

Studi *Density Functional Theory (DFT)* pada *Cadmium-Montmorillonite* untuk aplikasi di bidang lingkungan

Meqorry Yusfi^{1,a)}, Triati Dewi Kencana Wungu^{2,b)} dan Suprijadi^{1,c)}

¹Laboratorium Komputasi Lanjut,
Kelompok Keilmuan Fisika Teoretik Energi Tinggi dan Instrumentasi,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesha no. 10 Bandung, Indonesia, 40132

²Laboratorium Biofisika,
Kelompok Keilmuan Fisika Nuklir dan Biofisika,
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Teknologi Bandung,
Jl. Ganesha no. 10 Bandung, Indonesia, 40132

^{a)} meqorry@yahoo.com (corresponding author)

^{b)} triati@fi.itb.ac.id

^{c)} supri@fi.itb.ac.id

Abstrak

Penelitian ini dilakukan dengan menggunakan metoda Density Functional Theory (DFT) untuk menghitung sifat-sifat elektronik dan struktur geometri dari Cadmium(Cd)-montmorillonite berbasis mineral lempung untuk aplikasi di bidang lingkungan. Untuk mendapatkan optimasi struktur maka dalam perhitungan ini dilakukan variasi penempatan posisi Cd di atas permukaan montmorillonite. Dari hasil perhitungan didapat bahwa energi adsorpsi Cd pada permukaan montmorillonite sebesar positif 36,114 eV. Energi gap berubah dari 4,327 eV menjadi 2,588 eV dengan penambahan Cd.

Kata-kata kunci: Cadmium-montmorillonite, DFT, lempung

PENDAHULUAN

Cadmium (Cd) adalah senyawa logam yang dapat ditemukan di alam sebagai senyawa dengan zat kimia lain, tidak hanya itu Cd dapat ditemukan juga di kerak bumi. Meski Cd dapat dimanfaatkan untuk bidang industri dan pertanian seperti pupuk dan pestisida, namun keberadaan Cd untuk jumlah yang melebihi batas ambang di udara dapat menjadi pencemar lingkungan. Jika terjadi peningkatan kadar Cd di lingkungan dapat mengakibatkan terganggunya ekosistem perairan dan kerusakan biota. Tidak hanya itu, Cd jika masuk ke dalam tubuh manusia juga akan menyebabkan gangguan aktivitas enzim di dalam tubuh, begitu juga pada tulang, akan menyebabkan kerapuhan dan nyeri. Oleh karena itu polusi logam berat harus dikurangi untuk menghindari terjadinya dampak negatif terhadap manusia dan lingkungan.

Sebagai salah satu upaya dalam menangani permasalahan lingkungan maka dibutuhkan suatu material yang dapat menyerap logam berat. Material tersebut yakni mineral lempung. Mineral lempung terdiri dari tiga jenis yaitu montmorillonite, illite, dan kaolinite. Dibandingkan dengan illite dan kaolinite, montmorillonite mempunyai luas permukaan yang besar dan sangat mudah menyerap air dalam jumlah banyak. Oleh sebab itu sangat baik digunakan dalam penyerapan logam berat Cd. Berdasarkan unsur penyusun kimianya, mineral lempung tersusun oleh silikat berlapis SiO₄ dan (Al(OH)₃). Proses pertukaran ion (ion exchange) dapat terjadi pada saat montmorillonite berinteraksi dengan logam berat (seperti Pb, Cd, Al). Sebelumnya telah dilakukan penelitian tentang interaksi montmorillonite dengan Pb [1] dan Li [2,3]. Pada penelitian ini akan dilihat interaksi montmorillonite dengan Cd. Keberadaan mineral lempung di

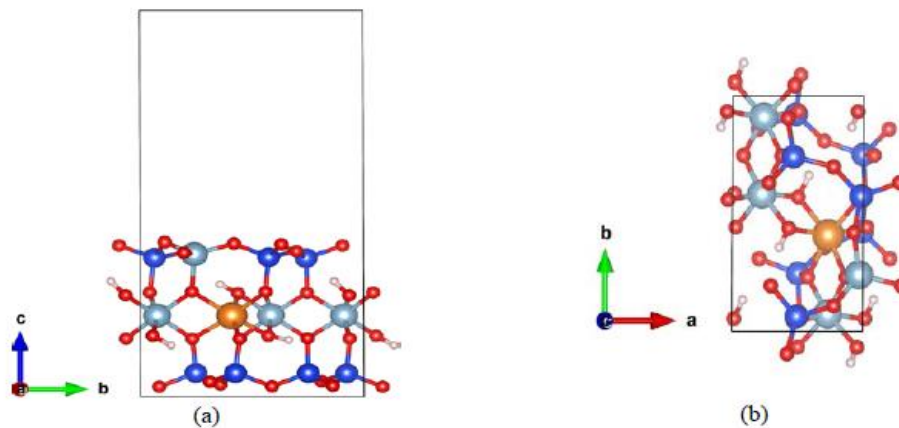
Indonesia sangat mudah ditemukan sehingga penelitian dan produksi terkait mineral lempung dapat dengan mudah terlaksana.

Untuk mengetahui bagaimana interaksi antara Cadmium dengan montmorillonite dan penerapannya di bidang lingkungan, maka perlu dilakukan penelitian tentang adsorpsi dari Cd terhadap montmorillonite dari skala atomik. Maka, dalam penelitian ini akan dibahas tentang struktur dan sifat-sifat elektronik dari adsorpsi Cd-montmorillonite sebagai hasil pendekatan simulasi komputasi berbasis kuantum untuk aplikasi di bidang lingkungan.

MODEL DAN METODA KALKULASI

Metode yang akan dipakai dalam penelitian ini adalah metode Density Functional Theory (DFT). DFT merupakan metode komputasi berbasis kuantum untuk penentuan struktur elektronik suatu bahan pada keadaan dasar (ground state) melalui fungsional kerapatan elektron (electron density). Karena DFT hanya bekerja pada keadaan energi *ground state* maka temperatur yang bekerja dalam perhitungan ini adalah 0K. Meskipun dilakukan pada temperatur 0K, penentuan struktur elektronik baik secara komputasi (dengan DFT) ataupun eksperimen cenderung memberikan hasil yang hampir sama. DFT dilakukan dengan formula Kohn-Sham [4] yang terdapat pada *Vienna Ab Initio Simulation Package* (VASP)[5]. Energi exchange-correlation diperoleh dengan menerapkan fungsi *generalized gradient approximation* (GGA) dan fungsi *Perdew-Burke-Ernzerhof* (PBE). *Brillouin zone* disampel menggunakan *grid* k-point Monkhorst-Pack 5x5x1 dan energi *cut-off* 520 eV. Kalkulasi dilakukan sampai mencapai nilai konvergensi dari total energi mencapai 0,1 meV.

Model dari montmorillonite (MMT) yang digunakan serupa dengan penelitian sebelumnya [1] seperti terlihat pada Gambar 1. Penambahan dari atom Cd pada MMT akan mengubah rumus kimia dari $(\text{Si}_7\text{Al})(\text{Al}_3\text{Mg})\text{O}_{20}(\text{OH})_4$ menjadi $\text{Cd}(\text{Si}_7\text{Al})(\text{Al}_3\text{Mg})\text{O}_{20}(\text{OH})_4$ yang disebut dengan Cadmium-montmorillonite. Tahap awal dari kalkulasi akan mencari posisi yang paling stabil dari atom Cd, lalu dengan posisi yang paling stabil tahap selanjutnya akan dilakukan kalkulasi untuk memperoleh sifat elektronik dari struktur.

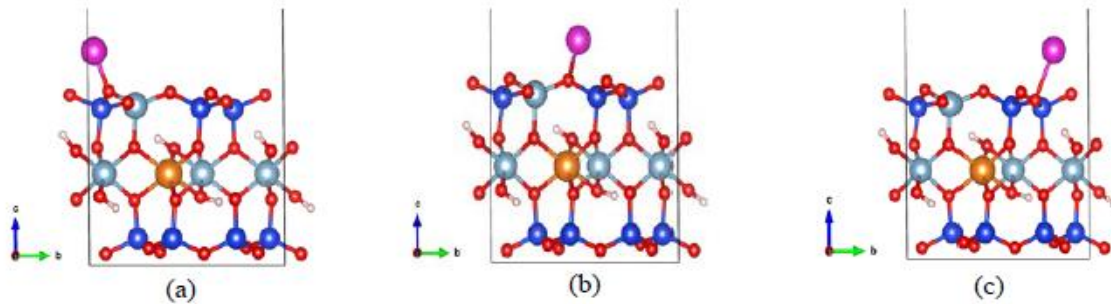


Gambar 1. Struktur geometri Cd-MMT dalam : (a) bidang xy , (b) bidang yz

Setelah kalkulasi selesai maka akan dilihat energi adsorpsi dari molekul Cd terhadap MMT. Perhitungan energi adsorpsi E_{ad} dilakukan dengan persamaan :

$$E_{ad} = \text{energi total}_{\text{Cd-MMT}} - \text{energi total}_{\text{MMT}} - \text{energi total}_{\text{Cd}} \quad (1)$$

HASIL DAN PEMBAHASAN



Gambar 2. Variasi posisi Cd terhadap montmorillonite

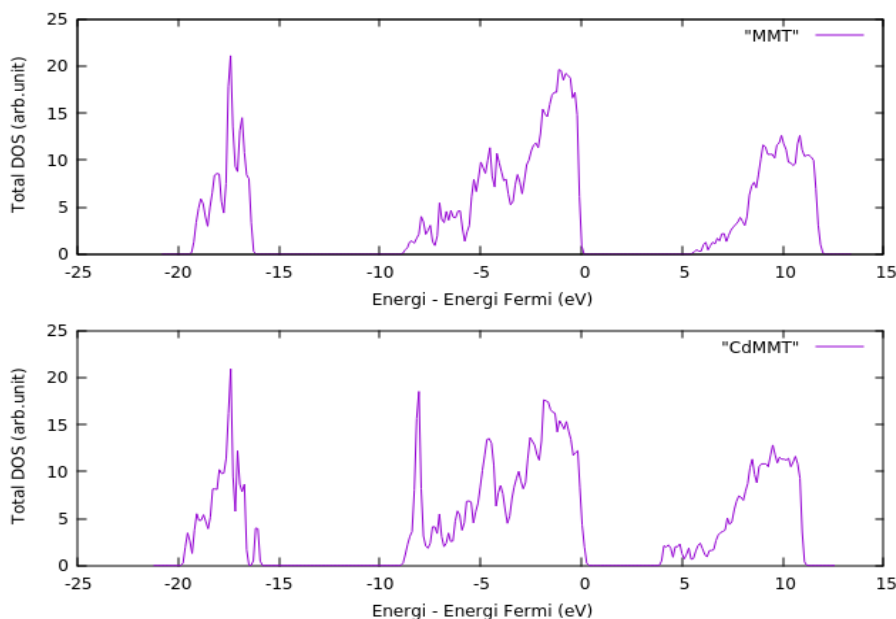
Kalkulasi pertama yang dilakukan adalah untuk menentukan posisi paling stabil dari penempatan atom Cd. Kalkulasi dilakukan secara statik ($NSW=0$). Variasi posisi dilakukan sebanyak tiga buah seperti pada Gambar 2(a) atom Cd diletakkan di sebelah kiri atas dari montmorillonite (b) di tengah atas dari montmorillonite (c) di sebelah kanan atas dari montmorillonite. Hasil kalkulasi statik diperoleh energi total adalah, $-294,803\text{eV}$, $-5336,935\text{eV}$, dan $-309,211\text{ eV}$ secara berurutan. Dari hasil tersebut diperoleh bahwa energi yang paling minimum adalah jika atom Cd diletakkan di tengah atas dari posisi montmorillonite (Gambar 2(b)). Energi yang paling minimum menunjukkan bahwa struktur yang paling stabil adalah jika Cd diletakkan di tengah atas.

Setelah diperoleh posisi atom dengan energi minimum (posisi tengah atas) maka selanjutnya posisi tersebut akan dipakai untuk kalkulasi berikutnya. Kalkulasi dilakukan dengan nilai batas $NSW = 1000$. Dari hasil kalkulasi diperoleh total energi dari Cd- montmorillonite adalah $-282,662\text{ eV}$. Perhitungan energi total juga dilakukan untuk montmorillonite tanpa penambahan Cd, dari hasil kalkulasi diperoleh nilai energi totalnya $-314,920\text{ eV}$, sedangkan untuk energi total Cd sebesar $-3,855\text{ eV}$. Berdasarkan persamaan 1, maka diperoleh nilai energi adsorpsi dari sistem adalah sebesar $36,114\text{ eV}$. Hasil yang diperoleh menunjukkan adanya interaksi jika montmorillonite ditambahkan atom Cd. Hasil yang diperoleh bernilai positif.

Untuk mengetahui bagaimana pengaruh interaksi montmorillonite dengan Cd maka dilakukan analisis dari density of states (DOS). Gambar 3 merupakan total DOS dari montmorillonite dan Cd-montmorillonite. Dapat dilihat pada Gambar 3a, energi gap untuk montmorillonite diperoleh sebesar $4,327\text{ eV}$ sedangkan untuk Cd-montmorillonite (Gambar 3b) sebesar $2,588\text{ eV}$. Ini berarti terjadi penyempitan energi gap sebesar $1,739\text{ eV}$. Dengan adanya perubahan energi gap yang signifikan tersebut maka sifat elektronik montmorillonite setelah berinteraksi dengan Cd berubah dari insulator menjadi semikonduktor. Terjadinya perubahan sifat elektronik tersebut menandakan bahwa montmorillonite dapat dijadikan sebagai bahan aktif untuk mendeteksi keberadaan logam berat seperti Cd di lingkungan kita. Meskipun nilai energi adsorpsi bernilai positif, yang menunjukkan bahwa reaksi yang terjadi tidak spontan, namun melalui analisis perubahan energi gap pada total DOSnya dapat dijadikan dasar bagi kita untuk menyimpulkan bahwa montmorillonite baik digunakan untuk kepentingan lingkungan.

KESIMPULAN

Kalkulasi interaksi Cd dengan montmorillonite menggunakan *density functional theory (DFT)* telah dilakukan untuk mengkaji struktur dan sifat elektronik dari Cd-montmorillonite untuk aplikasi di bidang lingkungan. Hasil dari perhitungan diperoleh energi yang paling minimum adalah jika atom Cd diletakkan di tengah atas dari posisi montmorillonite. Hasil interaksi antara Cd dengan montmorillonite diperoleh nilai energi adsorpsi dari sistem adalah sebesar $36,114\text{ eV}$. Energi gap untuk montmorillonite diperoleh sebesar $4,327\text{ eV}$ sedangkan untuk Cd-montmorillonite diperoleh energi gap sebesar $2,588\text{ eV}$. Ini berarti terjadi penyempitan energi gap sebesar $1,739\text{ eV}$.



Gambar 3. Total density of states (DOS) dari struktur (a) montmorillonite, (b) Cd-montmorillonite

UCAPAN TERIMA KASIH

Penulis mengucapkan terima kasih kepada berbagai pihak yang telah membantu dalam penulisan makalah ini. Makalah ini didanai oleh **Riset Pusat Unggulan Perguruan Tinggi (PUPT) kemenristekdikti 2017**. Semua kalkulasi dilakukan menggunakan QC cluster di laboratorium komputasi lanjut, Program Studi Fisika, Institut Teknologi Bandung.

REFERENSI

1. T.D.K. Wungu, M.R. Al Fauzan, Widayani dan Suprijadi, *A Density Functional Theory of a Calcium Montmorillonite : A First Investigation for Medicine Application*, 6th Asian Physics Symposium At Bandung, Indonesia, Journal of Physics: Conference Series **739** 012133 (2016)
2. T.D.K. Wungu, F. Rusyidi, H.K. Dipojono dan H. Kasai, *A Density Functional Theory Study on The Origin of Lithium-montmorillonite's Conductivity at Low Water Content : A First Investigation*, Solid State Communication **152**, 1862-1866 (2012)
3. T.D.K. Wungu, M.K. Agusta, A.G. Saputro, H.K. Dipojono dan H. Kasai, *First Principles Calculation on the Adsorption of Water on Lithium-Montmorillonite (Li-MMT)*, Journal of Physics: Condensed Matter **24**, 475506 (2012)
4. J.P. Perdew, K. Burke dan M. Ernzerhof, *Generalized gradient approximation made simple*, Phys. Rev. Lett **77**, 3865-3868 (1996)
5. G. Kresse, M. Marsman dan J. Furthmuller, *VASP the Guide*, Computational Material Physics, Faculty of Physics, Universitat Wien, Austria, (2016)