

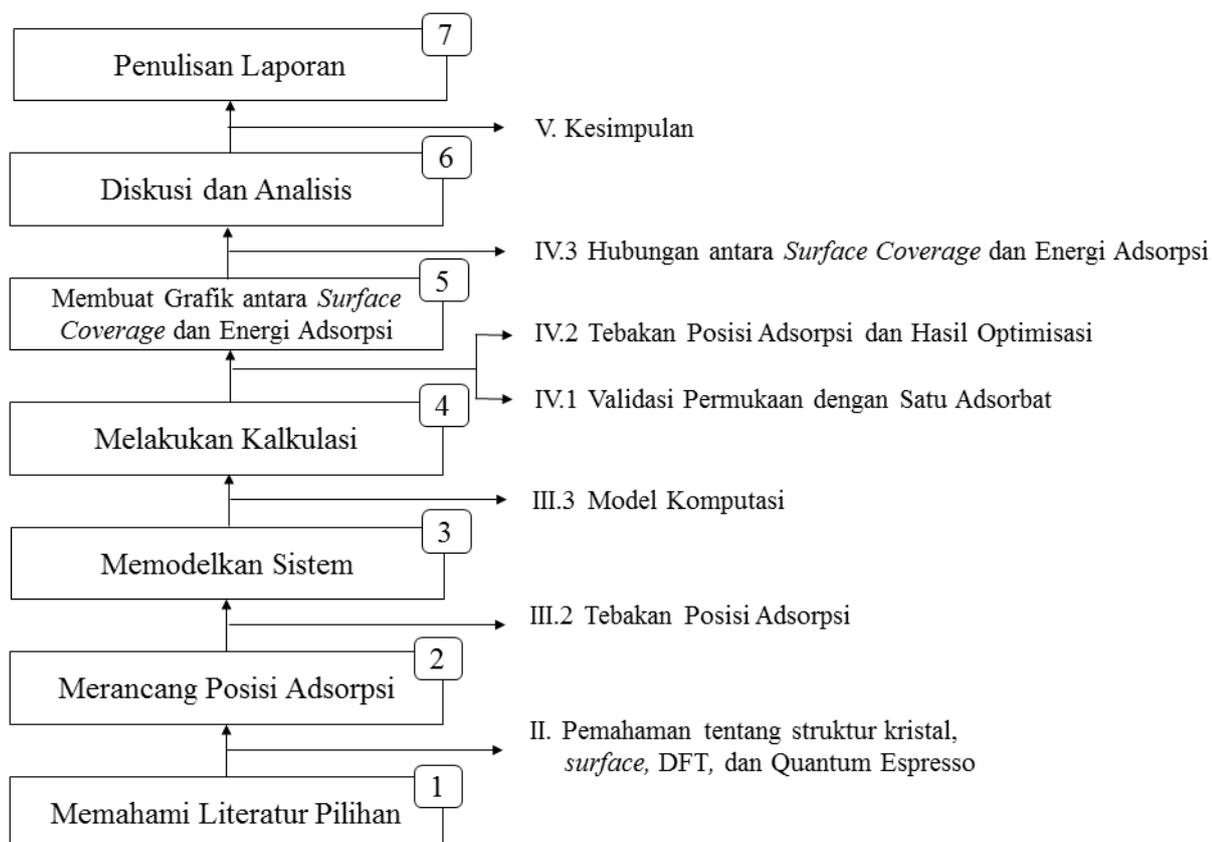
BAB III

METODE PENELITIAN

III.1 Alur Penelitian

Gambar III.1 menampilkan alur penelitian pada tugas akhir ini. Alur penelitian tersebut terdapat lima tahap penelitian untuk mencapai tujuan “Mengonstruksi hubungan antara *surface coverage* dan energi adsorpsi berdasarkan posisi atom O pada permukaan Pt”. Tahap selanjutnya dilakukan untuk mendapatkan kesimpulan.

Tahap pertama penelitian adalah membaca literatur sebagai dasar penelitian. Hasil dari tahap pertama menjadi input untuk tahap kedua, begitupun dengan tahap berikutnya. Hasil dari tahap sebelumnya akan menjadi input untuk tahap berikutnya. Tahap kedua penelitian adalah merancang posisi adsorpsi. Hasil dari tahap kedua yaitu tebakan posisi adsorpsi yang akan dijelaskan lebih lanjut pada Subbab III.2 “Tebakan Posisi Adsorpsi” (hlm. 27). Tahap ketiga yaitu memodelkan sistem. Memodelkan sistem dilakukan secara komputasi yang akan dijelaskan lebih lanjut pada Subbab III.3 “Model Komputasi” (hlm. 29). Hasil dari tahap ketiga yaitu struktur geometris. Tahap keempat yaitu melakukan kalkulasi yang akan dibahas lebih lanjut pada Subbab III.4 “Alur Kalkulasi” (hlm. 31). Hasil dari tahap keempat adalah energi adsorpsi. Energi adsorpsi yang dihasilkan, sebagai input untuk membuat grafik hubungan antara *surface coverage* dan energi adsorpsi. Grafik tersebut disusun berdasarkan *surface coverage* dan energi adsorpsi yang diperoleh dari perhitungan energi total setiap sistem. Sehingga, grafik yang dihasilkan sesuai dengan posisi yang dikonstruksi.

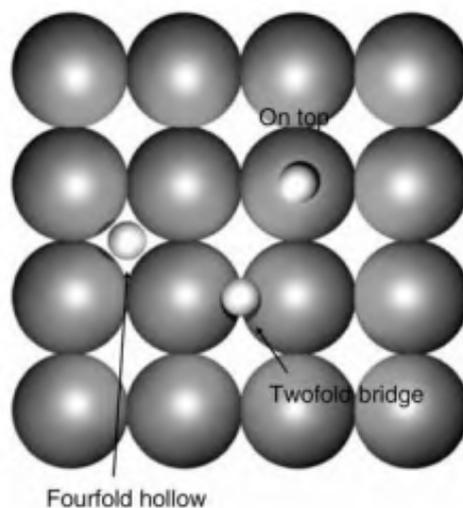


Gambar III.1: Alur Penelitian

III.2 Tebakan Posisi Adsorpsi

Gambar III.3 menampilkan tebakan posisi adsorpsi. Tebakan posisi adsorpsi membutuhkan informasi terkait objek penelitian yang akan digunakan. Objek pada penelitian ini adalah atom Oksigen dan permukaan Platina yang akan dijelaskan pada Subbab III.3 "Model Komputasi" (hlm. 29). Posisi atom Oksigen diatas permukaan diletakkan saling berjauhan untuk mengurangi efek dari interaksi antar atom. Ukuran *Supercell* mengontrol jarak antar atom sehingga juga mempengaruhi interaksi antar atom.

Seperti yang telah dijelaskan pada Subbab II.2.3 "Efek *Surface Coverage*" (hlm. 16), terdapat dua cara untuk menghitung nilai *surface coverage*. Tugas akhir ini menggunakan cara ke-dua untuk menghitung nilai *surface coverage*. Cara tersebut yaitu ukuran *supercell* konstan tetapi jumlah atom pada permu-

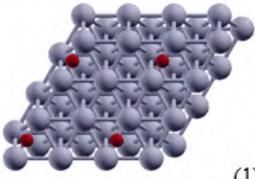
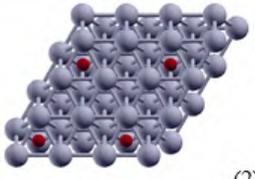
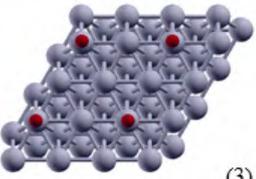
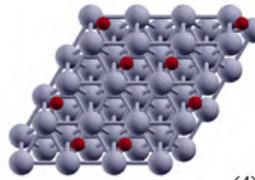
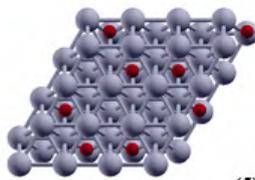
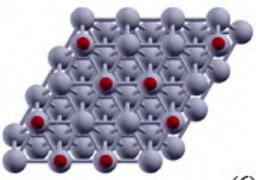
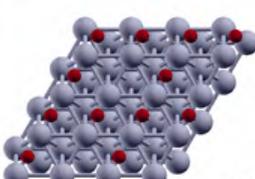
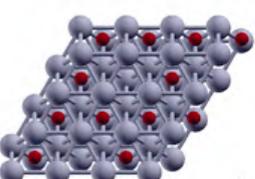
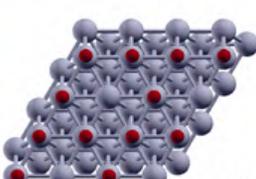
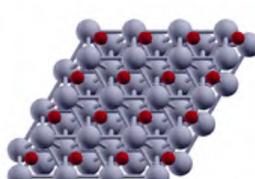
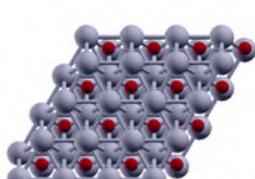
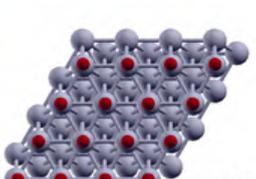


Gambar III.2: Posisi Adsorpsi. Sholl and Steckel 2009

kaan berubah-ubah. Seperti pada Gambar III.3 menampilkan tebakan posisi adsorpsi. Dimana ukuran *supercell* mengikuti ukuran permukaan yang tetap dan jumlah atom permukaan berubah-ubah.

Tebakan posisi adsorpsi berdasarkan kombinasi dari empat *surface coverage* dan tiga posisi. Empat *surface coverage* yang dirancang adalah 0.25 ML, 0.50 ML, 0.75 ML, dan 1.00 ML. Sistem (1), (2), dan (3) dengan *Surface coverage* 0.25 ML yaitu terdiri dari empat adsorbat per enam belas adsorben. Sistem (4), (5), dan (6) dengan *surface coverage* 0.50 ML yaitu terdiri dari delapan adsorbat per enam belas adsorben. Sistem (7), (8), dan (9) dengan *surface coverage* 0.75 ML yaitu terdiri dari dua belas adsorbat per enam belas adsorben. Sistem (10), (11), dan (12) *Surface coverage* 1 ML yaitu terdiri dari enam belas adsorbat per enam belas adsorben.

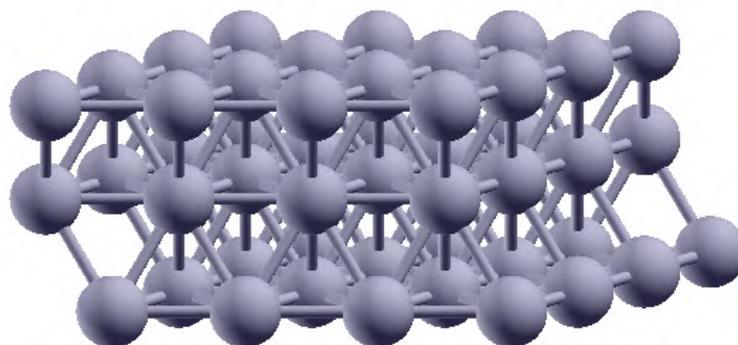
Tiga posisi yang dirancang yaitu *bridge*, *hollow* dan *top*. Sehingga tebakan posisi adsorpsi terdiri dari dua belas sistem. Posisi *bridge* (B) adalah posisi dimana atom O terletak diantara dua atom pada permukaan. Posisi *hollow* (H) adalah posisi atom O terletak diantara tiga atau lebih atom permukaan. Posisi *top* T adalah posisi atom O terletak tepat diatas sebuah atom permukaan, seperti pada Gambar III.2.

NO	Surface Coverage (ML)	Posisi		
		Bridge	Hollow	Top
1	0.25	 (1)	 (2)	 (3)
2	0.50	 (4)	 (5)	 (6)
3	0.75	 (7)	 (8)	 (9)
4	1.00	 (10)	 (11)	 (12)

Gambar III.3: Tebakan Posisi Adsorpsi

III.3 Model Komputasi

Objek pada penelitian ini adalah atom Oksigen (O) dan permukaan Platinum (Pt). Atom Oksigen dipilih karena penelitian ini mempelajari proses adsorpsi, sehingga membutuhkan atom yang mudah untuk terperangkap. Permukaan Pt dipilih karena banyak digunakan untuk katalis, dan memiliki aktivitas dan reaktivitas yang baik. Ukuran sel dan lapisan permukaan membentuk model permukaan. Ukuran sel adalah 4x4 dan jumlah lapisan permukaan yang digunakan tiga lapisan permukaan. Jumlah lapisan yang digunakan berdasar-

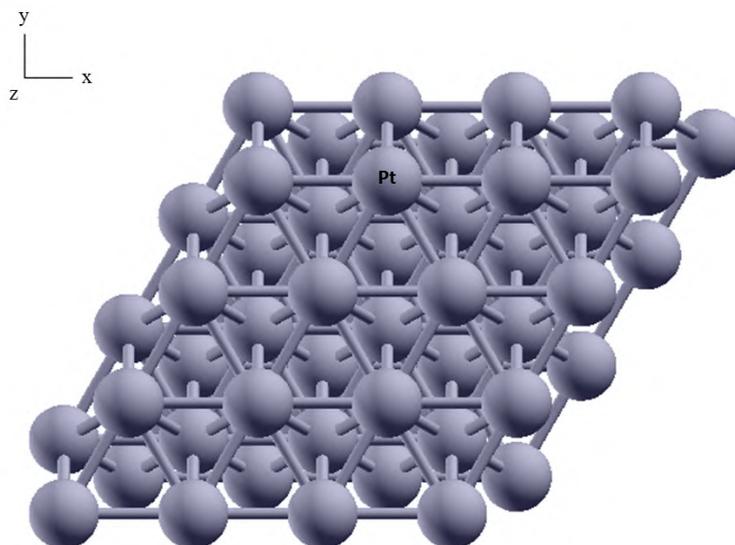


Gambar III.4: Permukaan Pt(111)

an karakteristik sebuah permukaan. Lebih banyak lapisan lebih baik, tetapi waktu yang digunakan juga semakin lama. Tiga lapisan tersebut dengan dua lapisan terbawah fix dan lapisan paling atas relax. Hal tersebut diperhitungkan karena lebih mempercepat perhitungan.

Permukaan berindeks miller (111). Indeks miller dipertimbangkan karena karakteristik setiap permukaan berbeda. Pada permukaan platinum memiliki struktur kristal *face-centered cubic* yang selanjutnya akan disebut fcc. Struktur kristal fcc dengan indeks miller (111) memiliki kerapatan atom tertinggi. Permukaan dengan atom tertinggi merupakan permukaan yang paling stabil, sehingga tugas akhir ini menggunakan permukaan dengan indeks miller (111).

Tinggi vakum sebesar 15 Å, nilai k-point yaitu 3x3x1, dan energi *cut-off* sebesar 400 eV. Tinggi vakum menunjukkan jarak antar permukaan Pt. K-point diperlukan untuk mengambil K-Space dalam perhitungan sistem periodik. Sedangkan energi *cut-off* diperlukan untuk menentukan jumlah plane waves di dalam basis set yang dipilih. `reffigfig-pt` menampilkan gambar struktur kristal Pt *face center cubic* (fcc) dengan indeks miller (111).



Gambar III.5: Permukaan Pt(111) bidang xy

III.4 Alur Kalkulasi

Gambar III.6 menampilkan alur kalkulasi pada tugas akhir. Terdapat dua input yaitu Atom O dan Pt(111). Dua input tersebut sebagai bahan untuk memodelkan adsorbat dengan adsorben. Hasil dari memodelkan adsorbat dengan adsorben yaitu rancangan posisi adsorpsi yang telah dijelaskan pada III.2. Setelah mendapatkan rancangan posisi adsorpsi, kemudian melakukan kalkulasi optimisasi. Ada dua jenis kalkulasi yang digunakan untuk mendapatkan energi dari setiap sistem. Jenis kalkulasi tersebut yaitu kalkulasi *Single Point Energy* (SPE) dan Optimisasi keadaan dasar. Berikut penjelasan setiap jenis kalkulasi.

Single Point Energy , penelitian ini menghitung energi total atom O menggunakan jenis kalkulasi *Single Point Energi* (SPE), dengan tipe kalkulasi yaitu *self consistent field* (scf). Jenis kalkulasi ini digunakan karena hanya menghitung konfigurasi satu atom. Hasil dari kalkulasi yaitu struktur geometris keadaan dasar dan energi total untuk satu atom. Struktur geometris yang dihasilkan akan dibahas pada Subbab IV.1 "Validasi Per-

mukaan dengan Satu Adsorbat” (hlm. 36). Energi total yang dihasilkan adalah bahan untuk mendapatkan energi adsorpsi.

Optimisasi Keadaan Dasar , permukaan Pt(111) dan dua belas sistem rancangan posisi adsorpsi menggunakan skalkulasi optimisasi keadaan dasar. Optimisasi keadaan dasar Pt(111) menghasilkan struktur geometris yang stabil dan total energi elektrnonik. Struktur geometris dari permukaan Pt tersebut digunakan sebagai input untuk sistem rancangan posisi adsorpsi. Optimisasi adsorbat dengan adsorben juga menghasilkan struktur geometris dan total energi elektronik. Energi yang dihasilkan sebagai bahan untuk mendapatkan energi adsorpsi.

Setiap kalkulasi menghasilkan energi total setiap sistem. Energi tersebut digunakan untuk menghitung energi adsorpsi. E_1 yaitu energi keadaan dasar atom O. E_2 yaitu energi keadaan dasar permukaan Pt(111). E_3 energi keadaan dasar rancangan posisi adsorpsi yang berjumlah dua belas. Menghitung energi adsorpsi menggunakan rumus II.13. n pada rumus adalah jumlah adsorbat pada adsorben. Terdapat dua belas sistem rancangan posisi adsorpsi sehingga energi adsorpsi yang dihasilkan yaitu dua belas. Contoh input file untuk permukaan Pt ditampilkan pada gambar berikut. Angka 0 0 0 pada ATOMIC POSITIONS yaitu permukaan dua lapisan terbawah yang fix. Sedangkan lapisan paling atas dan tidak ada angka 0 0 0 yaitu permukaan rilex.

BAB III. METODE PENELITIAN

33

```

calculation = 'relax' [Baris 2]
restart_mode = 'from_scratch' [Baris 3]
verbosity = 'high' [Baris 4]
outdir = './tmp' [Baris 5]
pseudo_dir = './pseudo' [Baris 6]
/

&SYSTEM [Baris 9]
ibrav = 0 [Baris 10]
nat = 48 [Baris 11]
ntyp = 1 [Baris 12]
ecutwfc = 29.40 [Baris 13]
occupations = 'smearing' [Baris 14]
smearing = 'mv' [Baris 15]
degauss = 0.01 [Baris 16]
vdw_corr='dft-d' [Baris 17]
/

&ELECTRONS [Baris 20]
mixing_mode = 'local-TF' [Baris 21]
mixing_beta = 0.2 [Baris 22]
electron_maxstep = 200 [Baris 23]
conv_thr = 1.D-6 [Baris 24]
diagonalization = 'david' [Baris 25]
/

&IONS [Baris 28]
ion_dynamics = 'bfgs' [Baris 29]
/

ATOMIC_SPECIES [Baris 32]
Pt 195.084 Pt.pbe-n-kjpaw_psl.1.1.0.0.UPF [Baris 33]

ATOMIC_POSITIONS {angstrom} [Baris 34]
Pt 1.38592929 0.80016665 0.00000000 0 0 0
Pt 4.15778787 0.80016665 0.00000000 0 0 0
.
.
Pt 9.70150504 8.80183314 2.26321306 0 0 0
Pt 12.47336362 8.80183314 2.26321306 0 0 0
Pt 0.00000000 -0.00000000 4.52642611
Pt 2.77185858 -0.00000000 4.52642611
.
.
Pt 9.70150504 7.20149984 4.52642611
Pt 12.47336362 7.20149984 4.52642611

K_POINTS automatic [Baris 84]
3 3 1 0 0 0 [Baris 85]

CELL_PARAMETERS {angstrom} [Baris 87]
11.0874343290050650 0.0000000000000000 0.0000000000000000
5.5437171645025325 9.6019997917100568 0.0000000000000000
0.0000000000000000 0.0000000000000000 34.5264261104466641

```

Keterangan per baris dari input file adalah sebagai berikut.

Baris 1-6 memuat variabel umum yang digunakan untuk mengontrol kalkulasi.

Baris 2 untuk menentukan jenis kalkulasi. Jenis kalkulasi yang dipilih pada penelitian ini adalah jenis kalkulasi relax. Kalkulasi jenis ini digunakan untuk optimisasi geometri keadaan dasar.

Baris 3 akan diisi dengan keyword fromscratch menandakan bahwa kalkulasi dimulai dengan cara normal.

Baris 5 akan diisi dengan keyword tmp adalah lokasi sementara untuk menyimpan output kalkulasi.

Baris 6 berisi informasi letak pseudopotensial yang dipakai untuk kalkulasi sistem.

Baris 9-17 Bagian ini mendeskripsikan sistem yang akan dikalkulasi.

Baris 10 untuk memasukkan indeks bravais lattice yang ada pada sistem. Contoh input file tersebut memberikan nilai indeks bravais lattice nol. Hal ini dikarenakan contoh input file tersebut untuk sistem permukaan.

Baris 11 memuat informasi total atom yang terlibat dalam sistem.

Baris 12 memuat informasi jenis atom yang terlibat dalam sistem.

Baris 13 memuat informasi besar energy cut-off yang dipakai untuk kalkulasi sistem.

Baris 20-25 memuat variabel elektronik; self-consistency, smearing, variabel ionik: variabel relaksasi dan variabel dinamik.

Baris 23 untuk menentukan jumlah iterasi yang diinginkan untuk kalkulasi sistem.

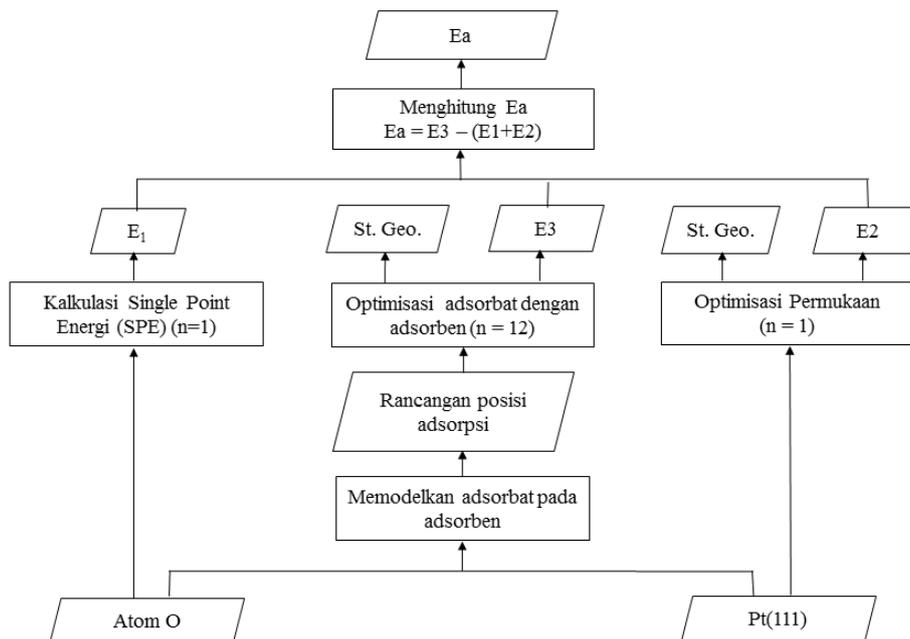
Baris 28-29 memuat variabel ionik: variabel relaksasi dan variabel dinamik.

Baris 33 berisi simbol atom, massa atom dan pseudopotensial atom secara berurutan.

Baris 34-82 berisi simbol atom dan posisi atom dalam koordinat x,y,dan z.

Baris 85 berisi informasi k-points yang digunakan untuk kalkulasi sistem.

Baris 87-91 berisi informasi mengenai cell parameter sistem yang digunakan.



Gambar III.6: Alur Kalkulasi

III.5 Waktu dan Aktifitas

Penelitian ini dilakukan di dua tempat, yaitu

1. Laboratorium Fisika Teori, Universitas Airlangga, Surabaya,
2. Lab. Computer Science, Universitas Dian Nuswantoro Semarang.

Waktu pelaksanaan penelitian ditunjukkan oleh Tabel berikut.

Tabel III.1: Rancangan Alur Kalkulasi

No.	Aktivitas	Bulan ke-						
		1	2	3	4	5	6	7
1.	Tahap (1)	x	x					
2.	Tahap (2)		x					
3.	Tahap (3)		x	x				
4.	Tahap (4)			x	x			
5.	Tahap (5)				x			
6.	Tahap (6)					x	x	
5.	Tahap (7)						x	x