

Energi Hemholtz Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2 dari Fungsi Partisi Kanonikal

SKRIPSI

oleh:
Ravi Mahesta
135090201111006



**JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017**

Energi Hemholtz Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2 dari Fungsi Partisi Kanonikal

SKRIPSI

Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Kimia

oleh:
Ravi Mahesta
135090201111006



JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS BRAWIJAYA
MALANG
2017

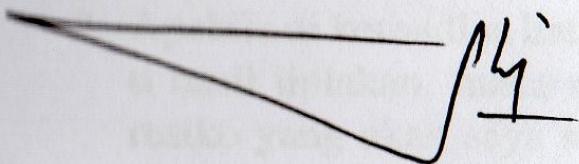
LEMBAR PENGESAHAN SKRIPSI

Energi Hemholtz Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2 dari Fungsi Partisi Kanonikal

oleh:
Ravi Mahesta
135090201111006

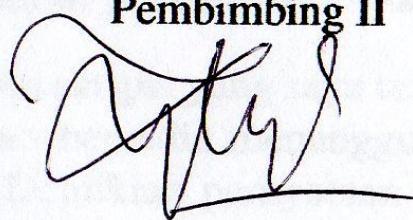
**Setelah dipertahankan di depan Majelis Pengaji
pada tanggal 02-08-2017
dan dinyatakan memenuhi syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana Sains dalam bidang Kimia**

Pembimbing I



**Dr.Sc. Lukman Hakim
NIP. 198204122003121002**

Pembimbing II



**Zubaidah Ningsih AS, Ph.D
NIP. 197905242003122022**



**Mengetahui,
Ketua Jurusan Kimia
Fakultas MIPA Universitas Brawijaya**



**Masruri, S.Si, M.Si, Ph.D
NIP. 197310202002121001**

LEMBAR PERNYATAAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

**Nama : Ravi Mahesta
NIM : 135090201111006
Jurusan : Kimia**

Penulis skripsi berjudul:

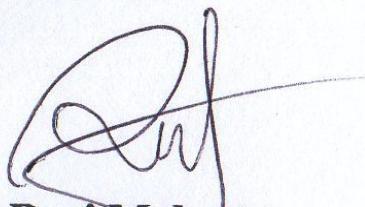
Energi Hemholtz Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2 dari Fungsi Partisi Kanonikal

Dengan ini menyatakan bahwa:

1. Isi dari skripsi yang saya buat adalah benar-benar karya sendiri dan tidak menjiplak karya orang lain, selain nama-nama 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 resiko yang akan saya terima. Demikian pernyataan ini dibuat dengan segala kesadaran.

Malang, 02-08-2017

Yang menyatakan,



**Ravi Mahesta
135090201111006**

Energi Hemholtz Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2 dari Fungsi Partisi Kanonikal

ABSTRAK

Salah satu tantangan terbesar dalam penerapan ekonomi hidrogen adalah material penyimpan hidrogen. Salah satu metode penyimpanan hidrogen yang menjanjikan adalah hidrat hidrogen. Dalam penelitian ini, okupansi hidrogen dalam hidrat hidrogen dengan struktur es VI/2 diperoleh dengan menggunakan teori van der Waals-Platteuw (teori vdWP) dan mengintegrasikan energi Helmholtz dari molekul tunggal hidrogen dalam es VI/2. Hasil menunjukkan bahwa okupansi maksimum tercapai ketika tekanan lebih tinggi dari 1,5 dengan rasio hidrogen:air, $N_g/N_w = 1$. Estimasi ini sesuai dengan hasil dari simulasi *Grand Canonical Monte Carlo* (GCMC) dan menunjukkan bahwa teori vdWP dapat mereproduksi hasil simulasi.

Kata Kunci: *Hidrat hidrogen, es VI/2, energi Helmholtz, teori vdWP*

Helmholtz Energy of Hydrogen Occupancy inside Ice VI/2 from Canonical Partition Function

ABSTRACT

One of the major challenges in implementing hydrogen economy is the hydrogen storage material. Hydrogen-hydrate is one of the promising methods to store hydrogen. In this research, occupancy of hydrogen inside ice VI/2 is obtained using van der Waals-Platteuw theory (vdWP theory) by integrating the Helmholtz energy of single hydrogen molecules inside ice VI/2. The result shows that the maximum occupancy reach at pressure ≥ 1.5 GPa with hydrogen: water ratio, $N_g/N_w = 1$. This result agrees well with Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) simulation and it suggests that vdWP Theory can reproduce the simulation results.

Keywords: *Hydrogen-hydrate, ice VI/2, Helmholtz energy, vdWP Theory*

KATA PENGANTAR

Simulasi molekuler merupakan salah satu kajian dalam ilmu kimia. Skripsi ini ditulis untuk mendukung perkembangan simuasi molekuler dan dapat berperan sebagai dasar dari bidang ilmu kimia, serta sebagai tugas akhir mahasiswa program studi sarjana kimia. Skripsi ini memuat bidang kajian simulasi molekuler khususnya metode mekanika statistik menggunakan teori van der Waals-Platteuw (vdWP). Di-harapkan skripsi ini dapat bermanfaat bagi pembaca umumnya dan penulis sendiri dalam perkembangan bidang ilmu kimia. Dalam penulisan skripsi ini, penulis menyampaikan puji syukur ke hadirat Allah SWT yang telah memberikan hidayah dan kesempatan kepada penulis untuk menyelesaikan skripsi ini. Penulis juga mengucapkan rasa terima kasih kepada banyak pihak yang telah membantu dan memberikan dukungan dalam penulisan skripsi ini, terutama kepada:

1. Dr.Sc. Lukman Hakim, selaku Dosen Pembimbing I dan Zubaidah Ningsih AS, S.Si, M.Phil, selaku Dosen Pembimbing II yang telah meluangkan banyak waktu untuk memberikan ilmu, arahan, bimbingan, dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.
2. Dr. Diah Mardiana, MS, yang telah memberikan arahan dan motivasi dalam penyelesaian skripsi ini.
3. Dr.Hermin Sulistyarti, selaku Dosen Penasehat Akademik yang selama masa studi telah memberikan arahan dan nasehat.
4. Bapak dan Ibu dosen Jurusan Kimia Universitas Brawijaya yang telah memberikan ilmu selama perkuliahan.
5. Lia Ninda Safitri, Karina Puspitasari, dan Novia Eka Setyatama yang telah membantu dan memberikan dorongan dalam penyelesaian skripsi ini.
6. segenap keluarga, sahabat, dan teman-teman kimia angkatan 2013 yang telah memberikan dorongan sehingga skripsi ini dapat selesai.

Malang, 02-08-2017

Penulis,

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
HALAMAN PERNYATAAN	iii
ABSTRAK	iv
ABSTRACT	v
KATA PENGANTAR	vi
DAFTAR ISI	viii
DAFTAR GAMBAR	ix
DAFTAR TABEL	x
 I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Batasan Masalah	2
1.4 Tujuan Penelitian	2
1.5 Manfaat Penelitian	2
 II DASAR TEORI	3
2.1 Penyimpanan Hidrogen	3
2.2 Klatrat Hidrat	4
2.3 Teori van der Waals-Platteuw	5
2.4 Energi Helmholtz dari Fungsi Partisi	6
2.5 Es VI dan Es VI/2	6
2.6 Potensial Kimia dan Transisi Fasa	7
 III METODE PENELITIAN	8
3.1 Tempat dan Waktu	8
3.2 Alat Penelitian	8
3.3 Tahapan penelitian	8
3.4 Prosedur Penelitian	8
3.5 Interaksi Hidrogen-Air	8
3.6 Energi Helmholtz Okupansi	10
3.7 Stabilitas Hidrat Hidrogen dari Es VI/2	11

IV HASIL DAN PEMBAHASAN	12
4.1 Konfigurasi Awal	12
4.2 Energi Helmholtz Molekul Hidrogen Tunggal	13
4.3 Potensial Kimia Gas Hidrogen	14
4.4 Okupansi Hidrogen dalam Es VI/2	16
V KESIMPULAN DAN SARAN	18
5.1 Kesimpulan	18
5.2 Saran	18
DAFTAR PUSTAKA	18

DAFTAR GAMBAR

2.1	Struktur es VI (kiri) dan es struktur VI/2 (kanan).	7
3.1	Model rotor kaku lurus hidrogen (kiri) dan model air TIP4P (kanan).	9
4.1	Volume molar es VI/2 sebagai fungsi dari tekanan.	12
4.2	Energi potensial struktur keadaan dasar es VI/2 sebagai fungsi dari volume.	13
4.3	Fungsi partisi non-ideal dari hidrat hidrogen es VI/2 sebagai fungsi dari tekanan	14
4.4	Energi Helmholtz molekul hidrogen tunggal sebagai fungsi dari tekanan.	15
4.5	Potensial kimia hidrogen sebagai fungsi tekanan dan temperatur[1].	15
4.6	Okupansi hidrogen dalam es VI/2 berdasarkan teori vdWP (garis halus) dibandingkan dengan hasil simulasi GCMC (garis putus-putus)	17

DAFTAR TABEL

3.1 Parameter potensial untuk hidrogen dan model air TIP4P. 9