

**STUDI INTERAKSI AIR PADA PERMUKAAN  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110)  
BERDASARKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL DENGAN  
METODE *SELF-CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL  
TIGHT-BINDING***

Widya Purnamasari  
17/414647/PA/18147

**INTISARI**

Penelitian mengenai interaksi air pada permukaan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) telah dilakukan. Penelitian ini dilakukan berdasarkan simulasi dinamika molekul dengan menggunakan metode *self-consistent-charge density-functional tight-binding* (SCC-DFTB). Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui interaksi yang terjadi terhadap struktur  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110)-H<sub>2</sub>O selama simulasi dan struktur yang terbentuk setelah dilakukan simulasi dinamika molekul.

Pada penelitian ini dilakukan pemodelan struktur  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110). Simulasi dinamika molekul  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110)-H<sub>2</sub>O dilakukan selama 20 ps pada temperatur 298,15 K. Algoritma yang digunakan adalah Velocity Verlet dengan pengendali temperatur termostat Berendsen.

Permukaan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) reaktif terhadap keberadaan molekul air. Molekul air yang teradsorpsi pada permukaan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) membentuk ikatan Y-OH<sub>2</sub>. Sebagian Y-OH<sub>2</sub> terdisosiasi dan membentuk Y-OH<sup>-</sup>, dan >OH<sup>+</sup>. Vibrasi molekul yang dihasilkan pada sistem berupa vibrasi ulur Y-O pada bilangan gelombang 402 dan 497 cm<sup>-1</sup>, vibrasi tekuk H-O-H dari molekul air pada 1540 cm<sup>-1</sup>, dan vibrasi ulur O-H yang teradsorpsi di permukaan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) pada bilangan gelombang 3300-3000 cm<sup>-1</sup>. Simulasi dinamika molekul dengan SCC-DFTB dapat digunakan untuk mempelajari interaksi yang terjadi antara molekul air dan permukaan  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110).

Kata kunci: dinamika molekul, SCC-DFTB, yttrium oksida.

***STUDY OF WATER INTERACTION ON  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) SURFACE BASED ON MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION BY SELF-CONSISTENT CHARGE DENSITY FUNCTIONAL TIGHT-BINDING METHOD***

Widya Purnamasari  
17/414647/PA/18147

**ABSTRACT**

Research about interaction of water on  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) surface has been carried out. This research was conducted based on molecular dynamics simulation using self-consistent-charge density-functional tight-binding (SCC-DFTB) method. The purpose of this study was to determine the interactions that occur on  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110)-H<sub>2</sub>O during the simulation and the structures formed after molecular dynamics simulation.

In this study, structural modeling of  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) were carried out. Molecular dynamics simulation of  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110)-H<sub>2</sub>O conducted for 20 ps at 298,15 K. The integration algorithm used was Velocity Verlet with Berendsen thermostat as temperature controller.

The result showed that  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) surface was reactive to water molecules. Water molecules adsorbed on  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) surface and formed Y-OH<sub>2</sub>. Y-OH<sub>2</sub> partially dissociated and formed Y-OH<sup>-</sup> and proton. The proton cause protonatio on the surface and formed >OH<sup>+</sup>. The molecular vibrations generated in the system are Y-O stretching at 402 and 497 cm<sup>-1</sup>, H-O-H bending at 1540 cm<sup>-1</sup>, and OH stretchching at 3300-3000cm<sup>-1</sup>. Molecular dynamics simulation by SCC-DFTB method can be used to study the interactions that occur between water molecules and  $\alpha$ -Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (110) surface.

Keywords: molecular dynamics, SCC-DFTB, yttrium oxide.