

Pemodelan Energi Adsorpsi dan Energi Reaksi Dekomposisi Amonia pada Katalis Besi-Kobalt dengan Variasi Orientasi Permukaan = Modeling of Adsorption Energy and Reaction Energy for Ammonia Decomposition on Iron-Cobalt Catalysts with Surface Orientation Variations

Pavitraj Singh Aulakh, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920545179&lokasi=lokal>

Abstrak

Hidrogen sebagai pembawa energi terbarukan berperan penting dalam memenuhi kebutuhan energi global dan mengatasi tantangan perubahan iklim, namun penyimpanannya menghadapi tantangan seperti kepadatan volumetrik rendah dan kondisi operasi ekstrem. Penyimpanan hidrogen melalui dekomposisi amonia menjadi alternatif penyimpanan yang berpotensi. Amonia cocok untuk menghasilkan hidrogen on-site tanpa emisi karbon untuk aplikasi PEM fuel cell yang membutuhkan suhu operasi di bawah 450°C, namun pengembangan katalis non-logam mulia dengan biaya rendah yang mampu bekerja pada suhu rendah tetap menjadi tantangan besar. Salah satu terobosan merupakan utilisasi katalis bimetalik besi-kobalt dengan penyangga MgO untuk dekomposisi amonia pada 500°C dan 1 bar ditemukan mampu menekan nitridasi dan mencapai energi pengikatan nitrogen yang setara dengan katalis berbasis Ru (Chen, dkk, Nat. Commun. 2024, 871, 15, 8410). Pada penelitian ini, studi lebih lanjut mengenai katalis bimetalik besi-kobalt akan dilakukan dengan fokus pada pengaruh orientasi permukaan katalis terhadap reaksi dekomposisi amonia. Pendekatan DFT diterapkan pada setiap tahap reaksi untuk mengevaluasi energi adsorpsi dan energi reaksi, yang berfungsi sebagai indikator performa katalis. Hasil simulasi menunjukkan orientasi (100) terbaik untuk disosiasi, (111) untuk rekombinasi dan desorpsi yang merupakan tahap penentu laju, serta (210) untuk keseimbangan energi pada seluruh tahapan, mencerminkan efisiensi bervariasi yang dipengaruhi oleh orientasi permukaan dan efek kobalt.

.....Hydrogen, a renewable energy carrier, is crucial in addressing global energy demands and climate change. However, its storage faces challenges like low volumetric density and extreme conditions. Ammonia decomposition presents a potential alternative for hydrogen storage due to its high hydrogen content and stability at low pressures. Ammonia is ideal for generating on-site hydrogen without carbon emissions, especially for PEM fuel cells that require operating temperatures below 450°C. Developing low-cost, non-precious metal catalysts that can function at low temperatures remains a challenge. A notable breakthrough involves using iron-cobalt catalyst supported by MgO for ammonia decomposition at 500°C and 1 bar, which effectively suppresses nitridation and achieves nitrogen binding energies comparable to Ru-based catalysts (Chen et al., Nat. Commun. 2024, 871, 15, 8410). This study focuses on the effect of surface orientation on the ammonia decomposition reaction using an iron-cobalt catalyst. The DFT approach is used to evaluate adsorption and reaction energies at each reaction step, serving as indicators of catalyst performance. Simulation results indicate that the (100) orientation is best for dissociation, (111) for recombination and desorption, which are the rate-determining steps, and (210) for energy balance across all stages, highlighting efficiency variations influenced by surface orientation and cobalt effects.