



Simulasi Dinamika Molekul Berbasis Kode LAMMPS untuk Mengkaji Titik Leleh Bahan Besi (Fe), Timbal (Pb) dan Aluminium (Al)

Piana Hartina^a, Sri Wahyu Suciati^b, Amir Supriyanto^c, dan Junaidi

Jurusan Fisika, Universitas Lampung, Bandar Lampung, Indonesia, 35141

Article Information

Article history:
Received May 3rd, 2020
Received in revised form
May 30rd, 2020
Accepted June 10rd, 2020

Keywords:

Molecular Dynamics
Simulation,
LAMMPS, Melting
Point, OVITO,
ISAACS.

Abstract

Research has been carried out with the aim of obtaining a molecular dynamics simulation model of the Al, Fe, Pb materials related to the crystal structure and characteristics of the materials at their melting point. This melting point simulation method uses the molecular dynamics simulation of the LAMMPS code using the Finnis-Sinclair EAM potential and uses the velocity-verlet algorithm equation. The melting point value analysis is carried out based on the graph of the phase change (solid-liquid) between the potential energy and temperature values of each material obtained from the LAMMPS output. The LAMMPS output contains Data on the position of the atoms are in XYZ format, and information is also obtained in the form of integration step, potential energy, temperature, volume, and pressure. The visualization results show that the crystal structure of aluminum reaches a melting point at 948.51 °C, lead reaches a melting point at 952.92 °C, iron reaches a melting point at 1521.25 °C. Visualization of the crystal structure of the material when it reaches the melting point using the OVITO software and to analyze the characteristics of the crystal structure of the material with a radial distribution function curve using the ISAACS software.

Informasi Artikel

Proses artikel:
Diterima 3 Mei 2020
Diterima dan direvisi dari
30 Mei 2020
Accepted 10 Juni 2020

Kata kunci:

Simulasi Dinamika
Molekul, LAMMPS,
Titik Leleh, OVITO,
ISAACS.

Abstrak

Telah dilakukan penelitian dengan tujuan memperoleh model simulasi dinamika molekul bahan Al, Fe, Pb terkait struktur kristal dan karakteristik bahan saat mencapai titik leleh. Metode simulasi titik leleh ini menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS dengan menggunakan potensial Finnis-Sinclair EAM dan menggunakan persamaan algoritma velocity-verlet. Analisis nilai titik leleh dilakukan berdasarkan grafik perubahan fase (padat-cair) antara nilai energi potensial dan suhu dari masing-masing bahan yang diperoleh dari output LAMMPS. Hasil output LAMMPS berisi data posisi atom-atom dalam format XYZ, dan juga diperoleh informasi berupa step integrasi, energi potensial, suhu, volume, dan tekanan. Hasil visualisasi terlihat bahwa struktur kristal aluminium mencapai titik leleh saat suhu 948,51 °C, timbal mencapai titik leleh saat suhu 952,92 °C, besi mencapai titik leleh saat suhu 1521,25 °C. Visualisasi struktur kristal bahan saat mencapai titik leleh menggunakan software OVITO dan untuk menganalisis karakteristik struktur kristal bahan dengan kurva fungsi distribusi radial menggunakan software ISAACS.

1. Pendahuluan

Simulasi komputer bertindak sebagai jembatan antara besaran mikroskopis dan besaran makroskopik laboratorium (Nurdin dan Andrianto, 2012). Metodologi yang tepat dibutuhkan untuk menentukan simulasi model yang diinginkan. Sistem dinamik merupakan metodologi dan teknik pemodelan matematika untuk memahami dan mendiskusikan masalah yang kompleks. Metodologi sistem dinamika pada dasarnya menggunakan hubungan sebab akibat dalam menyusun model suatu

* Corresponding author.

E-mail address: (a*) pianahartina474@gmail.com, (b) ayoe1971@fmipa.unila.ac.id, (c) amirsupriyanto56@gmail.com

sistem yang bersifat kompleks. Simulasi sistem dinamik dapat diketahui dengan mengamati perilaku sistem dan perubahan nilai dari variabel sistem (Fortunella dkk., 2014).

Dinamika molekul merupakan suatu teknik simulasi komputer dimana perubahan waktu dari interaksi antar atom yang diikuti dengan mengintegrasikan persamaan gerak antar atom (Astuti, 2014). Simulasi MD dapat digunakan untuk menguji teori menggunakan model simulasi yang sama kemudian membandingkan hasil simulasi tersebut dengan hasil eksperimen serta mampu melakukan simulasi yang sulit atau tidak mungkin dilakukan di laboratorium misalnya melakukan eksperimen dengan suhu atau tekanan yang ekstrem (Fitrianda, 2013).

Hukum gerak Newton dapat dinyatakan dalam dua hal yaitu jika suatu benda tidak dipengaruhi oleh gaya apapun, maka benda tersebut akan terus bergerak lurus dalam kecepatan konstan dan jika besar gaya sama dengan laju perubahan momentum (Hsu, 2007). Dinamika molekuler klasik juga memecahkan hukum Newton untuk sistem yang terdiri dari atom dan atau molekul untuk mempelajari suatu sistem baik sederhana maupun kompleks (Ackland dkk., 2011).

Potensial EAM yang dikembangkan oleh Pun dan Mishin. Metode ini berdasarkan pada teori fungsi kerapatan dan memperlakukan setiap atom sebagai pengotor dalam sejumlah atom lainnya. Potensial EAM ini juga digunakan sebagai referensi potensial untuk menggambarkan interaksi interatomik (Zhang dkk., 2016). Potensial interatomik merupakan dasar dari simulasi dinamik, statika dan mekanika molekuler klasik (Zhou dan Huang, 2013). Persamaan gerak Newton diintegrasikan oleh algoritma velocity Verlet. Algoritma velocity-verlet digunakan untuk menghasilkan parameter kecepatan dan posisi dari setiap partikel (Insani dkk., 2015).

Timbal (Pb) salah satu jenis logam yang memiliki nomor atom 82, massa atom relatif (Ar) sebesar 207.2 u, titik lelehnya pada suhu 327.46°C, 621.43°F, 600.61 K. Pb memiliki struktur kristal (FCC). Besi (Fe) salah satu jenis logam yang memiliki nomor atom 26, massa atom relatif (Ar) sebesar 55.845 u, titik lelehnya pada suhu 1538°C, 2800°F, 1811 K. Fe memiliki struktur kristal (BCC) (Mark, 1993). Penggunaan bahan ini dalam penelitian untuk membandingkan visualisasi struktur kristal bahan antara FCC dan BCC serta membandingkan grafik RDF struktur kristal FCC dan BCC saat bahan mencapai titik leleh. Aluminium (Al) salah satu jenis logam yang memiliki nomor atom 13, massa atom relatif (Ar) sebesar 26.9815385 u, titik lelehnya pada suhu 660.32°C, 1220.58°F, 933.47 K. Al memiliki struktur kristal (FCC) (Australia Geological Survey Organization, 1999).

Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) adalah kode dinamika molekuler klasik yang memodelkan partikel dalam bentuk cair, padat atau gas. LAMMPS menerapkan integrasi persamaan gerak Newton untuk atom, molekul, atau partikel makroskopik yang berinteraksi melalui gaya jarak pendek atau panjang dengan menggunakan berbagai kondisi batas (Plimpton, 2015).

Open Visualization Tool (OVITO) adalah perangkat lunak yang sangat baik untuk visualisasi dan analisis atom. Alamat website resmi OVITO yaitu <http://www.ovito.org/> (Nordlund dkk., 2015). OVITO digunakan untuk membuat simulasi dinamika molekul secara visual. Metode *common neighbor analysis* (CNA) dapat digunakan untuk menghitung jumlah unit kristal seperti BCC, FCC dan sebagainya. Perhitungan CNA ini dapat dilakukan menggunakan program OVITO (Arkundato dkk., 2013).

Interactive Structure Analysis Of Amorphous And Crystalline System (ISAACS) merupakan program simulasi komputer untuk menganalisis karakteristik model struktur dalam bentuk tiga dimensi. Fungsi distribusi radial (RDF) atau fungsi distribusi pasangan atau fungsi korelasi pasangan yang merupakan karakteristik struktural yang penting yang dihitung melalui ISAACS (Roux dan Petkov, 2010). Grafik fungsi distribusi radial (RDF) yang menganalisis bentuk struktur kristal bahan melalui hubungan jarak antar dua atom dan koefisien yang menyatakan jumlah atom pada jarak tersebut (Latifa, 2015)

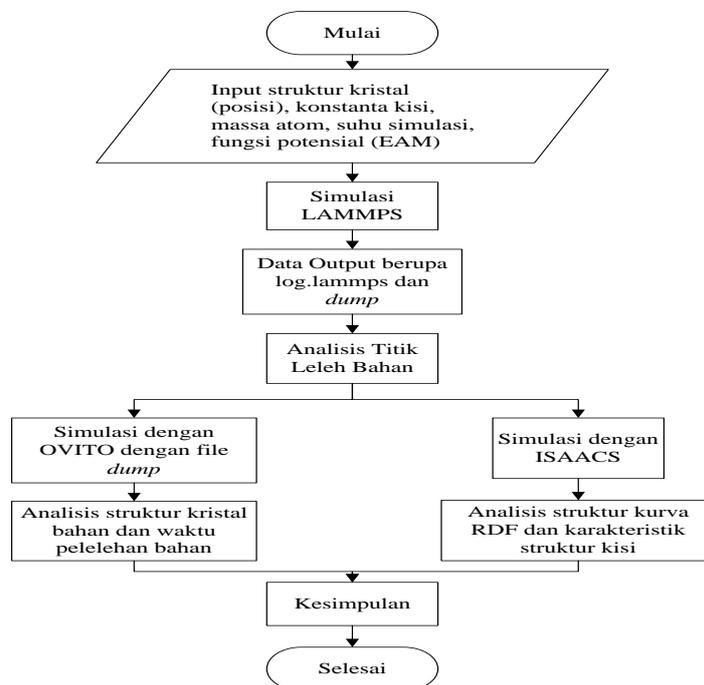
Berdasarkan pemaparan diatas maka penelitian tugas akhir ini akan melakukan pemodelan bahan dan mengkaji perhitungan titik leleh bahan Aluminium (Al), Besi (Fe), dan Timbal (Pb) menggunakan MD dengan kode *Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator* (LAMMPS). Gambaran dari penelitian simulasi ini adalah menggunakan file output LAMMPS untuk menganalisis titik leleh bahan serta dapat memodelkan bahan hingga dapat divisualisasikan menggunakan program *Open Visualization Tool* (OVITO) untuk memperoleh struktur kristal bahan kemudian hasil file output LAMMPS juga akan digunakan untuk menggambarkan grafik fungsi distribusi radial (RDF) menggunakan program (*Interactive Structure Analisis Of Amorphous And Crystalline System*) ISACCS yang kemudian akan dianalisis bentuk struktur kristal bahan melalui hubungan jarak antar dua atom dan koefisien yang menyatakan banyaknya atom pada jarak tersebut.

2. Metode Penelitian

Pelaksanaan penelitian dilakukan di Laboratorium Elektronika Dasar Jurusan Fisika (bagian komputasi) Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung. Penelitian ini dilakukan sejak Januari hingga Agustus 2020. Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah

komputer yang diinstal sistem operasi windows 2010 pro dengan RAM 4 GB dan processor intel core i5-8250U. Bahan yang digunakan berupa software program LAMMPS dan *command prompt* serta aplikasi Notepad ++, OVITO, dan ISAACS.

Prosedur penelitian yang dilakukan terdiri yaitu metode simulasi pada program LAMMPS, OVITO dan ISAACS serta metode analisis. Secara umum ditunjukkan prosedur penelitian pada **Gambar 1**.

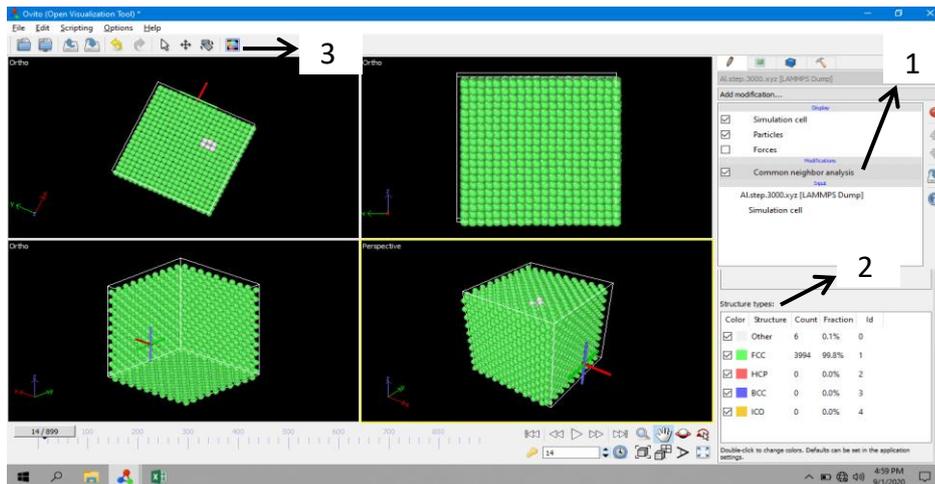


Gambar 1. Diagram Alir Penelitian

2.1 Prosedur Simulasi

1. *Program LAMMPS*. Membuat file input yang akan digunakan dalam simulasi LAMMPS menggunakan aplikasi Notepad++ yang kemudian disimpan menggunakan ekstensi “.in”, dan dijalankan melalui *command prompt*.

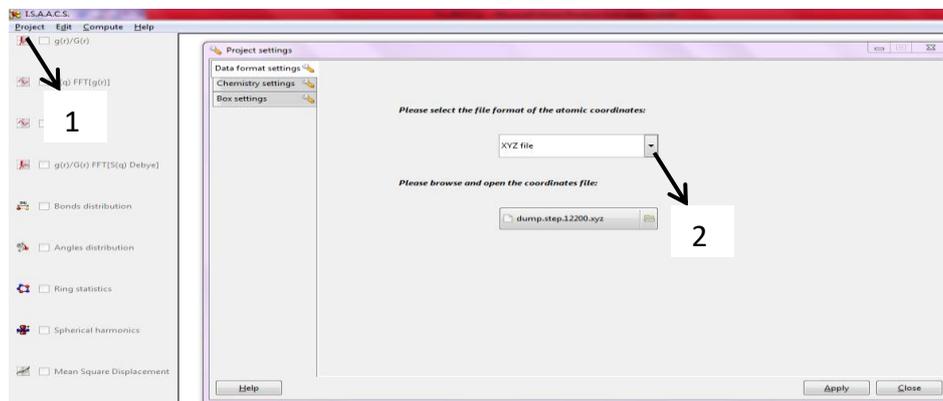
2. *Program OVITO*. Tampilan lembar kerja OVITO pada saat pengambilan data visualisasi dengan mengaktifkan menu *common neighbor analysis* (CNA), dapat dilihat pada **Gambar 2**.



Gambar 2. Visualisasi Struktur Kristal pada OVITO

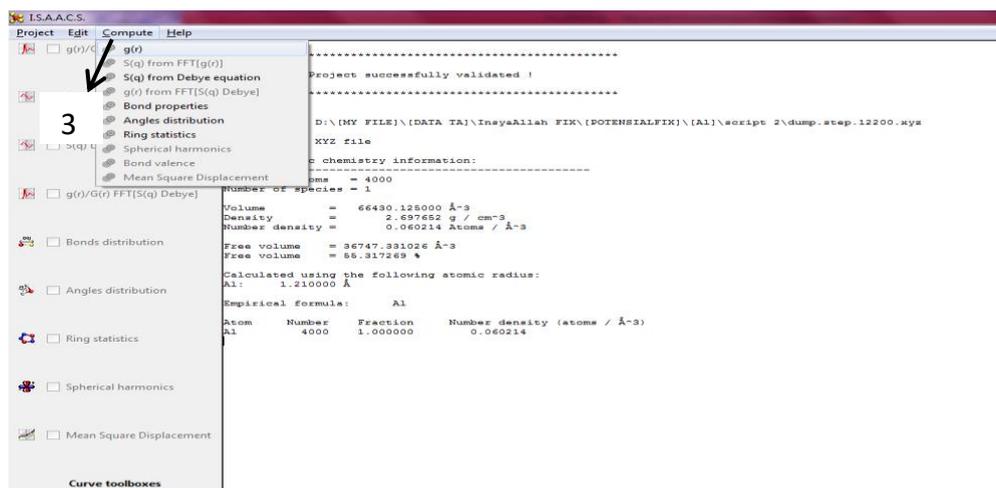
Berdasarkan **Gambar 2** pada tampilan menu OVITO menunjukkan urutan pengambilan data visualisasi struktur kristal. Nomor 1 menunjukkan menu *common neighbor analysis*, nomor 2 menunjukkan menu '*structure type*' yang akan muncul setelah CNA diaktifkan kemudian nomor 3 ikon untuk menyimpan hasil visualisasi yang diinginkan.

3. *Program ISAACS*. Lembar kerja program ISAACS dalam pengambilan data grafik fungsi radial distribusi (RDF) untuk melihat struktur kristal dapat dilihat pada **Gambar 3 dan 4**.



Gambar 3. Tampilan layar ISAACS saat input file output LAMMPS

Berdasarkan **Gambar 3** pada tampilan menu ISAACS menunjukkan proses input file output (LAMMPS). Nomor 1 menunjukkan menu '*project*' yang berisi tab menu yang akan diisi untuk mengatur model struktur untuk perhitungan. Nomor 2 menunjukkan menu format file dari koordinat atom yang digunakan.



Gambar 4. Pembentukan Grafik RDF

Berdasarkan **Gambar 4** menunjukkan tampilan menu dalam pembentukan grafik RDF ($g(r)$). Nomor 3 menunjukkan menu 'compute' kemudian mencentang kolom ' $g(r)$ ' kemudian ISAACS akan menampilkan hasil perhitungan berupa grafik RDF.

2.2 Metode Analisis

Setelah mendapatkan file *log.lammps* dari masing-masing bahan, file tersebut akan digunakan untuk menganalisis visualisasi struktur kristal bahan menggunakan simulasi OVITO, menganalisis perbedaan struktur kristal FCC dan BCC hingga menganalisis struktur kristal FCC berdasarkan material yang berbeda. Kemudian melakukan simulasi menggunakan ISAACS untuk mendapatkan grafik RDF untuk menggambarkan struktur dari sebuah sistem dan melihat karakteristik struktur kisi dari masing-masing bahan.

Titik leleh dapat ditentukan menggunakan pendekatan titik tengah, dengan $\Delta T = (T_2 - T_1)$, sehingga persamaan titik leleh dapat dilihat pada **persamaan 1**

$$T_L = \left(T_1 + \frac{\Delta T}{2} \right) \text{ atau } T_L = \left(T_2 - \frac{\Delta T}{2} \right) \quad (1)$$

Pada **persamaan 1** merupakan pendekatan titik tengah dengan T_1 sebagai titik awal perubahan wujud bahan, T_2 sebagai titik akhir perubahan wujud bahan, T_L sebagai titik leleh bahan dan ΔT adalah selisih antara nilai T_2 dan T_1 .

3. Hasil dan Pembahasan

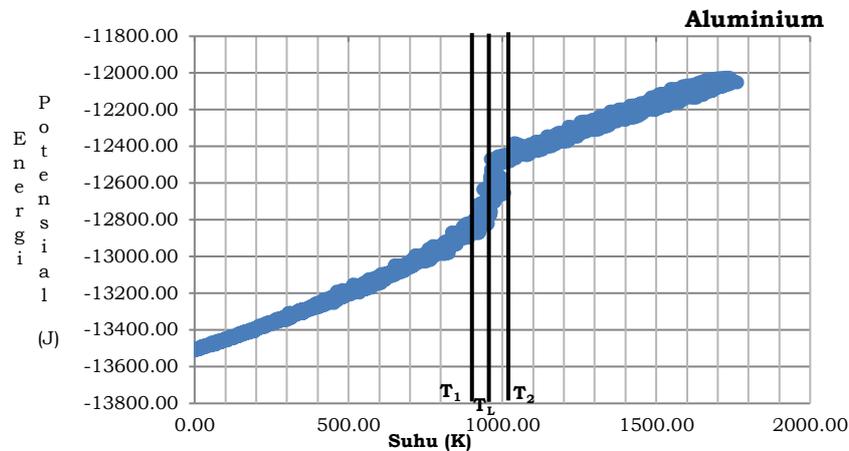
3.1 Hasil dan Data Pengamatan

Hasil output simulasi kode LAMMPS yaitu berupa data posisi atom-atom dalam format XYZ, *Text Document*, *MELT*. Data informasi tersebut terdapat dalam file *log.lammps* pada masing-masing bahan. Output LAMMPS juga menghasilkan file dump yang digunakan untuk input software OVITO dan ISAACS. Nilai titik leleh pada simulasi atom $10 \times 10 \times 10$ untuk bahan Al (fcc) berjumlah 4000 atom, untuk bahan Pb (fcc) berjumlah 4000 atom dan untuk Fe (bcc) berjumlah 2000 atom. Metode simulasi titik leleh ini menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS dengan potensial interatomik yang digunakan yaitu potensial Finnis-Sinclair EAM.

3.2 Simulasi Titik Leleh Bahan

Output dari LAMMPS salah satunya yaitu file log.lammps yang digunakan untuk menganalisis titik leleh bahan dengan membuat kurva perubahan fase (padat-cair). Titik leleh bahan terlihat pada kurva saat terjadi perubahan tiba-tiba pada energi potensial dengan suhu konstan. Data simulasi antara energi potensial dan suhu dibuat plot kurva nilai energi potensial (horizontal) dan suhu (vertikal).

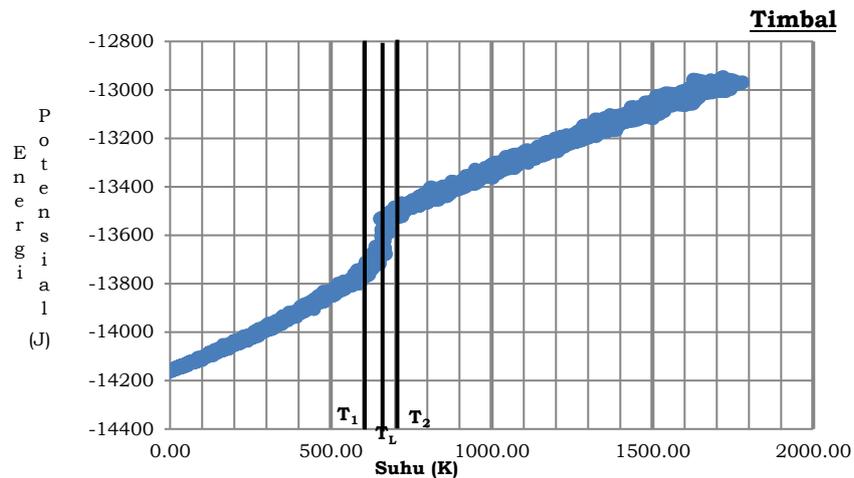
1. Aluminium (Al). Analisis titik leleh bahan Al menggunakan grafik T-E_T dapat dilihat pada **Gambar 5**.



Gambar 2. Kurva perubahan fase (padat-cair) aluminium

Berdasarkan metode analisis titik leleh yang ditentukan menggunakan pendekatan titik tengah sehingga pada **Gambar 5** menunjukkan bahwa bahan Al (FCC) memiliki nilai T₁ sebesar 1189,16 K konversi menjadi 916,01°C. Nilai T₂ sebesar 1254,15 K konversi menjadi 981°C, untuk nilai ΔT sebesar 64,99°C sehingga nilai titik leleh Al berada pada (948,51 ± 32,5) °C nilai tersebut berada pada step integrasi ke 103000 dengan nilai energi potensial sebesar -12823,94 J. Nilai energi potensial bertanda negatif karena atom tertanam (EAM) dalam sistem atom yang stabil membutuhkan energi yang cukup untuk memutus ikatan antar atom.

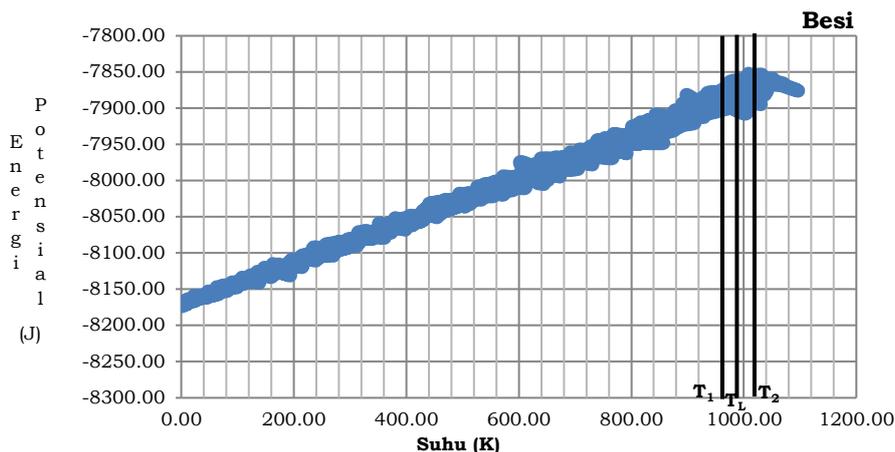
2 Timbal (Pb). Analisis titik leleh bahan Pb menggunakan grafik T-E_T dapat dilihat pada **Gambar 6**.



Gambar 3. Kurva perubahan fase (padat-cair) Timbal (Pb)

Gambar 6 menunjukkan bahan Pb (FCC) memiliki nilai T₁ sebesar 839,86 K konversi menjadi 566,71°C. Nilai T₂ sebesar 950,57 K konversi menjadi 677,42°C, untuk nilai ΔT sebesar 110,71°C sehingga nilai titik leleh Pb berada pada (623,55 ± 55,36) °C nilai tersebut berada pada step integrasi ke 76000 dengan nilai energi potensial sebesar -13726,299 J.

3. Besi (Fe). Analisis titik leleh bahan Fe menggunakan grafik T-E_T dapat dilihat pada **Gambar 7**.



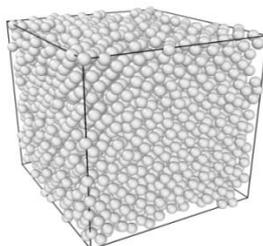
Gambar 4. Kurva perubahan fase (padat-cair) Besi (Fe)

Gambar 7. menunjukkan bahan Fe (BCC) memiliki nilai T1 sebesar 1742,58 K konversi menjadi 1469,43°C. Nilai T2 sebesar 1846,21 K konversi menjadi 1573,06°C, untuk nilai ΔT sebesar 103,63°C sehingga nilai titik leleh Fe berada pada $(1521,25 \pm 51,82)$ °C nilai tersebut berada pada step integrasi ke 162000 dengan nilai energi potensial sebesar -10641,258 J.

3.3 Visualisasi Struktur Kristal

Common Neighbor Analysis (CNA) merupakan metode kualitatif yang digunakan untuk menganalisis struktur kristal suatu material. Metode CNA dapat digunakan untuk menghitung jumlah unit kristal seperti BCC, FCC dan sebagainya. Perhitungan CNA ini dapat dilakukan menggunakan program OVITO (Arkundato dkk., 2013) dengan mengaktifkan CNA pada OVITO akan terlihat jenis struktur kristal serta visualisasi juga akan terlihat dari empat sisi secara bersamaan.

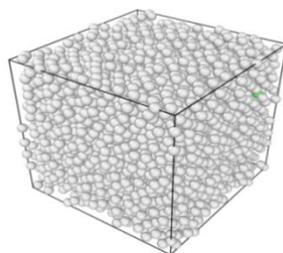
1. *Aluminium (Al)*. Visualisasi struktur kristal fase titik leleh bahan Al dapat dilihat pada **Gambar 8**.



Gambar 5. Visualisasi Struktur Kristal Bahan Al Saat Mencapai Titik Leleh

Berdasarkan **Gambar 8** visualisasi struktur kristal bahan Al saat mencapai titik leleh terlihat pada step 103000 dengan suhu sebesar 948,5°C dengan nilai struktur kristal yang masih berbentuk FCC sebesar 0,1% dengan jumlah atom yang tersisa 1 atom. Atom dengan jumlah nilai struktur kristal yang sudah tidak beraturan dan sudah tidak berbentuk struktur kristal FCC sebesar 99,9% dengan jumlah atom yang berkurang yaitu 3999 atom.

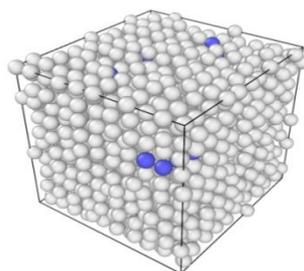
2. *Timbal (Pb)*. Visualisasi struktur kristal fase titik leleh bahan Pb dapat dilihat pada **Gambar 9**



Gambar 6. Visualisasi Struktur Kristal Bahan Pb Saat Mencapai Titik Leleh

Berdasarkan **Gambar 9** visualisasi struktur kristal bahan Pb saat mencapai titik leleh terlihat pada step 76000 dengan suhu sebesar $623,55^{\circ}\text{C}$ dengan nilai struktur kristal yang masih berbentuk FCC sebesar 0,1% dengan jumlah atom yang tersisa 2 atom. Atom dengan jumlah nilai struktur kristal yang sudah tidak beraturan dan sudah tidak berbentuk struktur kristal FCC sebesar 99,9% dengan jumlah atom yang berkurang yaitu 3998 atom.

3. Besi (*Fe*). Visualisasi struktur kristal fase titik leleh bahan Fe dapat dilihat pada **Gambar 10**.



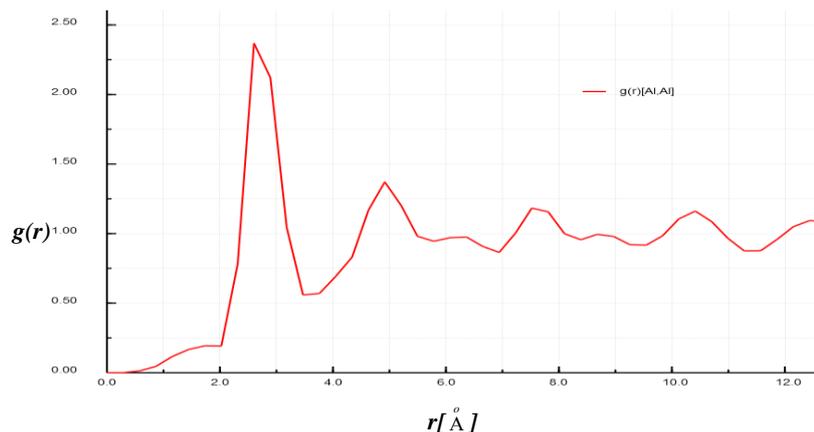
Gambar 7. Visualisasi Struktur Kristal Bahan Fe Saat Mencapai Titik Leleh

Berdasarkan **Gambar 10** visualisasi struktur kristal bahan Fe saat mencapai titik leleh terlihat pada step 162000 dengan suhu sebesar $1521,25^{\circ}\text{C}$ dengan nilai struktur kristal yang masih berbentuk BCC sebesar 1,4% dengan jumlah atom yang tersisa 28 atom. Atom dengan jumlah nilai struktur kristal yang sudah tidak beraturan dan sudah tidak berbentuk struktur kristal BCC sebesar 98,6% dengan jumlah atom yang berkurang yaitu 1972 atom.

3.4 Analisis Titik Leleh Melalui Grafik Radial Distribution Functions (RDF)

Radial distribution function dapat menggambarkan susunan atom-atom secara radial pada suatu sistem, selain itu RDF juga mampu menggambarkan struktur dan fasa dari suatu sistem pada zat cair. Pada kondisi sistem padat, RDF memiliki nilai yang tak terhingga, di mana jarak dan tingginya merupakan karakteristik dari struktur kisi (Li, 2007).

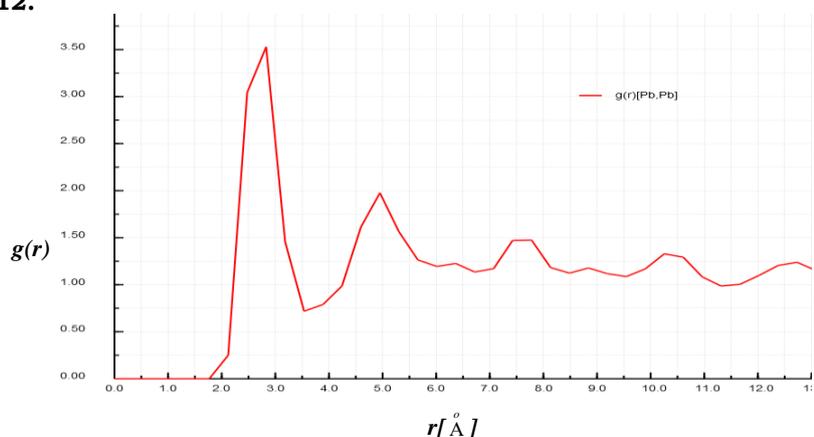
1. Aluminium (*Al*). Secara grafik hasil analisis struktur kristal Al saat mencapai fase titik leleh ditunjukkan pada **Gambar 11**.



Gambar 8. Grafik RDF aluminium ditentukan dari simulasi dinamika molekul dengan suhu 948,51°C pada step integrasi 103000.

Berdasarkan **Gambar 11** kurva RDF yang menunjukkan fase titik leleh dengan suhu sebesar 948,51°C, pada puncak tertinggi terjadi pada jarak 2,8 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 2,4. Puncak kurva yang cukup lebar memiliki arti bahwa keteraturan struktur kristal sudah mulai tidak teratur (Hidayat, 2019).

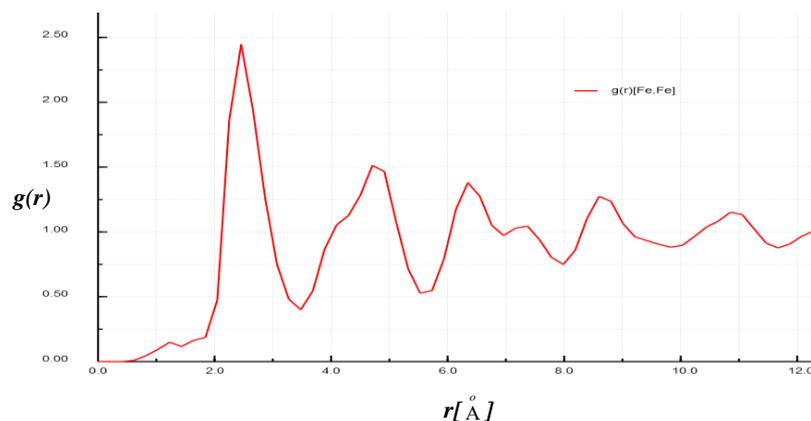
2. *Timbal (Pb)*. Secara grafik hasil analisis struktur kristal Pb saat mencapai fase titik leleh ditunjukkan pada **Gambar 12**.



Gambar 9. Grafik RDF timbal ditentukan dari simulasi dinamika molekul dengan suhu 623,55°C pada step integrasi 76000

Berdasarkan **Gambar 12** kurva RDF yang menunjukkan fase titik leleh dengan suhu sebesar 623,55°C, pada puncak tertinggi terjadi pada pada jarak 2,9 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 3,5.

3. *Besi (Fe)*. Secara grafik hasil analisis struktur kristal Fe saat mencapai fase titik leleh ditunjukkan pada **Gambar 13**.



Gambar 10. Grafik RDF dari besi ditentukan dari simulasi dinamika molekul dengan suhu 1521,25°C pada step integrasi 162000

Berdasarkan **Gambar 13** kurva RDF yang menunjukkan fase titik leleh dengan suhu sebesar 1521,25°C, pada puncak tertinggi terjadi pada pada jarak 2,3 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 2,4.

4. Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dapat diambil kesimpulan bahwa penelitian ini telah berhasil membuat simulasi dan memvisualisasikan struktur kristal bahan pada saat mencapai titik leleh pada program OVITO. Metode yang digunakan pada simulasi titik leleh bahan ini adalah metode simulasi dinamika molekuler kode LAMMPS menggunakan fungsi potensial Finnis-Sinclair EAM dengan menggunakan persamaan algoritma velocity verlet. Hasil visualisasi terlihat bahwa struktur kristal aluminium mencapai titik leleh saat suhu 948,51°C pada step integrasi 103000, timbal mencapai titik leleh saat suhu 623,55°C pada step integrasi 76000, besi mencapai titik leleh saat suhu 1521,25°C pada step integrasi 162000. Pada grafik RDF saat bahan mencapai titik leleh akan menunjukkan bahwa semakin bertambahnya suhu maka puncak-puncak (*peak*) kurva akan semakin melebar dan berkurang, hal tersebut mengindikasikan bahwa struktur kristal sudah tidak lagi beraturan. Karakteristik struktur kisi bahan saat bahan mencapai titik leleh, untuk aluminium memiliki puncak tertinggi dengan nilai jaraknya sebesar 2,8 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 2,4, untuk bahan timbal memiliki puncak tertinggi dengan nilai jaraknya sebesar 2,9 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 3,5 serta untuk bahan besi memiliki puncak tertinggi dengan nilai jaraknya sebesar 2,3 angstrom dengan $g(r)$ memiliki nilai sebesar sekitar 2,4.

5. Ucapan Terimakasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Kepala Laboratorium Elektronika Dasar dan Instrumentasi (bagian komputasi) Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung yang telah membantu dalam penyelesaian penelitian ini.

6. Daftar Pustaka

- Ackland, G. J., K. D'Mellow, S. L. Daraszewicz, D. J. Hepburn, M. Uhrin, And K. Stratford. 2011. "The MOLLY Short-Range Molecular Dynamics Package." *Computer Physics Communications*. Vol. 182. No. 12. pp. 2587–2604.
- Arkundato, Artoto, Zaki Su'ud, Mikrajuddin Abdullah, And Widayani Sutrisno. 2013a. "Molecular Dynamic Simulation On Iron Corrosion-Reduction In High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic." *Turkish Journal Of Physics*. Vol. 37. No. 1. pp. 132–44.
- Arkundato, Artoto, Zaki Su'ud, Mikrajuddin Abdullah, And Widayani Sutrisno. 2013b. "Study Of Liquid Lead Corrosion Of Fast Nuclear Reactorand Its Mitigation By Using Molecular Dynamics Method." *International Journal Of Applied Physics And Mathematics*. Vol. 3. No. 1. pp. 1–7.

- Astuti, A. D. 2014 Simulasi Dinamika Molekuler Protein Dengan Aplikasi Gromacs. *Skripsi*. Universitas Guna Darma.
- Australian Geological Survey Organization. 1999. Iron_Geoscience Australia.
- Fitrianda, M. I. 2013. Performa Komputasi Paralel Multicore Program LAMMPS: Studi Titik Leleh Logam Murni. *Digital Repository Universitas Jember*.
- Fortunella, A., I. P. Tama, dan A. Eunike. 2014. Model Simulasi Sistem Produksi Dengan Sistem Dinamik Guna Simulation Model Of Production System With System Dynamic To Support Production Capacity Planning. *Jurnal Rekayasa dan Manajemen Sistem Industri*. vol. 3. no. 2. pp. 256–267.
- Hidayat, Aulia Fikri. 2019. Studi Evolusi Struktur Pada Deposisi Tembaga Dalam Substrat Silikon Dengan Metode Dinamika Molekuler Study Of Structure Evolution Of Copper Deposition On Silicon Substrate Using Molecular Dynamics Method. Vol. 18. No. 1. pp. 21–28.
- Hsu, Andy. 2007. Molecular Dynamics Simulations Of Hydrophobic Solutes In Liquid Water. *Thesis*. pp. 1–61.
- Insani, M., Fitriyani, dan N. Ikhsan. 2015. Perbandingan Algoritma Velocity Verlet Dengan Algoritma Beeman Pada Simulasi Molecular Dynamics. *E-Proceeding of Engineering*. Vol. 2, No. 3, pp. 7954–7962.
- Latifa, Ainul. 2015. Studi Titik Leleh Besi (Fe) Dan Timbal (Pb) Menggunakan Metode Dinamika Molekul. *Digital Repository Universitas Jember*. pp. 27.
- Li, Je-Luen. 2007. Radial Distribution Function.
- Mark Winter. 1993. WebElements Periodic Table » *Aluminium* » historical information.
- Nordlund, Kai. K. Nordlund, Kai dan Antti Kuronen. 2015. Introduction to Molecular dynamics. *Complete lecture notes for self-studies*.
- Nurdin, Bahari W., dan Rian Andrianto. 2012. Simulasi Sifat Fisis Model Molekuler Dinamik Gas Argon dengan Potensial Lennard-Jones. *Jurnal Sainsmat*. Vol. 1. No. 2. pp. 147-155.
- Plimpton, Steve. 2015. “LAMMPS And Classical Molecular Dynamics For Materials Modeling,” No. June.
- Roux, S. L., dan V. Petkov. 2010. Interactive Structure Analysis of Amorphous and Crystalline Systems I.S.A.A.C.S. *Journal of Applied Crystallography*. Vol. 43. pp. 181-185.
- Zhang, Wenjin, Yufeng Peng, And Zhongli Liu. 2016. “Molecular Dynamics Simulations Of The Melting Curve Of Nial Alloy Under Pressure. *AIP ADVANCES* Vol. 057110.
- Zhou, L. G., And Hanchen Huang. 2013. “Response Embedded Atom Method Of Interatomic Potentials.” *Physical Review B - Condensed Matter And Materials Physics*. Vol. 87. No. 4.