

Daftar Isi

Lembar Judul	i
Lembar Pengesahan	ii
Abstrak	iv
Kata Pengantar	vi
Daftar Isi	ix
Daftar Tabel	xi
Daftar Gambar	xii
 Bab I: Pendahuluan	
1. Latar Belakang	1
1.1 <i>Gold Nanoparticles</i>	1
1.2 Struktur dan Sifat Elektrik	3
2. Rumusan Masalah	5
3. Batasan Masalah	6
4. Tujuan Penelitian	6
5. Manfaat Penelitian	7
 Bab II: Tinjauan Pustaka	
1. Properti Sistem	8
1.1 Emas (Aurum)	8
1.2 Icosahedral	9

2. Ab Initio Molecular Dynamic	11
2.1 Molecular Dynamic	11
2.2 MD Klasik	12
2.3 Teknik Ab Initio	13
2.4 <i>Density Functional Theory</i>	16
2.5 Fungsional Energi Harris	19
3. SIESTA Sebagai Meode	21
4. Analisa Struktur	24
4.1 Fungsi Distribusi Radial	24
4.2 Urutan Cincin	26
4.3 Distribusi Sudut Ikat	27
5. Analisa Sifat Elektrik	30
5.1 Pita Energi	30
5.2 Celah Pita GNP	31
5.3 Rapat Keadaan	32

Bab III: Metode Penelitian

1. Waktu dan Tempat Penelitian	33
2. Skema Perhitungan	33
3. Perangkat Lunak	34
4. Prosedur Simulasi	36
4.1 Praproses	37
4.1.1 Menentukan Struktur	37
4.1.2 Menentukan Parameter Iterasi	38
4.1.3 Menentukan Parameter MD	40

4.2 Proses Pengambilan Data	42
4.3 Pascaproses	42
4.3.1 Visualisasi dan Jumlah Ikatan	42
4.3.2 Distribusi Sudut Ikat dan FDR	43
4.3.3 Rapat Keadaan dan Struktur Pita	43
4.4 Menganalisis Data	44
5. Jadwal penelitian	44
6. Anggaran Dana	45
 Bab IV: Hasil dan Pembahasan	
1. Kajian Struktur	46
1.1 Visual	46
1.2 Jumlah Ikatan	49
1.3 Distribusi Sudut Ikat	53
1.4 FDR	56
2. Kajian Sifat Elektrik	59
2.1 Rapat Keadaan	59
2.2 Struktur Pita	61
3. Validitas Penelitian	64
 Bab V: Kesimpulan dan Saran	
1. Kesimpulan	65
2. Saran	66
Daftar Pustaka	67

Daftar Gambar

No	Nama Gambar	Halaman
2.1	Struktur icosahedral	10
2.2	Jaring icosahedral	10
2.3	Grafis yang merepresentasikan FDR	25
2.4	Lingkungan FCC gambar bidang	27
2.5	Sudut ikat oleh triplet partikel	28
2.6	Distribusi sudut ikat cincin berbagai ukuran	29
3.1	Skema perhitungan <i>ab initio</i>	34
3.2	Skenario tahapan simulasi GNP likuid dan amorf	37
4.1	Visualisasi struktur GNP likuid	47
4.2	Visualisasi struktur GNP amorf	47
4.3	Visualisasi struktur GNP icosahedral	48
4.4	Simetri yang teramati dari GNP icosahedral	49
4.5	Visualisasi jumlah ikatan GNP likuid	50
4.6	Visualisasi jumlah ikatan GNP amorf	51
4.7	Visualisasi jumlah ikatan GNP icosahedral	52
4.8	Grafik distribusi sudut ikat ketiga sampel GNP	54
4.9	Grafik FDR ketiga sampel GNP	57
4.10	Grafik rapat keadaan ketiga sampel GNP	60
4.11	Grafik celah pita energi ketiga sampel GNP	62

Daftar Tabel

No	Nama Tabel	Halaman
2.2	Ringkasan data fisika-kimia unsur Aurum	8
3.1	Parameter iterasi GNP likuid dan Amorf	38
3.2	Parameter iterasi GNP icosahedral	40
3.3	Parameter MD GNP likuid dan amorf	41
3.4	Parameter MD GNP icosahedral	42
3.5	Jadwal Pengerjaan Penelitian	44
3.6	Anggaran Dana	45
4.1	Jumlah ikatan GNP likuid	50
4.2	Jumlah ikatan GNP amorf	51
4.3	Jumlah ikatan GNP icosahedral	53
4.4	Output nilai eigen yang akan diplot di rapat keadaan	59
4.5	Nilai celah pita perbandingan dua tinjauan	63

