

SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR STRUKTUR ANTARMUKA (0001) α -ALUMINA/AIR: PENGARUH ION Ca²⁺ DAN Mg²⁺ PADA PENATAAN MOLEKUL AIR

Dewi Wijayanti
20/459293/PA/19954

INTISARI

Simulasi dinamika molekul struktur antarmuka (0001) α -alumina/air: Pengaruh ion Mg²⁺ dan Ca²⁺ pada penataan molekul air telah dilakukan. Tujuan penelitian ini adalah mempelajari penataan molekul air di dalam bidang alumina/air dan pengaruh ion Mg²⁺ dan Ca²⁺ terhadap perubahan struktur hidrasi yang terbentuk di bidang antarmuka alumina/air pada penataan molekul air di atas permukaan (0001) α -alumina. Analisis yang dilakukan meliputi 1d-RDF yang memuat RDF oksigen dan hidrogen terhadap alumina-air, alumina-air dengan ion acak, dan alumina-air dengan ion di dekat alumina serta RDF oksigen dan hidrogen terhadap ion Ca²⁺, Mg²⁺, dan Cl⁻. Analisis sudut θ air terhadap alumina.

Simulasi menggunakan metode dinamika molekul. Hasil penelitian menunjukkan bahwa sistem (0001) α -alumina/air menghasilkan 3 lapisan hidrasi yang terdefinisi dengan baik yakni pada jarak 2.2, 3, dan 4.85 Å dari permukaan alumina, secara berurutan. Lapisan hidrasi pertama dipenuhi dengan air yang berikatan hidrogen dengan oksigen pada permukaan alumina. Ion Mg²⁺ dan Ca²⁺ memiliki pengaruh terhadap penataan molekul air di atas permukaan alumina di mana ion Mg²⁺ memiliki pengaruh yang lebih kuat daripada ion Ca²⁺, ditandai dengan sudut θ dalam sistem Mg²⁺ yang lebih kecil daripada Ca²⁺ yaitu 39 dan 49° secara berurutan. Interaksi antara ion Mg²⁺ dengan air lebih kuat daripada ion Ca²⁺-air sehingga meminimalisir reorientasi molekul air dan mengurangi besarnya perubahan sudut θ .

Kata kunci: Air, alumina, Ca²⁺, Mg²⁺

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE α -ALUMINA(0001)/WATER INTERFACE STRUCTURE: EFFECT OF Mg^{2+} DAN Ca^{2+} ION ON WATER MOLECULE ARRANGEMENT

Dewi Wijayanti
20/459293/PA/19954

ABSTRACT

Molecular dynamics simulation of the α -alumina(0001)/water interface structure: effect of Mg^{2+} dan Ca^{2+} ion on the arrangement of water molecules has been carried out. The aims of this research is to study the arrangement of water molecules at the alumina/air interface and the effect of of Mg^{2+} dan Ca^{2+} ion on the changes in hydration structure formed at the alumina/water interface in the arrangement of water molecules on the α -alumina(0001) surface. The analysis includes 1d-RDF containing RDF of oxygen and hydrogen with respect to alumina-water, alumina-water with random ions, and alumina-water with ions near alumina, as well as RDF of oxygen and hydrogen with respect to Ca^{2+} , Mg^{2+} , and Cl^- ions. The analysis also examines the water angle θ with respect to alumina.

The simulation uses the molecular dynamics method. The results show that the α -alumina(0001)/water system produces three well-defined hydration layers at distances of 2.2, 3, and 4.85 Å from the alumina surface, respectively. The first hydration layer is filled with water molecules that form hydrogen bonds with the oxygen on the alumina surface. Mg^{2+} dan Ca^{2+} ion have an effect on the arrangement of water molecules on the surface of alumina, where the Mg^{2+} ion has a stronger influence than the Ca^{2+} ion, indicated by the θ angle in the Mg^{2+} system being smaller than that of Ca^{2+} , which are 39 and 49°, respectively. The interaction between the Mg^{2+} ion and water is stronger than the Ca^{2+} -water interaction, thereby minimizing the reorientation of water molecules and reducing the magnitude of the θ angle change.

Keywords: Alumina, Ca^{2+} , Mg^{2+} , water