

ABSTRAK

Telah dilakukan penelitian mengenai simulasi pemisahan H_2O menjadi H_{ads} dan OH_{ads} di atas permukaan atom Pt(111) dengan menggunakan teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory*), yang bertujuan untuk mengetahui bagaimana jalur reaksi yang membutuhkan energi aktivasi paling kecil dengan menghitung energi potensial permukaan. DFT merupakan salah satu gagasan eksak tentang masalah banyak partikel untuk mempelajari perilaku-perilaku keadaan dasar sistem-sistem elektron (*electronic systems*) melalui prinsip variasi. Dalam hal ini, energi total sistem merupakan fungsional dari kerapatan. Atom Pt(111) digunakan karena atom tersebut dapat mempermudah pemisahan air dan methanol di dalam *Direct Methanol Fuel Cell* (DMFC). Sedangkan indeks (111) merupakan indeks bidang rendah yang memiliki kestabilan paling baik sehingga ikatan atom-atom Pt sangat kuat dan tidak mudah pecah. Penggunaan DMFC sendiri diharapkan dapat membantu kebutuhan masyarakat sehari – hari, salah satunya sebagai transportasi karena memiliki polutan yang rendah. Pada penelitian ini terdapat dua jalur yang diamati, masing-masing jalur terdapat 5 situs. Kemudian jalur yang diamati akan dihitung energi sistemnya sampai mendapatkan kurva potensial Morse sehingga akan diketahui besar energi aktivasinya. Energi aktivasi yang paling rendah berada pada jalur 1 yaitu 0,82 eV, dengan situs yang ditempuh yaitu posisi awal pada top Pt43, brigde Pt38 & Pt42, HCP Pt22, brigde Pt37 & Pt38, dan situs terakhir pada FCC Pt6. Sedangkan pada jalur 2 dengan energi aktivasi sebesar 0,88 eV atom H melewati situs-situs top Pt43, Pt38 & Pt39, FCC Pt7, brigde Pt34 & Pt38, dan terakhir FCC Pt6. Energi aktivasi terendah pada jalur 1 itulah yang merupakan jalur yang paling efektif karena memiliki energi paling stabil.

Kata Kunci: DFT, Energi potensial permukaan, DMFC, Energi aktivasi

ABSTRACT

Research has been carried out on simulating the separation of H_2O into H_{ads} and OH_{ads} on the surface of Pt(111) atoms using Density Functional Theory, which aims to find out how the reaction pathway that requires the smallest activation energy is calculated by calculating the surface potential energy. DFT is one of the exact ideas of the many-particle problem to study the ground state behavior of electronic systems through the principle of variation. In this case, the total energy of the system is a function of the density. The Pt(111) atom is used because it can facilitate the separation of water and methanol in the Direct Methanol Fuel Cell (DMFC). While the index (111) is a low plane index which has the best stability so that the bonds between Pt atoms are very strong and not easily broken. The use of DMFC itself is expected to help people's daily needs, one of which is transportation because it has low pollutants. In this study, two paths were observed, each path contained 5 sites. Then the observed path will be calculated for the energy of the system to obtain a Morse potential curve so that the magnitude of the activation energy will be known. The lowest activation energy is in lane 1, which is 0.82 eV, with the sites taken are the initial position at top Pt43, Pt38 & Pt42 brigades, Pt22 HCPs, Pt37 & Pt38 brigades, and the last site at FCC Pt6. While in lane 2 with an activation energy of 0.88 eV, the H atom passes through the top sites Pt43, Pt38 & Pt39, FCC Pt7, Pt34 & Pt38 brigades, and finally FCC Pt6. The lowest activation energy in first pathway is the most effective path because it has the most stable energy.

Keyword: DFT, Potential energy surface, DMFC, Activation energy