

KAJIAN KOMPUTASI ADSORPSI DAN REDUKSI NO₂RR PADA PERMUKAAN WS₂ TERMODIFIKASI LOGAM PLATINUM DAN PERAK MENGGUNAKAN METODE TEORI FUNGSI KERAPATAN

Shafira Saffa
22/502892/PA/21590

INTISARI

Telah dilakukan kajian komputasi adsorpsi dan reduksi NO₂RR pada permukaan WS₂ yang dimodifikasi dengan logam platinum dan perak menggunakan metode teori fungsi kerapatan. Tujuan dari penelitian ini adalah menganalisis sifat elektronik dan adsorpsi NO₂ pada Pt₅-WS₂ dan Ag₅-WS₂, serta meninjau jalur mekanisme reaksi reduksi NO_x yang menentukan selektivitas produk. Model katalis WS₂ murni didesain menggunakan *supercell* 4 × 4 × 1 dan logam yang dipilih adalah kluster Pt₅ dan Ag₅ dengan geometri bipiramidal yang ditempatkan di atas permukaan WS₂. Perhitungan dilakukan menggunakan fungsi korelasi-pertukaran Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dengan basis pseudopotensial *projector augmented wave* (PAW).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa sistem Pt₅-WS₂ dan Ag₅-WS₂ bersifat stabil dan memiliki perilaku adsorpsi yang baik karena proses berjalan spontan dengan nilai energi negatif. Modifikasi permukaan WS₂ dengan kluster logam memberikan efek positif pada proses adsorpsi yang juga berpengaruh pada reaksi reduksi NO₂. Analisis sifat elektronik menunjukkan interaksi sistem Pt₅-WS₂ dan Ag₅-WS₂ lebih kuat dengan molekul NO₂ dibandingkan WS₂ murni. Berdasarkan analisis profil energi, jalur asosiatif menuju pembentukan NH₂OH menjadi jalur yang paling menguntungkan pada kedua sistem termodifikasi. Sistem Ag₅-WS₂ menunjukkan performa yang lebih unggul dalam reaksi reduksi NO₂ menjadi NH₂OH dibanding Pt₅-WS₂.

Kata kunci: perak, platinum, polusi nitrogen, teori fungsi kerapatan, tungsten disulfida

***COMPUTATIONAL STUDY OF NO₂RR ADSORPTION AND REDUCTION
OVER WS₂ SURFACE MODIFIED WITH PLATINUM AND SILVER
METAL USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD***

Shafira Saffa
22/502892/PA/21590

ABSTRACT

A computational study of NO₂RR adsorption and reduction over WS₂ surface modified with platinum and silver metal using density functional theory method has been carried out. This study aimed to analyze the electronic properties and adsorption behavior of NO_x on Pt₅-WS₂ and Ag₅-WS₂ systems, as well as to investigate the NO_x reduction reaction pathways that determine product selectivity. Pristine WS₂ catalyst model was designed using a 4 × 4 × 1 supercell and the selected metals were Pt₅ and Ag₅ clusters with bipyramidal geometry placed on the WS₂ surface. All calculations were performed using Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) exchange-correlation with a projector augmented wave (PAW) pseudopotential basis.

The results showed that both Pt₅-WS₂ and Ag₅-WS₂ systems were structurally stable and exhibit favorable adsorption behavior, indicated by negative adsorption energy values. Modification of the WS₂ surface with metal clusters enhances the adsorption capability, which subsequently influences the NO₂ reduction reaction. Electronic structure analysis reveals stronger interactions between NO₂ molecules and the Pt₅-WS₂ and Ag₅-WS₂ systems compared to pristine WS₂. Based on the reaction energy profile, the associative pathway leading to NH₂OH formation was the most favorable pathway in both modified systems. The Ag₅-WS₂ system exhibited superior catalytic performance for NO₂ reduction reaction to NH₂OH compared to Pt₅-WS₂.

Keywords: density functional theory, nitrogen pollution, platinum, silver, tungsten disulfide