

**STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER  
MEKANISME ADSORPSI DAN DISOSIASI MOLEKUL H<sub>2</sub>O  
PADA PERMUKAAN LOGAM Fe (001)**

**SKRIPSI**

Diajukan Sebagai Salah satu Syarat  
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1)  
Pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo



**DIKY SATRIA PERMANA**

**19511411**

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN  
FAKULTAS TEKNIK  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO**

**2024**

## HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Diky Satria Permana  
NIM : 19511411  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam Fe (001)

Isi dan formatnya telah disetujui dan dinyatakan memenuhi syarat  
Untuk melengkapi persyaratan guna memperoleh Gelar Sarjana  
pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo

Ponorogo, 12 Februari 2024

Menyetujui

Dosen Pembimbing I,



Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D.  
NIK. 19870920 201204 12

Dosen Pembimbing II,



Yoyok Winardi, ST., M.T  
NIK. 19860803 201909 13

Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



Edy Kurniawan, S.T., M.T  
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin



Yoyok Winardi, ST., M.T  
NIK. 19860803 201909 13

## PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Diky Satria Permana  
Nim : 19511411  
Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa skripsi saya dengan judul “Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam Fe (001)” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang / teliti di dalam Naskah Skripsi ini adalah asli dari pemikiran saya. Tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka.

Apabila ternyata dalam Naskah Skripsi ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur plagiarisme, saya bersedia Ijazah saya dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Ponorogo, 29 November 2023

Mahasiswa,



Diky Satria Permana

NIM. 19511411

## HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Diky Satria Permana  
NIM : 19511411  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi  
dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam  
Fe (001)

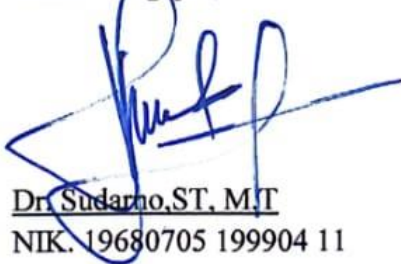
Telah diuji dan dipertahankan di hadapan

Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) pada :

Hari : Senin  
Tanggal : 12 Desember 2023  
Nilai :

### Dosen Penguji

Dosen Penguji I,



Dr. Sudarno, ST, MT  
NIK. 19680705 199904 11

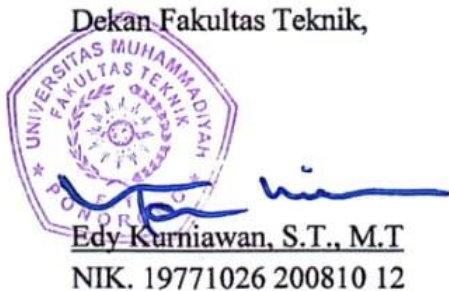
Dosen Penguji II,



Wawan Trisnadi Putra, ST, MT, Ph.D  
NIK. 19800220 202109 12

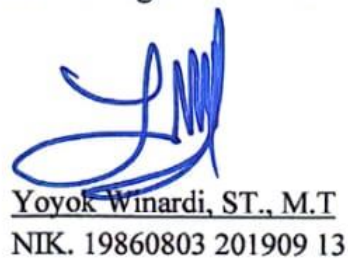
### Mengetahui

Dekan Fakultas Teknik,



Edy Kurniawan, S.T., M.T  
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi Teknik Mesin







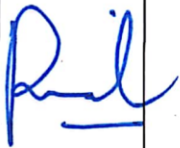
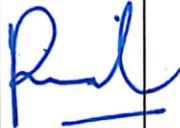
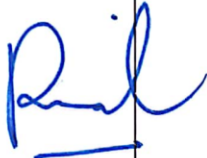
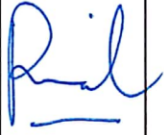
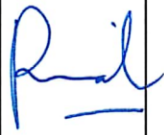

Yoyok Winardi, ST., M.T  
NIK. 19860803 201909 13

## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Diky Satria Permana  
 NIM : 19511411  
 Judul Skripsi : Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Disosiasi Molekul  $H_2O$  Pada Permukaan Logam  $Fe(001)$   
 Dosen Pembimbing I : Rizal Aripin, S.Si., M.Si., Ph.D

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	26/12/22	Konsultasi Judul		
2	4/1/23	BAB I	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Penambahan penelitian terdahulu</li> <li>- Penambahan batasan masalah dengan suhu antara <math>1667^{\circ}K</math> - <math>1811^{\circ}K</math> dan arah orientasi (001)</li> </ul>	
3	17/2/23	BAB II	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Penambahan minimal 5 penelitian terdahulu.</li> <li>- Penambahan reaksi antara <math>H_2O</math> dan <math>Fe</math>.</li> </ul>	
4	8/3/23	BAB II	<ul style="list-style-type: none"> <li>- Penambahan algoritma verlet dan Energi Potensial.</li> </ul>	





No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	10/23 / 4	BAB <u>i</u>	- Penambahan diagram alir penelitian dan pembuatan konfigurasi awal.	
6	15/23 / 5	BAB <u>ii</u>	- Penambahan optimasi struktur dan ekuilibrasi.	
7	22/23 / 5	Ace Saipura		
8	13/23 / 8	BAB <u>iii</u>	- Konfigurasi awal dan optimasi struktur.	
9	19/23 / 6	BAB <u>iv</u>	- Melanjutkan konfigurasi awal dan optimasi struktur. - Menghitung energi adsorpsi	
10	03/23 / 7	BAB <u>v</u>	- Melanjutkan penulisan optimasi struktur dan energi adsorpsi. - Penambahan tabel dan grafik. - Penentuan jarak ketinggian h.	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	10/23 7	BAB I <sub>U</sub>	- Memvisualisasikan hasil simulasi dengan software Ovitu	<u>Rah</u>
12	25/23 7	BAB I <sub>U</sub>	- Konversi satuan kcal/mol menjadi eV dan step menjadi femtosecond (fs) - Mencari referensi yang relevan. - Menyimpulkan situs yang paling disukai	<u>Rah</u>
13	31/23 7	BAB I <sub>U</sub>	- Penambahan mekanisme disosiasi dan reaksi molekul	<u>Rah</u>
14	29/23 8	BAB I <sub>U</sub>	- Melanjutkan mekanisme disosiasi dan reaksi molekul.	<u>Rah</u>
15	13/23 9	BAB I <sub>U</sub>	- Penambahan keterangan waktu pada gambar	<u>Rah</u>
16	10/23 11	Acc sidang.		<u>Rah</u>







## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI







Nama : Diley Satria Permana  
 NIM : 19511411  
 Judul Skripsi : studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Disosiasi Molekul  $H_2O$  Pada Permukaan Logam Fe (woi)  
 Dosen Pembimbing II : Yoyok Winardi, ST., M.T

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	7/23 1	Bab 1 Latar belakang.	sewa literatur tentang simulasi yang dimaksud.	
2	15/23 2.	Bab I	• tambahkan hasil penelitian terdahulu pada latar belakang. * tambahkan kajian penelitian pada elemen fraktal.	
3	27/23 2	Bab I.	• tanyakan penelitian terdahulu jawaban dari permasalahan masalah.	
4	21/23 3	Bab II. Kajian pustaka.	Jabarkan hasil penelitian terdahulu pada poin penelitian sebelumnya	



No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	9/23 4	Bab II	<ul style="list-style-type: none"> <li>• jelaskan teori reaksi <math>H_2O_2</math> pada dasar teori.</li> <li>• rumus 20 dasar algoritma.</li> </ul>	
6	20/23 4	Bab III metodologi pulpitan	<ul style="list-style-type: none"> <li>• waktu &amp; tempat pelaksanaan pulpitan</li> <li>• data pelaksanaan pulpitan.</li> </ul>	
7	22/23 5	Bab III	<ul style="list-style-type: none"> <li>• flow chart pulpitan</li> <li>• Daftar pustaka</li> </ul>	
8	22/23 6	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	
9	30/23 6	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	
10	7/23 7	BAB IV	Penambahan tentang mekanisme adsorpsi	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	13/23 7	BAB 10	visualisasi dengan software Outo	
12	28/23 7	BAB 10	Mencari referensi yang relevan.	
13	15/23 8	BAB 10	- Penambahan mekanisme disosiasi dan reaksi molekul.	
14	5/23 9	BAB 10	Penambahan kesimpulan dan saran	
15	12/23 10	BAB 10	Penambahan kesimpulan dan saran.	
16	22/23 11	ACC Sidang		

## MOTTO

“Lakukan apa pun yang sedang kamu jalani dengan sebaik mungkin, maksimalkan semua potensi yang ada, karena kamu tidak pernah tahu jalan mana yang sesungguhnya terbaik untukmu.”

(Catatan Penulis)



**STUDI SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER  
MEKANISME ADSORPSI DAN DISOSIASI MOLEKUL H<sub>2</sub>O  
PADA PERMUKAAN LOGAM Fe (001)**

Diky Satria Permana, Rizal Arifin, Yoyok Winardi

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : [dikysatria14@gmail.com](mailto:dikysatria14@gmail.com)

---

**ABSTRAK**

Besi (Fe) merupakan salah satu material logam yang paling banyak dimanfaatkan dalam kehidupan manusia. Dalam penggunaannya besi memiliki kekurangan yang cukup serius yaitu rentan terhadap serangan korosi. Untuk itu dibutuhkan metode pencegahan korosi agar struktur logam Fe memiliki masa pakai yang lebih lama. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mempelajari proses awal terjadinya korosi melalui mekanisme adsorpsi dan disosiasi molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (001). Penelitian dilakukan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler untuk memodelkan interaksi antara molekul H<sub>2</sub>O dengan permukaan Fe (001). *Software* Avogadro digunakan untuk menggambarkan konfigurasi awal dari atom O, H, dan Fe. Selanjutnya, dilakukan proses optimasi struktur untuk masing-masing atom H, O, OH, dan H<sub>2</sub>O pada permukaan Fe (001) dengan tiga situs yang berbeda yaitu *top*, *bridge*, dan *hollow*. Dari hasil optimasi struktur akan diperoleh nilai energi adsorpsi dari masing-masing atom. Pada atom H, situs *hollow* merupakan situs yang paling optimal untuk proses adsorpsi pada permukaan Fe (001) dengan nilai energi adsorpsi -2,71 eV. Sementara itu atom O berada pada situs *top* dan *bridge* dengan nilai energi adsorpsi -5,93 eV, molekul OH berada pada situs *bridge* dan *hollow* dengan nilai energi adsorpsi -1,39 eV, dan molekul H<sub>2</sub>O berada pada situs *top* dengan nilai energi adsorpsi 1,21 eV. Setelah teradsorpsi, molekul H<sub>2</sub>O akan mengalami proses disosiasi pada permukaan Fe (001). Proses disosiasi terbagi ke dalam dua tahap, disosiasi pertama yaitu molekul H<sub>2</sub>O menjadi molekul OH dan atom H, disosiasi kedua yaitu molekul OH menjadi atom O dan H. Setelah proses disosiasi selesai, terdapat satu temuan menarik yaitu terbentuknya molekul H<sub>2</sub>.

**Kata Kunci:** Fe (001), H<sub>2</sub>O, Korosi, Adsorpsi, Disosiasi, Simulasi Dinamika Molekuler

## KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis panjatkan kepada Allah SWT, karena berkat rahmat dan karunia-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H<sub>2</sub>O Pada Permukaan Logam Fe (001)”. Penyusunan skripsi ini menjadi salah satu syarat guna mendapatkan gelar Sarjana Teknik (S.T) pada program studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

Dalam proses penyusunan skripsi ini melibatkan berbagai pihak yang membantu penulis baik secara langsung maupun tidak langsung. Oleh karena itu dengan segala kerendahan hati, penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada :

1. Dr. Happy Susanto, M.A. selaku Rektor Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Edy Kurniawan S.T., M.T. selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Ketua Prodi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
4. Rizal Arifin, S.Si., M.Si., Ph.D. dan Yoyok Winardi, S.T., M.T. selaku Dosen Pembimbing yang selalu memberikan arahan, serta bimbingan secara sabar kepada penulis dalam menyusun skripsi ini.
5. Bapak dan Ibu Dosen Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
6. Orang tua penulis yaitu Bapak Yatmono dan Ibu Darmini yang selalu mendoakan dan memberi motivasi semangat kepada penulis untuk dapat menyelesaikan kuliah.
7. Ervan Surya Aby Nugroho selaku kakak laki-laki penulis yang telah membantu dan menjadi bagian dalam segala proses pendidikan penulis.
8. Rido Firmansyah dan Khoirul Anwar sebagai rekan mahasiswa yang selalu mendampingi, memahami atau bertukar pendapat terkait dengan ilmu simulasi dinamika molekuler dan yang selalu memberikan motivasi untuk menyelesaikan skripsi ini.

9. Para teman dan rekan-rekan mahasiswa S1 Teknik Mesin yang telah memberikan dukungan semangat dan berbagi informasi.
10. Semua pihak yang secara langsung maupun tidak langsung telah membantu dalam penyelesaian skripsi ini.

Penulis menyadari dalam penyusunan skripsi ini masih terdapat banyak kekurangan dan kesalahan. Oleh sebab itu penulis memohon maaf atas kekurangan dan kesalahan tersebut. Kritik dan saran yang bersifat membangun sangat diharapkan guna menjadi evaluasi penulis. Akhir kata, semoga skripsi yang telah disusun ini dapat memberikan manfaat dan senantiasa dapat dikembangkan.



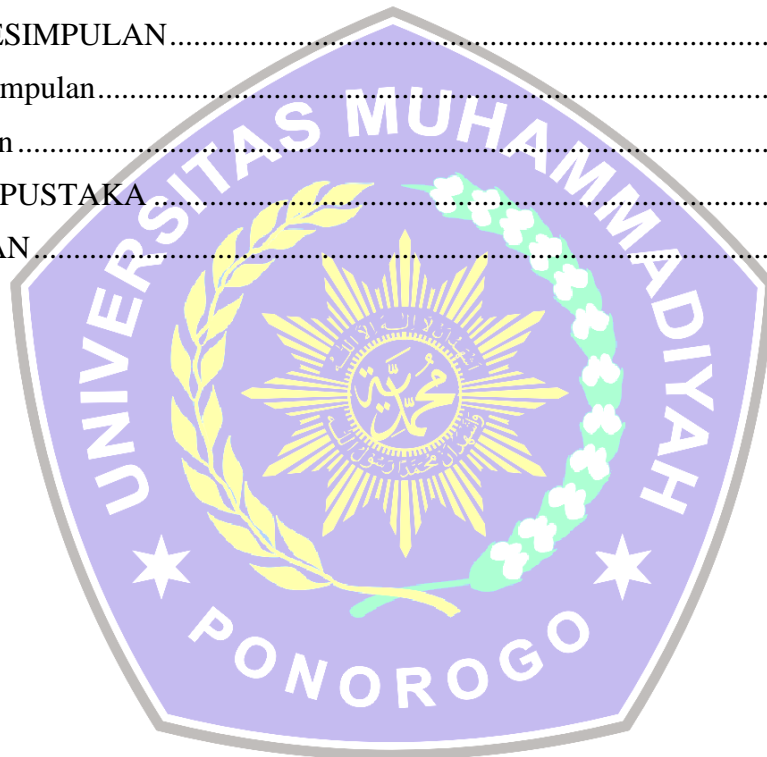
Ponorogo, 16 November 2023

Diky Satria Permana  
NIM. 19511411

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI .....	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN .....	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI .....	v
MOTTO .....	xi
ABSTRAK.....	xii
KATA PENGANTAR .....	xiii
DAFTAR ISI.....	xv
DAFTAR TABEL.....	xvii
DAFTAR GAMBAR .....	xviii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xxi
BAB 1 PENDAHULUAN .....	1
1.1 Latar Belakang .....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	3
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	4
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA .....	5
2.1 Penelitian Terdahulu.....	5
2.2 Adsorpsi.....	8
2.3 Disosiasi .....	8
2.4 Molekul H <sub>2</sub> O .....	9
2.5 Struktur Kristal .....	10
2.6 Besi (Fe) .....	12
2.7 Reaksi Molekul H <sub>2</sub> O dengan Fe.....	13
2.8 Simulasi Dinamika Molekuler.....	14
2.9 Temperatur Kontrol.....	15
2.10 Model.....	15
2.11 Kondisi Batas Periodik.....	16
2.12 Algoritma Integrasi waktu.....	16
BAB 3 METODE PENELITIAN.....	18

3.1 Alat dan Perlengkapan Penelitian.....	18
3.2 Mekanisme Penelitian .....	21
3.3 Membuat Konfigurasi Awal Simulasi.....	22
3.4 Optimasi Struktur .....	22
3.5 Ekuilibrasi Sistem dan Simulasi Dinamika Molekuler .....	23
3.6 Analisis Data dan Visualisasi .....	23
<b>BAB 4 ANALISA DATA DAN PEMBAHASAN.....</b>	<b>24</b>
4.1 Mekanisme Adsorpsi Molekul H <sub>2</sub> O pada Permukaan Fe (001).....	24
4.2 Mekanisme Disosiasi Molekul H <sub>2</sub> O pada Permukaan Fe (001).....	40
4.3 Pembentukan Molekul H <sub>2</sub> .....	46
<b>BAB 5 KESIMPULAN.....</b>	<b>48</b>
5.1 Kesimpulan.....	48
5.2 Saran.....	48
<b>DAFTAR PUSTAKA.....</b>	<b>49</b>
<b>LAMPIRAN.....</b>	<b>52</b>





## DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Hasil optimasi dan energi adsorpsi atom H pada permukaan Fe (001) .....	26
Tabel 4. 2 Hasil optimasi dan energi adsorpsi atom O pada permukaan Fe (001) .....	29
Tabel 4. 3 Hasil optimasi dan energi adsorpsi molekul OH pada permukaan Fe (001) .....	33
Tabel 4. 4 Hasil optimasi dan energi adsorpsi molekul H <sub>2</sub> O pada permukaan Fe (001) .....	37



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1	Molekul H <sub>2</sub> O .....	9
Gambar 2. 2	Ikatan hidrogen dan kovalen molekul H <sub>2</sub> O .....	10
Gambar 2. 3	Struktur kristal BCC, (a) hard-sphere, (b) reduced-sphere, (c) gabungan sel satuan BCC .....	11
Gambar 2. 4	Struktur kristal FCC, (a) hard-sphere, (b) reduced-sphere, (c) gabungan sel satuan FCC .....	11
Gambar 2. 5	Struktur kristal HCP, (a) hard-sphere, (b) reduced-sphere, (c) gabungan sel satuan HCP .....	12
Gambar 2. 6	Kubus dan potongan besi murni .....	12
Gambar 2. 7	Diagram fase besi .....	13
Gambar 2. 8	Representasi 2D dari kondisi batas periodik .....	16
Gambar 3. 1	Diagram alir penelitian .....	21
Gambar 3. 2	Konfigurasi awal sistem simulasi dimana atom berwarna orange, merah, dan putih secara berturut-turut menggambarkan atom Fe, O, dan H.....	22
Gambar 4. 1	Grafik hasil optimasi atom H pada permukaan Fe (001) .....	25
Gambar 4. 2	Situs awal struktur atom H pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola yang berwarna putih dan jingga masing-masing merepresentasikan atom H dan Fe. ....	26
Gambar 4. 3	Situs akhir struktur atom H pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola yang berwarna putih dan jingga masing-masing merepresentasikan atom H dan Fe. ....	27
Gambar 4. 4	Grafik hasil optimasi atom O pada permukaan Fe (001) .....	28
Gambar 4. 5	Situs awal struktur atom O pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola yang berwarna merah dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O dan Fe. ....	30
Gambar 4. 6	Situs akhir struktur atom O pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola yang	

	berwarna merah dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O dan Fe. ....	30
Gambar 4. 7	Grafik hasil optimasi atom OH pada permukaan Fe (001).....	32
Gambar 4. 8	Situs awal struktur molekul OH pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola berwarna putih, merah, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom H, O, dan Fe.....	33
Gambar 4. 9	Situs akhir struktur molekul OH pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola berwarna putih, merah, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom H, O, dan Fe.....	34
Gambar 4. 10	Grafik hasil optimasi molekul H <sub>2</sub> O pada permukaan Fe (001). .	36
Gambar 4. 11	Situs awal struktur molekul H <sub>2</sub> O pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola berwarna merah, putih, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O, H, dan Fe.....	37
Gambar 4. 12	Situs akhir struktur molekul H <sub>2</sub> O pada permukaan Fe (001), (a) situs <i>top</i> , (b) situs <i>bridge</i> , (c) situs <i>hollow</i> . Bola berwarna merah, putih, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O, H, dan Fe.....	38
Gambar 4. 13	Disosiasi pertama, (a) molekul H <sub>2</sub> O teradsorpsi, (b) disosiasi molekul H <sub>2</sub> O menjadi OH + H, (c) setelah disosiasi. Bola berwarna merah, putih, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O, H, dan Fe.....	40
Gambar 4. 14	Disosiasi kedua, (a) molekul OH dari disosiasi pertama, (b) disosiasi molekul OH menjadi O + H, (c) setelah disosiasi. Bola berwarna merah, putih, dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O, H, dan Fe.....	42
Gambar 4. 15	Pergerakan atom H setelah disosiasi. Bola berwarna putih dan jingga masing-masing merepresentasikan atom H dan Fe. ....	43
Gambar 4. 16	Pergerakan atom O setelah disosiasi. Bola berwarna merah dan jingga masing-masing merepresentasikan atom O dan Fe. ....	44

Gambar 4. 17 Proses pembentukan molekul H<sub>2</sub>, (a) atom H bergerak  
mendekat ke molekul OH, (b) pembentukan molekul H<sub>2</sub>. ..... 46

Gambar 4. 18 Posisi molekul H<sub>2</sub> setelah proses pembentukan H<sub>2</sub> selesai.  
(a) Posisi H<sub>2</sub> pada waktu 12500 fs, (b) posisi H<sub>2</sub> pada waktu  
50000 fs. .... 47



## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Log optimasi struktur atom H.....	52
Lampiran 2	Log optimasi struktur atom O.....	53
Lampiran 3	Log optimasi struktur atom OH.....	54
Lampiran 4	Log optimasi struktur atom H <sub>2</sub> O .....	55
Lampiran 5	Log H <sub>2</sub> O pada suhu 500K.....	56
Lampiran 6	Log H <sub>2</sub> O pada suhu 700K.....	57
Lampiran 7	Log H <sub>2</sub> O pada suhu 1700K.....	58
Lampiran 8	Hasil simulasi (a) suhu 500K, (b) suhu 700K, dan (c) suhu 1700K .....	59

