

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Perkembangan ilmu pengetahuan dan teknologi yang semakin pesat akhir-akhir ini membawa manusia kepada peradaban yang baru, dimana manusia memenuhi kebutuhannya yang sudah didukung oleh peralatan-peralatan yang serba modern. Sebagian besar peralatan modern menggunakan logam khususnya besi (Fe) pada bahan dasarnya. Logam yang sudah ditemukan sejak dahulu, dalam penggunaannya sering kali menimbulkan masalah yang kadang sulit untuk memecahkannya. Salah satu masalah besar yang muncul pada logam yaitu korosi.

Korosi adalah proses penurunan kualitas yang disebabkan oleh reaksi kimia antara logam dengan unsur-unsur lain yang ada di lingkungan alam. Terdapat dua jenis mekanisme utama dari korosi, yaitu berdasarkan reaksi kimia secara langsung dan reaksi elektrokimia. Sebagian besar korosi pada Fe terjadi karena interaksi dengan H₂O. Meskipun korosi pada logam tidak dapat dihindari, namun bisa dicegah dan dikendalikan agar struktur atau komponen tersebut memiliki masa pakai yang lebih lama. Studi sistematis tentang adsorpsi dan disosiasi molekul H₂O di permukaan Fe sangat penting untuk memahami tahap awal korosi pada Fe. Berbagai penelitian telah dilakukan untuk memahami interaksi antara air dengan permukaan logam.

Selama beberapa tahun terakhir, telah dilakukan penelitian yang berkelanjutan untuk menyelidiki proses adsorpsi dan disosiasi molekul H₂O pada permukaan Fe. Misalnya, Fernandes dan Campos yang mempelajari adsorpsi molekul H₂O pada permukaan BCC dari Fe (100) dengan dinamika molekuler. Dalam penelitiannya, Fernandes dan Campos mengembangkan medan gaya efektif untuk menjelaskan interaksi permukaan Fe-H₂O dan digunakan dalam simulasi dinamika molekuler. Hasilnya menunjukkan kesesuaian yang sangat baik antara spektrum vibrasi simulasi dan spektrum vibrasi eksperimental pada antarmuka besi-air. Profil kepadatan H₂O mengungkapkan adanya lapisan ganda H₂O pada antarmuka logam. Selain itu, pemetaan horizontal yang dikombinasikan dengan distribusi sudut bidang molekul memungkinkan analisis struktur H₂O di atas

permukaan, yang sejalan dengan model lapisan ganda pada permukaan logam [1]. Selanjutnya, Govender mempelajari antarmuka H₂O - Fe menggunakan DFT dan menemukan bahwa di antara situs adsorpsi energi yang paling stabil (puncak, jembatan dan relung), situs teratas memiliki energi adsorpsi terendah [2]. Situs adsorpsi yang berbeda ini sesuai dengan lapisan pertama air yang diserap, dengan jarak H₂O - Fe sepanjang sumbu z (tegak lurus dengan permukaan besi) yang berkaitan dengan energi adsorpsi. Gao mempelajari penyerapan dan disosiasi H₂O pada permukaan Fe₅C₂(010) dengan *Spin-polarized density functional theory calculations* (GGA-PBE) [3]. Ditemukan bahwa daerah besi pada permukaan Fe₅C₂(010) aktif untuk penyerapan dan disosiasi H₂O, sementara daerah karbon tidak aktif. Untuk penyerapan H₂O pada daerah besi, H₂O cenderung mengisi posisi paling atas atom besi permukaan, dan interaksi ikatan hidrogen yang signifikan ditemukan pada penutupan H₂O yang tinggi berdasarkan energi penyerapan yang dihitung dan jarak O-H antar molekul.

Lalu, Liu mempelajari adsorpsi dan disosiasi H₂O pada permukaan Fe (100) dengan penutupan yang berbeda dengan menggunakan *Density Functional Theory methods and ab initio thermodynamics* [4]. Penelitian ini telah dilakukan untuk menghitung penyerapan dan disosiasi H₂O pada permukaan Fe (100) dengan berbagai tingkat penutupan menggunakan metode teori densitas fungsional dan termodinamika ab initio. Pada penyerapan gugus (H₂O)_n pada permukaan Fe (100) dengan ukuran (3 × 4), energi penyerapan terjadi melalui interaksi langsung antara H₂O dan atom Fe, serta ikatan hidrogen. Selain itu, Jung dan Kang melakukan penelitian tentang adsorpsi dan disosiasi molekul air tunggal pada permukaan Fe (100) menggunakan perhitungan *density-functional theory* [5]. Hasil penelitian menunjukkan adsorpsi molekuler stabil dengan energi adsorpsi 0,39 eV saat molekul H₂O menempel di atas atom Fe permukaan dalam konfigurasi datar. Konfigurasi ini dapat mereproduksi frekuensi getaran air yang diukur dalam studi *Electron Energy Loss Spectroscopy (EELS)* suhu rendah. Disosiasi molekuler H₂O menjadi H+OH memiliki hambatan aktivasi 0,35 eV, sementara disosiasi gugus OH menjadi H+O memerlukan energi aktivasi 0,79 eV.

Selain menggunakan DFT, studi simulasi adsorpsi H₂O dengan permukaan Fe dapat dipelajari dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler. Simulasi

Dinamika molekuler adalah salah satu metode komputasi yang paling umum digunakan dalam studi antarmuka karena pendekatan molekulernya. Selain itu, sistem yang sangat besar dapat disimulasikan karena dinamika molekul memiliki biaya komputasi yang sangat rendah.

Simulasi Dinamika Molekuler didasarkan pada gerakan atom dan molekul dalam sistem *n-body*. Gerak molekul didasarkan pada potensi yang telah ditentukan sebelumnya antara atom dan medan gaya mekanika molekuler. Meskipun demikian pengetahuan mekanisme disosiasi H₂O pada permukaan Fe (111) dengan menggunakan metode Simulasi Dinamika Molekuler masih terbatas, sehingga dalam penelitian ini penulis mengajukan judul “Studi Simulasi Dinamika Molekuler Mekanisme Adsorpsi dan Disosiasi Molekul H₂O pada permukaan Fe (111)” untuk mempelajari mekanisme adsorpsi dan disosiasi lebih lanjut.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar dari belakang diatas, maka rumusan masalah pada penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Bagaimana mekanisme adsorpsi molekul H₂O pada permukaan Fe (111) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler?
2. Bagaimana mekanisme disosiasi molekul H₂O pada permukaan Fe (111)?
3. Bagaimana reaksi yang terjadi antara molekul H₂O dan permukaan Fe (111)?

1.3 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah yang sudah dijelaskan diatas, tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Dapat mengetahui proses adsorpsi molekul H₂O pada permukaan Fe (111) dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler.
2. Dapat mengetahui proses disosiasi molekul H₂O pada permukaan Fe (111) dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler.
3. Dapat mengetahui reaksi yang terjadi antara molekul H₂O dan permukaan Fe (111).

1.4 Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut :

1. Semua pemodelan dilakukan dengan simulasi dinamika molekuler.
2. Proses adsorpsi dan disosiasi diamati pada permukaan Fe (111).
3. Simulasi dilakukan pada temperatur 1700K untuk mempercepat proses reaksi dan hasil simulasi pada temperatur yang lebih rendah disajikan sebagai perbandingan.
4. Molekul yang terlibat dalam reaksi adalah H₂O.

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari pelaksanaan proposal ini adalah sebagai berikut :

1. Dapat memahami mekanisme adsorpsi molekul H₂O pada permukaan Fe (111).
2. Dapat memahami mekanisme disosiasi molekul H₂O pada permukaan Fe (111).
3. Dapat dijadikan referensi untuk penelitian selanjutnya khususnya di bidang korosi pada permukaan Fe (111).

