

Bandiyah Sri Aprillia, 2013. **Analisis Perturbasi Geometri Pada Proses Disosiasi Molekul O₂ oleh Katalis Atom Fe dengan Metode *Density Functional Theory* (DFT)**. Skripsi ini di bawah bimbingan Drs. Adri Supardi, M. S dan Herlik Wibowo, S. Si, M. Si. Departemen Fisika, Fakultas Sains Dan Teknologi, Universitas Airlangga.

ABSTRAK

Density Functional Theory (DFT) adalah metode penghitungan energi berdasarkan pada kerapatan muatan. DFT menggunakan persamaan Kohn-Sham yang merupakan persamaan numerik dari persamaan Schrodinger. Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis pengaruh perturbasi geometri dalam proses disosiasi molekul O₂ oleh atom Fe terhadap struktur elektronik molekul O₂, frekuensi vibrasi molekul O₂ dan energi disosiasi molekul O₂. Perhitungan dilakukan dengan metode DFT dengan basis set 6-31G(d). Dari hasil perhitungan diperoleh diagram tingkat energi orbital molekul O₂ terhadap jarak antaratom yang menunjukkan bahwa kedua atom oksigen tidak lagi berinteraksi pada jarak $R = 2,8\text{\AA}$. Energi disosiasi molekul O₂ dengan katalis atom Fe 0.30 eV.

Kata Kunci: DFT, disosiasi Fe-O₂, frekuensi vibrasi, struktur elektronik.