

# PENSTABILAN FASA FOTOKATALIS Cu<sub>2</sub>O(111) DENGAN PERLAKUAN HIDROGENASI BERDASARKAN STUDI AB INITIO

Muhammad Irfandi (23319014)

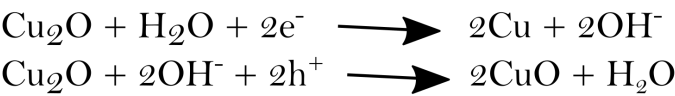
Program Studi Magister Teknik Fisika, Institut Teknologi Bandung

## LATAR BELAKANG

Tembaga (I) oksida (Cu<sub>2</sub>O) merupakan fotokatalis dengan celah pita sebesar 2.1-2.6 eV yang dapat digunakan untuk memproduksi gas hidrogen melalui reaksi evolusi hidrogen.



Namun, Cu<sub>2</sub>O memiliki kendala berupa degradasi fasa menjadi Cu dan CuO sesuai mekanisme reaksi berikut

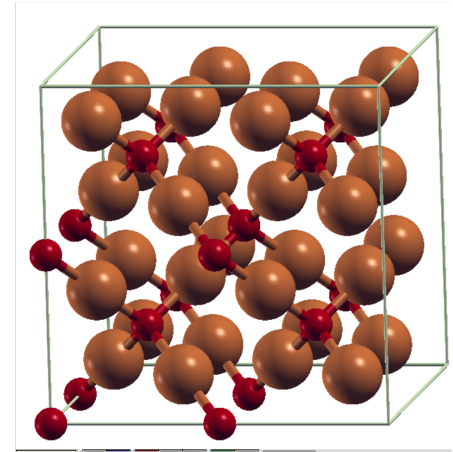


Degradasi fasa menjadi CuO lebih dominan terjadi sebab terjadinya akumulasi *hole* tak termanfaatkan di permukaan Cu<sub>2</sub>O.

Akumulasi *hole* pada permukaan Cu<sub>2</sub>O diminimasi dengan perlakuan hidrogenasi

## METODE

Studi ab initio berbasis DFT+U digunakan untuk menyelidiki mekanisme penstabilan fasa Cu<sub>2</sub>O dengan perlakuan hidrogenasi dari aspek struktur elektronik. Parameter U = 5 eV menghasilkan nilai parameter kisi sesuai eksperimen, yaitu 4,266 Å.



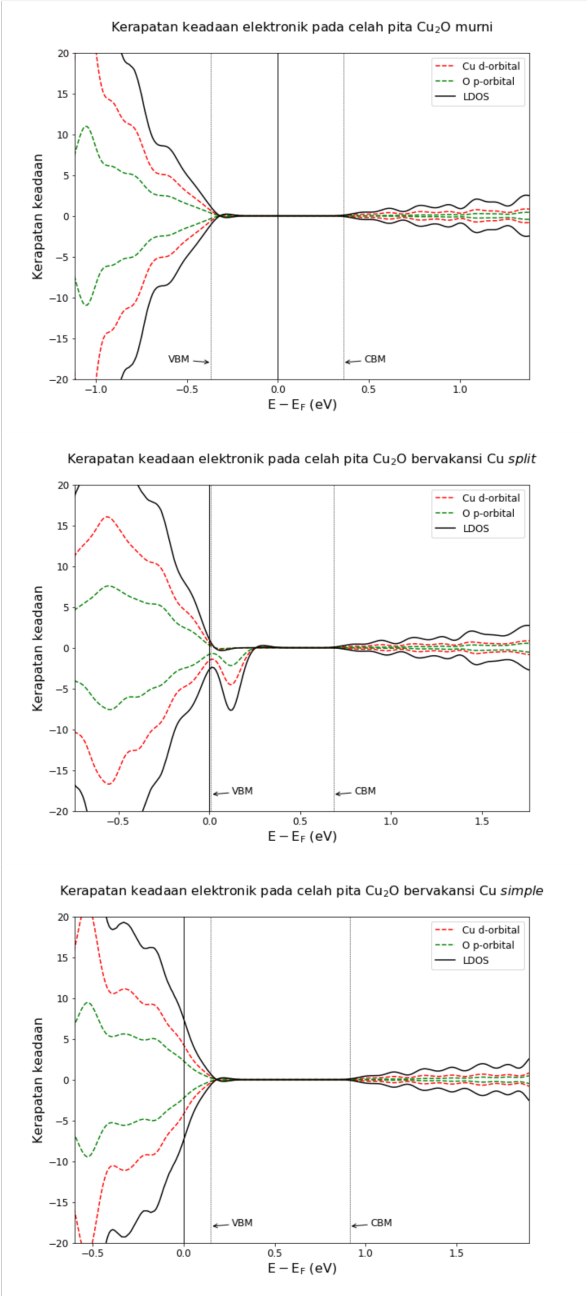
Model sel super Cu<sub>2</sub>O

### Rincian parameter-parameter simulasi

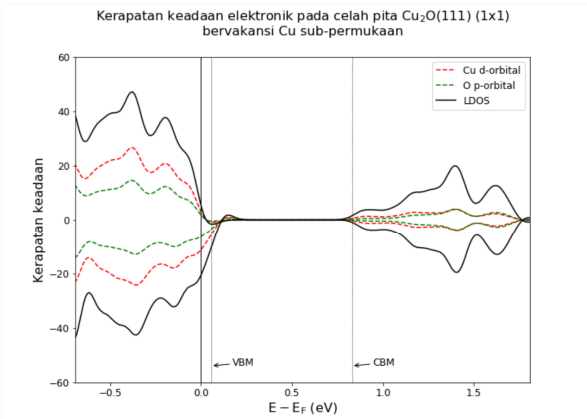
| Parameter                                        | Nilai                                           |
|--------------------------------------------------|-------------------------------------------------|
| Fungsional                                       | PBE + U ( <i>spin-polarized</i> )               |
| Koreksi                                          | Dispersi Grimme                                 |
| Batas konvergensi optimasi struktur (total gaya) | 0.026 eV/Å                                      |
| Wavefunction cutoff                              | 544 eV                                          |
| Kinetic cutoff                                   | 2721 eV                                         |
| k-point                                          | 5 x 5 x 5 (bulk)<br>5 x 5 x 1 (permukaan)       |
| Konstruksi fungsi gelombang                      | Projected Augmented Wave                        |
| Perangkat lunak                                  | Quantum Espresso (QE)<br>Fasilitas HPC PPNN ITB |

## DATA DAN ANALISIS

Cu<sub>2</sub>O merupakan semikonduktor tipe-p

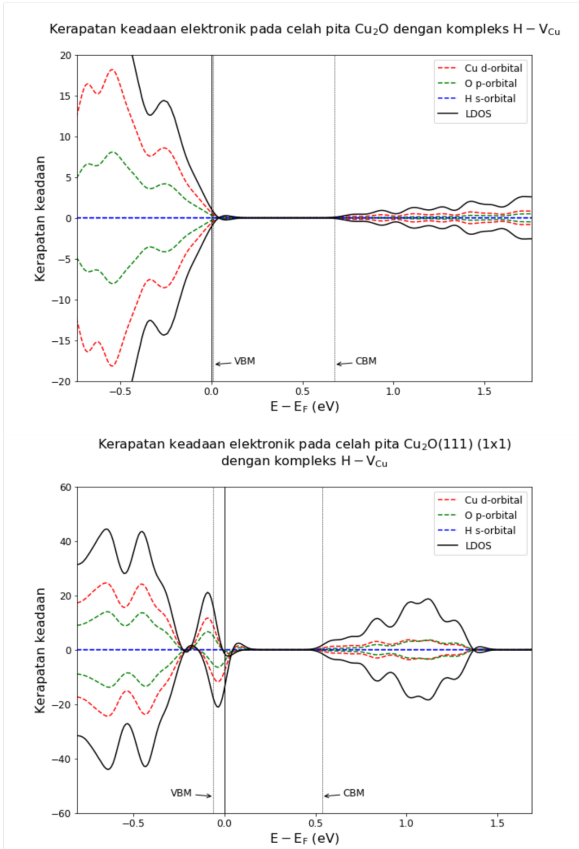


Cu<sub>2</sub>O bersifat sebagai semikonduktor tipe-p akibat adanya vakansi atom Cu (V<sub>Cu</sub>), yaitu V<sub>Cu</sub> sederhana dan V<sub>Cu</sub> pisah. V<sub>Cu</sub> sederhana menimbulkan level akseptor terdelokalisasi sedangkan V<sub>Cu</sub> pisah menimbulkan level akseptor terlokalisasi pada VBM + 0,11 eV. Dari aspek energetika, V<sub>Cu</sub> sederhana dan pisah memiliki entalpi formasi sebesar 0,58 eV dan 0,33 eV



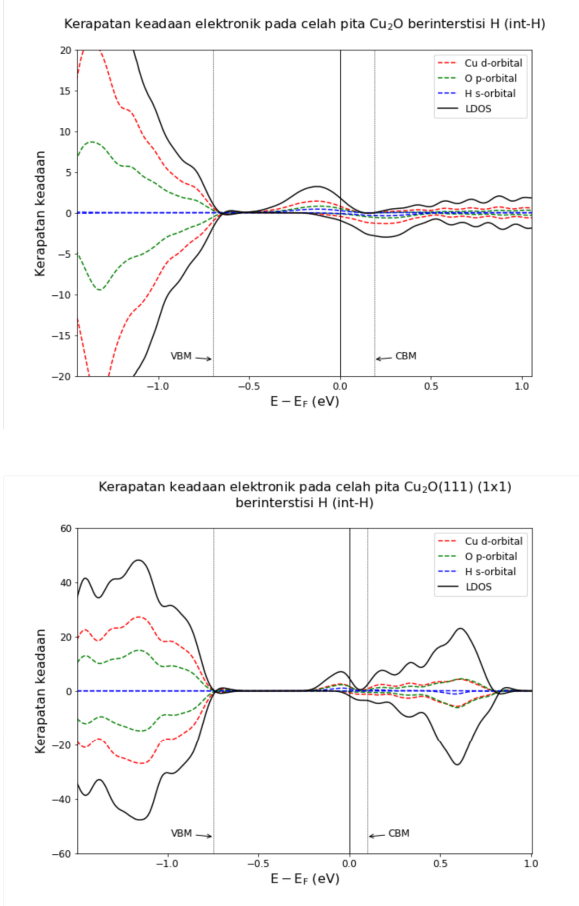
Pembentukan level akseptor secara konsisten juga teramati pada permukaan Cu<sub>2</sub>O(111). Potensial asimetris di sekitar permukaan menyebabkan V<sub>Cu</sub> membentuk level akseptor terdelokalisasi pada *spin-down* saja.

Atom H berperan sebagai peredam level akseptor



Perlakuan hidrogenasi pada Cu<sub>2</sub>O dapat menempatkan atom H di posisi V<sub>Cu</sub> sehingga membentuk kompleks H-V<sub>Cu</sub> dengan entalpi formasi sebesar -1.27 eV. Atom H tersebut mampu meredam level akseptor (*hole state*).

Atom H mampu menginduksi level perangkap *hole*



Perlakuan hidrogenasi juga dapat menempatkan atom H pada posisi interstisial dengan nilai entalpi pembentukan sebesar 1.02 eV. Atom H interstisial mampu menginduksi level perangkap *hole* yang terletak pada VBM + 0,56 eV.

## KESIMPULAN

- Cu<sub>2</sub>O merupakan semikonduktor tipe-p yang memiliki level akseptor akibat adanya vakansi atom Cu.
- Atom H pada kompleks H-V<sub>Cu</sub> mampu meredam keberadaan level akseptor sehingga konsentrasi *hole* berkurang.
- Atom H pada posisi interstisial mampu menginduksi level perangkap *hole* sehingga mobilitas efektif *hole* berkurang.