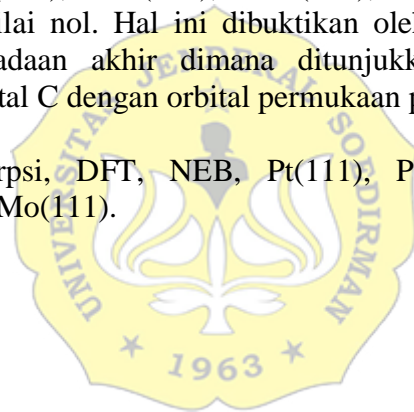


ABSTRAK

Simulasi kuantum proses derosiasi CO₂ pada Pt(111) dengan modifikasi paduan logam Ru dan Mo berbasis *Density Functional theory* (DFT) telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui kemungkinan besar energi interaksi relatif pada proses pelepasan CO₂ dari permukaan logam Pt(111) dengan modifikasi paduan Ru dan Mo serta mekanisme dari pelepasan tersebut. Hal yang dilakukan dalam penelitian ini adalah mensimulasikan situs-situs desorpsi untuk mendapatkan keadaan awal dan keadaan akhir dari proses pelepasan CO₂ menggunakan DFT. Kemudian, menganalisa rapat keadaan lokal pada orbital yang ditinjau. Selain itu, dilakukan juga simulasi untuk mendapatkan nilai energi interaksi relatif dari proses desorpsi. Berdasarkan analisa tersebut, maka dapat disimpulkan bahwa kemungkinan proses pelepasan CO₂ dari permukaan logam Pt(111), PtRu(111), PtMo(111), dan PtRuMo(111) bernilai nol atau reaksi tersebut terjadi secara spontan. Selanjutnya, mekanisme proses desorpsi CO₂ pada permukaan logam Pt(111), PtRu(111), PtMo(111), dan PtRuMo(111) dari metode DFT dan NEB bernilai nol. Hal ini dibuktikan oleh grafik LDOS pada setiap permukaan saat keadaan akhir dimana ditunjukkan tidak adanya overlap/tumpukan antara orbital C dengan orbital permukaan pada setiap percobaan.

Kata kunci: Desorpsi, DFT, NEB, Pt(111), PtRu(111), PtMo(111), dan PtRuMo(111).



ABSTRACT

The quantum simulation of the CO₂ desorption process on Pt (111) with modification of Ru and Mo metal alloys based on Density Functional theory (DFT) has been carried out. This study aims to determine the relative interaction energy possible in the CO₂ release process from the Pt (111) metal surface with the modification of the alloy Ru and Mo and the mechanism of the release. What is done in this research is to simulate desorption sites to get the initial and final state of the CO₂ release process using DFT. Then, it analyzes the local state density of the orbital in question. In addition, simulations are also carried out to obtain the relative interaction energy value of the desorption process. Based on this analysis, it can be concluded that the possibility of the CO₂ release process from the metal surface of Pt (111), PtRu (111), PtMo (111), and PtRuMo (111) is zero or the reaction occurs spontaneously. Furthermore, the mechanism of the CO₂ desorption process on the metal surface of Pt (111), PtRu (111), PtMo (111), and PtRuMo (111) from the DFT and NEB methods is zero. This is evidenced by the LDOS graph on each surface during the final state where it is shown that there is no overlap between the C orbitals and the surface orbitals in each experiment.

Keywords: *Desorption, DFT, NEB, Pt (111), PtRu (111), PtMo (111), and PtRuMo (111).*

