

# Simulasi Mekanisme Reaksi Pada Siklus Penyimpanan-Pelepasan Hidrogen Berbasis Sistem Bikarbonat-Format Dengan Katalis (4-Me)Triaz(NHPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Mn(CO)<sub>2</sub>Br = Reaction Pathway Simulation Of Hydrogen Storage-Release Cycles Based On Bicarbonate-Formate System (4-Me)Triaz(NHPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Mn(CO)<sub>2</sub>Br Catalyst

Rafi Athallah Seniang, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920524498&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Hidrogen berpotensi besar sebagai energi masa depan, namun untuk metode penyimpanannya yang efektif masih menjadi tantangan. Penyimpanan bentuk gas membutuhkan vessel yang tahan tekanan setinggi 350 bar dan bentuk cair memerlukan suhu dibawah  $-239,95^{\circ}\text{C}$ , sehingga butuh insulasi yang sulit. Pada November 2022, tim peneliti dari Jerman, Henrik dkk., mengembangkan metode penyimpanan dan pelepasan hidrogen dengan menggunakan reaksi kesetimbangan bikarbonat-format yang dibantu oleh katalis (4-Me)Triaz(NHPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Mn(CO)<sub>2</sub>Br. Katalis tersebut berbasis mangan yang merupakan logam paling berlimpah kedua di bumi, tidak beracun, dan ramah lingkungan. Dalam penelitian ini kami mengusulkan tiga mekanisme reaksi yang memungkinkan untuk sistem penyimpanan dan pelepasan hidrogen ini bekerja. Kami menggunakan teori fungsional kerapatan (density functional theory, DFT) untuk memahami reaksi ini pada tingkat molekuler. Barrier single point energy paling rendah didapat pada mekanisme III, yaitu mekanisme yang dimana tahapan penentu laju reaksinya adalah pelepasan ion format dari katalis Mn bermuatan netral dengan nilai sebesar 24,9 kkal/mol dihitung pada tingkatan teori B3LYP-D3 def2-TZVP/SMD(THF). Selain itu, ditemukan bahwa penggunaan campuran air dan THF sebagai pelarut memberikan hasil yang lebih baik lagi. Tahapan penentu laju dari mekanisme ini ialah tahap pelepasan ion format dari pusat logam katalis dengan perubahan energi bebas Gibbs sebesar 8,9 kkal/mol. Semua perhitungan dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak ORCA 5.0.3, Chemcraft dan Avogadro.

.....Hydrogen has great potential as a future energy, but effective storage methods still pose a challenge. Gas storage requires a vessel that can withstand pressures as high as 350 bar and liquid form requires temperatures below  $-239.95^{\circ}\text{C}$ , necessitating difficult insulation. In November 2022, a team of researchers from Germany, Henrik et al., developed a storage and release method for hydrogen using the bicarbonate-formate equilibrium reaction assisted by the catalyst (4-Me)Triaz(NHPr<sub>2</sub>)<sub>2</sub>Mn(CO)<sub>2</sub>Br. This catalyst is based on manganese, the second most abundant metal on Earth, which is non-toxic and environmentally friendly. In this study, we propose three reaction mechanisms that allow this hydrogen storage and release system to function. We employ density functional theory (DFT) to understand these reactions at the molecular level. The mechanism with the lowest single-point energy barrier is found in mechanism III, where the rate-determining step is the release of the formate ion from the neutral-charged Mn catalyst, with a value of 24.9 kcal/mol calculated at the B3LYP-D3 def2-TZVP/SMD(THF) level of theory. Furthermore, it is found that using a mixture of water and THF as a solvent yields even better results. The rate-determining step of this mechanism is the release of the formate ion from the central metal catalyst, with a change in Gibbs free energy of 8.9 kcal/mol. All calculations were performed using the software packages ORCA 5.0.3, Chemcraft, and Avogadro.