

## ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian simulasi Kuantum Pemecahan H<sub>2</sub>O pada permukaan PtRu (111) menggunakan *Metode Density Functional Theory* (DFT). Penelitian telah berhasil menentukan jalur dan mekanisme terjadinya reaksi pemecahan H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> pada permukaan PtRu (111) menjadi H<sub>ads</sub> dan OH<sub>ads</sub>. Hasil menunjukkan bahwa pemecahan H<sub>2</sub>O pada permukaan PtRu (111) menjadi H<sub>ads</sub> dan OH<sub>ads</sub> terjadi berturut-turut, yaitu dari *top Pt (initial state)*, FCC Pt-Ru-Pt (*transition state*), *bridge Pt-Pt*, HCP Pt-Pt-Pt, dan *top Pt (final state)*. Mekanisme reaksi pemecahan H<sub>2</sub>O terjadi dengan energi aktivasi sebesar 0,72 eV dengan posisi akhir OH tetap pada *top Ru*, sedangkan H pada *top Pt*. Interaksi kuat antara adsorbat H-OH dan permukaan PtRu (111) pada *transition state* melalui transfer muatan dari permukaan ke adsorbat diduga menyebabkan penurunan energi aktivasi reaksi pemecahan H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> menjadi H<sub>ads</sub> dan OH<sub>ads</sub>. Selain itu, diketahui bahwa reaksi pemecahan H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> menjadi H<sub>ads</sub> dan OH<sub>ads</sub> lebih mudah terjadi pada katalis PtRu (111) dibandingkan katalis Pt (111).

**Kata kunci:** jalur dan mekanisme reaksi pemecahan, energi aktivasi, transfer muatan, DFT, PtRu (111)

## ABSTRACT

*Quantum simulation research on splitting of H<sub>2</sub>O on PtRu surface (111) has been carried out using the Density Functional Theory (DFT) Method. Research has succeeded in determining the pathway and mechanism for the occurrence of H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> splitting reactions on PtRu surfaces (111) into H<sub>ads</sub> and OH<sub>ads</sub>. The results showed that the splitting of H<sub>2</sub>O on PtRu surface (111) became H<sub>ads</sub> and OH<sub>ads</sub>, respectively, ie from top Pt (initial state), Pt-Ru-Pt FCC (transition state), bridge Pt-Pt, HCP Pt-Pt- Pt, and Pt top (final state). The mechanism of H<sub>2</sub>O splitting occurs with activation energy of 0.72 eV with the final position of OH remaining at the top Ru, while H at the top Pt. The strong interaction between the adsorbate H-OH and PtRu surface (111) on TS by transferring charge from the surface to the adsorbate is thought to cause a decrease in the activation energy of the H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> splitting reaction into H<sub>ads</sub> and Oh<sub>ads</sub>. In addition, it is known that the splitting reaction of H<sub>2</sub>O<sub>ads</sub> into H<sub>ads</sub> and OH<sub>ads</sub> is easier to occur on PtRu (111) than Pt (111).*

**Keywords:** *reaction pathway and mechanism, activation energy, charge transfer, DFT, PtRu (111)*