JOICHE
Journal of Industrial Process and Chemical Engineering
Jurnal homepage : ejurnal.itats.ac.id/JOICHE

Pemodelan Perilaku Kelarutan Molekul Air terhadap Variasi Pelarut pada Permukaan $CuInS_2/ZnS$ Quantum Dots Menggunakan Pendekatan *ab-initio* berbasis *Density Functional Theory*

*Adi Permadi**[1], Mutiara Wilson Putri*[2]
[1-2]*Jurusan Teknik Kimia, Universitas Ahmad Dahlan, Yogyakarta, Indonesia*

INFORMASI ARTIKEL

Halaman:
12 – 19

Tanggal penyerahan:
26 Maret 2025

Tanggal diterima:
1 Desember 2025

Tanggal terbit:
3 Desember 2025

EMAIL

[1*]adi.permadi@che.uad.ac.id
[2]2300020037@webmail.uad.ac.id
1* **corresponding author**

ABSTRACT

This study investigates the solubility behavior of water molecules on the surface of $CuInS_2/ZnS$ Quantum Dots (QDs) in different solvents using an Ab Initio approach based on Density Functional Theory (DFT). The research evaluates the influence of solvent dielectric constant on surface potential energy and solute-solvent interaction energy. The study reveals that hydrogen bonding, dipole-dipole interactions, and van der Waals forces significantly affect QDs stability and size. The findings indicate that solvents with higher dielectric constants destabilize nanoparticles, leading to electron transfer between particles. Among the tested solvents, chloroform provides an optimal balance between solubility, stability, and band gap (~1.68 eV). These results contribute to a deeper understanding of solvent-mediated effects on QDs, essential for their application in optoelectronics and bio-imaging.

Keywords: *$CuInS_2/ZnS$, Quantum Dots, DFT, Solvent Effect, Dielectric Constant*

ABSTRAK

Penelitian ini mengkaji perilaku kelarutan molekul air pada permukaan Quantum Dots (QDs) $CuInS_2/ZnS$ dalam berbagai pelarut menggunakan pendekatan Ab Initio berbasis *Density Functional Theory* (DFT). Studi ini mengevaluasi pengaruh konstanta dielektrik pelarut terhadap energi potensial permukaan serta energi interaksi zat terlarut-pelarut. Hasil penelitian menunjukkan bahwa ikatan hidrogen, interaksi dipol-dipol, dan gaya van der Waals berperan penting dalam stabilitas dan ukuran QDs. Ditemukan bahwa pelarut dengan konstanta dielektrik lebih tinggi menyebabkan ketidakstabilan nanopartikel akibat transfer elektron antar partikel. Dari berbagai pelarut yang diuji, kloroform memberikan keseimbangan optimal antara kelarutan, stabilitas, dan *band gap* (~1,68 eV). Temuan ini memberikan wawasan lebih dalam mengenai efek pelarut terhadap QDs, yang penting untuk aplikasi dalam optoelektronika dan bio-imaging.

Kata kunci: *$CuInS_2/ZnS$, DFT, Efek Pelarut, Konstanta Dielektrik, Quantum Dots,*

PENDAHULUAN

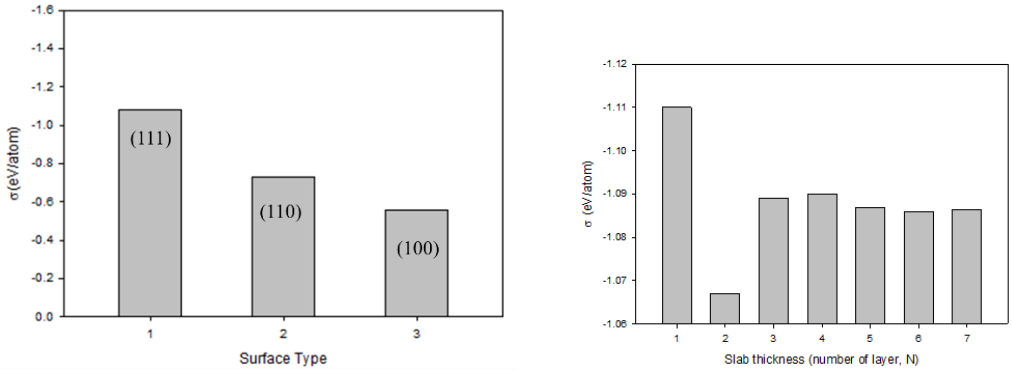
Nanopartikel merupakan kelompok atom berukuran sangat kecil. Sifat-sifat nanopartikel berbeda dengan zat pada umumnya (misalnya padatan, cairan, atau gas). Karakteristik uniknya tidak mudah ditentukan karena keterbatasan alat untuk mengamati keberadaan nanopartikel yang tak kasat mata. Ketidakmampuan untuk melihatnya secara langsung berkaitan dengan interaksi antara inti atom dan elektron itu sendiri [1], [2]. Untuk menjawab pertanyaan mengenai cara yang tepat dalam menggambarkan karakteristik nanopartikel, metode Ab-initio menjadi salah satu pendekatan yang dapat digunakan untuk mengukur struktur elektronik dan mengevaluasi energi molekuler yang berkaitan dengan energi potensial suatu permukaan [3].

Kata Ab Initio berarti “berawal dari awal,” yang merujuk pada tahap awal transformasi molekul, di mana elektron berada dalam kondisi awalnya. Salah satu metode perhitungan Ab Initio

yang paling umum adalah perhitungan Hartree-Fock (HF). Berbagai metode Ab Initio tersedia dalam sejumlah perangkat lunak untuk melakukan perhitungan struktur elektronik tingkat tinggi, seperti Gaussian03, GAMESS, DMol3, Molpro, dan VASP [4], [5]. Pendekatan Hartree-Fock (HF) telah menjadi metode penting sejak awal perkembangan mekanika kuantum untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger elektronik secara mendekati. Metode HF mengasumsikan bahwa fungsi gelombang dari banyak partikel dapat didekati menggunakan Slater determinant, yang terdiri dari orbital satu elektron dengan bagian orbital dan spin [6], [7].

Potential Energy Surface (PES), yang diperoleh dari pemetaan energi Ab Initio, menggambarkan perubahan energi molekul saat jarak antar inti atom berubah secara kontinu. Energi Ab Initio digunakan untuk memetakan PES, yang melibatkan pemecahan masalah elektronik seperti transfer elektron, celah pita (band gap), dan efek pelarut [8]. Dalam penelitian ini, model pelarut berkelanjutan yang dapat dipolarisasi digunakan untuk menilai pengaruh pelarut terhadap perbedaan PES dalam berbagai pelarut. Penelitian ini didasarkan pada *Density Functional Theory* (DFT), yang merupakan pendekatan Ab Initio yang umum digunakan. Metode ini difokuskan untuk menentukan keadaan dasar suatu sistem fisik dengan mencari energi minimum yang dapat ditempati oleh elektron. Namun, metode ini tidak mencakup analisis keadaan tereksitasi. Perbedaan energi minimum dalam model pelarut kontinu dari berbagai jenis pelarut dibandingkan untuk menentukan energi interaksi antara molekul zat terlarut dan pelarut secara eksplisit [9], [10], [11].

Dalam penyelidikan pengaruh pelarut terhadap energi permukaan dalam perhitungan Density Functional Theory (DFT), diperlukan analisis terhadap density of state (DOS) serta koreksi interaksi dipol [12]. Untuk mengamati perubahan density of state dalam berbagai pelarut, optimasi permukaan dilakukan menggunakan model vakum dalam kotak simulasi [13]. Model vakum ini menunjukkan bahwa tidak ada interaksi sebelum penambahan model pelarut kontinu dalam perhitungan geometri yang telah dioptimalkan. Struktur $CuInS_2/ZnS$ yang telah dioptimalkan tetap mengalami konvergensi sempurna meskipun tanpa pelarut atau dalam kondisi vakum [14].



Gambar 1. Data Optimasi Jenis Permukaan dan Jumlah Slab $CuInS_2/ZnS$

Stabilitas permukaan didasarkan pada pemilihan tiga lapisan slab dan pemotongan pada permukaan yang dapat dilihat pada gambar 1. Berdasarkan penelitian sebelumnya, ukuran nanopartikel $CuInS_2$ (CIS) berkisar antara 1,7 nm [15] hingga 1,9 nm [16]. Ukuran tiga lapisan slab yang digunakan dalam penelitian ini serupa dengan data eksperimental yang menunjukkan ketebalan sekitar 5,6 Å per lapisan, atau sekitar 17 Å untuk tiga lapisan. Slab yang stabil ini mewakili kerapatan permukaan yang konstan saat diukur dalam berbagai jenis pelarut [17]. Teori kontinuum dielektrik ini didasarkan pada pendekatan dari Tomasi, Barone, dan Mennucci dalam Gaussian, yang digunakan untuk merepresentasikan energi solvasi serta memahami energi permukaan dan distribusi muatan dalam larutan pelarut untuk nanopartikel $CuInS_2/ZnS$ dalam fase terkondensasi [18], [19].

Quantum Dots (QDs) $CuInS_2/ZnS$ memiliki sifat unik yang bergantung pada ukuran dan lingkungan pelarutnya, menjadikannya kandidat potensial untuk berbagai aplikasi dalam bidang optoelektronik dan biomedis. Studi mengenai stabilitas dan interaksi QDs dalam berbagai pelarut sangat penting untuk memahami pengaruh parameter lingkungan terhadap sifat elektronik dan strukturalnya [20]. Metode *Density Functional Theory (DFT)* digunakan dalam penelitian ini untuk mengevaluasi energi permukaan, interaksi antar molekul, serta perubahan celah pita energi akibat efek solvasi. Dengan pendekatan ini, hubungan antara konstanta dielektrik pelarut dan stabilitas QDs

dapat dianalisis secara sistematis, memberikan wawasan mendalam terhadap mekanisme dasar kelarutan dan stabilitas nanopartikel dalam berbagai kondisi pelarut [21], [22].

Beberapa penelitian sebelumnya telah mengeksplorasi efek pelarut terhadap stabilitas dan sifat optoelektronik Quantum Dots (QDs). Studi oleh Akdas et al. (2017) menunjukkan bahwa ukuran nanopartikel $CuInS_2$ berkisar antara 1,7–1,9 nm, dengan perubahan struktur elektronik yang bergantung pada lingkungan pelarut [15]. Selain itu, penelitian oleh Yoo et al. (2021) mengungkapkan bahwa konstanta dielektrik pelarut berperan dalam mempengaruhi energi ikat dan celah pita energi QDs, di mana peningkatan nilai dielektrik dapat menyebabkan ketidakstabilan ukuran partikel. Metode Density Functional Theory (DFT) telah digunakan dalam berbagai studi untuk menganalisis efek interaksi zat terlarut-pelarut, termasuk ikatan hidrogen, interaksi dipol-dipol, dan gaya van der Waals, yang semuanya berkontribusi terhadap kelarutan dan kestabilan QDs dalam larutan [18].

Tujuan utama dari studi ab initio ini adalah menyelidiki pengaruh variasi pelarut terhadap perilaku kelarutan molekul air pada permukaan Quantum Dots (QDs) $CuInS_2$/ZnS. Dengan memanfaatkan metode *Density Functional Theory* (DFT), penelitian ini bertujuan untuk menentukan energi potensial permukaan serta mengevaluasi energi interaksi antara QDs dan berbagai jenis pelarut. Selain itu, penelitian ini berupaya mengungkap peran interaksi zat terlarut-pelarut, termasuk ikatan hidrogen, interaksi dipol-dipol, dan gaya van der Waals, dalam mempengaruhi stabilitas dan ukuran nanopartikel dalam berbagai lingkungan pelarut. Lebih lanjut, penelitian ini bertujuan untuk menghubungkan konstanta dielektrik pelarut dengan stabilitas QDs, sehingga memberikan wawasan fundamental mengenai sifat elektronik dan struktural QDs yang dimediasi oleh pelarut dalam larutan.

METODE

Perhitungan prinsip pertama telah dilakukan dalam kerangka kerja Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dari pendekatan gradien tergeneralisasi (GGA-PBE) menggunakan paket perangkat lunak DMOL3 dalam Materials Studio. Dalam perhitungan ini, energi cutoff ditetapkan sebesar 400 eV, dan posisi atom dalam struktur dikendurkan hingga gaya residualnya lebih kecil dari 0,01 eV/Å. Untuk integrasi zona Brillouin, diterapkan skema k-titik Monkhorst-Pack dengan kisi $2 \times 2 \times 1$. Dalam simulasi ini, model slab permukaan Tembaga-Indium-Sulfida (Copper-Indium-Sulfide) digunakan dengan daerah vakum sekitar 15 Å pada arah sumbu Z untuk mencegah interaksi antara slab yang diulang secara periodik. Pemilihan ketebalan vakum ini memastikan bahwa tidak ada pengaruh antar-gugus dalam simulasi, sehingga hasil yang diperoleh lebih akurat dalam merepresentasikan permukaan material tanpa efek artefak dari periodisitas simulasi [23].

Perhitungan energi titik tunggal (*single point energy calculation*) dari potongan kristal dilakukan menggunakan paket perangkat lunak Vienna Ab *Initio Simulation Package* (VASP) dalam pendekatan VASPsol untuk berbagai jenis pelarut dalam model pelarutan kontinuum. VASP merupakan program berbasis gelombang bidang (*plane-wave based* DFT) yang dirancang untuk melakukan perhitungan energi total secara ab initio, khususnya dalam kajian interaksi zat terlarut-pelarut yang sering digunakan dalam bidang pelarutan (*dissolution field*). Model ini memungkinkan evaluasi kontribusi pelarut terhadap stabilitas quantum dots (QDs) dalam lingkungan yang lebih realistis. Solvasi energi dalam sistem ini dihitung berdasarkan rumus berikut:

$$Esolv = Etot;sol - Etot;vac \quad (1)$$

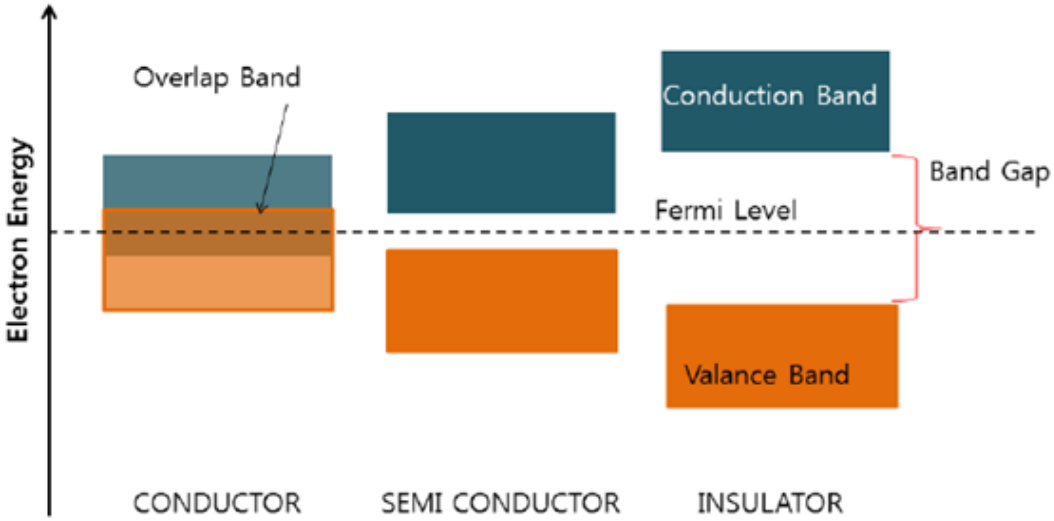
Di mana Esolv merupakan energi solvasi yang menggambarkan kontribusi elektronik dari pelarut terhadap quantum dots (QDs). Sementara itu, Etot;sol adalah energi total quantum dots dalam kondisi terlarut *(explicit solvation calculation*), dan Etot;vac adalah energi total quantum dots dalam kondisi vakum (tanpa pelarut). Dengan menggunakan pendekatan ini, estimasi sejauh mana pengaruh lingkungan pelarut terhadap stabilitas material yang dikaji dapat dilakukan, serta bagaimana interaksi elektronik antara QDs dan pelarut dapat memengaruhi sifat-sifat fisik dan kimia dari sistem yang dianalisis.

HASIL DAN PEMBAHASAN

Bagian ini bertujuan untuk menyoroti konsep utama dalam kinerja quantum dots (QDs) sebagai agen pencitraan biologis. Interaksi antara QDs dan radiasi insiden dibahas sebagai proses eksitasi dan de-eksitasi muatan serta penyerapan dan emisi foton [24]. Kesesuaian QDs untuk

aplikasi sebagai probe fluoresen dalam pencitraan biologis dianalisis, serta sifat optik dan kimia yang diinginkan dari QDs dalam studi ini dijelaskan.

Gaya tolak-menolak jarak pendek yang muncul antara nanopartikel dalam jarak dekat dikompensasi oleh gaya tarik-menarik jarak jauh yang berasal dari elektron valensi. Orbital atom dalam kisi periodik yang terdiri dari N atom masing-masing terpisah menjadi N orbital atau tingkat energi, dan ketika N menjadi sangat besar, pita energi yang dapat diakses secara efektif tersebar dalam ruang momentum [25], [26]. Hal ini menghasilkan struktur pita khas dari suatu material sesuai dengan teori pita, yang memberikan perbedaan yang jelas antara isolator dan konduktor sebagaimana diilustrasikan pada gambar 2.



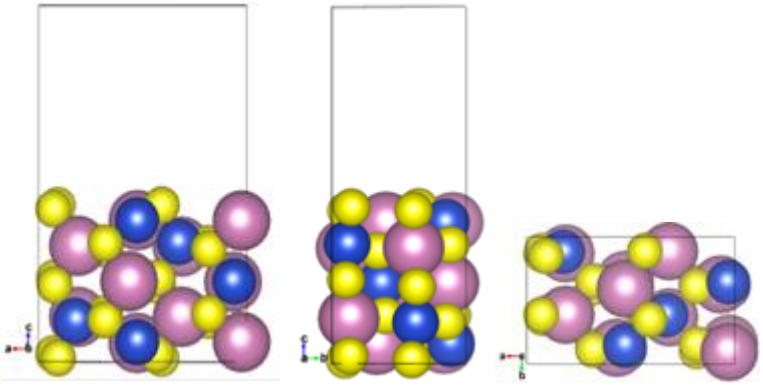
Gambar 2. Ilustrasi yang menunjukkan kategori material sebagai isolator, semikonduktor, dan konduktor berdasarkan besar celah pita energi (*band gap*).

Perbedaan antara konduktor, semikonduktor, dan isolator berdasarkan struktur pita energinya dapat dilihat pada gambar 2. Pada konduktor, pita valensi dan pita konduksi saling tumpang tindih, memungkinkan elektron berpindah dengan mudah, sehingga material dapat menghantarkan listrik dengan baik. Pada semikonduktor, terdapat celah pita energi (band gap) kecil antara pita valensi dan pita konduksi, yang memungkinkan konduktivitas dapat dikendalikan, misalnya melalui doping atau eksitasi termal. Sementara itu, pada isolator, band gap sangat besar sehingga elektron tidak dapat dengan mudah berpindah dari pita valensi ke pita konduksi, membuat material ini tidak menghantarkan listrik. Perbedaan ini menentukan sifat listrik dan optik dari masing-masing material dalam berbagai aplikasi teknologi.

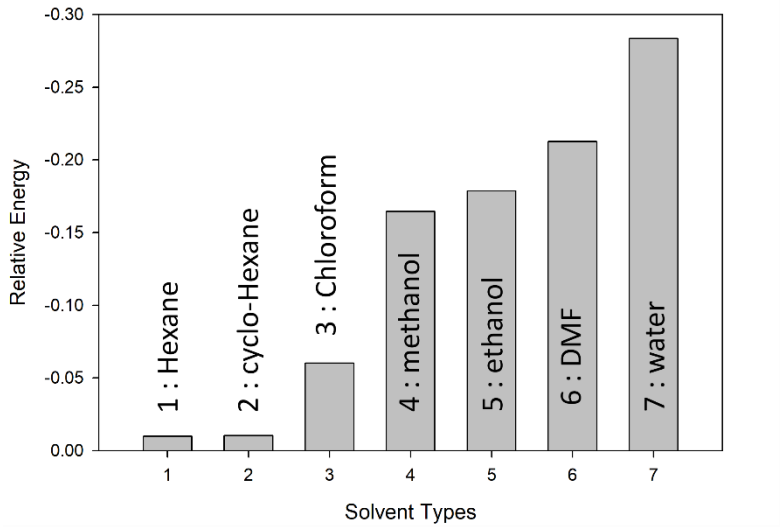
Sebuah celah energi terlarang (Eg) dapat terbentuk antara pita energi yang lebih rendah yang terdiri dari orbital terisi (disebut pita valensi) dan pita konduksi yang berisi orbital yang sebagian terisi atau bahkan sepenuhnya kosong. Sifat dari celah pita ini umumnya menentukan karakteristik elektronik suatu material [27]. Dalam kasus material konduktor, elektron dalam pita konduksi memiliki sifat terdilokalisasi dan mobilitas tinggi, yang memungkinkan mereka bergerak bebas di dalam kisi periodik material. Kemampuan ini memungkinkan arus listrik mengalir dengan mudah melalui material tersebut.

Selain memahami sifat elektronik material, perilaku kelarutan molekul air dalam efek pelarut pada permukaan quantum dots (QDs) juga menjadi fokus dalam kajian ini. Kelarutan suatu zat umumnya terjadi ketika interaksi antara zat terlarut dan pelarut memiliki kemiripan dengan interaksi antar molekul pelarut itu sendiri, yang dikenal dengan prinsip "*like dissolves like*" atau "sejenis melarutkan sejenis." Oleh karena itu, zat terlarut yang bersifat polar lebih mudah larut dalam pelarut polar, sementara zat terlarut nonpolar cenderung larut dalam pelarut nonpolar. Meskipun tidak ada metode pasti untuk mengukur polaritas pelarut, pengelompokan pelarut berdasarkan polaritasnya dapat dilakukan menggunakan skala eksperimental. Skala ini berguna untuk memahami seberapa baik suatu zat dapat larut dalam pelarut tertentu serta bagaimana interaksi solut-pelarut dapat memengaruhi sifat material pada tingkat molekuler. Penelitian terhadap efek pelarut dalam sistem

QDs memberikan wawasan yang lebih mendalam mengenai kestabilan dan perilaku optik dari material ini, terutama dalam aplikasi berbasis biomedis dan teknologi optoelektronik.



Gambar 3. Permukaan (110) dari QDs (Cu: biru; In: pink; S: kuning) dilihat dari samping (kiri dan tengah) serta dari atas (kanan).



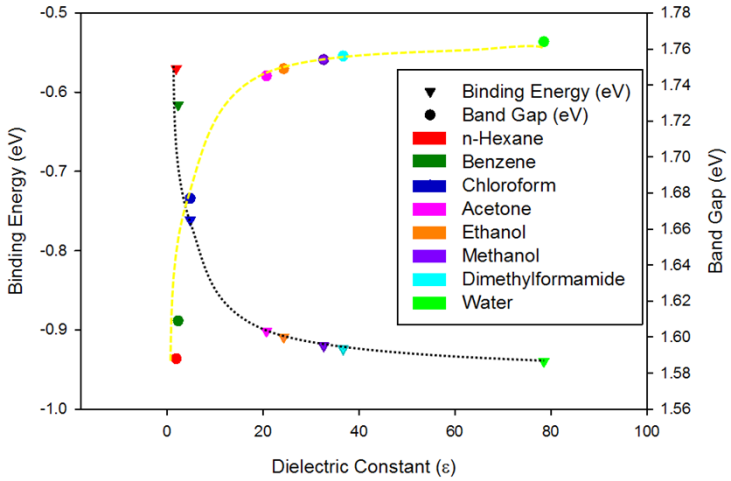
Gambar 4. Interaksi QDs dalam berbagai pelarut berdasarkan perhitungan energi solvasi menggunakan persamaan (1): sumbu x menunjukkan energi ikatan antara nanopartikel dalam satuan elektron-volt (eV); sumbu y menunjukkan berbagai jenis pelarut.

Interaksi antara zat terlarut dan pelarut dikenal sebagai interaksi non-kovalen, seperti ikatan hidrogen (H-bonding), interaksi dipol-dipol, serta gaya van der Waals. Karena adanya interaksi ini, energi solvasi relatif dihitung dari permukaan (110) quantum dots (QDs), seperti yang ditunjukkan pada gambar 3, yang memperlihatkan struktur permukaan (110) dari QDs (Cu: biru; In: merah muda; S: kuning) dari sisi samping (kiri dan tengah) serta tampak atas (kanan). Hasil dari perhitungan energi solvasi ditampilkan pada gambar 4, yang menggambarkan interaksi QDs dalam berbagai jenis pelarut menggunakan persamaan (1). Dari hasil yang diperoleh, interaksi antara QDs dan molekul air menunjukkan nilai tertinggi dibandingkan dengan pelarut lainnya. Seiring dengan menurunnya polaritas pelarut, interaksi ini juga mengalami penurunan sesuai dengan tren yang diamati.

Namun, interaksi ikatan hidrogen tidak sepenuhnya berperan dalam menentukan kelarutan QDs dalam studi ini. Sebaliknya, interaksi dispersi molekuler antara pelarut dan zat terlarut juga berkontribusi sebagai faktor pendukung dalam proses pelarutan. Hasil penelitian menunjukkan bahwa dalam pelarut heksana, energi yang diperlukan untuk menggabungkan satu nanopartikel kecil dengan partikel lainnya lebih rendah. Hal ini mengindikasikan bahwa antar-nanopartikel tidak mudah mengalami agregasi, sehingga stabilitas cluster tetap terjaga selama energi potensialnya tetap konstan.

Ketidakstabilan cluster selama dispersi dalam larutan berair juga dianalisis dengan membandingkannya langsung terhadap nilai dielektrik dari masing-masing pelarut. Hasilnya

menunjukkan bahwa semakin tinggi nilai dielektrik, partikel dengan ukuran kecil menjadi lebih tidak stabil karena elektron lebih mudah berpindah dari satu partikel ke partikel lainnya akibat peningkatan konstanta dielektrik [28]. Seperti yang diperlihatkan dalam gambar 5, energi ikat tertinggi diperoleh pada pelarut dengan konstanta dielektrik terendah. Selain itu, energi ikat $CuInS_2/ZnS$ juga dianalisis berdasarkan interaksi antar molekul dalam nanopartikel. Di sisi lain, kestabilan ukuran nanopartikel berkorelasi dengan peningkatan band gap ketika nilai dielektrik pelarut meningkat. Semua hasil ini dirangkum dalam gambar 5.



Gambar 5. Celah pita energi (band gap) dan energi ikatan dari nanopartikel $CuInS_2/ZnS$ dalam berbagai konstanta dielektrik; garis kuning/hitam diperoleh dari hasil pemfitingan nilai celah pita energi/energi ikatan secara berturut-turut.

Hubungan antara energi ikat (*binding energy*) dan celah pita energi (*band gap*) dari $CuInS_2/ZnS$ berukuran nano pada gambar 4 dalam berbagai pelarut dengan konstanta dielektrik yang berbeda. Simbol segitiga terbalik mewakili energi ikat, sedangkan lingkaran mewakili celah pita energi. Pola garis putus-putus hitam menunjukkan tren penurunan energi ikat seiring meningkatnya konstanta dielektrik pelarut, menandakan bahwa nanopartikel menjadi kurang stabil dalam pelarut dengan konstanta dielektrik tinggi. Pelarut organik mempengaruhi proses agregasi atau ukuran agregat nanopartikel, sementara pelarut dengan konstanta dielektrik tinggi memberikan gaya tarik elektrostatik yang lebih besar melalui interaksi antara pelarut dan nanopartikel [29], [30]. Oleh karena itu, celah pita energi (band gap) meningkat dalam pelarut dengan konstanta dielektrik tinggi, tetapi partikel cenderung mengalami agregasi saat pelarut berubah dari heksana ke pelarut lain. Sebagai alternatif, $CuInS_2/ZnS$ dalam kloroform (ditunjukkan dengan titik biru pada Gambar 5) menunjukkan keseimbangan antara mempertahankan kondisi tidak teragregasi dan memiliki celah pita energi yang efektif sekitar 1,68 eV. Sebaliknya, garis kuning menunjukkan peningkatan band gap saat konstanta dielektrik meningkat, yang mengindikasikan bahwa ukuran nanopartikel tetap kecil dalam pelarut dengan konstanta dielektrik lebih besar. Hasil ini menunjukkan bahwa pemilihan pelarut sangat memengaruhi stabilitas dan sifat optoelektronik dari $CuInS_2/ZnS$.

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil pemodelan menggunakan ab initio berbasis DFT, penelitian ini menemukan bahwa interaksi antara $CuInS_2/ZnS$ QDs dengan berbagai pelarut sangat dipengaruhi oleh polaritas dan konstanta dielektrik pelarut, di mana molekul air menunjukkan interaksi yang lebih kuat dibandingkan pelarut lainnya. Kelarutan QDs dalam berbagai pelarut mengikuti tren "like dissolves like", di mana pelarut polar lebih mudah melarutkan QDs dibandingkan pelarut nonpolar. Selain itu, konstanta dielektrik pelarut yang lebih tinggi menyebabkan stabilitas nanopartikel berkurang karena elektron lebih mudah berpindah antar partikel. Dalam penelitian ini, chloroform ditemukan sebagai pelarut yang paling optimal karena dapat mempertahankan keseimbangan antara kelarutan, kestabilan, dan band gap yang sesuai untuk aplikasi pencitraan biologis (~1.68 eV). Lebih lanjut, hasil analisis menunjukkan bahwa ikatan hidrogen bukan satu-satunya faktor yang

menentukan kelarutan QDs, tetapi juga interaksi dispersi molekuler yang berperan sebagai kofaktor dalam proses pelarutan. Dengan demikian, penelitian ini memberikan wawasan baru tentang bagaimana pemilihan pelarut dapat memengaruhi stabilitas dan sifat elektronik QDs, yang penting untuk aplikasi di bidang nanoteknologi dan bio-imaging.

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Reinard, alumni magister Teknik Kimia National Taiwan University of Science and Technology atas bantuan simulasinya menggunakan superkomputer Universitas dalam penyelesaian pemodelan ini.

DAFTAR PUSTAKA

[1] K. A. Altammar, "A review on nanoparticles: characteristics, synthesis, applications, and challenges," *Front Microbiol*, vol. 14, Apr. 2023, doi: 10.3389/fmicb.2023.1155622.

[2] I. Khan, K. Saeed, and I. Khan, "Nanoparticles: Properties, applications and toxicities," *Arabian Journal of Chemistry*, vol. 12, no. 7, pp. 908–931, Nov. 2019, doi: 10.1016/j.arabjc.2017.05.011.

[3] I. O. M. Magalhães, B. J. C. Cabral, and J. B. L. Martins, "Ab Initio Approach to the Structure, Vibrational Properties, and Electron Binding Energies of H2S···SO2," *Molecules*, vol. 28, no. 18, p. 6656, Sep. 2023, doi: 10.3390/molecules28186656.

[4] D. Esteve, "Foreword," in *C,H,N and O in Si and Characterization and Simulation of Materials and Processes*, Elsevier, 1996, p. v. doi: 10.1016/B978-0-444-82413-4.50006-8.

[5] H. Sun, "COMPASS: An ab Initio Force-Field Optimized for Condensed-Phase ApplicationsOverview with Details on Alkane and Benzene Compounds," *J Phys Chem B*, vol. 102, no. 38, pp. 7338–7364, Sep. 1998, doi: 10.1021/jp980939v.

[6] L. Nanni, "A discussion on the relativistic corrections of the electronic structures of multi-electron atoms," *Int J Quantum Chem*, vol. 123, no. 19, Oct. 2023, doi: 10.1002/qua.27182.

[7] C. D. Sherrill, "An Introduction to Hartree-Fock Molecular Orbital Theory," 2000.

[8] F. Arab, F. Nazari, and F. Illas, "Artificial Neural Network-Derived Unified Six-Dimensional Potential Energy Surface for Tetra Atomic Isomers of the Biogenic [H, C, N, O] System," *J Chem Theory Comput*, vol. 19, no. 4, pp. 1186–1196, Feb. 2023, doi: 10.1021/acs.jctc.2c00915.

[9] D. Beri, "Studi ab-initio Mekanisme Pembentukan Transisi Reaksi Oksidasi CO oleh No2 di Udara," *Jurnal Saintek*, vol. 4, no. 2, pp. 108–115, 2012.

[10] M. A. K. S., "Studi Komputasi Metode Ab Initio Dft Dalam Kajian Struktural Dan Sifat Elektronik Senyawa Kalsium Borohidrid-Diamonia Sebagai Penyimpan Hidrogen," *Jurnal Eksakta*, vol. 15, no. 1–2, pp. 23–37, 2015, doi: 10.20885/eksakta.vol14.iss1-2.art3.

[11] I. Abdul Rahman, dan Acep Purqon, K. Fisika Bumi dan Sistem Kompleks, and D. Fisika, *Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS 2*. 2015.

[12] A. H. Mazurek, Ł. Szeleszczuk, and D. M. Pisklak, "Periodic DFT Calculations—Review of Applications in the Pharmaceutical Sciences," *Pharmaceutics*, vol. 12, no. 5, p. 415, May 2020, doi: 10.3390/pharmaceutics12050415.

[13] A. Deacon *et al.*, "Understanding the ZIF-L to ZIF-8 transformation from fundamentals to fully costed kilogram-scale production," *Commun Chem*, vol. 5, no. 1, p. 18, Feb. 2022, doi: 10.1038/s42004-021-00613-z.

[14] B. Kaduk, T. Kowalczyk, and T. Van Voorhis, "Constrained Density Functional Theory," *Chem Rev*, vol. 112, no. 1, pp. 321–370, Jan. 2012, doi: 10.1021/cr200148b.

[15] T. Akdas, M. Haderlein, J. Walter, B. Apeleo Zubiri, E. Spiecker, and W. Peukert, "Continuous synthesis of CuInS $_2$ quantum dots," *RSC Adv*, vol. 7, no. 17, pp. 10057–10063, 2017, doi: 10.1039/C6RA27052B.

[16] C. T. Altaf, N. Abdullayeva, N. D. Sankir, and N. D. Sankir, "Copper-Based Chalcopyrite and Kesterite Materials for Solar Hydrogen Generation," in *Photoelectrochemical Solar Cells*, Wiley, 2018, pp. 251–303. doi: 10.1002/9781119460008.ch7.
[17] M. Jorge, J. R. B. Gomes, and M. C. Barrera, "The dipole moment of alcohols in the liquid phase and in solution," *J Mol Liq*, vol. 356, p. 119033, Jun. 2022, doi: 10.1016/j.molliq.2022.119033.
[18] S.-H. Yoo, M. Todorova, D. Wickramaratne, L. Weston, C. G. Van de Walle, and J. Neugebauer, "Finite-size correction for slab supercell calculations of materials with spontaneous polarization," *NPJ Comput Mater*, vol. 7, no. 1, p. 58, Apr. 2021, doi: 10.1038/s41524-021-00529-1.
[19] J. Chen, Z. Xu, and Y. Chen, "Interaction of flotation reagents with mineral surface," in *Electronic Structure and Surfaces of Sulfide Minerals*, Elsevier, 2020, pp. 237–305. doi: 10.1016/B978-0-12-817974-1.00006-5.
[20] J. Kong *et al.*, "Carbon Quantum Dots: Properties, Preparation, and Applications," *Molecules*, vol. 29, no. 9, p. 2002, Apr. 2024, doi: 10.3390/molecules29092002.
[21] J. D. Elliott, A. A. Papaderakis, R. A. W. Dryfe, and P. Carbone, "The electrochemical double layer at the graphene/aqueous electrolyte interface: what we can learn from simulations, experiments, and theory," *J Mater Chem C Mater*, vol. 10, no. 41, pp. 15225–15262, 2022, doi: 10.1039/D2TC01631A.
[22] N. M. Mwenze *et al.*, "Electronic and vibrational spectroscopic study complemented with the computational evaluation of hydroxychloroquine mixed with silver nanoparticles," *Results Chem*, vol. 10, p. 101711, Aug. 2024, doi: 10.1016/j.rechem.2024.101711.
[23] A. M. Belenguer, G. I. Lampronti, A. J. Cruz-Cabeza, C. A. Hunter, and J. K. M. Sanders, "Solvation and surface effects on polymorph stabilities at the nanoscale," *Chem Sci*, vol. 7, no. 11, pp. 6617–6627, 2016, doi: 10.1039/C6SC03457H.
[24] J. Chen *et al.*, "Perovskite quantum dot lasers," *InfoMat*, vol. 2, no. 1, pp. 170–183, Jan. 2020, doi: 10.1002/inf2.12051.
[25] C. Kittel, "Introduction to Solid State Physics," Wiley, 2013.
[26] S. K. Ghosh and T. Pal, "Interparticle Coupling Effect on the Surface Plasmon Resonance of Gold Nanoparticles: From Theory to Applications," *Chem Rev*, vol. 107, no. 11, pp. 4797–4862, Nov. 2007, doi: 10.1021/cr0680282.
[27] L. Wang, S. Zhang, Y. Zhang, and Q. An, "Piezodynamic therapy: Mechanisms and biomedical applications," *Nano Energy*, vol. 110, p. 108342, Jun. 2023, doi: 10.1016/j.nanoen.2023.108342.
[28] D. Acevedo and H. D. Abruna, "Electron-transfer study and solvent effects on the formal potential of a redox-active self-assembling monolayer," *J Phys Chem*, vol. 95, no. 23, pp. 9590–9594, Nov. 1991, doi: 10.1021/j100176a098.
[29] F. Yu *et al.*, "Dispersion stability of thermal nanofluids," *Progress in Natural Science: Materials International*, vol. 27, no. 5, pp. 531–542, Oct. 2017, doi: 10.1016/j.pnsc.2017.08.010.
[30] D. Gentili and G. Ori, "Reversible assembly of nanoparticles: theory, strategies and computational simulations," *Nanoscale*, vol. 14, no. 39, pp. 14385–14432, 2022, doi: 10.1039/D2NR02640F.