

ABSTRAK

Enggar Alfianto, 2011. **Perhitungan Numerik Energi Total Keadaan Dasar Untuk Molekul Sederhana Dengan *Density Functional Theory***. Skripsi ini di bawah bimbingan Drs. Adri Supardi, M.S. dan Herri Trilaksana, S.Si, M.Si. Departemen Fisika, Fakultas Sains Dan Teknologi, Universitas Airlangga

DFT adalah metode pencarian energi menggunakan kerapatan muatan. DFT menggunakan persamaan Kohn-Sham yang merupakan persamaan numerik dari persamaan Schrödinger. Penelitian ini bertujuan untuk mencari keadaan dasar molekul-molekul sederhana secara numerik. Perhitungan dilakukan dengan memasukkan kode kedalam algoritma DFT. Hasil perhitungan energi pada atom Hidrogen sebesar $-0.445670 H_e$, Helium sebesar $-2.834835 H_e$, Besi sebesar $-1261.093055 H_e$, Tembaga sebesar $-1637.785861 H_e$, Platina sebesar $-17326.576369 H_e$, Germanium sebesar $-2073.807332 H_e$. Dapat disimpulkan bahwa hasil perhitungan DFT sesuai dengan hasil perhitungan LDA.

Kata Kunci : DFT, Energi keadaan dasar, Atom, Molekul, ABINIT, Kerapatan Muatan, LDA

ABSTRACT

Enggar Alfianto, 2011. **The Numerical Calculation of Total Ground State Energy for Simple Molecule within Density Functional Theory.** This thesis is under the guidance of Drs. Adri Supardi, M.S. and Herri Trilaksana, S.Si, M.Si. Physics Department , Faculty of Science and Technology , Airlangga University.

DFT is the energy pursuid method which the charge density used. DFT is analyzed by Kohn-Sham equation which is a numerical equation of the Schrodinger equation. This study aimed to quarry the ground state of simple molecules numerically . The calculation is done by code inserted into the DFT algorithm. Results of energy calculations on hydrogen atomic is $-0.445670 H_a$, $-2.834835 H_a$ for Helium , $-1261.093055 H_a$ for ferum, $-1637.785861 H_a$ for Copper, $-17326.576369 H_a$ for Platinum , $- 2073.807332 H_a$ for Germanium, and $-1.449542 H_a$ for H_2^+ . In conclusion that DFT calculation was equaled to LDA's.

Keyword : DFT, the ground state energy, Atomic, Molecular, ABINIT, The charge density, LDA