

Hanif Roikhatul Jannah, 081211332006, 2016, Kajian *Ab Initio Molecular Dynamic* Struktur, Sifat Listrik dan Mekanik Nikel Titanium (NiTi) sebagai *Orthodontic Wire Material*. Skripsi ini di bawah bimbingan Andi Hamim Zaidan, Ph.D. dan Drs. Adri Supardi, M.S., Program Studi Fisika, Departemen Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga.

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian kajian *ab initio molecular dynamic* struktur, sifat listrik dan mekanik Nikel Titanium (NiTi) sebagai *orthodontic wire material*. Kajian dilakukan dengan metode *molecular dynamic* yang dikombinasikan dengan *density functional theory* (DFT) atau disebut *ab initio molecular dynamic* menggunakan program komputer SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousand of Atoms*). Simulasi dinamika molekul merupakan suatu sistem simulasi komputer yang mengamati interaksi pergerakan antar molekul dalam jangka waktu tertentu. Hasil penelitian menunjukkan bahwa dengan dilakukannya relaksasi struktur dengan variasi *lattice constant* menyebabkan terjadinya dislokasi atau pergeseran atom. Pergeseran atom ini terjadi akibat adanya energi mekanik yang diberikan tegangan sehingga menimbulkan deformasi plastis atau perubahan dimensi secara permanen. Nikel Titanium mempunyai lebar celah pita sebesar 1,70 eV sehingga dapat disimpulkan bahwa Nikel Titanium termasuk bahan semikonduktor. Nikel Titanium mempunyai nilai modulus bulk sebesar 89,00 GPa yang terjadi pada *lattice constant* 6,09 Amstrong, volume pertimbangan 226,28 Å³, energi minimum - 10233,48 eV.

Kata Kunci: Dinamika Molekul, DFT, Nikel Titanium

Hanif Roikhatul Jannah, 081211332006, 2016, Ab initio Molecular Dynamics Study of Structure, Electrical and Mechanical Properties of Nickel Titanium (NiTi) as Orthodontic Wire Material. This final assignment is under guidance Andi Hamim Zaidan, Ph.D. and Drs. Adri Supardi, M.S., Physics Department, Faculty of Science and Technology, Airlangga University.

ABSTRACT

Ab initio molecular dynamics studies of structure, electrical and mechanical properties of Nickel Titanium (NiTi) as orthodontic wire material have been done. This studies used density functional theory (DFT) method or ab initio molecular dynamic used SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousand of Atoms). Molecular dynamics simulations is a numerical simulation that observes movement of interaction between molecules in a specified period. The results showed that relaxation structure with lattice constant variations caused frictions of atom. This atom frictions caused by mechanical energy which supplied from the strain, so that causing plastic deformation or dimensional change permanently. Nickel Titanium has a bandgap of 1,70 eV, so it can be concluded that the Nickel Titanium include semiconductor materials. Nickel Titanium has bulk modulus 89,00 GPa at lattice constant 6,09 Amstrong, volume 226,28 A³, and energy minimum -10233,47 eV.

Keywords: Molecular Dynamic, DFT, Nickel Titanium