

ADSORPSI GAS N_2 DAN NH_3 PADA PERMUKAAN $Fe(111)$, $Cr(111)$ DAN $Fe/Cr(111)$

Theresia Sita Kusuma, Emdeniz, dan Hamzar Suyani

Laboratorium Komputasi Kimia, Jurusan Kimia, FMIPA Universitas Andalas Padang 25163

ABSTRAK

Program CalzaferriN, bekerja pada 'Personal Computer', digunakan untuk mempelajari pola adsorpsi gas N_2 dan NH_3 pada permukaan $L(111)$. Permukaan terdiri dari tiga lapis dan 13 atom, dengan L ialah Fe, Cr dan Fe/Cr (satu atom Fe diganti dengan atom Cr). Gas N_2 dan NH_3 dengan arah jatuh tegak lurus dan sejajar mendatangi permukaan dengan berbagai posisi jatuh. Hasil komputasi memperlihatkan umumnya N_2 diadsorpsi atomik oleh ketiga permukaan. Bentuk kompleks permukaan yang merupakan kombinasi antara pola bridge dan on top tidak ditentukan oleh jenis permukaan, arah dan posisi jatuh N_2 , sedangkan NH_3 diserap permukaan secara kimia dan fisika. Adsorpsi yang akan terjadi tergantung pada jenis permukaan, arah dan posisi jatuh NH_3 . Diduga hanya N on top, hasil adsorpsi N_2 dengan disosiasi, berinteraksi dengan H_2 membentuk NH_3 . Akibatnya kadar NH_3 yang terbentuk tidak dapat dinaikkan dengan tajam. Di samping itu, makin panjang jarak antar atom N dengan atom logam pada pola on top, makin mudah NH_3 terbentuk didesorpsi permukaan yang bersangkutan. Diduga permukaan $Fe/Cr(111)$ relatif lebih mudah mendesorpsi NH_3 daripada logam murni.

ABSTRACT

CalzaferriN program, works on PC, was used to study the adsorption models of an N_2 and NH_3 molecules on an $L(111)$ surface. L was Fe, Cr, and Fe/Cr (one of the central atom was substituted by Cr). This surface consisted of three layers and 13 atoms. An N_2 or an NH_3 (assumed to be planar) molecules came to the surface with two direction: perpendicular and parallel to the surface. Each direction had several positions of the oncoming molecule. Results of these computations showed that: usually N_2 was adsorbed atomically by the surface: i.e. the combination of on-top and bridge models. These models were not the surface, the direction, and the position of the oncoming molecule dependence. However, for the adsorbed NH_3 these were. The NH_3 molecule was adsorbed chemically (with or without dissociations) and physically. It was predicted that the on top model (of the atomically adsorbed N_2) interacted with H_2 to produce the adsorbed NH_3 . As a result the NH_3 production could not be increased sharply. On the other hand the longer the r_{NL} on top the easier the NH_3 was desorbed by the surface: i.e. $Cr(111) > Fe(111)$, and $Fe/Cr(111) > Cr(111)$ when N was bound by Cr.

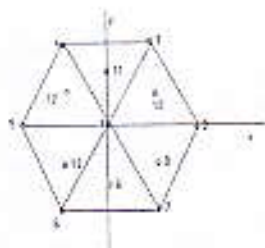
PENDAHULUAN

Sintesis gas NH_3 dari gas N_2 dan H_2 bebas memerlukan katalis. Sebagai katalis digunakan logam besi { $Fe(111)$ } dengan produk NH_3 sekitar 20%. Untuk memperbesar kadar NH_3 terbentuk katalis dapat diganti atau dimodifikasi. Logam pengganti harus mempunyai sifat dapat menyerap gas N_2 secara atomik, dan mendesorpsi NH_3 terbentuk. Salah satu diantara logam-logam pengganti ialah khrom. Seperti halnya besi, logam ini mengkristal dalam bentuk bcc. Lattice parameter-nya, a_0 , tidak berbeda banyak daripada besi (2,87 vs 2,88 Å). Elektron valensi kedua logam ini sama-sama mengisi orbital 3d. Dowben *et al*' melaporkan memang gas N_2 diserap atomik pada permukaan $Cr(110)$. Meskipun demikian, masih dirasa perlu

membandingkan pola adsorpsi gas N_2 dan NH_3 pada permukaan $Fe(111)$ dan $Cr(111)$.

Tujuan penelitian ini ialah mempelajari pola adsorpsi gas N_2 dan NH_3 pada $L(111)$. L = Fe, Cr, dan Fe/Cr (atom Fe pusat pada lapisan pertama diganti dengan Cr, dan jarak antar atom tidak berubah, kadar Cr=7,7%) dan sekaligus menentukan $BE(N_2)$ dan $BE(NH_3)$. Besaran-besaran itu didefinisikan sebagai energi yang dibutuhkan permukaan untuk mengikat berturut-turut satu molekul N_2 dan satu molekul NH_3 . Di samping itu juga menentukan kebolehjadian N diadsorpsi atomik oleh permukaan untuk berinteraksi dengan gas H_2 membentuk gas NH_3 yang dapat didesorpsi permukaan. Juga, menentukan permukaan paling efektif untuk menghasilkan gas NH_3 . Permukaan yang digunakan dalam penelitian ini terdiri dari 13 atom dan tiga lapisan: tujuh atom lapisan

pertama, tiga atom lapisan kedua, dan tiga atom lapisan ketiga (Gambar 1). Gas N₂ mendatangi permukaan dengan dua arah jatuh: sumbu molekul tegak lurus dan sejajar permukaan. Demikian juga NH₃ (dianggap planar dengan r_{NH} = 0,992 Å dan ∠ HNH = 120° (D3h)) mendatangi permukaan dengan dua arah jatuh: bidang molekul sejajar dan tegak lurus permukaan. Proses adsorpsi yang terjadi untuk setiap posisi jatuh diamati secara optimasi 3D dengan program CalzaferiN² yang bekerja pada Pentium IV dan RAM 32 MB, ketelitian 0,0003 eV untuk gas N₂ dan 0,00003 eV untuk gas NH₃.



Gambar 1. Permukaan L(111) Terdiri dari Tiga Lapisan dan 13 Atom, No 1-7 atom lapisan pertama, No 9,11, dan 13 atom lapisan kedua, No 8, 10, dan 12 atom lapisan ketiga. L=Fe, Cr, Fe/Cr (atom Fe No 1 diganti Cr).

METODE PENELITIAN

Program Calzaferi³ atau CalzaferiN² digunakan untuk mempelajari senyawa-senyawa anorganik. Dalam penelitian ini program dipakai untuk mempelajari interaksi gas dengan permukaan. Oleh karena itu beberapa parameter atom (yang mencekam sifat elektronik atom) perlu direvisi. Parameter suatu atom terdiri dari: jumlah elektron valensi, tipe orbital yang diduduki oleh elektron valensi (1s, 2s, 2p, dan seterusnya) beserta orbital eksponen (ξ) dan ionisasi potensialnya (IP). Untuk elektron valensi yang menduduki sub-orbital d, ada dua orbital eksponen ξ₁ dan ξ₂ serta dua koefisien orbital eksponen yaitu C₁ dan C₂. Parameter revisi atom Fe, Cr dan H diambil dari penelitian sebelumnya^{4,5} dan parameter atom N tanpa revisi diambil dari program (Tabel 1). Masukan program adalah

koordinat dan parameter atom-atom penyusun molekul. Di sini digunakan koordinat internal. Luaran program berbentuk antara lain: jarak antar atom (r), total energi yang dipunyai molekul (E_T). Keterangan rinci program dapat dibaca pada manual program Calzaferi.

Kemudian gas N₂ mendatangi permukaan. Untuk setiap arah jatuh dibuat empat macam posisi jatuh. Pada arah jatuh sejajar permukaan jarak masing-masing atom N ke permukaan dan jarak antar atom N (r_{NN}) diambil 1,3 Å. Sedangkan untuk arah jatuh tegak lurus permukaan diambil r_{NL} = 1,3 Å (L atom lapisan pertama); r_{NL} = 0,77 Å (L atom lapisan kedua dan ketiga, atau N menuju titik tengah dua atom pada lapisan pertama) dan r_{NN} = 1,3 Å.

Untuk gas NH₃ mendatangi permukaan dengan arah jatuh bidang molekul sejajar dan tegak lurus permukaan dibuat masing-masing lima dan tiga posisi jatuh. Pada arah jatuh sejajar diambil r_{NL} awal 1,5 Å (L atom lapisan pertama); 2,2 Å (N diarahkan ke atom lapisan kedua, ketiga, atau ke-pertengahan garis yang menghubungkan dua atom lapisan pertama) dan r_{NN} 1,3 Å. Selanjutnya, salah satu ikatan NH (dari molekul NH₃) dibuat sejajar garis yang menghubungkan dua atom lapisan pertama atau satu atom lapisan pertama dengan proyeksi atom lapisan kedua/ketiga kelapisan pertama. Sedangkan untuk arah jatuh tegak lurus salah satu atom H mengikuti posisi jatuh.

Kedudukan atom-atom permukaan dari setiap posisi jatuh N₂ dan NH₃ dilukiskan dengan internal koordinat. Koordinat ini membutuhkan panjang vektor (l), sudut antar vektor (α), dan sudut antar bidang (δ). Selanjutnya setiap posisi jatuh N₂ dan NH₃ dioptimasi 3D. Optimasi dilakukan secara manual. Untuk molekul N₂ optimasi dimulai dengan (l, α, dan δ) atom N yang paling dekat permukaan (N1) kemudian diikuti oleh (l, α, dan δ) atom N kedua (N2). Dalam keadaan tertentu, untuk mencegah N₂ meninggalkan permukaan pada tahap awal, optimasi tahap awal (set pertama) dimulai dengan (α, δ, dan l) atom N1 dan kemudian (l, α, dan δ) dari N2. Pada set kedua optimasi mengikuti pola yang normal, demikian seterusnya.

Tabel 1. Parameter atom yang digunakan dalam penelitian ini

Atom	Ns	ξs	IPs (eV)	Np	ξp	IPp (eV)	nd	ξ1	IPd (eV)	ξ2	C1	C2
Fe	4	1,70	8,75	4	1,40	5,70	3	5,35	10,50	1,80	0,5366	0,6678
Cr	4	1,60	6,77	4	1,30	3,72	3	4,95	9,50	1,60	0,4876	0,7205
N	2	2,14	26,00	2	1,55	13,4						
H	1	1,30	12,60									

Keterangan: Nilai IP bertanda negatif, n=bilangan kuantum utama elektron, valensi suatu atom

Untuk NH_3 dimulai dengan atom N (l , α , dan δ), dan ketiga atom H secara serentak (l , α , dan δ). Jika sistem koordinat dibantu oleh Dummy (D), maka optimasi diteruskan dengan D (l , α , dan δ). Pada seri optimasi yang pertama r_{NL} diusahakan maksimum 2,200 Å. Artinya panjang vektor N pada optimasi pertama dapat optimal dan tidak. Hal ini dilakukan untuk mencegah atom N meninggalkan permukaan

pada tahap awal. Optimasi dikatakan selesai bila nilai absolut perubahan E_T sistem antara dua seri optimasi berurutan $\leq 0,0003$ eV (untuk N_2) dan $\leq 0,00003$ eV (untuk NH_3). Selama optimasi berlangsung permukaan dianggap *rigid*. Dalam keadaan optimal ditentukan nilai E_T sistem, r_{NL} , r_{NL} , r_{NN} , dan r_{NH} . Selanjutnya juga dihitung nilai $\text{BE}(\text{N}_2)$ dan $\text{BE}(\text{NH}_3)$ pada L(111) menurut persamaan:

$$\begin{aligned}\text{BE}(\text{N}_2) \text{ pada L}(111) &= E_T\{\text{L}(111)\} + E_T(\text{N}_2) - E_T\{\text{L}(111)+\text{N}_2\} \\ \text{BE}(\text{NH}_3) \text{ pada L}(111) &= E_T\{\text{L}(111)\} + E_T(\text{NH}_3) - E_T\{\text{L}(111)+\text{NH}_3\}\end{aligned}$$

HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil optimasi gas N_2 dengan arah jatuh tegak lurus dan sejajar permukaan L(111), masing-masingnya dengan empat posisi jatuh, dipaparkan pada Tabel 2. Umumnya gas N_2 diadsorpsi atomik oleh ketiga permukaan dengan rentangan $\text{BE}(\text{N}_2)$ yang relatif tidak berbeda, yaitu 21,6305-24,0670; 21,0144-23,4440; dan 17,2266-24,1669 eV masing-masingnya untuk Fe(111), Cr(111), dan Fe/Cr(111). Di sini digunakan asumsi N_2 diadsorpsi atomik bila r_{NN} dalam keadaan optimal $> 2,25$ Å. Baik N_2 yang diserap secara molekuler (No 1) maupun atomik (No 2-8), atom N diikat permukaan menurut pola *on top* (satu atom N diikat oleh satu atom logam) dan *bridge* (satu atom N diikat oleh dua atom logam). Bentuk kompleks permukaan merupakan kombinasi antara pola *on top* dan *bridge*. Baik dari segi $\text{BE}(\text{N}_2)$ maupun dari bentuk kompleks permukaan ketiga permukaan tidak begitu berbeda. Menurut Kusuma⁴ hanya N *on top*, hasil suatu adsorpsi N_2 secara atomik, berinteraksi dengan gas H_2 membentuk NH_3 . Akibatnya, kadar NH_3 yang dihasilkan oleh ketiga permukaan tentu tidak berbeda banyak.

Hasil optimasi gas NH_3 yang mendatangi permukaan dengan arah jatuh tegak lurus (masing-masing tiga posisi jatuh) memperlihatkan: pada Cr(111) gas NH_3 diuraikan oleh permukaan (Tabel 3 No 6, 7, dan 8). Di sini digunakan asumsi, bila r_{NL} dan $r_{\text{NH}} > 2,25$ Å ikatannya akan putus. Pada Fe(111), NH_3 diuraikan (No 6) dan diadsorpsi lemah oleh permukaan (No 6 dan 7). Adsorpsi lemah ini, disebut juga adsorpsi fisika, ditandai oleh $\text{BE}(\text{NH}_3)$ yang mendekati nol dan r_{NL} atau r_{NH} yang besar. Pada permukaan Fe/Cr(111), NH_3 diadsorpsi fisika oleh permukaan (No 6, 7, dan 8). Molekul NH_3 yang diadsorpsi fisika mudah sekali dilepas kembali oleh permukaan. Jadi urutan permukaan melepas NH_3 ialah Fe/Cr(111) $>$ Fe(111) \gg Cr(111).

Hasil adsorpsi gas NH_3 yang mendatangi permukaan L(111) dengan arah

jatuh sejajar (lima posisi jatuh) memperlihatkan: umumnya NH_3 diadsorpsi kimia secara molekuler oleh permukaan dengan $\text{BE}(\text{NH}_3)$ yang kecil (Tabel 3). Akibatnya NH_3 dapat saja didesorpsi oleh permukaan. Rentangan $\text{BE}(\text{NH}_3)$ untuk Fe(111), Cr(111), dan Fe/Cr(111) masing-masingnya adalah: 1,9509-2,2340; 1,0025-1,3760; dan 1,1980-2,4178 eV. Dari segi adsorpsi kimia secara molekuler, urutan permukaan melepas NH_3 ialah Cr(111) $>$ Fe/Cr(111) $>$ Fe(111).

Di samping itu NH_3 juga diadsorpsi kimia secara atomik oleh permukaan (Tabel 3 No 5 untuk Fe(111), No 4 untuk Cr(111)). Pada permukaan Fe/Cr(111) tidak dijumpai adsorpsi kimia dengan disosiasi. Dalam penelitian ini, hasil akhir adsorpsi tidak ditentukan. Artinya bila selama proses optimasi dijumpai NH_3 diuraikan oleh permukaan optimasi dihentikan. Jadi, urutan kemudahan permukaan mendesorpsi NH_3 , Fe/Cr(111) $>$ Cr(111) = Fe(111).

Tabel 2 memaparkan, rentangan r_{NL} *on top* pada Cr(111), Fe/Cr(111), dan Fe(111), masing-masingnya adalah 1,3764-1,3983; 1,3080-1,4028; dan 1,3080-1,3242 Å. Pada Fe/Cr atom N dapat terikat pada Fe atau Cr, sehingga rentangannya sedikit lebih luas. Di atas telah didapatkan urutan kemudahan permukaan melepas NH_3 yang adsorpsi kimia secara molekuler Cr(111) $>$ Fe/Cr(111) $>$ Fe(111). Jadi, dapat dilihat adanya korelasi antara kemudahan permukaan melepas NH_3 dengan bertambah panjangnya r_{NL} *on top*. Dapat disimpulkan, memang NH_3 dibentuk dari interaksi N *on top* dengan gas H_2 . Akibatnya kadar NH_3 didesorpsi permukaan-permukaan di atas tidak memberikan perbedaan yang tajam. Mittsch (disadur dari Hwang dan Mebel⁵) memprediksi sampai saat ini katalis untuk memproduksi NH_3 belum ada penggantinya, yaitu besi oksida.

Tabel 2. Pola Adsorpsi, Panjang Ikatan Antar Atom, dan BE(N₂) gas N₂ pada L(111)

No	Posisi Jatuh	r _{FeN1} (Å)	r _{FeN2} (Å)	r _{FeN1} (Å)	r _{FeN2} (Å)	Δ b, Å	r _{N1N2} (Å)	BE(N ₂) (eV)	Pola
Fe(111)									
1	1→1			1,3260(1)	2,9620(1)	-----	1,6340	11,4012	lt
2	½(1-2 →1-2			1,3690(1) 1,5097(9)	1,3090(2)	0,1207	2,7750	22,9084	b/t
3	9→9			1,4219(2) 1,4710(9)	1,3239(2)	0,0379	2,7290	23,4839	b/t
4	10→ 10			1,5044(3) 1,4970(10)	1,3243(3)	0,0074	2,9140	24,0670	b/t
5	1, 1-10'			1,3210(1)	1,5151(1) 1,3925(10)	0,1226	2,5620	22,0864	tb
6	1,1-9'			1,3160(1)	1,3820(7) 1,5072(9)	0,1252	3,1950	23,3801	tb
7	½(1- 2, 1-2			1,4150(1) 1,4664(9)	1,4150(1) 1,4654(13)	0,0514	2,5264	21,6306	b/b
8	1,1-2			1,3160(1)	1,5099(9) 1,3818(2)	0,1281	3,0670	23,3683	tb
Cr(111)									
1	1→1	1,4010(1)	3,0650(1)			-----	1,6540	11,7386	lt
2	½(1-2 →1-2	1,4530(1) 1,6364(9)	1,3794(2)			0,1034	2,6350	22,1070	b/t
3	9→9	1,4938(7) 1,5690(9)	1,3968(7)			0,0752	2,6580	22,0763	b/t
4	10→ 10	1,5733(3) 1,5490(10)	1,3983(3)			0,0243	2,8520	23,4224	b/t
5	1, 1-10'	1,3850(1)	1,5099(1) 1,4673(10)			0,0226	2,7580	21,0144	tb
6	1,1-9'	1,3980(1)	1,3508(2)			-----	3,3660	23,4135	lt
7	½(1- 2, 1-2	1,4630(1) 1,5823(9)	1,5623(13) 1,4630(1)			0,1193	2,6529	21,0926	b/b
8	1,1-2	1,3910(1)	1,3804(7)			-----	3,5950	23,4440	lt
Fe/Cr(111)									
1	1→1	1,4080(1)	3,0450(1)			-----	1,6370	8,7697	lt
2	½(1-2 →1-2	1,6250(1)		1,3558(9)	1,3080(2)	0,2632	2,6380	22,0074	b/t
3	9→9	1,6552(1)	1,4028(1)	1,3420(9)		0,3132	2,5570	18,6664	b/t
4	10→ 10			1,4981(3) 1,4860(10)	1,3239(3)	0,0121	2,8080	24,1669	b/t
5	1, 1-10'	1,3980(1)			1,3840(7) 1,4990(9)	0,1150	3,2426	20,9241	tb
6	1,1-9'	1,3970(1)			1,3953(7) 1,4989(9)	0,1155	3,1800	20,9264	tb
7	½(1- 2, 1-2	1,6280(1)	1,6280(1)	1,3678(9)	1,3678(13)	0,2602	2,8122	19,7618	b/b
8	1,1-2	1,3950(1)			1,3108(2)		3,2460	17,2266	lt

Keterangan: t=top; b=bridge; Δb perbedaan panjang antara kedua sisi bridge; 9'=proyeksi L9 ke permukaan; 1→1 artinya N₂ tegak lurus permukaan dengan kedua atom N berada di atas L1 dan menuju L1; ½(1-2 →1-2 artinya N₂ tegak lurus permukaan dengan kedua atom N berada di atas pertengahan garis hubung L1-L2 dan menuju titik tengah tersebut; 1, 1-2 artinya N₂ yang sejajar permukaan N1-nya di atas L1 dan N1-N2 sejajar L1-L2; kotak kosong berarti memang tidak ada ikatan atau r > 2,250 Å.

Tabel 3. Panjang Ikatan Antar Atom, dan BE(NH₃) Molekul NH₃ pada L(111)

No	Posisi Jatuh	r _{CN} (Å)	r _{CH} (Å)	r _{FeN} (Å)	r _{FeH} (Å)	BE(NH ₃), eV
Fe(111)						
1	1, 1-2			1,6350(1)		2,0634
2	2, 1-2			1,5220(2)	1,7818(3)	2,2340
3	½(1-2, 1-2)			1,5065(1)	1,5297(1)	2,0286
4	9, 1-9'			1,4538(1)	1,6841(1) 1,6821(1)	1,9509
5	10, 1-10'					
6	1→1			2,7770(1)	1,7852(1)	0,1782
7	2→2			2,8080(2)	1,8465(2)	0,1617
8	9-9'					
Cr(111)						
1	1, 1-2	1,8960(1)				1,0025
2	2, 1-2	1,7520(2)	1,6357(3)			1,3697
3	½(1-2, 1-2)	1,7520(2)	1,6357(3)			1,3697
4	9, 1-9'					
5	10, 1-10'	1,7578(2)	1,6405(3)			1,3760
6	1→1					
7	2→2					
8	9-9'					
Fe/Cr(111)						
1	1, 1-2	1,8750(1)				1,1980
2	2, 1-2			1,5130(2)	1,7718(3)	2,4049
3	½(1-2, 1-2)	1,8744(1)				1,1980
4	9, 1-9'	1,8750(1)				1,1980
5	10, 1-10'			1,5007(3)	1,7363(2)	2,4178
6	1→1	2,7040(1)	2,3505(1)			0,2921
7	2→2	2,8070(2)	1,8518(2)			0,1663
8	9-9'	2,2118(1)				0,6249

Keterangan: ND=non disosiasi; D=disosiasi (proses optimasi tidak diteruskan); ½(1-2, 1-2) adalah atom N dari NH₃ sejajar menuju pertengahan garis hubung L1-L2 dan salah satu NH sejajar L1-L2; 1→1 adalah atom N dan salah satu atom H dari NH₃ tegak lurus menuju L1; 1,6350(1) artinya jarak N ke L1 adalah 1,6350 Å, umumnya nilai r > 2,250 Å tidak ditulis kecuali pada adsorpsi fisika; 9) ialah proyeksi L9 kelapisan pertama.

KESIMPULAN

Bentuk kompleks permukaan N₂ diadsorpsi dengan disosiasi pada ketiga permukaan L(111) yang merupakan kombinasi pola on top dan bridge, tidak berbeda banyak (tidak tergantung pada arah dan posisi jatuh N₂). Perbedaan yang nyata ialah r_N, on top, hasil adsorpsi N₂ secara atomik, pada Cr(111) > Fe(111). Sedangkan pada Fe/Cr(111) jarak tersebut tergantung pada L (Fe atau Cr). Pola adsorpsi gas NH₃ pada ketiga permukaan L(111) cukup berbeda (ditentukan oleh arah dan posisi jatuh NH₃). Pemunculan NH₃ diadsorpsi fisika pada Fe/Cr(111) > Fe(111) >> Cr(111); diadsorpsi kimia dengan disosiasi pada Fe/Cr(111) < Fe(111) < Cr(111); diadsorpsi kimia secara molekuler pada Fe/Cr(111) > Cr(111) = Fe(111). Sedangkan rentangan BE(NH₃) pada adsorpsi kimia secara molekuler pada Cr(111) < Fe/Cr(111) < Fe(111). Jadi kadar NH₃ yang

didesorpsi ditentukan oleh jenis permukaan, dengan catatan permukaan dapat mengadsorpsi N₂ secara atomik. Di sini Fe/Cr(111) dengan kadar Cr=7,7% lebih efektif dari pada logam murni. Diramalkan efektifitas permukaan mendesorpsi NH₃ ditentukan juga oleh kadar Cr dalam paduan karena adanya korelasi: semakin panjang r_N, on top semakin kecil BE(NH₃) suatu permukaan.

Acknowledgment

Penelitian ini dibiayai Proyek Penelitian Ilmu Pengetahuan Dasar dengan surat perjanjian Nomor 05/P2IPT/DPPM/PID/III/2003 Direktorat Pembinaan Penelitian dan Pengabdian kepada Masyarakat Direktorat Jendral Pendidikan Tinggi Departemen Pendidikan Nasional.

DAFTAR PUSTAKA

1. P. A. Dowben, H. J. Ruppender, and M. Grunze. *Surf. Sci. Letters* 254, L482-L486. (1991).
2. H. Suyani. *Unpublished Results*, (1999).
3. G. Calzaferri, and M. Brandle. QCPE, Program No QCMP 116, Indiana University, Bloomington, Indiana (1992).
4. T. S. Kusuma. Seminar BKS-PTN Wilayah Indonesia Barat, Lampung, (2001).
5. T. S. Kusuma. *Seminar BKS-PTN Wilayah Indonesia Barat*, Medan, (2002).
6. D. Y. Hwang, and A. M. Mabel. *J. Phys. Chem A* 107, 2865-2874. (2003).