

INVESTIGASI PENGARUH *SURFACE COVERAGE* TERHADAP
ENERGI ADSORPSI OKSIGEN PADA PERMUKAAN Pt
BERBASIS *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

SKRIPSI



DALLIYAH AZKA AMINATI

PROGRAM STUDI SARJANA FISIKA
DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS AIRLANGGA
2020

HALAMAN PERNYATAAN

INVESTIGASI PENGARUH *SURFACE COVERAGE* TERHADAP
ENERGI ADSORPSI OKSIGEN PADA PERMUKAAN PT
BERBASIS DENSITY FUNCTIONAL THEORY

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat
untuk memperoleh gelar Sarjana Sains Bidang Fisika
pada Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Airlangga

Dalliyah Azka Aminati

NIM 08 15 11 333 051

Disetujui oleh

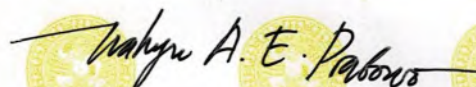
Pembimbing I

Pembimbing II



Febdian Rusydi, Ph.D.

NIP 1979 02 06 2008 01 1 004



Dr. Wahyu Aji Eko Prabowo.

NIDN 0610058801

LEMBARAN PENGESAHAN

Judul : Investigasi Pengaruh *Surface Coverage* terhadap Energi Adsorpsi Oksigen pada Permukaan Pt Berbasis *Density Functional Theory*

Penyusun : Dallyyah Azka Aminati

Nomor Induk Mahasiswa : 08 15 11 333 051

Tanggal Ujian : 29 Januari 2020

Disetujui oleh

Pembimbing I



Febdian Rusydi, Ph.D.

NIP 1979 02 06 2008 01 1 004

Pembimbing II



Dr. Wahyu Aji Eko Prabowo

NIDN 0610058801

Mengetahui

Ketua Departemen Fisika
Fakultas Sains dan Teknologi

Universitas Airlangga



Prof. Dr. Moh. Yasin, M.Si

NIP 1967 03 12 1991 02 1 001

Penyusun persembahkan skripsi ini
untuk Mama dan Yayah
Siti Nurul Jadidah dan H. Mislahuddin

Penyusun ucapkan terima kasih khusus
kepada adik
**Aufarul Maulidy Taufikillah dan Saelan
Maulidany Midad**

PEDOMAN PENGGUNAAN SKRIPSI

Skripsi ini tidak dipublikasikan, namun tersedia di perpustakaan dalam lingkungan Universitas Airlangga.

Skripsi ini diperkenankan untuk dipakai sebagai referensi kepustakaan, tetapi pengutipan harus seizin penyusun dan harus menyebutkan sumbernya sesuai kebiasaan ilmiah.

Dokumen skripsi ini merupakan hak milik Universitas Airlangga.

SURAT PERNYATAAN ORISINALITAS

Yang bertanda tangan dibawah ini, saya:

Nama : Dallyyah Azka Aminati
Nomor Induk Mahasiswa : 0815 11 333 051
Program Studi : S-1 Fisika
Fakultas : Sains dan Teknologi
Jenjang : Strata 1 (S-1)

Menyatakan bahwa saya tidak melakukan tindakan plagiat dalam penulisan naskah tugas akhir saya yang berjudul:

Investigasi Pengaruh *Surface Coverage* terhadap Energi Adsorpsi Oksigen pada Permukaan Pt berbasis *Density Functional Theory*

Apabila suatu saat saya terbukti melakukan tindakan plagiat, maka saya bersedia menerima sanksi yang telah ditetapkan.

Surabaya, 29 Januari 2020

Penulis,



NIM 0815 11 333 051

PRAKATA

Penelitian ini adalah tugas akhir yang dilakukan untuk syarat kelulusan di program studi sarjana Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Airlangga. Penelitian ini bernilai 6 sks dan didahului oleh proposal penelitian bernilai 2 sks.

Penelitian ini mencari korelasi antara energi adsorpsi dan *surface coverage* atom Oksigen (adsorbat) di atas permukaan Pt (adsorben). Adsorpsi dirancang terjadi pada tiga posisi berbeda dan dengan empat variasi *surface coverage*. Penelitian ini memodelkan permukaan Pt, atom Oksigen dan adsorpsi atom Oksigen di atas permukaan Pt berbasis kalkulasi *density functional theory* (DFT). Kalkulasi DFT memberikan struktur elektronik: struktur geometris dan energi elektronik. Energi elektronik ini menjadi modal untuk perhitungan energi adsorpsi yang kemudian diplot bersama dengan variasi nilai *surface coverage* untuk mendapatkan korelasi keduanya.

Buku laporan ini terdiri dari lima bab utama dan satu bab lampiran. Bab I. Pendahuluan, fokus pada rumusan masalah, sedangkan Bab III. Metode Penelitian, fokus pada metode penelitian untuk menelaah rumusan masalah tersebut. Bab IV. Hasil dan Pembahasan, melaporkan hasil dan analisis hasil tersebut. Bab II. Studi Literatur, berisi ulasan literatur-literatur yang dibutuhkan untuk melakukan penelitian dan menganalisis hasil. Sedangkan Lampiran menyertakan input dan output file kalkulasi, sehingga pembaca dapat melakukan ulang kalkulasi yang terdapat dalam laporan ini.

Semoga buku laporan penelitian ini bermanfaat untuk civitas akademika Universitas Airlangga.

Tabik,

Dalliyah Azka Aminati

LEMBARAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada semua pihak yang terlibat, langsung dan taklangsung, dalam proyek tugas akhir ini. Secara khusus, penulis *harus* menyampaikan terima kasih kepada pihak-pihak berikut ini atas kontribusi yang signifikan pada pengerjaan dan penyelesaian tugas akhir ini.

1. Dr. Febdian Rusydi yang telah memberikan ide awal tugas akhir ini serta pengecekan dasar-dasar pemodelan komputasi untuk masalah kuantum.
2. Dr. Ira Puspitasari yang telah menjadi editor laporan tugas akhir ini.
3. Dr. Wahyu Aji Eko Prabowo yang telah memberikan arahan dan bimbingan kepada penyusun hingga tugas akhir ini selesai.
4. Dr. Andi Hamim Zaidan dan Dr. Ersyzario Edo Yunata yang telah mengevaluasi semua aspek pengerjaan tugas akhir ini.
5. Arfan Isnu Fauzi yang telah menemani, memberi motivasi, semangat serta dukungan selama pengerjaan tugas akhir.
6. Rachma Arinsyah, Husnul Khuluk, Samuel Eka Payong Masan, Fitri Noor Febriana, dan Roichatul Madinah yang telah membantu dan menyemangati penyusun hingga tugas akhir ini selesai.
7. Teman-teman penyusun yang tergabung dalam 5160, Uruk-hai, Dun Harrow dan adik-adik penyusun yang tergabung dalam Spew, House-elf yang selalu menghibur dan menyemangati penyusun.