

ABSTRAK

Penelitian terkait simulasi kuantum untuk pemecahan H_2O pada permukaan PtMo(111) dengan *Density Functional Theory* (DFT) telah berhasil dilakukan. Simulasi ini nantinya dapat digunakan sebagai pertimbangan untuk merealisasikan *Direct Methanol Fuel Cell* (DMFC). Penelitian ini dilakukan untuk mengetahui lintasan atom H yang paling efektif selama proses pemecahan H_2O dan mekanisme yang terjadi selama pemecahan tersebut. Logam Platinum (Pt) digunakan sebagai katalis dengan memecah H_2O untuk mempermudah jalannya reaksi antara air dan methanol dari reaksi DMFC. Campuran logam Molybdenum (Mo) sendiri ditambahkan untuk mengurangi efek racun yang dihasilkan dari katalis Pt akibat menyerap banyak senyawa CO yang terbentuk dari reaksi air dengan methanol. Metode yang dilakukan untuk mengetahui energi dari tiap-tiap situs lintasan atom H adalah dengan DFT, yang merupakan metode akurat untuk menghitung energi suatu sistem atom kompleks dengan mempertimbangkan sifat elektroniknya. Berdasarkan hasil penelitian, diketahui bahwa energi aktivasi yang paling rendah untuk memecah H_2O adalah sebesar 0,68 eV dengan situs-situs yang dilalui selama proses pemecahan adalah Top Mo (posisi awal). Kemudian menuju situs HCP, situs FCC, situs Bridge, situs HCP, dan situs FCC (posisi akhir). Hasil tersebut merupakan perhitungan yang dilakukan secara manual dengan mencari situs-situs stabil di antara posisi awal dan posisi akhir pemecahan H_2O .

Kata Kunci: Simulasi kuantum, DFT, DMFC, Energi aktivasi, Lintasan atom

ABSTRACT

Quantum simulation for dissociation of water molecule on PtMo(111) surface with density functional theory were performed. This simulation will later be used for Direct Methanol Fuel Cell (DMFC) realization. The study was performed to determine the most effective of reaction path during the dissociation process and the mechanism that occurs during the reaction. Platinum metal used as a catalyst to facilitate the reaction path between the water and methanol molecule on DMFC reaction. Molybdenum alloy added to reduce the poisoing effect produced Pt catalyst which adsorbs CO molecules, that produced from water and methanol reaction. The methods to determining the energy from the sites of reaction path is DFT, which is an accurate methods for calculating the energy of the complex atomic system, with considers electronics property. Based on the result, the most lowest activation energy to dissociation the water molecule is 0,68 eV with the sites passed during the dissociation is Top Mo (initial state). Then, to the HCP sites, FCC sites, bridge sites, HCP sites, and the FCC sites (final state). The result is calculation with manual sites searching between the initial state and the final state.

Keyword: *Quantum simulation, DFT, DMFC, Activation energy, Reaction Path*