

STUDI KOMPUTASI TAHAP ADSORPSI DALAM PROSES FOTODEGRADASI FENOL PADA PERMUKAAN TiO_2 (101) ANATASE MURNI DAN TERDOPING KARBON MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

Intan Indah Zinnira
20/462225/PA/20197

INTISARI

Telah dilakukan penelitian kajian studi komputasi tahap adsorpsi dalam proses fotodegradasi fenol pada permukaan TiO_2 (101) anatase murni dan terdoping karbon menggunakan teori fungsi kerapatan. Tujuan penelitian ini adalah untuk mengetahui interaksi paling stabil adsorpsi fenol pada permukaan TiO_2 (101) anatase murni dan mengetahui pengaruh doping karbon terhadap permukaan TiO_2 (101) anatase dalam adsorpsi fenol. Model material TiO_2 didesain dengan menggunakan ekspansi sel $3 \times 3 \times 1$ sel satuan periodik dan tinggi vakum (arah sumbu z) sebesar 20 Å. Perhitungan struktur geometri dan energi sistem dilakukan pada tingkat DFT dengan penambahan parameter Hubbard U, serta dengan menggunakan fungsi korelasi-pertukaran PBEsol dalam basis *kjpaw pseudopotentials* (PPs). Doping karbon dilakukan dengan menggantikan atom oksigen ($\text{O}_{2\text{C}}$) di permukaan. Pemodelan fenol diatas permukaan TiO_2 dilakukan dengan 7 posisi dan diambil 4 posisi terstabil untuk dilanjutkan pemodelan fenol diatas permukaan TiO_2 terdoping karbon. Penentuan posisi terstabil didapatkan dari perhitungan energi adsorpsi yang paling negatif. Pengaruh variasi doping ditinjau melalui panjang ikatan, energi adsorpsi, dan rapat muatan yang telah dilakukan.

Hasil dari penelitian ini yakni posisi interaksi paling stabil adsorpsi fenol pada permukaan TiO_2 (101) anatase murni adalah pada posisi 5 yakni atom O dan H pada fenol dengan posisi *bridge* diatas permukaan TiO_2 dengan energi adsorpsi sebesar -1,07 eV. Doping karbon memiliki pengaruh terhadap permukaan fotokatalisis TiO_2 (101) anatase dalam adsorpsi fenol karena terdapat kontribusi atom C pada plot DOS dan PDOS. Selain itu, doping karbon pada permukaan terhadap interaksi fenol mengalami pemendekan panjang ikatan, energi adsorpsi yang semakin stabil, dan distribusi rapat muatan yang semakin tebal.

Kata kunci: adsorpsi, doping karbon, DFT, fenol, TiO_2

COMPUTATIONAL STUDY OF THE ADSORPTION STAGE IN THE PHOTODEGRADATION PROCESS OF PHENOL ON THE SURFACE OF PURE AND CARBON-DOPED TiO₂ (101) ANATASE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Intan Indah Zinnira
20/462225/PA/20197

ABSTRACT

Computational study of the adsorption stage in the photodegradation process of phenol on the surface of pure and carbon-doped TiO₂ (101) anatase using density functional theory has been conducted. The aim of this study is to determine the most stable interaction of phenol adsorption on the pure TiO₂ (101) anatase surface and to understand the impact of carbon doping on the TiO₂ (101) anatase surface in phenol adsorption. The TiO₂ material model was designed using a cell expansion of 3×3×1 periodic unit cells and a vacuum height (z-axis direction) of 20 Å. The geometric structure and system energy calculations were performed at the DFT level with the addition of the Hubbard U parameter, and the PBEsol exchange-correlation function in the kjpaw pseudopotentials (PPs) basis was used. Carbon doping was implemented by replacing oxygen atoms (O_{2C}) on the surface. The phenol modeling on the surface of TiO₂ was conducted with 7 positions and 4 stabilized positions were selected for further modeling of phenol on the carbon-doped TiO₂ surface. The determination of the stabilized position was obtained from the most negative adsorption energy calculation. The effect of doping variations was reviewed through bond length, adsorption energy, and charge.

The result of this study indicated that the most stable interaction position for phenol adsorption on the pure anatase TiO₂ (101) surface is at position 5, namely the O and H atoms of phenol are in the bridge position above the TiO₂ surface with an adsorption energy of -1.07 eV. Carbon doping affects the photocatalytic surface of TiO₂ (101) anatase in phenol adsorption, as evidenced by the contribution of C atoms in the DOS and PDOS plots. Additionally, carbon doping on the surface affects phenol interaction by shortening bond lengths, stabilizing adsorption energy, and increasing charge density distribution.

Keywords: adsorption, carbon doping, DFT, phenol, TiO₂