

**LAPORAN AKHIR PENELITIAN LANJUT
BIDANG ILMU**



**MODEL PEMBELAJARAN KIMIA FISIKA BERBASIS
SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**

Oleh:

Paken Pandiangan, S.Si., M.Si (Ketua)

Artoto Arkundato, S.Si., M.Si (Anggota)

Imelda Komalasari, SE (Tenaga Administrasi)

**UNIVERSITAS TERBUKA
2011**

**LEMBAR PENGESAHAN
PENELITIAN LANJUT BIDANG ILMU
LEMBAGA PENELITIAN DAN PENGABDIAN KEPADA MASYARAKAT
UNIVERSITAS TERBUKA**

1. Penelitian
 - a. Judu : Model Pembelajaran Kimia Fisika Berbasis Simulasi Dinamika Molekul
 - b. Bidang : Penelitian Keilmuan
 - c. Klasifikasi : Penelitian Lanjut
2. Ketua
 - a. Nama Peneliti : Paken Pandiangan, S.Si, M.Si
 - b. NIP : 19700820 199703 1 003
 - c. Pangkat/Gol : Pembina / IVa
 - d. Jabatan Akademik/Unit : Lektor Kepala/ UPBJJ-UT Batam
 - e. Fakultas Akademik : FKIP / Program Studi Pendidikan Fisika
3.
 - a. Jumlah Anggota Peneliti : 2 (Dua) orang
 - b. Nama Anggota/Unit : Artoto Arkundato, S.Si.,M.Si dan Imelda K, SE/ UPBJJ-UT Batam
 - c. Program Studi : Pendidikan Fisika dan Tenaga Administrasi
4. Lama Penelitian : 8 (delapan) bulan
5. Biaya Penelitian : Rp. 30.000.000,- (Tigapuluh Juta Rupiah)
6. Sumber Biaya : Universitas Terbuka
7. Pemanfaatan Hasil Penelitian
 - a. Seminar (nasional/regional)
 - b. Jurnal (UT, nas, inter)
 - c. Pengabdian masyarakat
 - d. Perbaikan bahan ajar

Mengetahui,
Kepala UPBJJ-UT Batam

Batam, 22 Desember 2011
Ketua Peneliti

Paken Pandiangan, S.Si, M.Si
NIP. 19700820 199703 1 003

Paken Pandiangan, S.Si, M.Si
NIP. 19700820 199703 1 003

Mengetahui,
Ketua LPPM-UT

Menyetujui,
Ka. Pusat Keilmuan

Drs. Agus Joko Purwanto, M.Si
NIP. 19660508 199203 1 003

Ir. Endang Nugraheni, M.Ed
NIP. 19570422 198503 2 001

(Executive summary:
**MODEL PEMBELAJARAN KIMIA FISIKA
BERBASIS SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL**
Oleh: Paken Pandiangan, dkk)

Kemajuan sains dan teknologi tidak terlepas dari riset-riset dan pengembangan kimia dan fisika bahan dengan produk terpopulernya misalnya IC (integrated circuit), LCD (*Liquid Crystal Display*), baja tahan korosi, dan sebagainya. Dalam hal kajian kimia fisika bahan (material) memerlukan landasan kuat pemahaman *termodinamika dan fisika statistik*. Namun demikian matakuliah Termodinamika dan Fisika Statistik adalah termasuk yang sulit dipelajari karena memerlukan analisis matematik yang kuat. Kemampuan mahasiswa dalam memahami bidang ini sangat dipengaruhi oleh kemampuan membayangkan obyek yang dipelajari dalam kaitannya dengan interaksi-interaksi yang terjadi di antara atom-atom pembentuk bahan. Oleh karena itu perlu dikembangkan suatu model pembelajaran yang inovatif untuk membantu mahasiswa dalam memahami mata kuliah Termodinamika dan Fisika Statistik dengan baik. Dengan pengembangan model pembelajaran yang tepat diharapkan mahasiswa dapat memiliki landasan penguasaan termodinamika dan fisika statistik yang baik, yang pada gilirannya akan mampu memperkuat kesiapan mahasiswa memasuki dunia kerja, terutama yang berkaitan erat dengan riset bahan.

Pada penelitian ini akan diajukan model pembelajaran berbasis simulasi dinamika molekul. Metode dinamika molekul merupakan metode standar untuk riset yang mempertimbangkan interaksi antar partikel penyusun bahan, sehingga sangat memungkinkan jika dapat didesain metode pembelajaran kimia fisika yang mengadopsi metode dinamika molekul ini.

Dengan mempertimbangkan masalah yang diangkat maka tujuan dari penelitian ini adalah merancang metode pembelajaran kimia fisika berbasis program komputer dinamika molekul yang akan digunakan sebagai alat bantu pembelajaran di kelas. Dengan demikian akan diperoleh manfaat model pembelajaran kimia fisika yang inovatif yang dapat digunakan sebagai alat bantu proses belajar mengajar baik di kelas maupun melalui *Dry Laboratory*.

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah **Metode Integrasi numerik** (Algoritma dan Verlet dan Algoritma Beeman) dan **Metode Diagram Alir Prosedur Komputasi/Simulasi MD**. Ada banyak algoritma yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial secara numerik. Verlet dalam hal ini telah mengembangkan beberapa algoritma yang telah digunakan secara luas untuk simulasi DM. Salah satu algoritma itu adalah algoritma Verlet-Velocity, yang dari penerapan deret Taylor. Pada simulasi menurut pendekatan ini maka percepatan terlihat setiap waktu yang akan mempercepat waktu perhitungan secara keseluruhan. Sedangkan keuntungan metode algoritma Beeman ini adalah dapat memberikan hasil yang lebih akurat dan konservasi energi yang lebih baik. Kelemahan metode ini adalah memberi kemungkinan waktu perhitungan yang lebih lama (*expensive*). Banyak paket program MD menggunakan algoritma ini seperti halnya paket program MOLLY. Pada riset ini digunakan program MD LAMMPS yang populer digunakan dalam komputasi material. Program MOLLY akan diintegrasikan kemudian.

Hasil dari penelitian ini berupa Program simulasi MD-Terpadu yang dibuat dengan bahasa pemrograman c++ yang memadukan code LAMMPS.exe, pgnuplot.exe dan inputMD.exe. InputMD.exe adalah program yang dibuat sendiri. Program dinamika molekuler (DM) secara umum adalah program untuk menyelesaikan persamaan gerak Newton, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, untuk atom-atom/partikel sistem. Persamaan gerak ini diselesaikan secara numerik. Dalam program simulasi riset ini, penyelesai persamaan gerak Newton menggunakan populer sebagai program inti. Kemudian pengembangan sesuai dengan tujuan riset akan ditambahkan sendiri subprogram-subprogram.

Sampai dengan tahapan ini penelitian pembuatan program simulasi MD untuk Fisika Statistik telah dapat dilakukan dengan baik. Dengan program ini sudah dapat dilakukan usaha pemanfaatan program untuk mempelajari beberapa sifat-sifat bahan dengan menggunakan kajian Fisika Statistik. Dalam program di atas digunakan ensemble NPT (lihat di file input.in). Dari simulasi dapat dihitung banyak besaran-besaran Termodinamik seperti entalpi, energy total, tekanan, volume dan besaran lainnya dengan membuka file log.LAMMPS hasil simulasi.

Abstrak

Bidang Termodinamika dan Fisika Statistik merupakan bidang yang sangat penting dipelajari bagi mahasiswa Fisika dan Kimia. Namun demikian bidang kajian ini termasuk bidang yang sulit dipelajari dan dipahami karena sangat memerlukan kemampuan analisis matematis yang memadai. Pada Penelitian ini telah didesain metode pembelajaran Fisika Kimia berbasis simulasi Dinamika Molekul. Dengan simulasi dinamika molekul ini banyak hal dapat dipelajari oleh mahasiswa untuk memahami perilaku sistem dalam berbagai jenis ensambel. Berbagai eksperimen laboratorium dapat dibawa ke dalam layar komputer untuk dapat membantu pemahaman mahasiswa dengan lebih baik.

Kata kunci: Model Pembelajaran, Simulasi Dinamika, Kimia – Fisika.

DAFTAR ISI

	halaman
LEMBAR PENGESAHAN	1
Ringkasan	2
Abstrak	3
DAFTAR ISI	4
I. PENDAHULUAN	
1.1. Latar Belakang	5
1.2. Perumusan Masalah	5
1.3. Tujuan Penelitian	5
1.4. Manfaat Penelitian	6
1.5. Tempat Penelitian	6
II. TINJAUAN PUSTAKA	
2.1. Simulasi Dinamika Molekul	7
2.2. Prosedur Simulasi MD.....	10
III. METODE PENELITIAN	
3.1. Metode Integrasi numerik	14
3.2. Metode Diagram Alir Prosedur Komputasi/Simulasi MD	14
3.3. Jadwal Penelitian	15
3.4. Anggaran Biaya Penelitian	15
IV. HASIL PENELITIAN	
4.1. Program Simulasi	16
4.2. Menjalankan Program	17
4.3. Memanfaatkan Program Simulasi	17
V. PEMBAHASAN	
5.1. Simulasi Tak Langsung	18
5.2. Simulasi Langsung	25
VI. KESIMPULAN DAN SARAN	
6.1. Kesimpulan	40
6.2. Saran dan Riset Lanjutan	40
DAFTAR PUSTAKA	41
LAMPIRAN	42

I. PENDAHULUAN

I.1. LATAR BELAKANG

Kemajuan sains dan teknologi tidak terlepas dari riset-riset dan pengembangan kimia dan fisika bahan dengan produk terpopulernya misalnya IC (integrated circuit), LCD (*Liquid Crystal Display*), baja tahan korosi, dan sebagainya. Dalam hal kajian kimia fisika bahan (material) memerlukan landasan kuat pemahaman *termodinamika dan fisika statistik*. Namun demikian matakuliah Termodinamika dan Fisika Statistik adalah termasuk yang sulit dipelajari karena memerlukan analisis matematik yang kuat. Kemampuan mahasiswa dalam memahami bidang ini sangat dipengaruhi oleh kemampuan membayangkan obyek yang dipelajari dalam kaitannya dengan interaksi-interaksi yang terjadi di antara atom-atom pembentuk bahan. Oleh karena itu perlu dikembangkan suatu model pembelajaran yang inovatif untuk membantu mahasiswa dalam memahami mata kuliah Termodinamika dan Fisika Statistik dengan baik. Dengan pengembangan model pembelajaran yang tepat diharapkan mahasiswa dapat memiliki landasan penguasaan termodinamika dan fisika statistik yang baik, yang pada gilirannya akan mampu memperkuat kesiapan mahasiswa memasuki dunia kerja, terutama yang berkaitan erat dengan riset bahan.

Pada penelitian ini akan diajukan model pembelajaran berbasis simulasi dinamika molekul. Metode dinamika molekul merupakan metode standar untuk riset yang mempertimbangkan interaksi antar partikel penyusun bahan, sehingga sangat memungkinkan jika dapat didesain metode pembelajaran kimia fisika yang mengadopsi metode dinamika molekul ini.

I.2 Rumusan Masalah

Berangkat dari pendahuluan di atas maka permasalahan yang ingin diangkat dalam proposal ini adalah :

- Bagaimana merancang program simulasi dinamika molekul untuk tujuan pembelajaran?
- Topik-topik apakah yang relevan untuk dikembangkan dalam metode pembelajaran?
- Bagaimana merancang simulasi dinamika molekul yang inovatif interaktif untuk tujuan pembelajaran kimia fisika?

I.3 Tujuan Penelitian

Dengan mempertimbangkan masalah yang diangkat maka tujuan dari penelitian ini adalah merancang metode pembelajaran kimia fisika berbasis program komputer dinamika molekul yang akan digunakan sebagai alat bantu pembelajaran di kelas.

I.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah diperoleh model pembelajaran kimia fisika yang inovatif yang dapat digunakan sebagai alat bantu proses belajar mengajar baik di kelas maupun melalui Dry Laboratory.

I.5 Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Fisika dan Komputasi UIB dan P4TK Bandung.

II. TINJAUAN PUSTAKA

II.1 Simulasi Dinamika Molekul

Dinamika Molekul (*Molecul Dinamic* – MD) 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 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. Justifikasi utama dari metode MD adalah “rata-rata ensambel statistik” sama dengan “rata-rata waktu (time averages)” dari sistem, yang dikenal sebagai “hipotesis ergodik”. Secara mendasar simulasi MD sangat bergantung pada bentuk **fungsi potensial** yang digunakan untuk mewakili model interaksi sistem. Dalam kimia dan biologi ini biasanya dipandang sebagai “*force field*”.

([http://en.wikipedia.org/wiki/Dynamics_\(mechanics\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Dynamics_(mechanics)))

II.1.1 Bentuk-Bentuk Potensial

Premis utama dari simulasi MD dapat digambarkan sebagai berikut: mengingat fakta bahwa pada tingkat primitif setiap zat terbuat dari partikel elementer (misal atom, molekul), maka jika parameter dinamik dasar seperti posisi, kecepatan, gaya interaksi diketahui, maka dapat ditentukan selanjutnya sifat-sifat fisis makro zat seperti volume, temperature, tekanan dll, dengan pendekatan “bottom up” menggunakan mekanika statistik. Berdasarkan ide ini, titik awal MD adalah hukum kedua Newton. Untuk gerak translasi simetri bola, maka persamaan adalah:

$$F = m \frac{d^2r}{dt^2},$$

Integrasi persamaan ini akan menghasilkan trayektori gerak atom, yang selanjutnya menggunakan konsep rata-rata waktu dapat ditentukan besaran fisis sistem. Bentuk potensial 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** (potensial 6-12) yang biasa

digunakan untuk menghitung gaya-gaya van der waals. Jenis lain adalah **potensial banyak benda** (*many-body potential*) yang memerlukan suku tambahan untuk efek-efek interaksi tiga atau lebih partikel dalam sistem. Dalam simulasi potensial setangkup (*pairwise potential*), interaksi-interaksi global juga ada namun hanya melalui suku-suku pasangan. Dalam potensial banyak-benda maka potensial energi tidak dapat diperoleh melalui penjumlahan dari pasangan-pasangan atom saja. Ada suku-suku orde lebih tinggi yang perlu diperhitungkan dalam fungsi potensial. Contoh potensial tipe ini adalah **potensial EAM** (*embedded-atom methods potential*).

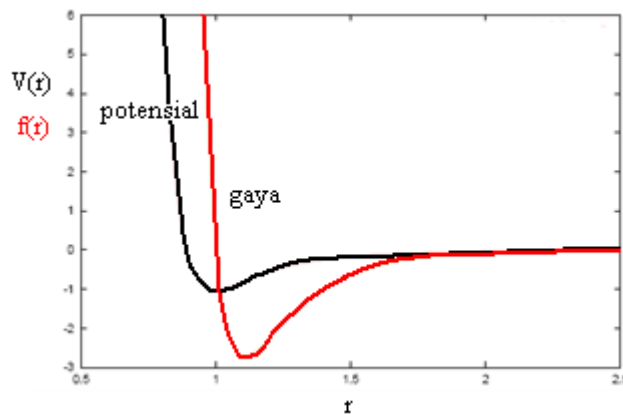
Gaya antara dua atom dapat didekati dengan sangat baik pada kasus-kasus tertentu menurut fungsi energi potensial Lennard-Jones:

$$U(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

Dengan r adalah jarak antara pusat dua atom, ε/K_B merupakan kuat energi potensial, dan σ yang merupakan nilai r pada saat energinya nol. Bentuk potensial dan kuat gaya Lennard-Jones (LJ) adalah:

$$F(r) = -\frac{dU(r)}{dr} = \frac{12\varepsilon}{\sigma} \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (2)$$

Yang dapat diplot seperti:



Gambar 3. Potensial dan Gaya Lennard-Jones

II.1.2. Persamaan Gerak Newton

Pada intinya untuk mensimulasikan sistem atom ini, kita akan menerapkan metode deterministik yaitu menggunakan hukum kedua Newton dalam mekanika klasik:

$$\vec{F} = m\vec{a} \quad (3)$$

Gaya antar atom pada posisi \mathbf{r}_i dan \mathbf{r}_j diberikan oleh:

$$\mathbf{F}_{\text{pada } i \text{ oleh } j} = -\mathbf{F}_{\text{pada } j \text{ oleh } i} = 12(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \left[\left(\frac{1}{r}\right)^{-14} - \left(\frac{1}{r}\right)^{-8} \right] \quad (4)$$

Dengan $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$. Gaya total pada atom ke i karena pengaruh semua $(N - 1)$ atom-atom yang lain adalah:

$$\mathbf{F}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \mathbf{F}_{\text{pada } i \\ \text{oleh } j} \quad (5)$$

Percepatan atom i adalah

$$\mathbf{a}_i(t) = \frac{d\mathbf{v}_i(t)}{dt} = \frac{d^2\mathbf{r}_i(t)}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m} \quad (6)$$

Dengan \mathbf{v}_i dan \mathbf{a}_i masing-masing adalah kecepatan dan percepatan atom i . Persamaan ini adalah 3N persamaan diferensial orde dua. Persamaan ini dapat diselesaikan jika diketahui nilai posisi awal $\mathbf{r}_i(t_0)$ dan kecepatan awal $\mathbf{v}_i(t_0)$ partikel-partikel tersebut. (Pada kenyataannya ini problem yang kompleks, sistem hanya dapat disimulasikan hanya untuk orde nanoseconds, oleh karena itu konfigurasi awal harus sangat dekat kesetimbangan untuk mendapatkan hasil yang baik).

II.1.3 Metode Abinitio Dinamika Molekular

Pada simulasi dinamika molekul klasik, maka potensial yang digunakan biasanya bersifat fenomenologis. Jika kita ingin mendapatkan hasil yang lebih akurat, maka potensial interaksi sistem harus dihitung secara akurat, dan ini dapat dilakukan dengan metode ab-initio atau “first-principles” misalnya menggunakan metode DFT (Density Functional Theory) atau secara keseluruhan disebut metode abinitio dinamika molekul. Metode ini sangat akurat namun secara komputasi sangat mahal. Tidak semua sistem harus menggunakan metode ini untuk telaah jika dengan metode klasik hasilnya sudah cukup baik. Paket software yang terkenal untuk metode ini adalah CPMD (Car-Parrinello Molecular Dynamics) berbasis teori fungsional densitas (DFT). Pada penelitian yang akan dilakukan, maka pendekatan ini tidak dilakukan mengingat keterbatasan waktu, fasilitas dan sedikitnya bahan pustaka, sehingga metode yang akan digunakan adalah simulasi dinamika molekul klasik, namun menggunakan potensial yang diturunkan secara kuantum yaitu dengan potensial EAM, terutama untuk mensimulasikan logam. Penelitian juga akan

menggunakan potensial Lennard-Jones untuk mensimulasikan sistem liquid dan gas.

II.2. Prosedur Simulasi MD

Untuk menjalankan simulasi dinamika molekul ini secara umum dapat dibagi dalam tiga tahap:

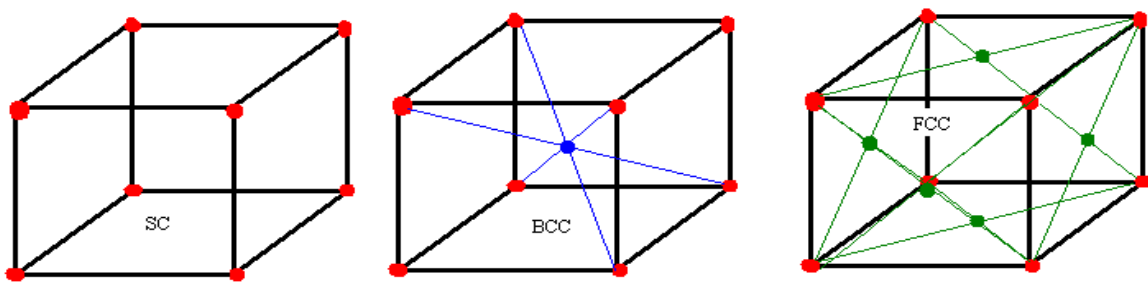
1. Tahap inisialisasi
2. Tahap ekuilibrasi
3. Tahap produksi

- **Tahap inisialisasi**

Pada tahap awal simulasi ini ada beberapa input parameter yang harus diberikan untuk menjalankan simulasi, yaitu:

- a. Konfigurasi sistem (koordinat awal atom)

Untuk mensimulasikan dinamika molekul (atom) maka kita memerlukan koordinat awal atom-atom. Sebelum sistem dijalankan harus diberikan bentuk konfigurasi awal atom-atom. Untuk simulasi dinamika molekul, bentuk kisi kristal yang cepat mencapai equilibrium adalah bentuk kubik misalnya fcc dan bcc.



Gambar 4. Struktur Kristal sc, bcc dan fcc

Konfigurasi awal ini sekaligus menentukan jumlah atom atom yang berinteraksi.

Tabel 3. Ketentuan jumlah atom-atom yang dapat dimuat dalam Kristal tertentu

Struktur Kristal		Jumlah kubus (X,Y,Z) n =	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
SC	Site/n		8	27	64	125	216	343	512	729	1000	1331
	Atom/n		1	8	27	64	125	216	343	512	729	1000
BCC	Site/n		9	35	91	189	341	559	855	1241	1729	2331
	Atom/n		2	16	54	128	250	432	686	1024	1458	2000
FCC	Site/n		14	63	172	365	666	1099	1688	2457	3430	4631
	Atom/n		4	32	108	256	500	864	1372	2048	2916	4000

Bagaimana untuk $N > 4000$ atom? Dapat kita buat rumusan umum seperti rumus dibawah ini, dengan n adalah jumlah kubus kecil pada arah (X,Y,Z, dengan asumsi kita mempunyai bangun kubus besar sama sisi):

Untuk struktur kisi fcc:

$$\text{Jumlah sites/n} = 4n^3 + 6n^2 + 3n + 1$$

$$\text{Jumlah atom/n} = 4n^3$$

Untuk struktur kisi bcc:

$$\text{Jumlah sites/n} = 2n^3 + 36n^2 + 3n + 1$$

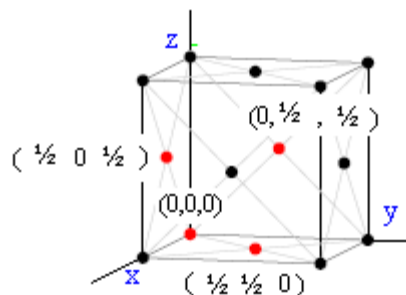
$$\text{Jumlah atom/n} = 2n^3$$

Untuk struktur kisi Sc:

$$\text{Jumlah sites/n} = n^3 + 3n^2 + 3n + 1$$

$$\text{Jumlah atom/n} = n^3$$

Posisi atom-atom dalam sel satuan kubus konvensional fcc adalah:



Gambar 5. Kisi fcc

Empat atom yang ditunjukkan pada gambar memberikan basis untuk sel konvensional. Posisinya dalam satuan a diberikan oleh:

$$(0,0,0) \quad \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\right) \quad \left(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}\right) \quad \left(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$$

Untuk *generate* seluruh posisi atom dalam Kristal dimana kita ingin menempatkan N buah atom menurut tabel 2 di atas, maka kita dapat menggunakan vector translasi:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3 \quad (7)$$

b. Parameter Potensial

Jika menggunakan potensial Lenard Jones maka parameter potensial untuk setiap jenis atom harus diketahui. Parameter ini menentukan kedalaman potensial dan jarak interaksi antar atom yang berpasangan

c. Timesize (dt) dan nsteps (n)

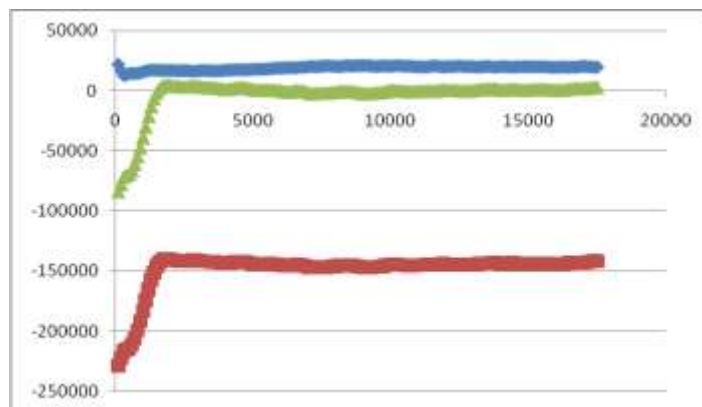
Karena simulasi dinamika molekul menerapkan prosedur diskretisasi, maka perlu dipilih ukuran waktu ($dt = 0.001$ ps misal) dan jumlah integrasi numeric ($n = 21000$ misalnya).

d. Suhu sistem (T)

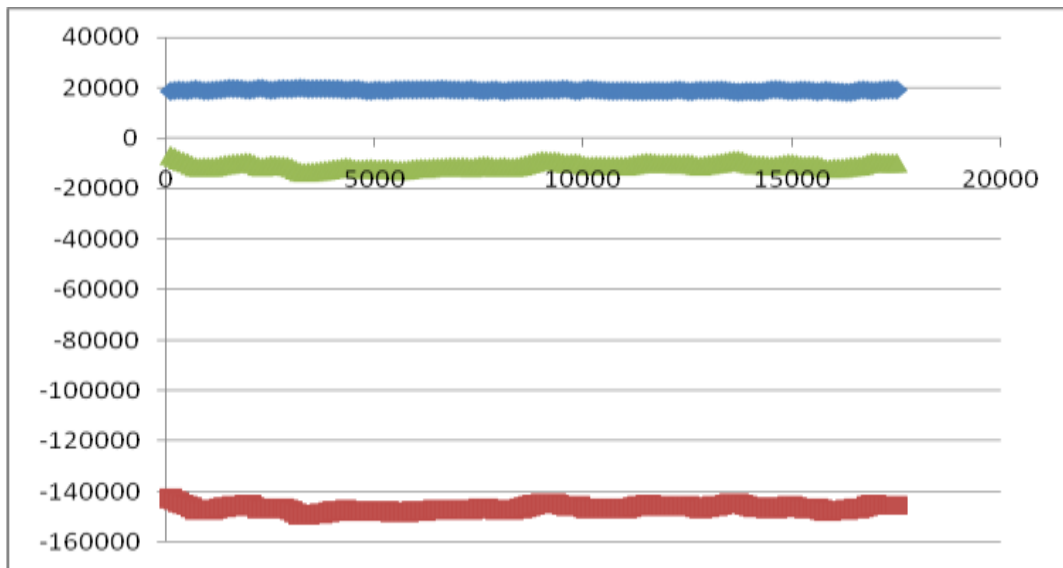
Suhu sistem saat awal simulasi perlu diberikan juga

➤ **Tahap Ekuilibrasi**

Karena simulasi MD menerapkan prosedur diskretisasi maka perlu waktu sampai sistem benar-benar setimbang, sebelum dapat dilakukan perhitungan besaran fisis. Tahap ini disebut tahap ekuilibrasi. Setiap entri parameter dan sistem yang berbeda dimungkinkan mempunyai waktu ekuilibrasi yang berbeda. Pilihan waktu ekuilibrasi sangat krusial karena sangat mempengaruhi hasil. Waktu ekuilibrasi dapat dilakukan dengan melihat konservasi energi total sistem.



Gambar 6. Sistem belum mencapai batas ekuilibrasi sampai sekitar 2500 nsteps



Gambar 7. Sistem sejak awal simulasi sudah mencapai tahap ekuilibrasi

➤ **Tahap Produksi**

Pada tahap ini dicapai jika tahap ekuilibrasi sudah terlampaui. Selama tahap ini maka proses perhitungan besaran fisis sudah dapat dilakukan.

III. METODE PENELITIAN

III.1 Metode Integrasi numerik

a. Algoritma Verlet-Velocity

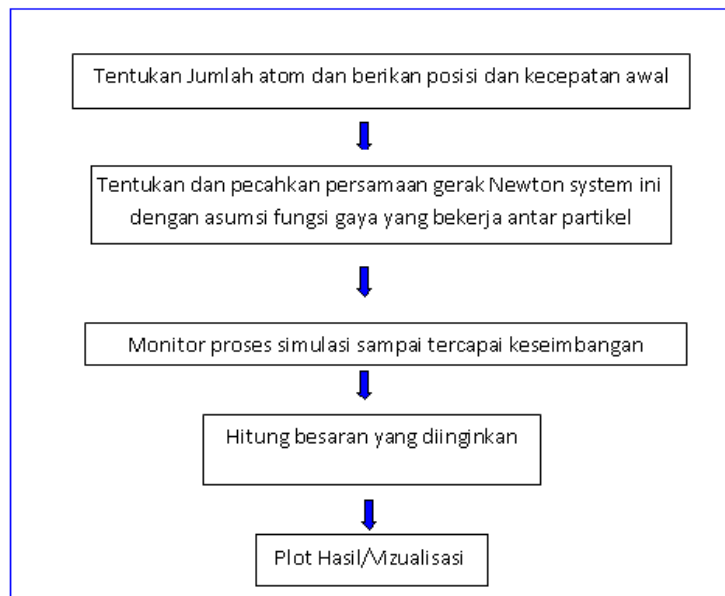
Ada banyak algoritma yang dapat digunakan untuk menyelesaikan persamaan diferensial secara numerik. Verlet dalam hal ini telah mengembangkan beberapa algoritma yang telah digunakan secara luas untuk simulasi DM. Salah satu algoritma itu adalah algoritma Verlet-Velocity, yang dari penerapan deret Taylor. Pada simulasi menurut pendekatan ini maka percepatan terlihat setiap waktu yang akan mempercepat waktu perhitungan secara keseluruhan.

b. Algoritma Beemen

Keuntungan metode algoritma Beemen ini adalah dapat memberikan hasil yang lebih akurat dan konservasi energi yang lebih baik. Kelemahan metode ini adalah memberi kemungkinan waktu perhitungan yang lebih lama (*expensive*). Banyak paket program MD menggunakan algoritma ini seperti halnya paket program MOLLY . Pada riset ini digunakan program MD LAMMPS yang populer digunakan dalam komputasi material. Program MOLLY akan diintegrasikan kemudian.

III.2 Metode Diagram Alir Prosedur Komputasi/Simulasi MD

Secara umum untuk menjalankan simulasi DM menggunakan flowchart berikut:



Gambar 8. Flow Chart Simulasi MD

III.3. Jadwal Penelitian

Penelitian ini direncanakan dilaksanakan dalam 8 bulan, dengan perincian kegiatan sebagai berikut:

No.	Kegiatan	Jadwal penelitian bulan ke -							
		1	2	3	4	5	6	7	8
1	Persiapan Penelitian, Studi Pustaka	x	x						
2	Instalasi program LAMMPS dan C++			x	x				
3	Instalasi GNUPLOT untuk Visualisasi/grafik				x				
4	Instalasi Program Jmol untuk visualisasi atom				x				
5	Kajian model pembelajaran					x			
6	Pengembangan program simulasi dinamika molekuler (pembuatan program MD-Terpadu)				x	x	x		
7	Studi kasus dengan program MD-Terpadu						x		
8	Integrasi simulasi dinamika molekul kedalam model pembelajaran						x	x	
10	Ujicoba Hasil Simulasi							x	
11	Seminar/laporan/publikasi								x

III.4. Anggaran Penelitian

Rincian anggaran yang diajukan diberikan sebagai berikut:

No	Jenis Pengeluaran	Rincian Biaya (Rp)	Jumlah (Rp)
1	Honor Peneliti		
	a. Ketua	1 org x 8 bln x 200.000	1,600,000
	b. Anggota	1 org x 8 bln x 150.000	1,200,000
2	Penyusunan Proposal (Transport Lokal)	2 org x 3 hari x 150.000	900,000
3	Pengumpulan Bahan (Transport)	3 org x 2 hari x 150.000	9,000,000
4	ATK dan Barang Habis Pakai		
	a. 2 buah RAM 2gb Ddr3 1333mhz Pc3-10600	450,000	900,000
	b. 2 HD tb 1000gb 7200rpm Sata Hard Drive	1,000,000	2,000,000
	c. 2 external HD	900,000	1,800,000
	d. 2 Intel Core 2 Quad Q9400 2.66ghz 6mb	1,200,000	2,400,000
	e. 2 MB Asus P5p43td Intel G43 Lga775 Ddr3 Board	750,000	1,500,000
5	Ujicoba Instrumen	100 responden x 15.000	1,500,000
6	Pengolahan data		
	a. Coding Data (Transport)	2 org x 750,000	1,500,000
	b. Entri Data (Transport lokal)	4 org x 2 hari x 150.000	1,200,000
	c. Analisis Data (Transport Lokan)	4 org x 2 hari x 150.000	1,200,000
7	Penyusunan dan Peggandaan Laporan		
	a. Transport Penyusunan Laporan	4 org x 3 hari x 150.000	1,800,000
	b. Peggandaan Laporan	5 exemplar x 50.000	250,000
8	Konsumsi Peserta Seminar Hasil Penelitian	50 org x 25,000	1,250,000
			30,000,000
	JUMLAH TOTAL		Tigapuluh Juta Rupiah

IV.HASIL PENELITIAN

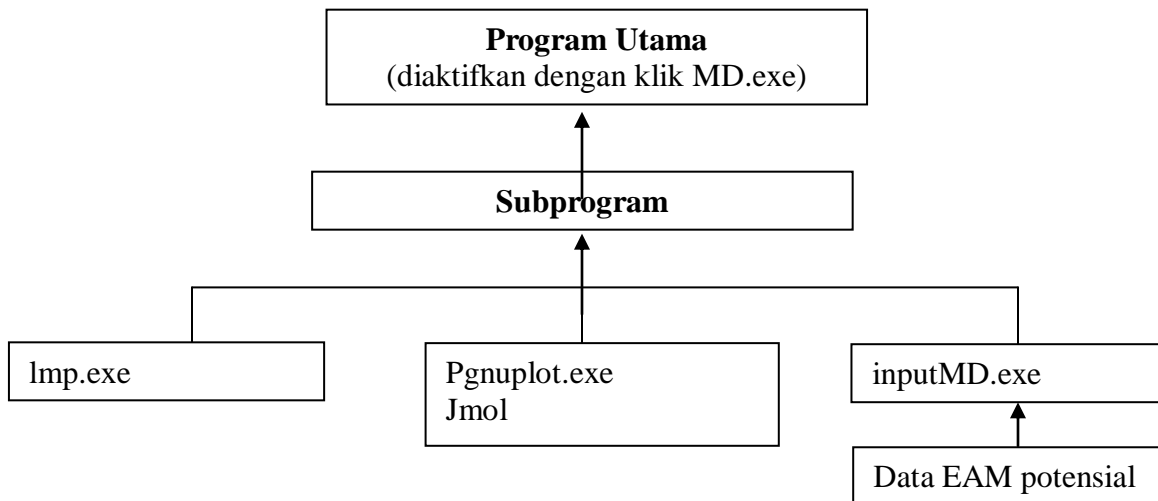
IV.1. Program simulasi

Program simulasi untuk simulasi Fisika Statistik mempunyai struktur sebagai berikut:

- 1) Program utama (main)
- 2) Program Subprogram

Program simulasi MD-Terpadudibuat dengan bahasa pemrograman c++. Yang memadukan code LAMMPS.exe, pgnuplot.exe dan inputMD.exe. InputMD.exe adalah program yang dibuat sendiri. Program dinamika molekuler (DM) secara umum adalah program untuk menyelesaikan persamaan gerak Newton, $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$, untuk atom-atom/partikel sistem. Persamaan gerak ini diselesaikan secara numerik. Dalam program simulasi riset ini, penyelesaian persamaan gerak Newton menggunakan popular sebagai program inti. Kemudian pengembangan sesuai dengan tujuan riset akan ditambahkan sendiri subprogram-subprogram.

Secara skematik dapat digambarkan sebagai berikut:



Gambar 9. Struktur program simulasi

Pada program simulasi ini, potensial yang digunakan adalah potensial EAM (embedded atomic method) yang merupakan potensial bahan logam. Untuk mengintegrasikan persamaan Newton kita menggunakan program Imp.exe dari LAMMPS (Plimpton, 1995). Beberapa potensial EAM yang sudah disediakan dalam program ini adalah:

- Potensial Ni_u3.EAM untuk nikel

- Potensial Cu_u3.EAM untuk tembaga
 - Potensial Pt_u3.EAM untuk Platinum
 - Potensial Pd_u3.EAM untuk Padium
 - Potensial Ag_u3.EAM untuk Perak
 - Potensial Al_njp.EAM untuk Aluminium
 - Potensial Fe.EAM untuk Besi
- Potensial yang lain belum ditambahkan dan dapat ditambahkan sendiri di folder yang sama namun perlu diperhatikan EAM berformat funcfl bukan setfl. Untuk material yang lain akan dilengkapi kemudian.

IV.2. Menjalankan Program

Untuk dapat memanfaatkan program simulasi ini langkah-langkahnya adalah sebagai berikut:

- 1) copy folder case, lalu berin nama case1
- 2) buka folder case1, jalankan program MD dengan klik 2x icon MD.exe
- 3) Ikuti perintah dan keterangan yang ada setelah program dapat dijalankan.
- 4) Hasil lengkap simulasi secara otomatis dituliskan didalam file: log.LAMMPS
- 5) Koordinat atom-atom secara otomatis dituliskan dalam file: file.dump
- 6) Fungsi RDF yang memberi gambaran fase bahan otomatis dituliskan di file: rdf.dat
- 7) Fungsi MSD yang memberi gambaran kemampuan difusi bahan dalam file: msd.dat
- 8) Plot struktur Kristal, MSD dan RDF dgn program gnuplot terintegrasi dgn perintah:

```
gnuplot>> plot "msd.dat" u 1:4 lt 1 pt 6, "msd.dat" u 1:4 lt -1 wl
gnuplot>> plot "rdf.dat" u 2:3 lt 1 pt 6, "rdf.dat" u 2:3 lt -1 wl
gnuplot>> plot "file.dump" u 2:3 lt 1 pt 6
```

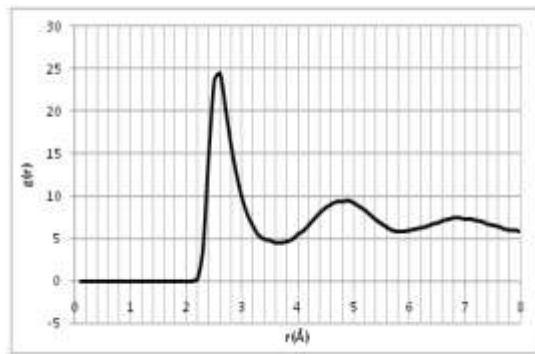
IV.3. Memanfaatkan program simulasi

Berikut adalah hasil simulasi logam tembaga (Cu). Kita ingin mengetahui titik leleh tembaga secara langsung dan tidak langsung. Secara langsung berarti simulasi dilakukan satu kali dengan temperature simulasi naik secara bertahap berawal dari suhu rendah sampai suhu tinggi sekali dan kemudian kita melihat perubahan fase yang terjadi dari padat ke cair. Secara tidak langsung berarti kita melakukan banyak simulasi untuk berbagai suhu setahp demi setahp lalu kita melihat perubahan kurva RDF dan MSD untuk memprediksi titik leleh bahan.

V. PEMBAHASAN

V.1. Simulasi Tidak Langsung

Pada simulasi ini digunakan ensambel NPT, skalawaktu $dt = 0.0001$ ps, dan temperature leleh logam ditentukan dengan melihat kurva RDF dan MSD. Jika kurva RDF sudah memperlihatkan cirikan lelehan bahan (lihat gambar 10) maka berarti kondisi bahan pada temperature tersebut sudah mencapai suhu leleh. Jadi dengan cara tak langsung ini kita melakukan simulasi beberapa kali dengan suhu yang berbeda sampai kita bisa melihat kurva RDF bahan yang meleleh.



Gambar 10. Cirikah kurva RDF bahan yang sudah mencapai titik leleh

Pada percobaan mencari titik leleh bahan ini kita ambil contoh tembaga (Cu) yang mempunyai spesifikasi massa = 63.5, lattice constant = 3.615.

5.1.1 Kondisi T = 185 K

```
D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case1\MD.exe
=====
Riset Pengembangan Komputasi untuk Pengajaran dan Pembelajaran
Program Aplikasi Simulasi Dinamika Molekuler Berbasis Code LAMMPS
Problem2 Fisika Statistik dan Termodinamika
Paken Pandiangan & Artoto Arkundato
Revisi U2 November 2011
=====
>>>>masukkan password program: y
PENTING -->Data potensial yg sudah ada (format EAM): Ag,Pd,Ni,Cu,Pt,Al,Fe
----- lattice-constant-----
Cu=3.615 Pt=3.920 Pd=3.890 Ag=4.090 Al=3.986 Fe=2.855 Ni=3.52
>>>>masukkan konstanta kisi bahan (lihat tabel di atas) atau yg baru: 3.615
>>>>berapa penggandaan kristal satuan arah x,y,z (misal 5): 10
----- massa elemen-----
Al =26.9 Pt =195.1 Fe =55.8 Cu =63.5 Ni =58.7 Pd =106.4 Ag = 4.09
>>>>berikan massa elemen(lihat tabel di atas) atau yg baru: 63.5_
```

Gambar 11. Tampilan layar input MD_Terpadu

```

D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case1\MD.exe
----- potensial elemen
! Ag_u3.EAM Fe.EAM Ni_u3.EAM Al_jnp.EAM Cu_u3.EAM Pd_u3.EAM Pt_u3.EAM!
! potensial baru yg lain harus di tempatkan dalam folder yang sama !
-----
>>>>pilih potential yg digunakan (lihat tabel di atas) atau yg baru: Cu_u3.eam
>>>>setiap berapa step, besaran fisis dihitung (misal 25): 50
>>>>setiap berapa step, data perhitungan disimpan (misal 50): 50
>>>>masukkan temperature simulasi (Kelvin) : 300
>>>>berapa step integrasi numeris dilakukan (misal 10000): 6000
  
```

```

D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case1\MD.exe
>>>>berapa step integrasi numeris dilakukan (misal 10000): 6000
LAMMPS (17 Jul 2010)
Lattice spacing in x,y,z = 3.615 3.615 3.615
Created orthogonal box = (0 0 0) to (36.15 36.15 36.15)
  1 by 1 by 1 processor grid
Created 4000 atoms
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.41114 Mbytes
Step Temp PotEng TotEng Enthalpy Press Volume
  0      300      -14160      -14004.927      -13901.545      3506.1302      472
41.633
  50      291.55385      -14155.776      -14005.068      -14011.912      -231.41754      47
382.08
 100      268.81541      -14143.879      -14004.926      -14089.252      -2843.7948      475
08.764
 150      235.36913      -14126.611      -14004.946      -13961.645      1463.1873      47
413.77
 200      194.23846      -14105.378      -14004.974      -13927.205      2626.5574      474
38.287
 250      151.46182      -14083.259      -14004.966      -14066.476      -2067.4155      47
667.73
 300      113.35379      -14063.398      -14004.804      -14064.614      -2007.8861      477
24.324
 350      83.582323      -14047.928      -14004.723      -13938.402      2231.4427      476
18.868
  
```

```

D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case1\MD.exe
09.502
 5950      186.87294      -14063.519      -13966.923      -14023.662      -1904.4889      47
732.41
 6000      186.33719      -14062.835      -13966.515      -13991.006      -822.68357      47
696.88
Loop time of 512 on 1 procs for 6000 steps with 4000 atoms
Pair time (%) = 448.328 (87.5641)
Neigh time (%) = 0 (0)
Comm time (%) = 2.59375 (0.506592)
Outpt time (%) = 44.375 (8.66699)
Other time (%) = 16.7031 (3.26233)
Nlocal: 4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost: 5841 ave 5841 max 5841 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs: 268000 ave 268000 max 268000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Total # of neighbors = 268000
Ave neighs/atom = 67
Neighbor list builds = 0
Dangerous builds = 0
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.41114 Mbytes
Step Temp PotEng TotEng Enthalpy Press Volume
 6000      186.33719      -14062.835      -13966.515      -13991.006      -822.68357      47
696.88
Loop time of 0 on 1 procs for 0 steps with 4000 atoms
  
```

```

Nlocal: 4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost: 5841 ave 5841 max 5841 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs: 265024 ave 265024 max 265024 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 265024
Ave neighs/atom = 66.256
Neighbor list builds = 0
Dangerous builds = 0
Press any key to continue . . .

===== Keterangan =====
1) Hasil simulasi dlm file log.LAMMPS
2) Koordinat atom-atom dlm file.dump
3) Data RDF dlm file: rdf.dat kolom [2,3]
4) Data MSD dlm file: msd.dat kolom [1,4]
5) Plot RDF dan MSD dengan GNUPLOT
=====

Press any key to continue . . .

```

```

gnuplot
File Plot Expressions Functions General Axes Chart Styles 3D Help
Replot Open Save ChDir Print PrtSc Prev Next

G N U P L O T
Version 4.4 patchlevel 0
last modified March 2010
System: MS-Windows 32 bit

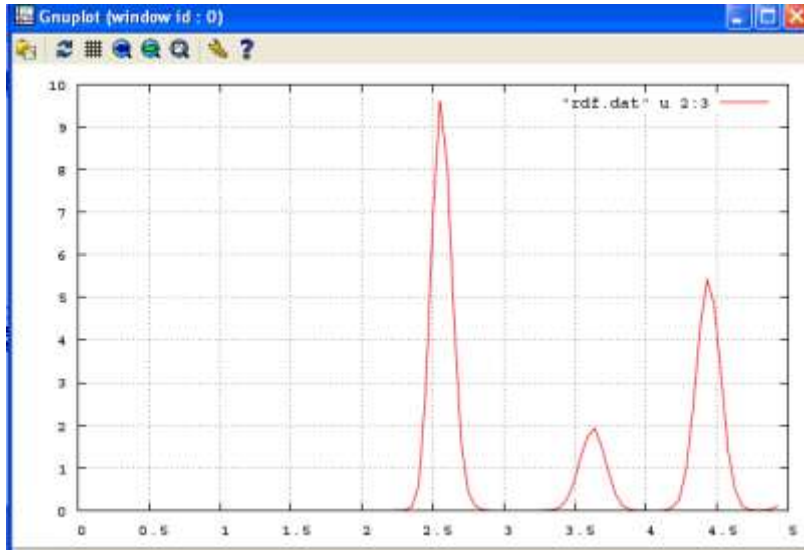
Copyright (C) 1986-1993, 1998, 2004, 2007-2010
Thomas Williams, Colin Kelley and many others

gnuplot home:      http://www.gnuplot.info
faq, bugs, etc.:  type "help seeking-assistance"
immediate help:   type "help"
plot window:      hit 'h'

Terminal type set to 'wxt'
gnuplot> plot "rdf.dat" u 2:3 w l_

```

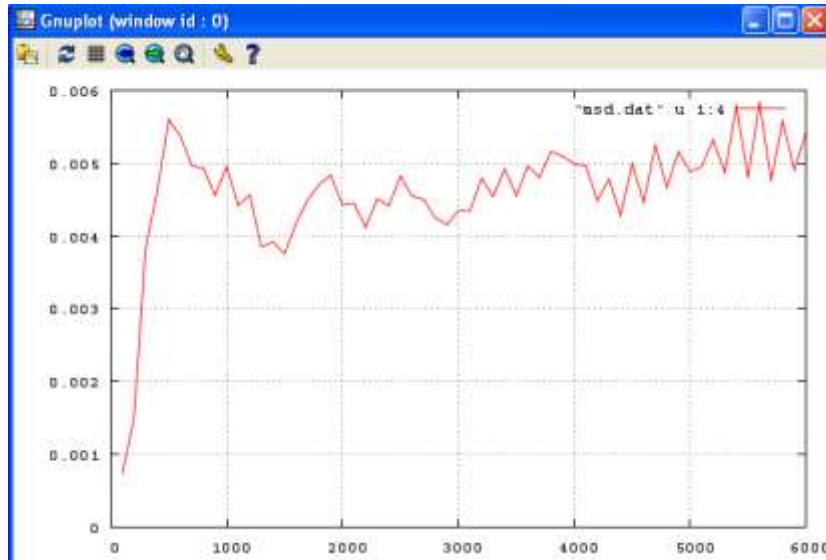
Gambar 12. Tampilan program visualisasi GNUPLOT



Gambar 13. Kurva RDF

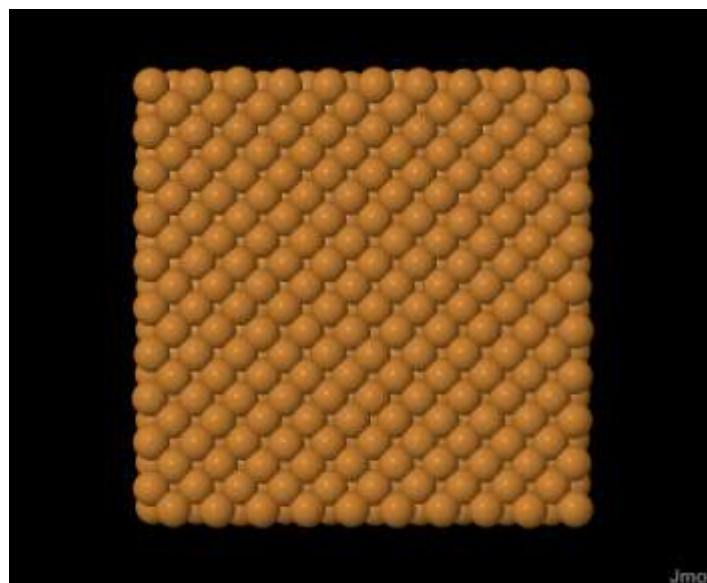
Dari kurva RDF ini tampak sekali banyak puncak-puncak tajam dan alas kurva segaris. Ini menandakan bahan masih berupa padatan. Pada kurva RDF lelehan puncak tajam hanya sekali pada puncak pertama lalu diikuti puncak-puncak kecil tidak tajam dgn alas yang tidak segaris (gambar 10). Selanjutnya kita lihat kurva MSD. Untuk keadaan meleleh maka garis MSD akan berupa garis lurus murni memiliki slope. Perintah untuk memanggil visualisasi kurva RDF dan MSD adalah sebagai berikut:

```
gnuplot>>plot "rdf.dat" u 2:3 w l (enter)
dan
gnuplot>>plot "msd.dat" u 1:4 w l (enter)
```



Gambar 13. Ciri khas MSD padatan

Selanjutnya untuk memastikan apakah bahan sudah meleleh atau belum paling mudah dan menarik adalah dengan melihat struktur bahan. Kita gunakan program Jmol seperti hasil pada gambar 14 berikut. Tampak struktur masih sempurna sebagai padatan kristal fcc murni.



Gambar 14. Struktur padatan

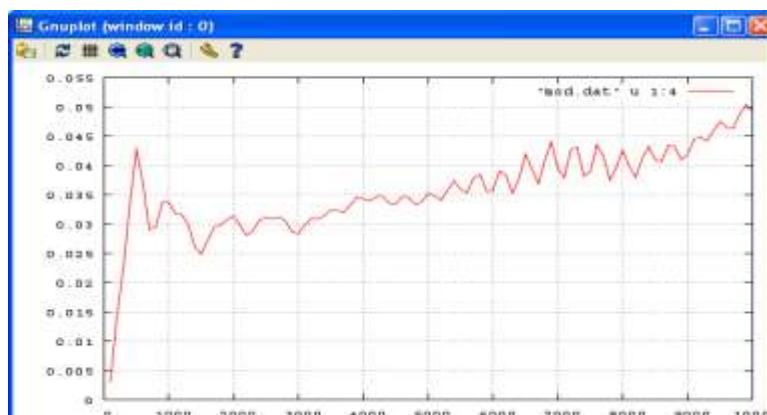
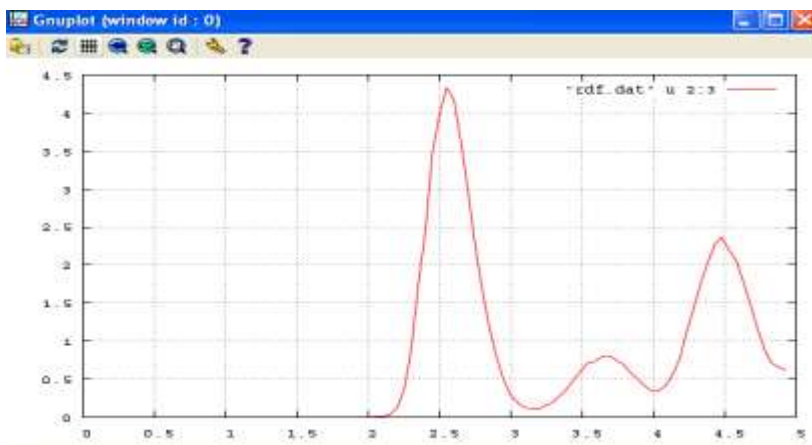
Data untuk melihat struktur bahan dapat dilihat pada file: “file.dump”. Untuk menggunakan Jmol pastikan bahwa format data yang akan diplot adalah sudah dalam bentuk format XYZ yang mengandung 3 bagian utama yaitu: paling atas jumlah atom, baris dua komentar dan baris ketiga dan selanjutnya adalah koordinat XYZ sejumlah baris yang sama dengan jumlah atom.

5.1.2. T = 800K

```

D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case2\MD.exe
Nlocal: 4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
Nghost: 5852 ave 5852 max 5852 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
Neighs: 235776 ave 235776 max 235776 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0

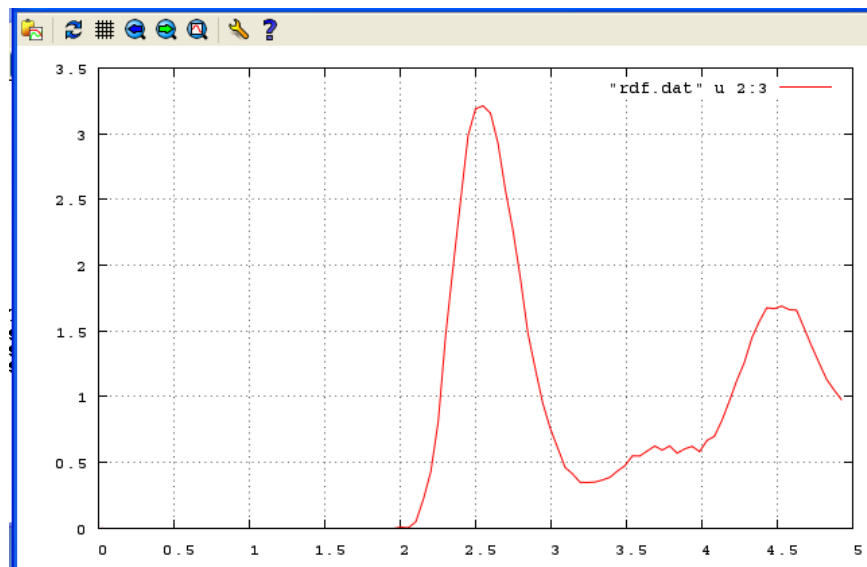
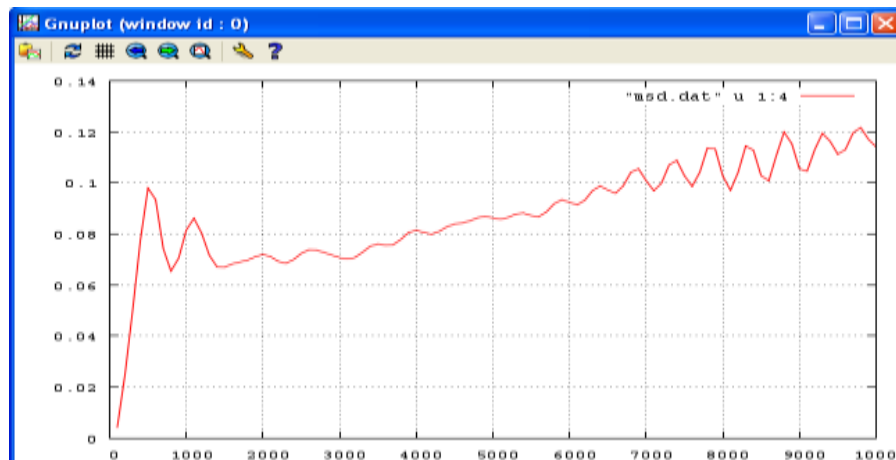
Total # of neighbors = 235776
Ave neighs/atom = 58.944
Neighbor list builds = 3
Dangerous builds = 0
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.41114 Mbytes
Step Temp PotEng TotEng Enthalpy Press Volume
10000 837.40915 -13671.838 -13238.972 -13226.324 410.08207 494
16.568
Loop time of 0 on 1 procs for 0 steps with 4000 atoms
  
```



Dari data RDF dan MSD terlihat bahan sudah mulai mencair di beberapa bagian, terutama mulai dari permukaan bahan.

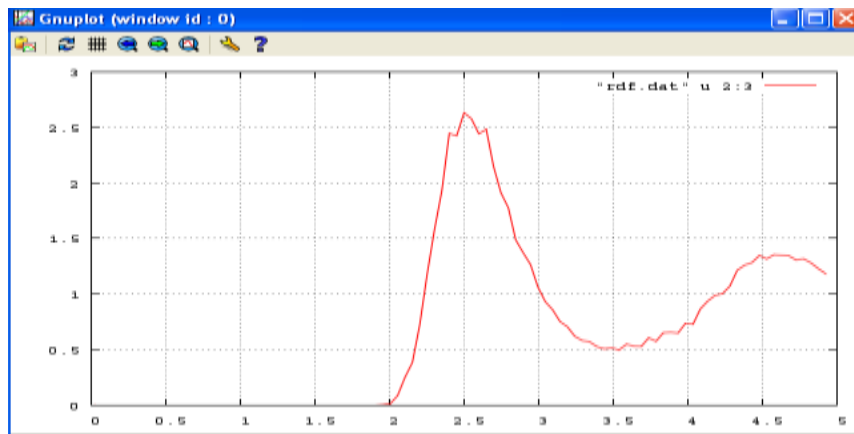
5.1.3. T = 1350K

```
D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case3\MD.exe
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.41114 Mbytes
Step Temp PotEng TotEng Enthalpy Press Volume
10000 1345.4357 -13342.237 -12646.766 -12539.824 3362.1148 509
62.009
Loop time of 0 on 1 procs for 0 steps with 4000 atoms
Pair time (%) = 0 (0)
Neigh time (%) = 0 (0)
Comm time (%) = 0 (0)
```

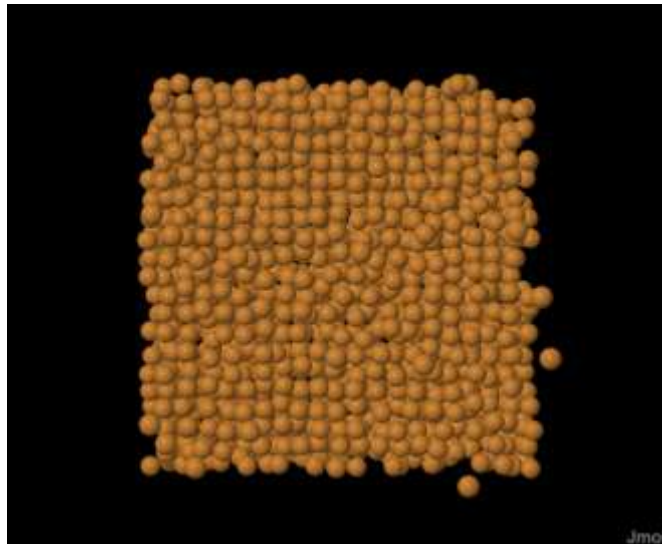
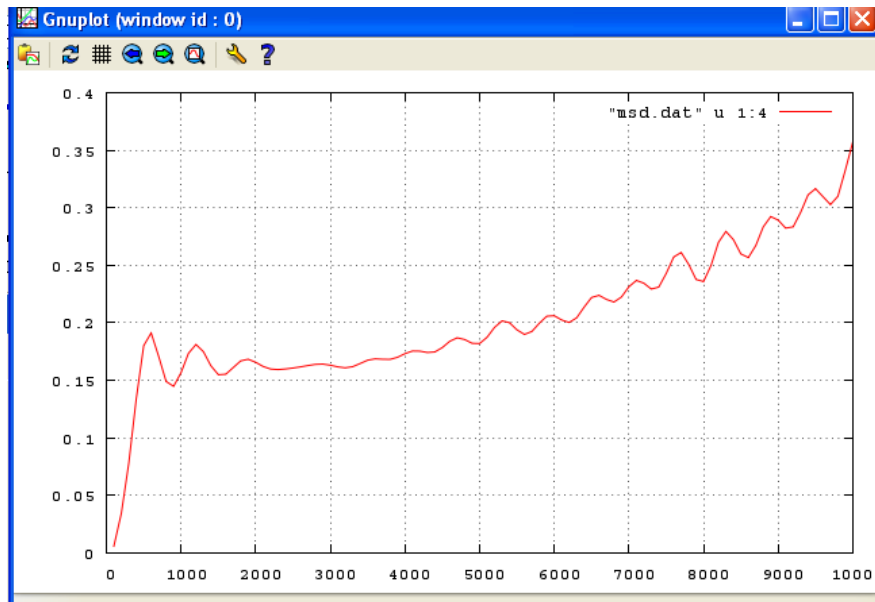


5.1.4 T = 1750K

```
D:\My_Grant\project_UT2001_penelitian\laporan_PAKEN\case4\MD.exe
Setting up run ...
Memory usage per processor = 3.41114 Mbytes
Step Temp PotEng TotEng Enthalpy Press Volume
10000 1749.8681 -12861.575 -11957.462 -12131.5 -5167.9588 539
55.523
Loop time of 0 on 1 proc for 0 steps with 4000 atoms
Pair time (x) = 0 (0)
Neigh time (x) = 0 (0)
Comm time (x) = 0 (0)
Output time (x) = 0 (0)
Other time (x) = 0 (0)
Nlocal: 4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
Nghost: 5941 ave 5941 max 5941 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
Neighs: 285460 ave 285460 max 285460 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0
Total # of neighbors = 285460
Ave neighs/atom = 51.365
Neighbor list builds = 0
Dangerous builds = 0
Press any key to continue . . .
```



Kurva RDF sudah menggambarkan pelelehan yang meluas diseluruh bagian bahan. Dengan demikian kita dapat memprediksi bahwa titik leleh bahan tembaga ada disekitar suhu 1750 K. Untuk lebih tepatnya perlu dilakukan beberapa kali simulasi mulai suhu 1600 – 2000K lalu membandingkan dengan lebih teliti.



Gambar di atas memperlihatkan struktur bahan tembaga yang sudah mulai rusak menuju keadaan cairan. Vizualisasi dengan program Jmol.

V.2. Simulasi Langsung

Simulasi langsung sangat berguna untuk mengetahui titik leleh bahan secara lebih pasti namun memerlukan waktu simulasi yang jauh lebih lama. Juga kita tidak mendapatkan berbagai gambaran struktur dari suhu ke suhu dengan lebih detail. Sekarang hasil dari simulasi langsung sampai 50000 step adalah seperti table dibawah ini.

```

PENTING -->Data potensial yg sudah ada (format EAM): Ag,Pd,Ni,Cu,Pt,Al,Fe
----- lattice-Constant-----
Cu=3.615 Pt=3.920 Pd=3.890 Ag=4.090 Al=3.986 Fe=2.855 Ni=3.52
>>>masukkan konstanta kisi bahan (lihat tabel di atas) atau yg baru: 3.615

>>>berapa penggandaan kristal satuan arah x,y,z (misal 5): 10

----- massa elemen-----
! Al =26.9 Pt =195.1 Fe =55.8 Cu =63.5 Ni =58.7 Pd =106.4 Ag = 4.09
-----
>>>berikan massa elemen(lihat tabel di atas) atau yg baru: 63.5

----- potensial elemen-----
! Ag_u3.EAM Fe.EAM Ni_u3.EAM Al_jnp.EAM Cu_u3.EAM Pd_u3.EAM Pt_u3.EAM!
! potensial baru yg lain harus di tempatkan dalam folder yang sama
!
-----
>>>pilih potential yg digunakan (lihat tabel di atas) atau yg baru: Cu_u3.eam

>>>setiap berapa step, besaran fisis dihitung (misal 25): 100
>>>setiap berapa step, data perhitungan disimpan (misal 50): 100

>>>masukkan temperature simulasi awal (Kelvin) : 300
>>>masukkan temperature simulasi akhir (Kelvin) : 3000

```

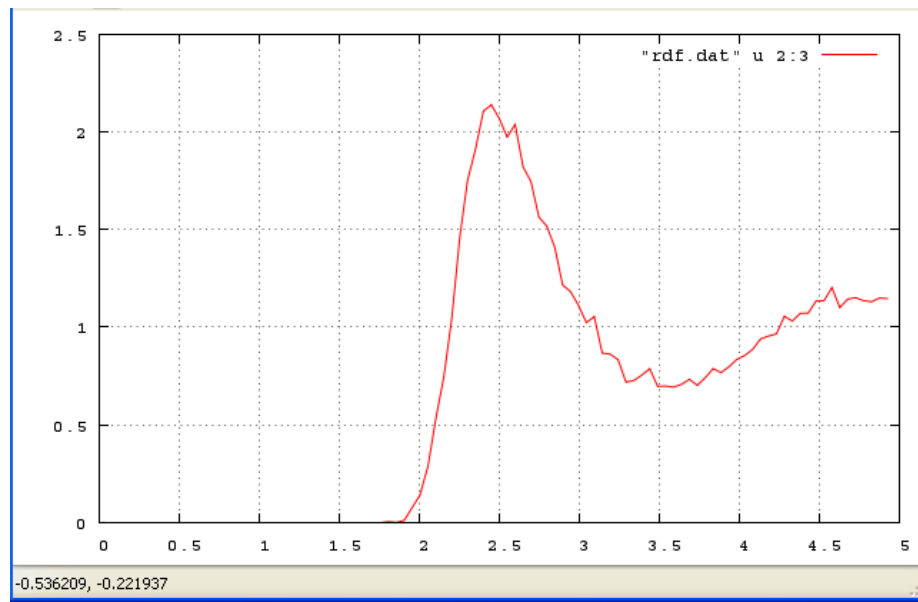
```

D:\My_Grant\project_U12001_penelitian\laporan_PAKEN\case_langsung\MD.exe
 49000 2388.2612 -12069.115 -10834.596 -10845.847 -305.43955 59
018.05
 49100 2399.2669 -12060.576 -10820.367 -10799.275 572.45213 590
32.613
 49200 2422.5694 -12058.107 -10805.853 -10837.901 -867.46195 591
90.635
 49300 2441.1369 -12053.315 -10791.463 -10745.372 1248.6781 591
39.401
 49400 2437.4391 -12036.79 -10776.85 -10817.377 -1092.7214 594
21.352
 49500 2442.6566 -12025.143 -10762.506 -10719.839 1151.0433 59
389.15
 49600 2445.5071 -12012.123 -10748.013 -10785.832 -1015.9502 59
642.05
 49700 2457.2781 -12003.798 -10733.603 -10696.23 1004.8344 595
90.221
 49800 2461.2873 -11991.376 -10719.109 -10757.713 -1034.1818 598
06.148
 49900 2472.9392 -11982.933 -10704.642 -10666.873 1013.2033 597
24.521
 50000 2479.934 -11972.031 -10690.125 -10733.309 -1154.6802 599
21.063
Loop time of 3655.22 on 1 procs for 50000 steps with 4000 atoms

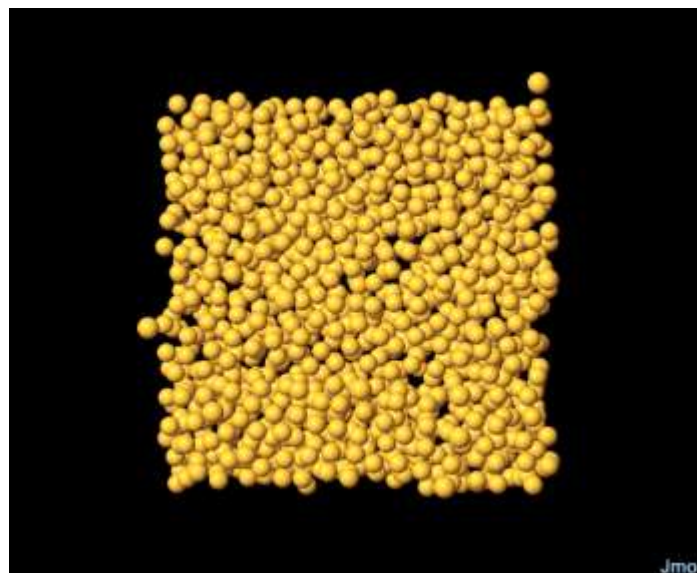
Pair time (%) = 3444.75 (94.242)
Neigh time (%) = 1.92188 (0.0525789)
Comm time (%) = 20.2656 (0.55443)
Outpt time (%) = 57.25 (1.56625)
Other time (%) = 131.031 (3.58477)

Nlocal: 4000 ave 4000 max 4000 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Nghost: 5962 ave 5962 max 5962 min
Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
Neighs: 186638 ave 186638 max 186638 min

```



Gambar RDF ini telah menggambarkan bahwa sampai suhu 2479K bahan telah benar-benar meleleh. Kita dapat lihat dari struktur bahan seperti gambar dibawah ini.



Dari gambar struktur tembaga di atas, yang dipotret dengan program Jmol (<http://www.jmol.org>) terlihat pada suhu 2500K material sudah meleleh tidak memperlihatkan struktur asli fcc.

Sekarang kita lihat berapa sebenarnya suhu leleh bahan. Kita buka file log.LAMMPS hasil simulasi yang ringkasannya adalah seperti table berikut:

Step	Temp	PotEng	TotEng	Enthalpy	Press	Volume
0	300	-14160	-14004.9	-13901.5	3506.13	47241.63
100	268.818	-14143.9	-14004.9	-14089.3	-2843.82	47508.77
200	194.2524	-14105.4	-14005	-13927.2	2626.717	47438.29
300	113.3793	-14063.4	-14004.8	-14064.6	-2008.63	47724.38
400	64.91477	-14038.3	-14004.7	-13977.5	913.0714	47689.1
500	63.59687	-14037.4	-14004.5	-14020	-518.804	47729.98
600	96.03428	-14053.8	-14004.2	-14014.1	-333.068	47662.89
700	133.4642	-14072.8	-14003.8	-13976.5	918.7	47557.42
800	153.7131	-14082.7	-14003.3	-14036.6	-1120.65	47602.8
900	153.4645	-14082.1	-14002.8	-13957.8	1516.115	47523.24
1000	144.2669	-14077	-14002.4	-14049.6	-1588.57	47658.8
1100	142.3351	-14075.5	-14001.9	-13958.9	1450.693	47564.16
1200	153.23	-14080.7	-14001.5	-14044.4	-1442.57	47649.85
1300	171.6108	-14089.6	-14000.9	-13965.5	1191.907	47526.69
1400	183.7707	-14095.2	-14000.2	-14024.5	-817.58	47574.94
1500	180.7713	-14092.9	-13999.5	-13980.5	641.9658	47529.32
1600	163.0704	-14083.1	-13998.8	-14004.6	-195.685	47590.49
1700	141.878	-14071.6	-13998.2	-14003.3	-170.098	47628.15
1800	130.9333	-14065.3	-13997.6	-13986.8	363.8072	47630.51
1900	136.6863	-14067.7	-13997	-14020.2	-778.524	47661.78
2000	154.4846	-14076.2	-13996.4	-13968.2	950.229	47572.33
2100	171.3088	-14084.2	-13995.6	-14026.3	-1030.59	47614.49
2200	176.6383	-14086.1	-13994.8	-13958.3	1230.264	47529.85
2300	167.8482	-14080.8	-13994	-14027.1	-1111.65	47630.8
2400	153.3188	-14072.6	-13993.3	-13963.7	998.1925	47586.56
2500	143.6646	-14066.9	-13992.6	-14019.3	-898.783	47672.8
2600	146.079	-14067.4	-13991.9	-13976.3	525.562	47621.06
2700	158.1663	-14072.9	-13991.2	-13998.8	-257.533	47629.16
2800	171.5927	-14079	-13990.3	-13992	-57.3362	47601.6
2900	177.6783	-14081.3	-13989.5	-13974.4	508.5282	47574.94
3000	173.8561	-14078.4	-13988.6	-14012.1	-790.12	47631.62
3100	165.3678	-14073.2	-13987.7	-13954.8	1106.627	47585.08
3200	159.3176	-14069.2	-13986.9	-14029.1	-1420.51	47688.03
3300	161.1333	-14069.3	-13986	-13940.9	1518.514	47585.34
3400	168.4042	-14072.2	-13985.2	-14032.9	-1604.43	47684.07
3500	176.0348	-14075.2	-13984.2	-13937.2	1584.882	47561.19
3600	177.3564	-14075	-13983.3	-14022.5	-1317.3	47662.38
3700	172.1757	-14071.4	-13982.4	-13951.8	1030.64	47592.32
3800	163.9527	-14066.2	-13981.5	-13998.5	-572.761	47666.35
3900	159.1922	-14062.9	-13980.6	-13984	-116.267	47662.53
4000	161.5317	-14063.2	-13979.7	-13956	796.7198	47630.51
4100	169.6407	-14066.4	-13978.7	-14028.8	-1681.21	47707.42
4200	179.6054	-14070.5	-13977.7	-13899.3	2640.806	47543.68

4300	185.2894	-14072.4	-13976.6	-14079.6	-3454.99	47751.82
4400	186.5249	-14071.9	-13975.5	-13850.1	4231.735	47486.44
4500	182.2271	-14068.6	-13974.4	-14109.3	-4521.62	47805.02
4600	178.7342	-14065.8	-13973.4	-13842.4	4418.54	47502.44
4700	176.2963	-14063.5	-13972.4	-14084.7	-3765.5	47795.99
4800	178.497	-14063.7	-13971.5	-13892	2677.557	47568.78
4900	182.0299	-14064.5	-13970.5	-14013.1	-1430.72	47709.05
5000	185.7243	-14065.4	-13969.4	-13962.5	232.0909	47647.87
5100	186.9309	-14064.9	-13968.3	-13948.5	664.5392	47634.82
5200	185.3003	-14062.9	-13967.1	-14001.1	-1138.73	47705.35
5300	183.1281	-14060.7	-13966	-13925.2	1374.515	47625.67
5400	181.8717	-14058.9	-13964.9	-14008.6	-1464.54	47731.94
5500	183.8568	-14058.9	-13963.8	-13920.4	1459.611	47630.37
5600	187.6377	-14059.7	-13962.7	-14004.5	-1405.02	47728.92
5700	192.2695	-14060.9	-13961.5	-13923.2	1286.983	47631.52
5800	194.8668	-14061	-13960.3	-13992.2	-1068.92	47714.5
5900	195.601	-14060.2	-13959.1	-13934.5	826.4224	47651.59
6000	194.6519	-14058.5	-13957.9	-13973.3	-516.294	47705.07
6100	193.8821	-14056.9	-13956.7	-13951.6	172.1596	47686.8
6200	194.1336	-14055.8	-13955.5	-13950.6	163.84	47691.4
6300	195.7002	-14055.4	-13954.2	-13969.6	-515.742	47717.25
6400	198.2875	-14055.5	-13953	-13928.4	826.3891	47670.62
6500	200.3478	-14055.3	-13951.7	-13984.1	-1086.49	47738.89
6600	201.7734	-14054.7	-13950.4	-13911.5	1306.694	47656.39
6700	201.6474	-14053.3	-13949.1	-13991.7	-1427.87	47756.74
6800	201.4537	-14051.9	-13947.8	-13903.9	1475.155	47659.63
6900	200.8808	-14050.3	-13946.5	-13988.5	-1408.21	47766.84
7000	201.8265	-14049.5	-13945.2	-13908.7	1225.422	47678.36
7100	203.977	-14049.3	-13943.9	-13971.7	-934.657	47756.78
7200	207.9003	-14050	-13942.5	-13928	487.1761	47706.53
7300	212.0108	-14050.7	-13941.2	-13939.2	65.3005	47720.4
7400	215.1757	-14051	-13939.7	-13961.7	-737.533	47748.63
7500	216.9114	-14050.4	-13938.3	-13893.7	1498.944	47672.03
7600	216.1909	-14048.6	-13936.8	-14003.8	-2244.55	47810.38
7700	215.1388	-14046.5	-13935.3	-13848.1	2934.977	47635.43
7800	213.056	-14044	-13933.9	-14036.2	-3426.33	47868.78
7900	213.8694	-14043	-13932.4	-13823.3	3670.458	47622.81
8000	215.5306	-14042.4	-13931	-14037.2	-3554.79	47880.65
8100	220.4136	-14043.5	-13929.5	-13836.8	3120.17	47643.43
8200	224.805	-14044.3	-13928.1	-13998.7	-2364.53	47835.84
8300	229.7113	-14045.3	-13926.6	-13884.3	1420.51	47700.76
8400	232.5912	-14045.2	-13925	-13937.1	-404.487	47766.85
8500	233.6464	-14044.2	-13923.4	-13939.8	-549.808	47775.75
8600	233.2215	-14042.4	-13921.8	-13883.3	1293.509	47716.69

8700	231.6005	-14039.9	-13920.2	-13972.4	-1749.91	47831.71
8800	231.1739	-14038.1	-13918.6	-13861.8	1908.553	47707.87
8900	230.6456	-14036.2	-13917	-13970.8	-1801.38	47844.25
9000	231.0447	-14034.9	-13915.4	-13868.3	1582.202	47728.78
9100	230.5525	-14033	-13913.8	-13952.4	-1290.4	47836.24
9200	230.7325	-14031.5	-13912.2	-13881.5	1031.94	47759.53
9300	231.3191	-14030.2	-13910.6	-13933.6	-770.583	47828.98
9400	233.4598	-14029.7	-13909	-13893.7	511.6543	47787.32
9500	236.475	-14029.6	-13907.3	-13915.4	-270.069	47818.12
9600	240.3756	-14029.9	-13905.6	-13905.2	14.22007	47809.32
9700	244.7914	-14030.5	-13903.9	-13897.2	225.7624	47801.78
9800	249.4145	-14031.1	-13902.2	-13916.1	-465.85	47826.08
9900	253.8618	-14031.6	-13900.4	-13880	683.6962	47785.41
10000	256.4403	-14031.1	-13898.6	-13923.7	-840.764	47842.59
10100	257.1482	-14029.6	-13896.7	-13867.2	991.4164	47783.52
10200	255.7436	-14027.1	-13894.9	-13926.9	-1071.44	47865.27
10300	254.8064	-14024.8	-13893.1	-13861.3	1065.474	47797.5
10400	254.8114	-14023	-13891.2	-13921.6	-1017.08	47876.89
10500	256.8046	-14022.2	-13889.4	-13863.7	861.0308	47812.67
10600	258.7126	-14021.3	-13887.6	-13906	-617.153	47867.5
10700	260.0792	-14020.1	-13885.7	-13877.4	276.4691	47839.63
10800	260.656	-14018.5	-13883.8	-13878.9	164.281	47849.76
10900	261.6531	-14017.1	-13881.9	-13903.1	-710.365	47887.62
11000	264.6699	-14016.8	-13880	-13841.7	1281.642	47820.94
11100	268.9012	-14017	-13878	-13935.3	-1914.49	47936.7
11200	274.9904	-14018.1	-13876	-13801.8	2486.884	47779.37
11300	279.2861	-14018.3	-13873.9	-13960.3	-2885.68	47971.57
11400	283.4028	-14018.3	-13871.9	-13778.6	3128.662	47758.93
11500	284.0095	-14016.6	-13869.8	-13960.4	-3025.66	47983.51
11600	284.3184	-14014.7	-13867.7	-13787	2706.467	47786.36
11700	281.7724	-14011.3	-13865.7	-13928.5	-2099.01	47967.98
11800	279.5579	-14008.1	-13863.6	-13824.1	1323.496	47856.5
11900	277.3233	-14004.9	-13861.6	-13875.7	-473.237	47930.8
12000	277.2126	-14002.8	-13859.5	-13872.6	-437.941	47936.16
12100	279.8638	-14002.1	-13857.5	-13820.3	1241.836	47879.5
12200	284.0121	-14002.1	-13855.3	-13914	-1957.82	47995
12300	290.4832	-14003.3	-13853.2	-13778.9	2486.723	47835.24
12400	296.3259	-14004.1	-13850.9	-13935	-2802.96	48023.91
12500	303.6396	-14005.6	-13848.7	-13761	2936.741	47817.27
12600	308.0111	-14005.6	-13846.4	-13930.6	-2810.22	48023.96
12700	311.2207	-14005	-13844.1	-13767.4	2568.518	47835.55
12800	309.7643	-14001.9	-13841.8	-13904.5	-2091.93	48012.97
12900	307.1965	-13998.3	-13839.5	-13793.4	1544.447	47895.8
13000	303.6797	-13994.2	-13837.2	-13865	-927.324	47998.42

13100	302.8063	-13991.5	-13835	-13827.7	244.2787	47966.02
13200	305.1091	-13990.4	-13832.7	-13821.7	365.3735	47966.46
13300	309.6279	-13990.4	-13830.3	-13859	-957.294	48014.9
13400	314.7001	-13990.6	-13828	-13784.7	1446.656	47929.62
13500	316.9424	-13989.4	-13825.5	-13878.1	-1753.1	48049.08
13600	318.2969	-13987.7	-13823.1	-13765.2	1935.157	47924.58
13700	318.6682	-13985.4	-13820.7	-13878.1	-1913.68	48071.59
13800	322.3021	-13984.9	-13818.3	-13766.5	1730.229	47945.42
13900	327.2333	-13985	-13815.8	-13859.5	-1457.21	48061.32
14000	333.4562	-13985.7	-13813.3	-13779.7	1122.961	47968.27
14100	336.98	-13984.9	-13810.7	-13832.9	-740.725	48038.14
14200	338.0708	-13982.9	-13808.2	-13794.8	445.9085	48002.99
14300	337.1962	-13979.9	-13805.6	-13809.4	-128.812	48034.72
14400	336.7618	-13977.1	-13803	-13807.1	-137.373	48046.25
14500	338.3796	-13975.3	-13800.4	-13790.2	339.8343	48037.25
14600	342.3001	-13974.7	-13797.8	-13813.9	-535.66	48073.08
14700	348.5923	-13975.3	-13795.1	-13775.6	651.0725	48030.27
14800	354.9287	-13975.9	-13792.4	-13814.7	-741.443	48079.82
14900	359.8664	-13975.7	-13789.7	-13765.1	817.7827	48025.68
15000	360.6296	-13973.3	-13786.9	-13810.8	-795.381	48092.74
15100	358.6147	-13969.5	-13784.1	-13761.2	763.7561	48050.74
15200	355.8132	-13965.3	-13781.3	-13802.8	-714.578	48118.69
15300	356.8309	-13963	-13778.6	-13761.8	559.5839	48080.98
15400	361.8954	-13962.9	-13775.8	-13788.7	-429.836	48118.44
15500	369.2924	-13963.9	-13773	-13766.9	201.1985	48093.79
15600	374.8866	-13963.9	-13770.1	-13765.4	155.254	48097.87
15700	376.2517	-13961.6	-13767.2	-13785.5	-609.408	48134.96
15800	374.5742	-13957.8	-13764.2	-13727.8	1213.308	48084.27
15900	371.9215	-13953.5	-13761.3	-13819.2	-1924.7	48214.14
16000	374.2738	-13951.8	-13758.4	-13682.8	2517.595	48061.85
16100	379.8382	-13951.7	-13755.4	-13846.8	-3035.34	48265.09
16200	390.3299	-13954.1	-13752.3	-13652.1	3344.561	48027.94
16300	397.0254	-13954.5	-13749.3	-13849.3	-3320	48268.11
16400	401.1395	-13953.5	-13746.2	-13651.8	3147.137	48038.06
16500	397.5376	-13948.5	-13743.1	-13821.6	-2606.39	48263.11
16600	393.4458	-13943.4	-13740	-13682.7	1907.01	48118.57
16700	390.1942	-13938.7	-13737	-13769.8	-1091.62	48246.23
16800	392.3641	-13936.7	-13733.9	-13730	129.4601	48211.27
16900	398.5836	-13936.8	-13730.8	-13709	722.9227	48191.65
17000	406.1893	-13937.6	-13727.6	-13774.3	-1548.67	48273
17100	414.8428	-13938.8	-13724.3	-13658.7	2184.512	48135.03
17200	420.7353	-13938.5	-13721	-13798.3	-2562.35	48309.76
17300	426.9673	-13938.4	-13717.7	-13634.7	2760.747	48121.11
17400	428.8607	-13936	-13714.3	-13793.4	-2620.71	48329.05

17500	430.5303	-13933.5	-13710.9	-13640.6	2341.044	48160.68
17600	429.9374	-13929.8	-13707.6	-13764.2	-1879.18	48328.02
17700	433.603	-13928.3	-13704.2	-13663.3	1358.33	48215.94
17800	439.3485	-13927.9	-13700.7	-13728.2	-909.402	48300.17
17900	445.3279	-13927.5	-13697.3	-13680.6	553.6582	48248.34
18000	446.9182	-13924.8	-13693.7	-13699.6	-193.887	48285.58
18100	445.4462	-13920.5	-13690.2	-13690.7	-17.6682	48295.14
18200	443.9679	-13916.2	-13686.7	-13680	223.2228	48304.46
18300	444.5546	-13913	-13683.2	-13695.5	-409.948	48342.1
18400	447.9406	-13911.2	-13679.6	-13664.2	512.4925	48316.85
18500	452.7429	-13910.1	-13676.1	-13695.7	-651.202	48363.74
18600	459.9454	-13910.2	-13672.4	-13651.2	703.8762	48314.81
18700	467.5445	-13910.4	-13668.7	-13691	-735.729	48368.79
18800	473.7377	-13909.9	-13665	-13641.4	781.1055	48318.76
18900	474.9578	-13906.7	-13661.2	-13683.7	-744.014	48388.69
19000	474.0426	-13902.5	-13657.5	-13637	677.5183	48354.12
19100	473.6367	-13898.5	-13653.7	-13672.8	-631.237	48418.02
19200	477.5919	-13896.8	-13649.9	-13636.9	429.441	48387.2
19300	484.7219	-13896.6	-13646.1	-13652.2	-202.75	48412.53
19400	492.5697	-13896.8	-13642.2	-13648.7	-215.195	48414.01
19500	497.7467	-13895.5	-13638.2	-13612.9	837.9266	48381.36
19600	498.3934	-13891.9	-13634.2	-13680.7	-1533.57	48482.3
19700	499.3265	-13888.3	-13630.2	-13563.9	2197.81	48359.81
19800	500.3002	-13884.8	-13626.2	-13710.2	-2769.64	48557.6
19900	507.2033	-13884.4	-13622.2	-13527.3	3145.64	48345.71
20000	512.5895	-13883.1	-13618.1	-13719.1	-3329.35	48591.24
20100	519.0529	-13882.3	-13614	-13511.7	3388.14	48349.53
20200	518.4507	-13877.8	-13609.8	-13704.7	-3126.15	48606.1
20300	519.6266	-13874.3	-13605.7	-13523.1	2734.959	48404.03
20400	521.523	-13871.2	-13601.6	-13667.7	-2177.26	48598.46
20500	530.4589	-13871.6	-13597.4	-13554.8	1410.976	48468.43
20600	539.9525	-13872.3	-13593.2	-13611.6	-607.447	48543.53
20700	547.4758	-13871.8	-13588.8	-13595.6	-222.407	48532.84
20800	550.1422	-13868.8	-13584.4	-13552.5	1056.288	48496.79
20900	547.3849	-13863	-13580	-13633.2	-1752.11	48621.71
21000	545.7102	-13857.7	-13575.6	-13505.1	2329.312	48490.65
21100	544.5159	-13852.7	-13571.3	-13654.8	-2747.29	48697.36
21200	550.782	-13851.6	-13566.9	-13477.9	2939.512	48491.9
21300	557.321	-13850.5	-13562.4	-13651.7	-2937.25	48715.66
21400	566.5934	-13850.8	-13557.9	-13472.9	2809.536	48503.31
21500	569.3572	-13847.7	-13553.4	-13627.5	-2437.25	48711.16
21600	570.8564	-13843.9	-13548.8	-13486.6	2055.349	48560.16
21700	569.5028	-13838.7	-13544.3	-13591.6	-1557.16	48715.07
21800	573.4139	-13836.1	-13539.7	-13509	1011.141	48632.18

21900	581.2582	-13835.6	-13535.1	-13551.6	-543.097	48697.92
22000	592.7071	-13836.8	-13530.4	-13528.5	62.15764	48676.62
22100	604.3325	-13838	-13525.6	-13515.1	344.5727	48666.22
22200	613.7811	-13838	-13520.7	-13541.2	-675.229	48707
22300	620.6214	-13836.6	-13515.8	-13486.2	972.3525	48652.67
22400	621.5731	-13832.1	-13510.8	-13544.1	-1095.49	48746.5
22500	619.5088	-13826.1	-13505.8	-13468	1245.011	48681.9
22600	614.7114	-13818.7	-13500.9	-13540.2	-1288.57	48803.96
22700	614.2742	-13813.5	-13496	-13458	1249.967	48727.99
22800	617.6851	-13810.4	-13491.1	-13528.7	-1232.51	48832.14
22900	626.0593	-13809.7	-13486.1	-13451.7	1130.36	48747.49
23000	631.4191	-13807.5	-13481.1	-13510.2	-955.86	48835.65
23100	633.3621	-13803.4	-13476	-13451.5	805.3906	48786.83
23200	632.8134	-13798	-13470.9	-13489.9	-622.608	48862.07
23300	636.9376	-13795.1	-13465.8	-13458.6	236.2813	48844.28
23400	647.0393	-13795.2	-13460.7	-13455.9	155.6598	48852.23
23500	659.9098	-13796.5	-13455.4	-13480.8	-830.091	48888.93
23600	671.2147	-13797	-13450.1	-13397.7	1719.413	48795.82
23700	674.913	-13793.5	-13444.6	-13526.2	-2667.89	48976.46
23800	678.5678	-13789.9	-13439.1	-13328.5	3635.432	48756.24
23900	678.0986	-13784.2	-13433.7	-13568.7	-4408.93	49084.09
24000	686.1292	-13782.8	-13428.1	-13279.4	4889.698	48743.47
24100	688.4251	-13778.5	-13422.6	-13573.2	-4907.85	49132
24200	696.3891	-13777.1	-13417.2	-13275.1	4664.7	48775.9
24300	700.3761	-13773.7	-13411.6	-13535.1	-4026.19	49119.04
24400	712.6773	-13774.5	-13406.1	-13307.1	3247.911	48846.56
24500	717.9756	-13771.5	-13400.4	-13470.6	-2291.51	49072.56
24600	718.7465	-13766.3	-13394.8	-13349.7	1474.862	48950.26
24700	712.2237	-13757.2	-13389	-13409.2	-658.446	49063.32
24800	707.7183	-13749.2	-13383.4	-13383	12.33336	49065.87
24900	709.1449	-13744.3	-13377.7	-13364.6	429.0389	49069.6
25000	715.6606	-13742	-13372.1	-13395	-747.55	49126.41
25100	725.4084	-13741.3	-13366.3	-13339	891.9599	49070.27
25200	734.5174	-13740.1	-13360.4	-13388.5	-914.367	49147.39
25300	746.5282	-13740.4	-13354.5	-13327.8	872.1173	49083.62
25400	758.6417	-13740.7	-13348.5	-13372.3	-775.431	49152.47
25500	771.8611	-13741.4	-13342.4	-13320.7	710.1117	49100.82
25600	781.7871	-13740.4	-13336.2	-13354.6	-597.119	49160.44
25700	787.2359	-13736.9	-13330	-13312.4	573.3918	49131.69
25800	786.3912	-13730.3	-13323.8	-13338.3	-474.292	49196.73
25900	784.9382	-13723.3	-13317.6	-13305.5	393.1994	49189.69
26000	784.6013	-13716.9	-13311.3	-13321.5	-331.303	49242.71
26100	787.2284	-13712	-13305.1	-13298.5	213.5764	49241.77
26200	792.334	-13708.4	-13298.8	-13303.1	-138.777	49273.29

26300	799.0631	-13705.6	-13292.5	-13292.9	-10.3684	49282.94
26400	806.3932	-13703	-13286.2	-13282	135.0787	49290.27
26500	815.7826	-13701.4	-13279.7	-13290.2	-341.055	49318.35
26600	827.7147	-13701.1	-13273.2	-13257.5	511.3646	49292.32
26700	836.3686	-13699	-13266.6	-13289.6	-744.032	49353.08
26800	841.5159	-13695	-13260	-13228.4	1026.067	49301.59
26900	843.7213	-13689.5	-13253.3	-13295.9	-1378.31	49418.33
27000	849.6641	-13685.9	-13246.7	-13194.9	1682.738	49318.02
27100	852.0421	-13680.4	-13239.9	-13301.7	-1998.89	49485.97
27200	855.5262	-13675.4	-13233.2	-13165.2	2208.778	49343.75
27300	856.5783	-13669.2	-13226.4	-13299.4	-2360.21	49545.66
27400	865.6619	-13667.1	-13219.7	-13149.1	2291.007	49375.83
27500	873.5073	-13664.4	-13212.8	-13277.7	-2097.83	49561.21
27600	883.4429	-13662.6	-13205.9	-13151.6	1762.101	49421.84
27700	885.6818	-13656.8	-13199	-13236.9	-1224.87	49563.91
27800	887.3264	-13650.7	-13192.1	-13175.5	534.8472	49521.6
27900	892.3904	-13646.3	-13185.1	-13180.4	150.785	49559.85
28000	903.1931	-13644.9	-13178	-13209.9	-1028.44	49619.82
28100	917.9687	-13645.3	-13170.8	-13114.6	1819.694	49514.33
28200	928.5921	-13643.6	-13163.6	-13243.2	-2566.92	49698.15
28300	940.5311	-13642.4	-13156.2	-13056.1	3239.964	49479.11
28400	940.597	-13635	-13148.8	-13260.3	-3589.58	49775.21
28500	942.8202	-13628.8	-13141.5	-13023.4	3820.008	49508.04
28600	936.5598	-13618.3	-13134.2	-13245.8	-3587.64	49838.94
28700	937.0812	-13611.3	-13126.9	-13029.3	3154.023	49599.79
28800	934.3393	-13602.6	-13119.7	-13195.6	-2441.17	49854.28
28900	941.1623	-13598.9	-13112.4	-13054.8	1857.149	49702.44
29000	948.8	-13595.5	-13105	-13147.3	-1359.5	49848.97
29100	961.7377	-13594.7	-13097.6	-13066.2	1011.102	49765.24
29200	974.6427	-13593.8	-13090	-13112.1	-709.802	49845
29300	990.0149	-13594.1	-13082.4	-13067.4	479.739	49805.65
29400	1002.275	-13592.7	-13074.6	-13082.6	-257.267	49847.39
29500	1010.111	-13588.9	-13066.8	-13064.1	85.78682	49853.07
29600	1012.859	-13582.5	-13059	-13054.9	129.8816	49879.11
29700	1012.546	-13574.5	-13051.1	-13062.2	-354.09	49931.56
29800	1013.717	-13567.3	-13043.3	-13026.6	535.5049	49925.27
29900	1017.375	-13561.3	-13035.5	-13063.7	-903.325	50008.91
30000	1027.181	-13558.5	-13027.5	-12987	1299.531	49936.47
30100	1035.061	-13554.6	-13019.6	-13081.4	-1976.72	50089.22
30200	1044.329	-13551.3	-13011.5	-12924.2	2801.591	49916.66
30300	1044.687	-13543.4	-13003.4	-13117	-3625.21	50212.05
30400	1052.614	-13539.3	-12995.2	-12863.8	4217.823	49920.71
30500	1052.617	-13531.2	-12987.1	-13127.5	-4470.22	50311.63
30600	1062.082	-13528	-12979	-12839.3	4478.255	49965.94

30700	1065.661	-13521.7	-12970.8	-13104.3	-4249.48	50343.87
30800	1085.451	-13523.7	-12962.6	-12843.7	3807.531	50012.9
30900	1099.814	-13522.8	-12954.3	-13053.4	-3157.36	50304.28
31000	1116.6	-13523	-12945.8	-12867.1	2518.45	50081.88
31100	1120.601	-13516.6	-12937.3	-12990.9	-1706.48	50285.24
31200	1123.433	-13509.6	-12928.8	-12897.1	1013.343	50210.37
31300	1124.014	-13501.3	-12920.3	-12933.2	-410.067	50305.05
31400	1131.285	-13496.5	-12911.7	-12917.1	-169.595	50318.14
31500	1146.111	-13495.5	-12903.1	-12886.8	518.8968	50299.8
31600	1160.464	-13494.2	-12894.4	-12917.8	-745.297	50362.61
31700	1170.683	-13490.7	-12885.5	-12855.3	962.1011	50311.2
31800	1171.753	-13482.4	-12876.7	-12904.4	-881.173	50423.72
31900	1170.265	-13472.8	-12867.9	-12838.1	946.6317	50392.89
32000	1164.9	-13461.3	-12859.1	-12884.9	-819.067	50516.52
32100	1164.879	-13452.5	-12850.3	-12827.1	738.2937	50491.11
32200	1170.154	-13446.4	-12841.5	-12864.4	-724.247	50578.38
32300	1183.208	-13444.3	-12832.7	-12811.8	662.4045	50532.99
32400	1192.266	-13440	-12823.7	-12841.6	-565.497	50603.27
32500	1194.465	-13432.2	-12814.7	-12796	593.9934	50586.33
32600	1194.139	-13423	-12805.8	-12824.6	-596.09	50675.03
32700	1203.252	-13418.7	-12796.7	-12781.2	492.9773	50654.17
32800	1219.47	-13418	-12787.6	-12805.8	-574.726	50710.56
32900	1239.878	-13419.3	-12778.4	-12758.1	642.4304	50661.3
33000	1255.66	-13418.1	-12769.1	-12793.9	-783.65	50729.14
33100	1270.474	-13416.4	-12759.6	-12732.6	856.0085	50673.42
33200	1280.468	-13412	-12750.1	-12774.3	-763.717	50767.53
33300	1285.98	-13405.4	-12740.6	-12724.9	496.6448	50751.04
33400	1283.064	-13394.3	-12731.1	-12735.9	-153.315	50827.59
33500	1281.121	-13383.9	-12721.7	-12738.1	-517.209	50888.56
33600	1289.783	-13378.8	-12712.1	-12677.3	1095.788	50850.6
33700	1298.916	-13374	-12702.6	-12763.6	-1916.55	51006.97
33800	1308.678	-13369.3	-12692.9	-12607	2706.499	50837.25
33900	1307.809	-13359.2	-12683.2	-12792.4	-3418.99	51143.37
34000	1315.043	-13353.2	-12673.5	-12548.6	3933.044	50863.81
34100	1310.54	-13341.3	-12663.8	-12796.3	-4139.44	51260.69
34200	1321.215	-13337.1	-12654.1	-12524.8	4066.903	50933.3
34300	1327.193	-13330.5	-12644.4	-12764.2	-3740.39	51303.53
34400	1347.273	-13331.1	-12634.7	-12527.6	3362.704	51010.43
34500	1356.965	-13326.2	-12624.8	-12714.3	-2795.31	51307.09
34600	1373.804	-13325	-12614.8	-12536.8	2447.649	51101.41
34700	1380.435	-13318.4	-12604.8	-12668.1	-1975.42	51332.08
34800	1381.356	-13308.8	-12594.8	-12535.7	1845.814	51214.64
34900	1365.134	-13290.4	-12584.8	-12634.4	-1545.15	51431.87
35000	1356.288	-13276	-12574.9	-12533.6	1286.33	51360.46

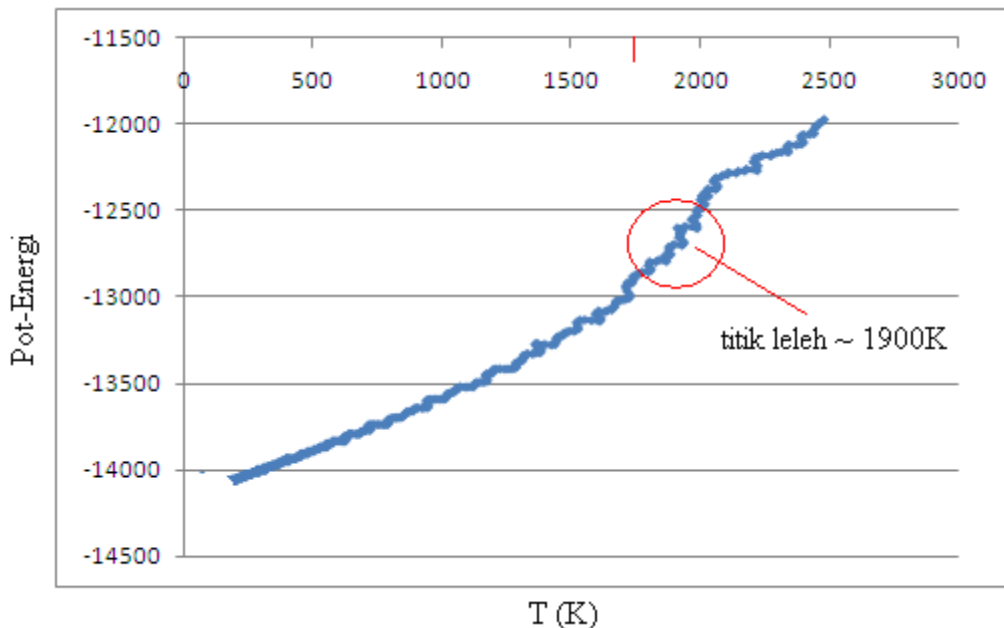
35100	1364.307	-13270.2	-12565	-12605.9	-1273.81	51496.04
35200	1395.215	-13276.1	-12554.9	-12521	1058.091	51382.99
35300	1420.827	-13279.1	-12544.7	-12571.8	-843.79	51464.75
35400	1434.999	-13276.1	-12534.3	-12508	820.8913	51410.63
35500	1437.278	-13266.8	-12523.9	-12549.4	-791.97	51523.73
35600	1439.663	-13257.7	-12513.6	-12493.1	637.4589	51504.92
35700	1438.311	-13246.6	-12503.1	-12526.1	-714.451	51614.36
35800	1440.069	-13237.2	-12492.8	-12483.8	280.8224	51611.46
35900	1448.284	-13231	-12482.4	-12478.2	130.1226	51649.93
36000	1459.925	-13226.6	-12472	-12499.9	-864.755	51722.34
36100	1469.118	-13220.8	-12461.4	-12412.3	1521.296	51651.72
36200	1468.832	-13210.2	-12450.9	-12518.1	-2074.43	51863.44
36300	1479.971	-13205.3	-12440.3	-12365.2	2327.437	51702.42
36400	1489.956	-13199.9	-12429.7	-12507.8	-2410.07	51948.6
36500	1508.857	-13198.9	-12419	-12342.6	2363.524	51749.7
36600	1515.857	-13191.8	-12408.2	-12478.8	-2173.99	51985.52
36700	1525.889	-13186.1	-12397.4	-12327.8	2152.013	51823.63
36800	1522.454	-13173.6	-12386.6	-12449.9	-1946.59	52065.95
36900	1520.974	-13162	-12375.8	-12313.8	1912.617	51947.29
37000	1517.708	-13149.6	-12365.1	-12427	-1900.62	52174.98
37100	1527.269	-13143.8	-12354.3	-12294.4	1845.287	52036.71
37200	1531.767	-13135.3	-12343.5	-12404.9	-1882.72	52240.76
37300	1550.499	-13134	-12332.6	-12271.3	1883.242	52081.19
37400	1575.643	-13136	-12321.5	-12388	-2037.53	52269.14
37500	1607.245	-13141.1	-12310.3	-12230.7	2446.932	52073.15
37600	1612.701	-13132.5	-12298.9	-12404.2	-3221.73	52381.98
37700	1612.176	-13120.9	-12287.5	-12140.9	4509.963	52086.09
37800	1591.36	-13098.7	-12276.1	-12467.4	-5821.77	52649.67
37900	1601.351	-13092.7	-12265	-12064	6175.674	52132.12
38000	1603.292	-13082.6	-12253.8	-12443.5	-5762.84	52732.8
38100	1630.197	-13085.4	-12242.8	-12080.8	4966.898	52239.87
38200	1638.428	-13078.4	-12231.5	-12356.1	-3788.52	52683.2
38300	1655.152	-13075.8	-12220.2	-12124.3	2933.886	52393.52
38400	1656.587	-13065.1	-12208.8	-12278.5	-2119.52	52675.68
38500	1666.126	-13058.7	-12197.4	-12143.4	1647.951	52537.83
38600	1667.714	-13048	-12185.9	-12225	-1187.34	52720.85
38700	1668.797	-13037.1	-12174.5	-12145	896.3303	52672.38
38800	1670.267	-13026.4	-12163	-12185.8	-691.141	52796.95
38900	1683.237	-13021.6	-12151.5	-12137.6	424.3521	52777.32
39000	1698.421	-13017.9	-12139.9	-12148	-244.838	52837.28
39100	1711.111	-13012.8	-12128.3	-12126.6	51.80405	52854.82
39200	1722.272	-13006.8	-12116.6	-12112.2	130.9761	52886.84
39300	1727.104	-12997.6	-12104.8	-12117.1	-369.453	52958.77
39400	1723.96	-12984.2	-12093.1	-12070.8	673.0834	52972.07

39500	1714.038	-12967.4	-12081.4	-12129.8	-1456.23	53150.3
39600	1713.103	-12955.2	-12069.6	-12003.2	2005.633	53055.17
39700	1708.223	-12941.1	-12058.1	-12157.5	-2983.48	53376.94
39800	1715.485	-12933	-12046.2	-11935.3	3346.497	53130.3
39900	1713.937	-12920.6	-12034.7	-12149.1	-3423.68	53526.14
40000	1734.002	-12919.2	-12022.9	-11918.6	3138.838	53238.77
40100	1736.211	-12908.6	-12011.2	-12100.6	-2675.24	53580.41
40200	1740.944	-12899.2	-11999.2	-11914	2559.088	53379.09
40300	1735.283	-12884.5	-11987.5	-12068.1	-2405.9	53695.58
40400	1747.009	-12878.6	-11975.6	-11898.1	2320.428	53503.98
40500	1752.134	-12869.4	-11963.7	-12040.6	-2292.61	53778.81
40600	1766.456	-12864.7	-11951.6	-11875	2292.658	53577.73
40700	1773.789	-12856.5	-11939.6	-12018.4	-2344.12	53841.74
40800	1796.587	-12856.1	-11927.4	-11845.8	2439.654	53619.91
40900	1804.681	-12848.1	-11915.2	-11996.4	-2411.93	53904.92
41000	1809.164	-12838.1	-11902.9	-11814	2652.771	53707.89
41100	1796.332	-12819.3	-11890.8	-11989.7	-2932.31	54075.93
41200	1802.029	-12810	-11878.5	-11770.5	3217.005	53824.55
41300	1801.114	-12797.3	-11866.3	-12005.8	-4120.69	54257.77
41400	1825.812	-12797.6	-11853.8	-11672.5	5401.205	53791.84
41500	1834.268	-12789.3	-11841.1	-12076.6	-6926.94	54461.36
41600	1868.117	-12794.1	-11828.4	-11555.2	8149.589	53706.1
41700	1853.815	-12774.3	-11816	-12074.2	-7577.68	54591.45
41800	1871.723	-12771.3	-11803.8	-11584.3	6522.305	53912.67
41900	1869.151	-12757.8	-11791.6	-11957.3	-4863.38	54572.21
42000	1885.39	-12753.8	-11779.2	-11643.5	4014.278	54160.61
42100	1874.269	-12735.6	-11766.8	-11878.9	-3287.4	54618.82
42200	1880.132	-12726.2	-11754.3	-11650.9	3048.233	54348.6
42300	1876.186	-12711.7	-11741.9	-11839.9	-2871.61	54729.08
42400	1887.803	-12705.2	-11729.3	-11635.9	2746.431	54479.35
42500	1896.452	-12697.1	-11716.8	-11811.8	-2779.57	54812.47
42600	1927.544	-12700.4	-11704.1	-11608	2823.328	54531.89
42700	1934.902	-12691.4	-11691.2	-11785.7	-2759.54	54877.15
42800	1934.796	-12678.6	-11678.4	-11576.4	2992.549	54647.04
42900	1915.097	-12655.6	-11665.7	-11776.5	-3223.9	55081.55
43000	1920.751	-12645.9	-11653	-11534.4	3467.606	54796.38
43100	1918.509	-12631.9	-11640.2	-11782.1	-4110.85	55281.71
43200	1929.196	-12624.6	-11627.4	-11451.2	5148.265	54841.79
43300	1908.51	-12600.9	-11614.3	-11840.1	-6510.41	55568.51
43400	1932.243	-12600.2	-11601.4	-11342.3	7568.832	54840.86
43500	1939.927	-12591.3	-11588.5	-11850.4	-7532.49	55707.64
43600	1987.129	-12603	-11575.8	-11348.9	6616.385	54936.08
43700	1985.79	-12589.5	-11563	-11716.4	-4418.69	55604.37
43800	1983.087	-12575.2	-11550.1	-11430.4	3473.091	55258.13

43900	1963.273	-12552.1	-11537.2	-11631.4	-2707.06	55709.77
44000	1974.118	-12544.8	-11524.3	-11439.7	2442.136	55494.82
44100	1978.295	-12533.9	-11511.3	-11591.7	-2307.08	55832.79
44200	1989.268	-12526.6	-11498.3	-11418.1	2308.918	55639.64
44300	1983.024	-12510.3	-11485.2	-11567.3	-2348.86	55980.74
44400	1990.049	-12500.8	-11472.1	-11388.7	2397.102	55777.27
44500	1990.278	-12487.8	-11459	-11549.6	-2586.75	56128.18
44600	2008.02	-12483.8	-11445.8	-11347	2833.492	55872.67
44700	2008.863	-12471	-11432.6	-11545.5	-3215.63	56291.98
44800	2018.569	-12462.7	-11419.3	-11287.2	3780.891	55969.04
44900	1998.633	-12439	-11405.9	-11568.1	-4596.23	56560.29
45000	2008.184	-12430.7	-11392.6	-11202.8	5424.987	56064.31
45100	2003.891	-12415	-11379.1	-11603.1	-6313.05	56832.34
45200	2031.666	-12415.9	-11365.7	-11122.3	6948.897	56119.68
45300	2016.281	-12394.7	-11352.5	-11579.3	-6377.62	56995.66
45400	2029.838	-12388.6	-11339.4	-11152.3	5315.101	56384.59
45500	2027.735	-12374.5	-11326.3	-11447.7	-3413.46	56977.36
45600	2057.697	-12376.6	-11313	-11224.5	2500.441	56675.39
45700	2066.082	-12367.4	-11299.4	-11366	-1872.17	57007.58
45800	2066.266	-12353.9	-11285.8	-11220.1	1852.398	56877.19
45900	2049.078	-12331.5	-11272.3	-11336.7	-1803.03	57201.99
46000	2053.248	-12320.2	-11258.9	-11197.9	1709.991	57065.6
46100	2059.716	-12310	-11245.3	-11311.2	-1842.13	57338.74
46200	2076.763	-12305.2	-11231.7	-11163.6	1908.923	57153.48
46300	2085.757	-12296.1	-11218	-11295.9	-2174.03	57445.73
46400	2103.881	-12291.7	-11204.2	-11113.7	2535.287	57199.83
46500	2107.169	-12279.5	-11190.3	-11304.3	-3169.07	57605.63
46600	2138.82	-12281.9	-11176.3	-11039.4	3836.066	57210.47
46700	2146.541	-12271.8	-11162.2	-11326.8	-4564.62	57776.01
46800	2171.127	-12270.3	-11148.1	-10964.4	5144.014	57220.85
46900	2178.115	-12259.9	-11134	-11326.7	-5333.16	57906.77
47000	2220.895	-12267.8	-11119.8	-10933.1	5224.376	57268.36
47100	2216.561	-12251.5	-11105.7	-11264.8	-4398.19	57925.74
47200	2223.186	-12240.8	-11091.6	-10949.1	3972.028	57489.46
47300	2203.735	-12216.9	-11077.7	-11197.3	-3298.53	58062.4
47400	2214.553	-12208.4	-11063.7	-10957.6	2942.014	57771.18
47500	2211.65	-12193	-11049.7	-11147.4	-2688.31	58221.82
47600	2228.343	-12187.5	-11035.6	-10947.4	2438.443	57964.07
47700	2241.424	-12180.2	-11021.6	-11106.7	-2339.33	58318.88
47800	2272.85	-12182.2	-11007.3	-10928.5	2174.126	58061.74
47900	2278.856	-12171	-10993.1	-11065.2	-1980.99	58378.5
48000	2295.726	-12165.4	-10978.7	-10913.7	1790.278	58187.44
48100	2313.719	-12160.4	-10964.4	-11025.4	-1672.86	58454.36
48200	2341.237	-12160.1	-10949.9	-10891	1619.376	58300.24

48300	2337.812	-12144	-10935.6	-10985.6	-1367.76	58599.72
48400	2335.029	-12128.1	-10921.1	-10881	1097.101	58553.09
48500	2342.347	-12117.7	-10906.9	-10950.1	-1179.46	58781.03
48600	2373.567	-12119.4	-10892.5	-10859.3	903.9476	58675.85
48700	2391.541	-12114.2	-10878	-10904.8	-730.475	58817.82
48800	2400.592	-12104.3	-10863.4	-10845.7	483.169	58794.36
48900	2392.743	-12085.9	-10849.1	-10856	-186.874	58920.1
49000	2388.261	-12069.1	-10834.6	-10845.8	-305.44	59018.05
49100	2399.267	-12060.6	-10820.4	-10799.3	572.4521	59032.61
49200	2422.569	-12058.1	-10805.9	-10837.9	-867.462	59190.64
49300	2441.137	-12053.3	-10791.5	-10745.4	1248.678	59139.4
49400	2437.439	-12036.8	-10776.9	-10817.4	-1092.72	59421.35
49500	2442.657	-12025.1	-10762.5	-10719.8	1151.043	59389.15
49600	2445.507	-12012.1	-10748	-10785.8	-1015.95	59642.05
49700	2457.278	-12003.8	-10733.6	-10696.2	1004.834	59590.22
49800	2461.287	-11991.4	-10719.1	-10757.7	-1034.18	59806.15
49900	2472.939	-11982.9	-10704.6	-10666.9	1013.203	59724.52
50000	2479.934	-11972	-10690.1	-10733.3	-1154.68	59921.06

Kemudian kita plot dengan Excel khusus suhu T vs. Ep (energy potensial). Maka kita akan mendapatkan grafik seperti dibawah ini. Telihat ada suatu daerah dimana grafik mengalami pembelokan. Pada titik belok itulah bahan mencapai titik leleh. Dari gambar kita perkirakan itu adalah suhu 1900K. Jadi titik leleh tembaga adalah $T = 1900\text{K}$.



VI. KESIMPULAN DAN SARAN RISET LANJUTAN

VI.1. Kesimpulan

Sampai dengan tahapan ini penelitian pembuatan program simulasi MD untuk Fisika Statistik telah dapat dilakukan dengan baik. Dengan program ini sudah dapat dilakukan usaha pemanfaatan program untuk mempelajari beberapa sifat-sifat bahan dengan menggunakan kajian Fisika Statistik. Dalam program di atas digunakan ensemble NPT (lihat di file input.in). Dari simulasi dapat dihitung banyak besaran-besaran Termodinamik seperti entalpi, energy total, tekanan, volume dan besaran lainnya dengan membuka file log.LAMMPS hasil simulasi.

VI.2. Saran dan Riset Lanjutan

Pada pengembangan selanjutnya akan dilakukan:

- 1) Pelengkapan database potensial dan pembuatan subprogram yg lain
- 2) Mengaitkan ke program MOLDY MD
- 3) Menambah kasus-kasus yang sesuai untuk pengajaran fisika statistik.

DAFTAR PUSTAKA

- Arkundato, A., Z. Suud, M. Abdullah,** *Corrosion study of Pure Fe in a stagnant liquid Pb by Molecular Dynamics simulation*, Dipresentasikan dalam seminar ICANSE November 2009, Hotel Grand Aquila, Bandung.
- Artoto, A., 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
- Soeprapto & Sumanah, S.R.** (2005). *Metode penelitian kualitatif*. Jakarta: Pusat Penerbitan Universitas Terbuka
- S. J. Plimpton,** *Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics*, J Comp Phys, 117, 1-19 (1995), untuk LAMMPS code di <http://lammmps.sandia.gov/>
- K. Refson, Moldy:** *A Portable molecular dynamics simulation program for successive and parallel computers*, CPC, 126(3), 11 April 2000, pp. 309-328, Elsevier Science B.V.
- Code Jmol** Vizualisasi Molekul di <http://www.jmol.org>

LAMPIRAN

L.1 Back-up Script "input.in" untuk T=1750K

```
units          metal
atom_style     atomic
boundary       p p p
lattice        fcc 3.615
region         mycube block 0 10 0 10 0 10
create_box     1 mycube
create_atoms   1 box
mass           1 63.5
pair_style     eam
pair_coeff     * * Cu_u3.eam
neighbor       2.0 bin
neigh_modify   every 20 delay 0 check yes
compute        ep all pe/atom
dump           mydump all custom 1000 file.dump type x y z c_ep
dump_modify    mydump append yes
thermo         100
thermo_style   custom step temp pe etotal enthalpy press vol
velocity       all create 2500 87287
fix            myfix all npt temp 2500 2500 0.25 iso 0.1 0.1 0.1
timestep       0.0001
compute        1 all msd
fix            msd all ave/time 2 5 100 c_1[1] c_1[2] c_1[3] c_1[4] file msd.dat
run            10000
compute        myrdf all rdf 100 1 1
fix            myfixrdf all ave/time 1 1 1 c_myrdf[1] c_myrdf[2] file rdf.dat mode
vector
run            0
```

Suhu T = 1750K adalah suhu real akhir simulasi bukan suhu awal.

L.2. Back-up Script untuk simulasi langsung dari T=300-3000K

```
units          metal
atom_style     atomic
boundary       p p p
lattice        fcc 3.615
region         mycube block 0 10 0 10 0 10
create_box     1 mycube
create_atoms   1 box
mass           1 63.5
pair_style     eam
pair_coeff     * * Cu_u3.eam
neighbor       2.0 bin
neigh_modify   every 20 delay 0 check yes
compute        ep all pe/atom
dump           mydump all custom 1000 file.dump type x y z c_ep
dump_modify    mydump append yes
thermo         100
thermo_style   custom step temp pe etotal enthalpy press vol
velocity       all create 300 87287
fix            myfix all npt temp 300 3000 0.25 iso 0.1 0.1 0.1
timestep       0.0001
```

```
compute          1 all msd
fix   msd all ave/time 2 5 100 c_1[1] c_1[2] c_1[3] c_1[4] file msd.dat
run
compute          myrdf all rdf 100 1 1
fix   myfixrdf all ave/time 1 1 1 c_myrdf[1] c_myrdf[2] file rdf.dat mode
vector
run              0
```