



**PENGARUH LAJU TEMPERATUR SOLIDIFIKASI
TERHADAP KRISTALINITAS NANO SENG OKSIDA
DENGAN METODE SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR**

Skripsi

Oleh :

Novel Bagas Satrio Wibowo

141910101079

PROGRAM STRATA 1 TEKNIK

JURUSAN TEKNIK MESIN

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS JEMBER

2019



**PENGARUH LAJU TEMPERATUR SOLIDIFIKASI
TERHADAP KRISTALINITAS NANO SENG OKSIDA
DENGAN METODE 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:

Novel Bagas Satrio Wibowo

141910101079

PROGRAM STUDI STRATA I TEKNIK

JURUSAN TEKNIK MESIN

FAKULTAS TEKNIK

UNIVERSITAS JEMBER

2019

PERSEMBAHAN

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

1. Allah SWT yang selalu melimpahkan rahmat, rezeki, dan hidayah-Nya sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi ini.
2. Nabi Muhammad SAW yang telah membawa kebenaran dari jalan kegelapan menuju jalan yang terang benderang yaitu Islam
3. Kedua orang tua saya Bambang Cipto Wibowo dan Sri Handayani yang tidak pernah lelah untuk memberikan dukungan baik secara moril maupun materiil sehingga saya dapat menyelesaikan skripsi ini dengan baik.
4. Kakakku Roman Bagus Widya Utama dan Adikku Bima Aji Satriyo Widigdo yang selalu memberikan dukungan serta motivasi dalam setiap langkahku.
5. Bapak Imam Sholahuddin, S.T., M.T. selaku pembimbing grup riset MRG 5 yang selalu membimbing saya, baik motivasi, arahan maupun saran yang tiada henti-hentinya selama riset. Serta keluarga besar grup riset MRG yang selalu memberikan saran dan motivasi selama riset.
6. Teman-teman MRG periode 5 yang selalu memberikan motivasi pada saat riset berlangsung
7. Teman-teman seperjuangan Teknik Mesin angkatan 2014 (M16) yang telah mendukung dari awal masuk hingga saat ini

MOTTO

Barang Siapa yang bersungguh sungguh, sesungguhnya keseungguhan tersebut untuk kebaikan dirinya sendiri.

(Surat Al-Ankabut. Ayat 6)

The only way to do great work is to love what you do

(Steve Jobs)

Kebanyakan orang pintar rata-rata pemalas, maka untuk menjadi orang pintar kita harus.....?

(Cania Citta)

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

(Dr. Aidh al Qarni)

PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Novel Bagas Satrio Wibowo

NIM : 141910101079

Menyatakan dengan sesungguhnya bahwa skripsi yang berjudul “Pengaruh Laju Temperatur Solidifikasi Terhadap Kristalinitas Nano Seng Oksida Dengan Metode Simulasi Molekular Dinamik” 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, 10 Januari 2019

yang menyatakan,

Novel Bagas Satrio Wibowo

NIM 141910101079

SKRIPSI

**PENGARUH LAJU TEMPERATUR SOLIDIFIKASI TERHADAP
KRISTALINITAS NANO SENG OKSIDA DENGAN METODE SIMULASI
MOLEKULAR DINAMIK**

Oleh:

Novel Bagas Satrio Wibowo

NIM 141910101079

Pembimbing

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

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

PENGESAHAN

Skripsi berjudul “Pengaruh Laju Temperatur Solidifikasi Terhadap Kristalinitas Nano Seng Oksida Dengan Metode Simulasi Molekular Dinamik” telah diuji dan disahkan pada :

Hari, tanggal : Kamis, 10 Januari 2019

Tempat : Fakultas Teknik, Universitas Jember

Tim Pembimbing

Dosen Pembimbing Utama,

Dosen Pembimbing Anggota,

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

Sumarji, S.T M.T.
NIP 196802021997021001

Tim Penguji

Penguji I,

Penguji II,

Aris Zainul Muttaqin, S.T., M.T.
NIP 196812071995121001

Santoso Mulyadi, S.T., M.T.
NIP. 197002281997021001

Mengesahkan
Dekan Fakultas Teknik Universitas Jember,

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

RINGKASAN

“Pengaruh Laju Temperatur Solidifikasi Terhadap Kristalinitas Nano Seng Oksida Dengan Metode Simulasi Molekular Dinamik”; Novel Bagas Satrio Wibowo, 141910101079; 2019; 115 halaman; Jurusan Teknik Mesin Universitas Jember, Fakultas Teknik, Universitas Jember.

Penggunaan nanoteknologi di Indonesia semakin berkembang luas sehingga kehadiran nanoteknologi sudah dapat kita rasakan, nanoteknologi mulai di aplikasikan sebagai teknologi yang digunakan untuk memenuhi kebutuhan masyarakat Indonesia. Dalam lima puluh tahun terakhir teknologi nano mengalami perkembangan yang sangat pesat hal ini ditandai dengan ribuan nano desain telah di aplikasikan. sehingga hadirnya teknologi nano menjadi peluang untuk memunculkan potensi energi sumber terbarukan.

Pada penelitian ini proses solidifikasi nano seng oksida diteliti menggunakan metode simulasi molekular dinamik dengan variasi laju temperatur solidifikasi 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, 10^{12} K/s, Proses simulasi menggunakan potensial LJ (*Lennard-Jones*) dengan menggunakan bantuan perangkat lunak VESTA JP-Minerals sebagai perangkat modifikasi atom, LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) sebagai perangkat lunak simulasi, dan OVITO (Open Visualization Tools) sebagai perangkat visualisasi hasil proses simulasi.

Berdasarkan hasil simulasi solidifikasi nano seng oksida (wurtzite) yang telah dilakukan, fungsi distribusi radial nano seng oksida dengan laju temperatur solidifikasi 10^{10} K/s adalah 1.800.000 g(r), pada laju 10^{11} K/s menghasilkan nilai distribusi radial sebesar 22.000 g(r), pada laju 10^{12} K/s menghasilkan nilai distribusi radial sebesar 8000 g(r) maka dapat dikatakan semakin tinggi laju temperatur solidifikasi maka kristalinitas akan semakin rendah. Pertumbuhan partikel nano seng oksida (wurtzite) pada laju temperatur solidifikasi sebesar 10^{10} K/s menghasilkan diameter partikel sebesar 3,394 nm, pada laju temperatur solidifikasi 10^{11} K/s di dapat nilai diameter 3,351 nm, sedangkan pada laju temperatur solidifikasi 10^{12} K/s dihasilkan partikel dengan diameter 3,317 nm. Pada distribusi

partikel nano seng oksida (wurtzite) pada laju 10^{10} K/s menghasilkan kluster dengan jumlah atom sebanyak 2350 atom, pada laju 10^{11} K/s dihasilkan kluster dengan jumlah atom 2360 atom, sedangkan pada laju 10^{12} K/s dihasilkan kluster dengan jumlah atom sebanyak 2070 atom, dari visualisasi dapat dikatakan proses rekombimasi terbaik dihasilkan dengan laju 10^{10} K/s.



SUMMARY

"Effect of Solidification Temperature Rate on the Crystallinity of Nano Zinc Oxides with Dynamic Molecular Simulation Methods"; Novel Bagas Satrio Wibowo, 141910101079; 2019; 115 page; Mechanical Engineering Department, University of Jember, Faculty of Engineering, University of Jember.

The use of nanotechnology in Indonesia is growing, so we can feel nanotechnology, nanotechnology has begun to be applied as a technology used to meet the needs of the Indonesian people. In the last fifty years nano technology has experienced a very rapid development, this is marked by thousands of nano designs have been applied. So the presence of nanotechnology is an opportunity to bring up the potential of renewable energy sources.

In this study, the nano sengida solidification process uses a dynamic molecular simulation method with variations in rate, solidification of 10^{10} K/s, 10^{11} K/s, 10^{12} K/s. The testing process uses the potential of LJ (Lennard-Jones) by using the use of VESTA JP-Mineral application as atomic modification devices, LAMMPS (Massive Atomic / Molecular Parallel Simulator) as modification software, and OVITO (Open Visualization Tool) as a visualization device as a result of the simulation process.

Based on the results of the nanoscale zinc oxide (wurtzite) solidification simulation, the radial nano zinc oxide distribution function with a solidification temperature of 10^{10} K / s is 1,800,000 g (r), at a rate of 10^{11} K/s the radial distribution value is 22,000 g (r) , at the rate of 10^{12} K/s produces a radial distribution value of 8000 g (r) so that it can be given an increase in the temperature solidification rate so that crystallinity will be lower. The acquisition of zinc oxide nanoparticles (wurtzite) at a padatification temperature rate of 10^{10} K / s produces a particle diameter of 3.394 nm, at a temperature rate of 10^{11} K/s the diameter value is 3.351 nm, when the solidification temperature rate is 10^{12} K/s particle size 3,317 nm. In the distribution of zinc oxide nanoparticles (wurtzite) at a rate of 10^{10} K/s it produces clusters with

as many as 2350 atoms, at a rate of 10^{11} K/s clusters with an atomic number of 2360 atoms, at a rate of 10^{12} K/s clusters with 2070 atoms , from visualization can produce the best recombination process produced at a rate of 10^{10} K/s.



PRAKATA

Puji syukur kepada Allah SWT yang telah memberikan rahmat dan karuniaNya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini yang berjudul “Pengaruh Laju Temperatur Solidifikasi Terhadap Kristalinitas Nano Seng Oksida Dengan Metode Simulasi Molekular Dinamik”. Shalawat dan salam penulis curahkan kepada Nabi Muhammad SAW yang telah menunjukkan inspirasi, suri tauladan, dan jalan yang terang bagi umat manusia dalam menjalani kehidupan di dunia. Skripsi ini disusun guna memenuhi salah satu syarat menyelesaikan pendidikan strata satu (S1) pada Jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Univeritas Jember.

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

1. Bapak Dr. Agus Triono, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Utama, dan Bapak Sumarji, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing Anggota yang telah memberikan masukan dan arahan dalam penyusunan dan penulisan skripsi ini. serta Bapak Aris Zainul Muttaqin, S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Utama dan Bapak Santoso Mulyadi S.T., M.T. selaku Dosen Penguji Anggota yang telah memberikan kritik dan saran yang membangun untuk perbaikan skripsi.
2. Rekan kerjaku Arap, Bang Pai, Bolang, Ivan dan Vale serta keluarga besar MRG yang selalu memberikan dukungan, ide dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.
3. Semua pihak yang telah membantu dan tidak dapat disebutkan satu per satu.

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

Jember, 10 Januari 2019

Penulis

DAFTAR ISI

| | |
|---|-----------|
| HALAMAN JUDUL | |
| PERSEMBAHAN..... | iii |
| MOTTO | iv |
| PERNYATAAN..... | v |
| SKRIPSI..... | vi |
| PENGESAHAN | vii |
| RINGKASAN | viii |
| <i>SUMMARY</i> | x |
| PRAKATA | xii |
| DAFTAR ISI..... | xiii |
| DAFTAR GAMBAR..... | xv |
| DAFTAR TABEL | xvi |
| BAB 1. PENDAHULUAN | 1 |
| 1.1 Latar Belakang | 1 |
| 1.2 Rumusan Masalah..... | 3 |
| 1.3 Batasan Masalah | 3 |
| 1.4 Tujuan Penelitian | 3 |
| 1.5 Manfaat Penelitian | 4 |
| 1.6 Hipotesis | 4 |
| BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA..... | 5 |
| 2.1 Seng Oksida | 5 |
| 2.2 Struktur Kristal..... | 6 |
| 2.2.1 Struktur Kristal Seng Oksida | 8 |
| 2.3 Nanomaterial | 8 |
| 2.4 Nano Seng Oksida | 11 |
| 2.5 Derajat Kristalinitas | 12 |
| 2.5.1 Differential Scanning Calorimetry | 12 |
| 2.5.2 XRD (X-Ray Diffraction)..... | 13 |
| 2.6 Molekular dinamik | 14 |
| 2.6.1 Interaksi Antar Atom | 15 |

| | |
|--|-----------|
| 2.6.2 Lennard Jones Potensial (LJ) | 16 |
| 2.7 Laju Temperatur Solidifikasi..... | 16 |
| 2.7.1 Perubahan Fasa pada Pembentukan Nanopartikel | 17 |
| 2.8 Solidifikasi Nano Seng Oksida | 19 |
| 2.9 Pertumbuhan Partikel (<i>Grain Growth</i>) | 20 |
| 2.10 Fungsi Distribusi Radial..... | 22 |
| 2.11 LAMMPS | 23 |
| 2.12 OVITO | 24 |
| 2.13 Vesta-Jp Minerals | 25 |
| BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN..... | 27 |
| 3.1 Metode Penelitian..... | 27 |
| 3.2 Waktu dan Tempat | 27 |
| 3.3 Alat dan Bahan..... | 27 |
| 3.4 Prosedur Penelitian..... | 27 |
| 3.4.1 Prosedur Pembuatan Read Data | 27 |
| 3.4.2 Pembuatan Script | 29 |
| 3.4.3 Menjalankan Simulasi LAMMPS | 30 |
| 3.4.4 Menjalankan Visualisasi OVITO..... | 31 |
| 3.5 Diagram Alir Penelitian..... | 32 |
| BAB 4. HASIL DAN PEMBAHASAN | 33 |
| 4.1 Laju Temperatur Terhadap Kristalinitas | 33 |
| 4.2 Analisa Laju Temperatur Terhadap Pertumbuhan Partikel | 36 |
| 4.3 Laju Temperatur Terhadap Distribusi Partikel | 39 |
| 4.4 Visualisasi Proses Solidifikasi Nano Seng Oksida (ZnO)..... | 43 |
| BAB 5. PENUTUP..... | 47 |
| 5.1 Kesimpulan | 47 |
| 5.2 Saran | 48 |
| DAFTAR PUSTAKA | 49 |
| LAMPIRAN..... | 51 |

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Gambar hasil foto nano seng oksida (ZnO) (Sholihin, 2016) 5

Gambar 2.2 Sifat-sifat seng oksida (Morkoç dan Özgür, 2008) 6

Gambar 2.3 Contoh sistem kristal pada kondisi kristal dan amorph..... 7

Gambar 2.4 Tiga jenis sistem kristal kubik (a) Kubik Sederhana, (b) Kubik Pusat Bidang Muka, (c) Kubik Pusat Ruang Badan 7

Gambar 2.5 Struktur kristal seng oksida (a) rocksalt (b) zinc blende (c) wurtzite (Morkoç dan Özgür, 2008) 8

Gambar 2. 6 Macam-macam dimensi nanomaterial (Jayadevan dan Tseng, 2004) 9

Gambar 2.7 Skema pembentukan nano partikel dengan metode top down dan bottom up (Dolez, 2015)..... 10

Gambar 2.8 Aplikasi nanomaterial pada berbagai bidang (Alshammari, dkk, 2016) 11

Gambar 2.9 Karakteristik nanopartikel ZnO (Ramahdita, 2011)..... 12

Gambar 2.10 Contoh grafik hasil differential scanning calorimetry (Chang, dkk, 2002)..... 13

Gambar 2.11 Contoh gambar hasil analisa XRD ZnO (Sholihin, 2016)..... 14

Gambar 2.12 Hubungan antara teori, simulasi dan eksperimen (Allen, 2004) 15

Gambar 2.13 Grafik temperatur solidifikasi (Dianat dan Medrano, 2015) .. 17

Gambar 2.14 Skema perubahan fasa pada pembentukan nanomaterial 18

Gambar 2.15 Visualisasi atom pada proses pembentukan nanopartikel 19

Gambar 2.16 Skema solidifikasi (Winegard, 1961) 20

Gambar 2.17 Skema pertumbuhan partikel (Cubillas dan Anderson, 2010) 21

Gambar 2.18 Prinsip dasar perhitungan RDF (J. Buhler, 2011) 22

Gambar 2.19 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (J.Buhler, 2011). ... 23

Gambar 2.20 Tampilan antarmuka website resmi LAMMPS 24

Gambar 2.21 Contoh tampilan visualisasi OVITO..... 25

Gambar 2.22 Tampilan antarmuka perangkat lunak VESTA..... 26

Gambar 3.1 Tampilan visualisasi pada program VESTA. 28

Gambar 3.2 Matriks transformasi..... 29

Gambar 3.5 Menu *Command Prompt*..... 30

| | |
|---|----|
| Gambar 3.6 Membuka lokasi berkas melalui <i>Command Prompt</i> | 31 |
| Gambar 3.7 Diagram alir penelitian | 32 |
| Gambar 4.1 Fungsi distribusi radial ZnO (Bharathi dan Duin, 2010) | 34 |
| Gambar 4.2 Fungsi distribusi radial nano seng oksida dengan variasi laju temperatur solidifikasi (a) (10^{10} K/s), (b) 10^{11} K/s, (c) 10^{12} K/s | 35 |
| Gambar 4.3 Grafik pertumbuhan partikel variasi laju 10^{10} K/s | 36 |
| Gambar 4.4 Grafik pertumbuhan partikel variasi laju 10^{11} K/s | 37 |
| Gambar 4.5 Grafik pertumbuhan partikel variasi laju 10^{12} K/s | 37 |
| Gambar 4.6 Grafik Pertumbuhan Partikel (Savka, dkk, 2017). | 38 |
| Gambar 4.8 Visualisasi proses rekombinasi partikel nano ZnO Variasi laju 10^{10} K/s | 39 |
| Gambar 4.8 Visualisasi proses rekombinasi partikel nano ZnO Variasi laju 10^{11} K/s | 40 |
| Gambar 4.9 Visualisasi proses rekombinasi partikel nano ZnO Variasi laju 10^{12} K/s | 40 |
| Gambar 4.10 Grafik Distribusi partikel nano ZnO hasil simulasi variasi laju 10^{10} K/s | 41 |
| Gambar 4.11 Grafik Distribusi partikel nano ZnO hasil simulasi variasi laju 10^{11} K/s | 41 |
| Gambar 4.12 Grafik Distribusi partikel nano ZnO hasil simulasi variasi laju 10^{12} K/s | 42 |
| | 43 |
| Gambar 4.13 Grafik distribusi partikel pada cluster terbesar | 43 |
| Gambar 4.14 Visualisasi Proses Solidifikasi Nano Seng Oksida | 44 |
| Gambar 4.15 <i>Cluster</i> atom pada simulasi solidifikasi nano ZnO | 45 |
| Gambar 4.16 Visualisasi hasil simulasi kondensasi ZnO (Savka, dkk, 2017) | 46 |

DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Data Pengamatan Ukuran Partikel 39





BAB 1. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Penggunaan nanoteknologi di Indonesia semakin berkembang luas sehingga kehadiran nanoteknologi sudah dapat kita rasakan, nanoteknologi mulai di aplikasikan sebagai teknologi yang digunakan untuk memenuhi kebutuhan masyarakat Indonesia. Teknologi nano di aplikasikan pada bidang komputer, produk elektronik, kosmetik, pupuk, polimer, suplemen, hingga obat herbal. Teknologi nano merupakan teknologi yang masih dalam masa pertumbuhan, namun dalam lima puluh tahun terakhir teknologi nano mengalami perkembangan yang sangat pesat hal ini ditandai dengan ribuan nano desain telah di aplikasikan. (Bharathi dan Duin, 2010) sehingga hadirnya teknologi nano menjadi peluang untuk memunculkan potensi energi sumber terbarukan (Sholahuddin, 2014).

Hadirnya teknologi nano memiliki peranan penting dalam pemanfaatan suatu material khususnya dalam ukuran nano, material dengan ukuran nano memiliki kelebihan dibanding material yang memiliki ukuran lebih besar salah satu kelebihan yang dimiliki material nano yaitu aktif area yang dimiliki material lebih besar sehingga energi yang dihasilkan oleh material nano lebih besar dibandingkan dengan material yang memiliki ukuran lebih besar (Carruthers, 2006). Nano teknologi adalah teknologi yang membicarakan tentang suatu ukuran dalam skala nano dengan kata lain nano teknologi merupakan teknologi untuk memanipulasi dan memproduksi material dalam skala ukuran nano (Bharathi dan Duin, 2010), suatu material dapat dikatakan sebagai nanomaterial apabila material tersebut memiliki ukuran maksimal 100 nm.

Pembentukan nanomaterial dapat melalui berbagai macam metode beberapa metode yang digunakan namun secara umum pembentukan nanomaterial dilakukan melalui metode bottom-up dan metode top-down (Ramsden, 2010). Pada metode bottom-up nanomaterial terbentuk dengan cara mengumpulkan atom dan molekul sehingga terbentuk kluster atom (kelompok atom) sehingga terbentuk nano partikel. Pada metode ini umumnya melibatkan reaksi kimia, sedangkan metode top-down

yaitu pembentukan nanomaterial dilakukan dengan cara memecahkan benda padat yang akan dibuat menjadi nanomaterial sehingga terbentuk nanomaterial, pada metode ini umumnya menggunakan energi mekanis dalam prosesnya.

Dalam proses pembentukan nano seng oksida terdapat proses solidifikasi yang mana merupakan proses dimana nanomaterial seng oksida terbentuk, Menurut (Hu, dkk, 2010) pada saat 2 atau lebih nanopartikel berada pada kondisi *melting* maka material tersebut akan bergabung menjadi partikel yang lebih besar dan mengalami rekristalisasi, pada proses ini temperatur memiliki peranan penting pada struktur kristal yang dihasilkan pada nanomaterial seng oksida. Proses solidifikasi terjadi pada saat suhu pendinginan yang artinya proses ini merupakan mulai terbentuknya nanopartikel seng oksida dan proses ini terjadi pada skala atomik. Maka dibutuhkan kajian molekular dinamik untuk dapat membahas fenomena yang terjadi.

Molekular dinamik merupakan kajian yang digunakan untuk mengamati pergerakan antar molekul yang saling berinteraksi pada saat proses pembentukan nano partikel karena pada proses pembentukan nano partikel tidak dapat diamati oleh mata telanjang. Pergerakan partikel yang terjadi karena energi yang diberikan kepada material, sehingga memaksa molekul-molekul pada material bergerak dan saling melepaskan diri seiring dengan besarnya energi yang diberikan pada material. Dengan menggunakan kajian molekular dinamik kita dapat mengetahui proses yang terjadi pada saat perubahan serbuk seng oksida menjadi serbuk seng oksida berukuran nano, dan juga dengan bantuan aplikasi yang dapat memudahkan untuk menjelaskan serta mengamati proses yang terjadi pada proses pembentukan nano partikel dengan jalan *visualisasi* proses yang terjadi.

Pada penelitian ini Penulis mengkaji tentang proses solidifikasi pada nanopartikel seng oksida dengan metode simulasi molekular dinamik, dimana berdasarkan latar belakang diatas laju temperatur solidifikasi memiliki pengaruh terhadap tingkat kristalinitas nanopartikel seng oksida, metode ini berupa simulasi berbasis komputasi sehingga dapat mengetahui fenomena solidifikasi pada proses pembentukan nanopartikel seng oksida. Sehingga pada peneltian ini ditujukan

sebagai penunjang analisis berbasis komputasi pada proses solidifikasi nano seng oksida.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah, maka dirumuskan masalah sebagai berikut :

1. Pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap kristalinitas nano seng oksida ?
2. Pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap pertumbuhan partikel nano seng oksida ?
3. Pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap distribusi partikel partikel nano seng oksida ?
4. Visualisasi solidifikasi nano seng oksida ?

1.3 Batasan Masalah

Untuk memfokuskan permasalahan yang akan diteliti pada penelitian ini, maka akan dibatasi permasalahan yang akan dibahas sebagai berikut :

1. Menggunakan material seng oksida dengan struktur kristal wurtzite.
2. Jumlah atom ZnO yang digunakan 5806 atom.
3. Potensial yang digunakan pada proses simulasi solidifikasi nano seng oksida adalah lennard-jones.

1.4 Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah :

1. Mengetahui pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap tingkat kristalinitas seng oksida.
2. Mengetahui pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap pertumbuhan partikel nano seng oksida.
3. Mengetahui pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap distribusi partikel nano seng oksida.

4. Mengetahui visualisasi proses solidifikasi nano seng oksida

1.5 Manfaat Penelitian

1. Mendapatkan grafik pengaruh proses laju temperatur solidifikasi pada proses solidifikasi nano seng oksida.
2. Dapat mengetahui bentuk struktur kristal yang terbentuk akibat pengaruh laju temperatur solidifikasi.
3. Dapat mengetahui fenomena solidifikasi partikel nano seng oksida pada proses pembentukan nanopartikel seng oksida.
4. Sebagai literatur atau bahan penelitian selanjutnya.

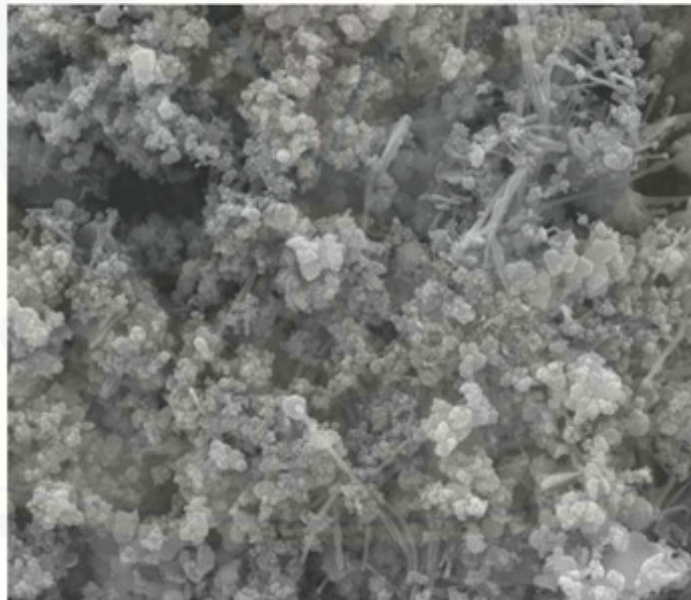
1.6 Hipotesis

Semakin besar nilai laju temperatur solidifikasi maka pertumbuhan partikel nano seng oksida pada proses solidifikasi akan semakin menurun sehingga kristalinitas nano seng oksida semakin rendah.

BAB 2. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Seng Oksida

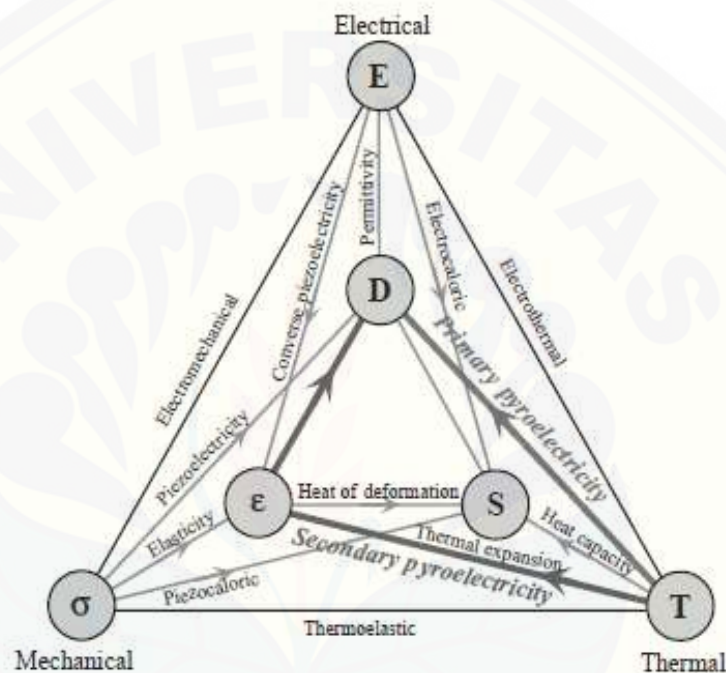
Merupakan senyawa anorganik yang memiliki sifat dan karakteristik yang unik sehingga banyak digunakan dan di aplikasikan dalam berbagai bidang baik industri, kesehatan dan berbagai bidang lainnya. Seng oksida memiliki rumus senyawa (ZnO) yang dapat diartikan bahwa seng oksida terdiri dari dua jenis unsur penyusun utama yaitu Zn (*zink*) dan O (oksigen), seng oksida merupakan material semikonduktor dimana konduktifitasnya tergantung pada atom seng (Zn) yang terkandung di dalamnya (Carter dan Norton, 2013). Ciri fisik yang dimiliki seng oksida adalah berbentuk serbuk putih jika pada keadaan dingin dan akan berwarna kuning jika dalam keadaan panas, untuk sifat yaitu pahit dan tidak berbau, tidak larut dalam air atau alkohol akan tetapi seng oksida akan larut dalam garam amonium.



Gambar 2.1 Gambar hasil foto nano seng oksida (ZnO) (Sholihin, 2016)

Material seng oksida dikatakan material unik karena sifat yang dimiliki, beberapa sifat yang dimiliki oleh seng oksida yaitu piezoelektrik,

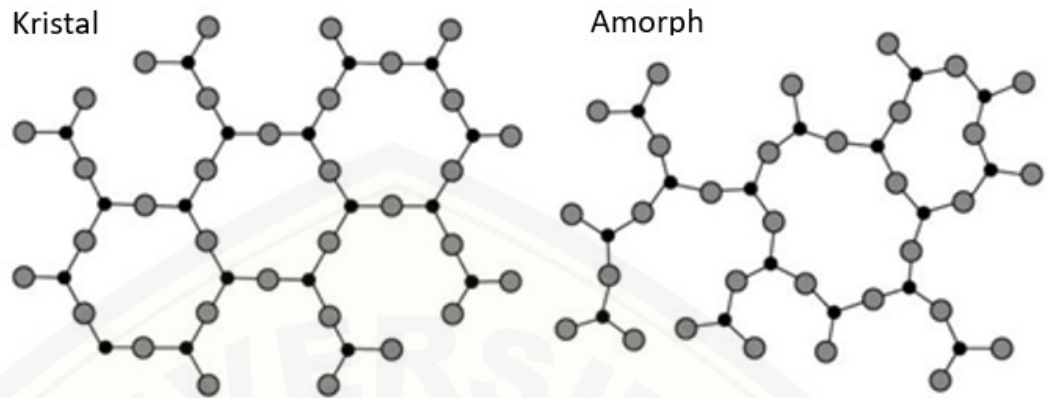
termoelektrik, dan fotoelektrik, anti bakteri, sifat optis yang direkayasa, kemampuan sebagai katalisator dan sifat non toxic pada konsentrasi tertentu (Ramahdita, 2011). Oleh karena itu material ini banyak di gunakan dalam berbagai bidang berikut merupakan aplikasi dari material seng oksida. Sel surya, antibakteri pada polimer, keperluan medis, kosmetik, pelapisan, sensor piezoelektrik, dan biosensor.



Gambar 2.2 Sifat-sifat seng oksida (Morkoç dan Özgür, 2008)

2.2 Struktur Kristal

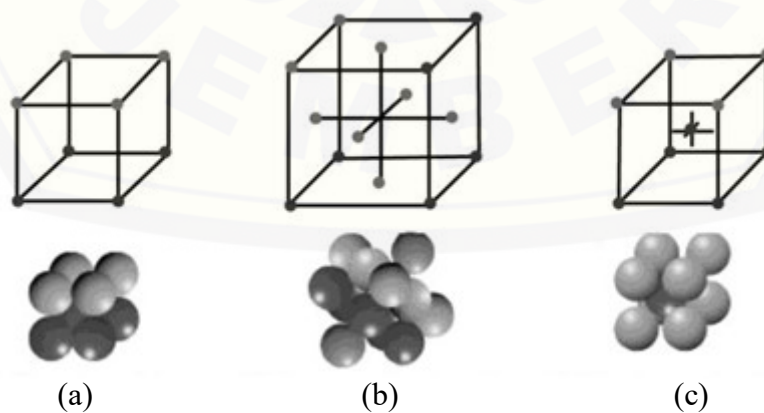
Material zat padat dapat diklasifikasikan berdasarkan keteraturan, di mana atom atau ion tersusun secara teratur antara atom yang satu dengan yang lainnya (atau disebut kristal) seperti intan. Sebuah material kristalin merupakan suatu kondisi di mana atom terletak dalam susunan yang berulang dalam jarak atomik yang besar oleh karena itu, muncul urutan yang panjang. Seperti pada saat terjadi proses pemadatan (solidifikasi), atom-atom akan menempatkan diri mereka sendiri ke dalam pengulangan pola tiga dimensi di mana masing-masing atom terikat dengan atom tetangga yang letaknya sangat dekat.



Gambar 2.3 Contoh sistem kristal pada kondisi kristal dan amorph

Susunan atomik dalam kristal zat padat mengindikasikan bahwa sedikit kelompok atom membentuk sebuah pola pengulangan. Oleh karena itu, dalam menggambarkan struktur kristal, terkadang lebih mudah untuk membagi struktur tersebut ke dalam entitas pengulangan kecil yang disebut sebagai unit sel.

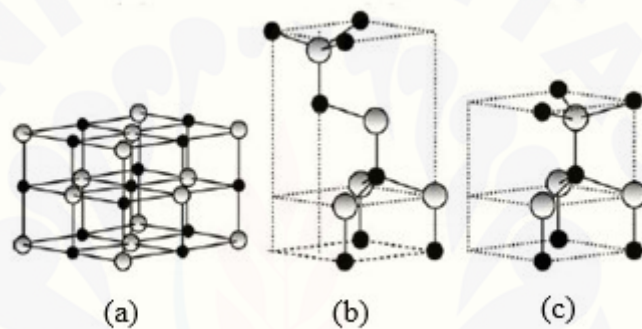
Unit sel (sel satuan) merupakan pola berulang dalam tiga dimensi dan membentuk kisi suatu kristal. Unit sel digambarkan sebagai volume terkecil suatu zat padat (Gambar 2.4). Semua sel satuan di dalam suatu kristal bersifat identik, jika kita membahas salah satunya berarti kita telah mendeskripsikan semuanya sehingga mempermudah proses analisis.



Gambar 2.4 Tiga jenis sistem kristal kubik (a) Kubik Sederhana, (b) Kubik Pusat Bidang Muka, (c) Kubik Pusat Ruang Badan

2.2.1 Struktur Kristal Seng Oksida

Seng oksida memiliki tiga jenis struktur kristal berbeda yaitu wurtzite, zincite atau zincblende dan rocksalt dan ketiga struktur ini ditemui pada kondisi yang berbeda. Seng oksida yang tersedia di alam berbentuk mineral biasanya memiliki struktur kristal zincite. Untuk struktur wurtzite dapat ditemukan pada keadaan dimana material berada pada kondisi dibawah suhu lingkungan dan fasa termodinamika yang stabil. Sedangkan untuk struktur rocksalt dapat ditemukan pada kondisi tekanan yang tinggi, contohnya pada struktur kristal GaN (Morkoç dan Özgür, 2008).



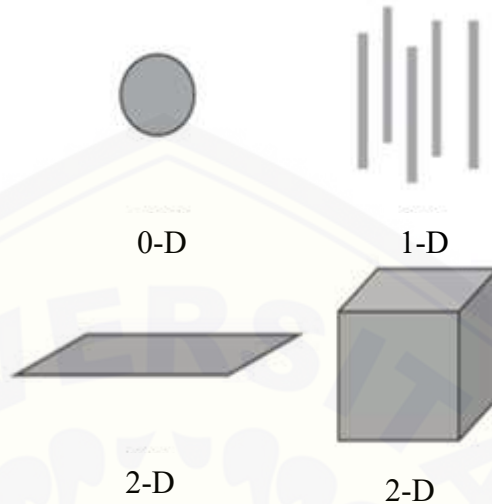
Gambar 2.5 Struktur kristal seng oksida (a) rocksalt (b) zinc blende (c) wurtzite (Morkoç dan Özgür, 2008)

2.3 Nanomaterial

Dapat diartikan sebagai material yang memiliki ukuran nano (10^{-9}) satu per satu milyar dari meter, sedangkan nano teknologi adalah ilmu dan rekayasa dalam menciptakan struktur fungsional maupun piranti dalam ukuran atau skala yang kecil (nano). Jadi dapat dikatakan nanoteknologi adalah teknologi yang digunakan untuk menciptakan nanomaterial sehingga potensi dari suatu material dapat dimaksimalkan. Nanomaterial mempunyai sifat material yang unik dalam segi ukuran dan dimensi, dimana nanomaterial ini menentukan batas ukuran dan formasi pada kristal ukuran nano.

Nanomaterial Pada umumnya diklasifikasikan dengan bentuk dan dimensinya. Secara umum Terdapat 4 macam dimensi dari nanomaterial yaitu *zero-dimensional (nanoparticle)*, *one-dimensional (nanowires)*, *two-dimensional*

(*nanostructure thin films*), dan *three-dimensional (nanostructured)* ditunjukkan pada gambar 2.6 (Jayadevan dan Tseng, 2004).

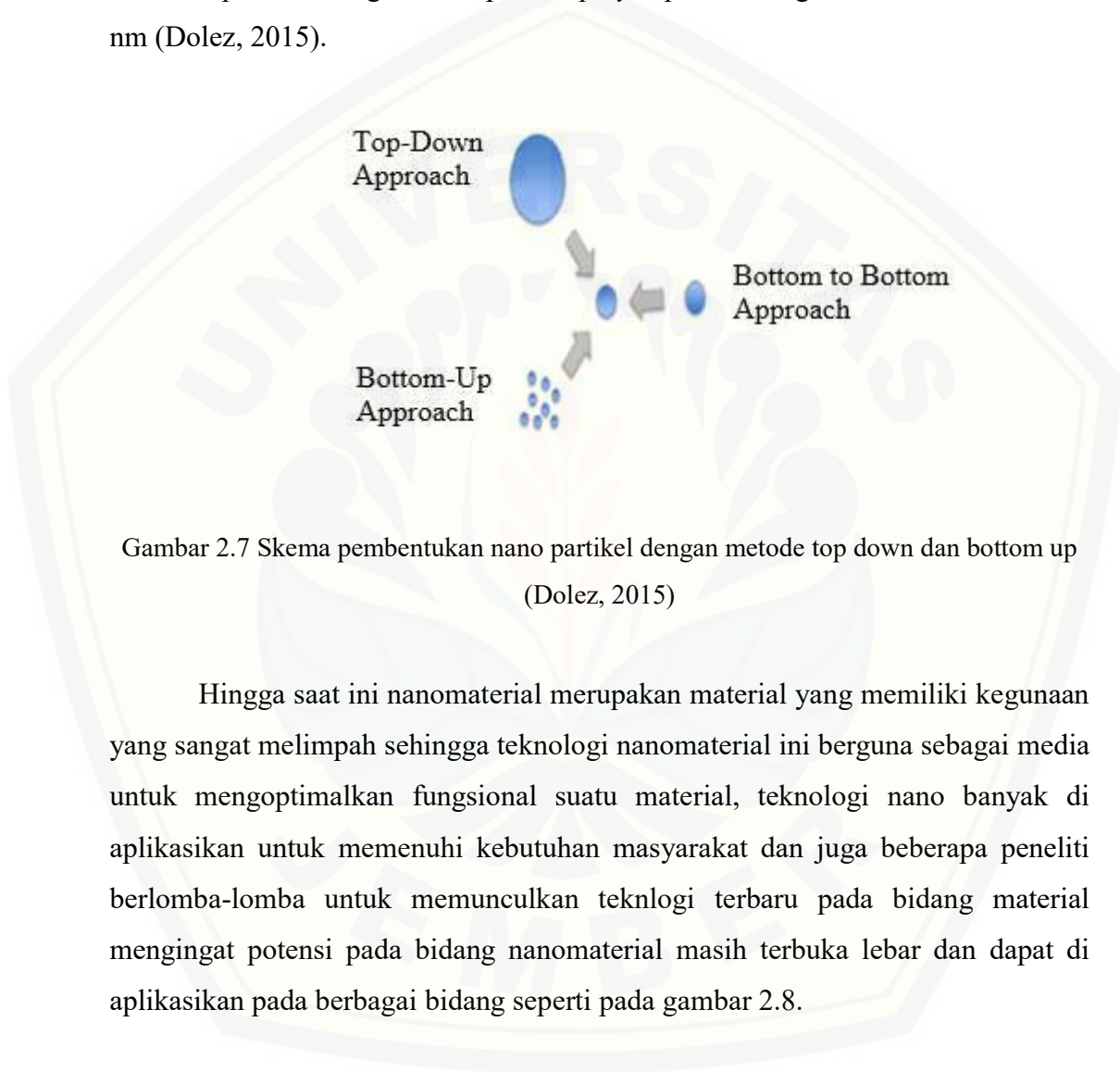


Gambar 2. 6 Macam-macam dimensi nanomaterial (Jayadevan dan Tseng, 2004)

Nanopartikel adalah material yang memiliki bentuk *zero-dimension (0D)* dimana semua dimensi pada nanopartikel linier dengan karakteristik yang dimiliki seragam, besarnya tidak lebih dari 100 nm. Dalam hal tersebut diartikan bahwa material nanopartikel mempunyai ukuran skala nanometer antara 1-100 nm. Nanopartikel memiliki susunan atom yang biasa disebut dengan *nanocrystal*. Terkait dalam hal ini nanopartikel mempunyai sifat dan karakteristik yang berbeda dengan partikel yang lebih besar, hal ini berhubungan dengan luas aktif area yang dimiliki oleh material nanopartikel (Poole dan Owens, 2003)

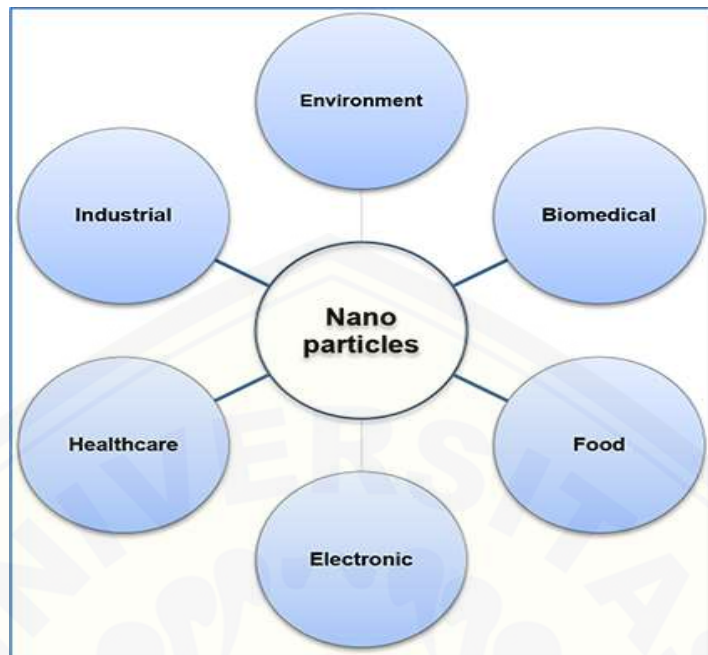
Beberapa metode dihadirkan untuk dapat menghasilkan partikel dengan ukuran nano, dan metode yang umum digunakan untuk membuat nanomaterial adalah teknik *top down* dan *bottom up*. Teknik fabrikasi *top down* dimana skala material yang akan di fabrikasi menjadi nano material memiliki ukuran yang lebih besar sehingga material tersebut akan direduksi menjadi ukuran nano melalui proses mekanik, fisik maupun kimia contoh proses antarlain *ball milling*, *high pressure homogenization* dan lain-lain. Sedangkan untuk metode *bottom up* yaitu dimana ukuran material yang akan di fabrikasi menjadi nanomaterial memiliki ukuran yang lebih kecil sehingga proses pembentukan menjadi nanomaterial seperti pada

gambar 2.7. Kedua metode ini memiliki mempunyai kekurangan dan kelebihan tersendiri, metode ini merupakan metode yang umum digunakan oleh peneliti untuk menghasilkan nanomaterial dimana partikel yang dihasilkan dengan metode *bottom up* yaitu di kisaran ukuran 1-100 nm sedangkan partikel yang dihasilkan dengan metode *top down* menghasilkan partikel *polydispersed* dengan kisaran ukuran > 800 nm (Dolez, 2015).



Gambar 2.7 Skema pembentukan nano partikel dengan metode top down dan bottom up (Dolez, 2015)

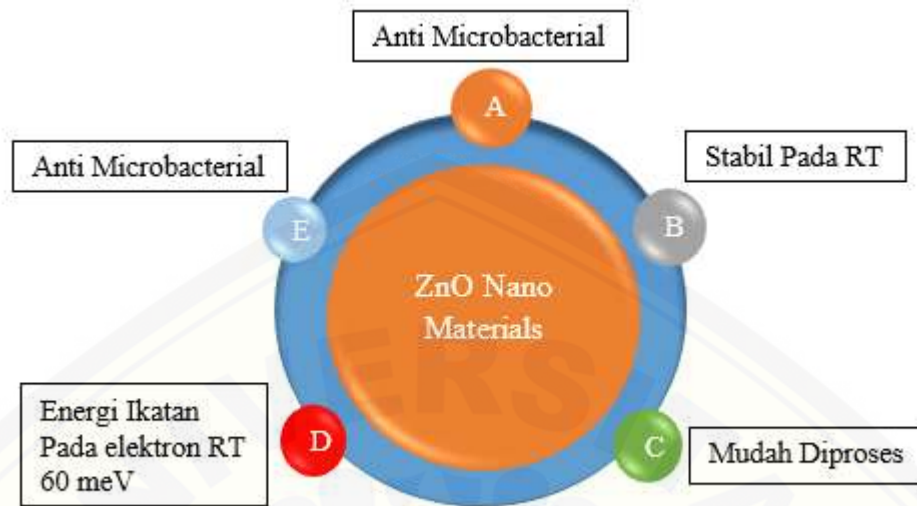
Hingga saat ini nanomaterial merupakan material yang memiliki kegunaan yang sangat melimpah sehingga teknologi nanomaterial ini berguna sebagai media untuk mengoptimalkan fungsional suatu material, teknologi nano banyak di aplikasikan untuk memenuhi kebutuhan masyarakat dan juga beberapa peneliti berlomba-lomba untuk memunculkan teknologi terbaru pada bidang material mengingat potensi pada bidang nanomaterial masih terbuka lebar dan dapat di aplikasikan pada berbagai bidang seperti pada gambar 2.8.



Gambar 2.8 Aplikasi nanomaterial pada berbagai bidang (Alshammari, dkk, 2016)

2.4 Nano Seng Oksida

Nano seng oksida merupakan material yang memiliki sifat semikonduktur yang memiliki struktur kristal wurtzite seperti pada gambar 2.5. material ini memiliki nilai *bandgap energy* yang tinggi yaitu 3.07 eV dan *excitation binding energy* yang kuat yaitu 60 meV, dan juga memiliki nilai celah pita yang tinggi angka yang pernah dicapai untuk nilai celah pita yaitu 3.20 eV. Sifat tersebut yang membuat material nano seng oksida sangat baik untuk diterapkan pada berbagai bidang contohnya semikonduktor maupun DSSC (*dye – sensitized solar cells*). Keunggulan dari nanopartikel seng oksida tidak hanya ditinjau dari luasnya aplikasi yang dapat dicakup namun juga kelayakan untuk difabrikasi juga merupakan aspek yang cukup diminati. Berbagai penelitian menunjukkan bahwa nanopartikel ZnO dapat difabrikasi melalui berbagai teknik, mulai dari yang konvensional seperti milling dan metode kimiawi basah, hingga metode fabrikasi yang cukup kompleks seperti *molecular beam epitaxy* dan *chemical vapor deposition* yang membutuhkan teknologi tinggi. Karena struktur kristal yang dimilikinya, nanopartikel ZnO hasil sintesis stabil pada temperatur ruang. Hal ini mendukung kecenderungan nanopartikel ZnO untuk dimanfaatkan lebih lanjut pada berbagai aplikasi.



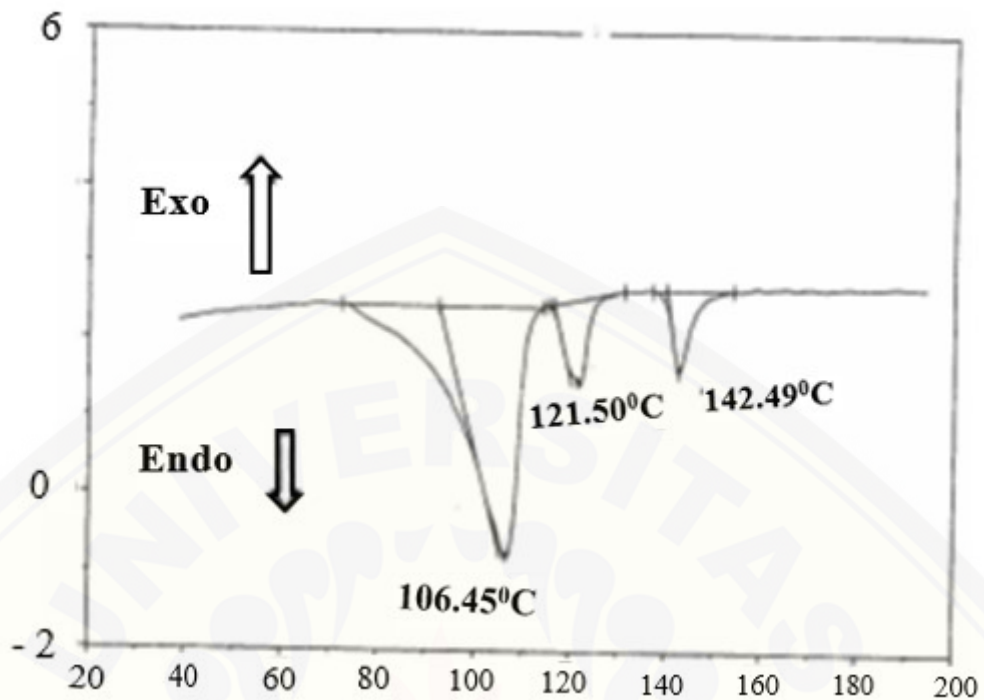
Gambar 2.9 Karakteristik nanopartikel ZnO (Ramahdita, 2011)

2.5 Derajat Kristalinitas

Kristalinitas adalah keadaan struktur molekul yang mangacu pada panjang rentang pola geometrik periodik jarak atom. Dalam kondisi semikristalin polimer seperti polietilena derajat kristalinitas (% kristalinitas) yang dimiliki akan mempengaruhi sifat yang dimiliki seperti tingkat kekauan, kekerasan sifat tahan panas yang dimiliki. Karena derajat kristalinitas memiliki peranan yang penting untuk mengetahui suatu material maka dibutuhkan metode untuk menghitung atau mengukur nilai suatu kristalinitas dari suatu material berikut beberapa metode yang umum digunakan (Crompton, 1993).

2.5.1 Differential Scanning Calorimetry

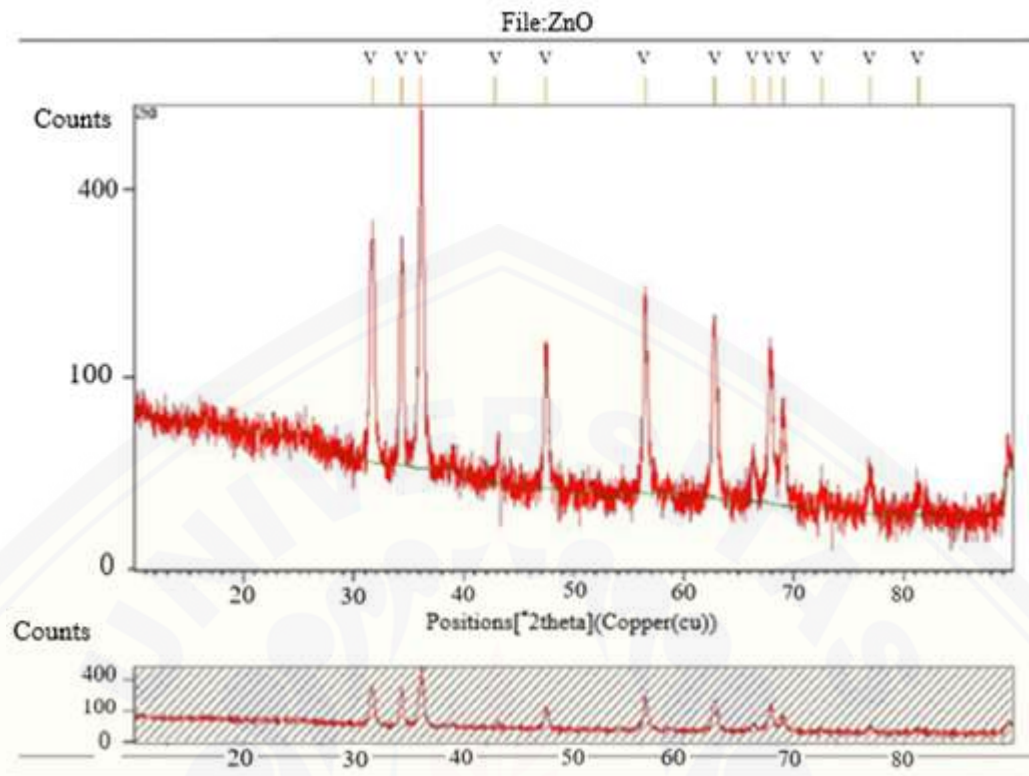
Derajat kristalinitas suatu material dapat diketahui ataupun dihitung nilainya salah satu metode untuk menghitung kristalinitas suatu materal yaitu dengan menggunakan *differential scanning calorimetry* prinsip dari metode ini yaitu dengan membagi panas yang diukur dari fusi dengan panas fusi dan 100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



Gambar 2.10 Contoh grafik hasil differential scanning calorimetry (Chang, dkk, 2002)

2.5.2 XRD (X-Ray Diffraction)

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

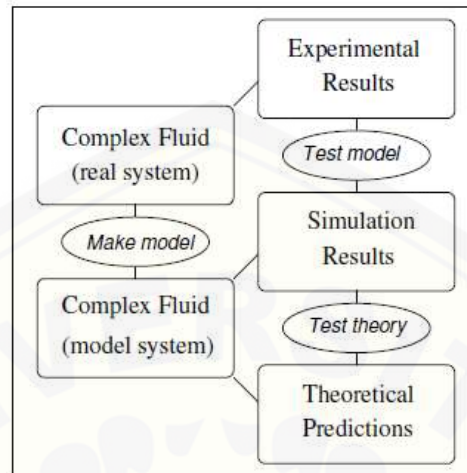


Gambar 2.11 Contoh gambar hasil analisa XRD ZnO (Sholihin, 2016)

2.6 Molekular dinamik

Molekular dinamik merupakan suatu metode yang digunakan untuk mempelajari struktur dari zat padat, cair, maupun gas yang mana interaksi yang terjadi dalam skala mikroskopik. Tujuan dari dilakukannya kajian tentang molekular dinamik yaitu untuk memahami sifat-sifat dan interaksi antar molekul yang terjadi dalam skala mikroskopik sehingga nantinya kajian ini berfungsi sebagai penunjang hasil eksperimen konvensional (Allen, 2004). Dinamika molekul pertama kali dimunculkan oleh Alder dan Wainwright pada tahun 1950, metode ini digunakan untuk mempelajari interaksi pada bola keras. Bermula dari studi tersebut akhirnya mereka memahami tentang sifat cairan secara sederhana. Dan pada tahun 1964, Rahman melakukan simulasi pertama kali menggunakan energi potensial terhadap cairan argon, dan pada tahun 1974 Rahman dan Stillinger melakukan simulasi dinamika molekul dengan menggunakan air dengan maksud

sistem yang digunakan lebih realistik. Hubungan hasil simulasi dan eksperimen dapat dilihat pada gambar 2.8.



Gambar 2.12 Hubungan antara teori, simulasi dan eksperimen (Allen, 2004)

2.6.1 Interaksi Antar Atom

Simulasi dinamika molekuler terdiri dari solusi numerik, langkah demi langkah, dari persamaan gerak klasik, untuk sistem atom sederhana dapat ditulis dengan persamaan

$$\{m_i \ddot{r}_i = f_i\} \quad (2.1)$$

Persamaan diatas menjelaskan tentang gaya yang berkerja pada atom, sehingga kita dapat menghitung gaya yang sedang berkerja pada sebuah atom. Hal ini bertujuan pada saat sebuah atom diberi energi maka suatu atom akan bergerak dan saling berinteraksi antara satu dengan yang lainnya, dengan menghitung gaya yang berkerja pada sautu atom, kita dapat memahami fenomena pada saat atom tersebut sedang bekerja. Beberapa jenis ikatan antar atom antara lain:

1. Gaya Tarik Menarik (Attractive Forces)

Interaksi ini terjadi pada saat molekul-molekul saling berinteraksi dan pada interaksi tersebut timbul gaya tarik menarik yang mengakibatkan energi potensial yang dimiliki oleh ikatan tersebut menurun.

2. Gaya Tolak Menolak (Repulsive Forces)

Interaksi ini terjadi ketika molekul-molekul yang mempunyai jenis yang sama akan terjadi gaya tolak-menolak akan tetapi energi potensial yang dimiliki oleh ikatan tersebut akan meningkat (Puri dan Babbar, 2001).

2.6.2 Lennard Jones Potensial (LJ)

Lennard Jones Potensial adalah potensial energi yang ditujukan untuk menjelaskan interaksi antar 2 atom netral atau molekul, fungsi empiris LJ menjelaskan tentang energi dispersi pada interaksi antar atom i dengan atom j yang terpisah sejauh r_{ij} , persamaan LJ dapat dituliskan sebagai berikut:

$$V^{LJ}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 4\epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right) \quad (2.2)$$

Dimana:

r_{ij} = jarak atom i dengan atom j

V_{ij} = energi dispersi

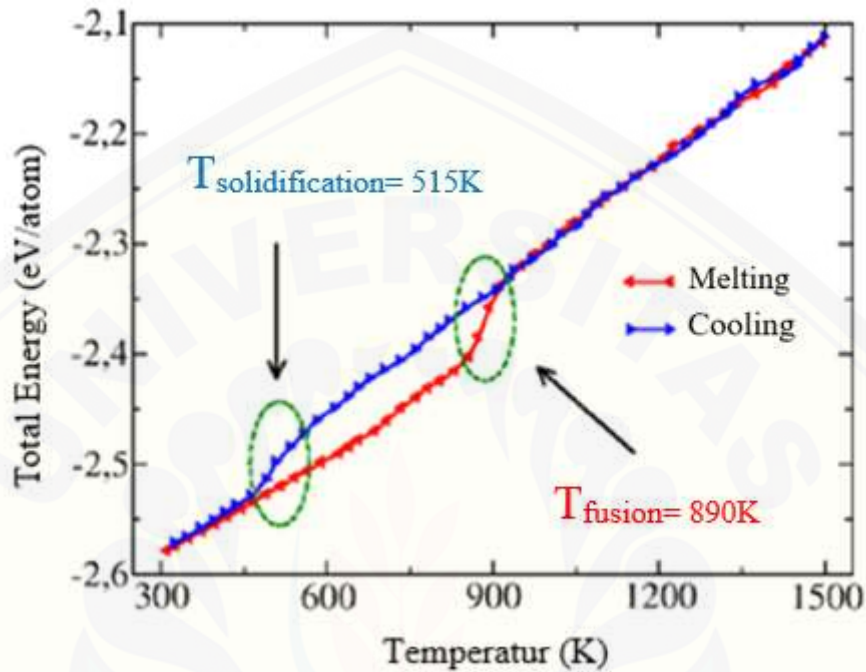
σ = jarak energi interaksi antar partikel

ϵ = Kedalaman potensial

2.7 Laju Temperatur Solidifikasi

Marupakan Temperatur yang berperan dalam proses solidifikasi suatu material dimana dalam sistemnya material akan mengalami transisi fasa dari cair akan berubah menjadi fasa padat. Pada kajian skala nano laju temperatur solidifikasi berperan dalam pembentukan partikel nano selain itu temperatur solidifikasi juga berpengaruh pada tingkat kristalinitas partikel material nano. Menurut (Dianat dan

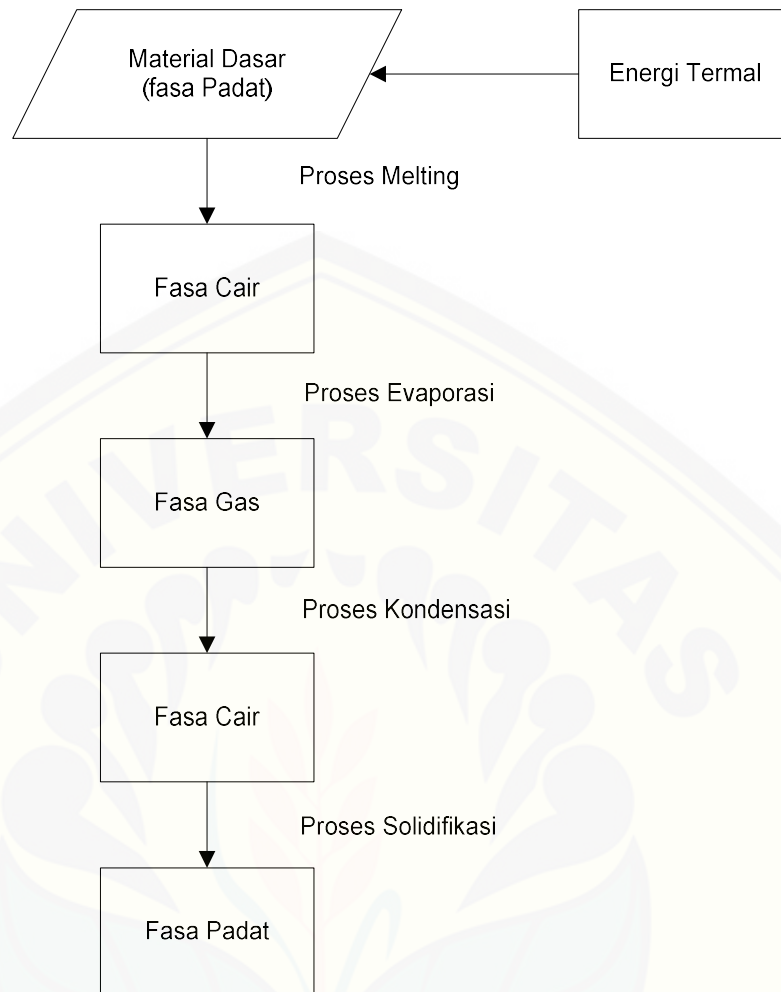
Medrano, 2015) semakin besar nilai laju solidifikasi pada maka material yang dihasilkan akan amorphous dan semakin rendah nilai laju temperatur solidifikasi maka material yang terbentuk akan kristalin.



Gambar 2.13 Grafik temperatur solidifikasi (Dianat dan Medrano, 2015)

2.7.1 Perubahan Fasa pada Pembentukan Nanopartikel

Dalam Pembentukan nanopartikel terdapat beberapa perubahan fasa yang terjadi pada suatu material secara umum perubahan fasa disebabkan karena energi yang diterima oleh suatu material dan energi tersebut menyebabkan terjadinya perubahan fasa seperti ditunjukkan seperti pada gambar 2.14.



Gambar 2.14 Skema perubahan fasa pada pembentukan nanomaterial

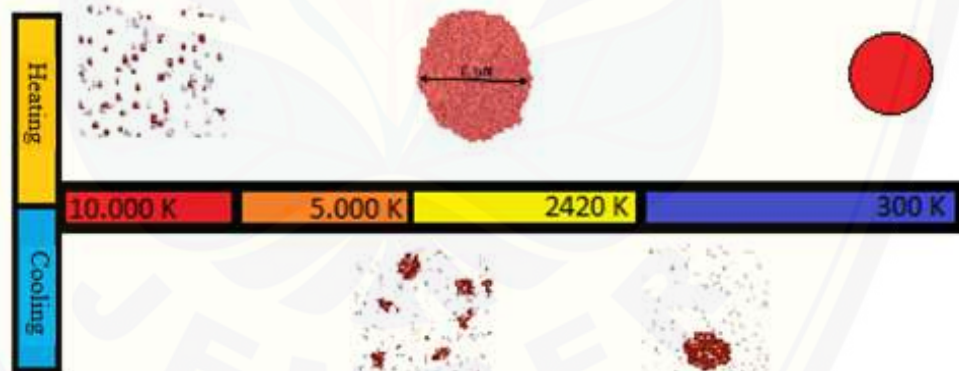
Pada gambar diatas ditunjukkan bahwa pada proses pembentukan nanomaterial terjadi beberapa perubahan fasa dari solid kemudian kembali ke fasa solid. Pada tahap awal perubahan fasa yang terjadi adalah dari fasa padat menuju cair. Menurut (Ahuja, dkk, 1998) proses melting terjadi karena adanya pengaruh temperatur yang semakin tinggi sehingga material mengalami perubahan fasa menjadi cair akibat pergerakan atom material. Hal ini terjadi karena pengaruh energi termal yang diterima oleh material.

Sedangkan Proses penguapan terjadi karena atom-atom material terlepas dari ikatan molekulnya sehingga pada kondisi tersebut dapat dikatakan terjadi proses penguapan dan ditandai dengan berubahnya fasa cair menjadi fasa gas

karena adanya pengaruh energi temperatur yang melebihi batas maksimal ketahanan ikatan antar atom i dan atom j (Suh dan Yasuoka, 2014).

Menurut (Kesälä, dkk, 2007) peristiwa kondensasi pada logam dapat diamati dari tiga peristiwa terpisah yang mungkin terjadi secara bersamaan yaitu nukleasi, pertumbuhan monomer, dan agregasi atau koagulasi. Pada awalnya proses yang mendominasi dan satu-satunya fenomena yang terjadi adalah nukleasi spontan dari uap pada material logam. Sebagai contoh jumlah kluster atom akan meningkat dan juga semakin lama akan semakin membesar dan juga proses ini ditandai dengan perubahan fasa gas menjadi menjadi fasa cair.

Untuk proses solidifikasi material yang berada pada fasa cair setelah mengalami proses kondensasi akan berubah menjadi fasa padat seiring dengan kecilnya temperatur yang dikenakan pada material dan pada proses ini terjadi fenomena pertumbuhan partikel (*grain growth*). yang memungkinkan terbentuknya material dengan ukuran maupun sifat- sifat baru.

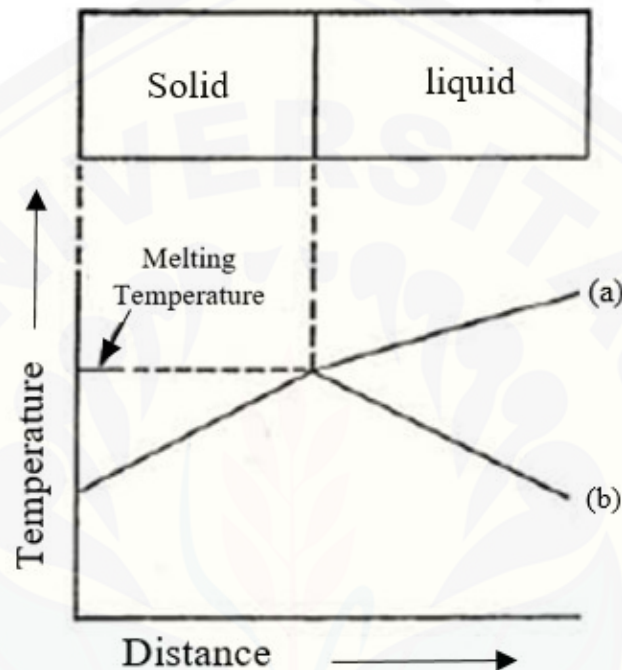


Gambar 2.15 Visualisasi atom pada proses pembentukan nanopartikel

2.8 Solidifikasi Nano Seng Oksida

Beberapa publikasi ilmiah menyatakan bahwa proses solidifikasi pada material logam terdiri dari dua proses utama yaitu nukleasi dan pertumbuhan. Proses ini biasanya di ibaratkan seperti terbentuknya bola salju dimana pada saat awal proses material berasal dari material yang kecil kemudian semakin lama akan

semakin besar, begitu pula yang terjadi pada proses solidifikasi logam material berawal dari material kecil kemudian akan terbentuk material yang ukurannya lebih besar. Jika melihat dari konsep solidifikasi tersebut maka akan terdapat nukleus pada setiap material yang berperan sebagai material awal yang akan membentuk material yang lebih besar (Winegard, 1961).



Gambar 2.16 Skema solidifikasi (Winegard, 1961)

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

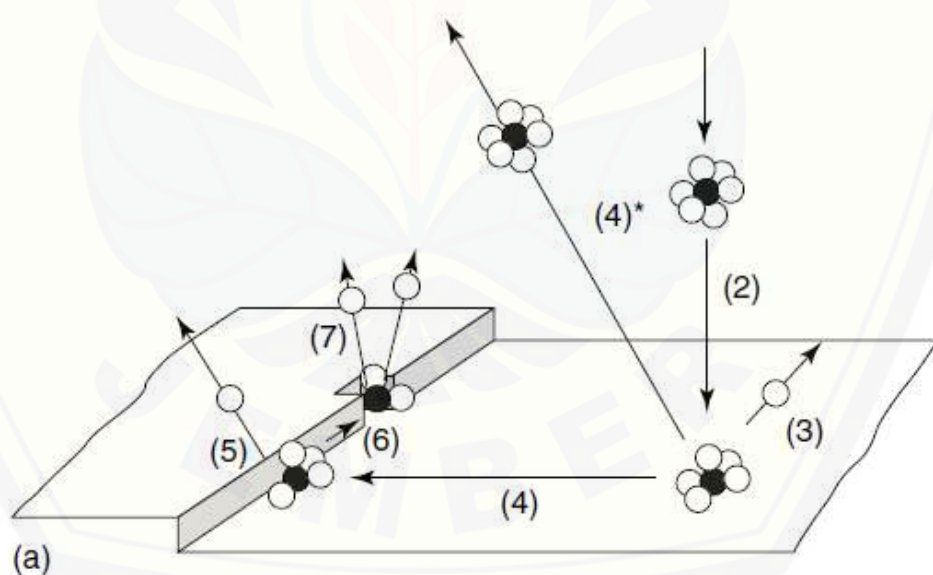
2.9 Pertumbuhan Partikel (*Grain Growth*)

Merupakan fenomena yang terjadi dalam proses solidifikasi nano seng oksida *Grain Growth* dapat di definissikan sebagai rangkaian proses di mana atom atau molekul bergerak menuju permukaan kristal, sehingga menyebabkan

peningkatan ukuran kristal, proses ini dibedakan menjadi 4 langkah antara lain (Cubillas dan Anderson, 2010)

- a. Pengangkutan atom melalui larutan.
- b. Pelekatan atom ke permukaan.
- c. Pergerakan atom.
- d. Pelekatan atom ke tepi dan kekhusatan.

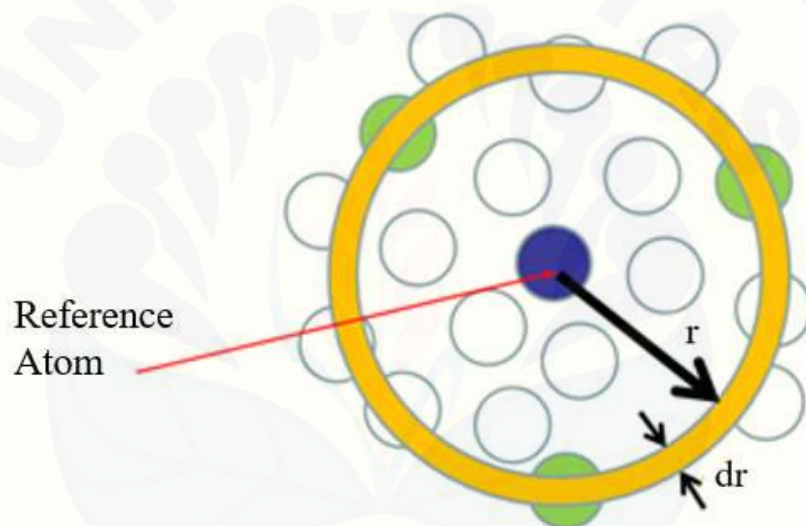
Proses pertama adalah proses pengangkutan yang disebut, sedangkan 2–4 dirujuk sebagai proses permukaan (dan mungkin melibatkan beberapa langkah). Karena ini berbeda langkah-langkah biasanya terjadi secara seri, proses paling lambat akan mengontrol keseluruhan kristal pertumbuhan. Oleh karena itu, pertumbuhan dapat menjadi transportasi (ketika langkah 1 adalah yang paling lambat) atau permukaan terkontrol (ketika langkah 2–4 adalah yang paling lambat). Seperti ditunjukkan pada gambar 2.17.



Gambar 2.17 Skema pertumbuhan partikel (Cubillas dan Anderson, 2010)

2.10 Fungsi Distribusi Radial

Fungsi distribusi radial atau sering dikenal dengan *radial distribution function* merupakan fungsi probabilitas spesifik karena membutuhkan partikel 1 yang berada pada 1 posisi r_1 (tidak ada partikel lain) dan secara bersamaan ada partikel 2 pada posisi r_2 (Chandler, 1986). Fungsi distribusi radial juga dapat diartikan sebagai teknik untuk menggambarkan perubahan kerapatan susunan suatu atom karena adanya pengaruh dari fungsi jarak seperti dijelaskan pada persamaan (Buhler, 2011)



Gambar 2.18 Prinsip dasar perhitungan RDF (J. Buhler, 2011)

Pada kajian simulasi dinamika molekul *radial distribution function* dapat ditentukan dengan menghitung jarak antara semua pasangan partikel dan di masukkan ke dalam histogram, selanjutnya histogram ini dapat menggambarkan susunan partikel pada kondisi dari suatu material (padat, cair dan gas) seperti pada gambar 2.18.

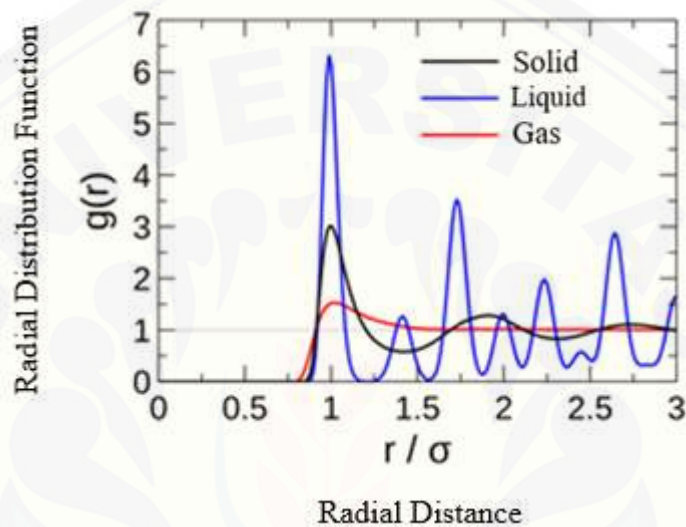
$$\left\{ g(r) = \frac{N(r, \Delta r)}{\frac{1}{2} N \rho V(r, \Delta r)} \right\} \quad (2.3)$$

Dimana :

ρ = kerapatan atom

$V(r)$ = volume kulit bola pada jarak r

$g(r)$ = radial distribution function



Gambar 2.19 Kondisi padat, cair dan gas pada partikel (J.Buhler, 2011).

2.11 LAMMPS

Merupakan perangkat lunak yang digunakan untuk menjalankan simulasi yang diinginkan, pengembangan LAMMPS dimulai pada pertengahan 1990-an di bawah kerjasama penelitian dan perjanjian pengembangan (CRADA) antara dua laboratorium DOE (Sandia dan LLNL) dan beberapa perusahaan seperti (Cray, Bristol Myers Squibb, dan Dupont). Tujuan kerjasama ini yaitu mengembangkan kode molekular dinamik berskala besar, upaya pengkodean dipimpin oleh Steve Plimpton di Sandia. Setelah CRADA berakhir, versi f77, kemudian LAMMPS 99 dirilis pada tahun 2004. Semenjak pertama dirilis lammps dirilis secara terbuka sebagai kode open sources dan terus dikembangkan hingga saat ini.

Dengan bantuan lammps kita dapat menjalankan simulasi sesuai program (*script*) yang telah dirancang dan hasil simulasi akan muncul yang nantinya dapat

divisualisasikan dengan perangkat lunak visualisasi. Tampilan gambar antarmuka website resmi lammmps dapat dilihat pada gambar 2.20.

LAMMPS Molecular Dynamics Simulator

lamp: a device that generates light, heat, or therapeutic radiation; something that illumines the mind or soul -- www.dictionary.com

[hover to animate -- input script](#)

[physical analog \(start at 3:25\) & explanation](#)

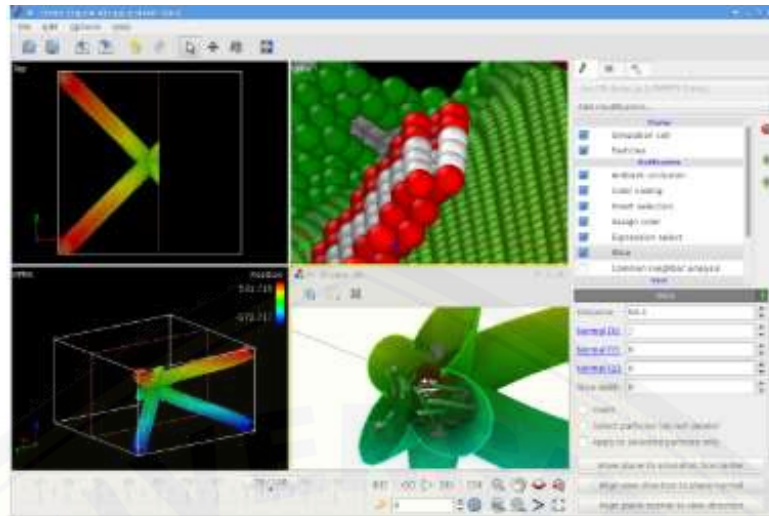
new July 2018 tutorial and symposium on *Modeling Supra-molecular Structures with LAMMPS* will be held at Temple University.

| Big Picture | Code | Documentation | Results | Related Tools | Context | User Support |
|------------------------------|--|---------------------------------------|-------------------------------|---|-----------------------------|---|
| Features | Download | Manual | Publications | Pre-Post processing | Authors | Mail list |
| Non-features | GitHub | Developer guide | Pictures | Pizza.py Toolkit | History | Workshops |
| Packages | SourceForge | Tutorials | Movies | Offsite LAMMPS packages & tools | Funding | User scripts and HowTos |
| FAQ | Latest features & bug fixes | MD to LAMMPS glossary | Benchmarks | Visualization | Open source | Contribute to LAMMPS |
| Wish list | Report bugs & request features | Commands | Citing LAMMPS | Related modeling codes | | |

Gambar 2.20 Tampilan antarmuka website resmi LAMMPS

2.12 OVITO

Adalah perangkat lunak *visualisator* yang digunakan untuk menampilkan gambaran tentang simulasi yang sedang berlangsung, OVITO sedang dikembangkan oleh Alexander Stukowski di Darmstadt University of Technology, Jerman. Program ini bersifat Open Source dan tersedia secara gratis untuk semua platform utama. Ini telah menjabat dalam semakin banyak studi simulasi komputasi sebagai alat yang berguna untuk menganalisis, memahami, dan mengilustrasikan hasil simulasi, contoh tampilan visualisasi OVITO pada gambar 2.21.

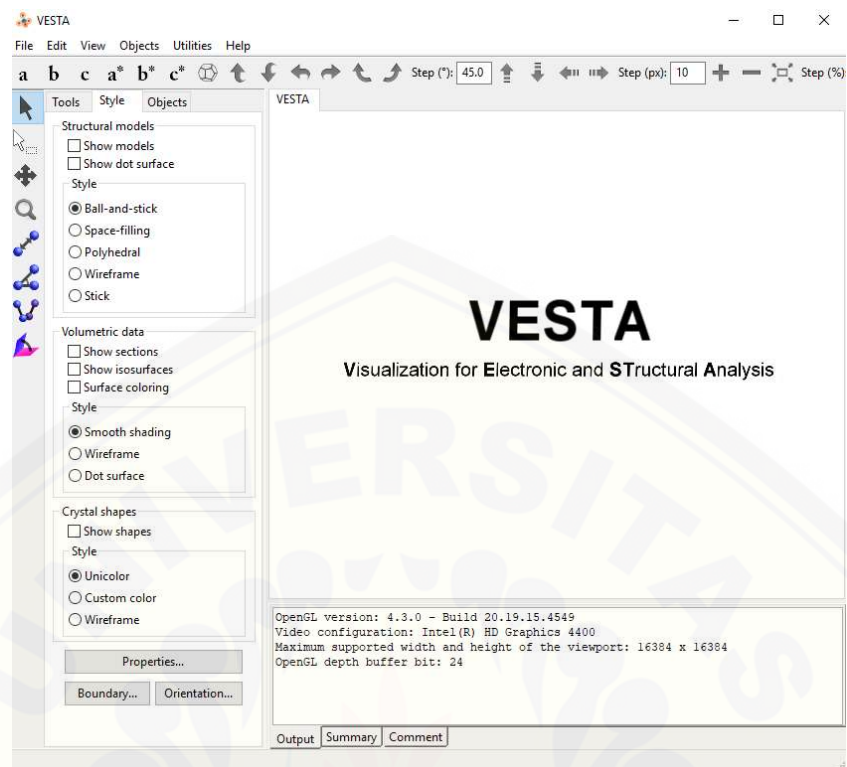


Gambar 2.21 Contoh tampilan visualisasi OVITO

2.13 Vesta-Jp Minerals

Merupakan aplikasi yang digunakan untuk membaca/memvisualisasikan struktur atom awal yang akan digunakan dalam script. VESTA adalah program visualisasi 3D untuk model struktural, data volumetrik seperti elektron / kepadatan nuklir, dan morfologi kristal. Perangkat lunak ini dikembangkan oleh Koichi Momma yang pertama kali dirilis pada tahun 2002 dan terus dikembangkan hingga saat ini.

Dengan menggunakan perangkat lunak ini kita dapat memodifikasi atom serta dapat memvisualisasikan, sebagai contoh kita menjalankan atom Zn pada perangkat lunak vesta, maka kita dapat memodifikasi atom tersebut sesuai keinginan kita sebagai contoh kita dapat memperbanyak jumlah atom yang dimiliki tanpa merubah struktur awal atom. Perangkat lunak ini merupakan serangkaian perangkat lunak yang dibutuhkan untuk menunjang dalam melaksanakan simulasi solidifikasi nano seng oksida.



Gambar 2.22 Tampilan antarmuka perangkat lunak VESTA

BAB 3. METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Metode Penelitian

Metode yang digunakan untuk menganalisis pengaruh laju Temperatur solidifikasi terhadap ukuran kristalinitas pada proses solidifikasi nano seng oksida (ZnO) yaitu menggunakan simulasi dinamika molekular. Dibutuhkan beberapa komponen penunjang berupa perangkat lunak komputer yang mendukung pembentukan simulasi dan visualisasi proses. Komponen penunjang tersebut adalah perangkat lunak, VESTA, LAMMPS dan OVITO.

3.2 Waktu dan Tempat

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

3.3 Alat dan Bahan

Alat yang digunakan pada penelitian ini yaitu laptop Toshiba dengan prosessor core i5, 64 bit dan Ram 4 Gb yang telah diinstall microsoft office, VESTA, LAMMPS dan OVITO pada sistem operasi Windows 10.

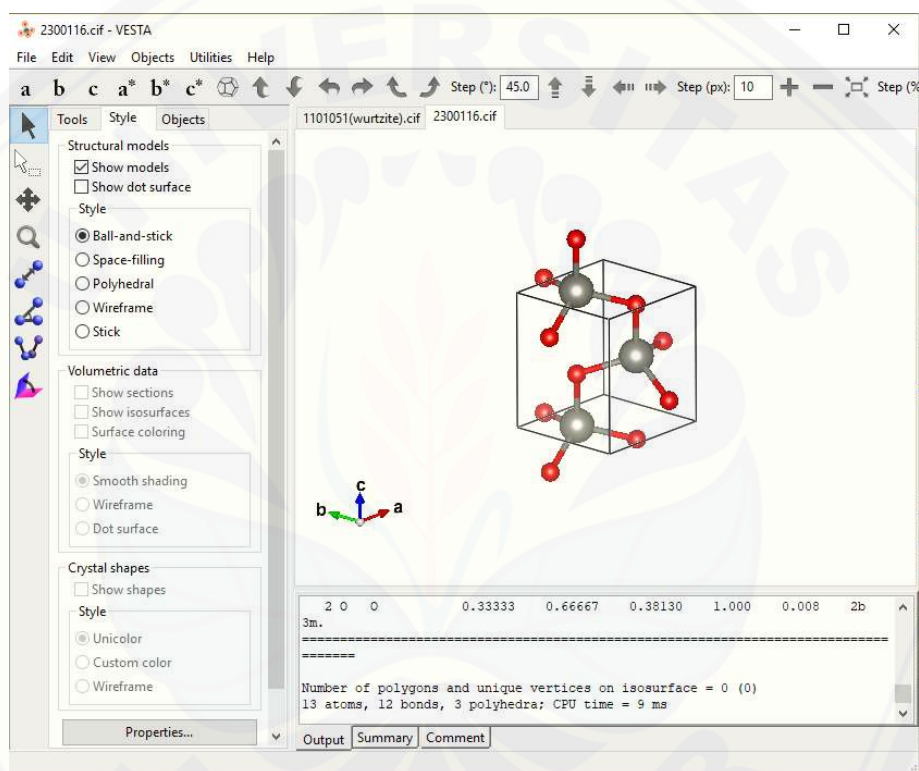
3.4 Prosedur Penelitian

Adapun tahapan yang dilakukan untuk melakukan simulasi dinamika molekular adalah sebagai berikut.

3.4.1 Prosedur Pembuatan Read Data

Sebelum program simulasi dibuat maka langkah pertama yang harus dilakukan adalah membuat read data yang berfungsi sebagai identitas struktur atau material yang akan disimulasikan. Tahapan yang dilakukan pada pembuatan read data adalah sebagai berikut:

- Pastikan perangkat komputer sudah diinstal dengan perangkat lunak VESTA-jp Minerals.
- Mengunduh database struktur kristal seng oksida (wurtzite). Database dapat diakses di <http://www.crystallography.net/cod/>. Berkas yang di unduh akan memiliki ekstensi “.cif”.
- Jalankan berkas yang sudah di unduh pada perangkat lunak VESTA, tampilan pada saat menjalankan seperti pada gambar 3.1.



Gambar 3.1 Tampilan visualisasi pada program VESTA.

- Atur Jumlah atom pada menu Edit, Edit data, Phase, Unit cell, Transform kemudian ganti angka berderet seperti gambar 3.2 dengan angka yang ditentukan.

| Transformation matrix | | | | | |
|-----------------------|---|---|----------------|--|--|
| Rotation matrix P | | | Origin shift p | | |
| 1 | 0 | 0 | 0.000000 | | |
| 0 | 1 | 0 | 0.000000 | | |
| 0 | 0 | 1 | 0.000000 | | |

View General Positions

Initialize current matrix

Gambar 3.2 Matriks transformasi

- Klik, ok
- Kemudian, ekspor berkas pada menu File, Export data menjadi ekstensi “VASP(POSCAR:*,vasp)”.
- Jalankan berkas yang sudah memiliki ekstensi “VASP(POSCAR:*,vasp)” pada ovito, kemudian ubahlah ekstensi berkas pada menu File, Export file. Ubah eksetensi file menjadi ekstensi “LAMMPS Data File”.
- Read data dapat digunakan pada script.

3.4.2 Pembuatan Script

Hal yang harus diperhatikan pada pembuatan *script* yaitu berkas potensial atau read data harus dipersiapkan (dapat digunakan). Adapun tahapan untuk pembuatan *script* adalah sebagai berikut:

- Identifikasi masalah yang akan disimulasikan, contoh batas suhu yang digunakan, data-data yang akan dimunculkan serta visualisasi yang akan dimunculkan.
- Pastikan Potensial atau read data yang akan digunakan sudah tersedia.
- Masukkan massa Zn dan O.
- Masukkan paramater – parameter setting atom (massa atom, units material, boundary, lattice, dll).
- Setelah, selesai pada setting atom selanjutnya pada bagian proses simulasi pada bagian ini kita memasukkan perintah seperti Temperatur untuk mengatur sehu yang digunakan, *compute* untuk menghitung keluaran data, dump sebagai data

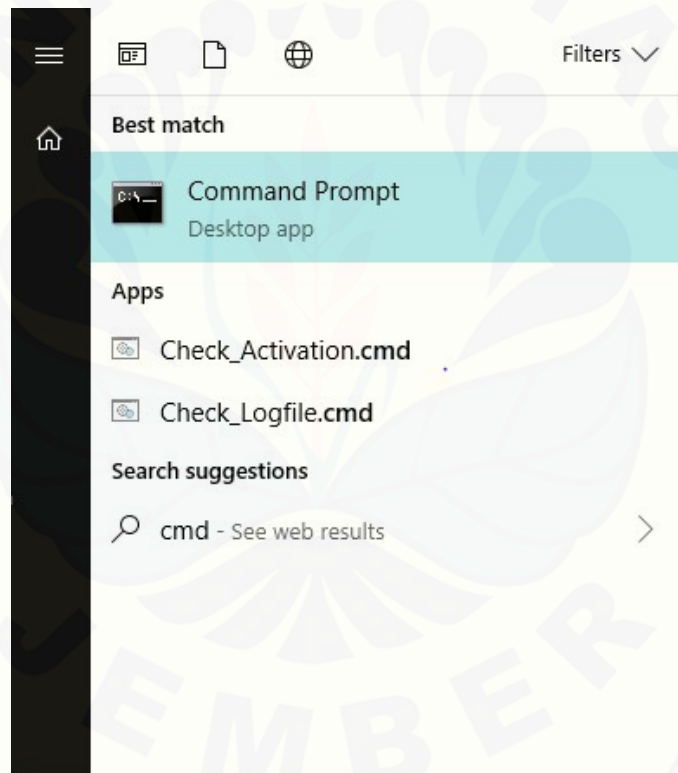
visualisasi yang dapat digunakan sebagai visualisasi dan banyak perintah lainnya .

- f. Selanjutnya simpan file dengan format *file .IN File*.

3.4.3 Menjalankan Simulasi LAMMPS

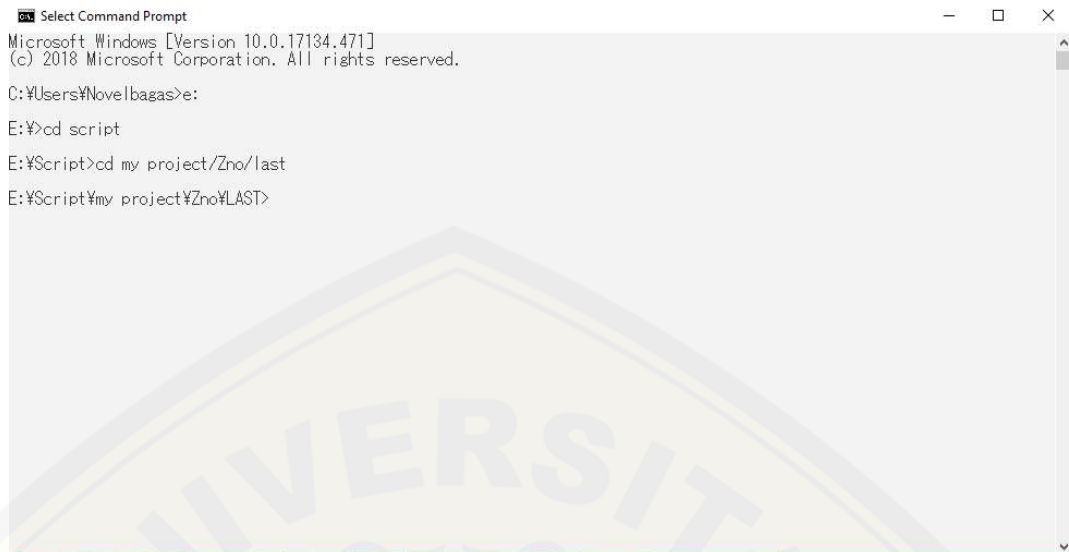
Berikut langkah menjalankan simulasi dengan menggunakan LAMMPS pada sistem operasi windows :

- a. Buka CMD atau *Command Prompt* (klik **Start**, all apps, Windows System, Command Prompt). Dapat juga dengan cara tulis cmd pada menu pencarian.



Gambar 3.5 Menu *Command Prompt*

- b. Buka berkas program dengan menggunakan perintah melalui *Command Prompt*.



```
Select Command Prompt
Microsoft Windows [Version 10.0.17134.471]
(c) 2018 Microsoft Corporation. All rights reserved.

C:\Users\Novelbagas>e:
E:\>cd script
E:\Script>cd my project/Zno/last
E:\Script\my project\Zno\LAST>
```

Gambar 3.6 Membuka lokasi berkas melalui *Command Prompt*

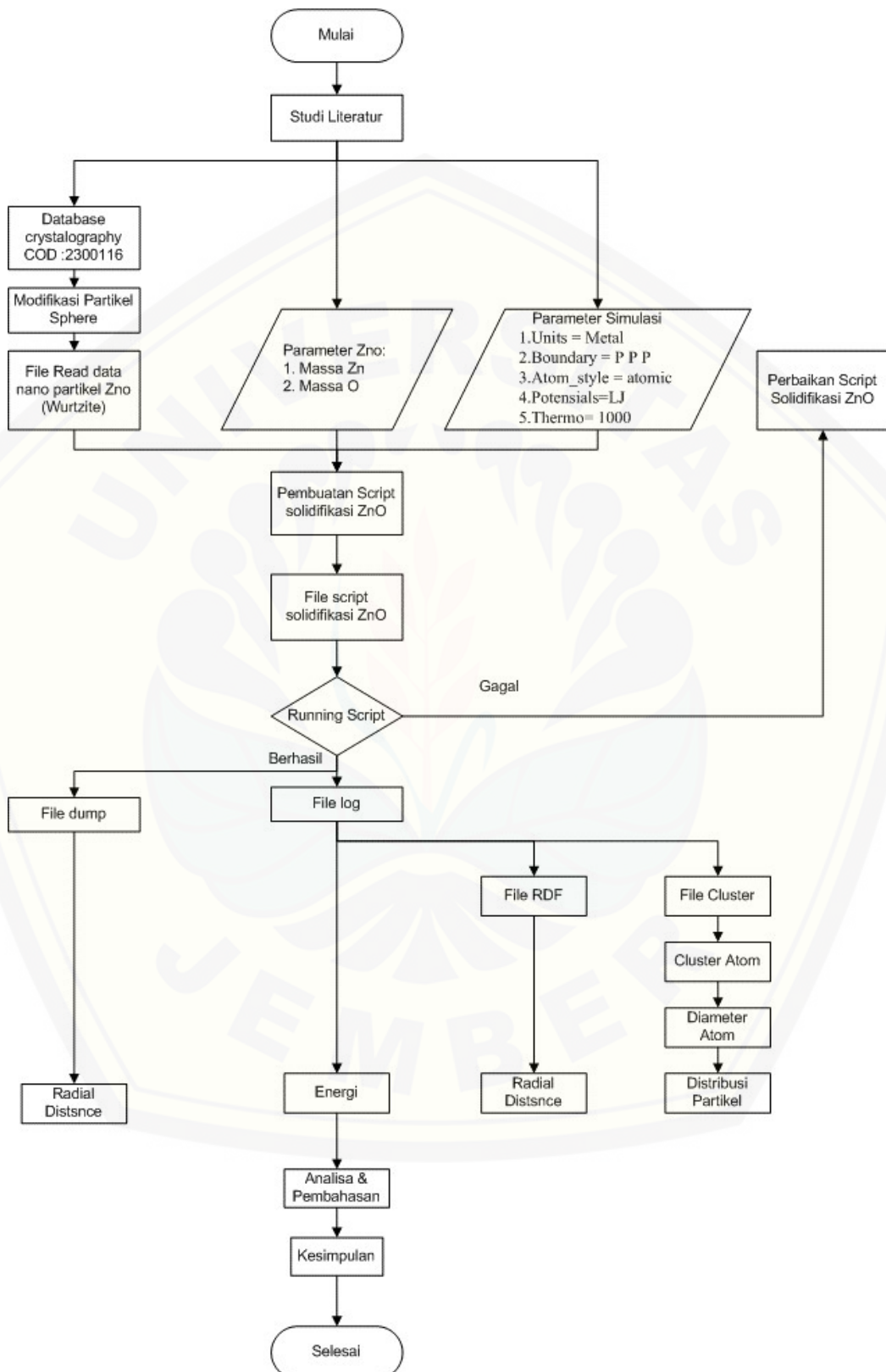
- c. Jalankan file dengan perintah (`Imp_serial.exe -in "Nama file"`), kemudian tunggu hingga proses selesai.
- d. Tunggu Proses simulasi hingga selesai.
- e. Setelah proses simulasi selesai maka akan muncul "log.lammps", berkas ini berisi data dari simulasi yang telah di jalankan yang nantinya akandi analisa dan juga akan muncul berkas "dump.nama file" yang akan digunakan pada proses visualisasi.

3.4.4 Menjalankan Visualisasi OVITO

Cara Menjalankan Visualisasi solidifikasi nano seng oksida dengan menggunakan perangkat lunak OVITO adalah sebagai berikut.

- a. Buka aplikasi Ovito
- b. Buka file "Dump" hasil simulasi sengan cara (File, Load file,Pilih File dump, ok). Kemudian jalankan visualisasi.

3.5 Diagram Alir Penelitian



Gambar 3.7 Diagram alir penelitian

BAB 5. PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian pada pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap kristalinitas nano seng oksida menggunakan simulasi molekular dinamika maka dapat disimpulkan:

1. Pada hasil pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap kristalinitas nano seng oksida di dapat data fungsi distribusi radial (RDF) yang menunjukkan bahwa semakin besar nilai laju temperatur solidifikasi maka tingkat kristalinitas nano seng oksida akan semakin menurun hal ini dibuktikan pada hasil RDF. Pada variasi 10^{10} K/s *peak* sekitar 1.800.000, variasi laju 10^{11} K/s menghasilkan *peak* 22.000 dan pada variasi 10^{12} K/s menghasilkan *peak* pada angka 8.000.
2. Diperoleh hasil pertumbuhan kluster nano seng oksida dengan diameter awal solidifikasi sebesar 3,318 nm dan menghasilkan ukuran akhir partikel sebesar 3,394 nm menggunakan laju 10^{10} K/s, 3,351 nm dengan laju 10^{11} K/s, sedangkan menggunakan laju 10^{12} K/s menghasilkan partikel sebesar 3.17 nm.
3. Berdasarkan analisa distribusi partikel solidifikasi nano seng oksida dapat disimpulkan semakin besar nilai temperatur solidifikasi maka distribusi partikel akan semakin menurun.
4. Visualisasi dari simulasi dinamika molekul pada partikel material nano seng oksida dengan menggunakan laju temperatur solidifikasi sebesar 10^{10} K/s, 10^{11} K/s dan 10^{12} K/s berhasil menggambarkan serta menjelaskan fenomena yang terjadi pada proses solidifikasi nano seng oksida yang ditandai dengan munculnya proses rekombinasi atom yang dibuktikan melalui hasil visualisasi dan data hasil simulasi.

5.2 Saran

Dari hasil penelitian mengenai pengaruh laju temperatur solidifikasi terhadap kristalinitas nano seng oksida dengan metode simulasi molekular dinamik, maka disarankan sebagai berikut:

1. Dibutuhkan komputer dengan spesifikasi yang tinggi untuk menjalankan simulasi molekular dinamik agar simulasi yang dijalankan lebih cepat (efisien) dan mendapatkan kondisi-kondisi sesuai kajian eksperimental.
2. Diperlukan kajian mendalam tentang simulasi molekular dinamik mengingat hasil dari simulasi sangat membantu proses eksperimental.
3. Diperlukan kajian eksperimental agar hasil simulasi dapat dimanfaatkan.

DAFTAR PUSTAKA

- Ahuja, R., Belonoshko, A. B. dan Johansson, B. r. 1998. Melting and liquid structure of aluminum oxide using a molecular-dynamics simulation. *PHYSICAL REVIEW E*, Volume 57: No 2.
- Alshammari, A., Kalevaru, V. N. dan Martin, A. 2016. Metal Nanoparticles as Emerging Green Catalysts. London, Intech
- Bharathi, A. K. dan Duin, A. V. 2010. Analysis Of The Thermal Properties Of Zinc Oxide Using The Reaxff Reactive Force Field. *thesis*, Pennsylvania, Mechanical Engineering, The Pennsylvania State University.
- Buhler, M. J. (2011). *Introduction to medeling and simulation* Vol. 4.
- Carruthers, J. 2006. Fabrication and Characterization of Nanomaterials. Portland, Physics Department, Portland State University.
- Carter, C. B. dan Norton, M. G. 2013. Ceramic Materials: Science and Engineering. New York, Springer
- Chandler, D. 1986. Introduction to modern statistical. New York, Oxford University Press
- Chang, Y., Hsieh, J., Wang, C. dan Hong, L. 2002. A Differential Scanning Calorimetry (DSC) Study on The Pyrolysis Mechanism of Zinc Oxide CVD Precursor, Zinc Acetylacetonate. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, Vol. 744: 581-586.
- Crompton, T. R. (1993). Degree Of Crystallinity And Melting Temperature *Practical Polymer Analysis*. New York: Plenum Press.
- Cubillas, P. dan Anderson, M. W. 2010. Zeolites and Catalysis, Synthesis, Reactions and Applications. Germany, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim
- Dianat, A. dan Medrano, L. 2015. Computersimulation in der Materialwissenschaft. Germany, Institut für Werkstoffwissenschaft
- Dolez, P. I. 2015. Nanoengineering: Global Approaches To Health And Safety Issues. usa, elsivier
- Hu, M., Poulidakos, D., Grigoropoulos, C. P. dan Pan, H. 2010. Recrystallization of picosecond laser-melted ZnO nanoparticles in a liquid: A molecular dynamics study. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, 182, (1): 164504.
- Jayadevan, K. P. dan Tseng, T. Y. 2004. Oxide Nanoparticles. *Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*, Volume 8: 333-376.
- Kesälä, E., Kuronen, A. dan Nordlund, K. 2007. Molecular dynamics simulation of pressure dependence of cluster growth in inert gas condensation. *PHYSICAL REVIEW B*, 75: 174121.
- Morkoç, H. dan Özgür, Ü. 2008. **Zinc Oxide** Fundamentals, Materials and Device Technology. USA, Wiley-VCH
- Poole, C. P. dan Owens, F. J. 2003. Introductions To Nanotechnology. New Jersey, John Wiley & Sons, inc

- Ramahdita, G. 2011. Karakterisasi Nanopartikel ZnO Hasil Sintesis Dengan Metode Presipitasi Dan Perlakuan Pra-Hidrotermal. Depok, Teknik Metalurgi Dan Material, Universitas Indonesia.
- Ramsden, J. J. 2010. Nanotechnology An Introductions. Cranfield, Elsevier
- Savka, S. S., Popovych, D. I. dan Serendnytski, A. S. 2017. Molecular Dynamics Simulations of the Formation Processes of Zinc Oxide Nanoclusters in Oxygen Environment. Springer Proceedings in Physics, 195:
- Sholahuddin, I. 2014. Peningkatan Unjuk Kerja Nanogenerator ZnO Berbasis Serat Nano Melalui Penumbuhan Nanowire Pada Permukaan Serat. *Penelitian Dosen pemula*, Jember, Teknik Mesin, Universitas Jember.
- Sholihin, A. 2016. Sintesis Dan Karakterisasi Nanopartikel Seng Oksida Metode Direct Current Thermal Plasma. Jember, Jurusan Teknik Mesin, Universitas Jember.
- Suh, D. dan Yasuoka, K. 2014. Nanoscale Droplet Vaporisation By Molecular Dynamics. Proceedings Of The 3RD International Conference On Molecular Simulations:
- Winegard, W. C. 1961. Fundamental Of The Solidification Of Metals.

LAMPIRAN

Lampiran A. log *script* menggunakan dengan laju temperatur solidifikasi 10^{10}K/s

Step Temp PotEng Atoms Density

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 110000 | 8722.6594 | -8433.7995 | 5806 | 0.68958435 |
| 111000 | 8647.6024 | -8367.9691 | 5806 | 0.6725086 |
| 112000 | 8687.0226 | -8372.5341 | 5806 | 0.65556514 |
| 113000 | 8719.157 | -8357.6416 | 5806 | 0.63915828 |
| 114000 | 8728.4181 | -8319.3646 | 5806 | 0.62324595 |
| 115000 | 8852.555 | -8372.4221 | 5806 | 0.60780148 |
| 116000 | 8896.8645 | -8369.3209 | 5806 | 0.59282104 |
| 117000 | 8955.5178 | -8381.7243 | 5806 | 0.57830093 |
| 118000 | 8942.8999 | -8340.2194 | 5806 | 0.56420868 |
| 119000 | 8938.2317 | -8301.4363 | 5806 | 0.55053988 |
| 120000 | 9032.3947 | -8336.6449 | 5806 | 0.53700948 |
| 121000 | 8976.6331 | -8257.652 | 5806 | 0.52381338 |
| 122000 | 9078.2156 | -8294.6087 | 5806 | 0.51102127 |
| 123000 | 9077.6178 | -8258.3039 | 5806 | 0.49789005 |
| 124000 | 9124.9986 | -8260.9825 | 5806 | 0.48503218 |
| 125000 | 9141.8676 | -8237.535 | 5806 | 0.47258482 |
| 126000 | 9127.6171 | -8197.2135 | 5806 | 0.46029098 |
| 127000 | 9152.6099 | -8185.4524 | 5806 | 0.44823932 |
| 128000 | 9142.5104 | -8151.7973 | 5806 | 0.43658611 |
| 129000 | 9176.3207 | -8152.3439 | 5806 | 0.42532581 |
| 130000 | 9066.022 | -8049.7375 | 5806 | 0.41443167 |
| 131000 | 9128.3379 | -8078.7385 | 5806 | 0.40389676 |
| 132000 | 9210.2448 | -8126.0636 | 5806 | 0.39222936 |
| 133000 | 9198.6619 | -8106.7883 | 5806 | 0.38100747 |
| 134000 | 9261.691 | -8150.5947 | 5806 | 0.37023687 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 135000 | 9270.892 | -8161.4561 | 5806 | 0.35986862 |
| 136000 | 9181.4547 | -8102.9196 | 5806 | 0.34987539 |
| 137000 | 9104.1778 | -8062.4539 | 5806 | 0.34026488 |
| 138000 | 9038.6881 | -8037.9139 | 5806 | 0.33103395 |
| 139000 | 9051.8718 | -8077.8015 | 5806 | 0.32215348 |
| 140000 | 9010.1945 | -8083.0526 | 5806 | 0.31360683 |
| 141000 | 8914.3631 | -8046.5176 | 5806 | 0.30538246 |
| 142000 | 8760.4681 | -7968.1688 | 5806 | 0.29747516 |
| 143000 | 8747.4704 | -7996.4049 | 5806 | 0.28987025 |
| 144000 | 8683.048 | -7987.5873 | 5806 | 0.28255337 |
| 145000 | 8750.5987 | -8076.3472 | 5806 | 0.27550306 |
| 146000 | 8769.9376 | -8131.3959 | 5806 | 0.26870097 |
| 147000 | 8749.9044 | -8157.8899 | 5806 | 0.2621464 |
| 148000 | 8669.4783 | -8141.1021 | 5806 | 0.25581995 |
| 149000 | 8670.483 | -8186.0648 | 5806 | 0.24971337 |
| 150000 | 8612.2783 | -8188.6615 | 5806 | 0.24382661 |
| 151000 | 8652.9329 | -8265.2468 | 5806 | 0.23815359 |
| 152000 | 8655.0185 | -8314.8711 | 5806 | 0.2326794 |
| 153000 | 8563.8165 | -8294.5712 | 5806 | 0.22739255 |
| 154000 | 8537.5459 | -8323.8273 | 5806 | 0.22228458 |
| 155000 | 8416.3966 | -8282.2 | 5806 | 0.21734937 |
| 156000 | 8408.3991 | -8327.9881 | 5806 | 0.21257832 |
| 157000 | 8479.0112 | -8434.147 | 5806 | 0.20796912 |
| 158000 | 8436.0388 | -8454.8015 | 5806 | 0.20351574 |
| 159000 | 8343.7713 | -8440.1512 | 5806 | 0.19920446 |
| 160000 | 8335.4305 | -8489.3853 | 5806 | 0.19503124 |
| 161000 | 8300.1482 | -8521.0756 | 5806 | 0.19099163 |
| 162000 | 8306.6453 | -8584.0927 | 5806 | 0.18708261 |

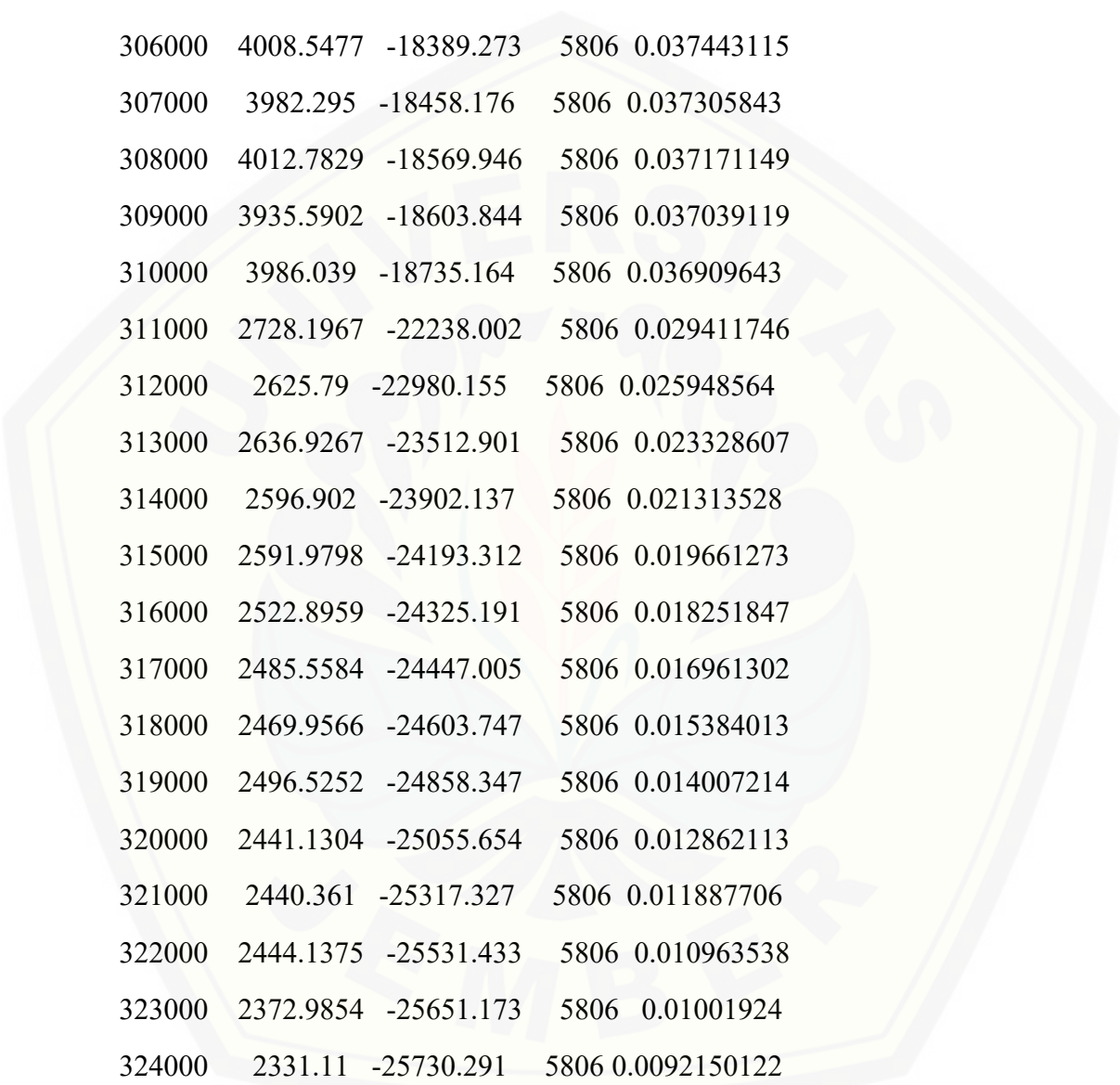
| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 163000 | 8261.658 | -8609.8596 | 5806 | 0.18329667 |
| 164000 | 8241.0753 | -8655.214 | 5806 | 0.17962873 |
| 165000 | 8186.6517 | -8672.8596 | 5806 | 0.17607705 |
| 166000 | 8153.4859 | -8708.0564 | 5806 | 0.17263848 |
| 167000 | 8146.8301 | -8764.6048 | 5806 | 0.16930328 |
| 168000 | 8059.6998 | -8764.1179 | 5806 | 0.16606605 |
| 169000 | 7999.7425 | -8784.4217 | 5806 | 0.1629247 |
| 170000 | 7981.2524 | -8833.6378 | 5806 | 0.15987762 |
| 171000 | 7921.85 | -8854.4983 | 5806 | 0.15692172 |
| 172000 | 7912.925 | -8913.1799 | 5806 | 0.15405674 |
| 173000 | 7861.7158 | -8936.9938 | 5806 | 0.15127757 |
| 174000 | 7820.6159 | -8973.0791 | 5806 | 0.14858131 |
| 175000 | 7817.8876 | -9039.4332 | 5806 | 0.1459609 |
| 176000 | 7790.4509 | -9086.5729 | 5806 | 0.14340982 |
| 177000 | 7671.3889 | -9065.9295 | 5806 | 0.14092474 |
| 178000 | 7608.2539 | -9087.6324 | 5806 | 0.13850825 |
| 179000 | 7620.5626 | -9167.2968 | 5806 | 0.13606982 |
| 180000 | 7598.3766 | -9220.7308 | 5806 | 0.1336619 |
| 181000 | 7552.2104 | -9259.5872 | 5806 | 0.13132395 |
| 182000 | 7555.0508 | -9336.725 | 5806 | 0.1290542 |
| 183000 | 7532.1486 | -9393.6356 | 5806 | 0.12685019 |
| 184000 | 7527.0477 | -9467.1541 | 5806 | 0.12439288 |
| 185000 | 7480.5252 | -9511.9142 | 5806 | 0.12197034 |
| 186000 | 7457.2032 | -9575.4185 | 5806 | 0.11962702 |
| 187000 | 7511.2933 | -9697.7648 | 5806 | 0.11735978 |
| 188000 | 7507.2007 | -9776.8571 | 5806 | 0.11516592 |
| 189000 | 7429.4126 | -9803.6746 | 5806 | 0.11304273 |
| 190000 | 7379.4827 | -9850.9703 | 5806 | 0.11098686 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 191000 | 7322.0636 | -9893.278 | 5806 | 0.10899558 |
| 192000 | 7340.4982 | -9994.0189 | 5806 | 0.10706709 |
| 193000 | 7316.7865 | -10065.041 | 5806 | 0.10519902 |
| 194000 | 7244.3584 | -10099.118 | 5806 | 0.10338889 |
| 195000 | 7217.5561 | -10166.119 | 5806 | 0.10163457 |
| 196000 | 7134.5997 | -10192.059 | 5806 | 0.099933985 |
| 197000 | 7082.9696 | -10243.78 | 5806 | 0.098284724 |
| 198000 | 7079.5275 | -10333.241 | 5806 | 0.096684981 |
| 199000 | 7008.0862 | -10373.178 | 5806 | 0.095132904 |
| 200000 | 7009.5707 | -10464.373 | 5806 | 0.09362668 |
| 201000 | 6960.2911 | -10519.454 | 5806 | 0.092164926 |
| 202000 | 6950.9881 | -10607.732 | 5806 | 0.090745904 |
| 203000 | 6932.9047 | -10690.938 | 5806 | 0.089368041 |
| 204000 | 6976.13 | -10820.421 | 5806 | 0.088030346 |
| 205000 | 6845.5157 | -10824.305 | 5806 | 0.086730992 |
| 206000 | 6870.6554 | -10942.193 | 5806 | 0.085469137 |
| 207000 | 6871.4362 | -11041.557 | 5806 | 0.084243529 |
| 208000 | 6814.3167 | -11101.19 | 5806 | 0.08305294 |
| 209000 | 6798.3811 | -11192.796 | 5806 | 0.081895772 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 211000 | 6844.8007 | -11357.927 | 5806 | 0.079672815 |
| 212000 | 6852.5001 | -11420.362 | 5806 | 0.078598399 |
| 213000 | 6883.1893 | -11510.318 | 5806 | 0.077549467 |
| 214000 | 6844.7505 | -11539.027 | 5806 | 0.076524899 |
| 215000 | 6837.7363 | -11596.726 | 5806 | 0.075524177 |
| 216000 | 6819.0755 | -11657.267 | 5806 | 0.074547703 |
| 217000 | 6771.0104 | -11698.269 | 5806 | 0.073595012 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 218000 | 6824.0771 | -11820.9 | 5806 | 0.072665587 |
| 219000 | 6767.2164 | -11864.471 | 5806 | 0.071759015 |
| 220000 | 6733.9468 | -11925.379 | 5806 | 0.070874909 |
| 221000 | 6631.5046 | -11936.019 | 5806 | 0.070012577 |
| 222000 | 6585.1802 | -11987.413 | 5806 | 0.069171442 |
| 223000 | 6497.9845 | -12008.168 | 5806 | 0.068350911 |
| 224000 | 6494.2158 | -12095.521 | 5806 | 0.06755044 |
| 225000 | 6482.9579 | -12178.529 | 5806 | 0.066769281 |
| 226000 | 6442.8196 | -12243.45 | 5806 | 0.066007162 |
| 227000 | 6449.2307 | -12345.561 | 5806 | 0.065263577 |
| 228000 | 6406.5359 | -12410.556 | 5806 | 0.064538294 |
| 229000 | 6398.7427 | -12504.448 | 5806 | 0.063831044 |
| 230000 | 6334.3058 | -12556.762 | 5806 | 0.063140905 |
| 231000 | 6289.7213 | -12622.396 | 5806 | 0.062467065 |
| 232000 | 6265.4279 | -12700.564 | 5806 | 0.061809275 |
| 233000 | 6238.3692 | -12780.293 | 5806 | 0.061167278 |
| 234000 | 6236.7015 | -12878.898 | 5806 | 0.060540836 |
| 235000 | 6205.8154 | -12958.054 | 5806 | 0.059926891 |
| 236000 | 6224.8035 | -13074.408 | 5806 | 0.059297805 |
| 237000 | 6194.0204 | -13153.619 | 5806 | 0.058684063 |
| 238000 | 6167.4847 | -13239.446 | 5806 | 0.058085232 |
| 239000 | 6076.7091 | -13275.246 | 5806 | 0.057501046 |
| 240000 | 6106.6345 | -13402.022 | 5806 | 0.056931026 |
| 241000 | 6011.3346 | -13433.415 | 5806 | 0.056374726 |
| 242000 | 5932.1839 | -13475.014 | 5806 | 0.055831595 |
| 243000 | 5836.3577 | -13502.329 | 5806 | 0.05530123 |
| 244000 | 5796.2783 | -13573.899 | 5806 | 0.054783084 |
| 245000 | 5776.771 | -13658.812 | 5806 | 0.054277105 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 246000 | 5761.397 | -13748.292 | 5806 | 0.053782733 |
| 247000 | 5780.4803 | -13861.269 | 5806 | 0.053299749 |
| 248000 | 5717.8758 | -13917.374 | 5806 | 0.052827923 |
| 249000 | 5741.2157 | -14038.546 | 5806 | 0.052366924 |
| 250000 | 5747.7773 | -14148.035 | 5806 | 0.051916278 |
| 251000 | 5687.3761 | -14204.773 | 5806 | 0.051475897 |
| 252000 | 5611.3822 | -14247.6 | 5806 | 0.051045452 |
| 253000 | 5569.8053 | -14318.887 | 5806 | 0.050624898 |
| 254000 | 5568.3826 | -14420.884 | 5806 | 0.050213746 |
| 255000 | 5535.0305 | -14500.777 | 5806 | 0.049811704 |
| 256000 | 5491.2032 | -14571.884 | 5806 | 0.049418656 |
| 257000 | 5461.7873 | -14653.292 | 5806 | 0.049034314 |
| 258000 | 5481.0974 | -14772.02 | 5806 | 0.048658424 |
| 259000 | 5543.31 | -14925.525 | 5806 | 0.048290863 |
| 260000 | 5489.1144 | -14989.496 | 5806 | 0.047931463 |
| 261000 | 5432.063 | -15049.853 | 5806 | 0.047579875 |
| 262000 | 5302.301 | -15052.932 | 5806 | 0.047235967 |
| 263000 | 5242.3631 | -15108.245 | 5806 | 0.046899571 |
| 264000 | 5229.5748 | -15198.565 | 5806 | 0.046570205 |
| 265000 | 5223.9899 | -15295.113 | 5806 | 0.046247782 |
| 266000 | 5199.2318 | -15381.883 | 5806 | 0.045932338 |
| 267000 | 5166.1026 | -15459.639 | 5806 | 0.045623488 |
| 268000 | 5247.0458 | -15622.069 | 5806 | 0.045321245 |
| 269000 | 5163.4155 | -15662.678 | 5806 | 0.045025602 |
| 270000 | 5164.3796 | -15765.933 | 5806 | 0.044736226 |
| 271000 | 5092.9962 | -15812.352 | 5806 | 0.044452862 |
| 272000 | 5102.0924 | -15923.526 | 5806 | 0.044175541 |
| 273000 | 5004.2688 | -15950.585 | 5806 | 0.043904029 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 274000 | 4881.8914 | -15954.082 | 5806 | 0.04363805 |
| 275000 | 4944.5919 | -16098.698 | 5806 | 0.043377596 |
| 276000 | 4929.6853 | -16188.563 | 5806 | 0.043122431 |
| 277000 | 4895.0536 | -16261.351 | 5806 | 0.042872505 |
| 278000 | 4890.9132 | -16361.422 | 5806 | 0.042627754 |
| 279000 | 4875.6591 | -16453.334 | 5806 | 0.042387911 |
| 280000 | 4838.9659 | -16527.104 | 5806 | 0.042152968 |
| 281000 | 4768.4601 | -16572.431 | 5806 | 0.041922855 |
| 282000 | 4697.5946 | -16616.754 | 5806 | 0.04169736 |
| 283000 | 4720.4655 | -16732.64 | 5806 | 0.041476451 |
| 284000 | 4655.3689 | -16778.596 | 5806 | 0.041259961 |
| 285000 | 4658.4766 | -16877.379 | 5806 | 0.041047897 |
| 286000 | 4615.6416 | -16940.836 | 5806 | 0.040840082 |
| 287000 | 4519.3039 | -16963.66 | 5806 | 0.040636308 |
| 288000 | 4561.8472 | -17091.977 | 5806 | 0.040436497 |
| 289000 | 4454.9412 | -17107.073 | 5806 | 0.040240635 |
| 290000 | 4456.2599 | -17201.32 | 5806 | 0.040048757 |
| 291000 | 4523.9649 | -17347.174 | 5806 | 0.03986071 |
| 292000 | 4392.0276 | -17344.674 | 5806 | 0.039676315 |
| 293000 | 4452.8532 | -17488.695 | 5806 | 0.039495563 |
| 294000 | 4388.7521 | -17537.758 | 5806 | 0.039318328 |
| 295000 | 4426.6132 | -17666.037 | 5806 | 0.039144634 |
| 296000 | 4330.5603 | -17690.936 | 5806 | 0.038974373 |
| 297000 | 4313.4712 | -17773.617 | 5806 | 0.038807354 |
| 298000 | 4294.5395 | -17852.438 | 5806 | 0.038643558 |
| 299000 | 4245.063 | -17908.157 | 5806 | 0.03848299 |
| 300000 | 4197.9202 | -17964.371 | 5806 | 0.038325574 |
| 301000 | 4175.2944 | -18041.474 | 5806 | 0.038171228 |



| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|--------------|
| 302000 | 4241.1531 | -18189.45 | 5806 | 0.038019837 |
| 303000 | 4195.5388 | -18250.426 | 5806 | 0.037871322 |
| 304000 | 4168.8476 | -18324.777 | 5806 | 0.037725782 |
| 305000 | 4128.5022 | -18386.814 | 5806 | 0.037583103 |
| 306000 | 4008.5477 | -18389.273 | 5806 | 0.037443115 |
| 307000 | 3982.295 | -18458.176 | 5806 | 0.037305843 |
| 308000 | 4012.7829 | -18569.946 | 5806 | 0.037171149 |
| 309000 | 3935.5902 | -18603.844 | 5806 | 0.037039119 |
| 310000 | 3986.039 | -18735.164 | 5806 | 0.036909643 |
| 311000 | 2728.1967 | -22238.002 | 5806 | 0.029411746 |
| 312000 | 2625.79 | -22980.155 | 5806 | 0.025948564 |
| 313000 | 2636.9267 | -23512.901 | 5806 | 0.023328607 |
| 314000 | 2596.902 | -23902.137 | 5806 | 0.021313528 |
| 315000 | 2591.9798 | -24193.312 | 5806 | 0.019661273 |
| 316000 | 2522.8959 | -24325.191 | 5806 | 0.018251847 |
| 317000 | 2485.5584 | -24447.005 | 5806 | 0.016961302 |
| 318000 | 2469.9566 | -24603.747 | 5806 | 0.015384013 |
| 319000 | 2496.5252 | -24858.347 | 5806 | 0.014007214 |
| 320000 | 2441.1304 | -25055.654 | 5806 | 0.012862113 |
| 321000 | 2440.361 | -25317.327 | 5806 | 0.011887706 |
| 322000 | 2444.1375 | -25531.433 | 5806 | 0.010963538 |
| 323000 | 2372.9854 | -25651.173 | 5806 | 0.01001924 |
| 324000 | 2331.11 | -25730.291 | 5806 | 0.0092150122 |
| 325000 | 2340.8448 | -25771.713 | 5806 | 0.0085165698 |
| 326000 | 2323.5915 | -25719.681 | 5806 | 0.0078947009 |
| 327000 | 2286.5235 | -25881.98 | 5806 | 0.0073487807 |
| 328000 | 2278.8095 | -25926.455 | 5806 | 0.006760934 |
| 329000 | 2274.7411 | -25912.043 | 5806 | 0.0062137518 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|--------------|
| 330000 | 2253.9432 | -25980.445 | 5806 | 0.0057349526 |
| 331000 | 2204.2853 | -26049.308 | 5806 | 0.0053098171 |
| 332000 | 2166.3224 | -26024.002 | 5806 | 0.0049318937 |
| 333000 | 2127.8027 | -26118.245 | 5806 | 0.0045968359 |
| 334000 | 2062.1145 | -26141.872 | 5806 | 0.0042951683 |
| 335000 | 2071.5095 | -26172.032 | 5806 | 0.0040243613 |
| 336000 | 2086.5387 | -26226.699 | 5806 | 0.003777583 |
| 337000 | 2094.7009 | -26298.513 | 5806 | 0.0035537285 |
| 338000 | 2042.2034 | -26305.63 | 5806 | 0.0033496771 |
| 339000 | 1989.1905 | -26326.353 | 5806 | 0.0031551672 |
| 340000 | 1983.4844 | -26376.13 | 5806 | 0.0029633418 |
| 341000 | 1963.5293 | -26386.612 | 5806 | 0.0027889109 |
| 342000 | 1932.8497 | -26411.678 | 5806 | 0.0026307545 |
| 343000 | 1919.8571 | -26402.203 | 5806 | 0.0024851342 |
| 344000 | 1869.9619 | -26466.118 | 5806 | 0.002352109 |
| 345000 | 1831.6146 | -26473.027 | 5806 | 0.0022298675 |
| 346000 | 1842.2937 | -26525.003 | 5806 | 0.0021180978 |
| 347000 | 1818.2097 | -26549.139 | 5806 | 0.002014537 |
| 348000 | 1796.2683 | -26574.712 | 5806 | 0.0019190572 |
| 349000 | 1714.6446 | -26583.386 | 5806 | 0.001816791 |
| 350000 | 1737.9884 | -26626.987 | 5806 | 0.0017101371 |
| 351000 | 1718.235 | -26663.639 | 5806 | 0.0016132865 |
| 352000 | 1703.4311 | -26700.307 | 5806 | 0.001525383 |
| 353000 | 1675.0448 | -26722.815 | 5806 | 0.0014443737 |
| 354000 | 1601.509 | -26709.756 | 5806 | 0.0013701521 |
| 355000 | 1622.8007 | -26716.567 | 5806 | 0.0013020381 |
| 356000 | 1597.6629 | -26796.881 | 5806 | 0.0012394408 |
| 357000 | 1570.5984 | -26772.232 | 5806 | 0.0011815645 |

| | | | |
|--------|-----------|------------|--------------------|
| 358000 | 1531.0352 | -26827.055 | 5806 0.0011282445 |
| 359000 | 1560.5709 | -26844.38 | 5806 0.0010787881 |
| 360000 | 1477.7015 | -26840.785 | 5806 0.0010331034 |
| 361000 | 1491.7309 | -26897.181 | 5806 0.0009906489 |
| 362000 | 1440.4184 | -26927.234 | 5806 0.00095105067 |
| 363000 | 1450.9248 | -26975.413 | 5806 0.00091420077 |
| 364000 | 1416.1408 | -26975.864 | 5806 0.00088005427 |
| 365000 | 1370.3267 | -27008.29 | 5806 0.00084825082 |
| 366000 | 1330.9497 | -27045.877 | 5806 0.0008186312 |
| 367000 | 1292.5349 | -27074.644 | 5806 0.00079079997 |
| 368000 | 1331.7716 | -27079.313 | 5806 0.00076464611 |
| 369000 | 1250.1464 | -27111.362 | 5806 0.00074004928 |
| 370000 | 1236.2872 | -27146.094 | 5806 0.00071690665 |
| 371000 | 1232.8427 | -27143.69 | 5806 0.00069518899 |
| 372000 | 1186.2372 | -27195.735 | 5806 0.00067473771 |
| 373000 | 1173.6708 | -27231.334 | 5806 0.0006554953 |
| 374000 | 1155.2516 | -27250.008 | 5806 0.00063735186 |
| 375000 | 1098.7635 | -27232.576 | 5806 0.00062013736 |
| 376000 | 1094.0426 | -27280.253 | 5806 0.00060402356 |
| 377000 | 1063.8432 | -27304.558 | 5806 0.00058866634 |
| 378000 | 1046.1495 | -27328.663 | 5806 0.00057419631 |
| 379000 | 1017.1794 | -27351.307 | 5806 0.00056048446 |
| 380000 | 1000.4156 | -27372.04 | 5806 0.00054753266 |
| 381000 | 972.39163 | -27395.459 | 5806 0.00053520641 |
| 382000 | 941.53656 | -27419.574 | 5806 0.00052360013 |
| 383000 | 941.22767 | -27447.002 | 5806 0.00051261765 |
| 384000 | 904.50988 | -27453.63 | 5806 0.00050219268 |
| 385000 | 870.56246 | -27486.762 | 5806 0.00049228316 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|---------------|
| 386000 | 850.57573 | -27533.106 | 5806 | 0.00048288434 |
| 387000 | 821.95804 | -27554.212 | 5806 | 0.00047310856 |
| 388000 | 813.32765 | -27565.5 | 5806 | 0.00046303965 |
| 389000 | 782.57593 | -27587.325 | 5806 | 0.00045246152 |
| 390000 | 755.03828 | -27601.326 | 5806 | 0.00044144769 |
| 391000 | 729.90645 | -27621.775 | 5806 | 0.00043110037 |
| 392000 | 706.81405 | -27651.724 | 5806 | 0.00042142842 |
| 393000 | 684.37294 | -27674.378 | 5806 | 0.00041229895 |
| 394000 | 651.79701 | -27694.328 | 5806 | 0.0004037084 |
| 395000 | 632.40568 | -27713.758 | 5806 | 0.00039563501 |
| 396000 | 605.88989 | -27733.324 | 5806 | 0.00038806878 |
| 397000 | 582.14959 | -27754.333 | 5806 | 0.00038097054 |
| 398000 | 569.69056 | -27783.016 | 5806 | 0.00037397469 |
| 399000 | 540.49946 | -27802.557 | 5806 | 0.00036514413 |
| 400000 | 517.73622 | -27826.342 | 5806 | 0.00035700171 |
| 401000 | 499.32966 | -27850.703 | 5806 | 0.00034948593 |
| 402000 | 472.48471 | -27860.592 | 5806 | 0.00034250574 |
| 403000 | 453.49141 | -27889.521 | 5806 | 0.00033601927 |
| 404000 | 414.82012 | -27901.196 | 5806 | 0.00033004916 |
| 405000 | 389.96394 | -27926.364 | 5806 | 0.00032453644 |
| 406000 | 371.467 | -27949.745 | 5806 | 0.0003194485 |
| 407000 | 349.45095 | -27971.18 | 5806 | 0.00031477098 |
| 408000 | 326.1355 | -27990.998 | 5806 | 0.0003104787 |
| 409000 | 297.41148 | -28008.661 | 5806 | 0.00030655807 |
| 410000 | 272.46169 | -28026.606 | 5806 | 0.00030299661 |

Loop time of 890.367 on 4 procs for 100000 steps with 5806 atoms

Performance: 9.704 ns/day, 2.473 hours/ns, 112.313 timesteps/s

88.7% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```
-----
Pair | 343.48 | 343.48 | 343.48 | 0.0 | 38.58
Neigh | 430.7 | 430.7 | 430.7 | 0.0 | 48.37
Comm | 15.805 | 15.805 | 15.805 | 0.0 | 1.78
Output | 68.821 | 68.821 | 68.821 | 0.0 | 7.73
Modify | 29.471 | 29.471 | 29.471 | 0.0 | 3.31
Other | | 2.091 | | | 0.23
```

Nlocal: 5806 ave 5806 max 5806 min

Histogram: 1 0 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 0

Neighs: 444596 ave 444596 max 444596 min

Histogram: 1 0 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 0

Total # of neighbors = 444596

Ave neighs/atom = 76.5753

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

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

Lampiran B. log *script* menggunakan laju temperatur Solidifikasi 10^{11} K/s

Step Temp PotEng Atoms Density

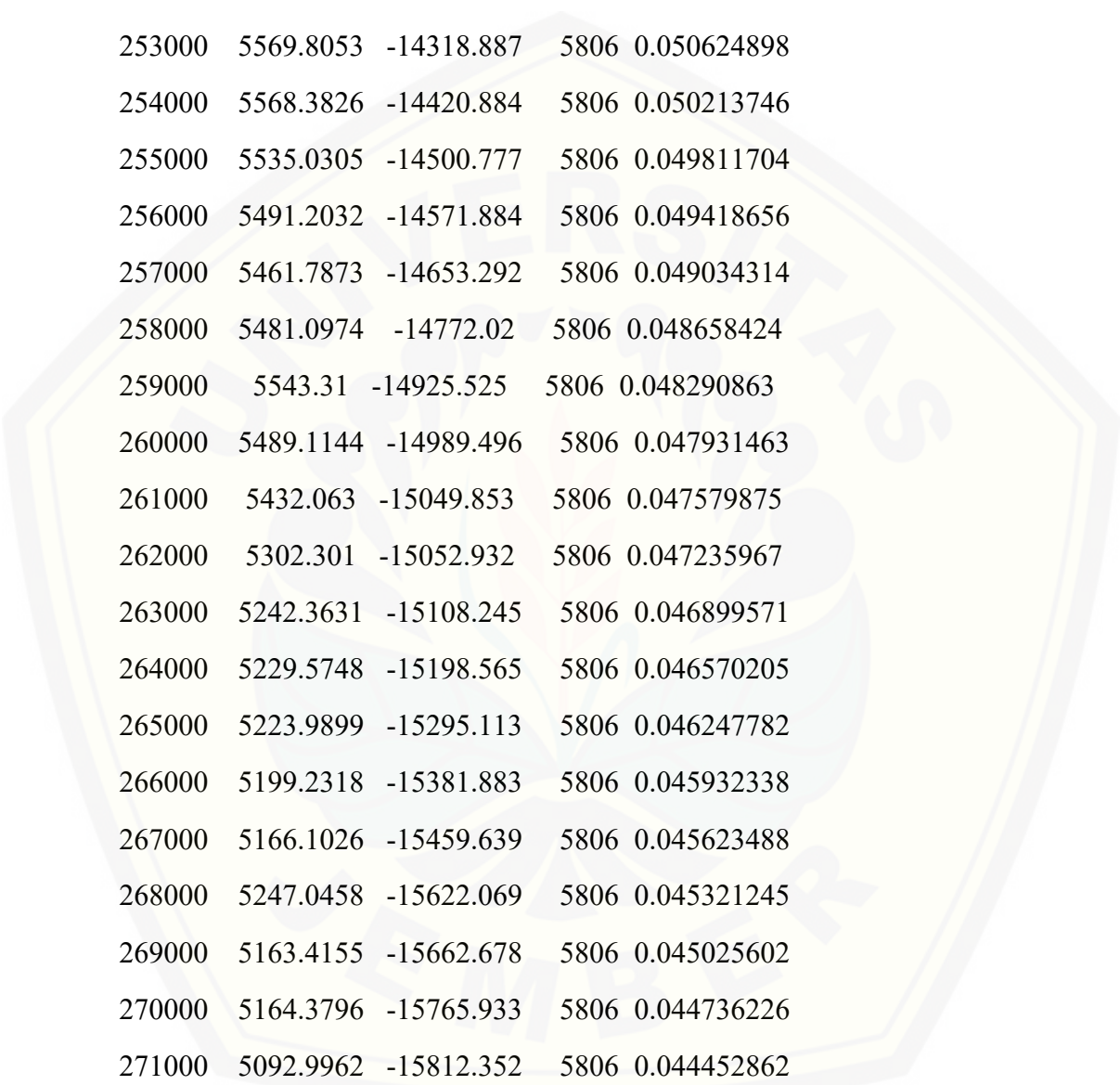
| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 110000 | 8722.6594 | -8433.7995 | 5806 | 0.68958435 |
| 111000 | 8647.6024 | -8367.9691 | 5806 | 0.6725086 |
| 112000 | 8687.0226 | -8372.5341 | 5806 | 0.65556514 |
| 113000 | 8719.157 | -8357.6416 | 5806 | 0.63915828 |
| 114000 | 8728.4181 | -8319.3646 | 5806 | 0.62324595 |
| 115000 | 8852.555 | -8372.4221 | 5806 | 0.60780148 |
| 116000 | 8896.8645 | -8369.3209 | 5806 | 0.59282104 |
| 117000 | 8955.5178 | -8381.7243 | 5806 | 0.57830093 |
| 118000 | 8942.8999 | -8340.2194 | 5806 | 0.56420868 |
| 119000 | 8938.2317 | -8301.4363 | 5806 | 0.55053988 |
| 120000 | 9032.3947 | -8336.6449 | 5806 | 0.53700948 |
| 121000 | 8976.6331 | -8257.652 | 5806 | 0.52381338 |
| 122000 | 9078.2156 | -8294.6087 | 5806 | 0.51102127 |
| 123000 | 9077.6178 | -8258.3039 | 5806 | 0.49789005 |
| 124000 | 9124.9986 | -8260.9825 | 5806 | 0.48503218 |
| 125000 | 9141.8676 | -8237.535 | 5806 | 0.47258482 |
| 126000 | 9127.6171 | -8197.2135 | 5806 | 0.46029098 |
| 127000 | 9152.6099 | -8185.4524 | 5806 | 0.44823932 |
| 128000 | 9142.5104 | -8151.7973 | 5806 | 0.43658611 |
| 129000 | 9176.3207 | -8152.3439 | 5806 | 0.42532581 |
| 130000 | 9066.022 | -8049.7375 | 5806 | 0.41443167 |
| 131000 | 9128.3379 | -8078.7385 | 5806 | 0.40389676 |
| 132000 | 9210.2448 | -8126.0636 | 5806 | 0.39222936 |
| 133000 | 9198.6619 | -8106.7883 | 5806 | 0.38100747 |
| 134000 | 9261.691 | -8150.5947 | 5806 | 0.37023687 |
| 135000 | 9270.892 | -8161.4561 | 5806 | 0.35986862 |
| 136000 | 9181.4547 | -8102.9196 | 5806 | 0.34987539 |
| 137000 | 9104.1778 | -8062.4539 | 5806 | 0.34026488 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 138000 | 9038.6881 | -8037.9139 | 5806 | 0.33103395 |
| 139000 | 9051.8718 | -8077.8015 | 5806 | 0.32215348 |
| 140000 | 9010.1945 | -8083.0526 | 5806 | 0.31360683 |
| 141000 | 8914.3631 | -8046.5176 | 5806 | 0.30538246 |
| 142000 | 8760.4681 | -7968.1688 | 5806 | 0.29747516 |
| 143000 | 8747.4704 | -7996.4049 | 5806 | 0.28987025 |
| 144000 | 8683.048 | -7987.5873 | 5806 | 0.28255337 |
| 145000 | 8750.5987 | -8076.3472 | 5806 | 0.27550306 |
| 146000 | 8769.9376 | -8131.3959 | 5806 | 0.26870097 |
| 147000 | 8749.9044 | -8157.8899 | 5806 | 0.2621464 |
| 148000 | 8669.4783 | -8141.1021 | 5806 | 0.25581995 |
| 149000 | 8670.483 | -8186.0648 | 5806 | 0.24971337 |
| 150000 | 8612.2783 | -8188.6615 | 5806 | 0.24382661 |
| 151000 | 8652.9329 | -8265.2468 | 5806 | 0.23815359 |
| 152000 | 8655.0185 | -8314.8711 | 5806 | 0.2326794 |
| 153000 | 8563.8165 | -8294.5712 | 5806 | 0.22739255 |
| 154000 | 8537.5459 | -8323.8273 | 5806 | 0.22228458 |
| 155000 | 8416.3966 | -8282.2 | 5806 | 0.21734937 |
| 156000 | 8408.3991 | -8327.9881 | 5806 | 0.21257832 |
| 157000 | 8479.0112 | -8434.147 | 5806 | 0.20796912 |
| 158000 | 8436.0388 | -8454.8015 | 5806 | 0.20351574 |
| 159000 | 8343.7713 | -8440.1512 | 5806 | 0.19920446 |
| 160000 | 8335.4305 | -8489.3853 | 5806 | 0.19503124 |
| 161000 | 8300.1482 | -8521.0756 | 5806 | 0.19099163 |
| 162000 | 8306.6453 | -8584.0927 | 5806 | 0.18708261 |
| 163000 | 8261.658 | -8609.8596 | 5806 | 0.18329667 |
| 164000 | 8241.0753 | -8655.214 | 5806 | 0.17962873 |
| 165000 | 8186.6517 | -8672.8596 | 5806 | 0.17607705 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 166000 | 8153.4859 | -8708.0564 | 5806 | 0.17263848 |
| 167000 | 8146.8301 | -8764.6048 | 5806 | 0.16930328 |
| 168000 | 8059.6998 | -8764.1179 | 5806 | 0.16606605 |
| 169000 | 7999.7425 | -8784.4217 | 5806 | 0.1629247 |
| 170000 | 7981.2524 | -8833.6378 | 5806 | 0.15987762 |
| 171000 | 7921.85 | -8854.4983 | 5806 | 0.15692172 |
| 172000 | 7912.925 | -8913.1799 | 5806 | 0.15405674 |
| 173000 | 7861.7158 | -8936.9938 | 5806 | 0.15127757 |
| 174000 | 7820.6159 | -8973.0791 | 5806 | 0.14858131 |
| 175000 | 7817.8876 | -9039.4332 | 5806 | 0.1459609 |
| 176000 | 7790.4509 | -9086.5729 | 5806 | 0.14340982 |
| 177000 | 7671.3889 | -9065.9295 | 5806 | 0.14092474 |
| 178000 | 7608.2539 | -9087.6324 | 5806 | 0.13850825 |
| 179000 | 7620.5626 | -9167.2968 | 5806 | 0.13606982 |
| 180000 | 7598.3766 | -9220.7308 | 5806 | 0.1336619 |
| 181000 | 7552.2104 | -9259.5872 | 5806 | 0.13132395 |
| 182000 | 7555.0508 | -9336.725 | 5806 | 0.1290542 |
| 183000 | 7532.1486 | -9393.6356 | 5806 | 0.12685019 |
| 184000 | 7527.0477 | -9467.1541 | 5806 | 0.12439288 |
| 185000 | 7480.5252 | -9511.9142 | 5806 | 0.12197034 |
| 186000 | 7457.2032 | -9575.4185 | 5806 | 0.11962702 |
| 187000 | 7511.2933 | -9697.7648 | 5806 | 0.11735978 |
| 188000 | 7507.2007 | -9776.8571 | 5806 | 0.11516592 |
| 189000 | 7429.4126 | -9803.6746 | 5806 | 0.11304273 |
| 190000 | 7379.4827 | -9850.9703 | 5806 | 0.11098686 |
| 191000 | 7322.0636 | -9893.278 | 5806 | 0.10899558 |
| 192000 | 7340.4982 | -9994.0189 | 5806 | 0.10706709 |
| 193000 | 7316.7865 | -10065.041 | 5806 | 0.10519902 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 194000 | 7244.3584 | -10099.118 | 5806 | 0.10338889 |
| 195000 | 7217.5561 | -10166.119 | 5806 | 0.10163457 |
| 196000 | 7134.5997 | -10192.059 | 5806 | 0.099933985 |
| 197000 | 7082.9696 | -10243.78 | 5806 | 0.098284724 |
| 198000 | 7079.5275 | -10333.241 | 5806 | 0.096684981 |
| 199000 | 7008.0862 | -10373.178 | 5806 | 0.095132904 |
| 200000 | 7009.5707 | -10464.373 | 5806 | 0.09362668 |
| 201000 | 6960.2911 | -10519.454 | 5806 | 0.092164926 |
| 202000 | 6950.9881 | -10607.732 | 5806 | 0.090745904 |
| 203000 | 6932.9047 | -10690.938 | 5806 | 0.089368041 |
| 204000 | 6976.13 | -10820.421 | 5806 | 0.088030346 |
| 205000 | 6845.5157 | -10824.305 | 5806 | 0.086730992 |
| 206000 | 6870.6554 | -10942.193 | 5806 | 0.085469137 |
| 207000 | 6871.4362 | -11041.557 | 5806 | 0.084243529 |
| 208000 | 6814.3167 | -11101.19 | 5806 | 0.08305294 |
| 209000 | 6798.3811 | -11192.796 | 5806 | 0.081895772 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 211000 | 6844.8007 | -11357.927 | 5806 | 0.079672815 |
| 212000 | 6852.5001 | -11420.362 | 5806 | 0.078598399 |
| 213000 | 6883.1893 | -11510.318 | 5806 | 0.077549467 |
| 214000 | 6844.7505 | -11539.027 | 5806 | 0.076524899 |
| 215000 | 6837.7363 | -11596.726 | 5806 | 0.075524177 |
| 216000 | 6819.0755 | -11657.267 | 5806 | 0.074547703 |
| 217000 | 6771.0104 | -11698.269 | 5806 | 0.073595012 |
| 218000 | 6824.0771 | -11820.9 | 5806 | 0.072665587 |
| 219000 | 6767.2164 | -11864.471 | 5806 | 0.071759015 |
| 220000 | 6733.9468 | -11925.379 | 5806 | 0.070874909 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 221000 | 6631.5046 | -11936.019 | 5806 | 0.070012577 |
| 222000 | 6585.1802 | -11987.413 | 5806 | 0.069171442 |
| 223000 | 6497.9845 | -12008.168 | 5806 | 0.068350911 |
| 224000 | 6494.2158 | -12095.521 | 5806 | 0.06755044 |
| 225000 | 6482.9579 | -12178.529 | 5806 | 0.066769281 |
| 226000 | 6442.8196 | -12243.45 | 5806 | 0.066007162 |
| 227000 | 6449.2307 | -12345.561 | 5806 | 0.065263577 |
| 228000 | 6406.5359 | -12410.556 | 5806 | 0.064538294 |
| 229000 | 6398.7427 | -12504.448 | 5806 | 0.063831044 |
| 230000 | 6334.3058 | -12556.762 | 5806 | 0.063140905 |
| 231000 | 6289.7213 | -12622.396 | 5806 | 0.062467065 |
| 232000 | 6265.4279 | -12700.564 | 5806 | 0.061809275 |
| 233000 | 6238.3692 | -12780.293 | 5806 | 0.061167278 |
| 234000 | 6236.7015 | -12878.898 | 5806 | 0.060540836 |
| 235000 | 6205.8154 | -12958.054 | 5806 | 0.059926891 |
| 236000 | 6224.8035 | -13074.408 | 5806 | 0.059297805 |
| 237000 | 6194.0204 | -13153.619 | 5806 | 0.058684063 |
| 238000 | 6167.4847 | -13239.446 | 5806 | 0.058085232 |
| 239000 | 6076.7091 | -13275.246 | 5806 | 0.057501046 |
| 240000 | 6106.6345 | -13402.022 | 5806 | 0.056931026 |
| 241000 | 6011.3346 | -13433.415 | 5806 | 0.056374726 |
| 242000 | 5932.1839 | -13475.014 | 5806 | 0.055831595 |
| 243000 | 5836.3577 | -13502.329 | 5806 | 0.05530123 |
| 244000 | 5796.2783 | -13573.899 | 5806 | 0.054783084 |
| 245000 | 5776.771 | -13658.812 | 5806 | 0.054277105 |
| 246000 | 5761.397 | -13748.292 | 5806 | 0.053782733 |
| 247000 | 5780.4803 | -13861.269 | 5806 | 0.053299749 |
| 248000 | 5717.8758 | -13917.374 | 5806 | 0.052827923 |



| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 249000 | 5741.2157 | -14038.546 | 5806 | 0.052366924 |
| 250000 | 5747.7773 | -14148.035 | 5806 | 0.051916278 |
| 251000 | 5687.3761 | -14204.773 | 5806 | 0.051475897 |
| 252000 | 5611.3822 | -14247.6 | 5806 | 0.051045452 |
| 253000 | 5569.8053 | -14318.887 | 5806 | 0.050624898 |
| 254000 | 5568.3826 | -14420.884 | 5806 | 0.050213746 |
| 255000 | 5535.0305 | -14500.777 | 5806 | 0.049811704 |
| 256000 | 5491.2032 | -14571.884 | 5806 | 0.049418656 |
| 257000 | 5461.7873 | -14653.292 | 5806 | 0.049034314 |
| 258000 | 5481.0974 | -14772.02 | 5806 | 0.048658424 |
| 259000 | 5543.31 | -14925.525 | 5806 | 0.048290863 |
| 260000 | 5489.1144 | -14989.496 | 5806 | 0.047931463 |
| 261000 | 5432.063 | -15049.853 | 5806 | 0.047579875 |
| 262000 | 5302.301 | -15052.932 | 5806 | 0.047235967 |
| 263000 | 5242.3631 | -15108.245 | 5806 | 0.046899571 |
| 264000 | 5229.5748 | -15198.565 | 5806 | 0.046570205 |
| 265000 | 5223.9899 | -15295.113 | 5806 | 0.046247782 |
| 266000 | 5199.2318 | -15381.883 | 5806 | 0.045932338 |
| 267000 | 5166.1026 | -15459.639 | 5806 | 0.045623488 |
| 268000 | 5247.0458 | -15622.069 | 5806 | 0.045321245 |
| 269000 | 5163.4155 | -15662.678 | 5806 | 0.045025602 |
| 270000 | 5164.3796 | -15765.933 | 5806 | 0.044736226 |
| 271000 | 5092.9962 | -15812.352 | 5806 | 0.044452862 |
| 272000 | 5102.0924 | -15923.526 | 5806 | 0.044175541 |
| 273000 | 5004.2688 | -15950.585 | 5806 | 0.043904029 |
| 274000 | 4881.8914 | -15954.082 | 5806 | 0.04363805 |
| 275000 | 4944.5919 | -16098.698 | 5806 | 0.043377596 |
| 276000 | 4929.6853 | -16188.563 | 5806 | 0.043122431 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 277000 | 4895.0536 | -16261.351 | 5806 | 0.042872505 |
| 278000 | 4890.9132 | -16361.422 | 5806 | 0.042627754 |
| 279000 | 4875.6591 | -16453.334 | 5806 | 0.042387911 |
| 280000 | 4838.9659 | -16527.104 | 5806 | 0.042152968 |
| 281000 | 4768.4601 | -16572.431 | 5806 | 0.041922855 |
| 282000 | 4697.5946 | -16616.754 | 5806 | 0.04169736 |
| 283000 | 4720.4655 | -16732.64 | 5806 | 0.041476451 |
| 284000 | 4655.3689 | -16778.596 | 5806 | 0.041259961 |
| 285000 | 4658.4766 | -16877.379 | 5806 | 0.041047897 |
| 286000 | 4615.6416 | -16940.836 | 5806 | 0.040840082 |
| 287000 | 4519.3039 | -16963.66 | 5806 | 0.040636308 |
| 288000 | 4561.8472 | -17091.977 | 5806 | 0.040436497 |
| 289000 | 4454.9412 | -17107.073 | 5806 | 0.040240635 |
| 290000 | 4456.2599 | -17201.32 | 5806 | 0.040048757 |
| 291000 | 4523.9649 | -17347.174 | 5806 | 0.03986071 |
| 292000 | 4392.0276 | -17344.674 | 5806 | 0.039676315 |
| 293000 | 4452.8532 | -17488.695 | 5806 | 0.039495563 |
| 294000 | 4388.7521 | -17537.758 | 5806 | 0.039318328 |
| 295000 | 4426.6132 | -17666.037 | 5806 | 0.039144634 |
| 296000 | 4330.5603 | -17690.936 | 5806 | 0.038974373 |
| 297000 | 4313.4712 | -17773.617 | 5806 | 0.038807354 |
| 298000 | 4294.5395 | -17852.438 | 5806 | 0.038643558 |
| 299000 | 4245.063 | -17908.157 | 5806 | 0.03848299 |
| 300000 | 4197.9202 | -17964.371 | 5806 | 0.038325574 |
| 301000 | 4175.2944 | -18041.474 | 5806 | 0.038171228 |
| 302000 | 4241.1531 | -18189.45 | 5806 | 0.038019837 |
| 303000 | 4195.5388 | -18250.426 | 5806 | 0.037871322 |
| 304000 | 4168.8476 | -18324.777 | 5806 | 0.037725782 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 305000 | 4128.5022 | -18386.814 | 5806 | 0.037583103 |
| 306000 | 4008.5477 | -18389.273 | 5806 | 0.037443115 |
| 307000 | 3982.295 | -18458.176 | 5806 | 0.037305843 |
| 308000 | 4012.7829 | -18569.946 | 5806 | 0.037171149 |
| 309000 | 3935.5902 | -18603.844 | 5806 | 0.037039119 |
| 310000 | 3986.039 | -18735.164 | 5806 | 0.036909643 |
| 310000 | 3986.039 | -18735.164 | 5806 | 0.036909643 |
| 311000 | 3874.5278 | -19096.671 | 5806 | 0.035692509 |
| 312000 | 3786.1374 | -19627.7 | 5806 | 0.034624468 |
| 313000 | 3607.8092 | -20103.596 | 5806 | 0.033672375 |
| 314000 | 3411.1813 | -20542.409 | 5806 | 0.032841031 |
| 315000 | 3215.9673 | -20945.57 | 5806 | 0.032118689 |
| 316000 | 3040.7238 | -21313.587 | 5806 | 0.031483381 |
| 317000 | 2908.0912 | -21668.101 | 5806 | 0.03092161 |
| 318000 | 2785.4056 | -21973.745 | 5806 | 0.030421469 |
| 319000 | 2712.8501 | -22268.585 | 5806 | 0.0299729 |
| 320000 | 2561.8815 | -22454.735 | 5806 | 0.029567388 |
| 321000 | 2518.0634 | -22675.659 | 5806 | 0.029193451 |
| 322000 | 2394.1828 | -22798.399 | 5806 | 0.028848346 |
| 323000 | 2335.6871 | -22918.437 | 5806 | 0.028526523 |
| 324000 | 2382.1104 | -23074.741 | 5806 | 0.028220452 |
| 325000 | 2330.1575 | -23139.51 | 5806 | 0.027926862 |
| 326000 | 2338.6322 | -23230.043 | 5806 | 0.027645387 |
| 327000 | 2308.4332 | -23294.473 | 5806 | 0.027373484 |
| 328000 | 2278.1783 | -23355.14 | 5806 | 0.027111773 |
| 329000 | 2288.6843 | -23462.042 | 5806 | 0.026857909 |
| 330000 | 2218.8086 | -23525.156 | 5806 | 0.026615295 |
| 331000 | 2213.5756 | -23626.154 | 5806 | 0.026383489 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 332000 | 2190.1688 | -23701.58 | 5806 | 0.026163016 |
| 333000 | 2175.78 | -23780.298 | 5806 | 0.025950103 |
| 334000 | 2097.1406 | -23802.646 | 5806 | 0.025746341 |
| 335000 | 2126.3262 | -23892.464 | 5806 | 0.025547988 |
| 336000 | 2067.4513 | -23937.724 | 5806 | 0.02535656 |
| 337000 | 2055.1838 | -24020.524 | 5806 | 0.025173018 |
| 338000 | 2015.3311 | -24085.338 | 5806 | 0.024996904 |
| 339000 | 2009.9283 | -24172.312 | 5806 | 0.024827828 |
| 340000 | 1994.2485 | -24244.599 | 5806 | 0.02466245 |
| 341000 | 1973.92 | -24317.234 | 5806 | 0.02450562 |
| 342000 | 1904.795 | -24363.663 | 5806 | 0.024354762 |
| 343000 | 1891.2571 | -24445.564 | 5806 | 0.024208728 |
| 344000 | 1881.2652 | -24522.767 | 5806 | 0.024068191 |
| 345000 | 1885.6184 | -24616.049 | 5806 | 0.023933201 |
| 346000 | 1823.7784 | -24663.467 | 5806 | 0.02380298 |
| 347000 | 1830.1993 | -24747.867 | 5806 | 0.023678712 |
| 348000 | 1790.5748 | -24799.815 | 5806 | 0.02355779 |
| 349000 | 1743.0553 | -24847.091 | 5806 | 0.023440222 |
| 350000 | 1744.6872 | -24933.179 | 5806 | 0.023327551 |
| 351000 | 1717.4354 | -24989.933 | 5806 | 0.023219587 |
| 352000 | 1689.0308 | -25036.005 | 5806 | 0.023115083 |
| 353000 | 1675.9032 | -25092.527 | 5806 | 0.0230149 |
| 354000 | 1619.2528 | -25110.823 | 5806 | 0.022919026 |
| 355000 | 1634.8934 | -25184.463 | 5806 | 0.022824071 |
| 356000 | 1598.9802 | -25231.233 | 5806 | 0.022731755 |
| 357000 | 1573.2249 | -25277.412 | 5806 | 0.022642736 |
| 358000 | 1556.5366 | -25340.007 | 5806 | 0.022555505 |
| 359000 | 1543.4318 | -25410.43 | 5806 | 0.022471926 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 360000 | 1522.6495 | -25480.048 | 5806 | 0.022391631 |
| 361000 | 1487.031 | -25537.576 | 5806 | 0.022315624 |
| 362000 | 1459.1689 | -25601.092 | 5806 | 0.02224351 |
| 363000 | 1429.7543 | -25652.784 | 5806 | 0.022174378 |
| 364000 | 1402.3108 | -25704.846 | 5806 | 0.022107542 |
| 365000 | 1346.8869 | -25721.017 | 5806 | 0.022043703 |
| 366000 | 1354.4639 | -25779.234 | 5806 | 0.021982586 |
| 367000 | 1329.131 | -25811.353 | 5806 | 0.021922267 |
| 368000 | 1288.8089 | -25826.402 | 5806 | 0.021863413 |
| 369000 | 1284.589 | -25871.813 | 5806 | 0.021805801 |
| 370000 | 1242.4774 | -25889.789 | 5806 | 0.021750233 |
| 371000 | 1224.8741 | -25928.723 | 5806 | 0.021695776 |
| 372000 | 1220.1231 | -25975.035 | 5806 | 0.021641741 |
| 373000 | 1177.8867 | -25994.112 | 5806 | 0.021588974 |
| 374000 | 1156.9473 | -26023.537 | 5806 | 0.021538351 |
| 375000 | 1127.114 | -26040.013 | 5806 | 0.021490184 |
| 376000 | 1107.6087 | -26070.566 | 5806 | 0.021442139 |
| 377000 | 1097.9851 | -26110.612 | 5806 | 0.02139536 |
| 378000 | 1054.0299 | -26116.702 | 5806 | 0.021349521 |
| 379000 | 1045.5042 | -26158.367 | 5806 | 0.021303466 |
| 380000 | 1011.1014 | -26179.674 | 5806 | 0.021258091 |
| 381000 | 991.63715 | -26213.485 | 5806 | 0.021214976 |
| 382000 | 966.39393 | -26248.212 | 5806 | 0.021174698 |
| 383000 | 939.60006 | -26272.285 | 5806 | 0.021135379 |
| 384000 | 924.42886 | -26305.885 | 5806 | 0.021096724 |
| 385000 | 887.97197 | -26323.205 | 5806 | 0.021059978 |
| 386000 | 869.88078 | -26355.994 | 5806 | 0.021023389 |
| 387000 | 852.76392 | -26388.079 | 5806 | 0.02098777 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 388000 | 827.43643 | -26411.03 | 5806 | 0.020953869 |
| 389000 | 802.76406 | -26438.462 | 5806 | 0.020921397 |
| 390000 | 780.26191 | -26461.23 | 5806 | 0.020890433 |
| 391000 | 749.798 | -26477.307 | 5806 | 0.020861497 |
| 392000 | 732.99131 | -26505.785 | 5806 | 0.020832583 |
| 393000 | 702.58998 | -26521.179 | 5806 | 0.020804882 |
| 394000 | 685.55211 | -26548.691 | 5806 | 0.02077757 |
| 395000 | 671.99808 | -26577.837 | 5806 | 0.020752108 |
| 396000 | 644.65457 | -26597.426 | 5806 | 0.020728068 |
| 397000 | 611.72707 | -26614.176 | 5806 | 0.020705753 |
| 398000 | 604.65179 | -26647.346 | 5806 | 0.02068335 |
| 399000 | 569.40302 | -26662.689 | 5806 | 0.020662255 |
| 400000 | 552.47448 | -26688.756 | 5806 | 0.020643438 |
| 401000 | 524.99703 | -26711.743 | 5806 | 0.020624264 |
| 402000 | 522.80605 | -26753.112 | 5806 | 0.020605892 |
| 403000 | 482.30767 | -26762.361 | 5806 | 0.020588381 |
| 404000 | 457.05406 | -26784.467 | 5806 | 0.020571399 |
| 405000 | 431.10582 | -26803.339 | 5806 | 0.020555749 |
| 406000 | 412.5451 | -26830.268 | 5806 | 0.020540592 |
| 407000 | 377.67643 | -26839.237 | 5806 | 0.020525615 |
| 408000 | 363.61282 | -26866.025 | 5806 | 0.020512574 |
| 409000 | 336.47876 | -26885.139 | 5806 | 0.020500957 |
| 410000 | 317.32401 | -26906.202 | 5806 | 0.020490085 |

Loop time of 493.73 on 4 procs for 100000 steps with 5806 atoms

Performance: 1.750 ns/day, 13.715 hours/ns, 202.540 timesteps/s

96.3% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```
-----
Pair | 312.31 | 312.31 | 312.31 | 0.0 | 63.26
Neigh | 78.555 | 78.555 | 78.555 | 0.0 | 15.91
Comm | 0.69978 | 0.69978 | 0.69978 | 0.0 | 0.14
Output | 70.291 | 70.291 | 70.291 | 0.0 | 14.24
Modify | 29.6 | 29.6 | 29.6 | 0.0 | 6.00
Other | | 2.275 | | | 0.46
```

Nlocal: 5806 ave 5806 max 5806 min

Histogram: 1 0 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 0

Neighs: 407501 ave 407501 max 407501 min

Histogram: 1 0 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 0

Total # of neighbors = 407501

Ave neighs/atom = 70.1862

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

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

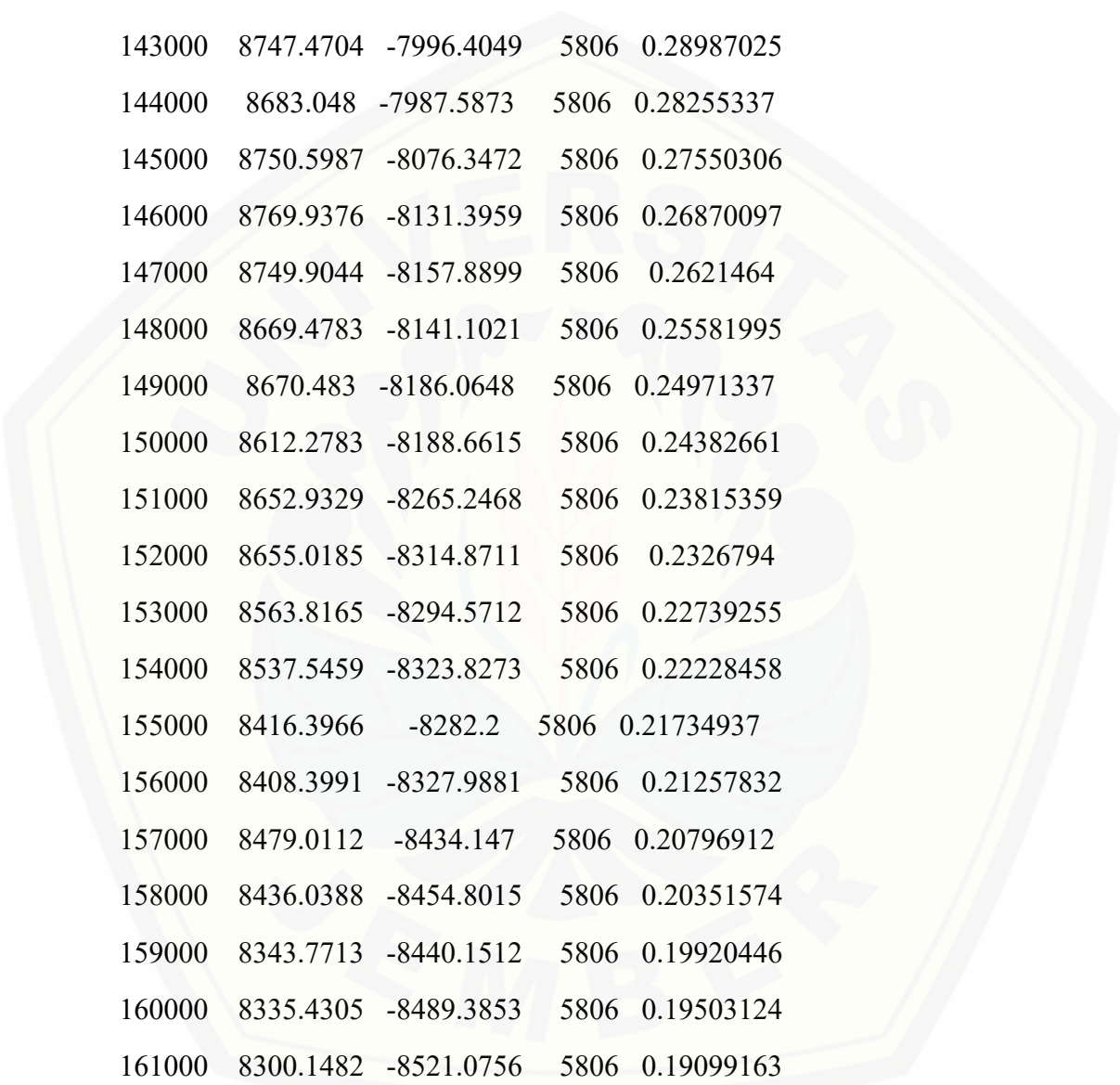
Lampiran

Lampiran C. log *script* menggunakan dengan laju temperatur solidifikasi 10^{10} K/s

Step Temp PotEng Atoms Density

110000 8722.6594 -8433.7995 5806 0.68958435

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 111000 | 8647.6024 | -8367.9691 | 5806 | 0.6725086 |
| 112000 | 8687.0226 | -8372.5341 | 5806 | 0.65556514 |
| 113000 | 8719.157 | -8357.6416 | 5806 | 0.63915828 |
| 114000 | 8728.4181 | -8319.3646 | 5806 | 0.62324595 |
| 115000 | 8852.555 | -8372.4221 | 5806 | 0.60780148 |
| 116000 | 8896.8645 | -8369.3209 | 5806 | 0.59282104 |
| 117000 | 8955.5178 | -8381.7243 | 5806 | 0.57830093 |
| 118000 | 8942.8999 | -8340.2194 | 5806 | 0.56420868 |
| 119000 | 8938.2317 | -8301.4363 | 5806 | 0.55053988 |
| 120000 | 9032.3947 | -8336.6449 | 5806 | 0.53700948 |
| 121000 | 8976.6331 | -8257.652 | 5806 | 0.52381338 |
| 122000 | 9078.2156 | -8294.6087 | 5806 | 0.51102127 |
| 123000 | 9077.6178 | -8258.3039 | 5806 | 0.49789005 |
| 124000 | 9124.9986 | -8260.9825 | 5806 | 0.48503218 |
| 125000 | 9141.8676 | -8237.535 | 5806 | 0.47258482 |
| 126000 | 9127.6171 | -8197.2135 | 5806 | 0.46029098 |
| 127000 | 9152.6099 | -8185.4524 | 5806 | 0.44823932 |
| 128000 | 9142.5104 | -8151.7973 | 5806 | 0.43658611 |
| 129000 | 9176.3207 | -8152.3439 | 5806 | 0.42532581 |
| 130000 | 9066.022 | -8049.7375 | 5806 | 0.41443167 |
| 131000 | 9128.3379 | -8078.7385 | 5806 | 0.40389676 |
| 132000 | 9210.2448 | -8126.0636 | 5806 | 0.39222936 |
| 133000 | 9198.6619 | -8106.7883 | 5806 | 0.38100747 |
| 134000 | 9261.691 | -8150.5947 | 5806 | 0.37023687 |
| 135000 | 9270.892 | -8161.4561 | 5806 | 0.35986862 |
| 136000 | 9181.4547 | -8102.9196 | 5806 | 0.34987539 |
| 137000 | 9104.1778 | -8062.4539 | 5806 | 0.34026488 |
| 138000 | 9038.6881 | -8037.9139 | 5806 | 0.33103395 |



| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 139000 | 9051.8718 | -8077.8015 | 5806 | 0.32215348 |
| 140000 | 9010.1945 | -8083.0526 | 5806 | 0.31360683 |
| 141000 | 8914.3631 | -8046.5176 | 5806 | 0.30538246 |
| 142000 | 8760.4681 | -7968.1688 | 5806 | 0.29747516 |
| 143000 | 8747.4704 | -7996.4049 | 5806 | 0.28987025 |
| 144000 | 8683.048 | -7987.5873 | 5806 | 0.28255337 |
| 145000 | 8750.5987 | -8076.3472 | 5806 | 0.27550306 |
| 146000 | 8769.9376 | -8131.3959 | 5806 | 0.26870097 |
| 147000 | 8749.9044 | -8157.8899 | 5806 | 0.2621464 |
| 148000 | 8669.4783 | -8141.1021 | 5806 | 0.25581995 |
| 149000 | 8670.483 | -8186.0648 | 5806 | 0.24971337 |
| 150000 | 8612.2783 | -8188.6615 | 5806 | 0.24382661 |
| 151000 | 8652.9329 | -8265.2468 | 5806 | 0.23815359 |
| 152000 | 8655.0185 | -8314.8711 | 5806 | 0.2326794 |
| 153000 | 8563.8165 | -8294.5712 | 5806 | 0.22739255 |
| 154000 | 8537.5459 | -8323.8273 | 5806 | 0.22228458 |
| 155000 | 8416.3966 | -8282.2 | 5806 | 0.21734937 |
| 156000 | 8408.3991 | -8327.9881 | 5806 | 0.21257832 |
| 157000 | 8479.0112 | -8434.147 | 5806 | 0.20796912 |
| 158000 | 8436.0388 | -8454.8015 | 5806 | 0.20351574 |
| 159000 | 8343.7713 | -8440.1512 | 5806 | 0.19920446 |
| 160000 | 8335.4305 | -8489.3853 | 5806 | 0.19503124 |
| 161000 | 8300.1482 | -8521.0756 | 5806 | 0.19099163 |
| 162000 | 8306.6453 | -8584.0927 | 5806 | 0.18708261 |
| 163000 | 8261.658 | -8609.8596 | 5806 | 0.18329667 |
| 164000 | 8241.0753 | -8655.214 | 5806 | 0.17962873 |
| 165000 | 8186.6517 | -8672.8596 | 5806 | 0.17607705 |
| 166000 | 8153.4859 | -8708.0564 | 5806 | 0.17263848 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|------------|
| 167000 | 8146.8301 | -8764.6048 | 5806 | 0.16930328 |
| 168000 | 8059.6998 | -8764.1179 | 5806 | 0.16606605 |
| 169000 | 7999.7425 | -8784.4217 | 5806 | 0.1629247 |
| 170000 | 7981.2524 | -8833.6378 | 5806 | 0.15987762 |
| 171000 | 7921.85 | -8854.4983 | 5806 | 0.15692172 |
| 172000 | 7912.925 | -8913.1799 | 5806 | 0.15405674 |
| 173000 | 7861.7158 | -8936.9938 | 5806 | 0.15127757 |
| 174000 | 7820.6159 | -8973.0791 | 5806 | 0.14858131 |
| 175000 | 7817.8876 | -9039.4332 | 5806 | 0.1459609 |
| 176000 | 7790.4509 | -9086.5729 | 5806 | 0.14340982 |
| 177000 | 7671.3889 | -9065.9295 | 5806 | 0.14092474 |
| 178000 | 7608.2539 | -9087.6324 | 5806 | 0.13850825 |
| 179000 | 7620.5626 | -9167.2968 | 5806 | 0.13606982 |
| 180000 | 7598.3766 | -9220.7308 | 5806 | 0.1336619 |
| 181000 | 7552.2104 | -9259.5872 | 5806 | 0.13132395 |
| 182000 | 7555.0508 | -9336.725 | 5806 | 0.1290542 |
| 183000 | 7532.1486 | -9393.6356 | 5806 | 0.12685019 |
| 184000 | 7527.0477 | -9467.1541 | 5806 | 0.12439288 |
| 185000 | 7480.5252 | -9511.9142 | 5806 | 0.12197034 |
| 186000 | 7457.2032 | -9575.4185 | 5806 | 0.11962702 |
| 187000 | 7511.2933 | -9697.7648 | 5806 | 0.11735978 |
| 188000 | 7507.2007 | -9776.8571 | 5806 | 0.11516592 |
| 189000 | 7429.4126 | -9803.6746 | 5806 | 0.11304273 |
| 190000 | 7379.4827 | -9850.9703 | 5806 | 0.11098686 |
| 191000 | 7322.0636 | -9893.278 | 5806 | 0.10899558 |
| 192000 | 7340.4982 | -9994.0189 | 5806 | 0.10706709 |
| 193000 | 7316.7865 | -10065.041 | 5806 | 0.10519902 |
| 194000 | 7244.3584 | -10099.118 | 5806 | 0.10338889 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 195000 | 7217.5561 | -10166.119 | 5806 | 0.10163457 |
| 196000 | 7134.5997 | -10192.059 | 5806 | 0.099933985 |
| 197000 | 7082.9696 | -10243.78 | 5806 | 0.098284724 |
| 198000 | 7079.5275 | -10333.241 | 5806 | 0.096684981 |
| 199000 | 7008.0862 | -10373.178 | 5806 | 0.095132904 |
| 200000 | 7009.5707 | -10464.373 | 5806 | 0.09362668 |
| 201000 | 6960.2911 | -10519.454 | 5806 | 0.092164926 |
| 202000 | 6950.9881 | -10607.732 | 5806 | 0.090745904 |
| 203000 | 6932.9047 | -10690.938 | 5806 | 0.089368041 |
| 204000 | 6976.13 | -10820.421 | 5806 | 0.088030346 |
| 205000 | 6845.5157 | -10824.305 | 5806 | 0.086730992 |
| 206000 | 6870.6554 | -10942.193 | 5806 | 0.085469137 |
| 207000 | 6871.4362 | -11041.557 | 5806 | 0.084243529 |
| 208000 | 6814.3167 | -11101.19 | 5806 | 0.08305294 |
| 209000 | 6798.3811 | -11192.796 | 5806 | 0.081895772 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 210000 | 6731.0226 | -11247.29 | 5806 | 0.080770935 |
| 211000 | 6844.8007 | -11357.927 | 5806 | 0.079672815 |
| 212000 | 6852.5001 | -11420.362 | 5806 | 0.078598399 |
| 213000 | 6883.1893 | -11510.318 | 5806 | 0.077549467 |
| 214000 | 6844.7505 | -11539.027 | 5806 | 0.076524899 |
| 215000 | 6837.7363 | -11596.726 | 5806 | 0.075524177 |
| 216000 | 6819.0755 | -11657.267 | 5806 | 0.074547703 |
| 217000 | 6771.0104 | -11698.269 | 5806 | 0.073595012 |
| 218000 | 6824.0771 | -11820.9 | 5806 | 0.072665587 |
| 219000 | 6767.2164 | -11864.471 | 5806 | 0.071759015 |
| 220000 | 6733.9468 | -11925.379 | 5806 | 0.070874909 |
| 221000 | 6631.5046 | -11936.019 | 5806 | 0.070012577 |

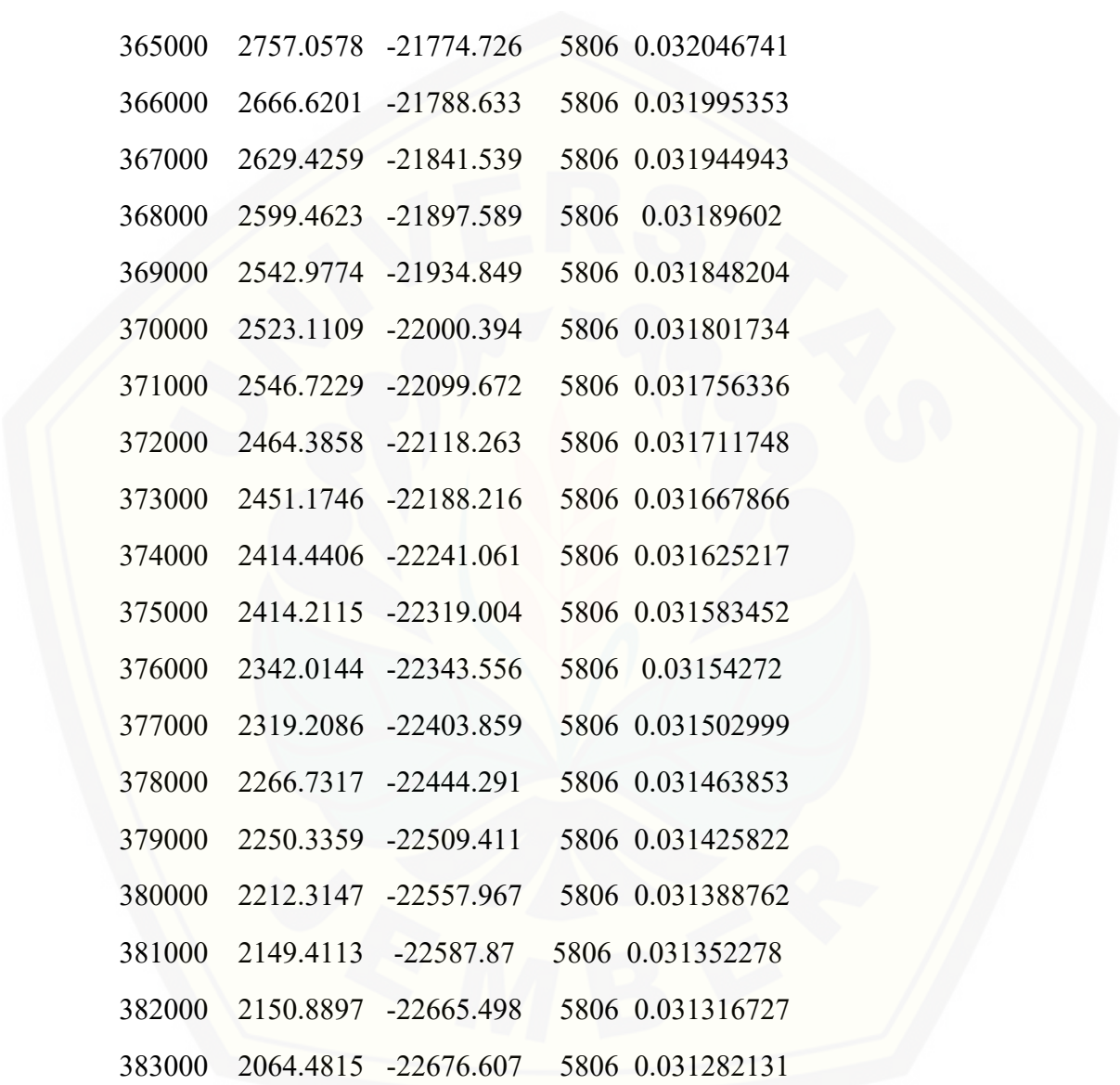
| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 222000 | 6585.1802 | -11987.413 | 5806 | 0.069171442 |
| 223000 | 6497.9845 | -12008.168 | 5806 | 0.068350911 |
| 224000 | 6494.2158 | -12095.521 | 5806 | 0.06755044 |
| 225000 | 6482.9579 | -12178.529 | 5806 | 0.066769281 |
| 226000 | 6442.8196 | -12243.45 | 5806 | 0.066007162 |
| 227000 | 6449.2307 | -12345.561 | 5806 | 0.065263577 |
| 228000 | 6406.5359 | -12410.556 | 5806 | 0.064538294 |
| 229000 | 6398.7427 | -12504.448 | 5806 | 0.063831044 |
| 230000 | 6334.3058 | -12556.762 | 5806 | 0.063140905 |
| 231000 | 6289.7213 | -12622.396 | 5806 | 0.062467065 |
| 232000 | 6265.4279 | -12700.564 | 5806 | 0.061809275 |
| 233000 | 6238.3692 | -12780.293 | 5806 | 0.061167278 |
| 234000 | 6236.7015 | -12878.898 | 5806 | 0.060540836 |
| 235000 | 6205.8154 | -12958.054 | 5806 | 0.059926891 |
| 236000 | 6224.8035 | -13074.408 | 5806 | 0.059297805 |
| 237000 | 6194.0204 | -13153.619 | 5806 | 0.058684063 |
| 238000 | 6167.4847 | -13239.446 | 5806 | 0.058085232 |
| 239000 | 6076.7091 | -13275.246 | 5806 | 0.057501046 |
| 240000 | 6106.6345 | -13402.022 | 5806 | 0.056931026 |
| 241000 | 6011.3346 | -13433.415 | 5806 | 0.056374726 |
| 242000 | 5932.1839 | -13475.014 | 5806 | 0.055831595 |
| 243000 | 5836.3577 | -13502.329 | 5806 | 0.05530123 |
| 244000 | 5796.2783 | -13573.899 | 5806 | 0.054783084 |
| 245000 | 5776.771 | -13658.812 | 5806 | 0.054277105 |
| 246000 | 5761.397 | -13748.292 | 5806 | 0.053782733 |
| 247000 | 5780.4803 | -13861.269 | 5806 | 0.053299749 |
| 248000 | 5717.8758 | -13917.374 | 5806 | 0.052827923 |
| 249000 | 5741.2157 | -14038.546 | 5806 | 0.052366924 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 250000 | 5747.7773 | -14148.035 | 5806 | 0.051916278 |
| 251000 | 5687.3761 | -14204.773 | 5806 | 0.051475897 |
| 252000 | 5611.3822 | -14247.6 | 5806 | 0.051045452 |
| 253000 | 5569.8053 | -14318.887 | 5806 | 0.050624898 |
| 254000 | 5568.3826 | -14420.884 | 5806 | 0.050213746 |
| 255000 | 5535.0305 | -14500.777 | 5806 | 0.049811704 |
| 256000 | 5491.2032 | -14571.884 | 5806 | 0.049418656 |
| 257000 | 5461.7873 | -14653.292 | 5806 | 0.049034314 |
| 258000 | 5481.0974 | -14772.02 | 5806 | 0.048658424 |
| 259000 | 5543.31 | -14925.525 | 5806 | 0.048290863 |
| 260000 | 5489.1144 | -14989.496 | 5806 | 0.047931463 |
| 261000 | 5432.063 | -15049.853 | 5806 | 0.047579875 |
| 262000 | 5302.301 | -15052.932 | 5806 | 0.047235967 |
| 263000 | 5242.3631 | -15108.245 | 5806 | 0.046899571 |
| 264000 | 5229.5748 | -15198.565 | 5806 | 0.046570205 |
| 265000 | 5223.9899 | -15295.113 | 5806 | 0.046247782 |
| 266000 | 5199.2318 | -15381.883 | 5806 | 0.045932338 |
| 267000 | 5166.1026 | -15459.639 | 5806 | 0.045623488 |
| 268000 | 5247.0458 | -15622.069 | 5806 | 0.045321245 |
| 269000 | 5163.4155 | -15662.678 | 5806 | 0.045025602 |
| 270000 | 5164.3796 | -15765.933 | 5806 | 0.044736226 |
| 271000 | 5092.9962 | -15812.352 | 5806 | 0.044452862 |
| 272000 | 5102.0924 | -15923.526 | 5806 | 0.044175541 |
| 273000 | 5004.2688 | -15950.585 | 5806 | 0.043904029 |
| 274000 | 4881.8914 | -15954.082 | 5806 | 0.04363805 |
| 275000 | 4944.5919 | -16098.698 | 5806 | 0.043377596 |
| 276000 | 4929.6853 | -16188.563 | 5806 | 0.043122431 |
| 277000 | 4895.0536 | -16261.351 | 5806 | 0.042872505 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 278000 | 4890.9132 | -16361.422 | 5806 | 0.042627754 |
| 279000 | 4875.6591 | -16453.334 | 5806 | 0.042387911 |
| 280000 | 4838.9659 | -16527.104 | 5806 | 0.042152968 |
| 281000 | 4768.4601 | -16572.431 | 5806 | 0.041922855 |
| 282000 | 4697.5946 | -16616.754 | 5806 | 0.04169736 |
| 283000 | 4720.4655 | -16732.64 | 5806 | 0.041476451 |
| 284000 | 4655.3689 | -16778.596 | 5806 | 0.041259961 |
| 285000 | 4658.4766 | -16877.379 | 5806 | 0.041047897 |
| 286000 | 4615.6416 | -16940.836 | 5806 | 0.040840082 |
| 287000 | 4519.3039 | -16963.66 | 5806 | 0.040636308 |
| 288000 | 4561.8472 | -17091.977 | 5806 | 0.040436497 |
| 289000 | 4454.9412 | -17107.073 | 5806 | 0.040240635 |
| 290000 | 4456.2599 | -17201.32 | 5806 | 0.040048757 |
| 291000 | 4523.9649 | -17347.174 | 5806 | 0.03986071 |
| 292000 | 4392.0276 | -17344.674 | 5806 | 0.039676315 |
| 293000 | 4452.8532 | -17488.695 | 5806 | 0.039495563 |
| 294000 | 4388.7521 | -17537.758 | 5806 | 0.039318328 |
| 295000 | 4426.6132 | -17666.037 | 5806 | 0.039144634 |
| 296000 | 4330.5603 | -17690.936 | 5806 | 0.038974373 |
| 297000 | 4313.4712 | -17773.617 | 5806 | 0.038807354 |
| 298000 | 4294.5395 | -17852.438 | 5806 | 0.038643558 |
| 299000 | 4245.063 | -17908.157 | 5806 | 0.03848299 |
| 300000 | 4197.9202 | -17964.371 | 5806 | 0.038325574 |
| 301000 | 4175.2944 | -18041.474 | 5806 | 0.038171228 |
| 302000 | 4241.1531 | -18189.45 | 5806 | 0.038019837 |
| 303000 | 4195.5388 | -18250.426 | 5806 | 0.037871322 |
| 304000 | 4168.8476 | -18324.777 | 5806 | 0.037725782 |
| 305000 | 4128.5022 | -18386.814 | 5806 | 0.037583103 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 306000 | 4008.5477 | -18389.273 | 5806 | 0.037443115 |
| 307000 | 3982.295 | -18458.176 | 5806 | 0.037305843 |
| 308000 | 4012.7829 | -18569.946 | 5806 | 0.037171149 |
| 309000 | 3935.5902 | -18603.844 | 5806 | 0.037039119 |
| 310000 | 3986.039 | -18735.164 | 5806 | 0.036909643 |
| 310000 | 3986.039 | -18735.164 | 5806 | 0.036909643 |
| 311000 | 4034.4277 | -18790.24 | 5806 | 0.03678182 |
| 312000 | 4034.4028 | -18831.572 | 5806 | 0.03665506 |
| 313000 | 4054.0239 | -18890.269 | 5806 | 0.036529773 |
| 314000 | 3983.566 | -18876.233 | 5806 | 0.036405855 |
| 315000 | 3970.5959 | -18913.458 | 5806 | 0.036283363 |
| 316000 | 3954.34 | -18951.751 | 5806 | 0.036162326 |
| 317000 | 3893.8275 | -18959.674 | 5806 | 0.03604276 |
| 318000 | 3941.4027 | -19054.121 | 5806 | 0.035924882 |
| 319000 | 3854.4602 | -19049.064 | 5806 | 0.035808749 |
| 320000 | 3859.0729 | -19111.648 | 5806 | 0.035694142 |
| 321000 | 3891.4537 | -19202.043 | 5806 | 0.035581123 |
| 322000 | 3841.5064 | -19229.067 | 5806 | 0.03546978 |
| 323000 | 3820.8477 | -19280.74 | 5806 | 0.03536013 |
| 324000 | 3780.9646 | -19318.912 | 5806 | 0.035252191 |
| 325000 | 3739.1183 | -19353 | 5806 | 0.03514582 |
| 326000 | 3734.3517 | -19419.018 | 5806 | 0.035041023 |
| 327000 | 3728.9125 | -19486.747 | 5806 | 0.034937931 |
| 328000 | 3708.1364 | -19545.046 | 5806 | 0.034836495 |
| 329000 | 3722.3633 | -19628.877 | 5806 | 0.03473669 |
| 330000 | 3723.0601 | -19705.476 | 5806 | 0.034638538 |
| 331000 | 3652.0822 | -19724.482 | 5806 | 0.034540509 |
| 332000 | 3575.9936 | -19740.915 | 5806 | 0.034442744 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 333000 | 3572.6718 | -19812.536 | 5806 | 0.034346606 |
| 334000 | 3545.3603 | -19867.815 | 5806 | 0.034252196 |
| 335000 | 3502.241 | -19910.754 | 5806 | 0.034159237 |
| 336000 | 3529.3489 | -20009.656 | 5806 | 0.034068415 |
| 337000 | 3494.8036 | -20062.547 | 5806 | 0.033979338 |
| 338000 | 3485.8471 | -20136.556 | 5806 | 0.033891684 |
| 339000 | 3442.5642 | -20183.284 | 5806 | 0.033805515 |
| 340000 | 3404.2653 | -20232.279 | 5806 | 0.033720792 |
| 341000 | 3384.3337 | -20294.882 | 5806 | 0.03363723 |
| 342000 | 3314.2005 | -20320.031 | 5806 | 0.033554863 |
| 343000 | 3312.6653 | -20397.707 | 5806 | 0.033474205 |
| 344000 | 3288.4143 | -20461.244 | 5806 | 0.033395388 |
| 345000 | 3246.1421 | -20509.614 | 5806 | 0.033318087 |
| 346000 | 3255.6437 | -20598.596 | 5806 | 0.033242068 |
| 347000 | 3259.4419 | -20685.492 | 5806 | 0.033167272 |
| 348000 | 3267.5318 | -20775.793 | 5806 | 0.033093918 |
| 349000 | 3148.3024 | -20771.067 | 5806 | 0.033022161 |
| 350000 | 3148.189 | -20850.97 | 5806 | 0.032951903 |
| 351000 | 3095.2343 | -20890.169 | 5806 | 0.032882922 |
| 352000 | 3074.702 | -20956.349 | 5806 | 0.032815273 |
| 353000 | 3010.2061 | -20986.663 | 5806 | 0.032748671 |
| 354000 | 2996.1554 | -21055.295 | 5806 | 0.032683694 |
| 355000 | 2996.5333 | -21140.091 | 5806 | 0.032620153 |
| 356000 | 2971.783 | -21205.177 | 5806 | 0.032557505 |
| 357000 | 2932.3031 | -21254.422 | 5806 | 0.03249598 |
| 358000 | 2877.4573 | -21292.777 | 5806 | 0.03243562 |
| 359000 | 2837.0562 | -21343.484 | 5806 | 0.032376552 |
| 360000 | 2853.3216 | -21437.312 | 5806 | 0.032318484 |



| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 361000 | 2755.8504 | -21444.261 | 5806 | 0.032261757 |
| 362000 | 2789.9798 | -21550.541 | 5806 | 0.032206625 |
| 363000 | 2792.0044 | -21633.761 | 5806 | 0.032152589 |
| 364000 | 2693.2961 | -21643.859 | 5806 | 0.032099213 |
| 365000 | 2757.0578 | -21774.726 | 5806 | 0.032046741 |
| 366000 | 2666.6201 | -21788.633 | 5806 | 0.031995353 |
| 367000 | 2629.4259 | -21841.539 | 5806 | 0.031944943 |
| 368000 | 2599.4623 | -21897.589 | 5806 | 0.03189602 |
| 369000 | 2542.9774 | -21934.849 | 5806 | 0.031848204 |
| 370000 | 2523.1109 | -22000.394 | 5806 | 0.031801734 |
| 371000 | 2546.7229 | -22099.672 | 5806 | 0.031756336 |
| 372000 | 2464.3858 | -22118.263 | 5806 | 0.031711748 |
| 373000 | 2451.1746 | -22188.216 | 5806 | 0.031667866 |
| 374000 | 2414.4406 | -22241.061 | 5806 | 0.031625217 |
| 375000 | 2414.2115 | -22319.004 | 5806 | 0.031583452 |
| 376000 | 2342.0144 | -22343.556 | 5806 | 0.03154272 |
| 377000 | 2319.2086 | -22403.859 | 5806 | 0.031502999 |
| 378000 | 2266.7317 | -22444.291 | 5806 | 0.031463853 |
| 379000 | 2250.3359 | -22509.411 | 5806 | 0.031425822 |
| 380000 | 2212.3147 | -22557.967 | 5806 | 0.031388762 |
| 381000 | 2149.4113 | -22587.87 | 5806 | 0.031352278 |
| 382000 | 2150.8897 | -22665.498 | 5806 | 0.031316727 |
| 383000 | 2064.4815 | -22676.607 | 5806 | 0.031282131 |
| 384000 | 2057.225 | -22746.596 | 5806 | 0.03124823 |
| 385000 | 2080.7717 | -22839.744 | 5806 | 0.03121528 |
| 386000 | 2022.787 | -22874.185 | 5806 | 0.031183175 |
| 387000 | 1947.1883 | -22890.674 | 5806 | 0.031151974 |
| 388000 | 1907.9879 | -22932.444 | 5806 | 0.031121739 |

| | | | | |
|--------|-----------|------------|------|-------------|
| 389000 | 1858.8355 | -22965.855 | 5806 | 0.031092349 |
| 390000 | 1819.9367 | -23008.804 | 5806 | 0.031063775 |
| 391000 | 1824.3016 | -23084.303 | 5806 | 0.031035924 |
| 392000 | 1807.0546 | -23141.976 | 5806 | 0.031008698 |
| 393000 | 1771.2284 | -23187.766 | 5806 | 0.030982198 |
| 394000 | 1755.922 | -23246 | 5806 | 0.030956292 |
| 395000 | 1678.3823 | -23258.803 | 5806 | 0.030931223 |
| 396000 | 1639.1538 | -23298.022 | 5806 | 0.030906729 |
| 397000 | 1601.4955 | -23340 | 5806 | 0.030882981 |
| 398000 | 1584.5061 | -23397.463 | 5806 | 0.030859807 |
| 399000 | 1564.3679 | -23450.329 | 5806 | 0.030837256 |
| 400000 | 1495.755 | -23468.376 | 5806 | 0.030815262 |
| 401000 | 1453.8393 | -23502.679 | 5806 | 0.030793967 |
| 402000 | 1459.2442 | -23571.837 | 5806 | 0.030773436 |
| 403000 | 1409.6491 | -23601.75 | 5806 | 0.030753368 |
| 404000 | 1378.3964 | -23645.656 | 5806 | 0.030733806 |
| 405000 | 1350.2013 | -23691.439 | 5806 | 0.03071482 |
| 406000 | 1316.7616 | -23733.928 | 5806 | 0.030696655 |
| 407000 | 1284.4671 | -23776.246 | 5806 | 0.030679061 |
| 408000 | 1251.7861 | -23818.164 | 5806 | 0.030661955 |
| 409000 | 1214.133 | -23856.847 | 5806 | 0.030645774 |
| 410000 | 1176.0876 | -23895.33 | 5806 | 0.030630327 |

Loop time of 420.912 on 4 procs for 100000 steps with 5806 atoms

Performance: 0.205 ns/day, 116.920 hours/ns, 237.580 timesteps/s

95.6% CPU use with 1 MPI tasks x 4 OpenMP threads

MPI task timing breakdown:

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

```
-----
Pair | 258.12 | 258.12 | 258.12 | 0.0 | 61.32
Neigh | 59.167 | 59.167 | 59.167 | 0.0 | 14.06
Comm | 0.52688 | 0.52688 | 0.52688 | 0.0 | 0.13
Output | 71.226 | 71.226 | 71.226 | 0.0 | 16.92
Modify | 29.518 | 29.518 | 29.518 | 0.0 | 7.01
Other | | 2.354 | | | 0.56
```

Nlocal: 5806 ave 5806 max 5806 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: 320322 ave 320322 max 320322 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 = 320322

Ave neighs/atom = 55.1709

Neighbor list builds = 10000

Dangerous builds not checked

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