

STUDI ADSORPSI MOLEKUL NH_3 PADA PERMUKAAN ALIASI
 Fe (111) DENGAN Cr (5\%) MENGGUNAKAN PROGRAM
CALZAFERRI

TESIS

Oleh :

ETTRI HAYATI
01 207 005



PROGRAM PASCASARJANA
UNIVERSITAS ANDALAS
PADANG
2003

STUDI ADSORPSI MOLEKUL NH_3 PADA PERMUKAAN ALIASI Fe(111) DENGAN Cr (5%) MENGGUNAKAN PROGRAM CALZAFERRI

Oleh : Fitri Hayati

(Dibawah bimbingan Theresia Sita Kusuma dan Hamzar Suyani)

RINGKASAN

Amonia adalah bahan yang terpenting diantara bahan yang mengandung nitrogen karena merupakan bahan dasar bagi hampir semua jenis produk yang mengandung nitrogen. Amonia juga sangat banyak digunakan sebagai pupuk. Jumlah amonia yang dihasilkan masih jauh dibawah kuantitas yang diperlukan untuk menghasilkan panen yang maksimum. Dewasa ini pembuatan amonia secara alami disisihkan oleh amonia sintetis (Austin, 1996). Sintesis amonia dari unsur-unsurnya nitrogen dan hidrogen dengan menggunakan katalis besi sudah lama dikenal. Hasil yang diperoleh adalah sekitar 20%. Untuk itu perlu dipelajari kembali proses pembentukan amonia pada permukaan katalis. Menurut Norskov dan Stoltze (1987), Fe mengadsorpsi N_2 secara atomik. Kemudian diikuti dengan reaksi antara atom N dengan H_2 bebas membentuk amonia teradsorpsi dan selanjutnya desorpsi NH_3 . Dari eksperimen didapatkan kereaktifan permukaan katalis tergantung pada struktur permukaan katalis. Didapatkan permukaan Fe(111) jauh lebih aktif dari Fe(100) dan Fe(110) (Gates, 1992).

Dowben *et al.* (1991) mendapatkan bahwa N_2 teradsorpsi secara molekular dan atomik pada permukaan Cr(110) dan energi desorpsi molekul N_2 pada Cr lebih

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Amonia adalah bahan yang terpenting diantara bahan yang mengandung nitrogen karena merupakan bahan dasar bagi hampir semua jenis produk yang mengandung nitrogen. Amonia juga sangat banyak digunakan sebagai pupuk, tetapi jumlahnya masih jauh dibawah kuantitas yang diperlukan untuk menghasilkan panen yang maksimum. Amonia dapat dibuat secara alami dan sintetis. Namun dewasa ini pembuatan amonia secara alami disisihkan oleh amonia sintetis (Austin, 1996).

Sintesis amonia dari unsur-unsurnya nitrogen dan hidrogen dengan menggunakan katalis besi sudah lama dikenal. Hasil yang diperoleh adalah sekitar 20%. Telah banyak usaha yang dilakukan untuk meningkatkan produk. Untuk itu perlu dipelajari kembali proses pembentukan amonia pada permukaan katalis. Berbagai eksperimen tentang proses katalisis pada bermacam permukaan besi telah dilakukan. Dari eksperimen tersebut didapatkan permukaan Fe(111) sangat aktif yaitu ± 25 kali lebih aktif dari permukaan Fe(100) dan ± 400 kali lebih aktif dari permukaan Fe(110) pada tekanan 20 atm dan suhu 525 °C (Gates, 1992). Sedangkan perbandingan kecepatan adsorpsi N₂ pada Fe(111), (100) dan (110) tersebut pada suhu 275°C adalah 60 : 25 : 1 (Bozso, 1977). Hasil-hasil ini memperlihatkan bahwa aktivitas katalis untuk menghasilkan gas NH₃ sangat bergantung pada struktur permukaan katalis untuk mendisosiasikan gas N₂.

Menurut Norskov dan Stoltze (1987), Fe mengadsorpsi N_2 secara atomik. Kemudian diikuti dengan reaksi antara atom N dengan H_2 bebas membentuk amonia teradsorpsi dan selanjutnya desorpsi NH_3 . Dowben *et al.* (1991) mendapatkan bahwa N_2 teradsorpsi secara molekular dan atomik pada permukaan Cr(110) dan energi desorpsi molekul N_2 pada Cr lebih kecil dibandingkan dari yang diamati pada logam transisi lain termasuk besi. Ini berarti bahwa permukaan Cr lebih reaktif dari permukaan logam transisi lain. Kusuma (2001) mendapatkan N_2 teradsorpsi secara atomik pada permukaan Fe(111), Fe/Cr(111) (aliansi Fe dengan Cr) dan Cr(111). Bedanya ikatan FeN lebih kuat dari ikatan CrN atau ikatan CrN lebih mudah putus.

Baik Fe maupun Cr mempunyai struktur kristal yang sama yaitu BCC (*Body Centered Cubic*) dan nilai a_c (*lattice parameter*) yang tidak jauh berbeda (masing-masing 2,87 dan 2,88 Å). Sehingga kedudukan Fe pada permukaan mudah digantikan oleh Cr. Meskipun demikian, adsorpsi NH_3 pada permukaan Fe/Cr belum banyak dipelajari.

Kesuksesan menghasilkan NH_3 tidak hanya ditentukan oleh proses disosiasi N_2 , tetapi akhir dari proses, apakah NH_3 yang terbentuk akan diadsorpsi secara lemah, kuat atau bahkan diuraikan oleh katalis juga sangat menentukan. Maka dalam penelitian ini dipelajari adsorpsi NH_3 pada permukaan katalis dengan menggunakan metoda Calzaferri yang diolah dengan bantuan komputer IBM-PC compatible (Pentium III, 660 MHz). Proses yang terjadi selama adsorpsi diamati dengan optimasi 3D. Permukaan yang diamati adalah aliansi Fe dengan Cr (5%) ($Fe_{19}Cr$) dengan irisan permukaan (111) yang terdiri dari 20 atom dan tiga lapisan. Pada lapisan pertama terdapat 10 atom sedangkan pada lapisan kedua dan ketiga masing-masing terdapat 5

BAB V KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Analisis dari hasil optimasi molekul NH_3 yang mendatangi permukaan aliansi logam Fe dengan Cr 5% dengan arah jatuh bidang molekul horizontal dan vertikal terhadap permukaan logam memberikan pola adsorpsi:

1. Molekul NH_3 yang mendatangi permukaan dengan arah horizontal terhadap permukaan akan diadsorpsi secara kimia dengan dua pola, yaitu hanya atom N yang terikat pada atom permukaan, dan atom N dan H terikat pada atom permukaan.
2. Molekul NH_3 yang mendatangi permukaan dengan arah vertikal terhadap permukaan akan diadsorpsi secara fisika dengan dua pola, yaitu N dan atau atom H diikat sangat lemah oleh atom permukaan, dan atom H diikat oleh atom permukaan.
3. Molekul NH_3 yang mendatangi permukaan dengan arah horizontal dan vertikal pada posisi tertentu dapat diuraikan oleh permukaan.
4. Adanya aliansi atom Cr pada logam Fe dapat menurunkan energi desorpsi NH_3 pada permukaan logam Fe.

5.2 Saran

Dari penelitian yang telah dilakukan, maka disarankan untuk melakukan penelitian dengan meningkatkan kadar atom Cr pada aliansi logam Fe/Cr. Masih perlu

DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Adamson, A. W. 1990. *Physical Chemistry of Surface*. 5th ed. John Wiley and Sons, New York. Pp: 721-726.
- Austin G. T. 1996. *Industri Proses Kimia*. Terjemahan: E. Jasjfi. Jilid 1, Edisi 5. Erlangga, Jakarta. Hal. 308-324.
- Banon, C. 2003. *Studi Teoritik Adsorpsi Molekul NH₃ pada Permukaan Cr(111)*, Tesis Magister Sains, Program Pasca Sarjana, Universitas Andalas, Padang.
- Bowser, J.R. 1993. *Inorganic Chemistry*. Cole publishing Company, Pasific Grove, California. P: 36.
- Bozso, F., G. Ertl and M. Weiss. 1977. Interaction of Nitrogen with Iron Surface II: Fe(110). *J. Catal.* 50: 519-520.
- Calzaferri, G. and M. Brändle. 1992. *Extended-Hückel Calculations*. Institut for Inorganic and Physical Chemistry, University of Berne, Bern. Pp: 1-43
- Dowben, P.A., H. J. Ruppender and M.Grunze. 1991. Molecular Nitrogen Adsorption on Cr(110). *Surf. Sci.* 254: 482 – 486.
- Efendy, W. 2002. *Mempelajari Adsorpsi Molekul NH₃ pada Permukaan Fe(111) Menggunakan Metoda Calzaferri*, Skripsi Sarjana Kimia, FMIPA, Universitas Andalas, Padang.
- Gates, B. C. 1992. *Catalitic Chemistry*. Wiley Series in Chemical Chemistry Engineering, John Wiley & Sons, Inc., New York. Pp: 362-368.
- Kusuma, T. S. 2002. *Revisi Parameter atom Fe, Cr dan H*, unpublished results.
- Kusuma, T. S. 2001. Adsorpsi gas N₂ pada Fe(111), Cr(111), dan Fe/Cr(111) menurut metoda Calzaferri. Pada seminar BKS-PTN wilayah Indonesia Bagian Barat, di Lampung.
- Kusuma, T.S. 1996. *Optimasi isomer-isomer Benzokuinon, Naftokuinon dan Atrakuinon*. Pada seminar Nasional Himpunan Kimia Indonesia di Padang.
- Kusuma. T.S. 1989. *Kimia Kuantum dan Statistik*. FMIPA, Universitas Andalas Padang, pp 30-32.