

PENGGUNAAN MONOMER NAFION SEBAGAI PEMBAWA PROTON (H^+) DENGAN METODE TEORI FUNGSI KERAPATAN

Albar Alhabib, Rahmat Gunawan, Saibun Sitorus

Program Studi Kimia FMIPA Universitas Mulawarman
Jalan Barong Tongkok No. 4 Kampus Gunung Kelua Samarinda, 75123

ABSTRACT

Research which has been conducted in this study aims to determine the use of the compound as a Nafion membrane in a Proton Exchange Membrane system (PEM) Fuel Cells which acts as a proton exchange (H^+). After assessment and computational chemistry calculations by calculating the value of energy optimization and molecular orbital energies obtained in the form of the HOMO and LUMO energy. Value calculation is done by using the calculation method of Density Function Theory (density function theory). The analysis showed Nafion energy value of -0.04358×10^{-18} J and Nafion after bringing energy protons (H^+) of -0.07629×10^{-18} J. In this case proved that the PEM system of exchanging protons (H^+) is characterized by the presence of increased energy electron activity.

Keywords : Proton Exchange Membrane, Fuel Cells, Nafion, Proton (H^+), the activity of electrons, density functional theory, the energy of the HOMO, LUMO energy.

A. PENDAHULUAN

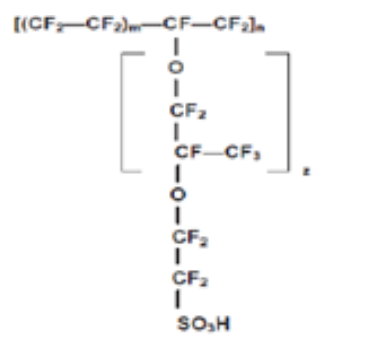
Energi menjadi komponen penting bagi kelangsungan hidup manusia karena hampir semua aktivitas kehidupan manusia sangat tergantung pada ketersediaan energi yang cukup. Untuk itu perlu ada energi alternatif salah satunya PEMFC.

Proton Exchange Membrane Fuel Cell (PEMFC) adalah salah satu energi ramah lingkungan yang sangat menjanjikan dan sedang dikembangkan. PEMFC menjadi sumber energi alternatif untuk *stationary*, *automobile* dan *portable power*.

Salah satu komponen penting yang menentukan kinerja dari fuel cells adalah membran tempat terjadinya pertukaran proton (H^+) perubahan bahan bakar H_2 dan oksigen (O_2 atau udara) menjadi air dan listrik. Komponen yang dimaksud adalah membran polimer. Yang pada prinsipnya sebagai tempat pertukaran proton (H^+) yang dialirkan menjadi ion-ion. Dalam fuel cell membran polimer ditempatkan diantara katoda dan anoda, yang mana membran ini sebagai pemisah antara katoda dan anoda dan pembawa proton (H^+).

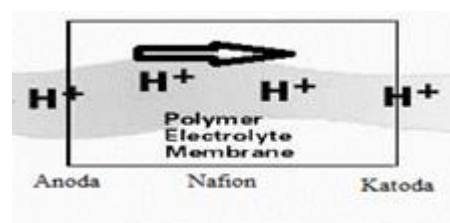
1.1. Nafion sebagai membran pada PEM (Proton Exchange Membrane)

Nafion merupakan polimer yg memiliki sifat-sifat ionik terdiri kerangka fluorokarbon yang bersifat hidrofobik dan gugus sulfonat yang bersifat hidrofilik. Gugus sulfonat merupakan super asam, menjamin kelangsungan transfer proton dari anoda ke katoda sementara kation dan anionnya tidak diizinkan lewat.



Gambar 1. Struktur Nafion (asam poliperfluoro sulfonat ionomer)

Pada PEMFC nafion membawa proton seperti terlihat pada gambar :



Gambar 2. Skema pada PEM

Untuk itu perlu ada kajian secara teoritis tentang monomer Nafion yang berperan sebagai pembawa proton pada PEM dengan lebih menstabilkan dan mengoptimalkan

kinerja dari monomer Nafion secara riset kimia komputasi dan memberikan gambaran yang jelas untuk di lanjutkan ke eksperimen skala laboratoriumnya.

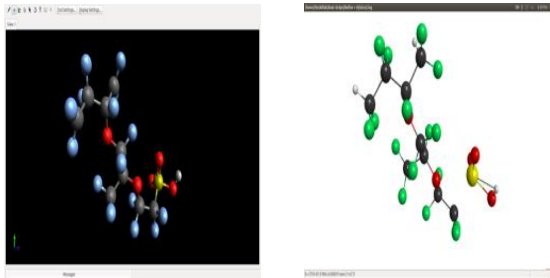
B. METODOLOGI PENELITIAN

Semua perhitungan yang dilakukan pada penelitian ini di kerjakan dengan menggunakan perangkat lunak GAMESS-US dengan menggunakan metode SCFTYP dalam kerangka DFT, dengan pendekatan perhitungan pertukaran energi SVWN dengan MAXIT 90 iteration..

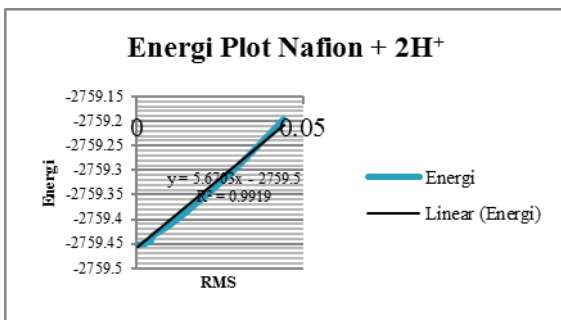
C. HASIL DAN PEMBAHASAN

3.1. Perhitungan Energi afinitas Nafion dan Nafion setelah membawa proton

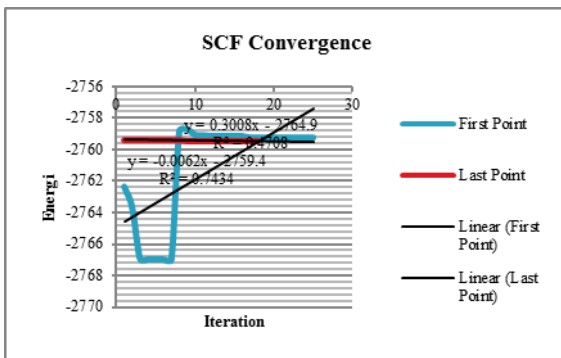
Dilakukan perhitungan energi afinitas elektron sebelum membawa proton (H^+) memiliki energi afinitas -27858.2181 sedangkan setelah terjadi proses pengangkutan proton (H^+) pada aplikasi PEMFC terjadi peningkatan energi afinitas elektron sebesar -2759.4513.



Gambar 3. Struktur Nafion dan Nafion +2H⁺ yang telah teroptimasi oleh GAMESS-US.



Gambar 4. Grafik energi plot Nafion yang telah membawa proton

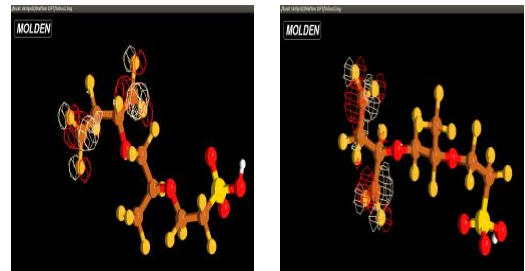


Gambar 5. Grafik SCF Nafion yang telah terkonvergenasi

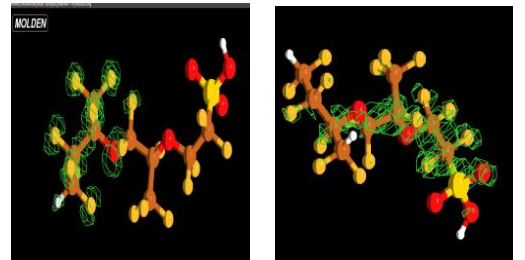
Optimasi dilakukan dengan GAMESS-US yaitu perhitungan hasil konvergensi dari monomer Nafion dan Nafion + 2H⁺. Hasil dari optimasi digunakan untuk divisualisasikan lebih lanjut menggunakan MOLDEN dimana bertujuan untuk menganalisis orbital dan grafik energi struktur monomer Nafion yang sudah teroptimasi.

Dimana pada grafik bahwa energi vs iteration dalam satu frame energi stabil pada iteration 10 hingga 18 pada tiap –

tiap keterulangannya seperti tercantum dalam grafik diatas perhitungan energi vs iteration perpoint ditunjukkan perubahan energi yang signifikan dan monomer nafion yang telah teroptimasi sehingga mencapai keadaan energi yang paling stabil.



Gambar 6. Daerah HOMO dan LUMO pada monomer Nafion



Gambar 7. Daerah HOMO dan LUMO pada monomer Nafion yang telah membawa proton

3.2. Analisa monomer Nafion sebagai membran pada PEM

Dalam langkah ini akan kembali dianalisa membran Nafion yang telah di ukur secara kimia komputasi sebagai pembawa proton (H^+) diperoleh bahwa membran Nafion sebelum membawa proton (H^+) memiliki energi afinitas sebesar -2758,2181 sedangkan setelah terjadi proses pengangkutan proton (H^+) pada aplikasi Proton Exchange Membran Fuel Cell terjadi peningkatan energi afinitas elektron yaitu sebesar -2759,4513. Selanjutnya telah di ketahui energi HOMO-LUMO dalam senyawa Nafion sebesar -0,01000 eH dimana di konversikan dalam bentuk joule menjadi -0.04358×10^{-18} J sedangkan energi HOMO-LUMO dalam senyawa Nafion + 2H⁺ sebesar -0,01750 eH dimana di konversikan dalam bentuk joule menjadi -0.07629×10^{-18} J dalam hal ini selama proses pertukaran

proton (H^+) energi dari senyawa tersebut naik karena terjadinya aktifitas elektron untuk di konversikan. Maka dapat di pastikan bahwa membran Nafion pada Fuel Cell yang berfungsi sebagai tempat pertukaran proton yang

menghasilkan elektron dan H_2O . Aplikasi PEMFC sangat berguna pada kehidupan masa mendatang untuk sebuah alat pembangkit listrik konvensional.

D. KESIMPULAN

1. Dari hasil penelitian diketahui bahwa senyawa Nafion dapat berperan sebagai membran pembawa proton (H^+) terbukti dengan terjadinya proses pertukaran proton pada aplikasi PEMFC dibuktikan dengan adanya daerah HOMO dan LUMO.
2. Dari hasil perhitungan diperoleh besar energi optimasi dari molekul Nafion adalah -2758,2181 dan Nafion +

$2H^+$ adalah sebesar -2759,4513 menggunakan metode DFT (Density Functional Theory).

3. Dari hasil penelitian diketahui kinerja membran polimer Nafion mengalami peningkatan aktifitas elektron oleh sebab itu membran polimer Nafion dapat digunakan sebagai membran polimer pada PEM fuel cells.

DAFTAR PUSTAKA

1. Caretto, L. 2002. Fuel Cell. Mechanical Engineering 694C Seminar in Energy and Policy. California State University Nerthridge. November 13, 2002.
2. Einsla, B. R. (2005). High Temperature Polymers for proton Exchange Membrane Fuel Cells. . Ph. D Thesis Virginia Ploytechnic Institute and State University.
3. Ja'far, M. 2009. "Energynomics" ideologi baru dunia". Jakarta : PT Gramedia Pustaka Utama. ISBN: 978-979-22-5028-2.
4. Paul William Manjsztrik. 2008. Mechanical and Transport Properties Of Nafion for PEM Fuel Cells, Temperature and Hydration Effects. The Faculty of Priceton University.
5. 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.
6. Setiawan, I; Handayani, M; Dwiantoro, I; Irawan, D; Siswayanti, B. 2007. Pemanfaatan teknologi fuel cell sebagai alternative penyediaan energi bersih di Indonesia. Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia. Pusat Penelitian Metalurgi. Volume 22, No. 2.
7. Suhada, H. 2001. Fuel Cell Sebagai Penghasil Energi Abad 21. Jurnal Teknik Mesin, Vol. 3, No. 2, Oktober 2001: 92-100.
8. Wallmark, C. 2004. Design and Evaluation of Stationary Polymer Electrolyte Fuel Cell Systems. Ph.D Thesis; Dept. Of Chem Eng & Tech. Energy Process. Stockholm, Sweden.