

**SELF-CONSISTENT-CHARGE DENSITY-FUNCTIONAL TIGHT-BINDING (SCC-DFTB)
STUDY ON THE ADSORPTION BEHAVIORS OF CO₂, H₂O, O₂, and CH₄ ON (111) γ -
Al₂O₃ SURFACE**

Alifah Humairo Zuhdy

19/438458/PA/18916

ABSTRACT

This study was conducted to predict the interaction between molecules CO₂, H₂O, O₂, and CH₄ with γ -Al₂O₃ surfaces using a self-consistent charge density functional tight-binding (SCC-DFTB) approach. This research aimed to interact (111) γ -Al₂O₃ with several molecules and to identify the binding energy, charge transfer, energy interaction and Density of States of γ -Al₂O₃ complexes after optimization.

The structure of the unit cell of γ -alumina (40 atoms) and (111) γ -Al₂O₃ surface was firstly optimized using the DFTB strategy. The geometry-optimized surface of γ -Al₂O₃ then interacted with several molecules. Lastly, the analysis of binding energy, Density of States (DOS) and transfer charge show the factor influencing the interaction.

In conclusion, Al_(III) and Al_(IV) were the most favorable site in the interaction of the surface with the molecules. This interaction caused slight structural rearrangement, and H₂O obtained the most potent interaction and indicating that the H₂O molecule binds tightly to the surface of γ -Al₂O₃, which due to the electrostatic interaction between the H₂O and the charged surface of γ -Al₂O₃. The value of energy interaction correlated with other values such as binding energy, bond distance, and transfer charge.

Keywords: (111) γ -Al₂O₃ surface, SCC-DFTB, Optimization

Studi Self-Consistent-Charge Density-Functional Tight-Binding pada Interaksi Adsorpsi dan Aktivasi CO₂, H₂O, O₂, dan CH₄ pada Permukaan (111) γ -Al₂O₃

Alifah Humairo Zuhdy

19/438458/PA/18916

INTISARI

Penelitian ini dilakukan untuk memprediksi interaksi antara molekul CO₂, H₂O, O₂, dan CH₄ dengan permukaan γ -Al₂O₃ dengan menggunakan pendekatan self-consistent-charge density-functional tight-binding (SCC-DFTB). Penelitian ini bertujuan untuk menginteraksikan (111) γ -Al₂O₃ dengan beberapa molekul dan mengidentifikasi energi ikat, transfer muatan, energi interaksi dan Densitas Keadaan kompleks γ -Al₂O₃ setelah optimasi.

Struktur sel satuan permukaan γ -alumina (40 atom) dan (111) γ -Al₂O₃ pertama kali dioptimalkan menggunakan strategi DFTB. Permukaan γ -Al₂O₃ yang dioptimalkan secara geometri kemudian berinteraksi dengan beberapa molekul. Terakhir, analisis binding energy, Density of States (DOS) dan transfer of charge untuk menunjukkan faktor-faktor yang mempengaruhi interaksi.

Kesimpulannya, Al (III) dan Al (IV) adalah situs yang paling disukai dalam interaksi permukaan dengan molekul. Interaksi ini menyebabkan sedikit penataan ulang struktural dan H₂O memperoleh interaksi terkuat dan menunjukkan bahwa molekul H₂O mengikat secara efektif ke permukaan γ -Al₂O₃, yang disebabkan oleh interaksi elektrostatik antara H₂O dan permukaan bermuatan γ -Al₂O₃. Nilai interaksi energi berkorelasi dengan nilai lain seperti energi ikat, jarak ikatan dan transfer muatan.

Kata kunci: (111) permukaan γ -Al₂O₃, SCC-DFTB, Optimasi