

## Simulasi Molekuler Pemisahan Larutan Air – Methanol dengan *Carbon Nanotubes Membrane*

WINARTO

ABSTRACT

Bio-methanol is a renewable energy source as an alternative to replace fossil fuels. Bio-methanol can be produced from biomass or biodegradable waste through fermentation process. Distillation is a common method to separate methanol from water after the fermentation. However, distillation requires a large amount of energy and therefore an innovation is needed to develop more efficient methods. This research performed molecular dynamics simulation to study the separation of methanol from water with carbon nanotubes (*CNT*) membranes under the influence of an electric field. In the absence of an electric field, water molecule and methanol molecule flow across the *CNT* membrane at the same rate. This means the membrane has no separation effect. In contrast, with an electric field only water molecules flow through the membrane and methanol molecules are rejected. This means the membrane is able to separate methanol from water. Water molecules in the membrane form an ordered structure. The formation of the ordered structure causes the electrostatic interactions between water molecules in the *CNT* stronger. As a result, water molecules enter the membrane more easily than methanol molecules, resulting in the separation effect.

**Keywords:** carbon nanotubes, membrane, separation, water, methanol

### PENDAHULUAN

*Bio-methanol* merupakan sumber energi terbarukan (*renewable energy*) yang dapat digunakan sebagai alternatif pengganti bahan bakar *fossil*. Methanol dapat dicampur dengan bensin sebagai bahan bakar mesin kendaraan transportasi. Campuran bensin dengan methanol dapat meningkatkan *performance* mesin dan dapat mengurangi emisi gas buang (S. Liu, 2007) (W. Yanju, 2008) (T. Hu, 2007). Methanol juga dapat dikonversikan secara langsung menjadi energi listrik dengan *fuel cell* (B. Höhle, 1999) (X. Ren, 2006) (D. A. Boysen, 2004).

*Bio-methanol* adalah methanol yang dihasilkan dari tumbuh-tumbuhan melalui proses fermentasi (R. Cortright, 2002) (T. P. Vispute, 2010) (J. P. Maity, 2014) (I. Gelfand, 2013) (R. L. Costa, 2015). Methanol dari proses fermentasi masih bercampur dengan air sehingga perlu proses pemisahan. Umumnya pemisahan campuran air-methanol adalah dengan proses distilasi. Akan tetapi proses distilasi ini membutuhkan energi yang besar (Y. Huang, 2010) (K. Liang, 2014). Oleh karena itu perlu pengembangan

metode alternatif untuk memisahkan larutan air-methanol yang lebih efektif dan hemat energi.

Salah satu keunggulan *carbon nanotube* (*CNT*) adalah dapat mengalirkan fluida dengan sangat cepat dan selektif (G. Hummer, 2011) (M. Majumder, 2005) (G. Arora, 2007) (G. Arora, 2006). Misalnya *CNT* dapat mengalirkan oksigen dan menahan nitrogen. Dengan demikian *CNT* sangat potensial dijadikan *membrane* untuk pemisahan udara atau oksigen dan nitrogen (G. Arora, 2007) (G. Arora, 2006). *CNT* juga dapat memisahkan berbagai gas yang larut dalam air, misalnya CO<sub>2</sub>-air, O<sub>2</sub>-air, dan H<sub>2</sub>-air (J. Lee, 2010).

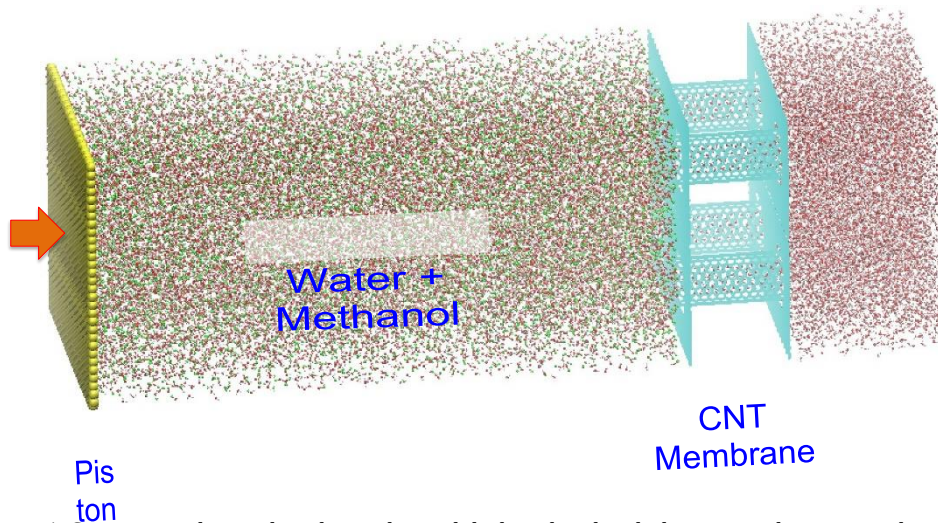
Penelitian ini menggunakan metode simulasi dinamika molekul untuk mempelajari pemisahan larutan air-methanol dengan *carbon nanotube membrane* dibawah pengaruh medan listrik. Sistem simulasi terdiri dari beberapa *CNT* yang disusun dengan konfigurasi tertentu sehingga menyerupai sebuah *membrane*. Dengan medan listrik, *CNT membrane* menghasilkan efek pemisahan campuran air-methanol yang sangat kuat.

## METODE SIMULASI

Penelitian ini dilakukan dengan simulasi dinamika molekul untuk melihat efek pemisahan larutan air–methanol dengan menggunakan *CNT membrane*. Sistem simulasi terdiri dari beberapa *CNT* yang kedua ujungnya dimasukkan ke dalam *graphene* seperti pada Gambar 1. *CNT* disusun dengan konfigurasi tertentu sehingga menyerupai sebuah *membrane*. Di dalam *reservoir* kiri diisi campuran molekul air dan molekul methanol. Sebuah piston ditempatkan di ujung *reservoir* kiri untuk mengalirkan molekul melewati *CNT*

*membrane* seperti yang digunakan pada penelitian sebelumnya (Winarto, E, 2019). Efek pemisahan dapat diamati dengan membandingkan laju aliran molekul air dan molekul methanol

Molekul air dimodelkan dengan SPC (*simple point charge*) sedangkan methanol dengan OPLS-UA. Simulasi menggunakan *software Gromacs 4.5.5*. Simulasi dilakukan pada temperatur 300 K dimana temperatur dikontrol dengan metode Nosé-Hoover (S. Nosé, 1984) (W. G. Hoover, 1985). Medan listrik diberikan dalam arah aksial, yaitu searah dengan sumbu *CNT*, sedangkan besarnya bervariasi dari 0 V/nm sampai dengan 2 V/nm.

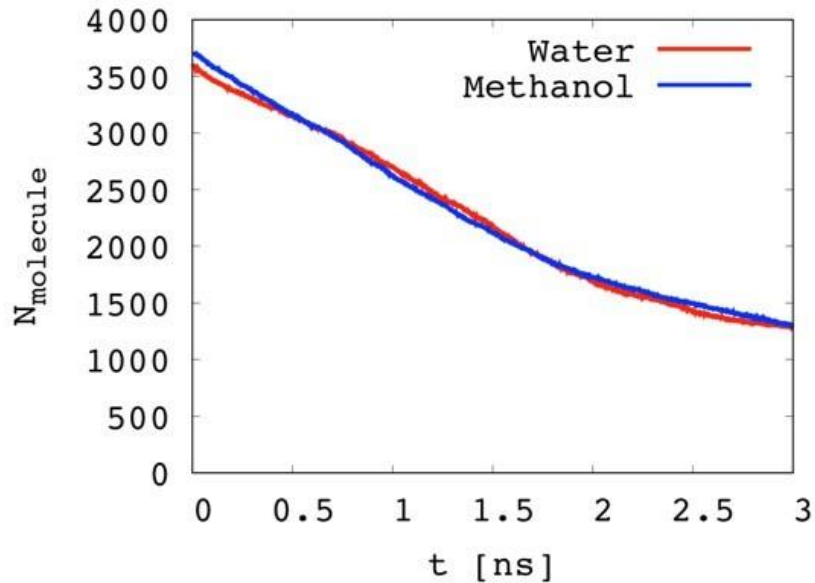


GAMBAR 1. Sistem untuk simulasi dinamika molekul terdiri dari beberapa carbon nanotubes yang disusun menyerupai membrane, reservoir, dan sebuah piston.

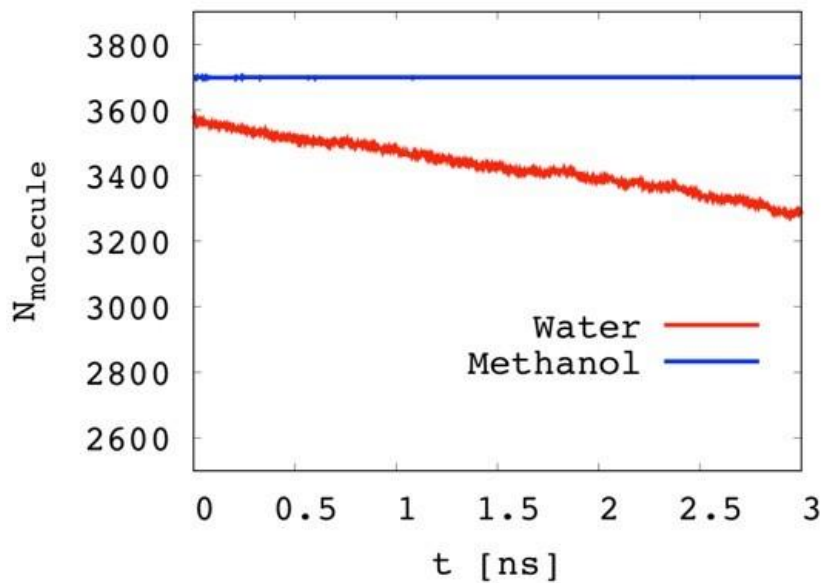
## HASIL DAN PEMBAHASAN

Seperti yang telah dijelaskan di atas bahwa sistem simulasi ini menggunakan sebuah piston untuk menghasilkan aliran melewati *CNT membrane*. Molekul-molekul di dalam *reservoir* kiri mengalir melalui *CNT membrane* karena tekanan dari gaya eksternal yang diberikan pada piston (Winarto, E, 2019). Efek pemisahan larutan air–methanol dengan *CNT membrane* dapat dicek dengan mengamati perubahan jumlah molekul di dalam *reservoir* sebelah kiri seperti yang ditampilkan pada Gambar 2 dan 3. Penurunan jumlah molekul di *reservoir* kiri menunjukkan jumlah molekul yang masuk *CNT membrane* dan mengalir ke *reservoir*

kanan. Dengan 0 V/nm, jumlah molekul airdan molekul methanol dari *reservoir* kiri yang mengalir melalui *CNT membrane* ke *reservoir* kanan sama banyaknya seperti yang ditunjukkan pada Gambar 2. Karena fraksi molekul methanol di *reservoir* kiri 0.5 maka tidak didapatkan efek pemisahan daricampuran air dan methanol. Dengan medan listrik 2 V/nm, jumlah molekul methanol di dalam *reservoir* kiri tidak berubah sementara jumlah molekul air terus menurun. Dengan medan listrik hanya molekul air yang mengalir ke *reservoir* kanan melewati *membrane* sehingga dihasilkan efek pemisahan yang kuat seperti yang ditunjukkan Gambar 3.



GAMBAR 2. Perubahan jumlah molekul air dan methanol di dalam *reservoir* kiri. Simulasi dilakukan tanpa diberi pengaruh medan listrik atau 0 V/nm.



GAMBAR 3. Perubahan jumlah molekul air dan methanol di dalam *reservoir* kiri. Simulasi dilakukan dengan medan listrik 2 V/nm. Jumlah molekul methanol di *reservoir* kiri tidak berubah sehingga hanya molekul air yang mengalir melalui *membrane*.

Seperti yang diperoleh pada penelitian sebelumnya bahwa dengan medan listrik molekul air membentuk struktur yang beraturan. Molekul air membentuk struktur *helical* di dalam CNT (8, 8) (Winarto, D, 2015) (Winarto, D, 2016). Pembentukan struktur *helical* ini yang menyebabkan air lebih mudah masuk ke dalam CNT dibandingkan methanol sehingga terjadi efek pemisahan. Pembentukan struktur *helical* oleh medan listrik menyebabkan gaya interaksi elektrostatik antar molekul air menjadi lebih kuat. Energi interaksi elektrostatik ini yang

menyebabkan air lebih mudah masuk ke dalam CNT dibandingkan methanol (Winarto, D, 2015) (Winarto, D, 2016). Struktur air dalam CNT *membrane* dibawah pengaruh medan listrik sama dengan yang ditunjukkan pada penelitian sebelumnya yang hanya menggunakan satu buah CNT [21]. Interaksi antara molekul air di dalam CNT dengan molekul-molekul pada CNT lainnya tidak berpengaruh terhadap perubahan struktur molekul air di dalam CNT.

## KESIMPULAN

Tanpa pengaruh medan listrik dan dengan tekanan piston molekul air dan molekul methanol mengalir melewati *CNT membrane* sama banyaknya. Dengan demikian tidak didapatkan efek pemisahan dari campuran air–methanol oleh *CNT membrane*. Dengan medan listrik, hanya molekul air yang mengalir melewati *CNT membrane* sedangkan molekul methanol tidak dapat masuk ke dalam *CNT*. Dengan demikian *CNT membrane* dapat memisahkan air dan methanol. Medan listrik menyebabkan molekul air di dalam *CNT membrane* membentuk struktur *helical*. Pembentukan struktur *helical* ini memperkuat gaya elektrostatik antar molekul air. Energi potensial dari interaksi elektrostatik ini yang menyebabkan molekul air lebih mudah masuk ke dalam *CNT membrane* dibandingkan molekul methanol.

## UCAPAN TERIMA KASIH

Penelitian ini sebagian dibiayai oleh Dana Penelitian DIPA Fakultas Teknik Universitas Brawijaya Tahun 2019.

## DAFTAR PUSTAKA

- B. Höhle, P. Biedermann, T. Grube and R. Menzer, *J. Power Sources*, 1999, 84, 203–213.
- D. A. Boysen, T. Uda, C. R. Chisholm and S. M. Haile, *Science*, 2004, 303, 68–70.
- G. Hummer, J. C. Rasaiah, and J. P. Noworyta, *Nature*, 2011, 414, 188–190.
- G. Arora and S. I. Sandler, *Nano Lett.*, 2007, 7, 565–569.
- G. Arora and S. I. Sandler, *J. Chem. Phys.*, 2006, 124, 084702.
- H. Chen, D. Zhou, G. Luo, S. Zhang and J. Chen, *Renewable Sustainable Energy Rev.*, 2015, 47, 427–437.
- I. Gelfand, R. Sahajpal, X. Zhang, R. C. Izaurralde, K. L. Gross and G. P. Lee, *Appl. Phys. Lett.*, 2010, 96, 133108.
- J. Zhang, G.-P. Yin, Q.-Z. Lai, Z.-B. Wang, K.-D. Cai and P. Liu, *J. Power Sources*, 2007, 168, 453–458.
- J. P. Maity, J. Bundschuh, C.-Y. Chen and P. B. J. Hinds, *Nature*, 2005, 438, 44.
- K. Liang, W. Li, H. Luo, M. Xia and C. Xu, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2014, 53, 7121–7131.
- M. Majumder, N. Chopra, R. Andrew, and T. Hu, Y. Wei, S. Liu and L. Zhou, *Energy Fuels*, 2007, 21, 171–175.
- Robertson, *Nature*, 2013, 493, 514–517.
- R. L. Costa, T. V. Oliveira, J. de Souza Ferreira, V. L. Cardoso and F. R. X. Batista, *Bioresour. Technol.*, 2015, 181, 330–337.
- R. Cortright, R. Davda and J. A. Dumesic, *Nature*, 2002, 418, 964–967.
- S. Liu, E. R. Cuty Clemente, T. Hu and Y. Bhattacharya, *Energy*, 2014, 78, 104–113.
- S. Nosé, *J. Chem. Phys.*, 1984, 81, 511.
- T. P. Vispute, H. Zhang, A. Sanna, R. Xiao and G. W. Huber, *Science*, 2010, 330, 1222–1227.
- Wei, *Appl. Therm. Eng.*, 2007, 27, 1904–1910.
- W. Yanju, L. Shenghua, L. Hongsong, Y. Rui, L. Jie and W. Ying, *Energy Fuels*, 2008, 22, 1254–1259.
- Winarto, E. Yamamoto, K. Yasuoka, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, 21, 15431.
- Winarto, D. Takaiwa, E. Yamamoto, K. Yasuoka, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, 18, 33310–33319.
- Winarto, D. Takaiwa, E. Yamamoto, K. Yasuoka, *J. Chem. Phys.*, 2015, 142, 124701.
- Winarto, D. Takaiwa, E. Yamamoto, K. Yasuoka, *Nanoscale*, 2015, 7, 12659–12665.
- W. G. Hoover, *Phys. Rev. A*, 1985, 31, 1695.
- X. Ren, P. Zelenay, S. Thomas, J. Davey and S. Gottesfeld, *J. Power Sources*, 2000, 86, 111–116.
- Y. Huang, R. W. Baker and L. M. Vane, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2010, 49, 3760–3768.

---

## PENULIS:

Winarto

Departemen Teknik Mesin, Fakultas Teknik,  
Universitas Brawijaya, Malang.

Email: winarto@ub.ac.id