

ABSTRAK

Fuel cell adalah perangkat elektrokimia yang mengubah energi kimia menjadi energi listrik, salah satu diantaranya adalah *Direct Methanol Fuel Cell* (DMFC). Hambatan utama pengembangan DMFC adalah rendahnya aktivitas pada katalis anoda. Anoda berbasis platinum dapat dengan mudah tertutupi oleh zat pengotor karbon, sehingga metanol terhambat untuk diproses. Dalam DMFC, metanol akan dioksidasi untuk pembentukan produk utama karbon dioksida dan air sebagai bahan sumber energi listrik. Gugus format dan asam format merupakan dua produk yang berperan dalam proses oksidasi metanol yang terjadi pada anoda DMFC. Sifat elektronik dan geometri adsorbat dan permukaan katalis yang digunakan akan mempengaruhi mekanisme interaksi yang berlangsung. Metode *Density Functional Theory* (DFT) memungkinkan mempelajari sifat umum interaksi secara sistematis untuk mendapat solusi interaksi kompleks banyak partikel. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui konfigurasi interaksi terbaik gugus format dan asam format pada permukaan PtRuMo dan mekanisme interaksi yang terjadi. Hasil kalkulasi dan analisis interaksi menggunakan DFT menunjukkan, bahwa konfigurasi *end-on* memiliki hasil lebih baik daripada konfigurasi *side-on* dalam proses oksidasi metanol. Mekanisme interaksi yang terjadi pada interaksi gugus format dengan permukaan PtRuMo ialah transfer muatan dari permukaan PtRuMo kepada adsorbat gugus format. Sedangkan pada interaksi asam format pada permukaan PtRuMo, terjadi transfer muatan dari adsorbat asam format kepada permukaan PtRuMo.

Kata kunci : DFT, PtRuMo, mekanisme interaksi, gugus format, asam format

ABSTRACT

A fuel cell is an electrochemical device that converts chemical energy into electrical energy, one of which is the Direct Methanol Fuel Cell (DMFC). The main obstacle to the development of DMFC is the low activity of the anode catalyst. Platinum-based anodes can easily be covered by carbon impurities, making it difficult for methanol to be processed. In DMFC, methanol will be oxidized to form the main products carbon dioxide and water as a source of electrical energy. Formate and formic acid are two products that play a role in the methanol oxidation process that occurs at the DMFC anode. The electronic properties and geometry of the adsorbate and the surface of the catalyst used will influence the interaction mechanism that takes place. The Density Functional Theory (DFT) method makes it possible to study the general nature of interactions systematically to obtain solutions to complex interactions of many particles. This research aims to determine the best interaction configuration of formate and formic acid on the PtRuMo surface and the interaction mechanism that occurs. The results of calculations and interaction analysis using DFT show that the end-on configuration has better results than the side-on configuration in the methanol oxidation process. The interaction mechanism that occurs when the formate interacts with the PtRuMo surface is charge transfer from the PtRuMo surface to the formate adsorbate. Meanwhile, in the interaction of formic acid on the PtRuMo surface, charge transfer occurs from the formic acid adsorbate to the PtRuMo surface.

Key words: DFT, PtRuMo, interaction mechanism, formate, formic acid

