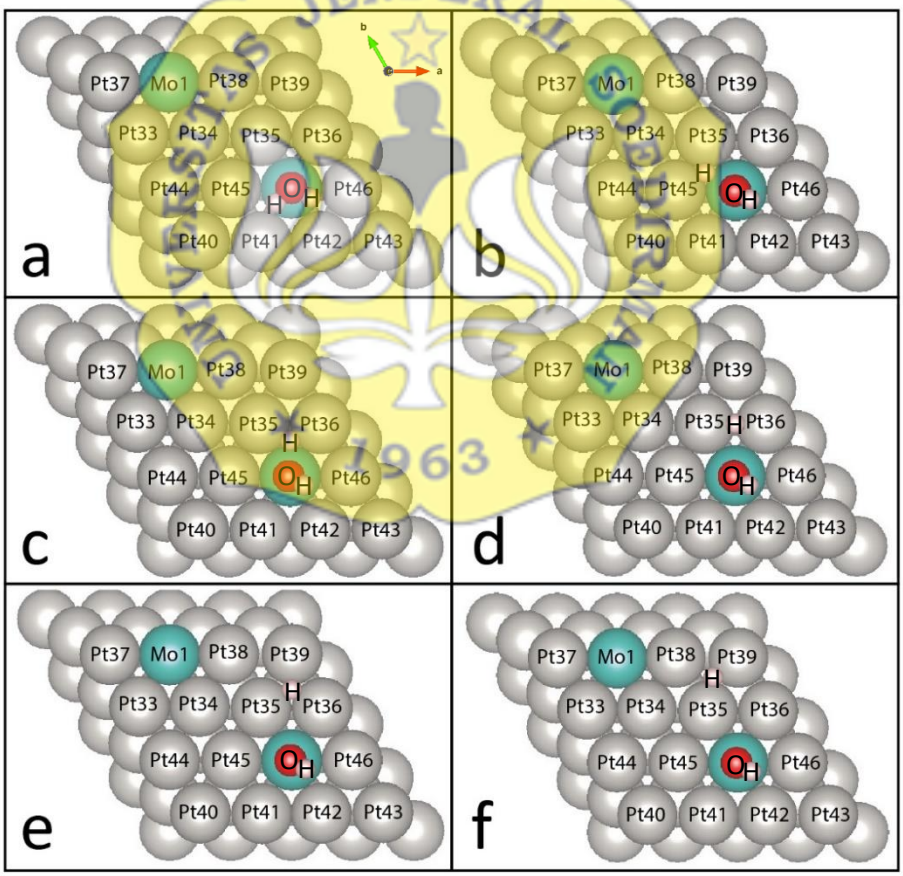
BAB IV
HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 Jalur Reaksi Pemecahan H_2O

4.1.1 Alternatif pertama

Molekul H_2O yang datang akan langsung terserap pada situs-situs di permukaan PtMo(111). Semakin senyawa terserap kuat, maka semakin mudah senyawa tersebut untuk terpecah (Hammer dan Nørskov, 2000). Untuk memahami proses reaksi pemecahan tersebut maka sangat penting untuk mengetahui jalur reaksi dan mekanisme pemecahannya. Jalur reaksi pertama yang mungkin untuk pemecahan H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads} diketahui melalui beberapa situs di antara keadaan



Gambar 4.1 Skema perpindahan atom H selama proses pemecahan H_2O (tampak atas), berurutan menurut abjad adalah: (a) keadaan awal top Mo (b) HCP Pt35-Mo2-Pt45 (c) FCC Pt35-Mo2-Pt36 (d) bridge Pt35-Pt36 (e) HCP Pt35-Pt36-Pt39 (f) keadaan akhir FCC Pt35-Pt38-Pt39

awal saat masih menjadi H_2O_{ads} dan keadaan akhir saat sudah terpecah menjadi H_{ads} dan OH_{ads}. Situs-situs tersebut adalah OH tetap berada di top Mo, dan H menuju ke HCP Pt35-Mo2-Pt45, kemudian menuju ke situs FCC Pt35-Mo2-Pt36, dilanjut menuju situs bridge Pt35-Pt36, kemudian ke situs HCP Pt35-Pt36-Pt39. Skema jalur reaksi tersebut digambarkan secara berurutan (a-b-c-d-e-f) seperti yang terlihat pada **Gambar 4.1**.

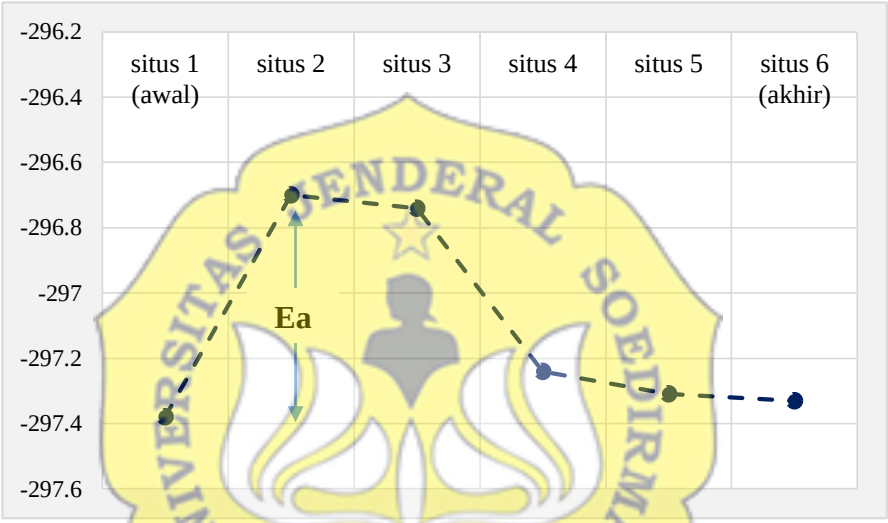
Untuk mengetahui apakah atom H dapat melalui lintasan tersebut, maka harus diketahui energi aktivasi dari reaksi pemecahan H_2O. Karena posisi atom H berubah pada tiap situsnya, maka akan berimplikasi pada bervariasnya besar energi yang dihasilkan dari tiap situsnya. Energi tersebut merupakan energi sistem total yang diperoleh sesaat sebelum terjadinya penyerapan adsorbat. Setelah beberapa saat, adsorbat akan terserap ke permukaan, dengan energi adsorpsi tertentu pada tiap situsnya. Dalam proses pemecahan H_2O ini, energi aktivasi dapat diperoleh melalui energi total sistem pada setiap situs yang dilaluinya. Sedangkan energi adsorpsi dapat diperoleh melalui persamaan 2.11. Berdasarkan perhitungan yang telah dilakukan menggunakan metode *Density Functional Theory* dengan bantuan *software* VASP, diperoleh data yang diberikan pada **Tabel 4.1**.

Tabel 4.1 Energi Adsorpsi Atom H Pada Tiap Situs

Situs	Energi (eV)	
	Sistem	Adsorpsi
Top Mo (keadaan awal)	-297,38	-1,48
HCP Pt35-Mo2-Pt45	-296,70	-6,41
FCC Pt35-Mo2-Pt36	-296,74	-5,48
bridge Pt35-Pt36	-297,24	-7,41
HCP Pt35-Pt36-Pt39	-297,31	-7,89
FCC Pt35-Pt38-Pt39 (keadaan akhir)	-297,33	-8,70

Berdasarkan data energi total sistem, dapat diketahui keadaan transisi yang merupakan nilai energi maksimum diantara nilai-nilai minimum, yaitu saat atom H berada pada situs HCP Pt35-Mo2-Pt45. Keadaan transisi sendiri juga merupakan

keadaan saat atom H mulai terlepas dari ikatan OH, sehingga untuk mengetahui jalur reaksi pemecahan, dapat ditinjau melalui keadaan transisinya. Adapun nilai negatif dari energi tersebut menunjukkan tingkat kestabilan atom yang besar saat berinteraksi dengan permukaan. Semakin stabil interaksi antar atom, maka ikatannya akan semakin kuat. Dengan adanya keadaan transisi maka dapat diketahui energi aktivasinya yang merupakan selisihnya terhadap keadaan awal, seperti pada **Gambar 4.2**.



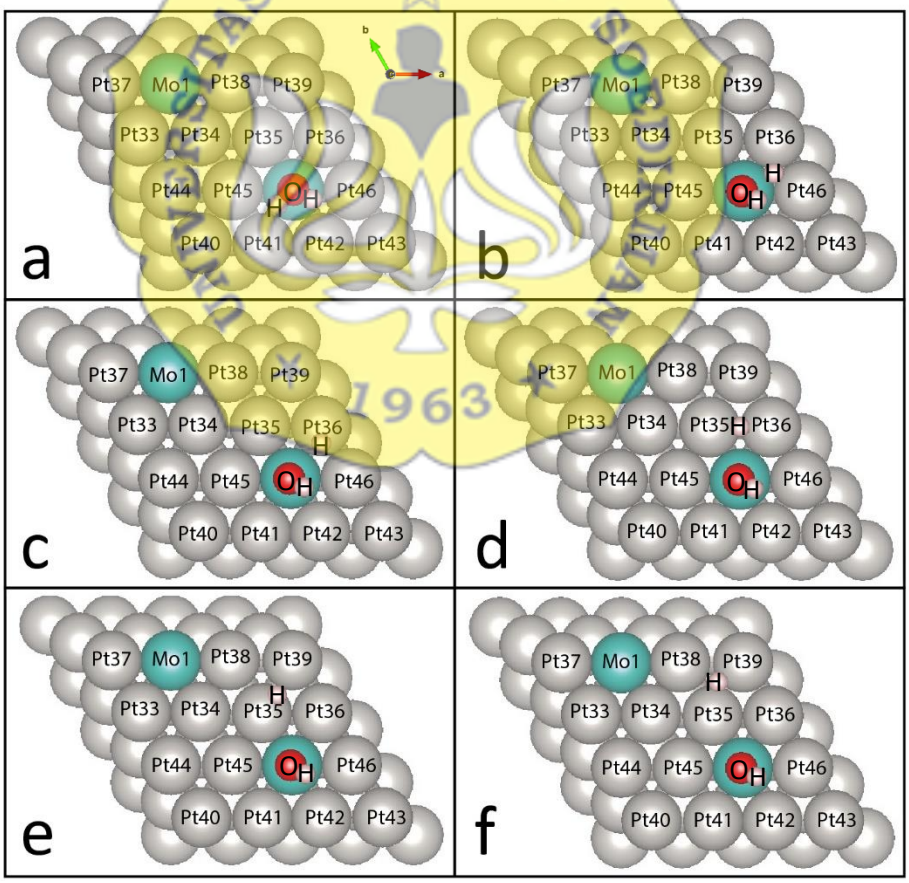
Gambar 4.2 Energi aktivasi berdasarkan energi total sistem tiap situsnya

Sehingga diperoleh energi aktivasi sebesar 0,68 eV untuk memecah H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads}. Energi aktivasi tersebut sangat rendah apabila dibandingkan dengan menggunakan katalis Pt murni yang penelitiannya telah dilakukan oleh tim Fisika Komputasi dan Material FMIPA Unsoed dan mendapat energi aktivasi sebesar 0,91 eV. Rendahnya energi aktivasi ini menandakan bahwa dengan ditambahkannya atom Mo pada katalis Pt, maka pemecahan H_2O_{ads} menjadi H_{ads} dan OH_{ads} lebih mudah dilakukan. Data ini juga mendukung penelitian yang dilakukan oleh Purwanto (2005) yang menyatakan bahwa atom Mo akan menyerap senyawa OH untuk mengoksidasi CO.

Pada **Tabel 4.1** juga diketahui energi adsorpsi dari H dan OH dengan permukaan pada tiap situsnya. Energi adsorpsi ini merupakan energi penyerapan hasil interaksi antara atom adsorbat dengan permukaannya. Saat keadaan transisi

(situs HCP Pt35-Mo2-Pt45), energi adsorpsi yang diperoleh adalah sebesar -6,41 eV. Nilai energi tersebut lebih kecil dibandingkan dengan kondisi awalnya saat masih terbentuk H_2O yang hanya sebesar -1,48 eV. Hal ini memberikan informasi bahwa pada keadaan transisi, adsorbat cenderung lebih stabil dan sangat menyerap di permukaan. Untuk situs-situs lainnya terlihat energi adsorpsi yang bervariasi. Untuk keadaan akhir diketahui energi adsorpsi lebih kecil dibandingkan saat keadaan transisi, sehingga pada keadaan akhir, atom-atom berada pada keadaan yang lebih stabil. Dengan data tersebut membuktikan bahwa pemecahan H_2O masih terus berlangsung dari keadaan awal menuju keadaan transisi sampai ke keadaan akhirnya.

4.1.2 Alternatif Kedua



Gambar 4.3 Skema perpindahan atom H selama proses pemecahan H_2O (tampak atas), berurutan menurut abjad adalah: (a) keadaan awal top Mo (b) HCP Pt36-Mo2-Pt46 (c) FCC Pt36-Mo2-Pt46 (d) bridge Pt35-Pt36 (e) HCP Pt35-Pt36-Pt39 (f) keadaan akhir FCC Pt35-Pt38-Pt39

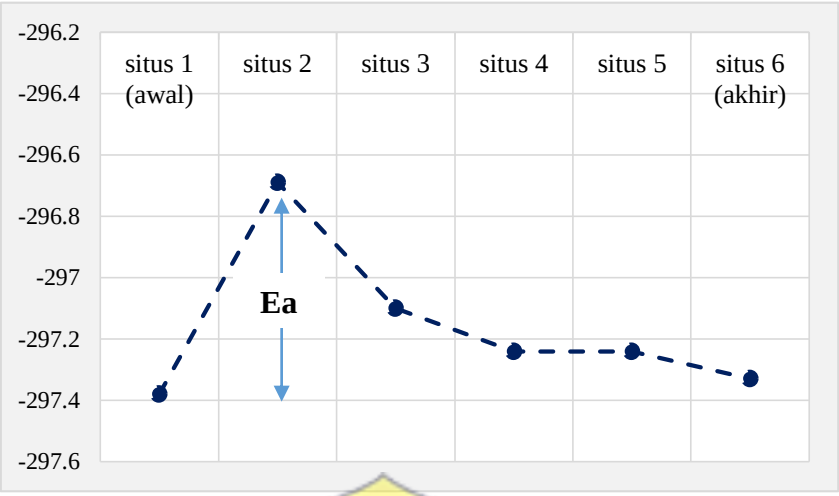
Adapun lintasan lain yang mungkin dilalui oleh atom H selama proses pemecahan H_2O adalah melalui beberapa situs berbeda dari jalur reaksi pertama. Berdasarkan penelitian, diketahui molekul OH tetap berada di situs top Mo, dan atom H bergerak menuju situs HCP Pt36-Mo2-Pt46, kemudian menuju situs FCC Pt36-Mo2-Pt46, dilanjutkan menuju situs bridge Pt35-Pt36, selanjutnya ke situs FCC Pt35-Pt38-Pt39. Adapun untuk memahami jalur reaksi tersebut dapat melihat **Gambar 4.3**.

Berdasarkan skema jalur reaksi tersebut, terlihat jelas bahwa atom H melalui situs yang berbeda dengan jalur reaksi pertama. Dengan perbedaan jalur reaksi tersebut, maka didapatkan pula energi aktivasi yang berbeda. Hal ini disebabkan karena energi total sistem untuk tiap situsnya memiliki nilai yang berbeda-beda bergantung posisi dan jaraknya yang akan mempengaruhi interaksi Coulomb. Energi total sistem yang telah dihitung menggunakan metode DFT diperoleh data seperti pada **Tabel 4.2**.

Tabel 4.2 Energi Adsorpsi Atom H Pada Tiap Situs

Situs	Energi (eV)	
	Sistem	Adsorpsi
Top Mo (keadaan awal)	-297,38	-1,48
HCP Pt36-Mo2-Pt46	-296,69	-5,14
FCC Pt36-Mo2-Pt46	-297,10	-7,20
bridge Pt35-Pt36	-297,24	-7,41
HCP Pt35-Pt36-Pt39	-297,24	-9,83
FCC Pt35-Pt38-Pt39 (keadaan akhir)	-297,33	-8,70

Dari data energi total sistem tersebut diketahui bahwa kenaikan energi terbesar terjadi saat atom H berada pada situs HCP Pt36-Mo2-Pt46. Pada situs tersebutlah terjadinya keadaan transisi. Energi sistem yang diperoleh memiliki nilai yang sedikit lebih tinggi dibandingkan dengan keadaan transisi di jalur reaksi pertama. Hal ini akan mempengaruhi energi aktivasi yang diperoleh.

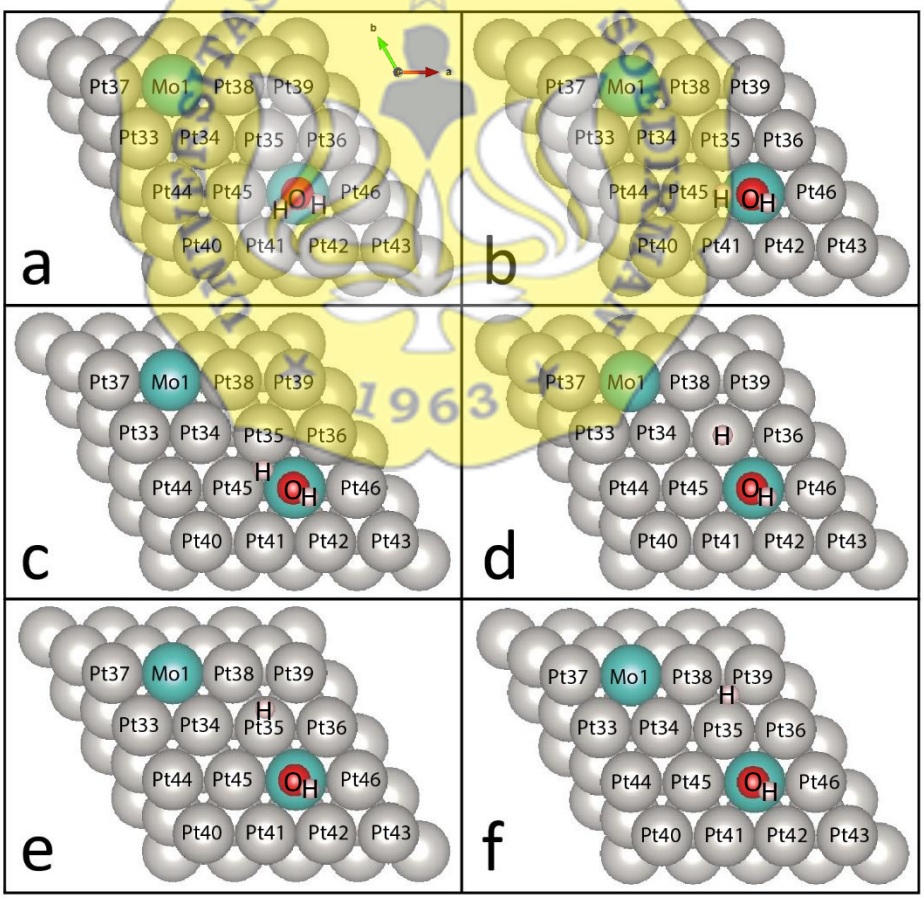


Gambar 4.4 Energi aktivasi berdasarkan energi total sistem tiap situsnya

Untuk memperjelas kenaikan energi tersebut, dan untuk mengetahui besar energi aktivasi yang diperoleh, maka dapat dilihat grafik energi total sistem pada **Gambar 4.4**. Dengan analisis grafik tersebut, diketahui bahwa energi aktivasi untuk memecah H_2O adalah sebesar 0,69 eV. Nilai ini memiliki selisih 0,01 eV dibandingkan dengan jalur reaksi pertama. Meskipun situs keadaaan transisi di jalur reaksi pertama dan kedua adalah berada di situs HCP Pt-Mo-Pt, namun dengan posisi yang berbeda, ternyata menghasilkan energi yang berbeda. energi aktivasi yang dihasilkan pada jalur reaksi kedua ini sedikit lebih besar, yang menandakan bahwa atom H lebih mungkin untuk terpisah melalui jalur reaksi pertama dibandingkan melalui jalur reaksi kedua. Namun, masih ada kemungkinan atom H terpisah melalui jalur kedua. Selanjutnya selain data energi sistem, diketahui pula data energi adsorpsi H_{ads} dan OH_{ads} pada permukaan. Pada keadaan transisi (situs HCP Pt36-Mo2-Pt46), didapatkan data energi adsorpsinya adalah sebesar -5,14 eV. Nilai ini lebih tinggi dari energi adsorpsi pada jalur reaksi pertama. Hal ini menunjukkan bahwa adsorbat tidak menyerap lebih kuat di permukaan apabila dibandingkan pada keadaan transisi di jalur reaksi pertama.

4.1.3 Alternatif Ketiga

Selanjutnya untuk mengetahui probabilitas jalur reaksi lain yang mungkin untuk proses pemecahan H_2O, maka dilakukan perhitungan jalur reaksi ketiga sebagai data tambahan. Data ini juga nantinya akan digunakan untuk dapat mengetahui besar energi pada berbagai situs di permukaan (*Potential Energy Surface*). Semakin banyak data energi di permukaan, maka akan semakin mudah untuk memprediksi jalur reaksi lainnya yang mungkin memiliki energi aktivasi yang rendah. Pada jalur reaksi ketiga ini, perpindahan atom dibuat dengan molekul OH tetap berada pada situs top Mo, atom H bergerak melalui situs bridge Pt45-Mo2, selanjutnya menuju situs HCP Pt35-Mo2-Pt45, dilanjutkan menuju situs top Pt35, kemudian ke situs HCP Pt35-Pt38-Pt39, dan berakhir pada keadaan akhirnya di situs FCC Pt35-Pt38-Pt39. Perjalanan atom H tersebut dapat dilihat pada **Gambar 4.5**.



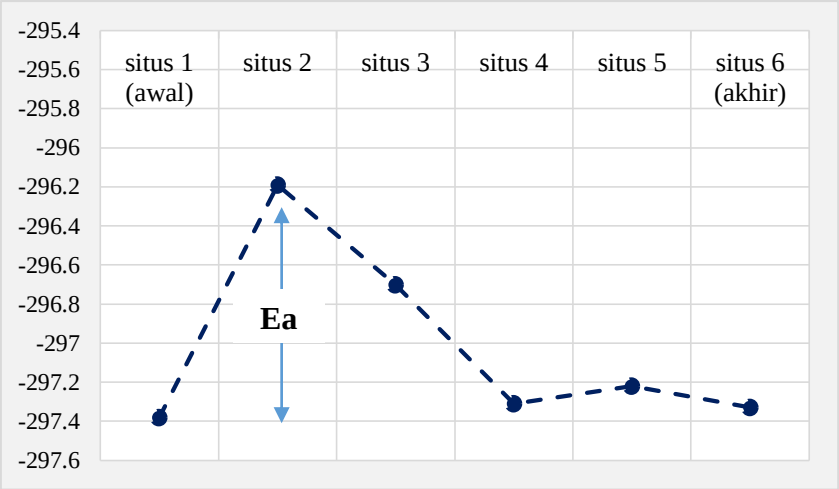
Gambar 4.5 Skema perpindahan atom H selama proses pemecahan H_2O (tampak atas), berurutan menurut abjad adalah: (a) keadaan awal top Mo (b) bridge Pt45-Mo2 (c) HCP Pt35-Mo2-Pt45 (d) top Pt35 (e) HCP Pt35-Pt38-Pt39 (f) keadaan akhir FCC Pt35-Pt38-Pt39

Pada skema jalur reaksi di atas, terlihat bahwa atom H berpindah dari keadaannya menuju keadaan akhir dengan jalur yang lebih lurus dibandingkan dengan jalur reaksi pertama dan kedua. Pengambilan jalur reaksi yang lurus ini dilakukan untuk mengetahui apakah lebih menghasilkan energi aktivasi yang lebih rendah atau lebih tinggi, karena jalur yang lurus cenderung menghasilkan jarak yang pendek. Pada kasus makroskopis, kita mengetahui bahwa jalan yang lebih pendek tentunya hanya membutuhkan energi yang sedikit dibandingkan apabila melalui jalan memutar. Namun pada kasus mikroskopis dalam kajian ilmu permukaan, untuk membuktikan hal tersebut dapat diketahui berdasarkan hasil data energi yang diperoleh tiap situsnya, yang dapat dilihat pada **Tabel 4.3**.

Tabel 4.3 Energi Adsorpsi Atom H Pada Tiap Situs

Situs	Energi (eV)	
	Sistem	Adsorpsi
Top Mo (keadaan awal)	-297,38	-1,48
bridge Pt45-Mo2	-296,19	-4,48
HCP Pt35-Mo2-Pt45	-296,70	-6,41
top Pt35	-297,31	-7,72
HCP Pt35-Pt38-Pt39	-297,22	-8,85
FCC Pt35-Pt38-Pt39 (keadaan akhir)	-297,33	-8,70

Dengan data tersebut, terihat bahwa titik maksimum diantara titik minimumnya adalah saat atom H berada pada situs bridge Pt45-Mo2, dan situs HCP Pt35-Pt38-Pt39. Namun, energi paling tinggi ditunjukkan pada situs bridge Pt45-Mo2, sehingga situs inilah yang merupakan keadaan transisi dari pemecahan H_2O. Energi sistem yang diperoleh pada keadaan transisi terlihat cukup besar. Kemudian untuk memperjelas titik transisi dan energi aktivasinya dapat dilihat pada **Gambar 4.6**.



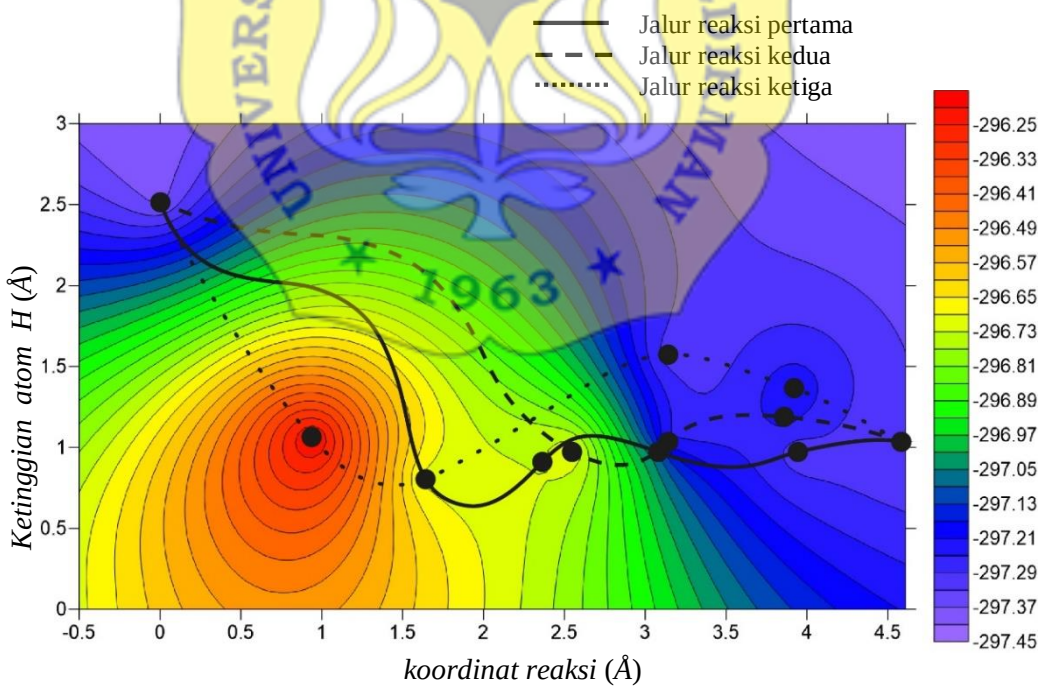
Gambar 4.6 Energi aktivasi berdasarkan energi total sistem tiap situsnya

Adanya grafik tersebut menunjukkan bahwa energi aktivasi pemecahan H_2O adalah sebesar 1,19 eV. Energi ini tentunya sangat tinggi dibandingkan energi aktivasi yang dihasilkan dari jalur reaksi pertama dan kedua. Hal ini menunjukkan bahwa sangat kecil kemungkinan atom H terpisah melalui jalur ini, karena energi yang dibutuhkan jauh lebih besar. Meskipun jalur yang dibuat adalah mendekati lurus, namun ternyata energi aktivasinya tidak lebih rendah dibandingkan energi aktivasi pada jalur reaksi pertama dan kedua yang cenderung memiliki jalur memutar. Kejadian ini disebabkan karena pada lintasan lurus, terdapat puncak-puncak energi yang lebih besar di beberapa situsnya.

Selanjutnya untuk mengetahui besar energi serapannya, dapat dilihat pada **Tabel 4.3** di kolom energi adsorpsi. Terlihat bahwa pada keadaan transisi (situs bridge Pt45-Mo2), energi adsorpsi diperoleh sebesar -4,48 eV. Dengan energi tersebut, maka adsorpsinya tidak lebih kuat dibandingkan yang terjadi pada jalur reaksi pertama dan kedua. Dengan energi aktivasi dan energi adsorpsinya yang tinggi, maka sangat kecil kemungkinan H_2O_{ads} terpecah menjadi H_{ads} dan OH_{ads} melalui jalur reaksi ketiga ini. Dengan diketahuinya situs-situs perpindahan atom H pada reaksi pemecahan H_2O di jalur reaksi ketiga, maka data energi permukaan yang diperoleh menjadi lebih banyak. Dari ketiga jalur reaksi pemecahan H_2O yang telah diperoleh, maka dapat dibuat pemetaan atau *scan* energi di permukaan.

4.2 Energi Potensial Permukaan (*Potential Energy Surface = PES*)

Untuk memetakan energi potensial sistem pada tiap-tiap situs yang tidak termasuk dalam perhitungan, dan untuk mempermudah pembacaan ketiga jalur reaksi dari pemecahan H_2O, dapat digunakan kontur PES. Kontur ini dibuat dengan memasukan variabel energi sistem total, koordinat perpindahan atom H dan ketinggian atom H dari permukaan yang diperoleh dari data-data ketiga jalur reaksi. Kontur PES juga dapat digunakan untuk menganalisis pergerakan atom H di situs-situs permukaan yang tidak masuk dalam perhitungan. Apabila dianalisis lebih lanjut, maka kita juga dapat mengetahui jalur-jalur reaksi lainnya yang memiliki energi aktivasi yang rendah. Keadaan transisi dari tiap jalur reaksi juga terlihat lebih jelas, karena keadaan ini merepresentasikan *saddle point* dari energi-energi yang ada di permukaan. Dengan memasukkan data-data energi di beberapa situs yang sudah diperoleh, maka kontur PES dapat dibuat dan dapat dilihat seperti **Gambar 4.7**.



Gambar 4.7 *Potential Energy Surface* (PES) untuk ketiga jalur reaksi

Kontur tersebut memperlihatkan hasil dari ketiga jalur reaksi, dimana garis tebal menunjukkan jalur reaksi pertama, garis putus-putus adalah jalur reaksi kedua, dan garis titik-titik adalah jalur reaksi ketiga. Sumbu-x pada gambar menyatakan

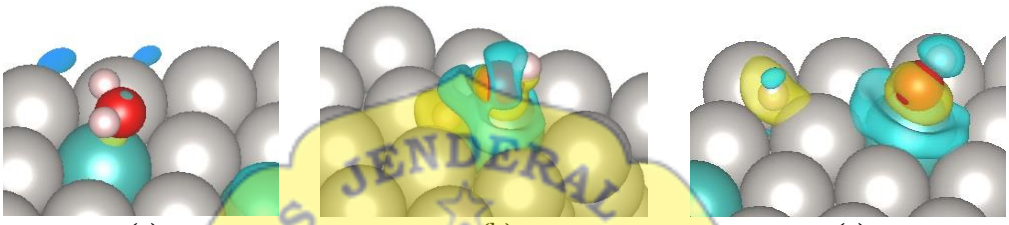
jarak perpindahan atom H dari keadaan awalnya, sumbu-y menyatakan ketinggian atom H yang terukur dari lapisan permukaan teratas, dan warna mewakili besar total energi sistem. Bulatan berwarna hitam tebal menyatakan situs-situs yang diusulkan dari ketiga jalur reaksi. Bulatan pertama yang berada pada titik 0 di sumbu-x menyatakan posisi atom H pada keadaan awal. Selanjutnya bulatan-bulatan yang lain merupakan situs-situs setelah posisi awalnya dari ketiga jalur reaksi yang telah diperoleh.

Dari **Gambar 4.7** terlihat bahwa saat posisi kedua dari tiap-tiap jalur reaksi terjadi kenaikan energi, yang merupakan saat terjadinya keadaan transisi. Adapun garis yang menghubungkan antar bulatan menggambarkan prediksi jalur reaksi di situs-situs yang tidak masuk dalam perhitungan penelitian. Pada tiap situs-situs yang dipilih, telah dilakukan perhitungan variasi ketinggian atom H dengan interval 0,05 Å. Adapun posisi yang ditampilkan adalah posisi yang paling stabil, yaitu posisi yang memiliki energi paling kecil.

Dari situs yang stabil tersebut, juga dapat dianalisis perubahan ketinggiannya. Ketinggian atom H terlihat menurun saat keadaan transisi, yang menandakan bahwa atom H bersifat radikal dan sangat mudah untuk berinteraksi dengan atom lainnya. Berdasarkan data yang diperoleh juga terdapat pengurangan panjang ikatan OH saat keadaan transisi. Dari ketiga jalur reaksi, diketahui terjadi perubahan panjang ikatan yang sama, yaitu menjadi 0,975 Å, sedikit lebih pendek dibandingkan saat keadaan awalnya sebesar 0,979 Å. Perubahan ini hanya memiliki selisih 0,004 Å, namun selisih ini tetap mempengaruhi penyerapan atom OH ke permukaan menjadi lebih kuat. Kuat lemahnya ikatan adsorbat dengan permukaan juga dapat dianalisis lebih jauh dengan mengetahui mekanisme pemecahan H_2O tersebut. Berdasarkan data yang diperoleh, telah diketahui bahwa jalur reaksi pertama merupakan jalur reaksi yang memiliki energi aktivasi terrendah, sehingga mekanisme pemecahan yang akan dianalisis dan dibahas lebih jauh adalah mekanisme yang melalui jalur reaksi pertama.

4.3 Mekanisme Reaksi

Mekanisme terkait reaksi pemecahan, dapat dilakukan dengan menganalisis keadaan transisi dari jalur reaksinya. Selanjutnya mekanisme yang dilakukan dapat ditinjau melalui hasil pendistribusian atau perpindahan muatan yang terjadi, yang kemudian dapat dimanfaatkan untuk mengetahui ikatan antar tiap-tiap atom. Saat atom-atom berinteraksi, akan terjadi perpindahan muatan pada setiap atomnya, baik berupa penambahan atau pelepasan muatan.



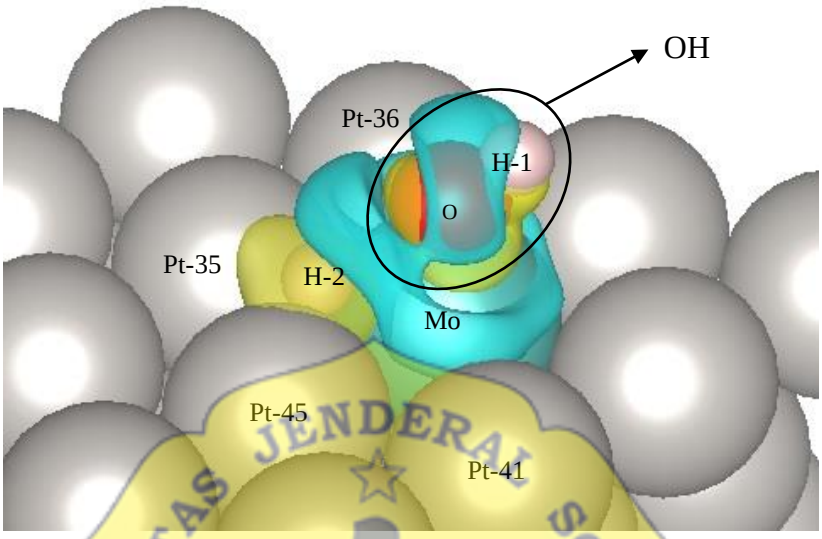
(a) (b) (c)

Gambar 4.8 Perbandingan perpindahan muatan saat: (a) keadaan awal, (b) keadaan transisi, dan (c) keadaan akhir

Sebelum menganalisis lebih jauh pada keadaan transisi, mekanisme pemecahan dapat dilihat dengan mengamati perubahan muatan yang terjadi antara saat keadaan awal, keadaan transisi, dan keadaan akhirnya. Perbedaan tersebut dapat dilihat pada **Gambar 4.8**. Warna kuning pada gambar di atas menunjukkan daerah ditemukannya muatan, sedangkan warna biru menunjukkan daerah tidak adanya muatan, sebagai akibat pelepasan muatan. Kedua warna tersebut menunjukkan terjadinya perpindahan muatan dari daerah berwarna biru ke daerah yang berwarna kuning. Terlihat bahwa pada keadaan awal, muatan berkumpul pada molekul H_2O yang ditandai dengan adanya daerah berwarna kuning. Kemudian pada keadaan transisi terlihat atom H sudah terpisah dari OH yang dibuktikan dengan adanya daerah tanpa muatan (warna biru) diantara posisi atom H dan OH. Hal ini menandakan bahwa molekul H_2O sudah mulai terpecah menjadi H dan OH. Selanjutnya pada keadaan akhir, diketahui bahwa atom H telah benar-benar terpisah dan muatan berpindah ke permukaannya tempat H dan OH terserap.

Untuk pembahasan lebih lanjut, mekanisme pemecahan dapat ditinjau pada keadaan transisinya, dimana atom H sudah mulai terlepas yang dapat dilihat seperti

pada gambar di bawah. Muatan yang berkumpul pada daerah berwarna kuning akan menerima sejumlah muatan dari daerah berwarna biru di atom-atom sekitarnya.



Gambar 4.9 Distribusi muatan pada keadaan transisi

Adapun untuk mengetahui besar muatan yang terdistribusi pada tiap atomnya, dapat dilihat pada **Tabel 4.4**. Atom Pt35 dan Pt45 terlihat tidak ada daerah berwarna biru yang berarti melepas muatan. Namun, terlihat adanya pelepasan sejumlah muatan, hal tersebut disebabkan karena visualisasi pada **Gambar 4.9**, menggunakan ukuran atom normal, dan daerah berwarna biru berada di dalam atom, sehingga daerah tersebut tidak terlihat.

Tabel 4.4 Besar muatan yang terdistribusi pada setiap atom

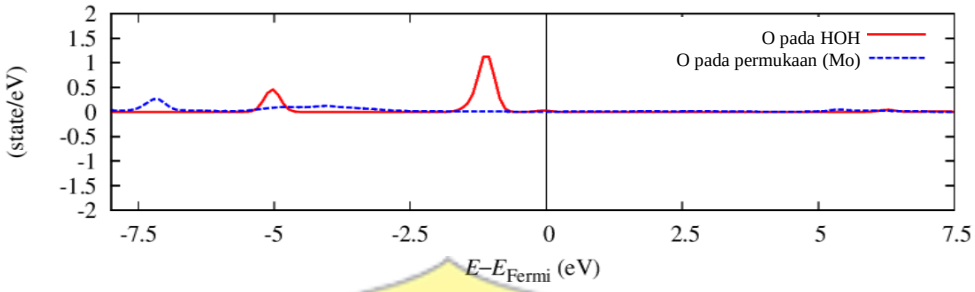
Atom	Penambahan / pengurangan muatan (e^-)	Atom	Penambahan / pengurangan muatan (e^-)
H-1	0,000	Pt-35	-0,108
H-2	0,464	Pt-36	-0,027
O	0,275	Pt-41	-0,036
Mo	-0,003	Pt-45	-0,098

Pada data yang tertera di **Tabel 4.4**, nilai positif menandakan bahwa atom menerima sejumlah muatan, sedangkan nilai negatif menunjukkan bahwa atom melepas atau memberikan sejumlah muatan ke atom lain. Adapun nilai yang tertera merupakan probabilitas dari pelepasan atau penerimaan elektron. Diketahui adanya penambahan muatan pada atom H-2 sebesar 0,464 e^-. Atom H-2 merupakan atom hidrogen yang terlepas dari ikatan H_2O. Apabila dikaitkan seperti yang ada pada **Gambar 4.9**, terlihat bahwa daerah kuning yang menyelimuti atom H-2 menempel pada atom Pt-35, Pt-45, dan atom Mo. Diketahui pula atom Pt-35, Pt-45, dan atom Mo memiliki sejumlah muatan yang bernilai negatif. Hal ini menunjukkan bahwa atom-atom tersebut lah yang memberikan sejumlah muatan kepada atom H-2. Keadaan tersebut memberikan informasi bahwa atom H-2 pada keadaan transisi terserap kuat pada situs Pt.

Pada atom O juga terlihat dikelilingi daerah berwarna kuning yang menunjukkan terjadinya penguatan ikatan antara atom O dengan atom Mo. Adapun penambahan muatan atom O adalah sebesar 0,275 e^-. Penambahan muatan tersebut terlihat berasal dari atom Mo yang melepas muatan sebesar -0,003 e^-. Penguatan ikatan antara atom O dan Mo juga ditunjang dengan data panjang ikatan antar atom tersebut. Pada keadaan transisi diketahui panjang ikatan O dan Mo adalah sebesar 1,89 Å. Panjang ikatan ini lebih pendek dibandingkan saat keadaan awalnya, yaitu sebesar 2,25 Å. Pemendekan ikatan ini menunjukkan bahwa ikatan menjadi semakin kuat.

Adapun atom H-1 terlihat adanya daerah biru dan kuning yang menunjukkan adanya penambahan dan pelepasan muatan. Namun, pada **Tabel 4.2** diketahui sebaran muatannya adalah 0 e^-, hal ini menandakan terjadi penambahan dan pelepasan muatan yang seimbang. Atom H-1 sendiri tetap berikatan dengan atom O membentuk OH, dan diketahui panjang ikatannya pada keadaan transisi adalah sebesar 0,975 Å. Pada keadaan awalnya saat terbentuk H_2O, diketahui panjang ikatan OH tersebut adalah 0,979 Å. Perubahan panjang ikatan sebesar 0,004 Å ini menunjukkan bahwa molekul OH semakin memendek dan ikatan menjadi lebih kuat.

Kemudian untuk mengetahui kuat atau lemahnya ikatan yang terjadi antara H dan OH ataupun dengan permukaannya berdasarkan orbital elektron yang berikatan, maka dapat diketahui melalui grafik *Density of State* (DOS). Adapun grafik DOS pada keadaan transisi dapat dilihat pada **Gambar 4.12**.



Gambar 4.10 *Local Density of State* (LDOS) pada keadaan transisi

Grafik tersebut menggambarkan keadaan ikatan pada atom O pada molekul HOH pada keadaan transisi yang berada dalam fase gas saat sebelum berinteraksi dengan permukaan (garis merah), dan saat sudah berinteraksi dengan permukaan (garis putus-putus biru), yaitu pada atom Mo. Grafik tersebut merupakan representasi dari orbital *p* pada sumbu z (p_z). Orbital *p* diambil karena otom O memiliki elekton valensi pada orbital *p*. Sedangkan sumbu *z* diambil karena adsorbat yang berinteraksi dengan permukaan berada tepat di atas permukaan (sejajar sumbu-z), sehingga orbital yang memberikan pengaruh besar adala orbital p_z. Adapun sumbu-x pada grafik menggambarkan tingkat kestabilan sistem. Titik 0 sendiri merupakan titik energi fermi. Semakin besar energinya maka sistem semakin tidak stabil dan merepresentasikan keadaan anti ikatan, sedangkan apabila semakin rendah energinya maka sistem semakin stabil dan merepresentasikan keadaan ikatan. Sedangkan sumbu-y pada grafik mendeskripsikan jumlah keadaan pada tiap level energi. Keadaan yang dimaksud adalah keadaan dimana ada kemungkinan ditemukannya sejumlah elektron pada orbital tertentu. Dari grafik LDOS tersebut dapat dianalisis perubahan ikatan yang terjadi saat sebelum dan setelah berinteraksi dengan permukaan. Analisis tersebut dapat dilakukan dengan melihat intensitas pengisian molekul orbital paling tinggi (*Highest Occupied Molecular Orbital* = HOMO) yang terlihat pada puncak tertinggi di sebelah kiri energi fermi.

Saat sebelum berinteraksi dengan permukaan, terlihat adanya puncak yang paling tinggi berada pada keadaan ikatan di sebelah kiri dari energi fermi, dan tidak adanya puncak-puncak pada keadaan anti ikatan di daerah sebelah kanan energi fermi. Sedangkan pada saat setelah berinteraksi dengan permukaan, puncak tertinggi berada jauh di sebelah kiri energi fermi, dan puncak yang sangat kecil di sebelah kanan energi fermi. Dari data-data yang diketahui tersebut dapat diketahui bahwa adsorbat sangat kuat berinteraksi dengan permukaan. Hal ini juga mendukung data yang dihasilkan bahwa besar energi adsorpsi yang dihasilkan cenderung rendah, dan atom O yang menerima sejumlah muatan yang cukup besar dari permukaan.