

ABSTRAK

Telah dilakukan studi simulasi kuantum untuk adsorpsi molekul air (H_2O) pada permukaan Pt(111), PtMo(111) dan PtRu(111) dengan metode *density functional theory* (DFT). Penelitian ini dilakukan untuk menentukan pengaruh perbedaan konfigurasi struktur H_2O dengan kedua atom H di atas (*upright*) dan konfigurasi H_2O dengan kedua atom H turun sejajar atom O (*down*) dalam mekanisme adsorpsi H_2O pada permukaan Pt(111), PtMo(111) dan PtRu(111). Hasil menunjukkan bahwa adsorpsi pada konfigurasi H_2O *down* memiliki kestabilan yang lebih besar dibanding dengan konfigurasi *upright*. Situs-Situs yang disukai untuk adsorpsi H_2O pada konfigurasi tersebut berturut-turut adalah situs *top* Mo, *top* Ru, dan *top* Pt. Mekanisme adsorpsi H_2O dengan konfigurasi *down* dapat dilihat dari analisis transfer muatan. Hasil menunjukkan bahwa kekuatan interaksi antara H_2O dengan sampel permukaan logam tersebut sebanding dengan besar transfer muatan yang terjadi antara H_2O and substrat. Ikatan yang terbentuk antara H_2O dengan permukaan Pt(111), PtMo(111) dan PtRu(111) adalah ikatan kovalen, yaitu melalui pemakaian elektron secara bersama-sama dari sumbangan H_2O dan substrat. Selain itu, orbital yang terlibat dalam adsorpsi H_2O dengan konfigurasi *upright* adalah orbital $1b_1$. Berbeda dengan konfigurasi H_2O *down* dimana orbital yang terlibat dalam mekanisme adsorpsinya adalah orbital $3a_1$.

Kata kunci: Adsorpsi H_2O , permukaan berbasis Pt, transfer muatan, DFT

ABSTRACT

A quantum simulation was performed for the adsorption of water (H_2O) on the surface of Pt(111), PtMo(111) and PtRu(111) by density functional theory (DFT). This study was carried out to evaluate the effect of H_2O structure configuration difference, i.e., the upright H_2O and the down configuration to investigate the H_2O adsorption mechanism. The results show that the adsorption in the down- H_2O configurations are more stable than the upright configurations. The preferred sites for H_2O adsorption in the such configuration are the top Mo, top Ru, and top Pt sites, respectively. The adsorption mechanism of H_2O with down configuration are studied from the charge transfer analysis. The results show that the interaction strength between H_2O and the metal surfaces is proportional to the amount of charge transfer that occurs between the H_2O and the substrate. Furthermore, the bonds formed between H_2O and the surface of Pt (111), PtMo (111) and PtRu (111) are covalent bonds, i.e., by the use of shared electrons from H_2O donors and substrates. In addition, the orbital involved in H_2O adsorption with upright configuration is state $1b_1$. This is slightly different from the H_2O down configuration in which the orbital responsible for the adsorption mechanism is state $3a_1$.

Keywords: H_2O adsorption, surface-based on Pt, charge transfer, DFT