

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR LAMPIRAN	x
DAFTAR ISTILAH	xi
INTISARI	xii
ABSTRACT	xiii
BAB I PENDAHULUAN	1
I.1 Latar Belakang	1
I.2 Tujuan Penelitian	4
I.3 Manfaat Penelitian	4
BAB II TINJAUAN DAN PERUMUSAN HIPOTESIS	5
II.1 Tinjauan Pustaka	5
II.1.1 <i>Direct ethanol fuel cell</i> (DEFC)	5
II.1.2 Mekanisme reaksi oksidasi etanol	7
II.1.3 Katalis palladium	9
II.1.4 Katalis bimetalik PdCu	11
II.1.5 <i>Density funtional theory</i> (DFT)	13
II.1.6 Studi komputasi reaksi oksidasi etanol pada permukaan logam	14
II.2 Penentuan Hipotesis dan Rancangan Penelitian	15
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	15
II.2.2 Perumusan hipotesis 2	16
II.2.3 Perumusan hipotesis 3	16
II.2.4 Rancangan penelitian	17
BAB III METODE PENELITIAN	18
III.1 Peralatan	18
III.1.1 Perangkat Keras	18
III.1.2 Perangkat Lunak	18
III.2 Model Kajian	18
III.3 Prosedur penelitian	18
III.4 Analisis Kuantitatif	19
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	21
IV.1 Struktur Geometri, Sifat Elektronik, dan Energi Total Katalis PdCu (111)	21
IV.2 Penentuan Posisi Interaksi Spesi Adsorbat pada Katalis PdCu (111)	24
IV.3 Struktur Geometri Reaksi R1: $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{OH}^* \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH}^*$ pada Variasi Katalis PdCu(111)	29
IV.4 Struktur Geometri Reaksi R2: $\text{CH}_3\text{CO}^* + \text{OH}^* \rightarrow \text{CH}_3\text{COOH}^*$ pada Variasi Katalis PdCu (111)	32

IV.5 Hasil Energi Adsorpsi, Energi Aktivasi, Energi Reaksi R1 dan R2 pada Variasi Katalis PdCu (111)	35
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	38
IV.1 Kesimpulan	38
IV.2 Saran	38
DAFTAR PUSTAKA	39
LAMPIRAN	42