

## DAFTAR ISI

<b>Halaman Pernyataan</b>	<b>i</b>
<b>Lembaran Pengesahan</b>	<b>ii</b>
<b>Pedoman Penggunaan Skripsi</b>	<b>iv</b>
<b>Prakata</b>	<b>vi</b>
<b>Lembaran Terima Kasih</b>	<b>vii</b>
<b>Abstrak (versi Bahasa Indonesia)</b>	<b>viii</b>
<b>Abstract (English version)</b>	<b>ix</b>
<b>I Pendahuluan</b>	<b>1</b>
I.1 Latar Belakang . . . . .	1
I.2 Rumusan Masalah . . . . .	2
I.3 Tujuan . . . . .	2
I.4 Batasan Masalah . . . . .	3
I.5 Manfaat . . . . .	3
<b>II Studi Literatur</b>	<b>4</b>
II.1 Struktur Kristal . . . . .	4
II.1.1 Struktur Kristal Sederhana . . . . .	4
II.1.2 Sistem Indeks pada Bidang Kristal . . . . .	8
II.1.3 <i>Reciprocal Lattice</i> . . . . .	9
II.2 Ilmu Permukaan . . . . .	13
II.2.1 <i>Surface Relaxation</i> . . . . .	13
II.2.2 Energi Adsorpsi . . . . .	15

<i>DAFTAR ISI</i>	xi
II.2.3 Efek <i>Surface Coverage</i> . . . . .	16
II.3 <i>Density Functional Theory</i> . . . . .	17
II.4 Program Quantum Espresso . . . . .	21
II.4.1 Algoritma DFT di dalam QE . . . . .	21
II.4.2 Input pada QE . . . . .	22
II.4.3 Output pada QE . . . . .	23
<b>III Metode Penelitian</b>	<b>26</b>
III.1 Alur Penelitian . . . . .	26
III.2 Tebakan Posisi Adsorpsi . . . . .	27
III.3 Model Komputasi . . . . .	29
III.4 Alur Kalkulasi . . . . .	31
III.5 Waktu dan Aktifitas . . . . .	35
<b>IV Hasil dan Pembahasan</b>	<b>36</b>
IV.1 Validasi Permukaan dengan Satu Adsorbat . . . . .	36
IV.1.1 Permukaan Pt . . . . .	36
IV.1.2 Optimisasi Permukaan Pt dengan Satu Adsorbat . . . . .	38
IV.2 Tebakan Posisi Adsorpsi dan Hasil Optimisasi . . . . .	40
IV.3 Hubungan antara energi adsorpsi dan <i>surface coverage</i> . . . . .	46
<b>V Kesimpulan dan Saran</b>	<b>50</b>
V.1 Kesimpulan . . . . .	50
V.2 Saran . . . . .	50
<b>Bibliografi</b>	<b>51</b>
<b>A Tabulasi Hasil Optimisasi</b>	<b>52</b>
A.1 Tabel Energi Adsorpsi posisi <i>hollow</i> . . . . .	52
A.2 Tabel Energi Adsorpsi posisi <i>top</i> . . . . .	52
A.3 Tabel Hasil Optimisasi Rancangan Posisi Adsorpsi . . . . .	52

<i>DAFTAR ISI</i>	xii
<b>B Input dan Output File</b>	<b>54</b>
B.1 Input File . . . . .	55
B.2 Output File . . . . .	63

## DAFTAR GAMBAR

II.1	<i>Simple-cubic, Body-centered cubic, dan Face-centered cubic.</i> (Kittle 2005) . . . . .	5
II.2	Ilustrasi vektor sel pada fcc. (Sholl and Steckel 2009) . . . . .	7
II.3	Sel primitif dari struktur <i>body-centered cubic</i> . (Kittle 2005) . .	8
II.4	Permukaan dengan indeks miller (111). (Sholl and Steckel 2009)	9
II.5	Permukaan dengan indeks miller (110). (Sholl and Steckel 2009)	9
II.6	Permukaan dengan indeks miller (001). (Sholl and Steckel 2009)	10
II.7	<i>supercell</i> mendefinisikan suatu material dengan permukaan padat ketika digunakan dengan batasan-batasan periodik pada tiga dimensi. (Sholl and Steckel 2009) . . . . .	12
II.8	[Ilustrasi skematik dari relaksasi atom permukaan pada model <i>slab</i> ]Ilustrasi skematik dari relaksasi atom permukaan pada model <i>slab</i> .Tiga <i>layer</i> teratas dapat terelaksasi sedangkan pada bagian bawah tetap pada keadaan ideal <i>bulk</i> .. (Sholl and Steckel 2009) . . . . .	14
II.9	Adsorbat dan adsorben. (Sholl and Steckel 2009) . . . . .	15
II.10	Permukaan dengan <i>surface coverage</i> (a)0.25 ML (b)0.33 ML (c)0.50 ML. (Sholl and Steckel 2009) . . . . .	17
II.11	Input file Quantum Espresso . . . . .	24
II.12	Output file Quantum Espresso . . . . .	25
III.1	Alur Penelitian . . . . .	27
III.2	Posisi Adsorpsi. Sholl and Steckel 2009 . . . . .	28
III.3	Tebakan Posisi Adsorpsi . . . . .	29
III.4	Permukaan Pt(111) . . . . .	30
III.5	Permukaan Pt(111) bidang xy . . . . .	31

<i>DAFTAR GAMBAR</i>	xiv
III.6 Alur Kalkulasi . . . . .	35
IV.1 <i>Lattice Parameter</i> pada permukaan Pt(111) . . . . .	36
IV.2 Relaksasi Permukaan . . . . .	37
IV.3 Tebakan posisi satu adsorbat dan hasil optimisasi . . . . .	39
IV.4 Ketinggian adsorbat sebelum dan sesudah optimisasi . . . . .	39
IV.5 Posisi Adsorpsi Hasil Optimisasi Keadaan Dasar . . . . .	41
IV.6 Ketinggian Adsorbat Sebelum Optimisasi . . . . .	42
IV.7 Ketinggian Adsorbat Setelah Optimisasi . . . . .	43
IV.8 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap ketinggian adsorbat	44
IV.9 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap <i>dihedral angle</i> . . .	44
IV.10 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap ketinggian adsorbat	45
IV.11 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap <i>dihedral angle</i> . . .	45
IV.12 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap energi adsorpsi . .	48
IV.13 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap energi adsorpsi . .	48
IV.14 Grafik pengaruh <i>surface coverage</i> terhadap energi adsorpsi . .	49

## DAFTAR TABEL

III.1 Waktu Penelitian . . . . .	35
IV.1 Tabel perbandingan hasil <i>lattice constan</i> kalkulasi dan eksperimen]Tabel perbandingan hasil <i>lattice constan</i> kalkulasi dan eksperimen . . . . .	37
IV.2 Validasi jarak antar lapisan . . . . .	38
IV.3 Hasil optimisasi dari permukaan dengan satu adsorbat . . . . .	39