



UNIVERSITAS  
GADJAH MADA

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, Dr. Aulia Sukma Hutama, S.Si., M.Si.; Prof. Dr.rer.nat. Karna Wijaya, M.Eng.

Universitas Gadjah Mada, 2021 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>

## SKRIPSI

**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**

**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

PROGRAM STUDI SARJANA KIMIA  
DEPARTEMEN KIMIA  
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM  
UNIVERSITAS GADJAH MADA  
YOGYAKARTA

2021