

PENGARUH PENAMBAHAN Na-ALGINAT DALAM PROSES EKSFOLIASI GRAFIT DENGAN METODE PENCAMPURAN**EFFECT OF Na-ALGINATE ADDITION IN EXFOLIATION PROCESS OF GRAPHITE WITH MIXING METHOD**

Muhammad Arsyik Kurniawan*, Rohini Pujiarti

Program Studi Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Islam Indonesia
Jalan Kaliurang KM 14,5 Yogyakarta 55584
Email : m.arsyik@gmail.com

Received: 2 Februari 2017; Accepted: 23 Maret 2017

Abstrak. Studi pengaruh penambahan Na-alginat dalam proses eksfoliasi grafit telah dilakukan melalui sintesis dan kajian komputasi menggunakan teori fungsi kerapatan pada level B3LYP/6-31G(d). Penelitian ini bertujuan mengkaji pengaruh Na-alginat terhadap pembentukan partikel grafen sebagai bentuk interaksi elektrostatik antar keduanya. Pencampuran material dilakukan menggunakan metode percampuran kimia. Karakterisasi komposit dilakukan menggunakan spektrofotometer inframerah (FT-IR) untuk mengamati perubahan serapan dan gugus fungsi komposit. Energi disosiasi ikatan (BDE) didapatkan 14 kali lebih besar akibat pengaruh interaksi Na-alginat dalam proses eksfoliasi membentuk kompleks komposit. Kajian ini akan sangat berkontribusi dalam mendesain dan sintesis senyawa lapis tipis semikonduktor dari bahan grafit.

Kata kunci : Na-alginat, grafit, grafen, eksfoliasi, semikonduktor, BDE

Abstract. The study of the effect of Na-alginate addition in graphite exfoliation process has been done through synthesis and computational studies using density function theory at B3LYP/6-31G(d) level. This study aims to assess the impact of particles Na-alginate it was reflected from graphene as an electrostatic interaction. The composite characterization was performed using an infrared spectrophotometer to observe changes in absorption and composite functional group. Bond dissociation energy (BDE) was obtained 14 times higher due to the influence of Na-alginate interactions in the exfoliation process to form a complex composite. This study would have a good contribution in design and synthesis of semiconductor thin layer compounds from graphite materials

Keywords: Na-alginate, graphite, graphene, exfoliation, semiconductor, BDE

PENDAHULUAN

Cahaya matahari merupakan sumber energi yang sangat besar dan tidak akan pernah habis, cahaya yang dipancarkan ke bumi dapat dimanfaatkan untuk berbagai macam kebutuhan diantaranya pembangkit listrik dengan sistem sel surya, fotovoltaic [1], DSSC (Dye Sensitized Solar Cell) [2], juga dalam reaksi fotoredoks sebagai pembersihan diri dan anti bakteri [3, 4].

Sel surya adalah jenis teknologi penyimpan sekaligus konverter energi cahaya matahari menjadi energi listrik. secara langsung menggunakan prinsip fotovoltaik. Oleh karena itu, teknologi semikonduktor sekarang ini banyak dikembangkan untuk memunculkan inovasi dalam sel surya, salah satunya penggunaan material grafit. Grafit adalah salah satu bentuk alotrop dari bahan dasar karbon yang tersusun dari tumpukan lembaran planar dua-dimensi (2D), memiliki bentuk seperti sarang lebah dengan panjang ikatan karbon-karbon sebesar 1,42 Å [5], elektron di dalam grafit berperilaku seperti partikel relativitas tak bermassa dan terdelokalisasi, mempunyai keistimewaan seperti sifat mekanis

seperti logam, ringan dan mempunyai sifat yang baik serta dari segi ekonomi bahan dasar grafit buatan tersedia melimpah dan murah [6].

Penelitian terdahulu yang membuktikan sifat semikonduktor pada grafit, diantaranya sebagai semikonduktor sel surya [7], grafit sebagai semikonduktor fotokatalist [8], dan grafit-grafen sebagai material semikonduktor magnet dielektrik [9], dan juga banyak digunakan sebagai elektroda karena sifat konduktornya. Namun, grafit dapat teroksidasi oleh oksigen membentuk CO₂ pada temperatur 700 °C [10].

Penggunaan grafit sebagai material semikonduktor pembangun sel surya, grafit harus dieksfoliasikan terlebih dahulu untuk membentuk grafen. Grafen memiliki struktur lembaran planar, atom karbon dalam setiap lapisnya berbentuk segienam yang terikat secara kovalen.

Alginat yang merupakan molekul polimer alam dari ganggang laut, polimer polianion yang secara alami mampu mengikat kation dalam bentuk kompleks kelat ligan, dimana alginat berposisi

sebagai ligan, dan kation sebagai atom pusat sehingga dengan kata lain dapat digunakan sebagai adsorben alami. Keberadaan kation Na dalam Na-alginat diharapkan dapat digunakan untuk berikatan dengan partikel grafen membentuk lapis tipis.

Mengadaptasi dari sifat grafit dan Na-alginat maka dalam penelitian ini, Na-alginat didesain skema proses pembentukkan grafen menggunakan material Na-alginat menjadi komposit melalui metode pencampuran. Diharapkan dapat membentuk komposit yang terdiri dari grafen dengan sifat semikonduktor yang dapat digunakan sebagai material penyusun solar sel. Interaksi grafen yang terbentuk dianalisis dengan pemodelan kimia komputasi untuk mengetahui stabilitas interaksi struktur baik dari ikatan yang terbentuk.

METODE PENELITIAN

Bahan yang digunakan adalah karbon (grafit) yang dibeli dari Merck.Co., material Na-alginat (viskositas 1200 cps, pH=7-8) dari Kelco Co, dan aquades Peralatan yang digunakan adalah alat gelas, Spektrofotometer Inframerah (Shimadzu FTIR 8201 PC).

Sintesis komposit grafen/Na-Alginat

Sebanyak 125 mL akuades disiapkan didalam gelas beker 250 mL, dilanjutkan dengan memasukkan serbuk Na-alginat sebanyak 0.5 gram kemudian ditambahkan sebanyak 1 gram serbuk grafit. Campuran diaduk selama 24 jam. Setelah itu campuran dikeringkan dalam oven pada suhu 60°C. Hasil komposit yang terbentuk berupa serbuk kemudian dianalisis dengan spektrofotometer inframerah

Studi Komputasi Menghitung Energi

Perhitungan komputasi untuk semua model dioptimasi melalui perangkat lunak Gaussian 09W [11], dengan menggunakan metode teori fungsi kerapatan pada level B3LYP/6-31G(d) untuk menghitung energi dan *Bond Dissociation Energy* (BDE). Tujuan menghitung BDE untuk mengetahui seberapa besar sensitivitas ikatan kompleks yang terbentuk antara molekul grafen/alginat (G/A) dan grafen/Na-alginat (G/N/A), dengan rumus sebagai berikut :

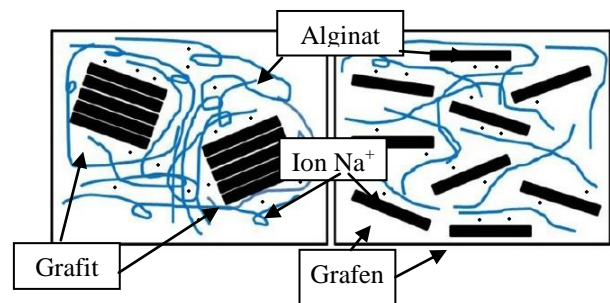
$$E1 = E(G) + E(A) - E(G/A)$$

$$E2 = E(G) + E(N) + E(A) - E(G/N/A)$$

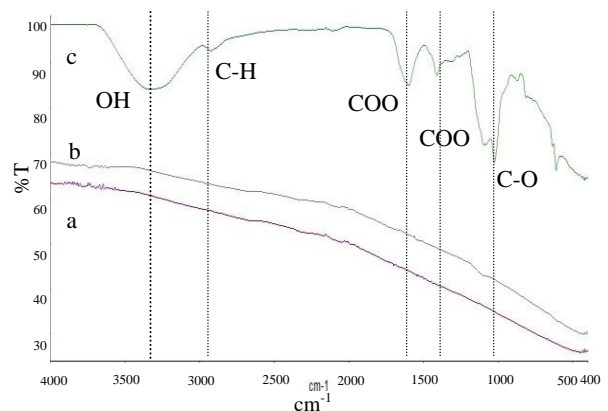
dimana E1 adalah besar BDE dari kompleks (G/A) yang terbentuk dari molekul grafen, E(G) dan alginat, E(A). E2 adalah nilai BDE dari kompleks (G/N/A) yang terbentuk dari molekul grafen, E(G), kation Na E(N) dan alginat, E(A).

HASIL PENELITIAN

Komposit disintesis dengan melarutkan Na-alginat sebanyak 0,5 gram dilanjutkan dengan penambahan 1 gram powder grafit, tanpa variasi komposisi berat Na-alginat, hal ini dimaksudkan untuk mendapatkan dasar asumsi Na-alginat memiliki kemampuan berinteraksi dengan grafit, serta mengeksfoliasi partikel grafen. Percampuran secara kimia diharapkan lebih memaksimalkan interaksi antar partikel molekul. Interaksi grafen-Na-Alginat ditambah gaya akrobat proses pengadukan menyebabkan terlepasnya lembaran grafen dari partikel grafit, dan berakrobat menurunnya jumlah partikel grafit yang ada. Dan yang terbentuk adalah partikel baru grafen-Na-Alginat, seperti yang diilustrasikan dalam Gambar 1.



Gambar 1. Ilustrasi grafit yang mengalami pemisahan (separation) dengan sesama partikel grafit(a). Grafit yang mengalami proses eksfoliasi membentuk grafen (b)

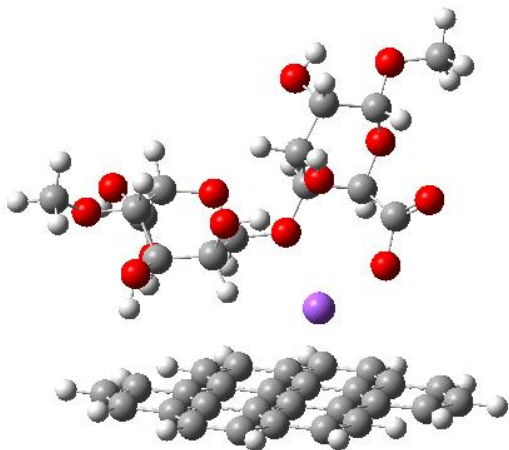


Gambar 2. Spektra inframerah dari karbon grafit (a), komposit grafen/Na-alginat (b), Na-alginat (c)

Spektra grafit Gambar 2a memiliki profil penampilan spektra yang datar namun tetap memiliki serapan inframerah yang besar disetiap rentang bilangan gelombang inframerah, hal ini disebabkan spektra serapan dari grafit yang tidak murni. karena grafit dapat menyerap setiap rentang bilangan gelombang inframerah yang diberikan [12]. Pembentukan grafen dari partikel grafit diidentifikasi dari penurunan daya serapan

infrared yang awalnya kuat dan beragam dari gambar (2a) menjadi menurun pada gambar (2b)

Gambar 2c menunjukkan spektra inframerah dari Na-alginat memperlihatkan puncak serapan pada bilangan di wilayah gelombang $3450,40\text{ cm}^{-1}$; $2920,66\text{ cm}^{-1}$; $1611,34\text{ cm}^{-1}$; $1440,23\text{ cm}^{-1}$; dan $1043,52\text{ cm}^{-1}$. Puncak-puncak tersebut menginter-pretasikan ikatan yang terdapat pada struktur Na-alginat di antaranya, uluran vibrasi ikatan O-H pada puncak serapan $3450,40\text{ cm}^{-1}$, uluran vibrasi C-H pada puncak serapan $2920,66\text{ cm}^{-1}$, uluran asimetris COO^- pada bilangan gelombang $1611,34\text{ cm}^{-1}$, uluran simetris COO^- pada bilangan gelombang $1440,23\text{ cm}^{-1}$, vibrasi $-\text{C}-\text{O}$ dari kelompok eter pada $1043,52\text{ cm}^{-1}$ [13].



Gambar 3. Interaksi yang terjadi antara grafen-Na-alginat

Tabel 1. Perbandingan energi interaksi alginat/grafen

Komponen	Energi molekul (E1) (Ha)	Energi molekul (E2) (Ha)
Alginat	-1524.556	-1524.55
Na	-	-162.080
Grafen	-1075.534	-1075.53
Kompleks	-2600.097	-2762.28
BDE	0.006387	0.11634

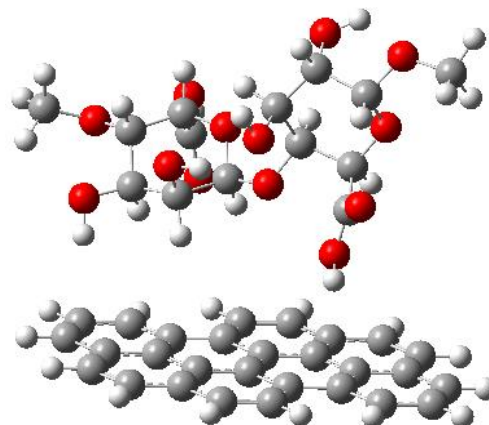
*BDE = *Bond Dissociation Energy*

Dalam komposit 2b spektra serapan Na-alginat tak terlihat, hal ini bisa disebabkan oleh jumlah yang jauh lebih sedikit dibandingkan jumlah grafit yang tereksfoliasi menjadi grafen, sehingga bisa jadi menutupi polimer Na-alginat dengan membentuk kompleks komposit grafen/Na-alginat seperti pada gambar 3.

Proses eksfoliasi partikel grafit membentuk lempengan-lempengan struktur grafen (gambar 3) sebagai akibat interaksi elektrostatis karbon (grafen)-Na-alginat. Alginat dapat berposisi sebagai ligan melalui atom O, maupun gugus karbonil yang dimiliki untuk berinteraksi dengan kation Na^+ .

Dengan banyaknya atom O sebagai donor pasangan elektron untuk berinteraksi dengan Na^+ , maka dapat disimpulkan bahwa interaksi antara Na-alginat juga kuat. Ion Na^+ juga dapat berinteraksi dengan awan elektron yang dimiliki oleh grafen membentuk interaksi elektrostatis.

Untuk mengetahui besarnya pengaruh Natrium dalam pembentukan kompleks grafen/Na-alginat dilakukan melalui perhitungan *Bond Dissociation Energy* (BDE) yang menyatakan kekuatan ikatan maupun interaksi dari kompleks yang terbentuk, semakin rendah nilai BDE menjelaskan rendahnya molekul kompleks untuk terbentuk dari molekul penyusunnya, begitupula sebaliknya



Gambar 4. Interaksi antara alginat dan grafen

Kalkulasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan basis set 6-31G(d) membandingkan antara bentuk molekul kompleks dari gambar 3 dan gambar 4 didapatkan hasil seperti didalam tabel 1 dimana memperlihatkan nilai BDE meningkat dengan keberadaan ion natrium dari sebesar ± 14 kali, dari $0,0061387\text{ Ha}$ ($4,023\text{ kcal/mol}$) menjadi sebesar $0,116343\text{ Ha}$ ($73,296\text{ kcal/mol}$).

Lempengan grafen tidak bisa terlepas dari partikel grafit, dikarenakan interaksi dengan sesama grafen lebih besar dibandingkan interaksi antara alginat dengan grafit, akan tetapi dengan adanya kation natrium (Na^+) interaksi elektrostatis lebih memungkinkan terjadi. Lamanya proses pengadukan membantu interaksi antara Na-alginat dengan grafit dalam proses eksfoliasi grafit dengan adanya interaksi elektrosatis grafen-Na-Alginat.

KESIMPULAN

Kajian sintesis komposit grafen/Na-alginat telah dilakukan untuk mempelajari pengaruh penambahan Na-alginat dengan percampuran secara kimia dan pengadukan secara mekanik untuk meningkatkan proses pengelupasan material grafit akibat interaksi dengan Na-alginat. Karakterisasi menggunakan spektra FT-IR mengindikasikan

berhasilnya proses eksfoliasi grafit. Peran keberadaan ion Na^+ sangat penting dalam proses eksfoliasi dalam bentuk interaksi elektrostatis antara Na-alginat dengan partikel grafen, hal ini didukung dengan data BDE hasil komputasi.

UCAPAN TERIMAKASIH

Kami mengucapkan terimakasih atas dukungan dan fasilitas dari Lab. Kimia dan Lab. Komputasi, Prodi Kimia FMIPA UII.

DAFTAR PUSTAKA

- [1] W. Shockley and H. J. Queisser, "Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells," *J. Appl. Phys.*, vol. 32, no. 3, p. 510, 1961.
- [2] B. O'Regan and M. Grätzel, "A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO_2 films," *Nature*, vol. 353, no. 6346, pp. 737–740, Oct. 1991.
- [3] R. A. Damodar, S.-J. You, and H.-H. Chou, "Study the self cleaning, antibacterial and photocatalytic properties of TiO_2 entrapped PVDF membranes," *J. Hazard. Mater.*, vol. 172, no. 2–3, pp. 1321–1328, Dec. 2009.
- [4] W. Sangchay, "The Self-cleaning and Photocatalytic Properties of TiO_2 Doped with SnO_2 Thin Films Preparation by Sol-gel Method," *Energy Procedia*, vol. 89, pp. 170–176, Jun. 2016.
- [5] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss, "Band Structure of Graphite," *Phys. Rev.*, vol. 109, no. 2, pp. 272–279, Jan. 1958.
- [6] A. Artadi, Sudaryo, and Aryadi, "Penggunaan grafit batu baterai sebagai alternatif elektroda spektrofotometri emisi," *JFN*, vol. 1, no. 2, Nov. 2007.
- [7] D. Y. Rahman, M. Rokhmat, E. Yuliza, E. Sustini, and M. Abdullah, "New Design of Potentially Low-cost Solar Cells Using TiO_2 /Graphite Composite as Photon Absorber," *ArXiv150607953 Cond-Mat*, Jun. 2015.
- [8] Q. Xiang, J. Yu, and M. Jaroniec, "Graphene-based semiconductor photocatalysts," *Chem Soc Rev*, vol. 41, no. 2, pp. 782–796, 2012.
- [9] S. Tongay, "Graphite-graphene semiconductor junctions and magneto-dielectric coupling in Schottky diodes," UNIVERSITY OF FLORIDA, 2010.
- [10] D. Hanaor, M. Michelazzi, J. Chenu, C. Leonelli, and C. C. Sorrell, "The effects of firing conditions on the properties of electrochemically deposited titanium dioxide films on graphite substrates," *J. Eur. Ceram. Soc.*, vol. 31, no. 15, pp. 2877–2885, Dec. 2011.
- [11] M. J. Frisch *et al.*, *Gaussian 09*. Wallingford, CT, USA: Gaussian, Inc., 2009.
- [12] R. A. Friedel and G. L. Carlson, "Infrared spectra of ground graphite," *J. Phys. Chem.*, vol. 75, no. 8, pp. 1149–1151, Apr. 1971.
- [13] P. L. Nayak and D. Sahoo, "Chitosan-alginate composites blended with cloisite 30B as a novel drug delivery system for anticancer drug paclitaxel," *Int. J. Plast. Technol.*, vol. 15, no. 1, pp. 68–81, Jun. 2011.