebut.



Gambar 1. Tampilan depan website LAMMPS

Selanjutnya bagaimana simulasi sistem logam Aluminium dapat dilakukan langkah-langkahnya dapat diringkas dalam diagram alur sebagai berikut (Gambar 2):



Gambar 2. Diagram alir langkah-langkah penelitian

## **HASIL DAN PEMBAHASAN**

### **1. Tampilan Simulasi**

Setelah program LAMMPS dipanggil dan dijalankan maka lembar/layar pertama yang ditampilkan adalah informasi seperti pada Gambar 3. Hasil dari simulasi menurut Gambar 2 adalah seperti di bawah ini.

```

Microsoft Windows XP [Version 5.1.2600]
(C) Copyright 1985-2001 Microsoft Corp.

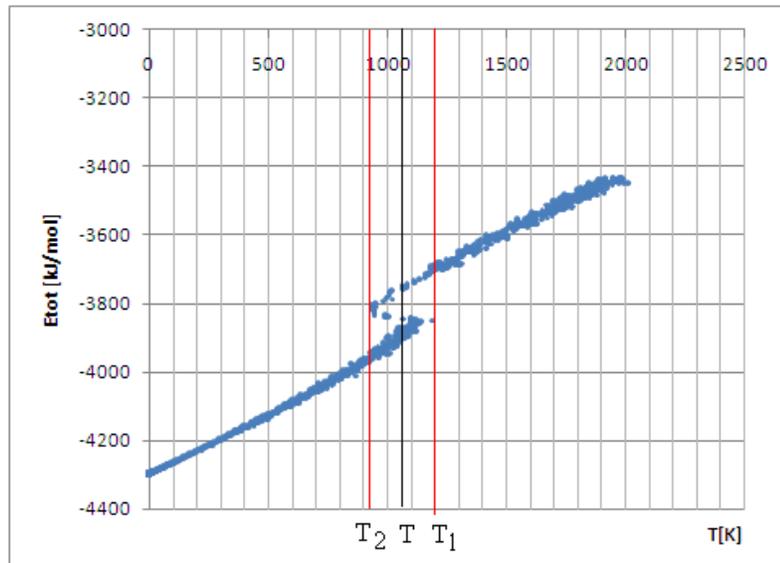
LAMMPS (21 Dec 2010)
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05
Created orthogonal box = (0 0 0) to (32.4 32.4 20.25)
  1 by 1 by 1 processor grid
Created 1280 atoms
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.31123 Mbytes
Step Temp E_pair E_mol TotEng Press
  0          2.5 -4299.8646          0 -4299.4513 -10496.323
100 1.269560655 21257.64 -4299.636088 -4299.4262 -10488.70844
200 1.397134931 21257.64 -4299.634825 -4299.403845 -10483.84415
300 1.384916473 21257.64 -4299.605354 -4299.376394 -10483.13836
400 1.575923002 21257.64 -4299.609008 -4299.34847 -10481.22533
500 1.580183413 21257.64 -4299.57934 -4299.318098 -10480.76711
600 1.695820925 21257.64 -4299.567221 -4299.286862 -10476.73168
700 1.686191216 21257.64 -4299.534038 -4299.255271 -10476.17223
800 1.856723918 21257.64 -4299.531392 -4299.224432 -10470.24152

```

Gambar 3. Tampilan step awal simulasi LAMMPS

## 2. Prediksi temperatur leleh logam Aluminium

Data-data hasil simulasi meliputi step integrasi, temperatur, energi potensial, energi total dan sebagainya sesuai script input. Pada penelitian ini simulasi dijalankan dalam 130000 step integrasi dengan algoritman Verlet. Untuk mengetahui temperatur titik lebur logam Al, maka kita buka file **log,lammps** dan kita plot data temperatur  $T$  (sumbu horizontal) dengan energi total sistem  $E_T$  (sumbu vertikal) dengan Microsoft Excel. Dari grafik  $T-E_T$  terlihat bahwa daerah dimana terjadi perubahan tiba-tiba energi total. Gambar 4 memperlihatkan grafik  $T-E_T$  untuk logam Al.



Gambar 4. Grafik  $T-E_T$  untuk perubahan fase padat-cair logam Al

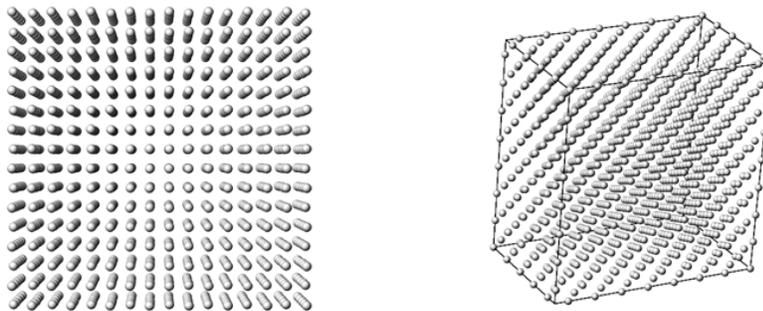
Dari Gambar 4 perubahan fase terjadi antara  $T_1$  dan  $T_2$ . Untuk hasil simulasi terbaik maka seharusnya perubahan hanya terjadi pada satu garis, yaitu pada satu nilai  $T$ . Pada hasil simulasi terdapat dua titik  $T_1$  dan  $T_2$ . Namun bisa diambil pendekatan dengan nilai tengahnya yaitu:

$$T = T_1 - \frac{|T_2 - T_1|}{2} \quad (7)$$

Dari data hasil simulasi dan berdasarkan penafsiran terhadap grafik  $T-E_T$  pada Gambar 4, dan menggunakan pers.(7) maka dapat dihitung temperatur titik lebur logam Al adalah sekitar  $T = 1059,75$  K pada step integrasi ke 78200.

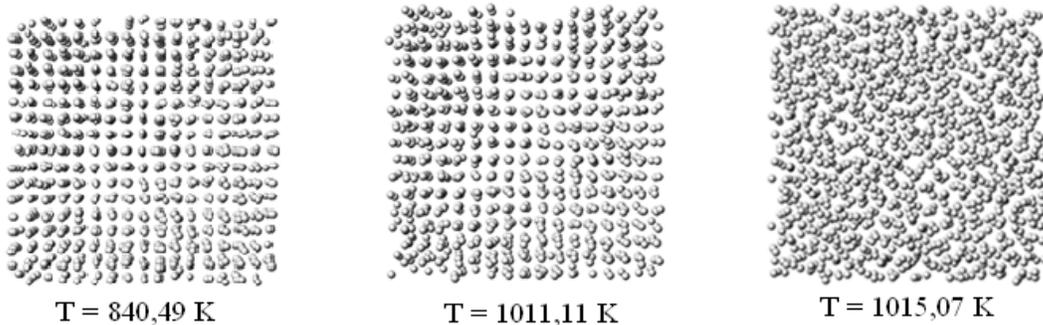
Perubahan fase dari padat menjadi cair dapat digambarkan lebih informatif berdasarkan gambaran struktur mikroskopik material, yaitu dengan melihat posisi

atom-atom penyusun material. Pada studi ini material aluminium sebelum diberikan panas yang makin meningkat adalah kristal berstruktur FCC seperti pada Gambar 5 di bawah ini. Konstanta kisi untuk Al dapat dilihat pada file script input. Gambar struktur mikro dikerjakan dengan program code **Jmol** yang dapat diunduh dari website [www.jmol.org](http://www.jmol.org). File yang diplot adalah posisi-posisi 1280 atom Al yang menyusun material untuk berbagai temperatur. File-file koordinat (x,y,z) dapat dilihat pada file dump dengan nama **Al.xyz**).



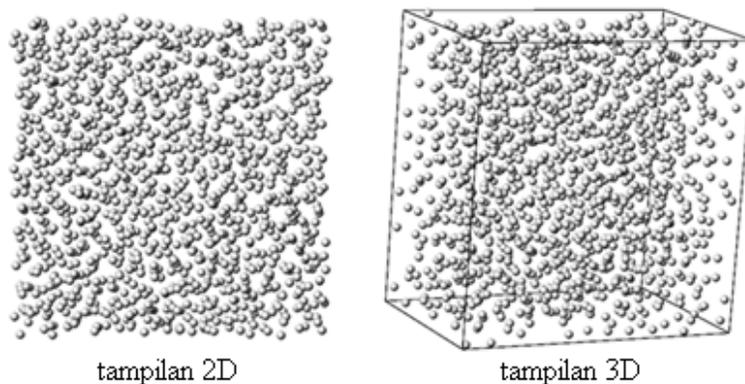
**Gambar 5.** Konfigurasi awal logam Al struktur kristal FCC untuk simulasi (dengan code vizualisasi Jmol)

Simulasi dijalankan dan dimulai dari temperatur  $T$  nol absolut pada step ke nol kemudian temperatur dinaikan secara gradual sepanjang simulasi sampai mencapai temperatur 1950,51 K pada step ke 130000. Pada Gambar 6 memperlihatkan hasil simulasi setelah step ke 60000 ( $T = 840,49$  K) struktur aluminium masih belum sepenuhnya mencair, sedangkan pada step ke 70000 ( $T = 1011,11$  K) sudah lebih acak atom-atomnya. Pada step ke 80000 terlihat material Al sudah meleleh seluruhnya.



**Gambar 6.** Gambaran struktur mikro dari Aluminium untuk berbagai temperatur

Dari gambar 6 dapat kita lihat antara  $T = 1011,11\text{K}$  dan  $T = 1015,07 \text{ K}$  terjadi perubahan struktur yang dramatis dari cenderung padat ke keadaan fase cair. Oleh karena itu prediksi **temperatur titik lebur dicapai pada  $T = 1059,75 \text{ K}$**  adalah beralasan. Gambar 7 memperlihatkan struktur mikro alumunium pada  $T = 1950,51 \text{ K}$  (pada step 130000) jauh diatas titik lebur. Namun terlihat bahwa struktur mikro bahan Al pada step 130000 mirip dengan struktur bahan pada  $T = 1015,07 \text{ K}$  pada step 80000. Oleh karena itu pada step ke 80000 bahan diprediksi sudah masuk fase cair, sedangkan titik lebur dimana terjadi perubahan dari padat ke cair diprediksi pada  $T = 1059,75 \text{ K}$ .



Gambar 7. Struktur mikro Aluminium pada  $T = 1950,51$  K pada step 130000

## **SIMPULAN DAN SARAN**

Dengan metode simulasi dinamika molekul dapat diprediksi dengan bahwa titik lebur logam Aluminium (Al) adalah pada  $T = 1059,75$  K. Gambaran struktur mikro bahan Aluminium mulai dari padatan, setengah padat sampai dalam bentuk fase cair dengan baik dan informatif dapat dijelaskan berdasarkan data hasil simulasi LAMMPS yang divisualisasikan menggunakan program Jmol. Dengan gambaran lengkap mulai dari pilihan fungsi potensial EAM yang dapat diganti-ganti untuk berbagai bahan logam dan visualisasi data yang informatif dengan Jmol maka model disimulasi dinamika molekuler ini diharapkan dapat diterapkan untuk model pembelajaran konsep fisika perubahan wujud berbagai zat untuk siswa SMA. Penerapan untuk material selain Aluminium dilakukan dengan mengganti file potensial EAM yang sesuai untuk logam yang ingin dipelajari. Program LAMMPS dapat digunakan untuk mempelajari besaran fisis yang lain selain temperature yang merupakan pengembangan untuk studi lain. Sebagai saran maka untuk mendukung kesimpulan ini dapat dilakukan penelitian dengan menerapkan model pembelajaran di ruang kelas sekolah untuk mengetahui tingkat penyerapan siswa pada mata pelajaran dimaksud. Hal ini karena metode dinamika molekuler untuk media pembelajaran fisika perubahan wujud menurut sepengetahuan peneliti belum pernah dilakukan peneliti lain, dan juga biasanya metode dinamika molekuler hanya diajarkan pada tingkat universitas. Namun demikian dengan hanya mengambil hal-hal yang penting saja dari metode dinamika molekuler (MD) (Lammps) yang tepat untuk digunakan siswa SMA maka peneliti menganggap metode MD ini dapat diterapkan untuk pembelajaran fisika interaktif.

## **DAFTAR PUSTAKA**

- [1] Arkundato, A. , Suud, Z., and Abdullah, M. (2010) ‘Corrosion study of Fe in a stagnant liquid Pb by molecular dynamics methods’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1244, pp.136 - 144.
- [2] Arkundato, A. , Suud, Z., Abdullah, M., Widayani, S., and Massimo, C. (2012) ‘Numerical study: Iron corrosion-esistance in lead-bismuth eutectic coolant by molecular dynamics method’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1448, pp.155.
- [3] Arkundato, A. , Suud, Z., Abdullah, M., Widayani, S. (2012) ‘Computational study: reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor’, in *AIP Conference Proceeding*, New York, Vol. 1454.
- [4] Artoto Arkundato, Zaki Suud, Mikrajuddin Abdullah, Widayani (2009), Perhitungan Koefisien Difusi Logam Fe Dalam Pb Cair Dengan Metode Dinamika Molekuler: Studi Awal Korosi Dalam Reaktor Cepat, *SPEKTRA:Jurnal Fisika dan Aplikasinya*, Vol. 8, No.2 Desember 2009.
- [5] Ackland, G. J., D’Mellow, K., Daraszewicz, S. L., Hepburn, D. J., Uhrin, M.K., and Stratford (2011) ‘The MOLDY short-range molecular dynamics package’, *Computer Physics Communications*, Vol. 182, pp.2587-2604.
- [6] Belonoshko, A.B. (1998) 'Melting of corundum using conventional and two-phase molecular dynamic simulation method', *Phys Chem Minerals*, Vol. 25, pp. 138-141.
- [7] Brodholt, J. and Wood, B. (1993) 'Molecular dynamics simulations of the properties of CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O mixtures at high pressures and temperatures', *American Mineralogist*, Vol. 78, pp. 558-564.
- [8] Lemmon, E.W. and Jacobsen, R.T. (2004) ‘Viscosity and thermal conductivity equations for nitrogen, oxygen, argon and air’, *International Journal of Thermophysics*, Vol. 25(1), pp.21 - 69.
- [9] Embedded atom model. [http://en.wikipedia.org/wiki/Embedded\\_atom\\_model](http://en.wikipedia.org/wiki/Embedded_atom_model) di akses 7 Juli 2012
- [10] Interatomic Potentials Repository Project, <http://www.ctcms.nist.gov/> Di akses 7 Juli 2012
- [11] Plimpton,S. (1995) *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*, *J Comp Phys*, 117, 1-
- [12] Laboratory for Materials Modeling and Simulations, <http://cms.sjtu.edu.cn/...> Diakses 7 Juli 2012

