



# Studi Adsorpsi Molekul $\text{NH}_3$ Pada Permukaan $\text{Cr}(111)$ Menggunakan Program Calzaferri

Charles Banon

*Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Bengkulu, Indonesia.*

Diterima 7 September 2006; Disetujui 24 Desember 2006

**Abstrak-** Studi interaksi molekul  $\text{NH}_3$  pada permukaan  $\text{Cr}(111)$  menggunakan program QCMP 116 yang dijalankan dengan IBM PC Compatible (Pentium III, 660 MHz) telah dilakukan. Permukaan ini terdiri dari 20 atom dengan tiga lapisan. Sebuah  $\text{NH}_3$  (dengan bidang molekul planar dibuat sejajar atau tegak lurus bidang permukaan), pada berbagai posisi jatuh dioptimasi tiga dimensi dengan program tersebut. Hasil perhitungan binding energi  $\text{NH}_3$  ( $\text{BE}(\text{NH}_3)$ ) pada permukaan dan panjang ikatan antar atom pada kondisi optimal memperlihatkan: molekul  $\text{NH}_3$  dengan bidang molekul sejajar bidang permukaan menuju atom permukaan lapisan satu dan tiga, teradsorpsi kimia lemah dengan rentang  $\text{BE}(\text{NH}_3)$  0,9797 – 1,3421 eV/molekul dan yang menuju lapisan kedua diuraikan oleh permukaan. Molekul  $\text{NH}_3$  yang mendatangi permukaan dengan bidang molekul tegak lurus permukaan teradsorpsi secara fisika (sangat lemah) mempunyai rentang  $\text{BE}(\text{NH}_3)$  0,4903 – 0,5614 eV/molekul.

**Kata Kunci:** Adsorpsi; Energi ikatan.

## 1. Pendahuluan

Sintesis amoniak dari unsurnya nitrogen dan hidrogen dengan menggunakan katalis besi sudah lama dikenal. Disosiasi  $\text{N}_2$  pada permukaan katalis merupakan proses yang berlangsung lambat [7]. Kecepatan adsorpsi  $\text{N}_2$  pada permukaan logam besi tergantung pada struktur permukaan besi tersebut. Berbagai eksperimen tentang proses katalisis pada bermacam permukaan besi telah dilakukan. Dari eksperimen tersebut diketahui bahwa permukaan Fe (111) sangat aktif yaitu  $\pm 25$  kali lebih aktif dari permukaan Fe (100) dan  $\pm 400$  kali lebih aktif dari permukaan Fe (110). Sedangkan perbandingan kecepatan adsorpsi  $\text{N}_2$  pada Fe (111), (100) dan (110) tersebut pada suhu  $275^\circ\text{C}$  adalah 60 : 3 : 1 (3). Dari percobaan selanjutnya telah dipelajari dan dibandingkan proses disosiasi  $\text{N}_2$  pada permukaan (111) antara Fe, Cr, dan Cu, didapat bahwa atom Cr paling reaktif untuk mendisosiasi  $\text{N}_2$  (6). Kemudian Dowben *et al.*, (1991) mendapatkan energi desorpsi molekul  $\text{N}_2$  pada Cr lebih kecil dibandingkan dari yang diamati pada logam transisi lain termasuk besi. Ini berarti bahwa permukaan Cr lebih reaktif dari permukaan logam transisi lain. Logam ini mungkin dapat digunakan sebagai katalis pembentuk  $\text{NH}_3$  secara langsung maupun tidak langsung. Walau demikian

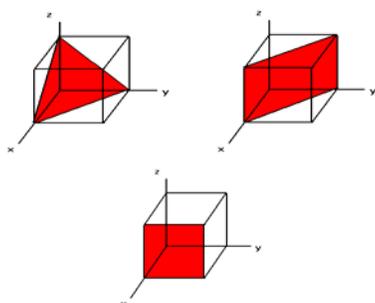
kesuksesan menghasilkan  $\text{NH}_3$  tidak hanya ditentukan oleh proses disosiasi, tetapi akhir dari proses, apakah  $\text{NH}_3$  yang terbentuk akan diadsorpsi secara lemah, kuat atau bahkan diuraikan oleh katalis juga sangat menentukan. Maka perlu dipelajari bagaimana proses adsorpsi/desorpsi  $\text{NH}_3$  pada permukaan Cr. Penelitian ini dilakukan untuk mempelajari adsorpsi/desorpsi molekul  $\text{NH}_3$  pada permukaan katalis dengan menggunakan metoda Calzaferri yang diolah dengan bantuan komputer IBM-PC (Pentium III, 660 MHz). Permukaan yang diamati adalah Cr dengan irisan permukaan (111) yang terdiri dari 3 lapisan permukaan dengan jumlah atom 20. Sedangkan sebuah molekul  $\text{NH}_3$  mendatangi permukaan logam dengan arah bidang molekul ( $D_{3h}$ ) horizontal (bidang molekul sejajar bidang permukaan logam,  $\alpha = 0^\circ$ ) dengan beberapa posisi jatuh yang berbeda, dan arah vertikal (bidang molekul tegak lurus bidang permukaan logam,  $\alpha = 90^\circ$ ) dengan beberapa posisi jatuh yang berbeda pula.

## Sistem Kristal

Pada tahun 1984, Bravis memperkenalkan 14 jenis kristal, dan salah satunya berbentuk kubus [2]. Ada 3 tipe kristal kubus, yaitu kubus sederhana (*Simple Cubic*), kubus berpusat muka (*Face Centered Cubic* /

FCC) dan kubus berpusat tubuh (*Body Centered Cubic* / BCC) .

Pada struktur BCC setiap atom mempunyai 8 buah atom tetangga terdekat, atau bilangan koordinasi setiap atom adalah 8. Dalam struktur ini, atom-atom menempati 68% dari ruang yang tersedia. Besi dan khrom adalah beberapa contoh dari logam transisi yang memiliki struktur kristal BCC (5). Gambar 1 memperlihatkan ketiga tipe kristal kubus untuk irisan permukaan (111), (110) dan (100).



Gambar 1. Skema Tipe Struktur Kristal BCC (111), (110), (100)

### Sintesis Amonia dengan Katalis Cr(111)

Peran katalis pada reaksi pembentukan amonia yang diharapkan adalah sebagai media yang dapat mendisosiasi gas  $N_2$ , dengan cara mengadsorpsi gas  $N_2$  tersebut, baik secara atomik maupun molekuler. Kecepatan adsorpsi  $N_2$  pada katalis inilah yang menjadi penentu kecepatan reaksi pembentukan amonia.

Kecepatan adsorpsi  $N_2$  pada permukaan logam besi ataupun krom tergantung pada struktur permukaan logam tersebut. Berbagai eksperimen tentang proses katalis pada bermacam permukaan besi/krom telah dilakukan. Dari eksperimen tersebut diketahui bahwa permukaan Fe (111) sangat aktif, yaitu  $\pm 25$  kali lebih aktif dari permukaan Fe (100) dan  $\pm 400$  kali lebih aktif dari permukaan Fe (110). Sedangkan perbandingan kecepatan adsorpsi  $N_2$  pada Fe (111), (100) dan (110) tersebut pada suhu  $275^\circ C$  adalah  $60 : 3 : 1$  (3). Dari percobaan selanjutnya telah dipelajari dan dibandingkan proses disosiasi  $N_2$  pada permukaan (111) antara Fe, Cr, dan Cu, didapat bahwa atom Cr paling reaktif untuk mendisosiasi  $N_2$  (6).

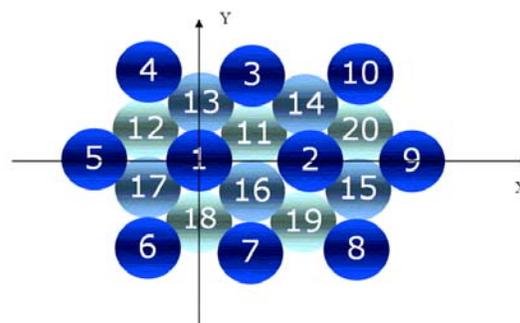
Kemudian Dowben *et al.* (1991) mendapatkan energi desorpsi molekul  $N_2$  pada Cr lebih kecil dibandingkan dari yang diamati pada logam transisi lain termasuk besi. Ini berarti bahwa permukaan Cr lebih reaktif dari permukaan logam transisi lain.

Di samping dapat mendisosiasi  $N_2$ , ternyata katalis logam tersebut juga akan mengadsorpsi gas  $NH_3$ , hal ini dikarenakan gas  $NH_3$  mudah teradsorpsi terhadap bahan-bahan yang mempunyai daya serap yang baik (1).

## 2. Metoda Penelitian

Alat yang digunakan adalah, IBM PC (Pentium III, 660MHz), Printer HP Destjet 3920, Disket program QCMP (Calzaferri)

Sistem yang diamati Struktur irisan Cr(111) yang akan diamati dapat dilihat pada Gambar 3.



Gambar 2. Struktur permukaan Cr(111), sumbu Z tegak lurus bidang gambar 1-10 : lapisan satu 13-17 : lapisan dua 11, 12, 18-20 : lapisan tiga

Senyawa yang diamati adalah  $NH_3$  yang mendatangi permukaan logam Cr dengan irisan permukaan (111), baik secara Horizontal (bidang molekul sejajar bidang permukaan,  $\alpha = 0^\circ$ ) maupun Vertikal (bidang molekul tegak lurus bidang permukaan,  $\alpha = 90^\circ$ ) dengan beberapa posisi jatuh yang berbeda. Adapun posisi jatuh yang diamati sebanyak 20 untuk arah jatuh horizontal dan 4 untuk arah jatuh vertikal.

Pada penelitian ini yang dilakukan adalah optimasi 3 dimensi (panjang ikatan, sudut ikatan dan sudut antar bidang) dengan menggunakan program Calzaferri, sehingga didapatkan energi total dari struktur dalam keadaan optimal.

Metoda ini memerlukan masukan data suatu molekul sebagai berikut :

Parameter atom-atom penyusun molekul, Koordinat internal, yang berfungsi untuk menentukan vektor berdasarkan posisi atom-atom dalam koordinat tersebut. Jumlah, jenis dan muatan atom pada molekul. Jumlah atom dummy. Jenis variasi (jarak antara atom atau panjang ikatan ( $l$ ), sudut antar vektor/sudut ikatan/bond angle ( $\alpha$ ), sudut antar bidang/dihedral angle ( $\delta$ )), jumlah variasi yang diinginkan, jumlah vektor yang divariasikan, selisih antar variasi (increment).

Adapun parameter atom yang digunakan untuk perhitungan dalam program termuat dalam Tabel 1 (8).

Tabel 1. Parameter atom yang digunakan dalam perhitungan

Atom	ns	$\xi_s$	VSIE, eV	np	$\xi_p$	VSIE (eV)	nd	$\xi_d$	VSIE (eV)	$\xi_2$	C1	C2
Cr	4	1.600	-6.77	4	1.30	-3.72	3	4.95	-9.50	1.60	0.4876	0.7205
N	2	2.140	-26.0	2	1.95	-13.4						
H	1	1.300	-12.6									

Keterangan: n = bil. Kuantum utama,  $\xi$  = eksponen orbital VSIE = Valence State Ionization Energi, C = koefisien orbital atom. Parameter Cr dari Yuhernita, 1999, N dari Program Calzaferri, H dari Kusuma, 2001

Sebelum melakukan optimasi, terlebih dahulu dibuat masukan data pada program, dengan langkah-langkah sebagai berikut :

- Memperkirakan struktur geometri permukaan Cr(111) yang diamati, dan posisi molekul NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan tersebut. Kemudian semua atom pada struktur diberi nomor sehingga posisi atom-atom tersebut dapat dinyatakan dalam koordinat kartesian..
- Menentukan vektor antara 2 buah atom dan membuat perkiraan panjang ikatan (panjang vektor), sudut ikatan dan sudut antar bidang yang memuat masing-masing vektor dalam koordinat internal Tabel 2.

Untuk molekul NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan Cr(111), panjang ikatan N terhadap permukaan 1,5Å bila tanpa dummy dan 1Å bila pakai dummy seperti yang digambarkan pada Lampiran 1. rN-H = 0,992 Å

merupakan jarak optimum N-H dalam keadaan bebas, < HNH = 120° merupakan sudut struktur segitiga planar (D<sub>3h</sub>).

Tabel 2. Koordinat internal atom-atom penyusun permukaan Cr(111)

Vektor	Dari atom	Panjang ikatan (Å)	Sudut $\alpha$	Sudut $\delta$
1	1 – 2	4,07290	90,00000°	0,00000°
2	2 – 3	4,07290	60,00000°	90,00000°
3	3 – 4	4,07290	120,00000°	0,00000°
4	4 – 5	4,07290	120,00000°	0,00000°
5	5 – 6	4,07290	120,00000°	0,00000°
6	6 – 7	4,07290	120,00000°	0,00000°
7	7 – 8	4,07290	120,00000°	0,00000°
8	8 – 9	4,07290	120,00000°	0,00000°
9	9 – 10	4,07290	120,00000°	0,00000°
10	1 – 11	2,88000	54,73530°	30,00000°
11	1 – 12	2,88000	54,73530°	150,00000°
12	1 – 13	2,49420	70,52500°	90,00000°
13	13 – 14	4,07290	-90,00000°	90,00000°
14	14 – 15	4,07290	240,00000°	19,47500°
15	1 – 16	2,49420	70,52500°	330,00000°
16	1 – 17	2,49420	70,52500°	210,00000°
17	1 – 18	2,88000	54,73530°	270,00000°
18	18 – 19	4,07290	90,00000°	90,00000°
19	19 – 20	4,07290	120,00000°	-35,26500°

### 3. Hasil Dan Diskusi

Optimasi dilakukan secara manual. Set optimasi diulang terus, sehingga beda  $E_T$  dari dua set berurutan  $\leq 1 \times 10^{-5}$  eV. Diharapkan pada saat itu  $\Delta l = 0.001$  Å, dan  $\Delta \alpha, \delta = 0.10^\circ$ . Selanjutnya dalam penelitian ini dilakukan pengamatan terhadap sebuah molekul NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan logam Cr(111) dengan bidang molekul horizontal dan vertikal terhadap bidang permukaan logam pada berbagai posisi jatuh. Jarak mula-mula atom N ke atom permukaan untuk lapisan 1 adalah 1,5 Å dan 1 Å apabila NH<sub>3</sub> menuju lapisan yang lainnya ataupun menuju pertengahan antara dua atom permukaan.

Analisis terhadap sifat adsorpsi molekul NH<sub>3</sub> pada permukaan logam akibat variasi posisi jatuh ini dibuat berdasarkan jarak antara atom N dengan atom permukaan (r Cr-N), atom H dengan atom permukaan (r Cr-H), atom N dengan atom H (r N-H) serta jarak antara atom H dengan atom H (r H-H) dalam keadaan optimal. Ikatan antara masing-masing atom ini secara umum dikatakan putus apabila jarak antara keduanya > 2,2 Å. Diasumsikan sebelum putus kedua atom terikat secara fisika dahulu (2,2 – 2,3 Å). Bila kedua atom

tersebut adalah N dan H maka  $\text{NH}_3$  diasumsikan diuraikan oleh permukaan.

Berdasarkan hal-hal tersebut di atas dapat ditentukan apakah  $\text{NH}_3$  diuraikan atau diadsorpsi oleh permukaan. Selanjutnya  $\text{NH}_3$  diadsorpsi secara kimia atau fisika. Namun demikian baik atau kurang baiknya sifat katalis dari permukaan logam Cr(111) tidak hanya ditentukan oleh mudah tidaknya logam mendesorpsi molekul  $\text{NH}_3$  saja. Ketahanan katalis dan kemurnian produk yang dihasilkan juga merupakan indikator yang harus diamati secara langsung.

### Arah Jatuh Horizontal

Tabel 3. Hasil optimasi molekul  $\text{NH}_3$  yang medatangi permukaan logam Cr(111) pada berbagai posisi.

No	Posisi	$r_{\text{Cr-N}}(\text{\AA})$	$r_{\text{Cr-H}}(\text{\AA})$	$r_{\text{N-H}}(\text{\AA})$	$r_{\text{H-H}}(\text{\AA})$	BE(eV)
1//	9, 1-2	1,7360 (9)	1,8283 (10)	1,0590	1,6043	1,3421
2//	$\frac{1}{2}(1-5)$ , 2-1	1,7382 (5)	1,8358 (4)	1,0580	1,6020	1,3440
3//	18, 1-18'	1,7586 (7)	1,8745 (6)	1,0440	1,6039	1,1663
4//	7, 1-2	1,7630 (7)	1,8688 (8)	1,0430	1,6053	1,1616
5//	7, 2-1	1,7640 (7)	1,8706 (6)	1,0420	1,6052	1,1616
6//	$\frac{1}{2}(1-7)$ , 1-7	1,7652 (7)	1,8825 (6)	1,0420	1,6038	1,1665
7//	8, 1-2	1,8260 (8)	1,9198 (7)	1,0270	1,6035	1,2078
8//	11, 11'-1	1,8909 (1)	-	1,0050	1,6134	1,0216
9//	$\frac{1}{2}(1-7)$ , 1-2	1,8920 (7)	-	1,0050	1,6134	1,0215
10//	$\frac{1}{2}(1-2)$ , 1-2	1,8928 (2)	-	1,0050	1,6134	1,0218
11//	1, 1-2	1,8930 (1)	-	1,0050	1,6134	1,0192
12//	$\frac{1}{2}(1-16)$ , 1-16'	1,8930 (1)	-	1,0050	1,6134	1,0216
13//	$\frac{1}{2}(16-17)$ , 1-18'	1,8932 (1)	-	1,0050	1,6134	1,0216
14//	3, 1-2	1,9070 (3)	-	1,0060	1,6133	1,1600
15//	$\frac{1}{2}(8-9)$ , 1-2	1,9180 (8)	-	1,0042	1,6141	0,9797
16⊥	$\frac{1}{2}(1-2)$ , $\text{NH} \rightarrow 1'$	2,2901 (1)	-	0,9850	1,7060	0,4903
17⊥	9, $\text{NH} \rightarrow 9$	2,2979 (10)	-	0,9860	1,7078	0,5614
18⊥	1, $\text{NH} \rightarrow 1$	2,3142 (2)	-	0,9850	1,7061	0,4668
19⊥	7, $\text{NH} \rightarrow 7$	2,3202 (8)	-	0,9850	1,7061	0,5523
20//	13, 1-13'	*	*	*	*	*
21//	16, 1-16'	*	*	*	*	*
22//	$\frac{1}{4}(16)$ , 1-16'	*	*	*	*	*
23//	$\frac{1}{2}(7-8)$ , 1-2	*	*	*	*	*
24//	$\frac{1}{2}(7-8)$ , 2-1	*	*	*	*	*

// artinya molekul  $\text{NH}_3$  mendatangi permukaan secara horizontal.

9, 1-2 artinya atom N diarahkan ke atom Cr No 9, sebuah ikatan N-H sejajar garis yang menghubungkan atom 1-2.

$\frac{1}{2}(1-5)$  artinya atom N diarahkan ditengah-tengah garis yang menghubungkan atom No 1 dan 5

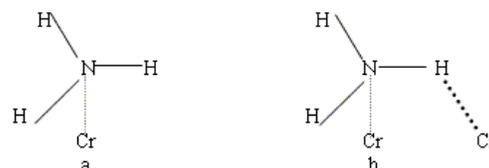
⊥ 9,  $\text{NH} \rightarrow 9$  artinya molekul  $\text{NH}_3$  mendatangi permukaan secara vertikal, salah satu NH menuju 9

1,7360 (9) artinya jarak atom terhadap atom Cr No 9 adalah 1,7360 Å.

\*  $\text{NH}_3$  Terurai sehingga data tidak dituliskan.

Ada dua tipe struktur ikatan  $\text{NH}_3$  horizontal pada permukaan Cr(111), a dan b (Gambar 5). Struktur b

mempunyai  $\text{BE}(\text{NH}_3)$  lebih besar dari a, dimana dua atom dari molekul  $\text{NH}_3$  diikat oleh Cr yang berbeda pada permukaan (Contoh No 1-7 Pada Tabel 3). Tipe a mempunyai  $\text{BE}(\text{NH}_3)$  lebih kecil dari b (Contoh No 8-15). Keadaan ini memberikan kemungkinan bahwa struktur a akan lebih mudah didesorpsi oleh permukaan.



Gambar 3. Tipe struktur ikatan  $\text{NH}_3$  terhadap permukaan logam, a : Hanya atom N yang terikat pada permukaan, b : Atom N dan salah satu H terikat pada permukaan.

Hasil optimasi  $\text{NH}_3$  horizontal yang atom N nya mendatangi permukaan logam pada lapisan kedua, memperlihatkan molekul  $\text{NH}_3$  diuraikan oleh permukaan. Keadaan ini pada Tabel 3 diberi keterangan putus, yang artinya dua dari tiga ikatan N-H sudah putus dan terbentuk beberapa fragmen. Salah satu atom H akan lepas / terbang sementara atom N dan H lainnya berikatan kuat dengan atom Cr yang berlainan pada permukaan logam. Hal serupa juga terjadi terhadap  $\text{NH}_3$  horizontal yang mendatangi permukaan logam lapisan pertama pada posisi ditengah antara atom No 7 dan 8 (atom pada pinggir permukaan). Pada Tabel 3  $\text{NH}_3$  yang diuraikan oleh permukaan adalah No 20 - 24.

Secara keseluruhan molekul  $\text{NH}_3$  yang mendatangi permukaan secara horizontal umumnya akan diikat secara kimia dengan masing-masing interval  $\text{BE}(\text{NH}_3)$  dan  $r(\text{Cr-N})$  adalah 0,9797- 1,3440 eV/molekul dan 1,7360-1,9180 Å. Untuk permukaan Fe(111) dengan struktur yang sama masing-masing 1,9380- 2,2130 eV/molekul dan 1,4920-1,6390 Å (Efendi, 2002). Hal ini menunjukkan bahwa Cr(111) akan lebih mudah untuk mendesorpsi  $\text{NH}_3$  dari pada Fe(111).

### Arah Jatuh Vertikal

Molekul  $\text{NH}_3$  yang mendatangi permukaan logam secara vertikal ( $\text{NH}_3$  vertikal) hanya akan berikatan secara fisika pada atom-atom permukaan dengan  $r(\text{Cr-N})$

N) 2,2901 – 2,3202 Å dan BE(NH<sub>3</sub>) 0,4903 – 0,5614 eV/molekul. Fenomena ini pada Tabel 3 ditunjukkan oleh No 16-19. Juga kelihatan r(N-H) untuk NH<sub>3</sub> vertikal lebih kecil dibanding NH<sub>3</sub> horizontal dan dengan r(H-H) yang relatif lebih besar, maka keadaan ini lebih mirip dengan keadaan NH<sub>3</sub> terisolasi.

Secara umum semakin besar r(Cr-N) maka BE(NH<sub>3</sub>) dan r(N-H) akan semakin kecil, tetapi r(H-H) akan menjadi lebih besar. Umumnya NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan lapisan pertama akan diikat secara kimia, dan akan diuraikan oleh permukaan apabila menuju lapisan kedua, sedangkan semua NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan secara vertikal akan diikat secara fisika. Semua NH<sub>3</sub> yang mendatangi permukaan logam pada lapisan ketiga akan selalu lari/terikat pada permukaan lapisan pertama, dari semua keadaan di atas sudah lebih mencerminkan keadaan logam dengan irisan (111) yang sebenarnya.

#### 4. Kesimpulan

Molekul NH<sub>3</sub> horizontal yang mendatangi permukaan akan teradsorpsi secara kimia lemah dengan BE(NH<sub>3</sub>) ± 1 eV dan sangat lemah (fisika) dengan BE(NH<sub>3</sub>) ± 0,5 eV, kecuali NH<sub>3</sub> horizontal yang mendatangi permukaan logam lapisan kedua akan diuraikan oleh permukaan.

Ada dua tipe ikatan molekul NH<sub>3</sub> terhadap permukaan, yaitu hanya atom N yang terikat (tipe a), atom N dan satu H terikat (tipe b).

Katalis Cr(111) lebih mudah mendasorpsi molekul NH<sub>3</sub> dibanding Fe(111).

#### Daftar Pustaka

- [1] Banon, C., *Adsorpsi Amoniak oleh Adsorben Zeolit Alam yang Diaktivasi dengan Amonium Nitrat*, **1999**, Skripsi Sarjana Kimia, Universitas Bengkulu.
- [2] Bowser, J.R., *Inorganic Chemistry*, **1993**, Cole publishing Company, Pasific Grove, California, pp 36.
- [3] Bruce, C. and G. Willey, Series in Chemical Chemistry Engineering, *J. Catalytic Chemistry*, **1992**, Jhon Willey inc. New York.
- [4] Dowben, P. A., Ruppender, H. J. and M. Grunze, *Molekular Nitrogen Adsorption on Cr(110)*, **1991**, *J. Surface Sciece Letter*, 254.

- [5] Kusuma, T. S., *Kimia Kuantum dan Statistik*, **1989**, FMIPA Universitas Andalas Padang, pp 30-32.
- [6] Rahmi, *Penggunaan Metoda Calzaferrri Untuk Mempelajari Ikatan gas N<sub>2</sub> dan CO dengan logam-logam Transisi*, **1996**, Skripsi Sarjana Kimia, FMIPA Universitas Andalas Padang.
- [7] Stoltze, P. and J.K. Norskov, *Bridging the "Pressure gap" between Ultrahigh-vacuum Surface Physics and High Pressure Catalysis*, **1985**, *Phys. Rev. lett.* 55: 2502 – 2505.
- [8] Yuhernita, Emdeniz, Theresia S.K, *Mempelajari Adsorpsi Molekul N<sub>2</sub> Pada Permukaan Logam Besi, Kromium dan Tembaga*, **1999**, *J. Kimia Andalas*, Vol. 5, No.1, hal. 21-29.