

STUDI KOMPUTASI TAHAP ADSORPSI DALAM PROSES FOTODEGRADASI FENOL PADA PERMUKAAN FOTOKATALIS ZrTiO₄ (111) TERDOPING SULFUR MENGGUNAKAN TEORI FUNGSI KERAPATAN

Zhiva Audry Salsabilla

20/462265/PA/20237

INTISARI

Telah dilakukan kajian kimia komputasi tahap adsorpsi dalam proses fotodegradasi fenol pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) terdoping sulfur menggunakan pendekatan teori fungsi kerapatan. Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mengetahui interaksi fenol paling stabil dalam proses adsorpsi pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111). Selain itu, untuk mengkaji pengaruh doping sulfur pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111).

Penelitian ini diawali dengan pemodelan fotokatalis ZrTiO₄ (111) menggunakan ekspansi 2×2×1. Perhitungan *relax* dilakukan pada optimasi geometri dan energi sistem menggunakan metode DFT+U. Doping sulfur dilakukan pada atom oksigen permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) teroptimasi. Adsorpsi fenol pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) dilakukan melalui dua tahap. Tahap pertama dilakukan penempatan fenol dengan variasi atom dan orientasi pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) murni. Tahap selanjutnya, dilakukan perlakuan yang sama pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) terdoping sulfur.

Hasil penelitian menunjukkan interaksi fenol paling stabil dalam proses adsorpsi permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) dari berbagai variasi atom dan orientasi yaitu posisi Ti5-vertikal dengan energi adsorpsi sebesar -2,00 eV. Sedangkan, doping sulfur memengaruhi ikatan dan transfer muatan pada permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111), sehingga interaksi yang terjadi tidak begitu signifikan. Energi adsorpsi yang dihasilkan dari permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) terdoping sulfur kurang optimal dibandingkan permukaan fotokatalis ZrTiO₄ (111) murni.

Kata kunci: Adsorpsi, fenol, sulfur, ZrTiO₄ (111).

THE COMPUTATIONAL STUDY OF ADSORPTION STEP IN PHENOL PHOTODEGRADATION PROCESS ON THE SULFUR-DOPED ZrTiO₄ (111) PHOTOCATALYST SURFACE USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Zhiva Audry Salsabilla

20/462265/PA/20237

ABSTRACT

The adsorption step in phenol photodegradation process on the sulfur-doped ZrTiO₄ (111) photocatalyst surface had been performed using density functional theory. The purpose of this study was to determine the most stable interaction of phenol in adsorption with the surface of ZrTiO₄ (111) photocatalyst. In addition, was to examine the effect of sulfur doping on the surface of ZrTiO₄ (111) photocatalyst.

This research begins with modelling of ZrTiO₄ (111) photocatalyst using the 2×2×1 expansion. Relaxed calculations were conducted on the geometry optimization and system energy using the DFT+U method. Sulfur doping was applied on the surface oxygen atoms of the optimised ZrTiO₄ (111) photocatalyst. The adsorption of phenol on the surface of ZrTiO₄ (111) photocatalyst was carried out in two steps. The first step, Variation position and orientation of phenol placement was carried out on the surface of pure ZrTiO₄ (111) photocatalyst. Next step, the same treatment was carried out on the surface of sulfur-doped ZrTiO₄ (111) photocatalyst.

The results showed that the most stable phenol interaction in the adsorption process with the ZrTiO₄ (111) photocatalyst surface from various variations position and orientation is the Ti5-vertical position with an adsorption energy of -2,00 eV. Meanwhile, sulfur doping affects the bonding and charge transfer on the ZrTiO₄ (111) photocatalyst, this interaction was not significant. The adsorption energy of the sulfur-doped ZrTiO₄ (111) photocatalyst surface is less optimal than that of pure ZrTiO₄ (111) photocatalyst surface.

Keywords: Adsorption, phenol, sulfur, ZrTiO₄ (111).