

## ABSTRAK

Studi teoretik adsorpsi molekul air ( $\text{H}_2\text{O}$ ) pada permukaan PtRuMo(111) dengan metode *density functional theory* (DFT) telah dilakukan. Fungsional *exchange-correlation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dan Perdew-Wang (PW91) dari pendekatan *Generalized Gradient Approximation* (GGA) ditinjau dalam perhitungan. Studi ini bertujuan untuk menentukan situs yang paling disukai dari adsorpsi  $\text{H}_2\text{O}$  serta menjelaskan mekanisme reaksi adsorpsi molekul  $\text{H}_2\text{O}$  tersebut pada permukaan PtRuMo(111). Pada studi ini juga ditinjau konfigurasi  $\text{H}_2\text{O}$  tegak (*upright*) dan konfigurasi  $\text{H}_2\text{O}$  turun (*down*). Hasil menunjukkan bahwa pada molekul  $\text{H}_2\text{O}$  paling menyukai berturut-turut situs *top* Mo, *top* Ru, dan *top* Pt dengan konfigurasi  $\text{H}_2\text{O}$  *down* untuk proses adsorpsinya. Selanjutnya, mekanisme adsorpsi dibahas dengan analisis transfer muatan. Dari analisis transfer muatan yang terjadi, diperoleh hasil bahwa Mo mendonorkan elektron paling banyak diikuti oleh Ru dan Pt dalam proses pembentukan ikatan antara  $\text{H}_2\text{O}$  dengan permukaan logam. Selain itu, atom O pada  $\text{H}_2\text{O}$  juga mendonorkan sebagian elektron untuk pembentukan ikatan. Hal ini menunjukkan bahwa adsorpsi  $\text{H}_2\text{O}$  pada situs-situs paling disukai tersebut menggunakan mekanisme pemakaian bersama elektron (ikatan kovalen). Hasil juga menunjukkan bahwa semakin besar jumlah elektron yang tertransfer, maka ikatan yang terbentuk antara  $\text{H}_2\text{O}$  dan PtRuMo juga semakin kuat. Pada akhirnya, dapat disarankan untuk melakukan relaksasi atom pada setiap tahap pemodelan interaksi supaya lebih mendekati system nyata.

**Kata kunci :** Adsorpsi, DFT,  $\text{H}_2\text{O}$ , transfer muatan, PtRuMo(111)

## ABSTRACT

*Theoretical studies of the water (H<sub>2</sub>O) molecular adsorption on the PtRuMo(111) surface using density functional theory (DFT) have been conducted. Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) and Perdew-Wang (PW91) exchange-correlation functionals based on Generalized Gradient Approximation (GGA) are used in the calculation. This research focuses on the preferential site and determination of the most related reaction mechanism of H<sub>2</sub>O adsorption on the PtRuMo(111) surface. Here we consider the upright and down configurations of the H<sub>2</sub>O adsorption geometry. The results showed that the H<sub>2</sub>O prefers to adsorb on top Mo, top Ru, and top Pt sites with down configuration for adsorption process. Furthermore, H<sub>2</sub>O molecular adsorption mechanism is determined using charge-transfer analysis. From the calculated charge-transfer we obtained that Mo released the electrons largest followed by Ru and Pt order respectively, in the bonding formation between H<sub>2</sub>O and metal's surfaces. Moreover, atomic O of H<sub>2</sub>O also released electrons to form bonds. This means that H<sub>2</sub>O adsorption on the preferred sites occurred via electrons sharing or covalent bond. The results also showed that the more the charge transfer the stronger the bonds between H<sub>2</sub>O and PtRuMo. Finally, atomic relaxations in each step of surface-adsorbate interaction can be done in order to get the result closer to the real system.*

**Keywords :** Adsorption, DFT, H<sub>2</sub>O, PtRuMo(111), charge transfer.

