

## DAFTAR ISI

<b>HALAMAN JUDUL</b>	ii
<b>HALAMAN PENGESAHAN</b>	iii
<b>PERNYATAAN</b>	iv
<b>HALAMAN PERSEMBAHAN</b>	v
<b>PRAKATA</b>	vi
<b>DAFTAR ISI</b>	vii
<b>DAFTAR GAMBAR</b>	ix
<b>DAFTAR TABEL</b>	xi
<b>DAFTAR LAMPIRAN</b>	xii
<b>INTISARI</b>	xiii
<b>ABSTRACT</b>	xiv
<b>BAB I PENDAHULUAN</b>	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	2
I.3 Manfaat Penelitian	3
<b>BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS</b>	4
II.1 Tinjauan Pustaka	4
II.1.1 Nikel	4
II.1.2 Struktur kristal nikel dan nikel fcc	4
II.1.3 Proses Fischer Tropsch	6
II.1.3 Kluster atom logam	6
II.1.4 Interaksi molekul CO pada permukaan kluster logam	7
II.1.5 Teori <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	8
II.1.6 Fungsi korelasi pertukaran	10
II.1.7 Teori orbital molekul	11
II.1.8 <i>Band gap</i>	12
II.1.9 Interaksi donasi balik	13
II.1.10 Kemisorpsi CO model <i>blyholder</i> pada logam	13
II.1.11 Model pengikatan CO pada kluster logam	15
II.2. Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	16
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	16
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	17
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	17
II.2.4 Perumusan hipotesis 4	18
II.2.5 Rancangan penelitian	18
<b>BAB III METODE PENELITIAN</b>	22
III.1 Alat dan Bahan	22
III.1.1 Perangkat Keras	22
III.1.2 Perangkat Lunak	22
III.1.3 Bahan Kajian	22
III.2 Prosedur Penelitian	22
III.2.1 Pemodelan sel kristal Ni fcc dengan 14 atom dan	

struktur kluster melalui fragmentasi kristal Ni fcc	22
III.2.2 Penentuan fungsi korelasi-pertukaran	23
III.2.3 Penentuan model kluster nikel	23
III.2.4 Pengamatan interaksi kluster nikel dengan satu molekul CO dan CO <sub>2</sub> serta penentuan posisi interaksi terbaik	24
III.2.5 Penentuan spektra serapan vibrasi IR kompleks [Ni <sub>m</sub> CO] dan [Ni <sub>m</sub> (CO <sub>2</sub> )]	24
III.2.6 Pengamatan interaksi <i>coverage</i> pada kluster nikel	25
III.3 Pengolahan Data	25
III.3.1 <i>Band gap</i>	25
III.3.2 Energi kisi	26
III.3.3 Kuat ikat ligan-kluster	26
<b>BAB IV HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN</b>	27
IV.1 Fungsi Korelasi-Pertukaran <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	27
IV.2 Struktur Kluster Nikel	29
IV.3 Interaksi Kluster Ni <sub>4</sub> dengan Satu Molekul Ligan CO dan CO <sub>2</sub>	32
IV.4 Interaksi Coverage Kluster Ni <sub>4</sub> oleh Ligan CO	37
IV.5 Analisis Frekuensi Vibrasi Stretching Ikatan C-O	41
<b>BAB V KESIMPULAN DAN SARAN</b>	44
V.1 Kesimpulan	44
V.2 Saran	45
<b>DAFTAR PUSTAKA</b>	46
<b>LAMPIRAN</b>	49

## DAFTAR GAMBAR

Gambar II.1	(a) Struktur TEM kristal Ni (b) Hasil XRD kristal nikel	5
Gambar II.2	Struktur kristal fcc	5
Gambar II.3	Katalisis logam mikel pada proses Fischer Tropsch	6
Gambar II.4	Diagram orbital CO	12
Gambar II.5	Donasi balik pada ikatan logam-karbonil (M-C)	13
Gambar II.6	Donor $\sigma$ dan akseptor $\pi$ ligan CO	15
Gambar II.7	Model pengikatan CO pada kluster logam (a) terminal/ <i>on-top</i> (b) <i>edge-bridging/bridge</i> (c) <i>face-bridging/hollow</i>	15
Gambar II.8	Struktur kristal Ni (fcc) (a) tampak samping (b) tampak atas	19
Gambar II.9	Struktur kluster Ni <sub>2</sub> , Ni <sub>3</sub> , Ni <sub>4</sub> , dan Ni <sub>5</sub>	20
Gambar II.10	Posisi interaksi ligan CO pada kluster sebagai contoh kluster Ni <sub>4</sub>	20
Gambar II.11	Posisi interaksi ligan CO <sub>2</sub> pada kluster sebagai contoh kluster Ni <sub>4</sub>	21
Gambar IV.1	Perbandingan panjang ikatan Ni-Ni struktur kluster Ni <sub>4</sub> teroptimasi dengan variasi fungsi korelasi-pertukaran dan hasil eksperimen	30
Gambar IV.2	Perbandingan energi kisi struktur model kluster nikel Teroptimasi dan eksperimen	33
Gambar IV.3	Perbandingan panjang ikatan Ni-Ni struktur model kluster nikel teroptimasi dengan data eksperimen	34
Gambar IV.4	Perbandingan <i>band gap</i> model kluster teroptimasi dengan eksperimen	34
Gambar IV.5	Perbandingan panjang ikatan struktur teroptimasi dari ketiga posisi interaksi ligan pada senyawa kompleks [Ni <sub>4</sub> CO]	36
Gambar IV.6	Perbandingan panjang ikatan struktur teroptimasi dari ketiga posisi interaksi ligan senyawa kompleks [Ni <sub>4</sub> CO <sub>2</sub> ]	36
Gambar IV.7	Perbandingan kuat ikatan ligan-kluster Ni <sub>4</sub> pada ketiga posisi interaksi ligan	38
Gambar IV.8	Perubahan nilai kuat ikatan ligan-kluster per jumlah ligan CO pada kompleks [Ni <sub>4</sub> CO]	41
Gambar IV.9	Perubahan nilai panjang ikatan Ni-Ni pada kompleks [Ni <sub>4</sub> (CO) <sub>n</sub> ] (n=1-12) terhadap peningkatan nilai $\theta$	41
Gambar IV.10	Perubahan panjang ikatan Ni-C struktur kompleks [Ni <sub>4</sub> (CO) <sub>n</sub> ] (n=1-12) terhadap peningkatan $\theta$	41

Gambar IV.11	Perubahan panjang ikatan C-O pada struktur kompleks $[\text{Ni}_4(\text{CO})_n]$ ( $n=1-12$ ) terhadap peningkatan $\theta$	44
Gambar IV.12	Perbandingan frekuensi serapan vibrasi <i>stretching</i> ikatan C-O pada ketiga keadaan $\theta$ dan molekul CO bebas	45

## DAFTAR TABEL

Tabel IV.1	Perbandingan pita valensi dan pita konduksi serta <i>band gap</i>	31
Tabel IV.2	Data muatan mulliken atom C pada kompleks $[\text{Ni}_4\text{CO}]$ dan $[\text{Ni}_4\text{CO}_2]$	38

## DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1	Himpunan basis LANL2DZ ECP (Ni) dan aug-cc-pVTZ (C,O)	49
Lampiran 2	Perhitungan basis set superposition error (BSSE)	51
Lampiran 3	Struktur $[\text{Ni}_4(\text{CO})_n]$ (n=1-12) teroptimasi	52
Lampiran 4	Simetri struktur teroptimasi	56