

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR SISTEM LENNARD-JONES MIKROKANONIS-NVE

Auliya Fardiyani Umami, Prof. Dr. Achmad Benny Mutiara

Penulisan Ilmiah, Fakultas Ilmu Komputer, 2009

Universitas Gunadarma

<http://www.gunadarma.ac.id>

kata kunci : fortran

Abstraksi :

Adanya interaksi antar molekul yang dipengaruhi oleh persamaan gaya klasik Newton, tidak dapat dimengerti jika menggunakan kasat mata. Salah satu solusi adalah dengan melakukan eksperimen komputer dengan teknik dinamika molekul. Dinamika Molekul adalah teknik simulasi komputer yang mengamati pergerakan molekul-molekul yang saling berinteraksi. Teknik ini mensimulasikan molekulmolekul yang saling menarik dan mendorong serta menabrak satu sama lain. Berdasarkan itu, maka dirancang suatu simulasi dinamika molekular untuk sistem terisolasi (ensemble mikrokanonikal) dan sistem dengan pengendalian temperatur (ensemble kanonikal). Untuk menguji kebenaran simulasi, maka digunakan model potensial Lennard-Jones Mikrokanonis-NVE dan energi tetap. Perangkat lunak simulasi dikembangkan dengan bahasa pemrograman Force Fortran 2.0. Data yang diperoleh menunjukkan bahwa energi kinetik ditambah dengan energi potensial maka didapatkan energi total.