

# BAB I

## PENDAHULUAN

### I.1 Latar Belakang

Katalis dapat meningkatkan laju reaksi kimia. Misalnya, produksi amonia ( $\text{N}_2 + 3\text{H}_2 \longrightarrow 2\text{NH}_3$ ) tidak akan terjadi tanpa kehadiran katalis. (Pauling 1988, Bab 7-5) Meskipun tersedia melimpah,  $\text{N}_2$  adalah molekul stabil dan tidak akan bereaksi dengan senyawa lain. Katalis berfungsi membuat  $\text{N}_2$  menjadi radikal sehingga mudah bereaksi dengan molekul  $\text{H}_2$ , dikenal dengan proses Haber. Pada kasus isomerisasi cis-2-butena, katalis berfungsi untuk memutuskan ikatan rangkap yang menghalangi proses isomerisasi terjadi. (Madinah 2019 dan Nisa 2019) Secara garis besar, fungsi katalis adalah untuk menurunkan energi aktivasi reaksi sehingga laju reaksi meningkat.

Meskipun tidak mengubah produk reaksi, reaktan berinteraksi dengan katalis sepanjang reaksi terjadi. Studi isomerisasi cis-2-butena oleh Madinah 2019 dan Nisa 2019 menunjukkan bahwa terjadi proses adsorpsi: molekul cis-2-butena (adsorbat) menempel pada permukaan platinum sehingga ikatan rangkapnya menjadi ikatan tunggal. Akibatnya, isomerisasi dapat terjadi dengan proses konformasi. Proses Haber juga melibatkan proses adsorpsi, yaitu melekatkan molekul  $\text{N}_2$  pada permukaan besi atau ruterium. Dengan kata lain, adsorpsi adalah proses fundamental pada reaksi yang melibatkan katalis.

Katalis berwujud permukaan (*surface*). Permukaan adalah bagian kristal yang berhadapan dengan vakum. Bagian kristal tersebut dapat diperoleh dari pemotongan kristal berdasarkan indeks Miller. Indeks Miller yang berbeda, dapat memengaruhi kestabilan permukaan dan perilaku adsorbat yang berinteraksi dengan permukaan tersebut. Contoh kasus adalah studi oleh Candrasari 2018. Studi tersebut mendemonstrasikan atom hidrogen (sebagai adsorbat)

lebih stabil teradsorpsi pada permukaan besi (111) dibandingkan dengan permukaan besi (110) dan (100). Studi ini menunjukkan bahwa indeks Miller menentukan kestabilan permukaan dengan adsorbat di atasnya.

Selain indeks Miller, jumlah adsorbat juga memengaruhi kestabilan permukaan saat proses adsorpsi (sistem permukaan-adsorbat). (Sholl and Steckel 2009) Densitas adsorbat pada permukaan disebut *surface coverage*. Pada kasus satu atom sebagai adsorbat, hanya terdapat satu interaksi: interaksi atom-permukaan. Jika ada dua atom sebagai adsorbat, terdapat tiga interaksi: atom 1-permukaan, atom 2-permukaan, dan atom 1-atom 2. Tambahan interaksi inilah yang memengaruhi kestabilan permukaan-adsorbat. Tugas akhir ini mempelajari pengaruh jumlah atom-atom yang teradsorpsi di atas permukaan.

## I.2 Rumusan Masalah

Salah satu pengaruh *surface coverage* terhadap stabilitas adsorben-adsorbat adalah pada energi adsorpsi. Energi adsorpsi yang tinggi menunjukkan kuatnya ikatan antara adsorbat dan adsorben, begitu pula sebaliknya. Energi adsorpsi ini dapat berkurang atau bertambah, oleh perubahan densitas adsorbat. Informasi ini penting untuk merencanakan permukaan pada aplikasi katalis.

Untuk mempelajari masalah ini, tugas akhir ini memilih permukaan Pt(111) sebagai adsorben dan atom oksigen sebagai adsorbat. Oleh sebab itu, masalah untuk tugas akhir ini

Bagaimana korelasi energi adsorpsi dan *surface coverage* pada sistem Pt(111)-O ?

## I.3 Tujuan

Tugas akhir ini bertujuan untuk mengonstruksi grafik hubungan antara *surface coverage* dan energi adsorpsi oksigen pada permukaan Pt(111) dengan variasi empat *surface coverage* dan tiga posisi adsorpsi.

## I.4 Batasan Masalah

1. Permukaan yang digunakan berindeks Miller (111) dengan K-point 3x3x1 dan energy cutoff sebesar 450 eV.
2. Tiga posisi yang dipilih yaitu *bridge*, *hollow*, dan *top*.
3. *Surface Coverage* yang dipilih yaitu 0,25 ML; 0,50 ML; 0,75 ML; 1,00 ML.
4. Kalkulasi yang dilakukan berbasis DFT yang terimplementasikan dalam Program Quantum Espresso.

## I.5 Manfaat

Penelitian ini bermanfaat sebagai tinjauan untuk mengukur kekuatan hubungan antara energi adsorpsi dan *surface coverage* dalam proses adsorpsi atom pada permukaan