

**STUDI DINAMIKA MOLEKULER TERHADAP
HIDRAT HIDROGEN TIPE C1**

**RIDWANSYAH
NIM H1021161002**

SKRIPSI



**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2023**

**STUDI DINAMIKA MOLEKULER TERHADAP
HIDRAT HIDROGEN TIPE C1**

**RIDWANSYAH
NIM H1021161002**

SKRIPSI



**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
PONTIANAK
2023**

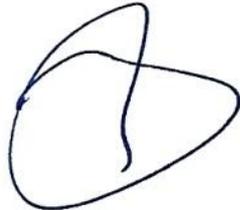
**STUDI DINAMIKA MOLEKULER TERHADAP
HIDRAT HIDROGEN TIPE C1**

Tanggung Jawab Yuridis Material Pada

Ridwansyah
NIM H1021161002

Disetujui Oleh

Pembimbing I



Yudha Arman, S.Si., M.Si., D.Sc.
NIP197805132003121002

Pembimbing II



Hasanuddin, S.Si., M.Si., Ph.D.
NIP198412162008121003

Disahkan Oleh

Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Tanjungpura



Dr. Gusrizal, S.Si., M.Si.
NIP197108022000031001

**KEMENTERIAN PENDIDIKAN, KEBUDAYAAN,
RISET, DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS TANJUNGPURA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
PONTIANAK**

TIM PENGUJI SKRIPSI

NAMA/ NIP	TIM PENGUJI	GOLONGAN/ JABATAN	TANDA TANGAN
Yudha Arman, S.Si., M.Si., D.Sc. NIP197805132003121002	Pimpinan Sidang (merangkap anggota penguji)	IIIc/ Lektor	
Hasanuddin, S.Si., M.Si., Ph.D. NIP198412162008121003	Sekretaris Sidang (merangkap anggota penguji)	IIIc/ Lektor	
Dr. Bintoro Siswo Nugroho, S.Si., M.Si. NIP198102062006041003	Ketua Penguji	IIId/ Lektor	
Zulfian, S.Si., M.Si. NIP198812142020121005	Anggota Penguji	IIIb/ Asisten Ahli	

Berdasarkan Surat Keputusan Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengatahuan Alam

Universitas Tanjungpura Pontianak

Nomor: 1226/UN22.8/TD.06/2023

Tanggal: 3 April 2023

Tanggal Lulus: 14 April 2023

Studi Dinamika Molekuler Terhadap Hidrat Hidrogen Tipe C1

Abstrak

Telah dilakukan pemodelan struktur hidrat hidrogen tipe C1 menggunakan metode dinamika molekuler. Hidrat hidrogen adalah substansi material berstruktur es yang kisi-kisinya ditempati oleh molekul gas hidrogen. Model air TIP4P/Ice digunakan untuk mereplika molekul air sebagai substansi berstruktur es yang bersifat *rigid* dengan penyeragaman *bond* dan *angle* menggunakan Rodrigues *Rotation Formula*. Molekul gas hidrogen dimodelkan sebagai dua partikel yang berada di pusat massanya. Ukuran sistem hidrat hidrogen C1 yang digunakan adalah $26,18 \text{ \AA} \times 45,34 \text{ \AA} \times 12,23 \text{ \AA}$ yang terdiri dari 576 molekul air dan 18 molekul hidrogen. Syarat batas periodik digunakan untuk menghindari adanya efek permukaan pada sistem. Profil fungsi distribusi radial diamati setelah proses simulasi minimisasi. Pasangan antar molekul air terdekat ditemukan pada jarak $1,55 \text{ \AA}$ dan pasangan berikutnya ditemukan pada jarak $1,85 \text{ \AA}$ hingga $2,75 \text{ \AA}$. Pasangan antar molekul air dan hidrogen terdekat ditemukan pada jarak $0,95 \text{ \AA}$ dan pasangan berikutnya ditemukan pada jarak $1,75 \text{ \AA}$ hingga $2,05 \text{ \AA}$. Pasangan antar molekul gas hidrogen terdekat ditemukan pada jarak $2,65 \text{ \AA}$ hingga $3,05 \text{ \AA}$ dan pasangan berikutnya ditemukan pada jarak $3,15 \text{ \AA}$ hingga $3,35 \text{ \AA}$.

Kata kunci: Dinamika Molekuler, Hidrat C1, Model Air TIP4P/Ice, Molekul Gas Hidrogen.

Molecular Dynamics Studies of C1 Type Hydrogen Hydrates

Abstract

The structure of C1-type hydrogen hydrate has been modeled using molecular dynamics method. Hydrogen hydrate is an ice-structured material substance whose lattice is occupied by hydrogen gas molecules. The TIP4P/Ice water model is used to replicate water molecules as a rigid ice-structured substance with bond and angle uniformity using the Rodrigues Rotation Formula. Hydrogen gas molecules are modeled as two particles at their center of mass. The size of the C1 hydrogen hydrate system used is $26,18 \text{ \AA} \times 45,34 \text{ \AA} \times 12,23 \text{ \AA}$ consisting of 576 water molecules and 18 hydrogen molecules. Periodic boundary conditions were used to avoid any surface effects on the system. Radial distribution function were observed after the minimization simulation process. The first nearest neighbor intermolecular pair of water molecules is found at a distance of $1,55 \text{ \AA}$ and the next pairs are found at a distance of $1,85 \text{ \AA}$ to $2,75 \text{ \AA}$. The first nearest neighbor intermolecular pair of water and hydrogen molecules is found at a distance of $0,95 \text{ \AA}$ and the next pair is found at a distance of $1,75 \text{ \AA}$ to $2,05 \text{ \AA}$. The first nearest neighbor intermolecular pair of hydrogen gas is found at a distance of $2,65 \text{ \AA}$ to $3,05 \text{ \AA}$ and the next pair is found at a distance of $3,15 \text{ \AA}$ to $3,35 \text{ \AA}$.

Keywords: *Molecular Dynamics, C1 Hydrate, Water Model TIP4P/Ice, Hydrogen Gas Molecule.*

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “**Studi Dinamika Molekuler terhadap Hidrat Hidrogen Tipe C1**”. Skripsi ini merupakan salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains (S.Si) pada Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Tanjungpura Pontianak.

Penulis menyadari bahwa selama proses penulisan skripsi ini tidak lepas dari dukungan dan bimbingan oleh berbagai pihak, maka dari itu penulis ingin menyampaikan ucapan terimakasih yang sebesar-besarnya kepada:

1. Bapak Yudha Arman, S.Si., M.Si., D.Sc. dan Bapak Hasanuddin, S.Si., M.Si., Ph.D., selaku dosen pembimbing pertama dan kedua, dengan kerendahan hatinya telah bersedia membimbing, mengarahkan, dan memberikan masukan selama penelitian ini dilakukan.
2. Bapak Dr. Bintoro Siswo Nugroho, S.Si., M.Si. dan Bapak Zulfian, S.Si., M.Si., selaku dosen penguji pertama dan kedua, yang telah bersedia memberikan kritik dan saran yang sangat membangun dalam penulisan skripsi ini.
3. Ibu Nurhasanah, S.Si., M.Si., selaku dosen pembimbing akademik yang telah memberikan semangat serta dukungan selama proses perkuliahan.
4. Bapak dan Ibu dosen pengajar di Jurusan Fisika yang telah memberikan banyak ilmu serta motivasi yang sangat berguna bagi penulis.
5. Bapak Nuriman dan Ibu Norsiah selaku orang tua yang selalu mendukung serta memberikan do'a sehingga penulis dapat menyelesaikan perkuliahan hingga menyelesaikan tugas akhir ini.
6. Sahabat-sahabat seperjuangan Fisika 2016 dan teman-teman di lingkungan Universitas Tanjungpura yang senantiasa selalu memberikan dukungan serta motivasi selama masa perkuliahan.
7. Serta semua pihak yang tidak dapat disebutkan satu-persatu baik secara langsung maupun tidak langsung yang telah membantu dan mendukung dalam penyelesaian skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa terdapat banyak kekurangan baik dalam penyajian maupun materi yang disampaikan. Oleh karena itu, penulis mengucapkan mohon maaf dan menerima kritik dan saran dengan senang hati. Penulis berharap agar skripsi ini dapat bermanfaat untuk semua pihak yang membutuhkan serta menjadi sediaan informasi untuk penelitian selanjutnya, terkhusus dalam tema dinamika molekuler.

Pontianak, 14 April 2023

Ridwansyah

DAFTAR ISI

	Halaman
PRAKATA	vi
DAFTAR ISI.....	viii
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR TABEL.....	xi
DAFTAR LAMPIRAN.....	xii
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	4
1.3 Batasan Masalah.....	4
1.4 Tujuan Penelitian.....	5
1.5 Manfaat Penelitian.....	5
BAB II DASAR TEORI.....	6
2.1 Penyimpanan Hidrogen	6
2.2 Hidrat Hidrogen.....	7
2.3 Simulasi Dinamika Molekuler.....	9
2.4 <i>State of The Art</i> Hidrat Hidrogen Tipe C1.....	11
BAB III METODOLOGI PENELITIAN	13
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	13
3.2 Prosedur Simulasi.....	13
3.2.1 Inisialisasi Koordinat Molekul.....	13
3.2.2 Simulasi.....	15
3.3 Analisis Hidrat Hidrogen C1	16
3.4 Sistematika Alur Penelitian	16
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	18
4.1 Inisialisasi Koordinat Molekul	18
4.2 Simulasi	21
4.3 Fungsi Distribusi Radial.....	24
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	27
5.1 Kesimpulan.....	27

5.2	Saran.....	27
	DAFTAR PUSTAKA	28
	LAMPIRAN.....	31

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Struktur hidrat hidrogen (a) tipe C0 (b) tipe C1 (c) tipe C2.....	8
Gambar 2.2	Diagram alir metode dinamika molekuler.....	10
Gambar 3.1	Ilustrasi memutar atom hidrogen pada molekul air.....	14
Gambar 3.2	(a) Model molekul air TIP4P/Ice dan (b) Model molekul hidrogen yang digunakan.....	15
Gambar 3.3	Diagram alir penelitian.....	17
Gambar 4.1	Es II/hidrat hidrogen C1 (a) belum terisi molekul hidrogen dan (b) hidrat hidrogen C1/es II terisi molekul hidrogen.....	20
Gambar 4.2	Hidrat hidrogen C1 $2 \times 2 \times 2$ <i>unit cell</i>	21
Gambar 4.3	Struktur hidrat hidrogen C1 $2 \times 2 \times 2$ <i>unit cell</i> dengan perbandingan molekul hidrogen dan air 1:32 setelah minimisasi	24
Gambar 4.4	Profil fungsi distribusi radial pasangan atom.....	25

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Parameter energi potensial yang digunakan.....	15
--	----

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. <i>Script</i> Program TIP4P/Ice.....	31
Lampiran 2. Fungsi Program TIP4P/Ice	33
Lampiran 3. Input File Minimisasi.....	35
Lampiran 4. Data File Minimisasi	37

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Energi telah menjadi ukuran kemajuan suatu negara, terutama terkait dengan kemajuan perekonomian. Tingkat ketersediaan energi dan tingkat konsumsi energi sangat penting karena dapat menentukan pertumbuhan ekonomi suatu negara (Yandri *et al.*, 2018). Sumber energi fosil seperti batu bara, minyak dan gas bumi saat ini masih menjadi sumber energi utama di berbagai negara. Namun dengan seiring berjalannya waktu, kebutuhan akan energi menjadi salah satu masalah krisis yang dihadapi seluruh negara. Hal itu disebabkan oleh konsumsi energi yang berlebihan pada setiap kegiatan manusia baik pada sektor industri maupun rumah tangga. Selain permasalahan mengenai kelangkaan sumber energi fosil pada masa mendatang, masalah lain yang ditimbulkan dari penggunaan energi fosil adalah energi tersebut menyumbang emisi gas CO₂ terbesar yang kemudian menjadikannya sebagai salah satu penyebab kerusakan lingkungan seperti hujan asam, perubahan iklim serta pemanasan global (Astra, 2010). Jika kondisi ini terus dibiarkan, maka penggunaan sumber energi fosil ini semakin lama akan merusak keseimbangan lingkungan. Oleh karena itu, penggunaan energi baru terbarukan (EBT) yang ramah lingkungan perlu di tingkatkan sebagai alternatif pengganti energi fosil.

Konsumsi energi di Indonesia setiap tahun terus meningkat seiring pertumbuhan jumlah penduduk, kegiatan ekonomi, dan perkembangan industri. Komposisi pemakaian jenis energi di Indonesia pada tahun 2019 terdiri atas batu bara sebesar 37,15%, disusul dengan minyak bumi sebesar 33,58%, gas alam sebesar 20,12%, serta bauran EBT sebesar 9,15%. Data tersebut menunjukkan bahwa pemanfaatan EBT masih belum maksimal karena masih didominasi oleh peran sumber energi fosil. Sedangkan cadangan sumber energi fosil dari waktu ke waktu semakin menipis dan tidak dapat diperbarui. Namun jika dibandingkan dengan data sebelumnya, persentase angka bauran EBT pada tahun 2019 mengalami kenaikan sekaligus menunjukkan tren positif untuk capaian energi

primer dibandingkan capaian pada tahun 2018 yang hanya sebesar 8,55% (Kementerian ESDM, 2019).

Peraturan Presiden (PP) No.22 tahun 2017 tentang Rencana Umum Energi Nasional (RUEN) menyebutkan pemodelan pasokan energi primer EBT dalam bauran energi primer 2050 paling sedikit sebesar 31,2% (315,7 MTOE). Bauran EBT tersebut terdiri dari bioenergi 39%, panas bumi 18,6%, air 17,5%, surya 9,4%, angin 8,7%, mini dan mikrohidro 3,2%, serta EBT lainnya 3,1%. Untuk mendorong penggunaan EBT sebagai sumber energi primer, diperlukan tambahan sumber energi alternatif lain yang memiliki potensi. Diantara energi alternatif, gas hidrogen (H_2) adalah pilihan tepat sebagai bahan bakar atau penyimpan energi karena dapat diperbaharui dan bebas emisi (Martak et al., 2016; Mazloomi dan Gomes, 2012). Gas hidrogen dapat menjadi alternatif pemasok energi primer untuk pembangkit listrik dengan sel bahan bakar, sebagai bahan bakar mesin kendaraan, serta penggunaan-penggunaan lainnya baik secara komersial maupun non komersial. Walaupun saat ini masih dalam tahap pengembangan dan masih dalam skala laboratorium, penggunaan gas ini untuk keperluan tersebut diyakini tidak merusak lingkungan. Hal itu disebabkan oleh sifat hidrogen yang ramah lingkungan dan kemudahannya dikonversi menjadi energi. Penggunaan gas hidrogen sebagai bahan bakar sama sekali tidak memberi kontribusi terhadap efek rumah kaca, hujan asam, dan kerusakan lapisan ozon. Disisi lain, gas metana (CH_4) juga dapat digunakan sebagai alternatif energi. Namun, proses penambangan gas metana dihadapkan pada isu lingkungan yang lebih besar karena dapat mengakibatkan terjadinya deformasi dibawah permukaan laut. Tidak hanya itu, dampak buruk gas metana yang terlepas ke atmosfer dapat menyebabkan efek rumah kaca selain karbondioksida (CO_2) dan nitrogen oksida (N_2O) (Badan Pusat Statistik, 2019).

Pemanfaatan gas hidrogen sebagai bahan bakar alternatif saat ini masih terkendala pada belum optimalnya media penyimpanan yang telah berhasil disintesa, baik dari segi kapasitas penyimpanan maupun dalam kemudahan transportasi. Saat ini, metode yang digunakan salah satunya adalah penyimpanan gas didalam padatan kristal es yang disebut gas hidrat. Gas hidrat merupakan

kristal padat menyerupai es yang terbentuk melalui ikatan hidrogen pada suhu dan tekanan tertentu. Gas hidrat tersusun atas molekul air (*host molecule*) yang membentuk kurungan dan molekul gas (*guest molecule*) yang terperangkap dalam kurungan air tersebut (Cai *et al.*, 2019). Dengan menggunakan gas hidrogen sebagai molekul yang mengisi hidrat, maka jenis hidrat tersebut dinamakan hidrat hidrogen. Beberapa jenis hidrat hidrogen memiliki kemampuan untuk dijadikan sebagai media penyimpanan serta mudah untuk dimobilisasi. Diantara jenis hidrat tersebut, hidrat hidrogen berstruktur es II dapat digunakan sebagai pilihan (Hakim *et al.*, 2010).

Struktur es II dilaporkan mampu menampung sejumlah molekul hidrogen dengan perbandingan terhadap jumlah molekul air sebesar 1:6. Hidrat hidrogen ini dikenal juga dengan istilah *filled ice* II atau hidrat hidrogen C1. Proses pembentukan struktur hidrat dilakukan dengan mengisi lokasi pada bagian kisi-kisi es dengan molekul gas hidrogen untuk mendapatkan senyawa padat yang stabil. Kondisi tekanan tinggi diperlukan untuk mengimbangi interaksi repulsif antara molekul air dan molekul hidrogen tamu untuk menjaga stabilitas senyawa. Dibandingkan dengan struktur es lain, struktur *filled ice* II lebih stabil dalam rentang tekanan dan suhu yang lebih luas (Hakim *et al.*, 2010). Hal tersebut menunjukkan bahwa struktur es II dapat dijadikan sebagai alternatif media penyimpanan molekul gas hidrogen. Namun kendala yang masih dihadapi adalah hidrat hidrogen C1 ini belum dapat dibuat secara lebih ekonomis. Hal ini dikarenakan proses sintesis masih dilakukan pada tekanan yang sangat tinggi, yaitu berkisar antara 0,75 – 3,1 GPa pada temperatur 295 K (Vos *et al.*, 1993).

Namun, pada studi dan eksperimen penelitian sebelumnya menemukan bahwa pada tekanan 1 GPa dan temperatur 291 K pada hidrat hidrogen C1 terjadi difusi cepat hidrogen dalam pembentukan hidrat (Okuchi *et al.*, 2007, Harada *et al.*, 2019). Studi lainnya juga menemukan bahwa ketika terdapat kisi yang kosong pada struktur hidrat, molekul hidrogen akan melakukan perpindahan antar kisi. Tidak terdapat energi penghalang ketika proses perpindahan tersebut terjadi (Arman dan Miura, 2018). Berdasarkan hal tersebut, diperlukan penelitian lebih lanjut mengenai dinamika molekul hidrogen dan struktur es II ketika menampung

molekul gas didalamnya. Dinamika pada struktur es menentukan secara implisit kondisi kestabilan hidrat hidrogen terhadap berbagai kondisi termodinamika.

Dalam penelitian ini, akan dilaporkan hasil simulasi dinamika molekuler dari hidrat hidrogen C1. Struktur hidrat akan dipelajari melalui simulasi minimisasi energi pada sistem struktur kristal. Untuk kebutuhan ini, hidrat hidrogen dimodelkan memiliki struktur es II dengan molekul hidrogen menempati kisi-kisi pada kristal es II tersebut. Jumlah molekul hidrogen yang digunakan bervariasi, dengan rasio jumlah molekul hidrogen-molekul air yang digunakan mengadopsi kondisi eksperimen sebelumnya. Hasil analisis yang diperoleh diyakini dapat berkontribusi terhadap studi hidrat hidrogen C1 dalam upaya memaksimalkan jumlah molekul gas hidrogen yang dapat ditampung. Selain itu, hasil penelitian berupa hubungan antara kondisi termodinamika dengan struktur hidrat diyakini akan memberikan sediaan data yang berguna untuk perolehan kondisi sintesa yang lebih optimal dan ekonomis.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang pada poin sebelumnya, maka rumusan masalah penelitian ini adalah:

- 1 Bagaimana memodelkan hidrat hidrogen C1?
- 2 Bagaimana profil fungsi distribusi radial struktur hidrat hidrogen C1 setelah proses minimisasi?

1.3 Batasan Masalah

Agar pembahasan materi dalam penelitian ini tidak meluas, maka pada penelitian ini penulis memberikan batasan masalah diantaranya adalah:

1. Hidrat hidrogen yang digunakan pada penelitian ini adalah hidrat hidrogen tipe C1 dengan ukuran $2 \times 2 \times 2$ *unit cell*.
2. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah metode dinamika molekuler.
3. Interaksi antar partikel pada sistem menggunakan interaksi klasik yang berlaku persamaan gerak Newton.
4. Proses simulasi menggunakan perangkat lunak LAMMPS.

1.4 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah:

1. Memodelkan hidrat hidrogen C1.
2. Mengetahui profil fungsi distribusi radial struktur hidrat hidrogen C1 setelah proses minimisasi.

1.5 Manfaat Penelitian

Diharapkan hasil dari penelitian ini dapat bermanfaat sebagai referensi untuk proses simulasi sistem hidrat sejenis. Selain itu, penelitian ini akan menambah sediaan data bagi proses pengembangan dan penyempurnaan hidrat hidrogen menuju pemanfaatannya sebagai salah satu alternatif sumber energi terbarukan yang tidak berdampak buruk bagi lingkungan.