

## STUDI REDUKSI CO<sub>2</sub> MENJADI CH<sub>3</sub>OH MELALUI JALUR KARBOKSIL PADA PERMUKAAN ZrTiO<sub>4</sub> (111) TERDOPING S DENGAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

Wafa' Dzofari Hilmy  
20/462259/PA/20231

### INTISARI

Telah dikaji studi reduksi CO<sub>2</sub> menjadi CH<sub>3</sub>OH pada permukaan ZrTiO<sub>4</sub> (111) menggunakan teori fungsi kerapatan dengan tujuan untuk mempelajari pengaruh dopan sulfur terhadap kinerja fotokatalis ZrTiO<sub>4</sub> (111) dan mempelajari mekanisme terbaik dari reaksi reduksi CO<sub>2</sub> menjadi metanol melalui jalur karboksil. Pengaruh dopan S pada ZrTiO<sub>4</sub> dapat dideteksi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan koreksi *Hubbard* yang disingkat sebagai DFT+*U*. Model katalis ZrTiO<sub>4</sub> (111) didesain menggunakan ekspansi  $2 \times 2 \times 1$ . Salah satu atom O dipermukaan ZrTiO<sub>4</sub> digantikan dengan atom S sebagai dopan yang diteliti pada penelitian ini. Perhitungan struktur geometri dilakukan dengan fungsi korelasi pertukaran PBEsol dengan metode Paw dalam basis set *projected augment wave* (PAW). Hasil penelitian menunjukkan bahwa penambahan dopan S pada katalis ZrTiO<sub>4</sub> terbukti dapat meningkatkan aktivitas katalitik reaksi reduksi karbondioksida menjadi metanol melalui jalur karboksil pada sinar tampak yang dibuktikan dengan adanya penurunan tahapan penentu laju reaksi pada katalis terdoping. Mekanisme terbaik reaksi reduksi karbondioksida menjadi metanol pada katalis ZrTiO<sub>4</sub>-S yang didapatkan adalah  $\text{*CO}_2 \rightarrow \text{*COOH} \rightarrow \text{*CO} \rightarrow \text{*CHO} \rightarrow \text{*CH}_2\text{O} \rightarrow \text{*CH}_2\text{OH} \rightarrow \text{CH}_3\text{OH}$ .

Kata kunci : CO<sub>2</sub>, fotoreduksi, *potential determining step*, ZrTiO<sub>4</sub>.

***STUDY OF THE REDUCTION CO<sub>2</sub> TO CH<sub>3</sub>OH THROUGH THE  
CARBOXYL PATHWAY ON SULFUR DOPED ZrTiO<sub>4</sub> (111) SURFACE  
USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Wafa' Dzofari Hilmy  
20/462259/PA/20231

**ABSTRACT**

A computational chemistry study has been carried out on the mechanism of the carbon dioxide reduction reaction to methanol on the surface of the ZrTiO<sub>4</sub>-S catalyst (111) using density functional theory to study the effect of the S dopant on the performance of the ZrTiO<sub>4</sub> photocatalyst (111) and study the best mechanism of the CO<sub>2</sub> reduction reaction to methanol via the pathway carboxyl. The influence of the S dopant on ZrTiO<sub>4</sub> can be detected using the Density Functional Theory (DFT) method with Hubbard correction which is abbreviated as DFT+U. The ZrTiO<sub>4</sub> (111) catalyst model is designed using 2×2×1 expansion. One of the O atoms on the surface of ZrTiO<sub>4</sub> was replaced with an S atom as the dopant studied in this research. The geometric structure calculation was carried out using the PBEsol exchange-correlation function with the Paw method in the projected augment wave (PAW) basis set. The research results showed that the addition of S dopant to the ZrTiO<sub>4</sub> catalyst was proven to increase the catalytic activity of the carbon dioxide reduction reaction to methanol via the carboxyl pathway in visible light as evidenced by a decrease in the potential determining step on the doped catalyst. The best reaction mechanism for reducing carbon dioxide to methanol on the ZrTiO<sub>4</sub>-S catalyst obtained is \*CO<sub>2</sub> → \*COOH → \*CO → \*CHO → \*CH<sub>2</sub>O → \*CH<sub>2</sub>OH → CH<sub>3</sub>OH.

Keywords: CO<sub>2</sub>, photoreduction, potential determining step, ZrTiO<sub>4</sub>.