

## Studi Teori Fungsional Kerapatan pada Penentuan Jalur Reaksi Pemecahan H<sub>2</sub>O di Atas Permukaan PtMo(111)

<b>Title</b>	Studi Teori Fungsional Kerapatan pada Penentuan Jalur Reaksi Pemecahan H <sub>2</sub> O di Atas Permukaan PtMo(111)
<b>Author Order</b>	of
<b>Accreditation</b>	5
<b>Abstract</b>	<p>Abstrak “ Telah dilakukan penelitian terkait simulasi kuantum untuk pemecahan molekul air (H<sub>2</sub>O) pada permukaan PtMo(111) berbasis Density Functional Theory (DFT). Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui jalur reaksi yang paling efektif dalam proses pemecahan H<sub>2</sub>O dan mekanisme reaksinya. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa jalur yang paling mungkin untuk pemecahan H<sub>2</sub>O menjadi H dan OH adalah pergerakan H dari posisi H<sub>2</sub>O di top Mo<sub>2</sub> ke situs HCP Pt41-Mo<sub>2</sub>-Pt42, dilanjutkan ke situs FCC Pt42-Mo<sub>2</sub>-Pt46, kemudian ke situs bridge Pt42-Pt46, terus ke situs HCP Pt42-Pt43-Pt46, dan berakhir di situs FCC Pt38-Pt42-Pt43. Posisi OH berada di top Mo<sub>2</sub>. Adapun energi aktivasi yang diperlukan untuk memecah H<sub>2</sub>O sebesar 0,68 eV. Selanjutnya, mekanisme reaksi pemecahan H<sub>2</sub>O dibahas dengan analisis struktur geometri dari adsorpsi H<sub>2</sub>O di situs yang bersesuaian dengan jalannya reaksi. Kata kunci: pemecahan H<sub>2</sub>O, DFT, PtMo(111), energi aktivasi, mekanisme reaksi.</p> <p>Abstract “ Quantum simulation studies for the decomposition of water molecules (H<sub>2</sub>O) on the surface of PtMo (111) based on the density functional theory (DFT) were performed. This study was conducted to determine the most preferred pathways of the H<sub>2</sub>O dissociation process and its reaction mechanism. The calculation results show that the most preferential pathway to decompose H<sub>2</sub>O into H and OH is the movement of H from the original position of adsorbed H<sub>2</sub>O atop Mo<sub>2</sub> to the HCP Pt41-Mo<sub>2</sub>-Pt42 site, then to the FCC Pt42-Mo<sub>2</sub>-Pt46 and then to the bridge site of neighboring Pt42-Pt46 atoms followed by HCP Pt42-Pt43-Pt46 site and terminate at the FCC Pt38-Pt42-Pt43 site. The position of OH remains on top of Mo<sub>2</sub>. The activation energy required to break H<sub>2</sub>O is 0.68 eV. In addition, the reaction mechanism for H<sub>2</sub>O dissociation is discussed by analyzing the adsorption geometri corresponding to the each sites of reaction paths. Key words: dissociation of H<sub>2</sub>O, DFT, PtMo(111), activation energy, reaction mechanism</p>
<b>Publisher Name</b>	Physical Society of Indonesia (PSI)
<b>Publish Date</b>	2019-09-24
<b>Publish Year</b>	2019
<b>Doi</b>	DOI: 10.35895/rf.v3i2.156
<b>Citation</b>	
<b>Source</b>	Risalah Fisika
<b>Source Issue</b>	Vol 3, No 2 (2019): Risalah Fisika ISSN 2548-9011
<b>Source Page</b>	33-36
<b>Url</b>	<a href="http://journal.fisika.or.id/rf/article/view/156">http://journal.fisika.or.id/rf/article/view/156</a>
<b>Author</b>	WAHYU TRI CAHYANTO, S.Si, M.Si, Ph.D