

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Saat ini, hampir seluruh pasokan energi dunia berasal dari bahan bakar fosil dan nuklir. Bahan bakar tersebut terbatas dan penggunaannya menyebabkan polusi lingkungan. Peningkatan ketergantungan global terhadap energi dan penurunan jumlah bahan bakar fosil mendorong adanya sumber energi alternatif bersih yang tidak bergantung pada bahan bakar fosil dan menghasilkan lebih sedikit polusi ke lingkungan[2].

Hidrogen merupakan bahan bakar tanpa emisi zat berbahaya. Hidrogen dapat diproduksi dari sumber energi terbarukan seperti elektrolisis air bertenaga surya[3]. Energi yang dilepaskan pada pembakaran hidrogen ($142,9 \text{ kJ g}^{-1}$) lebih besar dari bahan bakar minyak ($47,8 \text{ kJ g}^{-1}$)[4]. Salah satu tantangan terbesar dalam pengaplikasian energi berbasis hidrogen adalah kebutuhan akan cara efektif penyimpanan dan pengiriman hidrogen dengan aman.

Dari semua metode, penyimpanan hidrogen dengan menggunakan molekul supramolekular, seperti kerangka logam-organik dan klatrat hidrat, mempunyai ketertarikan lebih. Pada metode ini, hidrogen sebagai molekul tamu berikatan dengan interaksi van der Waals dengan marial penyimpan. Ikatan seperti itu dapat dengan mudah dimanipulasi dengan perlakuan panas dan mekanik secara sederhana.

Hidrogen klatrat hidrat merupakan senyawa supramolekular yang terdiri dari molekul hidrogen yang terperangkap dalam jaringan air yang dihubungkan dengan ikatan hidrogen. Dua tipe hidrat hidrogen yang stabil pada T, p tinggi dengan kapasitas H_2 banyak adalah C1 dan C2. Rasio molar maksimum hidrogen: air pada C2 adalah 1:1[5].

struktur C2 dapat dibangun dari es VII dengan menghilangkan salah satu subkisinya. Sama halnya, es VI juga terdiri dari 2 subkisi yang saling tumpang tindih. Ruang kosong yang dapat ditempati hidrogen bisa didapatkan dengan menghilangkan salah satu subkisi dari es VI, sehingga struktur tersebut disebut es VI/2. Dibandingkan dengan es VII, es VI berada pada daerah tekanan rendah dalam diagram fasa. Namun demikian, kemungkinan untuk menghasilkan material

ini belum dilaporkan, sehingga ini menjadi subjek investigasi dengan cara mengevaluasi okupansi dan stabilitas dari struktur baru tersebut. Stabilitas dari senyawa metana klatrat hidrat telah diterangkan dengan baik oleh teori vdWP [6]. Dalam penelitian ini, okupansi hidrogen dalam es VI/2 diselidiki dengan mengevaluasi energi Helmholtz okupansi. Stabilitas dari struktur tersebut dikuantifikasi sebagai potensial kimia menggunakan teori vdWP.

1.2 Rumusan Masalah

1. Bagaimana perubahan energi Helmholtz okupansi dari molekul hidrogen dalam struktur es VI/2 sebagai fungsi dari T, p ?
2. Bagaimana okupansi molekul hidrogen dalam struktur es VI/2 hasil prediksi menggunakan teori van der Waals-Platteuw ?

1.3 Batasan Masalah

1. Sistem diasumsikan mematuhi mekanika klasik.
2. Hidrat dari struktur es VI/2 diasumsikan stabil secara mekanik pada temperatur dan tekanan yang dipelajari.

1.4 Tujuan Penelitian

1. Mengevaluasi tren perubahan energi Helmholtz okupansi dari molekul hidrogen dalam struktur es VI/2.
2. Mengevaluasi tingkat okupansi gas hidrogen dalam struktur es VI/2 menggunakan teori van der Waals-Platteuw.

1.5 Manfaat Penelitian

Tujuan dari penelitian ini adalah menghitung energi Helmholtz, memprediksi okupansi molekul hidrogen, dan menjelaskan kemungkinan struktur hidrat hidrogen baru dapat disintesis dan digunakan sebagai material penyimpan hidrogen.