

Simulasi Sifat Fisis Model Molekuler Dinamik Gas Argon dengan Potensial *Lennard-Jones*

Physical Properties Molecular Simulation Model Dynamic Argon Gas with Lennard-Jones Potential

Wira Bahari Nurdin*, Rian Andrianto

Jurusan Fisika FMIPA Universitas Hasanuddin
Jl. Perintis Kemerdekaan KM 10 Tamalanrea, Makassar 90245

Received 4 Agustus 2012 / Accepted 12 September 2012

ABSTRAK

Telah dilakukan pembuatan dan pengujian suatu simulasi tentang sifat fisis gas argon dengan menggunakan dinamika molekuler menggunakan potensial *Lennard-Jones* dalam sistem terisolasi (*ensemble* mikrokanonik). Jumlah molekul, energi total sistem dan luas kotak simulasi telah divariasikan. Untuk menghitung perubahan posisi digunakan algoritma Verlet. Sifat fisis yang ditentukan dalam simulasi adalah temperatur dan energi total sistem untuk menentukan adanya fase transisi. Dari hasil simulasi, terdapat kesesuaian antara simulasi dengan gas argon dan tidak diperoleh adanya fase transisi.

Kata kunci: Simulasi dinamika molekuler, argon, potensial *Lennard-Jones*, *ensemble* mikrokanonik, algoritma Verlet.

ABSTRACT

A simulation to determine the physical properties of argon gas has been carried out using molecular dynamics with *Lennard-Jones* potential in an isolated system (microcanonical ensemble). The number of molecules, total energy system and wide of simulation box were varied. To calculate vibration of position we use verlet algorithm. Physical properties specified in simulation are temperature and total energy system to determine the existence of phase transition. The simulation has a good agreement with the real argon gas without presence of phase transition.

Key words: Molecular dynamics simulations, argon, *Lennard-Jones* potential, microcanonical ensemble and Verlet algorithm.

*Korenspondensi:
email: wbnurdin@gmail.com

PENDAHULUAN

Simulasi komputer merupakan suatu teknik meniru operasi-operasi atau proses-proses yang terjadi dalam suatu sistem dengan bantuan perangkat komputer dan dilandasi oleh beberapa asumsi tertentu sehingga sistem tersebut bisa dipelajari secara ilmiah (Nurdin, 2001; Nurdin, 2000:2001). Simulasi komputer memainkan peranan penting dalam penelitian ilmiah, karena ia bertindak sebagai jembatan antara besaran mikroskopik, besaran waktu dan besaran makroskopik laboratorium. Dalam fisika komputasi, simulasi komputer dikategorikan menjadi dua yaitu dinamika molekul (*molecular dynamic/MD*) dan *Monte Carlo (MC)*. Dinamika molekul merupakan suatu teknik simulasi komputer dimana perubahan waktu dari interaksi antar atom yang diikuti dengan mengintegrasikan persamaan gerak antar atom. Oleh karena itu, berbeda dengan metode Monte Carlo, dinamika molekul adalah teknik deterministik yaitu memberikan pengaturan awal dari parameter-parameter, dan perubahan waktu berikutnya keadaan sistem dapat ditentukan (Mutiar, 2005; Nurdin, 2001; Nurdin, 2000:2001).

Menurut Boltzman, dengan jangka waktu yang cukup, suatu sistem dapat memiliki semua konfigurasi yang mungkin terjadi. Dengan kata lain, sistem tersebut akan pernah berada pada setiap koordinat dalam ruang fasa. Ruang fasa merupakan informasi keadaan mikroskopis sistem. Informasi ini lalu digunakan untuk memperoleh keadaan makroskopis sistem dan memprediksi ruang fasa pada waktu selanjutnya. Ruang fasa yang berbeda dapat menghasilkan keadaan makroskopis yang

sama. Dengan kata lain, suatu keadaan makroskopis belum pasti berasal dari satu keadaan mikroskopis yang unik ilmiah (Nurdin, 2001; Nurdin, 2000:2001).

Dalam dinamika molekuler digunakan ketiga Hukum Newton:

1. Suatu partikel akan tetap diam atau bergerak dengan kecepatan tetap kecuali jika menerima gaya-gaya eksternal dengan resultan tidak sama dengan nol.
2. Jika partikel massa m menerima gaya, \vec{F} maka partikel tersebut mengalami percepatan sebesar

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} \quad (1)$$

3. Jika partikel i memberikan gaya pada partikel j sebesar \vec{F}_{ij} maka partikel j memberikan gaya pada partikel i sebesar $-\vec{F}_{ij}$.

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} \quad (2)$$

Dalam suatu sistem yang mempunyai energi kinetik dan jumlah molekul tetap, momentum masing-masing molekul dapat berubah-ubah akibat interaksi satu sama lain, namun momentum total tidak akan berubah. Momentum total sistem dapat diamati untuk memeriksa kebenaran simulasi *ensemble* mikrokanonikal, dengan

$$\frac{d}{dt} (\sum_i p_i) = \frac{d}{dt} (\sum_i m_i v_i) = 0 \quad (3)$$

di mana m adalah massa molekul dan p adalah momentum molekul.

Energi total suatu sistem tersusun dari energi potensial sistem dan energi kinetik sistem. Energi potensial adalah jumlah dari semua energi potensial molekul-molekul dalam sistem. Untuk sistem terisolasi di mana tidak ada energi yang menembus batas, sistem bersifat

konservatif. Konservasi energi ini adalah salah satu cara untuk memeriksa kebenaran simulasi *ensemble* mikrokanonikal (Allen, 2004).

$$U = \sum_i U_i(R_i) \quad (4)$$

R_i adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul $R_i = (R_{i1}, R_{i2}, R_{i3}, \dots, R_{iN})$

Energi kinetik adalah jumlah dari energi kinetik setiap molekul

$$K = \sum_i K_i(v_i) \quad (5)$$

dengan $K_i = \frac{1}{2} m_i (v_i)^2 = \frac{p_i^2}{2m_i}$

Untuk sistem terisolasi dimana tidak ada energi yang menembus sistem bersifat konservatif atau energi sistem konstan. Konservasi energi ini adalah salah satu cara untuk memeriksa kebenaran simulasi *ensemble* mikrokanonikal. Temperatur adalah suatu skala dari energi kinetik molekul-molekul penyusunnya. Untuk tiga dimensi, hubungan antara energi kinetik dengan temperatur adalah

$$K = \frac{3}{2} N k_B T \quad (6)$$

$$\text{atau } T = \frac{2}{3} \frac{K}{N k_B} \quad (7)$$

dimana K adalah energi kinetik total sistem, N jumlah molekul, k_B konstanta Boltzman dan T temperatur.

Model Interaksi Antar Molekul

Model interaksi antar molekul yang diperlukan adalah hukum gaya antar molekul, yang ekuivalen dengan fungsi energi potensial antar molekul. Pemilihan model interaksi antar molekul sangat menentukan kebenaran simulasi dari sudut pandang fisika. Karena berada dalam skala atomik, interaksi secara prinsip harus diturunkan secara kuantum, di mana berlaku prinsip ketidakpastian *Heisenberg*.

Namun kita dapat melakukan pendekatan mekanika klasik di mana atom atau molekul dianggap sebagai suatu titik massa (Haile, 1992). Untuk N jumlah atom dalam suatu simulasi maka fungsi energi potensial adalah $U(R_i)$ di mana R_i adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $R_i = \{R_{i1}, R_{i2}, R_{i3}, \dots, R_{iN}\}$. Model energi potensial yang sederhana dan umum digunakan adalah *pair-wise*, di mana potensial adalah jumlah dari interaksi antara dua molekul yang diisolasi.

Model energi potensial *Lennard-Jones* antara dua molekul yang digunakan:

$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (8)$$

n dan m adalah bilangan bulat positif yang dipilih $n > m$, dan i, j adalah indeks dari molekul, $R_{ij} \equiv |R_i - R_j|$ atau jarak antara molekul i dan j . Sedangkan σ adalah parameter jarak, dan ε adalah parameter yang menyatakan kekuatan interaksi. Pilihan yang umum untuk m dan n adalah $m = 6$ dan $n = 12$, sehingga persamaan menjadi (Stote dkk, 2011):

$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (9)$$

Persamaan Gerak Diskrit

Dinamika molekul mengamati posisi dan derivasinya, antara lain kecepatan dan percepatan. Persamaan gerak ini harus dijadikan diskrit agar dapat dipecahkan secara numerik. Pendiskritan ini dilakukan dengan metoda beda hingga (*finite-difference*) dengan langkah waktu (*time step*) Δt . Metode beda hingga dilakukan dengan mengadakan ekspansi *Taylor*. Suatu metoda beda hingga aproksimasi solusi sebuah persamaan

diferensial, akan selalu menimbulkan kesalahan pemotongan (*truncation error*).

Metoda yang dipilih harus memberikan kesalahan yang kecil namun tidak terlalu kompleks sehingga memerlukan waktu komputasi yang lama. Metoda integrasi persamaan gerak yang digunakan pada penelitian ini adalah algoritma *Verlet*. Metode beda hingga

sederhana telah banyak digunakan dalam dinamika molekul yakni algoritma stomer orde tiga. Pertama digunakan oleh *Verlet* dan dikenal untuk simulator sebagai metode *Verlet* yaitu kombinasi dari dua ekspansi Taylor yang digabungkan. Pertama seri Taylor untuk posisi dari waktu t menuju $(t + \Delta t)$:

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{3!} \frac{d^3x(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4) \quad (10)$$

Kemudian seri Taylor dari t kembali ke $(t - \Delta t)$

$$x(t - \Delta t) = x(t) + \frac{dx(t)}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2x(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 - \frac{1}{3!} \frac{d^3x(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4) \quad (11)$$

jika persamaan (10) dan (11) ditambahkan maka menghasilkan:

$$x(t + \Delta t) = 2x(t) - x(t - \Delta t) + \frac{d^2x(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4) \quad (12)$$

Ini adalah algoritma *Verlet* untuk posisi yang memiliki kesalahan pemotongan lokal $O((\Delta t)^4)$.

METODE

Alat yang akan digunakan dalam penelitian ini adalah komputer dengan sistem operasi Windows 7 dan perangkat lunak Matlab version 7.10.0.499 (R2010a).

Simulasi dinamika molekul terdiri atas dua tahapan sebagai berikut:

1. Tahap inisialisasi berupa pemasukan panjang kotak simulasi, energi sistem, massa argon, konstanta *Boltzman*, jumlah molekul gas argon, nilai parameter jarak antar molekul *Lennard-Jones*, nilai parameter interaksi antar molekul *Lennard-Jones*, jumlah *time step*, dan selang waktu (Δt).
2. Tahap repetisi yang terdiri atas:
 - a) Pembuatan matriks X berbentuk baris berdasarkan jumlah molekul pada sumbu x dan matriks Y berdasarkan jumlah molekul pada sumbu y

berbentuk kolom dan menggabungkan matriks tersebut untuk menentukan posisi awal molekul.

- b) Penghitungan energi potensial tiap molekul berdasarkan molekul tetangga terdekatnya menurut persamaan (9). Molekul-molekul terbagi dalam tiga golongan berdasarkan tetangga terdekatnya. Pertama, molekul dengan empat tetangga terdekat yang berinteraksi dengan tiga molekul tetangga terdekatnya. Kedua, molekul dengan lima tetangga terdekat yang terdapat pada pinggir bawah, pinggir atas, pinggir kanan dan pinggir kiri berinteraksi dengan lima molekul terdekatnya. Ketiga, molekul dengan delapan tetangga terdekat yang terdapat pada posisi tengah berinteraksi dengan 8 molekul

- terdekatnya.
- Penghitungan energi kinetik tiap molekul yaitu selisih jumlah energi tiap molekul dan energi potensial tiap molekul serta menghitung energi kinetik rata-rata untuk memperoleh besar temperatur simulasi.
 - Penghitungan kecepatan tiap molekul dari energi potensial per molekul.
 - Nilai langkah (4) digunakan sebagai kecepatan awal sebagai syarat pergerakan tiap molekul dan penentuan posisi berikutnya menggunakan algoritma Verlet.
 - Langkah (2)-(5) dilakukan sebanyak *time step* berdasarkan tahap inisialisasi.
 - Membuat grafik hubungan temperatur terhadap waktu dan energi sistem.
 - Memprediksi kemungkinan terjadinya fase transisi.

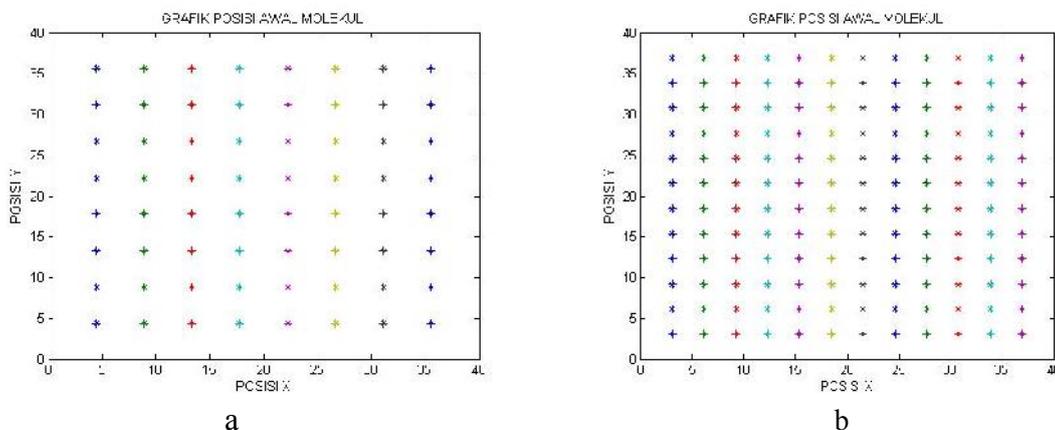
HASIL DAN PEMBAHASAN

Besaran-besaran yang digunakan dalam simulasi adalah tidak berdimensi. Fungsi-fungsi dari besaran energi sistem, energi potensial, massa argon, kecepatan, parameter jarak antar molekul, parameter interaksi antar molekul, energi kinetik, dan temperatur dikalibrasi setelah hasil simulasi

diperoleh. Variabel-variabel fisis untuk jumlah molekul (N) sebanyak 64.144 molekul, panjang kotak simulasi sebesar 40×10^{-9} m dengan energi sistem sebesar 1×10^{-21} J. Selang waktu (Δt) menyatakan waktu respon molekul untuk berpindah. Selang waktu (Δt) yang digunakan dalam simulasi ini sebesar 1×10^{-6} , *time step* sebanyak 1000. Molekul-molekul bergerak secara acak di dalam kotak simulasi dan jika molekul bertumbukan dengan dinding kotak simulasi maka molekul tersebut akan mengalami tumbukan lenting sempurna.

1. Posisi Awal Molekul

Molekul berada dalam kotak berbentuk persegi, terletak pada posisi teratur untuk sumbu x dan y dengan jumlah molekul N yang sama tiap sumbu. Gambar 1 menunjukkan posisi awal molekul dengan 64 dan 144 pada $P 40 \times 10^{-9}$ m. Jumlah molekul gas argon dalam setiap sumbu x dan y dibuat sama agar molekul dapat terdistribusi seragam dalam kotak simulasi. Posisi awal molekul diletakkan secara teratur adalah jarak antar molekul teratur. Jarak antar molekul bergerak tidak teratur dengan menggunakan pembangkitan bilangan acak sebagai vibrasi.



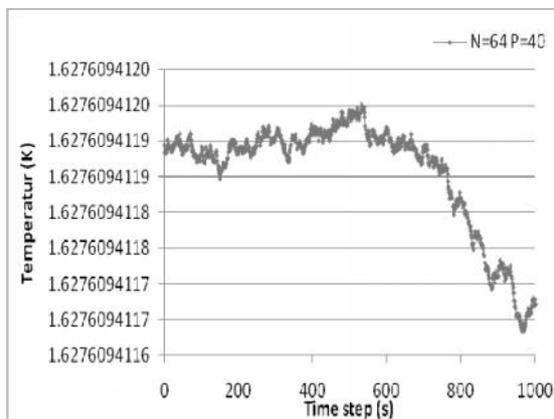
Gambar 1. Posisi awal molekul: a. $N=64$, $P=40 \times 10^{-9}$ m, b. $N=144$, $P=40 \times 10^{-9}$ m.

2. Hubungan antara *time step* terhadap Temperatur

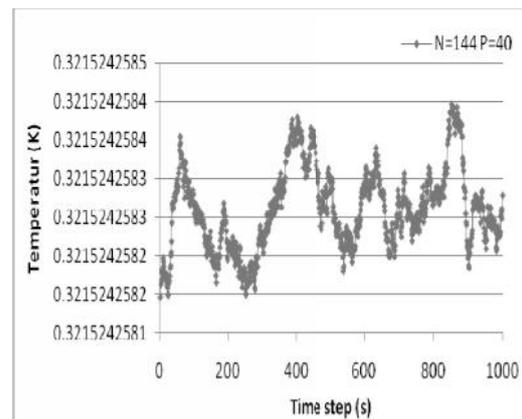
Untuk menentukan hubungan antara temperatur dan *time step* dalam simulasi dinamika gas argon, digunakan persamaan (9) untuk menghitung energi potensial setiap molekul. Molekul-molekul terbagi dalam tiga golongan berdasarkan tetangga terdekatnya. Pertama, molekul dengan empat tetangga terdekat yang terdapat pada pojok kiri bawah, pojok kiri atas, pojok kanan atas dan pojok kanan bawah berinteraksi dengan tiga molekul tetangga terdekatnya. Kedua, molekul dengan empat tetangga terdekat kedua yang terdapat pada

pinggir bawah, pinggir atas, pinggir kanan dan pinggir kiri berinteraksi dengan lima molekul terdekatnya. Ketiga, molekul dengan delapan tetangga terdekat yang terdapat pada posisi tengah-tengah berinteraksi dengan delapan molekul terdekatnya.

Energi potensial tiap molekul digunakan untuk menentukan energi kinetik tiap molekul dengan menggunakan persamaan energi total. Nilai energi kinetik tiap molekul digunakan untuk menentukan kecepatan tiap molekul. Posisi baru molekul diperoleh dengan menggunakan algoritma Verlet.



a



b

Gambar 2. Hubungan *time step* (*t*) terhadap suhu (*T*) pada energi sistem 1×10^{-21} J (a). *N*=64, (b). *N*=144

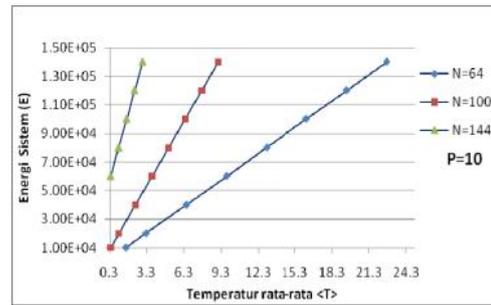
Hubungan antara *time step* terhadap temperatur dapat dilihat pada Gambar 2. Hasil yang diperoleh selama simulasi dengan masukan energi sistem sebesar 1×10^{-21} J, *time step* sebanyak 1000 dengan panjang kotak 40×10^{-9} m. Gambar 2(a) memperlihatkan temperatur yang menurun seiring dengan meningkatnya *time step* dengan temperatur rata-rata sebesar 1.62761 K. Sedangkan pada gambar 2(b)

temperatur mengalami fluktuasi seiring bertambahnya *time step* dengan temperatur rata-rata sebesar 0.32152 K. Perubahan jumlah molekul dari setiap sistem untuk panjang kotak 40×10^{-9} m dengan masukan energi sistem 10^{-21} J mengakibatkan temperatur yang dihasilkan untuk setiap sistem semakin menurun. Hal ini disebabkan karena jarak antar molekul kecil dengan bertambahnya jumlah

molekul. Jarak antar molekul kecil mengakibatkan energi potensial menjadi besar. Sehingga energi kinetik dan temperatur yang dihasilkan akan semakin menurun. Hubungan antara *time step* terhadap temperatur dalam sistem cenderung konstan. Temperatur mengalami fluktuasi yang berarti gerakan-gerakan molekul terjadi dengan kecepatan yang berubah-ubah sehingga menyebabkan temperatur yang dihasilkan sistem pada simulasi ini tidak menuju pada suatu titik tertentu.

3. Hubungan Temperatur terhadap Energi Sistem

Data simulasi dinamika molekul gas argon memakai besar energi sistem yang dimasukkan adalah 1×10^{-21} J, 2×10^{-21} J, 4×10^{-21} J, 6×10^{-21} J, 8×10^{-21} J, 10×10^{-21} J, 12×10^{-21} J dan 14×10^{-21} J. Gambar 3 memperlihatkan grafik hubungan antara temperatur rata-rata-terhadap energi sistem dengan panjang kotak 10^{-8} m. Simbol kotak berwarna biru merupakan hasil rata-rata dari fluktuasi temperatur sebagai fungsi dari waktu dengan jumlah N 64 untuk energi sistem yang berbeda-beda. Temperatur rata-rata yang dihasilkan meningkat seiring bertambahnya energi sistem. Pada sistem dengan panjang kotak 10^{-8} m, temperatur mencapai titik tertinggi dengan temperatur rata-rata sebesar 22.766 K dengan jumlah molekul 64. Simbol kotak berwarna merah merupakan hasil rata-rata dari fluktuasi temperatur sebagai fungsi dari waktu dengan N 100 untuk berbagai energi sistem.



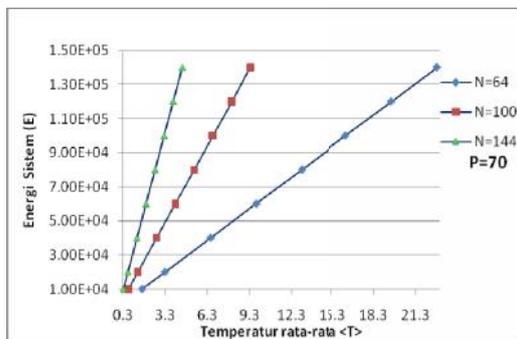
Gambar 3. Grafik hubungan suhu rata-rata terhadap energi sistem

Temperatur rata-rata sistem berkurang dengan bertambahnya jumlah molekul dalam kotak simulasi. Simbol segitiga berwarna hijau merupakan hasil rata-rata dari fluktuasi temperatur sebagai fungsi dari waktu dengan jumlah molekul 144 untuk energi sistem berbeda-beda. Temperatur rata-rata sistem semakin menurun seiring bertambahnya jumlah molekul. Pada sistem dengan jumlah molekul 144 terlihat bahwa temperatur bernilai positif jika energi sistem sebesar 6×10^{-21} J.

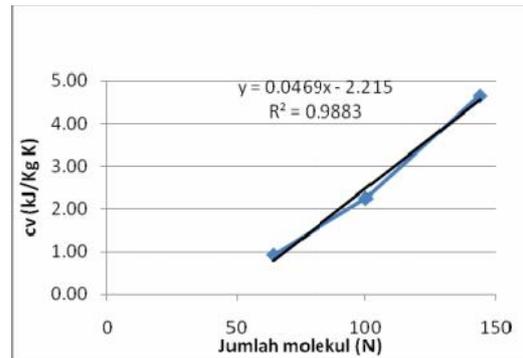
Selanjutnya dari Gambar 4 dan 5 tampak bahwa temperatur rata-rata berubah linear dengan meningkatnya energi sistem. Perubahan temperatur dalam sistem menunjukkan grafik yang linear antara temperatur rata-rata dengan energi sehingga dapat dinyatakan bahwa tidak terjadi fase transisi pada sistem simulasi ini. Selain itu, simulasi dinamika molekul gas argon menghasilkan temperatur rata-rata sistem dalam simulasi bernilai besar jika jarak antar molekulnya semakin besar. Untuk memperoleh jarak antar molekul yang besar maka panjang kotak simulasi harus besar dan jumlah molekulnya kecil sehingga energi potensialnya akan kecil. Kondisi ini mengakibatkan energi kinetik dari simulasi akan semakin besar, karena

sistem yang digunakan dalam simulasi dinamika molekul gas argon ini merupakan sistem yang terisolasi (*ensemble* mikrokanonik). Selain itu, energi sistem sangat mempengaruhi temperatur yang dihasilkan dalam proses simulasi dinamika molekul gas argon. Dengan meningkatnya energi sistem yang dimasukkan maka temperatur yang dihasilkan pun akan meningkat pula.

Untuk menguji kebenaran simulasi maka dilakukan pendekatan dengan membandingkan nilai kapasitas panas gas argon yang dihasilkan dalam simulasi dengan kapasitas panas gas argon yang telah didapatkan secara eksperimen. Nilai kapasitas panas gas argon yang dihasilkan dalam simulasi untuk jumlah molekul 64 adalah 0.92 kJ/kg K. Kapasitas panas gas argon untuk jumlah molekul 100 adalah 2.24 kJ/kg K dan kapasitas panas gas argon untuk jumlah molekul 144 adalah 4.64 kJ/kg K.



Gambar 4. Grafik hubungan suhu rata-rata $\langle T \rangle$ terhadap energi sistem (E).



Gambar 5. Grafik hubungan jumlah molekul terhadap nilai (c_v) pada simulasi.

Gambar 5 menunjukkan grafik hubungan antara jumlah molekul dengan kapasitas panas yang diperoleh dalam simulasi (c_v) gas argon yang diperoleh simulasi. Nilai kemiringan dari persamaan regresi $y=0.0469 x - 2.2215$ merupakan nilai kapasitas panas (c_v) yang diperoleh simulasi sebesar 0.0469 tanpa dimensi. Nilai kapasitas panas gas argon yang diperoleh simulasi jika dikalikan dengan besaran 1 mol gas Argon dengan berat 39,95 gram, berisi $6,24 \times 10^{23}$ partikel dan satuan 10^{-24} kJ diperoleh nilai 0.690 kJ/kg K yang mendekati nilai kapasitas panas yang diperoleh secara eksperimen sebesar 0.321 kJ/kg K (5). Perbedaan nilai kapasitas panas (c_v) hasil simulasi dengan nilai kapasitas panas (c_v) secara eksperimen dikarenakan keterbatasan simulasi meliputi jumlah molekul yang dihitung sangat kecil jika dibandingkan dengan jumlah molekul gas dalam bilangan Avogadro mencapai 6.02×10^{23} partikel per mol.

KESIMPULAN

Pembuatan simulasi dinamika molekul gas argon dengan menggunakan potensial *Lennard-Jones* untuk menentukan hubungan antara energi sistem terhadap temperatur dan menentukan hubungan antara waktu terhadap temperatur. Dari hubungan linear antara energi sistem dengan temperatur dapat diketahui tidak terjadinya fase transisi pada sistem *Lennard-Jones* dan membandingkan nilai kapasitas panas (c_v) yang dihasilkan simulasi dengan nilai kapasitas panas (c_v) secara eksperimen untuk melihat sejauh mana kebenaran dari simulasi yang telah dibuat. Energi sistem dalam simulasi gas argon berbanding lurus terhadap temperatur yang dihasilkan, semakin besar energi total sistem maka semakin besar temperatur yang dihasilkan. Pada sistem simulasi dinamika molekul dengan potensial *Lennard-Jones* tidak terdapat fasa transisi karena grafik hubungan antara temperatur rata-rata terhadap energi sistem bergerak linear.

DAFTAR PUSTAKA

- Allen MP. 2004. *Introduction To Molecular Dynamics Simulation*, John Van Neumann Institute For Computing.
- Ercolessi F. 1997. *A Molecular Dynamics Primer*. (<http://Www.Sissa.It/Furio/Md>). Accessed October 31 2011
- Haile JM. 1992. *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods*, John Wiley & Sons, Inc.
- Mutiara AB. 2005. *Panduan Praktis Simulasi Komputer Untuk Sain Dan Teknik*. Jakarta : Penerbit Gunadarma.
- Nurdin WB. 2001. *Mechanik Fur Diskrete Zeit And Dynamik Von Spinsystemen*, Shaker Verlag, Isbn 3-8265-8526-7.
- Nurdin WB, Schotte KD. 2001, *Dynamical Temperature Study For Classical Planar Spin Systems*, Cond-Mat/0109982, Physica A 308, 209-226.
- Nurdin WB, Schotte KD. 2000, *Dynamical Temperature For Spin Systems*, Physical Review E 61, 3579.
- Stote R, Dejaegere A, Kuznetsov D, Falquet L. *CHARMM Molecular Dynamics Simulations*. http://Www.Ch.Embnet.Org/MD_Tutorial/. Accessed September 22 2011.