

ABSTRAK

Simulasi kuantum reaksi dekarboksilasi pada permukaan Pt(111) berbasis metode *density functional theory* telah dilakukan. Penelitian telah berhasil menentukan situs-situs paling stabil untuk adsorpsi COOH beserta koadsorpsi CO₂ dan H pada permukaan Pt(111). Situs *top* Pt untuk COOH dan situs *hollow* FCC Pt untuk CO₂, situs *top* Pt untuk H merupakan situs paling stabil karena memiliki nilai energi adsorpsi dan koadsorpsi yang paling minimum. Selain itu, mekanisme adsorpsi COOH beserta koadsorpsi CO₂ dan H pada permukaan Pt(111) telah diklarifikasi dengan distribusi muatan dan rapat muatan pada kulit p_y , p_z , dan p_x sebagai orbital yang berperan dalam pembentukan ikatan CO₂, H, dan reaksi pemecahan COOH pada permukaan Pt(111). Hasil menunjukkan bahwa adsorpsi COOH beserta koadsorpsi CO₂ dan H ditentukan oleh HOMO dan LUMO molekul tersebut. Hal ini juga ditandai dengan bergesernya puncak HOMO dan LUMO serta terbentuknya keadaan-keadaan baru yaitu, keadaan *bonding* dan keadaan *anti-bonding*. Hasil simulasi menunjukkan COOH terpecah di situs *hollow* FCC Pt. Perhitungan dengan metode NEB menunjukkan bahwa terjadi pemecahan molekul COOH pada permukaan Pt(111) dengan energi *barrier* sebesar 0,136 eV. Mekanisme pemecahan molekul COOH telah diklarifikasi pada keadaan transisi dengan distribusi muatan, rapat keadaan lokal pada tiap orbital dan melemahnya ikatan CO₂ yang ditandai dengan bertambahnya jarak molekul tersebut dengan permukaan sedangkan berkurangnya jarak H dengan permukaan yang menandakan teradsorpsi atom H.

Kata kunci: adsorpsi, koadsorpsi, COOH, NEB, DFT, Pt(111)

ABSTRACT

Quantum simulation for the deformation of COOH on Pt (111) surface was performed using density functional theory method. Research has succeeded in determining the most stable sites for adsorption of COOH and coadsorption of CO₂ and H on Pt(111). The top Pt site for COOH adsorption and hollow FCC Pt site for CO₂ at coadsorption, and the top Pt site for OH are the most stable sites because they have minimum adsorption and coadsorption energy value. In addition, the mechanism for adsorption of COOH and coadsorption of CO₂ and H on Pt (111) was clarified with charge distribution and local density of states on each orbitals as orbitals that play a role in bond formation of CO₂, H, and COOH on Pt (111). The results show that adsorption of COOH and coadsorption of CO₂ and H are defined by the HOMO of the two molecules. This is also indicated by displaced of the HOMO peak and the formation of the new states, namely bonding state and anti-bonding state. The simulation results show that COOH is deformed on hollow FCC Pt site. Calculation using NEB method shows that COOH is deformed on Pt (111) with an energy barrier of 0,136 eV. The mechanism of the deformation of COOH was clarified on transition state with charge distribution, local density of states on p orbitals, and decreasing the distance between H and Pt shows that atom H is adsorped in the surface.

Keywords: adsorption, coadsorption, COOH, NEB, DFT, Pt(111)

