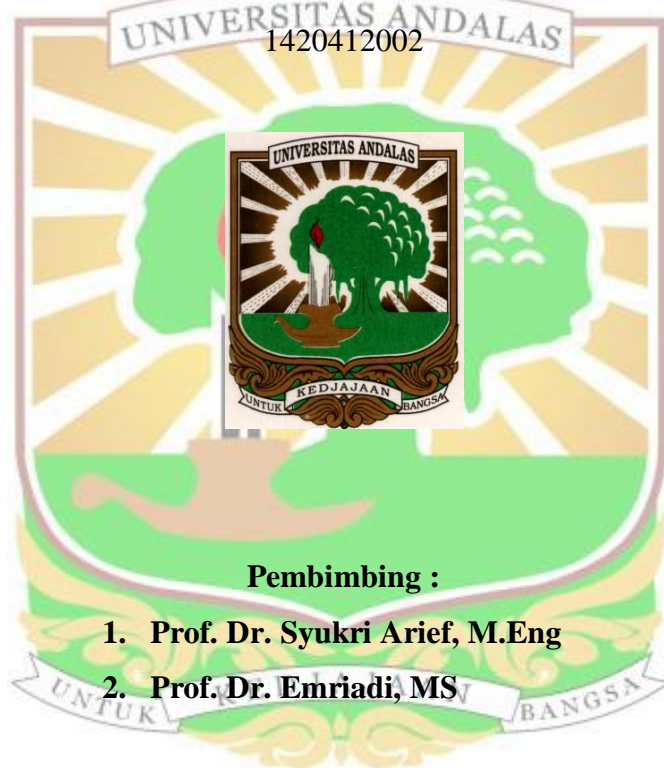


**Kajian Teoritis Kemampuan *Capping* Katekin, Kateku Tanat dan
Quarsetin Terhadap Nanopartikel Perak dengan Menggunakan
Metoda hibrid DFT/MM dan DFT-B**

TESIS

HARRY ADE SAPUTRA

1420412002



Pembimbing :

- 1. Prof. Dr. Syukri Arief, M.Eng**
- 2. Prof. Dr. Emriadi, MS**

**PROGRAM PASCASARJANA
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS ANDALAS
2016**

**Kajian Teoritis Kemampuan *Capping* Katekin, Kateku Tanat dan Quarsetin
Terhadap Nanopartikel Perak dengan Menggunakan Metode hibrid
DFT/MM dan DFT-B**

Oleh : Harry Ade Saputra

(Dibawah bimbingan : Prof. Dr. Syukri Arief, M.Eng dan Prof. Dr. Emriadi, MS)

Abstrak

Mekanisme interdifusi Katekin, Kateku tanat dan Quarsetin dipelajari dengan menggunakan metode hibrid DFT/MM dan DFT-B. Dari hasil simulasi dinamika molekular, diperoleh dua model penjatuhan untuk sampel Quarsetin, empat model penjatuhan untuk sampel Katekin dan tiga model penjatuhan untuk sampel Kateku tanat. Hasil optimasi adsorbat terisolasi memperlihatkan, Quarsetin memiliki energi gap sebesar 2,806 eV (DFT) dan 3,243 eV (DFT-B), yang jauh lebih kecil dibandingkan katekin dan kateku tanat dengan nilai 3,7 - 4,1 eV. Hasil optimasi model-model penjatuhan sampel memperlihatkan, semua adsorbat memiliki ikatan lemah (adsorpsi fisik) pada permukaan perak dengan energi adsorpsi kurang dari 100 kcal/mol (20-50 kcal/mol), sehingga ketiga senyawa dapat dikategorikan sebagai *capping agent* yang baik. Angka adsorpsi paling besar terdapat pada sampel quarsetin dengan nilai 41,9 kcal/mol (DFT/MM) dan 34,9 kcal/mol (DFT-B). Dari perbandingan hasil eksperimen yang dan data teoritis yang telah diperoleh, dapat disimpulkan bahwa metode hibrid DFT/MM dan DFT-B dapat digunakan untuk mempelajari proses penjatuhan dan interaksi senyawa katekin, kateku tanat dan quarsetin pada permukaan perak.

Kata kunci : Capping, Adsorpsi, DFTB dan hibrid DFT/MM

The Study of Capping of Catechine, Catechu Tannat and Quarsetine on Silver Nanoparticles by hybrid DFT/MM and DFT-B

by : Harry Ade Saputra

(Supervised by : Prof. Dr. Syukri Arief, M.Eng dan Prof. Dr. Emriadi, MS)

Abstract

Interdiffusion mechanism of Catechin, Catechutannic acid and Quercetin are studied by using hybrid DFT/MM and DFT-B method. But before conducting these experiment, we perform molecular dynamic simulations to find adsorbtion models probability of each compound. Two models adsorbtion of Quarsetin, four models for Catechin and three models for Catechutannic Acid have been obtained from molecular dynamic simulations. Quantum parameter of each compound, energy and properties adsorbtion models have been calculated and discussed. The theoretical results were found to be consistent with the experimental data reported. Futhermore, optimization adsorbtion model samples shows that all of adsorbates have weak bonds on the surface of silver nanoparticles. The mechanism can be calssified as strong physisorption, so that Catechin, Catechutannic acid and Quercetin can be categorized as good capping agent in synthesis of silver nanoparticles.

Key Word : Capping, Adsorpsi, DFTB and hibrid DFT/MM

