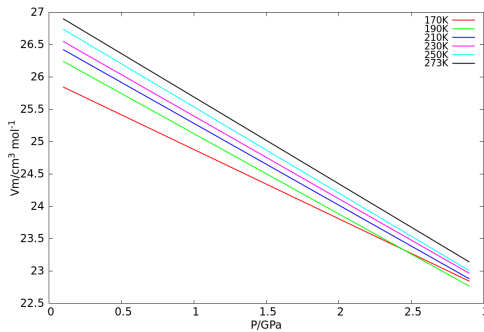


## BAB IV

### HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 4.1 Konfigurasi Awal

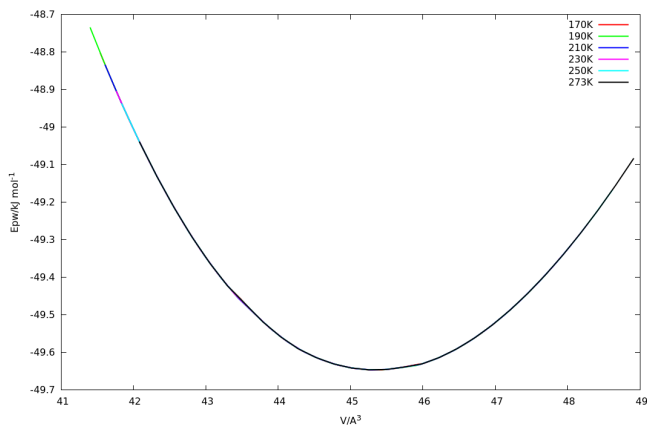
Konfigurasi awal dibangun dalam berbagai variasi volume berdasarkan tekanan yang diterapkan. Gambar 4.1 menunjukkan variasi volume molar dari sistem sebagai fungsi tekanan. Bagian kanan dari gambar (1,5 - 3,0 GPa) didapatkan dari hasil simulasi GCMC dan bagian kiri didapatkan dari ekstrapolasi persamaan linier. Langkah ini penting karena simulasi GCMC tidak dapat memberikan informasi mengenai variasi volume pada tekanan rendah karena struktur es VI/2 terdegradasi pada tekanan rendah. Tingginya tekanan memaksa sistem untuk menemani volume yang lebih kecil. Hal yang menarik pada Gambar 4.1 adalah adanya perpotongan volume molar pada 170 K dan 190, yang kemungkinan disebabkan perbedaan okupansi molekul hidrogen pada kedua temperatur sehingga mengakibatkan perbedaan kompresi, yang dapat dilihat dari gradian kurva volume terhadap tekanan.



Gambar 4.1: Volume molar es VI/2 sebagai fungsi dari tekanan.

Struktur awal yang didapatkan dengan variasi volume molar di atas tidak berada pada keadaan dasar (*ground-state*). Struktur keadaan dasar merupakan hal yang penting karena sistem menghabiskan sebagian besar waktunya pada keadaan dasar. Dalam rangka mendapatkan struktur keadaan dasar, sistem disimulasikan pada temperatur 0

K menggunakan metode gradien konjugasi untuk mendapatkan struktur keadaan dasar pada variasi volume molar. Seperti yang ditunjukkan pada Gambar 4.2, energi potensial dari es VI/2 berada pada interval 48,7 - 49,7 kJ mol<sup>-1</sup>. Energi potensial tersebut lebih tinggi jika dibandingkan dengan energi potensial bentuk es yang lain(50 - 55 kJ/mol)



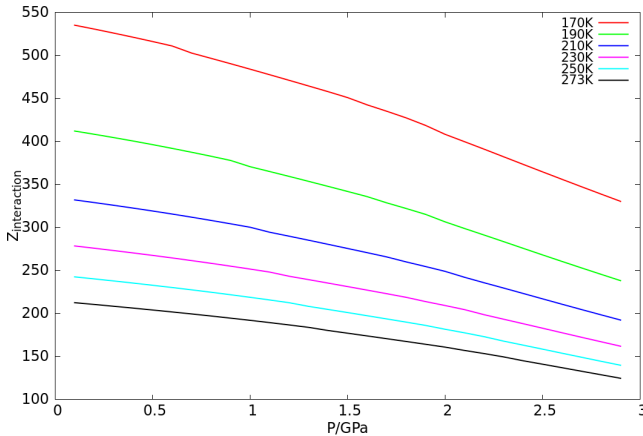
Gambar 4.2: Energi potensial struktur keadaan dasar es VI/2 sebagai fungsi dari volume.

## 4.2 Energi Helmholtz Molekul Hidrogen Tunggal

Fungsi partisi kanonikal,  $Z$ , didapatkan dengan mengintegrasikan faktor Boltzmann dari semua energi keadaan dasar yang timbul oleh sebuah molekul hidrogen tunggal dalam ruang kosong es VI/2. Berdasarkan persamaan 3.8, ada 3 komponen utama fungsi partisi kanonikal dalam sistem, yaitu fungsi partisi kanonikal translasi, rotasi, dan interaksi. Fungsi partisi kanonikal translasi dan rotasi merupakan fungsi dari temperatur, sedangkan fungsi partisi kanonikal interaksi merupakan fungsi dari jarak antar molekul,  $r_1$  dan orientasi; yang juga merupakan fungsi dari volume.

Gambar 4.3 menunjukkan bahwa fungsi partisi kanonikal interaksi berkurang dengan meningkatnya tekanan. Hal ini dapat dipahami karena dengan meningkatnya tekanan, ruang kosong es VI/2 menjadi lebih kecil, dan molekul hidrogen menjadi lebih dekat dengan molekul

air disekelilingnya sehingga cenderung meningkatkan nilai dari energi potensial interaksi. Merujuk pada persamaan 3.8, dengan meningkatnya energi yang timbul akibat interaksi antar molekul, fungsi partisi kanonikal akan menurun.

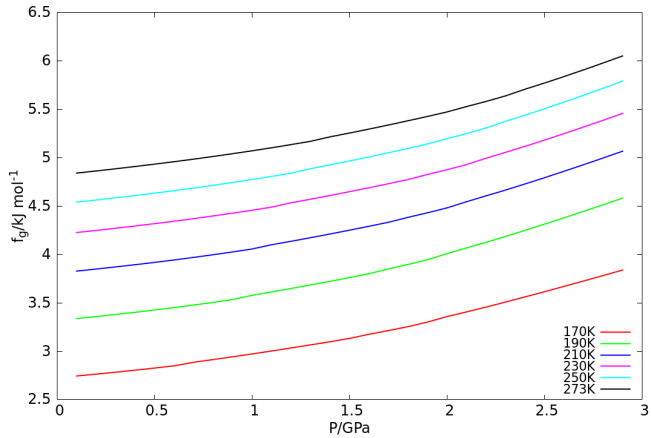


Gambar 4.3: Fungsi partisi non-ideal dari hidrat hidrogen es VI/2 sebagai fungsi dari tekanan

Energi Helmholtz molekul tunggal memiliki nilai yang berkebalikan dengan fungsi partisi. Gambar 4.4 menunjukkan bahwa energi Helmholtz molekul tunggal hidrogen meningkat dengan meningkatnya temperatur dan tekanan. Berdasarkan persamaan 3.9, energi Helmholtz dari sebuah molekul hidrogen merupakan fungsi dari temperatur dan volume. Hal ini dapat dipahami karena pada temperatur yang lebih tinggi, energi Helmholtz meningkat akibat kontribusi positif dari fungsi partisi translasi, dan sedikit dari fungsi partisi rotasi, meskipun fungsi partisi interaksi berkontribusi negatif terhadap energi Helmholtz dalam interval temperatur dan tekanan yang diamati. Fungsi partisi kanonikal translasi memiliki nilai yang lebih tinggi dibandingkan dengan fungsi partisi kanonikal interaksi.

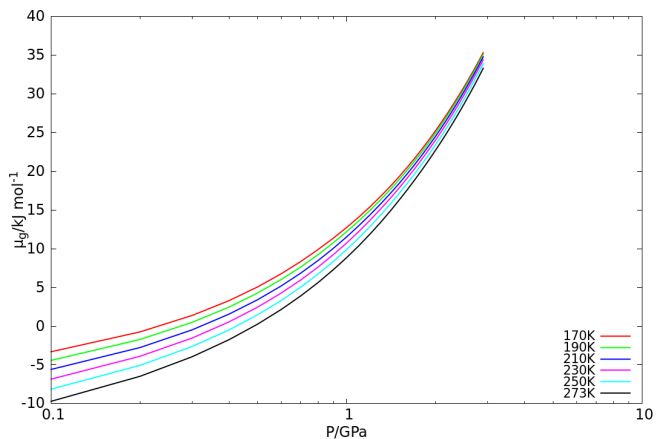
### 4.3 Potensial Kimia Gas Hidrogen

Potensial kimia dari molekul hidrogen,  $\mu_g$ , didapatkan dari hasil simulasi MC-NVT[1]. Potensial kimia ini digunakan untuk menghi-



Gambar 4.4: Energi Helmholtz molekul hidrogen tunggal sebagai fungsi dari tekanan.

tung okupansi hidrogen dalam es VI/2 sebagai rasio antara molekul hidrogen terhadap molekul air,  $N_g/N_w$ , menggunakan persamaan 3.6. Persamaan tersebut menghubungkan okupansi,  $x$ , dengan  $\bar{f}$  dan  $\mu_g$ .



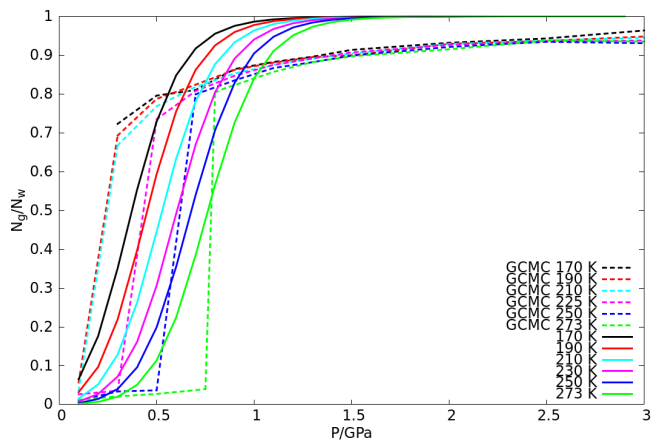
Gambar 4.5: Potensial kimia hidrogen sebagai fungsi tekanan dan temperatur[1].

#### 4.4 Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2

Gambar 4.6 menunjukkan bahwa okupansi maksimum hidrogen dalam es VI/2 dicapai saat  $p \geq 1,5$  GPa dan nilai okupansi maksimum,  $N_g/N_w = 1$ . Molekul hidrogen dapat masuk dalam struktur es VI/2 untuk menempati ruang kosong di dalam es secara penuh atau secara parsial dibawah tekanan[22]. Dapat dilihat juga bahwa okupansi maksimum pada temperatur yang lebih rendah tercapai pada tekanan yang lebih rendah. Pada temperatur rendah, potensial kimia hidrogen meningkat dan harus dikompensasi dengan berkurangnya energi Helmholtz pada tekanan rendah.

Gambar 4.6 menunjukkan okupansi dari hasil teori vdWP (garis halus) dan simulasi GCMC (garis putus-putus). Hasil dari suhu yang sama ditandai dengan warna garis yang sama. Garis halus okupansi vdWP, sebagaimana bertentangan dengan kurva GCMC yang patah-patah, disebabkan karena asumsi bahwa struktur es VI/2 stabil pada semua daerah tekanan dan dapat ditempati sebagian oleh hidrogen. Hal ini berbeda dengan simulasi GCMC yang dapat meramalkan hidrat hidrogen dari es VI/2 bertahan atau roboh dibawah okupansi sebagian dengan mengakomodasi gerakan termal dari air. Berdasarkan simulasi GCMC, hidrat hidrogen dari es VI/2 roboh pada tekanan rendah.

Gambar 4.6 juga menunjukkan bahwa maksimum okupansi dari teori vdWP adalah 1. Hasil ini berbeda dengan simulasi GCMC yang melaporkan bahwa maksimum okupansi es VI/2 adalah 0,9 yang dapat timbul dari kemungkinan bahwa ruang sangkar virtual bergantung pada keberadaan hidrogen tetangga. Namun demikian, teori vdWP dapat memprediksi bahwa okupansi maksimum dicapai saat  $p \geq 1,5$ GPa, – hasil tersebut sesuai dengan hasil simulasi GCMC.



Gambar 4.6: Okupansi hidrogen dalam es VI/2 berdasarkan teori vd-WP (garis halus) dibandingkan dengan hasil simulasi GCMC (garis putus-putus)