



**ANALISIS KRISTALINITAS NANO ALPHA-ALUMINA (*SPHERE*) PADA
PROSES PENDINGINAN MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKUL**

SKRIPSI

Oleh

Ivan Permadi Mahfud

141910101038

**PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK
JURUSAN TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS JEMBER**

2019



**ANALISIS KRISTALINITAS NANO ALPHA-ALUMINA (*SPHERE*) PADA
PROSES PENDINGINAN MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKUL**

SKRIPSI

diajukan guna melengkapi tugas akhir dan memenuhi salah satu syarat
untuk menyelesaikan Program Studi Teknik Mesin (S1)
dan mencapai gelar Sarjana Teknik

Oleh

Ivan Permadi Mahfud

141910101038

PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK

JURUSAN TEKNIK MESIN

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS JEMBER

2019

PERSEMBAHAN

Dengan mengucapkan puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa dengan kerendahan hati, skripsi ini saya persembahkan untuk:

1. Kedua orang tua saya Almarhum Mahfud dan Sunaryati yang tidak pernah lelah untuk memberikan doa, semangat, dedikasi, dan motivasi serta segala kasih sayang dan ketulusan yang telah diberikan selama ini.
2. Kakakku Samsul Hidayat dan Roni Syarifudin yang selalu menemani dan memberikan dukungan serta motivasi dalam setiap keadaan.
3. Bapak Imam Sholahuddin, S.T., M.T. selaku pembimbing grup riset MRG 5 yang selalu membimbing saya, baik motivasi, arahan maupun saran yang tiada henti-hentinya selama riset. Serta keluarga besar grup riset MRG yang selalu memberikan saran dan motivasi selama riset.
4. Seluruh guru dari taman kanak-kanak hingga perguruan tinggi yang telah mendidik saya.
5. Teman-teman seperjuangan Teknik Mesin angkatan 2014 (M16) yang telah mendukung dari awal masuk hingga saat ini.

MOTTO

Ilmu pengetahuan itu bukanlah yang dihafal, melainkan yang memberi manfaat.

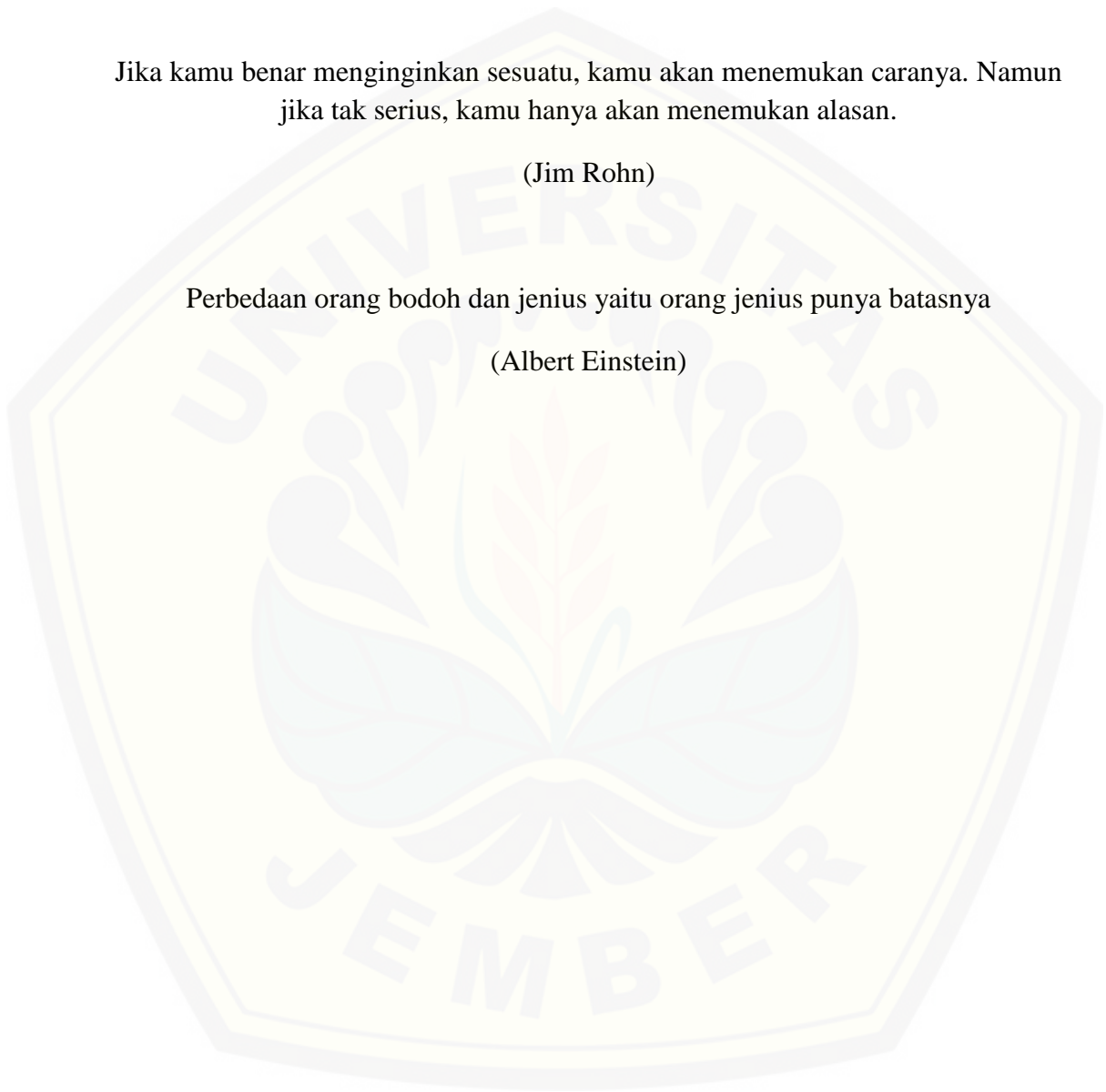
(Imam Syafi'i)

Jika kamu benar menginginkan sesuatu, kamu akan menemukan caranya. Namun jika tak serius, kamu hanya akan menemukan alasan.

(Jim Rohn)

Perbedaan orang bodoh dan jenius yaitu orang jenius punya batasnya

(Albert Einstein)



PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Ivan Permadi Mahfud

NIM : 141910101038

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Analisis Kristalinitas Nano Alpha-Alumina (*Sphere*) Pada Proses Pendinginan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” adalah benar-benar hasil karya sendiri, kecuali kutipan yang sudah saya sebutkan sumbernya, belum pernah diajukan pada institusi manapun, dan bukan karya jiplakan. Saya bertanggung jawab atas keabsahan dan kebenaran isinya sesuai dengan sikap ilmiah yang harus dijunjung tinggi.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya, tanpa ada tekanan dan paksaan dari pihak manapun serta bersedia mendapat sanksi akademik jika ternyata dikemudian hari pernyataan ini tidak benar.

Jember, 09 Januari 2019

yang menyatakan,

Ivan Permadi Mahfud

NIM 141910101038

SKRIPSI

**ANALISIS KRISTALINITAS NANO ALPHA-ALUMINA (*SPHERE*) PADA
PROSES PENDINGINAN MENGGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA
MOLEKUL**

Oleh

Ivan Permadi Mahfud

NIM 141910101038

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Agus Triono S.T., M.T

Dosen Pembimbing Anggota : Sumarji S.T., M.T.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Analisis Kristalinitas Nano Alpha-Alumina (*Sphere*) Pada Proses Pendinginan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul” telah diuji dan disahkan pada :

Hari, tanggal : Rabu, 09 Januari 2019

Tempat : Fakultas Teknik, Universitas Jember

Tim Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama,

Dosen Pembimbing Anggota,

Dr. Agus Triono S.T., M.T.
NIP 197008072002121001

Sumarji S.T., M.T.
NIP 196802021997021001

Tim Penguji

Penguji I,

Penguji II,

M. Edoward Ramadhan S.T., M.T.
NIP 198704302014041001

Rahma Rei Sakura S.T, M.T
NIP 760017115

Mengesahkan

Dekan Fakultas Teknik Universitas Jember,

Dr. Ir. Entin Hidayah, M.U.M.
NIP 19661215 1995 03 2 001

RINGKASAN

Analisis Kristalinitas Nano Alpha-Alumina (*Sphere*) Pada Proses Pendinginan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul; Ivan Permadi Mahfud, 141910101038; 2019; 55 halaman; Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember.

Alumina merupakan senyawa Aluminium dimana bereaksi terhadap oksigen, dan dituliskan secara ilmiah Al_2O_3 . Alumina (Al_2O_3) secara luas digunakan dalam berbagai aplikasi karena memiliki sifat fisik dan kimia yang unggul seperti tahan terhadap panas yang tinggi, isolator listrik yang baik, tahan abrasi dan memiliki ketahanan korosi yang tinggi.

Metode yang digunakan yaitu simulasi dinamika molekul yang merupakan suatu teknik untuk mencontoh proses yang terjadi dalam suatu sistem pada keadaan lingkungan yang nyata dengan bantuan perangkat komputer dan variabel yang digunakan yaitu struktur kristal Alpha-Alumina dengan massa unsur atom aluminium 28,99 kg/kmol dan massa unsur atom oksigen 15,9 kg/kmol, serta menggunakan potensial Lennard-Jones. Pada proses simulasi ini laju temperatur pendinginan yang digunakan adalah $10^{10}K/s$, $10^{11}K/s$ dan $10^{12}K/s$ dengan temperatur sebesar 5000 K – 300 K serta jumlah atom sebesar 2630 atom.

Variasi $10^{10} K/s$ menghasilkan fungsi distribusi radial tertinggi dengan angka *peak* sekitar 550.000, sedangkan pada variasi laju $10^{11} K/s$ *peak* yang dihasilkan pada fungsi distribusi radial adalah 45.000 dan pada variasi $10^{12} K/s$ menghasilkan *peak* pada angka 15.000. Dari hasil tersebut dapat dikatakan bahwa tingkat kristalinitas dari material nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan $10^{10} K/s$ menghasilkan *peak* yang lebih, ini membuktikan bahwa ikatan atom Al_2O_3 belum sepenuhnya terbentuk karena jarak antar atom – atom yang berdekatan masih sedikit dan belum memungkinkan untuk terbentuknya struktur atom Al_2O_3 . Distribusi atom tersebut hanya terjadi pada variasi $10^{10}K/s$ yaitu pada *cluster* yang jumlah atomnya <10 , sedangkan pada *cluster* yang jumlah atomnya <5 berkurang atau sebagian besar lepas. Hal tersebut disebabkan oleh atom- atom yang berada pada *cluster* yang memiliki jumlah sedikit sebagian besar akan melepaskan ikatannya dan berikatan dengan *cluster* yang memiliki jumlah atom lebih banyak.

SUMMARY

Crystallinity Analysis of Nano Alpha-Alumina (Sphere) in the Cooling Process Using Molecular Dynamics Simulation; Ivan Permadi Mahfud, 141910101038; 2019; 55 pages; Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Jember University.

Alumina is an aluminum compound which reacts to oxygen, and scientifically written Al_2O_3 . Alumina (Al_2O_3) is widely used in various applications because it has superior physical and chemical properties such as high heat resistance, good electrical insulators, abrasion resistance and high corrosion resistance.

The method used is molecular dynamics simulation which is a technique to model the processes that occur in a system in a real environment with the help of computer devices and the variables used are the structure of Alpha-Alumina crystals with an elemental mass of aluminum atom 28.99 Kg/Kmol the elemental mass of the oxygen atom is 15.9 Kg/Kmol, and uses the potential of Lennard-Jones. In this simulation process the cooling temperature used is 10^{10} K/s, 10^{11} K/s and 10^{12} K/s with temperatures of 5000 K - 300 K and the number of atoms is 2630 atoms.

Variation of 10^{10} K/s produces the highest radial distribution function with a peak number of around 550,000, whereas in the variation of the rate of 10^{11} K/s peak produced in the radial distribution function is 45,000 and in the variation of 10^{12} K/s produces a peak of 15,000. From these results it can be said that the crystallinity of the Alumina nano material with a cooling temperature variation of 10^{10} K/s produces more peaks, proving that the Al_2O_3 atomic bond has not been fully formed because the distance between adjacent atoms is still small and not possible to form Al_2O_3 atomic structure. The distribution of these atoms only occurs in a variation of 10^{10} K/s which is in clusters with an atomic number of <10 , whereas in clusters whose atomic numbers <5 are reduced or mostly loose, this is because atoms in a cluster that have a small amount will mostly release the tie and bind to clusters that have more atomic junctions.

PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karuniaNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini yang berjudul “Analisis Kristalinitas Nano Alpha-Alumina (*Sphere*) Pada Proses Pendinginan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul”. Shalawat dan salam penulis curahkan kepada Nabi Muhammad SAW yang telah menunjukkan inspirasi, suri tauladan, dan jalan yang terang bagi umat manusia dalam menjalani kehidupan di dunia. Skripsi ini disusun guna memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Jember.

Penulis tidak lupa berterima kasih serta mengapresiasi semua pihak yang telah membantu dan mendukung selama penyusunan skripsi ini, khususnya kepada:

1. Bapak Dr. Agus Triono S.T., M.T selaku Dosen Pembimbing Utama, dan Bapak Sumarji S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan masukan dan arahan dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini. serta Bapak M. Edoward Ramadhan S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Utama dan Bapak Rahma Rei Sakura S.T, M.T selaku Dosen Penguji Anggota yang telah memberikan kritik dan saran untuk perbaikan skripsi.
2. Rekan kerjaku keluarga besar MRG yang selalu memberikan dukungan, ide dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.
3. Semua pihak yang telah membantu dan tidak dapat disebutkan satu per satu.

Penulis menyadari bahwa dalam penyusunan skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan. Semoga hasil dari penelitian ini dapat memberikan manfaat bagi dan pembaca.

Jember, Januari 2019

Penulis

DAFTAR ISI

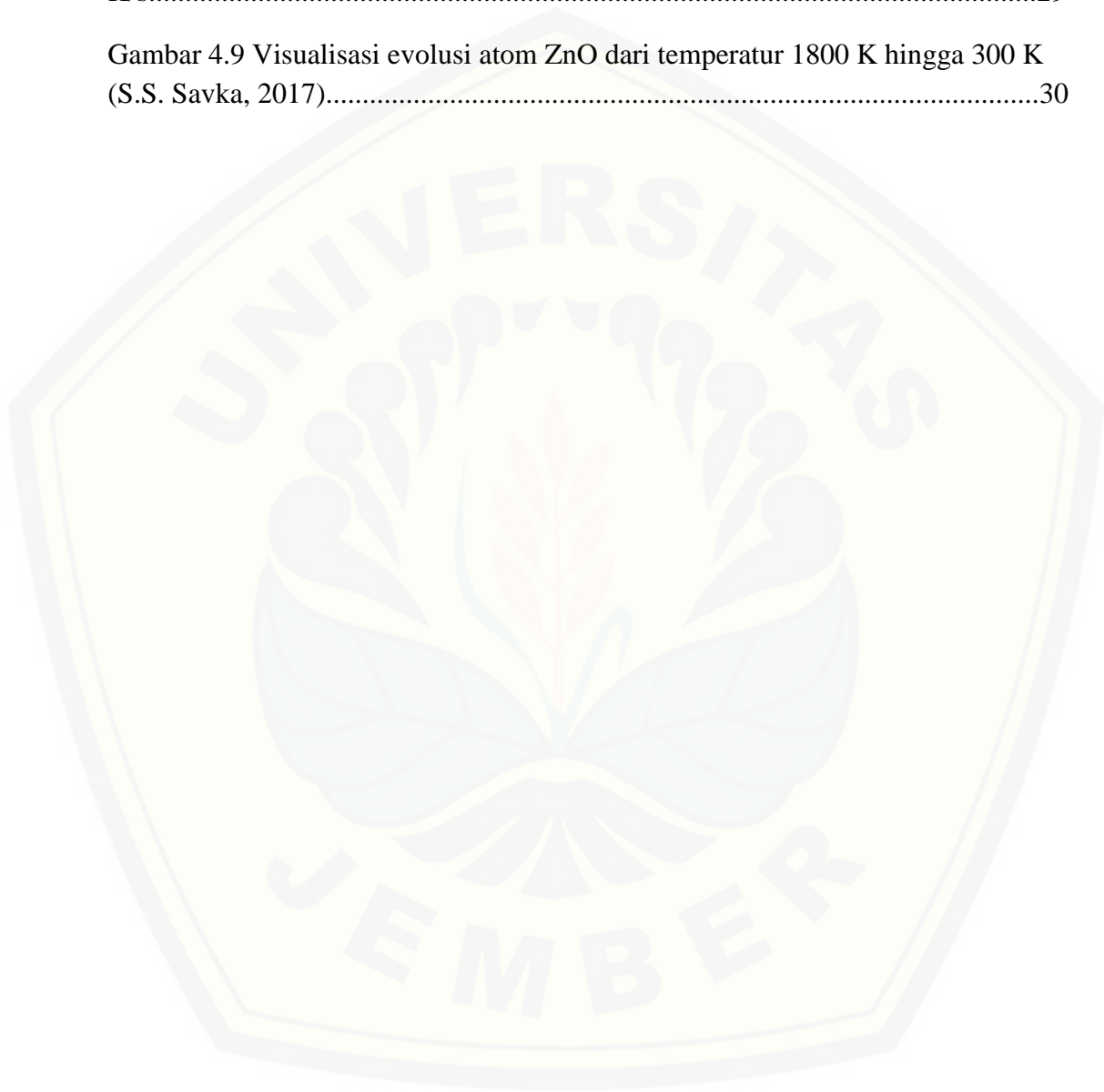
	Halaman
HALAMAN JUDUL	ii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iii
HALAMAN MOTTO	iv
HALAMAN PERNYATAAN.....	v
HALAMAN PEMBIMBING	v
HALAMAN PENGESAHAN.....	vii
RINGKASAN	viii
SUMMARY.....	ix
PRAKATA.....	x
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR TABEL	xv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah.....	2
1.4 Tujuan Penelitian.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	3
1.6 Hipotesis	3
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Nano Material.....	4
2.2 Alumunium.....	4
2.3 Alumina	5
2.4 Kristal Struktur Alumina	6
2.4.2 Kristalin fasa Υ -Alumina.....	7
2.4.3 Kristalin fasa α -Alumina	8
2.5 Dinamika Molekul	9
2.6.1 Interaksi Antar Atom	10
2.6.2 <i>Lennard Jones</i> Potensial.....	10

2.6 Fungsi Distribusi Radial	11
2.7 Kristalinitas.....	13
2.7.1 Differential Scanning Calorimetry	13
2.7.2 XRD (X-Ray Difrraction)	14
2.8 Solidifikasi.....	14
2.9 LAMMPS	15
2.10 OVITO.....	16
2.11 VESTA	17
BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN	19
3.1 Metodologi	19
3.2 Tempat dan Waktu Penelitian	19
3.3 Alat dan Bahan	19
3.3.1 Alat	19
3.3.2 Bahan.....	19
3.4 Prosedur Penelitian.....	19
3.4.1 Pembuatan Read Data	19
3.4.2 Pembentukan Input Script	20
3.4.3 Menjalankan Simulasi LAMMPS	21
3.4.4 Prosedur Visualisasi	21
3.5 Diagram Alir.....	22
BAB 4. PEMBAHASAN	23
4.1 Analisis laju pendinginan terhadap kristalinitas nano Alumina.....	23
4.2 Analisis laju pendinginan terhadap <i>Radia Distance</i>	25
4.3 Laju Temperatur Terhadap Distribusi Partikel.....	28
4.4 Visualisasi kristalinitas nano Alumina	30
BAB 5. PENUTUP.....	33
5.1 Kesimpulan.....	33
5.2 Saran	33
DAFTAR PUSTAKA	35
LAMPIRAN.....	37

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
Gambar 2.1 Demonstrasi aplikasi dari nanopartikel.....	4
Gambar 2.2 Unit cell dari fasa θ -Alumina	7
Gambar 2.3 Struktur fasa γ -Alumina terdiri dari atom Oksigen ditunjukkan dengan struktur FCC dan Aluminium dengan struktur octahedral dan tetrahedral(Jiang <i>et al.</i> , 2010).....	8
Gambar 2.4 Menunjukkan susunan kation dan anion dari <i>basal plane</i> dalam fasa α -Alumina (Lee <i>et al.</i> , 1985).....	9
Gambar 2.5 Mekanisme Perhitungan RDF (Buhler , 2011).....	11
Gambar 2.6 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (Buhler, 2011).....	12
Gambar 2.7 Fungsi distribusi radial kristalin dan amorphous.....	12
Gambar 2.8 contoh grafik hasil differential scanning calorimetry.....	13
Gambar 2.9 Contoh gambar hasil analisa XRD.....	14
Gambar 2.10 Skema solidifikasi.....	15
Gambar 2.11 Gambar layar dari jendela utama Ovitto (Stukowski, 2010).....	17
Gambar 2.12 Gambar layar dari jendela utama VESTA.....	18
Gambar 3.1 Diagram alir penelitian.....	22
Gambar 4.1 Fungsi distribusi radial nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan 10^{10} K/s.....	24
Gambar 4.2 Fungsi distribusi radial nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan 10^{11} K/s.....	24
Gambar 4.3 Fungsi distribusi radial nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan 10^{12} K/s.....	25
Gambar 4.4 Fungsi distribusi radial untuk Al_2O_3 laju pendinginan cepat (B) dan laju pendinginan stabil (A).....	26
Gambar 4.5 Perbandingan Fungsi distribusi radial nano Alumina pada variasi laju temperatur pendinginan 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, dan 10^{12} K/s.....	27

Gambar 4.6 Grafik Distribusi partikel nano Alumina pada laju pendinginan 10^{12} K/s.....	28
Gambar 4.7 Grafik Distribusi partikel nano Alumina pada laju pendinginan 10^{11} K/s.....	29
Gambar 4.8 Grafik Distribusi partikel nano Alumina pada laju pendinginan 10^{10} K/s.....	29
Gambar 4.9 Visualisasi evolusi atom ZnO dari temperatur 1800 K hingga 300 K (S.S. Savka, 2017).....	30



DAFTAR TABEL

	Halaman
Tabel 2.1 Fasa dari Alumina dan sifat mekanis dan properties fisiknya dalam temperatur melting yang berbeda (Levin et al., 1998).	6
Tabel 4.1 Visualisai Solidifikasi Nano Alumina.....	31



BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Nanomaterials yaitu bahan yang berukuran nano meter (nm), dan telah menjadi semakin penting dalam dekade terakhir karena karakteristik khusus mereka dibandingkan dengan bahan berukuran lebih besar (*bulk material*). Hal khusus yang mereka miliki yaitu peningkatan sifat fisik jauh lebih tinggi dibandingkan bahan berukuran mikro (Roco, 1999). *Nanotech* adalah untuk menyelidiki desain, fabrikasi, dan pemanfaatan bahan fungsional dengan setidaknya satu dimensi unggulan diukur dalam nanometer (nm) yaitu 1-100 nm (Bashir *et al.*, 2015). Peneliti banyak yang menyimpulkan bahwa nanopartikel dapat menambah unjuk kerja yang lebih baik terutama karena kerja spesifik area permukaan dan aktivasi permukaannya lebih tinggi dibandingkan dengan skala mikron seperti sifat kimia, *thermal*, magnetik, optik, listrik dan mekanis (Kong *et al.*, 2008; Mahmoud, 2014; Yua *et al.*, 2009)

Alumina merupakan senyawa Aluminium dimana bereaksi terhadap oksigen, dan dituliskan secara ilmiah Al_2O_3 . Alumina (Al_2O_3) secara luas digunakan dalam berbagai aplikasi karena memiliki sifat fisik dan kimia yang unggul seperti tahan terhadap panas yang tinggi, isolator listrik yang baik, tahan abrasi dan memiliki ketahanan korosi yang tinggi (Fujiwara, *et al.*, 2007).

Dalam dunia keteknikan, alumina digunakan di berbagai bidang seperti pelapisan, sintesis dan anoda korban. Hal ini karena alumina mempunyai sifat sangat tahan terhadap asam dan basa, tahan korosi, kekerasan yang tinggi serta ketahanan temperatur yang tinggi (Zhao, 2006). Alumina banyak diproduksi dalam bentuk nanopartikel dengan skala ukuran 10-100 nm. Serbuk nanopartikel alumina banyak digunakan di dalam dunia industri seperti elektronik, metalurgi dan komposit keramik (Khamirul Amin Matori *et al.*, 2012).

Pada proses pembentukan material nano alumina terdapat beberapa fasa salah satunya yaitu proses solidifikasi yang sangat penting dalam pembentukan nano alumina. Menurut (Stuart Ansell *et al.*, 1997) Ketika laju pendinginan mendekati 10^5 K/s, aluminium oksida amorf dapat terbentuk. Pada tingkat

pendinginan yang agak rendah, gamma – Alumina stabil dapat terbentuk langsung dari fasa cair, sedangkan pada tingkat pendinginan dalam kisaran 1-100 K/s hanya terbentuk alpha – Alumina.

Simulasi komputer memainkan peranan penting dalam penelitian ilmiah, karena ia bertindak sebagai jembatan antara besaran mikroskopik, besaran waktu dan besaran makroskopik laboratorium. Dalam fisika komputasi, simulasi komputer dikategorikan menjadi dua yaitu dinamika molekul (molecular dynamic/MD) dan Monte Carlo (MC). Dinamika molekul merupakan suatu teknik simulasi komputer dimana perubahan waktu dari interaksi antar atom yang diikuti dengan mengintegrasikan persamaan gerak antar atom. Oleh karena itu, berbeda dengan metode Monte Carlo, dinamika molekul adalah teknik deterministik yaitu memberikan pengaturan awal dari parameter-parameter, dan perubahan waktu berikutnya keadaan sistem dapat ditentukan (Mutiar, 2005; Nurdin, 2001; Nurdin, 2000:2001).

Pada penelitian ini akan dilakukan analisis kristalinitas pada alumina yang bertujuan untuk mengetahui pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap kristalinitas nano alumina

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap kristalinitas nano Alumina ?
2. Bagaimana pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap parameter kisi (*Radial Distance*) ?
3. Bagaimana pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap distribusi partikel nano Alumina ?
4. Bagaimana visual dari proses kristalinitas nano Alumina ?

1.3 Batasan Masalah

1. Potential yang digunakan yaitu *Lennard jones*.
2. Material yang digunakan Alumina dengan struktur kristal Alpha.
3. Jumlah atom Al_2O_3 yang digunakan 2630 atom.

1.4 Tujuan Penelitian

1. Mengetahui pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap Kristalinitas nano Alumina.
2. Mengetahui pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap perubahan parameter kisi (*Radial Distance*).
3. Mengetahui pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap distribusi partikel nano Alumina.
4. Mengetahui visualisasi proses Solidifikasi nano Alumina.

1.5 Manfaat Penelitian

1. Memberikan informasi mengenai pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap Kristalinitas nano Alumina dengan menganalisis grafik RDF.
2. Mengetahui pengaruh laju temperatur pendinginan terhadap perubahan parameter kisi (*Radial Distance*) dan distribusi atom pada nano Alpha-Alumina.

1.6 Hipotesis

Tingkat kristalinitas nano partikel Alumina akan meningkat jika nilai laju temperatur pendinginan semakin kecil, dapat ditandai dengan perubahan nilai *Radial Distance* yang semakin rapat dan berada pada *peak* yang tinggi.

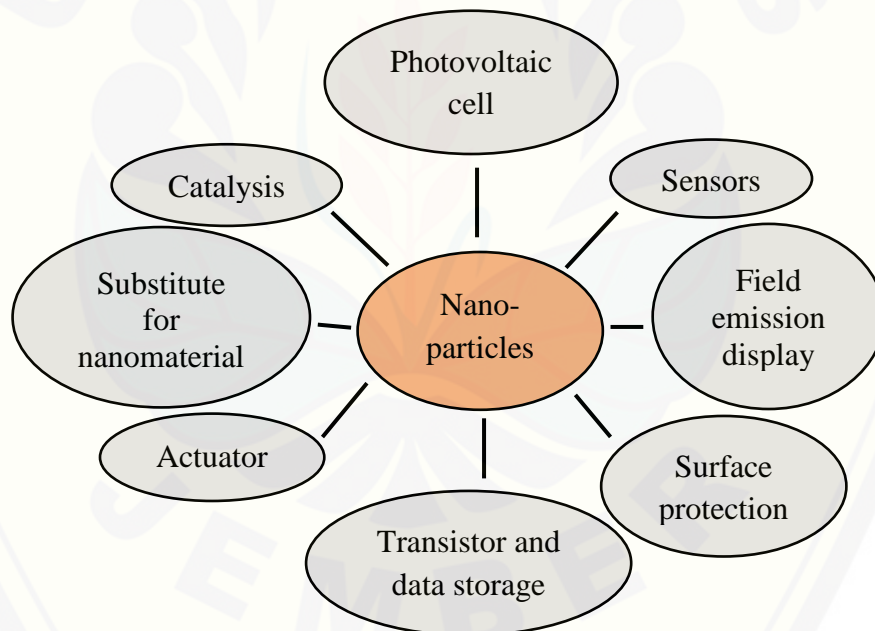
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Nano Material

Nanomaterials yaitu bahan yang berukuran nano meter (nm), dan telah menjadi semakin penting dalam dekade terakhir karena karakteristik khusus mereka dibandingkan dengan bahan berukuran lebih besar (*bulk material*). Hal khusus yang mereka miliki yaitu peningkatan sifat fisik jauh lebih tinggi dibandingkan bahan berukuran mikro (Roco, 1999). *Nanotech* adalah teknologi yang berguna untuk menyelidiki desain, fabrikasi, dan pemanfaatan bahan fungsional dengan setidaknya satu dimensi unggulan diukur dalam nanometer (nm) yaitu 1-100 nm (Bashir *et al.*, 2015).

2.1.1 Aplikasi Nanopartikel

Aplikasi nanopartikel telah banyak diaplikasikan pada berbagai bidang seperti bahan semikonduktor, katalis pada bidang minyak, pelapisan dan lain-lain.



Gambar 2.1 Demonstrasi aplikasi dari nanopartikel (Bashir *et al.*, 2015).

2.2 Alumunium

Alumunium adalah salah satu logam yang ringan dan merupakan elemen yang berlimpah di bumi ini dengan prosentase sekitar 8% dari permukaan bumi. Alumunium pada tabel periodik dituliskan Al dengan unsur golongannya III

A, nomor atomnya 13, dan Berat atom 26,9815 Da. Alumunium hampir mustahil untuk didapatkan secara murni tanpa proses pemisahan senyawa, dikarenakan Alumunium di alam bercampur dengan bermacam-macam senyawa. Ilmuwan yang pertama kali berhasil memisahkan Alumunium dari senyawanya adalah Orsted pada tahun 1825. Ilmuwan ini memisahkan Alumunium dengan mereduksi Alumunium Klorida, akan tetapi Keadaan Alumunium yang dihasilkan tidak 100% murni. Dua tahun berselang pada tahun 1827 Wohler berhasil menemukan Alumunium murni dengan memodifikasi proses Orsted. Berselang beberapa tahun, pada tahun 1886 ditemukan metode pembuatan Alumunium secara besar yaitu Halt-Heroult oleh dua orang yang berbeda negara yakni Charles Martin Hall di Amerika dan Heroult di Paris. Sampai saat ini proses Halt-Heroult tetap diterapkan oleh banyak perusahaan karena metode ini paling ekonomis untuk produksi Alumunium. Bahan baku yang diperlukan dalam produksi aluminium adalah bauksit, empat ton bijih bauksit diperlukan untuk menghasilkan dua ton alumina, yang kemudian diekstrak menjadi 1 ton aluminium. Total sumber bauksit diperkirakan 55-7,5x10¹⁰ ton, yang terletak di Afrika (33%), Oceania (24%), Amerika Selatan dan Karibia (22%), Asia (15%) dan tempat lain (6%) (Huo *et al.*, 2011).

2.3 Alumina

Alumina dan Alumunium adalah salah satu unsur logam yang mudah didapatkan di Kerak bumi dimana pada Alumina mengandung oksida, hidroksida dan aluminosilikat. Alumina adalah salah satu unsur logam yang ringan dengan keadaan teroksidasi, dimana unsur logam ini mempunyai berbagai macam fasa dan bentuk ini dikenal sebagaistoikiometri Al. Material Alumina dapat dibentuk menggunakan kalsinasi *gibbsite* [Al(OH)₃] atau *boehmite* (AlOOH). Alumina mempunyai unsur oksidasi yang besar dan mengakibatkan tidak stabil terhadap perubahan temperatur. Aplikasi dari Alumina sendiri banyak digunakan sebagai *coating* karena kemampuannya terhadap temperatur yang tinggi. Properti ini menjadikan Al₂O₃ salah satu bahan keramik penting. Alumina merupakan senyawa Alumunium dimana bereaksi terhadap oksigen, dan dituliskan secara ilmiah Al₂O₃. Alumina (Al₂O₃) secara luas digunakan dalam berbagai aplikasi karena memiliki sifat fisik dan kimia yang unggul seperti tahan terhadap panas yang tinggi, isolator

listrik yang baik, tahan abrasi, dan memiliki ketahanan korosi yang tinggi (Fujiwara, *et al.*, 2007).

2.4 Kristal Struktur Alumina

Alumina adalah salah satu keramik yang berjenis *metal oxide*. Dimana Alumina terdiri dari beberapa macam fasa dan mempengaruhi seperti kemurnian alumina, Sifat Mekanik, dan propertiesnya (Levin *et al.*, 1998). Alumina mempunyai beberapa fasa seperti γ (*gamma*), θ (*Teta*), dan α (*Alpha*) dimana fasa-fasa ini sangat penting pada struktur Alumina. Alumina mempunyai fasa yang stabil disebut Alumina (α -fasa), dimana fasa ini dapat digunakan sebagai pelapisan untuk menjaga permukaan material saat digunakan. α -Alumina adalah fasa yang stabil saat temperatur tinggi (Suhu melting untuk α -Alumina adalah 2051°C) dan fasa yang lainnya tidak dapat stabil saat temperatur tinggi. Perbedaan fasa juga mempengaruhi sifat mekanisnya di mana dibawah ini Tabel 2.1 menunjukkan properties, sifat mekanis, dan suhu leleh (Trunov *et al.*, 2006).

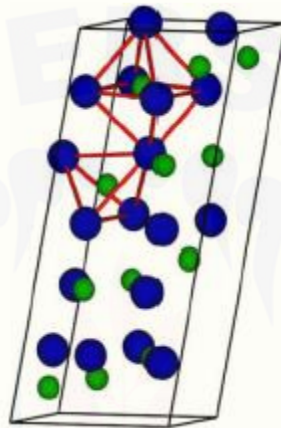
Tabel 2.1 Fasa dari Alumina dan sifat mekanis dan properties fisiknya dalam temperatur melting yang berbeda (Levin *et al.*, 1998).

No.	Alumina	Selected properties			
		Density, Kg/m ³	Elastic Modulus, GPa	Hardness, GPa	Melting Temp. °C
1.	α -Alumina	3980	409	28	2051
2.	γ -Alumina	3200	-	-	γ : 700-800
3.	θ -Alumina	3560	-	-	$\theta \rightarrow \alpha$: 1050

2.4.1 Kristalin fasa θ -Alumina

Fasa θ -Alumina adalah salah satu fasa dari Alumina, dimana fasa ini tidak stabil dan fasa ini akan berubah menjadi fasa α -Alumina saat temperatur tinggi yaitu sekitar 1050°C (Levin *et al.*, 1998). Pada ukuran densitas untuk fasa α -Alumina lebih tinggi daripada fasa θ -Alumina seperti ditunjukkan pada table 2.1. kisi paket

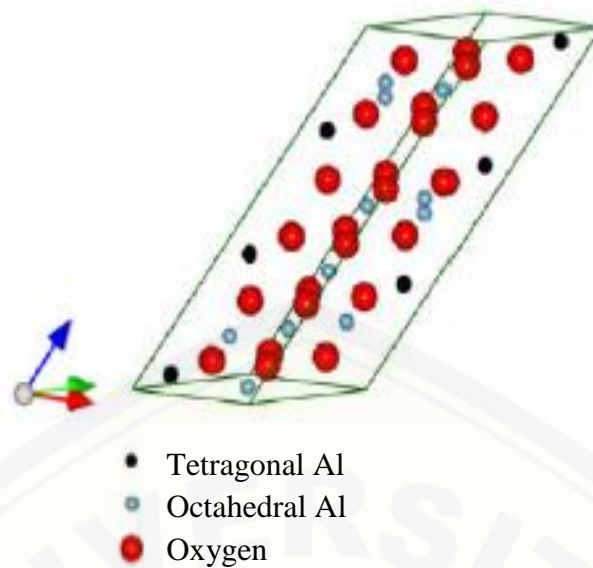
oksigen tertutup menampilkan struktur dari fasa θ , α , dan Υ . α -Alumina mempunyai struktur *Hexagonal Close Packed* (HCP) dan *Face Centre Cubic* (FCC) untuk kisi oksigen pada struktur fasa θ (Zhou,1991). Gambar 2.6 dibawah ini menunjukkan kisi oksigen dengan ditambahkan warna pada butiran untuk membedakan atom yang tersusun dalam satu sistem, dimana atom Oksigen dengan warna biru dan atom Alumunium warna hijau. Jarak antar kisi adalah 7.4 eV dimana ini menunjukkan fasa tersebut mempunyai properties konduktifitas ionik yang tinggi (Franchy *et al.*, 1997).



Gambar 2.2 Unit shell dari fasa θ -Alumina (Trunov *et al.*, 2006)

2.4.2 Kristalin fasa Υ -Alumina

Fasa Υ -Alumina adalah salah satu yang tidak stabil dan fasa ini adalah perubahan dari teta-Alumina saat temperatur 700-800°C. Fasa alumina ini digunakan sebagai katalis dan katalis *support* dimana Υ -Al₂O₃ unit sell mempunyai spesifik area yang besar dan juga mempunyai energi permukaan yang kecil. Fasa ini tidak cocok diaplikasikan untuk temperatur yang tinggi karena fasa ini dapat berubah menjadi fasa yang stabil saat temperatur tinggi contohnya fasa α -Alumina (Mchale *et al.*, 1997). Struktur kisi dari fasa Υ -Alumina mempunyai dua perbedaan kisi, untuk kisi pertama terdiri dari ion alumunium yang terbentuk dari octahedral dan tetrahedral lokasi intersisialnya dan kisi kedua adalah kisi oksigen mempunyai struktur face center cubic (FCC) seperti ditunjukkan pada gambar dibawah ini (Mchale *et al.*, 1997).

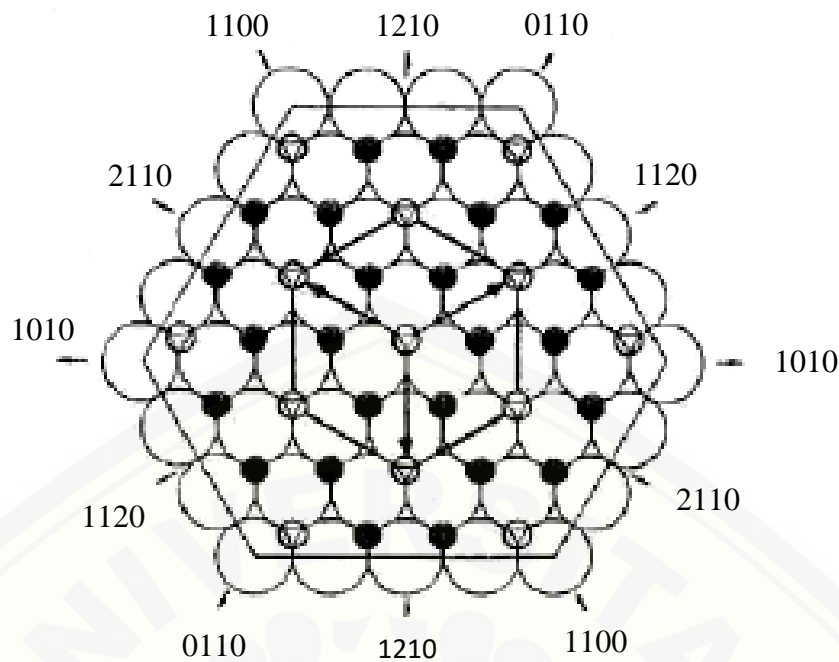


Gambar 2.3 Struktur fasa γ -Alumina terdiri dari atom Oksigen ditunjukkan dengan struktur FCC dan Aluminium dengan struktur octahedral dan tetrahedral (Jiang *et al.*, 2010).

2.4.3 Kristalin fasa α -Alumina

Fasa α -Alumina digunakan pada struktur keramik karena mempunyai properties mekanik yang baik dan juga ketahanan termal pada temperatur tinggi. Polikristalin alumina mempunyai kekuatan yang tinggi dan propertis ini didapat saat pengembangan, proses pembuatan dan dioptimalkan polikristalin alumina. ketika fasa α -Alumina dinyatakan single kristal maka dapat diasumsikan berbentuk butiran dan juga digunakan dalam struktur keramik (Gitzen, 1970).

Menurut (Pengarang) Kisi Polikristalin alumina untuk α -Alumina mempunyai ion oksigen yang besar dengan susunan A-B-A-B untuk bentuk HCP sub kisinya. Susunan ini mewakili anion struktur. Lokasi octahedral di penuh oleh cation dan juga *planes* diantara lapisan oksigen, yang mana diwakili oleh *close packed planes* oleh kation. Keseluruhan susunan anion dan kation dibentuk oleh unit sel dari fasa α -Alumina yaitu A-a-B-b-A-c-B-a-A-b-B-c-A. Parameter kisi untuk struktur hexagonal adalah ($a_0 = 4.7589 \times 10^{-8}$ cm dan $c_0 = 12.991 \times 10^{-8}$ cm) dan radius ionik untuk ion aluminium adalah 0,053 nm dan ion oksigen adalah 0,138 nm (Gitzen, 1970).



Gambar 2.4 Menunjukkan susunan kation dan anion dari *basal plane* dalam fasa α -Alumina (Lee *et al.*, 1985).

2.5 Dinamika Molekul

Metode simulasi prinsip pertama seperti teori fungsional kerapatan memecahkan elektronik untuk menghitung total energi dari sistem atom. Perawatan mekanika kuantum ini memungkinkan elektron satu untuk mempelajari materi pada skala atom sangat akurat. Namun, disana banyak proses fisik yang panjang dan skala waktunya berada di luar domain saat ini dapat diakses oleh metode utama pertama. Ini khususnya benar untuk sistem yang dipelajari dalam tesis ini, yang melibatkan beberapa jutaan atom. Sebuah postur interatomik adalah analitik yang relatif sederhana fungsi yang mengekspresikan total energi potensial, E , dari suatu sistem dalam istilah dari posisi atom (ion), (Fujiwara *et al.*) (titik dalam ruang konfigurasi). Itu metode molecular dynamics (MD) dapat digunakan untuk menghitung lintasan dari partikel simulasi. Metode ini membutuhkan beberapa evaluasi gaya Newtonian $F_i = -\partial E / \partial r_i$ bertindak pada atom individu. Interatomik seperti itu potensi disebut empirial karena mereka tidak melibatkan apapun perhitungan mekanika kuantum, meskipun sering digunakan selama pengembangan potensi. Fungsi potensial mengandung parameter pemasangan, yang disesuaikan untuk mereproduksi properti yang dipilih dari material dikenal dari percobaan dan

kalkulasi prinsip pertama. Yang mendasarinya Asumsinya adalah bahwa sebuah potensi, yang memberikan energi dan kekuatan yang akurat titik konfigurasi yang digunakan selama fit, juga akan memberikan hasil yang masuk akal untuk konfigurasi antara dan di luar titik-titik tersebut (properti pengalihan). Potensi empiris sederhana seperti Lennard-Jones dan Morse memiliki potensi telah digunakan untuk pemodelan material selama beberapa dekade. Mereka menggambarkan energi total sebagai jumlah dari pasangan-bijaksana, yang, dalam banyak kasus, adalah penyederhanaan dari ikatan atom. Untuk sistem metalik, yang paling saat ini format potensial yang banyak digunakan diberikan oleh metode atom tertanam (EAM) dan skema Finnis-Sinclair (Stukowski, 2010).

2.6.1 Interaksi Antar Atom

Ketika sebuah atom dan atom yang lain berada pada posisi yang salingberdekatan, maka akan terjadi sebuah gaya di antara kedua atom tersebut. Gaya diantara atom-atom tersebut akan menyebabkan sebuah interaksi antar atom yang dikenal sebagai ikatan antar atom. Beberapa jenis ikatan antar atom antara lain:

1. Gaya Tarik menarik (attractive forces)

ketika molekul-molekul berinteraksi dengan jenis yang berbeda sehingga akan terjadi gaya Tarik menarik sehingga menurunkan energi potensial.

2. Gaya tolak-menolak (repulsive forces)

ketika molekul-molekul yang mempunyai jenis yang sama akan terjadi interaksi tolak menolak akan tetapi energi potensial akan naik Karena hal tersebut (Puri dan Babbar, 2001).

2.6.2 Lennard Jones Potensial

Potensi Lennard-Jones adalah energi potensial yang berfungsi untuk menggambarkan interaksi antara kedua atom atau molekul netral. Potensial tersebut menolak bila jarak terlalu dekat dan menarik bila jarak menjauh (Irianti 2015). Titik seimbang yang potensialnya minimum terletak pada posisi r_{min} memenuhi $F(r_{min}) = 0$. Ketika jarak antar partikel terlampaui jauh maka interaksi antara partikel-partikel diabaikan diberi nilai r_{cutoff} . Potensial Lennard-Jones pada interaksi antar atom yang berjarak lebih besar dari nilai r_{cutoff} dituliskan sebagai berikut :

$$V^{LJ}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (2.1)$$

Dimana:

r_{ij} = jarak atom i dengan atom j

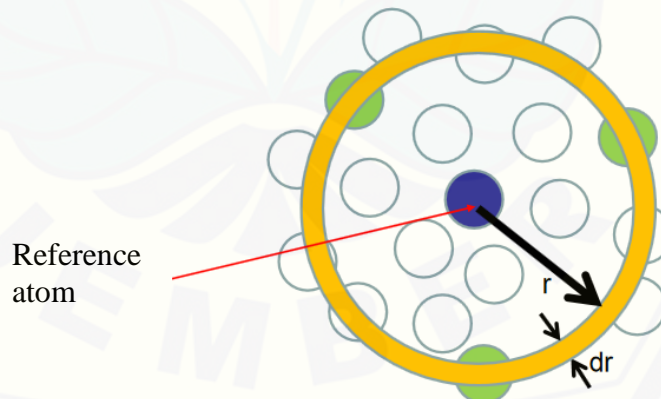
V_{ij} = energi dispersi

σ = jarak energi interaksi antar partikel

ϵ = Kedalaman potensial

2.6 Fungsi Distribusi Radial

Menurut Buhler (2011), Fungsi distribusi radial merupakan suatu teknik untuk menggambarkan perubahan kerapatan susunan atom karena adanya pengaruh dari fungsi jarak, seperti yang ditunjukkan pada gambar 2.5

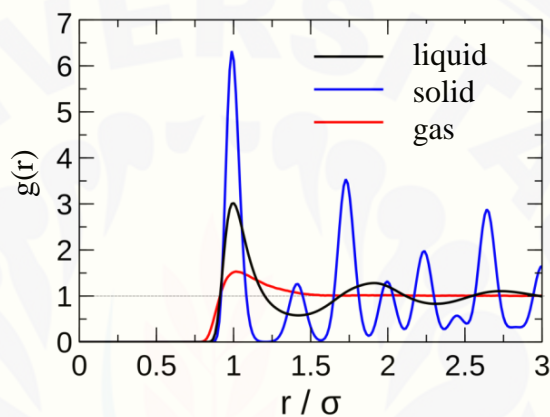


Gambar 2.5 Mekanisme Perhitungan RDF (Buhler , 2011).

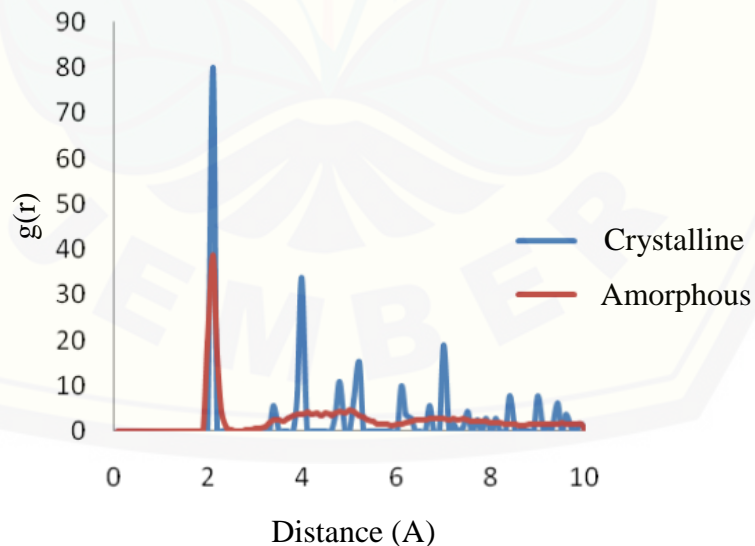
Pada simulasi dinamika molekul fungsi distribusi radial biasanya ditentukan dengan menghitung jarak antara semua pasangan partikel dan memasukkannya ke dalam histogram, kemudian histogram ini dapat menggambarkan susunan partikel pada kondisi padat, cair dan gas seperti yang terlihat pada gambar 2.5.

$$\left\{ g(r) = \frac{N(r, \Delta r)}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)} \right\} \quad (2.2)$$

Dimana ρ adalah rapat atom, $V(r)$ volume kulit bola pada jarak r . Fungsi distribusi radial $g(r)$ merupakan ukuran untuk melihat sejauh mana atom-atom mengatur posisinya pada temperatur dan waktu tertentu, sehingga dapat dibedakan secara kualitatif apakah suatu sistem dalam keadaan padat atau cair.



Gambar 2.6 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (Buhler, 2011).



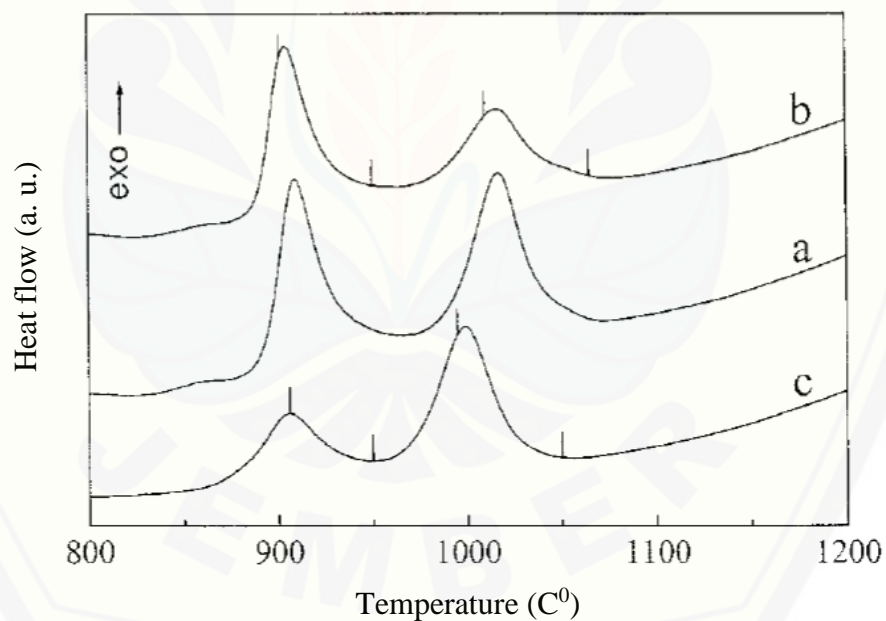
Gambar 2.7 Fungsi distribusi radial kristalin dan amorphous

2.7 Kristalinitas

Kristalinitas adalah keadaan struktur molekul yang mangacu pada panjang rentang pola geometrik periodik jarak atom. Dalam kondisi semikristalin polimer seperti polietilena derajat kristalinitas yang dimiliki akan mempengaruhi sifat yang dimiliki seperti tingkat kekakuan, kekerasan sifat tahan panas yang dimiliki. Karena derajat kristalinitas memiliki peranan yang penting untuk mengetahui suatu material maka dibutuhkan metode untuk menghitung atau mengukur nilai suatu kristalinitas dari suatu material berikut beberapa metode yang umum digunakan.

2.7.1 Differential Scanning Calorimetry

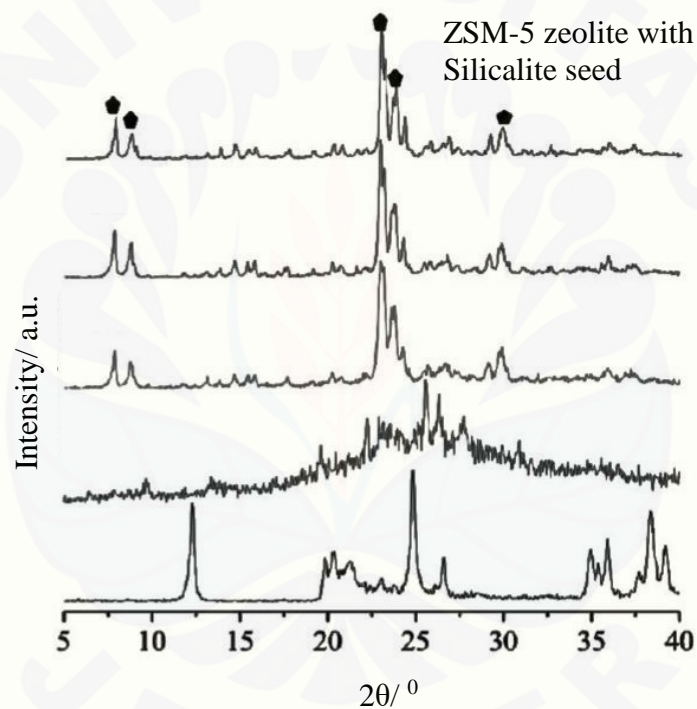
Derajat kristalinitas suatu material dapat diketahui ataupun dihitung nilainya salah satu metode untuk menghitung kristalinitas suatu material yaitu dengan menggunakan *differential scanning calorimetry* prinsip dari metode ini yaitu dengan membagi panas yang diukur dari fusi dengan panas fusi dan 100 material kristalin.



Gambar 2.8 contoh grafik hasil differential scanning calorimetry

2.7.2 XRD (X-Ray Diffraction)

Difraksi sinar-x atau yang sering dikenal dengan XRD digunakan untuk mengidentifikasi kristal suatu material umumnya material yang diidentifikasi merupakan material dengan fasa solid (padat) prinsip kerja dari XRD dengan mengidentifikasi struktur kristal material dengan membandingkan nilai bidang kristal dan intensitas puncak difraksi dengan data referensi. Sinar-X merupakan radiasi elektromagnetik dengan panjang gelombang sekitar 100 pm yang dihasilkan dari penembakan logam (material) dengan elektron berenergi tinggi. XRD merupakan salah satu dari karakterisasi material nanopartikel yang dapat digunakan untuk mengukur tingkat kristalinitas dari nanomaterial.

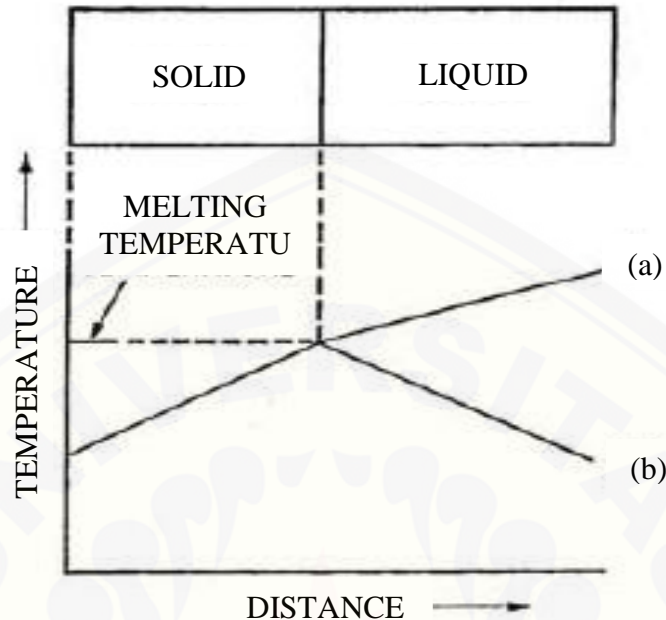


Gambar 2.9 Contoh gambar hasil analisa XRD

2.8 Solidifikasi

Proses solidifikasi pada material logam terdiri dari dua proses utama yaitu nukleasi dan pertumbuhan menurut Winegard (1961). Proses ini biasanya diibaratkan seperti terbentuknya bola salju dimana pada saat awal proses material berasal dari material yang kecil kemudian semakin lama akan semakin besar, begitu pula yang terjadi pada proses solidifikasi logam material berawal dari material kecil

kemudian akan terbentuk material yang ukurannya lebih besar. jika melihat dari konsep solifikaasi tersebut maka akan terdapat nukleus pada setiap material yang berperan sebagai material awal yang akan membentuk material yang lebih besar.



Gambar 2.10 Skema solidifikasi

Pada solidifikasi nano seng oksida fenomena solidifikasi yang terjadi berlangsung pada skala atom sehingga fenomena tidak dapat diamati dengan mata telanjang. Maka dibutuhkan kajian molekular dinamik untuk dapat mengkaji fenomena solidifikasi nano seng oksida.

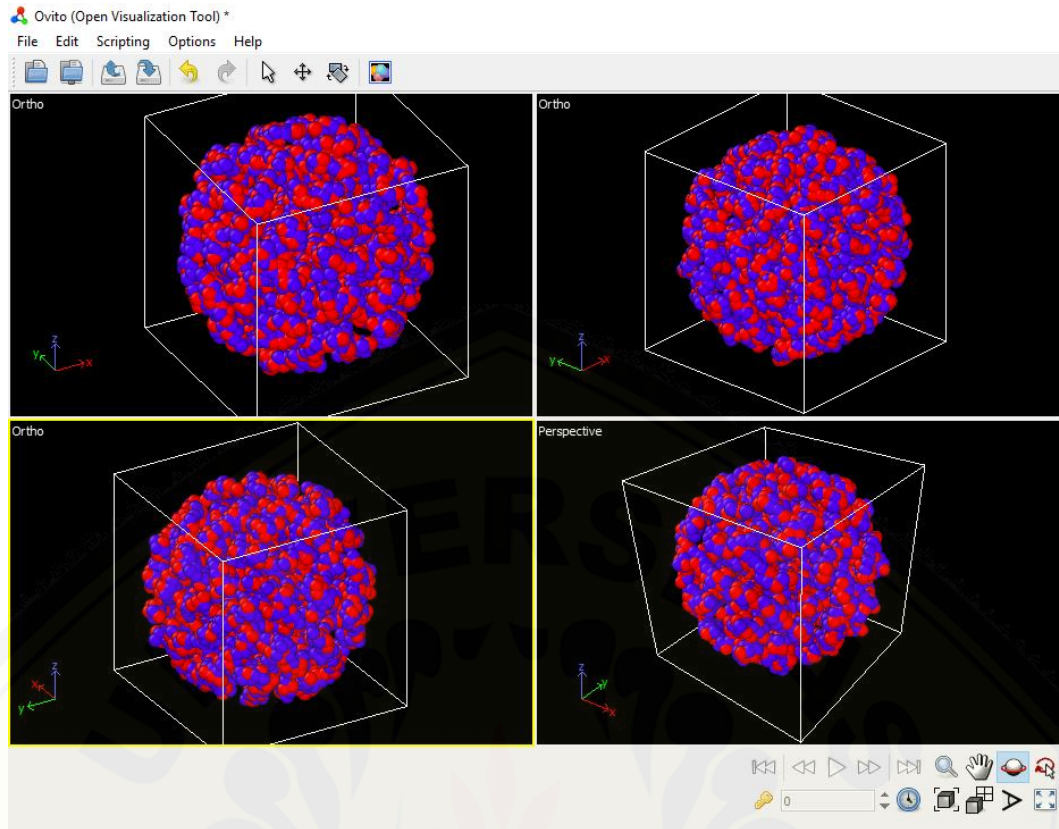
2.9 LAMMPS

LAMMPS adalah kode dinamika molekul klasik yang memodelkan ensemble partikel dalam keadaan cair, padat, atau gas. Dapat memodelkan sistem atomik, polimerik, biologi, metalik, granular, dan kasar menggunakan berbagai medan gaya dan kondisi batas. LAMMPS berjalan dengan efisien pada komputer desktop atau laptop satu-prosesor, tetapi dirancang untuk komputer paralel. Ini akan berjalan di semua mesin paralel yang mengkompilasi C++ dan mendukung perpustakaan MPI message-passing. Ini termasuk mesin paralel didistribusikan atau bersama-memori dan kelompok gaya Beowulf. Dalam pengertian yang paling umum, LAMMPS mengintegrasikan persamaan gerak Newton untuk koleksi atom, molekul, atau partikel makroskopik yang berinteraksi melalui kekuatan jarak

pendek atau jarak jauh dengan berbagai kondisi awal dan / atau batas. Untuk perhitungan efisiensi, LAMMPS menggunakan daftar tetangga untuk melacak partikel di dekatnya. Daftar dioptimalkan untuk sistem dengan partikel yang menjijikkan pada jarak pendek, sehingga kepadatan lokal partikel tidak pernah menjadi terlalu besar. Pada mesin paralel, LAMMPS menggunakan teknik dekomposisi spasial untuk mempartisi domain simulasi menjadi sub-domain 3d kecil, yang salah satunya ditetapkan untuk setiap prosesor. Prosesor berkomunikasi dan menyimpan informasi atom “hantu” untuk atom yang membatasi sub-domain mereka. LAMMPS paling efisien (dalam arti paralel) untuk sistem yang partikelnya mengisi kotak persegi panjang 3d dengan kerapatan kasar seragam (Sandia, 2003)

2.10 OVITO

Ovito telah dikembangkan sebagai platform perangkat lunak independen yang berjalan pada semua sistem operasi utama, termasuk Microsoft Windows dan Linux. Gambar 1.11 menunjukkan screenshot dari jendela utama aplikasi. Program paket telah dirancang dengan kemungkinan diperpanjang, karena tidak mungkin diasumsikan bahwa persyaratan masing-masing dan setiap pengguna dapat dipenuhi dalam yang pertama tempat. Oleh karena itu arsitektur berbasis plug-in dari Ovito memungkinkan pengguna untuk dengan mudah memperluas perangkat lunak ke kebutuhan masing-masing. Hampir setiap aspek Ovito dapat diperpanjang dengan menulis plug-in kecil yang terintegrasi dengan mulus ke dalam program tanpa membuat perubahan pada basis kode Ovito inti (Stukowski, 2010). Dalam penelitian kali ini Ovito digunakan untuk memvisualisasikan atom – atom dan juga untuk mengamati grafik rdf.

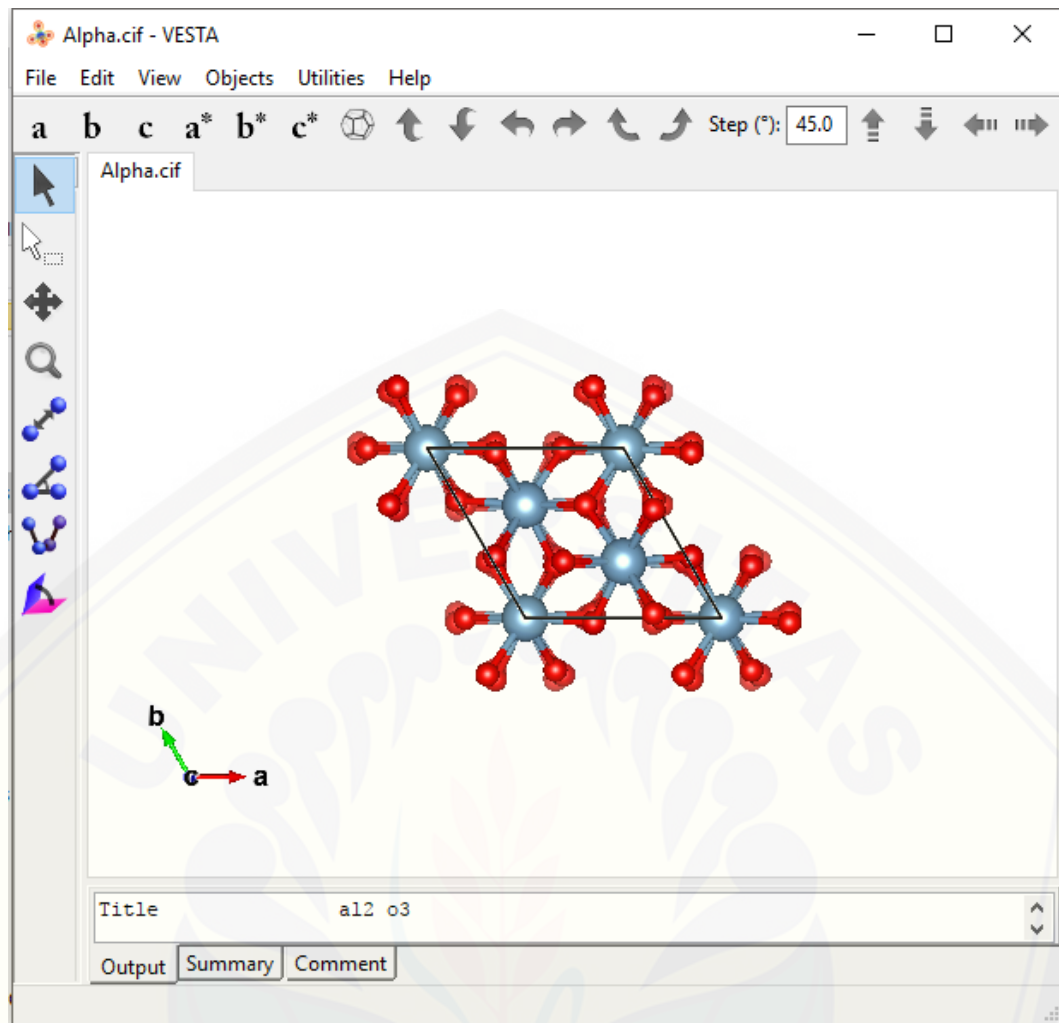


Gambar 2.11 Gambar layar dari jendela utama Ovito (Stukowski, 2010).

Jendela dibagi menjadi empat viewports, masing-masing menampilkan struktur atom dari pandangan yang berbeda arah (Stukowski, 2010).

2.11 VESTA

VESTA pertama kali dirilis pada tahun 2002 dan dikembangkan oleh Koichi Momma, aplikasi ini digunakan untuk memvisualisasikan struktur atom dengan visualisasi 3D untuk model struktural, morfologi kristal, dan data volumetrik elektron. Pada penelitian kali ini aplikasi Vesta digunakan untuk memodelkan atom sebagai bahan material di dalam pemrograman nantinya. Gambar 2.12 menunjukkan screenshot dari jendela utama aplikasi.



Gambar 2.12 Gambar layar dari jendela utama VESTA

BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Metodologi

Metode yang digunakan pada penelitian ini yaitu metode simulasi untuk memodelkan dan menggambarkan proses Kristalinitas Alpha-Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan.

3.2 Tempat dan Waktu Penelitian

Pelaksanaan Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Teknologi Terapan Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember. Penelitian ini dilakukan pada semester ganjil dan semester genap tahun ajaran 2018

3.3 Alat dan Bahan

3.3.1 Alat

- Laptop Acer One 14 dengan processor Intel Celeron dan RAM 2 Gb
- Jaringan Internet

3.3.2 Bahan

- LAMMPS untuk script software Simulasi Molecular Dynamic
- OVITO untuk Software Simulasi Molecular Dynamic
- VESTA untuk membuat read data

3.4 Prosedur Penelitian

Prosedur Pelaksanaan yang akan dilakukan untuk mendapatkan gambaran pada proses simulasi Kristalinitas Alumina adalah :

3.4.1 Pembuatan Read Data

Pembuatan read data ini menggunakan aplikasi VESTA

1. Download file CIF Alpha-Alumina di www.crystallography.net
2. Buka aplikasi vesta, klik File + Open dan buka file CIF yang sudah di download
3. Untuk mengubah jumlah atom klik Edit + Edit data + Unit cell + Transform lalu ganti angka yang ada di Transformmation matrix lalu klik ok

4. Export file agar bisa di buka dengan aplikasi OVITO, klik File + Export data lalu klik save dan simpan dengan file VASP
5. Selanjutnya buka aplikasi OVITO dan buka file yg sudah di export dari VESTA sebelumnya, klik File + Export file dengan file lammmps agar bisa dibaca oleh LAMMPS

3.4.2 Pembentukan Input Script

Input Script pada perangkat lunak LAMMPS merupakan perintah / informasi yang harus ada dalam suatu simulasi, berupa file yang memiliki ekstensi "in" yang nantinya file ini akan dijalankan pada perangkat lunak LAMMPS yang dijalankan melalui windows. Informasi ini berguna untuk mendefinisikan atom dan molekul beserta posisinya, sekaligus dapat memberikan parameter-parameter yang dibutuhkan untuk membuat kondisi yang diinginkan.

1. Initialization

Pada bagian ini adalah bagian awal dimulainya program script untuk perintah yang terdapat pada bagian adalah units, dimensi, boundary, atom_style, neighbor, neighbor_modify.

2. Atom Definition

Bagian ini bertujuan mendefinisikan atom jenis atom, jumlah atom, jumlah molekul, jumlah ikatan dan posisi awal koordinate atom. Karena pada atom bagian ini berisi banyak perintah pada atom yang akan digunakan maka, biasanya pada bagian ini hanya muncul perintah untuk melakukan read_data pada atom yang akan digunakan jadi dengan kata lain perintah yang berkaitan dengan atom yang akan digunakan pada tahap ini berasal dari file yang berbeda (terpisah) jadi perintah yang ada pada atom definisi biasanya berupa perintah read data yang berisi data script atom yang akan digunakan.

3. Settings

Merupakan bagian tentang pengaturan koefisien ikatan, parameter-parameter kondisi simulasi yang diinginkan, beserta output simulasi yang akan digunakan berikut beberapa perintah yang biasanya ada pada bagian settings adalah pair_coeff, bond coeff, angle coeff dan banyak lainnya sedangkan untuk pengaturan variasi yang digunakan pada simulasi dijalankan oleh perintah seperti neighbor, timestep, run

style, minimize, special bond dan banyak lainnya sedangkan kondisi batas, integrasi waktu dan diagnostic simulasi dijalankan melalui perintah fix. Untuk variasi jenis perhitungan biasanya dijalankan melalui perintah compute , compute_modify dan variable dan yang terpenting adalah keluaran atau output simulasi, biasanya perintah output ini dijalankan melalui perintah dump atau dump_modify.

4. Run simulation

Bagian ini merupakan perintah terakhir yang ada pada script yang bertujuan untuk menjalankan perintah yang sudah dituliskan pada script lammmps.

3.4.3 Menjalankan Simulasi LAMMPS

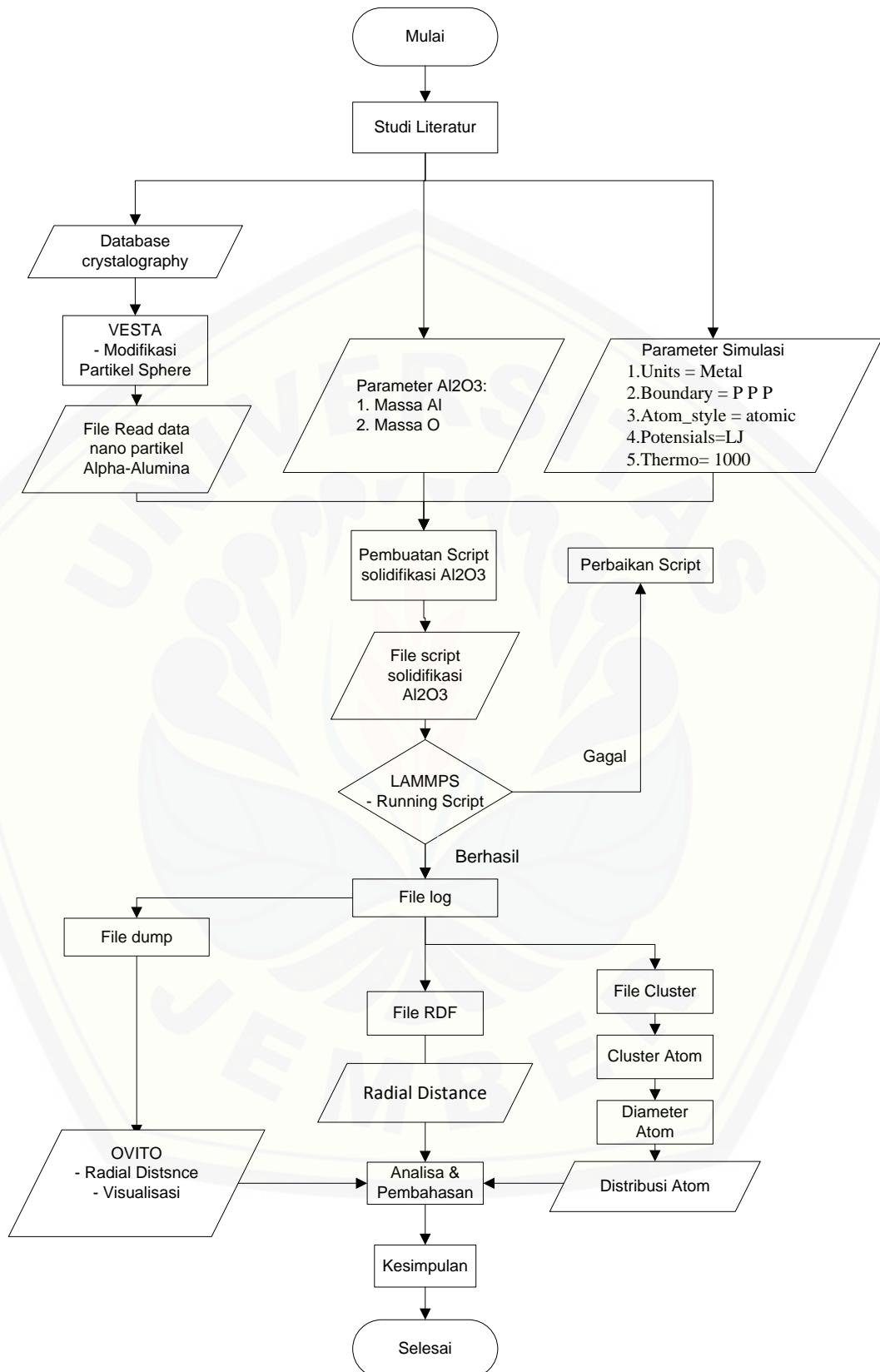
1. Buka CMD atau *Command Prompt* pada komputer
2. Buka file dengan menggunakan perintah pada *command prompt*
3. Jalankan file dengan perintah `Imp_serial.exe -in "nama file input"`, kemudian tunggu hingga proses selesai.

3.4.4 Prosedur Visualisasi

Tahapan yang dilakukan untuk melakukan proses visualisi molekular dinamik adalah sebagai berikut.

1. Melakukan instalasi perangkat lunak OVITO yang dapat di unduh pada alamat resmi www.ovito.org.
2. Jalankan aplikasi OVITO yang sudah terinstal.
3. Kemudian pilih open file, dan buka file dump hasil simulasi yang akan divisualisasikan.
4. Klik OK
5. Maka simulasi program akan berjalan dan dapat diamati pada visualisasi atom serta grafik rdf.

3.5 Diagram Alir



Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian tentang simulasi dinamika molekular pada nanopartikel Alpha-Alumina dengan variasi laju pendinginan 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, dan 10^{12} K/s dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut.

1. Dari hasil simulasi pada variasi 10^{10} K/s menghasilkan fungsi distribusi radial tertinggi dengan angka *peak* sekitar 550.000, sedangkan variasi 10^{11} K/s *peak* yang dihasilkan pada fungsi distribusi radial adalah 45.000 dan pada variasi 10^{12} K/s menghasilkan *peak* pada angka 15.000. Dari hasil tersebut dapat dikatakan bahwa tingkat kristalinitas dari material nano Alumina dengan variasi laju temperatur pendinginan 10^{10} K/s menghasilkan *peak* yang lebih tinggi dibandingkan dengan variasi yang lain.
2. Dari hasil simulasi di dapatkan nilai Radial Distance menunjukkan lebar *peak* yang berarti menunjukkan sisa energi dan jarak antara atom – atom, *peak* yang paling lancip yaitu ada pada variasi 10^{10} K/s dan *peak* yang paling lebar ada pada variasi 10^{12} K/s.
3. Hasil simulasi menunjukkan distribusi atom tersebut hanya terjadi pada variasi 10^{10} K/s yaitu pada *cluster* yang jumlah atomnya <10, sedangkan pada *cluster* yang jumlah atomnya <5 berkurang atau sebagian besar lepas.
4. Visualisasi dari simulasi dinamika molekul pada partikel material nano Alumina dengan menggunakan variasi laju temperatur pendinginan 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, dan 10^{12} K/s berhasil memvisualisasikan proses kristalin yang ditandai dengan terbentuknya cluster cluster kecil pada partikel alumina.

5.2 Saran

Saran yang dapat diberikan pada penelitian menggunakan simulasi dinamika molekul yaitu :

1. Penelitian simulasi ini dibutuhkan pemahaman teori pendahuluan, jadi untuk penelitian selanjutnya sangat disarankan untuk benar – benar memahami teori terlebih dahulu.

2. Dibutuhkan waktu simulasi seperti yang digunakan pada sintesa waktu yang dilakukan secara experimental.
3. Gunakan komputer dengan spesifikasi yang tinggi dalam proses simulasi yang bertujuan sebagai pendekatan proses sintesa nanopartikel alumina secara experimental



DAFTAR PUSTAKA

- Bashir, S., dan J. Liu. 2015. *Nanomaterials and Their Application*. Kingsville. Department of Chemistry Texas A&M University-Kingsville
- Franchy, R., G.Schmitz, P.Gassmann., dan F.Bartolucci, 1997. *Growth of thin, crystalline oxide, nitride, and oxynitride films on NiAl and CoGa surfaces*. *Material Science & processing*. 551–566
- Fujiwara, S., Y. Tamura, H. Maki, N. Azuma., dan Y. Takeuchi, 2007. *Development of New High-Purity Alumina*. SUMITOMO KAGAKU. 1 1-10
- Gitzen, W. H., 1970. *Alumina as a ceramic material*. The American Ceramic Society.
- Glossary, O. G. 2007. Density Definition in Oil Gas Glossary. www.oilgasglossary.com. 27 Januari 2018
- Huo, S. H., M. Qian., dan G. B. Schaffer, 2011. *Aluminium powder metallurgy*. *Metals and Surface Engineering*. 655-701
- Jiang, K., D. Music, K. Sarakinos., dan J. M. Schneider, 2010. *Ab initio study of effects of substitutional additives on the phase stability of γ -alumina*. *Journal Of Physics: Condensed Matter*. 22 1-8
- Khamirul Amin Matori, Mohd Hafiz . 2012. *Phase transformations of α -alumina made from waste aluminum via a precipitation technique*. *International journal of molecular sciences*
- Kong, P., dan A. Kawczak, 2008. *Plasma Synthesis of Nanoparticles for Nanocomposite Energy Applications*.
- Lee, W. E., dan K. P. D. Lagerlof, 1985. *Structural and Electron Diffraction Data for Sapphire (α -Al₂O₃)*. *JOURNAL OF ELECTRON MICROSCOPY TECHNIQUE*. 247-258
- Levin, I., dan D. Brandon, 1998. *Metastable Alumina Polymorphs: Crystal Structures and Transition Sequences*. *Journal of the American Ceramic Society*. 81 1995-2012
- Mahmoud, A. K., 2014. *Production of Alumina Nanoparticles (Al₂O₃) using Pulsed Laser Ablation Technique in Distilled Water Solution*. *International Journal of Current Engineering and Technology*. 314-316

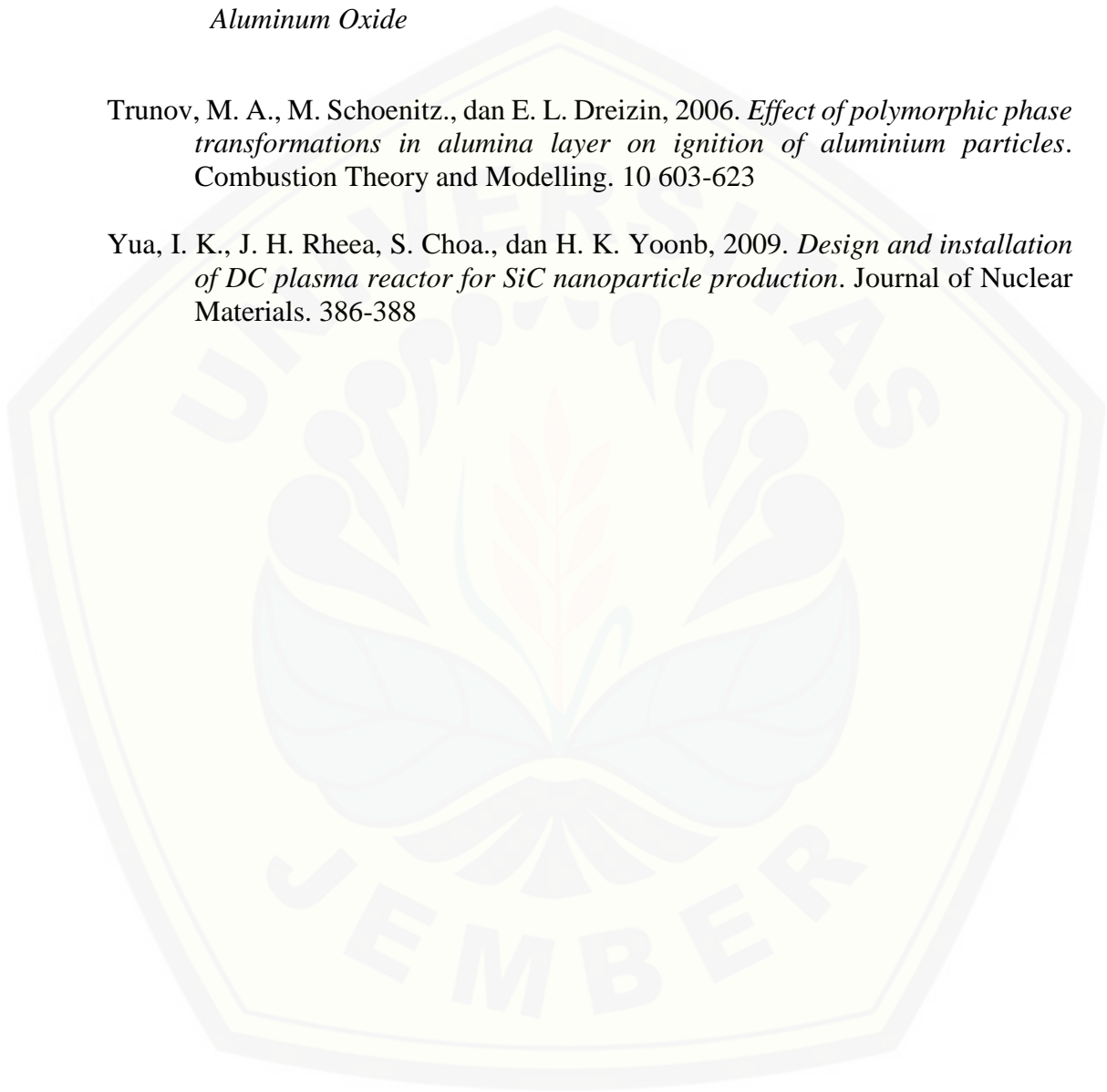
Mchale, J. M., A. Auroux, A. J. Perrotta., dan A. Navrotsky, 1997. *Surface Energies and Thermodynamic Phase Stability in Nanocrystalline Aluminas*. 277

Roco, M. C., 1999. *Nanoparticles and nanotechnology research*. Journal of Nanoparticle Research. 1-6

Stuart Ansell, Shankar Krishnan dan J. K. Richard Weber. 1997 *Structure of Liquid Aluminum Oxide*

Trunov, M. A., M. Schoenitz., dan E. L. Dreizin, 2006. *Effect of polymorphic phase transformations in alumina layer on ignition of aluminium particles*. Combustion Theory and Modelling. 10 603-623

Yua, I. K., J. H. Rhee, S. Choa., dan H. K. Yoonb, 2009. *Design and installation of DC plasma reactor for SiC nanoparticle production*. Journal of Nuclear Materials. 386-388



LAMPIRAN

Log

Log script variasi laju 10^{10} K/s

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density		
250000	8156.9956	-9434.3003	2630	0.90507252		
251000	8180.9986	-9435.9634	2630	0.85717122		
252000	8121.7587	-9401.0281	2630	0.81058854		
253000	8223.647	-9412.654	2630	0.76305619		
254000	8236.7869	-9390.1489	2630	0.7189938		
255000	8445.0582	-9436.372	2630	0.67805172		
256000	8342.3985	-9375.214	2630	0.64000799		
257000	8448.5652	-9389.0978	2630	0.60460784		
258000	8365.0908	-9337.9714	2630	0.57168422		
259000	8262.6852	-9278.0241	2630	0.54098586		
260000	8384.8587	-9291.7762	2630	0.51232991		
261000	8488.9651	-9300.6196	2630	0.4855741		
262000	8646.2905	-9327.801	2630	0.46053024		
263000	8643.0189	-9300.8579	2630	0.43706937		
264000	8679.4169	-9286.0471	2630	0.41464706		
265000	8627.6026	-9240.1851	2630	0.39336869		
266000	8684.477	-9233.6421	2630	0.37311381		
267000	8685.2566	-9205.8715	2630	0.35413976		
268000	8755.2741	-9201.2174	2630	0.33635865		
269000	8491.6306	-9086.4016	2630	0.31968378		
270000	8549.7501	-9082.8814	2630	0.3040327		
271000	8523.5202	-9046.4097	2630	0.28932919		
272000	8631.7881	-9060.0911	2630	0.27550517		
273000	8683.9157	-9054.0369	2630	0.2625011		
274000	8779.891	-9063.7369	2630	0.2502615		
275000	8520.1699	-8957.2376	2630	0.23873316		
276000	8690.0823	-8996.2604	2630	0.22786917		
277000	8818.5964	-9023.0764	2630	0.21762457		
278000	8779.4192	-8995.3704	2630	0.20795861		
279000	8709.0558	-8955.1	2630	0.19883518		
280000	8898.3113	-9005.5348	2630	0.19022001		
281000	8817.6246	-8969.9962	2630	0.18208078		
282000	8705.9626	-8925.0576	2630	0.17438949		
283000	8783.8363	-8944.7956	2630	0.16711955		
284000	8694.2197	-8909.6941	2630	0.16024451		
285000	8640.3773	-8891.7958	2630	0.15374189		
286000	8590.8019	-8880.1833	2630	0.14758993		
287000	8635.2377	-8905.3485	2630	0.14176742		
288000	8739.3811	-8952.0574	2630	0.13625558		
289000	8702.7798	-8955.5216	2630	0.13103709		

290000	8629.1099	-8951.0911	2630	0.12606044
291000	8589.0877	-8958.0568	2630	0.12101029
292000	8484.429	-8944.6397	2630	0.1162449
293000	8397.3788	-8939.2705	2630	0.11174862
294000	8336.7722	-8943.9244	2630	0.10749864
295000	8456.7261	-9014.1873	2630	0.10348236
296000	8560.9724	-9081.6854	2630	0.099682752
297000	8458.5597	-9076.4743	2630	0.096083478
298000	8528.8741	-9127.8038	2630	0.092670404
299000	8290.6058	-9076.6799	2630	0.089433009
300000	8334.9113	-9119.2187	2630	0.086362965
301000	8177.1969	-9097.1769	2630	0.083447306
302000	8212.1789	-9135.2706	2630	0.08067734
303000	7980.7303	-9085.8466	2630	0.078043159
304000	8040.7626	-9135.6425	2630	0.075531935
305000	7918.7066	-9124.2842	2630	0.073140504
306000	7926.7952	-9158.5009	2630	0.070802601
307000	7964.575	-9200.7757	2630	0.0685454
308000	8081.2376	-9273.8216	2630	0.066395412
309000	7971.0037	-9271.7576	2630	0.064346835
310000	8032.9723	-9323.9994	2630	0.062389338
311000	7844.9455	-9292.3753	2630	0.060522008
312000	7879.4229	-9336.1416	2630	0.058742152
313000	7948.5204	-9392.642	2630	0.057044183
314000	7696.9035	-9342.1771	2630	0.055422137
315000	7839.6818	-9429.0336	2630	0.053870811
316000	7783.6244	-9447.5393	2630	0.052384283
317000	7808.3063	-9493.4801	2630	0.050961406
318000	7671.0848	-9483.2183	2630	0.049597284
319000	7632.0933	-9504.4402	2630	0.04829017
320000	7624.9147	-9538.7559	2630	0.047035913
321000	7589.0619	-9566.8932	2630	0.045833095
322000	7640.4591	-9624.4674	2630	0.04468189
323000	7569.9654	-9639.995	2630	0.043574828
324000	7494.909	-9656.0686	2630	0.042511569
325000	7651.5606	-9750.1854	2630	0.041489106
326000	7583.8036	-9771.5582	2630	0.040507709
327000	7574.2478	-9812.3142	2630	0.039565329
328000	7343.0856	-9774.2474	2630	0.0386598
329000	7350.5022	-9817.5352	2630	0.037785983
330000	7164.7253	-9797.1685	2630	0.036946253
331000	7135.483	-9827.1987	2630	0.036138464
332000	7132.0939	-9870.0785	2630	0.035360597
333000	7334.5355	-9983.9469	2630	0.034611597
334000	7301.5112	-10016.819	2630	0.033888974
335000	7136.3284	-10005.181	2630	0.033194124

```

336000  7058.215 -10024.938  2630 0.032523709
337000  7079.6312 -10078.893  2630 0.031877928
338000  6969.1997 -10086.081  2630 0.031253577
339000  6909.3793 -10107.839  2630 0.030651544
340000  6813.3956 -10118.101  2630 0.03007067
341000  6631.8236 -10101.779  2630 0.029508646
342000  6836.8642 -10215.506  2630 0.02896565
343000  6629.7934 -10190.283  2630 0.028440824
344000  6682.0607 -10253.531  2630 0.027932643
345000  6601.2045 -10271.682  2630 0.02744205
346000  6557.0909 -10301.971  2630 0.02696772
347000  6525.2712 -10338.206  2630 0.02650893
348000  6511.3332 -10379.464  2630 0.026064665
349000  6461.2208 -10410.411  2630 0.025633236
350000  6352.2531 -10421.348  2630 0.025215483

```

Loop time of 203.993 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.424 ns/day, 56.665 hours/ns, 490.214 timesteps/s
97.1% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	135.16	135.16	135.16	0.0	66.26
Neigh	35.181	35.181	35.181	0.0	17.25
Comm	0.19148	0.19148	0.19148	0.0	0.09
Output	19.949	19.949	19.949	0.0	9.78
Modify	12.196	12.196	12.196	0.0	5.98
Other		1.31			0.64

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 193403 ave 193403 max 193403 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 193403

Ave neighs/atom = 73.5373

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

fix 1 all nvt temp 5000.0 3000.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1

fix 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular

```

fix      3 all recenter INIT INIT INIT units box
fix      4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf5.dat mode
vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)
fix      5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster5.out mode
vector
fix      6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas
file data5.dat
#fix     7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]

```

```

dump      5 all atom 100 dump.kondensasi2
timestep  0.00001
thermo_style custom step temp pe atoms density
thermo    1000
run       100000

```

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 19.25 | 19.25 | 19.25 Mbytes

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
350000	6352.2531	-10421.348	2630	0.025215483
351000	6510.98	-10484.203	2630	0.024809341
352000	6414.2882	-10471.82	2630	0.024413569
353000	6346.6911	-10477.353	2630	0.024028712
354000	6401.1612	-10524.756	2630	0.023653755
355000	6322.8456	-10524.701	2630	0.023289653
356000	6347.8984	-10556.711	2630	0.022934975
357000	6298.235	-10570.809	2630	0.022589491
358000	6208.2424	-10569.742	2630	0.022252695
359000	6219.4435	-10606.952	2630	0.021924634
360000	6154.8781	-10618.249	2630	0.021605842
361000	6056.1739	-10622.072	2630	0.021295079
362000	6241.1346	-10719.015	2630	0.020992945
363000	6094.8792	-10708.342	2630	0.020698906
364000	6170.069	-10769.559	2630	0.020412773
365000	6086.134	-10778.886	2630	0.020134
366000	6055.6606	-10806.413	2630	0.019863077
367000	6026.1357	-10838.128	2630	0.019599783
368000	5923.6882	-10842.16	2630	0.019343049
369000	5953.9386	-10889.872	2630	0.019093981
370000	5862.1969	-10896.229	2630	0.01885179
371000	5908.1024	-10950.486	2630	0.018614622
372000	5772.0576	-10939.905	2630	0.018383459
373000	5800.1465	-10987.163	2630	0.01815871
374000	5706.5785	-10996.358	2630	0.017939963
375000	5696.1525	-11032.671	2630	0.017726395
376000	5716.9136	-11078.591	2630	0.017518062
377000	5743.0675	-11128.297	2630	0.017315172
378000	5715.5736	-11159.294	2630	0.017117349

379000	5539.8513	-11140.115	2630	0.016924884
380000	5494.1413	-11162.306	2630	0.01673692
381000	5534.897	-11215.172	2630	0.016554211
382000	5491.6818	-11241.197	2630	0.016375847
383000	5400.2048	-11244.859	2630	0.01620161
384000	5323.5382	-11258.759	2630	0.016031319
385000	5328.3419	-11296.361	2630	0.015864187
386000	5370.3013	-11348.191	2630	0.015701655
387000	5345.2739	-11377.542	2630	0.015543248
388000	5272.9424	-11391.154	2630	0.015388555
389000	5215.5043	-11408.443	2630	0.015236622
390000	5172.3652	-11429.648	2630	0.015088906
391000	5149.0106	-11457.766	2630	0.014944394
392000	5130.2216	-11488.926	2630	0.014803743
393000	5071.762	-11506.454	2630	0.014665439
394000	5116.0791	-11556.309	2630	0.014530178
395000	4929.8723	-11529.462	2630	0.014397794
396000	5040.0647	-11602.531	2630	0.014268181
397000	4969.703	-11614.998	2630	0.014141961
398000	4934.1546	-11639.644	2630	0.014018437
399000	4925.5353	-11672.878	2630	0.013897187
400000	4808.23	-11666.185	2630	0.013779242
401000	4883.9472	-11726.698	2630	0.013663525
402000	4799.2381	-11733.459	2630	0.013550614
403000	4767.3564	-11754.783	2630	0.013439914
404000	4787.9457	-11798.153	2630	0.013331331
405000	4773.2392	-11828.373	2630	0.01322546
406000	4750.554	-11855.109	2630	0.013121927
407000	4505.7065	-11802.915	2630	0.013020244
408000	4566.955	-11855.217	2630	0.012920497
409000	4499.1926	-11863.592	2630	0.0128225
410000	4580.9903	-11922.595	2630	0.012726558
411000	4573.6156	-11952.209	2630	0.012632384
412000	4503.941	-11961.711	2630	0.012539881
413000	4480.3522	-11986.858	2630	0.012449343
414000	4468.2888	-12012.295	2630	0.012360794
415000	4458.4943	-12042.728	2630	0.012273797
416000	4331.0408	-12030.771	2630	0.012188382
417000	4450.128	-12101.581	2630	0.012104838
418000	4358.662	-12104.399	2630	0.012022875
419000	4410.6742	-12154.95	2630	0.01194263
420000	4381.7518	-12179.006	2630	0.011863511
421000	4386.1216	-12211.799	2630	0.011785955
422000	4233.6004	-12188.622	2630	0.011710013
423000	4072.8947	-12162.069	2630	0.011635435
424000	4018.0368	-12168.586	2630	0.011562255

425000	4140.2346	-12240.783	2630	0.011490461
426000	4059.323	-12242.453	2630	0.011419974
427000	4137.0978	-12298.042	2630	0.01135081
428000	4032.5349	-12291.178	2630	0.011282683
429000	4127.1153	-12352.709	2630	0.011215951
430000	4031.4499	-12350.882	2630	0.01115063
431000	4029.5955	-12379.634	2630	0.011086272
432000	3935.2486	-12376.611	2630	0.011022966
433000	3979.7807	-12418.132	2630	0.010960678
434000	3914.2564	-12422.617	2630	0.010899458
435000	3833.2772	-12421.581	2630	0.010839609
436000	3810.6002	-12439.368	2630	0.010780859
437000	3713.2454	-12431.596	2630	0.010722991
438000	3764.9546	-12477.72	2630	0.010666185
439000	3773.4804	-12510.187	2630	0.010609945
440000	3879.0739	-12575.876	2630	0.010554556
441000	3823.8282	-12585.423	2630	0.010500549
442000	3760.8438	-12590.534	2630	0.010447507
443000	3631.7002	-12569.681	2630	0.010394775
444000	3605.423	-12585.892	2630	0.010343165
445000	3604.2595	-12610.777	2630	0.010292778
446000	3656.1841	-12655.162	2630	0.01024333
447000	3592.4473	-12659.762	2630	0.010194345
448000	3584.0947	-12682.333	2630	0.01014628
449000	3571.4151	-12706.123	2630	0.010099275
450000	3651.6714	-12762.143	2630	0.010053105

Loop time of 233.414 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.370 ns/day, 64.837 hours/ns, 428.423 timesteps/s
96.6% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	% total
Pair	155.17	155.17	155.17	0.0	66.48
Neigh	37.718	37.718	37.718	0.0	16.16
Comm	0.29685	0.29685	0.29685	0.0	0.13
Output	25.952	25.952	25.952	0.0	11.12
Modify	12.687	12.687	12.687	0.0	5.44
Other		1.594			0.68

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 218086 ave 218086 max 218086 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 FullNghs: 0 ave 0 max 0 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 218086
 Ave neighs/atom = 82.9224
 Neighbor list builds = 10000
 Dangerous builds not checked

```
fix      1 all nvt temp      3000.0 273.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1
fix      2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular
fix      3 all recenter INIT INIT INIT units box
fix      4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf6.dat mode
vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)
fix      5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster6.out mode
vector
fix      6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas
file data6.dat
#fix     7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]
```

```
dump      6 all atom 100 dump.kondensasi2
timestep  0.001
thermo_style custom step temp pe atoms density
thermo    1000
run       100000
```

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 23.67 | 23.67 | 23.67 Mbytes

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
450000	3651.6714	-12762.143	2630	0.010053105
451000	3006.4408	-13141.928	2630	0.0070116551
452000	2968.7571	-13200.242	2630	0.0052292812
453000	2943.6909	-13339.428	2630	0.0040340089
454000	2935.9211	-13429.625	2630	0.0032179185
455000	2956.1453	-13500.953	2630	0.0026196326
456000	2825.2707	-13566.243	2630	0.0021717611
457000	2787.3273	-13574.494	2630	0.0018280723
458000	2840.8126	-13618.181	2630	0.0015538226
459000	2784.7873	-13713.771	2630	0.0013373476
460000	2843.0784	-13733.726	2630	0.0011633654
461000	2710.2062	-13786.025	2630	0.0010218294
462000	2675.7255	-13852.654	2630	0.0009042736
463000	2712.0761	-13893.953	2630	0.00080514135
464000	2614.8407	-13865.701	2630	0.00072081332
465000	2563.7776	-13934.601	2630	0.00064857126
466000	2545.9588	-14015.627	2630	0.00058711801
467000	2515.6368	-14003.386	2630	0.00053494245

468000	2519.7112	-14033.946	2630 0.00048863926
469000	2538.0274	-14026.313	2630 0.00044760777
470000	2438.2699	-14069.162	2630 0.00041121826
471000	2426.6007	-14054.26	2630 0.00037907676
472000	2417.8609	-14097.358	2630 0.00035008275
473000	2345.4491	-14110.815	2630 0.00032433567
474000	2378.7636	-14113.519	2630 0.0003010697
475000	2362.9214	-14138.844	2630 0.0002800987
476000	2276.662	-14138.252	2630 0.00026115003
477000	2260.363	-14151.863	2630 0.00024379223
478000	2313.3191	-14175.085	2630 0.00022816509
479000	2248.7361	-14217.795	2630 0.00021387839
480000	2189.7374	-14204.51	2630 0.0002007657
481000	2167.1601	-14229.078	2630 0.00018883891
482000	2129.271	-14234.23	2630 0.00017790214
483000	2087.8918	-14231.585	2630 0.00016790469
484000	2081.6143	-14229.473	2630 0.00015861299
485000	2001.156	-14264.624	2630 0.00015012309
486000	2040.3203	-14300.355	2630 0.00014223438
487000	1999.0265	-14275.222	2630 0.00013494464
488000	1973.1081	-14320.798	2630 0.00012819404
489000	1909.3309	-14294.647	2630 0.00012195663
490000	1962.8983	-14346.049	2630 0.0001161172
491000	1893.0627	-14354.057	2630 0.00011072875
492000	1919.8273	-14345.274	2630 0.00010568193
493000	1840.134	-14381.691	2630 0.00010096741
494000	1804.2086	-14390.419	2630 9.6562556e-005
495000	1813.6716	-14366.24	2630 9.2438157e-005
496000	1706.4192	-14389.113	2630 8.8593074e-005
497000	1723.1287	-14400.461	2630 8.4966676e-005
498000	1705.4824	-14416.97	2630 8.1592286e-005
499000	1642.0347	-14416.124	2630 7.8408096e-005
500000	1618.9004	-14446.097	2630 7.5421604e-005
501000	1621.8828	-14470.27	2630 7.260029e-005
502000	1591.3915	-14474.221	2630 6.9954648e-005
503000	1552.5435	-14479.55	2630 6.7445934e-005
504000	1571.2965	-14492.714	2630 6.5098786e-005
505000	1468.4618	-14501.158	2630 6.2876745e-005
506000	1490.5397	-14500.721	2630 6.0781539e-005
507000	1452.8248	-14527.849	2630 5.8804942e-005
508000	1392.0528	-14539.106	2630 5.6930252e-005
509000	1418.4465	-14542.673	2630 5.5163109e-005
510000	1401.4617	-14582.583	2630 5.3486631e-005
511000	1340.6737	-14563.886	2630 5.1906912e-005
512000	1303.1328	-14580.394	2630 5.0410858e-005
513000	1277.859	-14598.954	2630 4.8980455e-005

514000	1218.3312	-14601.288	2630	4.762713e-005
515000	1256.3754	-14614.959	2630	4.6334449e-005
516000	1194.0726	-14628.615	2630	4.5114143e-005
517000	1180.294	-14651.062	2630	4.3952361e-005
518000	1198.4705	-14645.226	2630	4.2843767e-005
519000	1097.4632	-14659.081	2630	4.1791876e-005
520000	1118.0461	-14691.199	2630	4.0798086e-005
521000	1056.5839	-14680.385	2630	3.9848326e-005
522000	1006.7854	-14688.236	2630	3.8942463e-005
523000	1038.173	-14703.044	2630	3.8084455e-005
524000	993.8595	-14714.143	2630	3.7266819e-005
525000	953.15316	-14735.598	2630	3.6488593e-005
526000	953.88682	-14736.065	2630	3.5749684e-005
527000	899.79517	-14758.801	2630	3.505064e-005
528000	883.63456	-14762.742	2630	3.4385505e-005
529000	846.08549	-14778.547	2630	3.3747746e-005
530000	852.15863	-14784.001	2630	3.3145906e-005
531000	809.00209	-14799.236	2630	3.2568664e-005
532000	761.34062	-14809.2	2630	3.2027389e-005
533000	727.16625	-14812.434	2630	3.1512086e-005
534000	710.57642	-14820.742	2630	3.1023591e-005
535000	687.1534	-14843.418	2630	3.0558169e-005
536000	663.37972	-14854.558	2630	3.0117951e-005
537000	638.51093	-14864.256	2630	2.9703024e-005
538000	600.14752	-14873.934	2630	2.9310894e-005
539000	552.37394	-14878.482	2630	2.8938348e-005
540000	537.42917	-14899.319	2630	2.8587336e-005
541000	509.83824	-14904.531	2630	2.8256804e-005
542000	477.43915	-14908.835	2630	2.7945286e-005
543000	468.89071	-14925.572	2630	2.7652513e-005
544000	439.40965	-14933.195	2630	2.7379822e-005
545000	407.28333	-14945.892	2630	2.7125666e-005
546000	381.4588	-14952.777	2630	2.6887609e-005
547000	353.42085	-14964.417	2630	2.6668729e-005
548000	342.69625	-14973.926	2630	2.6466509e-005
549000	298.01069	-14985.707	2630	2.6280649e-005
550000	275.20006	-14998.041	2630	2.6111393e-005

Loop time of 1299.3 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 6.650 ns/day, 3.609 hours/ns, 76.964 timesteps/s
78.3% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section | min time | avg time | max time |%varavg| %total

Pair | 171.74 | 171.74 | 171.74 | 0.0 | 13.22

Neigh | 1033.3 | 1033.3 | 1033.3 | 0.0 | 79.53
 Comm | 44.843 | 44.843 | 44.843 | 0.0 | 3.45
 Output | 35.653 | 35.653 | 35.653 | 0.0 | 2.74
 Modify | 12.137 | 12.137 | 12.137 | 0.0 | 0.93
 Other | | 1.612 | | | 0.12

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Nghost: 0 ave 0 max 0 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Neighs: 238183 ave 238183 max 238183 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 FullNghs: 0 ave 0 max 0 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 238183
 Ave neighs/atom = 90.5639
 Neighbor list builds = 10000
 Dangerous builds not checked

Log script variasi laju 10¹¹ K/s

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
250000	8156.9956	-9434.3003	2630	0.90507252
251000	8180.9986	-9435.9634	2630	0.85717122
252000	8121.7587	-9401.0281	2630	0.81058854
253000	8223.647	-9412.654	2630	0.76305619
254000	8236.7869	-9390.1489	2630	0.7189938
255000	8445.0582	-9436.372	2630	0.67805172
256000	8342.3985	-9375.214	2630	0.64000799
257000	8448.5652	-9389.0978	2630	0.60460784
258000	8365.0908	-9337.9714	2630	0.57168422
259000	8262.6852	-9278.0241	2630	0.54098586
260000	8384.8587	-9291.7762	2630	0.51232991
261000	8488.9651	-9300.6196	2630	0.4855741
262000	8646.2905	-9327.801	2630	0.46053024
263000	8643.0189	-9300.8579	2630	0.43706937
264000	8679.4169	-9286.0471	2630	0.41464706
265000	8627.6026	-9240.1851	2630	0.39336869
266000	8684.477	-9233.6421	2630	0.37311381
267000	8685.2566	-9205.8715	2630	0.35413976
268000	8755.2741	-9201.2174	2630	0.33635865
269000	8491.6306	-9086.4016	2630	0.31968378
270000	8549.7501	-9082.8814	2630	0.3040327
271000	8523.5202	-9046.4097	2630	0.28932919

272000	8631.7881	-9060.0911	2630	0.27550517
273000	8683.9157	-9054.0369	2630	0.2625011
274000	8779.891	-9063.7369	2630	0.2502615
275000	8520.1699	-8957.2376	2630	0.23873316
276000	8690.0823	-8996.2604	2630	0.22786917
277000	8818.5964	-9023.0764	2630	0.21762457
278000	8779.4192	-8995.3704	2630	0.20795861
279000	8709.0558	-8955.1	2630	0.19883518
280000	8898.3113	-9005.5348	2630	0.19022001
281000	8817.6246	-8969.9962	2630	0.18208078
282000	8705.9626	-8925.0576	2630	0.17438949
283000	8783.8363	-8944.7956	2630	0.16711955
284000	8694.2197	-8909.6941	2630	0.16024451
285000	8640.3773	-8891.7958	2630	0.15374189
286000	8590.8019	-8880.1833	2630	0.14758993
287000	8635.2377	-8905.3485	2630	0.14176742
288000	8739.3811	-8952.0574	2630	0.13625558
289000	8702.7798	-8955.5216	2630	0.13103709
290000	8629.1099	-8951.0911	2630	0.12606044
291000	8589.0877	-8958.0568	2630	0.12101029
292000	8484.429	-8944.6397	2630	0.1162449
293000	8397.3788	-8939.2705	2630	0.11174862
294000	8336.7722	-8943.9244	2630	0.10749864
295000	8456.7261	-9014.1873	2630	0.10348236
296000	8560.9724	-9081.6854	2630	0.099682752
297000	8458.5597	-9076.4743	2630	0.096083478
298000	8528.8741	-9127.8038	2630	0.092670404
299000	8290.6058	-9076.6799	2630	0.089433009
300000	8334.9113	-9119.2187	2630	0.086362965
301000	8177.1969	-9097.1769	2630	0.083447306
302000	8212.1789	-9135.2706	2630	0.08067734
303000	7980.7303	-9085.8466	2630	0.078043159
304000	8040.7626	-9135.6425	2630	0.075531935
305000	7918.7066	-9124.2842	2630	0.073140504
306000	7926.7952	-9158.5009	2630	0.070802601
307000	7964.575	-9200.7757	2630	0.0685454
308000	8081.2376	-9273.8216	2630	0.066395412
309000	7971.0037	-9271.7576	2630	0.064346835
310000	8032.9723	-9323.9994	2630	0.062389338
311000	7844.9455	-9292.3753	2630	0.060522008
312000	7879.4229	-9336.1416	2630	0.058742152
313000	7948.5204	-9392.642	2630	0.057044183
314000	7696.9035	-9342.1771	2630	0.055422137
315000	7839.6818	-9429.0336	2630	0.053870811
316000	7783.6244	-9447.5393	2630	0.052384283
317000	7808.3063	-9493.4801	2630	0.050961406

318000	7671.0848	-9483.2183	2630	0.049597284
319000	7632.0933	-9504.4402	2630	0.04829017
320000	7624.9147	-9538.7559	2630	0.047035913
321000	7589.0619	-9566.8932	2630	0.045833095
322000	7640.4591	-9624.4674	2630	0.04468189
323000	7569.9654	-9639.995	2630	0.043574828
324000	7494.909	-9656.0686	2630	0.042511569
325000	7651.5606	-9750.1854	2630	0.041489106
326000	7583.8036	-9771.5582	2630	0.040507709
327000	7574.2478	-9812.3142	2630	0.039565329
328000	7343.0856	-9774.2474	2630	0.0386598
329000	7350.5022	-9817.5352	2630	0.037785983
330000	7164.7253	-9797.1685	2630	0.036946253
331000	7135.483	-9827.1987	2630	0.036138464
332000	7132.0939	-9870.0785	2630	0.035360597
333000	7334.5355	-9983.9469	2630	0.034611597
334000	7301.5112	-10016.819	2630	0.033888974
335000	7136.3284	-10005.181	2630	0.033194124
336000	7058.215	-10024.938	2630	0.032523709
337000	7079.6312	-10078.893	2630	0.031877928
338000	6969.1997	-10086.081	2630	0.031253577
339000	6909.3793	-10107.839	2630	0.030651544
340000	6813.3956	-10118.101	2630	0.03007067
341000	6631.8236	-10101.779	2630	0.029508646
342000	6836.8642	-10215.506	2630	0.02896565
343000	6629.7934	-10190.283	2630	0.028440824
344000	6682.0607	-10253.531	2630	0.027932643
345000	6601.2045	-10271.682	2630	0.02744205
346000	6557.0909	-10301.971	2630	0.02696772
347000	6525.2712	-10338.206	2630	0.02650893
348000	6511.3332	-10379.464	2630	0.026064665
349000	6461.2208	-10410.411	2630	0.025633236
350000	6352.2531	-10421.348	2630	0.025215483

Loop time of 507.579 on 1 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.170 ns/day, 140.994 hours/ns, 197.014 timesteps/s
96.9% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	% total
---------	----------	----------	----------	----------	---------

Pair	338.24	338.24	338.24	0.0	66.64
Neigh	71.001	71.001	71.001	0.0	13.99
Comm	0.57299	0.57299	0.57299	0.0	0.11
Output	55.278	55.278	55.278	0.0	10.89
Modify	40.605	40.605	40.605	0.0	8.00

Other | | 1.882 | | | 0.37

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Nghost: 0 ave 0 max 0 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 Neighs: 193403 ave 193403 max 193403 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0
 FullNghs: 0 ave 0 max 0 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 193403
 Ave neighs/atom = 73.5373
 Neighbor list builds = 10000
 Dangerous builds not checked

fix 1 all nvt temp 5000.0 3000.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1
 fix 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular
 fix 3 all recenter INIT INIT INIT units box
 fix 4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf5.dat mode
 vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)
 fix 5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster5.out mode
 vector
 fix 6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas
 file data5.dat
 #fix 7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]

dump 5 all atom 100 dump.kondensasi2
 timestep 0.00001
 thermo_style custom step temp pe atoms density
 thermo 1000
 run 100000

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 13.26 | 13.26 | 13.26 Mbytes

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
350000	6352.2531	-10421.348	2630	0.025215483
351000	6510.98	-10484.203	2630	0.024809341
352000	6414.2882	-10471.82	2630	0.024413569
353000	6346.6911	-10477.353	2630	0.024028712
354000	6401.1612	-10524.756	2630	0.023653755
355000	6322.8456	-10524.701	2630	0.023289653
356000	6347.8984	-10556.711	2630	0.022934975
357000	6298.235	-10570.809	2630	0.022589491
358000	6208.2424	-10569.742	2630	0.022252695
359000	6219.4435	-10606.952	2630	0.021924634
360000	6154.8781	-10618.249	2630	0.021605842

361000	6056.1739	-10622.072	2630	0.021295079
362000	6241.1346	-10719.015	2630	0.020992945
363000	6094.8792	-10708.342	2630	0.020698906
364000	6170.069	-10769.559	2630	0.020412773
365000	6086.134	-10778.886	2630	0.020134
366000	6055.6606	-10806.413	2630	0.019863077
367000	6026.1357	-10838.128	2630	0.019599783
368000	5923.6882	-10842.16	2630	0.019343049
369000	5953.9386	-10889.872	2630	0.019093981
370000	5862.1969	-10896.229	2630	0.01885179
371000	5908.1024	-10950.486	2630	0.018614622
372000	5772.0576	-10939.905	2630	0.018383459
373000	5800.1465	-10987.163	2630	0.01815871
374000	5706.5785	-10996.358	2630	0.017939963
375000	5696.1525	-11032.671	2630	0.017726395
376000	5716.9136	-11078.591	2630	0.017518062
377000	5743.0675	-11128.297	2630	0.017315172
378000	5715.5736	-11159.294	2630	0.017117349
379000	5539.8513	-11140.115	2630	0.016924884
380000	5494.1413	-11162.306	2630	0.01673692
381000	5534.897	-11215.172	2630	0.016554211
382000	5491.6818	-11241.197	2630	0.016375847
383000	5400.2048	-11244.859	2630	0.01620161
384000	5323.5382	-11258.759	2630	0.016031319
385000	5328.3419	-11296.361	2630	0.015864187
386000	5370.3013	-11348.191	2630	0.015701655
387000	5345.2739	-11377.542	2630	0.015543248
388000	5272.9424	-11391.154	2630	0.015388555
389000	5215.5043	-11408.443	2630	0.015236622
390000	5172.3652	-11429.648	2630	0.015088906
391000	5149.0106	-11457.766	2630	0.014944394
392000	5130.2216	-11488.926	2630	0.014803743
393000	5071.762	-11506.454	2630	0.014665439
394000	5116.0791	-11556.309	2630	0.014530178
395000	4929.8723	-11529.462	2630	0.014397794
396000	5040.0647	-11602.531	2630	0.014268181
397000	4969.703	-11614.998	2630	0.014141961
398000	4934.1546	-11639.644	2630	0.014018437
399000	4925.5353	-11672.878	2630	0.013897187
400000	4808.23	-11666.185	2630	0.013779242
401000	4883.9472	-11726.698	2630	0.013663525
402000	4799.2381	-11733.459	2630	0.013550614
403000	4767.3564	-11754.783	2630	0.013439914
404000	4787.9457	-11798.153	2630	0.013331331
405000	4773.2392	-11828.373	2630	0.01322546
406000	4750.554	-11855.109	2630	0.013121927

407000	4505.7065	-11802.915	2630	0.013020244
408000	4566.955	-11855.217	2630	0.012920497
409000	4499.1926	-11863.592	2630	0.0128225
410000	4580.9903	-11922.595	2630	0.012726558
411000	4573.6156	-11952.209	2630	0.012632384
412000	4503.941	-11961.711	2630	0.012539881
413000	4480.3522	-11986.858	2630	0.012449343
414000	4468.2888	-12012.295	2630	0.012360794
415000	4458.4943	-12042.728	2630	0.012273797
416000	4331.0408	-12030.771	2630	0.012188382
417000	4450.128	-12101.581	2630	0.012104838
418000	4358.662	-12104.399	2630	0.012022875
419000	4410.6742	-12154.95	2630	0.01194263
420000	4381.7518	-12179.006	2630	0.011863511
421000	4386.1216	-12211.799	2630	0.011785955
422000	4233.6004	-12188.622	2630	0.011710013
423000	4072.8947	-12162.069	2630	0.011635435
424000	4018.0368	-12168.586	2630	0.011562255
425000	4140.2346	-12240.783	2630	0.011490461
426000	4059.323	-12242.453	2630	0.011419974
427000	4137.0978	-12298.042	2630	0.01135081
428000	4032.5349	-12291.178	2630	0.011282683
429000	4127.1153	-12352.709	2630	0.011215951
430000	4031.4499	-12350.882	2630	0.01115063
431000	4029.5955	-12379.634	2630	0.011086272
432000	3935.2486	-12376.611	2630	0.011022966
433000	3979.7807	-12418.132	2630	0.010960678
434000	3914.2564	-12422.617	2630	0.010899458
435000	3833.2772	-12421.581	2630	0.010839609
436000	3810.6002	-12439.368	2630	0.010780859
437000	3713.2454	-12431.596	2630	0.010722991
438000	3764.9546	-12477.72	2630	0.010666185
439000	3773.4804	-12510.187	2630	0.010609945
440000	3879.0739	-12575.876	2630	0.010554556
441000	3823.8282	-12585.423	2630	0.010500549
442000	3760.8438	-12590.534	2630	0.010447507
443000	3631.7002	-12569.681	2630	0.010394775
444000	3605.423	-12585.892	2630	0.010343165
445000	3604.2595	-12610.777	2630	0.010292778
446000	3656.1841	-12655.162	2630	0.01024333
447000	3592.4473	-12659.762	2630	0.010194345
448000	3584.0947	-12682.333	2630	0.01014628
449000	3571.4151	-12706.123	2630	0.010099275
450000	3651.6714	-12762.143	2630	0.010053105

Loop time of 583.146 on 1 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.148 ns/day, 161.985 hours/ns, 171.484 timesteps/s
 96.8% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	388.23	388.23	388.23	0.0	66.58
Neigh	82.537	82.537	82.537	0.0	14.15
Comm	0.80797	0.80797	0.80797	0.0	0.14
Output	68.764	68.764	68.764	0.0	11.79
Modify	40.883	40.883	40.883	0.0	7.01
Other	1.919				0.33

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 218086 ave 218086 max 218086 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 218086

Ave neighs/atom = 82.9224

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

fix 1 all nvt temp 3000.0 273.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1

fix 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular

fix 3 all recenter INIT INIT INIT units box

fix 4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf6.dat mode

vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)

fix 5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster6.out mode

vector

fix 6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas

file data6.dat

#fix 7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]

dump 6 all atom 100 dump.kondensasi2

timestep 0.0001

thermo_style custom step temp pe atoms density

thermo 1000

run 100000

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 17.68 | 17.68 | 17.68 Mbytes

Step Temp PotEng Atoms Density

450000	3651.6714	-12762.143	2630	0.010053105
451000	3543.3046	-12827.45	2630	0.0096148627
452000	3307.4467	-12886.388	2630	0.0092212184
453000	3203.6772	-12984.909	2630	0.0088697379
454000	3042.031	-13051.576	2630	0.0085543241
455000	2943.2681	-13124.133	2630	0.0082688568
456000	2861.5499	-13185.285	2630	0.0080081981
457000	2783.4017	-13227.872	2630	0.0077673869
458000	2756.219	-13265.289	2630	0.0075431488
459000	2806.3934	-13315.783	2630	0.0073314464
460000	2685.5779	-13299.813	2630	0.0071305149
461000	2737.4687	-13338.019	2630	0.0069390411
462000	2686.0966	-13345.95	2630	0.0067562654
463000	2699.9825	-13382.978	2630	0.0065819871
464000	2587.4819	-13384.714	2630	0.0064172742
465000	2620.7818	-13433.072	2630	0.0062610041
466000	2597.5017	-13457.329	2630	0.0061126866
467000	2475.8044	-13446.367	2630	0.005971514
468000	2522.0268	-13481.903	2630	0.0058360749
469000	2495.2699	-13491.231	2630	0.0057060592
470000	2421.1883	-13493.768	2630	0.0055818955
471000	2444.3634	-13538.958	2630	0.0054631569
472000	2392.0781	-13550.978	2630	0.0053495311
473000	2326.5929	-13552.962	2630	0.0052411399
474000	2393.9383	-13599.395	2630	0.0051374091
475000	2333.3255	-13603.139	2630	0.0050369673
476000	2260.44	-13597.788	2630	0.0049411026
477000	2284.9341	-13628.002	2630	0.0048485411
478000	2259.0302	-13636.874	2630	0.0047592017
479000	2258.2446	-13662.387	2630	0.0046732929
480000	2233.9416	-13680.603	2630	0.0045906882
481000	2190.1819	-13692.176	2630	0.0045115361
482000	2120.4299	-13696.467	2630	0.004435327
483000	2168.9613	-13742.275	2630	0.0043623797
484000	2144.6701	-13761.491	2630	0.0042922212
485000	2078.6736	-13768.845	2630	0.004224518
486000	2007.2652	-13769.265	2630	0.0041600321
487000	2055.6446	-13812.351	2630	0.0040975485
488000	1951.9852	-13798.189	2630	0.004037292
489000	1970.3809	-13826.611	2630	0.0039792857
490000	1952.267	-13843.149	2630	0.0039231389
491000	1937.7866	-13862.809	2630	0.0038690166
492000	1856.6211	-13856.675	2630	0.0038166647
493000	1857.3478	-13882.5	2630	0.0037661606
494000	1862.7462	-13904.741	2630	0.0037173532
495000	1860.9897	-13927.994	2630	0.0036702358

496000	1769.2626	-13918.098	2630 0.0036247231
497000	1743.6517	-13932.687	2630 0.0035806662
498000	1703.355	-13941.856	2630 0.0035382117
499000	1690.5178	-13960.903	2630 0.0034973347
500000	1672.0556	-13977.052	2630 0.0034576731
501000	1641.0131	-13992.342	2630 0.0034193298
502000	1622.9615	-14009.286	2630 0.003382323
503000	1600.9223	-14023.416	2630 0.0033466788
504000	1531.7776	-14023.29	2630 0.0033122003
505000	1497.4499	-14032.995	2630 0.0032787777
506000	1501.2662	-14061.842	2630 0.0032464403
507000	1519.6114	-14088.581	2630 0.0032152625
508000	1433.8695	-14083.471	2630 0.0031853121
509000	1415.4902	-14101.619	2630 0.0031561592
510000	1400.9201	-14120.305	2630 0.0031282119
511000	1386.144	-14138.06	2630 0.0031010947
512000	1346.9688	-14154.028	2630 0.0030751969
513000	1336.2762	-14179.614	2630 0.0030502148
514000	1312.8548	-14200.583	2630 0.003026026
515000	1277.3983	-14215.465	2630 0.0030030412
516000	1235.2481	-14230.17	2630 0.0029809921
517000	1211.5321	-14247.017	2630 0.0029595811
518000	1181.491	-14261.564	2630 0.0029390531
519000	1150.9814	-14275.998	2630 0.0029193628
520000	1139.4147	-14292.733	2630 0.0029002695
521000	1113.1853	-14303.391	2630 0.0028818489
522000	1059.0617	-14308.54	2630 0.0028641278
523000	1038.7612	-14324.322	2630 0.0028469818
524000	1025.828	-14345.134	2630 0.0028303977
525000	998.50226	-14358.596	2630 0.0028144957
526000	978.85129	-14374.458	2630 0.0027991757
527000	937.68153	-14385.08	2630 0.0027844496
528000	912.44766	-14398.582	2630 0.002770357
529000	873.01111	-14407.931	2630 0.0027568641
530000	870.84497	-14429.549	2630 0.0027438974
531000	830.49743	-14435.026	2630 0.0027314648
532000	799.18949	-14447.569	2630 0.0027194972
533000	764.43233	-14454.135	2630 0.0027080684
534000	730.99051	-14461.892	2630 0.0026970796
535000	717.80526	-14478.409	2630 0.0026865366
536000	680.08785	-14486.223	2630 0.0026764998
537000	666.64778	-14499.575	2630 0.0026668687
538000	621.96351	-14504.649	2630 0.002657671
539000	608.7883	-14519.56	2630 0.0026489126
540000	571.74897	-14525.414	2630 0.0026406106
541000	565.50957	-14545.822	2630 0.002632675

```

542000  523.65977  -14548.374  2630 0.0026251728
543000  509.93948  -14564.586  2630 0.0026180768
544000  487.11295  -14578.707  2630 0.0026113804
545000  453.48522  -14587.775  2630 0.002605047
546000  418.79627  -14594.523  2630 0.0025991581
547000  402.95313  -14610.058  2630 0.0025936806
548000  375.47758  -14624.493  2630 0.0025885471
549000  354.78266  -14635.995  2630 0.002583838
550000  319.50721  -14643.423  2630 0.0025795064
    
```

Loop time of 678.929 on 1 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 1.273 ns/day, 18.859 hours/ns, 147.291 timesteps/s
 96.0% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%var	avg	%total
Pair	429.91	429.91	429.91	0.0	63.32	
Neigh	117.96	117.96	117.96	0.0	17.37	
Comm	1.5854	1.5854	1.5854	0.0	0.23	
Output	86.557	86.557	86.557	0.0	12.75	
Modify	41.064	41.064	41.064	0.0	6.05	
Other		1.856			0.27	

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 232829 ave 232829 max 232829 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 232829

Ave neighs/atom = 88.5281

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

Log script variasi laju 10^{12} K/s

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
250000	8156.9956	-9434.3003	2630	0.90507252
251000	8180.9986	-9435.9634	2630	0.85717122
252000	8121.7587	-9401.0281	2630	0.81058854
253000	8223.647	-9412.654	2630	0.76305619

254000	8236.7869	-9390.1489	2630	0.7189938
255000	8445.0582	-9436.372	2630	0.67805172
256000	8342.3985	-9375.214	2630	0.64000799
257000	8448.5652	-9389.0978	2630	0.60460784
258000	8365.0908	-9337.9714	2630	0.57168422
259000	8262.6852	-9278.0241	2630	0.54098586
260000	8384.8587	-9291.7762	2630	0.51232991
261000	8488.9651	-9300.6196	2630	0.4855741
262000	8646.2905	-9327.801	2630	0.46053024
263000	8643.0189	-9300.8579	2630	0.43706937
264000	8679.4169	-9286.0471	2630	0.41464706
265000	8627.6026	-9240.1851	2630	0.39336869
266000	8684.477	-9233.6421	2630	0.37311381
267000	8685.2566	-9205.8715	2630	0.35413976
268000	8755.2741	-9201.2174	2630	0.33635865
269000	8491.6306	-9086.4016	2630	0.31968378
270000	8549.7501	-9082.8814	2630	0.3040327
271000	8523.5202	-9046.4097	2630	0.28932919
272000	8631.7881	-9060.0911	2630	0.27550517
273000	8683.9157	-9054.0369	2630	0.2625011
274000	8779.891	-9063.7369	2630	0.2502615
275000	8520.1699	-8957.2376	2630	0.23873316
276000	8690.0823	-8996.2604	2630	0.22786917
277000	8818.5964	-9023.0764	2630	0.21762457
278000	8779.4192	-8995.3704	2630	0.20795861
279000	8709.0558	-8955.1	2630	0.19883518
280000	8898.3113	-9005.5348	2630	0.19022001
281000	8817.6246	-8969.9962	2630	0.18208078
282000	8705.9626	-8925.0576	2630	0.17438949
283000	8783.8363	-8944.7956	2630	0.16711955
284000	8694.2197	-8909.6941	2630	0.16024451
285000	8640.3773	-8891.7958	2630	0.15374189
286000	8590.8019	-8880.1833	2630	0.14758993
287000	8635.2377	-8905.3485	2630	0.14176742
288000	8739.3811	-8952.0574	2630	0.13625558
289000	8702.7798	-8955.5216	2630	0.13103709
290000	8629.1099	-8951.0911	2630	0.12606044
291000	8589.0877	-8958.0568	2630	0.12101029
292000	8484.429	-8944.6397	2630	0.1162449
293000	8397.3788	-8939.2705	2630	0.11174862
294000	8336.7722	-8943.9244	2630	0.10749864
295000	8456.7261	-9014.1873	2630	0.10348236
296000	8560.9724	-9081.6854	2630	0.099682752
297000	8458.5597	-9076.4743	2630	0.096083478
298000	8528.8741	-9127.8038	2630	0.092670404
299000	8290.6058	-9076.6799	2630	0.089433009

300000	8334.9113	-9119.2187	2630	0.086362965
301000	8177.1969	-9097.1769	2630	0.083447306
302000	8212.1789	-9135.2706	2630	0.08067734
303000	7980.7303	-9085.8466	2630	0.078043159
304000	8040.7626	-9135.6425	2630	0.075531935
305000	7918.7066	-9124.2842	2630	0.073140504
306000	7926.7952	-9158.5009	2630	0.070802601
307000	7964.575	-9200.7757	2630	0.0685454
308000	8081.2376	-9273.8216	2630	0.066395412
309000	7971.0037	-9271.7576	2630	0.064346835
310000	8032.9723	-9323.9994	2630	0.062389338
311000	7844.9455	-9292.3753	2630	0.060522008
312000	7879.4229	-9336.1416	2630	0.058742152
313000	7948.5204	-9392.642	2630	0.057044183
314000	7696.9035	-9342.1771	2630	0.055422137
315000	7839.6818	-9429.0336	2630	0.053870811
316000	7783.6244	-9447.5393	2630	0.052384283
317000	7808.3063	-9493.4801	2630	0.050961406
318000	7671.0848	-9483.2183	2630	0.049597284
319000	7632.0933	-9504.4402	2630	0.04829017
320000	7624.9147	-9538.7559	2630	0.047035913
321000	7589.0619	-9566.8932	2630	0.045833095
322000	7640.4591	-9624.4674	2630	0.04468189
323000	7569.9654	-9639.995	2630	0.043574828
324000	7494.909	-9656.0686	2630	0.042511569
325000	7651.5606	-9750.1854	2630	0.041489106
326000	7583.8036	-9771.5582	2630	0.040507709
327000	7574.2478	-9812.3142	2630	0.039565329
328000	7343.0856	-9774.2474	2630	0.0386598
329000	7350.5022	-9817.5352	2630	0.037785983
330000	7164.7253	-9797.1685	2630	0.036946253
331000	7135.483	-9827.1987	2630	0.036138464
332000	7132.0939	-9870.0785	2630	0.035360597
333000	7334.5355	-9983.9469	2630	0.034611597
334000	7301.5112	-10016.819	2630	0.033888974
335000	7136.3284	-10005.181	2630	0.033194124
336000	7058.215	-10024.938	2630	0.032523709
337000	7079.6312	-10078.893	2630	0.031877928
338000	6969.1997	-10086.081	2630	0.031253577
339000	6909.3793	-10107.839	2630	0.030651544
340000	6813.3956	-10118.101	2630	0.03007067
341000	6631.8236	-10101.779	2630	0.029508646
342000	6836.8642	-10215.506	2630	0.02896565
343000	6629.7934	-10190.283	2630	0.028440824
344000	6682.0607	-10253.531	2630	0.027932643
345000	6601.2045	-10271.682	2630	0.02744205

```

346000 6557.0909 -10301.971 2630 0.02696772
347000 6525.2712 -10338.206 2630 0.02650893
348000 6511.3332 -10379.464 2630 0.026064665
349000 6461.2208 -10410.411 2630 0.025633236
350000 6352.2531 -10421.348 2630 0.025215483

```

Loop time of 216.409 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.399 ns/day, 60.113 hours/ns, 462.089 timesteps/s
96.3% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	144.31	144.31	144.31	0.0	66.68
Neigh	36.399	36.399	36.399	0.0	16.82
Comm	0.17894	0.17894	0.17894	0.0	0.08
Output	21.249	21.249	21.249	0.0	9.82
Modify	13.053	13.053	13.053	0.0	6.03
Other	1.222				0.56

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 193403 ave 193403 max 193403 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 193403

Ave neighs/atom = 73.5373

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

fix 1 all nvt temp 5000.0 3000.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1

fix 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular

fix 3 all recenter INIT INIT INIT units box

fix 4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf5.dat mode
vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)

fix 5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster5.out mode
vector

fix 6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas
file data5.dat

#fix 7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]

```

dump          5 all atom 100 dump.kondensasi2
timestep      0.00001
thermo_style  custom step temp pe atoms density
thermo        1000
run           100000
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 19.25 | 19.25 | 19.25 Mbytes
Step Temp PotEng Atoms Density
350000  6352.2531 -10421.348  2630 0.025215483
351000  6510.98 -10484.203  2630 0.024809341
352000  6414.2882 -10471.82  2630 0.024413569
353000  6346.6911 -10477.353  2630 0.024028712
354000  6401.1612 -10524.756  2630 0.023653755
355000  6322.8456 -10524.701  2630 0.023289653
356000  6347.8984 -10556.711  2630 0.022934975
357000  6298.235 -10570.809  2630 0.022589491
358000  6208.2424 -10569.742  2630 0.022252695
359000  6219.4435 -10606.952  2630 0.021924634
360000  6154.8781 -10618.249  2630 0.021605842
361000  6056.1739 -10622.072  2630 0.021295079
362000  6241.1346 -10719.015  2630 0.020992945
363000  6094.8792 -10708.342  2630 0.020698906
364000  6170.069 -10769.559  2630 0.020412773
365000  6086.134 -10778.886  2630 0.020134
366000  6055.6606 -10806.413  2630 0.019863077
367000  6026.1357 -10838.128  2630 0.019599783
368000  5923.6882 -10842.16  2630 0.019343049
369000  5953.9386 -10889.872  2630 0.019093981
370000  5862.1969 -10896.229  2630 0.01885179
371000  5908.1024 -10950.486  2630 0.018614622
372000  5772.0576 -10939.905  2630 0.018383459
373000  5800.1465 -10987.163  2630 0.01815871
374000  5706.5785 -10996.358  2630 0.017939963
375000  5696.1525 -11032.671  2630 0.017726395
376000  5716.9136 -11078.591  2630 0.017518062
377000  5743.0675 -11128.297  2630 0.017315172
378000  5715.5736 -11159.294  2630 0.017117349
379000  5539.8513 -11140.115  2630 0.016924884
380000  5494.1413 -11162.306  2630 0.01673692
381000  5534.897 -11215.172  2630 0.016554211
382000  5491.6818 -11241.197  2630 0.016375847
383000  5400.2048 -11244.859  2630 0.01620161
384000  5323.5382 -11258.759  2630 0.016031319
385000  5328.3419 -11296.361  2630 0.015864187
386000  5370.3013 -11348.191  2630 0.015701655
387000  5345.2739 -11377.542  2630 0.015543248
388000  5272.9424 -11391.154  2630 0.015388555

```


389000	5215.5043	-11408.443	2630	0.015236622
390000	5172.3652	-11429.648	2630	0.015088906
391000	5149.0106	-11457.766	2630	0.014944394
392000	5130.2216	-11488.926	2630	0.014803743
393000	5071.762	-11506.454	2630	0.014665439
394000	5116.0791	-11556.309	2630	0.014530178
395000	4929.8723	-11529.462	2630	0.014397794
396000	5040.0647	-11602.531	2630	0.014268181
397000	4969.703	-11614.998	2630	0.014141961
398000	4934.1546	-11639.644	2630	0.014018437
399000	4925.5353	-11672.878	2630	0.013897187
400000	4808.23	-11666.185	2630	0.013779242
401000	4883.9472	-11726.698	2630	0.013663525
402000	4799.2381	-11733.459	2630	0.013550614
403000	4767.3564	-11754.783	2630	0.013439914
404000	4787.9457	-11798.153	2630	0.013331331
405000	4773.2392	-11828.373	2630	0.01322546
406000	4750.554	-11855.109	2630	0.013121927
407000	4505.7065	-11802.915	2630	0.013020244
408000	4566.955	-11855.217	2630	0.012920497
409000	4499.1926	-11863.592	2630	0.0128225
410000	4580.9903	-11922.595	2630	0.012726558
411000	4573.6156	-11952.209	2630	0.012632384
412000	4503.941	-11961.711	2630	0.012539881
413000	4480.3522	-11986.858	2630	0.012449343
414000	4468.2888	-12012.295	2630	0.012360794
415000	4458.4943	-12042.728	2630	0.012273797
416000	4331.0408	-12030.771	2630	0.012188382
417000	4450.128	-12101.581	2630	0.012104838
418000	4358.662	-12104.399	2630	0.012022875
419000	4410.6742	-12154.95	2630	0.01194263
420000	4381.7518	-12179.006	2630	0.011863511
421000	4386.1216	-12211.799	2630	0.011785955
422000	4233.6004	-12188.622	2630	0.011710013
423000	4072.8947	-12162.069	2630	0.011635435
424000	4018.0368	-12168.586	2630	0.011562255
425000	4140.2346	-12240.783	2630	0.011490461
426000	4059.323	-12242.453	2630	0.011419974
427000	4137.0978	-12298.042	2630	0.01135081
428000	4032.5349	-12291.178	2630	0.011282683
429000	4127.1153	-12352.709	2630	0.011215951
430000	4031.4499	-12350.882	2630	0.01115063
431000	4029.5955	-12379.634	2630	0.011086272
432000	3935.2486	-12376.611	2630	0.011022966
433000	3979.7807	-12418.132	2630	0.010960678
434000	3914.2564	-12422.617	2630	0.010899458

```

435000 3833.2772 -12421.581 2630 0.010839609
436000 3810.6002 -12439.368 2630 0.010780859
437000 3713.2454 -12431.596 2630 0.010722991
438000 3764.9546 -12477.72 2630 0.010666185
439000 3773.4804 -12510.187 2630 0.010609945
440000 3879.0739 -12575.876 2630 0.010554556
441000 3823.8282 -12585.423 2630 0.010500549
442000 3760.8438 -12590.534 2630 0.010447507
443000 3631.7002 -12569.681 2630 0.010394775
444000 3605.423 -12585.892 2630 0.010343165
445000 3604.2595 -12610.777 2630 0.010292778
446000 3656.1841 -12655.162 2630 0.01024333
447000 3592.4473 -12659.762 2630 0.010194345
448000 3584.0947 -12682.333 2630 0.01014628
449000 3571.4151 -12706.123 2630 0.010099275
450000 3651.6714 -12762.143 2630 0.010053105

```

Loop time of 280.516 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.308 ns/day, 77.921 hours/ns, 356.485 timesteps/s
86.2% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	184.64	184.64	184.64	0.0	65.82
Neigh	45.101	45.101	45.101	0.0	16.08
Comm	0.43678	0.43678	0.43678	0.0	0.16
Output	30.16	30.16	30.16	0.0	10.75
Modify	15.15	15.15	15.15	0.0	5.40
Other		5.028			1.79

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 218086 ave 218086 max 218086 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 218086

Ave neighs/atom = 82.9224

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

fix 1 all nvt temp 3000.0 273.0 0.1 #iso 0.1 0.1 0.1

```

fix      2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular
fix      3 all recenter INIT INIT INIT units box
fix      4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf6.dat mode
vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)
fix      5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster6.out mode
vector
fix      6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas
file data6.dat
#fix     7 all ave/time 1000 1 1000 c_pair1[1] c_pair1[2] c_pair1[1]

```

```

dump      6 all atom 100 dump.kondensasi2
timestep 0.00001
thermo_style custom step temp pe atoms density
thermo    1000
run       100000
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 23.67 | 23.67 | 23.67 Mbytes

```

Step	Temp	PotEng	Atoms	Density
450000	3651.6714	-12762.143	2630	0.010053105
451000	3621.9046	-12756.197	2630	0.010007424
452000	3561.7536	-12740.591	2630	0.0099616739
453000	3555.103	-12746.401	2630	0.0099166289
454000	3471.5097	-12730.292	2630	0.0098723927
455000	3409.5389	-12720.565	2630	0.0098285082
456000	3436.991	-12741.923	2630	0.0097852363
457000	3506.0835	-12778.662	2630	0.0097421209
458000	3450.4376	-12775.468	2630	0.0096992707
459000	3581.7062	-12837.224	2630	0.009657032
460000	3531.6641	-12836.511	2630	0.0096155528
461000	3455.9999	-12827.096	2630	0.009574446
462000	3445.8254	-12840.103	2630	0.0095338307
463000	3393.1249	-12841.052	2630	0.0094936754
464000	3331.5698	-12835.942	2630	0.009453871
465000	3269.6452	-12833.033	2630	0.0094147578
466000	3363.7359	-12882.774	2630	0.0093762663
467000	3337.3215	-12895.394	2630	0.0093383899
468000	3353.5295	-12922.38	2630	0.0093012922
469000	3243.2468	-12907.899	2630	0.009264328
470000	3330.9939	-12959.358	2630	0.009228025
471000	3231.0774	-12946.711	2630	0.0091922205
472000	3216.5509	-12962.306	2630	0.0091567797
473000	3239.8301	-12989.38	2630	0.0091219832
474000	3076.7784	-12955.932	2630	0.0090875714
475000	3115.5435	-12990.239	2630	0.0090537068
476000	3131.0867	-13017.765	2630	0.0090205724
477000	3090.4783	-13027.743	2630	0.0089879824

478000	3028.7306	-13029.32	2630 0.0089557355
479000	3013.1171	-13047.889	2630 0.0089240638
480000	2994.2236	-13064.747	2630 0.0088929824
481000	3008.513	-13093.261	2630 0.008862172
482000	2936.5768	-13091.615	2630 0.0088317953
483000	2895.4018	-13099.319	2630 0.0088018418
484000	2914.9474	-13129.005	2630 0.0087722487
485000	2800.4533	-13115.551	2630 0.0087432325
486000	2826.1175	-13147.915	2630 0.0087147677
487000	2818.3975	-13170.28	2630 0.0086868769
488000	2874.2913	-13214.869	2630 0.0086596248
489000	2760.3229	-13199.543	2630 0.0086325531
490000	2785.9555	-13233.731	2630 0.0086060694
491000	2622.3189	-13200.912	2630 0.0085800704
492000	2701.6157	-13251.1	2630 0.0085545087
493000	2696.9941	-13274.292	2630 0.0085291469
494000	2635.1251	-13278.579	2630 0.0085043632
495000	2618.0346	-13297.413	2630 0.0084801179
496000	2603.5164	-13317.3	2630 0.0084563207
497000	2567.2675	-13330.791	2630 0.008432964
498000	2570.0025	-13358.402	2630 0.0084099162
499000	2523.567	-13368.464	2630 0.0083871088
500000	2532.6045	-13394.808	2630 0.0083647185
501000	2466.4837	-13396.044	2630 0.0083428801
502000	2407.8844	-13400.459	2630 0.0083213267
503000	2413.9851	-13426.475	2630 0.0083001527
504000	2380.3548	-13440.946	2630 0.0082793774
505000	2331.3857	-13450.276	2630 0.0082590489
506000	2384.7146	-13494.809	2630 0.0082391848
507000	2304.3645	-13493.091	2630 0.0082197313
508000	2241.0939	-13497.258	2630 0.0082006987
509000	2192.3261	-13504.715	2630 0.0081816884
510000	2183.2147	-13528.32	2630 0.0081631295
511000	2158.9521	-13545.42	2630 0.008144996
512000	2109.959	-13552.942	2630 0.0081272007
513000	2105.2401	-13575.203	2630 0.0081097302
514000	2064.9965	-13586.129	2630 0.0080926498
515000	2023.5767	-13599.341	2630 0.0080758841
516000	2006.6126	-13618.251	2630 0.0080594615
517000	1978.032	-13631.171	2630 0.0080434626
518000	1957.949	-13648.626	2630 0.0080277248
519000	1922.9416	-13661.367	2630 0.0080122611
520000	1901.6349	-13678.571	2630 0.0079972995
521000	1859.5468	-13688.473	2630 0.0079825937
522000	1889.5736	-13723.596	2630 0.007968107
523000	1799.152	-13718.332	2630 0.0079540292

524000	1779.2766	-13736.352	2630	0.0079402341
525000	1747.3297	-13752.068	2630	0.007926625
526000	1718.271	-13766.156	2630	0.0079131826
527000	1694.5031	-13782.573	2630	0.0079002578
528000	1655.3527	-13792.425	2630	0.0078877608
529000	1608.2209	-13800.649	2630	0.0078754113
530000	1615.8127	-13827.518	2630	0.0078633498
531000	1567.6925	-13836.647	2630	0.0078515231
532000	1579.319	-13864.966	2630	0.007840008
533000	1515.7408	-13866.726	2630	0.0078287846
534000	1476.1517	-13877.535	2630	0.0078178039
535000	1480.2219	-13902.539	2630	0.0078071727
536000	1419.6272	-13905.646	2630	0.0077967506
537000	1385.0263	-13915.497	2630	0.0077865863
538000	1334.0704	-13922.238	2630	0.0077767494
539000	1343.598	-13949.877	2630	0.0077671159
540000	1310.0118	-13963.431	2630	0.0077577721
541000	1274.0778	-13974.678	2630	0.0077488741
542000	1250.6991	-13990.718	2630	0.007740219
543000	1201.709	-13997.402	2630	0.0077317426
544000	1178.8277	-14013.264	2630	0.0077232474
545000	1147.7093	-14024.552	2630	0.0077151577
546000	1120.2496	-14038.467	2630	0.0077073942
547000	1093.3191	-14053.414	2630	0.007699724
548000	1038.7165	-14059.318	2630	0.007692444
549000	1027.2936	-14078.877	2630	0.0076853479
550000	988.94723	-14091.566	2630	0.0076784936

Loop time of 297.591 on 4 procs for 100000 steps with 2630 atoms

Performance: 0.290 ns/day, 82.664 hours/ns, 336.031 timesteps/s
88.2% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% var	avg	% total
---------	----------	----------	----------	-------	-----	---------

Pair	190.28	190.28	190.28	0.0	63.94
Neigh	47.125	47.125	47.125	0.0	15.84
Comm	0.40993	0.40993	0.40993	0.0	0.14
Output	41.981	41.981	41.981	0.0	14.11
Modify	14.63	14.63	14.63	0.0	4.92
Other	3.167				1.06

Nlocal: 2630 ave 2630 max 2630 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Nghost: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Neighs: 229320 ave 229320 max 229320 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

FullNghs: 0 ave 0 max 0 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 229320

Ave neighs/atom = 87.1939

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

Rdf

Rdf variasi laju 10^{10} K/s

1: Bin number

2: r

3: g(r)

0	0.05	0
1	0.15	0
2	0.25	0
3	0.35	0
4	0.45	0
5	0.55	0
6	0.65	0
7	0.75	0
8	0.85	0
9	0.95	9.1775
10	1.05	11912
11	1.15	11535.5
12	1.25	2446.44
13	1.35	1054.86
14	1.45	940.71
15	1.55	1311.97
16	1.65	1655.02
17	1.75	2669.33
18	1.85	4607.72
19	1.95	4353.7
20	2.05	3328.63
21	2.15	3821.21
22	2.25	2533.49
23	2.35	1512.47
24	2.45	1481.31
25	2.55	1837.81
26	2.65	2582.71
27	2.75	3119.93
28	2.85	3200.81

29	2.95	2733.81
30	3.05	2178.18
31	3.15	2020.37
32	3.25	1849.04
33	3.35	1639.11
34	3.45	1719.82
35	3.55	2027.09
36	3.65	2270.35
37	3.75	2285.49
38	3.85	2055.71
39	3.95	1800.82
40	4.05	1600.11
41	4.15	1463.44
42	4.25	1483.97
43	4.35	1530.14
44	4.45	1603.09
45	4.55	1659.27

Rdf variasi laju 10^{11} K/s

1: Bin number

2: r

3: g(r)

0	0.05	0
1	0.15	0
2	0.25	0
3	0.35	0
4	0.45	0
5	0.55	0
6	0.65	0
7	0.75	0
8	0.85	0
9	0.95	0
10	1.05	38642.5
11	1.15	37296.9
12	1.25	3167.64
13	1.35	1606.11
14	1.45	2229.24
15	1.55	8594.55
16	1.65	3736.45
17	1.75	5131.65
18	1.85	15914.6
19	1.95	17106
20	2.05	6869.16
21	2.15	11410.3
22	2.25	6789.32
23	2.35	3208

24	2.45	8321.49
25	2.55	5435.25
26	2.65	6728.79
27	2.75	7888.51
28	2.85	10365.4
29	2.95	10914.7
30	3.05	4779.11
31	3.15	5288.75
32	3.25	5909.04
33	3.35	5368.79
34	3.45	5757.99
35	3.55	5767.14
36	3.65	6935.43
37	3.75	6200.82
38	3.85	6065.47
39	3.95	6970.07
40	4.05	4285.69
41	4.15	3742.55
42	4.25	5072.69
43	4.35	4520.04
44	4.45	4463.74
45	4.55	5236.4
46	4.65	5011.7
47	4.75	4555.37
48	4.85	4247.42
49	4.95	3834.15

Rdf variasi laju 10^{12} K/s

1: Bin number

2: r

3: g(r)

0	0.05	0
1	0.15	0
2	0.25	0
3	0.35	0
4	0.45	0
5	0.55	0
6	0.65	0
7	0.75	0
8	0.85	0
9	0.95	0
10	1.05	3.84395e+06
11	1.15	4.05295e+06
12	1.25	97204.6
13	1.35	9359.45
14	1.45	64135.3

15	1.55	1.33967e+06
16	1.65	248566
17	1.75	309846
18	1.85	1.80553e+06
19	1.95	1.68282e+06
20	2.05	647468
21	2.15	1.42021e+06
22	2.25	502990
23	2.35	123735
24	2.45	873777
25	2.55	664147
26	2.65	653736
27	2.75	850100
28	2.85	1.14893e+06
29	2.95	1.03119e+06
30	3.05	409667
31	3.15	625652
32	3.25	543203
33	3.35	433133
34	3.45	608420
35	3.55	637107
36	3.65	752966
37	3.75	673185
38	3.85	641193
39	3.95	633566
40	4.05	346539
41	4.15	346130
42	4.25	559069
43	4.35	459025
44	4.45	483971
45	4.55	580334
46	4.65	521406
47	4.75	430678
48	4.85	400838
49	4.95	375786

