

**Simulasi Kuantum untuk Sistem Koadsorpsi H dan OH
pada Permukaan PtRuMo(111) dengan Metode *Density Functional Theory***

Endah Tri Listiowati (H1E014008)

Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Jenderal Soedirman

Jl.Dr.Soeparno No.61 Karangwangkal Purwokerto

Endahtri376@gmail.com

ABSTRAK

Studi tentang simulasi kuantum untuk sistem koadsorpsi hidrogen dan hidroksil radikal pada permukaan PtRuMo(111) dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) telah dilakukan. Penelitian ini mengkaji reaksi yang terjadi pada sel bahan bakar metanol pada bagian anoda. Studi tentang simulasi kuantum ini bertujuan untuk menentukan situs yang paling disukai dan mekanisme koadsorpsi H dan OH pada permukaan PtRuMo(111). Mekanisme ini dibahas dengan analisis transfer muatan. Berdasarkan perhitungan yang telah dilakukan diperoleh bahwa situs koadsorpsi yang paling disukai adalah atom H pada situs *top* Pt dan OH pada situs *top* Mo. Hasil analisis transfer muatan menunjukkan terdapat kecenderungan bahwa kekuatan interaksi ditentukan oleh besarnya elektron yang didonorkan dari permukaan. Semakin besar kekuatan interaksi ditunjukkan dengan semakin besarnya jumlah elektron yang didonorkan. Selanjutnya, dari analisis transfer muatan dapat disimpulkan bahwa ikatan yang terjadi antara permukaan dengan adsorbat adalah ikatan ionik, yaitu permukaan sebagai donor elektron dan adsorbat sebagai akseptor elektron.

Kata kunci : Koadsorpsi, PtRuMo(111), DFT, transfer muatan

**Simulasi Kuantum untuk Sistem Koadsorpasi H dan OH
pada Permukaan PtRuMo(111) dengan Metode *Density Functional Theory***

Endah Tri Listiowati (H1E014008)

Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Jenderal Soedriman

Jl.Dr.Soeparno No.61 Karangwangkal Purwokerto

Endahtri376@gmail.com

ABSTRACT

Quantum simulation studies for the hydrogen and radical hydroxyl coadsorption systems on the PtRuMo(111) surface was performed by Density Functional Theory(DFT) has been done. This research studied the reaction in a direct methanol fuel cells on anode. This quantum simulation studies aims to determine the most preferred site and mechanism of H and OH coadsorption on the PtRuMo(111) surface. This mechanism is explained by using charge transfer analysis. The calculation results shows that the most preferred coadsorption sites is H on top Pt site and OH on top Mo site. The result of charge transfer analysis shows that there is a tendency that interaction strength is determined by the amount of the electron donor. The greater the power of interaction is shown by the greater number of electrons donated. Furthermore, from the charge transfer analysis it can be concluded that the bond between the surface and the adsorbate is the ionic bond, i.e. the surface as the electron donor and the adsorbate as the electron acceptor.

Keywords: coadsorption, PtRuMo(111), DFT, charge transfer