

## MEMPELAJARI ADSORPSI MOLEKUL $N_2$ PADA PERMUKAAN LOGAM BESI, KROMIUM DAN TEMBAGA

*(Study of  $N_2$  Molecule Adsorption on Iron, Chromium and Copper)*

Yuhernita, Emdeniz, Theresia Sita Kusuma

Laboratorium Kimia Fisika Jurusan Kimia FMIPA  
Universitas Andalas, Padang 25163

### INTISARI

Telah dilakukan penelitian untuk mempelajari ikatan sebuah molekul  $N_2$  pada permukaan logam besi, kromium dan tembaga menggunakan metoda Calzaferri. Perhitungan dilakukan terhadap tiga bentuk permukaan logam, yaitu (111), (100) dan (110). Dari hasil penelitian, diperoleh bahwa pada permukaan logam besi dan kromium,  $N_2$  diadsorpsi secara atomik, namun pada permukaan tembaga,  $N_2$  diadsorpsi secara molekular. Sifat katalis kromium relatif lebih baik dari besi dan bentuk permukaan (111) relatif lebih aktif sebagai katalis daripada permukaan (100) dan (110).

### ABSTRACT

Method of Calzaferri has been used to study the interaction an  $N_2$  molecule on iron, chromium and copper surfaces. Calculations were done on (111), (100) and (110) surfaces on those metals. These calculations indicated that on iron and chromium surfaces  $N_2$  were adsorbed atomically, however on cooper surfaces  $N_2$  were adsorbed molecularly. The catalitic effect of chromium was better than that iron and (111) surfaces were relatively more active as catalyst than those (100) and (100) surfaces.

### PENDAHULUAN

Sintesis amonia dalam industri sudah dimulai sejak 1913 yang dikenal dengan proses Haber-Bosch. Dissosiasi  $N_2$  merupakan tahap reaksi yang berlangsung lambat dan menjadi penentu kecepatan reaksi. Agar dissosiasi tersebut berlangsung lebih cepat, peranan katalis sangatlah penting. Katalis yang sering digunakan adalah besi (Howe, 1988). Berbagai eksperimen tentang proses katalisis pada bermacam-macam bentuk permukaan logam besi telah dilakukan. Dari eksperimen tersebut diketahui bahwa permukaan Fe(111) sangat aktif, yaitu  $\pm 25$  kali lebih aktif dari permukaan Fe(100) dan  $\pm 400$  kali lebih aktif dari permukaan Fe(110) pada tekanan 20 atm dan

suhu  $525^{\circ}C$  (Gates, 1992), sedangkan perbandingan kecepatan dissosiasi  $N_2$  pada permukaan logam besi tersebut berturut-turut adalah 60 : 25 : 1 (Bozda, 1977). Hasil-hasil ini memperlihatkan bahwa aktivitas katalisis sangat tergantung pada struktur dari permukaan besi.

Agar effisiensi reaksi katalisis dapat ditingkatkan, perlu juga dianalisis logam-logam lain yang mungkin dapat digunakan sebagai katalis selain besi dengan berbagai bentuk permukaannya. Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan metoda Calzaferri yang diolah dengan bantuan komputer IBM-PC. Permukaan logam yang diamati adalah logam besi (Fe), kromium (Cr) dan tembaga (Cu).

Bentuk permukaannya adalah (111), (100) dan (110) yang terdiri dari dua lapisan permukaan logam dengan jumlah atom total 9 sampai 11 atom. Sedangkan sebuah molekul N<sub>2</sub> mendarat pada permukaan logam dengan posisi sumbu molekul tegak lurus terhadap bidang permukaan logam. Pada penelitian sebelumnya telah dianalisis bahwa satu atom dari logam-logam tersebut dapat mendissosiasikan molekul N<sub>2</sub> dengan baik, kecuali pada tembaga hanya memperpanjang ikatan kedua atom N tersebut (unpublished ; Rahmi, 1996). Penelitian ini bertujuan untuk mengamati bagaimana dissosiasi molekul N<sub>2</sub> pada beberapa atom permukaan logam yang lebih mencerminkan keadaan logam yang sebenarnya.

**METODE PENELITIAN**

Metoda Calzaferri yang merupakan modifikasi dari metoda Extended Huckel Molecular Orbital (EHMO). Metoda ini dapat

menggambarkan sifat ikatan antara atom yang teradsorpsi oleh permukaan dengan atom permukaan logam. Dengan mengamati panjang ikatan optimal dan kuat ikatan antara atom-atom dalam molekul, dapat diketahui kestabilan molekul serta mudah tidaknya proses dissosiasi molekul N<sub>2</sub> pada permukaan logam berlangsung.

Masakan data yang dibutuhkan program Calzaferri ini adalah jumlah atom, jenis atom, sistem koordinat atom-atom serta parameter masing-masing atom. Parameter tersebut adalah jumlah elektron valensi masing-masing atom, jenis orbital yang ditempati oleh elektron-elektron valensi beserta energi ionisasi orbital tersebut (Valence State Ionization Energy, VSIE dalam eV) dan orbital eksponen (dalam a.u). Untuk elektron valensi yang mengisi subkulit d, ada dua jenis orbital eksponen ( $\alpha_1$  dan  $\alpha_2$ ) dan dua jenis koefisien orbital eksponen (C<sub>1</sub> dan C<sub>2</sub>). Parameter yang digunakan dalam penelitian ini dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Parameter atom yang digunakan dalam perhitungan dengan menggunakan metoda Calzaferri

atom	Orbital	IP (eV)	C <sub>1</sub>	$\alpha_1$	C <sub>2</sub>	$\alpha_2$
N	2s	-26,00		2,140		
	2p	-13,40		1,950		
Fe	4s	-7,60	0,537	1,900	0,668	1,800
	4p	-3,80		1,900		
	3d	-9,20		5,350		
Cr	4s	-7,30	0,487	1,700	0,720	1,600
	4p	-3,80		1,700		
	3s	-7,90		4,950		
Cu	4s	-12,00	0,486	2,200	0,657	2,777
	4p	-7,50		2,200		
	3d	-15,60		6,680		

Ket : IP = Potensial ionisasi;  $\alpha_i$  = eksponen orbital, C<sub>i</sub> = koefisien orbital atom.

Luaran data yang dihasilkan adalah energi sistem (dalam eV) dan reduced overlap population yang dapat dikaitkan dengan kekuatan ikatan antar atom dalam sistem. Keterangan rinci tentang program Calzaferri ini dapat dilihat pada Quantum Chemistry Program Exchange (Calzaferri, 1992).



## HASIL DAN DISKUSI

Dalam penelitian ini pengamatan dilakukan terhadap sebuah molekul  $N_2$  yang datang dengan sumbu molekul tegak lurus permukaan logam besi, kromium dan tembaga. Untuk masing-masing posisi dilakukan optimasi sepanjang sumbu Z (jarak N ke permukaan dan jarak kedua atom N). Peramalan sifat katalis dari logam transisi terhadap  $N_2$  yang diamati didasarkan pada panjangikatan antara atom N dengan atom-atom permukaan logam serta panjang ikatan antara kedua atom N. Sebelumnya terlebih dahulu ditentukan panjang ikatan pada  $N_2$  bebas dan dibandingkan dengan data eksperimen. Dari optimasi panjang ikatan  $N_2$  bebas ini didapatkan bahwa jarak antara kedua atom N adalah 1,098 Å. Panjang ikatan ini tidak berbeda jauh dari hasil eksperimen, yaitu 1,100 Å. Disamping itu vibrasi molekul  $N_2$  bebas hasil optimasi juga tidak berbeda jauh dari eksperimen, dimana vibrasi molekul  $N_2$  hasil optimasi adalah  $2413\text{ cm}^{-1}$  sedangkan dari hasil eksperimen adalah  $2360\text{ cm}^{-1}$  (Tibbetts, 1979). Karena itu metoda ini dapat digunakan lebih lanjut dalam penentuan panjang ikatan pada sistem  $N_2$  dengan permukaan logam besi, kromium dan tembaga.

### $N_2$ Pada Permukaan Besi dan Kromium

Molekul  $N_2$  yang jatuh tegak lurus ke permukaan besi dan kromium (Gambar 1) mengalami disosiasi. Ini sesuai dengan hasil penelitian yang dilaporkan oleh M. Grunze (1984). Salah satu atom N terikat pada permukaan logam, sedangkan satu atom N lainnya terlepas dari permukaan logam (terbang). Hasil optimasi (Tabel 2 dan 3) memperlihatkan dengan jelas jarak N ke N relatif cukup jauh, yaitu besar dari 3,00 Å. Jadi pada sistem permukaan besi dan kromium ini, nitrogen cenderung teradsorpsi secara atomik. Hal ini sesuai pula dengan yang dilaporkan sebelumnya bahwa nitrogen yang teradsorpsi secara molekular pada Fe mempunyai energi ikatan yang relatif lebih kecil dari energi ikatan nitrogen yang teradsorpsi secara atomik,

sehingga ada kemungkinan nitrogen yang teradsorpsi secara molekular pada permukaan logam Fe dapat diusir oleh nitrogen yang teradsorpsi secara atomik (Kusuma, 1994).

Atom N yang teradsorpsi pada permukaan besi dan kromium ada yang terikat relatif sangat kuat (sk, dengan overlap population (o.p)  $> 1,00$ ), cukup kuat (ck dengan o.p = 0,50 - 1,00), lemah (l, dengan o.p = 0,10 - 0,50) dan sangat lemah (sl, dengan o.p = 0,05 - 0,10). Atom N tersebut dapat berikatan dengan satu atom permukaan (on-top), dua atom permukaan (bridge), tiga atom permukaan (tri-fold) atau empat atom permukaan (tetra-fold) (Gambar 3).

### $N_2$ Pada Permukaan Besi (Fe)

Pada Tabel 2 diperlihatkan bahwa atom N yang teradsorpsi pada Fe(111) berada di atas permukaan Fe(111). Pada posisi a, atom N berikatan sangat kuat dengan satu atom permukaan lapisan pertama (on-top) (Gambar 1.a). Sedangkan pada posisi b, atom N berikatan relatif lebih kuat dengan atom permukaan lapisan kedua. Hal ini memungkinkan, karena cukup dekatnya jarak antara lapisan permukaan Fe(111), yaitu 0,83 Å. Disamping itu jarak antar atom pada lapisan permukaan Fe(111) relatif lebih besar, sehingga memberi cukup ruang bagi atom N untuk lebih mendekati atom lapisan kedua dari permukaan Fe(111). Pada posisi c, atom N berikatan lemah dengan atom-atom permukaan Fe(111). Ikatan N pada posisi ini relatif lebih memungkinkan untuk terlepas kembali.

Pada permukaan Fe(100), atom N berikatan cukup kuat dengan atom-atom permukaan Fe(100) sehingga relatif tidak mudah untuk terlepas kembali. Atom N tersebut tidak hanya berada di atas permukaan logam Fe(100) tetapi juga dapat masuk ke permukaan (posisi c pada Gambar 1.b). Pada posisi ini, atom N terikat relatif lebih kuat dengan atom lapisan kedua. Hal ini terjadi karena jarak antar atom pada lapisan permukaan Fe(100) cukup besar, yaitu 2,87 Å.



Atom N yang teradsorpsi pada permukaan Fe(110) berada di atas permukaannya. Jarak antar lapisan permukaan Fe(110) yang relatif lebih jauh, yaitu 2,03 Å menyebabkan atom N tersebut hanya berikatan dengan atom-atom permukaan lapisan pertama (Gambar 1.c). Ikatan atom N ke atom-atom permukaan logam Fe(110) cukup kuat, sehingga relatif lebih sukar untuk terlepas kembali.

### *N<sub>2</sub> Pada Permukaan Kromium (Cr)*

Atom N yang teradsorpsi pada Cr(111) berada di atas permukaan logam. Pada posisi b, atom N terikat relatif lebih kuat dengan atom lapisan kedua. Hal ini memungkinkan, karena jarak antar lapisan atom Cr(111) yang relatif kecil, yaitu 0,83 Å (Gambar 1.a). Disamping itu jarak antar atom pada permukaan Cr(111) relatif lebih besar (4,073 Å) yang memberi peluang bagi atom N untuk lebih mendekati atom lapisan kedua dari permukaan Cr(111). Pada posisi c atom N terikat lemah dengan atom-atom permukaan Cr(111), sehingga relatif lebih memungkinkan untuk terlepas kembali.

Atom N yang teradsorpsi pada permukaan Cr(100) berikatan cukup kuat dengan atom-atom permukaan Cr(100) sehingga relatif tidak mudah untuk terlepas kembali. Atom N tersebut berada di atas permukaan logam Cr(100). Hal ini berbeda dengan adsorpsi N pada posisi c pada permukaan Fe(100), dimana atom N dapat masuk ke permukaan Fe(100). Dengan demikian atom N yang teradsorpsi pada posisi c pada Fe(100) relatif lebih sukar untuk terlepas kembali dibanding Cr(100). Hal ini memberi petunjuk bahwa permukaan Cr(100) relatif lebih baik sifat katalisnya dibanding Fe(100).

Atom N yang teradsorpsi pada permukaan Cr(110) berada di atas permukaan Cr(110). Atom N tersebut berikatan dengan atom-atom lapisan pertama, dan tidak berikatan dengan atom-atom lapisan kedua. Hal ini terjadi karena jarak antar lapisan permukaan

Cr(110) yang relatif besar, yaitu 2,04 Å (Gambar 1.c). Ikatan atom N ke atom permukaan relatif cukup kuat, sehingga atom N tersebut relatif lebih sukar untuk terlepas kembali.

Dari bentuk-bentuk permukaan logam besi dan kromium di atas, dapat dilihat bahwa baik pada Fe(110) maupun Cr(110), meskipun N<sub>2</sub> terdissosiasi dengan baik tetapi salah satu atom N masih terikat relatif lebih kuat pada atom-atom permukaan logam. Salah satu contohnya adalah pada posisi c pada permukaan Fe(110) dan posisi b pada Fe(111). Overlap atom N dengan atom-atom permukaan logam Fe(111) relatif lebih lemah dibanding Fe(110). Ikatan yang cukup lemah ini menyebabkan atom N relatif lebih mudah untuk meninggalkan permukaan Fe(111). Hal ini menunjukkan bahwa sifat katalis Fe(111) relatif lebih baik dari Fe(110).

Begitu juga halnya dengan sistem permukaan kromium. Pada Cr(111) terdapat beberapa posisi N yang relatif lebih mudah untuk terlepas kembali (posisi c), sedangkan pada Cr(110) dan Cr(100) kemungkinan tersebut lebih kecil karena cukup kuatnya ikatan N ke permukaan Cr(110) dan Cr(100). Jadi dalam hal ini juga dapat dikatakan sifat katalisis Cr(111) lebih baik daripada Cr(110) dan Cr(100).

Jika dibandingkan overlap atom N dengan atom-atom permukaan pada ketiga bentuk permukaan besi dan kromium, dapat dilihat bahwa untuk posisi dan bentuk permukaan yang sama, overlap atom N dengan permukaan besi relatif lebih kuat dibanding kromium. Hal ini berarti atom N pada permukaan besi relatif terikat kuat dibanding kromium, sehingga atom N yang teradsorpsi pada kromium relatif lebih mudah untuk terlepas kembali. Hal ini sesuai dengan yang dilaporkan Dowben (1991) bahwa energi desorpsi ( $E_d$ ) molekul nitrogen pada Cr(110) lebih kecil daripada energi desorpsi ( $E_d$ ) molekul nitrogen yang teradsorpsi pada logam transisi lainnya. Karena itu jika dibandingkan



sifat katalisnya, maka dapat dikatakan sifat katalis kromium lebih baik daripada besi.

### **N<sub>2</sub> Pada Permukaan Tembaga**

Molekul N<sub>2</sub> yang datang tegak lurus ke permukaan tembaga tidak mengalami disosiasi. Hasil optimasi (Tabel 4) memperlihatkan, jarak antara kedua atom N sekitar 1,10 Å. Jadi pada permukaan tembaga molekul N<sub>2</sub> teradsorpsi molekuler.

Ikatan antara atom N pertama ke permukaan tembaga relatif tidak begitu kuat dibanding pada besi dan kromium (overlap population kecil dari 1,00). Hal ini sesuai dengan laporan penelitian sebelumnya yang menjelaskan bahwa dalam keadaan dasar molekul N<sub>2</sub> tidak bereaksi dengan permukaan tembaga (Trapnell, 1953), akan tetapi molekul N<sub>2</sub> yang terdissosiasi dapat teradsorpsi secara atomic pada permukaan tembaga (Tibbetts, 1979). Atom N tersebut juga dapat terikat dengan permukaan tembaga secara on-top, bridge atau tri-fold.

Pada posisi yang diamati, molekul N<sub>2</sub> berada di atas permukaan logam Cu(111) dan berikatan dengan atom-atom permukaan logam lapisan pertama. Atom-atom permukaan pada lapisan kedua tidak memungkinkan untuk berikatan dengan molekul N<sub>2</sub>, karena jarak antara lapisan permukaan yang relatif besar, yaitu 2,09 Å serta jarak antara atom-atom pada lapisan yang relatif kecil, yaitu 2,56 Å.

Jarak antara atom N pertama ke permukaan Cu(111) berkisar antara 0,616 Å sampai 1,370 Å. Sedangkan jarak kedua atom N berkisar antara 1,083 Å sampai 1,175 Å. Ikatan molekul N<sub>2</sub> ke permukaan Cu(111) ini cukup kuat, kecuali pada posisi c (Gambar 2.a). Pada posisi ini, ikatan molekul N<sub>2</sub> dengan atom-atom permukaan logam cukup lemah, sehingga relatif lebih mudah untuk terlepas kembali sebagai molekul N<sub>2</sub>.

Pada permukaan sistem Cu(100), molekul N<sub>2</sub> yang teradsorpsi berada di atas permukaan logam dan berikatan dengan atom-atom lapisan pertama. Jarak antara kedua atom

N berkisar antara 1,082 Å sampai 1,100 Å. Ikatan molekul N<sub>2</sub> ke permukaan Cu(100) cukup kuat kecuali pada posisi c (Gambar 2.b). Pada posisi ini ikatannya cukup lemah sehingga relatif lebih mudah untuk terlepas kembali sebagai N<sub>2</sub>. Pada permukaan Cu(100), atom-atom permukaan lapisan kedua tidak memungkinkan untuk berikatan dengan molekul N<sub>2</sub>. Hal ini disebabkan karena jarak atom-atom permukaan yang kecil, sehingga molekul N<sub>2</sub> tidak mempunyai cukup ruang untuk lebih mendekati permukaan dan berikatan dengan atom-atom lapisan kedua (Gambar 2.b).

Molekul N<sub>2</sub> yang teradsorpsi pada permukaan Cu(110). Pada posisi b (Gambar 2.c), ikatan antara atom N pertama ke permukaan cukup lemah, akibatnya pada posisi ini molekul N<sub>2</sub> relatif lebih mudah untuk terlepas kembali sebagai N<sub>2</sub>. Pada posisi c, satu dari atom N dapat memasuki permukaan Cu(110). Jarak kedua atom N berkisar antara 1,078 Å sampai 1,126 Å.

Dari hasil optimasi ketiga bentuk permukaan tembaga ini, dapat dilihat bahwa atom-atom permukaan Cu(110) relatif lebih kuat mengikat molekul N<sub>2</sub> dibanding Cu(111) dan Cu(100). Walaupun demikian ketiga bentuk permukaan tembaga ini tidak dapat menyebabkan disosiasi molekul N<sub>2</sub> tetapi hanya memperpanjang ikatan N ke N. Hasil ini juga didukung oleh overlap population N ke N yang nilainya cukup besar, berkisar antara 1,277 sampai 1,730. Ini berarti ikatan antara kedua atom N cukup kuat yang membuktikan bahwa N<sub>2</sub> tidak terdissosiasi.

### **KESIMPULAN DAN SARAN**

Hasil optimasi sistem-sistem yang diamati memperlihatkan bahwa besi (Fe) dan kromium (Cr) dapat menyebabkan disosiasi molekul N<sub>2</sub>, dimana jarak N ke N diperpanjang sampai lebih dari 3,00 Å. Sedangkan pada tembaga (Cu), molekul N<sub>2</sub> tidak mengalami disosiasi, dimana jarak N ke N kecil dari 1,18 Å. Molekul N<sub>2</sub> yang jatuh tegak lurus ke



permukaan tembaga, teradsorpsi secara molekuler. Akibatnya tembaga tidak dapat digunakan sebagai katalis.

Atom atau molekul nitrogen yang teradsorpsi pada permukaan logam (111) relatif lebih mudah untuk dapat terlepas kembali dibanding permukaan logam (110) dan (100). Berarti permukaan (111) relatif lebih reaktif sebagai katalis dibanding permukaan logam (110) dan (100). Sifat katalisis kromium dan besi hampir sama. Akan tetapi kuat ikatan N ke atom-atom permukaan logam pada Fe relatif lebih kuat daripada kromium. Berarti sifat katalisis kromium relatif lebih baik dari besi.

Penelitian ini merupakan penelitian semi empiris, maka dibutuhkan data yang lebih lengkap mengenai sifat katalis logam-logam transisi. Untuk mengetahui sifat katalis logam transisi lebih lanjut disarankan untuk melakukan penelitian terhadap permukaan logam-logam transisi lainnya.

#### DAFTAR KEPUSTAKAAN

1. Bozda, F., et al., *J. Catal.*, 50, p 519, (1977)
2. Calzaferri, G. and M. Brandel, *Quantum Chemistry Program Exchange*, Institut for Inorganic and Physical Chemistry, University of Berne, Bern, pp 1-43, (1992)
3. Dowben, P.A., et al., *M., Surf. Sci.*, 254, pp 428, (1991)
4. Gates, B.C., *Catalytic Chemistry*, Wiley Series in Chemical Engineering, John Wiley & Sons, Inc., New York, pp 362-368, (1992)
5. Grunze, M., et al., *J. Phys. Rev. Letter*, 53, p 850, (1984)
6. Howe, R. and Vanselow *Chemistry and Physics of Solid Surfaces VII*, Heidenberg-Berlin, pp 54-57, (1988).
7. Kusuma, T.S., *Jumpa*, 3, hal 103, (1994)
8. Nicholas, J.F., *An Atlas of Model of Crystal Surfaces*, Science Publisher Inc., (1965)
9. Rahmi, *Penggunaan Metoda Calzaferri untuk Mempelajari Ikatan Gas N<sub>2</sub> dan CO dengan logam-logam Transisi*, Skripsi Sarjana Kimia, FMIPA UNAND, Padang, (1996).
10. Tibbetts, G.G., *J. Chem. Phys.*, 70, p 3600, (1979).
11. Trapnell, B.M.W., *Proc. R. Soc., London*, A, 218, p 566, (1953)

Tabel 2. Optimasi adsorpsi N<sub>2</sub> pada permukaan besi (Fe)

Logam	Posisi	dLN	dNN	Jenis ikatan	o.p. N <sub>1</sub> - Fe
Fe(111)	a	1,360	3,715	On-top	S(1,453)sk
	b	0,541	3,712	On-top	D(1,537)sk
	c	0,219	3,714	Tri-fold	S(0,143)l S(0,143)l S(0,143)l
Fe(100)	a	1,358	3,717	On-top	S(1,465)sk
	b	0,885	3,683	Bridge	S(0,780)ck S(0,780)ck
	c	-0,180	3,803	Tri-fold	D(1,064)sk S(0,659)ck S(0,659)ck
Fe(110)	a	1,356	3,716	On-top	S(1,542)sk
	b	1,196	3,697	On-top	S(1,369)sk
	c	0,975	3,685	Tri-fold	S(0,721)ck S(0,422)l S(0,422)l
	d	1,071	3,680	Bridge	S(0,793)ck S(0,793)ck

Ket : dLN = jarak atom N ke permukaan logam, dNN = jarak antara kedua atom N, o.p = overlap population, S = atom terikat pada atom lapisan satu, D = atom N terikat pada atom lapisan kedua, sk = sangat kuat, ck = cukup kuat, l = lemah.

Tabel 3. Optimasi adsorpsi molekul N<sub>2</sub> pada permukaan kromium (Cr)

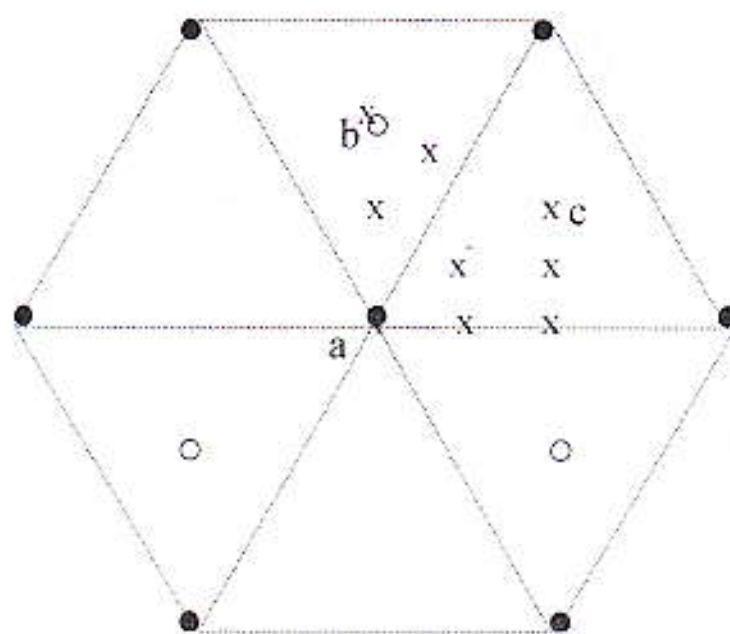
Logam	Posisi	dLN	dNN	Jenis ikatan	o.p. N <sub>1</sub> – Fe
Cr(111)	a	1,424	3,723	On-top	S(1,430)sk
	b	0,610	3,717	On-top	D(1,510)sk
	c	0,243	3,729	Tri-fold	S(0,217)l S(0,217)l S(0,217)l
Cr(100)	a	1,420	3,719	On-top	S(1,465)sk
	b	1,052	3,700	Bridge	S(0,715)ek S(0,715)ek
	c	0,957	3,700	Bridge	S(0,608)ek S(0,608)ek
Cr(110)	a	1,417	3,718	On-top	S(1,550)sk
	b	1,288	3,705	On-top	S(1,327)sk
	c	1,144	3,698	Tri-fold	S(0,672)ek S(0,349)l S(0,349)l
	d	1,208	3,698	Bridge	S(0,728)ek S(0,728)ek

Ket : Arti semua singkatan dalam tabel dapat dilihat pada Tabel 2.

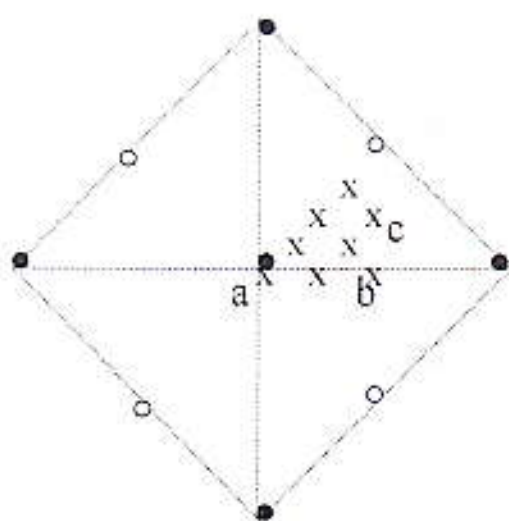


Tabel 4. Optimasi adsorpsi molekul N<sub>2</sub> pada permukaan logam tembaga (Cu)

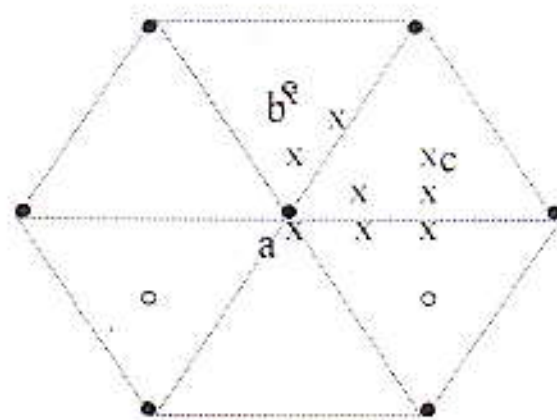
Logam	Posisi	dLN	dNN	Jenis ikatan	o.p. NI-Fe	o.p. N-N
Cu(111)	a	1,370	1,083	On-top	S(0,951)ck	1,709
	b	0,616	1,133	Tri-fold	S(0,4258)l	1,435
					S(0,467)l	
					S(0,467)l	
	c	0,647	1,175	Tri-fold	S(0,453)l	1,277
					S(0,453)l	
S(0,453)l						
Cu(100)	a	1,374	1,082	On-top	S(0,940)ck	1,716
	b	0,969	1,100	Bridge	S(0,518)ck	1,613
					S(0,518)ck	
	c	0,934	1,092	Bridge	S(0,419)l	1,644
					S(0,419)l	
	Cu(110)	a	1,366	1,085	On-top	S(0,960)ck
b		0,963	1,078	Bridge	S(0,219)l	1,730
					S(0,219)l	
c		-,056	1,114	Bridge	S(0,119)l	1,510



(a)

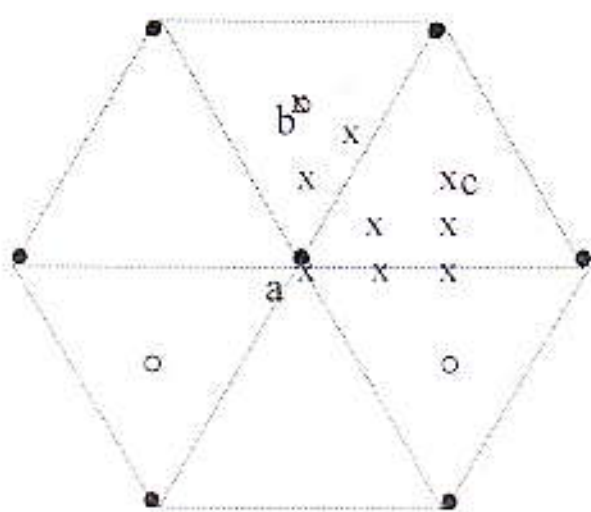


(b)

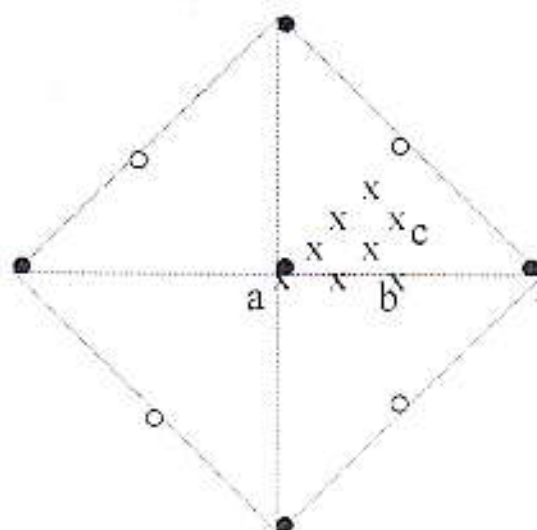


(c)

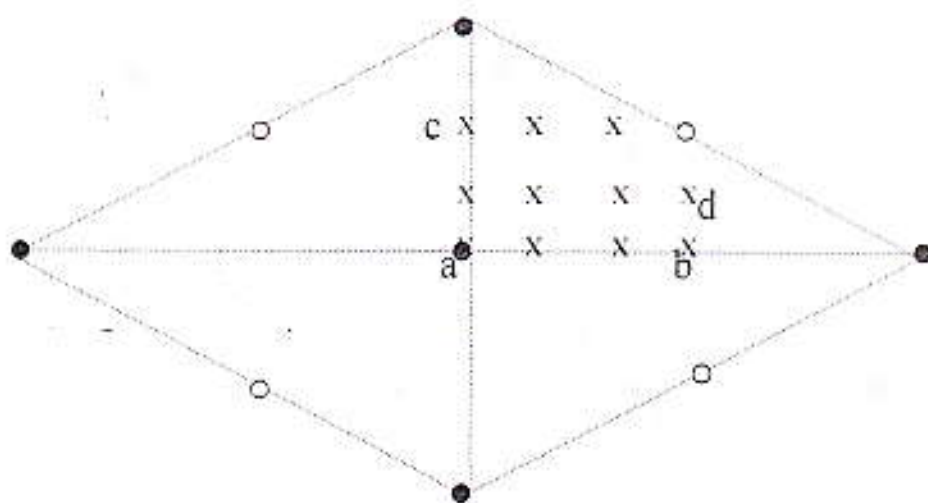




(a)



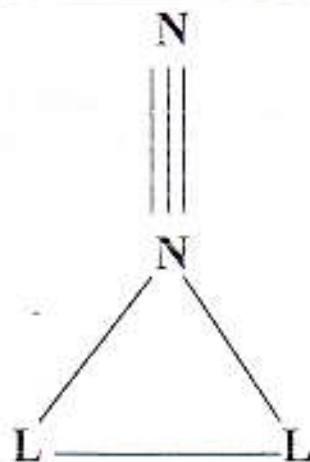
(b)



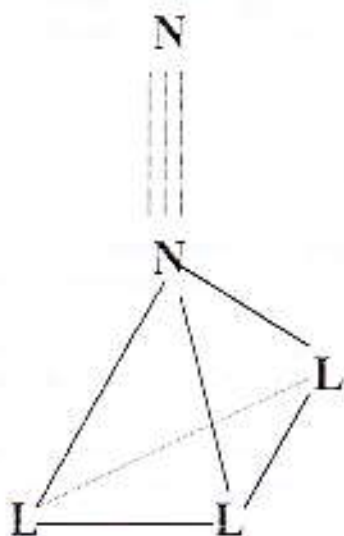
(c)



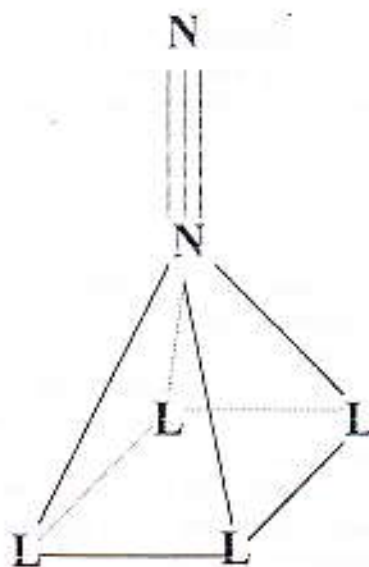
(a)



(b)



(c)



(d)