



**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PADA PROSES PENGUAPAN  
PARTIKEL NANO ALUMINIUM SERI 1010**

**SKRIPSI**

Oleh

**Ramanda Hifani Aulia**

**141910101044**

**PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK**

**JURUSAN TEKNIK MESIN**

**FAKULTAS TEKNIK**

**UNIVERSITAS JEMBER**

**2018**



**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PADA PROSES PENGUAPAN  
PARTIKEL NANO ALUMINIUM SERI 1010**

**SKRIPSI**

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

Oleh

**Ramanda Hifani Aulia**

**141910101044**

**PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK**

**JURUSAN TEKNIK MESIN**

**FAKULTAS TEKNIK**

**UNIVERSITAS JEMBER**

**2018**

## PERSEMBAHAN

Dengan menyebut nama Allah SWT yang maha pengasih dan penyayang, saya persembahkan skripsi ini sebagai bentuk tanggung jawab dan ungkapan terima kasih kepada :

1. Allah SWT yang selalu melimpahkan rahmat, rezeki, dan hidayah-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi ini;
2. Nabi Muhammad SAW yang telah membawa kebenaran dari jalan kegelapan menuju jalan yang terang benderang yaitu Islam
3. Kedua orang tua saya Budi Suyanto dan Sri Puji Astuti yang tidak pernah lelah untuk memberikan dukungan baik secara moril maupun materiil sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
4. Kakakku Anindya Dianing Pratiwi dan kakak iparku Sigit Rianto yang selalu memberikan dukungan serta motivasi dalam setiap langkahku.
5. Bapak Imam Sholahuddin, S.T., M.T. selaku pembimbing grup riset MRG 4 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.
6. Teman Hidup saya Fantimatus Sofia yang dengan setia menemani dalam suka dan duka sekaligus mendukung saya selama proses penyusunan skripsi ini.
7. Teman-teman seperjuangan Teknik Mesin angkatan 2014 (M16) yang telah mendukung dari awal masuk hingga saat ini.

### **MOTTO**

Allah akan meninggikan orang-orang yang beriman di antara kamu dan orang-orang yang diberi ilmu pengetahuan beberapa derajat.

(Surat Al-Mujadalah. Ayat 11)

Pikirkan hal – hal yang paling hebat, dan kamu akan menjadi terhebat. Tetapkan akal pada hal tertinggi dan kamu akan mencapai yang tertinggi.

(Anonim)

Kebanyakan orang mengatakan bahwa, kecerdasanlah yang melahirkan seorang ilmuwan besar. Mereka salah, karakterlah yang melahirkannya

(Albert Einstein)

Jangan takut dengan kesulitan sebab kesulitan akan menguatkan hati, membuat anda dapat merasakan nikmatnya sehat, membulatkan tekad, mengangkat kedudukan, dan memunculkan kesabaran anda.

(Dr. Aidh al Qarni)

**PERNYATAAN**

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Ramanda Hifani Aulia

NIM : 141910101044

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Simulasi Dinamika Molekul pada Proses Penguapan Partikel Nano Aluminium Seri 1010” 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, 25 Juli 2018

yang menyatakan,

Ramanda Hifani Aulia

NIM 141910101044

**SKRIPSI**

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL PADA PROSES PENGUAPAN  
PARTIKEL NANO ALUMINIUM SERI 1010**

Oleh

**Ramanda Hifani Aulia**

**NIM 141910101044**

Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama : Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T.

Dosen Pembimbing Anggota : Ir. Ahmad Syuhri, M.T.

**PENGESAHAN**

Skripsi berjudul “Simulasi Dinamika Molekul pada Proses Penguapan Partikel Nano Aluminium Seri 1010” telah diuji dan disahkan pada :

Hari, tanggal : Rabu, 25 Juli 2018

Tempat : Fakultas Teknik, Universitas Jember

**Tim Penguji**

Ketua,

Sekretaris,

Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T.  
NIP 19751006 2002 12 1 002

Ir. Ahmad Syuhri, M.T.  
NIP 196902091998021001

Anggota I,

Anggota II,

Sumarji, S.T., M.T.  
NIP 19680202 1997 02 1 001

Ir. FX. Kristianta, M.Eng.  
NIP. 19650120 200112 1 001

Mengesahkan  
Dekan Fakultas Teknik Universitas Jember,

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



## RINGKASAN

**“Simulasi Dinamika Molekul pada Proses Penguapan Partikel Nano Aluminium Seri 1010”**; Ramanda Hifani Aulia, 141910101044; 2018; 94 halaman; Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember.

Perkembangan nanoteknologi pada saat ini memiliki peranan yang sangat penting dalam sintesis dan penggunaan partikel berukuran nano untuk berbagai aplikasi. Telah ditemukan bahwa penambahan nanopartikel aluminium bisa meningkatkan tingkat pembakaran oleh propelan 5-10 kali dibandingkan dengan partikel aluminium konvensional.

Metode simulasi dinamika molekul pada penelitian ini dilakukan dengan membentuk suatu sistem pada material aluminium seri 1010 pada temperatur  $300^{\circ}\text{C} - 3000^{\circ}\text{C}$  dengan variasi timestep  $1 \times 10^{-3}\text{ps}$ ,  $5 \times 10^{-4}\text{ps}$  dan  $1 \times 10^{-4}\text{ps}$ . Penelitian ini bertujuan untuk menghasilkan penurunan ukuran diameter material aluminium dengan waktu yang diinginkan. Proses Simulasi menggunakan potensial EAM (*Embedded Atom Method*) dan program OVITO (Open Visualization Tools) berfungsi sebagai alat untuk menampilkan pergerakan struktur atom yang telah diolah menggunakan program LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).

Berdasarkan simulasi yang telah dilakukan, Nilai Penguapan aluminium seri 1010 dengan *timestep*  $1 \times 10^{-3}\text{ps}$  adalah  $1040^{\circ}\text{C}$ , pada *timestep*  $5 \times 10^{-4}\text{ps}$  memiliki nilai titik penguapan sebesar  $1272^{\circ}\text{C}$  dan pada *timestep*  $1 \times 10^{-4}\text{ps}$  memiliki nilai titik penguapan sebesar  $2026^{\circ}\text{C}$ . Densitas aluminium seri 1010 menggunakan *timestep*  $1 \times 10^{-3}\text{ps}$  nilai densitas penguapan sebesar  $0,439\text{ g/cm}^3$ , sedangkan pada *timestep*  $5 \times 10^{-4}\text{ps}$  nilai densitas penguapan aluminium seri 1010 sebesar  $0,439\text{ g/cm}^3$  dan *timestep*  $1 \times 10^{-4}\text{ps}$  nilai densitas penguapan aluminium sebesar  $0,439\text{ g/cm}^3$ . Berdasarkan hasil dari pengaruh temperatur pada ukuran diameter partikel material aluminium seri 1010 dalam kondisi penguapan pada *timestep*  $1 \times 10^{-3}\text{ps}$  memiliki nilai diameter  $1,86\text{ nm}^3$ ,  $5 \times 10^{-4}\text{ps}$  memiliki nilai diameter  $1,91\text{ nm}^3$ , pada *timestep*  $1 \times 10^{-4}\text{ps}$  memiliki nilai diameter sebesar  $2,016\text{ nm}^3$  dan diperoleh bahwa semakin lama waktu tinggal partikel aluminium



berada pada pengaruh energi panas, maka akan menghasilkan penurunan ukuran diameter partikel alumunim.



## SUMMARY

**"Simulation of Molecular Dynamics on the Evaporation of Nano Aluminum 1010 Series Aluminum Particles"**; Ramanda Hifani Aulia, 141910101044; 2018; 94 pages; Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Jember.

The development of nanotechnology today has a very important role in the synthesis and use of nano for various applications. It has been found that the addition of aluminum nanoparticles can increase the combustion rate by propellant 5-10 times compared to conventional aluminum particles.

The method used in this research was done by using the system on 1010 series aluminum material at temperature 300oC - 3000oC with the same time  $1 \times 10^{-3}$  ps,  $5 \times 10^{-4}$  ps and  $1 \times 10^{-4}$  ps. This study to produce a decrease in the diameter of aluminum material with the desired time. The simulation process uses the EAM program (Embedded Atomic Method) and the OVITO program (Open Visualization Tool) to be used to guide the processed structure using the LAMMPS (Large-Scale Atom / Molecular Massively Parallel Simulator) program.

Based on the measurements made, the Evaporation Value of 1010 series aluminum with timestep  $1 \times 10^{-3}$  ps is 1040°C, the timestep  $5 \times 10^{-4}$  ps has the evaporation point value of 1272 °C and at the timestep  $1 \times 10^{-4}$  ps has the point value evaporation of 2026 °C. The 1010 series aluminum density uses a timeplate of  $1 \times 10^{-3}$  ps of evaporation density value of 0.439 g/cm<sup>3</sup>, whereas in timestep  $5 \times 10^{-4}$  ps the 1010 series evaporative density value of 0.439 g/cm<sup>3</sup> and timestep  $1 \times 10^{-4}$  ps density aluminum evaporation of 0.439 g/cm<sup>3</sup>. Based on the result of the effect of temperature on the diameter of 1010 series aluminum particle material under evaporation conditions at  $1 \times 10^{-3}$  ps timestep has a diameter value of 1.86 nm<sup>3</sup>,  $5 \times 10^{-4}$  ps has a diameter value of 1.91 nm<sup>3</sup>, in timestep  $1 \times 10^{-4}$  ps has a diameter value of 2.016 nm<sup>3</sup> and obtained a longer stay in aluminum, thus resulting in a decrease in the diameter size of the aluminum particles.

## PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karuniaNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini yang berjudul “Simulasi Dinamika Molekul pada Proses Penguapan Partikel Droplet Aluminium”. 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 Univeritas Jember.

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

1. Bapak Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Utama, dan Ir. Ahmad Syuhri, M.T. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan masukan dan arahan dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini. serta Bapak Sumarji, S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Utama dan Bapak Ir. FX. Kristianta, M.Eng. selaku Dosen Penguji Anggota yang telah memberikan kritik dan saran untuk perbaikan skripsi.
2. Rekan kerjaku Waldi dan Fajar serta 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 memerikan manfaat bagi dan pembaca.

Jember, 25 Juli 2018

Penulis

**DAFTAR ISI**

<b>HALAMAN JUDUL .....</b>	<b>ii</b>
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN.....</b>	<b>iii</b>
<b>HALAMAN MOTTO .....</b>	<b>iv</b>
<b>HALAMAN PERNYATAAN .....</b>	<b>v</b>
<b>SKRIPSI.....</b>	<b>vi</b>
<b>HALAMAN PEMBIMBING.....</b>	<b>vi</b>
<b>HALAMAN PENGESAHAN .....</b>	<b>vii</b>
<b>HALAMAN RINGKASAN .....</b>	<b>viii</b>
<b>HALAMAN SUMMARY .....</b>	<b>x</b>
<b>PRAKATA .....</b>	<b>xi</b>
<b>DAFTAR ISI.....</b>	<b>xii</b>
<b>DAFTAR GAMBAR.....</b>	<b>xv</b>
<b>DAFTAR TABEL .....</b>	<b>xvii</b>
<b>BAB 1 PENDAHULUAN.....</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Latar Belakang.....</b>	<b>1</b>
<b>1.2 Rumusan Masalah.....</b>	<b>3</b>
<b>1.3 Batasan Masalah .....</b>	<b>4</b>
<b>1.4 Tujuan Penelitian.....</b>	<b>4</b>
<b>1.5 Manfaat .....</b>	<b>4</b>
<b>1.5 Hipotesa.....</b>	<b>5</b>
<b>BAB 2 TINJUAN PUSTAKA .....</b>	<b>6</b>
<b>2.1 Aluminium.....</b>	<b>6</b>
<b>2.1.1 Sifat Fisika Aluminium .....</b>	<b>6</b>
2.1.2 Struktur Kristal .....	8
<b>2.2 Nanopartikel.....</b>	<b>10</b>
2.2.1 Nano Aluminium .....	11
2.2.2 Metode Sintesis Nanopartikel .....	12
<b>2.3 Plasma.....</b>	<b>14</b>
2.3.1 Jenis - jenis Plasma .....	16

2.3.2 Fabrikasi Nano Partikel Berbasis Thermal Plasma .....	17
<b>2.4 Simulasi Dinamika Molekuler .....</b>	<b>18</b>
2.4.1 Interaksi Antar Atom .....	19
2.4.2 Energi Potensial EAM ( <i>Embedded Atomic Method</i> ) .....	20
2.4.3 <i>Ensemble</i> .....	21
2.4.4 Mekanika Statistik .....	22
2.4.5 Fungsi Distribusi Radial .....	24
<b>2.5 Software Simulasi Dinamika Molekul.....</b>	<b>26</b>
2.5.1 LAMMPS .....	26
2.5.2 OVITO .....	27
<b>BAB 3 METODELOGI PENELITIAN .....</b>	<b>28</b>
<b>3.1 Metode Penelitian.....</b>	<b>28</b>
<b>3.2 Waktu dan Tempat .....</b>	<b>28</b>
<b>3.3 Alat dan Bahan.....</b>	<b>28</b>
<b>3.4 Prosedur Penelitian .....</b>	<b>28</b>
3.4.1 Validasi Data.....	28
3.4.2 Pembentukan Input Script .....	29
3.4.3 Menjalankan simulasi LAMMPS.....	31
3.4.4 Prosedur Visualisasi .....	32
3.4.5 Prosedur Analisis .....	34
<b>3.5 Diagram Alir Penelitian.....</b>	<b>35</b>
<b>BAB 4. PEMBAHASAN .....</b>	<b>36</b>
4.1 Analisa titik temperatur penguapan pada material aluminium.....	37
4.2 Analisa Densitas terhadap evaporasi aluminium seri 1010 .....	40
4.3 Pengaruh temperatur terhadap ukuran diameter partikel aluminium .....	43
4.4 Visualisasi Penguapan Partikel Material Aluminium Seri 1010 .....	46
<b>BAB 5. PENUTUP .....</b>	<b>48</b>
<b>5.1 Kesimpulan .....</b>	<b>48</b>
<b>5.2 Saran .....</b>	<b>49</b>
<b>Daftar Pustaka .....</b>	<b>50</b>
<b>LAMPIRAN .....</b>	<b>54</b>

Lampiran A. Script Timestep 0,001 psec .....	54
Lampiran A2. File Log .....	55





**DAFTAR GAMBAR**

Gambar 2.1 Struktur kristal SC (sumber: Kittel, 2005) ..... 9

Gambar 2.2 Struktur kristal BCC (Kittel, 2005) ..... 9

Gambar 2.3 Struktur kristal FCC (Kittel, 2005). ..... 9

Gambar 2.4 Skematik Klasifikasi nano material : (a) struktur tiga dimensi (3-D),  
(b) struktur dua dimensi (2-D), (c) struktur satu dimensi, dan (d)  
struktur zerodimensi (0-D) (Pokropivny V, 2007). ..... 10

Gambar 2.5 Skematik pembentukan dan pertumbuhan partikel aluminum  
menggunakan pendinginan (Panda S, 1995). ..... 12

Gambar 2.6 Sintesis nanopartikel top-down dan bottom-up (Abdullah, M. 2008).  
..... 13

Gambar 2.7 Ilustrasi fase materi ke empat setelah fase padat, cair, dan fase gas  
(Muhammad Nur, 2011). ..... 14

Gambar 2.8 Perbedaan materi antara fase gas dengan fase plasma untuk gas  
hidrogen (Muhammad Nur, 2011). ..... 15

Gambar 2.9 I lustrasi Fase Materi ke empat (Muhammad Nur, 2011). ..... 15

Gambar 2.10 Distribusi temperatur DC Thermal Plasma (Shan-Lin Zhang, 2015).  
..... 16

Gambar 2.11 Skema Metode Berbasis Sintesis Plasma (Vollath, 2008). ..... 18

Gambar 2.12 Skema pembentukan nanopartikel dengan metode plasma (Kong  
dan Kawczak, 2008). ..... 18

Gambar 2.13 Mekanisme Perhitungan RDF (Buhler , 2011). ..... 25

Gambar 2.14 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (Buhler, 2011). ..... 25

Gambar 2.15 Tampilan halaman awal program LAMMPS (lammmps, 2000). ..... 27

Gambar 2.16 Tampilan aplikasi OVITO (Stukowski, 2009). ..... 27

Gambar 3.1 Input Script ..... 30

Gambar 3.2 Command Prompt ..... 31

Gambar 3.3 Membuka script dengan command prompt ..... 31

Gambar 3.4 Proses menjalankan LAMMPS ..... 31

Gambar 3.7 Visualisasi Hasil Proses Running Script ..... 33

Gambar 3.8 Visualisasi pada langkah awal ..... 33

Gambar 3.9 Proses Visualisasi pada Akhir Simulasi ..... 34

Gambar 3.10 Diagram Alir Penelitian ..... 35

Gambar 4.1 Temperatur penguapan terhadap jarak radial atom (Donguk suh,  
2014) ..... 39

Gambar 4.2 Densitas penguapan terhadap jarak radial antar atom (a) timestep  
0.001ps (b) 0.0005ps dan (c) 0.0001ps. .... 40

Gambar 4.3 Densitas Penguapan terhadap Jarak Radial antar Atom. .... 42

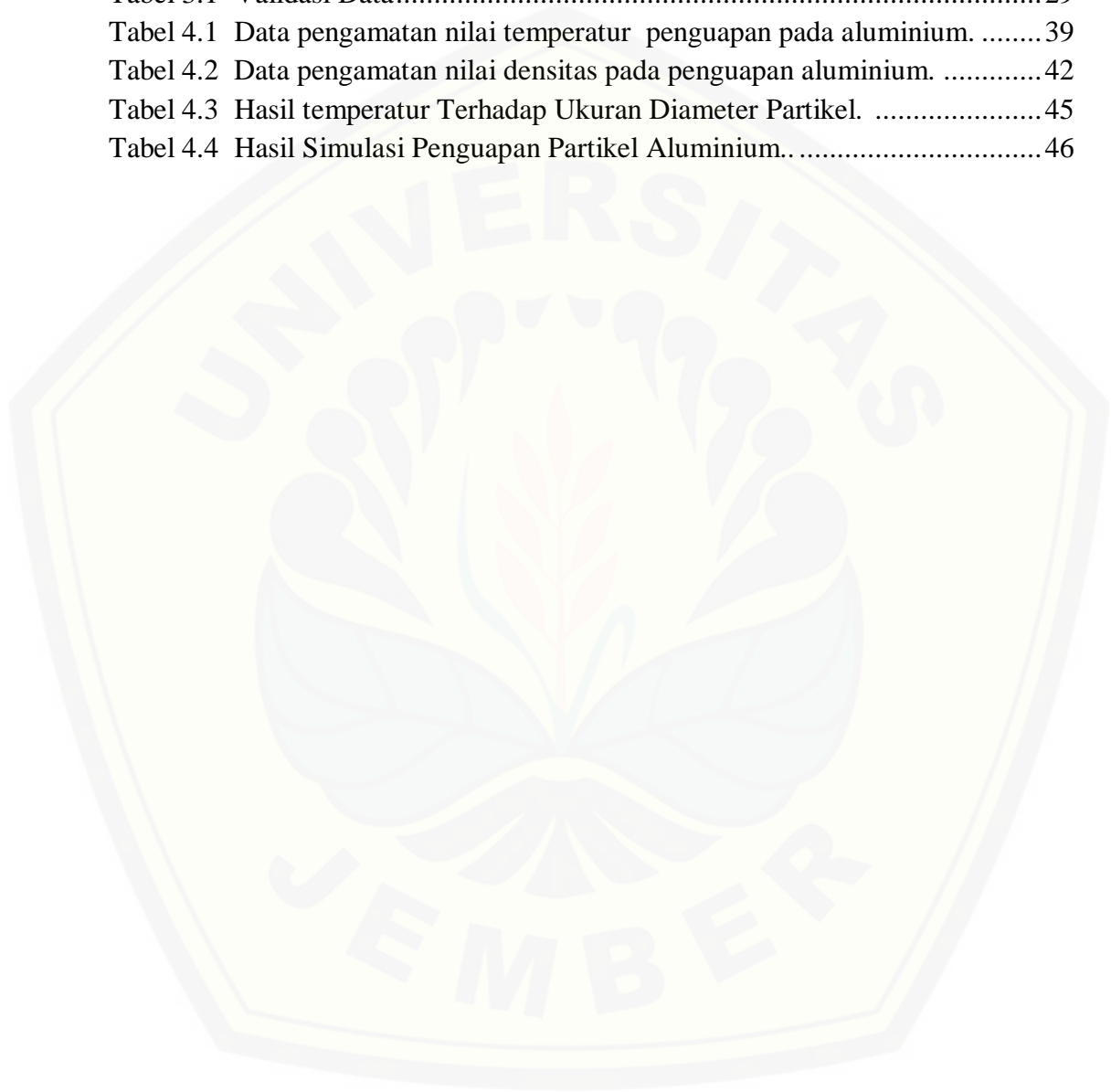


Gambar 4.4 Pengaruh Temperatur terhadap Ukuran Diameter Partikel. .... 43  
Gambar 4.5 Pengaruh Waktu Pemanasan terhadap Diameter (Donguk suh,  
2014). ..... 45



**DAFTAR TABEL**

Tabel 2.1 Sifat Fisik Aluminium (Sumber : Douglas M, 1983).....	7
Tabel 2.2 Fisik Mekanik Aluminium (Sumber : Douglas M, 1983) .....	8
Tabel 3.1 Validasi Data.....	29
Tabel 4.1 Data pengamatan nilai temperatur penguapan pada aluminium. ....	39
Tabel 4.2 Data pengamatan nilai densitas pada penguapan aluminium. ....	42
Tabel 4.3 Hasil temperatur Terhadap Ukuran Diameter Partikel. ....	45
Tabel 4.4 Hasil Simulasi Penguapan Partikel Aluminium.....	46



## BAB 1. PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Perkembangan nanoteknologi pada saat ini memiliki peranan yang sangat penting dalam sintesis dan penggunaan partikel berukuran nano untuk berbagai aplikasi termasuk superalloy dan konduktor film tipis untuk industri elektronik (Kear,1986). Banyak peneliti setuju bahwa partikel berukuran nano dapat menghasilkan unjuk kerja material menjadi lebih baik terutama pada kerja spesifik area permukaan dan aktivasi permukaannya lebih tinggi dibandingkan dengan skala mikron seperti sifat kimia, thermal, magnetik, optik, listrik, dan mekanis (Yu, 2009; Kong, 2008; Mahmoud, 2014).

Ukuran nano aluminium dan partikel logam lainnya telah banyak digunakan dalam banyak aplikasi penggerak propulsi dan konversi energi karena sifat energiknya yang tidak biasa, seperti peningkatan aktivitas katalitik dan reaktivitas yang lebih tinggi (Ilyin A, 2001; Kwon .Y, 2003). Telah ditemukan bahwa penambahan nanopartikel aluminium bisa meningkatkan tingkat pembakaran oleh propelan 5-10 kali dibandingkan dengan partikel aluminium konvensional (Mench *et al.*, 1998).

Teknologi thermal plasma semakin banyak digunakan dalam aplikasi pengolahan bahan. Selain dapat menghasilkan sumber suhu yang sangat tinggi mencapai 14.727 °C (Kong, 2008), juga merupakan media yang mudah untuk mewujudkan banyak reaksi penting dalam industri metalurgi dan kimia. Penggunaan thermal plasma diaplikasikan untuk pelapisan permukaan, sintesis keramik maju (metal oksida), produksi bahan nanokristalin dan untuk pengembangan metalurgi dan mineral dalam menghasilkan nilai tambah. Beberapa metode masih sangat sulit untuk menghasilkan jumlah yang relatif besar untuk produk nanopartikel dengan biaya rendah. Baru-baru ini, teknik DC thermal plasma telah dikembangkan untuk mensintesis berbagai nanopartikel oksida dengan kualitas tinggi tetapi juga sangat murah dengan laju produksi yang tinggi (Nirmala dkk, 2010; Takayuki, 2009; Hong dkk, 2009). Metode ini juga telah digunakan secara luas oleh banyak industri karena fleksibilitas untuk mensintesis

logam, paduan (alloy), material oksida, polimer, dan bubuk komposit (Laha dkk,2005).

Pembuatan nanopartikel dapat dibuat menggunakan beberapa metode yang diantaranya dengan metode DC thermal plasma. Metode ini digunakan karena memiliki efisiensi yang tinggi, serta mudah dikendalikan oleh partikel pengisi (Vollath, *et al.*, 2008). Menurut Masaya, (2011) Proses produksi nanopartikel dengan metode *DC thermal plasma* sebagai media penghasil material berukuran nano, maka dimulai dari mengalirkan precursor melewati busur api yang dihasilkan dari mesin *DC thermal plasma* yang bertujuan untuk menguapkan partikel aluminium sehingga dalam proses ini terjadi proses penurunan atau penyusutan ukuran volume partikel aluminium akibat terlepasnya atom-atom pada partikel aluminium. Menurut Panda S (1995), Sintesis partikel aluminium melalui proses evaporasi pada aliran aerosol didalam reaktor dengan suhu penguapan 1873 K menggunakan gas argon sebagai gas pembawa uap aluminium dan partikel Al dibentuk dari proses pendinginan, lalu dikumpulkan pada filter. Teknik evaporasi menggunakan gas inert (pembentukan partikel dari proses penguapan dalam gas inert) telah digunakan untuk sintesis partikel logam berukuran nano (Kimoto, 1963).

Menurut Rozy F (2015), diperoleh parameter bahwa semakin kecil laju aliran serbuk dan oksigen menyebabkan lama tinggal partikel dalam busur thermal plasma semakin meningkat dan akan meningkatkan jumlah droplet yang dihasilkan dari proses evaporasi. Proses tersebut menjadi peranan yang sangat penting dalam memperkecil ukuran droplet uap aluminium yang menjadi cikal bakal terbentuknya partikel dalam skala nanometer.

Pada Penelitian ini akan mengkaji tentang pengaruh temperatur terhadap proses penurunan ukuran pada skala nano dengan menggunakan metode dinamika molekul sebagai teknik untuk mengamati pergerakan molekul yang saling berinteraksi. Metode ini dipengaruhi oleh suatu potensial yang dibentuk dari adanya medan gaya pada setiap atom yang berada disekitarnya, maka akan sangat sulit untuk mengkalkulasikannya. Untuk itu, telah dikembangkan beberapa jenis penyederhanaan kalkulasi untuk menyelesaikan permasalahan dinamika

molekuler ini, yang tentunya masing-masing metode pasti memiliki keterbatasan misalnya ketelitian masing-masing metode.

Studi komprehensif berdasarkan pada simulasi dinamika molekular (MD) digunakan untuk mengeksplorasi perilaku thermo mekanik partikel nano aluminium (Puri dan Yang, 2007). Simulasi dinamika molekular memberikan wawasan eksklusif kedalam mekanisme atomistik yang terlibat untuk nanopartikel yang tidak dapat dijelaskan oleh hukum kontinum. Dalam studi sebelumnya, perilaku peleburan partikel aluminium berukuran nano murni dipelajari dalam kisaran ukuran 2-9 nm. EAM (Embedded Atomic Method) merupakan pemilihan potensial yang tepat untuk proses simulasi dinamika molekular pada penggunaan material logam namun lebih rumit. Potensial EAM menyatakan kerapatan elektron logam yang membutuhkan konstruksi kisi dan tetangga dari atom tersebut (Zhou, 2012).

Banyaknya studi eksperimental mengenai sintesis partikel aluminium pada proses evaporasi yang menghasilkan partikel berukuran nano belum ada analisis data yang sistematis membahas model terperinci untuk dinamika partik karena adanya peranan pengaruh temperatur pada proses pembentukan ukuran partikel dengan skala nano. Untuk mengetahui proses terbentuknya perubahan ukuran pada diameter partikel, maka pada penelitian ini digunakan metode dinamika molekular sebagai program analisis berbasis komputasi untuk melihat fenomena proses penguapan dan penurunan ukuran diameter pada partikel aluminium .

## 1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan dari latar belakang diatas, maka dapat dirumuskan permasalahan sebagai berikut :

1. Pengaruh energi panas ( $30\text{ }^{\circ}\text{C}$  -  $3026\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) terhadap titik penguapan partikel aluminium seri 1010.
2. Pengaruh densitas dari partikel aluminium seri 1010 terhadap titik penguapan partikel aluminium seri 1010.
3. Pengaruh temperatur penguapan terhadap penurunan ukuran diameter partikel aluminium seri 1010.

4. Visualiasi akibat adanya panas ( $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 3026\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) proses penguapan partikel aluminium dan perubahan ukuran diameter droplet partikel aluminium.

### 1.3 Batasan Masalah

Sebagai pembahasan yang bertujuan untuk memusatkan pada permasalahan yang akan diteliti pada penelitian ini, maka diperoleh batasan permasalahan yang akan dibahas yaitu :

1. Partikel aluminium berukuran nanometer (2,038nm).
2. Proses penurunan ukuran diameter pada partikel aluminium.
3. Menggunakan potensial EAM (*Embedded Atom Method*).
4. Struktur kristal aluminium FCC (Face Center Cubic).
5. Visualisasi proses evaporasi pada partikel aluminium.
6. Material Aluminium.
7. Suhu  $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 3000\text{ }^{\circ}\text{C}$ .
8. Jumlah 2123 atom.

### 1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini sebagai berikut :

1. Mengetahui pengaruh temperatur ( $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 3026\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) terhadap titik evaporasi partikel aluminium seri 1010.
2. Mengetahui pengaruh densitas dari partikel aluminium seri 1010 terhadap titik evaporasi partikel aluminium seri 1010.
3. Mengetahui pengaruh temperatur penguapan aluminium seri 1010 terhadap penurunan ukuran diameter partikel aluminium seri 1010.
4. Mengetahui visualiasi akibat adanya temperatur ( $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 3026\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) proses penguapan partikel aluminium dan perubahan ukuran diameter droplet partikel aluminium.

### 1.5 Manfaat

Adapun manfaat yang dapat diperoleh dari penelitian ini, yaitu :

1. Dapat mengetahui pengaruh temperatur ( $30\text{ }^{\circ}\text{C} - 3026\text{ }^{\circ}\text{C}$ ) terhadap titik evaporasi partikel aluminium seri 1010.



2. Dapat mengetahui pengaruh densitas dari partikel aluminium seri 1010 terhadap titik evaporasi partikel aluminium seri 1010.
3. Dapat mengetahui pengaruh temperatur penguapan aluminium seri 1010 terhadap penurunan ukuran diameter partikel aluminium seri 1010.
4. Dapat mengetahui visualiasi akibat adanya temperatur (30 °C – 3026 °C) proses penguapan partikel aluminium dan perubahan ukuran diameter droplet partikel aluminium.

### 1.5 Hipotesa

Adanya pengaruh temperatur dan tekanan yang dihasilkan semakin besar dari mesin plasma, maka mengakibatkan partikel aluminium berada dalam kondisi *supersaturation* sehingga pada kondisi ini partikel aluminium mengalami penurunan densitas yang disebabkan oleh pelepasan atom dari rantai molekul aluminium, diikuti oleh terciptanya ukuran diameter partikel dari serbuk aluminium.



## BAB 2. TINJUAN PUSTAKA

### 2.1 Aluminium

Aluminium adalah logam *non-ferrous* yang paling banyak digunakan di dunia, dengan pemakaian tahunan saat ini mencapai 24 juta ton. Sekitar 75% dari total volume atau 18 juta ton adalah “*aluminium primer*” (aluminium yang diekstraksi dari bijih). Sementara peluang semakin berkembang, aluminium harus terus bersaing dengan berbagai bahan yang menawarkan biaya lebih rendah atau keunggulan kompetitif lainnya. Perusahaan aluminium harus terus berinovasi untuk menyediakan pelanggan dengan teknologi yang memungkinkan lebih baik dan bahan unggul dengan sifat yang unik. Pembuat pabrikan aluminium harus mengeksplorasi teknologi baru untuk menurunkan biaya produksi dan membuat aluminium lebih kompetitif (George E. 2003). Hans Christian Oersted merupakan penemu material aluminium pada tahun 1825 dan pada tahun 1827 F. Wohler baru mematenkan unsur ini sebagai penemuannya. Aluminium merupakan sebuah unsur yang tidak dapat berdiri sendiri dan bijih utamanya yaitu Bauksit. (Surdia, *et al.*, 1992).

Sifat-sifat unik aluminium antara lain, bobotnya yang ringan, kekuatan yang tinggi, dan ketahanan terhadap korosi yang membuatnya menjadi bahan yang ideal untuk digunakan dalam aplikasi konvensional dan baru. Aluminium telah menjadi semakin penting dalam produksi mobil dan truk, pengemasan makanan dan minuman, konstruksi bangunan, transmisi listrik, pengembangan infrastruktur transportasi, produksi peralatan pertahanan dan kedirgantaraan, pembuatan mesin dan peralatan, dan produksi produk konsumen yang tahan lama. Karena permintaan untuk produk yang semakin kompleks secara teknologi dan ekologis yang berkelanjutan meningkat, peluang untuk aluminium akan terus berkembang (George E.2003).

#### 2.1.1 Sifat Fisika Aluminium

Aluminium adalah logam yang ringan dan cukup penting dalam kehidupan manusia. Aluminium merupakan unsur kimia golongan IIIA dalam sistem periodik

unsur, dengan nomor atom 13 dan berat atom 26,98 gram per mol. Struktur kristal aluminium adalah struktur kristal FCC, sehingga aluminium tetap ulet meskipun pada temperatur yang sangat rendah. Keuletan yang tinggi dari aluminium menyebabkan logam tersebut mudah dibentuk atau mempunyai sifat mampu bentuk yang baik. Aluminium memiliki beberapa kekurangan yaitu kekuatan dan kekerasan yang rendah bila dibanding dengan logam lain seperti besi dan baja. Aluminium memiliki karakteristik sebagai logam ringan dengan densitas  $2,7 \text{ g/cm}^3$ .

Selain sifat-sifat tersebut aluminium mempunyai sifat-sifat yang sangat baik dan bila dipadu dengan logam lain bisa mendapatkan sifat-sifat yang tidak bisa ditemui pada logam lain. Adapun sifat-sifat dari aluminium antara lain : ringan, tahan korosi, penghantar panas dan listrik yang baik. Sifat tahan korosi pada aluminium diperoleh karena terbentuknya lapisan oksida aluminium pada permukaan aluminium. Lapisan oksida ini melekat pada permukaan dengan kuat dan rapat serta sangat stabil (tidak bereaksi dengan lingkungannya) sehingga melindungi bagian yang lebih dalam. Adanya lapisan oksida ini disatu pihak menyebabkan tahan korosi tetapi di lain pihak menyebabkan aluminium menjadi sukar dilas dan disolder (titik leburnya lebih dari  $2000^\circ\text{C}$ ). Sifat mekanik dan fisik aluminium dapat dilihat pada tabel 2.1 dan tabel 2.2 berikut :

Tabel 2.1 .Sifat Fisik Aluminium (Sumber : Douglas M, 1983)

Aluminium	Hasil Fisik Aluminium
Jari-jari atom	125 pm
Density	( 20 °C) 2,6989 gr/cm <sup>3</sup>
Kapasitas panas	(25 °C) 5,38 cal/mol °C
Tensile strength	700 Mpa
Hantaran panas	(25 °C) 0,49 cal/det °C
Panas peleburan	10,71 kJ•mol <sup>-1</sup>
Massa atom	26,98 gr/mol
Density	(660 °C) 2,368 gr/cm <sup>3</sup>
Potensial elektroda	(25 °C) -1,67 volt
Panas pembakaran	399 cal/gr mol
Kekerasan brinell	245 Mpa
Kekentalan	(700 °C) 0,0127 poise
Panas uap	294,0 kJ•mol <sup>-1</sup>
Titik lebur	660 °C
Struktur kristal kubus	FCC

Tabel 2.2 Fisik Mekanik Aluminium (Sumber : Douglas M, 1983)

Sifat-sifat	Kemurnian Aluminium (%)			
	99,996		>99,0	
	Dianil	75% dirol dingin	Dianil	H18
Kekuatan tarik (kg/mm <sup>2</sup> )	4,9	11,6	9,3	16,9
Kekutan mulur (0,2%) (kg/mm <sup>2</sup> )	1,3	11,0	3,5	14,8
Perpanjangan (%)	48,8	5,5	35	5
Kekerasan Brinell	17	27	23	44

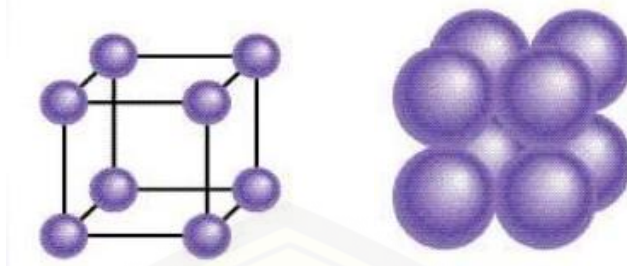
Tabel 2.1 menunjukkan sifat-sifat fisik Al dan tabel 2.2 menunjukkan sifat-sifat mekaniknya. Ketahanan korosi berubah menurut kemurnian, pada umumnya untuk kemurnian 99,0 % atau di atasnya dapat dipergunakan di udara tahan dalam bertahun - tahun. Hantaran listrik aluminium kira-kira 65 % dari hantaran listrik tembaga, tetapi masa jenisnya kira-kira sepertiganya sehingga memungkinkan untuk memperluas penampangannya. Oleh karena itu, dapat dipergunakan untuk kabel tenaga dan dalam berbagai bentuk umpamanya sebagai lembaran tipis (*foil*).

### 2.1.2 Struktur Kristal

Material tersusun atas beberapa atom. Atom-atom yang tersusun secara teratur dan juga memiliki ikatan antar atom yang teratur dapat membentuk sebuah kristal. Susunan kristal dengan pola yang teratur dan periodik dalam 3 dimensi, pada umumnya terdapat pada material padat (Askeland, 2010). Salah satu contoh bentuk kristal yang berada pada ruang 3 dimensi adalah kubus (Puri dan Babbar, 2001). Terdapat 3 macam sktruktur kristal dalam ruang kubus yaitu *Simple Cubic* (SC), *Body Centered Cubic* (BCC), *Face Centered Cubic* (FCC), dan *Hexagonal Close Packed* (HCP).

#### a. *Simple Cubic* (SC)

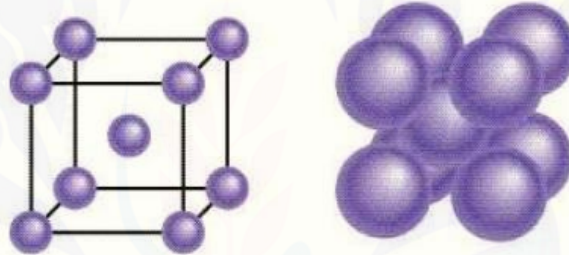
Struktur kristal ini mempunyai 1/8 atom di setiap sudut sel satuan, sehingga dalam satu sel SC terdapat 1 atom. Struktur sel SC dapat ditunjukkan pada Gambar 2.1.



Gambar 2.1 Struktur kristal SC (sumber: Kittel, 2005)

b. *Body Centered Cubic (BCC)*

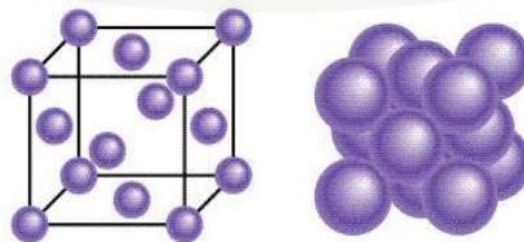
Struktur kristal ini merupakan struktur kristal dimana 1 atom terletak di tengah sel dan  $1/8$  atom terletak di masing-masing sudut sel. Dengan demikian, struktur BCC memiliki 2 atom. Struktur sel BCC dapat ditunjukkan pada Gambar 2.2.



Gambar 2.2 Struktur kristal BCC (Kittel, 2005)

c. *Face centered Cubic (FCC)*

Struktur kristal ini mengandung empat titik kisi, dengan satu atom tunggal terletak pada setiap titik. Tidak ada atom yang sepenuhnya terletak di dalam sel satuan. Sejumlah atom berada di pusat muka yang jumlahnya enam, dimana masing-masing berbagi dengan sel lainnya, dan satu atom terdapat di setiap ujung sel, sehingga keseluruhannya FCC memiliki empat atom per sel satuan. Struktur sel FCC dapat ditunjukkan pada Gambar 2.3.

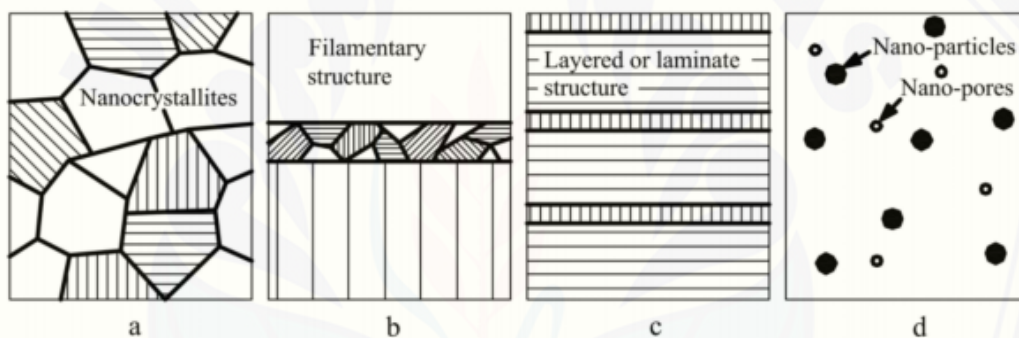


Gambar 2.3 Struktur kristal FCC (Kittel, 2005).



## 2.2 Nanopartikel

Nanopartikel adalah partikel dalam ukuran nanometer yaitu sekitar 1-100 nm (Hosokawa *et al.* 2007). Nanopartikel merupakan ilmu dan rekayasa dalam menciptakan material, struktur fungsional, maupun piranti alam skala nanometer. Ditinjau dari jumlah dimensi yang terletak dalam rentang nanometer, material nano diklasifikasikan menjadi beberapa kategori (Gambar 2.2), yaitu: material nano berdimensi nol (*nanoparticle*) seperti oksida logam, semi konduktor, dan *fullerenes*. material nano berdimensi satu (*nanowire, nanotubes, nanorods*), material nano berdimensi dua (*thin films*), dan material nano berdimensi tiga seperti Nanokomposit, nanograined, mikroporous, mesoporous, interkalasi, organik-anorganik hybrids (Pokropivny V, 2007).



Gambar 2.4 Skematik Klasifikasi nano material : (a) struktur tiga dimensi (3-D), (b) struktur dua dimensi (2-D), (c) struktur satu dimensi, dan (d) struktur zerodimensi (0-D) (Pokropivny V, 2007).

Nanopartikel menjadi kajian yang sangat menarik, karena material yang berada dalam ukuran nano biasanya memiliki partikel dengan sifat kimia atau fisika yang lebih unggul dari material yang berukuran besar (bulk) (C. R. Vestal *et al.*, 2004). Sifat-sifat yang berubah pada nanopartikel biasanya berkaitan dengan fenomena-fenomena berikut ini. Pertama adalah fenomena kuantum sebagai akibat keterbatasan ruang gerak elektron dan pembawa muatan lainnya dalam partikel. Fenomena ini berimbas pada beberapa sifat material seperti perubahan warna yang dipancarkan, transparansi, kekuatan mekanik, konduktivitas listrik, dan magnetisasi. Kedua adalah perubahan rasio jumlah atom yang menempati permukaan terhadap jumlah total atom. Fenomena ini berimbas pada perubahan titik didih, titik beku, dan reaktivitas kimia. Perubahan-perubahan tersebut

diharapkan dapat menjadi keunggulan nanopartikel dibandingkan dengan partikel sejenis dalam keadaan bulk. Para peneliti juga percaya bahwa kita dapat mengontrol perubahan-perubahan tersebut ke arah yang diinginkan. (Abdullah M., *et al.*, 2008).

### 2.2.1 Nano Aluminium

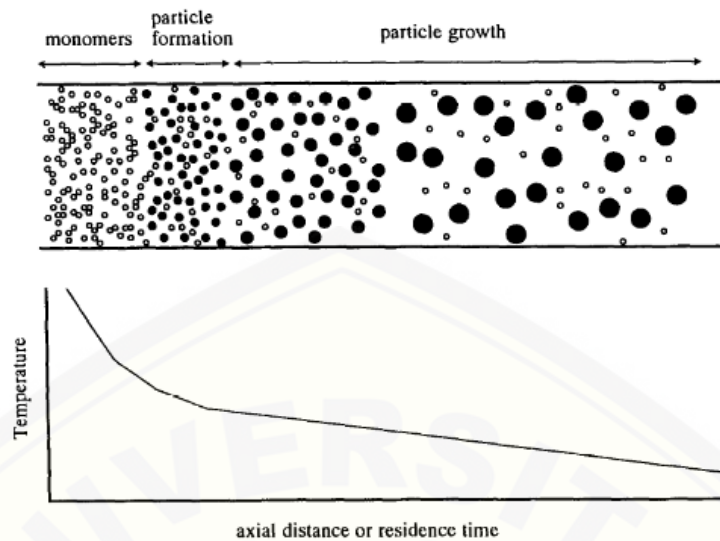
Selama proses penguapan sampai kondensasi, prekursor yang menguap dan berevolusi berada pada daerah yang memiliki kenaikan temperatur tinggi hingga pada saat prekursor meninggalkan daerah dengan diikuti oleh penurunan temperatur, maka prekursor mengalami proses pendinginan yang menghasilkan ukuran prekursor diikuti dengan *nukleasi*, *kondensasi* dan *koagulasi*. Skema dari proses ini ditunjukkan pada Gambar 2.5 skema pembentukan partikel bergantung pada sistem termodinamika. Molekul (monomer) akan membentuk partikel stabil dengan koagulasi jika ukuran gugus kritis ( $d_p^*$ ) kurang dari atau sama dengan molekul (misalnya monomer bola setara) ukuran spesies kondensasi:

$$d_p^* \leq d_1 \quad (1)$$

Ukuran cluster kritis atau diameter Kelvin adalah:

$$d_p^* = \frac{4\sigma v_1}{k_B T (\ln S)} \quad (2)$$

Dimana  $\sigma$  adalah tegangan permukaan,  $v_1$  volume monomer,  $k_B$  konstanta Boltzmann,  $T$  suhu absolut dan  $S$  rasio saturasi (rasio konsentrasi monomer, terhadap saturasi konsentrasi monomer). Proses kondensasi pengaburan yang tidak dilakukan dalam reaksi kimia, formasi partikel adalah proses penggerak nukleasi ( $d_p^* > d_1$ ).



Gambar 2.5 Skematik pembentukan dan pertumbuhan partikel aluminum menggunakan pendinginan (Panda S, 1995).

Dinamika pembentukan partikel dan pertumbuhan dapat digambarkan dengan keseimbangan pada uap kondensasi dan jumlah partikel dan konsentrasi massa yang dihasilkan. Mengabaikan penyebaran ukuran partikel, keseimbangan untuk konsentrasi molekul kondensasi (monomer) per satuan massa gas ditulis sebagai (Warren dan J.H. Seinfeld, 1984 ).

### 2.2.2 Metode Sintesis Nanopartikel

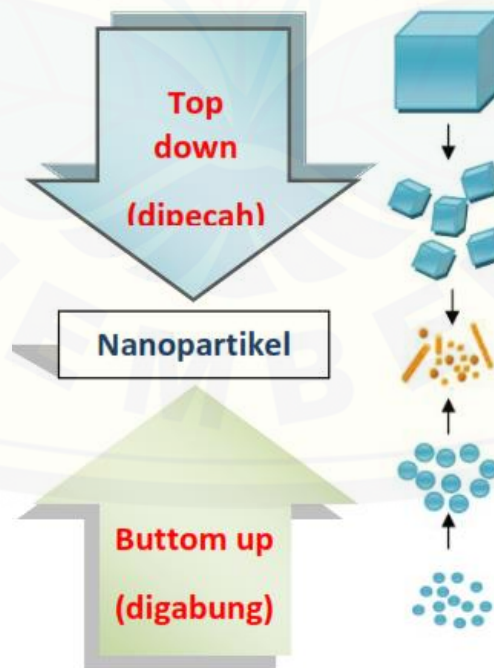
Metode sintesis nanopartikel telah terkenal pada waktu yang lama dibandingkan dengan nanomaterial lainnya. Untuk sintesis nanopartikel, kondisi pengolahan perlu dikontrol sedemikian rupa sehingga dapat menghasilkan ukuran nanopartikel, nanopartikel memiliki karakteristik ukuran identik semua partikel, bentuk identik, dan struktur kristal identik secara individual tersebar tanpa aglomerasi. Nanopartikel dapat disintesis dengan pendekatan top-down atau bottom-up seperti yang ditunjukkan pada gambar 2.6. Dua pendekatan top-down yang terkenal adalah proses pengolahan menggunakan media *thermal* . Pengurangan diameter menghasilkan nanopartikel dari berbagai diameter mulai dari 20 nm sampai ratusan nanometer dan bentuk partikelnya juga bervariasi, serta komposisi dari nanopartikel mungkin mengandung pengotor dari media pembuatan. Nanopartikel yang dihasilkan oleh proses tersebut biasanya digunakan



dalam fabrikasi nanokomposit, serta bahan massal yang memiliki butir nano di mana kesempurnaan dalam ukuran, bentuk dan keberadaan pengotor secara signifikan tidak menjadi masalah (Pallab Gosh, 2007).

Pada proses pembentukan nanopartikel memiliki beberapa cacat yang timbul selama proses pembentukan dan cacat tersebut dapat dihindari dengan melakukan *anil* selama proses sintering. Material yang berukuran besar memiliki konduktivitas termal yang sangat kecil tetapi koefisien yang besar dan ekspansi termal yang mengalami siklus termal berulang untuk menghasilkan partikel halus. Namun, teknik ini sulit untuk mengendalikan material agar menghasilkan ukuran dan bentuk partikel (Pallab Gosh, 2007).

Proses pembuatan nanopartikel menggunakan media *thermal* termasuk sintesis secara fisika yang tidak melibatkan pada proses reaksi kimia karena proses pembentukannya yang terjadi dengan memecah material berukuran di atas nanometer menjadi material berukuran nanometer tanpa mengubah sifat bahan (Abdullah *et al*, 2008).

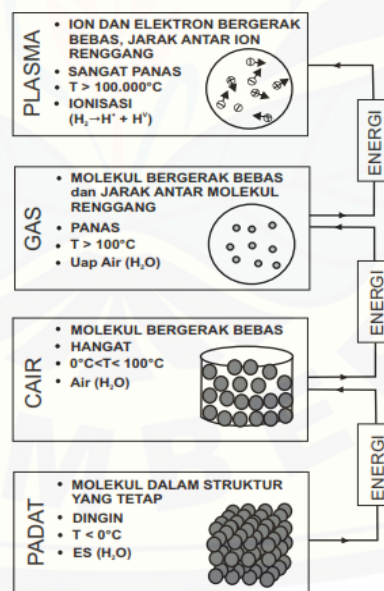


Bagan 2.6 Sintesis nanopartikel *top-down* dan *bottom-up* (Abdullah, M. 2008).

### 2.3 Plasma

Definisi Konsep tentang plasma pertama kali dikemukakan oleh Langmuir dan Tonks pada tahun 1928. Mereka mendefinisikan plasma sebagai gas yang terionisasi dalam lucutan listrik, jadi plasma dapat juga didefinisikan sebagai percampuran kuasinetral dari elektron, radikal, ion positif dan negatif. Percampuran antara ion-ion yang bermuatan positif dengan elektron-elektron yang bermuatan negatif memiliki sifat-sifat yang sangat berbeda dengan gas pada umumnya dan materi pada fase ini disebut fase plasma. Maka secara sederhana plasma didefinisikan sebagai gas terionisasi dan dikenal sebagai fase materi ke empat setelah fase padat, cair, dan fase gas.

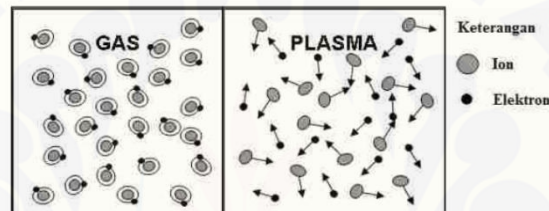
Menurut Chen (2002), plasma merupakan daerah reaksi tumbukan elektron yang sangat signifikan untuk terjadi. Plasma dapat terjadi ketika temperatur atau energi suatu gas dinaikkan sehingga memungkinkan atom-atom gas terionisasi akan membuat gas tersebut melepaskan elektron-elektronnya yang pada keadaan normal mengelilingi inti.



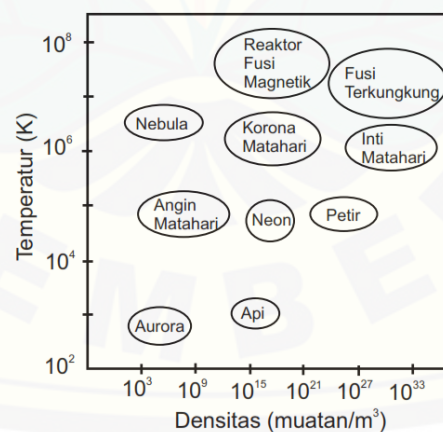
Gambar 2.7 Ilustrasi fase materi ke empat setelah fase padat, cair, dan fase gas (Muhammad Nur, 2011).

Ilustrasi pada gambar 2.7 menunjukkan terbentuknya plasma dari proses perubahan melalui urutan padat, cair, gas dan akhirnya plasma. Melalui logika

urutan materi tersebut maka plasma selalu disebut dengan “materi fase ke empat” setelah fase padat, fase cair dan gas. Gambar tersebut menunjukkan bahwa jika es (merupakan materi padat) mendapat energi, maka ia akan mencair pada suhu di atas  $0^{\circ}\text{C}$  menjadi air. Jika air diberikan energi, setelah melewati suhu  $100^{\circ}\text{C}$  akan menjadi uap air dengan molekul  $\text{H}_2\text{O}$ . Pemberian energi terus menerus pada uap air akan memecahkan molekul air menjadi H dan O dan akhirnya molekul-molekul ini akan terionisasi menjadi ion-ion positif dan elektron yang dalam keadaan tertentu dan ruang tertentu (microspace) terjadi keseimbangan antara ion dan elektron, pada keadaan ini disebut plasma.



Gambar 2.8 perbedaan materi antara fase gas dengan fase plasma untuk gas hidrogen (Muhammad Nur, 2011).



Gambar 2.9 Ilustrasi Fase Materi ke empat (Muhammad Nur, 2011).

### 2.3.1 Jenis - jenis Plasma

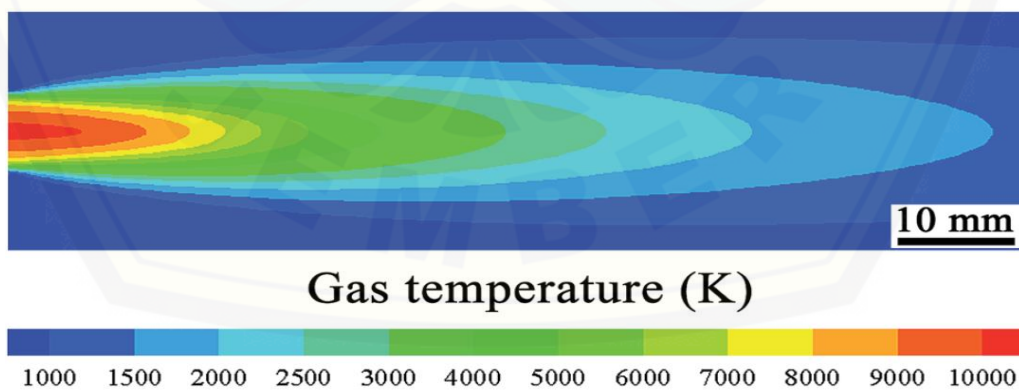
Ditinjau dari temperaturnya plasma dapat diklasifikasikan menjadi tiga, yaitu :

#### 1. Plasma Dingin

Plasma yang terjadi dalam keadaan ketidaksetimbangan termal (non-thermal equilibrium) antara temperatur elektron dan gas. Temperatur elektron tinggi tetapi temperatur partikel gas relatif rendah karena tumbukan elektron dan partikel gas sangat kecil. Pada plasma dingin ion dan atom-atom atau molekul-molekul netral tetap dalam suhu sekitar 1000 K. elektron-elektron dalam plasma jenis ini mempunyai temperatur cukup tinggi sekitar 50000 K. Plasma dingin sering digunakan dalam bidang mikroelektronik, pembentukan materi baru dan pembersihan polutan.

#### 2. Plasma Termik

Plasma jenis ini tergolong plasma dalam keadaan ketidaksetimbangan termal (non - thermal equilibrium). Partikel-partikel berat di dalam plasma bersuhu lebih tinggi dari 3000 K. Elektron dalam plasma termik ini mempunyai 5 temperatur cukup tinggi lebih besar dari 10 K. Plasma jenis ini sering digunakan untuk pengelasan, pemotongan logam, pembersihan polutan dan lain-lain.



Gambar 2.10 Distribusi temperatur DC Thermal Plasma (Shan-Lin Zhang, 2015).

#### 3. Plasma Panas

Plasma panas terjadi dalam keadaan kesetimbangan termal (thermal equilibrium). Pada pembangkitan plasma panas distribusi energi elektron dan

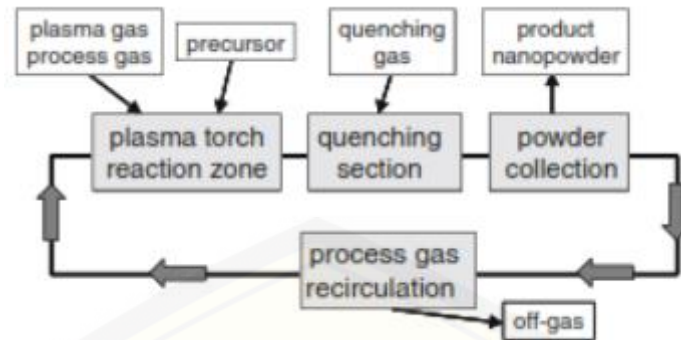
molekul gas mendekati sama, karena frekuensi tumbukan antara elektron dan molekul gas lebih besar. Plasma panas adalah plasma yang tersusun dari molekul gas yang bertemperatur tinggi. Plasma jenis ini memiliki temperatur di atas  $10^6$  K. Plasma panas digunakan untuk memproduksi energi listrik. Untuk memberikan gambaran sebaran plasma yang terkait dengan temperatur dan densitasnya.

### 2.3.2 Fabrikasi Nano Partikel Berbasis Thermal Plasma

Plasma merupakan materi gas yang mengandung partikel bermuatan listrik, dimana jumlah tersebut yang dibebankan adalah hampir tidak ada. Partikel-partikel yang bermuatan elektron, atom terionisasi atau molekul dalam proses sintesis dibebankan pada nanopartikel. Sebagai beban pembawa perangkat, plasma menunjukkan daya konduksi listrik. Tingkat ionisasi sangat penting karena rasio partikel bermuatan di atas netral mungkin cukup kecil. Proses plasma yang mengandung partikel disebut "debu plasma", oleh karena itu plasma digunakan untuk sintesis partikel seperti debu. Sehubungan dengan sintesis, ada satu hal yang membedakan dari beberapa metode plasma, antara lain pada tekanan rendah dan tinggi.

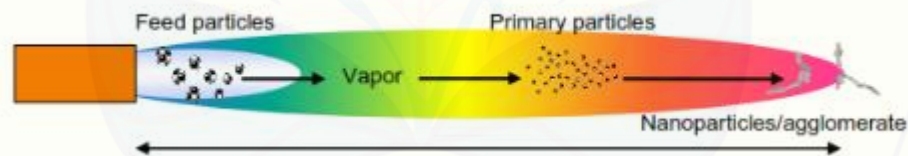
berkaitan dengan klasifikasi dari proses plasma, perbedaan yang penting adalah antara plasma ekuilibrium dan plasma non-ekuilibrium. Dalam plasma ekuilibrium, semua energi atau suhu dibebankan pada partikel adalah sama. sedangkan di non-ekuilibrium plasma, memiliki elektron yang tinggi ion berat yang lebih rendah, dan partikel bermuatan listrik yang netral dengan sedikit energi (Vollath, 2008). Metode plasma mengharuskan memperhatikan parameter yang ada agar erbentuk nanopartikel dengan kualitas yang baik. Seperti yang ditunjukkan padagambar 2.11 merupakan skema dari proses pembuatan nanopartikel dengan menggunakan metode plasma.





Gambar 2.11 Skema Metode Berbasis Sintesis Plasma (Vollath, 2008).

Mengingat sintesis dengan metode plasma, flames digambarkan sebagai plasma dengan tingkat rendah ionisasi yang kadang disebut "suhu rendah plasma parsial". Dilihat dari prekursor, yang membedakan prosesnya yaitu menggunakan gas, padatan, cairan atau cairan solut. Pada sintesis partikel, plasma dengan kepadatan tertinggi diamati dalam gabungan laser fokus yang dijelaskan secara singkat pada gambar 2.12 dimana pembentukan nanopartikel dan bentuk api plasma.



Gambar 2.12 Skema pembentukan nanopartikel dengan metode plasma (Kong dan Kawczak, 2008).

## 2.4 Simulasi Dinamika Molekuler

Dinamika molekuler merupakan suatu metode untuk menyelidiki struktur dari zat padat, cair dan gas. Umumnya dinamika molekuler menggunakan teknik persamaan hukum Newton dan mekanika klasik. Dinamika molekuler pertama kali diperkenalkan oleh Alder dan Wainwright pada akhir tahun 1950-an, metode ini digunakan untuk mempelajari interaksi pada bola keras. Dari studi tersebut mereka mempelajari mengenai sifat sebuah cairan sederhana. Pada tahun 1964, Rahman melakukan simulasi pertama menggunakan energi potensial terhadap

cairan argon. Dan di tahun 1974, Rahman dan Stillinger melakukan simulasi dinamika molekuler pertama menggunakan sistem yang realistic yaitu simulasi dengan menggunakan air.

Kemudian pada tahun 1977, muncul pertama kali simulasi terhadap protein yaitu simulasi sebuah *inhibitor enzim tripsin bovine pancreas* (BPTI). Dinamika molekuler mengamati molekul-molekul dalam suatu sistem tertutup, dimana jumlah materi (molekul) dalam sistem tidak berubah. Energi dapat keluar atau masuk sistem, tergantung dari jenis simulasi yang dilakukan. Suatu sistem adalah suatu kuantitas materi atau volume yang dipilih untuk diamati, sedangkan materi dan volume di luar sistem disebut lingkungan (Cengel dkk, 1994). Pemisahan antara sistem dan lingkungan disebut batas, yang secara teoritis tidak memiliki massa ataupun volume tersendiri. Sistem terbagi atas sistem tertutup, jika materi tidak dapat menembus batas, dan sistem terbuka, jika materi dapat menembus batas. Materi pada skala makroskopis terdiri dari molekul-molekul berjumlah sangat besar (bilangan Avogadro berorde  $10^{23}$ ). Karena keterbatasan komputasi, maka simulasi dinamika molekul hanya dapat melakukan perhitungan untuk ratusan atau ribuan molekul. Semakin banyak molekul dalam simulasi, semakin realistis hasil yang diperoleh, tetapi biaya komputasi semakin mahal.

Tujuan pertama simulasi dinamika molekul adalah menghasilkan trajektori molekul-molekul sepanjang suatu jangka waktu terhingga. Pada setiap waktu, molekul-molekul dalam simulasi memiliki suatu posisi dan momentum tertentu untuk masing-masing sumbu. Untuk  $N$  molekul dalam ruang 3 dimensi, terdapat ruang posisi berdimensi  $3N$  dan ruang momentum berdimensi  $3N$ , sehingga terbentuk ruang fasa berdimensi  $6N$ . Suatu konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul dapat diartikan sebagai koordinat dalam ruang fasa tersebut.

#### 2.4.1 Interaksi Antar Atom

Ketika sebuah atom dan atom yang lain berada pada posisi yang saling berdekatan, 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).

#### 2.4.2 Energi Potensial EAM (*Embedded Atomic Method*)

Menurut Alavi (2006), perhitungan dinamika molekular pada EAM (*Embedded Atom Method*) potensial adalah salah satu metode perhitungan potensial antar-atom yang paling sering digunakan secara luas di dunia, untuk logam dan paduan. Secara konseptual, distribusi elektron dari masing-masing atom tidak merespon lingkungan atom di dalam EAM. Pada kenyataannya, distribusi setiap atom bergantung pada kondisi lingkungan atom. Potensial antar-atom adalah pondasi dari simulasi mekanika molekuler klasik (termasuk simulasi statis dan dinamis). Kontribusi *embedded atom* adalah jumlah dari pasangan potensial ( $\phi_{ij}$ ) dan sebuah tarikan *embedding energy* ( $F_i$ ). Persamaan *embedded atom method* (EAM) dituliskan pada persamaan 1.

$$U_{\text{eam}}(\{r\}) = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \phi^{ij}(r^{ij}) \quad (3)$$

Dalam potensial ES+, fungsi Finnis-Sinclair bergantung pada densitas lokal elektron ( $\rho_i$ ) dari *tight-binding theory* yang digunakan untuk memperoleh kontribusi bagian-bagian atomke potensial (Alavi, 2006).

$$F_i[\rho_i] = \left( \sum_{j(\neq i)} \rho_i(r^{ij}) \right) \quad (4)$$

Keterangan :

$A_i$  dan  $\xi_i$  = konstanta *positive fitting*

Densitas lokal elektron dari aluminium atom  $i$  adalah jumlah dari densitas elektron dari semua atom lainnya. Persamaan 5 menyatakan perhitungan densitas lokal elektron (Alavi *et al.*, 2006)

$$P_i(r_i) = \sum_{i \neq j} \xi_j \exp[-\beta(r_{ij} - r^*)] \quad (5)$$

Penurunan eksponensial digunakan untuk bagian atraktif dari potensi EAM. Interaksi pasangan residual dituliskan pada persamaan 6 (Alavi *et al.*, 2006).

$$\phi_{ij}(r_{ij}) = 2B \exp\left[-\beta \left(\frac{r_{ij} - r^*}{2}\right)\right] - C [1 + \alpha(r_{ij} - r^*)] \exp[-\alpha(r_{ij} - r^*)] \quad (6)$$

Keterangan :

$\beta$  = pengurangan panjang pada bagian repulsif

$\alpha$  = pengurangan panjang pada bagian atraktif

$r^*$  = jarak kesetimbangan dari pasangan potensial

$C$  = energi penguraian dua atom

$B$  = jumlah atom terdekat pada keadaan solid

#### 2.4.3 Ensemble

Gibbs pada tahun 1902 telah memperkenalkan konsep *Ensemble*, yang berasal dari bahasa Perancis, yang berarti perakitan sistem (Das, 2011). *Ensemble* merupakan kumpulan dari sistem *independent*, yang secara makro memiliki karakteristik sama, akan tetapi secara mikro berbeda. Berikut adalah 3 *Ensemble* yang biasa digunakan, yaitu:

##### 1. *Ensemble* Mikrokanonikal

Merupakan *Ensemble* yang memiliki jumlah atom  $N$ ,  $V$  merupakan volume yang sama dan  $E$  adalah energi potensial yang tidak berubah. *Ensemble* ini diperoleh dari sistem yang terisolasi sehingga nilai  $(E, V, N)$  tidak akan terpengaruh oleh sistem lain dari luar.

##### 2. *Ensemble* Kanonial.

Merupakan *Ensemble* yang mempunyai nilai suhu (T) volume dan N partikel yang sama. Dalam *Ensemble* kanonik, sistem dapat bertukar energi tetapi tidak dengan partikelnya.

### 3. *Ensemble* Isobarik-Isotermal.

Pada *Ensemble* ini nilai tekanan (P), suhu (T), dan jumlah atom (N) dipertahankan dalam harga konstan. Dalam *Ensemble* ini nilai volume sistem dapat berubah atau menjadi variabel (Maginn, 1997).

#### 2.4.4 Mekanika Statistik

Mekanika statistik atau termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonversikan informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala makroskopik (Ercolessi, n.d.). Konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul menentukan sifat-sifat yang dimiliki materi tersebut. Sifat-sifat itu antara lain adalah energi, temperatur, tekanan dan entalpi. Menurut mekanika statistik, kuantitas fisis diperoleh sebagai rata-rata konfigurasi tersebut terhadap waktu .

##### 1. Energi Total

Energi total suatu sistem tersusun dari energi potensial sistem dan energi kinetik sistem. Energi potensial adalah jumlah dari semua energi potensial molekul-molekul dalam system.

$$U = \sum_i U_i (R_n) \quad (7)$$

$R^N$  adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul,  $R_N = \{R_1, R_2, R_3, \dots, R_N\}$ . Energi kinetik sistem adalah jumlah dari energi kinetik setiap molekul.

$$K = \sum_i K_i (V_i) \quad (8)$$

Dengan  $K_i = \frac{1}{2} m_i (v_i)^2 = \frac{p_i^2}{2m_i}$

Untuk sistem terisolasi di mana tidak ada energi yang menembus batas, sistem bersifat konservatif atau energi sistem konstan. Konservasi energi ini adalah salah satu cara untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal.

##### 2. Temperatur

Menurut termodinamika statistik, temperatur tidak lain adalah suatu skala dari energi kinetik molekul-molekul penyusunnya. Untuk tiga dimensi, hubungan antara energi kinetik dengan temperatur dinyatakan,

$$K = \frac{3}{2} N k_b T \quad (9)$$

Atau ,

$$T = \frac{2 k}{3 N k_b} \quad (10)$$

di mana K adalah energi kinetik total sistem, N adalah jumlah molekul sistem,  $k_B$  adalah konstanta Boltzmann dan T adalah temperatur.

### 3. Massa Jenis

Massa jenis dapat didefinisikan sebagai massa persatuan volume. Simbol dari massa jenis adalah ( $\rho$ ). Bahan yang berbeda akan memiliki nilai massa jenis yang berbeda pula. Rumus dari massa jenis adalah:

$$\rho = \frac{m}{v} \quad (11)$$

Dengan,

m = Mass (kg)

v = Volume ( $m^3$ )

### 4. Evaporasi

Fenomena yang terjadi pada proses evaporasi pembentukan droplet pada titik *supersaturation* dapat menghasilkan ukuran droplet tertentu yang dikaji dengan simulasi dinamika molekuler sebagai fundamental untuk menganalisis dinamika proses pembentukan dan perhitungan terkait pengaruh lingkungan yang menyebabkan terbentuknya droplet dengan metode simulasi dinamika molekuler dihitung menggunakan regresi dari hukum hukum evaporasi  $D^2$  dengan memperkirakan model *self diffusion* yang dapat dihitung menggunakan :

$$\frac{d(D^2)}{dt} = -\beta_v \quad (12)$$

Dimana :

$d$  = diameter droplet

$D^2$  = Diamer Droplet

$-\beta_v$  = Koefisien Evaporasi

Dimana  $-\beta_v$  adalah koefisien evaporasi dapat dihitung

$$\beta_v = \left( \frac{8\rho_s D_s}{\rho_l} \right) \ln(1 + B) \quad (13)$$

Dimana :

$\rho_s$  = Densitas Padat

$D_s$  = Self Diffusion

$\rho_l$  = Densitas Cair

$B$  = *Transfer Number*

Dan  $B$  merupakan *transfer number* yang dapat dihitung menggunakan

$$B = \frac{c_p (T_v - T_s)}{h_{fg}} \quad (14)$$

Dimana :

$C_p$  = *Spesific Heat*

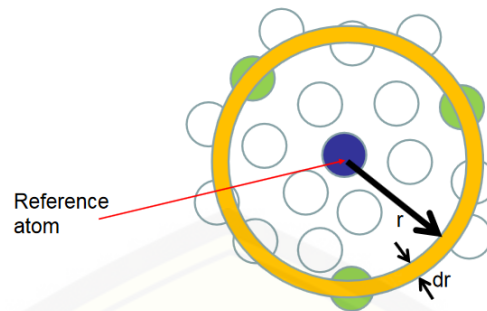
$T_v$  = *Temperature of Vaporization*

$T_s$  = *Temperature Surface Droplet*

$h_{fg}$  = *Heat of Vaporization*

#### 2.4.5 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 dinyatakan pada persamaan (13) dan ditunjukkan pada gambar 2.13.

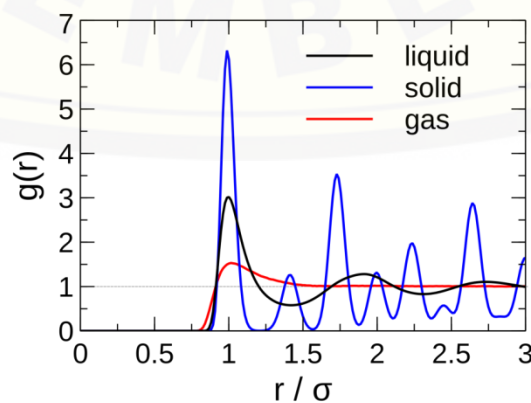


Gambar 2.13 Mekanisme Perhitungan RDF (Buhler , 2011).

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 2.14.

$$g(r) = \frac{N(r, \Delta r)}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)} \quad (15)$$

Dimana  $\rho$  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 2.14 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (Buhler, 2011).



## 2.5 Software Simulasi Dinamika Molekul

Dinamika molekul merupakan suatu metode simulasi komputer yang digunakan untuk merepresentasikan interaksi antara molekul dan atom dalam jangka waktu tertentu yang didasarkan pada persamaan hukum Newton dan mekanika klasik. Dalam hal ini sebelum proses simulasi dinamika molekul dapat berjalan maka dibutuhkan dukungan perangkat lunak yang berfungsi sebagai pemodelan dan perancangan partikel dalam kondisi yang diinginkan, selain itu proses simulasi dinamika molekul juga membutuhkan perangkat lunak yang berbeda dari proses pemodelan karena pada proses ini dibutuhkan perangkat lunak yang dapat mengolah data berupa angka menjadi proses visual yang nantinya dapat dianalisis antara data pemodelan dengan proses visualisasi interaksi antar atom.

### 2.5.1 LAMMPS

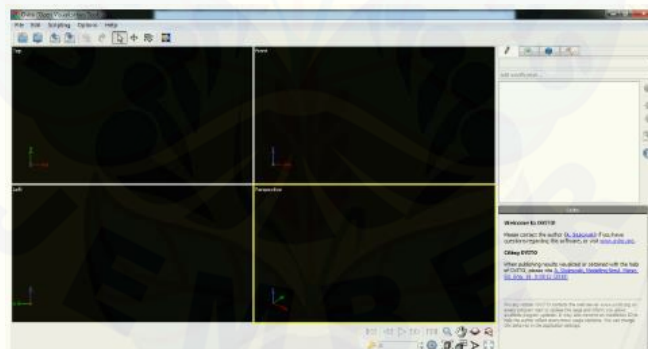
LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) adalah sebuah program yang berisi sekumpulan kode dinamika molekul klasik, yang dapat digunakan untuk menyimulasikan perilaku partikel hingga berjumlah milyaran, baik dalam keadaan padat, cair maupun gas. Program ini dapat juga digunakan untuk model atom, polimer, biologi, logam, granular, dan sistem *coarse-grained*, menggunakan berbagai medan gaya dan kondisi batas. LAMMPS berjalan efisien pada computer atau laptop prosesor tunggal, tetapi dirancang untuk komputer paralel. LAMMPS berjalan pada mesin paralel yang mengkompilasi C++ dan mendukung pesan lewat MPI. Kode yang tersedia dalam program ini bersifat *open source* (di bawah ketentuan GNU *Public License*), yang dapat dimodifikasi sesuai keinginan. LAMMPS mengintegrasikan persamaan gerak Newton untuk koleksi atom, molekul dan partikel makroskopis yang berinteraksi dengan gaya dengan kondisi awal atau kondisi batas (Camprubi, 2011)



Gambar 2.15 Tampilan halaman awal program LAMMPS (lammeps, 2000).

### 2.5.2 OVITO

OVITO adalah program visualisasi dan analisis ilmiah hasil data atomik dari data simulasi, OVITO dapat digunakan untuk visualisasi model 2D maupun dalam 3D. OVITO merupakan *software open source* yang digunakan sebagai pendukung dalam menganalisis data hasil simulasi dinamika molekul, seperti LAMMPS. Program OVITO dapat digunakan untuk pengguna Windows, Linux, Mac OS. OVITO dikembangkan oleh Alexander Stukowski dari Departemen Material Sains Darmstadt University of Technology, Jerman (Stukowski, 2010). Gambar 2.14 merupakan tampilan awal dari program OVITO yang digunakan untuk memvisualisasikan data hasil simulasi.



Gambar 2.16 Tampilan aplikasi OVITO (Stukowski, 2009).

## BAB 3 METODELOGI PENELITIAN

### 3.1 Metode Penelitian

Metode yang digunakan untuk menganalisis pembentukan nanopartikel aluminium pada proses penguapan yaitu menggunakan simulasi dinamika molekul. Dibutuhkan beberapa komponen penunjang berupa perangkat lunak komputer yang mendukung pembentukan simulasi. Komponen penunjang tersebut adalah perangkat lunak bernama LAMMPS dan Ovitto.

### 3.2 Waktu dan Tempat

Pelaksanaan penelitian dilakukan di laboratorium Teknologi Terapan Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember. Penelitian ini dilakukan semester ganjil 2017 dan semester genap 2018.

### 3.3 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini yaitu laptop Toshiba dengan processor *core i3*, 64 bit dan Ram 2gb yang telah diinstal program aplikasi LAMMPS dan OVITO pada sistem operasi Windows.

### 3.4 Prosedur Penelitian

Prosedur pelaksanaan yang akan dilakukan untuk mendapatkan gambaran proses simulasi ini adalah:

#### 3.4.1 Validasi Data

Sebelum dilakukannya proses pembentukan *script*, hal penting yang harus diketahui adalah identifikasi kondisi partikel pada suatu sistem sebagai parameter yang bertujuan sebagai pemodelan partikel sekaligus menciptakan suatu kondisi yang diinginkan. Dapat dilihat pada tabel 3.1 dimana terdapat parameter validasi data yang bertujuan untuk memodelkan partikel agar menciptakan suatu kondisi yang diinginkan dan dapat dilanjutkan pada tahap pembentukan input *script*.

Tabel 3.1 Validasi Data

<b>Material</b>	<b>Aluminum (Al)</b>
<b>Nomor Atom</b>	13
<b>Struktur kristal</b>	FCC
<b>Jenis</b>	Partikel
<b>Interatomic Potential</b>	Embedded Atom Model
<b>Temperatur Cair</b>	660 °C
<b>Temperatur Penguapan</b>	2100°C
<b>Parameter Kisi</b>	0.404 nm

#### 3.4.2 Pembentukan Input Script

Input script LAMMPS merupakan informasi yang harus diberikan sebelum simulasi, berupa file pada aplikasi *notepad C++*. Informasi tersebut berfungsi untuk mendefinisikan atom, molekul beserta posisinya, sekaligus memberikan parameter – parameter yang dibutuhkan untuk menciptakan sebuah kondisi yang diinginkan. Konten input script pada LAMMPS terdiri dari empat bagian penting yang harus diperhatikan, diantaranya sebagai berikut :

1. Initialization

Parameter – parameter yang perlu ditentukan dalam pengaturan awal yaitu *units, boundary, atom\_style, lattice, region, create box, create atom, group, mass*.

2. Definisi Atom

merupakan bagian pengaturan untuk mendefinisikan jenis atom, nomor atom, jumlah atom, jumlah molekul, jumlah ikatan, massa berat atom dan posisi awal koordinat atom. Pembuatan definisi atom tidak melalui *input script*, karena banyaknya informasi yang diberikan dalam atom definisi, maka dilakukan pembuatan kode berupa nama lampiran file yang terpisah dari *input script* yang nantinya nama lampiran file yang sudah dibuat berupa *.dat* file dan akan digunakan sebagai kode perintah untuk memanggil file lampiran kedalam *command read\_data* pada *input script*.

### 3. Settings

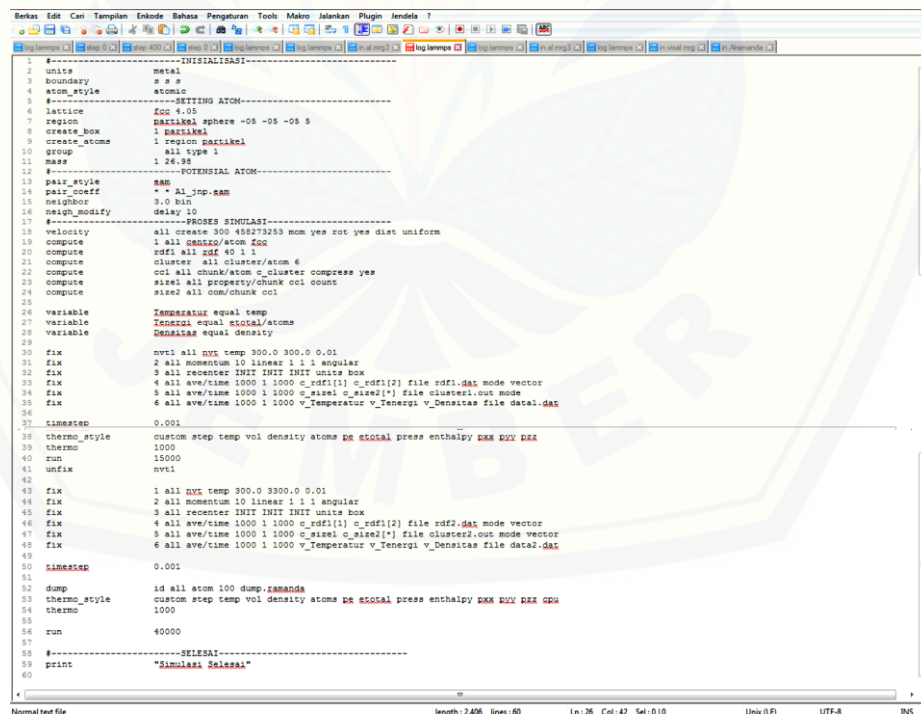
Merupakan bagian tentang pengaturan koefisien ikatan, parameter – parameter kondisi simulasi yang diinginkan, dan output. Contoh perintah pengaturan koefisien yaitu *pair\_style* dan *pair\_coeff*. Pengaturan variasi simulasi dijelaskan dengan perintah – perintah seperti *timestep* dan *reset\_timestep*. Untuk kondisi batas, integrasi waktu, dan pilihan diagnostic termodinamika dijelaskan dengan perintah *fix*.

Sedangkan jenis perhitungan dijelaskan dengan perintah *compute* dan *variable*. Selain itu, *Output* dari script diatur menggunakan *thermo*, *dump*, dan *restart*.

### 4. Run a simulation

Simulasi dinamika molekul dijalankan dengan menggunakan perintah *run*.

Proses pembentukan input script pada material partikel aluminium seri 1010 dapat dilihat pada gambar 3.1



```

1 #-----INISIALISASI-----
2 units                metal
3 boundary             # s #
4 atom_style           atomic
5 #-----SETTING ATOM-----
6 lattice              FCC 4.05
7 region              ballkeel sphere -05 -05 -05 5
8 create_box           1 BALLKEEL
9 create_atoms         1 region ballkeel
10 group               all type 1
11 mass                1 24.36
12 #-----POTENSIAL ATOM-----
13 pair_style           EAM
14 pair_coeff           * * Al_mfp.EAM
15 neighbor             3.0 bin
16 neigh_modify        delay 10
17 #-----PROSES SIMULASI-----
18 velocity            all create 300 486279259 mom yes rot yes dist uniform
19 compute             1 all density/atom fcc
20 compute             rdf1 all rdf 40 1 1
21 compute             cluster all cluster/atom 4
22 compute             cci all chunk/atom c_cluster compress yes
23 compute             size1 all property/chunk cci count
24 compute             size2 all com/chunk cci
25
26 variable            TEMPERATUR equal temp
27 variable            DENSITAS equal sctotal/atoms
28 variable            DENSITAS equal density
29
30 fix                 nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
31 fix                 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular
32 fix                 3 all recenter INIT INIT INIT units box
33 fix                 4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf1.dat mode vector
34 fix                 5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size1[*] file cluster1.out mode vector
35 fix                 6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Densitas file data1.dat
36
37 timestep            0.001
38 thermo_style        custom step temp vol density atoms pr sctotal press enthalpy EAM NVT EAM DENS
39 thermo              1000
40 run                 15000
41 unfix               nvt1
42
43 fix                 1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
44 fix                 2 all momentum 10 linear 1 1 1 angular
45 fix                 3 all recenter INIT INIT INIT units box
46 fix                 4 all ave/time 1000 1 1000 c_rdf1[1] c_rdf1[2] file rdf2.dat mode vector
47 fix                 5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size1[*] file cluster2.out mode vector
48 fix                 6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Densitas file data2.dat
49
50 timestep            0.001
51
52 dump                id all atom 100 dump.ramanda
53 thermo_style        custom step temp vol density atoms pr sctotal press enthalpy EAM NVT EAM DENS
54 thermo              1000
55
56 run                 40000
57
58 #-----SELESAI-----
59 print                "Simulasi Selesai"
60

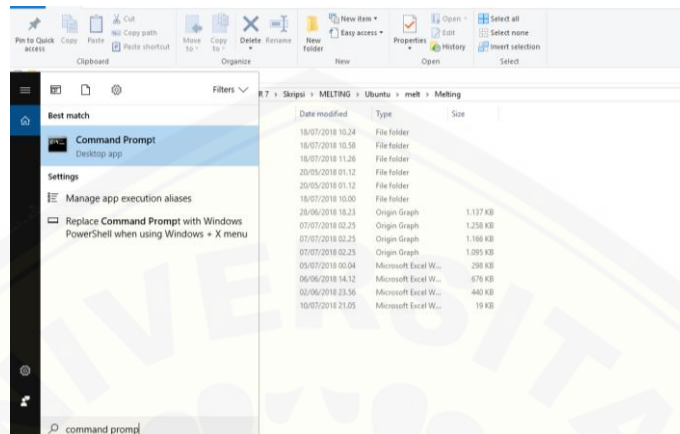
```

Gambar 3.1 Input Script



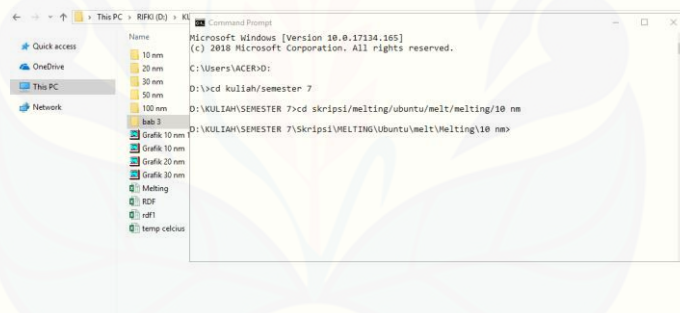
### 3.4.3. Menjalankan simulasi LAMMPS

#### 1) Buka Command Prompt pada komputer



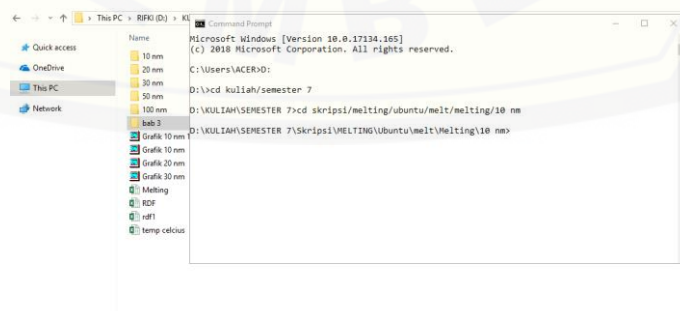
Gambar 3.2 Command Prompt

#### 2) Buka file dengan menggunakan perintah pada command prompt.



Gambar 3.3 Membuka script dengan command prompt

#### 3) Jalankan file dengan perintah `lmp_serial.exe -in in.al.mrg`, kemudian tunggu hingga proses selesai.



Gambar 3.4 Proses menjalankan LAMMPS

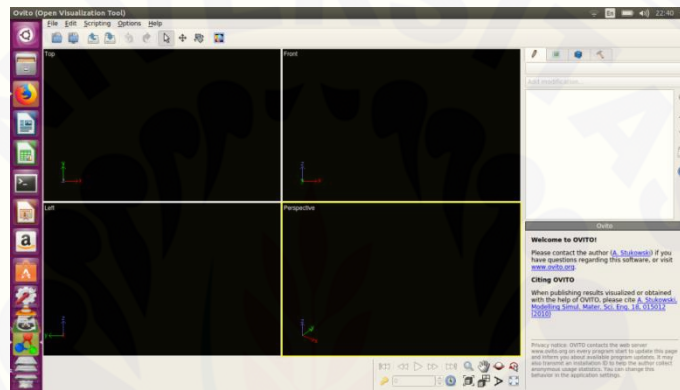


- 4) Jika proses running telah berhasil, maka terdapat output berupa file log simulasi dan file visual .

### 3.4.4 Prosedur Visualisasi

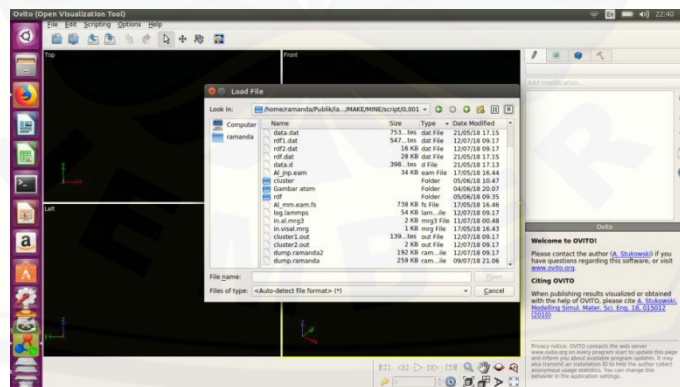
Adapun tahapan untuk melakukan simulasi dinamika molekul adalah sebagai berikut:

1. Menginstall aplikasi *OVITO* yang sebelumnya telah di download pada website resmi [www.ovito.org](http://www.ovito.org).
2. Buka Aplikasi *OVITO* yang telah terinstal.



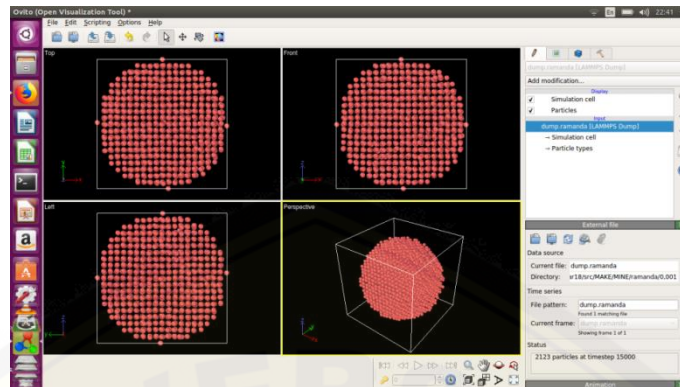
Gambar 3.5 Aplikasi OVITO

2. Buka file dengan tipe dump hasil dari simulasi dengan *LAMMPS*.



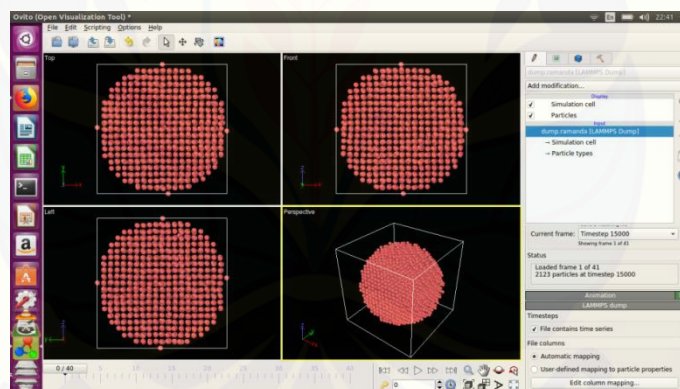
Gambar 3.6 File dump hasil simulasi

3. Terlihat tampilan output dari hasil proses *running script*.



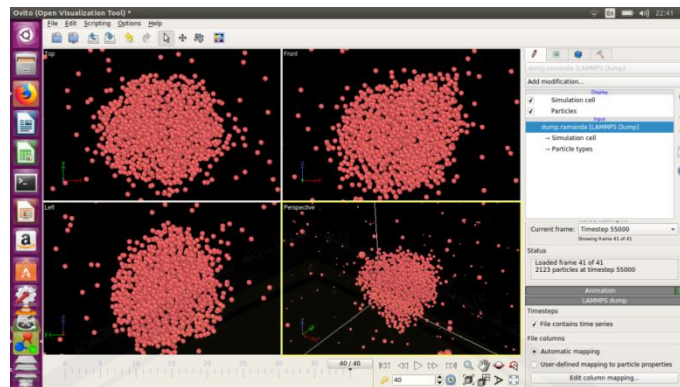
Gambar 3.7 Visualisasi Hasil Proses *Running Script*

4. Pilih Animation pada OVITO kemudian centang *file contains time series* agar dapat menampilkan langkah-langkah hasil simulasi. Langkah-langkah ini digunakan untuk mengetahui pergerakan atom hasil simulasi dengan LAMMPS.



Gambar 3.8 Visualisasi pada langkah awal

5. Pilih menu mulai agar simulasi dapat berjalan dan lakukan pengamatan hingga proses visualisasi selesai.



Gambar 3.9 Proses Visualisasi pada Akhir Simulasi

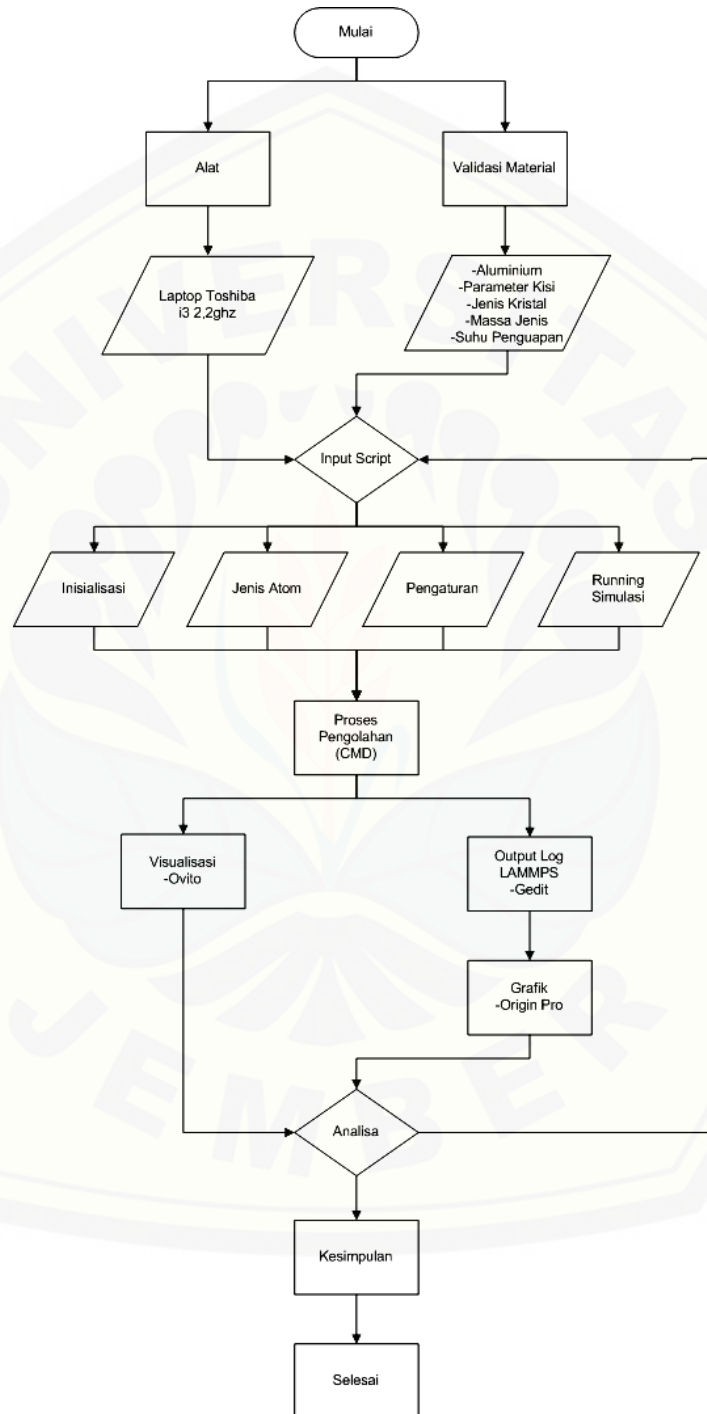
#### 3.4.5 Prosedur Analisis

Adapun tahapan untuk melakukan simulasi dinamika molekul adalah sebagai berikut:

1. Buka aplikasi Origin.
2. Kemudian buka file log hasil simulasi untuk mengetahui nilai-nilai dari hasil running script.
3. Buat grafik temperatur terhadap jarak radial antar atom dengan variasi timestep yang digunakan 0,001, 0,0005 dan 0,0001ps pada masing-masing *input script*.
4. Buat grafik Densitas terhadap jarak radial antar atom dengan variasi timestep yang digunakan 0,001, 0,0005 dan 0,0001ps pada masing-masing *input script*.
5. Buat grafik temperatur terhadap diameter partikel aluminium dengan variasi timestep yang digunakan 0,001, 0,0005 dan 0,0001ps pada masing-masing *input script*.

### 3.5 Diagram Alir Penelitian

Dalam memudahkan penelitian ini, maka prosedur penelitian disajikan seperti pada gambar 3.10



Gambar 3.10 Diagram Alir Penelitian

## BAB 5. PENUTUP

### 5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian menggunakan simulasi dinamika molekul pada pengaruh penguapan terhadap ukuran diameter partikel dari material aluminium dapat disimpulkan :

1. Diperoleh hasil dengan menggunakan diameter awal partikel aluminium seri 1010 sebesar 2,038nm pada *timestep* 0,001 psec titik temperatur penguapan sebesar 1040 °C yang memiliki nilai jarak radial antar atom 9,4 Å, sedangkan pada *timestep* 0,0005 psec titik temperatur penguapan sebesar 1272 °C yang memiliki nilai jarak radial antar atom 9,4 Å dan penggunaan *timestep* 0,0001 psec memiliki nilai temperatur penguapan 2026 °C diikuti dengan nilai jarak radial antar atom 9,4 Å.
2. Hasil simulasi memperlihatkan nilai densitas partikel pada material aluminium seri 1010 dalam keadaan menguap dengan menggunakan *timestep* 0,001psec nilai densitas penguapan sebesar 0,439 g/m<sup>3</sup> dengan nilai jarak radial antar atom 9,4 Å, sedangkan pada *timestep* 0,0005 psec nilai densitas penguapan aluminium seri 1010 sebesar 0,439 g/m<sup>3</sup> serta memiliki nilai jarak radial antar atom 9,4 Å dan dengan menggunakan *timestep* 0,0001psec nilai densitas penguapan aluminium sebesar 0,439 g/m<sup>3</sup> serta memiliki nilai jarak radial antar atom 9,4 Å.
3. Berdasarkan hasil dari pengaruh temperatur pada ukuran diameter partikel material aluminium seri 1010 dalam kondisi penguapan dengan menggunakan temperatur sebesar 3000 °C pada penggunaan *timestep* 0,001 psec memiliki nilai diameter 1,86 nm<sup>3</sup>, sedangkan pada *timestep* 0,0005 psec memiliki nilai diameter 1,91 nm<sup>3</sup> dan dengan menggunakan *timestep* 0,0001 psec memiliki nilai diameter sebesar 2,016 nm<sup>3</sup> dan diperoleh bahwa semakin lama waktu tinggal partikel aluminium berada pada pengaruh energi panas, maka akan menghasilkan penurunan ukuran diameter partikel aluminim.



4. Visualisasi dari simulasi dinamika molekul pada partikel material aluminium dengan menggunakan timestep 0.001, 0.0005 dan 0.0001 berhasil menggambarkan proses penguapan yang ditandai dengan lepasnya atom-atom aluminium dari susunan molekul pada partikel aluminium.

## 5.2 Saran

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

1. Perlu dilakukan proses penelitian simulasi menggunakan ukuran partikel seperti ukuran yang dilakukan secara experimental.
2. Dibutuhkan waktu simulasi seperti yang digunakan pada sintesa waktu yang dilakukan secara experimental.
3. Dibutuhkan komputer dengan spesifikasi yang tinggi dalam proses simulasi yang bertujuan sebagai pendekatan proses sintesa nanopartikel aluminium secara experimental.



**Daftar Pustaka**

- Abdullah, M., Yudistira, V, Nirmin dan Khairurrijal. 2008. *Sintesis Nanomaterial. Jurnal Nanosains & Nanoteknologi*. 1: 33-57.
- Alavi, S., dan D. L. Thompson. 2006. *Molecular Dynamics Simulations of the Melting of Aluminum Nanoparticles. J. Phys. Chem. A*. 110: 1518-1523.
- A. I. Rusanov. 1976. The Molecular Dynamics Simulation of a Small Drop. *Department of Chemistry, Leningrad State University, Leningrad )9004, USSR*
- Askeland, D. R., Fulay, P. P., & Wright, J. W. 2010. *The Science and Engineering of Materials*. USA: Cengage Learning, Inc.
- B.H. Kear, Scientific American, p. 159 (October 1986).
- C. R. Vestal, Z. J. Chang. 2004. *Int. J. Nanobiotechnology*. Vol 1. Nos 1 /2.
- Douglas M. Considin P. E., 1983. "Scientific Encyclopedia", Australia, Van Mostran Reinold Company.
- D.R. Warren and J.H. Seinfeld, *Aerosol Sci. Technol.* 2, 135 (1984).
- Donguk Suh and. 2014. *Nanoscale droplet vaporisation by molecular dynamics*. Department of Mechanical Engineering, Keio University, 3-14-1 Hiyoshi, Kohokuku, Yokohama 223-8522, Japan.
- Hosokawa, M. *et al.*, 2007, *Nanoparticle Technology Handbook*, 1<sup>st</sup> edition. Elsevier.UK.
- Ilyin, A. P.; Gromov, A. A.; Vereshchagin, V. I.; Popenko, E. M.; Surgin, V. A.; Lehn, H. 2001. *Combust. Expl. Shock WaVes*.
- Jabbar, A. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbon Nanotube* Dengan Variasi Temperatur. *Tesis*. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.

- Jian-hong, Sun You-yi, GAO Jian-feng, XU Chun-yan. 2009. Synthesis of Crystalline  $\text{-Al}_2\text{O}_3$  with high purity. Youth Science Foundation of Shanxi Province. DOI: 10.1016/S1003-6326(08)60435-5.
- Kittel, C. 2005. *Introduction to Solid State Physics*. Amerika: John Wiley & Sons, Inc.
- Kong Peter, Kawczak Alex. 2008. *Nanoparticles for Nanocomposite Energy Applications*. INL U.S. Department of Energy National Laboratory Operated by Battelle Energy Alliance.
- Koumoutsakos P, Walther J.H. 2001. *Molecular Dynamics Simulation of Nanodroplet Evaporation*. Institute of Computational Sciences, Zürich, Switzerland.
- Kwon, Y. S.; Gromov, A. A.; Ilyin, A. P.; Popenko, E. M.; Rim, G. H. *Combust. Flame* **2003**, *133*, 385.
- Laha T, Balani K, Agarwal A, Patil S, Seal S. 2005. *Synthesis of Nanostructured Spherical Aluminum Oxide Powders by Plasma Engineering*. Department of Mechanical & Materials Engineering, Florida International University, Miami, FL 33174.
- Lyle N. Long. 1996. *Molecular Dynamics Simulation of Droplet Evaporation*. Department of Aerospace Engineering. The Pennsylvania State University, University Park, USA
- L.G Zhou and Hancheng Huang, 2012. *Arespon Embedded Atom Method of Interatomic Potentials*, USA department of mechanical engineering university of Connecticut.
- Mahmoud K Adel. 2014. Production of Alumina Nanoparticles ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) Using Pulsed Laser Ablation Technique in Distilled Water Solution. Mechanical Engineering Department, College of Engineering, University of Diyala, Iraq.
- Markus. J Buhler. 2011. *Introduction to Modeling and Simulation*. Laboratory for Atomistic and Molecular Mechanics Department of Civil and Environmental Engineering Massachusetts Institute of Technology.

- Masaya Shigeta. 2011. *Thermal Plasma Fast-Track Nanoparticle Production*. Department of Mechanical Systems and Design, Graduate School of Engineering, Tohoku University in Japan.
- Minton, P. E. 1986. *Handbook of Evaporation Technology*. united states: noyes publications.
- M. S. Korilie. 1999. Three-Dimensional Computer Simulation of Liquid Drop Evaporation Department of Mathematical Sciences, Montclair State University Upper Montclair, NJ 07043, U.S.A.
- Muhammad Nur. 2011. Fisika Plasma, Universitas Diponegoro, Indonesia.
- Nurdin WB, Schotte KD. 2001, Dynamical Temperature Study For Classical Planar Spin Systems, Cond-Mat/0109982, Physica A 308, 209-226.
- Pratsinis, S. P. a. S. E. 1995. Nano Structured Material. *Modeling The Synthesis Of Aluminum Particle By Evaprator –Condensation In An Aerosol Flow Reactor*,5 ,13.
- Pokropivny, V., Lohmus, R., Hussainova, I., Pokropivny, A., Vlassov, S. 2007. *Introduction in Nanomaterials and Nanotechnology*. Tartu University Press, Ukraina, 225 p.
- Puri, R.K. dan Babbar, V.K. 2001. *Solid State Physics and Electronics*. New Delhi: S. Chand & Company Ltd.
- Rozy F. 2015. Rancang Bangun Reaktor Thermal Plasma Portabel untuk Sintesa Nanopartikel Alumina. Universitas Jember. Desember 2015. Universitas Jember.
- Takayuki Watanabe, Manabu Tanaka. 2009. Thermal Plasma Processing for Functional Nanoparticle Synthesis, pp. 45-47, *16TH ASEAN REGIONAL SYMPOSIUM ON CHEMICAL ENGINEERING December 1-2. 2009. Manila Hotel, Philippines*.
- Vladimir , P 2007. *Introduction To Nanomaterials and Nanotechnology*. University of Tartu Institute of Physics.

- Vollath Dieter. 2008. *Plasma Synthesis Of Nanopowders*. Springer Science Business Media B.V.
- Santoso, m. 2012. *simulasi dinamika molekuler adsorpsi hidrogen pada carbon nanotubes (CNT) dengan variasi chirality*. (Sarjana Teknik), Universitas Indonesia, Jakarta.
- Surdia, Tata dkk. 1992. *Pengetahuan Bahan Teknik Cet.2*. Pradnya Paramitha. Jakarta.
- Shan Lin Zhang. 2015. *Dominant Factors Influencing the Electrochemical Performance of Plasma-Sprayed LSGM Electrolyte*.
- S.Panda. 1995. *Modeling The Synthesis Of Aluminum Particles by Evaporation – Condensation in an Aerosol Flow Reactor*. University of Cincinnati.
- Wei, Y. 2015. *EFFECT OF PARTICLES ON EVAPORATION OF DROPLET CONTAINING PARTICLES* (Doctor), university of Central Florida, Florida.
- Yu. I.K. Rhee J.H. Cho S. Yoon H.K. 2009. *Design and Installation of DC Plasma Reactor for SiC Nanoparticle Production*. Material Research Team, National Fusion Research Center, Daejeon 305-333, South Korea.

**LAMPIRAN**

Lampiran A. Script Timestep 0,001 psec

**A1. Input Script**

```

#14/5/2018 PROGRAM EVAPORASI MRG
#-----INISIALISASI-----
units          metal
boundary       s s s
atom_style     atomic
#-----SETTING ATOM-----
lattice        fcc 4.05
region         box block -100 100 -100 100 -100 100
create_box     1 box
region         partikel sphere -05 -05 -05 5
create_atoms   1 region partikel
group          all type 1
mass           1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style     eam
pair_coeff     * * Al_jnp.eam
neighbor       3.0 bin
neigh_modify   delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity       all create 300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute       1 all centro/atom fcc
compute       rdf1 all rdf 100 1 1
compute       cluster all cluster/atom 6
compute       cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute       size1 all property/chunk cc1 count
compute       size2 all com/chunk cc1

variable      Temperatur equal temp
variable      Tenaga equal etotal/atoms
variable      Densitas equal density

fix           nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
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 rdf1.dat
fix           5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.out

```



```
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data1.dat
```

```
timestep    0.001
thermo      1000
run         15000
unfix      nvt1
```

```
fix          1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01
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 rdf2.dat
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster2.out
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data2.dat
```

```
timestep    0.001

dump        id all atom 1000 dump.ramanda
thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo      1000

run         40000

#-----SELESAI-----
print      "Simulasi Selesai"
```

#### Lampiran A2. File **Log**

```
LAMMPS (30 Mar 2018)
#14/5/2018 PROGRAM FINAL MELTING DAN EVAPORASI MRG
#-----INISIALISASI-----
units      metal
boundary   s s s
atom_style atomic
#-----SETTING ATOM-----
lattice    fcc 4.05
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05
region     box block -100 100 -100 100 -100 100
create_box 1 box
Created orthogonal box = (-405 -405 -405) to (405 405 405)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
```

```

region      partikel sphere -05 -05 -05 5
#create_box 1 partikel
create_atoms 1 region partikel
Created 2123 atoms
  Time spent = 1.37058 secs
group      all type 1
2123 atoms in group all
mass       1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style  eam
pair_coeff  * * Al_jnp.eam
Reading potential file Al_jnp.eam with DATE: 2007-06-11
neighbor    3.0 bin
neigh_modify delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity    all create 300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute    1 all centro/atom fcc
compute    rdf1 all rdf 100 1 1
compute    cluster all cluster/atom 6
compute    cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute    size1 all property/chunk cc1 count
compute    size2 all com/chunk cc1

variable    Temperatur equal temp
variable    Tenergi equal etotal/atoms
variable    Densitas equal density

#1 Nose-Hoover thermostat (thermal relaxation at 300 K)
fix        nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
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 rdf1.dat mode vector
fix        5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.out mode vector
fix        6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file data1.dat

timestep    0.001

thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo      1000
run         15000
Neighbor list info ...
  update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

```

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000  
 master list distance cutoff = 9  
 ghost atom cutoff = 9  
 binsize = 4.5, bins = 181 181 181  
 4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam, perpetual

attributes: half, newton on  
 pair build: half/bin/atomonly/newton  
 stencil: half/bin/3d/newton  
 bin: standard

(2) compute centro/atom, occasional

attributes: full, newton on  
 pair build: full/bin/atomonly  
 stencil: full/bin/3d  
 bin: standard

(3) compute rdf, occasional, copy from (1)

attributes: half, newton on  
 pair build: copy  
 stencil: none  
 bin: none

(4) compute cluster/atom, occasional

attributes: full, newton on  
 pair build: full/bin/atomonly  
 stencil: full/bin/3d  
 bin: standard

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 6.735 | 6.735 | 6.735 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy	Pxx	Pyy	Pzz	CPU
0	300	67230.479	1.4148389	2123	-6831.2187	-6748.9316	-21472.626	-				
		7649.9653	-21484.843	-21475.127	-21457.908	0						
	1000	292.99359	60893.675	1.5620719	2123	-6776.6466	-6696.2814					
		11147.169	-6272.6127	10757.812	11540.319	11143.375	7.9225161					
	2000	302.5697	60893.675	1.5620719	2123	-6770.5764	-6687.5846	-				
		5097.787	-6881.3354	-4783.3398	-4989.0423	-5520.9789	15.937463					
	3000	298.49344	60893.675	1.5620719	2123	-6784.5563	-6702.6825					
		1005.3552	-6664.4721	1027.4295	396.45191	1592.1843	23.940604					
	4000	294.66723	60893.675	1.5620719	2123	-6779.2791	-6698.4548					
		1305.9796	-6648.8186	1573.7449	1333.7583	1010.4356	31.960571					
	5000	303.23941	60893.675	1.5620719	2123	-6768.8232	-6685.6476	-				
		4912.4798	-6872.3555	-5342.7881	-4827.6307	-4567.0205	39.965411					
	6000	287.77333	60893.675	1.5620719	2123	-6777.7372	-6698.8038					
		6484.4858	-6452.349	6061.4704	6645.526	6746.461	47.978194					
	7000	294.06042	60893.675	1.5620719	2123	-6768.0649	-6687.407	-				
		5760.9292	-6906.3618	-5105.2633	-6170.0037	-6007.5208	55.979713					

```

8000 298.75539 60893.675 1.5620719 2123 -6777.7091 -6695.7635
4162.8161 -6537.548 3949.1832 4218.0287 4321.2362 63.976838
9000 299.71176 60893.675 1.5620719 2123 -6771.1661 -6688.9581 -
3017.3189 -6803.6369 -2771.2426 -3003.4914 -3277.2227 71.975848
10000 298.62384 60893.675 1.5620719 2123 -6775.2386 -6693.329
1216.3982 -6647.0976 802.97057 1420.279 1425.9451 79.957402
11000 291.04751 60893.675 1.5620719 2123 -6776.7236 -6696.8922
49.303401 -6695.0183 83.117603 -30.235267 95.027867 87.959971
12000 302.00677 60893.675 1.5620719 2123 -6772.856 -6690.0186 -
1966.103 -6764.744 -1905.8649 -1841.7125 -2150.7318 95.942822
13000 296.77163 60893.675 1.5620719 2123 -6775.8147 -6694.4132
3653.7426 -6555.546 3387.714 3793.8194 3779.6944 103.94038
14000 304.34604 60893.675 1.5620719 2123 -6771.2703 -6687.7912 -
2928.1893 -6799.0824 -2332.0654 -3207.0155 -3245.4872 111.93983
15000 300.9005 60893.675 1.5620719 2123 -6775.8624 -6693.3284
3409.3098 -6563.7513 3123.733 3663.8199 3440.3764 119.94408
Loop time of 119.944 on 1 procs for 15000 steps with 2123 atoms

```

Performance: 10.805 ns/day, 2.221 hours/ns, 125.058 timesteps/s  
99.9% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	117.56	117.56	117.56	0.0	98.01
Neigh	0.021191	0.021191	0.021191	0.0	0.02
Comm	0.0076025	0.0076025	0.0076025	0.0	0.01
Output	0.0013323	0.0013323	0.0013323	0.0	0.00
Modify	2.0765	2.0765	2.0765	0.0	1.73
Other		0.2771			0.23

```

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 150178 ave 150178 max 150178 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 = 150178
Ave neighs/atom = 70.7386
Neighbor list builds = 3
Dangerous builds = 0

```

```

unfix      nvt1

fix        1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01 #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 rdf2.dat mode vector
fix        5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster2.out mode vector
fix        6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file data2.dat

timestep   0.001

dump       id all atom 1000 dump.ramanda
thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo     1000

run        40000
WARNING: Fix recenter should come after all other integration fixes
(./fix_recenter.cpp:131)
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 8.197 | 8.197 | 8.197 Mbytes
Step Temp Volume Density Atoms PotEng TotEng Press Enthalpy Pxx Pyy Pzz CPU
 15000   300.9005   64654.174   1.4712166   2123  -6775.8624  -6693.3284
3211.0131 -6563.7513  2942.0465  3450.7201  3240.2728    0
 16000   367.87283   64989.425   1.4636273   2123  -6750.3542  -6649.4503  -
2922.0257 -6767.9771 -2394.2047 -3343.3146 -3028.5577  7.996897
 17000   437.14936   64989.425   1.4636273   2123  -6732.2236  -6612.3179
1048.9855 -6569.7677  733.98451  1272.6034  1140.3685  15.999678
 18000   522.0624    63328.247   1.50202     2123  -6703.6839  -6560.4874
1030.5904 -6519.7518  779.23363  1203.7887  1108.7487  24.070633
 19000   600.17447    67339.19   1.4125548   2123  -6674.5068  -6509.8849  -
3010.5213 -6636.4166 -2435.9304 -2955.4713 -3640.1621  32.058138
 20000   693.31431    62914.089   1.5119077   2123  -6648.7897  -6458.6205
2663.7085 -6354.0223  2147.857  2850.3713  2992.8972  40.076613
 21000   775.33675    64018.136   1.4858336   2123  -6614.8337  -6402.1665  -
1282.0216 -6453.3922 -1839.5305 -766.85045 -1239.6838  48.124573
 22000   818.96819    60580.991   1.5701344   2123  -6583.5642  -6358.9294  -
664.91561 -6384.0709 -455.33491 -1138.1719 -401.24001  56.110353
 23000   899.43697    61402.483   1.5491278   2123  -6548.3539  -6301.6473
460.57104 -6283.9962  1083.4584 -615.05154  913.30626  64.058012
 24000   979.37191    63959.952   1.4871852   2123  -6494.9036  -6226.2717
733.70238 -6196.9818  112.42935  684.37558  1404.3022  71.976021
 25000  1037.4603    61712.425   1.5413476   2123  -6449.6554  -6165.0903  -
22.664148 -6165.9633 -330.61136  501.45367 -238.83475  79.929831

```



26000	1158.3422	71209.125	1.335788	2123	-6364.0763	-6046.3545
481.45939	-6024.956	908.46717	364.45725	171.45377	87.749613	
27000	1208.739	74646.44	1.2742777	2123	-6295.3112	-5963.7661 -
1326.5585	-6025.5713	-1601.7221	-1213.8919	-1164.0613	95.428993	
28000	1318.0627	86110.984	1.1046244	2123	-6253.5402	-5892.0088
306.23684	-5875.5497	-97.202369	614.7475	401.16538	103.01615	
29000	1365.9876	139750.75	0.68064249	2123	-6210.7945	-5836.1177
213.47855	-5817.4969	156.83497	-119.39527	602.99595	110.5504	
30000	1438.9011	216407.47	0.43954257	2123	-6179.3722	-5784.696 -
606.24321	-5866.5818	-782.97437	-640.1607	-395.59456	118.05236	
31000	1527.3354	374294.8	0.25413202	2123	-6131.7701	-5712.8373 -
286.95139	-5779.8739	-237.06667	-330.18471	-293.60277	125.47171	
32000	1581.9211	664511.8	0.14314312	2123	-6114.8511	-5680.9459 -
78.396982	-5713.4615	-91.768074	-115.55731	-27.865556	132.82014	
33000	1635.7435	1218021	0.078094137	2123	-6083.3898	-5634.7217
57.249957	-5591.1986	8.3349351	57.93454	105.4804	140.11447	
34000	1754.5678	2050266.1	0.046394122	2123	-6046.4257	-5565.1653
4.988173	-5558.782	-3.6933916	-10.068111	28.726021	147.31352	
35000	1833.8465	3379686.1	0.028144713	2123	-6011.47	-5508.4642
9.370938	-5488.6969	8.3217333	2.29291	17.498171	154.45367	
36000	1923.6133	5615640.3	0.01693846	2123	-5961.8323	-5434.2043 -
18.422701	-5498.776	-12.595585	-16.73019	-25.942327	161.39934	
37000	1951.5522	9077220.6	0.010479011	2123	-5919.3538	-5384.0625 -
3.7983603	-5405.5823	2.2174492	-9.8582231	-3.7543069	168.35109	
38000	2027.3478	14471868	0.0065727726	2123	-5913.5375	-5357.4562
4.385191	-5317.8464	3.448929	8.2121288	1.4945151	175.18758	
39000	2075.3783	21698196	0.0043837882	2123	-5831.7801	-5262.5245
2.1606707	-5233.2626	1.0088686	1.9866589	3.4864846	181.91475	
40000	2148.1174	32040088	0.0029687901	2123	-5774.1198	-5184.9127 -
1.2017959	-5208.946	-0.9802622	-2.321621	-0.30350452	188.52008	
41000	2309.3559	46473065	0.0020467834	2123	-5741.3209	-5107.8876
3.0552104	-5019.2676	3.5693846	2.1325568	3.4636899	194.98544	
42000	2369.3372	64897184	0.0014657076	2123	-5727.7366	-5077.851
1.1380881	-5031.752	1.36452	1.7542594	0.29548489	201.3657	
43000	2328.5618	90902921	0.0010463943	2123	-5679.9779	-5041.2767
0.53997213	-5010.6402	0.098408746	0.53239806	0.98910957	207.72584	
44000	2447.3908	1.2754256e+08	0.00074579257	2123	-5634.4507	-4963.1558
0.96877303	-4886.0358	1.0306272	0.64511431	1.2305776	213.99289	
45000	2506.6656	1.7721792e+08	0.00053674197	2123	-5566.5038	-4878.9504
1.1027337	-4756.9762	1.3152566	0.59406293	1.3988816	220.24914	
46000	2653.5113	2.402817e+08	0.00039586992	2123	-5523.6564	-4795.8247
0.87285838	-4664.9203	0.85915103	1.1293666	0.63005751	226.39059	
47000	2693	3.2234972e+08	0.00029508416	2123	-5509.6889	-4771.0259
0.46982959	-4676.4986	0.56290953	0.65208664	0.19449262	232.5748	

```

48000 2714.2334 4.2455521e+08 0.00022404694 2123 -5476.9681 -4732.4809
0.4964023 -4600.941 0.60617114 0.52507282 0.35796294 238.64718
49000 2892.0336 5.5043216e+08 0.00017281021 2123 -5431.315 -4638.059
0.64065911 -4417.9588 0.58481006 0.673235 0.66393228 244.8351
50000 2973.1169 7.0816803e+08 0.00013431882 2123 -5379.3256 -4563.8293
0.23419495 -4460.3143 0.3066201 0.20531279 0.19065195 251.1184
51000 3041.3734 8.9853462e+08 0.00010586158 2123 -5338.3967 -4504.1783
0.45009792 -4251.7539 0.43720965 0.41383349 0.49925061 257.45481
52000 3095.596 1.1268704e+09 8.4411036e-05 2123 -5340.3442 -4491.2531
0.3425334 -4250.3366 0.36485552 0.34773478 0.31500991 264.08242
53000 3209.1145 1.3988548e+09 6.7998693e-05 2123 -5284.4507 -4404.2226
0.23291832 -4200.8625 0.26299984 0.18663173 0.24912339 270.89428
54000 3232.0874 1.7197208e+09 5.5311476e-05 2123 -5243.027 -4356.4976
0.19178074 -4150.6468 0.21220742 0.11140451 0.25173031 278.01998
55000 3194.7077 2.103974e+09 4.5209825e-05 2123 -5234.0571 -4357.7806
0.15316015 -4156.6511 0.23196264 0.083898689 0.14361911 285.53873

```

Loop time of 285.539 on 1 procs for 40000 steps with 2123 atoms  
Performance: 12.103 ns/day, 1.983 hours/ns, 140.086 timesteps/s  
97.2% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

#### MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	%total
Pair	262.11	262.11	262.11	0.0	91.79
Neigh	16.349	16.349	16.349	0.0	5.73
Comm	0.48138	0.48138	0.48138	0.0	0.17
Output	0.11295	0.11295	0.11295	0.0	0.04
Modify	5.8766	5.8766	5.8766	0.0	2.06
Other		0.6137			0.21

```

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 80775 ave 80775 max 80775 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 = 80775
Ave neighs/atom = 38.0476
Neighbor list builds = 842
Dangerous builds = 0

```

```
#-----SELESAI-----
print      "Simulasi Selesai"
Simulasi Selesai
Total wall time: 0:06:46
```

## B. Script Timestep 0,0005 ps

### B1. Input Script

```
#14/5/2018 PROGRAM EVAPORASI MRG
#-----INISIALISASI-----
units      metal
boundary   s s s
atom_style atomic
#-----SETTING ATOM-----
lattice    fcc 4.05
region     box block -100 100 -100 100 -100 100
create_box 1 box
region     partikel sphere -05 -05 -05 5
create_atoms 1 region partikel
group      all type 1
mass       1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style eam
pair_coeff  * * Al_jnp.eam
neighbor   3.0 bin
neigh_modify      delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity   all create 300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute    1 all centro/atom fcc
compute    rdf1 all rdf 100 1 1
compute    cluster all cluster/atom 6
compute    cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute    size1 all property/chunk cc1 count
compute    size2 all com/chunk cc1

variable   Temperatur equal temp
variable   Tenergy equal etotal/atoms
variable   Densitas equal density

#1 Nose-Hoover thermostat (thermal relaxation at 300 K)
fix        nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
```

```

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 rdf1.dat mode
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.out
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data1.dat

timestep    0.0005
thermo      1000
run         15000
unfix       nvt1

fix          1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01 #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 rdf2.dat mode
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster2.out
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data2.dat

timestep    0.0005

dump        id all atom 1000 dump.ramanda
thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo      1000

run         40000

#-----SELESAI-----
print      "Simulasi Selesai"

```

## B2. File Log

```

LAMMPS (30 Mar 2018)
#14/5/2018 PROGRAM FINAL MELTING DAN EVAPORASI MRG
#-----INISIALISASI-----
units      metal
boundary    s s s
atom_style  atomic
#-----SETTING ATOM-----
lattice     fcc 4.05
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05

```

```

#region      box block -100 100 -100 100 -100 100
#create_box  1 box
region      partikel sphere -05 -05 -05 5
create_box   1 partikel
Created orthogonal box = (-40.5 -40.5 -40.5) to (0 0 0)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
create_atoms 1 region partikel
Created 2123 atoms
  Time spent = 0.000854969 secs
group       all type 1
2123 atoms in group all
mass        1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style   eam
pair_coeff   * * Al_jnp.eam
Reading potential file Al_jnp.eam with DATE: 2007-06-11
neighbor     3.0 bin
neigh_modify delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity     all create 3300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute      1 all centro/atom fcc
compute      rdf1 all rdf 100 1 1
compute      cluster all cluster/atom 6
compute      cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute      size1 all property/chunk cc1 count
compute      size2 all com/chunk cc1

variable     Temperatur equal temp
variable     Tenergi equal etotal/atoms
variable     Densitas equal density

fix          nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
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 rdf1.dat
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.out
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data1.dat

timestep     0.0005

thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu

```



```

thermo      1000
run         15000
Neighbor list info ...
  update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
  max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
  master list distance cutoff = 9
  ghost atom cutoff = 9
  binsize = 4.5, bins = 10 10 10
  4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0
  (1) pair eam, perpetual
      attributes: half, newton on
      pair build: half/bin/atomonly/newton
      stencil: half/bin/3d/newton
      bin: standard
  (2) compute centro/atom, occasional
      attributes: full, newton on
      pair build: full/bin/atomonly
      stencil: full/bin/3d
      bin: standard
  (3) compute rdf, occasional, copy from (1)
      attributes: half, newton on
      pair build: copy
      stencil: none
      bin: none
  (4) compute cluster/atom, occasional
      attributes: full, newton on
      pair build: full/bin/atomonly
      stencil: full/bin/3d
      bin: standard

```

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 6.735 | 6.735 | 6.735 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy	Pxx	Pyy	Pzz	CPU
0	3300	66469.991	1.4310262	2123	-6831.2187	-5926.0616	-					
8495.4558	-6278.5152	-8631.3827	-8523.2789	-8331.7057	0							
1000	295.93681	61651.337	1.5428748	2123	-6782.2829	-6701.1104						
7741.9648	-6403.2016	7654.1838	7543.0919	8028.6186	8.6273489							
2000	303.22613	65272.044	1.45729	2123	-6783.9888	-6700.8169						
4687.3804	-6509.8548	4412.4595	4855.6406	4794.041	18.212759							
3000	303.93533	65272.044	1.45729	2123	-6760.2537	-6676.8873	-					
7493.9226	-6982.1867	-7511.7515	-7489.2213	-7480.795	28.454932							
4000	308.56192	65272.044	1.45729	2123	-6783.4773	-6698.8418	-					
459.52884	-6717.5629	-501.93304	-451.57309	-425.08039	37.549753							
5000	296.9148	65272.044	1.45729	2123	-6776.3549	-6694.9141						
7942.5973	-6371.3358	8073.0646	8079.2211	7675.5064	46.602459							

```

6000 301.77808 65272.044 1.45729 2123 -6774.594 -6691.8192 -
4220.8708 -6863.7759 -4446.3599 -4352.9154 -3863.3371 54.332799
7000 300.17084 65272.044 1.45729 2123 -6771.4169 -6689.083 -
5432.0876 -6910.3841 -5542.367 -5232.4208 -5521.4749 64.223356
8000 293.47795 65272.044 1.45729 2123 -6778.7238 -6698.2257
6547.7834 -6431.4716 6871.9694 6254.8115 6516.5692 73.613307
9000 304.71197 65272.044 1.45729 2123 -6779.5441 -6695.9647
1507.0446 -6634.5683 1787.1298 1535.7018 1198.3022 83.944938
10000 299.92591 65272.044 1.45729 2123 -6764.4847 -6682.218 -
6289.4304 -6938.4469 -6201.3803 -6472.398 -6194.5129 94.372123
11000 310.36079 65272.044 1.45729 2123 -6781.4084 -6696.2795
864.60578 -6661.0558 603.53574 809.89068 1180.3909 104.84012
12000 304.87783 65272.044 1.45729 2123 -6777.6392 -6694.0142
5798.87 -6457.7705 5612.0996 5796.3431 5988.1674 115.34158
13000 295.23205 65272.044 1.45729 2123 -6772.8373 -6691.8581 -
3491.2386 -6834.0898 -3343.2203 -3812.2205 -3318.275 125.70353
14000 303.53055 65272.044 1.45729 2123 -6772.0003 -6688.7449 -
3830.7584 -6844.8085 -3448.6906 -3713.3547 -4330.2299 138.1887
15000 304.54628 65272.044 1.45729 2123 -6781.9329 -6698.3989
4629.7883 -6509.7831 4817.4682 4403.4655 4668.4313 150.66028
Loop time of 150.66 on 1 procs for 15000 steps with 2123 atoms
    
```

Performance: 4.301 ns/day, 5.580 hours/ns, 99.562 timesteps/s  
 97.0% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	%total
Pair	147.17	147.17	147.17	0.0	97.68
Neigh	0.018715	0.018715	0.018715	0.0	0.01
Comm	0.011395	0.011395	0.011395	0.0	0.01
Output	0.0019433	0.0019433	0.0019433	0.0	0.00
Modify	3.0634	3.0634	3.0634	0.0	2.03
Other		0.3955			0.26

```

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 148754 ave 148754 max 148754 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 = 148754
Ave neighs/atom = 70.0678
Neighbor list builds = 2
Dangerous builds = 0
unfix      nvt1

fix      1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01 #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 rdf2.dat mode vector
# Step, RDF g(r),radial distance (r)
fix      5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster2.out mode vector
fix      6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergi v_Densitas file
data2.dat

timestep  0.0005

dump      id all atom 1000 dump.ramanda
thermo_style  custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo    1000

run       40000
WARNING: Fix recenter should come after all other integration fixes
(../fix_recenter.cpp:131)
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 8.197 | 8.197 | 8.197 Mbytes
Step Temp Volume Density Atoms PotEng TotEng Press Enthalpy Pxx Pyy Pzz CPU
15000  304.54628  62629.196  1.5187852  2123  -6781.9329  -6698.3989
4825.1577  -6509.7831  5020.7574  4589.2844  4865.4314  0
16000  366.81357  62629.196  1.5187852  2123  -6755.952  -6655.3387
1547.1406  -6594.8608  1144.0928  1574.2612  1923.0678  13.610745
17000  454.6209  62629.196  1.5187852  2123  -6718.8604  -6594.1624  -
6549.5468  -6850.1846  -6736.9866  -6325.5836  -6586.0702  26.414042
18000  528.10678  62629.196  1.5187852  2123  -6707.1763  -6562.3218
2365.2473  -6469.8641  1960.3153  2823.1997  2312.2268  39.850791
19000  590.09181  62545.772  1.520811  2123  -6682.8815  -6521.0252
4443.0498  -6347.5774  4655.4701  4392.9082  4280.7712  51.059013
20000  678.77561  62694.49  1.5172034  2123  -6633.0635  -6446.8821  -
5711.1268  -6670.3632  -5287.4041  -6508.7448  -5337.2315  62.409497
21000  758.85452  65991.238  1.441408  2123  -6628.8779  -6420.7317
2056.5595  -6336.0251  2142.6059  1731.991  2295.0815  73.804465
22000  831.83278  63743.595  1.492233  2123  -6587.0399  -6358.8765
1697.7511  -6291.3304  542.9482  2253.5293  2296.7758  85.496815

```

23000	897.22675	67467.993	1.4098581	2123	-6535.3476	-6289.2472	-
3577.3771	-6439.8913	-3935.3568	-3380.7726	-3416.0019	99.269832		
24000	981.78269	61861.836	1.5376248	2123	-6516.9307	-6247.6375	
4090.3788	-6089.7033	3833.5522	4688.4961	3749.088	111.91169		
25000	1073.1665	65541.65	1.4512954	2123	-6438.5875	-6144.2286	-
419.62538	-6161.3946	-344.50603	-620.7699	-293.60023	123.51908		
26000	1141.8537	69001.994	1.3785152	2123	-6410.3984	-6097.1993	-
549.77291	-6120.8767	-704.83259	-16.688162	-927.79799	135.20975		
27000	1189.0117	70670.05	1.3459775	2123	-6339.1451	-6013.0111	
411.14904	-5994.8758	617.24876	733.99135	-117.793	147.01894		
28000	1271.2456	75336.959	1.262598	2123	-6276.5737	-5927.8837	-
1084.967	-5978.9006	-1050.1113	-1235.6895	-969.10023	158.19104		
29000	1320.659	78213.265	1.2161658	2123	-6247.0742	-5884.8306	-
203.39645	-5894.7598	-836.70435	337.12704	-110.61205	169.19577		
30000	1433.9991	88499.836	1.0748076	2123	-6191.0197	-5797.688	-
162.81669	-5806.6816	-199.30585	-394.6511	105.50688	179.97527		
31000	1492.5274	88482.923	1.075013	2123	-6175.0064	-5765.621	-
1294.6945	-5837.1227	-1658.39	-1174.6097	-1051.0839	191.05385		
32000	1546.599	103464.54	0.91935164	2123	-6118.7445	-5694.5279	-
512.16528	-5727.6022	-373.74353	-961.98061	-200.77172	201.9422		
33000	1605.073	133212.74	0.71404803	2123	-6087.2416	-5646.9861	
774.72391	-5582.5718	982.48477	890.68175	451.0052	213.55278		
34000	1721.5224	190958.66	0.49811984	2123	-6046.6892	-5574.4928	-
64.669858	-5582.2006	-410.92136	328.79135	-111.87956	224.84183		
35000	1736.043	326412.66	0.29141117	2123	-6017.1998	-5541.0205	
171.25146	-5506.1313	212.32856	340.95871	-39.532886	237.00132		
36000	1877.537	542404.52	0.17536781	2123	-5969.2861	-5454.2964	
15.033544	-5449.2069	55.218061	89.297715	-99.415144	248.24506		
37000	1932.9504	823887.45	0.11545302	2123	-5963.4581	-5433.2691	
112.68298	-5375.3241	192.66925	43.720815	101.65888	259.54457		
38000	1982.4045	1325711.4	0.071750381	2123	-5905.494	-5361.7402	-
51.26654	-5404.1604	-40.615783	-77.772425	-35.411412	269.66535		
39000	2031.0316	2081154.7	0.045705538	2123	-5877.9828	-5320.8911	
2.2588899	-5317.9569	-9.174832	-6.7592455	22.710747	281.90164		
40000	2098.3616	3148876.8	0.03020769	2123	-5828.6044	-5253.0447	
24.91456	-5204.0783	21.851589	25.677505	27.214586	294.21845		
41000	2216.6601	4680380.2	0.020323198	2123	-5770.1228	-5162.115	-
4.6668366	-5175.7481	-4.6579058	-12.418965	3.0763612	304.04368		
42000	2296.6202	6811808.5	0.01396403	2123	-5730.2164	-5100.2764	-
13.484702	-5157.6079	-4.122588	-17.378408	-18.953111	312.56633		
43000	2427.4208	9526645.3	0.009984658	2123	-5708.0512	-5042.2339	
6.4821736	-5003.6905	4.5101316	17.137186	-2.2007968	320.62066		
44000	2446.1058	13178401	0.0072178935	2123	-5651.1732	-4980.2308	
9.700504	-4900.4412	9.8766481	12.343826	6.8810378	328.60213		



```

45000 2470.5187 17672887 0.0053822725 2123 -5597.1725 -4919.5339
7.4736978 -4837.0949 4.6568238 11.713967 6.0503029 335.86494
46000 2610.4987 23609725 0.0040288608 2123 -5573.5105 -4857.4767
4.07279 -4797.46 1.4996672 8.0733003 2.6454025 341.50909
47000 2755.8301 31491014 0.0030205536 2123 -5545.0118 -4789.1151
6.665373 -4658.1062 7.3367935 5.1329427 7.5263827 346.10101
48000 2720.4773 40936862 0.0023235854 2123 -5480.1755 -4733.9757
2.4475391 -4671.4391 1.9119153 3.6489756 1.7817264 351.11898
49000 2802.0041 52856632 0.0017995906 2123 -5424.1958 -4655.634
2.5056415 -4572.9716 2.9737992 -0.41600334 4.9591288 355.63571
50000 2895.5853 67801683 0.0014029194 2123 -5392.7027 -4598.4725
1.1694109 -4548.9848 1.0971398 1.8862248 0.52486821 360.16472
51000 2960.5236 86345175 0.0011016284 2123 -5346.0354 -4533.9933
3.1131284 -4366.2193 2.1815759 3.477373 3.6804362 364.66023
52000 3060.9772 1.0797648e+08 0.00088093529 2123 -5305.5857 -4465.9901
2.862498 -4273.076 2.2394582 2.9152215 3.4328145 368.86112
53000 3158.0388 1.3439451e+08 0.0007077692 2123 -5257.8315 -4391.6129
1.7796962 -4242.3276 1.5255732 2.2832422 1.5302732 373.23186
54000 3248.4648 1.6653251e+08 0.00057118153 2123 -5194.7118 -4303.6903
1.5530845 -4142.2605 1.572417 0.9945266 2.09231 377.11076
55000 3278.4786 2.0520515e+08 0.00046353756 2123 -5175.4276 -4276.1736
1.303779 -4109.1869 1.3263178 1.0991911 1.485828 381.31917
    
```

Loop time of 381.319 on 1 procs for 40000 steps with 2123 atoms

Performance: 4.532 ns/day, 5.296 hours/ns, 104.899 timesteps/s  
 86.5% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	366.87	366.87	366.87	0.0	96.21
Neigh	3.6807	3.6807	3.6807	0.0	0.97
Comm	0.1134	0.1134	0.1134	0.0	0.03
Output	0.1964	0.1964	0.1964	0.0	0.05
Modify	9.5018	9.5018	9.5018	0.0	2.49
Other		0.9559			0.25

```

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 78576 ave 78576 max 78576 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 = 78576

Ave neighs/atom = 37.0118

Neighbor list builds = 420

Dangerous builds = 0

```
#-----SELESAI-----
print    "Simulasi Selesai"
Simulasi Selesai
Total wall time: 0:08:52
```

### C. Script Timestep 0,0001 ps

#### C1. Input Script

```
#14/5/2018 PROGRAM EVAPORASI MRG
#-----INISIALISASI-----
units      metal
boundary   s s s
atom_style atomic
#-----SETTING ATOM-----
lattice    fcc 4.05
region     box block -100 100 -100 100 -100 100
create_box 1 box
region     partikel sphere -05 -05 -05 5
create_atoms 1 region partikel
group      all type 1
mass       1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style eam
pair_coeff  * * Al_jnp.eam
neighbor   3.0 bin
neigh_modify      delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity   all create 300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute    1 all centro/atom fcc
compute    rdf1 all rdf 100 1 1
compute    cluster all cluster/atom 6
compute    cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute    size1 all property/chunk cc1 count
compute    size2 all com/chunk cc1

variable   Temperatur equal temp
```

```

variable      Tenergy equal etotal/atoms
variable      Densitas equal density

fix          nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
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 rdf1.dat
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergy v_Densitas file
data1.dat

timestep     0.0001
thermo       1000
run          15000
unfix       nvt1

fix          1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01
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 rdf2.dat
fix          5 all ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster2.
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergy v_Densitas file
data2.dat

timestep     0.0001

dump         id all atom 1000 dump.ramanda
thermo_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo       1000
run          40000

#-----SELESAI-----
print       "Simulasi Selesai"

```

**C1. File Log**

LAMMPS (30 Mar 2018)

#14/5/2018 PROGRAM FINAL MELTING DAN EVAPORASI MRG

```

#-----INISIALISASI-----
units       metal
boundary    s s s
atom_style  atomic
#-----SETTING ATOM-----

```

```

lattice      fcc 4.05
Lattice spacing in x,y,z = 4.05 4.05 4.05
#region      box block -100 100 -100 100 -100 100
#create_box  1 box
region       partikel sphere -05 -05 -05 5
create_box   1 partikel
Created orthogonal box = (-40.5 -40.5 -40.5) to (0 0 0)
  1 by 1 by 1 MPI processor grid
create_atoms 1 region partikel
Created 2123 atoms
  Time spent = 0.000673056 secs
group       all type 1
2123 atoms in group all
mass        1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style   eam
pair_coeff   * * Al_jnp.eam
Reading potential file Al_jnp.eam with DATE: 2007-06-11
neighbor     3.0 bin
neigh_modify delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity     all create 3300 458273253 mom yes rot yes dist uniform

compute      1 all centro/atom fcc
compute      rdf1 all rdf 100 1 1
compute      cluster all cluster/atom 6
compute      cc1 all chunk/atom c_cluster compress yes
compute      size1 all property/chunk cc1 count
compute      size2 all com/chunk cc1

variable     Temperatur equal temp
variable     Tenergy equal etotal/atoms
variable     Densitas equal density

fix          nvt1 all nvt temp 300.0 300.0 0.01
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 rdf1.dat fix          5 all
ave/time 1000 1 1000 c_size1 c_size2[*] file cluster1.out
fix          6 all ave/time 1000 1 1000 v_Temperatur v_Tenergy v_Densitas file
data1.dat

# Timestep to make the integration of the motion equation
timestep     0.0001

```

```

# Parameters to print out on the screen and log.lammps file
thermo_style    custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz
cpu
thermo          1000
run             15000
Neighbor list info ...
  update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
  max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
  master list distance cutoff = 9
  ghost atom cutoff = 9
  binsize = 4.5, bins = 10 10 10
  4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0
(1) pair eam, perpetual
  attributes: half, newton on
  pair build: half/bin/atomonly/newton
  stencil: half/bin/3d/newton
  bin: standard
(2) compute centro/atom, occasional
  attributes: full, newton on
  pair build: full/bin/atomonly
  stencil: full/bin/3d
  bin: standard
(3) compute rdf, occasional, copy from (1)
  attributes: half, newton on
  pair build: copy
  stencil: none
  bin: none
(4) compute cluster/atom, occasional
  attributes: full, newton on
  pair build: full/bin/atomonly
  stencil: full/bin/3d
  bin: standard
Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 6.735 | 6.735 | 6.735 Mbytes
Step Temp Volume Density Atoms PotEng TotEng Press Enthalpy Pxx Pyy Pzz CPU
  0      3300   66469.991   1.4310262   2123  -6831.2187  -5926.0616  -
8495.4558 -6278.5152 -8631.3827 -8523.2789 -8331.7057    0
  1000  310.55903  66469.991   1.4310262   2123  -6755.6103  -6670.4271  -
9855.4942 -7079.305  -9786.2857 -10125.45  -9654.747   4.931386
  2000  305.37655  66469.991   1.4310262   2123  -6781.7099  -6697.9481  -
2599.3397 -6805.7877 -2559.9665 -2730.1635 -2507.8891   9.913646
  3000  297.59959  66469.991   1.4310262   2123  -6785.2748  -6703.6462
6013.148  -6454.1769  5985.9901  5863.1565  6190.2974  15.01149

```

```

4000 303.23979 66469.991 1.4310262 2123 -6773.1872 -6690.0116
11156.464 -6227.1599 11462.057 10746.376 11260.959 20.112153
5000 297.18694 61625.348 1.5435255 2123 -6782.1685 -6700.6531
7962.7026 -6394.3795 7878.4995 7768.7574 8240.851 25.587927
6000 305.2662 61625.348 1.5435255 2123 -6779.669 -6695.9375 -
3243.29 -6820.6859 -3385.3576 -3109.8562 -3234.6562 31.093237
7000 299.47589 65288.943 1.4569128 2123 -6762.9776 -6680.8344 -
9731.7214 -7077.4036 -9812.8442 -9754.5946 -9627.7254 38.103594
8000 301.45003 65288.943 1.4569128 2123 -6763.0357 -6680.351 -
8646.1626 -7032.6835 -8921.9603 -8361.0383 -8655.4891 43.932758
9000 301.3827 65288.943 1.4569128 2123 -6776.1315 -6693.4652 -
3274.0509 -6826.8833 -3505.1634 -2968.9203 -3348.0689 50.991408
10000 302.86042 65288.943 1.4569128 2123 -6784.0844 -6701.0128
4516.2078 -6516.9766 4250.4742 4671.9095 4626.2396 57.844087
11000 297.73368 65288.943 1.4569128 2123 -6775.971 -6694.3056
10018.676 -6286.043 9956.7824 10035.953 10063.293 65.630174
12000 296.63784 65288.943 1.4569128 2123 -6782.8117 -6701.4469
6649.9138 -6430.4619 6495.7351 6646.2458 6807.7605 74.981174
13000 300.43758 65288.943 1.4569128 2123 -6780.324 -6697.9169 -
2741.7138 -6809.6422 -2610.0798 -2824.1857 -2790.876 85.234033
14000 301.7044 65288.943 1.4569128 2123 -6767.872 -6685.1174 -
6610.6016 -6954.5005 -6442.8787 -6738.6189 -6650.3072 94.437126
15000 303.22866 65288.943 1.4569128 2123 -6760.0943 -6676.9217 -
7552.0855 -6984.6703 -7558.4332 -7539.1944 -7558.6288 103.60566
Loop time of 103.606 on 1 procs for 15000 steps with 2123 atoms

```

Performance: 1.251 ns/day, 19.186 hours/ns, 144.780 timesteps/s  
100.0% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	%total
Pair	101.2	101.2	101.2	0.0	97.68
Neigh	0.011486	0.011486	0.011486	0.0	0.01
Comm	0.0087793	0.0087793	0.0087793	0.0	0.01
Output	0.0012863	0.0012863	0.0012863	0.0	0.00
Modify	2.1055	2.1055	2.1055	0.0	2.03
Other		0.2792			0.27

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 148759 ave 148759 max 148759 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 = 148759  
 Ave neighs/atom = 70.0702  
 Neighbor list builds = 2  
 Dangerous builds = 0  
 unfix nvt1

fix 1 all nvt temp 300.0 3300.0 0.01 #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 rdf2.dat mode vector  
 # Step, RDF g(r),radial distance (r)  
 fix 5 all ave/time 1000 1 1000 c\_size1 c\_size2[\*] file cluster2.out mode vector  
 fix 6 all ave/time 1000 1 1000 v\_Temperatur v\_Tenergi v\_Densitas file  
 data2.dat

timestep 0.0001

dump id all atom 1000 dump.ramanda  
 thermo\_style custom step temp vol density atoms pe etotal press enthalpy pxx pyy pzz  
 cpu  
 thermo 1000

run 40000

WARNING: Fix recenter should come after all other integration fixes  
 (./fix\_recenter.cpp:131)

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 8.197 | 8.197 | 8.197 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy	Pxx	Pyy	Pzz	CPU	
15000	303.22866	63001.658	1.5098062	2123	-6760.0943	-6676.9217	-	7826.2652	-6984.6703	-7832.8434	-7812.9061	-7833.046	0
16000	369.09258	63001.658	1.5098062	2123	-6757.3098	-6656.0714	-	2740.1196	-6763.8198	-2517.0595	-2842.7385	-2860.5608	7.615468
17000	442.8206	63001.658	1.5098062	2123	-6748.4122	-6626.9509	-	7207.1312	-6343.5482	7440.5586	6979.1719	7201.6633	16.714185
18000	518.84723	63001.658	1.5098062	2123	-6710.7814	-6568.4668	-	12970.07	-6058.4506	13148.977	12693.327	13067.907	26.072279
19000	596.31515	62578.526	1.520015	2123	-6692.1842	-6528.6209	-	6752.2155	-6264.8899	6785.334	6782.22	6689.0925	36.531941
20000	675.53745	62578.526	1.520015	2123	-6671.2649	-6485.9717	-	4024.1226	-6643.1477	-3926.6583	-4516.0112	-3629.6984	46.853089

21000	727.98658	65140.288	1.4602376	2123	-6612.2612	-6412.5818	-
9705.3303	-6807.175	-9688.2267	-9480.4235	-9947.3406	57.143815		
22000	803.78539	66626.434	1.427666	2123	-6540.4342	-6319.9639	-
10217.218	-6744.8464	-10308.559	-9877.8221	-10465.272	67.181398		
23000	915.92311	66322.274	1.4342134	2123	-6514.5166	-6263.2881	-
6458.9223	-6530.6559	-6818.6298	-6346.4271	-6211.71	77.129831		
24000	974.95388	64131.317	1.4832113	2123	-6527.6722	-6260.2521	
265.1516	-6249.6387	530.41854	986.95051	-721.91425	87.988484		
25000	1009.1808	64659.626	1.4710926	2123	-6520.5474	-6243.7391	
7928.6615	-5923.7592	8149.7647	8220.1087	7416.1112	100.42769		
26000	1104.7175	66739.494	1.4252475	2123	-6509.858	-6206.845	
10843.043	-5755.1724	10298.417	10977.492	11253.22	113.15917		
27000	1187.4614	69846.17	1.3618541	2123	-6477.6383	-6151.9294	
6909.1957	-5850.7261	6491.0048	7006.4973	7230.085	126.40508		
28000	1255.525	73067.811	1.3018085	2123	-6408.7316	-6064.3536	-
509.77627	-6087.6022	-181.63925	-719.0579	-628.63166	139.4189		
29000	1327.9394	73491.08	1.2943108	2123	-6330.629	-5966.3885	-
5778.1929	-6231.4314	-6087.7264	-5240.5625	-6006.2898	150.93156		
30000	1415.8512	73627.314	1.2919159	2123	-6244.3088	-5855.955	-
6688.4267	-6163.3187	-7034.0827	-6874.8309	-6156.3665	160.73945		
31000	1486.7347	74828.821	1.2711719	2123	-6173.5835	-5765.787	-
5584.1688	-6026.5927	-5640.266	-5344.3906	-5767.8496	171.00705		
32000	1535.6015	79401.948	1.1979592	2123	-6128.0113	-5706.8111	-
3852.0254	-5897.7129	-3506.1664	-3899.2798	-4150.6301	180.85992		
33000	1610.0107	82667.44	1.150638	2123	-6106.089	-5664.4791	-
435.54817	-5686.9521	-1307.2165	670.70784	-670.13586	191.04247		
34000	1658.7857	85952.629	1.1066595	2123	-6088.6286	-5633.6402	
1460.0381	-5555.3129	678.85062	1565.9475	2135.3163	203.1339		
35000	1805.2741	85382.26	1.1140522	2123	-6062.4022	-5567.2336	
3344.3326	-5389.0093	3259.1798	4120.0539	2653.764	214.67447		
36000	1871.1885	86874.603	1.0949149	2123	-6050.1422	-5536.8938	
2111.2474	-5422.416	2815.393	1067.2204	2451.1288	225.58364		
37000	1964.0854	93819.158	1.0138686	2123	-5998.9547	-5460.2256	
2254.0146	-5328.2366	2487.3936	1997.1825	2277.4679	235.32698		
38000	2069.8627	98122.26	0.96940588	2123	-5976.4435	-5408.7008	-
1189.4271	-5481.545	-907.13085	-978.33868	-1682.8118	245.96169		
39000	2093.2678	103684.34	0.91740268	2123	-5914.4166	-5340.2541	-
159.12962	-5350.5521	-291.9885	-395.13806	209.73772	255.93401		
40000	2202.1448	111982.42	0.84942165	2123	-5858.1459	-5254.1196	-
1427.5013	-5353.8933	-1421.4825	-1392.6846	-1468.3369	265.39124		
41000	2231.6851	119043.71	0.79903675	2123	-5819.611	-5207.4821	-
1310.3977	-5304.8462	-2011.9787	-733.90073	-1185.3137	274.56046		
42000	2326.1103	127468.9	0.74622356	2123	-5785.2858	-5147.2569	-
1380.2573	-5257.07	-973.97667	-1507.3585	-1659.4366	283.88631		

```

43000 2360.1068 145304.17 0.6546288 2123 -5741.8339 -5094.4802 -
326.48252 -5124.0894 -305.00139 -350.57352 -323.87266 292.57151
44000 2546.4418 158151.79 0.60144937 2123 -5707.7045 -5009.2409
177.69218 -4991.7008 791.81734 -246.78122 -11.959573 301.94605
45000 2490.5842 171970.4 0.55312017 2123 -5678.3929 -4995.2505 -
200.37367 -5016.7577 -527.49291 -170.63126 97.003164 311.22265
46000 2653.3673 201513.77 0.47202877 2123 -5638.9503 -4911.1581
541.50301 -4843.0506 394.42442 426.71521 803.36939 320.4827
47000 2676.0685 224167.77 0.42432637 2123 -5611.5407 -4877.5218 -
77.545679 -4888.3715 140.69995 80.620178 -453.95717 329.62999
48000 2701.8801 259147.47 0.36705084 2123 -5602.2537 -4861.1549
54.876086 -4852.2788 -164.42842 414.99514 -85.938459 339.7431
49000 2889.6298 287750.78 0.33056486 2123 -5554.5816 -4761.9849
467.38064 -4678.0434 179.61334 648.74699 573.78159 348.75173
50000 2888.9259 347729.22 0.27354703 2123 -5514.4354 -4722.0318
253.46119 -4667.0217 836.38807 137.30941 -213.3139 358.36357
51000 3004.2104 417477.03 0.22784558 2123 -5482.8599 -4658.835
114.17636 -4629.0842 127.35704 92.959797 122.21226 367.14822
52000 3071.7713 496756.98 0.19148255 2123 -5452.9214 -4610.3652
100.51702 -4579.1997 48.399291 -2.1213487 255.27313 375.13538
53000 3193.824 585380.56 0.16249309 2123 -5400.9457 -4524.9117
316.95136 -4409.1085 329.6802 370.39124 250.78264 384.69275
54000 3209.8496 683918.24 0.13908139 2123 -5363.3031 -4482.8734
196.52194 -4398.9844 145.08091 318.47147 126.01343 394.51376
55000 3384.6918 793023.77 0.11994634 2123 -5303.56 -4375.1728
319.07874 -4217.2395 104.0453 417.95484 435.23609 403.21766

```

Loop time of 403.218 on 1 procs for 40000 steps with 2123 atoms

Performance: 0.857 ns/day, 28.001 hours/ns, 99.202 timesteps/s

86.7% CPU use with 1 MPI tasks x no OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```

-----
Pair |391.26 |391.26 |391.26 | 0.0 |97.03
Neigh |0.77197 |0.77197 |0.77197 | 0.0 | 0.19
Comm |0.033296 |0.033296 |0.033296 | 0.0 | 0.01
Output |0.1836 |0.1836 |0.1836 | 0.0 | 0.05
Modify |9.8321 |9.8321 |9.8321 | 0.0 | 2.44
Other | |1.141 | | | 0.28

```

Nlocal: 2123 ave 2123 max 2123 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: 90473 ave 90473 max 90473 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 = 90473
Ave neighs/atom = 42.6156
Neighbor list builds = 73
Dangerous builds = 0
```

```
#-----SELESAI-----
print "Simulasi Selesai"
Simulasi Selesai
Total wall time: 0:08:27
```

