



**PENGARUH TEMPERATUR DAN DIAMETER NANOPARTIKEL
TERHADAP KARAKTERISTIK ALUMINIUM SERI 1010
DENGAN MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKULAR**

SKRIPSI

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

Oleh

Waldhy Rifki Dermawan

141910101035

**PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK
JURUSAN TEKNIK MESIN
FAKULTAS TEKNIK
UNIVERSITAS JEMBER
2018**

PERSEMBAHAN

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

1. Kedua orang tua saya Jaya Winarno dan Sri Manganti yang tidak pernah lelah untuk memberikan doa, semangat, dedikasi, dan motivasi serta segala keasih sayang dan ketulusan yang telah diberikan selama ini.
2. Kakakku Ryan Ardyanto Agus Pratama dan adikku Maya Anugerah Putri Anggraini yang selalu menemani dan memberikan dukungan serta motivasi dalam setiap keadaan.
3. 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.
4. Seluruh guru dari taman kanak-kanak hingga perguruan tinggi yang telah mendidik saya.
5. Sahabat sekaligus teman spesial Siti Zakiyatul Fajariyah yang memberikan dukungan dan semangat hingga saat ini
6. Teman-teman seperjuangan Teknik Mesin angkatan 2014 (M16) yang telah mendukung dari awal masuk hingga saat ini.
7. Teman-teman kontrakan jeger dan G14 Smansa yang sudah mendukung hingga saat ini.

MOTTO

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

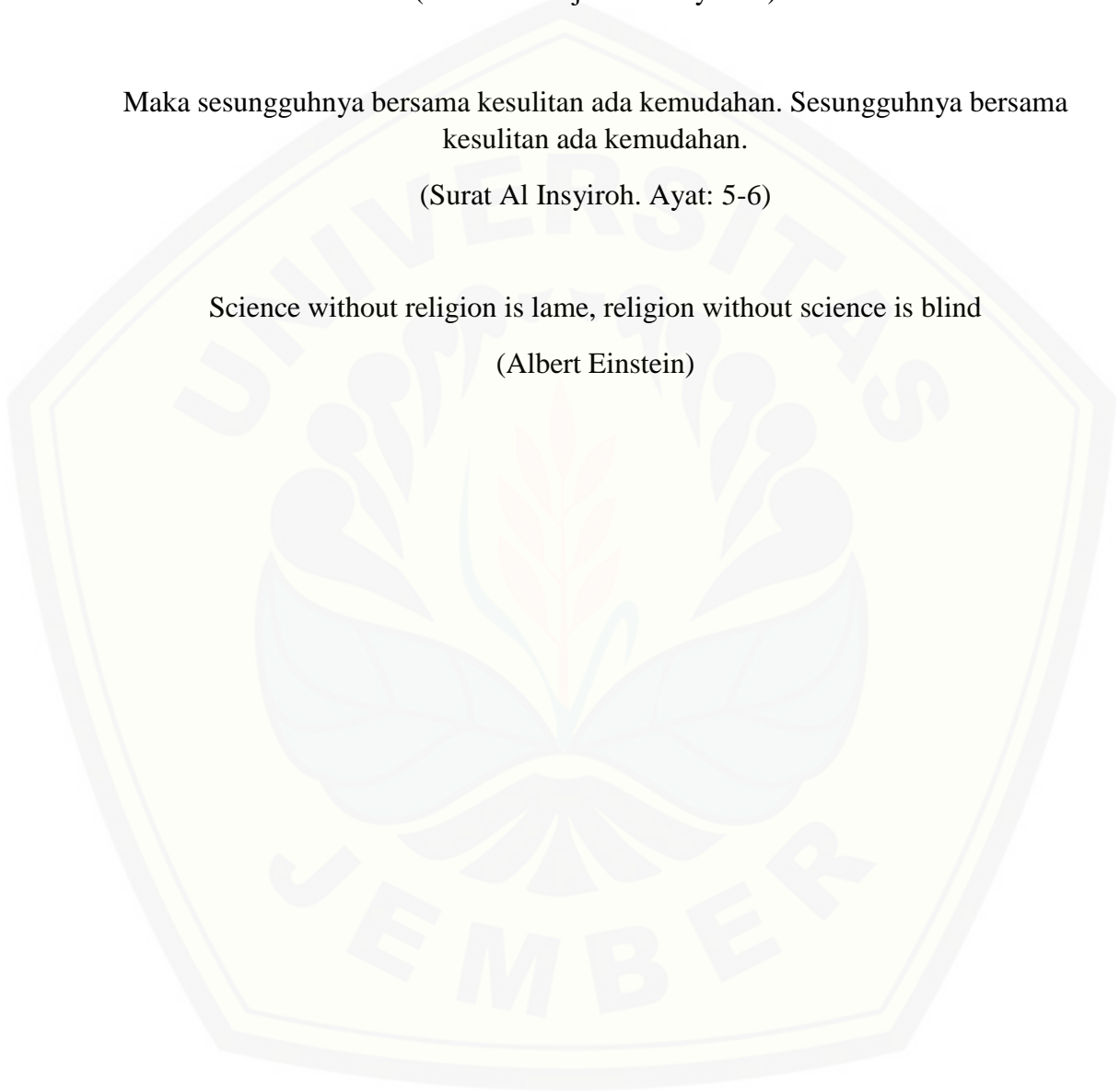
(Surat Al-Mujadalah. Ayat 11)

Maka sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan. Sesungguhnya bersama kesulitan ada kemudahan.

(Surat Al Insiroh. Ayat: 5-6)

Science without religion is lame, religion without science is blind

(Albert Einstein)



PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Waldhy Rifki Dermawan

NIM : 141910101035

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Pengaruh Temperatur dan Diameter Nanopartikel terhadap Karakteristik Aluminium Seri 1010 dengan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular” 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, 11 Juli 2018

yang menyatakan,

Waldhy Rifki Dermawan

NIM 141910101035

SKRIPSI

**PENGARUH TEMPERATUR DAN DIAMETER NANOPARTIKEL
TERHADAP KARAKTERISTIK ALUMINIUM SERI 1010
DENGAN MENGGUNAKAN SIMULASI
DINAMIKA MOLEKULAR**

Oleh

Waldhy Rifki Dermawan

NIM 141910101035

Pembimbing

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

Dosen Pembimbing Anggota : M. Fahrur Rozy Hentihu, S.T., M.T.

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Pengaruh Temperatur dan Diameter Nanopartikel terhadap Karakteristik Aluminium Seri 1010 dengan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular” telah diuji dan disahkan pada :

Hari, tanggal : Rabu, 11 Juli 2018

Tempat : Fakultas Teknik, Universitas Jember

Tim Penguji

Ketua,

Sekretaris,

Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T.

M. Fahrur Rozy Hentihu S.T., M.T.

NIP 19751006 2002 12 1 002

NIP 19800307 2012 12 1 003

Anggota I,

Anggota II,

Hary Sutjahjono, S.T., M.T.

Sumarji, S.T., M.T.

NIP 19681205 1997 02 1 002

NIP 19680202 1997 02 1 001

Mengesahkan

Dekan Fakultas Teknik Universitas Jember,

Dr. Ir. Entin Hidayah, M.U.M.

NIP 19661215 1995 03 2 001

RINGKASAN

Pengaruh Temperatur dan Diameter Nanopartikel terhadap Karakteristik Aluminium Seri 1010 dengan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular; Waldhy Rifki Dermawan, 141910101035; 2018; 43 halaman; Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember.

Pada zaman sekarang, studi tentang sistem pada skala nano menyediakan area yang luas untuk penelitian, karena keunikan sifat fisika, kimia, dan sifat mekaniknya yang nampak pada sekelompok material. Contohnya seperti material *nanocrystalline* mencair pada temperatur lebih rendah daripada titik leleh dari butiran kasar polikristal. Titik leleh dari material nano sangat berbeda dari material yang lebih besar, dan titik leleh dari material nano biasanya berkurang dengan bertambah kecil ukuran material tersebut.

Proses peleburan material nano dapat dilakukan dengan metode simulasi dinamika molekul. Dalam penelitian ini, aplikasi yang digunakan untuk menjalankan simulasi dinamika molekul adalah LAMMPS dan aplikasi visualisasi OVITO.

Nilai titik lebur aluminium seri 1010 dengan ukuran 10 nm adalah 558 °C, pada ukuran 20 nm memiliki nilai titik lebur sebesar 627 °C dan pada ukuran 30 nm memiliki nilai titik lebur sebesar 747 °C. Densitas aluminium seri 1010 pada ukuran 10 nm dengan temperatur 558 °C yaitu sebesar 1434 kg/m³, pada ukuran 20 nm dengan temperatur 627 °C nilai densitas sebesar 1320 kg/m³ dan pada ukuran 30 nm dengan temperatur 747 °C memiliki nilai densitas sebesar 1265 kg/m³. Nilai viskositas aluminium seri 1010 dengan ukuran 10 nm pada temperatur 558 °C sebesar 7,59 x 10⁻⁷ Pa.s, dan ukuran 20 nm pada temperatur 627 °C nilai viskositasnya sebesar 3,79 x 10⁻⁶ Pa.s. Sedangkan nilai viskositas terbesar di hasilkan oleh partikel dengan ukuran 30 nm pada temperatur 747 °C yaitu sebesar 3,03 x 10⁻⁶ Pa.s.

SUMMARY

The Effect Variation of Temperatures and Nanoparticle Diameters to Characteristics Aluminum Series 1010 Using Molecular Dynamics Simulation;

Waldhy Rifki Dermawan, 141910101035; 2018; 43 pages; Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Jember University.

Today, the study of nanoscale systems provides a wide area for research, because of their unique physical, chemical, and mechanical properties that appear in a group of materials. As an example, nanocrystalline materials, melt at temperatures lower than the melting temperatures of coarse-grain polycrystals. The melting point of the nanomaterial differs greatly from the larger material, and the melting point of the nanomaterial is usually reduced by decreasing the size of the material.

The process of melting nanomaterials can be done by molecular dynamics simulation method. In this study, applications used to run molecular dynamics simulations are LAMMPS and OVITO visualization applications.

The value of melting point aluminum series 1010 with a size at 10 nm is 558 °C, the size of 20 nm has a melting point at 627 °C and the size of 30 nm has a melting point at 747 °C. The density of aluminum series 1010 at 10 nm with temperatures at 558 °C has a value is 1434 kg/m³, at 20 nm with temperatures at 627 °C the value of density is 1320 kg/m³ and at 30 nm with temperatures 747 °C has a density value is 1265 kg/m³. The viscosity value of aluminum series 1010 with 10 nm at temperatures 558 °C is 7.59 x 10⁻⁷ Pa.s, and the size of 20 nm at temperatures 627 °C has viscosity value is 3.79 x 10⁻⁶ Pa.s While the largest viscosity value generated by the particle with a size of 30 nm at temperatures 747 °C that is equal to 3.03 x 10⁻⁶ Pa.s.

PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karuniaNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini yang berjudul “Pengaruh Temperatur dan Diameter Nanopartikel terhadap Karakteristik Aluminium Seri 1010 dengan Menggunakan Simulasi Dinamika Molekular”. Shalawat dan salam penulis curahkan kepada Nabi Muhammad SAW yang telah menunjukkan inspirasi, suri tauladan, dan jalan yang terang bagi umat manusia dalam menjalani kehidupan di dunia. Skripsi ini disusun guna memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Jember.

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

1. Bapak Dr. Salahuddin Junus, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Utama, dan Bapak M. Fahrur Rozy Hentihu, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan masukan dan arahan dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini. serta Bapak Hary Sutjahjono, S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Utama dan Bapak Sumarji, S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Anggota yang telah memberikan kritik dan saran untuk perbaikan skripsi.
2. Rekan kerjaku Ramanda 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 memberikan manfaat bagi dan pembaca.

Jember, Juli 2018

Penulis

DAFTAR ISI

	Halaman
HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PERSEMBAHAN	ii
HALAMAN MOTTO	iii
HALAMAN PERNYATAAN	iv
HALAMAN PEMBIMBING	iv
HALAMAN PENGESAHAN	vi
RINGKASAN	vii
SUMMARY	viii
PRAKATA	ix
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR LAMPIRAN	xiv
BAB 1. PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah	2
1.4 Tujuan Penelitian	3
1.5 Manfaat Penelitian	3
1.6 Hipotesa	3
BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Aluminium	4
2.2 Nanopartikel	6
2.3 Densitas	8
2.4 Viskositas	9
2.5 Struktur Kristal	10
2.5.1 <i>Simple Cubic (SC)</i>	11
2.5.2 <i>Face Centered Cubic (FCC)</i>	12

2.5.3 <i>Body Centered Cubic</i> (BCC)	13
2.6 Dinamika Molekular	14
2.6.1 Simulasi Dinamika Molekular	14
2.6.2 Potensial.....	17
2.6.3 Perhitungan jumlah atom.....	18
2.7 Aplikasi Simulasi Dinamika Molekular	19
2.7.1 LAMMPS	19
2.7.2 OVITO	19
BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN	21
3.1 Metode Penelitian	21
3.2 Waktu dan Tempat	21
3.3 Alat dan Bahan	21
3.4 Prosedur Penelitian	21
3.4.1 Prosedur Simulasi.....	21
3.4.2 Visualisasi dengan OVITO	24
3.5 Diagram alir	26
BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN	27
4.1 Aluminium Seri 1010	27
4.2 Densitas Aluminium	31
4.2.1 Temperatur terhadap densitas	31
4.2.2 Ukuran aluminium seri 1010 terhadap densitas	32
4.3 Viskositas Aluminium	33
4.3.1 Temperatur terhadap viskositas	33
4.3.2 Ukuran aluminium seri 1010 terhadap viskositas	35
4.4 Partikel Aluminium Seri 1010	36
BAB 5. PENUTUP	39
5.1 Kesimpulan	39
5.2 Saran	40
DAFTAR PUSTAKA	41
LAMPIRAN	44

DAFTAR GAMBAR

	Halaman
2.1 Uji SEM serbuk aluminium	4
2.2 Ukuran dan tipe dari koloid alam dan nanopartikel	7
2.3 Struktur kristal sederhana. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Gambar unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil.....	12
2.4 Struktur kristal FCC. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil (c) Kumpulan dari banyak atom.....	13
2.5 Struktur kristal BCC. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil (c) Kumpulan dari banyak atom.....	14
2.6 Logo LAMMPS	19
2.7 Tampilan aplikasi OVITO	20
3.1 Input script LAMMPS	22
3.2 Menu Command Prompt.....	23
3.3 Membuka script dengan command prompt.....	23
3.4 Proses menjalankan LAMMPS	24
3.5 Membuka program OVITO	24
3.6 Visualisasi dengan OVITO	25
3.7 Diagram alir penelitian.....	26
4.1 Variabel aluminium.....	27
4.2 Energi potensial terhadap temperatur pada aluminium ukuran (a) 10 nm, (b) 20 nm, (c) 30 nm	28
4.3 Variasi energi potensial terhadap temperatur.....	30
4.4 Densitas aluminium (a) 10 nm, (b) 20 nm, (c) 30 nm.....	31
4.5 Viskositas aluminium (a) 10 nm, (b) 20 nm, (c) 30 nm.....	34
4.6 Ketergantungan viskositas terhadap temperatur	34
4.7 Visualisasi partikel aluminium 10 nm, 20 nm dan 30 nm	37

DAFTAR TABEL

	Halaman
2.1 Sifat-sifat aluminium	5
2.2 Data viskositas beberapa unsur	10
2.3 Karakteristik Kisi Kubik	11
4.1 Perubahan energi potensial aluminium 30 nm	29
4.2 Hasil simulasi nano partikel aluminium seri 1010	30
4.3 Densitas nano aluminium seri 1010	32
4.4 Viskositas nano aluminium seri 1010	35
4.5 Viskositas aluminium	36

DAFTAR LAMPIRAN

	Halaman
4.1 Nilai Energi Potensial Terhadap Temperatur pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm	44
4.2 Nilai Densitas Nanopartikel Aluminium pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm	56
4.3 Nilai Viskositas Nanopartikel Aluminium pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm	68

BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Pada zaman sekarang, studi tentang sistem pada skala nano menyediakan area yang luas untuk penelitian, karena keunikan sifat fisika, kimia, dan sifat mekaniknya yang nampak pada sekelompok material. Contohnya seperti material *nanocrystalline* mencair pada temperatur lebih rendah daripada titik leleh dari butiran kasar polikristal (Noori *et al.*, 2014). Hal ini telah menjadi bidang baru dan sangat penting dalam penelitian untuk mempelajari pembentukan, struktur, sifat dan perilaku dari kumpulan material nano. Telah diketahui bahwa sifat-sifat termodinamika dari nano partikel dan material yang lebih besar sangat berbeda. Material nanostruktur menunjukkan beberapa keunggulan seperti kekuatan, ketangguhan, dan kekerasan yang sangat baik, hal ini terlihat jelas dengan terbentuknya butiran-butiran halus.

Pada skala nano menunjukkan banyak sifat-sifat *thermo-physical* yang berbeda dengan partikel ukuran mikron. Ukuran nano yang semakin kecil menyebabkan peningkatan rasio permukaan terhadap volume sehingga nilai titik *melting* pada skala nano akan berbeda dengan nilai titik *melting bulk* material (Puri, *et al.*, 2007). Titik *melting* dari material nano sangat berbeda dari material yang lebih besar, dan titik *melting* dari material nano berkurang dengan semakin kecil ukuran material tersebut (Li *et al.*, 2013).

Pengamatan secara eksperimen tentang proses *melting* pada material nanopartikel sangat sulit untuk mengetahui perilaku-perilakunya. Oleh karena itu, dilakukan simulasi atomik sebagai pengganti yang sesuai untuk mempelajari perilaku nanopartikel.

Metode *Molecular Dynamics* (MD) atau dinamika molekular mendeskripsikan proses fisika pada tingkatan atomik. Dinamika molekul dapat menunjukkan pembelajaran yang terperinci dari perubahan fasa yang terdiri dari karakteristik yang berbeda (Kolotova *et al.*, 2015). Simulasi (MD) *molecular*

dynamics juga telah banyak digunakan secara luas untuk mengetahui perilaku dari kristal.

Pada penelitian tentang studi dinamika molekul aluminium menunjukkan titik lebur aluminium dengan jumlah atom 147 terjadi pada temperatur 700 K dengan metode *Lindemann Index* (Arifin *et al.*, 2016). Wideasih *et al.* (2013) dalam penelitian tentang konsep titik leleh dan perubahan wujud dengan bahan aluminium menunjukkan hasil yaitu titik lebur aluminium berada pada temperatur 1059,75 K pada langkah ke 80000. Pada penelitian yang dilakukan oleh Puri *et al.* (2007) menunjukkan titik lebur aluminium dengan ukuran 2 nm (256 atom) terjadi pada temperatur 473 K dan ukuran 8 nm (16.384 atom) nilai titik lebur terjadi pada temperatur 937 K.

Pada penelitian ini akan dilakukan analisa titik *melting* pada aluminium seri 1010 yang bertujuan untuk mengetahui pengaruh variasi diameter nano partikel aluminium dan temperatur terhadap karakteristik aluminium seri 1010 serta visualisasi pergerakan atom aluminium seri 1010.

1.2 Rumusan Masalah

Dari penjelasan di atas dapat dirumuskan permasalahan sebagai berikut:

1. Bagaimanakah nilai titik lebur aluminium seri 1010 dengan menggunakan simulasi dinamika molekular ?
2. Bagaimanakah pengaruh temperatur dan diameter nanopartikel terhadap densitas aluminium pada proses simulasi *melting* aluminium seri 1010 ?
3. Bagaimanakah pengaruh temperatur dan diameter nanopartikel terhadap viskositas aluminium pada proses simulasi *melting* aluminium seri 1010 ?
4. Bagaimanakah visualisasi atom aluminium pada saat proses *melting* ?

1.3 Batasan Masalah

Adapun batasan masalah pada penelitian ini sebagai berikut:

1. Perhitungan potensial menggunakan *EAM Potential*.
2. Simulasi Dinamika Molekul menggunakan LAMMPS.
3. Visualisasi Dinamika Molekul menggunakan OVITO.

4. Struktur kisi yang digunakan FCC (*Face Centered Cubic*).
5. Material yang digunakan nanopartikel aluminium

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Untuk mengetahui nilai titik lebur pada masing-masing nanopartikel aluminium seri 1010 dengan menggunakan simulasi dinamika molekular.
2. Untuk mengetahui pengaruh temperatur dan diameter nanopartikel aluminium terhadap densitas aluminium seri 1010 pada proses simulasi menggunakan *software* LAMMPS.
3. Untuk mengetahui pengaruh temperatur dan diameter nanopartikel terhadap viskositas aluminium seri 1010 pada proses simulasi menggunakan *software* LAMMPS.
4. Untuk mengetahui pengaruh temperatur dan diameter nanopartikel terhadap visualisasi pergerakan atom aluminium pada saat proses *melting* dengan menggunakan *software* OVITO.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diperoleh dari penelitian ini yaitu:

1. Memberikan informasi mengenai pengaruh variasi temperatur dan diameter partikel terhadap karakterisasi aluminium dengan menggunakan dinamika molekular.
2. Memberikan tambahan koleksi pustakan kepada Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Jember.

1.6 Hipotesa

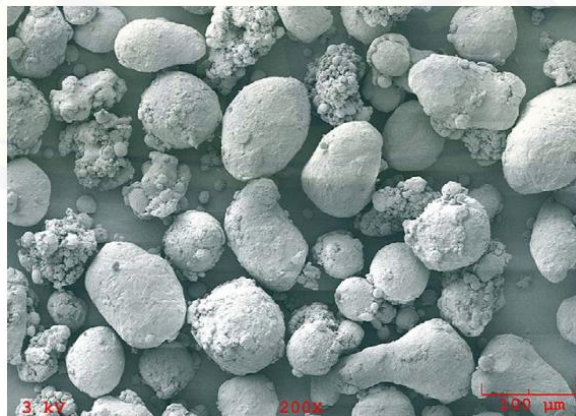
Temperatur yang semakin tinggi menyebabkan energi potensial meningkat dan jarak antar atom semakin jauh. Akibat semakin menjauhnya jarak antar atom menyebabkan nilai densitas dan viskositas aluminium akan menurun. Sedangkan variasi ukuran diameter nanopartikel yang semakin besar menyebabkan titik leleh aluminium semakin tinggi.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Aluminium

Aluminium adalah logam *non-ferrous* yang paling banyak digunakan di seluruh dunia, dengan konsumsi 24 juta ton per tahun. Sekitar 75% dari total volume atau 18 juta ton adalah aluminium primer (aluminium yang di ekstraksi dari bijih, berbeda dengan aluminium sekunder yang berasal dari pengolahan logam bekas) (Sverdlin, 2003). Aluminium juga merupakan elemen logam kedua yang berlimpah di bumi, menjadi kompetitor yang ekonomis dalam pengaplikasian di bidang engineering pada akhir abad ke-19. Munculnya tiga faktor penting dalam perkembangan dunia industri dengan menuntut karakteristik material yang konsisten dengan keunikan kualitas aluminium dan paduannya, sangat menguntungkan dalam perkembangan produksi dan penggunaan logam baru (Davis, 1993).

Aluminium merupakan logam yang banyak digunakan dan menempati peringkat kedua setelah besi dan baja. Sir Humphrey menemukan aluminium sebagai suatu unsur yang ditemukan pada tahun 1809 dan direduksi pertama kali sebagai logam oleh H.C Oersted pada tahun 1825. Aluminium di produksi secara industri pada tahun 1886. Logam aluminium diperoleh dengan cara elektrolisis oleh Paul Herroult di Perancis dan C.M Hall di Amerika Serikat. Proses produksi aluminium yang masih digunakan yaitu proses Hall-Heroult.



Gambar 2 1 Uji SEM serbuk aluminium (Metco, 2016)

Logam Aluminium berwarna putih keperakan yang memiliki temperatur titik lebur rendah yaitu 933 K. Kecuali besi dan baja, aluminium juga banyak digunakan untuk banyak aplikasi dibandingkan logam yang lainnya. Aluminium murni memiliki sifat lunak dan ulet. Aluminium banyak digunakan pada industri karena sifat aluminium yang mudah dilakukan pembentukan logam seperti cor, pemesinan, pengerolan, penempaan, ekstrusi dan penarikan. Aluminium juga mempunyai konduktivitas listrik tinggi dan tahan terhadap korosi (Puri, 2008). Sifat-sifat dari aluminium dijelaskan pada Tabel 2.1.

Tabel 2.1 Sifat-sifat aluminium (Puri, 2008)

Atomic Number	13
Atomic Weight	26,98 kg/kmol
Density	2700 kg/m ³
Molar Volume	10 cm ³
Young Modulus	70 GPa
Rigidity Modulus	26 GPa
Elastic Modulus	70-79 GPa
Bulk Modulus	76 GPa
Tensile Strength	230-570 MPa
Yield Strength	215-505 MPa
Poisson Ratio	0,35-0,33
Melting Point	933 K
Boiling Point	2740 K
Specific Heat	938 J/Kg K
Latent heat of fusion	397 kJ/Kg
Thermal Conductivity	0,5 cal/s cm K
Van der wall Radius	0,143 nm
Ionic Radius	0,05 nm
Thermal expansion coefficient	20,4-25,0 x 10 ⁻⁶ /K

Aluminium berkembang sangat luas dalam berbagai macam aplikasi seperti peralatan rumah tangga, elektrik dan industri otomotif, karena material aluminium memiliki sifat-sifat yang menguntungkan dalam perkembangan dunia industri, antara lain yaitu :

a. Ringan

Aluminium mempunyai sifat yang sangat ringan dengan berat jenis sebesar 2720 kg/m³. Karena sifatnya yang ringan aluminium banyak menggantikan

penggunaan baja dalam berbagai hal yaitu seperti alat rumah tangga, motor, kapal, mobil, dan lain-lain.

b. Tahan karat

Logam selain aluminium bila terkena bahan kimia, air atau oksigen akan mengalami pengikisan. Reaksi tersebut dapat menyebabkan perkaratan pada logam-logam tersebut.

c. Hantar listrik yang baik

Aluminium memiliki daya hantar kurang lebih sebesar 62 % dari daya hantar tembaga. Oleh karena itu aluminium banyak digunakan sebagai penghantar listrik.

d. Mudah dalam pembentukannya (*easy fabrication*)

Logam aluminium memiliki sifat mudah dibentuk dan mudah untuk fabrikasi seperti *forging, rolling, drawing, machining, casting*, dan ekstrusi. Struktur kristal pada aluminium adalah struktur FCC (*Face Centered Cubic*), sehingga aluminium mempunyai sifat ulet dalam temperatur yang rendah. Aluminium dapat dengan mudah dibentuk menjadi sesuatu yang kompleks dan tipis, seperti aluminium foil, gording, rel, jendela dan lain-lain.

e. Konduktifitas termal tinggi (*high thermal conductivity*)

Aluminium memiliki nilai konduktifitas termal tiga kali lebih besar dari besi. Oleh karena itu aluminium banyak digunakan pada koil evaporator, alat-alat masak, radiator mobil, alat penukar kalor, maupun komponen-komponen pada mesin.

f. Tidak beracun (*non toxic*)

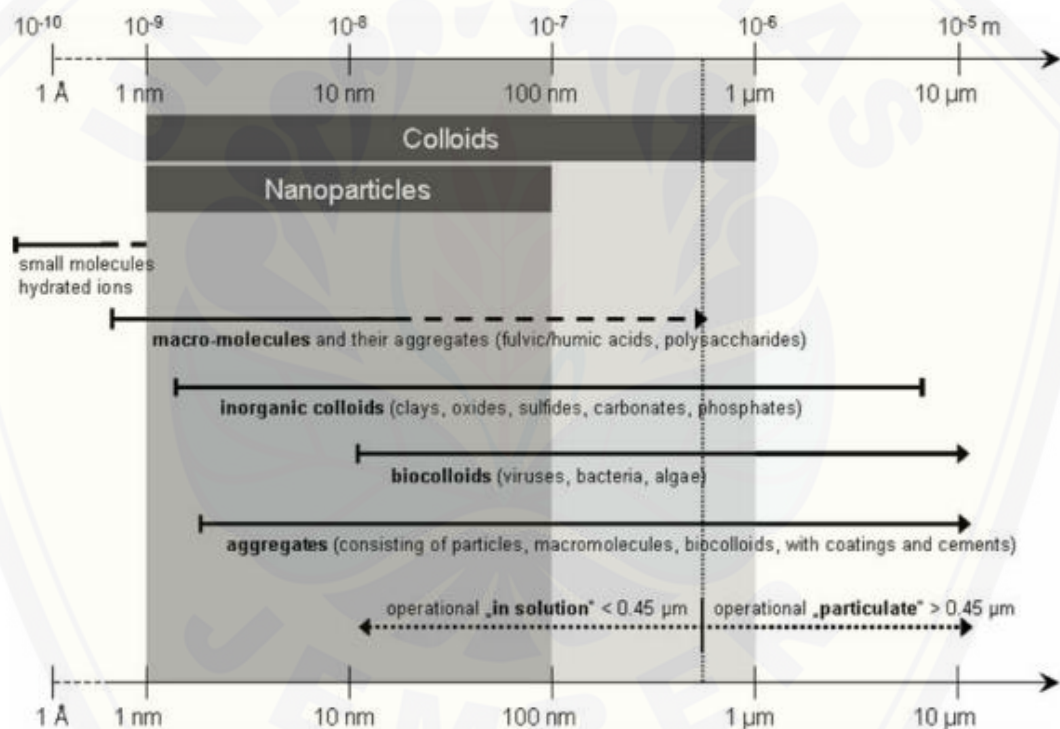
Aluminium banyak digunakan pada pipa penyalur industri makanan dan minuman serta digunakan pada kemasan makanan dan minuman dalam dunia industri, karena aluminium tidak memiliki sifat racun yang berbahaya pada tubuh manusia

2.2 Nanopartikel

Nanopartikel secara umum dapat didefinisikan sebagai partikel dengan ukuran kurang dari 100 nm. Definisi ini menempatkan ukuran nanopartikel sama

dengan partikel *ultrafine* (partikel udara) dan juga sebagai *sub-set* partikel koloid (Christian *et al.*, 2008). Sebagian besar material *solid* yang berada di bumi ditemukan dalam *range* ukuran koloid dan nanopartikel. Dalam 2 dekade terakhir para ilmuwan telah menunjukkan bahwa material koloid dan nanopartikel banyak ditemukan di lingkungan.

Nanomaterial dibuat untuk menunjukkan perbedaan secara kimia, fisik, biologi, sifat magnetik, elektronik dan fenomena proses sebagai akibat dari keterbatasan ukuran partikel penyusun atau molekul. Banyak ilmuwan dalam bidang biologi, kimia, fisika, metrologi, teknik, teknologi informasi dan bidang lain berkontribusi terhadap penelitian saat ini.



Gambar 2.2 Ukuran dan tipe dari koloid alam dan nanopartikel (Christian *et al.*, 2008).

Nanopartikel menjadi pembahasan yang menarik karena ukuran material nano memiliki sifat kimia atau fisika yang lebih unggul dibandingkan dengan material yang berukuran besar (*bulk*) (Vestal *et al.*, 2004). Terdapat beberapa hal yang menjadikan material dengan ukuran nano berbeda dengan material dalam ukuran besar (*bulk*) yaitu:

1. Nanopartikel mempunyai nilai luas permukaan dan volume yang besar dibandingkan dengan *bulk* material, karena ukurannya yang sangat kecil. Oleh karena itu nanopartikel memiliki sifat yang lebih reaktif. Reaktivitas suatu material dapat ditentukan oleh atom-atom yang terdapat pada permukaan, karena seluruh atom tersebut mengalami kontak langsung dengan material lainnya.
2. Partikel dengan orde nanometer, berlaku hukum-hukum fisika kuantum (Abdullah *et al.*, 2008)

Sifat-sifat yang dapat berubah pada material nanopartikel berkaitan dengan beberapa fenomena. Fenomena pertama yaitu tentang kuantum sebagai akibat keterbatasan ruang gerak elektron dan pembawa muatan lainnya. Akibat dari fenomena tersebut dapat merubah kekuatan mekanik, konduktivitas listrik, magnetisasi, transparansi, dan warna yang dipancarkan oleh material tersebut. Fenomena kedua adalah perubahan rasio jumlah atom yang menempati permukaan material. Fenomena tersebut mengakibatkan perubahan nilai titik beku, titik didih, dan reaktivitas kimia. Beberapa perubahan yang terjadi dapat menjadikan nanopartikel memiliki keunggulan dibandingkan dengan partikel dalam keadaan *bulk*. (Abdullah *et al.*, 2008).

2.3 Densitas

Densitas banyak digunakan di bidang aplikasi untuk menentukan sifat material atau produk tertentu. Densitas atau massa jenis dapat didefinisikan sebagai massa per satuan volume. Simbol yang sering digunakan untuk densitas yaitu ρ (rho). Pada beberapa kasus misalnya pada industri minyak dan gas di Amerika Serikat, densitas juga didefinisikan sebagai berat per satuan volume (Glossary, 2007). Massa jenis atau densitas pada setiap titik dari benda yang homogen sama dengan total massa dibagi dengan total volumenya. Massa biasanya diukur dengan skala atau kesetimbangan yang sesuai sedangkan volume dapat diukur secara langsung atau dengan perpindahan cairan.

$$\rho = \frac{m}{V} \dots \dots \dots (1)$$

Keterangan :

- ρ = Densitas
 m = Massa (gram)
 V = Volume (cm^3)

2.4 Viskositas

Viskositas suatu fluida merupakan daya hambat yang disebabkan oleh gesekan antara molekul-molekul cairan, yang mampu menahan aliran fluida sehingga dapat dinyatakan sebagai indikator tingkat kekentalannya (Warsito *et al.*, 2012). Salah satu metode untuk memodelkan viskositas atau kekentalan adalah dengan cara menerapkan satu komponen data dan membuat dalam bentuk interaksi biner dan terner. Perhitungan viskositas dituliskan pada persamaan 2 (Kirova *et al.*, 2016).

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^{\infty} dt \langle P_{xy}(0) P_{xy}(t) \rangle \dots\dots\dots(2)$$

Keterangan :

- η = *Shear viscosity* (Pa.s) η
 V = Volume
 k_B = Konstanta Boltzmann
 T = Temperatur (K)
 P_{xy} = *microscopic shear stress*

Tabel 2.2 menjelaskan daftar nilai viskositas untuk beberapa elemen yang relevan.

Tabel 2.2 Data viskositas beberapa unsur (Dinsdale *et al.*, 2004)

Element	M.Pt [3] $T_m(^{\circ}\text{C})$	$\eta(T_m)$ (mPa·s)	η_0 (mPa·s)	E (kJ mol ⁻¹)	$\rho(T_m)$ [3] (kg·m ⁻³)
Al	660	1.38	0.257	13.08	2380
Cu	1083	1.30	0.149	16.5	8000
		4.38	0.529	23.85	
Fe	1535	4.0	0.301	30.5	7030
		6.93	0.315	46.5	
Mg	650	5.5	0.370	41.4	1590
		-	-	-	
Mn	1244	1.25	0.025	30.5	5760
		-	-	-	
Si	1414	5	0.12–1.02	20–46.5	2530
		-	-	-	
Zn	419	0.8	0.06–0.12	27–36	6580
		3.50	0.527	10.91	
Ag	960	3.85	0.413	12.7	9300
		4.27	0.589	20.34	
Cr	1905	3.88	0.453	22.2	6290
		-	-	-	
Ni	1455	5.7	1.7×10^{-4}	~185	7900
		-	-	-	
Sn	231	4.9	0.166	50.2	6980
		1.87	0.467	5.83	
Ti	1725	1.85	0.538	5.4	4130
		2.2	-	-	
		2.2	-	-	
		5.2	~0.034	~68	

[3]. T. Iida dan R. I. L. Guthrie, 1988

2.5 Struktur Kristal

Material zat padat dapat diklasifikasikan berdasarkan keteraturan, di mana atom atau ion tersusun secara teratur antara atom yang satu dengan yang lainnya atau disebut kristal. Material kristalin merupakan suatu kondisi di mana atom terletak dalam susunan yang berulang dalam jarak atomik yang besar. Pada saat terjadi proses solidifikasi, atom-atom akan berada pada pola tiga dimensi di mana

masing-masing atom terikat dengan atom-atom lainnya yang letaknya sangat dekat (Astra *et al.*, 2015).

Kisi kristal merupakan sebuah kesatuan titik yang tidak terbatas dalam ruang dan setiap titik memiliki sifat yang identik dengan titik lainnya. Struktur kristal dapat diperoleh dengan memasukkan atom, kelompok atom atau molekul. Kristal 3D dapat digambarkan oleh vektor satuan a, b, dan c. Struktur kristal 3D dapat dibedakan dalam tiga unit kristal yaitu SC (*Simple Cubic*), FCC (*Face Centered Cubic*), dan BCC (*Body Centered Cubic*).

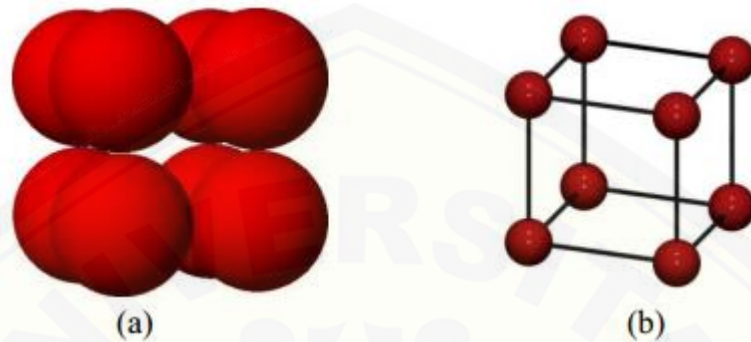
Tabel 2.3 Karakteristik Kisi Kubik (Astra *et al.*, 2015)

	Sederhana	BCC	FCC
Volume, sel konvensional	α^2	α^2	α^2
Titik kisi tiap sel	1	2	4
Volume, sel primitif	α^2	$\frac{1}{2} \alpha^2$	$\frac{1}{4} \alpha^2$
Titik kisi tiap satuan volume	$1/ \alpha^2$	$2/ \alpha^2$	$4/ \alpha^2$
Jumlah tetangga terdekat	6	8	12
Jarak tetangga terdekat	α	$\frac{3^{1/2}\alpha}{2} = 0,866\alpha$	$\alpha/2^{1/2} = 0,707 \alpha$
Jumlah tetangga terdekat kedua	12	6	6
Jarak tetangga terdekat kedua	$2^{1/2} \alpha$	α	α
Fraksi pengisian (APF)	$\frac{1}{6} \pi = 0,524$	$\frac{1}{8} \pi \sqrt{3} = 0,680$	$\frac{1}{8} \pi \sqrt{2} = 0,740$

2.5.1 Simple Cubic (SC)

Simple cubic atau kubik sederhana memiliki struktur atom-atom yang hanya terletak di bagian sudut saja sehingga hanya bersinggungan di sepanjang sisi kubus.

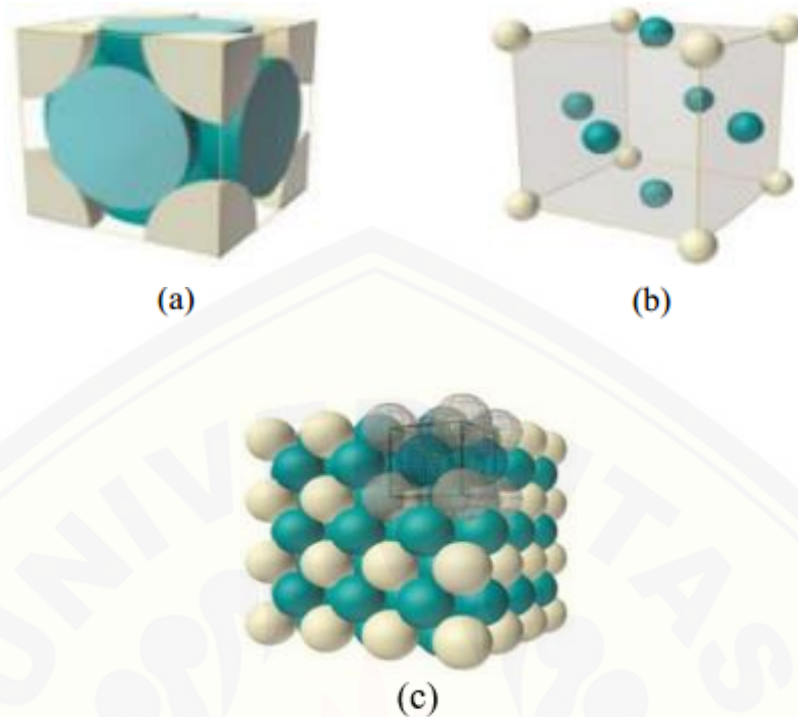
Total atom yang berada dalam sebuah unit sel dengan struktur SC berjumlah satu yang diperoleh dari penjumlahan seperdelapan atom yang terletak di sudut. Gambar 2.4 menunjukkan struktur kubik sederhana.



Gambar 2.3 Struktur kristal sederhana. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Gambar unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil (Astra *et al.*, 2015)

2.5.2 Face Centered Cubic (FCC)

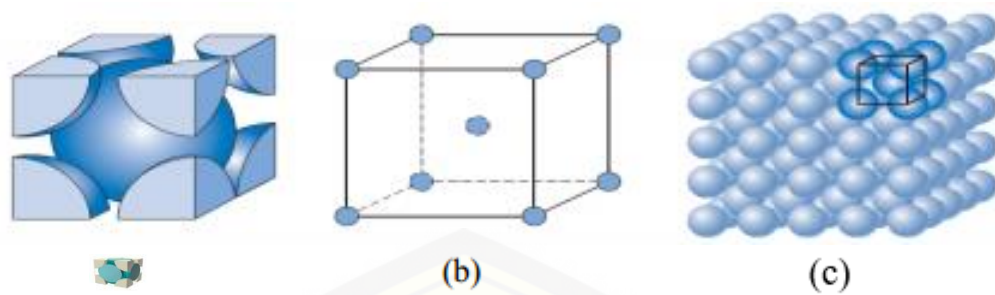
Struktur kristal FCC memiliki atom-atom yang terletak pada bagian sudut dan juga di pusat dari semua permukaan kubus. Untuk struktur kristal FCC, masing-masing atom yang terletak pada sudut dibagi ke dalam 8 unit sel, oleh karena itu atom *face centered* yang terletak pada bagian sisi terbagi menjadi dua. Struktur FCC memiliki total atom sebanyak 4 yang diperoleh dari penjumlahan seperdelapan dari masing-masing atom yang terletak pada delapan sudut dengan setengah bagian atom yang terletak pada enam permukaan sel. Struktur FCC ditunjukkan pada gambar 2.5



Gambar 2.4 Struktur kristal FCC. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil (c) Kumpulan dari banyak atom (Astra *et al.*, 2015)

2.5.3 *Body Centered Cubic* (BCC)

Pada struktur *Body Centered Cubic* (BCC) atom-atom terletak pada semua sudut dan atom tunggal pada bagian pusat kubus. Masing-masing unit sel BCC memiliki dua atom. Satu atom berasal dari penjumlahan satu per delapan atom yang terletak di delapan sudut kubus dan satu atom lainnya berasal dari atom yang terletak pada pusat kubus, ketika posisi atom yang terletak di bagian sudut dengan di bagian pusat adalah sama. Gambar 2.6 menunjukkan struktur kristal BCC.



Gambar 2.5 Struktur kristal BCC. (a) Penggambaran satu unit sel bola pejal (b) Unit sel dengan ukuran bola pejal yang sudah diperkecil (c) Kumpulan dari banyak atom (Astra *et al.*, 2015)

2.6 Dinamika Molekular

2.6.1 Simulasi Dinamika Molekular

Dinamika molekular atau biasa disebut *Molecular Dynamics* (MD) merupakan salah satu hal terpenting dalam simulasi komputer untuk mengetahui pergerakan dari atom dan molekul. Sejak 1980, metode dinamika molekular telah mengalami perkembangan yang sangat pesat di dalam berbagai bidang seperti ilmu material, teknologi nuklir, benda yang terkondensasi, kinetika reaksi kimia, dan biokimia (Yin, 2016).

Metode *molecular dynamics* (MD) dan Monte Carlo (MC) memiliki beberapa keuntungan dan kelemahan tergantung pada sistem dan sifat yang disimulasikan. Dalam metode dinamika molekular, posisi setiap atom atau molekul ditentukan berdasarkan persamaan gerak, sementara dalam metode monte carlo gerak atom atau molekul probabilistik sehingga mengurangi waktu komputasi.

Metode dinamika molekular lebih cocok digunakan pada fluida dengan densitas tinggi, sedangkan metode Monte Carlo lebih cocok untuk simulasi fluida dengan densitas rendah. Metode *molecular dynamics* (MD) dapat diketahui properti dinamik seperti difusi, viskositas, massa jenis, dan lain-lain, sedangkan untuk metode Monte Carlo tidak bisa tetapi metode ini dapat melakukan simulasi dengan jumlah partikel yang bervariasi sedangkan metode dinamika molekular dapat mengimplementasikan pada jumlah partikel yang konstan.

Kedua metode ini tidak hanya memiliki beberapa perbedaan tetapi juga memiliki kesamaan. Persamaan dari kedua metode ini yaitu dalam penggunaan

fungsi potensial. Keakuratan metode dinamika molekular dan Monte Carlo sangat bergantung pada keakuratan fungsi potensial yang digunakan. Oleh karena itu, pemilihan fungsi potensial sangat diperhatikan (Banerjee, 2008).

Secara singkat, mekanisme dari simulasi dinamika molekular dapat dijelaskan sebagai berikut :

1. Pilih persamaan potensial energi yang akan digunakan untuk mendeskripsikan interaksi interatom.
2. Mengatur posisi awal dan kecepatan dari setiap atom didalam sistem dan dimensi dari ruang simulasi
3. Menghitung seluruh gaya dari total jumlah atom melalui model interaksi
4. Temukan kecepatan dari setiap atom
5. Hasil dari kecepatan dan posisi atom didapatkan setelah *timestep* diberikan melalui integrasi numerik dari persamaan yang telah dipilih
6. Memperbarui seluruh posisi atom
7. Mengulangi langkah 3 – 6
8. *Posting* dari proses yang telah dilakukan atau analisa untuk menghasilkan termodinamika dan lintasan atomik.

Tujuan simulasi dinamika molekular adalah menghasilkan trajektori molekul-molekul sepanjang suatu jangka waktu terhingga. Molekul-molekul dalam simulasi memiliki posisi dan momentum untuk masing-masing sumbu pada setiap waktu. Pada molekul ke-N dalam ruang tiga dimensi (3D), 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 (Dzulfahmi, 2012)

Simulasi dinamika molekular dapat digunakan untuk merealisasikan perbedaan *ensemble* termodinamika, yang mana menampilkan jumlah keadaan termodinamika yang menyatakan situasi yang konstan secara keseluruhan pada simulasi. Pada saat *ensemble* terbentuk, waktu rata-rata dapat diperoleh. Untuk variabel keadaan termodinamik tidak dipertahankan konstan. Contohnya, seperti *ensemble* yang paling sering digunakan yaitu *microcanonical* (*NVE ensemble*), dimana N adalah jumlah atom, V adalah volume, dan E menyatakan total energi

(jumlah energi potensial dan energi kinetik) dinyatakan konstan. *Ensemble* lainnya adalah *canonical ensemble* yaitu NVT dimana, N adalah jumlah atom, V adalah volume, dan T adalah temperatur dinyatakan konstan serta *ensemble* selanjutnya NPT dimana N menyatakan jumlah atom, P menyatakan tekanan dan T menyatakan temperatur yang konstan (Siming Zhang, 2011).

a. Mikrokanonikal *Ensemble* (NVE)

Menurut Stote *et al.* (1999) *ensemble* adalah kumpulan dari sistem yang memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis sama. Seperti contoh yaitu sistem dengan konfigurasi posisi atau momentum yang berbeda namun memiliki temperatur yang sama.

Mikrokanonikal *ensemble* atau biasa dinamakan NVE adalah *ensemble* yang memiliki karakteristik jumlah molekul N dan volume yang tidak berubah serta energi total yang konstan (Jabbar, 2012). *Ensemble* ini didapatkan dari sistem yang terisolasi sehingga sistem tidak berinteraksi dengan lingkungan dan energi tidak dapat keluar masuk ke dalam sistem serta energi total memiliki nilai yang konstan. *Ensemble* ini merupakan *ensemble* yang paling sederhana untuk digunakan pada simulasi dinamika molekuler, tetapi kurang praktis untuk mensimulasikan keadaan eksperimen dalam laboratorium karena energi total sulit dipertahankan dalam keadaan konstan.

b. Kanonikal *Ensemble* (NVT)

Ensemble ini biasa dinamakan NVT yaitu menjelaskan *ensemble* dengan keadaan makroskopis temperatur (T) tetap, jumlah molekul (N) tetap dan volume (V) tidak berubah atau konstan. Dalam sebuah eksperimen dalam laboratorium, temperatur pada sistem lebih mudah dikendalikan daripada energi total sistem, oleh karena itu eksperimen banyak dilakukan pada temperatur konstan.

c. Isobarik Isotermal *Ensemble*

Ensemble ini biasa dinamakan dengan NPT yaitu di mana keadaan jumlah molekul, tekanan dan temperatur berada pada keadaan tetap atau konstan. Pada simulasi dinamika molekuler dapat dilakukan dengan mempertahankan tekanan dan temperatur sistem pada keadaan konstan. Temperatur dan tekanan adalah sifat

makroskopis yang mudah dikendalikan dalam eksperimen. Dalam *ensemble* isobarik-isothermal, volume sistem dapat berubah atau menjadi suatu variabel.

2.6.2 Potensial

a. *Embedded Atom Method Potential*

Perhitungan dinamika molekular pada penelitian ini digunakan *Embedded Atom Method* (EAM). EAM potensial adalah metode perhitungan potensial antar-atom yang paling sering digunakan untuk logam dan paduan. Secara konseptual, distribusi elektron dari masing-masing atom tidak merespon lingkungan pada atom di dalam EAM. Pada kenyataannya, distribusi atom bergantung pada kondisi lingkungan atom. Potensial antar-atom adalah pondasi dari simulasi mekanika molekular klasik (termasuk simulasi statis dan dinamis). Kontribusi *embedded atom* adalah jumlah dari pasangan potensial (ϕ_{ij}) dan sebuah tarikan *embedding energy* (F_i). Persamaan *embedded atom method* (EAM) dituliskan pada persamaan 3 (Alavi *et al.*, 2006).

$$U_{\text{eam}}(\{r\}) = \sum_{i < j} \phi_{ij}(r_{ij}) - \sum_{i=1}^N F_i[P_1] \dots\dots\dots (3)$$

Dalam potensial ES+, fungsi Finnis-Sinclair bergantung pada densitas lokal elektron (P_i) dari *tight-binding theory* yang digunakan untuk memperoleh kontribusi bagian-bagian atom ke potensial (Alavi *et al.*, 2006).

$$F_i[P_1] = -A_i \sqrt{P_i \xi_i} \dots\dots\dots (4)$$

Keterangan :

A_i dan ξ_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)

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

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

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

Keterangan :

β = pengurangan panjang pada bagian repulsif

α = pengurangan panjang pada bagian atraktif

r^* = jarak kesetimbangan dari pasangan potensial

C = energi penguraian dua atom

B = jumlah atom terdekat pada keadaan solid

2.6.3 Perhitungan jumlah atom

Ukuran partikel aluminium yang digunakan pada penelitian ini yaitu berdiameter sebesar 10, 20, 30 nm yang berbentuk butiran-butiran seperti bola-bola kecil. Untuk menghitung jumlah atom yang terdapat pada partikel tersebut dapat dengan cara menghitung volume partikel tersebut menggunakan persamaan 7.

$$V_{tot} = \frac{4}{3} \pi r^3 \dots\dots\dots (7)$$

Keterangan :

V_{tot} = Volume total

r = Jari-jari

Menghitung volume unit sel dengan menggunakan parameter kisi dari sel satuan aluminium sebesar 4,05 Å.

$$V_{unit} = (0,405)^3 \text{ nm}^3 \dots\dots\dots (8)$$

Menentukan total jumlah sel satuan yang menyusun partikel tersebut dengan menggunakan persamaan 11

$$Unit\ cells_{tot} = \frac{V_{tot}}{V_{unit}} \dots\dots\dots (9)$$

Keterangan :

V_{tot} = Volume total

V_{unit} = Volume unit sel

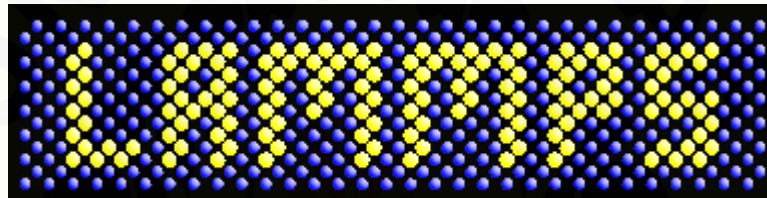
Jumlah atom per sel satuan adalah 4 karena aluminium memiliki struktur FCC. Perhitungan jumlah atom ini dapat dihitung menggunakan persamaan 12.

$$Atoms_{tot} = Unit\ cells_{tot} \times 4 \dots\dots\dots (10)$$

2.7 Aplikasi Simulasi Dinamika Molekular

2.7.1 LAMMPS

LAMMPS (*Large Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) adalah klasikal dinamika molekular kode yang memodelkan keadaan partikel dalam bentuk solid, liquid, atau pada keadaan gas. Aplikasi ini dapat memodelkan sistem atom, polimer, biologis, logam, dan sistem butiran menggunakan variasi dari gaya dan batas butir. LAMMPS dapat memodelkan sistem dengan hanya menggunakan beberapa partikel hingga jutaan atau miliaran (Plimpton *et al.*, 2017). Logo aplikasi LAMMPS ditunjukkan pada gambar 2.7.

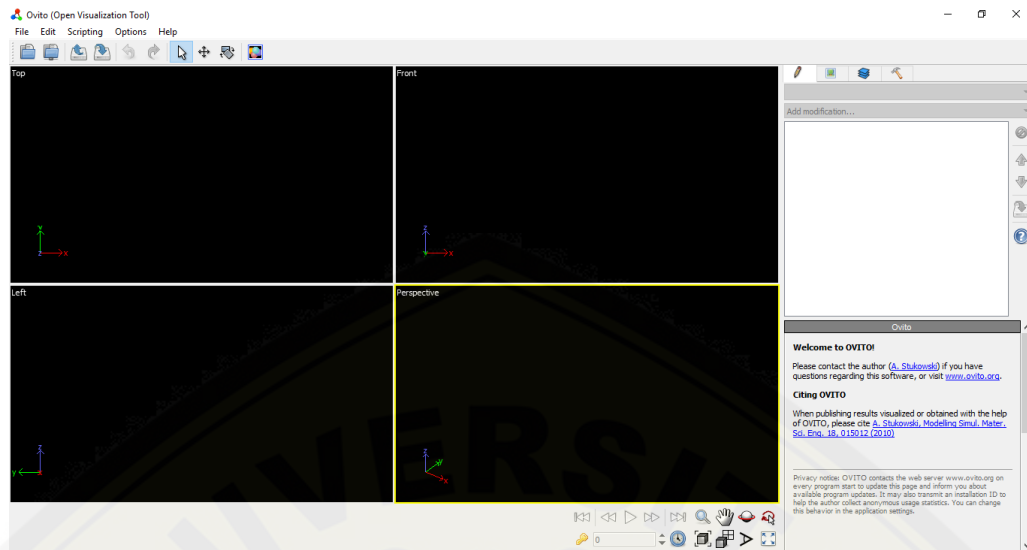


Gambar 2.6 Logo LAMMPS (Plimpton *et al.*, 2017)

Aplikasi LAMMPS juga dapat digunakan untuk menghitung besaran-besaran fisis termasuk perhitungan titik leleh. Untuk dapat menentukan titik leleh tersebut kita harus menganalisa terlebih dahulu misalnya dari kurva perubahan fase bahan yaitu kurva perubahan fase hasil energi potensial terhadap temperatur.

2.7.2 OVITO

Program OVITO (*Open Visualization Tool*) merupakan program pendukung tambahan yang dapat digunakan untuk memvisualisasikan pergerakan atom atau molekul. Aplikasi ini juga dapat digunakan untuk menganalisis data dan perhitungan struktur kristal dari simulasi dinamika molekular. OVITO menerjemahkan koordinat atom kemudian mempresentasikan dalam bentuk grafis atomik sebagai keluarannya (*output*) (Stukowski, 2009). Pada penelitian ini aplikasi OVITO digunakan untuk mengetahui pergerakan atom atau molekul dari hasil data simulasi menggunakan perangkat lunak LAMMPS.



Gambar 2.7 Tampilan aplikasi OVITO (Stukowski, 2009)

BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Metode Penelitian

Metode yang digunakan pada penelitian ini yaitu metode simulasi untuk memodelkan dan menggambarkan proses *melting* aluminium dengan variasi temperatur dan diameter partikel.

3.2 Waktu dan Tempat

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

3.3 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini yaitu laptop dengan prosessor *core* i5 64 bit yang telah diinstal sistem operasi Windows. Kemudian diinstal program Microsoft Office, dan program aplikasi LAMMPS dan OVITO.

3.4 Prosedur Penelitian

3.4.1 Prosedur Simulasi

Adapun tahapan untuk melakukan simulasi dinamika molekul adalah sebagai berikut:

- a. Membuat *script* serta memasukkan parameter-parameter yang akan digunakan pada simulasi. Selanjutnya simpan file dengan format *file .IN File*.

```

Berkas Ubah Tampilan Cari Alat Dokumen Bantuan
inal.mrg
#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
region         partikel sphere 0.0 0.0 0.0 12.38
create_box     1 partikel
create_atoms   1 region partikel
group          all type 1
mass           1 26.98
#-----POTENSIAL ATOM-----
pair_style     eam
pair_coeff     * * Al_mn.eam.fs Al
neighbor       2.86 bin
neigh_modify   delay 10
#-----PROSES SIMULASI-----
velocity       all create 200 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

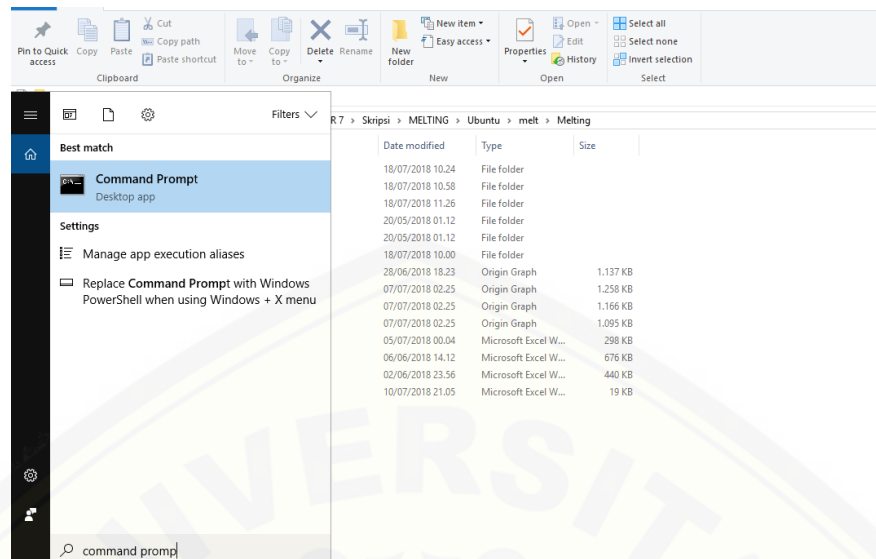
variable       Temperatur equal temp
variable       Tenergy equal etotal/atoms
variable       Densitas equal density

fix            1 all nvt temp 300.0 2700.0 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 rdf.dat mode vector # Step, RDF g(r),radial distance (r)
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_Tenergy v_Densitas file data.dat

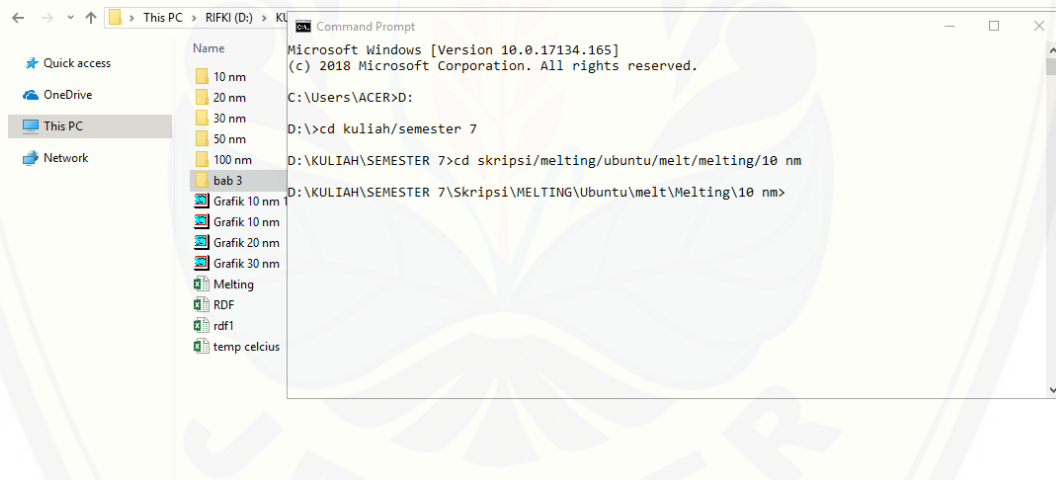
```

Gambar 3.1 *Input script* LAMMPS

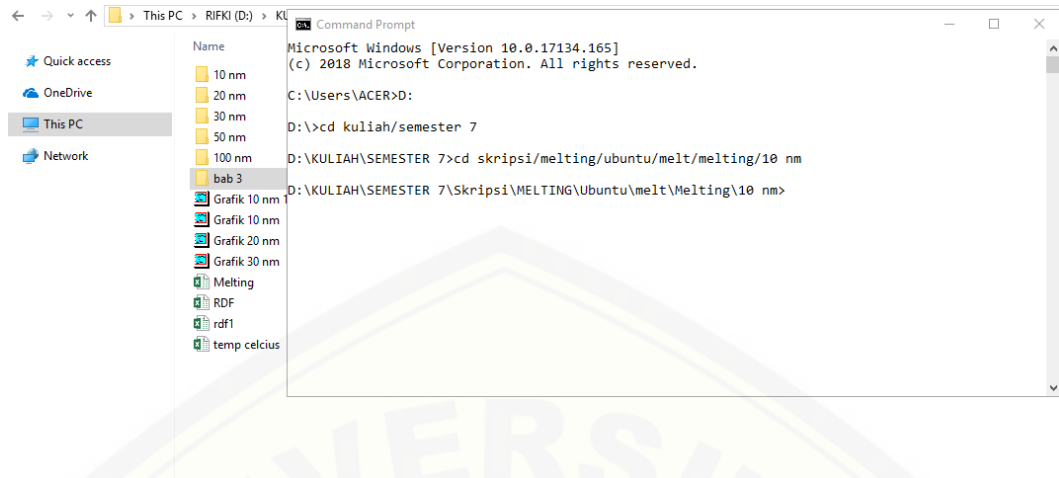
- 1) Struktur yang digunakan pada simulasi yaitu FCC dengan *lattice parameter* sebesar 4,05 Å.
 - 2) Temperatur yang digunakan yaitu 30 °C – 2427 °C.
 - 3) *Timestep* yang digunakan yaitu 0,0001 ps dengan *run* sebanyak 100000 langkah.
 - 4) Simulasi ini menggunakan NVT *ensemble*.
 - 5) Potensial yang digunakan yaitu EAM *Potential*
- b. Menjalankan simulasi LAMMPS
- 1) Buka CMD atau *Command Prompt* pada komputer

Gambar 3.2 Menu *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.



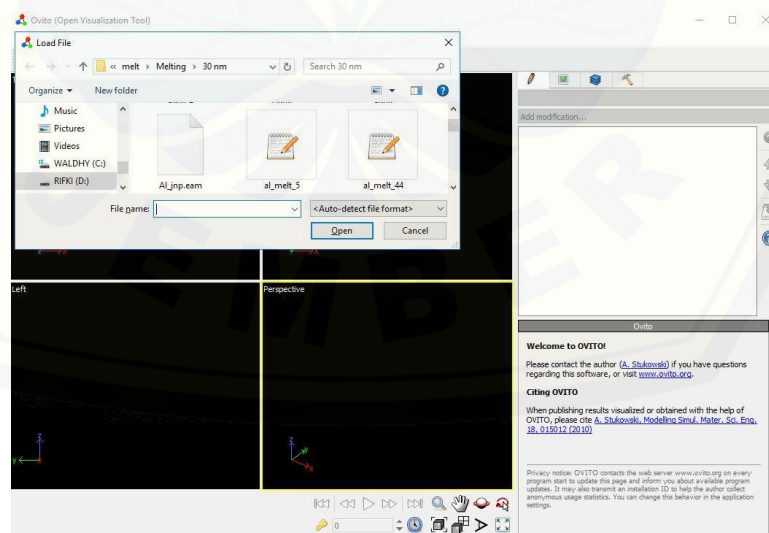
Gambar 3.4 Proses menjalankan LAMMPS

- 4) Apabila telah selesai, terdapat *file* log.lammps untuk menganalisis titik lebur, densitas dan viskositas aluminium serta *file dump* yang digunakan untuk visualisasi partikel dengan menggunakan OVITO.

3.4.2 Visualisasi dengan OVITO

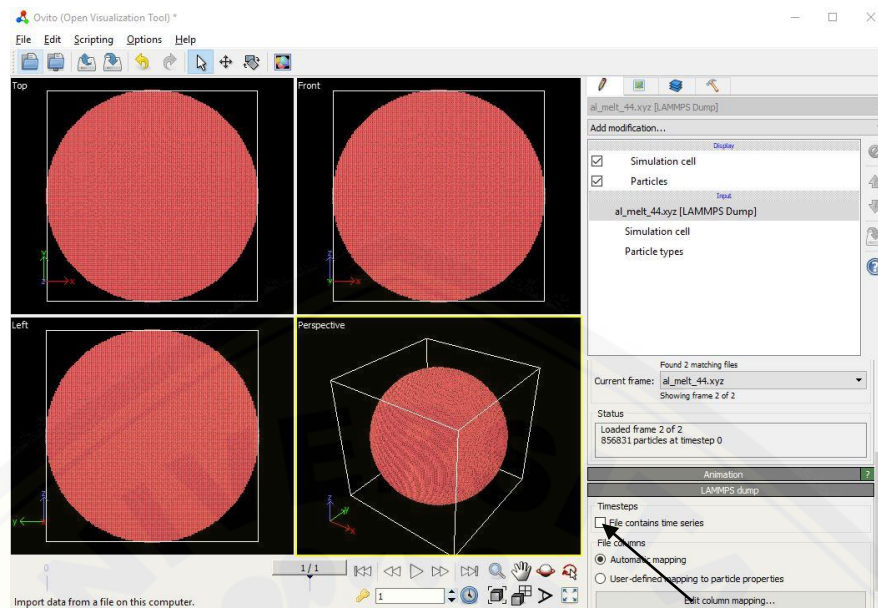
Visualisasi proses *melting* pada aluminium seri 1010 dapat dilihat dengan menggunakan aplikasi OVITO.

- Langkah pertama, buka file *dump* hasil simulasi dengan OVITO.



Gambar 3.5 Membuka program OVITO

- Menjalankan visualisasi atom aluminium dengan mengaktifkan *File Contains Time Series* pada OVITO



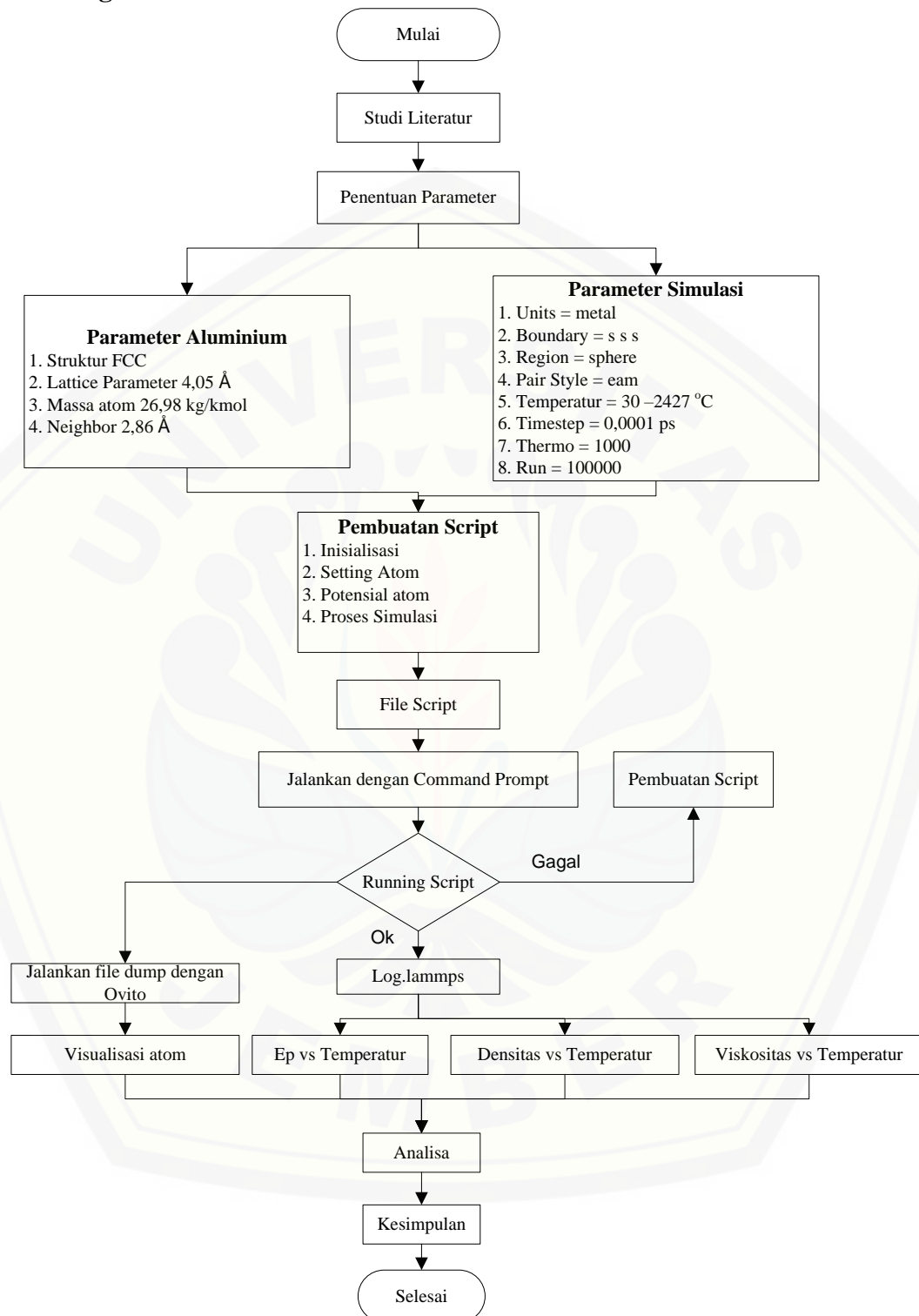
Gambar 3.6 Visualisasi dengan OVITO

3. *Render* kemudian simpan gambar hasil visualisasi

3.5 Metode Analisis

- Titik lebur aluminium seri 1010 dapat diketahui dengan grafik perubahan energi potensial terhadap temperatur. Perubahan ini dapat dianalisis dari data log.lammps hasil dari simulasi.
- Nilai temperatur yang semakin meningkat menyebabkan nilai densitas mengalami penurunan. Keadaan ini dapat diketahui dengan grafik densitas terhadap temperatur.
- Saat temperatur terus meningkat ($30\text{ }^{\circ}\text{C} - 2427\text{ }^{\circ}\text{C}$) menyebabkan nilai viskositas yang semakin menurun. Keadaan ini dapat dianalisis dari data viskositas hasil dari simulasi
- Pada saat aluminium mengalami pemanasan, menyebabkan atom-atom bergerak. Hal inilah yang menyebabkan terjadinya proses *melting*. Keadaan ini dapat dilihat pada visualisasi yang dihasilkan oleh OVITO

3.5 Diagram alir



Gambar 3.7 Diagram alir penelitian

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

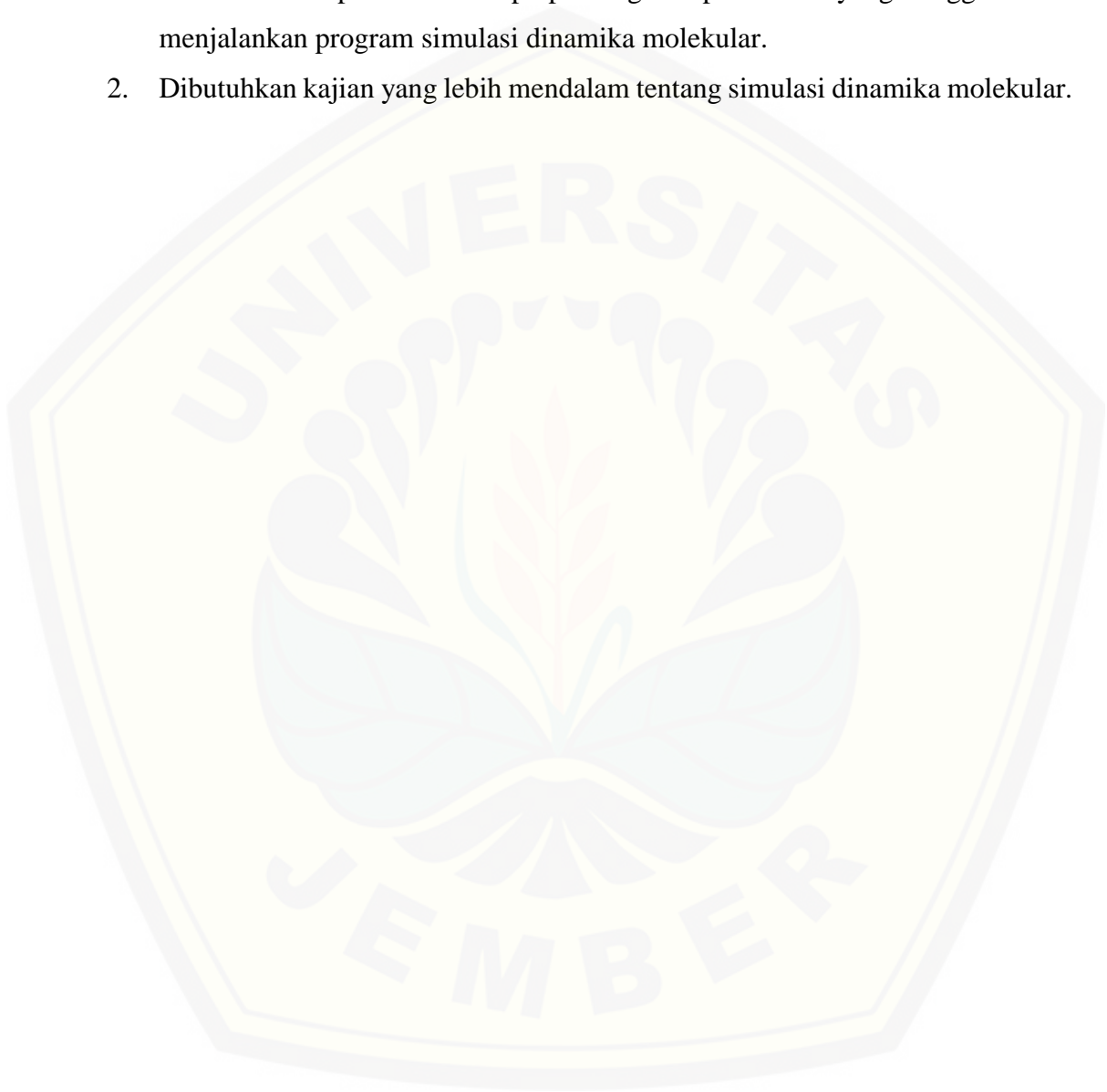
Berdasarkan hasil penelitian tentang simulasi dinamika molekular pada nanopartikel aluminium 10 nm, 20 nm dan 30 nm dapat disimpulkan beberapa hal sebagai berikut.

1. Pada hasil simulasi didapatkan nilai titik lebur dari aluminium pada masing-masing ukuran nanopartikel. Pada ukuran 10 nm memiliki nilai titik lebur sebesar 558 °C dan pada ukuran 20 nm memiliki nilai titik lebur sebesar 627 °C. Sedangkan pada ukuran 30 nm memiliki nilai titik lebur sebesar 747 °C.
2. Dari hasil simulasi di dapatkan nilai densitas semakin menurun pada saat mencapai titik leburnya. Untuk nanopartikel dengan ukuran 10 nm memiliki nilai densitas sebesar 1434 kg/m³ pada temperatur 558 °C, 20 nm sebesar 1320 kg/m³ pada temperatur 627 °C dan 30 nm sebesar 1265 kg/m³ pada temperatur 747 °C.
3. Hasil simulasi menunjukkan nilai viskositas pada masing-masing ukuran nanopartikel aluminium dengan temperatur *melting*. Pada ukuran 10 nm nilai viskositas sebesar 1,71 x 10⁻⁶ Pa.s pada temperatur 558 °C, dan ukuran 20 nm nilai viskositasnya sebesar 4,01 x 10⁻⁶ Pa.s pada temperatur 627 °C. Sedangkan nilai viskositas terbesar di hasilkan oleh partikel dengan ukuran 30 nm yaitu sebesar 2,71 x 10⁻⁵ Pa.s pada temperatur 747 °C.
4. Visualisasi struktur aluminium pada saat mencapai titik leburnya ditunjukkan dengan jumlah struktur kristal FCC yang mulai berkurang. Pada temperatur 1500 °C visualisasi dari partikel aluminium menunjukkan seluruh partikel telah berubah menjadi fasa liquid secara sempurna dengan jumlah struktur FCC sebesar 0 % dan jumlah struktur tak teratur sebesar 100 %.

5.2 Saran

Dari penelitian tentang simulasi dinamika molekular ini, maka terdapat beberapa saran sebagai berikut :

1. Gunakan komputer atau laptop dengan spesifikasi yang tinggi untuk menjalankan program simulasi dinamika molekular.
2. Dibutuhkan kajian yang lebih mendalam tentang simulasi dinamika molekular.



DAFTAR PUSTAKA

- Abdullah, M., Y. Virgus, Nirmin., dan Khairurrijal. 2008. Review : 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.
- Arifin, R., Munaji., dan Sudarno. 2016. Molecular Dynamics Study of Al147 Melting. *Applied Sciences, Engineering & Technology*. 13: 5-7.
- Astatik, R. P. A., Wuryanto., dan Masrukan. 2013. Aplikasi Integral Lipat Dua Dalam Perhitungan Volume Bangun Ruang Di R^3 Dengan Menggunakan Program Maple. *UJM*. 1: 24-31.
- Astra, I. M., dan I. Sugihartono. 2015. *Pengantar Fisika Zat Padat*. Banten-Indonesia: Universitas Terbuka
- Banerjee, S. 2008. Molecular Simulation Of Nanoscale Transport Phenomena. *Tesis*. Blacksburg, Virginia: Engineering Mechanics Virginia Polytechnic Institute and State University.
- Vestal, C. R., dan Z. J. Zhang. 2004. Magnetic spinel ferrite nanoparticles from microemulsions *Int. J. of Nanotechnology*. 1: 240-263.
- Davis, J. R. 1993. *ASM Specialty Handbook: Aluminum and Aluminum Alloys*. United States of America: ASM Handbook
- Dinsdale, A. T., dan P. N. Quedsted. 2004. The viscosity of aluminium and its alloys A review of data and models. *Journal of Materials Science*. 39: 7221 – 7228.
- Dzulfahmi, A. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada Carbon Nanotubes (CNT) Dengan Variasi Panjang. *Tesis*. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
- Glossary, O. G. 2007. Density Definition in Oil Gas Glossary. www.oilglossary.com. [27 Januari 2018].
- Jabbar, A. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbon Nanotube* Dengan Variasi Temperatur. *Tesis*. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
- Jensen, J. E., W. A. Tuttle, R. B. Stewart, H. Brechna., dan A. G. Prodell. 1980. *Brookhaven National Laboratory Selected Cryogenic Data Notebook* United States: United States Department of Energy

- Kirova, E. M., dan V. V. Pisarev. 2016. Study of viscosity of aluminum melt during glass transition by molecular dynamics and Green–Kubo formula. *J. Phys : Conf. Ser.* 774: 1-6.
- Kolotova, L. N., G.E.Norman., dan V.V.Pisarev. 2015. Glass transition of aluminum melt. Molecular dynamics study. *Journal of Non-Crystalline Solids.* 429: 98–103.
- Li, C. L., M. Kailaimu., dan H.-M. Duan. 2013. Molecular dynamical simulation of the structural and melting properties of Al196 cluster. *J. At. Mol. Sci.* 4: 367-374.
- Metco, O. 2016. Material Product Data Sheet 99% Aluminum Powder for Thermal Spray. www.oerlikon.com. [23 Januari 2018].
- Mills, K. C. 2002. *Recommended Values of Thermophysical Properties for Selected Commercial Alloys*. England: Woodhead Publishing Limited
- Noori, Z., M. Panjepour., dan M. Ahmadian. 2014. Study of the effect of grain size on melting temperature of Al nanocrystals by molecular dynamics simulation. *J. Mater. Res.* 30: 1648-1660.
- Novak, J. 2016. Molecular dynamics simulation of aluminium melting. *RMZ – M&G.* 63: 9-18.
- Nur, M. 2011. *Fisika Plasma dan Aplikasinya*. Semarang: Universitas Diponegoro
- Plimpton, S., A. Thompson, S. Moore., dan A. Kohlmeyer. 2017. *LAMMPS Users Manual*. Amerika Serikat: Sandia National Laboratories
- Puri, P., dan V. Yang. 2007. Effect of Particle Size on Melting of Aluminum at Nano Scales. *J. Phys. Chem. C.* 111: 11776-11783.
- Puri, P. 2008. Multi Scale Modeling of Ignition and Combustion of Micro and Nano Aluminum Particles. *Tesis*. Old Main, State College: Department of Mechanical and Nuclear Engineering Pennsylvania State University.
- Rusanov, A. I., dan E. N. Brodsakaya. 1977. The Molecular Dynamics Simulation of a Small Drop. *Journal of Colloid and Interface Science.* 62 542-555.
- Solhjo, S., A. Simchi., dan H. Aashuri. 2012. Molecular Dynamics Simulation of Melting, Solidification and Remelting Processes of Aluminum. *Transactions of Mechanical Engineering.* 36: 13-23.
- Stote, R., A. Dejaegere, D. Kuznetsov., dan L. Falquet. 1999. CHARMM Molecular Dynamics Simulation. www.ch.embnet.org/MD_tutorial/. [16 Januari 2018].

- Stukowski, A. 2009. OVITO (Open Visualization Tool). www.ovito.org. [19 Desember 2017].
- Sverdlin, A. 2003. *Handbook of Aluminum*. New York: Marcel Dekker, Inc.
- Tipler, P. A. 1998. *Fisika: Untuk Sains dan Teknik*. Jakarta: Erlangga
- Warsito, S. W. Suciwati., dan D. Isworo. 2012. Desain dan Analisis Pengukuran Viskositas dengan Metode Bola Jatuh Berbasis Sensor Optocoupler dan Sistem Akuisisinya pada Komputer. *Jurnal Natur Indonesia*. 14(3): 230-235.
- Widiasih, Herawati, H. Safitri., dan A. Arkundato. 2013. Penerapan Metode Dinamika Molekul untuk Pembelajaran: Konsep Titik Leleh dan Perubahan Wujud. *Teori dan Aplikasi Fisika*. 01: 171-175.
- Yin, J. 2016. Molecular Dynamics Study on the Grain Growth in Nanocrystalline Aluminum. *Tesis*. California Department of Mechanical Engineering Santa Clara University.
- Zhang, S.-L., T. Liu, C.-J. Li, S.-W. Yao, C.-X. Li, G.-J. Yang., dan M. Liu. 2015. Atmospheric plasma-sprayed $\text{La}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.2}\text{O}_3$ electrolyte membranes for intermediate-temperature solid oxide fuel cells. *J. Mater. Chem. A*, 3: 7535–7553.
- Zhang, S. 2011. Molecular Dynamics Simulation of Gold Nanoparticles and Surface Stress Effect. *Tesis*. Bethlehem, Pennsylvania: Computational and Engineering Mechanics Lehigh University.

LAMPIRAN

Lampiran 4.1 Nilai Energi Potensial Terhadap Temperatur pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm

A. 10 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36

ghost atom cutoff = 9.36

binsize = 4.68, bins = 22 22 22

4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam/alloy, 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) = 55.43 | 55.43 | 55.43 Mbytes

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
0	200	31677	-106815	-105996	-5664,03	-109245
1000	260,2707	31677	-105844	-104778	5653,14	-101536
2000	334,8236	31677	-105430	-104059	5184,945	-101085
3000	375,816	31677	-105339	-103800	3816,622	-101611
4000	392,858	31677	-105263	-103654	1743,951	-102654
5000	423,6148	31677	-105122	-103388	344,9828	-103190
6000	440,9858	31677	-105016	-103210	-824,755	-103683
7000	470,7438	31677	-104869	-102941	-2513,56	-104449
8000	489,0356	31677	-104710	-102708	-3544,36	-104848
9000	517,6327	31677	-104495	-102375	-4205,24	-104933

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
10000	539,6602	31677	-104301	-102091	-4712,04	-104972
11000	564,2596	31677	-104200	-101890	-5172,33	-105055
12000	587,1941	31677	-104085	-101681	-4812,82	-104623
13000	612,1553	31677	-103971	-101464	-3714,57	-103740
14000	634,5885	31677	-103903	-101304	-2890,56	-103068
15000	657,5308	31677	-103792	-101100	-1467,77	-101993
16000	685,2696	31677	-103739	-100933	1113,1	-100257
17000	704,2429	31677	-103699	-100815	4300,219	-98197,5
18000	732,5691	31677	-103582	-100583	6174,86	-96799,5
19000	752,647	31677	-103461	-100379	5814,694	-96855,5
20000	783,1259	31677	-103268	-100061	4973,189	-97054,9
21000	798,9093	31677	-103121	-99850	4510,793	-97086,3
22000	830,9756	31677	-102975	-99573	3975,54	-97118,3
23000	852,0079	31677	-102833	-99344,7	2274,033	-97936,7
24000	878,2891	31677	-102585	-98988,6	961,0331	-98388,8
25000	901,5683	31677	-102359	-98667,7	-707,674	-99112,9
26000	915,1116	31677	-102052	-98304,7	-2378,03	-99823,2
27000	948,3682	31677	-101764	-97881,2	-3458,35	-100101
28000	970,0295	31677	-101448	-97475,9	-4333,6	-100287
29000	994,306	31677	-101069	-96998,1	-4721,25	-100097
30000	1017,795	31677	-100777	-96609,9	-5084,43	-99968,3
31000	1036,309	31677	-100417	-96173,5	-4910,64	-99417,5
32000	1062,699	31677	-100182	-95830,6	-4237,5	-98647,3
33000	1091,184	31677	-100021	-95553,4	-2542,44	-97272,8
34000	1113,842	31677	-99844,3	-95283,7	-711,696	-95763,1
35000	1138,183	31677	-99700,4	-95040,2	1045,288	-94340,2
36000	1159,139	31677	-99557,7	-94811,7	2020,698	-93450,7
37000	1184,028	31677	-99322,8	-94474,9	2974,178	-92485,2
38000	1208,5	31677	-99072,8	-94124,6	3326,504	-91896,5
39000	1232,762	31677	-98748,4	-93700,9	3818,234	-91083,9
40000	1248,148	31677	-98415,3	-93304,9	4108,565	-90489,5
41000	1274,079	31677	-98141,6	-92924,9	4184,612	-90035,5
42000	1302,24	31677	-97803,3	-92471,3	3967,252	-89687,5
43000	1328,428	31677	-97502,5	-92063,3	3275,386	-89751,7
44000	1352,114	31677	-97190,1	-91653,9	2563,317	-89818,9
45000	1375,622	31677	-96883	-91250,6	1315,697	-90282,8
46000	1397,293	31677	-96544,2	-90823,1	188,122	-90683
47000	1420,117	31677	-96295,9	-90481,4	-1218,53	-91403,7
48000	1449,294	31677	-95961,1	-90027,1	-2001,97	-91539,9
49000	1472,206	31677	-95688,5	-89660,6	-3055,86	-91972,3
50000	1497,912	31677	-95342,9	-89209,8	-3436,19	-91875,4

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
51000	1527,643	31677	-95080,6	-88825,8	-3835,45	-91853,4
52000	1549,614	31677	-94816,4	-88471,6	-3921,77	-91599,6
53000	1570,274	31677	-94617	-88187,6	-3632,09	-91081,9
54000	1589,701	31677	-94452,7	-87943,7	-3644,72	-90868,2
55000	1622,878	31677	-94273,9	-87629,1	-3090,42	-90150,7
56000	1629,273	31677	-94194,9	-87523,9	-3032,92	-90038,7
57000	1669,932	31677	-94094,4	-87256,9	-2460,71	-89309,6
58000	1695,586	31677	-94020,3	-87077,8	-2120,02	-88837,7
59000	1712,488	31677	-93979,3	-86967,6	-1650,01	-88317,4
60000	1740,23	31677	-93944,3	-86819,1	-1297,46	-87881,8
61000	1761,881	31677	-93885,1	-86671,2	-975,144	-87480,9
62000	1797,22	31677	-93867,1	-86508,5	-758,383	-87150
63000	1805,505	31677	-93743	-86350,5	-115,133	-86448,9
64000	1828,027	31677	-93726,5	-86241,7	307,7668	-85981,6
65000	1851,827	31677	-93706,7	-86124,5	616,3695	-85612,9
66000	1867,972	31677	-93639,9	-85991,6	714,6694	-85404,3
67000	1921,323	31677	-93556,9	-85690,2	1183,083	-84708,8
68000	1938,373	31677	-93565,8	-85629,3	1630,45	-84283,4
69000	1959,793	31677	-93488,3	-85464,1	1967,23	-83846,4
70000	1973,763	31677	-93514,1	-85432,6	1777,587	-83960,9
71000	2001,29	31677	-93322,1	-85127,9	2206,684	-83265,8
72000	2024,092	31677	-93213,3	-84925,8	2396,122	-82946,7
73000	2052,402	31677	-93154,5	-84751,1	2310,687	-82813,2
74000	2078,577	31677	-93076	-84565,4	2137,257	-82768,9
75000	2099,897	31677	-92971	-84373,1	2103,852	-82596,4
76000	2119,895	31677	-92731,9	-84052,1	2044,201	-82302,9
77000	2139,735	31677	-92603,4	-83842,4	1324,332	-82693,9
78000	2189,75	31677	-92431,8	-83466	1552,5	-82131
79000	2199,972	31677	-92260,3	-83252,6	1164,086	-82245,7
80000	2225,776	31677	-92063,6	-82950,3	561,3751	-82462,2
81000	2229,426	31677	-91859,7	-82731,4	286,4536	-82481
82000	2251,818	31677	-91606,7	-82386,8	17,56745	-82370,9
83000	2290,033	31677	-91366,2	-81989,8	-335,035	-82296
84000	2309,063	31677	-91185,8	-81731,5	-570,439	-82257,4
85000	2339,69	31677	-91017,3	-81437,6	-836,874	-82232,5
86000	2372,091	31677	-90784,3	-81071,9	-908,335	-81930,3
87000	2386,725	31677	-90518,5	-80746,2	-578,457	-81304,5
88000	2388,361	31677	-90405	-80626	-1012,28	-81610
89000	2419,606	31677	-90167,5	-80260,6	-1070,54	-81306,3
90000	2465	31677	-89910,2	-79817,4	-682,059	-80499,3
91000	2483,387	31677	-89835,3	-79667,2	-1141,3	-80808,2

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
92000	2501,721	31677	-89629,1	-79385,9	-587,382	-79984,9
93000	2515,163	31677	-89494,7	-79196,5	-937,959	-80155,1
94000	2541,81	31677	-89322,5	-78915,2	-732,85	-79687,1
95000	2574,97	31677	-89236,5	-78693,4	-544,767	-79281
96000	2611,366	31677	-89090,6	-78398,5	-576,969	-79032,7
97000	2618,115	31677	-88982,2	-78262,4	-581,487	-78913,1
98000	2657,652	31677	-88782,1	-77900,5	-505,249	-78472,2
99000	2681,302	31677	-88647	-77668,5	-487,564	-78217,4
100000	2707,481	31677	-88496,7	-77411,1	-488,885	-77969,7

Loop time of 10384.9 on 1 procs for 100000 steps with 31677 atoms

Performance: 0.083 ns/day, 288.468 hours/ns, 9.629 timesteps/s

97.8% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

Pair	10087	10087	10087	0.0	97.13
Neigh	17.38	17.38	17.38	0.0	0.17
Comm	0.42539	0.42539	0.42539	0.0	0.00
Output	78.065	78.065	78.065	0.0	0.75
Modify	183.48	183.48	183.48	0.0	1.77
Other		18.86			0.18

Nlocal: 31677 ave 31677 max 31677 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: 1.94222e+006 ave 1.94222e+006 max 1.94222e+006 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 = 1942218

Ave neighs/atom = 61.3132

Neighbor list builds = 206

Dangerous builds = 0

#-----SELESAI-----

print "Simulasi Selesai"

Simulasi Selesai

Total wall time: 2:53:06

B. 20 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36
ghost atom cutoff = 9.36
binsize = 4.68, bins = 43 43 43
4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam/alloy, 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) = 454 | 454 | 454 Mbytes

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
0	200	253529	-859874	-853319	-2969,67	-867814
1000	203,9915	253529	-853927	-847242	3888,097	-828264
2000	318,0137	253529	-848832	-838411	6779,278	-805321
3000	364,3778	253529	-848288	-836347	6033,861	-806896
4000	397,4311	253529	-847139	-834115	5414,847	-807685
5000	421,2168	253529	-846545	-832741	4349,128	-811513
6000	443,5321	253529	-845723	-831188	3656,746	-813340
7000	466,8565	253529	-844905	-829606	2587,378	-816621
8000	491,6378	253529	-843894	-827783	1778,338	-818828
9000	516,274	253529	-842888	-825970	742,1698	-822213
10000	539,4688	253529	-841966	-824287	-319,952	-825913
11000	564,7895	253529	-840807	-822299	-1262,92	-828780
12000	587,3612	253529	-839696	-820447	-2279,91	-832191
13000	612,9343	253529	-838386	-818300	-3158,85	-834636
14000	636,1321	253529	-837002	-816156	-3942,57	-836617
15000	660,6296	253529	-835363	-813714	-4523,77	-837371
16000	683,6421	253529	-833913	-811509	-5277,14	-839189
17000	708,0984	253529	-832118	-808912	-5682,1	-838799
18000	732,2322	253529	-830518	-806522	-6086	-838685

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
19000	755,6949	253529	-828808	-804043	-6358,4	-837767
20000	780,1019	253529	-827223	-801658	-6647,36	-837066
21000	803,247	253529	-825558	-799235	-6908,28	-836026
22000	827,3877	253529	-824044	-796930	-7007,64	-834396
23000	852,8866	253529	-822427	-794477	-6877,72	-831231
24000	874,998	253529	-821080	-792406	-6619,46	-827831
25000	900,4651	253529	-819686	-790177	-6097,59	-822905
26000	924,1249	253529	-818443	-788159	-5462,39	-817581
27000	949,3136	253529	-817276	-786166	-4655,89	-811244
28000	971,5085	253529	-816337	-784500	-3757,69	-804759
29000	996,3903	253529	-815468	-782815	-2683,2	-797256
30000	1018,927	253529	-814515	-781124	-1523,63	-789305
31000	1043,868	253529	-813856	-779648	-379,114	-781683
32000	1066,936	253529	-812756	-777792	981,0436	-772546
33000	1091,326	253529	-811902	-776138	2198,4	-764368
34000	1115,824	253529	-810773	-774206	3448,228	-755659
35000	1140,745	253529	-809825	-772442	4474,029	-748468
36000	1161,833	253529	-808359	-770285	5370,559	-741261
37000	1188,366	253529	-806791	-767847	5980,179	-735386
38000	1212,972	253529	-804949	-765199	6707,479	-728759
39000	1235,111	253529	-803235	-762759	7113,178	-724083
40000	1257,846	253529	-801190	-759969	7460,323	-719282
41000	1284,491	253529	-799116	-757022	7529,721	-715614
42000	1305,031	253529	-796516	-753749	7722,314	-711067
43000	1331,076	253529	-794002	-750382	7753,632	-707230
44000	1355,08	253529	-791206	-746798	7677,155	-703760
45000	1380,76	253529	-788508	-743259	7280,772	-702031
46000	1404,48	253529	-785627	-739600	6944,395	-699784
47000	1429,841	253529	-783076	-736219	6314,442	-699611
48000	1449,63	253529	-780562	-733056	5497,757	-700834
49000	1478,169	253529	-778616	-730175	4352,235	-704406
50000	1499,033	253529	-776601	-727476	3118,632	-708618
51000	1527,561	253529	-774984	-724924	1810,752	-713878
52000	1546,052	253529	-773160	-722495	658,9724	-718376
53000	1573,23	253529	-771179	-719623	-354,014	-721870
54000	1595,986	253529	-769199	-716897	-1272,86	-725082
55000	1616,253	253529	-767194	-714228	-2046,11	-727500
56000	1646,274	253529	-764998	-711048	-2499,74	-727579
57000	1665,563	253529	-762808	-708226	-2982,53	-728188
58000	1694,176	253529	-760589	-705069	-3327,93	-727588
59000	1713,079	253529	-758519	-702380	-3549,31	-726893

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
60000	1740,276	253529	-756414	-699384	-3559,55	-724416
61000	1763,474	253529	-754398	-696607	-3741,33	-723129
62000	1789,654	253529	-752554	-693905	-3673,79	-720130
63000	1812,596	253529	-750947	-691546	-3800,79	-718951
64000	1835,427	253529	-749157	-689008	-3599,51	-715342
65000	1861,783	253529	-747411	-686398	-3388,65	-711578
66000	1878,739	253529	-746285	-684717	-3266,84	-709416
67000	1911,203	253529	-744887	-682255	-2999,54	-705156
68000	1933,585	253529	-743792	-680426	-2885,88	-702820
69000	1952,669	253529	-742445	-678454	-2774,61	-700228
70000	1982,14	253529	-741281	-676324	-2400,2	-695363
71000	2001,804	253529	-740216	-674614	-2397,93	-693760
72000	2028,454	253529	-739248	-672774	-2185,26	-690419
73000	2049,456	253529	-738396	-671233	-2053,62	-688063
74000	2071,86	253529	-737473	-669576	-1876,34	-685195
75000	2100,322	253529	-736709	-667879	-1842,97	-683260
76000	2120,763	253529	-735965	-666465	-1582,98	-679671
77000	2144,792	253529	-735233	-664946	-1406,12	-676745
78000	2167,242	253529	-734382	-663359	-1336,1	-674833
79000	2199,421	253529	-733563	-661485	-1104,22	-671036
80000	2218,183	253529	-732782	-660090	-961,776	-668540
81000	2247,071	253529	-731995	-658356	-821,519	-665593
82000	2266,228	253529	-731147	-656881	-751,138	-663552
83000	2294,058	253529	-730556	-655377	-592,199	-660644
84000	2313,936	253529	-729836	-654006	-512,501	-658594
85000	2337,498	253529	-729244	-652642	-508,699	-657271
86000	2359,839	253529	-728332	-650998	-433,221	-654971
87000	2387,645	253529	-727559	-649314	-294,84	-652054
88000	2413,65	253529	-726644	-647546	-228,841	-649682
89000	2435,895	253529	-726045	-646218	-245,939	-648545
90000	2456,797	253529	-725143	-644631	-187,159	-646408
91000	2478,542	253529	-724060	-642836	-69,4387	-643509
92000	2503,51	253529	-723187	-641144	-94,7965	-642067
93000	2533,637	253529	-722484	-639454	34,15244	-639119
94000	2555,033	253529	-721568	-637837	27,12803	-637569
95000	2579,85	253529	-720885	-636340	24,52049	-636096
96000	2603,26	253529	-719850	-634538	94,4548	-633589
97000	2626,353	253529	-718873	-632805	108,7033	-631702
98000	2649,26	253529	-718040	-631221	114,7864	-630044
99000	2677,257	253529	-717048	-629312	118,3669	-628094
100000	2697,593	253529	-715978	-627575	171,592	-625777

Loop time of 71864.6 on 1 procs for 100000 steps with 253529 atoms

Performance: 0.012 ns/day, 1996.238 hours/ns, 1.392 timesteps/s
99.1% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```
-----
Pair      | 69364 | 69364 | 69364 | 0.0 | 96.52
Neigh     | 145.21 | 145.21 | 145.21 | 0.0 | 0.20
Comm      | 3.9031 | 3.9031 | 3.9031 | 0.0 | 0.01
Output    | 532 | 532 | 532 | 0.0 | 0.74
Modify    | 1609.6 | 1609.6 | 1609.6 | 0.0 | 2.24
Other     | | 209.6 | | | 0.29
```

Nlocal: 253529 ave 253529 max 253529 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: 1.65475e+007 ave 1.65475e+007 max 1.65475e+007 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 = 16547487

Ave neighs/atom = 65.2686

Neighbor list builds = 223

Dangerous builds = 0

#----SIMULATION DONE-----

print "Simulation complete"

Simulation complete

Total wall time: 19:57:51

C. 30 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36

ghost atom cutoff = 9.36

binsize = 4.68, bins = 65 65 65

4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam/alloy, 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) = 1551 | 1551 | 1551 Mbytes

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
0	200	856831	-2,91E+06	-2,89E+06	-2130,73	-2,93E+06
1000	182,8571	856831	-2,89E+06	-2,87E+06	3375,837	-2,82E+06
2000	306,7251	856831	-2,88E+06	-2,84E+06	6674,504	-2,73E+06
3000	366,18	856831	-2,87E+06	-2,83E+06	7040,74	-2,71E+06
4000	395,1253	856831	-2,87E+06	-2,82E+06	6864,098	-2,71E+06
5000	421,3803	856831	-2,87E+06	-2,82E+06	6103,583	-2,72E+06
6000	443,4457	856831	-2,86E+06	-2,81E+06	5697,165	-2,72E+06
7000	467,1805	856831	-2,86E+06	-2,81E+06	5156,424	-2,72E+06
8000	492,2581	856831	-2,86E+06	-2,80E+06	4743,129	-2,72E+06
9000	515,7165	856831	-2,86E+06	-2,80E+06	4071,612	-2,73E+06
10000	540,5525	856831	-2,85E+06	-2,79E+06	3443,074	-2,73E+06
11000	564,2109	856831	-2,85E+06	-2,79E+06	2711,106	-2,74E+06
12000	587,7084	856831	-2,85E+06	-2,78E+06	1957,935	-2,75E+06
13000	611,9361	856831	-2,84E+06	-2,77E+06	1174,564	-2,75E+06
14000	636,0459	856831	-2,84E+06	-2,77E+06	422,6906	-2,76E+06
15000	660,0493	856831	-2,84E+06	-2,76E+06	-356,766	-2,77E+06
16000	683,9118	856831	-2,83E+06	-2,76E+06	-1130,71	-2,78E+06
17000	707,4582	856831	-2,83E+06	-2,75E+06	-1845,95	-2,78E+06
18000	731,8344	856831	-2,82E+06	-2,74E+06	-2575,83	-2,79E+06
19000	756,0088	856831	-2,82E+06	-2,74E+06	-3322,49	-2,80E+06
20000	779,9461	856831	-2,81E+06	-2,73E+06	-3949,74	-2,80E+06
21000	803,958	856831	-2,81E+06	-2,72E+06	-4529,27	-2,80E+06
22000	827,6333	856831	-2,80E+06	-2,71E+06	-4923,72	-2,80E+06
23000	852,2622	856831	-2,80E+06	-2,70E+06	-5348,72	-2,80E+06
24000	875,6216	856831	-2,79E+06	-2,69E+06	-5713,85	-2,80E+06
25000	899,6074	856831	-2,78E+06	-2,69E+06	-5990,3	-2,80E+06
26000	924,1331	856831	-2,78E+06	-2,68E+06	-6218,45	-2,79E+06
27000	947,8058	856831	-2,77E+06	-2,67E+06	-6417,14	-2,79E+06
28000	971,7483	856831	-2,77E+06	-2,66E+06	-6637,14	-2,78E+06
29000	996,1405	856831	-2,76E+06	-2,65E+06	-6665,42	-2,77E+06

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
30000	1019,618	856831	-2,75E+06	-2,64E+06	-6697,34	-2,76E+06
31000	1043,629	856831	-2,74E+06	-2,63E+06	-6659,6	-2,75E+06
32000	1068,004	856831	-2,74E+06	-2,62E+06	-6506,35	-2,74E+06
33000	1091,502	856831	-2,73E+06	-2,61E+06	-6284,53	-2,73E+06
34000	1116,023	856831	-2,72E+06	-2,60E+06	-5988,03	-2,71E+06
35000	1140,015	856831	-2,71E+06	-2,58E+06	-5502,02	-2,69E+06
36000	1164,512	856831	-2,70E+06	-2,57E+06	-5088,36	-2,67E+06
37000	1186,475	856831	-2,69E+06	-2,56E+06	-4489,1	-2,65E+06
38000	1212,297	856831	-2,68E+06	-2,55E+06	-3752,2	-2,62E+06
39000	1235,684	856831	-2,67E+06	-2,53E+06	-2960,05	-2,59E+06
40000	1260,543	856831	-2,66E+06	-2,52E+06	-2219,16	-2,57E+06
41000	1283,239	856831	-2,65E+06	-2,51E+06	-1580,45	-2,54E+06
42000	1308,43	856831	-2,64E+06	-2,50E+06	-1091,83	-2,52E+06
43000	1332,319	856831	-2,64E+06	-2,49E+06	-865,861	-2,50E+06
44000	1354,551	856831	-2,63E+06	-2,48E+06	-875,244	-2,50E+06
45000	1379,491	856831	-2,62E+06	-2,47E+06	-947,34	-2,49E+06
46000	1403,558	856831	-2,62E+06	-2,46E+06	-1056,86	-2,49E+06
47000	1428,374	856831	-2,61E+06	-2,46E+06	-1166,1	-2,48E+06
48000	1452,742	856831	-2,61E+06	-2,45E+06	-1211,31	-2,47E+06
49000	1477,286	856831	-2,61E+06	-2,44E+06	-1266,55	-2,47E+06
50000	1499,548	856831	-2,60E+06	-2,44E+06	-1247,12	-2,46E+06
51000	1523,916	856831	-2,60E+06	-2,43E+06	-1274,39	-2,46E+06
52000	1547,372	856831	-2,59E+06	-2,42E+06	-1201,44	-2,45E+06
53000	1573,729	856831	-2,59E+06	-2,42E+06	-1268,16	-2,44E+06
54000	1593,773	856831	-2,59E+06	-2,41E+06	-1222,76	-2,44E+06
55000	1621,532	856831	-2,58E+06	-2,41E+06	-1124,92	-2,43E+06
56000	1642,62	856831	-2,58E+06	-2,40E+06	-1069,81	-2,42E+06
57000	1666,166	856831	-2,58E+06	-2,39E+06	-1016,18	-2,41E+06
58000	1693,458	856831	-2,57E+06	-2,39E+06	-906,247	-2,41E+06
59000	1716,418	856831	-2,57E+06	-2,38E+06	-871,249	-2,40E+06
60000	1740,34	856831	-2,57E+06	-2,37E+06	-844,026	-2,39E+06
61000	1764,522	856831	-2,56E+06	-2,37E+06	-819,043	-2,39E+06
62000	1789,019	856831	-2,56E+06	-2,36E+06	-790,065	-2,38E+06
63000	1810,138	856831	-2,56E+06	-2,36E+06	-782,239	-2,37E+06
64000	1835,958	856831	-2,55E+06	-2,35E+06	-772,009	-2,37E+06
65000	1858,008	856831	-2,55E+06	-2,34E+06	-683,163	-2,36E+06
66000	1886,959	856831	-2,55E+06	-2,34E+06	-704,341	-2,35E+06
67000	1904,996	856831	-2,54E+06	-2,33E+06	-757,786	-2,35E+06
68000	1933,752	856831	-2,54E+06	-2,32E+06	-684,557	-2,34E+06
69000	1956,62	856831	-2,53E+06	-2,32E+06	-688,353	-2,33E+06
70000	1979,811	856831	-2,53E+06	-2,31E+06	-736,052	-2,33E+06

Step	Temp	Atoms	PotEng	TotEng	Press	Enthalpy
71000	2003,67	856831	-2,53E+06	-2,31E+06	-759,698	-2,32E+06
72000	2027,095	856831	-2,52E+06	-2,30E+06	-622,098	-2,31E+06
73000	2050,404	856831	-2,52E+06	-2,29E+06	-669,2	-2,31E+06
74000	2077,128	856831	-2,52E+06	-2,29E+06	-665,802	-2,30E+06
75000	2099,366	856831	-2,51E+06	-2,28E+06	-620,542	-2,29E+06
76000	2124,069	856831	-2,51E+06	-2,27E+06	-583,617	-2,29E+06
77000	2148,016	856831	-2,51E+06	-2,27E+06	-568,301	-2,28E+06
78000	2172,827	856831	-2,50E+06	-2,26E+06	-481,813	-2,27E+06
79000	2196,419	856831	-2,50E+06	-2,26E+06	-500,912	-2,27E+06
80000	2218,196	856831	-2,50E+06	-2,25E+06	-511,683	-2,26E+06
81000	2244,786	856831	-2,49E+06	-2,24E+06	-429,142	-2,25E+06
82000	2268,724	856831	-2,49E+06	-2,24E+06	-383,304	-2,25E+06
83000	2293,45	856831	-2,49E+06	-2,23E+06	-330,101	-2,24E+06
84000	2315,355	856831	-2,48E+06	-2,23E+06	-328,745	-2,23E+06
85000	2341,01	856831	-2,48E+06	-2,22E+06	-202,721	-2,22E+06
86000	2363,354	856831	-2,48E+06	-2,21E+06	-251,112	-2,22E+06
87000	2390,705	856831	-2,47E+06	-2,21E+06	-146,881	-2,21E+06
88000	2412,687	856831	-2,47E+06	-2,20E+06	-133,447	-2,21E+06
89000	2433,226	856831	-2,47E+06	-2,20E+06	-83,5325	-2,20E+06
90000	2457,628	856831	-2,46E+06	-2,19E+06	-80,1034	-2,19E+06
91000	2484,084	856831	-2,46E+06	-2,19E+06	33,30181	-2,18E+06
92000	2507,284	856831	-2,46E+06	-2,18E+06	89,49004	-2,18E+06
93000	2532,67	856831	-2,45E+06	-2,17E+06	115,3874	-2,17E+06
94000	2555,755	856831	-2,45E+06	-2,17E+06	98,41474	-2,17E+06
95000	2579,904	856831	-2,45E+06	-2,16E+06	114,0784	-2,16E+06
96000	2600,262	856831	-2,44E+06	-2,16E+06	191,6708	-2,15E+06
97000	2627,265	856831	-2,44E+06	-2,15E+06	141,5053	-2,15E+06
98000	2653,338	856831	-2,44E+06	-2,14E+06	227,5567	-2,14E+06
99000	2675,54	856831	-2,43E+06	-2,14E+06	303,7761	-2,13E+06
100000	2701,045	856831	-2,43E+06	-2,13E+06	313,4005	-2,12E+06

Loop time of 191851 on 1 procs for 100000 steps with 856831 atoms

Performance: 0.005 ns/day, 5329.191 hours/ns, 0.521 timesteps/s
99.8% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

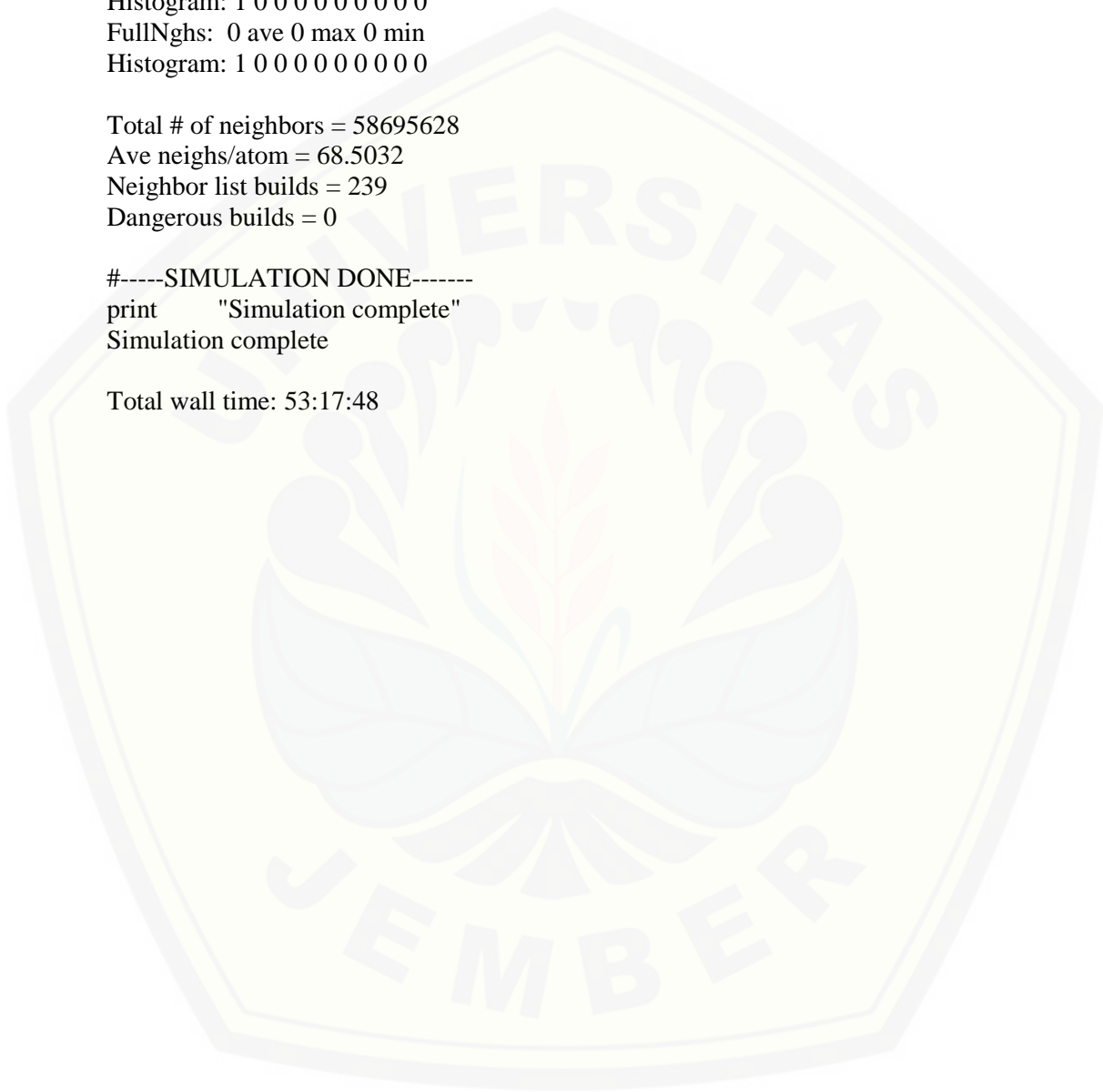
Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	1.8455e+005	1.8455e+005	1.8455e+005	0.0	96.19
Neigh	417.55	417.55	417.55	0.0	0.22
Comm	13.434	13.434	13.434	0.0	0.01
Output	1387	1387	1387	0.0	0.72
Modify	4797.8	4797.8	4797.8	0.0	2.50
Other		685.1			0.36

Nlocal: 856831 ave 856831 max 856831 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: 5.86956e+007 ave 5.86956e+007 max 5.86956e+007 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 = 58695628
Ave neighs/atom = 68.5032
Neighbor list builds = 239
Dangerous builds = 0

#-----SIMULATION DONE-----
print "Simulation complete"
Simulation complete

Total wall time: 53:17:48



Lampiran 4.2 Nilai Densitas Nanopartikel Aluminium pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm

A. 10 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36

ghost atom cutoff = 9.36

binsize = 4.68, bins = 22 22 22

4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam/alloy, 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) = 55.43 | 55.43 | 55.43 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
0	200	918898,6	1,54452	31677
1000	260,2707	918898,6	1,54452	31677
2000	334,8236	918898,6	1,54452	31677
3000	375,816	918898,6	1,54452	31677
4000	392,858	918898,6	1,54452	31677
5000	423,6148	918898,6	1,54452	31677
6000	440,9858	918898,6	1,54452	31677
7000	470,7438	961173,8	1,47658	31677
8000	489,0356	967611,5	1,46676	31677
9000	517,6327	974452,8	1,45646	31677
10000	539,6602	979526,7	1,44892	31677
11000	564,2596	980557,3	1,44739	31677

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
12000	587,1941	979307,9	1,44924	31677
13000	612,1553	981527,3	1,44596	31677
14000	634,5885	977319,4	1,45219	31677
15000	657,5308	974740,8	1,45603	31677
16000	685,2696	972368	1,45958	31677
17000	704,2429	975294,5	1,4552	31677
18000	732,5691	981707,5	1,4457	31677
19000	752,647	970851,3	1,46186	31677
20000	783,1259	968523,7	1,46538	31677
21000	798,9093	981615,7	1,44583	31677
22000	830,9756	989269,8	1,43465	31677
23000	852,0079	992030,7	1,43065	31677
24000	878,2891	999933,5	1,41935	31677
25000	901,5683	1,01E+06	1,40804	31677
26000	915,1116	1,02E+06	1,38723	31677
27000	948,3682	1,03E+06	1,38011	31677
28000	970,0295	1,04E+06	1,36559	31677
29000	994,306	1,05E+06	1,34955	31677
30000	1017,795	1,06E+06	1,34107	31677
31000	1036,309	1,06E+06	1,34093	31677
32000	1062,699	1,06E+06	1,33265	31677
33000	1091,184	1,08E+06	1,30984	31677
34000	1113,842	1,08E+06	1,31508	31677
35000	1138,183	1,07E+06	1,32271	31677
36000	1159,139	1,08E+06	1,31518	31677
37000	1184,028	1,07E+06	1,32418	31677
38000	1208,5	1,07E+06	1,32248	31677
39000	1232,762	1,10E+06	1,29242	31677
40000	1248,148	1,10E+06	1,2927	31677
41000	1274,079	1,11E+06	1,2829	31677
42000	1302,24	1,12E+06	1,2624	31677
43000	1328,428	1,13E+06	1,25516	31677
44000	1352,114	1,15E+06	1,23737	31677
45000	1375,622	1,18E+06	1,20435	31677
46000	1397,293	1,19E+06	1,19012	31677
47000	1420,117	1,21E+06	1,17033	31677
48000	1449,294	1,21E+06	1,17226	31677
49000	1472,206	1,21E+06	1,17102	31677
50000	1497,912	1,24E+06	1,14193	31677
51000	1527,643	1,26E+06	1,12218	31677
52000	1549,614	1,28E+06	1,11062	31677

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
53000	1570,274	1,28E+06	1,11162	31677
54000	1589,701	1,29E+06	1,10401	31677
55000	1622,878	1,31E+06	1,08566	31677
56000	1629,273	1,33E+06	1,06835	31677
57000	1669,932	1,34E+06	1,06193	31677
58000	1695,586	1,33E+06	1,06712	31677
59000	1712,488	1,31E+06	1,08284	31677
60000	1740,23	1,31E+06	1,08153	31677
61000	1761,881	1,33E+06	1,06689	31677
62000	1797,22	1,36E+06	1,04717	31677
63000	1805,505	1,37E+06	1,03596	31677
64000	1828,027	1,35E+06	1,04824	31677
65000	1851,827	1,33E+06	1,06728	31677
66000	1867,972	1,32E+06	1,07802	31677
67000	1921,323	1,33E+06	1,06793	31677
68000	1938,373	1,32E+06	1,07316	31677
69000	1959,793	1,32E+06	1,07726	31677
70000	1973,763	1,33E+06	1,06995	31677
71000	2001,29	1,35E+06	1,04977	31677
72000	2024,092	1,32E+06	1,07247	31677
73000	2052,402	1,34E+06	1,05625	31677
74000	2078,577	1,35E+06	1,05385	31677
75000	2099,897	1,35E+06	1,04893	31677
76000	2119,895	1,37E+06	1,03523	31677
77000	2139,735	1,39E+06	1,02145	31677
78000	2189,75	1,38E+06	1,0302	31677
79000	2199,972	1,39E+06	1,02413	31677
80000	2225,776	1,39E+06	1,01888	31677
81000	2229,426	1,40E+06	1,01312	31677
82000	2251,818	1,45E+06	0,97954	31677
83000	2290,033	1,46E+06	0,96929	31677
84000	2309,063	1,48E+06	0,96091	31677
85000	2339,69	1,52E+06	0,93266	31677
86000	2372,091	1,51E+06	0,93728	31677
87000	2386,725	1,55E+06	0,91791	31677
88000	2388,361	1,56E+06	0,91133	31677
89000	2419,606	1,57E+06	0,90686	31677
90000	2465	1,60E+06	0,88596	31677
91000	2483,387	1,60E+06	0,88604	31677
92000	2501,721	1,63E+06	0,86871	31677
93000	2515,163	1,64E+06	0,86675	31677

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
94000	2541,81	1,69E+06	0,84094	31677
95000	2574,97	1,73E+06	0,8213	31677
96000	2611,366	1,76E+06	0,8059	31677
97000	2618,115	1,79E+06	0,79164	31677
98000	2657,652	1,81E+06	0,78288	31677
99000	2681,302	1,80E+06	0,78686	31677
100000	2707,481	1,83E+06	0,77526	31677

Loop time of 10384.9 on 1 procs for 100000 steps with 31677 atoms

Performance: 0.083 ns/day, 288.468 hours/ns, 9.629 timesteps/s

97.8% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```
-----
Pair      | 10087    | 10087    | 10087    | 0.0    | 97.13
Neigh    | 17.38    | 17.38    | 17.38    | 0.0    | 0.17
Comm     | 0.42539  | 0.42539  | 0.42539  | 0.0    | 0.00
Output  | 78.065   | 78.065   | 78.065   | 0.0    | 0.75
Modify  | 183.48   | 183.48   | 183.48   | 0.0    | 1.77
Other   |          | 18.86    |          |        | 0.18
```

Nlocal: 31677 ave 31677 max 31677 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: 1.94222e+006 ave 1.94222e+006 max 1.94222e+006 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 = 1942218

Ave neighs/atom = 61.3132

Neighbor list builds = 206

Dangerous builds = 0

#-----SELESAI-----

print "Simulasi Selesai"

Simulasi Selesai

Total wall time: 2:53:06

B. 20 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36

ghost atom cutoff = 9.36
 binsize = 4.68, bins = 43 43 43
 4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

- (1) pair eam/alloy, 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) = 454 | 454 | 454 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
0	200	7,82E+06	1,45254	253529
1000	203,9915	7,82E+06	1,45254	253529
2000	318,0137	7,82E+06	1,45254	253529
3000	364,3778	7,82E+06	1,45254	253529
4000	397,4311	7,82E+06	1,45254	253529
5000	421,2168	7,82E+06	1,45254	253529
6000	443,5321	7,82E+06	1,45254	253529
7000	466,8565	8,04E+06	1,41269	253529
8000	491,6378	8,07E+06	1,40796	253529
9000	516,274	8,11E+06	1,40061	253529
10000	539,4688	8,14E+06	1,39487	253529
11000	564,7895	8,22E+06	1,38153	253529
12000	587,3612	8,25E+06	1,37648	253529
13000	612,9343	8,29E+06	1,37092	253529
14000	636,1321	8,31E+06	1,3661	253529
15000	660,6296	8,38E+06	1,35572	253529
16000	683,6421	8,40E+06	1,35164	253529
17000	708,0984	8,43E+06	1,34792	253529
18000	732,2322	8,47E+06	1,34153	253529
19000	755,6949	8,50E+06	1,33669	253529

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
20000	780,1019	8,53E+06	1,33102	253529
21000	803,247	8,53E+06	1,33126	253529
22000	827,3877	8,57E+06	1,32605	253529
23000	852,8866	8,56E+06	1,3267	253529
24000	874,998	8,57E+06	1,32477	253529
25000	900,4651	8,60E+06	1,3209	253529
26000	924,1249	8,63E+06	1,31626	253529
27000	949,3136	8,63E+06	1,31625	253529
28000	971,5085	8,64E+06	1,31499	253529
29000	996,3903	8,62E+06	1,31737	253529
30000	1018,927	8,60E+06	1,31508	253529
31000	1043,868	8,60E+06	1,31518	253529
32000	1066,936	8,57E+06	1,31404	253529
33000	1091,326	8,58E+06	1,25205	253529
34000	1115,824	8,62E+06	1,25116	253529
35000	1140,745	8,59E+06	1,24522	253529
36000	1161,833	8,66E+06	1,23737	253529
37000	1188,366	8,70E+06	1,22293	253529
38000	1212,972	8,70E+06	1,21548	253529
39000	1235,111	8,71E+06	1,2097	253529
40000	1257,846	8,74E+06	1,19747	253529
41000	1284,491	8,81E+06	1,18905	253529
42000	1305,031	8,86E+06	1,17244	253529
43000	1331,076	8,92E+06	1,17102	253529
44000	1355,08	8,98E+06	1,16216	253529
45000	1380,76	9,07E+06	1,15334	253529
46000	1404,48	9,19E+06	1,13443	253529
47000	1429,841	9,29E+06	1,12293	253529
48000	1449,63	9,39E+06	1,1197	253529
49000	1478,169	9,49E+06	1,11674	253529
50000	1499,033	9,69E+06	1,11244	253529
51000	1527,561	9,77E+06	1,11116	253529
52000	1546,052	1,00E+07	1,10245	253529
53000	1573,23	1,02E+07	1,10101	253529
54000	1595,986	1,03E+07	1,10036	253529
55000	1616,253	1,04E+07	1,09303	253529
56000	1646,274	1,06E+07	1,07206	253529
57000	1665,563	1,07E+07	1,05928	253529
58000	1694,176	1,08E+07	1,04776	253529
59000	1713,079	1,11E+07	1,02654	253529
60000	1740,276	1,13E+07	1,00816	253529

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
61000	1763,474	1,14E+07	1,00012	253529
62000	1789,654	1,14E+07	0,99318	253529
63000	1812,596	1,16E+07	0,9833	253529
64000	1835,427	1,17E+07	0,9691	253529
65000	1861,783	1,19E+07	0,95413	253529
66000	1878,739	1,21E+07	0,93775	253529
67000	1911,203	1,22E+07	0,92863	253529
68000	1933,585	1,24E+07	0,91368	253529
69000	1952,669	1,26E+07	0,90344	253529
70000	1982,14	1,27E+07	0,8938	253529
71000	2001,804	1,28E+07	0,88797	253529
72000	2028,454	1,29E+07	0,87803	253529
73000	2049,456	1,31E+07	0,86511	253529
74000	2071,86	1,33E+07	0,85173	253529
75000	2100,322	1,34E+07	0,84949	253529
76000	2120,763	1,34E+07	0,84987	253529
77000	2144,792	1,34E+07	0,84494	253529
78000	2167,242	1,38E+07	0,82555	253529
79000	2199,421	1,39E+07	0,81972	253529
80000	2218,183	1,41E+07	0,80701	253529
81000	2247,071	1,41E+07	0,80477	253529
82000	2266,228	1,42E+07	0,79826	253529
83000	2294,058	1,42E+07	0,79715	253529
84000	2313,936	1,43E+07	0,79202	253529
85000	2337,498	1,46E+07	0,77913	253529
86000	2359,839	1,47E+07	0,77299	253529
87000	2387,645	1,49E+07	0,76293	253529
88000	2413,65	1,50E+07	0,75963	253529
89000	2435,895	1,52E+07	0,74927	253529
90000	2456,797	1,52E+07	0,74699	253529
91000	2478,542	1,55E+07	0,73139	253529
92000	2503,51	1,56E+07	0,72831	253529
93000	2533,637	1,57E+07	0,72316	253529
94000	2555,033	1,58E+07	0,71773	253529
95000	2579,85	1,60E+07	0,71086	253529
96000	2603,26	1,61E+07	0,70508	253529
97000	2626,353	1,63E+07	0,69865	253529
98000	2649,26	1,64E+07	0,69181	253529
99000	2677,257	1,65E+07	0,68899	253529
100000	2697,593	1,68E+07	0,67652	253529

Loop time of 71864.6 on 1 procs for 100000 steps with 253529 atoms

Performance: 0.012 ns/day, 1996.238 hours/ns, 1.392 timesteps/s
99.1% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	69364	69364	69364	0.0	96.52
Neigh	145.21	145.21	145.21	0.0	0.20
Comm	3.9031	3.9031	3.9031	0.0	0.01
Output	532	532	532	0.0	0.74
Modify	1609.6	1609.6	1609.6	0.0	2.24
Other		209.6			0.29

Nlocal: 253529 ave 253529 max 253529 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: 1.65475e+007 ave 1.65475e+007 max 1.65475e+007 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 = 16547487

Ave neighs/atom = 65.2686

Neighbor list builds = 223

Dangerous builds = 0

#-----SIMULATION DONE-----

print "Simulation complete"

Simulation complete

Total wall time: 19:57:51

C. 30 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 9.36

ghost atom cutoff = 9.36

binsize = 4.68, bins = 65 65 65

4 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 3 0

(1) pair eam/alloy, 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) = 1551 | 1551 | 1551 Mbytes

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
0	200	2,69E+07	1,42524	856831
1000	182,8571	2,69E+07	1,42524	856831
2000	306,7251	2,69E+07	1,42524	856831
3000	366,18	2,69E+07	1,42524	856831
4000	395,1253	2,69E+07	1,42524	856831
5000	421,3803	2,73E+07	1,40551	856831
6000	443,4457	2,74E+07	1,40068	856831
7000	467,1805	2,75E+07	1,39393	856831
8000	492,2581	2,76E+07	1,39289	856831
9000	515,7165	2,77E+07	1,38583	856831
10000	540,5525	2,78E+07	1,37902	856831
11000	564,2109	2,78E+07	1,37913	856831
12000	587,7084	2,79E+07	1,37422	856831
13000	611,9361	2,80E+07	1,36983	856831
14000	636,0459	2,82E+07	1,3633	856831
15000	660,0493	2,83E+07	1,35733	856831
16000	683,9118	2,84E+07	1,35208	856831
17000	707,4582	2,85E+07	1,34901	856831
18000	731,8344	2,86E+07	1,34003	856831
19000	756,0088	2,87E+07	1,33739	856831
20000	779,9461	2,88E+07	1,33123	856831
21000	803,958	2,90E+07	1,32468	856831
22000	827,6333	2,92E+07	1,31404	856831
23000	852,2622	2,94E+07	1,30549	856831
24000	875,6216	2,95E+07	1,30332	856831
25000	899,6074	2,95E+07	1,30022	856831
26000	924,1331	2,99E+07	1,28551	856831
27000	947,8058	2,99E+07	1,28392	856831
28000	971,7483	3,01E+07	1,27749	856831
29000	996,1405	3,02E+07	1,26992	856831

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
30000	1019,618	3,03E+07	1,26542	856831
31000	1043,629	3,05E+07	1,25893	856831
32000	1068,004	3,06E+07	1,25465	856831
33000	1091,502	3,08E+07	1,24522	856831
34000	1116,023	3,08E+07	1,24494	856831
35000	1140,015	3,10E+07	1,2403	856831
36000	1164,512	3,10E+07	1,22206	856831
37000	1186,475	3,11E+07	1,22129	856831
38000	1212,297	3,12E+07	1,2202	856831
39000	1235,684	3,14E+07	1,21206	856831
40000	1260,543	3,16E+07	1,21548	856831
41000	1283,239	3,17E+07	1,21148	856831
42000	1308,43	3,18E+07	1,20598	856831
43000	1332,319	3,18E+07	1,20634	856831
44000	1354,551	3,19E+07	1,20327	856831
45000	1379,491	3,20E+07	1,19804	856831
46000	1403,558	3,21E+07	1,19459	856831
47000	1428,374	3,22E+07	1,19171	856831
48000	1452,742	3,24E+07	1,18377	856831
49000	1477,286	3,23E+07	1,18905	856831
50000	1499,548	3,24E+07	1,18518	856831
51000	1523,916	3,25E+07	1,18101	856831
52000	1547,372	3,26E+07	1,17776	856831
53000	1573,729	3,28E+07	1,17126	856831
54000	1593,773	3,28E+07	1,16969	856831
55000	1621,532	3,30E+07	1,16208	856831
56000	1642,62	3,29E+07	1,16725	856831
57000	1666,166	3,29E+07	1,16621	856831
58000	1693,458	3,29E+07	1,16659	856831
59000	1716,418	3,33E+07	1,15203	856831
60000	1740,34	3,34E+07	1,14988	856831
61000	1764,522	3,33E+07	1,15154	856831
62000	1789,019	3,32E+07	1,15537	856831
63000	1810,138	3,33E+07	1,15334	856831
64000	1835,958	3,33E+07	1,15231	856831
65000	1858,008	3,34E+07	1,14938	856831
66000	1886,959	3,38E+07	1,13555	856831
67000	1904,996	3,38E+07	1,13511	856831
68000	1933,752	3,41E+07	1,12736	856831
69000	1956,62	3,41E+07	1,12696	856831
70000	1979,811	3,41E+07	1,12656	856831

Step	Temp	Volume	Density	Atoms
71000	2003,67	3,42E+07	1,12354	856831
72000	2027,095	3,40E+07	1,12819	856831
73000	2050,404	3,42E+07	1,12409	856831
74000	2077,128	3,42E+07	1,12174	856831
75000	2099,366	3,42E+07	1,12094	856831
76000	2124,069	3,44E+07	1,11728	856831
77000	2148,016	3,46E+07	1,11045	856831
78000	2172,827	3,48E+07	1,10454	856831
79000	2196,419	3,48E+07	1,10335	856831
80000	2218,196	3,49E+07	1,10036	856831
81000	2244,786	3,51E+07	1,0948	856831
82000	2268,724	3,51E+07	1,09252	856831
83000	2293,45	3,51E+07	1,09479	856831
84000	2315,355	3,53E+07	1,08757	856831
85000	2341,01	3,53E+07	1,0881	856831
86000	2363,354	3,55E+07	1,08054	856831
87000	2390,705	3,56E+07	1,07692	856831
88000	2412,687	3,59E+07	1,06948	856831
89000	2433,226	3,60E+07	1,06708	856831
90000	2457,628	3,58E+07	1,07096	856831
91000	2484,084	3,56E+07	1,07756	856831
92000	2507,284	3,57E+07	1,07429	856831
93000	2532,67	3,59E+07	1,07048	856831
94000	2555,755	3,60E+07	1,06728	856831
95000	2579,904	3,63E+07	1,05751	856831
96000	2600,262	3,64E+07	1,05505	856831
97000	2627,265	3,62E+07	1,06121	856831
98000	2653,338	3,63E+07	1,0572	856831
99000	2675,54	3,65E+07	1,05316	856831
100000	2701,045	3,66E+07	1,04805	856831

Loop time of 191851 on 1 procs for 100000 steps with 856831 atoms

Performance: 0.005 ns/day, 5329.191 hours/ns, 0.521 timesteps/s
99.8% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

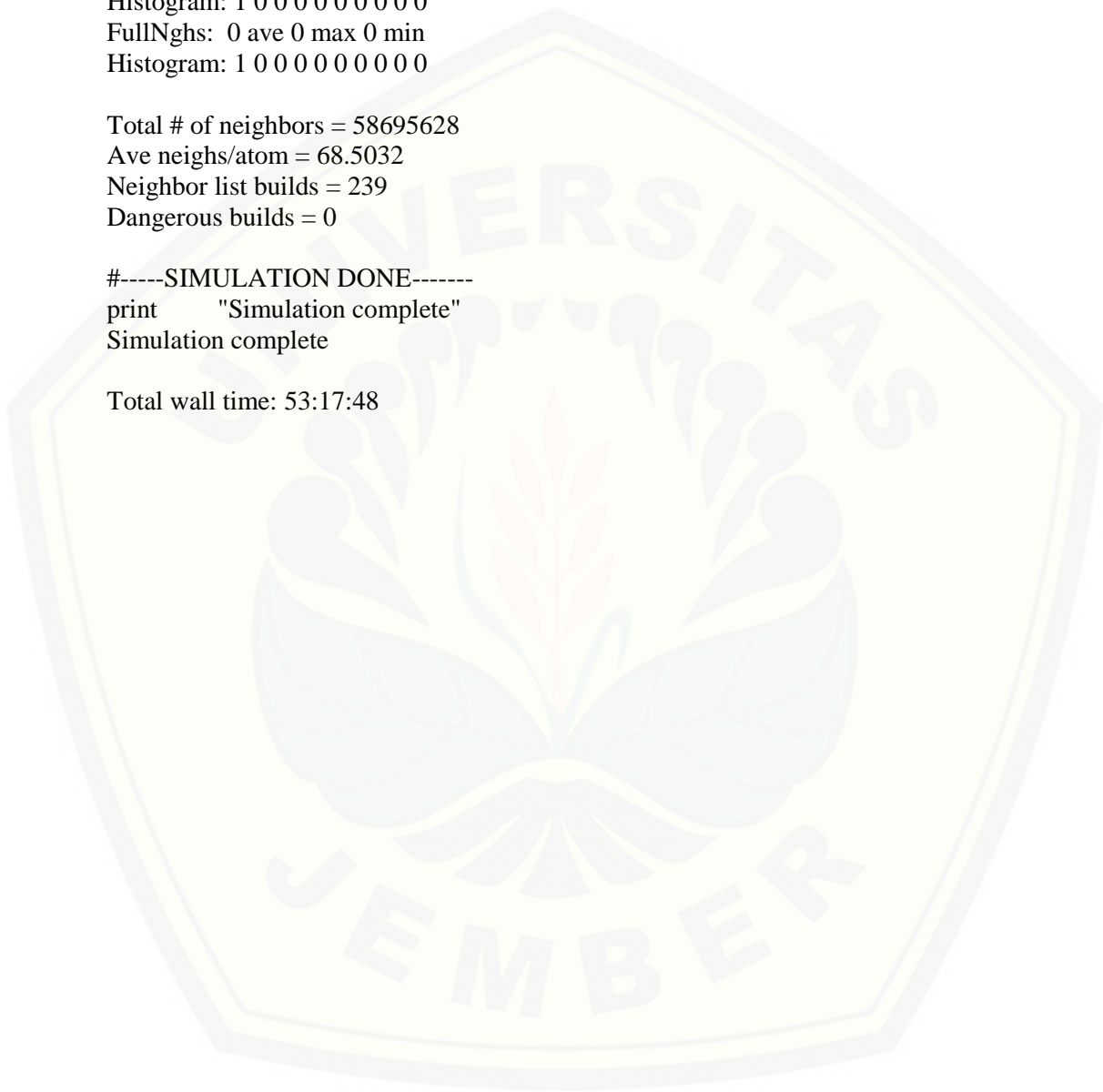
Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	1.8455e+005	1.8455e+005	1.8455e+005	0.0	96.19
Neigh	417.55	417.55	417.55	0.0	0.22
Comm	13.434	13.434	13.434	0.0	0.01
Output	1387	1387	1387	0.0	0.72
Modify	4797.8	4797.8	4797.8	0.0	2.50
Other		685.1			0.36

Nlocal: 856831 ave 856831 max 856831 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: 5.86956e+007 ave 5.86956e+007 max 5.86956e+007 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 = 58695628
Ave neighs/atom = 68.5032
Neighbor list builds = 239
Dangerous builds = 0

#-----SIMULATION DONE-----
print "Simulation complete"
Simulation complete

Total wall time: 53:17:48



Lampiran 4.3 Nilai Viskositas Nanopartikel Aluminum pada Ukuran 10 nm, 20 nm, dan 30 nm

A. 10 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
 max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
 master list distance cutoff = 8
 ghost atom cutoff = 8
 binsize = 4, bins = 26 26 26
 1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0
 (1) pair eam, perpetual
 attributes: half, newton on
 pair build: half/bin/atomonly/newton
 stencil: half/bin/3d/newton
 bin: standard

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 16.96 | 16.96 | 16.96 Mbytes

Step	Temp	E_pair	E_mol	TotEng	Press	Volume
0	700	-104924	0	-10503,4	3690,608	918898,6
2000	700,12228	-55463,1	0	39020,84	8982,452	1,10E+06
4000	700,49873	-56682,6	0	37472,38	6879,983	1,33E+06
6000	703,14614	-59430,9	0	35597,18	5313,498	1,62E+06
8000	697,68141	-61154,1	0	33339,27	3972,007	2,02E+06

Loop time of 1237.48 on 1 procs for 8000 steps with 31677 atoms

Performance: 0.056 ns/day, 429.680 hours/ns, 6.465 timesteps/s
 91.3% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	1189.4	1189.4	1189.4	0.0	96.12
Neigh	2.5523	2.5523	2.5523	0.0	0.21
Comm	0.14306	0.14306	0.14306	0.0	0.01
Output	13.573	13.573	13.573	0.0	1.10
Modify	26.732	26.732	26.732	0.0	2.16
Other		5.071			0.41

Nlocal: 31677 ave 31677 max 31677 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: 1.55634e+006 ave 1.55634e+006 max 1.55634e+006 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 1556340

Ave neighs/atom = 49.1315

Neighbor list builds = 25

Dangerous builds = 0

reset_timestep 0

variable pxy equal pxy

variable pxz equal pxz

variable pyz equal pyz

fix SS all ave/correlate \$s \$p \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 \$p \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 400 \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 400 2000 v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

variable scale equal \${convert}/(\${kB}*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(\${kB}*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*1000)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*1000)*2021240.01091749*
\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*1000)*2021240.01091749
5\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*1000)*2021240.01091749
*5*0.1

variable v11 equal trap(f_SS[3])*\${scale}

variable v11 equal trap(f_SS[3])*7.51514548924268e-010

variable v22 equal trap(f_SS[4])*\${scale}

variable v22 equal trap(f_SS[4])*7.51514548924268e-010

variable v33 equal trap(f_SS[5])*\${scale}

variable v33 equal trap(f_SS[5])*7.51514548924268e-010

thermo_style custom step temp v_pxy v_pxz v_pyz v_v11 v_v22 v_v33

run 100000

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 17.05 | 17.05 | 17.05 Mbytes

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
0	697,68141	30,06116	23,88359	-10,7649	3,40E-07	2,14E-07	4,35E-08
2000	700,82372	-12,1	10,04473	6,39722	-9,67E-06	5,14E-05	-2,87E-07
4000	700,75842	-1,6868	0,48234	10,77115	4,96E-06	3,13E-05	1,28E-05
6000	697,21262	-3,18966	6,77505	12,63546	6,53E-06	2,66E-05	1,84E-05
8000	703,48723	-10,3771	1,8669	5,22375	5,37E-06	1,94E-05	2,11E-05
10000	697,85482	-8,31786	8,6507	9,12616	5,78E-06	1,61E-05	2,19E-05
12000	697,13615	0,62343	5,36412	2,84214	5,97E-06	1,49E-05	1,92E-05
14000	704,58318	4,00791	8,45901	1,32402	5,33E-06	1,36E-05	1,68E-05
16000	698,12811	0,34165	3,73403	3,5644	4,65E-06	1,31E-05	1,45E-05
18000	703,5387	-0,90911	3,8228	3,40309	4,13E-06	1,21E-05	1,30E-05
20000	699,64492	-1,00106	1,40334	3,22407	3,72E-06	1,13E-05	1,20E-05
22000	698,78165	-0,89356	2,34369	0,9902	3,39E-06	1,04E-05	1,11E-05
24000	704,31106	0,08688	0,79578	1,59806	3,11E-06	9,60E-06	1,02E-05
26000	698,44137	-1,64733	1,2544	1,64831	2,88E-06	8,86E-06	9,51E-06
28000	699,7778	-0,53082	2,20872	1,18511	2,69E-06	8,25E-06	8,88E-06
30000	705,46635	-0,7157	1,84119	1,82109	2,51E-06	7,74E-06	8,29E-06

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
32000	700,52589	-0,19729	1,45365	1,56542	2,35E-06	7,29E-06	7,82E-06
34000	696,13047	-0,61825	1,5898	1,66396	2,22E-06	6,89E-06	7,38E-06
36000	706,89112	-0,33366	1,48817	1,86711	2,09E-06	6,54E-06	7,01E-06
38000	699,86231	-0,80831	0,78287	1,11007	1,99E-06	6,22E-06	6,67E-06
40000	698,07422	-0,39386	0,94202	0,5663	1,89E-06	5,92E-06	6,35E-06
42000	705,28806	-0,37362	1,07723	0,75063	1,80E-06	5,64E-06	6,04E-06
44000	697,83986	-0,334	0,82226	0,85632	1,72E-06	5,40E-06	5,77E-06
46000	698,72656	-0,36851	0,70916	0,87199	1,65E-06	5,17E-06	5,53E-06
48000	701,74203	-0,29377	0,78262	0,54729	1,58E-06	4,95E-06	5,30E-06
50000	696,50277	-0,39192	0,61403	0,5201	1,52E-06	4,76E-06	5,09E-06
52000	698,78272	-0,37654	0,86035	0,49843	1,46E-06	4,58E-06	4,89E-06
54000	704,15321	-0,30004	0,69897	0,32025	1,41E-06	4,41E-06	4,71E-06
56000	696,61153	-0,2097	0,60153	0,35102	1,36E-06	4,26E-06	4,54E-06
58000	702,37482	-0,09656	0,58333	0,39566	1,31E-06	4,11E-06	4,38E-06
60000	702,56155	-0,14233	0,55255	0,29057	1,27E-06	3,98E-06	4,23E-06
62000	698,6583	-0,10274	0,57534	0,39426	1,23E-06	3,85E-06	4,10E-06
64000	705,46622	-0,09752	0,49171	0,35399	1,19E-06	3,73E-06	3,97E-06
66000	696,40743	-0,06906	0,41902	0,26842	1,15E-06	3,62E-06	3,85E-06
68000	702,7418	-0,06079	0,48286	0,22774	1,12E-06	3,51E-06	3,73E-06
70000	699,95625	-0,16668	0,4566	0,24216	1,09E-06	3,41E-06	3,62E-06
72000	699,29152	-0,14751	0,41948	0,26675	1,06E-06	3,32E-06	3,52E-06
74000	703,61733	-0,11665	0,3805	0,22829	1,03E-06	3,23E-06	3,43E-06
76000	695,69715	-0,11853	0,33202	0,22081	1,00E-06	3,14E-06	3,34E-06
78000	698,88329	-0,1021	0,27811	0,23029	9,74E-07	3,06E-06	3,25E-06
80000	706,50708	-0,11394	0,28563	0,19407	9,49E-07	2,98E-06	3,17E-06
82000	699,09331	-0,07339	0,29778	0,23078	9,26E-07	2,91E-06	3,09E-06
84000	695,81021	-0,09829	0,26426	0,20521	9,04E-07	2,84E-06	3,02E-06
86000	702,6379	-0,09717	0,24846	0,19088	8,83E-07	2,78E-06	2,95E-06
88000	703,3637	-0,066	0,22833	0,17671	8,63E-07	2,71E-06	2,88E-06
90000	697,41702	-0,06218	0,21869	0,14673	8,44E-07	2,65E-06	2,81E-06
92000	701,7384	-0,05947	0,19832	0,14364	8,25E-07	2,59E-06	2,75E-06
94000	701,42712	-0,0647	0,18962	0,13703	8,08E-07	2,54E-06	2,69E-06
96000	696,01117	-0,06264	0,19377	0,14495	7,91E-07	2,48E-06	2,64E-06
98000	698,73041	-0,06197	0,18533	0,12172	7,75E-07	2,43E-06	2,58E-06
100000	704,70896	-0,06109	0,19381	0,10484	7,59E-07	2,38E-06	2,53E-06

Loop time of 4537.6 on 1 procs for 100000 steps with 31677 atoms

Performance: 0.190 ns/day, 126.045 hours/ns, 22.038 timesteps/s
92.3% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

Pair	3882.4	3882.4	3882.4	0.0	85.56
Neigh	14.657	14.657	14.657	0.0	0.32
Comm	2.1845	2.1845	2.1845	0.0	0.05
Output	172.05	172.05	172.05	0.0	3.79
Modify	393.44	393.44	393.44	0.0	8.67
Other		72.88			1.61

Nlocal: 31677 ave 31677 max 31677 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: 84374 ave 84374 max 84374 min
 Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 84374
 Ave neighs/atom = 2.66357
 Neighbor list builds = 311
 Dangerous builds = 0

variable v equal (v_v11+v_v22+v_v33)/3.0
 variable v equal v_v11
 variable ndens equal count(all)/vol
 print "average viscosity: \$v [Pa.s] @ \$T K, \${ndens} /A^3"
 average viscosity: 7.59001432405163e-007 [Pa.s] @ 1000 K, 0.000142806318036074 /A^3
 Total wall time: 1:36:16

B. 20 nm

Neighbor list info ...
 update every 1 steps, delay 10 steps, check yes
 max neighbors/atom: 2000, page size: 100000
 master list distance cutoff = 8
 ghost atom cutoff = 8
 binsize = 4, bins = 51 51 51
 1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0
 (1) pair eam, perpetual
 attributes: half, newton on
 pair build: half/bin/atomonly/newton
 stencil: half/bin/3d/newton
 bin: standard

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 130.6 | 130.6 | 130.6 Mbytes

Step	Temp	E_pair	E_mol	TotEng	Press	Volume
0	1500	-848131	0	663306,6	7910,261	7,82E+06
2000	1504,4531	-199360	0	1,31E+06	13252,14	8,73E+06
4000	1502,1643	-196237	0	1,32E+06	11276,68	9,98E+06
6000	1494,9078	-218683	0	1,29E+06	9451,883	1,17E+07
8000	1487,9451	-242496	0	1,27E+06	7917,577	1,37E+07

Loop time of 3396.75 on 1 procs for 8000 steps with 253529 atoms

Performance: 0.020 ns/day, 1179.428 hours/ns, 2.355 timesteps/s
99.9% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	% total
Pair	3270.2	3270.2	3270.2	0.0	96.27
Neigh	16.382	16.382	16.382	0.0	0.48
Comm	0.2933	0.29332	0.29332	0.0	0.01
Output	33.679	33.679	33.679	0.0	0.99
Modify	60.38	60.38	60.38	0.0	1.78
Other		15.86			0.47

Nlocal: 253529 ave 253529 max 253529 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: 1.40901e+007 ave 1.40901e+007 max 1.40901e+007 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 14090122

Ave neighs/atom = 55.576

Neighbor list builds = 35

Dangerous builds = 0

reset_timestep 0

variable pxy equal pxy

variable pxz equal pxz

variable pyz equal pyz

fix SS all ave/correlate \$s \$p \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 \$p \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 400 \$d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

fix SS all ave/correlate 5 400 2000 v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

variable scale equal \${convert}/(\${kB}*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(\${kB}*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*T)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*V*\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*13736953.6344419*
\$s*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*13736953.6344419*
5*\${dt}

variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*13736953.6344419*
5*0.1

variable v11 equal trap(f_SS[3])*\${scale}

variable v11 equal trap(f_SS[3])*2.55375919198608e-009

variable v22 equal trap(f_SS[4])*\${scale}

variable v22 equal trap(f_SS[4])*2.55375919198608e-009

variable v33 equal trap(f_SS[5])*\${scale}

variable v33 equal trap(f_SS[5])*2.55375919198608e-009

thermo_style custom step temp v_pxy v_pxz v_pyz v_v11 v_v22 v_v33

run 100000

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 131 | 131 | 131 Mbytes

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
0	1487,9451	-2,00672	-6,48	0,20229	5,14E-09	5,36E-08	5,23E-11
2000	1500,8112	-22,7415	-3,71297	17,97926	6,70E-05	1,26E-06	1,24E-04
4000	1502,2672	8,22098	-2,00867	6,61133	8,69E-05	2,28E-05	1,51E-04
6000	1498,5532	0,28034	3,30343	7,41565	5,26E-05	2,24E-05	1,05E-04
8000	1499,8573	-2,46123	-4,45507	5,08987	3,97E-05	1,72E-05	7,78E-05
10000	1506,1045	3,95297	-1,00256	-0,55018	3,10E-05	1,34E-05	6,52E-05
12000	1493,9069	-4,1019	3,96594	1,74656	2,59E-05	1,14E-05	5,41E-05
14000	1506,1662	-0,71106	-4,06322	-3,52857	2,22E-05	9,77E-06	4,59E-05
16000	1504,3404	0,24894	-6,2805	-1,9678	1,95E-05	9,63E-06	3,98E-05
18000	1491,3093	1,97132	-2,60632	6,72068	1,73E-05	1,06E-05	3,55E-05
20000	1505,313	0,1034	-2,11361	-0,48194	1,56E-05	9,48E-06	3,29E-05
22000	1502,821	1,54348	-2,7575	-1,65089	1,43E-05	9,03E-06	2,99E-05
24000	1496,017	0,5383	-0,86701	-2,38702	1,31E-05	8,94E-06	2,74E-05
26000	1509,9384	-0,62671	-1,96319	0,86929	1,20E-05	8,50E-06	2,52E-05
28000	1498,6383	0,42098	-0,71442	0,63762	1,12E-05	7,99E-06	2,34E-05
30000	1496,2082	1,77669	-0,7472	-0,5953	1,05E-05	7,52E-06	2,18E-05
32000	1508,8063	0,56092	-1,34883	0,14079	1,00E-05	7,04E-06	2,04E-05
34000	1496,1867	0,24266	-1,691	1,41957	9,47E-06	6,68E-06	1,92E-05
36000	1493,7697	0,40179	-1,7411	0,98636	8,94E-06	6,43E-06	1,82E-05
38000	1512,3351	-1,35643	-1,05476	0,44628	8,47E-06	6,27E-06	1,72E-05
40000	1494,5976	0,17762	-1,97605	-0,06955	8,05E-06	6,05E-06	1,64E-05
42000	1500,5187	0,09126	-0,69241	0,80857	7,66E-06	5,81E-06	1,56E-05
44000	1496,5958	-0,14198	-0,49008	0,77542	7,31E-06	5,56E-06	1,49E-05
46000	1489,4855	0,18915	-0,9967	0,73096	6,99E-06	5,35E-06	1,42E-05
48000	1502,18	-0,00356	-1,4207	0,45673	6,69E-06	5,18E-06	1,37E-05
50000	1495,9766	-0,31855	-0,63447	1,04739	6,43E-06	5,01E-06	1,31E-05
52000	1502,114	-0,3098	-0,56886	0,73125	6,18E-06	4,83E-06	1,26E-05
54000	1507,4102	-0,27737	-0,33475	0,57945	5,95E-06	4,66E-06	1,22E-05
56000	1491,7367	0,01355	-0,38859	0,50579	5,74E-06	4,50E-06	1,18E-05
58000	1497,0317	-0,18137	-0,42128	0,35773	5,54E-06	4,35E-06	1,13E-05
60000	1514,31	-0,2699	-0,33138	0,68342	5,36E-06	4,20E-06	1,10E-05
62000	1498,3853	-0,05034	-0,3298	0,47282	5,18E-06	4,07E-06	1,06E-05
64000	1491,1362	-0,00806	-0,0758	0,34699	5,02E-06	3,94E-06	1,03E-05
66000	1505,7684	-0,07341	-0,12959	0,39826	4,87E-06	3,82E-06	9,98E-06
68000	1506,9855	0,03796	-0,28149	0,34245	4,72E-06	3,71E-06	9,69E-06
70000	1494,817	-0,05801	-0,26342	0,28133	4,59E-06	3,61E-06	9,41E-06
72000	1502,4579	-0,06364	-0,09012	0,35655	4,46E-06	3,51E-06	9,15E-06
74000	1503,8062	0,03239	-0,22439	0,2431	4,34E-06	3,41E-06	8,90E-06

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
76000	1492,0872	0,04085	-0,18478	0,28575	4,22E-06	3,32E-06	8,67E-06
78000	1495,0572	0,02275	-0,25178	0,27507	4,11E-06	3,24E-06	8,44E-06
80000	1509,5302	0,04885	-0,188	0,27197	4,01E-06	3,16E-06	8,23E-06
82000	1500,6666	0,12512	-0,11798	0,27319	3,91E-06	3,08E-06	8,03E-06
84000	1493,0813	0,05218	-0,11987	0,28709	3,82E-06	3,01E-06	7,84E-06
86000	1504,5595	0,06524	-0,06839	0,23723	3,73E-06	2,94E-06	7,66E-06
88000	1503,4566	0,03197	-0,11138	0,27526	3,65E-06	2,87E-06	7,48E-06
90000	1489,4093	0,01129	-0,08888	0,26351	3,56E-06	2,81E-06	7,32E-06
92000	1501,7414	0,0624	-0,10564	0,20947	3,49E-06	2,74E-06	7,16E-06
94000	1510,7021	0,01853	-0,0947	0,20473	3,41E-06	2,69E-06	7,01E-06
96000	1494,4675	-6,66E-04	-0,11244	0,18085	3,34E-06	2,63E-06	6,86E-06
98000	1497,7637	0,06698	-0,09259	0,2004	3,27E-06	2,58E-06	6,72E-06
100000	1508,3936	-0,00128	-0,08876	0,20195	3,21E-06	2,52E-06	6,58E-06

Loop time of 16909.3 on 1 procs for 100000 steps with 253529 atoms

Performance: 0.051 ns/day, 469.704 hours/ns, 5.914 timesteps/s
99.9% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

Section	min time	avg time	max time	% varavg	% total
Pair	15419	15419	15419	0.0	91.19
Neigh	105.1	105.1	105.1	0.0	0.62
Comm	4.7984	4.7984	4.7984	0.0	0.03
Output	414.52	414.52	414.52	0.0	2.45
Modify	769.86	769.86	769.86	0.0	4.55
Other		196.1			1.16

Nlocal: 253529 ave 253529 max 253529 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: 1.23589e+006 ave 1.23589e+006 max 1.23589e+006 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 1235889

Ave neighs/atom = 4.87474

Neighbor list builds = 423

Dangerous builds = 0

variable v equal (v_v11+v_v22+v_v33)/3.0

variable v equal v_v11

variable ndens equal count(all)/vol

print "average viscosity: \$v [Pa.s] @ \$T K, \${ndens} /A^3"

average viscosity: 3.20618831979909e-006 [Pa.s] @ 2000 K, 0.000290519286061261 /A^3

Total wall time: 5:38:29

C. 30 nm

Neighbor list info ...

update every 1 steps, delay 10 steps, check yes

max neighbors/atom: 2000, page size: 100000

master list distance cutoff = 8

ghost atom cutoff = 8

binsize = 4, bins = 76 76 76

1 neighbor lists, perpetual/occasional/extra = 1 0 0

(1) pair eam, perpetual

attributes: half, newton on

pair build: half/bin/atomonly/newton

stencil: half/bin/3d/newton

bin: standard

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 440.3 | 440.3 | 440.3 Mbytes

Step	Temp	E_pair	E_mol	TotEng	Press	Volume
0	1300	-2,88E+06	0	2,23E+06	7768,935	2,69E+07
2000	1303,7618	-667845,3	0	4,42E+06	13351,18	2,94E+07
4000	1298,6556	-614677,5	0	4,50E+06	11481,2	3,35E+07
6000	1293,5593	-655618,6	0	4,46E+06	10066,42	3,77E+07
8000	1296,6337	-712046,9	0	4,40E+06	8731,11	4,30E+07

Loop time of 12234.4 on 1 procs for 8000 steps with 856831 atoms

Performance: 0.006 ns/day, 4248.039 hours/ns, 0.654 timesteps/s

100.0% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

Section	min time	avg time	max time	%varavg	%total
Pair	11758	11758	11758	0.0	96.11
Neigh	62.653	62.653	62.653	0.0	0.51
Comm	1.3356	1.3356	1.3356	0.0	0.01
Output	117.32	117.32	117.32	0.0	0.96
Modify	235.71	235.71	235.71	0.0	1.93
Other		59.14			0.48

Nlocal: 856831 ave 856831 max 856831 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: 5.008e+007 ave 5.008e+007 max 5.008e+007 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 50080050

Ave neighs/atom = 58.448

Neighbor list builds = 38

Dangerous builds = 0

```

reset_timestep 0
variable pxy equal pxy
variable pxz equal pxz
variable pyz equal pyz
fix SS all ave/correlate $s $p $d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running
fix SS all ave/correlate 5 $p $d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running
fix SS all ave/correlate 5 400 $d v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running
fix SS all ave/correlate 5 400 2000 v_pxy v_pxz v_pyz type auto file S0St.dat ave running

```

```

variable scale equal ${convert}/(${kB}*T)*V*$s*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(${kB}*T)*V*$s*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*T)*V*$s*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*V*$s*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*43043835.0849214*
  $s*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*43043835.0849214*
  5*${dt}
variable scale equal 1.0266755625e-035/(1.3806504e-023*2000)*43043835.0849214*
  5*0.1
variable v11 equal trap(f_SS[3])*${scale}
variable v11 equal trap(f_SS[3])*8.00203541714269e-009
variable v22 equal trap(f_SS[4])*${scale}
variable v22 equal trap(f_SS[4])*8.00203541714269e-009
variable v33 equal trap(f_SS[5])*${scale}
variable v33 equal trap(f_SS[5])*8.00203541714269e-009
thermo_style custom step temp v_pxy v_pxz v_pyz v_v11 v_v22 v_v33
run 100000

```

Per MPI rank memory allocation (min/avg/max) = 441.4 | 441.4 | 441.4 Mbytes

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
0	1296,6337	-0,27798	-16,2152	-2,87314	3,09E-10	1,05E-06	3,30E-08
2000	1309,1151	4,39168	-6,98709	-1,22292	4,44E-05	1,35E-04	1,78E-05
4000	1299,7416	10,36982	-8,76736	0,49284	4,12E-05	1,47E-04	2,02E-05
6000	1289,5873	-0,80563	-7,10142	-1,32412	1,21E-04	2,05E-04	1,00E-05
8000	1308,6039	-0,4533	1,24557	-1,51713	7,37E-05	1,63E-04	1,22E-05
10000	1289,7766	-4,40911	-1,56109	-3,91725	5,95E-05	1,27E-04	1,25E-05
12000	1298,7056	-3,17186	0,7763	-2,49519	5,14E-05	1,05E-04	1,62E-05
14000	1304,6387	-3,55515	0,16497	-3,95038	4,54E-05	8,80E-05	2,25E-05
16000	1298,8693	-1,26616	-3,77564	-4,1521	4,19E-05	7,60E-05	2,42E-05
18000	1300,5141	1,55829	-0,04286	0,76339	3,73E-05	6,69E-05	2,44E-05
20000	1303,4657	0,78953	-1,62354	-1,1651	3,43E-05	5,96E-05	2,20E-05
22000	1294,0718	-0,75669	0,43775	-3,42402	3,15E-05	5,41E-05	2,06E-05
24000	1304,9034	0,03171	-0,17837	1,79605	2,88E-05	4,96E-05	2,05E-05
26000	1302,0962	-0,12821	0,61964	-0,70363	2,68E-05	4,56E-05	1,89E-05
28000	1291,0798	-0,31734	-0,95906	-1,52468	2,49E-05	4,26E-05	1,76E-05
30000	1307,212	-0,64582	-0,6139	-1,15267	2,33E-05	3,97E-05	1,79E-05
32000	1299,6057	-1,22838	-1,7139	-2,58749	2,20E-05	3,73E-05	1,77E-05
34000	1299,7612	-2,37141	-0,64637	0,49131	2,08E-05	3,52E-05	1,68E-05

Step	Temp	v_pxy	v_pxz	v_pyz	v_v11	v_v22	v_v33
36000	1310,3155	-2,25696	-1,08496	-2,22156	2,01E-05	3,33E-05	1,59E-05
38000	1295,7475	-1,85798	-1,93302	-1,01	2,01E-05	3,17E-05	1,53E-05
40000	1305,181	-0,90963	-0,89364	-1,56707	1,94E-05	3,03E-05	1,47E-05
42000	1301,1683	-0,29015	-0,44556	-1,05631	1,85E-05	2,89E-05	1,43E-05
44000	1292,368	-1,21402	-0,48882	-1,29948	1,77E-05	2,76E-05	1,37E-05
46000	1304,8844	-0,67568	-0,92964	0,17057	1,72E-05	2,63E-05	1,31E-05
48000	1306,5249	-1,10861	-1,36279	-0,68859	1,66E-05	2,53E-05	1,26E-05
50000	1294,7881	-1,25982	-0,56197	-0,54414	1,62E-05	2,43E-05	1,21E-05
52000	1307,5844	-1,20051	-0,44274	-1,51272	1,57E-05	2,34E-05	1,17E-05
54000	1301,4976	-1,16071	-0,26361	-0,81993	1,53E-05	2,25E-05	1,13E-05
56000	1291,0495	-1,08123	-0,41547	-0,42236	1,50E-05	2,18E-05	1,09E-05
58000	1299,8692	-0,81775	-0,31476	-0,82536	1,45E-05	2,10E-05	1,06E-05
60000	1308,8891	-0,41958	0,1418	-0,82712	1,41E-05	2,03E-05	1,03E-05
62000	1298,0666	-0,40192	-0,48477	-0,142	1,37E-05	1,96E-05	1,00E-05
64000	1294,7686	-1,15889	-0,47374	-0,12793	1,33E-05	1,90E-05	9,70E-06
66000	1303,4382	-0,6995	-0,06753	-0,17925	1,30E-05	1,84E-05	9,40E-06
68000	1301,4656	-0,72418	-0,3592	-0,22475	1,26E-05	1,79E-05	9,13E-06
70000	1291,3288	-0,87723	-0,39248	-0,58047	1,23E-05	1,74E-05	8,88E-06
72000	1302,4392	-0,80347	-0,38639	-0,52049	1,21E-05	1,69E-05	8,64E-06
74000	1309,0511	-0,55188	-0,47723	-0,46104	1,18E-05	1,65E-05	8,42E-06
76000	1295,5246	-0,41301	-0,27871	-0,33202	1,15E-05	1,61E-05	8,21E-06
78000	1297,7354	-0,08657	-0,20931	-0,55095	1,12E-05	1,56E-05	8,01E-06
80000	1307,205	-0,11399	-0,14509	-0,48267	1,09E-05	1,53E-05	7,82E-06
82000	1296,5078	-0,1224	-0,2846	-0,51189	1,06E-05	1,49E-05	7,64E-06
84000	1295,9208	-0,10496	-0,14828	-0,17813	1,04E-05	1,45E-05	7,47E-06
86000	1311,5069	-0,24797	-0,08833	-0,30432	1,01E-05	1,42E-05	7,30E-06
88000	1300,5632	-0,17308	-0,16297	-0,20761	9,92E-06	1,39E-05	7,14E-06
90000	1290,975	-0,08252	-0,22634	-0,1487	9,70E-06	1,36E-05	6,98E-06
92000	1302,5795	-0,26457	-0,37021	-0,28372	9,48E-06	1,33E-05	6,83E-06
94000	1308,2936	-0,19071	-0,29317	-0,17142	9,28E-06	1,30E-05	6,69E-06
96000	1296,4844	-0,2094	-0,26359	-0,24985	9,09E-06	1,27E-05	6,55E-06
98000	1299,5505	-0,24008	-0,2431	-0,19849	8,91E-06	1,25E-05	6,42E-06
100000	1303,7675	-0,28463	-0,2492	-0,15407	8,73E-06	1,22E-05	6,29E-06

Loop time of 79856.4 on 1 procs for 100000 steps with 856831 atoms

Performance: 0.011 ns/day, 2218.232 hours/ns, 1.252 timesteps/s

99.9% CPU use with 1 MPI tasks x 1 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

Pair | 74417 | 74417 | 74417 | 0.0 | 93.19

Neigh | 478.37 | 478.37 | 478.37 | 0.0 | 0.60

Comm	18.994	18.994	18.994	0.0	0.02
Output	1402.3	1402.3	1402.3	0.0	1.76
Modify	2843.9	2843.9	2843.9	0.0	3.56
Other		696			0.87

Nlocal: 856831 ave 856831 max 856831 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: 9.92318e+006 ave 9.92318e+006 max 9.92318e+006 min

Histogram: 1 0 0 0 0 0 0 0 0

Total # of neighbors = 9923179

Ave neighs/atom = 11.5813

Neighbor list builds = 454

Dangerous builds = 0

variable v equal (v_v11+v_v22+v_v33)/3.0

variable v equal v_v11

variable ndens equal count(all)/vol

print "average viscosity: \$v [Pa.s] @ \$T K, \${ndens} /A^3"

average viscosity: 8.73486855668212e-006 [Pa.s] @ 2000 K, 0.000681755478870299 /A^3

Total wall time: 25:35:01