

Abdullah Aufa Fuad, 2015. Kajian Ab Initio Molecular Dynamic Struktur dan Sifat Elektrik Gold Nanoparticle. Skripsi S1 fisika ini di bawah bimbingan Andi Hamim Zaidan, M.Si Ph.D dan Drs. Adri Supardi M.Si, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga, Surabaya.

ABSTRAK

Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui karakteristik struktur dan sifat elektrik *gold nanoparticle* (GNP) melalui kajian *ab initio molecular dynamic* (AIMD). Karakteristik struktur dibahas melalui analisa jumlah ikatan, distribusi sudut, dan fungsi distribusi radial. Sifat elektrik dibahas melalui analisa struktur pita dan rapat keadaan. Sampel GNP yang digunakan adalah likuid, amorf, dan icosahedral. Perhitungan dilakukan numerik menggunakan perangkat utamanya SIESTA. GNP likuid didominasi jumlah ikatan 9, GNP amorf 10, GNP icosahedral 18. Distribusi sudut ikat GNP likuid punya 1 puncak di 60° , GNP amorf punya 4 puncak di 60° , 90° , 120° , 175° , GNP icosahedral punya lengkap 6 puncak. Celah internal GNP likuid $2,7 \text{ \AA}$, amorf $2,8 \text{ \AA}$, icosahedral $1,9 \text{ \AA}$. Analisa struktur pita menunjukkan lebar celah pita GNP likuid $0,040 \text{ eV}$, amorf $0,071 \text{ eV}$, icosahedral $0,200 \text{ eV}$. Adapun lebar celah pita dari analisa rapat keadaan untuk GNP likuid adalah $0,053 \text{ eV}$, amorf $0,085 \text{ eV}$, icosahedral $0,200 \text{ eV}$.

Kata kunci: AIMD, SIESTA, GNP, jumlah ikatan, distribusi sudut, fungsi distribusi radial, struktur pita, rapat keadaan.