

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR HARD SPHERES PADA TIGA DIMENSI MENGGUNAKAN POTENSIAL LENNARD - JONES

PUTU WAHYU ARIMBAWA, Achmad Benny Mutiara, Prof. Dr. R

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. 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.