

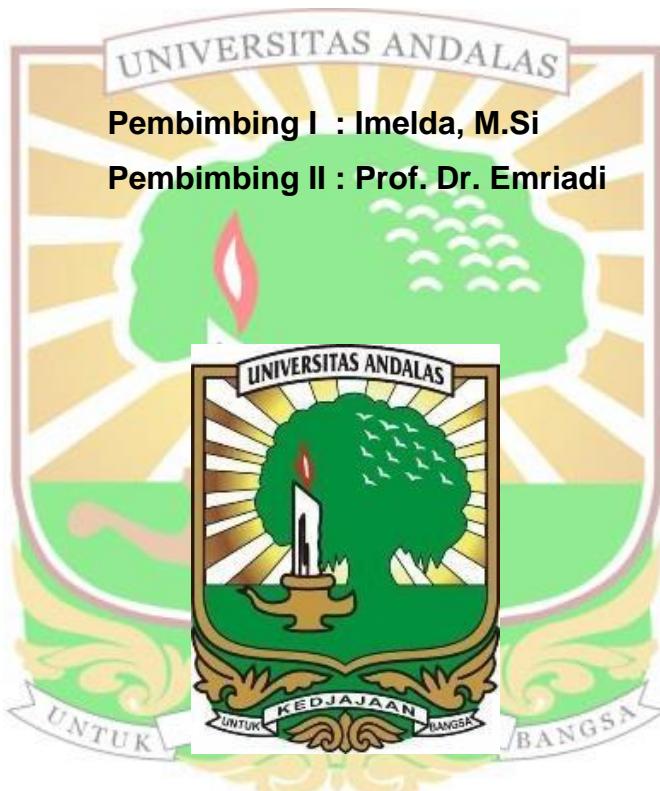
STUDI KOMPUTASI ABSORPSI GAS CO DAN CO₂ OLEH AMINA

SKRIPSI SARJANA KIMIA

Oleh :

FRANSISKA ROSMERY SITORUS

BP : 1710412001



JURUSAN S1 KIMIA

FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM

UNIVERSITAS ANDALAS

PADANG

2021

INTISARI

STUDI KOMPUTASI ABSORPSI GAS CO DAN CO₂ OLEH AMINA

Oleh:

Fransiska Rosmery Sitorus(BP : 1710412001)

Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Emriadi, MS*

*Pembimbing

Emisi CO dan CO₂ menimbulkan banyak dampak negatif terhadap berbagai aspek kehidupan makhluk hidup dan lingkungan disekitarnya. Salah satu cara untuk mengurangi emisi CO dan CO₂ dapat dilakukan melalui absorpsi dengan adanya absorben (zat penyerap). Dalam penelitian ini, absorpsi CO dan CO₂ oleh amina dipelajari secara komputasi. Amina yang digunakan yaitu monoetanolamina (MEA), 2-(2-aminoetoksi)etanol (DGA), dietanolamina (DEA), diisopropanolamina (DIPA), 2-amino-2-metilpropanol (AMP), trietilamina dan trietanolamina. Studi komputasi absorpsi CO dan CO₂ dalam penelitian ini dilakukan dalam fasa gas dan dengan adanya pelarut air pada suhu 298,15 K dan 313,15 K. Perhitungan dalam absorpsi CO dan CO₂ oleh amina menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada basis set B3LYP/6-31G. Analisis yang dilakukan terhadap hasil penelitian menunjukkan bahwa reaksi kimia yang terlibat dalam absorpsi CO dan CO₂ dalam fasa gas berlangsung relatif tidak spontan dan kespontanan meningkat dengan adanya pelarut air yang ditandai dengan perubahan nilai ΔH_{rx} pada absorpsi CO dari 80,525 - 105,385 kkal/mol menjadi (-29,246) - (-34,671) kkal/mol dan ΔG_{rx} dari 58,830 - 105,385 kkal/mol menjadi (-18,739) - (-23,838) kkal/mol dan perubahan nilai ΔH_{rx} pada absorpsi CO₂ dari (-7,673) - (-30,399) kkal/mol menjadi (-23,528) - (-34,049) kkal/mol dan ΔG_{rx} dari 13,816 - (-9,226) kkal/mol menjadi (-0,023) - (-10,522) kkal/mol. Reaksi kimia yang terlibat dalam absorpsi CO oleh amina menghasilkan amina terprotonasi dan HCOO⁻, reaksi kimia dalam absorpsi CO₂ oleh amina primer dan sekunder menghasilkan kompleks karbamat dan H₂O sedangkan dengan amina tersier menghasilkan kompleks amina terprotonasi dan HCO₃⁻. Berdasarkan hasil penelitian juga didapatkan bahwa suhu tidak mempengaruhi reaksi kimia yang terlibat dalam absorpsi CO oleh amina yang ditandai dengan nilai ΔH_{rx} dan ΔG_{rx} yang relatif sama, namun terhadap absorpsi CO₂ oleh amina suhu sedikit mengurangi kespontanan dari reaksi yang ditandai dengan ΔG_{rx} yang lebih positif pada suhu tinggi.

Kata kunci: CO, CO₂, amina, absorpsi, DFT

ABSTRACT

COMPUTATIONAL STUDY OF THE ABSORPTION OF CO AND CO₂ GASES BY AMINES

By:

Fransiska Rosmery Sitorus(BP : 1710412001)

Imelda, M.Si*, Prof. Dr. Emriadi, MS*

*Supervisor

CO and CO₂ emissions have many negative impacts on various aspects of living things and the environment around them. One way to reduce CO and CO₂ emissions can be done through absorption in the presence of absorbents. In this research, the absorption of CO and CO₂ by amines was studied computationally. The amines used were monoethanolamine (MEA), 2- (2-aminoethoxy) ethanol (DGA), diethanolamine (DEA), diisopropanolamine (DIPA), 2-amino-2-methylpropanol (AMP), triethylamine and triethanolamine. The computational study of the absorption of CO and CO₂ in this study was carried out in the gas phase and in the presence of water as a solvent at temperatures of 298,15 K and 313,15 K with B3LYP / 6-31G basis set. The analysis carried out on the results of the study showed that the chemical reactions involved in the absorption of CO and CO₂ in the gas phase were relatively non-spontaneous and the spontaneity increased in the presence of water as a solvent which was marked by ΔH_{rx} values change in CO absorption from 80,525 to 105,385 kcal / mol to (-29,246) to (-34,671) kcal / mol and ΔG_{rx} from 58,830 to 105,385 kcal / mol to (-18,739) to (-23,838) kcal / mol and ΔH_{rx} values change on CO₂ absorption from (-7,673) - (-30,399) kcal / mol to (-23,528) - (-34,049) kcal / mol and ΔG_{rx} from 13,816 – (9,226) kcal / mol to (-0.023) - (-10,522) kcal / mol. The chemical reactions involved in the CO absorption by amines produce protonated amines and HCOO⁻, the chemical reactions in the absorption CO₂ gas by primary and secondary amines produce carbamate and H₂O complexes while tertiary amines produce protonated amine and HCO₃⁻ complexes. Based on the results of the study, it was also found that temperature did not affect the chemical reactions involved in the absorption of CO by amines which were characterized by relatively the same ΔH_{rx} and ΔG_{rx} values, but for the CO₂ absorption of CO₂ by amines the temperature slightly reduced the spontaneity of the reactions involved which were marked by a more positive ΔG_{rx} at high temperature.

Keywords: CO, CO₂, amines, absorption, DFT