

STUDI MOLEKUL KITOSAN SEBAGAI MEMBRAN PENGHANTAR PROTON (H^+) DENGAN METODE AB INITIO

STUDYING MOLECULE OF CHITOSAN AS PROTON EXCHANGE MEMBRANE WITH AB INITIO METHODS

Arif Ari Wibowo*, Rahmat Gunawan dan Saibun Sitorus

Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Mulawarman

*Corresponding Author: arief12342@gmail.com

Submit : 14 Maret 2017 Accepted : 18 Mei 2019

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui apakah senyawa kitosan mampu menggantikan kinerja nafion sebagai penghantar proton (H^+). Proses pengkajian dan perhitungan dilakukan secara kimia komputasi dengan menggunakan metode *ab initio*. Hasil analisis menunjukkan nilai energi kitosan sebesar -1384.7601 eH dan energi kitosan setelah membawa proton (H^+) mengalami penurunan masing-masing sebesar -1385.2272 eH, -1385.8487 eH, -1386.3393 eH, -1386.9652 eH, -1387.4508 eH. Hal ini membuktikan bahwa kitosan menjadi stabil sehingga mampu digunakan sebagai penghantar proton (H^+).

Kata kunci: Membran, Kitosan, Proton (H^+), energi, *ab initio*.

ABSTRACT

The aim of this research to know chitosan compound able to replace nafion performance as a conductor of proton (H^+). The assessment process and computational chemistry calculations done using *ab initio* methods. The analysis showed chitosan energy is -1384.7601 eH and chitosan energy after bringing proton (H^+) decreased respectively by -1385.2275 eH, -1385.8487 eH, -1386.3393 eH, -1386.9652 eH, -1387.4508 eH. The result obtained proved of chitosan becomes stable so that it can be used as a proton conductor.

Keywords: Membrane, Chitosan, Proton (H^+), Energy, *ab initio*.

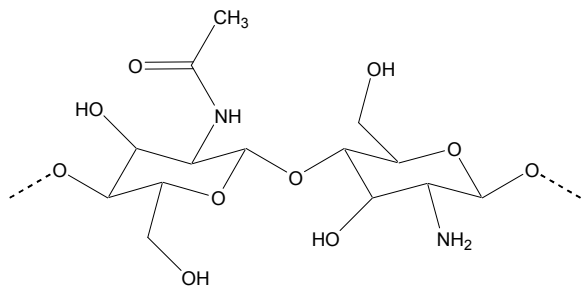
PENDAHULUAN

Membran penukar proton yang sering dipergunakan adalah Nafion yang memiliki hampir semua karakteristik yang sesuai sebagai membran elektrolit sel bahan bakar. Namun membran ini berharga mahal dan sangat bergantung pada air untuk proses konduksi, serta tidak stabil pada temperatur diatas 100 °C. Faktor faktor tersebut kurang mendukung peningkatan kinerja sel bahan bakar. Sebagai elektrolit sel bahan bakar, membran elektrolit diharapkan bersifat stabil dan dapat dipergunakan pada temperatur yang lebih tinggi sehingga arus listrik yang dihasilkan sel bahan bakar juga cukup besar.[1]

Kitosan merupakan polimer alamiah yang telah dipelajari secara luas dan cukup menjanjikan sebagai material elektrolit sel bahan bakar. Kitosan dapat diperoleh melalui serangkaian proses deproteinasi, demineralisasi

dan deasetilasi kitin menggunakan alkali dan temperatur yang tinggi. Keberadaan gugus hidroksil dan amino pada kerangka kitosan menyebabkan kitosan memiliki hidrofilisitas yang cukup tinggi, yang bermanfaat pada pengoperasian sel bahan bakar. Namun dalam keadaan normalnya, membran kitosan hanya memiliki konduktivitas listrik yang rendah. Meskipun struktur molekul kitosan memiliki tiga atom hidrogen, namun atom hidrogen tersebut terikat kuat pada kerangka kitosan dan tidak dapat digerakkan dibawah medan listrik, sehingga membran kitosan tidak dapat dijadikan suatu konduktor proton. Akan tetapi, jika kitosan tersebut dilarutkan di dalam asam asetat dan kemudian dicetak sebagai membran (film tipis), maka ion H^+ atau H_3O^+ dan CH_3COO^- pada sistem membran kitosan terasetilasi akan tersebar pada kerangka kitosan. Ion-ion ini dapat digerakkan dibawah pengaruh medan listrik. Jika

ion H^+ atau H_3O^+ lebih mudah bergerak dibandingkan ion CH_3COO^- , maka membran kitosan akan menjadi suatu konduktor proton. Kitosan dalam media asam juga dapat menjadi polielektrolit melalui protonasi gugus NH_2 . [1]



Gambar 1. Struktur Kitosan

Fuel cell adalah alat yang mampu menghasilkan listrik arus searah. Alat ini terdiri dari dua buah elektroda, yaitu anoda dan katoda yang dipisahkan oleh sebuah membran polimer yang berfungsi sebagai elektrolit. Membran ini sangat tipis, ketebalannya hanya beberapa mikrometer saja. Hidrogen dialirkan ke dalam fuel cell yaitu ke bagian anoda, sedang oksigen atau udara dialirkan ke bagian katoda, dengan adanya membran, maka gas hidrogen tidak akan bercampur dengan oksigen. Membran dilapisi oleh platina tipis yang berfungsi sebagai katalisator yang mampu memecah atom hidrogen menjadi elektron dan proton. [2]

Dibandingkan sumber energi lain *fuel cell* memiliki banyak keuntungan salah satunya dan yang paling menonjol adalah tingkat efisiensi energi yang dihasilkan. Jika pada pembangkit listrik tenaga termal, suhu pembakaran sekitar $550\text{ }^\circ\text{C}$, secara teoritis memiliki tingkat efisiensinya maksimal 60%. Namun untuk *fuel cell* yang menggunakan hidrogen sebagai sumber energinya, pada suhu kamar pun secara teoritis memiliki tingkat efisiensi mencapai 83%. [2]

Untuk itu perlu ada kajian secara teoritis tentang molekul Kitosan yang berperan sebagai pembawa proton pada PEM dengan lebih menstabilkan dan mengoptimalkan kinerja dari molekul kitosan secara riset kimia komputasi dan memberikan gambaran yang jelas untuk di lanjutkan ke eksperimen skala laboratoriumnya.

METODOLOGI PENELITIAN

Semua perhitungan yang dilakukan pada penelitian ini dikerjakan dengan menggunakan perangkat lunak GAMESS-US dengan menggunakan metode SCFTYP *Unrestricted*

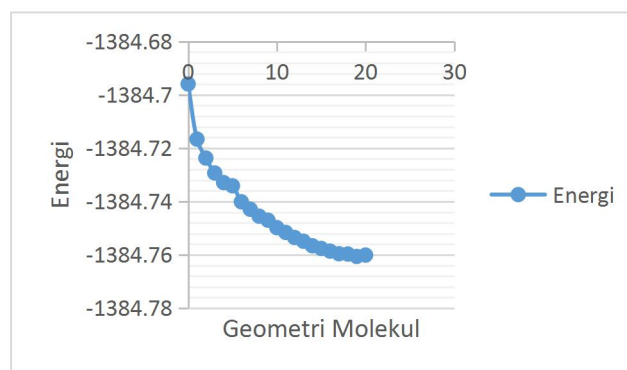
Hartree Fock dengan tipe perhitungan OPTIMIZE dengan MAXIT 20 iteration.

Optimasi dilakukan dengan GAMESS-US yaitu perhitungan hasil konvergensi dari sampel molekul Kitosan, Kitosan + H^+ , Kitosan + $2H^+$, Kitosan + $3H^+$, Kitosan + $4H^+$, Kitosan + $5H^+$. Hasil dari optimasi digunakan untuk divisualisasikan lebih lanjut menggunakan MOLDEN dimana bertujuan untuk menganalisis orbital dan grafik energi struktur molekul Kitosan yang sudah teroptimasi.

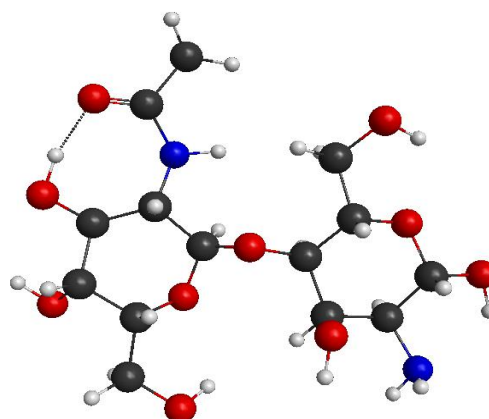
HASIL DAN PEMBAHASAN

Dilakukan perhitungan energi afinitas electron Kitosan sebelum membawa proton (H^+) dan setelah membawa proton (H^+) pada masing – masing sampel.

Pada optimasi molekul kitosan didapatkan hasil sebagai berikut, masing-masing geometri molekul yaitu :



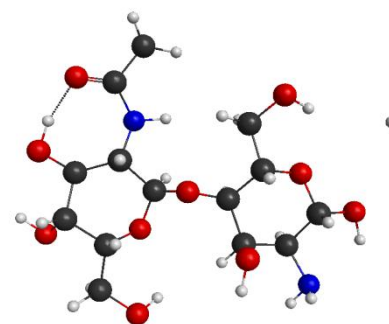
Gambar 2. Grafik geometri molekul kitosan



Gambar 3. Membran Kitosan yang divisualisasikan dengan open source WxMacMolPlt

Tabel 1. Hasil konversi perhitungan optimasi terbaik kitosan

Kondisi	Energi Afinitas
- Pra Optimasi membran kitosan	$-6036.9254 \times 10^{-18} \text{ J}$
- Paska Optimasi membran kitosan	$-6037.2053 \times 10^{-18} \text{ J}$



Gambar 6. Kitosan dengan penambahan proton (H^+) yang divisualisasikan dengan Open Source WxMacMolPlt

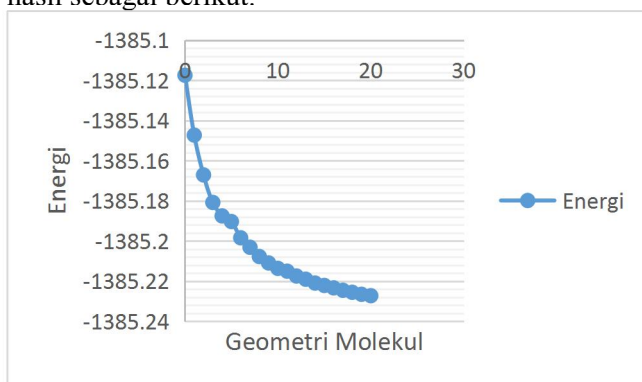


Gambar 4. Orbital Molekul kitosan dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolten

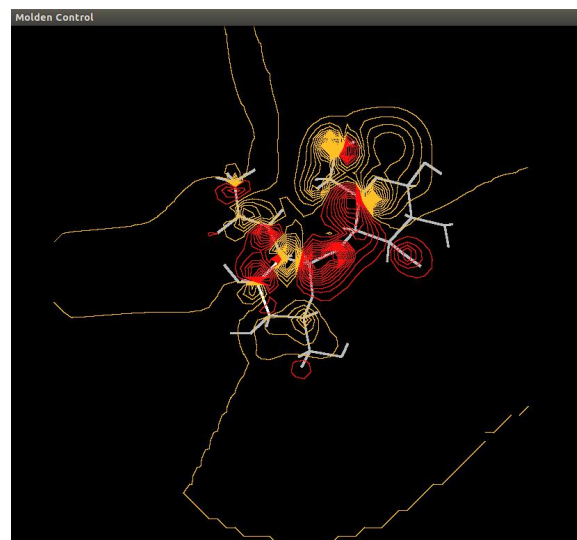
Tabel 2. Hasil konversi perhitungan optimasi kitosan dengan penambahan proton (H^+)

Kondisi	Energi Afinitas
- Pra Optimasi membran kitosan + H^+	$-6038.7635 \times 10^{-18} \text{ J}$
- Paska Optimasi membran kitosan + H^+	$-6039.2417 \times 10^{-18} \text{ J}$

Pada optimasi kitosan + H^+ didapatkan hasil sebagai berikut.

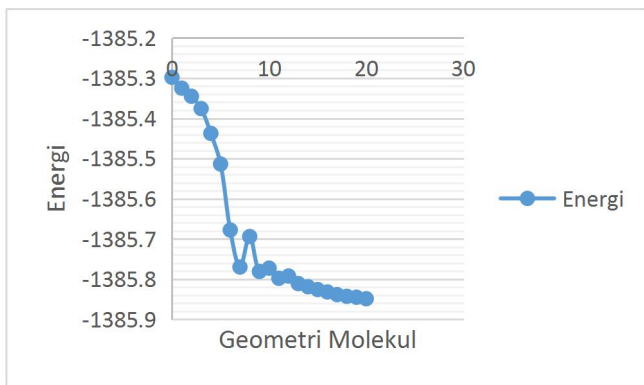


Gambar 5. Grafik geometri molekul kitosan dengan penambahan proton (H^+)

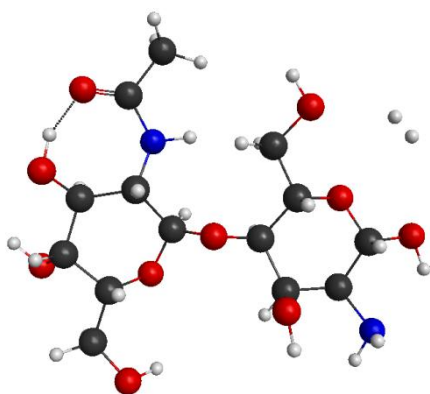


Gambar 7. Orbital Molekul kitosan + H^+ dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolten

Pada optimasi kitosan + 2H^+ didapatkan hasil sebagai berikut.



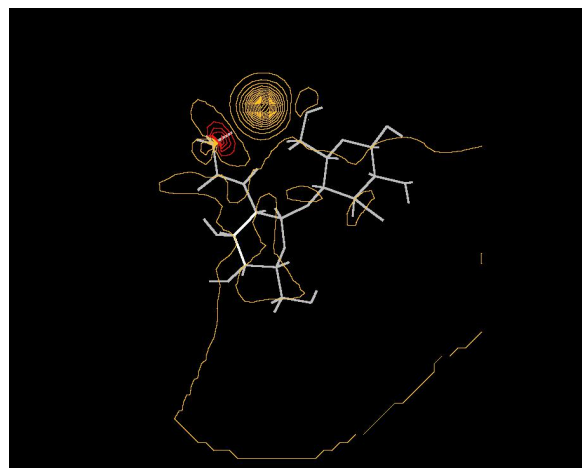
Gambar 8. Grafik geometri molekul kitosan dengan penambahan 2 proton



Gambar 9. Kitosan + 2H⁺ yang divisualisasikan dengan Open Source WxMacMolPlt

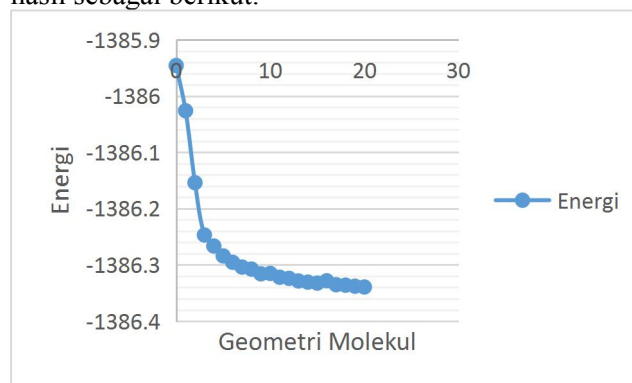
Tabel 3. Hasil perhitungan optimasi kitosan dengan penambahan 2 proton (H⁺)

Kondisi		Energi Afinitas
-	Pra Optimasi membran kitosan + 2H ⁺	-6039.5504 x 10 ⁻¹⁸ J
-	Paska Optimasi membran kitosan + 2H ⁺	-6041.9513 x 10 ⁻¹⁸ J

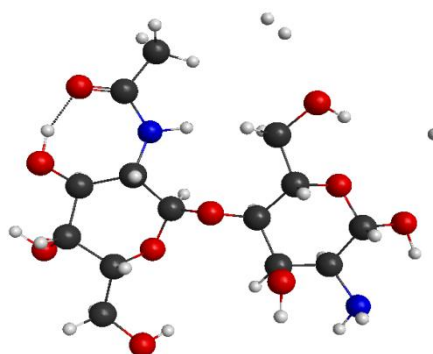


Gambar 10. Orbital Molekul kitosan dengan penambahan 2 proton (H⁺) dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolden

Pada optimasi kitosan + 3H⁺ didapatkan hasil sebagai berikut.



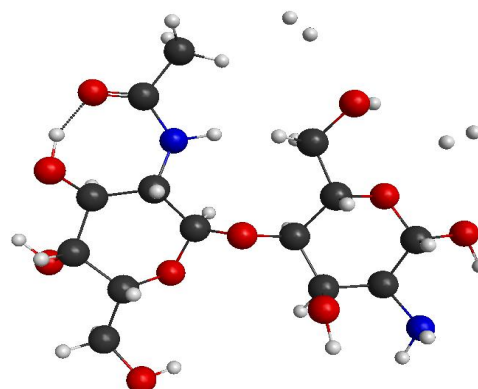
Gambar 11. Grafik geometri molekul kitosan dengan penambahan 3 proton



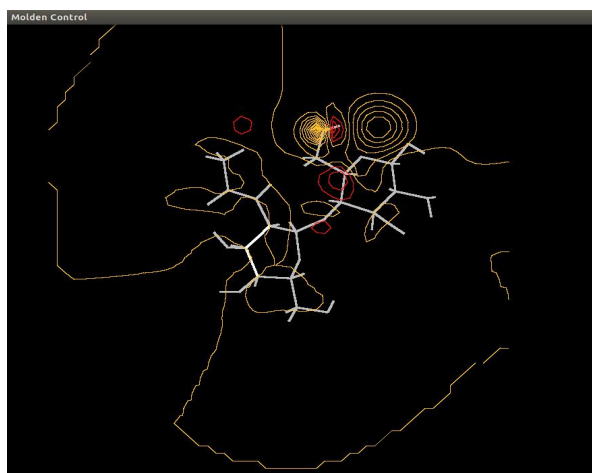
Gambar 12. Membran kitosan + 3H⁺ yang divisualisasikan dengan Open Source WxMacMolPlt

Tabel 4. Hasil perhitungan optimasi kitosan dengan penambahan 3 proton (H^+) yang dikonversi dalam bentuk Joule

Kondisi		Energi Afinitas
- Pra membran kitosan + $3H^+$	Optimasi	$-6042.3742 \times 10^{-18} \text{ J}$
- Paska membran kitosan + $3H^+$	Optimasi	$-6044.0902 \times 10^{-18} \text{ J}$



Gambar 15. Kitosan dengan penambahan 4 proton (H^+) yang divisualisasikan dengan Open Source WxMacMolPlt

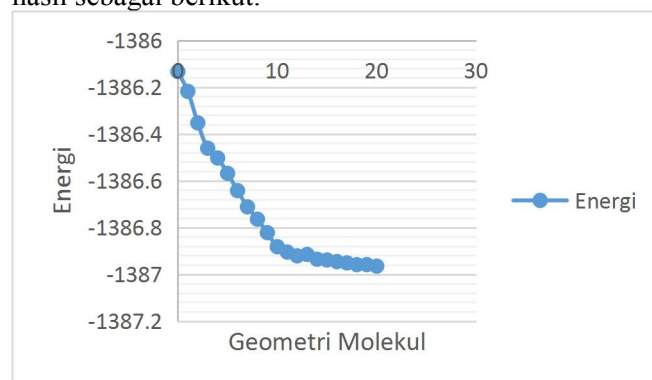


Gambar 13. Orbital Molekul kitosan dengan penambahan 3 proton (H^+) dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolden

Tabel 5. Hasil perhitungan optimasi kitosan dengan penambahan 4 proton (H^+)

Kondisi		Energi Afinitas
- Pra membran kitosan + $4H^+$	Optimasi	$-6043.1930 \times 10^{-18} \text{ J}$
- Paska membran kitosan + $4H^+$	Optimasi	$-6046.8190 \times 10^{-18} \text{ J}$

Pada optimasi kitosan + $4H^+$ didapatkan hasil sebagai berikut.

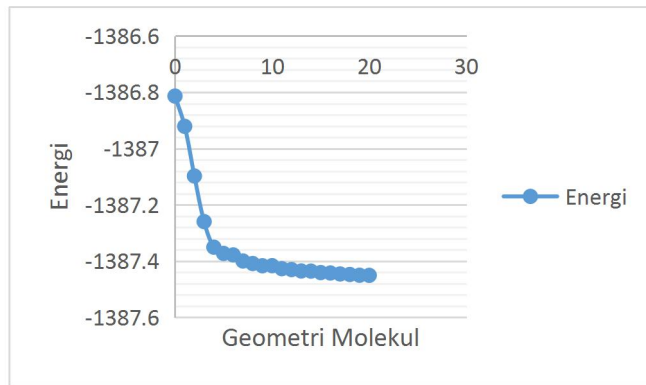


Gambar 14. Grafik molekul kitosan dengan penambahan 4 proton (H^+)

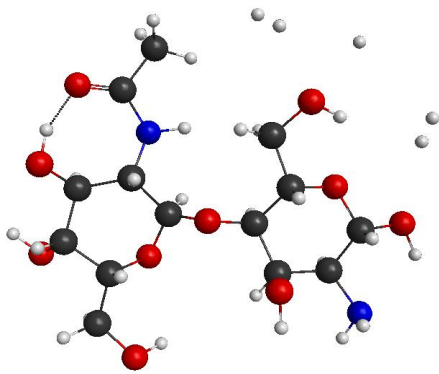


Gambar 16. Orbital Molekul kitosan + $4H^+$ dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolden

Pada optimasi kitosan + $5H^+$ didapatkan hasil sebagai berikut.



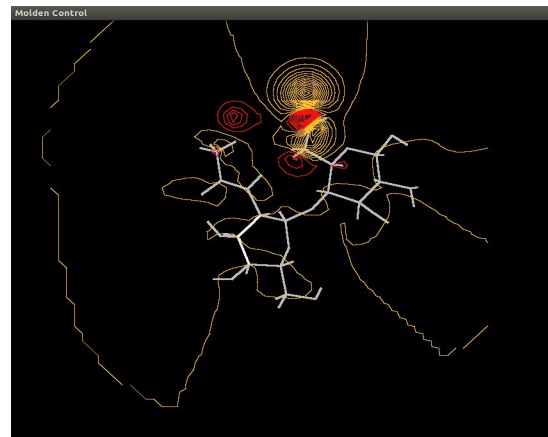
Gambar 17. Grafik geometri molekul kitosan dengan penambahan 5 proton



Gambar 18. Kitosan dengan penambahan 5 proton (H^+) yang divisualisasikan dengan Open Source WxMacMolPlt

Tabel 6. Hasil perhitungan optimasi terbaik membran kitosan dengan penambahan 5 proton (H^+)

Kondisi	Energi Afinitas
- Pra Optimasi membran kitosan + $5H^+$	$-6046.1585 \times 10^{-18} \text{ J}$
- Paska Optimasi membran kitosan + $5H^+$	$-6048.9361 \times 10^{-18} \text{ J}$



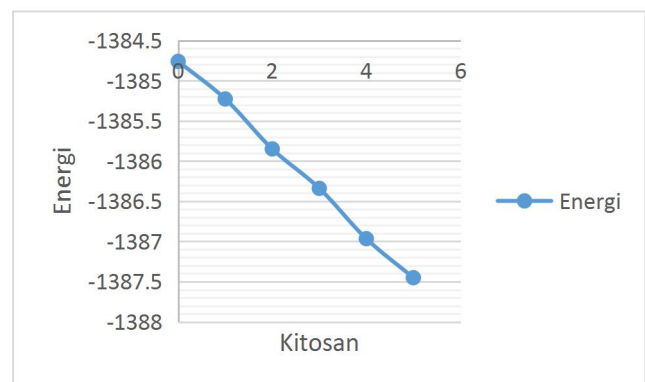
Gambar 19. Orbital Molekul kitosan + $5H^+$ dilihat secara Ecluid dengan aplikasi Gmolden

Analisa Membran Kitosan sebagai Pembawa proton (H^+) pada PEM

Dalam langkah ini akan kembali dianalisa membran kitosan yang telah diukur secara kimia komputasi sebagai pembawa proton (H^+) diperoleh perbandingan energi dari masing-masing polimer kitosan yang ditunjukkan pada tabel di bawah ini.

Tabel 7. Hasil perhitungan energi kitosan

Kitosan	Energi
• Kitosan	• -1384.7601 eH
• Kitosan + H^+	• -1385.2272 eH
• Kitosan + $2H^+$	• -1385.8487 eH
• Kitosan + $3H^+$	• -1386.3393 eH
• Kitosan + $4H^+$	• -1386.9652 eH
• Kitosan + $5H^+$	• -1387.4508 eH



Gambar 20. Grafik perubahan energi kitosan masing-masing penambahan proton (H^+)

Dari data diatas dapat diketahui bahwa bentuk geometri molekul kitosan stabil pada titik energi -1384.7601 eH. Setelah dilakukan

penambahan proton H^+ , $2H^+$, $3H^+$, $4H^+$, $5H^+$, kitosan mengalami perubahan bentuk geometri molekul yang lebih stabil dengan ditandai adanya nilai energi yang lebih kecil. Semakin banyak kitosan mengalami penambahan proton (H^+), energi kitosan semakin menurun dan bentuk geometri molekul menjadi semakin stabil. Hal ini menjelaskan bahwa, kitosan dapat menjadi stabil dan bisa digunakan sebagai penghantar proton (H^+).

KESIMPULAN

Berdasarkan hasil analisis dan perhitungan yang telah dilakukan dapat disimpulkan beberapa hal, yang diantaranya yaitu

1. Dari hasil penelitian diketahui perubahan energi kitosan sebagai membran mengalami penurunan energi dan kitosan menjadi stabil saat membawa proton (H^+), hal ini menandakan bahwa kitosan mampu menggantikan nafion sebagai membran pembawa proton pada aplikasi *Fuel Cell*.
2. Dari hasil perhitungan diperoleh besar energi optimasi dari polimer kitosan adalah -1384.7601 eH dan masing-masing kitosan dengan penambahan H^+ secara berurutan adalah sebesar -1385.2272 eH, -1385.8487 eH, -1386.3393 eH, -1386.9652, dan -1387.4508 menggunakan metode *ab initio*.

3. Dari hasil penelitian diketahui bahwa kitosan dapat berperan baik sebagai membran pembawa proton terbukti dari energinya rendah dan stabil.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] Majsztrik, P. W. 2008. *Mechanical and Transport Properties Of Nafion® for PEM Fuel Cells; Temperature and Hydration Effects*. The Faculty of Princeton University.
- [2] Rayment, C dan Sherwin, S. 2003. *Introduction to Fuel Cell Technology*. Department of Aerospace and Mechanical Engineering University of Notre Dame, IN 46556, U.S.A.