

**ANALISIS DISOSIASI METANA DENGAN KATALIS Pt-Ni  
MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER**

**SKRIPSI**

Diajukan dan Disusun Sebagai Salah Satu Syarat  
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Jenjang Strata Satu (S1)  
Pada Program Studi teknik Mesin Fakultas Teknik  
Universitas Muhammadiyah Ponorogo



FIKRUN NAJIB MUZAKKI

20511470

**PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN  
FAKULTAS TEKNIK  
UNIVERSITAS MUHAMMADIYAH PONOROGO  
(2024)**

## HALAMAN PENGESAHAN

Nama : Fikrun Najib Muzakki  
NIM : 20511470  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Proposal : Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni  
Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Isi dan formatnya telah disetujui dan dinyatakan memenuhi syarat  
Untuk melengkapi persyaratan guna memperoleh Gelar Sarjana pada  
Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah  
Ponorogo.

Ponorogo, 7 Agustus 2024

Menyetujui,

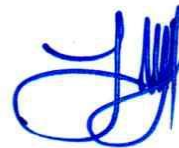
Dosen Pembimbing Utama



Rizal Arifin, M.Si, Ph.D.

NIK.19870920201204 12

Dosen Pembimbing Pendamping



Yoyok Winardi, S.T., M.T.

NIK.19860803 201909 13

Mengetahui,

Dekan Fakultas Teknik



Edy Kurniawan, S.T., M.T.  
NIK. 19771026 200810 12

Ketua Program Studi  
Teknik Mesin



Yoyok Winardi, S.T., M.T.  
NIK. 19860803 201909 13

## PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI

Yang bertanda tangan di bawah ini :

Nama : Fikrun Najib Muzakki

NIM : 20511470

Program Studi : Teknik Mesin

Dengan ini menyatakan bahwa Skripsi saya dengan judul: “Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler” bahwa berdasarkan hasil penelusuran berbagai karya ilmiah, gagasan dan masalah ilmiah yang saya rancang/ teliti di dalam Naskah Skripsi ini adalah asli dari pemikiran saya. Tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan oleh orang lain, kecuali yang secara tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar Pustaka.

Apabila ternyata di dalam Naskah Skripsi ini dapat dibuktikan terdapat unsur-unsur plagiarisme, saya bersedia Ijazah saya dibatalkan, serta diproses sesuai dengan peraturan perundang-undangan yang berlaku.

Demikian pernyataan ini dibuat dengan sesungguhnya dan dengan sebenar-benarnya.

Ponorogo, 7 Agustus 2024

Mahasiswa,



Fikrun Najib Muzakki

NIM. 20511470

## HALAMAN BERITA ACARA UJIAN

Nama : Fikrun Najib Muzakki  
NIM : 20511470  
Program Studi : Teknik Mesin  
Fakultas : Teknik  
Judul Skripsi : Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni  
Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler

Telah diuji dan dipertahankan dihadapan

Dosen penguji tugas akhir jenjang Strata Satu (S1) Pada :

Hari : Rabu  
Tanggal : 31 Juli 2024  
Nilai :

Mengetahui,

Dosen Penguji,


Ketua Penguji

Anggota Penguji I

Anggota Penguji II



Dr. Sudarno, S.T., M.T.  
NIK. 19680705 199904 11



Dr. Kuntang Winangun, S.Pd, M.P.  
NIK. 19840805 201701 11



Ir. Fadelan, M.T.  
NIK. 19610509 199009 12

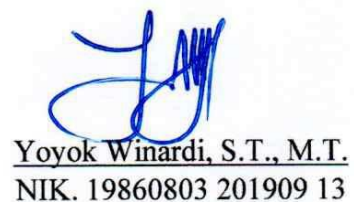
Mengetahui,

Dekan Fakultas Teknik

Ketua Program Studi Teknik Mesin



Edy Kurniawan, S.T., M.T.  
NIK. 19771026 200810 12



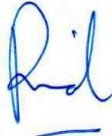





Yoyok Winardi, S.T., M.T.  
NIK. 19860803 201909 13

## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Fikrun Najib Muzakki  
 NIM : 20511470  
 Judul Skripsi : Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni  
 Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler  
 Dosen Pembimbing Utama : Rizal Arifin, M.Si, Ph.D.

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	29/Nov 2023	Pengajuan Judul	Analisa Disosiasi Metana Pada Permukaan Pt-Ni Sebagai Katalis Hidrogen Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler	
2	5/Des 2023	Bab 1	Penguatan. Latar belakang Masalah	
3	14/Des 2023	Bab 1	Keersi Tujuan dan Batasan Masalah	
4	21/Des 2023	Bab 2	Penambaran Rumus	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	5/Jan 2024	Bab 2	Revisi Rumus menjadi KeakPF	
6	8/Jan 2024	Bab 2	Acc bab 2.	
7	12/Jan 2024	Bab 3	Revisi Metode Penelitian	
8	25/Jan 2024	Bab 3	Pembahasan Jambor <del>analisa</del> Struktur. Equilibrasi Acc Sempro	
9	13/feb 2024.	Bab 9.	Pembuatan Struktur awal Atom Ni-PT	
10	6/maret 2024	Bab 9.	Pembahasan & Variasi lagi	

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
11	19/april 2029.	Bab 9.	Penambahan Merken Disosiasi	<u>Pial</u>
12	9/mei 2029	Bab 9.	Proses Simulasi Molekuler Dynamic. Pada 3 katalor-	<u>Pial</u>
13	18/juni 2029	Bab 9	Penambahan Plot Perhitungan	<u>Pial</u>
14	20/juni 2029	Bab 9.	Penambahan Tabel Hasil Perhitungan	<u>Pial</u>
15	18/juli 2029	Bab 8.	Revisi. Kesimpulan dan Saran	<u>Pial</u>
16	19/29 17		Acc Sidang.	<u>Pial</u>

## BERITA ACARA BIMBINGAN SKRIPSI

Nama : Fikrun Najib Muzakki  
 NIM : 20511470  
 Judul Skripsi : Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni  
 Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler  
 Dosen Pembimbing : Yoyok Winardi, S.T., M.T  
 Pendamping

### PROSES PEMBIMBINGAN

No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
1	29/Nov 2023	Pengajuan Judul.	Analisa Disosiasi Metana. Pada Permukaan Pt-Ni sebagai Katalis Hidrogen Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler	
2	5/Des 2023	Bab 1	Acc judul	
3	19/Des 2023	Bab 1	Revisi tujuan penelitian	
4	21/Des 2023	Bab 1	Revisi Batasan masalah	



No	Tanggal	Materi Yang Dikonsultasikan	Saran Pembimbing / Hasil	Tanda Tangan
5	5/Jan 2024	Bab 2	Menambahkan Struktur awal sistem.	
6	8/Jan 2024	Bab 2	Menambahkan penulisan terdahulu.	
7	12/Jan 2024	Bab 3	Koreksi paragraf dan tabel	
8	25/Jan 2024	Bab 3	Menambahkan Gambar Equilibrium Acc Sempurna	
9	13/feb 2024	Bab 9	Penambahan mekanisme Adsorpsi pada Katalis Ni(110), Ni-Pt1, Ni-Pt2	
10	6/mar 2024	Bab 9	Penambahan satuan gaya gesekan.	

# ANALISIS DISOSIASI METANA DENGAN KATALIS PT-NI MENGUNAKAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

Fikrun Najib Muzakki

Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Muhammadiyah Ponorogo

e-mail : [jendralnaguib@gmail.com](mailto:jendralnaguib@gmail.com)

---

## Abstrak .

Produksi hidrogen dari Steam Reforming menghasilkan emisi CO<sub>2</sub> tinggi. Katalis bimetalik Pt-Ni mengurangi karbon dan meningkatkan efisiensi disosiasi metana. Simulasi dinamika molekuler membantu desain katalis yang lebih efisien dan murah. Teknologi ini dapat membuat produksi hidrogen lebih ramah lingkungan dan ekonomis. Menganalisis pengaruh katalis Ni-Pt terhadap reaktivitas molekul metana dan mekanisme disosiasi metana di permukaan Ni-Pt, serta mekanisme produksi molekul hidrogen di permukaan Ni-Pt, menggunakan simulasi dinamika molekuler. Pengaruh katalis Ni-Pt terhadap reaktivitas dan disosiasi metana serta produksi hidrogen dapat diketahui menggunakan simulasi dinamika molekuler. Metode penelitian melibatkan mekanisme penelitian berupa tahapan konfigurasi awal simulasi, pembangunan struktur tiga variasi Ni dan Pt, optimasi struktur, ekuilibrasi, dan simulasi dinamika molekuler (MD). Analisis data dan visualisasi digunakan untuk memahami interaksi atomik dan efektivitas katalis dalam meningkatkan produksi hidrogen yang ramah lingkungan dan ekonomis. Selama 50.000 fs. Katalis Ni tanpa Pt memiliki adsorpsi terbaik tetapi lemah dalam disosiasi. Katalis dengan satu lapis Pt mendisosiasi 43 molekul CH<sub>4</sub> dalam 1000 fs pertama. Katalis dengan dua lapis Pt paling efektif, mendisosiasi 52 molekul CH<sub>4</sub>. Sehingga katalis Ni dengan dua lapis Pt adalah yang paling efisien untuk disosiasi CH<sub>4</sub> dalam produksi hidrogen.

**Kata Kunci :Disosiasi Metana, Katalis, Nikel, Platinum, ReaxFF, Simulasi Dinamika Molekuler**

## KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Allah atas berkat dan rahmat-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini dengan judul “Analisis Disosiasi Metana Dengan Katalis Pt-Ni Menggunakan Simulasi Dinamika Molekuler”. Adapun tujuan penulisan skripsi ini adalah untuk melengkapi persyaratan guna memperoleh Gelar Sarjana pada Program Studi Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.

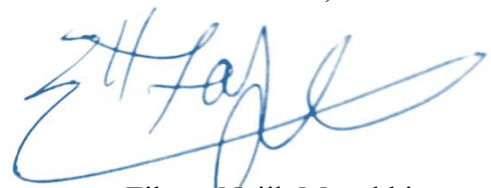
Dalam kesempatan ini, penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada:

1. Bapak Edi Kumiawan, S.T., M.T, selaku Dekan Fakultas Teknik Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
2. Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T, selaku Ketua Program Studi Teknik Mesin Universitas Muhammadiyah Ponorogo.
3. Bapak Rizal Arifin, M.Si., P.hD dan Bapak Yoyok Winardi, S.T., M.T, selaku dosen pembimbing, yang telah dengan sabar memberikan pengarah dan bimbingannya dalam menyelesaikan skripsi ini.
4. Seluruh dosen Teknik Mesin atas ilmu berharga yang telah diberikan selama penulis menempuh perkuliahan dari semester satu hingga semester akhir.
5. Orang Tua dan teman-teman Teknik Mesin yang telah memberikan dukungan untuk penulis.
6. Seluruh pihak yang tidak dapat penulis sampaikan satu persatu, terimakasih atas bantuannya sehingga skripsi ini dapat terselesaikan.

Akhir kata, penulis berharap semoga skripsi ini dapat bermanfaat bagi semua pihak yang membutuhkan. Wassalamu'alaikum Wr. Wb.

Ponorogo, 19 Juli 2024

Penulis,



Fikrun Najib Muzakki  
NIM. 20511470

## DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL.....	i
HALAMAN PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN ORISINALITAS SKRIPSI.....	iii
HALAMAN BERITA ACARA UJIAN .....	iv
BERITA ACARA BIMBINGAN .....	v
ABSTRAK .....	xi
KATA PENGANTAR .....	xii
DAFTAR ISI.....	xiii
DAFTAR GAMBAR .....	xv
DAFTAR TABEL.....	xvi
BAB 1 PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah .....	2
1.3 Tujuan Penelitian.....	3
1.4 Batasan Masalah.....	3
1.5 Manfaat Penelitian.....	3
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA.....	4
2.1 Penelitian Terdahulu.....	4
2.2 Metana ( <b>CH<sub>4</sub></b> ).....	5
2.3 Perkembangan Riset Disosiasi pada <b>CH<sub>4</sub></b> .....	6
2.4 Disosiasi ( <b>CH<sub>4</sub></b> ).....	7
2.5 Struktur Atom Face Centered Cubis (FCC).....	8
2.6 Platinum (Pt). dan Nikel (Ni) .....	9
2.7 Simulasi Dinamika Molekuler.....	10
2.8 Medan Gaya <i>Reactive Force field</i> (ReaxFF).....	12
2.9 Kondisi Batas Periodik.....	13
2.10 Integrasi Numerik.....	14
2.11 Temperatur <i>Bath</i> .....	14
BAB 3 METODE PENELITIAN.....	16
3.1 Alat Penelitian dan Kelengkapan Penelitian.....	16
3.2 Mekanisme Penelitian .....	18
3.3 Tahapan Konfigurasi Awal Simulasi .....	19
3.4 Membangun Struktur 3 variasi Ni, dan Pt.....	22

3.5 Optimasi Struktur .....	22
3.6 Ekuilibrasi dan Simulasi MD .....	23
3.7 Analisis Data dan Visualisasi.....	23
BAB 4 ANALISIS DATA DAN PEMBAHASAN .....	25
4.1 Tahapan Optimasi Struktur Atom Pt,Ni dengan Molekul <b>CH<sub>4</sub></b> .....	25
4.2 Disosiasi <b>CH<sub>4</sub></b> Pada Permukaan Pt-Ni .....	29
BAB 5 KESIMPULAN.....	40
5.1 Kesimpulan.....	40
5.2 Saran.....	40
DAFTAR PUSTAKA .....	41



## DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Struktur Molekul CH <sub>4</sub> .....	6
Gambar 2. 2 . Struktur Kristal Face Centered Cubic FCC.....	8
Gambar 2. 3 Ilustrasi batas periodik. ....	13
Gambar 3. 1 Diagram Alur Penelitian.....	18
Gambar 3. 2 Konfigurasi pertama sistem simulasi (Aplikasi Avogadro) .....	23
Gambar 3. 3 Konfigurasi Kedua sistem simulasi.....	24
Gambar 4. 1 Proses disosiasi CH <sub>4</sub> → CH <sub>3</sub> + H.....	29
Gambar 4. 2 Proses disosiasi CH <sub>3</sub> → CH <sub>2</sub> + H.....	30
Gambar 4. 3 Proses disosiasi CH <sub>2</sub> → CH + H.....	30
Gambar 4. 4 Proses disosiasi CH → C + H.....	31
Gambar 4. 5 Plot Perbandingan Disosiasi CH <sub>4</sub> Yang Terjadi Pada Katalis Ni(110) tanpa penambahan Pt Setiap Time Step .....	32
Gambar 4. 6 Proses disosiasi CH <sub>4</sub> → CH <sub>3</sub> + H .....	32
Gambar 4. 7 Proses disosiasi CH <sub>4</sub> → CH <sub>2</sub> + H .....	33
Gambar 4. 8 Proses disosiasi CH <sub>2</sub> → CH + H.....	33
Gambar 4. 9 Proses disosiasi CH → C + H.....	34
Gambar 4. 10 Plot Perbandingan Disosiasi CH <sub>4</sub> Yang Terjadi Pada Katalis dengan Penambahan Satu Lapis Pt Pada Setiap Time Step.....	35
Gambar 4. 11 Proses disosiasi CH <sub>4</sub> → CH <sub>3</sub> + H .....	36
Gambar 4. 12 Proses disosiasi CH <sub>3</sub> → CH <sub>2</sub> + H .....	36
Gambar 4. 13 Proses disosiasi CH <sub>2</sub> → CH + H.....	37
Gambar 4. 14 Proses disosiasi CH → C + H.....	37
Gambar 4. 15 Plot Perbandingan Disosiasi CH <sub>4</sub> Yang Terjadi Pada Katalis dengan Penambahan Dua Lapis Pt Pada Setiap Time Step .....	38

## DAFTAR TABEL

Tabel 2. 1 Sifat Struktur Kristal Face Centered Cubic.....	9
Tabel 4. 1 Proses Disosiasi Pada Ni(110) .....	31
Tabel 4. 2 Proses Disosiasi Pada Ni dengan Penambahan Pt Satu Lapis .....	34
Tabel 4. 3 Proses Disosiasi Pada Ni dengan Penambahan Pt Dua Lapis.....	38

