STUDI DINAMIKA MOLEKUL JARAK PAGAR SEBAGAI BAHAN BAKU BIODISEL MENGGUNAKAN SOFTWARE CS CHEM3D 5.0

TUGAS AKHIR

Diajukan kepada Tim Penguji Tugas Akhir Jurusan Fisika sebagai Salah Satu Persyaratan Guna Memperoleh Gelar Sarjana Sains

OLEH:

SUCI AGUSTIA

NIM/BP. 73175/2006

PROGRAM STUDI FISIKA

JURUSAN FISIKA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS NEGERI PADANG

2011

PERSETUJUAN TUGAS AKHIR

STUDI DINAMIKA MOLEKUL JARAK PAGAR SEBAGAI BAHAN BAKU BIODIESEL MENGGUNAKAN SOFTWARE CS CHEM3D 5.0

Nama : Suci Agustia

Nim : 73175

Program Studi : Fisika

Jurusan : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Padang, Mei 2011

Disetujui oleh

Pembimbing I	Pembimbing II
Dr. Ratnawulan, M.Si	Dra. Hidayati, M.Si
NIP. 19690120 199303 2 002	NIP.19671111 199203 2 001

PENGESAHAN

Dinyatakan lulus setelah dipertahankan di depan Tim Penguji Tugas Akhir Program Studi Fisika Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang

Judul : Studi Dinamika Molekul Jarak Pagar Sebagai Bahan Baku Biodiesel Menggunakan Software Cs Chem3d 5.0

Nama : Suci Agustia

NIM : 73175

Program Studi : Fisika

Jurusan : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu PengetahuanAlam

Padang, Mei 2011

Tim Penguji

	Nama	Tanda Tangan
1. Ketua	: Dr. Ratnawulan, M.Si	1. _____
2. Sekretaris	: Dra. Hidayati, M.Si	2. _____
3. Anggota	: Drs. Mahrizal, M.Si	3. _____
4. Anggota	: Dra. Yenni Darvina, M.Si	4. _____
5. Anggota	: Drs. Gusnedi, M.Si	5. _____

SURAT PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa Tugas Akhir ini benar- benar karya saya sendiri. Sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang ditulis atau diterbitkan orang lain kecuali sebagai acuan atau kutipan dengan mengikuti tata penulisan karya ilmiah yang lazim.

Padang, Mei 2011

Yang menyatakan,

Suci Agustia

PERSETUJUAN TUGAS AKHIR

STUDI DINAMIKA MOLEKUL JARAK PAGAR SEBAGAI BAHAN BAKU BIODIESEL MENGGUNAKAN SOFTWARE CS CHEM3D 5.0

Nama	: Suci Agustia
Nim	: 73175
Program Studi	: Fisika
Jurusan	: Fisika
Fakultas	: Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam

Padang, Mei 2011

Disetujui oleh

Pembimbing I	Pembimbing II
Dr. Ratnawulan, M.Si	Dra. Hidayati, M.Si
NIP. 19690120 199303 2 002	NIP.19671111 199203 2 001

PENGESAHAN

Dinyatakan lulus setelah dipertahankan di depan Tim Penguji Tugas Akhir Program Studi Fisika Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang

Judul : **Studi Dinamika Molekul Jarak Pagar Sebagai Bahan Baku Biodiesel Menggunakan Software Cs Chem3d 5.0**

Nama : Suci Agustia

NIM : 73175

Program Studi : Fisika

Jurusan : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu PengetahuanAlam

Padang, Mei 2011

Tim Penguji

	Nama	Tanda Tangan
1. Ketua	: Dr. Ratnawulan, M.Si	1.
2. Sekretaris	: Dra. Hidayati, M.Si	2.
3. Anggota	: Drs. Mahrizal, M.Si	3.
4. Anggota	: Dra. Yenni Darvina, M.Si	4.
5. Anggota	: Drs. Gusnedi, M.Si	5.

ABSTRAK

Suci Agustia : Studi Dinamika Molekul Jarak Pagar sebagai Bahan Baku Biodiesel menggunakan software CS Chem3D 5.0

Terbatasnyapersediaan sumber energi khususnya bahan bakar di Indonesia memotivasi peneliti untuk mencari bahan alternatif, oleh karena itu biodiesel adalah solusinya. Salah satu bahan baku dari biodiesel adalah tanaman jarak pagar.Walaupun sudah banyak penelitian yang memanfaatkan jarak pagar sebagai biodisel, tapi bagaimana mekanisme energi yang terlibat selama pembentukkan biodisel dan memperlihatkan perubahan energi potensial itu belum banyak dilengkapi oleh peneliti lain.Tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahuiperubahan energipotensial dan mekanisme energi yang terlibatdalamminyakbijijaraksebagaibahanbaku biodieseldenganmenggunakansoftwer CS Chem3D versi 5.0.

Penelitian ini jenisnya adalah kajian teoritik menggunakan simulasidinamikaMolekulyangdimulaidenganmemilihkonfigurasiawaldarisetiapkoordinatdankemudiandilakukanminimisasienergi.Semuakeadaanreaksidisimulasikan secara bebas sampai 20 femtosecon ddengan step waktu 2femtosecond.Selanjutnyasetiapkeadaanmolekuldipanaskansampai temperature 300K selama 20 femtosecond.

Dalampenelitianinisimulasidinamikamolekuldiimplementasikanmenggunakanpaket program software CS Chem3D versi 5.0. Rata-rata potensial dari pembentukkan substrat dari hasil reaksi biji jarak pagar dan metanol adalah 3.733.905kkal/mol dan campuran ester lemak adalah 2.512.612kkal/mol. perubahan energinya adalah 1.221.293 kkal/mol.Perubahan energi potensialnya disebabkan oleh proses perubahan energi kimia menjadi energi panas. Energi kimia tersebut diduga berasal dari energi potensial yang disimpan atom-atom dan molekul karena susunan dan posisinya. Ketika terjadi pengikatan sisi aktif dengan substrat-substratnya, maka terjadi pembebasan sejumlah energi potensial dalam bentuk energi panas yang disertai dengan energi kinetik yang disebabkan karena geraknya atom-atom molekul.

KATA PENGANTAR

Pujisyukurkehadirat Allah SWT atas rahmat dan karunia-Nya saya dapat menyelesaikan Tugas Akhir inidenganbaikdanlancar. Shalawat dan salam tak lupa saya sampaikan kepada junjungan kita nabi besar Muhammad S.A.W. yang telah membimbing umatnya kejalan yang benardandiridhoiolehTuhan Yang MahaEsa, Amin.

Tugas Akhir inidisusunsebagaisalahsatusyarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata 1 (S1) di Jurusan Fisika FMIPA Universitas Negeri Padang. Selama dalam penulisan Tugas Akhir ini, penulis banyak sekali mendapat masukkan dan arahan baik dari kampus, teman-teman maupun dari keluarga besar saya.

UntukitupenulisdengansepenuhhatimengucapkanTerimaKasihkepada :

1. Bapak Drs. Asrul, MA, sebagaidekan FMIPA UNP.
2. Bapak Dr. Ahmad Fauzi, M.Si sebagaiketuaJurusanFisika UNP.
3. Ibu Dr. Ratna Wulan, M.Si sebagai Dosen Pembimbing I
4. IbuDra. Hidayati, M.Si sebagai Dosen PembimbingII dan Ketua Prodi Fisika FMIPA UNP.
5. Ibu Dra.Yenni Darvina, M.Si, Bapak Drs. Mahrizal, M.Si, Bapak Drs. Gusnedi, M.Si sebagai Dosen penguji pada tugas akhir ini.
6. Bapak / ibu staf pengajar Jurusan Fisika FMIPA UNP.

7. Kedua Orang Tua :Ibu (UmulKhair, S.Pd) Ayah (SyendraWaldi) yang selalumemberikandukungan, baikmorilmaupunmateril.
8. Saudara (Hendri Yantara dan Surizki Destia) yang selalu memberi semagat
9. Rekan – rekan seperjuangan (Fisika 2006) dan mahasiswa Fisika yang telahmembantu dalam pembuatanTugas Akhir ini.
10. For someone in my heart HendrikoHerlangga.
11. Semua pihak yang telah banyak membantu penulis yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.

semoga semua bantuan, bimbingan dan arahan yang telah diberikan kepada penulis dapat menjadi amal ibadah dan mendapat balasan dari Allah SWT.Amin yaRabbal ‘alamin.

Penulis menyadari sepenuhnya bahwa Tugas Akhir ini masih jauh dari kesempurnaan yang disebabkan oleh keterbatasan pengetahuan dan kemampuan dari penulis. Untuk itu kritik dan saran sangat penulis harapkan demi kesempurnaan tugas akhir ini. Akhirnya penulis berharap semoga Tugas Akhir ini dapat bermanfaat bagi semua pihak terutama bagi penulis sendiri.

Padang, Mei 2011

Penulis

DAFTAR ISI

halaman

ABSTRAK i

KATA PENGANTAR.....ii

DAFTAR ISI.....iv

DAFTAR GAMBAR.....vi

BAB I PENDAHULUAN

A. Latar Belakang Masalah 1

B. Perumusan Masalah.....5

C. Pembatasan Masalah.....5

D. Pertanyaan Penelitian.....5

E. Tujuan Penelitian.....5

F. Kontribusi Penelitian 6

BAB II TINJAUAN KEPUSTAKAAN

A. Jarak Pagar.....7

B. Biodiesel sebagai Energi Alternatif 10

C. Teori Geometri Molekul.....15

D. Viibrasi kisi.....21

E. Tingkat Energi Molekul.....27

F. Metode Simulasi Dinamika Molekul.....30

BAB III METODOLOGI PENELITIAN

A. Waktu dan Tempat Penelitian.....35

B. Jenis Penelitian.....35

C. Instrumen Penelitian 35

D. Variabel Penelitian.....35

E. Rancangan Penelitian 36
F. Teknik Pengumpulan Data 41
G. Teknik Analisa Data 41
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN
A. Hasil 42
1. Skema Tiap Molekul 43
2. Grafik 49
3. Diagram Energi Potensial 50
B. Pembahasan 50
BAB V PENUTUP
A. Kesimpulan 53
B. Saran 53
DAFTAR KEPUSTAKAAN

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Biji Jarak Pagar 9

Gambar 2. Reaksi Transersterifikasi 11

Gambar 3. Perbedaan Siklus Otto dan Siklus Diesel 13

Gambar 4. Contoh ikatan kovalen H_2 16

Gambar 5. Contoh ikatan ionik NaCl.....17

Gambar 6. Sudut toarsi, sudut ikatan 19

Gambar 7. Kurva energi bukan ikatan sebagai fungsi jarak 20

Gambar 8. Kisi diatomik satu dimensi.....22

Gambar 9. Hubungan dispersi.....23

Gambar 10. Kisi diatomik.....25

Gambar 5. Perbedaan Cis dan Trans 26

Gambar 12. Diagram Jablonski untuk molekul.....28

Gambar 13.Potensial intermolekuler Lennard-Jones 30

Gambar 14. Sistem dinamika molekul.....31

Gambar 15.ContohSkema Model Ideal Struktur molekul.....37

Gambar 16.Meminimasi Energi dari Metanol. 38

Gambar 17. Window Molecular Dynamics job type 39

Gambar 18. Window Molecular Dynamics 39

Gambar 19.Hasil pengikatan antar molekul.....40

Gambar 20. Hasil Grafik. 40

Gambar 21.Biji Jarak Pagar 43

Gambar 22. Metanol.....44

Gambar 23.Skema stuktur molekul sebelum direaksikan.....44

Gambar 24. Campuran Ester Lemak.....45

Gambar 25. Gliserol.....46

Gambar 26.Skema stuktur molekul setelah direaksikan 46
Gambar 27.Grafik stuktur molekul biji jarak pagar 47
Gambar 28.Grafik stuktur molekul metanol 48
Gambar 29.Grafik stuktur molekul biji jarak pagar + metanol 48
Gambar 30.Grafik stuktur molekul campuran ester lemak 49
Gambar 31.Grafik stuktur molekul gliserol 49
Gambar 32.Diagram Energi Potensial.....50

BAB I

PENDAHULUAN

A. Latar Belakang

Ketersediaan bahan bakar minyak yang berasal dari minyak bumi semakin hari semakin menipis, sehingga menyebabkan harga bahan bakar minyak semakin meningkat. Untuk itu perlu dilakukan upaya penghematan serta upaya pengalihan bahan bakar dari bahan yang berasal dari minyak bumi menjadi sumber energi yang dapat diperbaharui.

Pada saat ini bahan bakar minyak (BBM) yang ada di pasaran disintesa dari produk petrokimia yang menggunakan bahan baku berasal dari minyak bumi. Ketersediaan minyak bumi sangat terbatas dan merupakan sumber daya alam yang tidak dapat diperbaharui, sehingga harganya akan semakin meningkat. Indonesia yang saat ini dikenal sebagai salah satu negara pengekspor minyak bumi diperkirakan juga akan mengimpor bahan bakar minyak pada 20 tahun mendatang, karena produksi dalam negeri tidak dapat lagi memenuhi permintaan pasar yang meningkat cepat akibat pertumbuhan penduduk dan industri.

Untuk mengatasi krisis BBM ini pemerintah mengeluarkan kebijakan penghematan BBM yang dituangkan dalam Instruksi Presiden No.10 tahun 2005. Inpres ini mengatur tentang langkah-langkah yang harus dilaksanakan dalam rangka penghematan BBM. Selain upaya penghematan, maka upaya untuk mengatasi krisis

BBM juga dapat dilakukan dengan mengalihkan pemanfaatan energi fosil (minyak) kepada energi yang terbarukan *(renewable energy).*

Upaya ke arah penyediaan bahan bakar alternatif selain bahan bakar fosil terus diupayakan, antara lain dengan mengubah bentuk mesin serta menyediakan sumber energi lain selain bahan bakar fosil. Di Indonesia, penelitian tentang alternatif pengganti bahan bakar fosil sudah lama dilakukan yaitu dengan mencari bahan baku atau sumber daya alam yang dapat diperbaharui. Indonesia merupakan negara agraris yang kaya akan sumber daya alam, sehingga mempunyai potensi untuk menjadi pemimpin dalam energi yang terbarukan ini. Energi terbarukan yang dapat digunakan adalah etanol dan biodiesel yang bahan bakunya sangat melimpah di Indonesia.

Terbatasnya persediaan sumber energi khususnya bahan bakar memotivasi kita untuk mencari bahan alternatif. Oleh karena itu biodiesel menjadi solusinya. Walaupun banyak tumbuhan yang menghasilkan minyak, tetapi tidak semua minyak tumbuhan bisa digunakan sebagai biodisel. Minyak yang berasal dari tumbuhan harus memenuhi standar yang sesuai dengan karakteristik mesin diesel, sehingga tidak merusak mesin.

Menurut Mulyani (2007) biodiesel memiliki kelebihan di bandingkan dengan bahan bakar fosil yaitu bersifat *biodegrable* (dapat terurai), tidak beracun atau menghasilkan lebih sedikit emisi zat berbahaya dan memiliki titik nyala api yang tinggi. Selain itu biodiesel memiliki sifat pelumas terhadap piston mesin yang aman

untuk digunakan ketika ditransportasikan serta meningkatkan impedensi suplai bahan bakar karena dapat diproduksi secara lokal dan dapat menurunkan tingkat asap pada kendaraan yang mempunyai kandungan sulfur yang rendah. Oleh sebab itu pencarian terhadap bahan bakar bio saat ini begitu gencarnya. Seiring berkembangnya teknologi, semakin banyak hal yang dapat kita explor dari alam. Salah satunya, kita bisa memanfaatkan buah jarak pagar yang nama latinnya *Jatropha Curcas L*.

Tanaman jarak pagar *(Jatropha Curcas L)* sudah dikenal oleh masyarakat, tetapi hanya sebatas sebagai tanaman pagar atau pembatas sawah petani, karena dianggap tidak ekonomis, sedangkan daun dan buahnya hanya digunakan untuk pakan ternak. Tanaman jarak adalah salah satu tanaman yang mempunyai potensi untuk dikembangkan sebagai bahan baku biodiesel. Berdasarkan hasil penelitian Tim Depertemen Teknologi Pertanian (2005), biji jarak dapat menghasilkan minyak yang dapat digunakan sebagai bahan bakar pengganti minyak diesel (solar) dan minyak tanah. Ekstraksi minyak dari buah jarak akan meningkatkan nilai ekonomi dari pohon jarak. Tanaman jarak dapat menghasilkan 40 ton biji per hektar dengan harga jual Rp.2000/kg.

Minyak jarak dihasilkan dari daging buah biji jarak melalui proses ekstraksi dengan menggunakan mesin pengepres minyak. Berdasarkan hasil penelitian yang telah dilakukan Tim Depertemen Teknologi Pertanian. (2005) diketahui bahwa kadar lemak kasar yang terdapat pada biji jarak adalah 46.25%, protein kasar 18.88% , serat kasar 15.10%, kadar air 48.06%, abu

2.62% dan karbohidrat 32.25%. Kandungan iodin minyak biji jarak juga cukup tinggi yaitu 92,85 mg iodine/g. Biji jarak yang mengandung minyak dengan kadar cukup tinggi ini sangat mudah diekstraksi. Dalam perhitungan matematis, untuk membangkitkan pembangkit listrik tenaga diesel berkekuatan 1 Megawatt dibutuhkan 90 hektar pohon jarak.

Walaupun sudah banyak penelitian yang memanfaatkan jarak pagar sebagai biodisel, namun bagaimana mekanisme dan energi yang terlibat selama pembentukkan biodisel itu belum banyak dilengkapi oleh peneliti lain. Untuk melihat mekanisme dan energi yang terlibat selama pembentukkan biodisel dapat memanfaatkan software Chem3D yang di dalamnya terdapat suatu bentuk metode yaitu metode dinamika molekul.

Metode Dinamika Molekul adalah suatu bentuk simulasi komputer dimana atom dan molekul yang di inginkan berinteraksi selama jangka waktu tertentu dan kemudian di amati gerak partikelnya. Tujuan dari simulasi Dinamika Molekul ini adalah untuk mengetahui keadaan molekul pada setiap pengikatan atom-atom pada senyawa-senyawa yang aktif dan menyelidiki perubahan energi akibat pengikatan atom-atom tersebut. Perubahan dari geometri setiap keadaan akan mengubah susunan atom–atom pada biji jarak pagar sebagai energi bahan baku biodiesel sehingga akan terjadi perubahan energi potensialnya.

Di Indonesia biodiesel khususnya dari minyak jarak belum banyak dimanfaatkan sebagai bahan bakar, baik untuk transportasi maupun industri.

Berdasarkan hal ini, penelitian ini dilakukan untuk mengetahui perubahan energi potensial dan mekanisme energi yang terlibat dalam minyak biji jarak sebagai bahan baku biodiesel dengan menggunakan softwer CS Chem3D versi 5.0.

B. Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang masalah yang telah dikemukan, dapat dirumuskan masalah dari penelitian ini yaitu berapa perubahan energi potensial dan mekanisme energi yang terlibat dalam minyak jarak sebagai bahan baku biodiesel.

C. Pembatasan Masalah

Permasalahan dalam penelitian ini hanya di batasi untuk mengetahui perubahan energi potensial yang terlibat dalam pembentukan biodiesel.

D. Pertanyaan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah dan pembatasan masalah yang dikemukakan sehingga menimbulkan pertanyaan penelitian, yaitu berapakah perubahan energi potensial dalam setiap pengikatan atom-atom dan mekanisme energi yang terlibat dalam minyak biji jarak sebagai bahan baku biodiesel?

E. Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini adalah untuk mengetahui perubahan energi potensial dan mekanisme energi yang terlibat dalam minyak biji jarak sebagai bahan baku biodiesel dengan menggunakan softwer CS Chem3D versi 5.0.

F. Kontribusi Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat:

1. Menambah wawasan penulis tentang besarnya perubahan energi potensial dalam proses fisis pembentukan biodisel yang berbahan baku Jarak Pagar
2. Sebagai informasi bagi masyarakat pada umumnya dan peneliti lanjutan pada khususnya.
3. Sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains di Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Negeri Padang (FMIPA UNP).