

KOMPUTASI ENERGI ELEKTRONIK PEMBENTUKAN KITOSAN DARI KITIN CANGKANG UDANG DAN PENGARUHNYA AKIBAT KEBERADAAN LOGAM BERAT

Bayu fernanda¹⁾, Ratnawulan²⁾ dan Hidayati²⁾

¹⁾Mahasiswa Fisika, FMIPA Universitas Negeri Padang

²⁾Staf Pengajar Jurusan Fisika, FMIPA Universitas Negeri Padang

bayufernanda84@yahoo.co.id

ABSTRACT

Shrimp waste in the form of skin, head and tail of a substance containing protein and chitin can be processed into chitosan which has many uses. Chitosan is obtained from chitin which is reacted with NaOH. Chitosan can be processed and used as an absorbent material heavy metals generated by industrial waste. Owned energy chitosan obtained by Ev 798,4. However kitosani formation process, and how the influence of the presence of heavy metals to the energy can not be explained. Based on that, the purpose of this study was to determine the change in potential energy and activation energy in the formation of chitosan and the influence of the presence of heavy metals to energy chitosan. This research was a theoretical study that uses CS software Chemoffice and winmopac to see the chitosan molecular electronics and pengaruh heavy metals. Using this software obtained data such as the distance between molecules, molecular charge and potential energy at the time of formation of chitin chitosan reacted with NaOH. Then chitosan is reacted with heavy metals, from here will be visible effect of heavy metals on the energy chitosan.

Keywords : Chitosan, NaOH, Copper (Cu), Iron (Fe), Cadmium (Cd), Activation Energy

PENDAHULUAN

Indonesia merupakan negara maritim yang mempunyai potensi cukup besar sebagai penghasil jenis ikan dan hewan laut lainnya seperti udang dan kepiting. Hal ini tentunya menyisakan limbah berupa cangkang udang. Penyusun utama cangkang udang adalah kitin, suatu polisakarida alami yang memiliki banyak kegunaan, seperti sebagai bahan pengkelat, pengemulsi dan absorben. Hasil penelitian Hargono, 2008 menyatakan bahwa kitin yang terkandung dalam limbah cangkang udang sebesar 24,3 % dari berat keringnya^[8].

Udang dapat klasifikasikan sebagai berikut:^[22]

Kelas :Crustacea (binatang berkulit keras)
Sub Kelas :Malacostraca (udang tingkat tinggi)
Super Ordo :Eucarida
Ordo :Decapoda (binatang berkaki sepuluh)
Sub Ordo :Natantia (kaki untuk berenang)
Famili: :Palaemonidae, Penaeidae

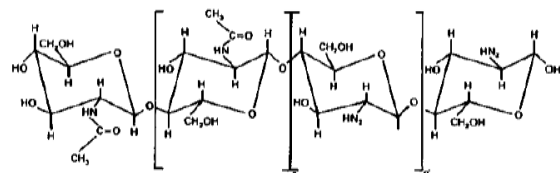
Berdasarkan penelitian sumber-sumber kitin dan kitosan dapat dilihat pada Tabel 1.

Tabel 1. Sumber-Sumber Kitin dan Kitosan^[14]

No	Sumber	Jumlah (%)
1	Jamur/cendawan	5-20
2	Tulang cumi-cumi	3-20
3	Kalajengking	30
4	Laba-laba	38
5	Kecoa	35
6	Ulat sutra	44
7	Kepiting	69
8	Udang	70

Udang merupakan salah satu hewan yang digemari untuk di konsumsi. Tubuh udang terdiri atas dua bagian, yaitu bagian depan dan bagian belakang (perut). Seluruh tubuh tertutup oleh kerangka luar yang disebut *eksoskeleton*, yang terbuat dari bahan kitin. Bagian kepala beratnya kurang lebih 36-49%, bagian daging antara 24-41%, dan kulit 17-23% dari total berat badan^[23]. Persentase dari pengolahan udang berkisar antara 30-75% dari berat udang. Berdasarkan hal tersebut jumlah bagian yang terbuang dari usaha pengolahan udang cukup tinggi. Limbah kulit udang mengandung konstituen utama yang terdiri atas protein, kalsium karbonat, kitin, pigmen, abu dan lain-lain. Kulit udang menjadi produk kitosan yang dapat dimanfaatkan untuk mengabsorpsi logam berat^[13].

Kitosan merupakan senyawa turunan kitin, senyawa penyusun rangka luar hewan berkaki banyak seperti kepiting, ketam, udang, dan serangga. Nama kitin (*chitin*) berasal dari bahasa Yunani yang artinya "Jubah" atau "Amplop". Struktur kitosan dapat dilihat pada Gambar 1.



Gambar 1. Struktur kitosan^[8].

Kitosan merupakan sejenis molekul. Molekul adalah sekelompok atom yang bermuatan listrik netral, terikat kuat bersama dan berperilaku sebagai

partikel tunggal. Molekul terdiri dari sejumlah atom yang bergabung bersamaan ikatan kovalen, dan atom tersebut akan berkisar dari jumlah yang paling sedikit (dari atom tunggal, seperti gas mulia) sampai jumlah yang sangat banyak (seperti pada polimer, protein atau bahkan DNA)^[9]. Ikatan kovalen yang mengikat molekul secara bersamaan dengan sangat kuat, tetapi hal ini tidak berhubungan dengan sifat fisik suatu zat.

Sifat fisik suatu zat ditentukan oleh gaya antar molekul, gaya tarik antara suatu molekul dengan tetangganya. Titik leleh dan titik didih substansi molekuler cenderung untuk menjadi gas, cairan atau padatan yang bertitik leleh rendah, karena gaya tarik menarik antar molekul terhitung lemah, untuk memutus ikatan kovalen yang dilelehkan atau dididihkan sebuah zat molekuler^[7]. Ukuran titik leleh dan titik didih akan bergantung pada kekuatan gaya antar molekul.^[1]

Suatu molekul terjadi karena interaksi yang terjadi antar sekelompok atom tertentu sedemikian sehingga energi sistem bersama lebih kecil dari energi sistem bersama lebih kecil dari energi atom-atom penyusunannya dalam keadaan terpisah^[18]. Sebaliknya bila interaksi itu menyebabkan energi total sistem meningkat, maka atom-atom itu akan saling menolak dengan yang lainnya sehingga terjadi pembentukan molekul.

Bahan yang tersusun oleh deretan atom-atom yang tersusun teratur letaknya dan berulang (periodik) disebut bahan kristal. Sebaliknya, zat padat yang memiliki keteraturan yang demikian disebut bahan amorf atau bukan kristal^[11]. Susunan atom pada kristal padat memperlihatkan bahwa sekelompok kecil atom membentuk pola yang berulang yang disebut kisi. Satuan pengulangan kisi adalah unit sel^[19].

Kitosan dapat digunakan sebagai absorben/penyerap yang dapat menyerap logam-logam berat, seperti Zn, Cd, Cu, Pb, Mg dan Fe. Kitosan mampu mengabsorpsi logam-logam berat melalui mekanisme pembentukan khelat dan atau penukar ion. Logam berat merupakan sumber pencemar yang sangat membahayakan bagi lingkungan. Beberapa contoh logam berat yang beracun bagi manusia adalah: arsen (As), kadmium (Cd), tembaga (Cu), timbal (Pb), merkuri (Hg), nikel (Ni), dan seng (Zn). Logam berat berbahaya karena dapat mengganggu kehidupan organisme di lingkungan jika keberadaannya melampaui ambang batas. Logam-logam berat ini juga mengancam kesehatan manusia karena dapat menjadi senyawa toksik bila melampaui ambang batas dan berada dalam tubuh manusia.

Logam berat merupakan sumber pencemar yang sangat membahayakan bagi lingkungan. Beberapa contoh logam berat yang beracun bagi manusia adalah besi (Fe), tembaga (Cu), dan kadmium (Cd)^[22]. Logam berat berbahaya karena dapat

mengganggu kehidupan organisme di lingkungan jika keberadaannya melampaui ambang batas. Logam-logam berat ini juga mengancam kesehatan manusia karena dapat menjadi senyawa toksik bila melampaui ambang batas dan berada dalam tubuh manusia. Berbagai upaya dilakukan dalam penanggulangan masalah logam berat ini, seperti metode fotoreduksi, penukaran ion (resin), pengendapan, elektrolisis dan adsorpsi serta mengembangkan semua metode tersebut dalam kerangka yang ramah lingkungan. Dari banyak logam berat logam yang paling berbahaya yaitu logam Cu, Fe, dan Cd.

Pencemaran air merupakan salah satu pencemaran lingkungan. Pencemaran air disebut juga polusi air yaitu masuknya atau tercampurnya unsur-unsur berbahaya ke dalam air yang dapat terjadinya kerusakan lingkungan^[16]. Sumber pencemaran air yang penting adalah industri, aktivitas rumah tangga serta limbah pertanian dan peternakan. Pencemaran air tidak hanya mempengaruhi manusia saja namun juga memberikan dampak pada makhluk hidup lain.

Pencemaran air yang diakibatkan dampak buangan industri banyak mengandung logam-logam berat yang dapat membahayakan. Senyawa logam berat sering digunakan dalam industri sebagai bahan baku, bahan tambahan maupun katalis. Keberadaan logam berat di lingkungan dapat mengganggu kehidupan organisme^[5]. Apabila suatu pengganggu terdapat pada suatu organisme, maka dapat mengurangi kinerja dari organisme tersebut. Untuk itu dilakukan penyerapan logam berat tersebut. Salah satu senyawa yang dapat menyerap logam berat adalah kitosan.

Penyerapan limbah logam berat menggunakan kitosan adalah dengan mereaksikan kitosan dengan limbah logam berat. Logam berat yang divariasikan adalah tembaga nitrat (CuNO_3), besi nitrat (FeNO_3), dan kadmium nitrat (CdNO_3)^[4].

Berbagai upaya dilakukan dalam penanggulangan masalah logam berat ini, seperti metode fotoreduksi, penukaran ion (resin), pengendapan, elektrolisis dan adsorpsi serta mengembangkan semua metode tersebut dalam kerangka yang ramah lingkungan. Salah satu metode pengolahan limbah yang mudah dan ramah lingkungan adalah metode adsorpsi dengan absorben alami seperti kitosan.

Dalam beberapa tahun terakhir, pertimbangan kesehatan masyarakat, lingkungan dan ekonomi telah membuat tekanan untuk mempertimbangkan kembali metode yang digunakan untuk pengobatan dan pembuangan limbah beracun. Hal ini benar, terutama untuk air limbah yang mengandung racun seperti logam berat, karena logam tidak dapat dimusnahkan, tentu yang dapat mereka lakukan adalah untuk meningkatkan pengurangan logam dari lingkungan mereka.

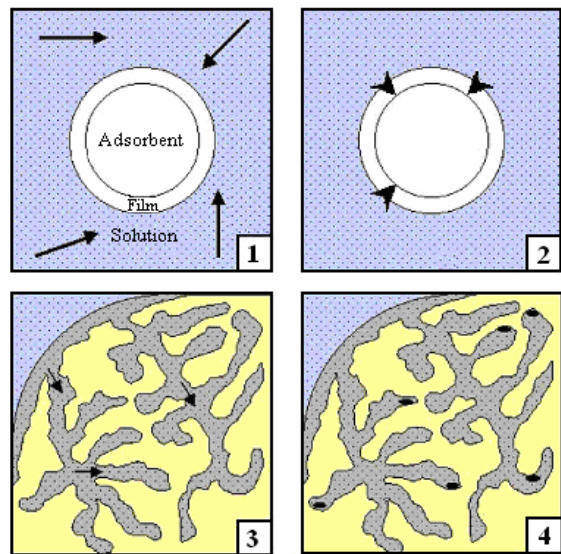
Sejak diperkenalkan pertama untuk menghilangkan logam berat, karbon aktif yang tidak diragukan lagi menjadi adsorben yang paling populer dan banyak digunakan dalam pengolahan air limbah aplikasi di seluruh dunia. Namun butuh biaya yang lebih besar dalam proses penyerapannya. Karbon aktif juga memerlukan agen pengompleks untuk meningkatkan kinerja penghapusan untuk ion-ion anorganik^[21]. Oleh karena itu, situasi ini membuat tidak lagi menarik secara luas digunakan dalam industri skala kecil karena biaya tidak efisien untuk industri.

Karena masalah yang disebutkan sebelumnya, adsorben alternatif untuk menggantikan karbon aktif mahal telah diintensifkan di baru-baru ini. Perhatian telah difokuskan pada berbagai adsorben, yang memiliki kapasitas dan mampu menghilangkan logam berat yang tidak diinginkan dari air yang terkontaminasi di biaya rendah yaitu kitosan. Sebagai alternatif untuk proses pengobatan tradisional, kitosan biopolimer dapat menjadi jawaban untuk pencegahan pencemaran air oleh logam berat dan banyak unsur-unsur lain. Proses penyerapan ini dikenal dengan absorpsi^[3].

Absorpsi logam berat oleh kitosan adalah proses pemisahan dimana komponen logam tertentu dari suatu fase fluida berpindah ke permukaan zat padat yang menyerap (adsorbent)^[19]. Biasanya partikel-partikel kecil, zat penyerap (kitosan) ditempatkan dalam suatu hamparan tetap kemudian fluida dialirkan melalui hamparan tersebut sampai zat padat itu mendekati jenuh dan proses pemisahan yang dikehendaki tidak dapat berlangsung lagi

Proses penyerapan atau yang dikenal dengan absorpsi membutuhkan zat penyerap. Kitosan adalah zat penyerap yang baik. Keberadaan suatu zat racun dapat mempengaruhi aktivitas penyerap. Logam berat mempunyai kemampuan untuk berikatan dengan kitosan, sehingga kitosan mudah terhalang kerjanya^[17].

Absorpsi adalah proses mengumpulkan zat dalam larutan. Absorpsi adalah operasi perpindahan massa dalam fase cair ditransfer ke fase padat. Istilah absorpsi digunakan juga untuk menggambarkan dua jenis kekuatan interaksi antara adsorbat dan adsorben^[22]. Proses absorpsi dapat dilihat pada Gambar 2.



Gambar 2. Skema Ilustrasi Langkah Adsorpsi^[22].

Adsorpsi dapat terjadi pada permukaan luar dari adsorben dalam pori makro, tapi daerah permukaan makro dan mesopori kecil dibandingkan dengan luas permukaan. Proses pertukaran ion dipengaruhi oleh ukuran partikel tanah dan konsentrasi nuklida. Biasanya tingkat pertukaran ion menurun dengan meningkatnya ukuran atom^[10].

Data energi aktivasi proses adsorpsi ion logam berat oleh kitosan dapat dilihat pada Tabel 2.

Tabel 2. Data Eksperimen Tingkatan Energi Kitosan Terhadap Adsorpsi Logam Berat^[13]

adsorben	Ion logam	Ea (eV)
kitosan	Logam Fe	4,6
	Logam Cu	3
	Logam Cd	2,4

Untuk mengetahui pengaruh logam berat terhadap energi kitosan, maka nilai energi dasar kitosan dapat dibandingkan dengan nilai energi kitosan setelah berikatan dengan logam berat dengan mengambil tingkat perbedaan energi terbesar kitosan dengan logam berat.

Wiyarsi dan Erfan, 2009^[22] pada penelitiannya mengemukakan semakin tingkat serapan kitosan terhadap logam berat mempengaruhi tingkat energinya. Dimana semakin sedikit kitosan menyerap logam berat semakin sedikit pula pengaruhnya terhadap energi kitosan. Sebaliknya semakin banyak kitosan menyerap logam berat semakin besar pula pengaruhnya terhadap energi kitosan. Pada saat kitosan melakukan penyerapan terjadi interaksi antar molekulnya.

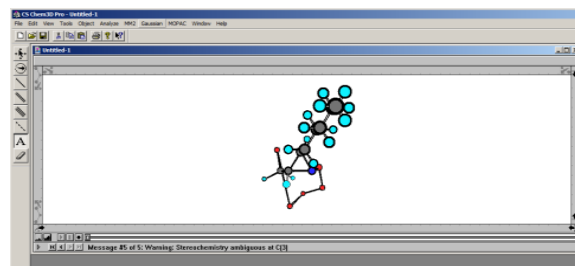
Kitosan yang diisolasi dari limbah udang, dapat digunakan sebagai adsorben logam berat yang meliputi kromium, tembaga, besi, zink dan nikel. Berdasarkan harga efisiensi penyerapan, kitosan merupakan adsorben yang baik untuk logam kromium, tembaga dan besi pada suhu kamar.

Penelitian tentang kitosan ini telah banyak dilakukan oleh peneliti-peneliti sebelumnya. Army^[2]. Dalam penelitiannya menyimpulkan bahwa Semakin banyak jumlah kitosan yang digunakan maka konstanta kecepatan penyerapan logam semakin besar dan penyerapan semakin cepat. Edi juga meneliti tentang kitosan, dalam penelitiannya ia menyimpulkan bahwa dengan penambahan NaOH yang sangat pekat dapat mengaktifkan kitin sehingga adsorben kitosan mampu mengabsorpsi Cd dalam limbah cair industri kimia sebesar 90%^[6]. Selain itu Rinaudo juga melakukan penelitian tentang kitin dan kitosan, dari penelitiannya menyimpulkan bahwa interaksi antar molekul sebagai bahan dasar pembentukan kitosan mengandung energi sebesar 798,2 eV^[17].

Walaupun telah banyak penelitian tentang kitin dan kitosan, namun proses terbentuknya kitosan dari kitin dan pengaruh logam berat terhadap energinya belum diketahui. Hal ini disebabkan energi yang terlibat dalam transfer elektron pada setiap proses belum diketahui. Untuk mengetahui proses ini, maka dilakukan penelitian tentang komputasi energi elektronik kitosan dari kitin cangkang udang dan pengaruh logam berat terhadap energi kitosan menggunakan software CS *Chemoffice* dan *Winnopac*.

METODE PENELITIAN

Jenis penelitian ini termasuk dalam penelitian teoritik dalam bidang kajian Fisika Material dan Biofisika. Penelitian ini dilakukan di Laboratorium Fisika Material Universitas Negeri Padang, bulan April sampai Juni 2015. Dalam Penelitian membutuhkan instrumen komputer menggunakan software CS *Chemoffice* dan *winnopac*. Adapun variabel dalam penelitian ini terbagi atas dua yaitu variabel bebas dan variabel terikat. Variabel bebas adalah himpunan sejumlah gejala yang memiliki aspek yang mempengaruhinya. Variabel terikat adalah himpunan sejumlah aspek atau unsur yang didalamnya berfungsi sebagai menerima atau menyesuaikan diri dengan variabel lain. Variabel bebas dalam penelitian ini adalah jenis logam berat yang di variasikan dan variabel terikatnya adalah jarak antar molekul, muatan elektron yang teraktivasi, dan energi aktivasinya. Pelaksanaan penelitian ini menggunakan software CS *Chemoffice* dan *winnopac*. Software *chemoffice* yang digunakan untuk menggambar molekul, menentukan posisi molekul, dan menentukan jarak antar molekul. Langkah pertama yang dilakukan adalah menggambar molekul. Untuk menggambar molekul adalah menuliskan nama atom pada layar dan menghubungkan dengan atom lain dengan menggunakan garis lurus seperti pada Gambar 3.



Gambar 3. contoh skema kitin sebagai pembentukan kitosan.

Kemudian Memutar dan mengatur posisi molekul pereaksi yang bertujuan untuk mendapatkan posisi terbaik dari molekul tanpa merubah panjang ikatan molekul dan sudut reaksi antar molekul. Semua molekul di blok terlebih dahulu agar posisi dan sudut antar atom tidak berubah. Memutar posisi molekul dapat dilakukan dengan menggunakan menu yang terdapat pada sebelah kiri layar. Berdasarkan data energi yang diperoleh di *winnopac* selanjutnya dihitung perbedaan energi yang tersimpan di dalam mekanisme reaksi *kitosan*. Jadi, energi aktivasi dan muatan molekul diperoleh dari koordinat internal. Hasil perhitungan energi aktivasi tersebut, diverifikasi dengan hasil eksperimen untuk melihat proses kajian elektronik yang dilakukan pada *kitosan* sudah benar atau belum. Setelah diperoleh energi dari *kitosan*, kemudian ditambahkan molekul logam berat, yaitu dengan memvariasikan logam berat Cd, Fe, Cu. Langkah yang digunakan sama dengan langkah a sampai c sehingga diperoleh energi aktivasinya.

Setelah diperoleh data dilakukan teknik pengumpulan data. Teknik pengumpulan data secara langsung dan tidak langsung. Data yang diperoleh secara langsung adalah muatan molekul, dan jarak antar molekul, yang merupakan struktur geometri dari *kitosan* sebelum dan setelah ditambahkan logam berat. Struktur geometri tersebut diperoleh dengan bantuan software CS *Chemoffice*. Struktur geometri dan keadaan elektronik tiap molekul dioptimasi terhadap energi total menggunakan software *winnopac*. Sedangkan data tak langsung adalah perbedaan energi potensial akibat variasi jarak antar dua molekul diperoleh dengan menggunakan persamaan

$$\Delta E = |E_R - E_a| \dots \dots \dots (1)$$

dan pengaruh pemberian logam berat terhadap energi dari *kitosan* menggunakan persamaan

$$\Delta E = |E_{\text{sebelum berikatan}} - E_{\text{setelah berikatan}}| \dots \dots \dots (2)$$

Data yang didapat berupa nilai muatan molekul, jarak antar molekul, dan energi potensial ditampilkan dalam bentuk tabel data. Kemudian dibuat grafik hubungan antara jarak antar molekul dengan muatan, dan grafik hubungan antara molekul dengan energi. Sehingga akan terlihat hubungan antara jarak antar molekul dengan muatan serta energi potensial

ditampilkan dalam bentuk dengan energi potensial dari karakteristik fisis *kitosan*. Kemudian dibandingkan dengan penambahan logam berat yang ditampilkan dalam bentuk grafik. Dari grafik akan terlihat pengaruh penambahan logam berat terhadap energi potensial kitosan.

HASIL PENELITIAN DAN PEMBAHASAN

1. Hasil Penelitian

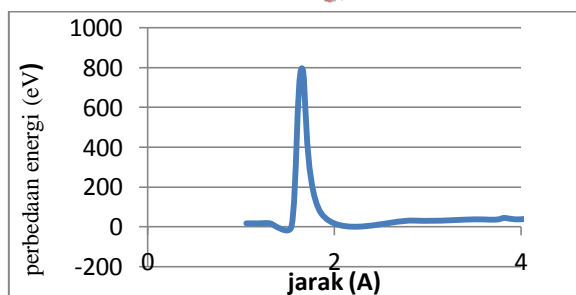
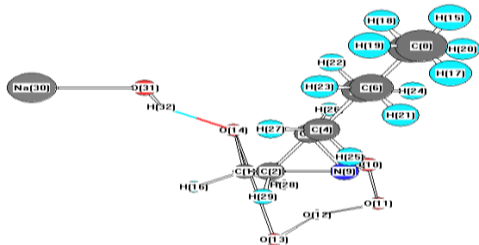
Selain jarak antar atom dan muatan dari elektron untuk masing-masing atom yang terlibat dalam pembentukan kitosan didapat juga energi yang tersimpan sebelum berikatan membentuk kitosan yang terdapat pada Tabel 1.

Tabel 3. Data Energi Awal Dari Molekul Pembentukan Kitosan

Molekul	Energi (eV)
Kitin	-2799,54071
NaOH	-313,42253

Untuk mendapatkan kitosan maka dilakukan pengikatan antar molekul-molekul penyusun yaitu kitin dengan NaOH.

Pembentukan kitosan dengan mereaksikan senyawa kitin dengan NaOH. Atom yang berikatan adalah H_{32} dan O_{14} . Dari banyak atom antara dua senyawa tersebut atom ini yang dapat berikatan. Bentuk ikatannya dapat dilihat pada gambar 4.



Gambar 4. Proses pembentukan kitosan

- Kitin ($C_8 H_{13} NO_5$) berikatan dengan NaOH
- Grafik energi potensial

Gambar 4 adalah grafik perbedaan nilai energi akibat variasi jarak. Perbedaan energi mengalami peningkatan pada jarak sekitar $1,54 \text{ \AA}$ dan mencapai nilai maksimum pada jarak $1,17 \text{ \AA}$ yaitu sebesar $2001,17198 \text{ eV}$. Sehingga diperoleh energi aktivasi

akibat pengikatan ini adalah $798,36873 \text{ hal}$ ini menunjukkan bahwa elektron mengalami eksitasi karena adanya penyerapan energi akibat penambahan molekul.

Hal ini terlihat dengan adanya serah terima muatan antar molekul yang berikatan, seperti yang terlihat pada Gambar 14c. Perubahan nilai muatan elektron juga terjadi pada jarak $1,17$. Pada jarak tersebut nilai muatan dari H_{32} berkurang sedangkan nilai muatan O_{14} tetap. Muatan dari molekul H_{32} diberikan pada molekul O_{12} yang merupakan tetangga molekul O_{14} . Hal ini terlihat pada grafik bahwa muatan untuk molekul O_{12} meningkat. Jadi molekul yang berperan sebagai donor adalah H_{32} dan yang berperan sebagai akseptor adalah O_{12} .

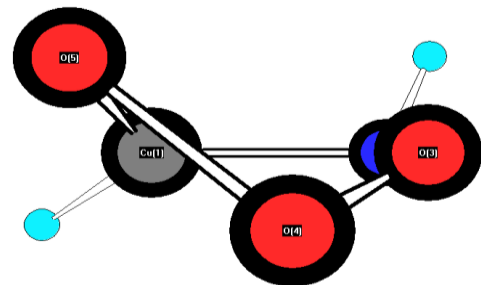
Hasil ini akan menjadi acuan untuk proses berikutnya yaitu penambahan logam berat terhadap kitosan. Dengan memvariasikan logam berat, maka akan terlihat pengaruh terhadap energi kitosan.

a. Penambahan logam berat ke pada kitosan

Setelah terbentuknya kitosan dengan energi - $798,36873$, selanjutnya dilakukan penambahan variasi logam berat untuk melihat pengaruh terhadap energi awal kitosan.

1. Logam Cu

Struktur geometri dari molekul logam tembaga ($CuNO_3$) dibangun dengan menggunakan software chemoffice. Struktur geometrinya ditunjukkan pada Gambar 5.



Gambar 5. Molekul tembaga ($CuNO_3$)

Pada struktur geometri terlihat bahwa masing-masing atom saling berikatan dengan jarak yang berbeda-beda antar atom. Tabel 3 merupakan data jarak antar atom dari molekul tembaga ($CuNO_3$) yang diperoleh dari software *chemoffice* dan *winmopac*.

Tabel 3. Jarak antar atom yang berikatan pada moleku tembaga ($CuNO_3$)

Atom yang berikatan	Jarak antar atom(Å)
Cu_1-N_2	1,846
O_3-O_4	1,428
O_4-O_5	2,376
Cu_1-O_5	1,810

Selain struktur geometri dan jarak antar atom, diperoleh juga nilai muatan untuk atom-atom

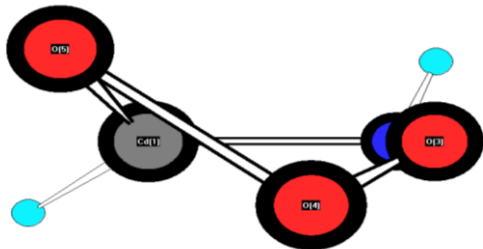
penyusun molekul tembaga. Nilai muatan untuk masing-masing atom penyusun molekul tembaga, terdapat pada Tabel 15.

Tabel 4. Muatan Atom Molekul tembaga (CuNO_3)

Atom ke	Tipe	Muatan (Q)
1	Cu	1,0000
2	N	0,2388
3	O	-1,1747
4	O	0,1981
5	O	0,1747

2. Logam Cd

Struktur geometri dari molekul kadmium (CdNO_3) dibangun dengan menggunakan software chemoffice. Struktur geometrinya ditunjukkan pada Gambar 6.



Gambar 6. Molekul kadmium (CdNO_3)

Pada struktur geometri dapat diamati bahwa masing-masing atom yang saling berikatan dengan jarak yang berbeda-beda antar atom. Tabel 5 merupakan data jarak antar atom dari molekul kadmium yang diperoleh dari software chemoffice dan winmopac.

Tabel 5. Jarak antar atom yang berikatan pada molekul kadmium (CdNO_3)

Atom yang berikatan	Jarak antar atom(Å)
$\text{Cd}_1\text{-N}_2$	2,156
$\text{O}_3\text{-O}_4$	1,428
$\text{O}_4\text{-O}_5$	2,757
$\text{Cd}_1\text{-O}_5$	2,120

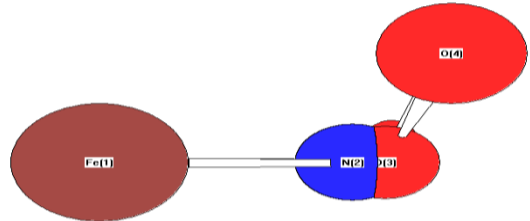
Selain struktur geometri dan jarak antar atom, diperoleh juga nilai muatan untuk atom-atom penyusun molekul kadmium (CdNO_3). Nilai muatan untuk masing-masing atom penyusun molekul kadmium (CdNO_3), terdapat pada Tabel 6.

Tabel 6. Muatan Atom Molekul kadmium (CdNO_3).

Atom ke	Tipe	Muatan (Q)
1	Cd	1.1863
2	N	-0.0354
3	O	0.3303
4	O	-0.4374
5	O	-0.7962

3. Logam besi (Fe)

Struktur logam besi sama halnya dengan logam Cu dan Cd yaitu dengan menggunakan software chemoffice dan winmopac, dapat dilihat pada Gambar 7.



Gambar 7. Molekul Besi (FeNO_3)

Untuk jarak antar atom dan muatan atom molekul yang terdapat pada Tabel 7 dan 8.

Tabel 7. Jarak antar atom yang berikatan pada molekul besi (FeNO_3)

Atom yang berikatan	Jarak antar atom(Å)
$\text{Fe}_1\text{-N}_2$	2,156
$\text{O}_3\text{-O}_4$	1,428
$\text{O}_4\text{-O}_5$	2,757
$\text{Fe}_1\text{-O}_5$	2,120

Selain struktur geometri dan jarak antar atom, diperoleh juga nilai muatan untuk atom-atom penyusun molekul Besi (FeNO_3). Nilai muatan untuk masing-masing atom penyusun molekul Besi (FeNO_3), terdapat pada Tabel 8.

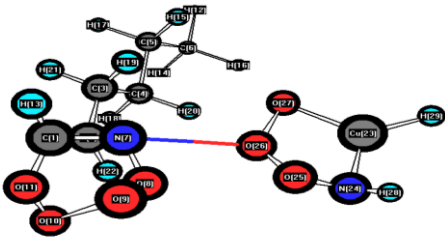
Tabel 8. Muatan Atom Molekul Besi (FeNO_3).

Atom ke	Tipe	Muatan (Q)
1	Fe	1,1863
2	N	-0,0354
3	O	0,3303
4	O	-0,4374
5	O	-0,7962

Pada saat kitosan direaksikan dengan logam berat, molekul yang berikatan yaitu molekul nitrogen dari kitosan dengan molekul oksigen dari molekul logam berat. Pada saat berikatan molekul logam berat akan menyerap energi dari kitosan seperti yang terlihat pada Gambar 8.

a. Pengikatan logam Cu dengan kitosan

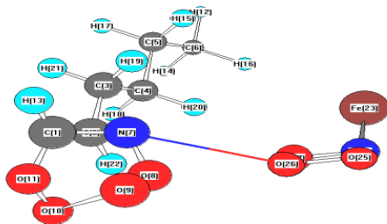
Pengikatan logam Cu dengan kitosan atom yang berikatan adalah atom N_7 dan O_{26} . Grafik proses pengikatannya dapat dilihat pada Gambar 8.



Gambar 8. Kitosan berikatan dengan CuNO₃

b. logam Fe

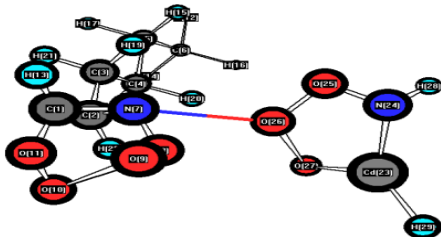
Pengikatan logam Fe dengan kitosan atom yang berikatan adalah atom N₇ dan O₂₆. Grafik proses pengikatannya dapat dilihat pada Gambar 9



Gambar 9. Gambar kitosan berikatan dengan FeNO₃

c. logam Cd

Pengikatan kitosan dengan logam Cd dapat dilihat pada grafik Gambar 10. Atom yang berikatan adalah N₍₇₎ dan O₍₂₆₎



Gambar 10. Gambar kitosan berikatan dengan CdNO₃

Kitosan (eV)	Kitosan + tembaga nitrat(FeNO ₃) (eV)	Kitosan + Besi nitrat(Cu NO ₃) (eV)	Kitosan + Kadmium nitrat(CdN O ₃) (eV)
-798,36	-4,76436	-3,09727	- 2,48386

2. Pembahasan

Energi relatif kitosan akan berubah jika diberikan pengaruh dari luar yaitu logam berat. Menurut wiyarsi dan Erfan keberadaan racun dalam suatu senyawa dapat mengurangi kerja dan aktivitas senyawa tersebut. Logam berat dapat mempengaruhi

kerja kitosan dalam proses penyerapan/adsorpsi sehingga energinya berkurang.

Dilihat dari kapasitas adsorpsi untuk logam dalam larutan. Secara umum memiliki pola yang sama, dan atom yang berperan sebagai donor dan akseptor sama. Pada pengikatan kitosan dengan logam berat Cu, Fe, dan Cd yang berperan sebagai donor adalah N₇ dan sebagai akseptor O₂₅. Akan tetapi jarak terjadinya donor dan akseptor masing-masing logam berbeda, karena

Saat terjadi tumbukan membuat jari-jari atom logam menjadi lebih kecil. Semakin kecilnya jari-jari atom ini akan memperkecil ikatan logam sehingga kemampuan kitosan menyerap logam lebih besar.

Dari ketiga atom tersebut logam Cd memiliki berat molekul paling besar sehingga pada saat tumbukan terjadi jari-jari atomnya tidak mengalami perubahan yang besar. Semakin besar jari-jari atomnya maka semakin kecil harga energi ionisasinya dan kekuatan ikatan logamnya semakin kuat. Karena ikatan logamnya semakin kuat dibutuhkan energi yang cukup besar untuk melakukan penyerapan. Sedangkan logam Cu dan Fe berat molekulnya lebih kecil dibandingkan logam Cd, dan energi kitosan untuk melakukan penyerapan lebih kecil dari logam Cd.

KESIMPULAN

Dari pembahasan yang telah dilakukan diperoleh kesimpulan sebagai berikut :

Energi aktivasi kitosan sebelum direaksikan dengan logam berat adalah sebesar 798,36873 eV

Melalui proses pembentukan kitosan dari kitin yang direaksikan dengan NaOH diperoleh jarak efektif molekul adalah 1,17 Å

Dalam mekanisme pembentukan kitosan terjadi serah terima muatan elektron antara molekul kitin dengan molekul NaOH yang berperan sebagai donor adalah H₃₂ dari molekul NaOH dan sebagai aseptor adalah O₁₂ dari molekul kitin(C₈H₁₃NO₅).

Setelah kitosan direaksikan dengan logam berat energinya cenderung menurun. Energi awalnya yaitu setelah direaksikan dengan logam Fe, Cu, Cd energinya yaitu -4,76436eV, -3,09727 eV, - 2,48386 eV semakin berat massa logam berat yang ditambahkan ke pada kitosan energinya semakin rendah tanda minus menyatakan energi kitosan berkurang.

Dari kesimpulan dapat disarankan bahwa untuk lebih mendapatkan hasil yang lebih akurat, dilakukan penambahan logam berat lebih banyak lmemvariasikannya misalnya 5, 6 variasi logam berat dan seterusnya

DAFTAR PUSTAKA

- [1]. Alim, M, R. 2011. <http://mediainformasidanpendidikan.blogspot.com/2011/04/struktur-molekul.html#axzz1N3UqiFfi>
- [2]. Army, putra satria, Windarti, tri. 2013. Kitin Sebagai Bahan Dasar *Drug Delivery*: Studi Interaksi Molekul Kitin. *Jurnal kimia* Vol 1, No 1, Hal 18 – 26, 2013. Diakses tanggal 12 mai 2015.
- [3]. Beiser, Arthur. (1990). *Konsep Fisika Modern Edisi Ke Empat*. Jakarta: Erlangga
- [4]. Bhuvana, 2006, *Studies on Frictional Behaviour of Chitosan-Coated Fabrics*, Aux. Res. J., Vol 6(4): 123-130.
- [5]. Dahlan, endes. 1989. *Dampak Pencemaran Lingkungan Terhadap Kesehatan Manusia Dan Beberapa Komponen Sumber Daya Alam*. Vol 11, 39-44.
- [6]. Edi, Sari cahyaningrum, dan Amaria. 2006. *Utilization Of Penaeus Monodon Shrimp Shell Waste As Adsorbent Of Cadmium(Ii) In Water Medium*. *Indo. J. Chem.*, 2005, 5 (2), 130 - 134
- [7]. Fuadi. 01 Agustus 2009. "Potensial Molekul" Vol 6(3): 123-127.
- [8]. Hargono, Abdullah, & Sumanti. I. 2008. Pembuatan Kitosan Dari Limbah Cangkang Udang . 12: 53-57. Semarang, Universitas diponegoro.
- [9]. Kawamura, Y., Mitsuhashi, M., Tanibe, H., Yoshida, H. 1993. "Adsorption of metal ions on polyaminated highly porous chitosan chelating agents". *Indian Engineering & Chemical Research*. Vol. 32, pp. 386–391.
- [10]. Liu, D., Hsu, C., Chuang, C. 1995. "Ion-exchange and sorption kinetics of Cesium and Strontium in soils", *Applied Radiation and Isotopes*. Vol. 46, pp. 839-843.
- [11]. Maria., Emriadi., admin, alif. (2011). *Karboksimetil Kitosan sebagai Inhibitor Korosi pada Baja Lunak dalam Media Air Gambut*. *Jurnal Matematika & Sains*, Agustus 2011, Vol. 16 Nomor 2.
- [12]. Melinda. (2014). *Manfaat Kitin Dan Kitosan*. Jurusan kimia UNY.
- [13]. Metcalf and Eddy, 2003. *Wastewater Engineering: Treatment and Reuse*. (McGraw Hill International Edition, New York). pp.478-483
- [14]. Muzzarelli. (2011) *Sumber Kitin Dan Kitosan*. *jurnal kimia* 2011, 4 (2), 6-7.
- [15]. Olmsted, John & Williams, Geger Y., M. (1994). *The Molecular Science*. USA: Wn C. Brown.
- [16]. Palar, H. 2009. Pencemaran dan Toksikologi Logam Berat. Penerbit Rineka Cipta, Jakarta. Hal.74-88.
- [17]. Rinaudo, M. *Review Chitin and Chitosan Preparation from Marine Sources. Structure, Properties and Applications*, *Polym. Int.* 2009, 57, 397–430.
- [18]. Ratnawulan, Arif, i, sukimono dan loeksmanto, w. (2005) :binding site determination for light emission in bacterial bioluminescence photobacterium phosphoreum that isolated from the indonesia marine squid, the asian physic seminar proceedings, december 6-7, bandung.
- [19]. Ratnawulan. 2008. *Studi Kasus Pada Bakteri Photobacterium Phosphoreum*. Padang: Universitas Negeri Padang Press.
- [20]. Rouquerol, F., 1999. *Adsorption by Powders and Porous Solids*. (Academic Press, London), pp. 1-21, 355-361, 378-382.
- [21]. Santoso, S. J., 2001, *Single And Competitive Adsorption Kinetics Of Cd and Cu by Humic Acid*, Prosiding Seminar Nasional Kimia V, Jurusan Kimia FMIPA UGM, Yogyakarta
- [22]. Wiyarsi, Antuni dan Erfan, Priyambodo. (2011) *Pengaruh Konsentrasi Kitosan Dari Cangkang Udang Terhadap Efisiensi Penjerapan Logam Berat*. Jurusan Pendidikan Kimia FMIPA UNY
- [23]. Yuliusman dan Adelina P.W. 2010. *Pemanfaatan Kitosan Dari Cangkang udang Pada Proses Adsorpsi Logam berat Dari Larutan Niso4*. Seminar Rekayasa Kimia Dan Proses 2010 Issn : 1411-4216.