



MODUL

OPTIMASI STRUKTUR DAN PERHITUNGAN NEB MENGGUNAKAN
SOFTWARE STATE-SENRI (SIMULATION TOOL FOR ATOM TECHNOLOGY).

>>>>

Outline

Bab 1. Pemodelan Katalis (Kelebihan/Keuntungan)

Bab 2. Pengenalan Software STATE

Bab 3. Pengenalan Command line

Bab 4. Pengenalan Tools pada Software State

Bab 5. Optimasi Struktur

Bab 6. Menghitung Neb

Bab 7. Menghitung Vibrasi

Bab 8. Studi Kasus

Bab 9. Hasil dan Analisis

Bab 10. Future Work

Bab I

Pemodelan Katalis

1.1. Pendahuluan

Pemodelan katalis adalah sebuah bidang ilmu yang berkaitan dengan penggunaan metode matematika, fisika, dan kimia untuk memahami, merancang, dan mengoptimalkan katalis dalam proses kimia. Katalis adalah substansi yang digunakan untuk mempercepat atau memperlambat reaksi kimia tanpa ikut terlibat dalam reaksi tersebut. Pemodelan katalis menjadi penting dalam pengembangan proses kimia karena dapat membantu memprediksi perilaku katalis, menghemat waktu dan biaya dalam pengembangan, serta merancang katalis yang lebih efisien.

Model katalis terdiri dari beberapa komponen penting yang bekerja bersama-sama untuk meningkatkan laju reaksi kimia tanpa mengalami perubahan permanen dalam reaksi tersebut. Komponen-komponen utama dalam sebuah model katalis meliputi:

- 1.Katalis: Katalis adalah zat atau substansi yang mempercepat reaksi kimia tanpa ikut berpartisipasi dalam reaksi itu sendiri. Katalis biasanya hadir dalam jumlah yang sangat kecil dibandingkan dengan reagen-reagen reaksi. Katalis dapat berupa logam, senyawa organik, atau bahkan enzim dalam reaksi biokimia.
- 2.Reagen: Reagen adalah zat-zat yang berpartisipasi dalam reaksi kimia yang akan dipercepat oleh katalis. Reagen-reagen ini dapat berinteraksi dengan katalis untuk membentuk kompleks katalis-reagen yang memungkinkan reaksi kimia terjadi lebih cepat.
- 3.Mekanisme Reaksi: Mekanisme reaksi adalah langkah-langkah yang terjadi selama reaksi kimia yang dipengaruhi oleh katalis. Katalis dapat mempengaruhi langkah-langkah reaksi ini dengan mengurangi energi aktivasi atau memungkinkan reaksi alternatif yang lebih cepat terjadi.
- 4.Intermediate: Selama reaksi kimia, intermediat adalah zat-zat sementara yang terbentuk selama langkah-langkah reaksi. Katalis dapat mempengaruhi pembentukan dan reaksi intermediat ini, yang pada gilirannya mempercepat reaksi keseluruhan.
- 5.Produk Akhir: Produk akhir adalah zat-zat yang dihasilkan setelah reaksi kimia selesai. Katalis tidak mengalami perubahan kimia yang signifikan selama reaksi dan tetap ada di akhir reaksi untuk digunakan kembali dalam reaksi berikutnya.

1.2. Keuntungan

Pemodelan katalis memiliki banyak keuntungan yang penting dalam pengembangan proses kimia dan pemahaman tentang reaksi katalitik. Beberapa keuntungannya meliputi:

1. Efisiensi Biaya dan Waktu: Pemodelan katalis dapat menghemat biaya dan waktu dalam pengembangan proses kimia. Daripada mencoba banyak variasi eksperimental untuk mengoptimalkan katalis, pemodelan dapat membantu mengidentifikasi kondisi yang paling obyektif dan efisien untuk diuji secara eksperimental.
2. Pemahaman Fundamental: Pemodelan katalis membantu dalam pemahaman fundamental tentang bagaimana katalis bekerja, termasuk mekanisme reaksi dan interaksi antara molekul reaktan dan permukaan katalis. Ini dapat mengarah pada penemuan pengetahuan baru tentang kimia reaksi.
3. Rancangan Katalis Baru: Pemodelan memungkinkan para ilmuwan untuk merancang katalis baru dengan kinerja yang lebih baik secara teoritis sebelum melibatkan percobaan fisik yang mahal dan kompleks. Ini membuka pintu untuk inovasi dalam pengembangan katalis.
4. Optimisasi Kondisi Operasional: Pemodelan memungkinkan pemahaman yang lebih baik tentang bagaimana faktor-faktor seperti suhu, tekanan, dan komposisi reaktan mempengaruhi kinerja katalis. Ini memungkinkan pengoptimalan kondisi operasional untuk mencapai hasil yang diinginkan.
5. Penilaian Risiko dan Keselamatan: Pemodelan katalis juga dapat digunakan untuk memprediksi risiko kecelakaan atau bahaya dalam proses kimia yang melibatkan katalis. Ini membantu dalam perencanaan keselamatan dan pengurangan risiko.
6. Pemahaman Interaksi Molekuler: Pemodelan dapat memberikan wawasan tentang interaksi molekuler yang terjadi di antara reaktan dan katalis, termasuk ikatan kimia yang terbentuk selama reaksi. Ini membantu dalam pemahaman yang lebih baik tentang mekanisme reaksi.
7. Kinerja yang Ditingkatkan: Dengan menggunakan pemodelan, katalis dapat dioptimalkan untuk mencapai kinerja yang lebih baik dalam hal aktivitas, selektivitas, dan stabilitas. Ini dapat mengarah pada efisiensi proses yang lebih tinggi dan produk yang lebih berkualitas.
8. Pengurangan Dampak Lingkungan: Dengan merancang katalis yang lebih efisien, pemodelan katalis dapat membantu dalam pengembangan proses yang lebih ramah lingkungan dengan mengurangi limbah, energi yang digunakan, dan emisi.
9. Eksplorasi Kandidat Katalis: Pemodelan memungkinkan eksplorasi berbagai kandidat katalis dengan cepat dan efisien, termasuk katalis alternatif yang lebih berkelanjutan dan berbiaya rendah.
10. Pemahaman Karakteristik Permukaan: Pemodelan membantu dalam pemahaman karakteristik permukaan katalis, termasuk struktur, situs aktif, dan adsorpsi spesies reaktan. Hal ini penting dalam merancang katalis yang lebih efektif.
11. Pemodelan katalis merupakan alat yang sangat berharga dalam pengembangan dan pemahaman kimia reaksi katalitik, dan dapat memberikan kontribusi besar dalam industri kimia, petrokimia, produksi energi, dan berbagai bidang ilmu yang terkait.

Bab II

STATE-Senri (Simulation Tool for Atom Technology)

2.1 State Software

"STATE" merupakan singkatan dari "Simulation Tool for Atom Technology." Ini adalah kode dinamika molekuler yang sangat digunakan yang mengikuti prinsip-prinsip teori densitas fungsional (DFT). Ini menggunakan pseudo-potensial dan basis set gelombang datar. Perangkat lunak ini awalnya dikembangkan di Joint Research Center for Atom Technology (JRCAT) dalam National Institute for Advanced Interdisciplinary Research (NAIR), dengan kontribusi dari banyak kolega di Jepang. STATE secara khusus dirancang untuk melakukan perhitungan struktur pita, energi total, dan dinamika molekuler pada superkomputer paralel. Fitur-fitur utamanya meliputi:

1. Ketersediaan pseudo-potensial yang mempertahankan norma (jenis Troullier & Martins) dan pseudo-potensial ultra-lunak (jenis Vanderbilt).
2. Dukungan untuk lokal (spin) density approximation (LSDA) dan generalized gradient approximation (versi PBE).
3. Implementasi metode LDA+U, cocok untuk mempelajari sistem yang sangat berkorelasi.
4. Penggunaan metode Davidson dan RMM dengan teknik ruang nyata untuk perhitungan struktur elektronik.
5. Kemampuan perhitungan energi total dan gaya, penting untuk menentukan struktur keseimbangan dan melakukan simulasi dinamika molekuler.
6. Generasi otomatis titik K menggunakan metode linier tetrahedral yang diperbaiki untuk integrasi ruang K yang efisien.
7. Operasi Transformasi Fourier Cepat (FFT) yang terparalel untuk kinerja komputasi yang lebih baik.
8. Paralelisasi menggunakan Message Passing Interface (MPI) untuk menjalankan kode di beberapa komputer.

Paralelisasi perangkat lunak STATE terutama bergantung pada distribusi titik G untuk sebagian besar subrutin, sehingga dioptimalkan untuk mesin vektor. Akibatnya, lebih efisien menjalankan STATE pada superkomputer vektor dengan jumlah elemen pemrosesan (PEs) terbatas, seperti VPP500-700 dan Fujitsu SR 8000, daripada komputer paralel massal dengan banyak PEs. Namun, ada pengecualian untuk ini: metode RMM dalam kode tersebut diterapkan secara paralel melintasi pita, memungkinkan penggunaan yang efisien pada komputer paralel massal seperti IBM SP.