

ABSTRAK

Studi tentang simulasi kuantum untuk sistem koadsorpsi hidrogen (H) dan hidroksil (OH) radikal pada permukaan PtRu(111) dengan metode Density Functional Theory (DFT) telah dilakukan. Situs-situs yang disukai pada koadsorpsi H dan OH pada permukaan PtRu(111) juga telah berhasil ditentukan. Hasil menunjukkan bahwa situs adsorpsi yang paling disukai untuk atom H tunggal adalah top Pt, sedangkan untuk adsorpsi OH radikal adalah situs top Ru. Sementara itu, diamati juga adanya kompetisi antara situs yang paling disukai untuk koadsorpsi H dan OH, yaitu situs top Ru untuk H maupun OH radikal. Kemudian, dalam studi ini juga diperoleh hasil bahwa terdapat penurunan kekuatan interaksi antara OH dengan permukaan PtRu(111) saat permukaan ditambah atom H. Hal ini menimbulkan dugaan bahwa OH lebih mudah berdifusi pada permukaan PtRu(111)+H untuk mengoksidasi metanol atau fragmen-fragmen turunannya. Selanjutnya, dari analisis transfer muatan diperoleh kecenderungan bahwa kekuatan interaksi pada koadsorpsi H dan OH pada PtRu(111) ditentukan oleh besarnya elektron donor dari permukaan. Semakin besar donor elektron dari permukaan menghasilkan kuat interaksi yang lebih besar. Akhirnya, dari analisis transfer muatan ini juga diperoleh kesimpulan bahwa jenis ikatan yang terjadi antara adsorbat dan permukaan adalah ikatan ionik berupa pemberian elektron oleh substrat dan adsorbat bertindak sebagai penerima elektron.

Kata kunci: Koadsorpsi H dan OH, PtRu(111), DFT, transfer muatan, mekanisme reaksi

ABSTRACT

Quantum simulation studies for the hydrogen (H) and radical hydroxyl (OH) coadsorption systems on the PtRu (111) surface was performed by density functional theory (DFT). Preferred sites for coadsorption of H and OH on the PtRu (111) surface were also determined. The results show that the most preferred adsorption site for a single H atom is at the top Pt, while for radical OH adsorption the most stable position is atop Ru. Moreover, it has been observed that there is competition between the most preferred sites for H and OH coadsorption, i.e., both H and OH prefer to adsorb at the top of the Ru atom. Then, we also found in this study that the interaction between the OH and PtRu (111) surface decreases as the surface is added to the H atom. This leads to the assumption that OH can easily diffuse on the surface of PtRu (111) + H to oxidize methanol and its derived fragments. Furthermore, it is found from the charge transfer analysis that the interaction strength of the system of coadsorption of H and OH on PtRu (111) is determined by the amount of the electron donor. The larger the electron donor from the surface, the greater the interaction strength. Finally, it was also concluded from the charge transfer analysis that the type of bond that occurs between the adsorbate and the surface is the ionic bond, i.e., electrons donor is from the substrate and electrons acceptor is the adsorbate.

Keywords: Coadsorption H and OH, PtRu (111), DFT, charge transfer, reaction mechanism