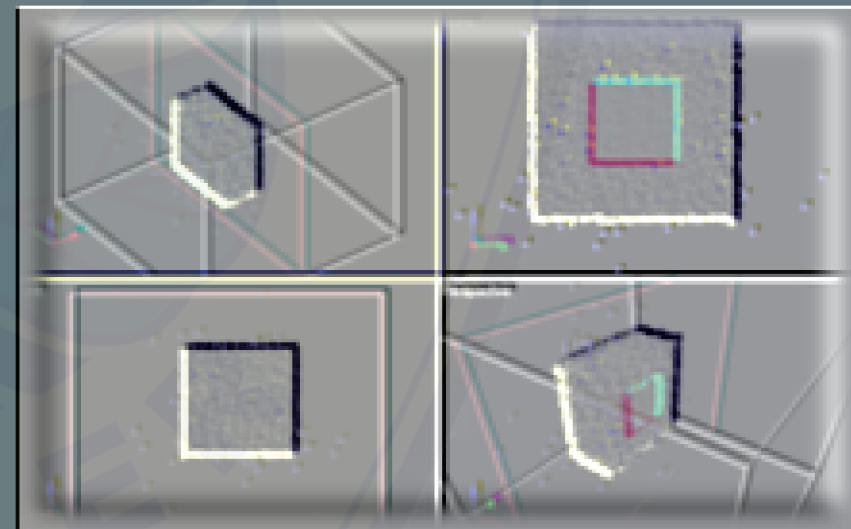


# Metode Simulasi Dinamika Molekul:

*From the Beginning to the Real Applications*

Artoto Arkundato  
Moh. Hasan  
Endhah Purwandari

Seri Metode Simulasi Dinamika Molekul



Anggota APPTI No. 036/KTA/APPT/2012

Anggota IKAPI No. 127/JTI/2015

ISBN 978-602-5617-70-6



Jember University Press  
Jl. Kalimantan 37 Jember 68121  
Telp. 0331-330224, psw. 0319  
E-mail: [upt-penerbitan@unej.ac.id](mailto:upt-penerbitan@unej.ac.id)



Membangun Generasi  
Menuju Insan Berprestasi

# **METODE SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL:**

**From the Beginning to the Real Applications**



Artoto Arkundato  
Moh Hasan  
Endhah Purwandari

**UPT PERCETAKAN & PENERBITAN  
UNIVERSITAS JEMBER**

# **Metode**

## **Simulasi Dinamika Molekul:**

### ***From the Beginning to the Real Applications***

**Penulis:**

Artoto Arkundato  
Moh Hasan  
Endhah Purwandari

**Desain Sampul dan Tata Letak**

Noerkoentjoro W.D.  
Fatkhur Rokhim

**ISBN:** 978-602-5617-70-6

Copy Right © 2019

**Penerbit:**

UPT Percetakan & Penerbitan Universitas Jember

**Redaksi:**

Jl. Kalimantan 37  
Jember 68121  
Telp. 0331-330224, Voip. 00319  
*e-mail:* [upt-penerbitan@unej.ac.id](mailto:upt-penerbitan@unej.ac.id)

**Distributor Tunggal:**

**UNEJ Press**

Jl. Kalimantan 37  
Jember 68121  
Telp. 0331-330224, Voip. 0319  
*e-mail:* [upt-penerbitan@unej.ac.id](mailto:upt-penerbitan@unej.ac.id)

**Ukuran Kertas Buku B5(JIS)**

Hak Cipta dilindungi Undang-Undang. Dilarang memperbanyak tanpa ijin tertulis dari penerbit, sebagian atau seluruhnya dalam bentuk apapun, baik cetak, *photoprint*, maupun *microfilm*.

## KATA PENGANTAR PAKAR SEBIDANG ILMU

Buku yang berjudul Metode Simulasi Dinamika Molekul: **from the beginning to real applications** ini terasa seperti oase di tengah padang pasir yang luas. Mengapa demikian karena jarang sekali sebuah buku teks berbasis riset yang diterbitkan khususnya dalam bidang riset komputasi material. Apalagi buku ini ditulis sangat detail khususnya mengenai teknis bagaimana sebuah riset komputasi material dilaksanakan mulai dari awal, pemilihan software, teori, instalasi dan penerapannya.

Isi dari buku ini menurut pandangan saya sudah sangat lengkap dan bermutu sebagai buku referensi riset komputasi karena disusun berdasarkan referensi yang up to date pada saat ini. Software-software yang digunakan juga software yang populer dan banyak digunakan oleh periset-periset kelas dunia.

Isi buku ini menurut pandangan saya juga sangat disiapkan agar pembaca yang tertarik pada bidang/metode simulasi dinamika molekul ini mampu mempelajarinya dengan baik dan mampu menerapkannya sebagai inisiasi riset untuk berbagai problem yang menarik dalam fisika.

Format penulisan buku ini juga tidak kaku dan monoton, serta ditampilkan banyak gambar yang menarik serta dengan ilustrasi yang sangat membantu pemahaman.

Akhirnya saya mengucapkan selamat untuk tim penulis buku ini yang telah memberikan satu sumbangsih yang sangat berarti untuk kemajuan sains komputasi di Indonesia.

Jakarta, 01 Nopember 2018



Dr. Paken Pandiangan, S.Si., M.Si  
Pendidikan Fisika, FKIP, Universitas Terbuka  
Email: pakenp@ut.ac.id

## PRAKATA

Alhamdulillah buku teks hasil penelitian ini akhirnya berhasil kami susun setelah melalui proses pembuatan, editing dan perbaikan yang cukup lama. Buku ini diharapkan dapat memberikan bahan atau referensi tambahan untuk mendukung riset yang menggunakan Metode Dinamika Molekul. Buku ini juga diharapkan dapat memberi bekal bagi yang tertarik mempelajari metode dinamika molekul untuk pengembangan riset/penelitian baik bidang fisika, kimia, biologi dan matematika bahkan tidak menutup kemungkinan pada bidang farmasi dan ilmu bahan. Metode dinamika molekul sebagai salah satu metode komputasi yang handal, dewasa ini mempunyai tempat dan peran yang sangat penting bagi kemajuan ilmu dan pengembangan teknologi. Banyak berbagai fenomena bidang sains yang dapat diprediksi gejala dan prosesnya melalui pendekatan metode dinamika molekul. Dengan makin meningkat pesatnya sumber daya komputasi seperti kecepatan processor komputer, kemampuan memori komputer, teknologi jaringan komputer, kapasitas dan kemampuan media penyimpan data maka penerapan metode dinamika molekul untuk menangani problem-problem kompleks bidang sains dan teknik menjadi semakin memungkinkan dan menjanjikan. Dengan memodelkan sistem material dan mensimulasikan fenomena terkait yang ingin diteliti maka pencapaian-pencapaian dan inovasi-inovasi bidang sains dapat dimaksimalkan dengan penggunaan sumber dana yang efisien. Oleh karena itu tidaklah berlebihan jika mempelajari metode dinamika molekul ini merupakan hal yang sangat positif dan berguna. Berbagai artikel-artikel ilmiah dalam bentuk jurnal dan prosidings yang menampilkan tulisan hasil riset dinamika molekul dapat memberikan gambaran betapa dewasa ini metode ini menjadi salah satu alat penting bagi periset-periset kelas dunia.

Buku ini secara umum dapat juga digunakan sebagai bahan rujukan oleh mahasiswa yang melakukan penelitian tugas akhir/thesis/disertasi bidang komputasi material. Namun demikian

buku ini juga ada manfaatnya jika digunakan untuk bahan rujukan perkuliahan komputasi. Apa yang menjadi kekhasan dari buku ini adalah pembaca akan dibawa mendalami mulai dari tingkatan dasar, diberikan pandangan yang cukup mengenai urgensi dari metode komputasi, diberikan cara bagaimana bagi pemula untuk memasuki metode komputasi ini baik berkenaan dengan sistem operasi, instalasi, software-software yang diperlukan, sampai bagaimana menjalankan program simulasi yang mana lebih ditekankan pada persiapan melakukan riset di bidang komputasi material. Software-software yang digunakan juga software-software yang populer digunakan dalam riset komputasi material yang hasil-hasilnya banyak dipublikasikan dalam jurnal dan prosidings internasional. Pada Bab 6 yaitu bab terakhir diberikan contoh aplikasi simulasi dinamika molekul yang hasil-hasilnya cukup layak untuk ide publikasi dalam jurnal internasional.

Pada kesempatan ini penulis mengucapkan terima kasih kepada DRPM-DIKTI Republik Indonesia atas bantuan Hibah Penelitian Berbasis Kompetensi 2018 sehingga buku hasil riset ini dapat dibuat berdasarkan data-data penelitian yang telah diperoleh.

Akhirnya tentu saja tidak ada yang sempurna kecuali perkenan Allah swt, oleh karena itu saran-saran dan pendapat yang membangun dari pembaca akan sangat membantu bagi perbaikan buku ini. Penulisan buku ini juga telah melalui review buku oleh Dr. Paken Pandiangan dari Universitas Terbuka Jakarta, dimana beliau mempunyai pengetahuan yang cukup baik dalam bidang teori dan komputasi fisika.

Jember, Kampus Tegal Boto, 17 Januari 2019  
Penulis, A.M.E

## DAFTAR ISI

	Sampul .....	i
	Informasi Penerbit .....	ii
	Kata Pengantar Pakar Sebidang Ilmu .....	iii
	Prakata .....	iv
	Daftar Isi .....	vi
	Daftar Gambar .....	ix
	Daftar Tabel .....	xi
	Kronologi Metode Dinamika Molekuler .....	xii
<b>Bab 1</b>	<b>Pendahuluan</b> .....	1
	1.1 Skala Panjang Sistem Material .....	2
	1.2 Metode Simulas untuk Skala Panjang dan Waktu yang Berbeda .....	7
	1.3 Simulasi Dinamika Molekul .....	9
	1.4 Persiapan Riset Simulasi Dinamika Molekul .....	10
	DAFTAR PUSTAKA .....	12
<b>Bab 2</b>	<b>Struktur Kristal</b> .....	13
	2.1 Sel Satuan Kristal .....	14
	2.2 Struktur Kristal Logam Murni .....	15
	2.3 Struktur Kristal Ionik .....	17
	2.4 Struktur Diamond .....	18
	2.5 Struktur $\text{CaF}_2$ atau $\text{ZrO}_2$ .....	18
	2.6 Struktur Peresvkite .....	18
	2.7 Struktur Spinel .....	19
	2.8 Sistem Kisi .....	19
	2.9 Konstanta Kisi .....	22
	2.10 Massa Atom, Titik Didih dan Titik Leleh .....	26
	2.11 Elastisitas Bahan .....	32
	2.12 Konversi Satuan .....	37
	DAFTAR PUSTAKA .....	39
<b>Bab 3</b>	<b>Software</b> .....	41
	3.1 ATOMSK .....	42
	3.2 Instalasi Program ATOMSK .....	49
	3.3 Aplikasi ATOMSK untuk Kreasi Kristal .....	49

3.4	Penggandaan Kristal .....	57
3.5	Instalasi JMOL .....	59
3.6	Instalasi VESTA .....	61
3.7	Instalasi OVITO .....	68
3.8	Program Plot Data GNUPLOT .....	75
3.8.1	Instalasi GNUPLOT .....	76
3.8.2	Menggambar/Plot Grafik .....	77
3.9	Program PACKMOL .....	89
3.9.1	Volume Guesser .....	89
3.9.2	Instalasi Packmol .....	90
3.9.3	Aplikasi Packmol .....	93
3.10	Program XCRYSDEN .....	102
3.11	Program PYTHON .....	105
	DAFTAR PUSTAKA .....	113
<b>Bab 4</b>	<b>Teori Dinamika Molekul .....</b>	<b>115</b>
4.1	Persamaan Gerak Atom-Atom .....	117
4.2	Model Medan Gaya Atom .....	118
4.2.1	Sistem Gas Mulia .....	122
4.2.2	Potensial Lennard-Jones .....	122
4.2.3	Sistem Ion .....	126
4.2.4	Sistem Logam .....	126
4.2.5	Sistem Kovalen .....	127
4.2.6	Sistem Semikonduktor .....	127
4.2.7	Sistem Kristal Logam Padat .....	127
4.3	Algoritma Integrasi .....	128
4.3.1	Algoritma Verlet .....	129
4.3.2	Algoritma Beeman .....	131
4.4	Step Waktu .....	131
4.5	Fungsi Distribusi Radial .....	135
4.6	Analisis dan Perhitungan Besaran Fisis .....	136
4.6.1	Postulat Ergodisiti .....	137
4.6.2	Fluktuasi .....	139
4.6.3	Sifat-Sifat Transpor .....	140
4.7	Implementasi Metode Dinamika Molekul .....	141
4.8	Mekanika Statistik .....	144
4.9	Efek Kuantum pada Limitasi Metode MD .....	147
	DAFTAR PUSTAKA .....	147



<b>Bab 5</b>	<b>PROGRAM MOLDY</b> .....	149
5.1	Software-Software Simulasi Dinamika Molekul .....	154
5.2	MOLDY.....	154
5.2.1	Instalasi .....	156
5.2.2	Menjalankan Moldy .....	157
5.2.3	File Input dan File Output Simulasi Moldy .....	157
5.2.4	Tampilan dan Hasil Simulasi .....	158
5.2.5	Detail Parameter file input spesifikasi sistem .....	162
5.2.6	Running dari running (file) sebelumnya .....	165
5.2.7	Rcut-off untuk perhitungan gaya .....	165
5.2.8	Pesan dan Error .....	166
5.2.9	Utilitis Moldy .....	166
5.3	Contoh File Spesifikasi dan Kontrol (studi kasus) .....	173
5.3.1	Membuat script untuk mengubah temperatur .....	178
	DAFTAR PUSTAKA .....	181
<b>Bab 6</b>	<b>APLIKASI SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL....</b>	183
6.1	Reaktor Nuklir, Jenis dan Karakteristiknya.....	184
6.2	Reaktor Cepat Berpendingin Timbal Cair LBE dan Korosi .....	189
6.3	Rancangan Riset Komputasi Penghambatan Korosi Baja dalam Pendingin Timbal Cair .....	192
6.3.1	Tahap Persiapan Besi Berstruktur Kristal BCC .....	193
6.3.2	Tahap Persiapan Medium Timbal Cair .....	198
6.3.3	Simulasi Timbal Cair .....	207
6.3.4	Tahap Persiapan Sistem Fe dalam Pb Cair .....	216
6.3.5	Simulasi Fe dalam Pb Cair pada 750 °C .....	233
6.3.6	Difusi Fe dalam Pb Cair .....	239
6.3.7	Menghambat Korosi Besi dalam Timbal Cair .....	247
6.3.8	Publikasi Hasil Penelitian Pada Jurnal Internasional ..	262
	DAFTAR PUSTAKA .....	264
	<b>LAMPIRAN</b> .....	xvi
	Tabel Periodik Unsur-Unsur.....	xvi
	Beberapa Judul Artikel Publikasi Penulis Pada Jurnal.....	xvii
	<b>INDEKS</b> .....	xviii
	<b>BIOGRAFI PENULIS</b> .....	xxi
	<b>RINGKASAN BUKU</b> .....	xxiv
	<b>GLOSARIUM</b> .....	xxvi

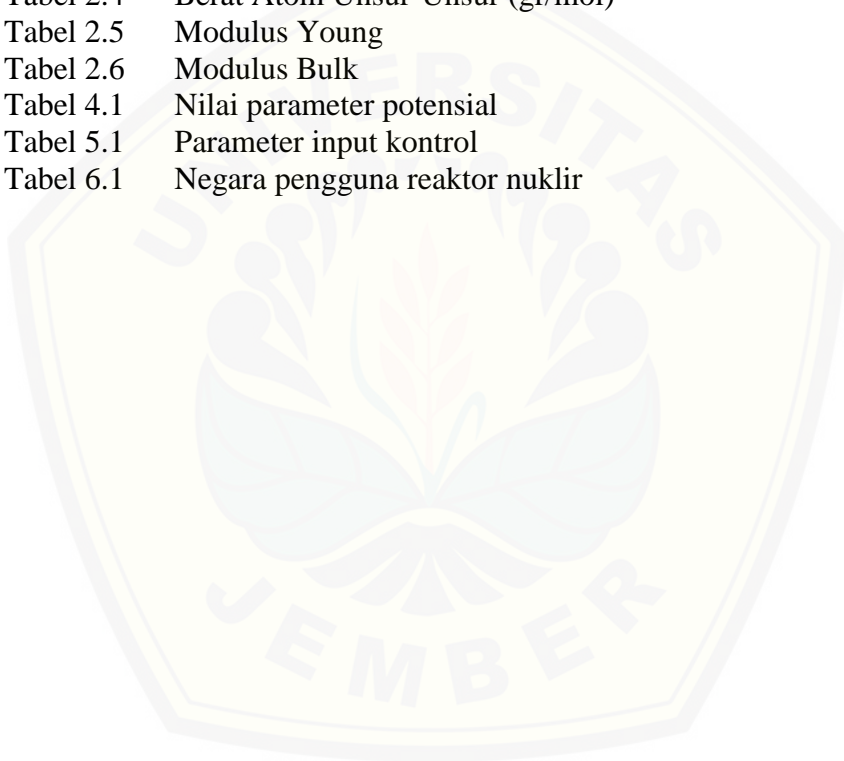
## DAFTAR GAMBAR

- Gambar 1.1 Hubungan 3 bidang riset fisika  
Gambar 1.2 Interseksi parsial 3 bidang riset fisika  
Gambar 1.3 Skala ukuran dan sistem materi yang dapat ditangani dalam riset fisika komputasi  
Gambar 1.4 Sebuah ide riset untuk memecahkan solusi komprehensif yang diinginkan  
Gambar 1.5 Deskripsi tiga tahapan simulasi  
Gambar 1.6 Ukuran partikel dan sumber daya komputer yang dibutuhkan dalam simulasi MD  
Gambar 2.1 Kristal NaCl dan bongkahan material NaCl  
Gambar 2.2 Empat struktur kristal yang populer  
Gambar 2.3 Bilangan koordinasi kristal  
Gambar 2.4 Struktur SC kristal ionik CsCl  
Gambar 2.5 Struktur FCC kristal ionik NaCl  
Gambar 2.6 Struktur ZnS  
Gambar 2.7 Struktur Fluoride  
Gambar 2.8 Struktur Perosvkite  
Gambar 2.9 Kisi *cubic*  
Gambar 2.10 Unit converter  
Gambar 3.1 Halaman utama ATOMSK  
Gambar 3.2 Program ATOMSK dapat dijalankan pada berbagai platform  
Gambar 3.3 Daftar tutorial penggunaan program ATOMSK  
Gambar 3.4 Konstruksi dari berbagai bentuk geometri  
Gambar 3.5 Beberapa tampilan dari adanya defek/cacat kristal  
Gambar 3.6 Bentuk polikristal dan beberapakode simulasi  
Gambar 3.7 Visualisasi sel satuan Aluminium dalam format xyz  
Gambar 3.8 Visualisasi sel satuan Aluminium menggunakan jmol .....  
Gambar 3.9 Penggandaan sel satuan dari kristal Aluminium  
Gambar 3.10 Halaman webiste VESTA  
Gambar 3.11 Tampilan awal VESTA  
Gambar 3.12 Struktur kristal FCC dari Al  
Gambar 3.13 Halaman website OVITO  
Gambar 3.14 File Al5.xyz yang dipanggil dari program OVITO  
Gambar 3.15 Salah satu utilities dari program OVITO  
Gambar 3.16 Plot Kurva RDF dengan OVITO  
Gambar 3.17 Utiliti Slice dari Ovito  
Gambar 3.18 Halaman webiste Gnuplot  
Gambar 3.19 Unduh gnuplot

- Gambar 3.20 Tampilan grafik menggunakan GNUPLOT
- Gambar 4.1 Potensial Lennard-Jones
- Gambar 4.2 Model interaksi pasangan atom
- Gambar 4.3 Efek pemotongan fungsi interaksi pada jarak  $r_{cut}$
- Gambar 4.4 Perbandingan interaksi Coulomb dan Lennard-Jones
- Gambar 4.5 Model perhitungan kurva RDF
- Gambar 4.6 Kurva equilibrasi sistem
- Gambar 4.7 Flowchart prosedur umum program simulasi dinamika molekul
- Gambar 4.8 Ensembel dengan N tetap dan V tidak tetap.....
- Gambar 5.1 Kurva potensial Lennard-Jones
- Gambar 5.2 Plotting energi terhadap time step
- Gambar 6.1 Reaktor nuklir tipe termal
- Gambar 6.2 Skema reaktor nuklir berpendingin timbal cair
- Gambar 6.3 Korosi baja dalam Timbal cair
- Gambar 6.4 Geometri sistem material Fe dalam Pb cair
- Gambar 6.5 Tampilan hasil simulasi berhasil dibaca oleh program
- Gambar 6.6 Grafik kurva equilibrasi sistem
- Gambar 6.7 Tampilan bahwa file simulasi untuk  $T=1023$  K telah berhasil dibaca
- Gambar 6.8 Tampilan file FePb menggunakan ovito
- Gambar 6.9 Bagian slice dari FePb
- Gambar 6.10 Kurva equilibrasi sistem
- Gambar 6.11 Struktur FePb sebelum (kiri) dan sesudah (kanan) simulasi menggunakan ovito
- Gambar 6.12 Struktur Besi Fe dari sebelum berinteraksi hingga setelah bereaksi dengan Pb (dari kiri ke kanan)
- Gambar 6.13 Salah satu sumber tentang MSD pada simulasi molecular dynamics
- Gambar 6.14 Grafik hubungan antara t dan MSD
- Gambar 6.15 Salah satu referensi penggunaan atom oksigen dalam sistem pendingin Pb cair menggunakan simulasi molecular dynamics MD
- Gambar 6.16 Studi pengaruh temperatur pada penggunaan inhibitor oksigen dalam sistem FePb
- Gambar 6.17 Konfigurasi sistem FePbO
- Gambar 6.18 Slope grafik hubungan antara t dan MSD
- Gambar 6.19 Grafik koefisien difusi sebagai fungsi dari konsentrasi atom oksigen yang diamati pada berbagai keadaan temperatur
- Gambar 6.20 Struktur Fe pada injeksi atom besi dengan konsentrasi 0.00wt%, 0.038wt% dan 0.1155wt%

## DAFTAR TABEL

Tabel 1.1	Skala panjang dan waktu, metode simulasi dan aplikasinya
Tabel 2.1	Kisi Bravais
Tabel 2.2	Konstanta kisi Unsur-Unsur
Tabel 2.3	Konstanta Kisi Kristal Poliatomik
Tabel 2.4	Berat Atom Unsur-Unsur (gr/mol)
Tabel 2.5	Modulus Young
Tabel 2.6	Modulus Bulk
Tabel 4.1	Nilai parameter potensial
Tabel 5.1	Parameter input kontrol
Tabel 6.1	Negara pengguna reaktor nuklir

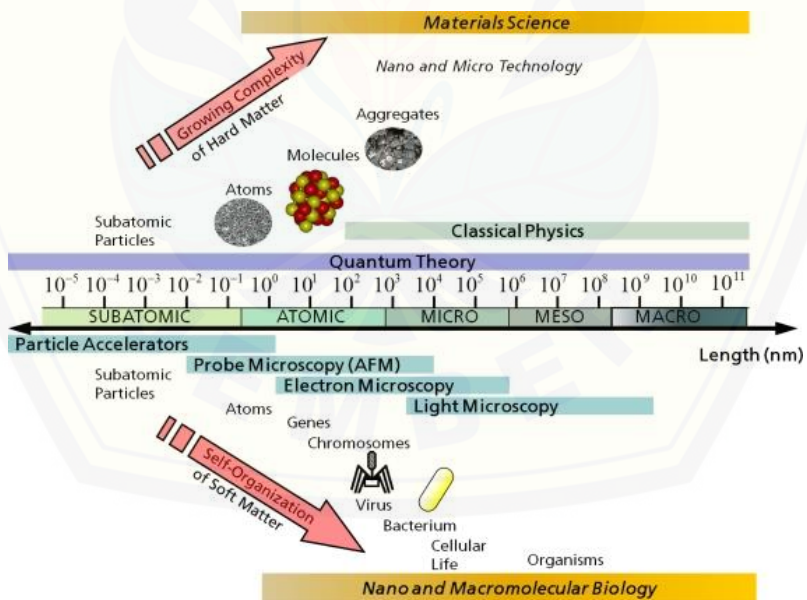


## KRONOLOGI METODE DINAMIKA MOLEKUL

1900	Konsep medan gaya dalam analisis spektroskopi
1929	Potensial atom (Morse dan Lennard-Jones)
1937	Dispersi London
1946	Mekanika Molekuler
1953	Simulasi Monte Carlo
1957	Simulasi Dinamika Molekul Hard Sphere (Alder dan Wainwright)
1964	Simulasi Dinamika Molekul Gas Argon potensial Lennard-Jones (A Rahman)
1967	Algoritma Verlet oleh Loup Verlet
1970	Simulasi Liquid. Pengembangan potensial Born-Mayer-Huggins, BMH)
1976	Simulasi SiO <sub>2</sub> (silica) dengan potensial BMH
1980	Algoritma Anderson Constant-Pressure Algoritma Rahman Parrinello Constant-Pressure
1985	Metode Dinamika Molekul Kuantum Car-Parrinello (CPMD) dengan DFT
1990	Potensial Interaksi Stillinger-Weber
2000 -	Software Dinamika Molekul dan Pendukungnya: MOLDY, NAMD, OVITO, LAMMPS, GROMACS, XMD, PACKMOL, VESTA, XCRYSDEN, RASMOL, ISSACS, IMD, ATOMSK, TINKER, dll.

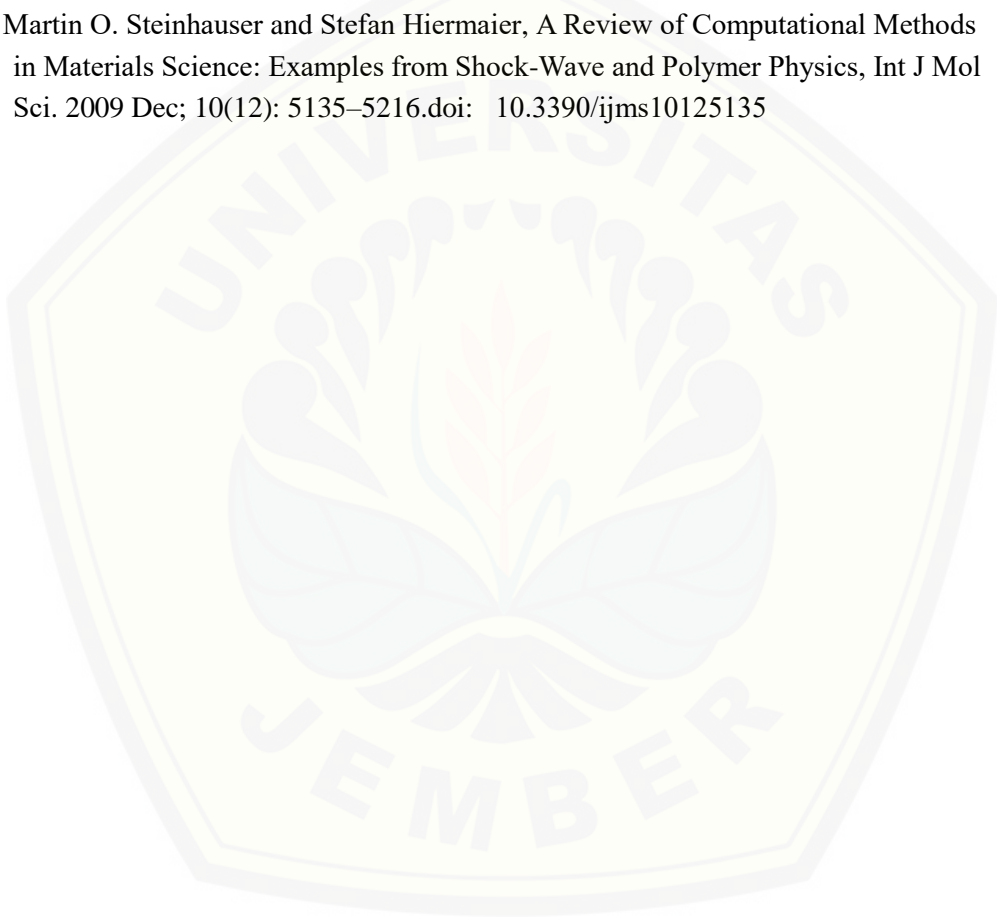
# BAB 1

## PENDAHULUAN



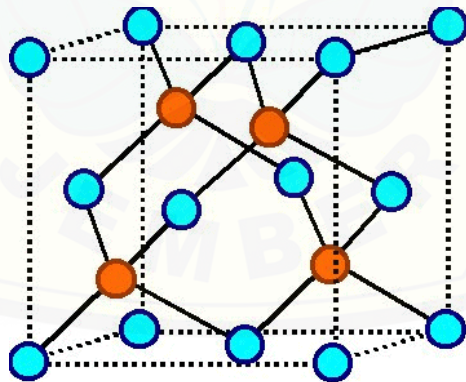
## DAFTAR PUSTAKA

- [1].  
<https://ramoncrehuet.wordpress.com/2015/02/02/theory-experiment-and-computation/>
- [2] <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC2801990/>
- [3] Martin O. Steinhauser and Stefan Hiermaier, A Review of Computational Methods in Materials Science: Examples from Shock-Wave and Polymer Physics, *Int J Mol Sci.* 2009 Dec; 10(12): 5135–5216.doi: 10.3390/ijms10125135



## BAB 2

# STRUKTUR KRISTAL





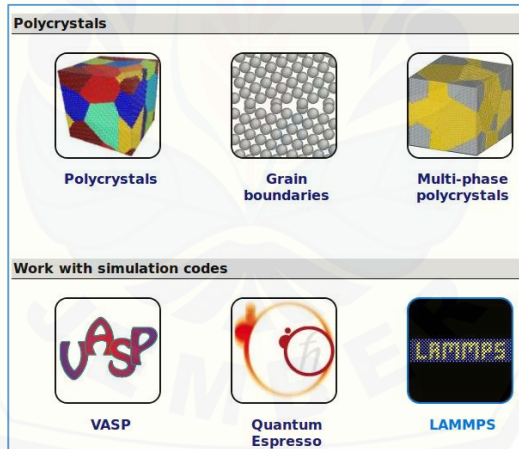
## DAFTAR PUSTAKA

- [1] (<http://green.wikia.com/wiki/File:Chlorine-sodium-chloride.jpg>)
- [2]  
<https://opentextbc.ca/chemistry/chapter/10-6-lattice-structures-in-crystallin-e-solids/>
- [3] <https://www.e-education.psu.edu/matse81/node/2134>
- [4]  
[https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def\\_en/kap\\_2/basics/b2\\_1\\_6.html](https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/kap_2/basics/b2_1_6.html))
- [5]  
[https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def\\_en/kap\\_2/basics/b2\\_1\\_6.html](https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/kap_2/basics/b2_1_6.html)
- [6] <http://periodictable.com/Properties/A/LatticeConstants.html>
- [7]  
[https://sector7.xray.aps.anl.gov/calculators/crystal\\_lattice\\_parameters.html](https://sector7.xray.aps.anl.gov/calculators/crystal_lattice_parameters.html)
- [8] <http://www5.csudh.edu/oliver/chemdata/atmass.htm>
- [9]  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Elastic\\_properties\\_of\\_the\\_elements\\_\(data\\_page\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Elastic_properties_of_the_elements_(data_page))
- [10] [www.digitaldutch.com/unitconverter/](http://www.digitaldutch.com/unitconverter/)



# BAB 3

# SOFTWARE



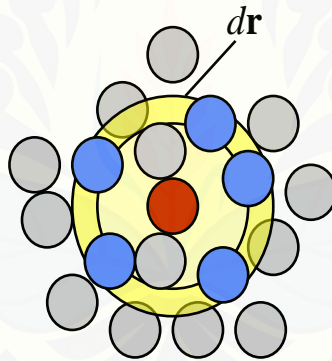
## DAFTAR PUSTAKA

- Pierre Hirel, *Comput. Phys. Comm.* **197** (2015) 212-219 |  
doi:10.1016/j.cpc.2015.07.012  
<http://www.gnuplot.info/>  
<https://ovito.org/>  
<http://www.gnuplot.info/>  
<https://people.sc.fsu.edu/~jburkardt/examples/gnuplot/gnuplot.html>  
<http://m3g.iqm.unicamp.br/packmol/home.shtml>  
<http://m3g.iqm.unicamp.br/packmol/download.shtml>  
<https://water.usgs.gov/edu/density.html>  
<https://www.lenntech.com/periodic/mass/atomic-mass.htm>  
<http://www.xcrysden.org/>  
<https://water.usgs.gov/edu/density.html>  
<http://atomsk.univ-lille1.fr/dl.php>



# BAB 4

## TEORI DINAMIKA MOLEKUL



Jadi dengan simulasi ini dapat dilihat bahwa pemberian oksigen 0.1155 wt% memberikan efek lebih baik untuk penghambatan korosi dibanding pemberian 0.038 wt%.

## DAFTAR PUSTAKA

- [1] <https://www.rosatom.ru/en/investors/benefits-of-nuclear-energy/>
- [2] <https://sciencestruck.com/advantages-disadvantages-of-breeder-reactors>
- [3] <https://www.euronuclear.org/info/encyclopedia/n/nuclear-power-plant-world-wide.html>
- [4] <https://www.theguardian.com/environment/2012/jul/30/fast-breeder-reactors-nuclear-waste-nightmare>
- [5] <https://whatisnuclear.com/fast-reactor.htm>
- [6] [https://en.wikipedia.org/wiki/Lead-cooled\\_fast\\_reactor](https://en.wikipedia.org/wiki/Lead-cooled_fast_reactor)
- [7] [https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid\\_metal](https://en.wikipedia.org/wiki/Liquid_metal)
- [8] [http://www.corrosionclinic.com/types\\_of\\_corrosion/liquid%20metal%20embrittlement\\_LM](http://www.corrosionclinic.com/types_of_corrosion/liquid%20metal%20embrittlement_LM)
- [9] Zhongfei Ye, Pei Wang, Hong Dong, Dianzhong Li, Yutuo Zhang & Yiyi Li, Oxidation mechanism of T91 steel in liquid lead-bismuth eutectic: with consideration of internal oxidation, *Scientific Reports*, volume 6, Article number: 35268 (2016)
- [10] Artoto Arkundato *et al*, Effect of temperature on the corrosion inhibition of iron in liquid lead using oxygen inhibitor: studied by MD simulation, 2017 *J. Phys.: Conf. Ser.* **853** 012046





## L.2 Beberapa Judul Artikel Publikasi Penulis Pada Jurnal

- [1] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani "Computational study: Reduction of iron corrosion in lead coolant of fast nuclear reactor", *AIP Conference Proc.*, Vol.1454, pp.65, (2012) USA
- [2] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, Celino, M. "Numerical Study: Iron Corrosion-Resistance in Lead-Bismuth Eutectic Coolant by Molecular Dynamics Method", *AIP Conference Proc.*, Vol. 1448, (2012) USA
- [3] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, " Study of liquid lead corrosion of fast nuclear reactor and its mitigation by using molecular dynamics method", *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, Vol. 3, No. 1, January 2013, , Singapore.
- [4] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, "Molecular dynamic simulation on iron corrosion-reduction in high temperature molten lead-bismuth eutectic", *Turkish Journal of Physics*, DOI: 10.3906/fiz-1112-12, (2013)
- [5] Arkundato, A., Su'ud, Z., Mikrajudin, A., Widayani, Celino, M., "Inhibition of iron corrosion in high temperature stagnant liquid lead: A molecular dynamics study", Vol.62, Pages 298–306, *Annals of Nuclear Energy*, (2013) Elsevier
- [6] Arkundato, A., Su'ud, Z., Sudarko, Hasan, M., Celino, M., "Molecular dynamics simulation of corrosion mitigation of iron in lead-bismuth eutectic using nitrogen as corrosion inhibitor", *Journal of Physics: Conference Series*, Vol. 622(2015) 012009, (2015), IOP Publishing.

## INDEKS

### A

Alloys 14  
Atomsk 11, 32

### B

Bilangan koordinasi 16  
Beeman 107

### C

Coolant 175  
Coarse-grained models 7

### D

Diamond 18  
Difusi 159

### E

EAM 117  
Energi 7, 117, 140, 175  
Ensambel 143  
Equilibrasi 126, 225

### F

Fluktuasi 129

### G

GNU plot 66

### I

Instalasi Gnuplot 66  
Instalasi Ovito 58, 62  
Instalasi Packmol 79  
Instalasi Vesta 51  
Isomorphous 16

### J

Jmol 44

## **K**

Koefisien difusi 130, 159

Kristal Ionik 17

## **L**

Lammps 98

LBE 179

Lennard-Jones 123

## **M**

Metode dinamika molekul, MD 7, 126, 131

Metode particle Meshed Ewald 122

Moldy 139

Morse 154

MSD 159

## **O**

Overheating 179

Ovito 58

## **P**

Packmol 83

Perovskite 18

Potential 108

Plutonium 177

Python 95

## **R**

RDF 125

Reaktor Nuklir 177

Reaktor nuklir pembiak cepat, reaktor cepat 177

## **S**

Sel satuan kristal 14

Simulasi dinamika molekul 126

## **T**

Termal 129

Thermal nuclear reactors 175

**V**

VESTA 51

Volume guesser 79

**X**

Xcrysden 92



## BIOGRAFI PENULIS

---

(A) **Dr. Artoto Arkundato, S.Si., M.Si** lahir di Srengat, Blitar, Jawa Timur, pada 25 Desember 1969. Sekolah SD, SMP diselesaikan di Srengat kemudian SMA diselesaikan di kota Blitar, tepatnya di SMAN 1 Blitar. Kemudian melanjutkan kuliah pada Jurusan Fisika, FMIPA, UGM di Yogyakarta. Lulus kuliah S1 dengan menyelesaikan skripsi teori yang berjudul Aspek Klasik dan Kuantum Optika Nonlinear dengan pembimbing Prof. Muslim, Phd dan Dra. Zahara, MSc. Setelah lulus kuliah sempat bekerja di dunia Industri di beberapa *multinational company* seperti SINOCA (Eks AT & T), Quantum Matshushita Ltd dan Symens Component Electronics di BATAM. Beberapa tahun di industri kemudian pada tahun 1999 memutuskan untuk kembali ke dunia pendidikan yaitu bekerja di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember. Sejak SMA menyenangi dunia pemrograman komputer dengan bahasa pemrograman yang pertama dipelajari adalah BASIC. Kuliah lanjut S2 diselesaikan di Jurusan Fisika FMIPA ITB pada 2003 dengan mengambil thesis mengenai metode komputasi Bruckner Hartree-Fock untuk aplikasi problem hamburan nuklir dengan pembimbing Prof. Zaki Su'ud. Kuliah S3 juga diselesaikan di Jurusan Fisika FMIPA ITB Bandung pada 2012 mengambil topik disertasi aplikasi metode simulasi dinamika molekul untuk mengamati proses dan penghambatan korosi besi dalam logam cair dalam reaktor nuklir, dengan promotor utama Prof. Zaki Suud, co-promotor Prof. Mikrajudin Abdullah dan Dr. Widayani.

Pelatihan metode komputasi yang pernah diikuti adalah *Workshop on Material Computation* di JNCASR, Bangalore, India pada 2005 yang diselenggarakan ICTP Italia. Kegiatan *visiting researcher* yang pernah diikuti adalah ke ENEA Roma, Italia pada Oktober-

Desember 2010 untuk memperdalam metode simulasi dinamika molekul paralel menggunakan ENEA grid supercomputing dengan supervisor Dr. Massimo Celino. Kegiatan *visiting research* juga kembali diikuti di Lab Theoretical Nanotechnology, ISIR, Osaka University, Nov 2017 - Januari 2018 dengan supervisor prof. Tamio Oguchi. Beberapa publikasi Jurnal Internasional dapat ditelusuri pada [www.google.com](http://www.google.com) seperti pada *Annals of Nuclar Energy*, *Turkhing Journal of Physics*, *Journal of Physics: Conference Series IOP*. Beberapa buku yang sudah diterbitkan adalah *Analisis Vektor dan Tensor* (UNEJ Press), *Fisika Komputasi: Metode Simulasi Dinamika Molekul dan Aplikaksinya* (UNEJ Press), *Optika* (Universitas Terbuka) dll. Artoto Arkundato aktif mengajar beberapa matakuliah seperti *Fisika Kuantum*, *Fisika Inti*, *Fisika Komputasi*, dan *Mekanika*. Artoto Arkundato juga aktif melakukan riset komputasi material dengan mendapatkan bantuan dana riset dari DRPM DIKTI Republik Indonesia melalui skim hibah PD, hibah Doktor dan hibah Kompetensi.

**(M) Drs. Moh. Hasan, M.Sc., Ph.D** lahir di Malang, 04 April 1964 adalah dosen Jurusan Matematika pada FMIPA Universitas Jember. Aktif mengajar dengan beberapa matakuliah yang pernah dibina seperti *Pemodelan Matematika*, *Komputasi Matriks*, *Analisa Numerik* dan *Sistem Dinamik*. Dr. Moh. Hasan memperoleh pendidikan doktor dari Wageningen University, Belanda.

**(E) Endhah Purwandari, S.Si., M.Si** lahir di Jember, 11 Nopember 1981 dan merupakan dosen aktif Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember. Yang bersangkutan menyelesaikan S1 pada Jurusan Fisika FMIPA Universitas Jember pada tahun 2003, dengan topik skripsi di bidang teori yang berjudul *Identitas Ward-Takahashi, Slavnov-Taylor dan BRST dalam Kondisi Gauge Umum* dengan pembimbing Dr. Sutisna, MSi dan Drs. Sujito, Ph.D. Studi

lanjut S2 pada Program Magister Fisika FMIPA ITB dan menyelesaikannya pada tahun 2011 dengan tesis di bidang komputasi fisika material semikonduktor berjudul *The Study of Deposition Parameters Optimization on The Simulation of a-Si:H Solar Cells Efficiency by Investigating the Effect of Optical Bandgap* dengan pembimbing Prof. Dr. Toto Winata. Beberapa matakuliah penting yang pernah diberikan adalah Fisika Inti, Fisika Modern, Mekanika, Komputasi Semikonduktor dsb.



## RINGKASAN BUKU

Dewasa ini metode simulasi dinamika molekul merupakan salah satu metode yang sangat powerful untuk memprediksi dan menghitung besaran-besaran fisis sebuah sistem materi dan juga untuk memprediksi proses fisika-kimia yang mungkin terjadi dari fenomena/sistem materil.

Untuk melaksanakan riset material dengan metode ini maka ada banyak software yang dapat dipilih. Salah satunya yang sangat handal adalah Program MOLDY. Metode simulasi dinamika molekul berusaha mempelajari dan mengkaji fenomena alam mikroskopis dengan cara atau menggunakan pendekatan makroskopis yaitu menggunakan hukum gerak Newton. Oleh karena kompleksitas fenomena alam dan juga jumlah partikel yang diteliti yang mungkin saja perlu dalam jumlah besar maka persamaan gerak ini menuntut dikerjakan dalam perangkat komputer dan oleh karena itu dalam bentuk program komputer. Beberapa pendekatan untuk menyelesaikan persamaan gerak Newton secara numerik ada dalam metode ini. Berbagai program simulasi dinamika molekul (MD) juga telah banyak dibuat baik yang boleh digunakan secara gratis maupun harus membeli untuk mendapatkan lisensinya.

Program MOLDY adalah program yang sederhana namun menurut penulis adalah program yang sangat akurat sehingga masih sangat baik untuk digunakan riset komputasi material, meskipun selain Moldy ada banyak software-software yang lebih baru dengan berbagai fasilitas/utiliti yang sudah disediakan untuk menghitung berbagai besaran fisis. Program-program tersebut misalnya adalah LAMMPS, GROMACS, NAMD dan lain-lain. Dalam buku ini dibahas sangat detail mengenai program MOLDY mulai dari instalasi sampai penggunaannya dalam simulasi material. Berbagai program bantu juga digunakan baik untuk tahapan pre-processing



maupun post-processing seperti program OVITO, PACKMOL, JMOL, VESTA, ATOMSK, XCRYSDEN, Python, Gnuplot.

Penulis merasa buku ini sangat cocok digunakan bagi siapa saja yang ingin memulai riset bidang komputasi material maupun bagi yang ingin memperluas kemampuan dalam bidang komputasi material dengan metode baru dan software baru. Buku ini dapat dikatakan sebagai lanjutan dari buku tema komputasi yang sudah diterbitkan oleh penulis yaitu *Fisika Komputasi: metode simulasi dinamika molekul dan aplikasinya* (UNEJ Press) sebelumnya. Buku ini disusun sedemikian hingga pembaca yang tertarik riset metode simulasi dinamika molekul dapat belajar dari awal, membuat yang sederhana sampai hanya menggunakan software-software yang sudah ada. Buku ini disiapkan agar pembaca dapat memulai melakukan riset atau penelitian dalam bidang fisika material meskipun juga pada kenyataannya metode simulasi MD ini dapat diterapkan dan dikembangkan ke banyak sekali bidang kajian seperti Biologi, Kimia, Farmasi, Astrofisika, Geofisika, Biofisika bahkan ke ekonofisika.

Simulasi dinamika molekul menawarkan peluang untuk menemukan material unggul yang dapat dimanfaatkan untuk berbagai keperluan dan aplikasi. Terakhir penulis mempunyai harapan agar riset dalam bidang aplikasi dinamika molekul ini dapat berkembang dengan baik ke depan, dapat bersinergi dengan riset terapan untuk dapat menghasilkan karya-karya dan produk-produk yang berguna bagi bangsa Indonesia.

## GLOSARIUM

<b>Bab I</b>	Metode Density Functional Theory (DFT)	Metode komputasi untuk menyelesaikan problem mekanika kuantum untuk sistem material dengan pendekatan fungsi kerapatan. Dengan pendekatan ini maka komputasi kuantum dapat dipercepat dengan akurasi yang cukup baik daripada menyelesaikan problem kuantum apa adanya sesuai prinsip-prinsip mekanika kuantum seperti pada komputasi Hartree-Fock. Teori DFT ini dewasa ini dapat diterapkan secara luas dalam fisika, kimia, dan ilmu material untuk menyelidiki struktur elektronik banyak sistem, terutama atom, molekul, dan fase terkondensasi. DFT adalah salah satu metode paling populer dan serbaguna yang tersedia untuk komputasi kuantum sistem material. Banyak program komputer handal yang bekerja berdasarkan konsep DFT ini seperti Quantum Espresso dan HILAPW
	Metode Simulasi Dinamika Molekul	Metode simulasi komputer untuk mempelajari gerakan fisik atom dan molekul. Atom dan molekul dapat berinteraksi selama jangka waktu tertentu menurut potensial interaksi tertentu yang hasilnya adalah trayektori atau lintasan atom dan molekul ditentukan berdasarkan persamaan gerak Newton secara numerik. Kemudian dengan mengadopsi konsep-konsep dalam mekanika statistik dapat dihitung besaran-besaran fisis berdasarkan informasi trayektori atom/molekul tersebut. Aplikasi metode simulasi ini sangat luas. Program-Program komputer yang terkenal misalkan Moldy dan Lammmps serta Gromacs.
	CLI	Singkatan dari Command Line Interface. Adalah perintah-perintah dalam sistem operasi komputer khususnya Linux untuk menjalankan instruksi tertentu dengan menuliskan perintah CLI tersebut pada terminal atau console dari Linux.
	Moldy	Adalah salah satu program komputer untuk menjalankan simulasi dinamika molekul. Program

Lammps Moldy ini sangat akurat untuk simulasi material. Moldy sudah lama tidak dikembangkan lagi meskipun masih relevan untuk digunakan dalam riset. Adalah salah satu program komputer untuk menjalankan simulasi dinamika molekul. Program LAMMPS ini sangat akurat untuk simulasi material. LAMMPS terus dan aktif dikembangkan lagi dan banyak diterapkan dalam riset-riset material dewasa ini.

Ovito Salah satu program komputer untuk visualisasi molekul. Sangat populer dan mudah digunakan.

Packmol Salah satu program komputer untuk merancang bentuk sistem material yang akan disimulasikan secara dinamika molekul.

## Bab II Struktur Kristal

Suatu susunan khas atom-atom dalam suatu kristal. Struktur kristal dibangun oleh **sel unit**, dimana sebuah kristal mengandung sekumpulan atom yang tersusun secara khusus, yang secara periodik berulang dalam tiga dimensi dalam suatu kisi menurut sel unit. Spasi antar sel unit dalam segala arah disebut konstanta kisi.

Kristal juga mempunyai simetri tertentu karena struktur kristal yang dimilikinya dan sifat simetri ini juga menentukan sifat-sifat kimia fisika dari kristal ini.

Sel Satuan Sel satuan atau sel unit yang merupakan bagian terkecil dari struktur kristal dimana untuk mendapatkan kristal yang lebih besar diperoleh dari penggandaan sel satuan ini secara periodik pada arah yang diinginkan.

Sistem Kristal Ada 7 sistem kristal yang unik berdasarkan simetrinya yaitu

1. kubus atau kubik
2. heksagonal
3. tetragonal
4. rhombohedral (trigonal)
5. ortorombik
6. monoklinik
7. triklinik

<b>Bab III</b>	Atomsk	<b>Program</b> Open Source command-line untuk melakukan kreasi, manipulasi, konversi file data atom. Mendukung program-program lain dalam format data atom yang beragam seperti XYZ dll. Atomsk dapat digunakan untuk pengandaan, rotasi, translasi sistem kristal
	Vesta	program Visualisasi 3D untuk model struktur, data volumetrik seperti rapat elektron, dan morfologi kristal.
<b>Bab IV</b>	Medan gaya (force fields)	<b>Medan gaya</b> mengacu pada bentuk fungsional dan kumpulan parameter untuk menghitung energi potensial sebuah sistem atomdi dalam simulasi dinamika molekul. Parameter energi potensialnya dapat dirumuskan dari data eksperimen atau perhitungan kuantum
	Lennard-Jones	bentuk interaksi dua atom/partikel netral dalam bentuk rumusan yang relatif sederhana dengan model matematis: $V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$
	Algoritma Verlet	Metode numerik untuk menyelesaikan persamaan gerak Newton dalam simulasi dinamika molekul. Salah satu skim integrasi numerik yang banyak digunakan dalam simulasi dinamika molekul seperti pada program LAMMPS
<b>Bab V</b>	Moldy	Salah satu program komputer simulasi dinamika molekul yang akurat. Sudah lama tidak dikembangkan untuk memperluas aplikasinya berdasarkan support fungsi energi potensial yang ada di dalamnya.
	File Spesifikasi File Kontrol	File input pada program Moldy berisi data atom File input pada program Moldy berisi parameter input jalannya simulasi seperti tekanan, temperatur jumlah step integrasi dan lain lain
<b>Bab VI</b>	Fisika reaktor	Sistem penghasil energi panas berdasarakan konsep pembelahan inti yang terkendali. Biasanya energi panas yang dihasilkan segera dikonversi menjadi energi listrik melalui generator pembangkit.
	Korosi logam cair	Korosi yang terjadi ketika material bestruktur bekerja pada lingkungan logam cair panas tinggi. Material

Penghambatan  
Korosi logam  
cair

akan cepat rusak atau mengalami korosi akibat interaksi dengan material logam cair.

Metode penghambatan dengan memasukkan unsur inhibitor seperti oksigen ke dalam medium logam cair agar korosi dapat dihambat. Pemberian oksigen harus dengan jumlah yang tepat agar korosi dapat dihambat. Terlalu banyak atau terlalu sedikit akan mengurangi kemampuan sistem dalam menghambat korosi.

