

PENGGUNAAN PROGRAM CALZAFERRI UNTUK
MEMPELAJARI ADSORPSI N_2 PADA PERMUKAAN $Fe_{20}(111)$

TESIS

Oleh :

ASEP HIDAYAT

99 207 016



PROGRAM PASCASARJANA
UNIVERSITAS ANDALAS
PABANG
2002

RINGKASAN

PENGGUNAAN PROGRAM *CALZAFERRI* UNTUK MEMPELAJARI ADSORPSI
 N_2 PADA PERMUKAAN $Fe_{20}(111)$

Oleh

ASEP HIDAYAT, S.Si

Magister Sains (MSi) dalam bidang kimia Program Pascasarjana Universitas Andalas
dibawah bimbingan Prof. Dr. Theresia Sita Kusuma, Dr. Sanusi Ibrahim dan
Dr. Hamzar Suyani, MSc.

Telah dilakukan penelitian tentang adsorpsi N_2 pada permukaan $Fe(111)$ yang terdiri dari 3 lapisan atom dengan jumlah atom 20. penelitian ini dilakukan dengan menggunakan program *Calzaferrri* terhadap beberapa posisi jatuh N_2 pada permukaan. Dari data hasil optimasi menunjukkan bahwa molekul N_2 yang diarahkan tegak lurus pada atom Fe lapisan pertama akan teradsorpsi molekuler. Sedangkan molekul N_2 yang diarahkan pada celah antara dua atom Fe serta pada atom Fe lapisan kedua dan ketiga akan terdisosiasi. Molekul N_2 yang terdisosiasi terdiri dari: 1) kedua atom N masih berada di atas lapisan pertama. 2) Satu atom N berada di atas lapisan pertama dan yang lainnya terbenam (berada diantara lapisan satu dan dua atau dua dan tiga) 3) Satu atom N berada di atas lapisan pertama dan yang lainnya disamping (edge site). Atom N yang teradsorpsi pada lapisan pertama diperkirakan akan mudah berinteraksi dengan hidrogen membentuk NH_3 teradsorpsi. Pola ikatan yang terbentuk antara N dengan atom-atom permukaan adalah pola tegak, pola jembatan dua dan jembatan tiga

I. PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Pembuatan gas amoniak dalam industri sudah dimulai sejak tahun 1913, melalui proses Haber-Bosch. Dalam proses pembuatannya dibutuhkan gas N_2 dan H_2 . Disosiasi N_2 merupakan tahapan reaksi yang berlangsung lambat dan menjadi penentu kecepatan reaksi pembuatan NH_3 (Adamson, 1990). Agar disosiasi dapat berlangsung lebih cepat diperlukan katalis. Katalis yang sering digunakan adalah besi. Beberapa percobaan tentang sifat katalisis besi telah dilakukan. Hasilnya memperlihatkan bahwa kecepatan adsorpsi N_2 pada permukaan besi sangat tergantung pada struktur permukaan besi (Gates, 1992).

Untuk meningkatkan aktivitas katalis, perlu dilakukan analisis terhadap sifat katalis besi dengan berbagai irisan permukaan. Pada penelitian sebelumnya, Yuhernita et al. (1999) menyebutkan bahwa Fe(111) sifat katalisnya lebih baik dari Fe(100) dan Fe(110). Dalam penelitian tersebut lapisan permukaan hanya dibatasi pada 2 lapisan dan jumlah atom 10, selanjutnya disebut $Fe_{10}(111)$, dengan optimasi yang dilakukan secara satu dimensi. Maka didapatkan satu atom N teradsorpsi sementara atom N yang lainnya tidak teradsorpsi (terbang). Kemudian Astoria (2002) dengan menggunakan Fe(111) yang terdiri dari 3 lapisan dan 13 atom dan dioptimasi 3D (tiga dimensi), selanjutnya disebut $Fe_{13}(111)$, menyebutkan bahwa molekul N_2 akan terdisosiasi dan beberapa diantaranya tetap dalam bentuk molekul. Molekul N_2 yang terdisosiasi, sebagian atom N terikat pada atom-atom permukaan lapisan pertama dan sebagian lainnya terbenam di bawah permukaan, kemudian terikat kuat pada atom-atom dari permukaan lapisan kedua dan ketiga. Dari hasil optimasi yang diperoleh diduga masih belum efektif mewakili sifat katalis dari permukaan besi sebenarnya.

Berdasarkan dua penelitian di atas, maka peneliti tertarik untuk mencoba menggunakan permukaan besi dengan 3 lapisan dan jumlah atom 20 yang selanjutnya disebut sebagai $Fe_{20}(111)$, untuk mengetahui apakah permukaan besi dengan jumlah

20 atom, lebih mewakili sifat permukaan besi sebenarnya. Pengamatan sifat katalis permukaan besi dilihat dari hasil optimasi secara 3D terhadap molekul N_2 yang dibiarkan jatuh tegak lurus permukaan ($\alpha = 90^\circ$) dengan 6 posisi jatuh dan sejajar permukaan ($\alpha = 0^\circ$) dengan 4 posisi jatuh.

Penelitian ini dilakukan secara komputasi dengan menggunakan program *Calzaferrri*, dimana gas N_2 yang mendatangi permukaan dioptimasi secara 3D (sedangkan atom permukaan dianggap kaku) dengan ketelitian 0,0005 eV. Dengan mengamati panjang dan kuat ikatan antar atom dalam keadaan optimal, diharapkan dapat menggambarkan sifat adsorpsi yang terjadi serta mudah tidaknya proses desorpsi dari permukaan.

1.2. Rumusan Masalah

Dari uraian di atas dapat dirumuskan beberapa masalah sebagai berikut:

1. Apakah dengan menambah jumlah atom permukaan, sifat katalis permukaan $Fe_{20}(111)$ dapat mewakili sifat katalis permukaan besi sebenarnya.
2. Bagaimanakah pola ikatan yang dibentuk antara atom N dengan atom-atom permukaan $Fe_{20}(111)$.
3. Bagaimanakah posisi jatuh N_2 yang akan meningkatkan efektifitas katalis besi.

1.3. Tujuan dan Manfaat Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui jenis adsorpsi molekul N_2 dan bagaimana proses terjadinya disosiasi molekul N_2 pada permukaan $Fe_{20}(111)$. Hasil yang diperoleh dalam penelitian ini diharapkan dapat mencerminkan keadaan logam yang sebenarnya.

Sedangkan manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah

1. Data yang diperoleh diharapkan dapat menerangkan sifat permukaan besi sebenarnya.
2. Data dapat digunakan sebagai pembanding untuk permukaan besi yang dimodifikasi.

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. Kesimpulan

Molekul N_2 baik yang mendatangi permukaan $Fe_{20}(111)$ secara tegak lurus maupun sejajar sebagian besar teradsorpsi atomik. Kecuali jika N_2 diarahkan jatuh tegak lurus atom-atom pada lapisan pertama, maka N_2 tersebut akan teradsorpsi molekuler.

Ada tiga macam pola ikatan yang dibentuk antara N dengan atom-atom permukaan yaitu:

1. Pola tegak: sebuah atom N terikat pada atom Fe lapisan pertama terdapat pada posisi 1 dan 6.
2. Pola jembatan dua: sebuah atom N terikat pada atom Fe lapisan pertama dan lapisan kedua terdapat pada posisi 2, 5, 8 dan 9.
3. Pola jembatan tiga: sebuah atom N terikat pada atom Fe lapisan pertama, kedua dan ketiga kecuali posisi 10 terdapat pada posisi 3, 4 dan 7.

Pembentukan NH_3 teradsorpsi permukaan akan lebih mudah jika N_2 dijatuhkan pada posisi 2, 5, 6, 8, dan 9. Sedangkan N_2 yang diarahkan seperti pada posisi 1 kurang efektif. Sedangkan molekul N_2 yang dijatuhkan pada posisi 3, 4, 7 dan 10 dapat menurunkan efektivitas katalis.

Berdasarkan pola ikatan yang dibentuk antara N dengan atom-atom logam permukaan. Permukaan $Fe_{20}(111)$ cukup baik untuk mewakili permukaan besi yang sebenarnya jika dibandingkan permukaan $Fe_{13}(111)$.

5.2. Saran

Dari sepuluh posisi yang dioptimasi, hasil yang diperoleh belum sepenuhnya dapat menerangkan sifat katalitik dari $Fe(111)$. Oleh karena itu disarankan untuk melakukan optimasi pada posisi-posisi lain. Sehingga didapatkan data yang lebih baik untuk menerangkan sifat katalis $Fe_{20}(111)$.

DAFTAR KEPUSTAKAAN

- Adamson, A.W. 1990. *Physical Chemistry of Surface*. 5th ed., Jhon Wiley & Sons Inc., New York. pp 721 – 726.
- Astoria, R. 2002, *Mempelajari Adsorpsi N₂ pada Permukaan Fe(111) dengan Metoda Calzaferrri*. Skripsi Sarjana Kimia. FMIPA UNAND, Padang.
- Benndorf, C. J., T. E. Madey, and A. L. Jhonson. 1987, NH₃ Adsorption and Disociation on A Stepped Fe₍₁₁₁₎ Surface. *Surface Science.*, 187, 434-444.
- Bowser, J.R. 1993. *Inorganic Chemistry*. 4th ed., Mc. Graw-Hill International Book Company, Tokyo. p 620.
- Cotton, F.A. 1987. *Basic Inorganic Chemistry*. 2nd ed., Jhon Wiley & Sons, University of Berne, Bern, pp 1- 43.
- Gates, B.C. 1992. *Catalytic Chemistry.*, Wiley Series in Chemical Engineering, jhon Wiley & Sons, Inc., Ney York, pp 362-368.
- Kusuma, T.S., 1987. *Molecular Orbital Studies of The Interaction of CO molecules on Ni(111) surface with coadsorbed CO molecules, H atoms and O atoms*. Dissertation, University of Kentucky, Lexington, Kentucky, p 1.
- Kusuma, T.S. 1994. Mempelajari Disosiasi Molekul N₂ Pada Permukaan Besi. *Jurnal Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam*, 3(2):103-107.
- Kusuma, T.S. 1995. Mempelajari Dissosiasi Molekul N₂ pada Permukaan Besi (bahagian II), *Jurnal Penelitian Andalas*, VIII(18): 12-17.
- Kusuma, T.S. 1996. *Optimasi isomer-isomer Benzokuinon, Naftokuinon dan Atruquinon*. Pada seminar Nasional Himpunan Kimia Indonesia, di Padang.
- Kusuma, T.S. 2001. *Adsorpsi gas N₂ pada Fe(111), Cr(111) dan Fe/Cr(111) menurut metoda Calzaferrri*. Pada Seminar BKS-PTN Wilayah Indonesi Bagian Barat, di Lampung.
- Lowe, J.P. 1978. *Quantum Chemistry*. Student Edition, Academic Press Inc, New York, pp. 150 – 200 and 283 –294.