

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian mengenai interaksi H₂ dengan permukaan oksida grafena (*graphene oxide*) dengan metode *Density Functional Theory* (DFT). Proses adsorpsi merupakan langkah awal dalam memahami reaksi-reaksi kimia yang terjadi antara H₂ dengan permukaan oksida grafena (*graphene oxide*) dalam berbagai proses teknologi. Penelitian ini bertujuan untuk menyelidiki interaksi antara molekul H₂ dengan oksida grafena (*graphene oxide*) dalam konteks penyimpanan hidrogen. Oksida grafena (*graphene oxide*) telah diidentifikasi sebagai kandidat potensial untuk penyimpanan hidrogen karena permukaannya yang luas dan juga berpori. Dalam upaya untuk memahami mekanisme interaksi dan kemungkinan penyimpanan hidrogen dalam oksida grafena (*graphene oxide*), dilakukan simulasi komputasi berbasis *Density Functional Theory* (DFT) untuk menggambarkan interaksi antara H₂ pada permukaan oksida grafena. Dalam menjamin akurasi perhitungan akibat dari adanya pertukaran elektron dan korelasi digunakan fungsional *Perdew-Burke-Ernzerhof* (PBE) dari pendekatan *Generalized Gradient Approximation* (GGA). Kemudian, pada hasil perhitungan digunakan dalam menentukan mekanisme adsorpsi yang dibahas dengan analisis transfer muatan. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa situs adsorpsi yang paling stabil dalam penelitian ini adalah pada situs *bridge* C-C tegak lurus H₂. Berdasarkan hasil analisis transfer muatan menunjukkan semakin besar transfer muatan, maka akan semakin kuat pula ikatan adsorbat dengan adsorbennya. Perlu dilakukan relaksasi untuk interaksi molekul H₂ dengan oksida grafena (*graphene oxide*) dan untuk penggunaan molekul H₂ sebagai *cluster* bukan molekul tunggal.

Kata Kunci: H₂, Adsorpsi, Oksida Grafena, Transfer Muatan, DFT.

ABSTRACT

Research has been carried out on the interaction of H₂ with the surface of graphene oxide (graphene oxide) using the Density Functional Theory (DFT) method. The adsorption process is the first step in understanding the chemical reactions that occur between H₂ and graphene oxide surfaces in various technological processes. This study aims to investigate the interaction between H₂ molecules and graphene oxide in the context of hydrogen storage. Graphene oxide (graphene oxide) has been identified as a potential candidate for hydrogen storage because of its large surface area and also porous. In an effort to understand the mechanism of interaction and the possibility of hydrogen storage in graphene oxide, a computational simulation based on Density Functional Theory (DFT) was carried out to describe the interaction between H₂ on the surface of graphene oxide. In guaranteeing the accuracy of calculations due to electron exchange and correlation, the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) functional from the Generalized Gradient Approximation (GGA) approach is used. Then, the results of the calculations are used in determining the adsorption mechanism which is discussed by charge transfer analysis. The calculation results show that the most stable adsorption site in this study is the C-C bridge site perpendicular to H₂. Based on the results of the charge transfer analysis, the greater the charge transfer, the stronger the adsorbate bond with the adsorbent. It is necessary to relax the interaction of H₂ molecules with graphene oxide and to use H₂ molecules as clusters instead of single molecules.

Keywords: H₂, Adsorption, Graphene Oxide, Charge Transfer, DFT.