

# KAJIAN AWAL MEKANISME REAKSI ELEKTROLISIS NaCl MENJADI NaClO<sub>4</sub> UNTUK MENENTUKAN TAHAPAN REAKSI YANG EFEKTIF DARI PROSES ELEKTROLISIS NaCl

Bayu Prianto  
Peneliti Bidang Material Dirgantara, LAPAN

## ABSTRACT

Ammonium Perchlorate is the oxidizer commonly used in propellant. Ammonium perchlorate composes from ammonium cation (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) and perchlorate anion (ClO<sub>4</sub><sup>-</sup>). Perchlorate anion can be synthesized from chloride anion (from NaCl solution) by using electrochemical method. Studying of electrochemical mechanism reaction of perchlorate is very important, because ammonium perchlorate is strategic material. With the knowledge of electrochemical mechanism of perchlorate, we will get information of electrochemical reactions process condition, than can be used to do chemical synthesis in the laboratory. Pre-study the mechanism reactions have done by studying of several reaction models. All model reaction is tested by chemical computation method to find effective and efficient reaction model (represented by reaction energy value). From three tested models, we obtained the 3<sup>rd</sup> model was the effective and the efficient reactions to produce perchlorate. The value of Gibbs free energy reaction (AG) for hypochlorite, chlorite, chlorate, and perchlorate production are 256.085 kcal/mol, 248.122 kcal/mol, 240.190 kcal/mol, and 263.974 kcal/mol respectively.

Keywords : *Elektrolisis, Amonium Perchlorate, Gibbs reaction*

## ABSTRAK

Amonium Perklorat adalah oksidator yang biasa digunakan dalam propelan. Senyawa amonium perklorat tersebut, tersusun dari kation amonium (NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) dan anion perklorat (CKV). Anion perklorat dapat disintesis dari anion klorida (berasal dari larutan NaCl) dengan cara elektrokimia. Mempelajari mekanisme reaksi elektrokimia perklorat menjadi sangat penting, karena amonium perklorat merupakan senyawa yang strategis. Dengan pengetahuan mekanisme elektrokimia perklorat, maka akan diperoleh informasi proses reaksi elektrokimia yang efektif dan efisien, serta kondisi reaksinya, sebagai titik awal sintesis dalam laboratorium. Sebagai tahap awal mempelajari mekanisme reaksi tersebut dilakukan kajian teoritis dengan cara pengujian beberapa model reaksi yang mungkin terjadi pada sistem nyata. Pengujian model-model reaksi tersebut menggunakan bantuan kimia komputasi untuk mencari model reaksi yang efektif dan efisien (dapat dilihat dari nilai energi reaksinya). Dari 3 model reaksi yang diujikan, diperoleh bahwa model 3 memiliki reaksi yang efektif dan efisien untuk menghasilkan perklorat. Dengan nilai energi bebas Gibbs reaksi (AG) untuk pembentukan hipoklorit, klorit, klorat dan perklorat adalah 256,085 kkal/mol, 248,122 kkal/mol, 240,190 kkal/mol, dan 263,974 kkal/mol secara berurutan.

Kata kunci: *Elektrolisis, Amonium Perklorat, Reaksi gibbs*

## 1 PENDAHULUAN

Sejak tahun 1950-an telah ditemukan bahan bakar roket padat dengan standar energi tinggi. Campuran utamanya

adalah amonium perklorat (sebagai oksidator), dikombinasikan dengan bubuk aluminium (sebagai bahan bakar), yang terjaga kesatuannya dalam

bahan dasar PBAN atau HTPB (karet yang bersifat seperti bahan bakar).

Garam amonium perklorat tersusun dari ion amonium ( $\text{NH}_4^+$ ) dan ion perklorat ( $\text{ClO}_4^-$ ). Perklorat merupakan bentuk oksidasi tertinggi dari klorida. Salah satu teknik oksidasi yang digunakan adalah dengan cara elektrokimia. Prosesnya disebut elektrolisis, dengan larutan yang digunakan pada umumnya adalah larutan NaCl.

Dalam ilmu kimia sangat penting untuk dapat memahami proses berlangsungnya reaksi (atau biasa disebut mekanisme reaksi). Karena dengan mengetahui mekanisme reaksi, para kimiawan dapat mengetahui energi yang diperlukan untuk berlangsungnya reaksi, kondisi proses reaksi yang diperlukan, dan halangan-halangan apa saja yang ada pada reaksi tersebut. Sehingga para kimiawan dapat merancang teknik pengoptimalan dari proses reaksi tersebut.

Mekanisme reaksi dapat dipelajari melalui pengamatan terhadap proses kimia di laboratorium. Tetapi, teknik ini akan sulit dilakukan jika reaksi yang diamati berlangsung sangat cepat. Begitu juga jika reaksi berlangsung sangat lambat (butuh waktu beberapa hari bahkan bulan atau tahun), akan banyak waktu dihabiskan untuk pengamatan tersebut. Namun kini, pengamatan untuk reaksi tersebut dapat dilakukan dengan menggunakan model dan perhitungan komputasi.

Hingga saat ini proses elektrolisis NaCl menjadi  $\text{NaClO}_4$  tersebut belum ditemukan mekanisme reaksinya secara pasti. Peneliti mencoba untuk mempelajari mekanisme elektrolisis, dengan kajian teoritis dan teknik komputasi. Peneliti memperkirakan, proses oksidasi klorida menjadi perklorat terbagi menjadi 4 tahap oksidasi : (1) oksidasi klorida ( $\text{Cl}^-$ ) menjadi hipoklorit ( $\text{ClO}^-$ ), (2) oksidasi hipoklorit menjadi klorit ( $\text{ClO}_2^-$ ), (3) oksidasi klorit menjadi klorat ( $\text{ClO}_3^-$ ), (4) oksidasi klorat menjadi perklorat. Dengan

masing-masing tahap oksidasi tersebut, memiliki mekanisme reaksi yang serupa.

## 2 METODOLOGI PENELITIAN

### 2.1 Model Reaksi Elektrolisis NaCl

Tabel 2-1 menunjukkan model-model yang mungkin terjadi dalam proses elektrolisis NaCl. Model-model tersebut disusun berdasarkan teori-teori penyusunan mekanisme reaksi yang berlaku.

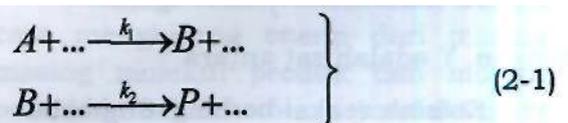
### 2.2 Dasar Teori

Mekanisme reaksi adalah rekonstruksi tentang tahap-tahap jalannya reaksi berdasarkan pengamatan laju reaksi.

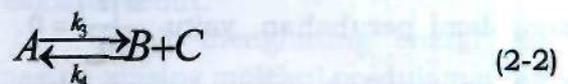
Reaksi sederhana adalah reaksi yang menggambarkan apa yang sebenarnya berlangsung dalam dunia atomik. Sedangkan reaksi rumit adalah reaksi yang hanya menggambarkan apa yang teramati dalam dunia makroskopik. Reaksi rumit tersusun dari sejumlah reaksi sederhana.

Pada dasarnya, suatu mekanisme reaksi disusun dengan menggabungkan 2 atau lebih reaksi-reaksi sederhana. Ada 2 cara untuk menggabungkan 2 reaksi, yaitu; susunan reaksi paralel dan susunan reaksi berurutan. Pada proses elektrolisis NaCl reaksinya berlangsung secara reaksi berurutan.

Dua reaksi disebut berurutan, bila sedikitnya satu hasil dari reaksi yang satu merupakan pereaksi bagi reaksi yang lain. Untuk lebih jelasnya dapat dilihat pada skema berikut ini:



atau dapat pula



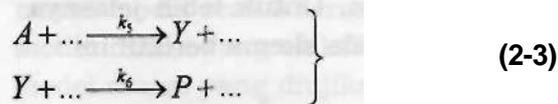
Tabel 2-1: TIGA MACAM MODEL PERSAMAAN REAKSI YANG DITELITI

Model	Persamaan Reaksi Model	Keterangan Model
1	$OH^- + Cl \longrightarrow HOCl + 2e^-$ $OH^- + ClO^- \longrightarrow HO_2Cl + 2e^-$ $OH^- + ClO_2^- \longrightarrow HO_3Cl + 2e^-$ $OH^- + ClO_3^- \longrightarrow HO_4Cl + 2e^-$	Reaksi keseluruhan murni terjadi pada permukaan elektroda
2	$Cl^- + H_2O \longrightarrow HOCl + H^+ + 2e^-$ $ClO^- + H_2O \longrightarrow HO_2Cl + H^+ + 2e^-$ $ClO_2^- + H_2O \longrightarrow HO_3Cl + H^+ + 2e^-$ $ClO_3^- + H_2O \longrightarrow HO_4Cl + H^+ + 2e^-$	Reaksi keseluruhan murni terjadi pada permukaan elektroda
3	$2Cl^- \longrightarrow Cl_2 + 2e^-$ $Cl^- + ClO^- \longrightarrow Cl_2O + 2e^-$ $Cl^- + ClO_2^- \longrightarrow Cl_2O_2 + 2e^-$ $Cl^- + ClO_3^- \longrightarrow Cl_2O_3 + 2e^-$	Reaksi yang terjadi pada permukaan elektroda
	$Cl_2 + OH^- \longrightarrow HOCl + Cl^-$ $Cl_2O + OH^- \longrightarrow HO_2Cl + Cl^-$ $Cl_2O_2 + OH^- \longrightarrow HO_3Cl + Cl^-$ $Cl_2O_3 + OH^- \longrightarrow HO_4Cl + Cl^-$	Reaksi yang terjadi dalam larutan elektrolisis
	$OH^- + Cl^- \longrightarrow HOCl + 2e^-$ $OH^- + ClO^- \longrightarrow HO_2Cl + 2e^-$ $OH^- + ClO_2^- \longrightarrow HO_3Cl + 2e^-$ $OH^- + ClO_3^- \longrightarrow HO_4Cl + 2e^-$	Reaksi empiris yang merupakan penggabungan dari reaksi yang terjadi pada permukaan elektroda dengan reaksi yang terjadi dalam larutan elektrolisis

2.2.1 Penyusunan mekanisme reaksi

Mekanisme reaksi adalah kumpulan dari reaksi-reaksi sederhana yang paralel maupun berurutan, dengan tiap pereaksi terkait satu sama lain melalui satu atau lebih zat antara.

Sebagai contoh :



Dengan, Y adalah zat antara

Setelah reaksi berlangsung beberapa saat, akan terjadi keadaan di mana konsentrasi dari zat antara tidak banyak mengalami perubahan, yaitu  $\frac{dY}{dt} = 0$ .

Keadaan tersebut dapat dimanfaatkan untuk memperoleh ungkapan bagi laju

secara keseluruhan. Pendekatan ini, yang disebut sebagai pendekatan "steady state".

Dalam suatu mekanisme reaksi, reaksi sederhana dengan laju paling lambat disebut sebagai tahap penentu laju. Laju keseluruhan hanya ditentukan oleh semua tahapan sampai dengan tahapan penentu laju, sedangkan tahapan berikutnya (karena semuanya lebih cepat) akan tak berpengaruh.

2.2.2 Katalis heterogen

Proses elektrolisis NaCl merupakan reaksi kimia yang berlangsung pada permukaan padatan, karena itu padatan tersebut berperan sebagai katalis. Dalam reaksi permukaan, proses utamanya adalah absorpsi.

Ada lima tahapan dalam reaksi heterogen:

- Difusi molekul-molekul pereaksi menuju permukaan.
- Adsorpsi molekul-molekul pereaksi pada permukaan.
- Reaksi berlangsung di permukaan.
- Desorpsi hasil reaksi dari permukaan.
- Difusi hasil-hasil reaksi meninggalkan permukaan menuju sistem keseluruhan.

Dalam reaksi heterogen padat-cair, proses difusi dapat merupakan tahap penentu laju, karena difusi dalam fasa cair berlangsung relatif lambat. Untuk mendapatkan persamaan laju reaksi yang berlangsung di permukaan berdasarkan konsentrasi pereaksi dalam sistem keseluruhan, perlu dilakukan hal-hal berikut

- Mendapatkan ungkapan bagi konsentrasi pereaksi di permukaan sebagai fungsi konsentrasi dari sistem keseluruhan,
- Mendapatkan ungkapan bagi persamaan laju pembentukan hasil berdasarkan konsentrasi pereaksi dipermukaan.
- Penggabungan hasil di (1) dan (2) untuk mendapatkan ungkapan laju reaksi terhadap konsentrasi pereaksi dalam sistem keseluruhan.

### 2.2.3 Absorpsi

Dalam suatu proses absorpsi, suatu molekul menempel pada permukaan, membentuk suatu ikatan lemah antara molekul tersebut dengan permukaan. Terdapat kesetimbangan antara molekul terabsorpsi dan molekul bebas di luar permukaan, yang dapat berupa fasa gas atau fasa cair.

Pada permukaan diandaikan adanya sejumlah tempat atau lokasi yang dapat ditempati molekul. Dengan demikian, bila absorpsi hanya terjadi dalam satu lapisan, akan terdapat jumlah tertinggi molekul yang dapat diabsorpsi, yaitu jumlah seluruh tempat tersebut.

Jika reaksi hanya melibatkan satu pereaksi, maka reaksi di permu-

kaan akan berlangsung secara unimolekul.

Bila dua pereaksi, A dan B, yang bereaksi dengan pertolongan suatu permukaan, maka reaksi digolongkan sebagai reaksi permukaan bimolekular. Ada dua cara mewujudkan reaksi ini :

- kedua pereaksi terabsorpsi di permukaan, membentuk AS dan BS, S adalah *Surface* (Permukaan). Keduanya kemudian bereaksi di permukaan membentuk produk P. Mekanisme ini disebut sebagai mekanisme *Langmuir-Hinshelwood*. Secara fisik, agar mekanisme ini dapat berlangsung dengan baik, kedua pereaksi harus terabsorpsi menyebar di permukaan agar ada kesempatan untuk ber-dampingan, yang merupakan syarat terjadinya reaksi,
- Salah satu pereaksi, andaikan A, terabsorpsi di permukaan membentuk AS. Pereaksi B dari fasa keseluruhan menumbuk AS dan bereaksi membentuk produk P. Mekanisme ini disebut sebagai mekanisme *Langmuir-Rideal*

### 2.3 Perhitungan Kimia Komputasi

Dari model-model mekanisme reaksi yang diuji, akan diperoleh satu model yang dapat menggambarkan sistem yang sebenarnya. Model tersebut ditentukan berdasarkan jumlah energi terkecil yang dibutuhkan untuk terjadinya reaksi, dan berdasarkan faktor-faktor penghambat reaksi yang paling minimum. Kimia komputasi dalam hal ini berperan dalam menghitung energi-energi reaksi dari setiap model yang diujikan.

Energi reaksi ditentukan dengan cara menghitung energi dari masing-masing molekul produk dan molekul pereaksi. Selisih antara jumlah energi molekul produk dengan jumlah energi molekul pereaksi merupakan energi dari reaksi tersebut.

Untuk menghitung energi dari masing-masing molekul produk maupun pereaksi, meliputi tahapan penghitungan komputasi sebagai berikut:

- Membuat Struktur Geometri Molekul,
- Optimasi Geometri Molekul,
- Struktur yang kita buat belum tentu merupakan struktur terstabil, oleh karena itu perlu dilakukan optimasi untuk mendapat struktur terstabil. Pada perhitungan optimasi geometri, kita mengubah-ubah berbagai parameter struktur hingga diperoleh energi terendah. Jadi, dilakukan pengulangan perhitungan energi selama proses pencarian geometri molekul yang paling stabil tersebut,
- Jika besaran  $q_i$  mewakili parameter struktur (seperti: panjang ikatan, sudut ikatan, sudut dihedral) atau transformasi koordinat dari parameter-parameter tersebut, maka syarat tercapainya struktur yang paling stabil adalah :

$$\frac{\partial E}{\partial q_i} = 0 \quad (2-4)$$

$$\frac{\partial^2 E}{\partial q_i^2} > 0 \quad (2-5)$$

- Dengan E adalah energi molekul,
- Perhitungan Frekuensi Vibrasi untuk Struktur Molekul Terstabil,
- Perhitungan frekuensi vibrasi ini menghasilkan nilai-nilai dari:

<sup>a</sup>  $E_o$ , adalah nilai energi elektronik. Energi elektronik adalah nilai energi molekul berdasarkan struktur elektronnya dan tidak terpengaruh oleh termal ataupun mekanik.

<sup>o</sup> E, adalah nilai energi yang telah dikoreksi dengan faktor energi termal molekul.

$$\left. \begin{aligned} E &= E_o + E_{\text{termal}} \\ E &= E_o + E_{\text{vib}} + E_{\text{rot}} + E_{\text{trans}} \end{aligned} \right\} \quad (2-6)$$

<sup>□</sup> H, adalah nilai entalpi. Entalpi merupakan nilai energi yang telah dikoreksi dengan faktor energi termal dan energi mekanik molekul,

$$H = E + RT \quad (2-7)$$

Keterangan:

R = Tetapan gas ideal = 8,314 J/°K.mol

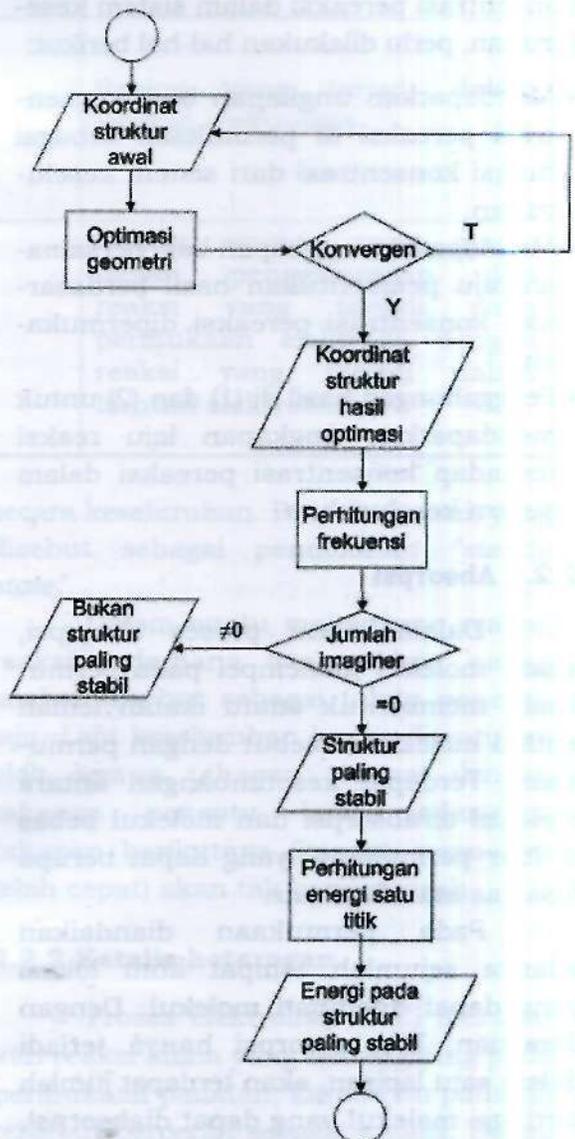
T = Temperatur (°K)

<sup>D</sup> S, adalah nilai entropi. Entropi menyatakan nilai derajat ketakteraturan dari molekul,

<sup>o</sup> G, adalah nilai energi bebas Gibbs. Energi bebas Gibbs ini merupakan nilai energi molekul yang telah dikoreksi dengan energi termal dan energi mekanik molekul, dan juga telah dikoreksi dengan energi yang diperlukan untuk mencapai keteraturan molekul.

$$G = H - TS \quad (2-8)$$

Pada Gambar 2-1 ditunjukkan diagram alir proses perhitungan kimia komputasi, hingga diperoleh hasil nilai energi dari masing-masing molekul pereaksi dan produk.



Gambar 2-1: Diagram alir penentuan energi molekul terstabil.

### 3 HASIL PENELITIAN

Reaksi elektrolisis pada uraumnya merupakan jenis reaksi yang terkatalisis oleh katalis heterogen yang memiliki fasa berbeda dengan fasa senyawa yang bereaksi. Dalam sistem ini, yang berperan sebagai katalis adalah elektroda (fasa padat). Pada penelitian ini model mekanisme reaksi yang dikaji ada 3 macam model berdasarkan pada proses oksidasi yang bertahap (oksidasi dari klorida ke perklorat harus melalui pembentukan senyawa hipoklorit, klorit dan klorat terlebih dahulu). Ketiga model tersebut dikaji secara teoritis dan dengan menggunakan teknik komputasi. Hasil perhitungan energi reaksi untuk masing-masing model ditampilkan pada Tabel 3-1.

Nilai energi bebas Gibbs (AG) ini memiliki 2 makna:

- Sebagai simbol kespontanan dari reaksi
  - <sup>a</sup> AG bernilai positif berarti reaksi berlangsung secara tidak spontan, dibutuhkan energi untuk terjadinya reaksi,
  - <sup>D</sup> AG bernilai nol (0) berarti reaksi berlangsung secara *reversible*, reaksi mengalami kesetimbangan,
  - <sup>D</sup> AG bernilai negatif berarti reaksi berlangsung secara spontan, dihasilkan energi dari reaksi tersebut.
- Sebagai nilai energi sistem reaksi yang telah dikoreksi termal, mekanik dan derajat ketakteraturan reaksi.

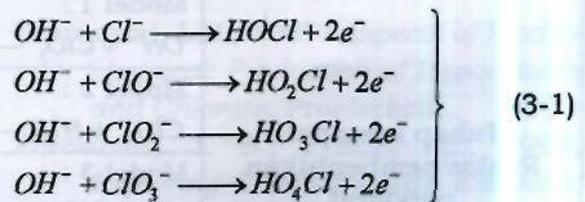
Pada model 1 dan model 2, semua tahapan reaksi elektrolisis (pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat) reaksinya berlangsung pada permukaan elektroda, dan tidak ada reaksi yang berlangsung dalam larutan elektrolit. Sedangkan pada model 3, reaksinya dibagi menjadi 2 bagian. Yaitu reaksi pada permukaan elektroda dan reaksi dalam larutan elektrolit. Namun, untuk model 3 tersebut, reaksi empirisnya (gabungan reaksi pada permukaan elektroda dan reaksi dalam larutan elektrolit) adalah sama dengan reaksi pada model 1. Bahkan, nilai energi

bebas Gibbs (AG) untuk masing-masing tahapan elektrolisis dari model 3 adalah sama dengan model 1.

Model reaksi yang mungkin terjadi dalam sistem sebenarnya dapat ditentukan dari nilai energi bebas Gibbs-nya. Semakin kecil nilai AG dari model reaksi yang diajukan, maka semakin besar kemungkinannya untuk terjadi dalam sistem yang sebenarnya. Pada Tabel 3-1 terlihat bahwa nilai AG untuk model 1 dan model 3 lebih kecil dari nilai AG untuk model 2. Model 1 dan model 3 memiliki nilai AG yang sama, yang berarti bahwa model 1 dan model 3 sama-sama lebih disukai karena reaksinya lebih mudah terjadi dibandingkan dengan model 2. Akan tetapi, antara model 1 dan model 3 ini memiliki sistem proses yang berbeda satu sama lain. Untuk lebih jelasnya mengenai perbedaan model 1 dan model 3, dapat dilihat penjelasan masing-masing model berikut:

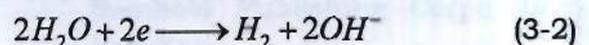
#### 3.1 Deskripsi Model 1

Pada model 1 reaksi pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat, berlangsung pada permukaan elektroda, tanpa ada yang bereaksi dalam larutan elektrolit. Dan reaksinya berlangsung dalam suasana yang sangat basa. Pada permukaan anoda merupakan reaksi oksidasi (pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat).



Reaksi pada permukaan anoda tersebut dapat terjadi, hanya jika pada awal proses elektrolisis jumlah mol dari OH<sup>-</sup> sebanding dengan jumlah mol dari Cl<sup>-</sup>. Hal ini berarti bahwa bahan baku yang diperlukan dari proses ini adalah NaCl dan NaOH, dengan perbandingan stokiometris.

Reaksi pada permukaan katoda :



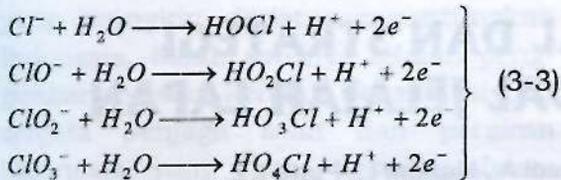
Tabel3-1: TABEL NILAI ENERGI BEBAS GIBBS HASIL PERHITUNGAN KIMA KOMPUTASI UNTUK MASING-MASING MODEL REAKSI

Tahapan Reaksi Elektrolisis	Reaksi Kimia	Energi Bebas Gibbs Reaksi, $\Delta G$ ( $\frac{kcal}{mol \cdot K}$ )
Tahap pertama Reaksi pembentukan hipoklorit	Model 1 : $OH^- + Cl^- \longrightarrow HOCl + 2e^-$	256,085
	Model 2 : $Cl^- + H_2O \longrightarrow HOCl + H^+ + 2e^-$	278,345
	Model 3 : $2Cl^- \longrightarrow Cl_2 + 2e^-$ $Cl_2 + OH^- \longrightarrow HOCl + Cl^-$	271,196 $\frac{-15,111}{256,085} +$
	$OH^- + Cl^- \longrightarrow HOCl + 2e^-$	
Tahap kedua Reaksi pembentukan klorit	Model 1 : $OH^- + ClO^- \longrightarrow HO_2Cl + 2e^-$	248,122
	Model 2 : $ClO^- + H_2O \longrightarrow HO_2Cl + H^+ + 2e^-$	270,381
	Model 3 : $Cl^- + ClO^- \longrightarrow Cl_2O + 2e^-$ $Cl_2O + OH^- \longrightarrow HO_2Cl + Cl^-$	271,446 $\frac{-23,324}{248,122} +$
	$OH^- + ClO^- \longrightarrow HO_2Cl + 2e^-$	
Tahap ketiga Reaksi pembentukan klorat	Model 1 : $OH^- + ClO_2^- \longrightarrow HO_3Cl + 2e^-$	240,190
	Model 2 : $ClO_2^- + H_2O \longrightarrow HO_3Cl + H^+ + 2e^-$	262,449
	Model 3 : $Cl^- + ClO_2^- \longrightarrow Cl_2O_2 + 2e^-$ $Cl_2O_2 + OH^- \longrightarrow HO_3Cl + Cl^-$	263,889 $\frac{-23,669}{240,190} +$
	$OH^- + ClO_2^- \longrightarrow HO_3Cl + 2e^-$	
Tahap keempat Reaksi pembentukan perklorat	Model 1 : $OH^- + ClO_3^- \longrightarrow HO_4Cl + 2e^-$	263,974
	Model 2 : $ClO_3^- + H_2O \longrightarrow HO_4Cl + H^+ + 2e^-$	286,223
	Model 3 : $Cl^- + ClO_3^- \longrightarrow Cl_2O_3 + 2e^-$ $Cl_2O_3 + OH^- \longrightarrow HO_4Cl + Cl^-$	296,841 $\frac{-23,868}{263,974} +$
	$OH^- + ClO_3^- \longrightarrow HO_4Cl + 2e^-$	

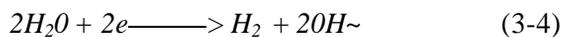
### 3.2 Deskripsi Model 2

Pada model 2 reaksi pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat, berlangsung pada permukaan elektroda, tanpa ada yang bereaksi dalam larutan

elektrolit, sama seperti model 1. Tetapi reaksinya berlangsung dalam suasana netral. Pada permukaan anoda merupakan reaksi oksidasi (pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat).



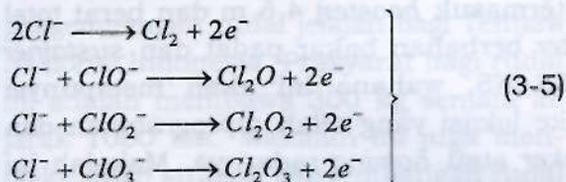
Reaksi pada permukaan anoda tersebut dapat terjadi, tanpa diperlukan penambahan NaOH, dengan perbandingan stokiometris pada awal proses. Tetapi model 2 ini, masih dianggap tidak efektif dari model 3 dan model 1, karena nilai energi bebas Gibbs dari model 2 lebih tinggi dari model 3 dan model 1. Reaksi pada permukaan katoda :



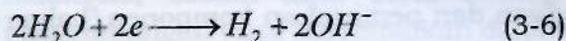
### 3.3 Deskripsi Model 3

Pada model 3, reaksi pembentukan gas  $Cl_2$ ,  $ClO$ ,  $ClO_2$ , dan  $ClO_3$  terjadi pada permukaan elektroda, diikuti dengan reaksi pembentukan hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat dalam larutan elektrolit. Reaksi pada permukaan elektroda berlangsung dalam suasana netral. Sedangkan reaksi dalam larutan elektrolit berlangsung dalam suasana basa. Suasana basa dalam larutan elektrolit diperoleh dari reduksi air pada permukaan katoda.

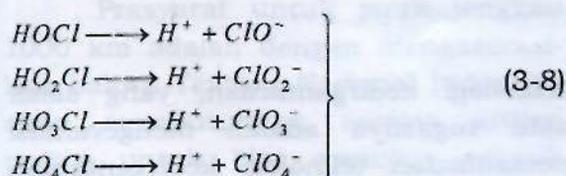
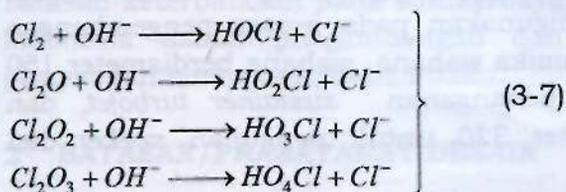
Reaksi pada permukaan anoda :



Reaksi pada permukaan katoda :



Reaksi dalam larutan elektrolit :



Jadi, untuk model 3 bahan baku yang diperlukan hanyalah NaCl, tanpa perlu NaOH sebagai bahan baku. Walaupun demikian, energi yang diperlukan untuk terjadinya reaksi tetap sama seperti pada model 1. Sehingga, dapat dikatakan bahwa model 3 lebih efektif daripada model 1. Karena, pada model 3 hanya dengan satu macam bahan baku (NaCl) dan kondisi reaksi yang netral sudah dapat menghasilkan senyawa hipoklorit, klorit, klorat, dan perklorat yang diharapkan.

## 4 KESIMPULAN

Hasil perhitungan kimia komputasi untuk model-model reaksi elektrolisis yang diujikan, disimpulkan bahwa:

- Secara termodinamika (nilai energi bebas Gibbs) model 1 dan model 3 memiliki kemungkinan lebih besar untuk terjadi reaksi dibandingkan dengan model 2,
- Perasamaan reaksi empiris model 1 = Persamaan reaksi empiris model 3,
- AG reaksi model 1 = AG reaksi model 3,
- Reaksi model 3 lebih efektif, karena hanya memerlukan bahan baku NaCl saja tanpa NaOH dan kondisi reaksi adalah netral.

## DAFTAR RUJUKAN

- C2«arnetzki, L.R., 1989. *Aspects of Electrochemical: Production of Hypochlorite and Chlorate*, Proefschrift.
- Foresman, J. B.; Frisch, J.E., 1993. *Exploring Chemistry with Electronic Structure Method*, 2<sup>nd</sup> edition, Gaussian Inc., Pittsburg, PA.
- Leach, Andrew R., 2001. *Molecular Modelling: Principles and Applications*, 2<sup>nd</sup> edition, Pearson Education Limited.
- Rahayu, Susanto Imam, 1995. *Kinetika Kimia*, Penerbit FTB, Bandung.
- Schumacher, J.C., 1960. *Perchlorate: Their Properties, Manufacture and Uses*, Reinhold Publishing Corporation, New York.