

ABSTRAK

Simulasi kuantum untuk reaksi pembentukan gugus karboksil (COOH) pada permukaan *alloy*Platinum-Ruthenium (Pt-Ru) (111) menggunakan *Density Functional Theory*(DFT) telah dilakukan. Pada penelitian ini, berhasil ditentukan situs-situs yang disukai untuk koadsorpsi karbon monoksida (CO) dan hidroksil (OH) pada permukaan PtRu(111). Situs *top* Pt untuk adsorpsi CO dan *top* Ru untuk adsorpsi OH merupakan konfigurasi paling stabil karena memiliki nilai energi adsorpsi paling minimum. Selain itu, dalam penelitian ini juga dilakukan klarifikasi mekanisme reaksi koadsorpsi CO dan OH pada permukaan PtRu(111). Hasil menunjukkan bahwa koadsorpsi CO dan OH dikendalikan oleh *highest occupied molecular orbitals* (HOMO) dari kedua fragmen tersebut. Hal ini ditandai dengan lenyapnya puncak HOMO saat kedua adsorbat berinteraksi dengan permukaan PtRu(111) dan diikuti dengan pembentukan state-state baru yang disebut bonding dan anti-bonding. Selanjutnya, hasil simulasi menunjukkan bahwa pembentukan COOH terjadi melalui difusi CO pada permukaan logam sampai akhirnya terbentuk gugus karboksil pada situs *top* Ru. Perhitungan dengan metode *nudge elastic bands* (NEB) menunjukkan bahwa pembentukan COOH ini bersifat endotermik dengan *energy barrier* sebesar 0,75eV. Akhirnya, mekanisme pembentukan COOH ini juga dipelajari dengan analisis transfer muatan. Di sini, teramati bahwa pada keadaan transisi (yaitu saat CO dan OH mulai bereaksi), muatan pada atom-atom permukaan logam dan atom-atom adsorbat yang berinteraksi secara langsung berkurang secara drastis mencapai nilai minimum.

Kata kunci: adsorpsi, koadsorpsi, NEB, DFT, PtRu(111)

ABSTRACT

A quantum simulation of the formation of a carboxyl group (COOH) on the surface of PtRu (111) was performed using density functional theory (DFT). In this study, the most preferred sites for the coadsorption of carbon monoxide (CO) and hydroxyl (OH) on PtRu (111) were determined. The top Pt and top Ru sites for coadsorption of CO and OH, respectively, are the most stable configuration because they have the minimum adsorption energy value. In this study, the mechanism of CO and OH coadsorption reactions on the PtRu (111) surface was also clarified. The results show that coadsorption of CO and OH is controlled by the highest occupied molecular orbitals (HOMO) of the two fragments. This can be seen from the disappearance of the HOMO peak in the reaction with the surface and followed by the formation of new states, which are referred to bonding and anti-bonding states. In addition, the simulation results show that the formation of COOH occurs by diffusion of CO at the metal surface until finally a carboxyl group is formed at the topmost Ru site. Calculations using the Nudge Elastic Band (NEB) method show that the COOH formation of PtRu (111) is an endothermic reaction with an energy barrier of only 0.75 eV. Finally, the mechanism of COOH formation by charge transfer analysis is also studied. It is observed that in the transition states in which the CO and OH begin to react, the charge of the atoms in the surface and the atoms of adsorbates that interact directly, significantly decrease to reach the minimum value.

Keywords: adsorption, coadsorption, NEB, DFT, PtRu(111).