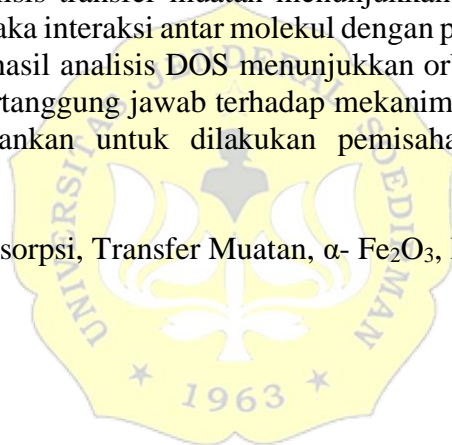


## ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian mengenai interaksi H<sub>2</sub>O dengan permukaan  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dengan metode *density functional theory* (DFT). Proses adsorpsi merupakan langkah awal dalam memahami reaksi-reaksi kimia yang terjadi antara H<sub>2</sub>O dengan permukaan  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> dalam berbagai proses teknologi. Penelitian ini berfokus pada adsorpsi molekuler H<sub>2</sub>O pada permukaan  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Untuk menjamin akurasi perhitungan akibat dari adanya pertukaran elektron dan korelasi digunakan fungsional *Perdew-Burke-Ernzerhof* (PBE) dari pendekatan (*Generalized Gradient Approximation*) GGA. Lebih jauh lagi, kondisi Hubbard U untuk sistem terkorelasi kuat karena orbital d dan f yang terlokalisasi juga dilakukan (DFT+U). Kemudian pada hasil perhitungan digunakan dalam menentukan mekanisme adsorpsi yang dibahas dengan analisis transfer muatan. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa situs adsorpsi yang paling stabil yang diperoleh pada penelitian ini adalah situs Top Fe Konfigurasi Kedua Atom H Diatas Atom O. Berdasarkan hasil analisis transfer muatan menunjukkan semakin besar transfer muatan yang terjadi, maka interaksi antar molekul dengan permukaan akan semakin kuat. Kemudian pada hasil analisis DOS menunjukkan orbital p dalam atom H<sub>2</sub>O adalah orbital yang bertanggung jawab terhadap mekanisme reaksi adsorpsi. Pada akhirnya, dapat disarankan untuk dilakukan pemisahan molekul H<sub>2</sub>O pada permukaan  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

**Kata Kunci** : H<sub>2</sub>O, Adsorpsi, Transfer Muatan,  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, DFT.



## ABSTRACT

A research about the interaction of H<sub>2</sub>O with the surface of  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> has been carried out using the density functional theory (DFT) method. The adsorption process is the first step in understanding the chemical reaction that occurs between H<sub>2</sub>O and the surface of  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> in various technological processes. This research focuses on the adsorption of H<sub>2</sub>O molecules on the surface of  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. To ensure the accuracy of the calculations due to the use of electrons and correlation, the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) function from Generalized Gradient Approximation (GGA) was used. Next, condition the Hubbard U for a strongly correlated system because the localized d and f orbitals are also carried out (DFT+U). Then the calculation results are used to determine the adsorption mechanism which is discussed by charge transfer analysis. The calculation results show that the most stable adsorption site obtained in this study is the Top Fe site in the Upright Configuration. Based on the results of the charge analysis, it shows that the greater the charge that occurs, the stronger the interaction between the molecule and the surface. Then the results of the DOS analysis show that the p orbital on the H<sub>2</sub>O atom is the orbital responsible for the mechanism of the adsorption reaction. In the end it can be suggested to purify the H<sub>2</sub>O molecule on the surface of  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

**Keywords** : H<sub>2</sub>O, Adsorption, Charge Transfer,  $\alpha$ -Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, DFT

