

**KARAKTERISASI STRUKTURAL DAN DINAMIKA MOLEKUL AIR  
PADA ANTARMUKA  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) MENGGUNAKAN METODE *SELF-  
CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL TIGHT-BINDING***

Nova Ifadatunnisa  
20/462241/PA/20213

**INTISARI**

Penelitian mengenai karakterisasi struktural dan dinamika molekul air pada permukaan  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> telah dilakukan. Metode *Self Consistent Charge Density Functional Tight Binding* (SCC-DFTB) digunakan untuk melakukan simulasi dinamika molekul dalam penelitian ini. Penelitian ini bertujuan untuk menentukan interaksi antara  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012)-H<sub>2</sub>O selama simulasi dan setelah simulasi dinamika molekul. Analisis yang dilakukan meliputi perhitungan jumlah ikatan, fungsi distribusi radial (RDF), dan vibrasi molekul.

Simulasi dilakukan menggunakan pemodelan struktur  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012)-H<sub>2</sub>O yang dilakukan selama 22,2 ps pada temperatur 298,15 K. Algoritma yang digunakan adalah Velocity Verlet dengan pengendali temperatur thermostat Noose Hover. Simulasi dinamika molekul dilakukan pada ansambel kanonik (NVT) untuk menjaga jumlah partikel, volume, dan temperatur sistem tetap konstan. Hasil optimasi geometri menunjukkan struktur yang digunakan memiliki kestabilan yang baik dengan parameter kisi sesuai data eksperimen.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa permukaan  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> reaktif terhadap molekul air. Dalam sistem ini, molekul air yang teradsorpsi pada permukaan  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) membentuk ikatan Al-OH<sub>2</sub>. Sebagian dari Al-OH<sub>2</sub> terdisosiasi dan membentuk Al-OH<sup>-</sup>, dan >OH<sup>+</sup>. Selain itu, vibrasi molekul yang dihasilkan di antaranya vibrasi ulur dan tekuk Al-O pada bilangan gelombang 736 dan 605 cm<sup>-1</sup>, vibrasi tekuk H-O-H dari molekul air pada 1804 cm<sup>-1</sup>, dan vibrasi ulur O-H yang teradsorpsi di permukaan  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) pada bilangan gelombang 3300–3800 cm<sup>-1</sup>. Untuk memberikan pemahaman struktural dan dinamika molekul air pada permukaan  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012), metode simulasi dinamika molekul dengan SCC-DFTB dapat digunakan.

**Kata Kunci:** dinamika molekul, SCC-DFTB, aluminium oksida

## STRUCTURAL CHARACTERIZATION AND DYNAMICS OF WATER MOLECULES AT THE $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) INTERFACE USING THE SELF-CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL TIGHT-BINDING METHOD

Nova Ifadatunnisa  
20/462241/PA/20213

### ABSTRACT

Research on the structural characterization and molecular dynamics of water molecules on the  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) surface has been conducted. The Self Consistent Charge Density Functional Tight Binding (SCC-DFTB) method was used to perform molecular dynamics simulations in this study. The research aimed to determine the interactions between  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012)-H<sub>2</sub>O during and after molecular dynamics simulation. The analysis included calculations of the number of bonds, radial distribution function (RDF), and molecular vibration.

The research used  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012)-H<sub>2</sub>O structure modelling conducted for 22.2 ps at a temperature of 298.15 K. The algorithm used was Velocity Verlet with a Noose Hover thermostat temperature controller. Molecular dynamics simulations were performed in the canonical ensemble (NVT) to maintain constant particle number, volume, and system temperature. The geometry optimization results showed that the structure used had good stability with lattice parameters in accordance with experimental data.

The results showed that the  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> surface is reactive towards water molecules. In the system, water molecules adsorbed on the  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) surface formed Al-OH<sub>2</sub> bonds. Some of the Al-OH<sub>2</sub> dissociates and formed Al-OH<sup>-</sup>, and <sup>+</sup>OH. Additionally, the resulting molecular vibrations include Al-O stretching and bending vibrations at wavenumbers 736 dan 605 cm<sup>-1</sup>, H-O-H bending vibration from water molecules at 1804 cm<sup>-1</sup>, O-H stretching vibration adsorbed on the  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) surface at wavenumbers 3300-3800 cm<sup>-1</sup>. To provide understanding of structure and molecular dynamics of water on  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (012) surface, molecular dynamics simulation using the SCC-DFTB method can be used.

**Keywords:** molecular dynamics, SCC DFTB, aluminium oxide