

ABSTRAK

Simulasi kuantum proses dekarboksilasi pada permukaan PtRuMo(111) berbasis *Density Functional theory* (DFT) telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui kemungkinan besar energi aktivasi pada proses pemecahan COOH menjadi CO₂ dan H di atas permukaan PtRuMo(111) serta mekanisme dari pemecahan tersebut. Hal yang dilakukan dalam penelitian ini adalah mensimulasikan situs-situs adsorpsi dan koadsorpsi untuk mendapatkan keadaan awal dan akhir dari proses pemecahan COOH menjadi CO₂ dan H menggunakan DFT. Kemudian, menganalisis distribusi muatan, transfer muatan, serta rapat keadaan lokal pada orbital yang ditinjau. Selain itu, dilakukan juga simulasi untuk mendapatkan keadaan transisi untuk memperoleh besar energi aktivasi dari proses dekarboksilasi ini. Berdasarkan analisis tersebut, maka dapat disimpulkan bahwa kemungkinan proses pemecahan COOH menjadi CO₂ dan H di atas permukaan PtRuMo(111) dapat terjadi dengan besar energi 0.09 eV yang dihasilkan dari perhitungan NEB. Selanjutnya, mekanisme situs adsorpsi yang diperoleh yaitu situs *top* Pt untuk adsorpsi COOH sebagai keadaan awal, situs koadsorpsi CO₂ di *bridge* PtMo dan H di *top* Pt sebagai keadaan akhir, serta situs koadsorpsi CO₂ di *top* Pt dan H di *top* Pt sebagai keadaan transisi. Besar energi dari masing-masing situs yang diperoleh yaitu -305.98 eV, -306.64 eV, dan -305.90 eV.

Kata kunci : adsorpsi, DFT, koadsorpsi, NEB, PtRuMo(111).



ABSTRACT

A quantum simulation of decarboxylation process on the surface of PtRuMo(111) based on Density Functional Theory (DFT) has been carried out. This research aims to find out the most likely activation energy in the process of separation COOH to CO₂ and H on the surface of PtRuMo(111) and the mechanism of this separation. The thing to do this research is to simulate the adsorption and co-adsorption sites to get the initial and final state of the process of separation COOH to CO₂ and H using DFT. Then, analyze the charge distribution, charge transfer, and local state density of the orbital being mined. In addition, simulations are also carried out to obtain the transition state to obtain the activation energy of this decarboxylation process. Based on this analysis, it can be concluded that the possibility of the process of separation COOH to CO₂ and H on the surface of PtRuMo(111) can occur with an energy of 0.09 eV resulting from the NEB calculation. Furthermore, the adsorption site mechanism obtained is the Pt top site for COOH adsorption as the initial state, the CO₂ co-adsorption site at the PtMo bridge and H at the top Pt as the final state, and the CO₂ co-adsorption site at the top Pt and H at the top Pt as a transition state. The amount of energy obtained from each site is -305.98 eV, -306.64 eV, and -305.90 eV.

Keyword : adsorption, DFT, co-adsorption, NEB, PtRuMo(111).

