

ABSTRACT

This study was conducted to compare the structure and reaction at the surface with the well-established α -Al₂O₃ (001) crystal as well as to simulate the α -Al₂O₃ (110) surface by characterizing the system at the atomic level. The interfacial adsorption and dissociation of water molecules at the α -Al₂O₃ (110) surface was simulated using 2-dimensional density-functional tight-binding/molecular mechanics molecular dynamics (2d-DFTB/MM MD) strategy.

Crystal α -Al₂O₃ (110) was firstly simulated by classical molecular dynamics with Buckingham Potential. Equilibration of α -Al₂O₃ (110) was done using DFTB/MM simulation for 30 ps at temperature of 298.15 K. Lennard-Jones potential was used when the water was added on top of the crystal surface with several variation of systems, such as single, dimer, and monolayer of water molecules.

The α -Al₂O₃ (110) is less reactive than the well-established α -Al₂O₃ (001) crystal since no protonation occurred. The tendency observed at three water systems was showing no significant differences, yet the dimer water system was assessing structural and dynamical behaviour of adsorbed water at the interface region indicated by dissociation which shown by bond breaking of water molecule. The 2d-DFTB/MM MD strategy is suitable to study the interfacial adsorption and dissociation of water molecule in the α -Al₂O₃ (110) surface.

Keywords: Dissociation of α -Al₂O₃ (110), molecular dynamics simulation, 2D-DFTB/MM MD.

INTISARI

Penelitian ini dilakukan dengan tujuan untuk membandingkan struktur dan reaksi pada permukaan α -Al₂O₃ (001) yang telah dibuat sebelumnya dan juga untuk mensimulasikan permukaan α -Al₂O₃ (110) dengan menggolongkan sistem pada level atom. Adsorpsi dan disosiasi antarmuka molekul air pada permukaan α -Al₂O₃ (110) disimulasi dengan strategi simulasi 2-dimensi *density-functional tight-binding/molecular mechanics molecular dynamics* (2d-DFTB/MM MD).

Kristal α -Al₂O₃ (110) pertama-tama disimulasi dengan *classical molecular dynamics* menggunakan Potensial Buckingham. Ekuilibrasi α -Al₂O₃ (110) disimulasi menggunakan DFTB/MM selama 30 ps pada suhu 298.15 K. Potensial Lennard-Jones digunakan saat air ditambahkan di bagian atas Kristal dengan beberapa variasi sistem, yakni *single*, *dimer*, dan *monolayer* molekul air.

Permukaan α -Al₂O₃ (110) kurang reaktif dibandingkan dengan α -Al₂O₃ (001) yang telah dibuat sebelumnya karena tidak ada protonasi yang teramati. Kecenderungan yang diamati dari ketiga system air tidak menunjukkan perubahan yang signifikan, namun system *dimer* mengalami perubahan struktur dan sifat dinamis adsorpsi air pada permukaan antarmuka dibuktikan dengan terjadinya disosiasi yang ditunjukkan dengan adanya pemutusan ikatan molekul air. Strategi simulasi 2d-DFTB/MM MD dapat digunakan untuk mempelajari adsorpsi dan disosiasi antarmuka molekul air pada permukaan α -Al₂O₃ (110).

Kata kunci: Disosiasi α -Al₂O₃ (110), simulasi dinamika molekular, 2D-DFTB/MM

MD.