

INTISARI

KAJIAN INTERAKSI MOLEKUL CO DENGAN KLUSTER ATOM KOBALT MENGGUNAKAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT)

Oleh

Hamonangan Rekso Diputro Sitompul

10/297412/PA/12987

Kajian interaksi gas CO pada kluster atom kobalt dengan metode *Density Functional Theory (DFT)* telah dikerjakan. Metode komputasi *DFT* dengan enam variasi fungsi densitas digunakan untuk menentukan model kluster kobalt terstabil dari kristal Co hcp. Pengamatan interaksi kluster kobalt dengan satu molekul CO dan CO₂, interaksi penutupan permukaan (*coverage*) molekul CO pada kluster kobalt, dan dilakukan juga pengamatan spektra vibrasi IR *stretching* ikatan C-O struktur kompleks kobalt-karbonil.

Model kluster kobalt terbaik yang ditentukan dengan optimasi geometri dengan metode DFT/B3LYP adalah struktur kluster Co₄. Kluster Co₄ bersifat lebih selektif terhadap molekul CO daripada molekul CO₂, dengan urutan preferensi pengikatan ligan CO oleh kluster Co₄ yaitu *hollow* > *bridge* > *on-top*, sedangkan urutan preferensi pengikatan ligan CO₂ oleh kluster Co₄ adalah *hollow* > *on-top* > *bridge*. Kluster Co₄ mengikat ligan CO dengan nilai kuat ikatan ligan-kluster per jumlah ligan terbesar pada keadaan *low coverage*, dengan θ sebesar 0.33 dan nilai kuat ikatan per jumlah ligan CO sebesar 46,179 kkal/mol. Pengikatan ligan CO oleh kluster Co₄ mengakibatkan *red shift* pada frekuensi serapan vibrasi IR *stretching* ikatan C-O terhadap frekuensi serapan vibrasi IR molekul CO bebas.

Kata Kunci: Kluster Co, Kobalt-Karbonil, Kompleks Organologam, Interaksi Penutupan Permukaan, DFT/B3LYP

ABSTRACT

INTERACTION STUDY OF CO MOLECULES WITH COBALT ATOM CLUSTERS USING THE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT) METHOD

By

Hamonangan Rekso Diputro Sitompul

10/297412/PA/12987

A theoretical study of the interaction of CO molecules on cobalt atom cluster with the density functional theory (DFT) has been carried out. The DFT computational method with six variation of density functions were used to perform computational calculation on the determination of the most stable cluster model of cobalt from Co hcp crystals. Investigation of the interaction between cobalt cluster and one CO and CO₂ molecule, and the surface enclosure by the CO ligands (*coverage interaction*), and the observation of IR vibration spectrum of C-O bond stretching from the structure of cobalt-carbonyl complexes also has been performed.

The best cluster model of cobalt determined by geometry optimization using the DFT/B3LYP method is the structure of Co₄ cluster. Co₄ cluster shows a selectivity toward CO than CO₂ molecules, with the preferred order of CO ligand binding position on Co₄ cluster is *hollow* > *bridge* > *on-top*, meanwhile the preferred order of CO₂ ligand binding position on the same cluster is *hollow* > *bridge* > *on-top*. Co₄ cluster bind the CO ligands with the strongest bond energy per ligand quantity at *low coverage* condition, with the θ value of 0.33 and the bond energy per ligand quantity of 46.179 kcal/mole. The binding of CO ligands by Co₄ cluster has resulted in a *red shift* at the adsorbed frequency of IR *stretching* vibration of the C-O bond compared to the adsorbed frequency of IR vibration from a free CO molecule.

Keywords: Co Clusters, Cobalt-Carbonyl, Organometallic Complexes, Surface Coverage Interaction, DFT/B3LYP