

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL STRUKTUR ANATASE-TITANIA  
(101) TERSULFATASI [TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>] DENGAN METODE *DENSITY-FUNCTIONAL TIGHT-BINDING* (DFTB)**

Debi Nur Afifah

17/409460/PA/17767

**INTISARI**

Pada penelitian ini, struktur permukaan anatase TiO<sub>2</sub> (101) tersulfatasi diteliti melalui simulasi dinamika molekul dengan metode *Density-Functional Tight-Binding* (DFTB) untuk menentukan konformasi struktur antarmuka TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> dengan kestabilan tinggi. Simulasi diawali dengan tahap optimasi geometri dan ekulibrasi permukaan TiO<sub>2</sub> pada suhu 298,15 K. Pada tahap awal sintesis katalis TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> dilakukan pemodelan molekul. Untuk memodelkan interaksi TiO<sub>2</sub> dengan larutan H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> dalam air, yakni dengan diinteraksikan sebanyak 10 molekul H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> dan 50 molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan TiO<sub>2</sub>. Sistem diekulibrasi pada 298,15 K selama 10 ps. Sistem telah berada pada keadaan kesetimbangan, yakni ditandai dengan temperatur yang stabil dan terbentuknya ikatan antar atom dengan jumlah yang konstan. Setelah memastikan sistem setimbang, simulasi dilanjutkan simulasi selama 20 ps untuk menganalisis jumlah molekul yang teradsorpsi, ikatan yang terbentuk di permukaan, jarak rata-rata antara molekul dengan permukaan, serta spektrum vibrasi dari struktur TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>.

Hasil dari penelitian menunjukkan bahwa interaksi larutan H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> diawali dengan protonasi ke permukaan TiO<sub>2</sub> dari 10 molekul H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Dengan adanya protonasi pada permukaan, 2 molekul sulfat teradsorpsi di permukaan dengan struktur HSO<sub>4</sub><sup>-</sup>. Ion HSO<sub>4</sub><sup>-</sup> terikat dengan permukaan TiO<sub>2</sub> melalui mode ikatan O – Ti(HSO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) – O dengan panjang rata-rata Ti-Os 2,02 Å dengan Os adalah atom oksigen dari ion sulfat. Analisis diperoleh juga bahwa 9 molekul H<sub>2</sub>O terikat dengan jarak rata-rata 2,1 Å di atas permukaan TiO<sub>2</sub>. Berdasarkan hasil analisis vibrasi, terdapat puncak serapan pada: 305 – 605 cm<sup>-1</sup> yang menunjukkan Ti-O ulur atau Ti-O-Ti ulur, 1030 cm<sup>-1</sup> yang menunjukkan vibrasi asimetri S-O, 1513 cm<sup>-1</sup> yang menunjukkan vibrasi tekuk -OH, dan 3109 – 3227 cm<sup>-1</sup> yang menunjukkan vibrasi ulur -OH.

Kata kunci: adsorpsi; DFTB; H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>; TiO<sub>2</sub>; dan vibrasi.

**MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF STRUCTURE OF SULFATED ANATASE-TITANIA (101) [TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>] BY DENSITY-FUNCTIONAL TIGHT-BINDING (DFTB)**

Debi Nur Afifah

17/409460/PA/17767

**ABSTRACT**

The surface structure of the sulfated TiO<sub>2</sub> (101) anatase was investigated through molecular dynamics simulations using the Density-Functional Tight-Binding (DFTB) method to determine the conformation of the TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> interface structure with high stability. The simulation was started with the geometry optimization and equilibration of the TiO<sub>2</sub> surface at 298.15 K. In the first step of the synthesis TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> catalyst, molecular modeling was carried out. The interaction between TiO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> solution in water was modelled with 10 molecules of H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> and 50 molecules of H<sub>2</sub>O over the surface of TiO<sub>2</sub> (101). The system was equilibrated at 298.15 K for 10 ps. The system was in a state of equilibrium as indicated by the stability of the simulated temperature and constant interatomic bond number. Simulation for 20 ps aims to analyzed the number of adsorbed molecules, the bonds formed on the surface, the average distance between the molecules and the surface, and the vibrational spectrum of the TiO<sub>2</sub>/SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> structure.

The results of this study indicate that the interaction of the H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> molecules begins with protonation on the TiO<sub>2</sub> surface with 10 molecules of H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. In the presence of protonation on the surface, two sulfate molecules adsorbed on the surface with the HSO<sub>4</sub><sup>-</sup> structure. The HSO<sub>4</sub><sup>-</sup> ion connected to the TiO<sub>2</sub> surface through the O-Ti bond mode O - Ti(HSO<sub>4</sub><sup>2-</sup>) - O with an average length of Ti-Os 2.02 Å where Os is the oxygen atom of the sulfate ion. It was also found that 9 bonds of H<sub>2</sub>O molecules were bonded with an average distance of 2.1 Å above the TiO<sub>2</sub> surface. Based on the results of the vibration analysis, there were absorption peaks at: 305 - 605 cm<sup>-1</sup> which shows Ti-O stretching or Ti-O-Ti stretching, 1030 cm<sup>-1</sup> which shows asymmetric vibrations of SO, 1513 cm<sup>-1</sup> which shows bending vibrations of -OH, and 3109 - 3227 cm<sup>-1</sup> which shows the stretching vibration of -OH.

Keywords: adsorbed; DFTB; H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>; TiO<sub>2</sub>; and vibrations.