KARAKTERISASI STRUKTURAL DAN DINAMIKA MOLEKUL AIR PADA ANTARMUKA ?-Al2O3 (012) MENGGUNAKAN METODE
SELF-CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL TIGHT-BINDING
NOVA IFADATUNNISA, Dr. Sc. Aulia Sukma Hutama, S.Si., M.Si. ; Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M.Eng.
Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL ..... **i**
HALAMAN PENGESAHAN ..... **iii**
SURAT PERNYATAAN ..... **iv**
PRAKATA ..... **vi**
DAFTAR ISI ..... **viii**
DAFTAR GAMBAR ..... **x**
DAFTAR LAMPIRAN ..... **xi**
INTISARI ..... **xii**
ABSTRACT ..... **xiii**
BAB I PENDAHULUAN **1**
I.1 Latar Belakang 1
I.2 Tujuan Penelitian 3
I.3 Manfaat Penelitian 4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS **5**
II.1 Tinjauan Pustaka 5
II.1.1 Struktur Aluminium Oksida (Al_2O_3) 5
II.1.2 Interaksi Alumina (Al_2O_3) dan Air 6
II.1.3 Simulasi Dinamika Molekuler 7
II.1.4 Self-Consistent Charge Density Functional Tight-Binding 10
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian 11
II.2.1 Perumusan Hipotesis I 11
II.2.2 Perumusan Hipotesis II 12
II.2.3 Rancangan Penelitian 12
BAB III METODE PENELITIAN **13**
III.1 Materi Penelitian dan Alat 13
III.1.1 Bahan Penelitian 13
III.1.2 Alat 13
III.2 Prosedur 13
III.2.1 Pemodelan α-Al_2O_3 dan permukaan α-Al_2O_3 (012) 13
III.2.2 Simulasi dinamika molekul permukaan α-Al_2O_3 (012)-H_2O 14
III.2.3 Analisis Data 15
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN **16**
IV.1 Karakterisasi Struktural α-Al_2O_3 16
IV.2 Simulasi Dinamika Molekul pada Antarmuka α-Al_2O_3 (012) 17
IV.3 Struktur dan Dinamika Antarmuka selama 10 ps 18
IV.4 Analisis Fungsi Distribusi Radial (RDF) 23
IV.5 Pembentukan Ikatan antara Al–Ow dan H–Oa 25
IV.6 Struktur dan Dinamika Antarmuka Setelah 10 ps (Analisis Vibrasi Molekul) 28
BAB V KESIMPULAN **30**
V.1 Kesimpulan 30
V.2 Saran 30

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
KARAKTERISASI STRUKTURAL DAN DINAMIKA MOLEKUL AIR PADA ANTARMUKA ?-Al2O3 (012) MENGGUNAKAN METODE
SELF-CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL TIGHT-BINDING
NOVA IFADATUNNISA, Dr. Sc. Aulia Sukma Hutama, S.Si., M.Si. ; Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M.Eng.
Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR PUSTAKA..... 32
LAMPIRAN..... 36