## Repository I Repository Universitas Brawijava Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Braw Investas animiara Universitas da SKRIPSI atas pawilara. Onivestas pawilara IVers Jniveršitas Brawijaya , Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya Inversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya) Universitas Brawijaya) Universitas Brawijaya Jm/e/sitas:Brawijaya LUnive/sitas:Brawijaya;Unive/sitas:Brawijaya;(Universitas:Brawijaya) IV 🛾 🚺 oleh: rsitas Brawijava Universitas Brawijaya Muhammad Ruslan Novianto and Appression Brawlaye

165090200111009

Jnversitas Brawijaya | Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya IV

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya

wijaya

vijaya wijaya

wijava

awijaya

awijaya awijaya

avijava

wijaya

wijaya wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya vijaya

wijaya

8.AC.ID

uhversitas Brawijaya Lunivaysitas Brawijayo DBvarsitas Brawijayo Universitas Brawijaya (UCE''S Inversitas Brawijaya Universitas JURUSAN KIMIA Brawijaya Universitas Brawijaya FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM **UNIVERSITAS BRAWIJAYA** 

mversitesBH500Jaya UNNA/strasBH200Ja 2020NA/stras)62awijaya OQNA/SH4CBr30vijaya I Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Iniversitas Brawijaya , Universitas Bra MALANG sitas Brawijaya , Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

ava dinnersitäs Brawijava IVErs a Onversitas Brawijava IVers

Universitas Brawijaya Myersitas Brawlaya ivers UVerSitas Brawijava IVerS

oiversitas Brawijaya ivers

Conversitas Brawijaya IVErs

the states of the second states and the second states of the second stat

diniversitàs Brawijaya ivers Dhivershis Brawijaya IVErS

ava Universitas Brawijaya ivers

Brawijaya Onverstas Brawilava IVErs

Brawijava Universitas Brawijava

Inivers

#### UnNerstas Bravifaya Universitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) IVers Inversional Broken Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dalam bidang Kimia

Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII

Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brav

Universita State SKRIPSI sites Bawijaya Universita Strawilaya IV ers

Repository Universitas Brawijaya

oleh: **Muhammad Ruslan Novianto** 165090200111009



Universitas Brawflaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya IVErs Jin Versitas Bravijaya Universitas **JURUSAN KIMIA** Brawijaya Universitas Brawi FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

**UNIVERSITAS BRAWIJAYA** 

Iniversitas Brawijaya , Universitas Bra MALANG sitas Brawijaya , Universitas Brawijaya Inversites Brawijaya Uhiversitas Brawija 2020 Versites Brawijaya. Ohiversitas Brawijaya I Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

ers Repository Univers **Repository Univers** Repository Univers

Repository

unversitas Brawijava Ivers

liversitas.Brawijaval IVers

niversitas Brawijaya

Conversitás Brawijalya IVErs

Universitas Brawijava IVErS

duniversitas Brawijaya ivers inversitäs Erawijaya IVers

Universitas Brawijaya ivers

ersitas Brawijaya IVers GVerStacBrawnaya IVers

ivers

Inivers

wijaya wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya vijaya wijaya

wijaya

awijaya awijaya

awijaya

avijava

wijaya wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya vijaya

wijaya

#### LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

#### Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII

oleh: Muhammad Ruslan Novianto 165090200111009

Setelah dipertahankan di depan Majelis Penguji pada tanggal 2 juli 2020 dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains dalam bidang Kimia

Pembimbing I

Dr. Diah Mardiana, MS NIP. 196305291991032002 Pembimbing II

Dr. Ir. Uswatun Hasanah, M.Si. NIP. 195510251986032002

RESTAS Mengetahui, Jur)san Kimia niversitas Brawijaya NIP. 197310292002121001

ii

Repository Universitas Brawijaya Repository Universita

B.AC

#### Repository Universitas Brawijaya

LEMBAR PERNYATAAN

niversitas Brawijaya, Universitas Brawi

Cepository (

Universitas Brawijava (Universitas Brawilava IVers

Inivers

ers

vers

ers

Wersitas Brawilava IVErS

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : **Muhammad Ruslan Novianto** NIM : **165090200111009** Jurusan : **Kimia** 

Penulis skripsi berjudul: Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII

Dengan ini menyatakan bahwa:

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya wijaya

wijaya

8.AC.ID

. Isi dari skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain namanama yang termaktub di isi dan tertulis di daftar pustaka dalam skripsi ini.

2. Apabila di kemudian hari ternyata skripsi yang saya tulis terbukti hasil jiplakan, maka saya akan bersedia menanggung segala risiko yang akan saya terima. Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, 2 Juli 2020 Yang menyatakan,

Muhammad Ruslan Novianto 165090200111009

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

# ABSTRAK

Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII

rsitas Brawijaya, Universit

aya Universitas Bravijay Bunversitas Bravij

srawiiava

niversitas

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

vijava

wijaya

wijaya Mjaya

wijaya

wijaya wijaya

awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya

wijaya wijaya wijaya wijaya Difusi molekul hidrogen di dalam es XVII merupakan sifat yang menarik dari hidrat-hidrogen untuk diselidiki lebih lanjut pada tingkat molekuler. Dalam penelitian ini, simulasi dinamika molekuler dilakukan untuk menyelidiki dinamika dan menganalisis secara kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII menggunakan metode *Mean Square Displacement* (MSD) dan analisa distribusi sudut. Hasil simulasi menunjukkan bahwa difusi molekul hidrogen di dalam es XVII teramati. Molekul hidrogen yang terletak di dalam terowongan spiral es XVII, sepanjang sumbu z, berdifusi sepanjang terowongan pada kondisi okupansi maksimum dengan nilai difusi maksimum ( $D_0$ ) 1.85 ×  $10^{-8}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>. Orientasi molekul hidrogen di bidang *xy* bersifat bebas atau tak-tentu, sedangkan pada sudut  $\theta$  molekul hidrogen cenderung terdistribusi di sekitar sudut  $\frac{\pi}{2}$ .

Kata kunci: Simulasi dinamika molekuler, Hidrat-hidrogen , Es XVII, Difusi

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

# ABSTRACT

**Diffusion of hidrogen Molecules in filled Ice XVII** 

⊰rawiiava

niversitas t

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijava

wijaya Mjaya

vijava

wijaya wijaya

awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya

wijaya wijaya wijaya wijaya

WHE

The diffusion of hidrogen molecules in filled ice XVII is an interesting property of hidrogen-hydrates for further investigation at the molecular level. In this study, molecular dynamics simulation conducted to investigate dynamics and quantitatively analyze orientation of hidrogen molecules in filled ice XVII using Mean Square Displacement (MSD) method and angular distribution analysis. The simulation results show that the diffusion of hidrogen molecules in ice XVII was observed. hidrogen molecules located in the ice XVII spiral tunnel, along the zaxis, diffuse along the tunnel under full occupancy conditions with a maximum diffusion value ( $D_0$ ) of  $1.85 \times 10^{-8}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>. The orientation of hidrogen molecules in the *xy* plane is free or indeterminate, whereas at the angle of  $\theta$  hidrogen molecules tend to be distributed around the angle of  $\frac{\pi}{2}$ .

#### Keywords: Molecular dynamics simulation, hidrogen-hydrates, Ice XVII, Diffusion

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

ivers ivers ivers ivers ivers ivers ivers ivers

Repository Univers

Repository Univers

Repository Univers

#### KATA PENGANTAR

niversitas Brawilava

Puji syukur kami sembahkan ke hadirat ALLAH SWT karena atas segala limpahan rahmat dan karunia-Nya, penulis dapat menyelesaikan penyusunan skripsi yang berjudul "Difusi Molekul Hidrogen di dalam Es XVII". Skripsi ini digunakan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana dalam bidang ilmu kimia di Universitas Brawijaya Malang. Manusia adalah makhluk sosial dan penuh keterbatasan sehingga membutuhkan bantuan dari orang lain. Begitu pula dalam penulisan dan penyelesaian skripsi ini yang tidak dapat terlaksana tanpa bantuan dari pihak-pihak yang terkait. Oleh karena itu tidak lupa penulis mengucapkan terima kasih kepada:

1. Dr. Diah Mardiana, MS selaku Dosen Pembimbing I dan Dr. Ir. Uswatun Hasanah, M.Si. selaku Dosen Pembimbing II yang telah meluangkan banyak waktu untuk memberikan ilmu, arahan, bimbingan, dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.

vijava

- 2. Dr. Tutik Setianingsih, M.Si. selaku Dosen Penasehat Akademik yang selama masa studi telah memberikan arahan dan nasehat.
- 3. Dr.Sc. Lukman Hakim yang telah memberikan ilmu, arahan dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.
- 4. Prof. Dr. Warsito yang telah memeberikan masukan dan saran dalam pengerjaan penelitian ini.
- 5. Bapak dan Ibu dosen Jurusan Kimia Universitas Brawijaya yang telah memberikan ilmu selama perkuliahan.
- 6. Irwansyah Putra Pradana, M.Si dan Ravi Mahesta, S.Si yang telah meluangkan banyak waktu dan membantu dalam pengerjaan penelitian ini.
- 7. Segenap keluarga, sahabat, dan teman-teman yang telah memberikan dorongan sehingga skripsi ini dapat selesai.

Malang, 2 Juli 2020

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers Repository Univers Repository Univers

nivers

sitorv

		Repository Universitas Brawijaya Repository Univ	ers
-D	awijaya awijaya	universitas Brawijaya   universitas Brawijaya universitas Brawijaya   universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya   Universitas Bravijaya   Diretsitas Brawijaya   Universitas Brawijaya   W	ers
ac.i	avijaya	URVersites Brawlaya Universitas Bravilaya Pavaraitas Brawijaya Universitas Brawlaya iv	ers
ıb.â	wijaya	Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Oniversitas Brawijaya IV	ers
ry.t	avijaya zvijava	HALAMAN JUDUL	ers
itol	wijaya	HALAMAN PENGESAHAN Universitas Brawinsta, Universitas Brawii ye	ers
SOC	awijaya awijaya	HALAMAN PERNYATAANiii	ers
rel	awijaya	Univers ${f ABSTRAK}$ Universitias Brawilaya, Universitas Brawilaya, Universitas Brav ${f iV}$ iya	Arc
	awijaya awijaya		are
	awijaya	KAIA PENGANIAK	ora Iora
AS	awijaya	DAFTAR GAMBAR	013
SIT	awijaya	DAFTAR TABEL	ers
ER	avujaya	Universitas Brawija antiversitas Brawijaya Universitas Brawijaya	ers
	awijaya awijaya	Un I ere <b>PENDAHULUAN SABB</b> AW I avaitate Braw 1 value i avaitate Braw 1 value i avaitate Braw 1 value i avaitate Brawijava	ers
5	awijaya	Universited Latar Belakang	ers
	awijaya	1.2 Perumusan Masalah	ers
	awijaya	1.5 Datasan Wasalan	ers
	awijaya	1.5 Manfaat Penelitian	ers
	awijaya	Reputersitas Brawijaya Reputersitas Brawijaya	ers
	Avijaya	II TINJAUAN PUSTAKA	ers
	awijaya Svijava	University 2.1 Hidrat Klatrat	ers
	avijaya	2.2 ES II dan ES AVII	ers
	nvijaya Avijaya	2.4 Mean Square Displacement	ers
	pvijaya	2.5 Distribusi Sudut	arc
	awijaya	Universitas Bravijava Universitas Bravijava awijava Universitas Bravijava	arc
	awijaya awilaya	III METODE PENELITIAN 9	oro
	awijaya	3.1 Tempat dan Waktu Penelitian	013
5	awijaya awijaya	3.3 Tahanan Penelitian 9	ers
	awijaya	3.4 Prosedur Kerja	ers
AY	awijaya	3.4.1 Model Potensial dan Konfigurasi Awal 10	ers
	awijaya	3.4.2 Detail Komputasi	ers
AW	awijaya	unversities at 3.4.3 Analisis data	ers
BR	awijaya	IV HASIL DAN PEMBAHASAN	ers
	awijaya	4.1 Dinamika molekul hidrogen di dalam es XVII	ers
Con	awijaya	4.2 Analisis kuantitatif orientasi molekul hidrogen di da-	ers
	awiiava	Repositames XVII/ersitas Brawijaya Repository16/niv	ers
í		Repository Universitas Brawijaya Repository Univ	ers
	ACIE	Repository Universitas Brawijaya Repository Univ	ers
	60		

	Repository Universitas Brawijaya	Repository Univers
awijaya	universitas Brawijaya i universitas Blawijaya universitas Brawij Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawij	aya, universitas Brawijaya ivers
<b>S</b> vijaya	Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawij	avRemonstate previous nivers
<b>e</b> awijaya	V KESIMPULAN DAN SARAN	aya Universitas Bravilaya aya ChiverStas Brawilaya ivers
n. havijaya	$5.1$ Kesimpulan $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$	aya, Universitas BrayliZya ARGOLOSIACHAALOIVERS
to avijava	Universitas Brawijava   Universitas Brawijava Universitas Brawij	ave Universitas Brawijaya ivers
SOC awijaya	DAFTAR PUSTAKA	aya Universitas Brawijaya ava Universitas Bray Tava ivers
<b>e</b> awijaya	Universitas Brawijava - Universitas Brawijaya, Universitas Brawij	aya, Universitas Brawijaya
awijaya avijaya	UN DAMPIRAN a Conversitas Brawijaya Universitas Brawij Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya Universitas Brawij	aya Universitas Brawijaya ivoro
awijaya	A Persamaan Lorentz-Berthelot	aya Universitas Brawijaya
Seawijaya	1.1 Persamaan Lorentz	ave. Universitas Bra 21 va
	1.2 Persamaan Berthelot	aya Universitas Braviaya IVCI 3 ava Aniversitas Bravilaya in oro
awijaya	B. File perometer simulasi (mdn)	aya Universitas Brawijaya
Zawijaya	Daiversitas	aya, Universitas Brawijaya
	C Data koefisien difusi	A Universitas Brawijava IVEIS
awijaya	3.1 Data Koefisien difusi $(D_z)$	
awijaya	3.2 Data ln koefisien difusi $(\ln(D_z))$	Nerostas Prav24 va IVers
awijaya	<b>D</b> Perhitungan difusi maksimum $(D_0)$ dan ene	rgi aktifasi (0) 25
awijaya	Apositor y Un anshash awijaya	niversitas Brawijaya IVERS
avijaya wijaya	Prepository Unmercials Incawijaya	Universitas Brawijaya IVERS
evijaya	Recository Ungersiat Bawijaya	A operation of the second seco
avijaya	Rversiository University Brawijaya	a Universitas Brawijaya ivers
avijaya	Restectory Universitat Brawijaya	Ave Universitas Brawijaya ivers
awijaya	Repair ory Universitas Brawijayawi	aya epversitas Brawijaya ivers
awijaya awijaya	universitas Bravita, Universitas Bravita, Bravit	aya Universitas Brawijaya ivers
awijaya	Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawij	ava Universitas Brawijaya ivers
avvijaya	Universites Brawijaya Universites Brawija	Repositorywiaknivers
S <sup>awijaya</sup>	Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya, Universitas Brawij Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya-Universitas Brawij	aya Universitas Brawijaya <b>ivers</b> aya Universitas Brawijaya <b>ivers</b>
awijaya	Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya Universitas Brawij	ave deliversites Brawijaya ivers
		aya Onversitas Brawijaya
	Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - Universitas Brawij Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - Universitas Brawij	aya, Universitas Brawijaya aya Guwersitas Brawijaya <b>iVEIS</b>
	Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya Universitas Brawij	ave Epiversitas Brawijaya ivers
awijaya	universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawij Universitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) Universitas Brawij	aya Universitas Brawijaya aya Universitas Brawijaya ivers
awijaya	Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawij	aya, Universitas Brawijaya
awijaya	Repositor Rewijava Universitas Rewijave Universitas Rrawij Repository Universitas Rrawijave Universitas Rrawijava	Repository Univers
<u> (1772)</u> (1	Repository Universitas Brawijaya	Repository Univers
CID	Repository Universitas Brawijaya	Renaeitary Univers
IB.A	Repusitory Universitas Drawijaya	Repository Univers

		Repository Universitas Brawijaya Repository Unive	ers
	awijaya	miversītas Brawijava - Universītas Brawijava Universītas Brawijava - Universītas Brawijava - Universitas - Universit	ers
c.i	nvijaya		ers
b.a	atvijaya	Iniversitas Brawijaya , Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya , Universitas Brawijaya , Iniversitas Brawijaya , Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya , Universitas Brawijaya <b> V(</b>	ers
y.u	avijaya	niversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	ers
tor	wijaya	2.1 Hidrat-klatrat (a) struktur-I, (b) struktur-II, dan (c) struktur-	are
osi	awijaya	Iniversitas Br $_{ m H}$ ijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawi $_5$ va	oro
rep	awijaya	2.2 Struktur (a) es II dan (b) es XVII 6	513
	avcijaya	2.3 Koordinat bola $(r, \theta, \phi)$	315
	awijaya	3.1 Konfigurasi awal molekul hidrogen di dalam es XVII	ars
S	awijaya	(a) pada bidang xy dan (b) pada bidang yz	ers
ZTI:	awijaya	Inversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	ers
R	awijaya awijaya	4.1 Mean square displacement untuk perpindahan mole-	ers
	awijaya	Hyperstarts kul hidrogen yang searah (a) sumbu $x$ , (b) $y$ , dan (c) $z$ Brawijaya (V	ers
	awijaya Jawijaya	dalam struktur es XVII dan (d) untuk es II	ers
	awijaya	4.2 Koensien unusi ternadap sunidu $z$ ((a) $D_z$ dan (b) $m(D_z)$ ) 15 4.3 Distribusi sudut molekul hidrogen yang terdiri dari:	ers
	awijaya	sudut $\theta$ (a) dan $\phi$ (b)	ers
	awijaya awijaya	Repostory University Stavijava Repostacirawijava	ərs
	awijaya	Repository Unicersites Brawijava Repositat Brawijava	ers
	awijaya	Avenository Unmersitas Requiava Requestas Brawijava	ers
	wijaya	Ranository Universitas Brawijaya	ans
	avijaya	Rivers sitory Ungerstas Rrawijaya	arc
	evijaya avijaya	hiversite ait on Universite Brawijaya	are
	ivijaya	Iniversitas Iniversitas Brawijaya Jaya Universitas Brawijaya	ore
	awijaya	Iniversitas Brown y OTITVETSILAS DI AVVIJA vowijava Universitas Brawnavali V a Avijava Universitas Brawnava Universitas Brawnava	513 oro
	awijaya	Inversitas Brawi, Volumenta Status Diavarsitas Brawijaya Universitas Brawijaya IV	315
AS	awijaya	Iniversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	ers
	awijaya	/ht/ersites Brawijaya Uhive/sitas Brawijayo Uhive/sitas Brawijaya (Uhive/sitas Brawijaya) [V( Iniversitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya -	ers
	awijaya	hiversitas Brawijaya Uhiversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Dhiversitas Brawijaya IV	ers
AV.	awijaya	intversitas Brawijava   Universitas Brawijava Universitas Brawijava) Universitas Brawijava   V( Iniversitas Brawijava   Universitas Brawijava Universitas Brawijava   Universitas Brawijava	ers
TJJ/	awijaya	n Verstras Brawiaya Universitas Brawijaya Delversitas Brawijaya Universitas Brawijaya IV (	ers
<b>AW</b>	awijaya	niversitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya IV(	ers
3R	awijaya awijaya	Iniversitas Brawijaya   Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya   Universitas Brawijaya	ers
	awijaya	Register Braviaya Universita Bravia Braversitas Bravia Reprositas Bravia Internation IVE	ers
( the second	awijaya awijaya	iniversītas Brawijāva - Universītas Brawijava - Universītas Brawijava - Universītas Brāwijava - Iniversītas Brawijava - Universītas Brawijava Universītas Brawijavā - Universītas Brawijava - IVE	ers
	awilava	Repository Universitas Brawilava Iniversitas Reawilava Iniversitas Repository Universitas Brawilava	ers
	New	Repository Universitas Brawijava Repository Universitas	ers
	AC ID	Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas	ers
	8.4	Toposioly onitololido bidnijuya – roposioly onito	010

## DAFTAR TABEL atvijaya Jhversites Brawijaya UnNersitas Brawijaya Universites Brawijaya, Otiversitas Brawijava IV ers 3.1 Parameter model molekul air TIP4P/Ice (Transferable Intermolecular Potential with 4 Points) dan model molekul hidrogen badan tegar linier (linear rigid body). . 10 Iniversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya wijaya wijaya wijaya

Jm/e/sitas:Brawijaya LUnive/sitas:Brawijaya;Unive/sitas:Brawijaya;(Universitas:Brawijaya) IV 🛾 🚺

Universitas Bravijava, Universitas Bravijava, Universitas Bravijava

Iniversitas Brawijav

Redository

wijaya wijaya

wijaya

wijaya Vijaya

wijaya wijaya

awijaya awijaya awijaya

avijava

wijaya

8.AC.ID

wijaya wijaya Universitas Brawflava Universitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) wijaya wijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya wijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya wijaya wijaya wijaya wijaya wijaya Jiniyersitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya)

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya itas Brawijaya) Universitas Brawijaya awiiava (Universitas Brawijava) IV Inversitàs Brawijaya IVERS liverStas Brawilava IVers Cintwersitas Brawijaya IV the states of the second states and the second states of the second stat diniversitàs Brawijaya ivers universitas Brawijaya) Universitas Brawijaya

epository

Inversitas Brawijaya Uhiversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Ohiversitas Brawijava Repository Univers

Repository Univers Repository Univers

## PENDAHULUAN

niversitas Brawijava

Universitas Brawit BAB Iversitas B

#### 1.1 Latar Belakang

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya ⊮ijaya

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

vijaya

wijaya

wilaya

wjaya

vijaya

ACID

Pada temperatur dan tekanan tinggi, molekul air dan molekul gas lainnya diketahui dapat ditransformasikan menjadi fase padatan yang disebut sebagai hidrat. Hidrat dapat dibagi menjadi dua jenis, yaitu hidrat-klatrat dan es yang terisi (filled ice) [1]. Pada hidrat-klatrat, molekul air membentuk sangkar polihedral dengan ikatan hidrogen dan guest molecule akan terperangkap di dalam sangkar tersebut [2]. Guest molecule adalah molekul yang dimasukkan ke dalam sangkar molekul air, contoh guest molecule adalah gas metana, gas hidrogen, dan molekul gas lainnya. Tidak ada ikatan kimia antara guest molecule dan molekul air, karena struktur hidrat-klatrat hanya dipertahankan dengan adanya interaksi van der Waals yang lemah [3]. Hidrat-klatrat adalah bahan yang ramah lingkungan untuk penyimpanan molekul gas ringan di bawah kondisi temperatur dan tekanan tertentu [4]. Salah satu guest molecule yang yang dapat terperangkap di dalam sangar tersebut adalah molekul hidrogen. Hidrat-klatrat dapat menampung hingga 4% dari berat molekul hidrogen, tetapi aplikasinya untuk penyimpanan molekul hidrogen terhalang oleh laju difusi molekul hidrogen yang lambat di dalam sangkar air [5], karena itu difusi molekul hidrogen dapat menjadi penting untuk efisiensi penyimpanan molekul hidrogen [1]. Dimana dari difusi tersebut dapat mengetahui dinamika molekul hidrogen dan dapat mengetahui arah gerak molekul hidrogen di dalam es atau hidrat-klatrat [3].

Dalam studi sebelumnya, simulasi komputer telah dilakukan untuk mendapatkan okupansi maksimum molekul hidrogen di dalam es XVII menggunakan metode GCMC (*Grand Canonical Monte Carlo*). Hasil yang diperoleh menunjukkan bahwa pada kondisi okupansi maksimum terjadi pada tekanan 2,5 GPa dan temperatur 170 K [6]. Okupansi yang dimaksud adalah rasio molekul hidrogen terhadap molekul air, dimana rasio antara molekul hidrogen dan molekul air 1:2 [7]. Keterbatasan instrumen dan metode eksperimen yang tepat menjadi tantangan dalam menginvestigasi dinamika molekul hidrogen di dalam jaringan es, sehingga simulasi dinamika molekuler menjadi alternatif

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers

vers

SILON

## Repository Universitas Brawijaya Repository

untuk menjawab tantangan tersebut. Melalui simulasi dinamika molekuler, Harada dkk. [1] telah melaporkan bahwa molekul hidrogen di dalam es II tidak dapat berdifusi pada okupansi maksimum, tetapi molekul hidrogen berdifusi secara cepat apabila terjadi kekosongan satu molekul hidrogen di dalam struktur es II. Penelitian yang dilakukan oleh del Rosso dkk [5] secara eksperimen melaporkan bahwa es XVII mempunyai sifat yang menarik yaitu kemampuannya untuk mengadsorpsi molekul hidrogen dengan sangat cepat bahkan pada tekanan yang sangat rendah. Oleh karena itu, molekul hidrogen sangat mungkin berdifusi di dalam es XVII. Sehingga pada penelitian ini dilakukan studi sistematik terhadap dinamika molekul hidrogen di dalam struktur es XVII pada tingkat molekuler.

#### 1.2 Perumusan Masalah

epository.ub.ac.i

- 1. Bagaimana dinamika molekuler molekul hidrogen di dalam es XVII ?
- 2. Bagaimana orientasi sudut molekul hidrogen di dalam es XVII ?

## 1.3 Batasan Masalah

- Penelitian ini menggunakan metode simulasi dinamika molekuler, sehingga sistem menggunakan mekanika klasik.
- Penelitian ini menggunakan variasi temperatur 170, 190, 21 230, 250, dan 273 K dengan tekanan tetap 2.5 GPa.
- 3. Analisis yang dilakukan adalah MSD (*mean square displacement*) dan distribusi sudut molekul hidrogen.

### 1.4 Tujuan Penelitian

- I. Menyelidiki dinamika molekul hidrogen di dalam es XVII.
  - Menganalisis secara kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

nivers

#### niversitas ≤rawiia∖ SILOU

#### **Manfaat Penelitian** 1.5

Manfaat dari penelitian ini adalah mengetahui dinamika senyawa hidrat-hidrogen struktur es XVII sebagai material novel untuk penvimpanan bahan bakar hidrogen.

Universitas Bowijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijay

wilaya wijaya Jnversitas Brawijaya LUfive/sitas Brawijaya Ufive/sitas Brawijaya (Ufiversitas Brawijaya IVers wilaya wijaya wijaya wijaya Mjaya wijaya

wijaya wijava awiiava awijaya awijaya **S**vijava

ivijava

wijaya awijaya wijaya wijaya wijaya wijaya wilaya Wjaya

wijaya wijaya

B.ACID

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

iava annersitäs Brawijava IVers Inversitàs Brawijaya ivers RiverStasBrawitava Vers Cintversitas Brawijaya IV 0 filversita Strawnava IVers duniversitás Brawijaya ivers universitas Brawijaya) Universitas Brawijaya iv Universitas Biawflave Universitas Brawijava Oniversitas Brawijava

ers

Universitas Brawijava) Universitas Brawijava) Universitas Brawijava Repository Univers

Repository Univers Repository Univers

nvijaya

#### TINJAUAN PUSTAKA

niversitas

University BAB II

#### 2.1 Hidrat Klatrat

vilaya

wijaya wijaya wijaya

wijaya wijaya

Hidrat-klatrat adalah material yang terdiri dari struktur kristal air dan *guest molecule* yang membantu menstabilkan strukturnya [8]. Hidrat-klatrat merupakan struktur kristal non-stoikiometrik dimana *guest molecule* dikurung di dalam struktur polyhedral air yang terikat dengan ikatan hidrogen [9]. Tergantung pada geometri struktur, konektivitas, kondisi termodinamika, ukuran dan gas pembentuk hidrat, hidrat-klatrat di alam diketahui memiliki tiga struktur berbeda yaitu: struktur-I (sI), struktur-II (sII), dan struktur-H (sH) [10]. Hidrat-klatrat adalah sejenis bahan yang ramah lingkungan yang dapat menyimpan molekul hidrogen di bawah kondisi tekanan dan temperatur tertentu [11]. Hidrat-klatrat berpotensi sebagai bahan penyimpan molekul hidrogen karena dapat menyimpan molekul hidrogen pada kerapatan yang relatif tinggi, memiliki keunggulan reversibilitas, biaya murah, dan tidak membahayakan lingkungan [12].

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers

Repository Univers

Repository Univers



Gambar 2.1. Hidrat-klatrat (a) struktur-I, (b) struktur-II, dan (c) Vers struktur-H

#### T 2.2 ES II dan Es XVII - Fravilave Universitas Brawijave Universitas Brawijave j Inversitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava

wijaya

wijaya

wijaya

wijaya

wfiaya

wijaya

wijaya wijaya

8.ACID

Es II adalah es hasil sintesis dari es Ih pada temperatur 198 K dan tekanan 300 MPa atau dengan mendekompres es V pada temperatur 238 K. Es II memiliki susunan ikatan hidrogen yang teratur dimana hal ini berlawanan dengan es lainnya. Pada pemanasan menuju titik lelehnya, es II berubah menjadi es Ih, III, V, atau VI [13]. Sedangkan, es XVII merupakan es hasil sintesis dari Struktur C<sub>0</sub> yang berisis gas

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers Repository Univers

## Repository Universitas Brawijaya Repository Univers

hidrogen yang dilepaskan dengan melakukan pemanasan dalam keadaan vakum selama sekitar satu jam pada temperatur 110-120 K [14]. Es XVII adalah es metastabil jadi tidak terdapat dalam diagram fase es [5]. Sifat es XVII yang tidak terduga adalah ketika terpapar gas hidrogen bertekanan rendah, es XVII menyerap molekul hingga jumlah tekanan yang diberikan pada sistem [15]. Es II dan es XVII mempunyai terowongan yang dapat diisi gu-

Es II dan es XVII mempunyai terowongan yang dapat diisi *guest molecule* yang salah satunya adalah molekul hidrogen. Perbedaan terowongan es II dan es XVII yaitu es II memiliki terowongan yang memanjang searah sumbu z yang menyerupai silinder, sedangkan es XVII memiliki terowongan berbentuk spiral.





Brawijava ivers Brawijava ivers

ers

ivers

vers

vers

Brawilaya IVerS

Gambar 2.2. Struktur (a) es II dan (b) es XVII

Universitas Brawija (b)

#### 2.3 Simulasi Dinamika Molekuler

(a)

Dinamika molekuler adalah metode simulasi komputer dimana atom dan molekul berinteraksi dalam jangka waktu tertentu. Simulasi dinamika molekuler menghasilkan konfigurasi atau trajektori vektor dari atom dengan menyelesaikan persamaan gerak klasik untuk sistem sebanyak N atom yang berinteraksi melalui fungsi potensial V ( $r_1$ , ...,  $r_N$ ). Persamaan 2.1 merupakan gerak hukum Newton:

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers Repository Univers Repository Univers

## dimana $F_i$ adalah gaya partikel ke-i dan didapatkan dari:

Iniversitas Brawilava

# $F_i = - \bigtriangledown_i V(r_1, \dots, r_N)$

Banyak percobaan di dalam laboratorium dilakukan pada temperatur dan tekanan konstan, sehingga kondisi isotermal-isobarik umum nya digunakan untuk memproduksi hasil simulasi dinamika molekuler. Pada kondisi ini temperatur sistem dikendalikan, sehingga dapat disesuaikan untuk mengontrol tekanan. Kontrol tekanan dalam simulasi dinamika molekuler terdapat dua macam, yaitu tekanan isotropik dan tekanan anisotropik. Tekanan isotropik memungkinkan bentuk sel simulasi tetap dan tekanan anisotropik dapat merubah bentuk sel silasi [16].

#### 2.4 Mean Square Displacement

DOSITORY L

Ujaya

iljaya /ilaya

wijaya wijaya

fiava

Keadaan fluida dapat dibedakan dari keadaan padat dengan melihat laju dimana molekul berdifusi melalui sistem, yang diukur dengan koefisien difusi, D. Untuk menentukan koefisien difusi  $D_A$  dari partikel tipe A, hubungan Einstein dapat digunakan [16]:

$$\lim_{i \to \infty} \langle |\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(0)|^2 \rangle = 6D_A t$$

Untuk molekul yang terdiri dari lebih dari satu atom,  $r_i$  dapat diartikan sebagai posisi pusat massa molekul.

#### 2.5 Distribusi Sudut

Analisis kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII dinyatakan dalam bentuk distribusi sudut molekul hidrogen dimana perhitungan distribusi sudut didasarkan pada perhitungan sudut di dalam sistem koordinat bola,  $(r, \theta, \phi)$ . Karena molekul hidrogen dimodelkan sebagai badan tegar linier (*linear rigid body*) maka sudut  $\theta$ dapat menggambarkan orientasi molekul hidrogen terhadap sumbu z, dimana perhitungan pada sumbu z adalah penentuan sudut antara sumbu z dan ikatan pusat posisi massa molekul hidrogen dengan salah satu hidrogen atom. Sementara itu sudut  $\phi$  menggambarkan orientasi molekul hidrogen terhadap bidang yang tegak lurus dengan sumbu z, yang

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

(2.3)

vers

## Repository Universitas Brawijaya Repository

a Universitas Brawijaya Luniversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya a Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya IV 6 a Universitas Brawijaya Luniversitas Brawijaya Universitas Brawijaya IV 6

mana dapat dihitung dari proyeksi ikatan antara pusat massa dan salah satu atom hidrogen dalam bidang xy [17]. Persamaan 2.3 merupakan persamaan sistem koordinat bola untuk menghitung sudut  $\theta$  dan sudut



**Gambar 2.3.** Koordinat bola  $(r, \theta, \phi)$ 

10-24



sudut  $\theta$  dapat dihitung menggunakan persamaan 2.6 dan dapat ditulis sebagai:

$$\theta = \arccos\left(\frac{z}{r}\right) \tag{2.7}$$

untuk sudut  $\phi$  dapat dihitung menggunakan persamaan 2.4 dan dapat divers ditulis sebagai:

$$\phi = \arccos\left(\frac{x}{r\sin\theta}\right) \tag{2.8}$$

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

Inivers

ers

ers

vers

vers

vers

vers

/ers /ers

Pawijaya Universitas Brawijaya IVErs

ijaya Unversitas Brawijaya IVErs

Universitas Brawijaya

sitas Brawijava **ivers** sitas Brawijava Sitas Brawijava **ivers** 

Enhersitas Brawijaya IVErS

W(2.4) Brawijava IVers

ersitas Brawijaya ivers

v (2.5) Brawija

(2.6) Brawijay

φ:

wijaya wilaya

awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya

awijaya

vljaya

## METODE PENELITIAN

epository

nivers

niversitas Brawijava

BAB III

#### 3.1 Tempat dan Waktu Penelitian

Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Kimia Fisik, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Brawijaya, Malang selama 3 bulan, dari bulan Februari sampai April 2020 secara daring.

#### 3.2 Alat Penelitian

vijaya vilaya

vijava

vijaya Vijaya

/iiaya

wijaya

wijava

wijaya

Maya

wijaya

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah dua unit *works-tation* dengan prosesor *multicore* AMD Threadreaper, yang dijalankan menggunakan sistem operasi CentOS. Simulasi dinamika molekuler dilakukan menggunakan program GROMACS 2018.7 [18]. Analisis data dilakukan menggunakan program yang ditulis sendiri dalam bahasa pemrograman Fortran. Visualisasi sel simulasi dilakukan menggunakan POV-Ray.

#### 3.3 Tahapan Penelitian

- 1. Struktur es XVII diperoleh dari hasil penelitian sebelumnya yang dibangun menurut aturan Bernal-Fowler [19].
  - 2. Hidrat-hidrogen struktur es XVII pada keadaan okupansi maksimum diperoleh dari hasil simulasi GCMC (Grand-Canonical Monte Carlo) [6].
  - 3. Simulasi dinamika molekuler hidrat-hidrogen struktur es XVII dijalankan menggunakan program GROMACS 2018.7.
  - 4. Analisis MSD (*Mean Square Displacement*) dilakukan untuk meng ukur perpindahan rata-rata molekul hidrogen di dalam es XVII terhadap fungsi waktu, yang kemudian hasilnya dibandingkan dengan es II.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

## Repository Universitas Brawijaya Repository

Analisis kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII dilakukan untuk mengetahui distribusi sudut molekul hidrogen yang bergerak di dalam es XVII.

#### 3.4 Prosedur Kerja

#### 3.4.1 Model Potensial dan Konfigurasi Awal

**Tabel 3.1.** Parameter model molekul air TIP4P/Ice (*Transferable Intermolecular Potential with 4 Points*) dan model molekul hidrogen badan tegar linier (*linear rigid body*).

		and the second sec	States to be to be to be	
model	posisi	q(e)	$\sigma(\AA)$	$\varepsilon$ (kJ mol <sup>-1</sup> )
TIP4P/Ice	Н	+0.5897	Regul	AVO AU
NO SILON	0	Dr. P.H. S	3.1668	0.8822
deboaro	MW	-1.1794	HTSK!	ayg Re
$H_2$ Or	УН	+0.4932	Brewi	jaya Re
Repositor	MH	-0.9864	3.038	0.2852
12.4			1	

Dalam penelitian ini, molekul air dimodelkan dengan model TIP4P/Ice yang mempunyai 4 situs [20]. Molekul hidrogen dimodelkan dengan model badan tegar linier yang mempunyai 3 situs [6]. Konfigurasi awal hidrat-hidrogen struktur es XVII diperoleh dari simulasi GCMC pada kondisi okupansi maksimum. Hidrat-hidrogen struktur es XVII pada kondisi okupansi maksimum mempunyai 768 molekul air dan 427 molekul hidrogen dengan panjang Sel simulasi 2,46  $\times$  4,34  $\times$  2,36 nm. Kemudian dilakukan *quenching* pada struktur hidrat-hidrogen struktur es XVII menggunakan metode gradien konjugat pada 0 K untuk mendapatkan struktur *ground-state*. Interaksi antarmolekul non-ikatan dinyatakan sebagai penjumlahan potensial Lennard-Jones 12-6 dan potensial Coulomb [21]. Interaksi molekul air dengan molekul hidrogen untuk parameter Lennard-Jones dihitung menurut aturan kombinasi Lorentz-Berthelot [22].

 $V_{LJ}(r_{ij}) = 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right]$ Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers Repository Univers Repository Univers Repository Univers

(3.1) Brav

nivers

ers

vers vers vers

3.AC.ID

#### Repository Universitas Brawijaya Repository Univers

universitas Brawijaya - universitas Brawijaya, universitas Brawijaya - universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - **iver** Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya - **iver** 



(a)

**Gambar 3.1.** Konfigurasi awal molekul hidrogen di dalam es XVII (a) pada bidang xy dan (b) pada bidang yz

#### 3.4.2 Detail Komputasi

Hidrat-hidrogen struktur es XVII pada keadaan *ground-state* yang diperoleh dari proses *quenching* disimulasikan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler. Simulasi dinamika molekuler pada kondisi isotermal-isobarik (NPT) dilakukan selama 50 ns dengan langkah waktu 1 fs. Parameter simulasi untuk interaksi Coulomb menggunakan PME (Particle-Mesh Ewald) [23] dan interaksi van der Waals diterapkan pada jarak 0.8655 nm dengan menerapkan *swithcing function* yang dimulai dari jarak 0.6655 nm. Untuk temperatur sistem dipertahankan menggunakan barostat Parrinello-Rahman [1]. Temperatur sistem divariasikan pada 170, 190, 210, 230, 250, 273 K yang masing-masing dipertahankan pada tekanan 2,5 GPa. Didapatkan hasil simulasi dinamika molekuler berupa file trajektori yang berisi vektor posisi dari setiap molekul yang kemudian digunakan untuk analisis MSD dan distribusi sudut.

#### 3.4.3 Analisis data shas Braylay Universitas Braylay Oniversitas Bray

Setelah dilakukan simulasi dinamika molekuler, dilakukan analisis data menggunakan metode analsis MSD (*Mean Square Displace*-

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers

/ers /ers

ers

/ers

ers

ers

ers

ers

ers

/aivers

Stac Brawlave ivers

(b)

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

vijava

wijaya wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

Maya

wijaya

wijaya

wijaya

Maya

wjaya

wijaya wijaya

## Repository Universitas Brawijaya Re

*ment*) dan metode analisis distribusi sudut. Metode analisis MSD digunakan untuk mengetahui dinamika molekul hidrogen di dalam struktur es XVII, dimana dinamika molekul hidrogen diketahui dari menghitung posisi setiap molekul hidrogen menggunakan persamaan (2.3). Hasil dari analisis MSD adalah rata-rata jarak perpindahan ( $Å^2$ ) dan koefisien difusi (m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>) molekul hidrogen di dalam es XVII. Sedangkan metode analisis distribusi sudut digunakan untuk mengetahui orientasi atau kecenderungan molekul hidrogen menata dirinya di dalam es XVII. Distribusi sudut molekul hidrogen dapat dihitung menggunakan persamaan (2.7) dan persamaan (2.8), sehingga didapatkan hasil berupa distribusi sudut pada sudut  $\theta$  dan  $\phi$ .

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

wijaya

awijaya

iwijaya iwijaya

wijaya wijaya wijaya

wijaya wijaya wijaya wijaya erstas Brawijava IVers

iversitas Brawijaya **ivers** iversitas Brawijaya NerStas Brawijaya **ivers** 

Driversitas Brawilaya IVERS Universitas Brawijaya Driversitas Brawijaya IVERS

ersitás Brawijaya IVer

Repository Univers

Repository Univers

Repository Univers

e/stras Biawflava Universitas Brawijava, ChiverStas Brawilava

Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava

#### HASIL DAN PEMBAHASAN

BAB IV

Iniversitas Brawijava

lepository

nivers

Valvers

ers

ers

ers

ers

vers

ers

vers

#### 4.1 Dinamika molekul hidrogen di dalam es XVII

<ebository

vilaya

vijava

wijaya wijaya

ACID

Mean Squared Displacement (MSD) atau kuadrat perpindahan rata-rata mendeskripsikan jarak rata-rata yang ditempuh oleh partikel, atom maupun molekul, per satuan waktu di dalam suatu sistem. MSD dapat dihitung dengan menghitung selisih antara posisi molekul hidrogen awal dan posisi molekul hidrogen ke-t.



**Gambar 4.1.** *Mean square displacement* untuk perpindahan molekul hidrogen yang searah (a) sumbu x, (b) y, dan (c) z dalam struktur es XVII dan (d) untuk es II

Gambar 4.1 menunjukkan pergerakan molekul hidrogen di da-

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitory Universitory

## Repository Universitas Brawijaya Repo

ada pada keadaan maksimum. Di dalam es XVII terdapat terowongan spiral dimana dari gambar 4.1a dan 4.1b dapat dilihat bahwa molekul hidrogen bergerak dinamis pada sumbu x dan pada sumbu y. Namun gerakan tersebut tidak diiringi dengan perpindahan molekul hidrogen dari satu terowongan ke terowongan yang lainnya. Untuk mengetahui perpindahan molekul hidrogen dari satu terowongan ke terowongan yang lain dapat diketahui dari rata-rata jarak perpindahannya. Adanya pergerakan molekul hidrogen pada sumbu x dan sumbu y dipengaruhi oleh bentuk dari terowongan es XVII yang berbentuk spiral. Pergerakan molekul hidrogen dalam terowongan spiral dipengaruhi oleh temperatur, dimana semakin tinggi temperatur yang diberikan pada sistem maka pergerakan molekul hidrogen pada sumbu x dan y akan semakin cepat begitu pula dengan sebaliknya. Di sisi lain, ruang kosong pada es II juga merupakan terowongan yang memanjang searah sumbu z, namun bentuknya menyerupai silinder. Gambar 4.1c menunjukkan bahwa molekul hidrogen berdifusi pada arah sumbu z yang merupakan arah perpanjangan terowongan spiral pada es XVII. Bentuk terowong an pada es XVII diketahui mempengaruhi dinamika molekul hidrogen karena molekul hidrogen yang terperangkap di dalam terowongan es II pada kondisi okupansi maksimum diketahui tidak mengalami difusi pada sumbu z [1]. Seperti yang telah disebutkan, terowongan es II berbentuk silinder, sedangkan terowongan es XVII berbentuk spiral. Selain itu diskontinuitas ruang pada terowongan spiral kemungkinan menyebabkan rapatan molekul hidrogen dalam terowongan es XVII lebih rendah dibandingkan rapatan molekul hidrogen dalam terowongan es II yang kontinu.

a) 14

vijaya

ository.ub.ac.i

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers

## Repository Universitas Brawijaya Repository Univers

Universitas Brawijaya - Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya - Universitas - Br



Ujaya

vijaya vijaya

wijaya

vijaya vijaya vijaya

Maya

Mjaya

vijava

**Gambar 4.2.** Koefisien difusi terhadap sumbu  $z((a) D_z dan (b) \ln(D_z))$ 

Difusi molekul hidrogen di dalam terowongan spiral es XVII juga dipengaruhi oleh temperatur sistem. Gambar 4.2a menunjukkan bahwa semakin tinggi temperatur sistem, maka semakin cepat pula molekul hidrogen berdifusi. Hal ini sesuai dengan teori kinetika gas yang menyebutkan bahwa energi kinetik rata-rata molekul berbanding lurus dengan temperatur sistem, sementara energi kinetik mencerminkan laju translasi dan rotasi molekul. Persamaan Arrhenius bisa digunakan untuk menghubungkan difusi langsung dengan temperatur [24]:

$$D = D_0 - exp\left(-\frac{Q}{RT}\right)$$

Dengan  $D_0$  adalah difusi maksimum pada batas  $T \rightarrow \infty$ , Q adalah energi aktivasi untuk perpindahan dari sangkar yang stabil ke sangkar yang berdekatan, dan R adalah konstanta gas. Jika persamaan 4.1 dituliskan dalam bentuk logaritma, maka akan menjadi persamaan linier:

$$\ln(D_z) = \ln(D_0) - \left(\frac{Q}{R}\frac{1}{T}\right) \tag{4.2}$$

 $D_0$  dan Q dapat diperoleh dari regresi linier Gambar 4.2b, dengan nilai  $D_0$  1,85 × 10<sup>-8</sup> m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup> dan Q -6,26 kJ mol<sup>-1</sup>.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

(4.1)Repository Univers Repository<sub>1</sub>Univers Repository Univers

/ers

## Repository Universitas Brawijaya F

# 2 Analisis kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII

Analisis kuantitatif orientasi molekul hidrogen di dalam es XVII dinyatakan dalam bentuk distribusi sudut molekul hidrogen, yaitu sudut  $\theta$  dan  $\phi$ , karena molekul hidrogen dimodelkan sebagai badan tegar linear (*linear rigid body*).



**Gambar 4.3.** Distribusi sudut molekul hidrogen yang terdiri dari: sudut  $\theta$  (a) dan  $\phi$  (b)

Gambar 4.3 menunjukkan distribusi sudut molekul hidrogen di dalam es XVII pada temperatur 170 K. Sudut  $\theta$  menggambarkan orientasi molekul hidrogen terhadap sumbu *z* dan sudut  $\phi$  menggambarkan orientasi molekul hidrogen terhadap bidang yang tegak lurus dengan sumbu *z*. Gambar 4.3 (a) menunjukkan bahwa orientasi molekul hidrogen di dalam struktur es XVII pada temperatur 170 K cenderung tersebar di sekitar sudut  $\theta = \frac{\pi}{2}$ . Selain itu, orientasi molekul hidrogen pada bidang yang tegak lurus dengan sumbu *z*, yang dinyatakan sebagai sudut  $\phi$ , tidak menujukkan kecenderugan nilai sudut tertentu yang mengindikasikan molekul hidrogen dapat menata dirinya secara bebas pada bidang *xy*. Variasi temperatur menunjukkan bahwa orientasi dari molekul hidrogen tidak bergantung pada temperatur, setidaknya pada temperatur 170, 190, 210, 250, dan 273 K dengan masing-masing tekanan 2.5 GPa.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers Repository Univers Repository Univers

vers

)SITOLV

#### **KESIMPULAN DAN SARAN**

nversitas Brawijava

Universitas Braw BAB Versitas Braw

vers

#### 5.1 Kesimpulan

wijaya

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijava

awijaya awijaya awijaya awijaya awijaya

wijaya wijaya wijaya wijaya Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa molekul hidrogen yang berada di dalam terowongan spiral es XVII dapat berdifusi di sepanjang terowongan meskipun dalam kondisi okupansi maksimum dengan nilai difusi maksimum (D<sub>0</sub>)  $1.85 \times 10^{-8}$  m<sup>2</sup> s<sup>-1</sup>. Hal ini berbeda dengan dinamika molekul hidrogen yang tidak berdifusi dalam terowongan es II ketika tingkat okupansinya mencapai maksimum. Orientasi molekul hidrogen di bidang *xy* bersifat bebas atau tak-tentu, sedangkan sudut  $\theta$  molekul hidrogen cenderung terdistribusi di sekitar sudut  $\frac{\pi}{2}$ .

#### 5.2 Saran

Perlu dilakukan penelitian lebih lanjut untuk menunjukkan secara spesifik dinamika molekul hidrogen di dalam es XVII, seperti mekanisme molekul hidrogen atau menghitung rapatan molekul hidrogen di dalam es XVII untuk setiap terowongan.

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava

Repository Univers

Repository<sub>1</sub>Univers

Repository Univers

B.ACID

## epository Universitas Brawijaya Repository Univers

#### **DAFTAR PUSTAKA**

Harada, A., Arman, Y., Miura, S. (2019), Molecular dynamics study on fast diffusion of hydrogen molecules in filled ice II, *Journal of Molecular Liquids*, 292: 111316.

Ahn, Y.H., Moon, S., Koh, D.Y., Hong, S., Lee, H., Lee, J.W., Park, Y. (2020), One-step formation of hydrogen clusters in clathrate hydrates stabilized via natural gas blending, *Energy Storage Materials*, 24(June 2019): 655–661.

[3] Mao, W.L., Koh, C.A., Sloan, E.D. (2007), Clathrate hydrates under pressure, *Physics Today*, 60(10): 42–47.

[4] Sloan, E., Koh, C.A. (2007), *Clathrate hydrates of natural gases*, CRC press.

5] del Rosso, L., Celli, M., Ulivi, L. (2017), Ice XVII as a Novel Material for Hydrogen Storage, *Challenges*, 8(1): 3.

Hakim, L., Koga, K., Tanaka, H. (2010), Thermodynamic stability of hydrogen hydrates of ice I<sub>c</sub> and II structures, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 82(14): 1–11.

7] Amos, D.M., Donnelly, M.E., Teeratchanan, P., Bull, C.L., Falenty, A., Kuhs, W.F., Hermann, A., Loveday, J.S. (2017), A Chiral Gas-Hydrate Structure Common to the Carbon Dioxide-Water and Hydrogen-Water Systems, *Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(17): 4295–4299.

Michl, J., Sega, M., Dellago, C. (2019), Phase stability of the ice XVII-based CO<sub>2</sub> chiral hydrate from molecular dynamics simulations, *Journal of Chemical Physics*, 151(10): 104502.

[9] English, N.J., MacElroy, J.M. (2015), Perspectives on molecular simulation of clathrate hydrates: Progress, prospects and challenges, *Chemical Engineering Science*, 121: 133–156.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

[8]

Repository Univers Repository Univers Repository Univers

### Repository Universitas Brawijaya – Repository L

[10] Lasich, M., Tumba, K. (2019), Single-site Langmuir-type adsorption in structure-I clathrate hydrates: A molecular simulation study using a general self-consistent force field, *Fluid Phase Equilibria*, 489: 111–116.

[11] Cai, J., Tao, Y.Q., von Solms, N., Xu, C.G., Chen, Z.Y., Li, X.S. (2019), Experimental studies on hydrogen hydrate with tetrahydrofuran by differential scanning calorimeter and in-situ Raman, *Applied Energy*, 243: 1–9.

[12] Liu, J., Yan, Y., Chen, G., Hou, J., Yan, Y., Liu, H., Li, S., Zhang, J. (2019), Prediction of efficient promoter molecules of sH hydrogen hydrate: An ab initio study, *Chemical Physics*, 516: 15–21.

wijaya wijaya

ACID

[13] Fortes, A.D., Wood, I.G., Alfredsson, M., Vočadlo, L., Knight, K.S. (2005), The incompressibility and thermal expansivity of D<sub>2</sub>O ice II determined by powder neutron diffraction, *Journal of Applied Crystallography*, 38(4): 612–618.

[14] Catti, M., Del Rosso, L., Ulivi, L., Celli, M., Grazzi, F., Hansen, T.C. (2019), Ne- and O<sub>2</sub>-filled ice XVII: A neutron diffraction study, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 21(27): 14671– 14677.

[15] Del Rosso, L., Celli, M., Ulivi, L. (2016), New porous water ice metastable at atmospheric pressure obtained by emptying a hydrogen-filled ice, *Nature Communications*, 7(1): 1–7.

[16] Allen, M.P., Tildesley, D.J. (2017), *Computer simulation of liquids*, Oxford university press.

[17] Pradana, I.P., Hakim, L. (2019), The condensation behaviours of carbon dioxide on MgO surface, *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*, 239(1): 012017.

[18] Abraham, M.J., Murtola, T., Schulz, R., Páll, S., Smith, J.C., Hess, B., Lindah, E. (2015), Gromacs: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers, *SoftwareX*, 1: 19–25.

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Univers Repository Univers Repository Univers

nivers

ers

vers

#### edository l Iniversitas Brawijava <edository

Matsumoto, M., Yagasaki, T., Tanaka, H. (2018), GenIce: [19] Hydrogen-Disordered Ice Generator, Journal of Computational Chemistry, 39(1): 61-64.

ers

Repository Univers

Repository Univers

Repository Univers

Abascal, J.L., Sanz, E., Fernández, R.G., Vega, C. (2005), A [20]potential model for the study of ices and amorphous water: TIP4P/Ice, Journal of Chemical Physics, 122(23): 234511.

[21] M.J. Abraham D. van der Spoel, E.L.B.H., the GROMACS development team (2019), GROMACS User Manual version 2018.7, www.gromacs.org.

[22] DUH, D.M., HENDERSON, D., ROWLEY, R.L. (1997), Some effects of deviations from the Lorentz-Berthelot combining rules for mixtures of Lennard-Jones fluids, Molecular Physics, 91(6): 1143-1147.

vijava

rijaya wijaya vijaya wijaya

aflava Mjaya vijaya

8.AC.ID

Van Der Spoel, D., Lindahl, E., Hess, B., Groenhof, G., Mark, wij[23] A.E., Berendsen, H.J. (2005), GROMACS: Fast, flexible, and free, Journal of Computational Chemistry, 26(16): 1701-1718.

Ikeda-Fukazawa, T., Kawamura, K., Hondoh, T. (2004), Mecha-[24] nism of molecular diffusion in ice crystals, Molecular Simulation, 30(13-15): 973-979.

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

atvijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

Maya wijaya

wijaya

Wilava

awijaya awijaya awijaya

avijava

wijaya

wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya wijaya

8.ACID

#### Repository l Iniversitas Brawijaya

versitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) ivers

Universitas Brawliava Universitas Brawijava ChiverSitas Brawijava IVErS LAMPIRAN A. Persamaan Lorentz-Berthelot

#### Persamaan Lorentz 1.1

## 1.2 Persamaan Berthelot

Iniversitas Brawijaya

 $\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj}}$ 

Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya Repository Universitas Brawijaya

niversitas Brawijaya Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya Jinkersitas Brawijaya (Ufilve/sitas Brawijaya) Ufilve/sitas Brawijaya, Ufilve/sitas Brawijaya (Vers Jniveršitas Brawijava , Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya , Universitas Brawijaya Inversitas Brawijaya Universitas Brawijay $\sigma_{ii}+\sigma_{jj}$ as Brawijaya Universitas Brawijaya universitas Brawijava i Universitas B<sup>r</sup>aj j<del>a</del>va Universitas Brawijava. Universitas Brawijava Universitas Brawijava - Universitas Brawijava Universitas Brawijava - Universitas Brawijava Jinversitas Brawijaya L Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya (Universitas Brawijaya) IVE 🛚 wijaya) Universitas Brawijaya awijaya (Universitas Brawijaya) IVErS a Universitas Brawijava IVErS Universitas Brawijaya Myersitas Brawijaya ivers UVerSitas Brawijava IVerS Conversitas Brawijaya IVErs 0 filversita Strawnava IVers dimensitias Brawijaya ivers O INOIS IS OF A WIJAYA IVERS universitas Brawijaya Universitas Brawijaya

Cepository u

Inivers

Universitäs Biawflave Universitäs Brawijava, Oniversitäs Brawijava IV Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawflay Universitas Brawijaya Universitas Brawija/n IVErs Inversitas Brawijaya Uhiversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Ohiversitas Brawijava Repository Univers Repository<sub>21</sub>Univers

Repository Univers

		Reposito	ny Università	45 C	nawijaya	Repository	Univers
	awijaya	Universitas Braw	ijava i universitas Bra ijava i universitas Bra	wijaya wijaya	Universitas Brawija	aya Universitas Bray ava Universitas Bray	vitavalivers
: <u>:</u> :	nvijaya	URVerstasSite	ijaya Universitas Bila	wijaya	Huversitas Brawij	ave denversitas Brav	vilavnivers
b.a	nvijaya	Universitas Braw	ijaya Universitas Bra ijaya Universitas Bra	wijaya	Universitas Brawija	aya Universitas Brav	vijava vilava <b>ivers</b>
/.u	LA	MPIRAN B.	File parameter	simul	lasi (.mdp)	aya Universitas Bray	vijava
01)	evijaya	Uhiversitas Braw	ijaya - Uhiversitas Bra jiava I Ilniversitas Bra	wijaya	Universitas Brawija Universitas Brawija	aya Universitas Brav ava Universitas Brav	vijava i vo ro
sit	awijaya	integrat	orra Universitas Bra	wija <u>v</u> a	md ersitas Brawija	aya Universitas Brav	vijaya
epc	awijaya	dt	ijāya Universitas Bra	Ryfaya	0.001	aya Universitas Bray	vilal/AIVers
5	awijaya	Universitas Braw	ijaya Universitas Bra	wijaya	Universitias Brawija	aya Ghiversitas Brav	vialivers
	awijaya	nsteps	ijaya Universitas Bra	yija¥∎	50000000	ayReliniversitas Bray	Whivers
	awijaya	nstxout	ijaya Universitas Bra	wijaya Wija <del>y</del> a	1000	aya Universitas Brav	vilava ivers
LAS	awijaya	nstvout	ijava Universitas P	rviia <del>⊭</del> n	1000 tas Brawij	aya, Universitas Bray	vijava
S	awijaya awijaya	nstlog	ijava Construction		1000	aya Muniversitas Brav ava) Aniversitas Brav	vijava i voro
/FR	awijaya	nstcalce	nergy	as <u>+</u> .	100 Brawij	aya Universitas Brav	vijava
	awyaya awijaya	nstenerg	yy Uniters	B	1000	aya, Universitas Brav ava, Universitas Brav	vilava i Vers
5	awijaya	nstxout-	compressed	ast	1000	A ODVORHADINA	vijalvalivers
	awijaya awijaya	compress	ed-x-precisi	o n =	1000 ya	Universitas Brav	vilava vilava livers
	awijaya	Flaposts	TV USABLER	as à	INDRO LCE	Repersitory	violativers
	awijaya awijaya	compress	ed-x-grps	NOT	HYDRO ICE	Renversitas Brav	vijava vitava <b>ivers</b>
	awijaya	energygi	ps	un al	IIIDKO ICE	R - hiversitas Bray	vijava ivors
	awijaya	cutoff-s	cheme		Verlet	Diniversitas Bray	vijava ivoro
	wijaya	nstlist			10	Universitas Bray	vijava
	Bvijaya	ns-type	ny Ungerga	指皇	grid	Chiversitas Bray	vijal/al IVEFS
	avijaya	pbc	ny Uniferen		xyz	a Universitas Brav	vijavalivers
	avijaya	periodic	-molecules	<u>de F</u>	nowijaya//	VR Universités Bray	violenivers
	awijaya	Universitas	ry Universit	as E	Brawijavawi	aya DhiverSitas Brav	vijava vijava ivers
	awijaya	coulombt	ype	as#3	PME	aya, Universitas Bray	vijava
	awijaya	rcoulomb	ijaya   University	o geryte	0.8655	aya Universitas Bray	vijava ivers
	awijaya	vdwtype	ijaya Universitas Bra	wija <del>ya</del>	Cut-off	aya Universitas Brav	vijava
0	awijaya	vdw_mod	ifier Inversitas Bra	wijaya.	Potentialh	aya, Universitas Bray	vijava :
4	awijaya	rvdw-swi	tch Universitas Bra	wija <del>y</del> a	0.6655	aya ThiveIstas Brav	vijavalvers
X	awijaya awijaya	rvdw	ijaya Tuniversitas Bra ijaya Universitas Bra	wijaya wijaya	0.8655	aya Universitas Brav aya Universitas Brav	
TIJ/	awijaya	DispCorr	ijaya Universitasi ta	Wijaya	EnerPres	Reportion	viavaivers
R'ST	awijaya awijaya	pme-orde	Taya Universitas Bra Lava Universitas Bra	wija <del>y</del> a wija <u>v</u> a	Onversitas Brawiji	aya, Universitas Brav ava, Universitas Brav	viavalivers
RA	awijaya	ewald ge	onetry	wijaya	1e-J Universitas Brawija	aya Universitas Bray	vilayanivers
Ba	awijaya bwijaya		ijava Universitas Bra	wija <del>y</del> a wijaya	Universitas Brawija	aya " Universitas Brav ava Autoersitas Brav	vijava
	awijaya	tcoupl	ijaya Universitas Bra	wijava	nose-hoov	aya, Universitas Bray	vijava
	awijaya	tc-grps	ijaya Uhiversitas Bra ijaya Uhiversitas Bra	wija <del>ya</del>	SYSTEM	aya Universitas Brav	vijava :
		Reposito	ry Universita	as E	srawijaya	Repository	Univers
	<u> </u>	Reposito	ry Universita	as E	Brawijaya	Repository	Univers
	S.AC	Reposito	ory Universita	as E	Brawijaya	Repository	Univers
	22 I	pm, 1.4	8 8 F 1	2000		2000, 7 r	4.4.5

nsttcouple tau-t ref-t ref-t pcoupl pcoupl pcouplype nstpcouple compressibility tau-p ref-p gen-vel gen-vel gen-seed = 0.2 = 170 = Parrinel = 4.5e-5 = 1.0 = 25000 = 170 = 225000	Universitas Brawijaya ivers Universitas Brawijaya ivers Universitas Brawijaya ivers Universitas Brawijaya ivers
nsttcouple = 5 tau-t = 0.2 ref-t = 170 pcoupl pcouplype = Parrinel pcouplype = isotropic nstpcouple = -1 compressibility = 4.5 e-5 = 1.0 ref-p = 25000 gen-vel gen-temp gen-seed = 170 = 123456	Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya
nsttcouple = 5tau-t = 0.2ref-t = 170 pcoupl = Parrinellpcoupltype = isotropicnstpcouple = -1compressibility = 4.5e-5tau-pref-p = 1.0gen-vel = nogen-tempgen-seed = 123456	Universitas Brawijaya
tau-t ref-t = 0.2 = 170 pcoupl pcouplype nstpcouple compressibility tau-p ref-p = 1.0 = 25000 = -1 = 4.5e-5 = 1.0 = 25000 = 170 = 210	
ref-t = 170 $pcoupl pcouply pe = Parrinel pcouply pe = isotropio = -1$ $compressibility = 4.5e-5$ $tau-p = 1.0$ $ref-p = 25000$ $gen-vel = no$ $gen-temp = 170$ $gen-seed = 123456$	Universitas Brawijaya
pcouplpcoupltype = Parrinellpcoupltype = isotropionstpcouple = -1compressibility = 4.5e-5tau-pref-p = 1.0gen-vel = 10gen-tempgen-seed = 170= 123456	Diversitas Brawijaya IVEIS
pcoupl pcoupl = Parrinel = isotropio nstpcouple = -1 compressibility = 4.5 e-5 tau-p = 1.0 ref-p = 25000 gen-vel = no gen-temp gen-seed = 170 = 123456	Universitas Brawijaya IVERS
pcoupltype = isotropic nstpcouple = -1 compressibility = 4.5e-5 tau-p = 1.0 ref-p = 25000 gen-vel = no gen-temp = 170 gen-seed = 123456	lanositonywlawivers
nstpcouple = $-1$ compressibility = $4.5e-5$ tau-p = $1.0$ ref-p = $25000$ gen-vel = no gen-temp = $170$ gen-seed = $123456$	Universitas Brawijava
$c \circ m pressibility = 4.5 e-5$ $tau-p = 1.0$ $ref-p = 25000$ $gen-vel = no$ $gen-temp$ $gen-seed = 170$ $= 123456$	Universitas Brawijaya ivers
$\begin{array}{rcl} tau-p & = 1.0 \\ ref-p & = 25000 \\ \\ gen-vel & = no \\ gen-temp & = 170 \\ gen-seed & = 123456 \end{array}$	Universitas Brawijaya
ret-p = 25000 $gen-vel = no$ $gen-temp$ $gen-seed = 123456$	Universitas Brawijava
gen-vel = no $gen-temp$ $gen-seed = 170$ $gen-seed = 123456$	Universitas Brawijaya IVEIS
gen-ven = no $gen-temp$ $gen-seed = 170$ $= 123456$	Universitas Brawijaya
gen-seed = 123456	epositerywlake ivers
wijaya Univer geni-seed wijaya Univer Ostional Seed Seed Seed Seed Seed Seed Seed See	Diversitas Brawijaya iVers
Prepository University vijavo R	Universitas Brawijaya
	niversitas Brawlaya ivers
wijava un epostory Lint er straut kawijava R	hiversitas Brawijaya
awijaya Unitopositony U Rischard Arte wijaya	niversitas Brawijaya
awijaya Unitobusitur y Uniterniskas revolvijaya in	niversitas Brawijaya
avijava Universitory University ingawijaya	Universitas Brawijaya IVEIS
evijaya umveluository Ungersters gawijaya	opposition wild wild wers
avijava Universitository Universitository A	Universitas Brawijaya ivers
Wilaya Universities tory University Brawijaya/ VR	eppersite gravitation ivers
avjava Universitas Juniversitas Brawijava Java	DhiverSitas Brawijaya
awijaya Universitas Bravilas Bravilas Bravilas	Universitas Brawijava
awijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawijaya
awijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawijaya
uvijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava	Universitas Brawijaya
Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Chiversitas Brawijaya IVEIS
awijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawijaya IVers
Inversitas Brawijaya Universitas Brawijaya Pelversitas Brawijaya	epositerywialaivers
avvijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava	Universitas Brawijaya
🚬 🔤 avijaya 🛛 Universitas Brawijaya 🖓 Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawilaya ivers
an awijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Jawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawijava
wijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya	Universitas Brawijava
uwijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya	Universitas Brawijava I v CI 3
Repusitory Universitas Brawijaya R	epository Univers
Repository Universitas Brawijaya R	edository Univers
Repository Universitas Brawijaya R	23

## Repository Universitas Brawijaya

Repository Univers

aya Universitas Brawijaya IVErs

WD Universitas Brawilaya ivers

aya ChiverStas Brawijava IVErS

ya Universitas Brawijaya IVErs

ava Universitas Brawijaya ivers

ava Olive Stát Brawilava IVERS ava, Universitas Brawilava A Olive Stat Brawilava IVERS

> Universitas Brawijaya Iniversitas Brawijaya

hversitas Brawijaya hiversitas Brawijaya Nersitas Brawijaya IVERS

niversitas Brawijaya **ivers** niversitas Brawijaya

the state Brawlay a ivers

DhiverStacBrawnaya IVerS

Universitas Brawijaya ivers Universitas Brawijaya Dhiversitas Brawijaya ivers

**Repository** Univers

**Repository Univers** 

Repository Univers

awijava, Universitas Brawijava

Brawijava Universitas Brawijaya

we demonstrate and the service and the service

Universite Bian Bay Universites Brawijaya Chinorsta Brawila A IVE S

Universitas Brawijava Universitas Brawijava Universitas Brawijava ivers

Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya,

Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya IVERS

Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya, Universitas Brawijaya ivers

Inversitas Brawijaya | Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya | Vers

JRVersites Brewijaya Universitas Brewijaya Universitas Brewijaya, Universitas Brewijaya IVERS Iniversitas Brewijaya Universitas Brewijaya, Universitas Brewijaya Universitas Brewijaya Iniversitas Brewijaya Universitas Brewijaya Universitas Brewijaya, Universitas Brewijaya IVERS

vers

vers

universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya **ivers** Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya **ivers** Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya **ivers** Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya Universitas Brawijaya

LAMPIRAN C. Data koefisien difusi

# 3.1 Data Koefisien difusi $(D_z)$

T (K)	$D_z (m^2 s - 1)$	std dev
170	$0.22342 \times 10^{-9}$	0.022853709
190	$0.34922 \times 10^{-9}$	0.034250285
210	$0.49470 \times 10^{-9}$	0.043106902
230	$0.74274 \times 10^{-9}$	0.053403305
250	$0.90756 \times 10^{-9}$	0.054412205
273	$1.16204 \times 10^{-9}$	0.113820310

Inversitas Brawijaya U hivaystas Brawijaya (I Alvaysitas Brawijaya, U hiversitas Brawijaya) IV errs

## **3.2** Data ln koefisien difusi $(\ln(D_z))$

1/T (K <sup>-</sup> 1)	$\ln(D_z) (m^2 s - 1)$	std dev
0.005882353	-22.2265482	0.109434711
0.005263158	-21.7790445	0.095748791
0.004761905	-21.4300810	0.086582289
0.004347826	-21.0228068	0.073569410
0.004000000	-20.8216959	0.059861123
0.003663004	-20.5770256	0.099817989

Universitas

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

Repository Universitas Brawijaya

nvijaya nvijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya

wijaya wijaya wijaya

wijava

awijaya

awijaya

Avijava

ivijaya

awijaya awijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya wijaya

wijaya

wijaya

wijaya

WH

8.ACID



B.AC.ID

The second se

Diawijaya itoj

Sitory Univers