

ABSTRAK

Pertumbuhan penduduk bumi yang semakin meningkat tidak sejalan dengan ketersediaan energi bumi yang ada. Penggunaan bahan bakar panas bumi yang masih menjadi energi utama dapat menjadi permasalahan keterbatasan energi di masa mendatang, oleh karena itu studi tentang energi baru terbarukan dapat menjadi solusi kebutuhan energi yang meningkat. Salah satu energi baru terbarukan yang dapat dikaji adalah fuel cell. Fuel cell adalah perangkat elektrokimia yang menggabungkan hidrogen dan oksigen untuk menghasilkan listrik, dengan air dan panas sebagai produk sampingannya. Jenis-jenis fuel cell bergantung pada bahan bakarnya, misalnya direct methanol fuel cell yang memanfaatkan methanol sebagai bahan bakarnya. Kinerja dari DMFC menggunakan anoda dan katoda sebagai jalur transfer elektronnya. Dalam penelitian ini dilakukan studi teoritik mengenai pada anoda, dimana interaksi antara gugus formate dan permukaan PtMo (111) dilakukan. Interaksi yang terjadi antara keduanya bersifat kompleks, oleh karena itu dibutuhkan pendekatan density functional theory (DFT). Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui prediksi kemungkinan terjadinya interaksi antara gugus formate dan permukaan PtMo (111) dan dapat dijelaskan melalui analisa struktur elektronik antara keduanya. Pada penelitian ini, berhasil diketahui konfigurasi sistem paling stabil ditunjukkan pada energi adsorpsi paling minimum adalah atom O1 milik gugus formate berikatan dengan atom Mo2 milik PtMo, dan atom O2 berikatan dengan atom Pt45. Mekanisme interaksinya dapat ditunjukkan pada distribusi muatan pada atom O1 dengan Mo2, dimana ada penambahan elektron dari $-0,01 e^-$ menjadi $0,27 e^-$. Ini menandakan adanya ikutan kuat antara keduanya. Dalam analisa DOS, Setelah terjadinya interaksi antara gugus formate dan permukaan, terjadi penurunan grafik DOS. Ini menandakan adanya interaksi mengikat lebih kuat antara gugus formate dan permukaan PtMo (111).

Kata kunci: adsorpsi, DFT, PtMo (111), DOS.

ABSTRACT

The increasing growth of the earth's population is not in line with the availability of existing earth's energy. The use of geothermal fuel which is still the main energy source can be a problem of limited energy in the future, therefore the study of new and renewable energy can be a solution to increasing energy needs. One of the new renewable energies that can be studied is the fuel cell. A fuel cell is an electrochemical device that combines hydrogen and oxygen to produce electricity, with water and heat as by-products. The types of fuel cells depend on the fuel, for example, direct methanol fuel cells that use methanol as fuel. The performance of the DMFC uses the anode and cathode as the electron transfer path. In this research, a theoretical study was carried out on the anode, where the interaction between the formate group and the PtMo (111) surface was carried out. The interactions that occur between the two are complex, therefore a density functional theory (DFT) approach is needed. The purpose of this research is to predict the possible interactions between the formate group and the PtMo surface (111) and can be explained by analyzing the electronic structure between the two. In this study, it was found that the most stable system configuration indicated at the minimum adsorption energy was that the O1 atom belonging to the formate group bonded to the Mo2 atom belonging to PtMo, and the O2 atom bonded to the Pt45 atom. The interaction mechanism can be shown in the charge distribution on the O1 atom with Mo2, where there is an addition of electrons from $-0.01 e^-$ to $0.27 e^-$. This indicates a strong follow-up between the two. In the DOS analysis, after the interaction between the formate groups and the surface, a decrease in the DOS graph occurs. This indicates a stronger binding interaction between the formate groups and the PtMo surface (111).

Keywords: adsorption, DFT, PtMo(111), DOS.