

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

Asep Saepulloh (H1E014049)

Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Jenderal Soedirman

Jl. Dr. Soeparno No.60, Karangwangkal, Purwokerto

ABSTRAK

Penelitian ini mengkaji reaksi anoda yang terjadi pada sel bahan bakar berbahan metanol yang digunakan logam Platinum sebagai katalis dengan diberi tambahan logam Molibdenum. Penelitian simulasi kuantum ini bertujuan menentukan besar energi adsorpsi dan situs yang paling disukai pada koadsorpsi H dan OH pada permukaan PtMo(111) dengan metode *Density Functional Theory* (DFT). Hasil perhitungan ini digunakan untuk menentukan mekanisme koadsorpsi yang terjadi. Mekanisme ini dibahas dengan analisis transfer muatan. Berdasarkan perhitungan yang telah dilakukan diperoleh bahwa situs koadsorpsi paling disukai oleh sistem adalah situs H pada FCC PtPtPt dan OH pada *top* Mo dengan energi koadsorpsi sebesar -4,05 eV. Hasil analisis transfer muatan menunjukkan bahwa semakin besar transfer muatan yang terjadi, maka interaksi atom H dan OH pada permukaan PtMo(111) akan semakin kuat yang ditunjukkan dengan nilai energi adsorpsi.

Kata kunci : Adsorpsi, Koadsorpsi, PtMo(111), DFT, transfer muatan

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

Asep Saepulloh (H1E014049)

Jurusan Fisika

Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Universitas Jenderal Soedirman

Jl. Dr. Soeparno No.60, Karangwangkal, Purwokerto

ABSTRACT

This research studied the anode reaction that occur in a direct methanol fuel cell used in platinum as catalyst with addition molibdenum metal. This research focuses on adsorption energy and adsorption sites on the surface of PtMo(111) as the first step to discuss about physical properties of material related to its functionalities. The calculation results are then used to determine the adsorption mechanism. This mechanism is explained by using charge transfer analysis. Calculation result show that the most stable adsorption sites is H on FCC PtPtPt and OH on top Mo that has coadsorption energy -4,05 eV. Charge transfer analysis results indicate that number of charge transfer enhance the interaction strength between H atom and PtMo(111), which are seen in the adsorption energy value. Finally, it is advisable to conduct research OH adsorption and H-OH coadsorption on PtMo(111) surface.

Keywords: adsorption, coadsorption, PtMo(111), DFT, charge transfer