

**STUDI ENERGI PENGHALANG (*BARRIER ENERGY*) TRANSFER
PROTON MOLEKUL TETRAZOLE PADA BEBERAPA MEDIUM**

SKRIPSI

Oleh:
ALIVIA AZ ZAHRA
NIM. 220604110028



**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MAULANA MALIK IBRAHIM
MALANG
2026**

HALAMAN PENGANTAR

**STUDI ENERGI PENGHALANG (*BARRIER ENERGY*) TRANSFER
PROTON MOLEKUL TETRAZOLE PADA BEBERAPA MEDIUM**

SKRIPSI

**Diajukan Kepada:
Fakultas Sains dan Teknologi
Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang
Untuk Memenuhi Salah Satu Persyaratan Dalam
Memperoleh Gelar Sarjana Sains (S.Si)**

**Oleh:
ALIVIA AZ ZAHRA
NIM. 220604110028**

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI MAULANA MALIK IBRAHIM
MALANG
2026**

HALAMAN PERSETUJUAN

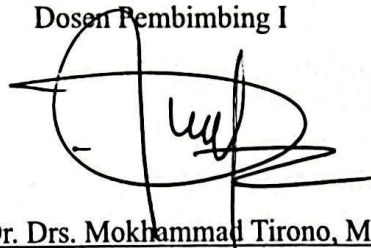
STUDI ENERGI PENGHALANG (*BARRIER ENERGY*) TRANSFER PROTON MOLEKUL TETRAZOLE PADA BEBERAPA MEDIUM

SKRIPSI

Oleh:
ALIVIA AZ ZAHRA
NIM. 220604110028

Telah Diperiksa dan Disetujui untuk Diuji
Pada Tanggal, 03 Juni 2026

Dosen Pembimbing I



Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si.
NIP. 19641211 199111 1 001

Dosen Pembimbing II



Mubasyiroh, S.S., M.Pd.I.
NIP. 19790502 202321 2 024

Mengetahui,
Ketua Program Studi



Farid Samsu Hananto, M.T.
NIP. 19740513 200312 1 001

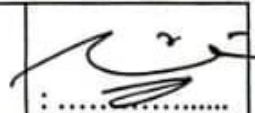
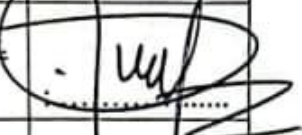
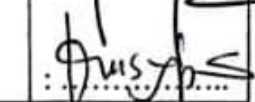
HALAMAN PENGESAHAN

STUDI ENERGI PENGHALANG (*BARRIER ENERGY*) TRANSFER PROTON MOLEKUL TETRAZOLE PADA BEBERAPA MEDIUM

SKRIPSI

Oleh:
ALIVIA AZ ZAHRA
NIM. 220604110028

Telah Dipertahankan di Depan Dewan Penguji Skripsi
dan Dinyatakan Diterima Sebagai Salah Satu Persyaratan
Untuk Memperoleh Gelar Sarjana Sains (S.Si)
Pada Tanggal, 24 Juni 2026

Penguji Utama	<u>Dr. H. Agus Mulyono, S.Pd., M.Kes.</u> NIP. 19750808 199903 1 003	
Ketua Penguji	<u>Arista Romadani, M.Sc.</u> NIP. 19900905 201903 1 018	
Sekretaris Penguji	<u>Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Sc.</u> NIP. 19641211 199111 1 001	
Anggota Penguji	<u>Mubasyiroh, S.S., M.Pd.I.</u> NIP. 19790502 202321 2 024	

Mengesahkan,
Ketua Program Studi



Farid Samsu Hananto, M.T.
NIP. 19740513 200312 1 001

PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : ALIVIA AZ ZAHRA

NIM : 220604110028

Program Studi : FISIKA

Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI

Judul Penelitian : Studi Energi Penghalang (*Barrier Energy*) Transfer Proton
Molekul Tetrazole Pada Beberapa Medium

Menyatakan dengan sebenar-benarnya bahwa hasil penelitian saya ini tidak terdapat unsur-unsur penjiplakan karya penelitian atau karya ilmiah yang pernah dilakukan atau dibuat oleh orang lain, kecuali yang tertulis dikutip dalam naskah ini dan disebutkan dalam sumber kutipan dan daftar pustaka. Apabila ternyata hasil penelitian ini terbukti terdapat unsur-unsur jiplakan maka saya bersedia untuk menerima sanksi atas perbuatan tersebut.

Malang, 24 Juni 2026
Yang Membuat Pernyataan




Alivia Az Zahra
NIM. 220604110028

MOTTO

“Bahwa manusia akan memperoleh apa yang telah diusahakannya, dan sesungguhnya usahanya itu akan diperlihatkan (kepadanya), kemudian akan di beri balasan kepadanya dengan balasan yang paling sempurna”

(Q.S. An-Najm [53]: 39-41)

“Jangan takut jatuh, sebab yang tak pernah memanjatlah yang tak pernah atuh. Jangan takut gagal, karena yang tak pernah gagal hanyalah mereka yang tak pernah melangkah. Dan jangan takut salah, sebab dari kesalahan pertama, kita bisa belajar menemukan jalan yang benar di langkah selanjutnya”

(Buya Hamka)

“Pada akhirnya ini semua hanyalah permulaan”

(Nadin Amizah)

“Jika bukan karena Allah yang memampukan, aku mungkin sudah lama menyerah”

HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan segala puji syukur kepada Allah SWT, akhirnya skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada pihak-pihak yang telah membantu penyelesaian skripsi ini. Karya ini penulis persembahkan kepada:

1. Abi dan Umi, Bapak Muhammad Kholid dan Ibu Rifa Hariyati, yang dengan ketulusan, kesabaran, dukungan dan kasih sayang tak terhitung telah membimbing penulis sejak masa kecil hingga sampai di titik ini. Terima kasih atas setiap doa yang dipanjatkan, nasihat yang diberikan dan pengorbanan yang mengiringi langkah penulis hingga mampu menyelesaikan skripsi ini dan meraih gelar sarjana. Terima kasih pula atas kasih sayang yang tidak pernah berkurang dan dukungan yang tidak pernah berhenti menguatkan penulis sepanjang perjalanan hidup ini.
2. Kakak penulis, Muhammad Alfin Nur Ramadhani, yang selalu memberikan dukungan, bantuan dan semangat selama proses penyusunan skripsi ini. Tak lupa kepada adik penulis, Muhammad Sholahuddin Al-Fakhri. Terima kasih atas semangat dan kebersamaan yang selalu menguatkan. Dukungan kalian menjadi bagian penting dari terselesainya studi ini.
3. Sahabat penulis sejak di PPTQ hingga saat ini, Ais dan Epha, yang telah bersedia menjadi tempat keluh kesah, memberikan semangat dan dukungan kepada penulis hingga skripsi ini dapat selesai dengan baik.
4. Teman-teman penulis sejak di PP Al-Azkiya' hingga saat ini, Fatul, Nabila dan Fathia, yang senantiasa memberikan motivasi, serta tidak pernah berhenti

memberikan semangat kepada penulis untuk tetap bertahan dan berjuang hingga segala proses skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.

5. Sahabat penulis sejak semester satu hingga saat ini, Nisa, Icha, Junda, Natasya, dan Nada, yang senantiasa mendampingi dan memberikan dukungan kepada menulis hingga penyusunan skripsi ini dapat terselesaikan dengan baik.
6. Sahabat penulis satu penelitian, Fafa, Nia dan Anisa, yang selalu membantu dan menemani penulis selama proses pengambilan penelitian hingga skripsi ini telah selesai.
7. Terakhir, penulis ingin menyampaikan rasa terima kasih kepada diri sendiri, Alivia Az Zahra. Terima kasih telah bertahan sejauh ini. Untuk setiap malam yang dihabiskan dalam kelelahan, setiap pagi yang disambut dengan keraguan namun tetap dijalani, serta setiap ketakutan yang berhasil dilawan dengan keberanian. Terima kasih kepada hati yang tetap ikhlas, meski tidak semua hal berjalan sesuai harapan. Terima kasih kepada jiwa yang tetap kuat, meski berkali-kali hampir menyerah. Penulis bangga kepada diri sendiri yang telah mampu melewati berbagai fase sulit dalam kehidupan ini. Semoga ke depannya, raga ini tetap kuat, hati tetap tegar, dan jiwa tetap lapang dalam menghadapi setiap proses kehidupan. Mari terus bekerja sama untuk tumbuh dan berkembang menjadi pribadi yang lebih baik dari hari ke hari.

Karya ini juga penulis persembahkan kepada semua orang yang hadir dalam perjalanan hidup penulis yang tidak bisa disebutkan satu persatu, yang selalu memberikan doa, dukungan, perhatian dan bantuan hingga penulis dapat sampai hingga titik ini.

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis haturkan kepada Allah SWT atas segala rahmat dan karunia-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi yang berjudul “Studi Energi Penghalang (*Barrier Energy*) Transfer Proton Molekul Tetrazole Pada Beberapa Medium”. Shalawat serta salam semoga senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad SAW, beserta keluarga, sahabat, dan para pengikutnya hingga akhir zaman. Skripsi ini disusun sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

Penulis menyadari bahwa penyusunan skripsi ini tidak terlepas dari bantuan, bimbingan, dan dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, pada kesempatan ini penulis ingin menyampaikan ucapan terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Hj. Ilfi Nur Diana, M.Si., selaku Rektor Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
2. Dr. Agus Mulyono, S.Pd., M.Kes., selaku Dekan Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
3. Farid Samsu Hananto, M.T., selaku Ketua Program Studi Fisika Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.
4. Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si., Khusnul Yakin, M.Si. Ph.D. dan Mubasyiroh, S.S., M.Pd.I, selaku dosen pembimbing yang telah memberikan arahan, koreksi, ilmu, serta motivasi selama proses bimbingan hingga terselesaikannya skripsi ini.

5. Seluruh Dosen, Staff Akademik, dan Staff Laboratorium Progran Studi Fisika UIN Maulana Malik Ibrahim Malang yang telah memberikan bantuan, akses fasilitas laboratorium, serta mendukung kelancaran administrasi penelitian.
6. Teman-teman satu bimbingan dan penelitian yang telah menemani penulis selama proses pengambilan penelitian hingga skripsi ini telah selesai. Terima kasih atas bantuan, dukungan, semangat dan kebersamaan yang telah diberikan selama ini.
7. Teman-teman mahasiswa Program Studi Fisika angkatan 2022 khususnya teman-teman biofisika, yang telah membantu, memberikan semangat, dukungan moral, dan motivasi sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.
8. Serta penulis mengucapkan terima kasih yang tulus kepada semua pihak yang telah membantu baik secara langsung maupun tidak langsung dalam penyusunan dan penyelesaian skripsi ini.

Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih jauh dari sempurna. Oleh karena itu, kritik, saran, dan masukan yang bersifat membangun sangat penulis harapkan demi penyempurnaan penelitian ini di masa mendatang. Semoga karya ini dapat memberikan kontribusi ilmu pengetahuan, serta bermanfaat bagi pembaca dan pihak-pihak yang berkepentingan.

Malang, 24 Juni 2026

Penulis

DAFTAR ISI

HALAMAN PERSETUJUAN.....	iii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
PERNYATAAN KEASLIAN TULISAN	v
MOTTO	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	vii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL	xiv
ABSTRAK	xvi
ABSTRACT	xvii
مستخلص البحث.....	xviii
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	5
1.3 Tujuan Penelitian	5
1.4 Manfaat Penelitian.....	5
1.5 Batasan Masalah	6
BAB II TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 <i>Fuel Cell</i>	7
2.2 Mekanisme Transfer Proton.....	10
2.3 Tetrazole	12
2.4 Energi Penghalang (<i>Barrier Energy</i>).....	14
2.5 <i>Density Functional Theory</i> (DFT).....	16
2.5.1 Mekanika Kuantum Banyak Partikel	17
2.5.2 Pendekatan Born-Oppenheimer	19
2.5.3 Aproksimasi Hartree-Fock.....	20
2.5.4 Teorema Hohenberg-Kohn.....	21
2.5.5 Pendekatan Kohn-Sham.....	22
2.6 <i>Nudged Elastic Band</i> (NEB).....	24
2.7 Selisih Energi HOMO-LUMO	27
2.8 Muatan Atom Mulliken	27
2.9 Rasio Populasi Boltzmann.....	28
2.10 Energi Ikatan Hidrogen.....	29
2.11 Kajian Terkait Penelitian dalam Perspektif Islam.....	30
BAB III METODE PENELITIAN	33
3.1 Jenis Penelitian	33
3.2 Waktu dan Tempat Penelitian	33
3.3 Alat dan Bahan Penelitian	33
3.3.1 Perangkat Keras	33
3.3.2 Perangkat Lunak	34

3.4 Variabel Penelitian	34
3.5 Diagram Alir Penelitian	35
3.6 Prosedur Penelitian	36
3.6.1 Pemodelan Struktur Molekul Tetrazole	36
3.6.2 Optimasi Geometri.....	36
3.6.3 Perhitungan Selisih Energi HOMO-LUMO	38
3.6.4 Perhitungan Muatan Atom Mulliken	38
3.6.5 Perhitungan Rasio Populasi Boltzmann.....	38
3.6.6 Optimasi Geometri Pasangan.....	39
3.6.7 Perhitungan Energi Ikatan Hidrogen.....	39
3.6.8 Perhitungan Energi Penghalang Transfer Proton	40
3.7 Pengambilan Data.....	41
3.7.1 Energi Relatif.....	41
3.7.2 Selisih Energi HOMO-LUMO.....	42
3.7.3 Muatan Atom Mulliken.....	43
3.7.4 Rasio Populasi Boltzmann	43
3.7.5 Pemodelan Pasangan Molekul Tetrazole	44
3.7.6 Energi Penghalang (<i>Barrier Energy</i>) Transfer Proton	44
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	45
4.1. Hasil Penelitian.....	45
4.1.1 Konfigurasi Molekul Tetrazole dengan Energi Terendah	45
4.1.2 Konfigurasi Molekul Tetrazole Terprotonasi dengan Energi Terendah.....	49
4.1.3 Energi Penghalang Transfer Proton pada Pasangan Molekul Tetrazole	53
4.2. Pembahasan	59
4.2.1 Konfigurasi Molekul Tetrazole dengan Energi Terendah	59
4.2.2 Konfigurasi Molekul Tetrazole Terprotonasi dengan Energi Terendah.....	63
4.2.3 Energi Penghalang Transfer Proton pada Pasangan Molekul Tetrazole.....	66
4.2.4 Keterkaitan Hasil Penelitian dalam Perspektif Islam.....	70
BAB V PENUTUP	75
5.1 Kesimpulan.....	75
5.2 Saran	76
DAFTAR PUSTAKA.....	77
LAMPIRAN.....	85

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Proses terjadinya fuel cell (Ma'aruf & Widiharsa, 2016)	8
Gambar 2.2	Model konduksi proton. Mekanisme Grotthuss, (atas) dan mekanisme vehicle, (bawah) (W. Li et al., 2020).	11
Gambar 2.3	Bentuk tautomerik tetrazole, yaitu (a) Te1, (b) Te2, (c) Te3.....	13
Gambar 2.4	Skema perhitungan SCF persamaan Kohn-Sham (Yakin, 2024)	24
Gambar 3.1	Diagram alir penelitian	35
Gambar 3.2	Tautomer tetrazole dan tetrazole terprotonasi, yaitu: (a) Te1, (b) Te2, (c) Te3, (d) TeH^+1 , (e) TeH^+2 , (f) TeH^+3 , (g) TeH^+4 , (h) TeH^+5 , (i) TeH^+6	41
Gambar 4.1	Energi relatif dari (a) tautomer tetrazole dalam medium air dan (b) tautomer tetrazole dalam medium DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**	46
Gambar 4.2	Jalur reaksi transfer proton pada struktur asimetris pasangan molekul 2 (kurva biru) dan 6 (kurva merah) pada (a) medium air ($\epsilon = 80,1$) dan (b) medium DMSO ($\epsilon = 47,2$)	57
Gambar 4.3	Jalur reaksi transfer proton pada struktur simetris pasangan molekul 3 pada (a) medium air ($\epsilon = 80,1$) dan (b) medium DMSO ($\epsilon = 47,2$)	57
Gambar 4.4	Mekanisme transfer proton pada (a) pasangan molekul asimetris 2, (b) pasangan asimetris molekul 6, dan (c) pasangan simetris molekul 3. Keadaan awal merupakan kondisi sebelum transfer proton, keadaan dengan energi tertinggi dalam jalur reaksi merupakan keadaan transisi dan keadaan akhir disebut produk.	58

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1	Spesifikasi perangkat keras	33
Tabel 3.2	Perangkat lunak yang digunakan.....	34
Tabel 3.3	Energi relatif tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	42
Tabel 3.4	Energi relatif tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**	42
Tabel 3.5	Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**	42
Tabel 3.6	Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	42
Tabel 3.7	Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	43
Tabel 3.8	Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	43
Tabel 3.9	Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K.....	43
Tabel 3.10	Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K	44
Tabel 3.11	Struktur pasangan molekul tetrazole, energi relatif, energi ikatan hidrogen (hydrogen bond energy/HBE) dan jarak donor-akseptor proton (proton donor-acceptor distance/PDAD) pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**	44
Tabel 3.12	Energi penghalang pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO.....	44
Tabel 4.1	Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	47
Tabel 4.2	Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	47
Tabel 4.3	Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K.....	48
Tabel 4.4	Energi relatif tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**	49
Tabel 4.5	Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.....	51

Tabel 4.6	Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.	52
Tabel 4.7	Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K	53
Tabel 4.8	Struktur pasangan molekul tetrazole, energi relatif, energi ikatan hidrogen (<i>hydrogen bond energy</i> /HBE) dan jarak donor-akseptor proton (<i>proton donor-acceptor distance</i> /PDAD) pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.	54
Tabel 4.9	Energi penghalang pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO.	59
Tabel 4.10	Keterkaitan hasil penelitian dengan maqashid syariah.	74

ABSTRAK

Zahra, Alivia Az, 2026. **Studi Energi Penghalang (*Barrier Energy*) Transfer Proton Molekul Tetrazole Pada Beberapa Medium**. Skripsi. Prodi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang. Pembimbing: (I) Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si (II) Mubasyiroh, S.S., M.Pd.I.

Kata Kunci: transfer proton, tetrazole, *fuel cell*, DFT, energi penghalang.

Kebutuhan energi yang terus meningkat mendorong pengembangan teknologi energi yang lebih ramah lingkungan, salah satunya *fuel cell*. Kinerja *fuel cell* sangat dipengaruhi oleh material elektrolit dalam transfer proton. Tetrazole merupakan salah satu senyawa heterosiklik yang berpotensi sebagai material transfer proton karena memiliki jalur transfer proton yang fleksibel dan memungkinkan terjadinya perpindahan proton tanpa perlu membalik orientasi cincin. Namun, penelitian tentang energi penghalang transfer proton molekul tetrazole khususnya pada medium masih terbatas. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui konfigurasi molekul tetrazole dan tetrazole terprotonasi dengan energi terendah pada medium air dan DMSO, serta menentukan besar energi penghalang yang terjadi selama proses transfer proton pasangan molekul tetrazole. Perhitungan dilakukan secara komputasi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada level teori B3LYP/6-311++G** dengan basis set DFT-D4, sedangkan energi penghalang transfer proton dihitung menggunakan metode *Nudged Elastic Band* (NEB). Hasil penelitian menunjukkan bahwa tautomer Te1 merupakan konfigurasi molekul tetrazole paling stabil pada medium air maupun DMSO, sedangkan tautomer TeH⁺2 merupakan konfigurasi tetrazole terprotonasi paling stabil pada kedua medium. Stabilitas energi ini dijelaskan menggunakan energi relatif terendah, selisih energi HOMO-LUMO yang tinggi, dan stabilitas muatan atom Mulliken. Dari enam pasangan molekul yang dianalisis, hanya 3 pasangan molekul yang dapat melakukan proses transfer proton. Pasangan molekul simetris memiliki energi penghalang paling rendah, yaitu 0,067 eV pada medium air dan 0,074 eV pada medium DMSO, sehingga transfer proton paling mudah terjadi pada pasangan tersebut. Perbedaan konstanta dielektrik antara medium air dan DMSO tidak menunjukkan perbedaan terhadap konfigurasi molekul tetrazole dan tetrazole terprotonasi yang paling stabil maupun pasangan yang paling mudah melakukan transfer proton.

ABSTRACT

Zahra, Alivia Az, 2026. **A Study of the Barrier Energy of Proton Transfer in Tetrazole Molecules in Solvents.** Thesis. Department of Physics, Faculty of Science and Technology, Maulana Malik Ibrahim State Islamic University, Malang.
Advisors: (I) Prof. Dr. Drs. Mokhammad Tirono, M.Si (II) Mubasyiroh, S.S., M.Pd.I.

Keywords: proton transfer, tetrazole, fuel cell, DFT, barrier energy.

The ever-increasing demand for energy is driving the development of more environmentally friendly energy technologies, one of which is the fuel cell. Fuel cell performance is greatly influenced by the electrolyte material in proton transfer. Tetrazole is a heterocyclic compound with potential as a proton transfer material because it has a flexible proton transfer pathway that allows proton transfer without the need to flip the ring orientation. However, research on the energy barriers for proton transfer in tetrazole molecules, particularly in solvents, remains limited. This study aims to identify the lowest-energy configurations of tetrazole and protonated tetrazole molecules in water and DMSO solvent, as well as to determine the magnitude of the energy barriers encountered during the proton transfer process between tetrazole molecules. Calculations were performed computationally using the Density Functional Theory (DFT) method at the B3LYP/6-311++G** theory level with the DFT-D4 basis set, while the proton transfer barrier energy was calculated using the Nudged Elastic Band (NEB) method. The results of the study show that the Te1 tautomer is the most stable tetrazole molecular configuration in both water and DMSO, while the TeH⁺2 tautomer is the most stable protonated tetrazole configuration in both solvent. This energy stability is explained by the lowest relative energy, a high HOMO-LUMO energy difference, and Mulliken atomic charge stability. Of the six molecular pairs analyzed, only three were capable of undergoing proton transfer. The symmetric molecular pair had the lowest energy barrier, namely 0.067 eV in water and 0.074 eV in DMSO, making proton transfer most likely to occur in that pair. The difference in dielectric constant between water and DMSO did not affect the most stable configurations of the tetrazole and protonated tetrazole molecules, nor did it affect which pairs were most capable of proton transfer.

مستخلص البحث

زهرة، أليفيا آز، ٢٠٢٦. دراسة طاقة الحاجز (Barrier Energy) لنقل البروتون في جزيء التترازول في عدة وسائط. بحث جامعي. قسم الفيزياء، كلية العلوم والتكنولوجيا، جامعة مولانا مالك إبراهيم الإسلامية الحكومية مالانج.
المشرف الأول: الأستاذ الدكتور. محمد تيرونو، الماجستير، المشرفة الثانية: مبشرة، الماجستير.

الكلمة المفتاحية: نقل البروتون، تترازول، خلية وقود، نظرية الدالة الكثافة، طاقة الحاجز.

الاحتياجات المتزايدة للطاقة تدفع إلى تطوير تكنولوجيا طاقة أكثر صداقة للبيئة، واحدة منها هي خلايا الوقود. أداء خلية الوقود يتأثر بشكل كبير بمواد الإلكتروليت في نقل البروتون. التترازول هو أحد المركبات الحلقية غير المتجانسة التي تمتلك إمكانية كمادة لنقل البروتون لأنه يمتلك مسار نقل بروتون مرّن ويسمح بانتقال البروتون دون الحاجة لتغيير اتجاه الحلقة. ومع ذلك، الدراسات حول طاقة حاجز نقل البروتون للجزيء التترازول خاصة في الوسط ما زالت محدودة. يهدف هذا البحث إلى معرفة تكوين جزيء التترازول والتترازول المؤين بأقل طاقة في وسط ماء وDMSO، وكذلك تحديد مقدار طاقة الحاجز الذي يحدث خلال عملية نقل البروتون بين أزواج جزيئات التترازول. تم إجراء الحسابات بطريقة الحوسبة باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) على مستوى نظرية B3LYP/6-311++G** مع مجموعة الأساس DFT-D4، بينما تم حساب طاقة حاجز نقل البروتون باستخدام طريقة Nudged Elastic Band (NEB) أظهرت نتائج البحث أن التناوب Te1 هو أكثر تكوين جزيئي للتترازول استقرارًا في كل من الوسط المائي وDMSO، بينما التناوب TeH²⁺ هو أكثر تكوين تترازول متأين استقرارًا في كلا الوسطين. يتم تفسير استقرار الطاقة هذا باستخدام أدنى طاقة نسبية، وفارق طاقة HOMO-LUMO العالي، واستقرار شحنة ذرة موككن. من بين ستة أزواج من الجزيئات التي تم تحليلها، فقط ٣ أزواج من الجزيئات يمكنها القيام بعملية نقل البروتون. الأزواج الجزيئية المتماثلة لها أدنى طاقة حاجز، وهي ٠,٠٦٧ إلكترون فولت في الوسط المائي و٠,٠٧٤ إلكترون فولت في وسط DMSO، لذلك نقل البروتون يحدث بسهولة أكبر في هذه الأزواج. اختلاف ثابت العزل بين الوسط المائي و DMSO لا يظهر فرقًا على تكوين جزيء التترازول والتترازول البروتوني الأكثر ثباتًا ولا على الزوج الذي يمكنه نقل البروتون بسهولة.

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Energi merupakan salah satu komponen penting dalam kehidupan manusia, karena hampir seluruh aktivitas manusia bergantung pada ketersediaan energi. Saat ini, sekitar 95% kebutuhan energi masih berasal dari bahan bakar fosil, seperti batu bara dan minyak bumi (Sebastian & Sitorus, 2013). Selain memiliki ketersediaan yang terbatas, penggunaan bahan bakar fosil secara terus-menerus dapat menimbulkan dampak berbahaya bagi lingkungan. Emisi gas rumah kaca yang dihasilkan dari pembakaran BBM dapat meningkatkan suhu global yang pada akhirnya memicu perubahan iklim (Erwin et al., 2022; Sulistiyawati et al., 2020).

Islam telah mengajarkan pentingnya menjaga kelestarian alam dan melarang kerusakan di bumi, sebagaimana yang telah tertulis dalam Al-Qur'an surah Ar-Rum ayat 41:

ظَهَرَ الْفَسَادُ فِي الْبَرِّ وَالْبَحْرِ بِمَا كَسَبَتْ أَيْدِي النَّاسِ لِيُذِيقَهُمْ بَعْضَ الَّذِي عَمِلُوا لَعَلَّهُمْ يَرْجِعُونَ ﴿٤١﴾

Artinya: “Telah tampak kerusakan di darat dan di laut disebabkan karena perbuatan tangan manusia, supaya Allah merasakan kepada mereka sebagian dari (akibat) perbuatan mereka, agar mereka kembali (ke jalan yang benar).” (Q.S. Ar-Rum [30]: 41)

Jauh sebelum kerusakan lingkungan sebesar sekarang, Al-Qur'an sudah berbicara mengenai kerusakan lingkungan dan mengajarkan kepada manusia bahwa kerusakan yang terjadi di bumi karena ulah tangan manusia. Di dalam Tafsir Al-Azhar, Buya Hamka menjelaskan tentang bentuk nyata kerusakan di darat adalah polusi atau udara yang kotor dampak dari pembakaran zat-zat kimia. Adanya kemajuan teknologi yang membutuhkan pembakaran batu bara, minyak bumi, gas alam dan sebagainya lebih banyak, dapat memicu manusia untuk mengeksploitasi

lingkungan secara besar-besaran agar peradaban lebih modern dan sesuai dengan apa yang manusia sudah rancang. Perkembangan peradaban dengan adanya ilmu dan teknologi melahirkan zaman industrialis yang juga merusak alam dan mengancam kelangsungan hidup (Rifzikka, 2024). Sehingga, penelitian dan pengembangan teknologi energi yang ramah lingkungan, seperti *fuel cell*, merupakan wujud tanggung jawab manusia untuk menjaga kelestarian ciptaan Allah SWT.

Peningkatan kinerja *fuel cell* dapat dilakukan dengan memahami mekanisme transfer proton pada membran elektrolit. Tetrazole banyak dikaji karena memiliki empat atom nitrogen yang memungkinkan jalur transfer proton lebih fleksibel tanpa memerlukan reorientasi cincin, serta stabilitas termal yang tinggi (155–157 °C), sehingga menjadikannya cocok digunakan sebagai material elektrolit *fuel cell*. Meskipun demikian, energi penghalang transfer proton pada tetrazole masih dikaji pada medium tertentu, mengingat perbedaan konstanta dielektrik medium dapat memengaruhi kestabilan molekul dan besarnya energi penghalang. Sehingga penelitian ini dilakukan untuk mengkaji pengaruh perbedaan konstanta dielektrik medium terhadap energi penghalang transfer proton pada molekul tetrazole.

Fuel cell (sel bahan bakar) adalah perangkat elektrokimia yang mampu mengubah energi kimia bahan bakar menjadi listrik secara langsung dengan efisien dan ramah lingkungan. Komponen utama dalam *fuel cell* adalah membran elektrolit, yang berfungsi sebagai media untuk menghantarkan proton dari anoda menuju katoda (Song et al., 2014). Konduktivitas proton pada membran elektrolit ini dipengaruhi mekanisme lompatan proton (*proton hopping*) dan tingkat energi penghalang yang rendah (Henkensmeier et al., 2015). Berdasarkan wujudnya,

elektrolit pada *fuel cell* dapat berupa elektrolit cair (*liquid electrolyte*) dan elektrolit padat (*solid electrolyte*). Elektrolit cair memiliki energi penghalang transfer proton yang lebih rendah, sekitar 0,3–0,5 eV, daripada elektrolit padat (0,8–0,9 eV), sehingga elektrolit cair memiliki konduktivitas proton yang lebih baik. Namun, elektrolit padat memiliki kestabilan termal yang lebih tinggi dibandingkan elektrolit cair, sehingga tidak mudah mengalami penguapan (da Silva et al., 2021; J. Li et al., 2024).

Berbagai senyawa berbasis turunan azole telah banyak diteliti sebagai konduktor proton, berkat memiliki kemampuan konduksi yang baik. Imidazole merupakan turunan azole pertama yang banyak digunakan sebagai pembawa proton. Penelitian oleh (Mangiatordi et al., 2011). menunjukkan bahwa molekul imidazole memiliki titik leleh sebesar 86-90 °C. Selain itu, imidazole juga memiliki energi penghalang yang rendah, sekitar 0,4-1,3 kkal/mol (Mangiatordi et al., 2011). Namun imidazole hanya memiliki satu atom donor dan satu atom akseptor proton, sehingga proses transfer proton memerlukan reorientasi molekul yang dapat menghambat konduksi proton dalam membran pertukaran proton (Yakin et al., 2024a).

Tetrazole (CH_2N_4) muncul sebagai alternatif karena memiliki empat atom nitrogen dalam strukturnya. Keberadaan atom nitrogen yang lebih banyak ini menciptakan jalur transfer proton yang lebih fleksibel dan memungkinkan terjadinya perpindahan proton tanpa perlu membalik orientasi cincin, sehingga meningkatkan efisiensi perpindahan proton (Mangiatordi et al., 2011; Pan et al., 2016). Tetrazole juga memiliki stabilitas termal yang tinggi, yaitu sekitar 155-

157°C, sehingga menjadikan tetrazole cocok digunakan sebagai material elektrolit *fuel cell* (Kiselev et al., 2011).

Selain komposisi molekul, medium juga berperan penting dalam meningkatkan probabilitas terjadinya transfer proton, terutama pada pasangan asimetris. Penelitian oleh Oziminski (2016) menunjukkan bahwa energi penghalang transfer proton pada molekul pyrazole ($C_3H_4N_2$) lebih tinggi dibandingkan molekul pentazole (HN_5), baik pada fase gas maupun fase medium. Pada fase gas, energi penghalang pyrazole sekitar 51 kkal/mol dan pentazole sekitar 26,16 kkal/mol, sedangkan pada medium air, nilainya menurun menjadi 19,51 kkal/mol untuk pyrazole dan 14,32 kkal/mol untuk pentazole (Oziminski, 2016). Sementara itu, penelitian oleh Yakin et al. (2024) menunjukkan bahwa proses transfer proton pada pasangan molekul triazole yang simetris berlangsung efisien pada fase gas dengan jarak donor-akseptor proton (*proton donor-acceptor distance* / PDAD) yang kecil, sedangkan pada pasangan molekul asimetris proses transfer proton cenderung terhambat. Adanya poli (asam akrilat) (PAA) sebagai medium dapat meningkatkan PDAD, sehingga memungkinkan transfer proton tidak hanya terjadi pada pasangan simetris tetapi juga pada pasangan asimetris (Yakin et al., 2024b).

Penelitian diatas menunjukkan bahwa medium berperan penting dalam memengaruhi besar energi penghalang transfer proton. Namun, penelitian terkait transfer proton pada molekul tetrazole masih terbatas pada fase gas dan medium air, serta belum membandingkan pengaruh medium dengan konstanta dielektrik yang berbeda terhadap energi penghalang transfer proton, terutama pada berbagai bentuk tautomerik dan jalur transfer proton yang beragam. Oleh karena itu, penelitian ini dilakukan untuk membandingkan pengaruh medium dimetil sulfoksida (DMSO)

(konstanta dielektrik $\epsilon = 46,7$) dan medium air (konstanta dielektrik $\epsilon = 80,1$) terhadap energi penghalang transfer proton pada molekul tetrazole dan tetrazole terprotonasi, serta memetakan jalur transfer proton menggunakan metode *Nudged Elastic Band* (NEB).

1.2 Rumusan Masalah

Adapun rumusan masalah dari penelitian ini yaitu:

1. Bagaimana konfigurasi molekul tetrazole pada beberapa medium yang memiliki energi terendah?
2. Bagaimana konfigurasi molekul tetrazole terprotonasi beberapa medium yang memiliki energi terendah?
3. Berapa besar nilai energi penghalang yang terjadi selama proses transfer proton pasangan molekul tetrazole pada beberapa medium?

1.3 Tujuan Penelitian

Adapun tujuan dari penelitian ini yaitu:

1. Mengetahui konfigurasi molekul tetrazole pada beberapa medium yang memiliki energi terendah.
2. Mengetahui konfigurasi molekul tetrazole terprotonasi pada beberapa medium yang memiliki energi terendah.
3. Menentukan besar energi penghalang yang terjadi selama proses transfer proton pasangan molekul tetrazole pada beberapa medium.

1.4 Manfaat Penelitian

Adapun manfaat dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Manfaat Teoritis:
Penelitian ini diharapkan dapat memberikan pemahaman mengenai mekanisme transfer proton pada molekul tetrazole dengan beberapa medium

menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT) dan *Nudged Elastic Band* (NEB). Hasil penelitian ini juga dapat memberikan pemahaman tentang pengaruh medium terhadap energi penghalang dan konduktivitas proton pada material elektrolit dalam sistem *fuel cell*.

2. Manfaat Praktis:

Penelitian ini diharapkan dapat menjadi dasar pengembangan material elektrolit berbasis tetrazole yang memiliki konduktivitas proton tinggi dan stabilitas termal yang baik untuk aplikasi *fuel cell*. Selain itu, hasil penelitian ini dapat dijadikan referensi dalam penelitian lanjutan yang berfokus pada optimasi material konduktor proton untuk teknologi energi berkelanjutan.

1.5 Batasan Masalah

Batasan masalah dalam penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Molekul yang digunakan ialah molekul tetrazole dan tetrazole terprotonasi.
2. Perhitungan dilakukan secara teoritis menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dan *Nudged Elastic Band* (NEB) menggunakan *software* ORCA.
3. Struktur energi stabil dan energi penghalang dihitung pada tingkat teori B3LYP, DFT-D4 dan basis set 6-311+ +G**.
4. Medium yang digunakan yaitu dimetil sulfoksida (DMSO) dengan konstanta dielektrik 46,7 dan medium air dengan konstanta dielektrik 80,1.
5. Metode medium implisit diselesaikan menggunakan model kontinum terpolarisasi mirip konduktor (*Conductor-like Polarizable Continuum Model* / CPCM).

BAB II

TINJAUAN PUSTAKA

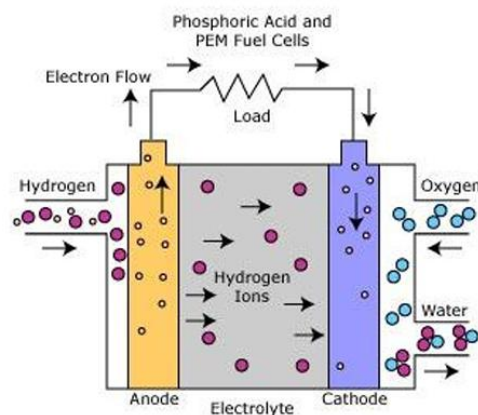
2.1 *Fuel Cell*

Fuel cell adalah perangkat elektrokimia yang menghasilkan energi listrik melalui reaksi kimia antara hidrogen dan oksigen. Dibandingkan baterai konvensional, hidrogen sebagai bahan bakar memiliki kapasitas penyimpanan energi kimia yang lebih tinggi (Karol et al., 2024; Ma'aruf & Widiarsa, 2016). Selain listrik, proses ini juga menghasilkan panas dan air pada prosesnya (Erwin et al., 2022). Karena itu, *fuel cell* dianggap sebagai salah satu inovasi ramah lingkungan dengan emisi rendah, yang berpotensi menggantikan teknologi konvensional berbasis bahan bakar fosil di berbagai bidang, seperti transportasi, pembangkit listrik, dan perangkat elektronik portabel (E. C. Muliawati et al., 2025).

Proses pembalikan elektrolisis air menjadi awal mula *fuel cell* ditemukan oleh Sir William R. G. pada tahun 1839 (Erwin et al., 2022). Karirnya dimulai sejak dia membuat *voltaic battery* yang kemudian dikenal sebagai *Grove's Battery* atau sel Grove. *Fuel cell* yang dibuatnya terdiri dari elektrolit asam, keping platina serta tabung gas oksigen dan hidrogen. Perangkat ini menggunakan prinsip reaksi balik terbentuknya air, di mana hidrogen dan oksigen bereaksi dalam larutan asam yang menghasilkan air dan listrik dengan arus sebesar 12 ampere dan tegangan 1,8 volt (N. Muliawati, 2008). Pada tahun 1889, Ludwig Mond dan Charles Longer melakukan penelitian dan menciptakan istilah *fuel cell* untuk pertama kalinya. Untuk memaksimalkan mesin awal, pada tahun 1932 seorang peneliti bernama Francis Bacon mulai meneliti *fuel cell* memakai KOH sebagai elektrolitnya. Bacon berhasil mengembangkan *fuel cell* hidrogen-oksigen tersebut pada 1959 dengan

efisiensi sebesar 60% dan bernama *Bacon Cell* atau yang sekarang dikenal dengan *Alkaline Fuel Cell* (AFC) (Erwin et al., 2022).

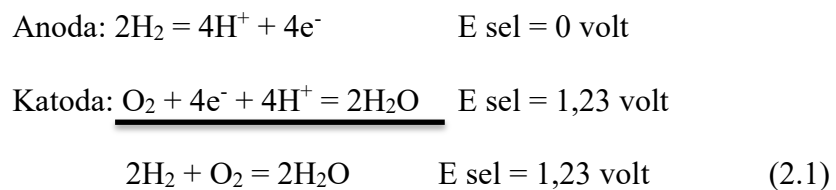
Fuel cell terdiri atas dua buah elektroda yaitu anoda dan katoda yang dipisahkan oleh membran pertukaran proton (*proton exchange membrane*) sebagai elektrolit (Riniati et al., 2010). Anoda berfungsi sebagai elektroda negatif tempat terjadinya oksidasi (kehilangan elektron), sedangkan katoda merupakan elektroda positif tempat oksigen mengalami reduksi. Elektrolit dalam *fuel cell* merupakan komponen penting yang berperan sebagai media yang menghantarkan ion bermuatan (proton) dari anoda menuju katoda sehingga reaksi elektrokimia dapat berlangsung. Selain itu, kedua elektroda dilengkapi dengan katalis yang dapat mempercepat laju proses oksidasi dan reduksi (Karol et al., 2024).



Gambar 2.1 Proses terjadinya *fuel cell* (Ma'aruf & Widiharsa, 2016)

Prinsip kerja *fuel cell* didasarkan pada reaksi elektrokimia antara hidrogen dan oksigen yang terjadi pada dua elektroda, yaitu anoda dan katoda, yang dipisahkan oleh lapisan elektrolit, sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 2.1 (Dewi et al., 2018). Gas hidrogen dengan tekanan tertentu memasuki anoda dan bereaksi dengan katalis. Ketika hidrogen kontak dengan platinum pada katalis, gas hidrogen akan terurai menjadi proton (H^+) dan elektron (e^-). Proton melewati

membran elektrolit menuju katoda, sementara elektron mengalir melalui rangkaian eksternal dan menghasilkan arus listrik. Di katoda, oksigen bereaksi dengan katalis dan membentuk dua atom oksigen. Muatan negatif ini akan menarik dua ion H^+ keluar dari membran PEM, lalu ini bergabung dengan satu atom oksigen dan elektron-elektron dari luar sirkuit untuk membentuk molekul air (H_2O) (Ma'aruf & Widiharsa, 2016). Reaksi *fuel cell* dapat dituliskan sebagai berikut (Riniati et al., 2010):



Fuel cell diklasifikasikan berdasarkan jenis elektrolit yang digunakan. Klasifikasi ini menentukan jenis reaksi kimia yang terjadi di dalam sel, jenis katalis yang diperlukan, batas temperatur dimana sel tersebut bekerja dan bahan bakar yang dibutuhkan (Ma'aruf & Widiharsa, 2016). Secara umum, *fuel cell* dibagi menjadi 4 macam, yakni:

1. PAFC (*Phosphoric Acid Fuel Cell*) menggunakan cairan asam fosfor sebagai elektrolit dan elektroda besi karbon yang mengandung katalis platinum. PAFC ini lebih dikenal sebagai generasi pertama dari sel bahan bakar modern (Sebastian & Sitorus, 2013).
2. MCFC (*Molten Carbonate Fuel Cell*) adalah *fuel cell* bersuhu tinggi yang menggunakan elektrolit yang terdiri dari campuran garam karbonat cair yang tersuspensi dalam matriks keramik litium aluminium oksida yang berpori dan inert secara kimia. Karena beroperasi pada suhu tinggi $650^\circ C$ (sekitar

1.200°F), logam non-mulia dapat digunakan sebagai katalis di anoda dan katoda (Energy, n.d.).

3. SOFC (*Solid Oxide Fuel Cell*) menggunakan bahan keramik yang keras dan tidak mudah berkarat sebagai elektrolit. SOFC beroperasi pada suhu yang sangat tinggi hingga 1.000°C (1.830°F) yang dapat menghilangkan kebutuhan akan katalis logam mulia (Energy, n.d.; Sebastian & Sitorus, 2013).
4. PEMFC (*Polymer electrolyte membrane fuel cells*) menggunakan polimer padat sebagai elektrolit dan elektroda karbon berpori yang mengandung katalis platina atau paduan platina. Sel ini beroperasi pada suhu yang relatif rendah, sekitar 80°C (176°F) (Energy, n.d.).

2.2 Mekanisme Transfer Proton

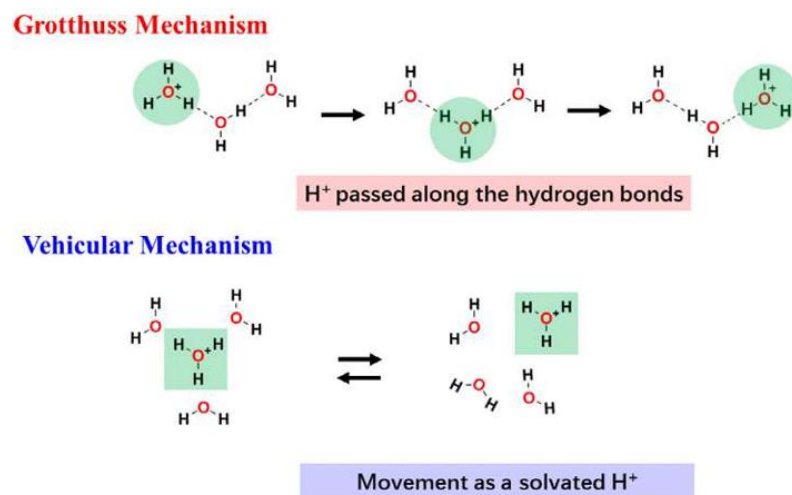
Transfer proton merupakan proses reaksi kimia yang melibatkan perpindahan ion hidrogen (H^+) dari donor proton ke akseptor proton (Ashenhurst, 2023). Konsep ini pertama kali dikenalkan oleh Brønsted dan Lowry pada tahun 1923 melalui teori asam-basa konjugat, yang menyatakan bahwa asam terprotonasi (AH) bertindak sebagai donor proton, sedangkan basa (B) bertindak sebagai akseptor (Raczynska et al., 2009).

Secara umum, proses transfer proton dapat terjadi melalui 2 mekanisme utama, yaitu mekanisme Grotthuss dan mekanisme *vehicular* (mekanisme difusi) seperti yang telah ditunjukkan pada Gambar 2.2 (Ludueno et al., 2011). Mekanisme Grotthuss, yang juga dikenal sebagai mekanisme lompatan proton, membentuk jalur konduksi proton melalui jaringan ikatan hidrogen yang sangat luas. Ion hidronium (H_3O^+) yang terbentuk dalam gugus air akan mentransfer protonnya dengan

memutuskan ikatan hidrogen secara bersamaan dan membentuk ikatan hidrogen baru. Akibatnya, proton tampak melompat dari satu molekul ke molekul lain melalui proses protonasi/deprotonasi antar molekul air (W. Li et al., 2020).

Sementara itu, pada mekanisme *vehicular* proton tidak berpindah secara langsung, melainkan berdifusi bersama molekul pembawa proton seperti H_3O^+ atau NH_4^+ yang terikat pada kendaraan (molekul pelarut) seperti H_2O atau NH_3 (Hirata et al., 2024). Molekul pembawa ini memiliki kemampuan untuk berdifusi (menyebarkan) sesuai dengan laju konduksi proton dan berperan sebagai basa Brønsted (akseptor proton) dari lingkungannya (W. Li et al., 2020).

Mekanisme Grotthuss dan *vehicular* dapat dibedakan berdasarkan energi aktivasi (E_a). Mekanisme Grotthuss memiliki energi aktivasi yang lebih rendah ($E_a < 0,4 \text{ eV}$) karena hanya melibatkan pemutusan ikatan hidrogen yang memerlukan energi dalam kisaran $2 - 3 \text{ kkal mol}^{-1}$ ($0,09 - 0,13 \text{ eV}$), sehingga proton dapat melompat antar molekul dengan mudah. Sebaliknya, mekanisme *vehicular* memerlukan energi aktivasi lebih tinggi ($E_a > 0,4 \text{ eV}$) karena melibatkan perpindahan ion yang lebih besar (memiliki massa lebih besar) (W. Li et al., 2020).



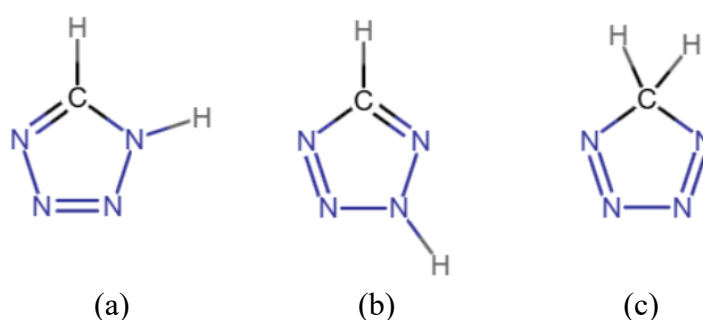
Gambar 2.2 Model konduksi proton. Mekanisme Grotthuss, (atas) dan mekanisme *vehicle*, (bawah) (W. Li et al., 2020).

Beberapa faktor struktural, seperti pasangan molekul simetris dan asimetris, serta jarak donor-akseptor proton (*Proton Donor-Acceptor Distance* / PDAD) dapat memengaruhi mekanisme transfer proton (Yakin et al., 2024a). Secara konvensional, panjang ikatan hidrogen diukur berdasarkan jarak antara heteroatom donor dan akseptor (Ishikita & Saito, 2014). Pada pasangan molekul simetris dengan PDAD pendek, transfer proton menghasilkan energi potensial berbentuk sumur ganda. Dalam konfigurasi ini, molekul donor proton bertukar menjadi molekul akseptor proton, sementara proton bergerak dari atom donor ke akseptor. Sebaliknya, pada pasangan molekul asimetris dengan PDAD pendek, transfer proton menghasilkan energi potensial berbentuk sumur tunggal, di mana molekul donor proton tidak bertukar menjadi akseptor proton selama proses transfer proton. Namun ketika PDAD meningkat, pasangan molekul asimetris membentuk potensial sumur ganda yang membuat molekul donor proton bertukar menjadi molekul akseptor proton (Yakin et al., 2024a).

2.3 Tetrazole

Senyawa heterosiklik telah menarik perhatian peneliti selama berabad-abad karena memiliki struktur cincin yang unik, yang mengandung setidaknya satu heteroatom di dalamnya (Kiselev et al., 2011). Istilah "heterosiklik" berasal dari bahasa Yunani "*heteros*" yang berarti berbeda dan "*kyklos*" yang berarti lingkaran atau cincin. Berbeda dengan senyawa karbosiklik yang hanya tersusun dari atom karbon, senyawa heterosiklik mengandung sedikitnya satu atom selain karbon, seperti nitrogen, oksigen atau sulfur dalam struktur cincinnya (Muhd Shafi et al., 2024).

Tetrazole (CH_2N_4) merupakan salah satu jenis senyawa heterosiklik dengan struktur cincin yang terdiri dari empat atom nitrogen, satu atom karbon dan dua atom hidrogen (Agarwal et al., 2025). Tetrazole berbentuk kristal berwarna putih hingga kuning pucat dengan aroma khas yang lemah. Senyawa ini memiliki kelarutan yang baik dalam air, serta menunjukkan sifat asam yang disebabkan oleh adanya empat atom nitrogen (Kaushik et al., 2018). Berdasarkan Gambar 2.3, tetrazole memiliki tiga bentuk tautomerik struktur elektronik, yaitu Te1, Te2 dan Te3. Bentuk tautomer 1H dan Te2 bersifat aromatik dengan delokalisasi 6 elektron π , sedangkan tautomer Te3 bersifat non-aromatik (Yuan et al., 2024).



Gambar 2.3 Bentuk tautomerik tetrazole, yaitu (a) Te1, (b) Te2, (c) Te3.

Sebagai senyawa heterosiklik aromatik, tetrazole mampu menghantarkan proton melalui mekanisme transfer proton, baik secara antar molekul atau intramolekul (Song et al., 2014). Selain itu, atom nitrogen pada cincin tetrazole dapat berperan sebagai pendonor elektron dan membentuk ikatan koordinasi dengan berbagai ion logam melalui atom nitrogennya, serta membentuk kompleks yang stabil. Tetrazole dan turunannya memiliki nilai keasaman yang mirip dengan asam karboksilat, sehingga menjadikannya bioisoster yang efektif dalam desain molekul (Kiselev et al., 2011).

Molekul tetrazole memiliki stabilitas termal yang sangat baik, di mana dekomposisi senyawa tersubstitusi umumnya terjadi di atas $250\text{ }^{\circ}\text{C}$, dengan titik

leleh berkisar antara 156 – 158 °C dan titik didihnya mencapai 220 °C (Neochoritis et al., 2019; Tetrazole, 2023). Stabilitas termal dan kimia yang tinggi menjadikan tetrazole ideal sebagai bahan dasar membran pertukaran proton / PEM dalam *fuel cell*. Konduktivitas dari PEM berbasis tetrazole ini menunjukkan ketergantungan terhadap perubahan suhu dan kelembaban, serta stabil secara elektrokimia pada rentang potensial listrik yang luas. Selain itu, tetrazole menunjukkan kinerja yang sangat baik pada suhu 20°C dan meningkat seiring dengan kondisi yang sangat kering karena peningkatan kinetika elektroda (Song et al., 2014).

Dengan stabilitas dan kinerjanya, tetrazole dapat diintegrasikan ke dalam membran elektrolit *fuel cell* melalui berbagai metode sintesis atau modifikasi, diantaranya kopolimerisasi, komposit dan doping asam. Pada metode kopolimerisasi, tetrazole disintesis sebagai bagian dari rantai utama polimer atau dicangkokkan ke polimer membran yang telah ada (da Silva et al., 2021). Pendekatan komposit dilakukan dengan mencampurkan material berbasis tetrazole dengan polimer lain untuk membentuk membran komposit melalui dispersi molekul tetrazole ke dalam matriks polimer utama membran selama proses fabrikasi / pembuatan membran (Ariesta, 2022). Sementara itu, pada metode doping asam, tetrazole yang memiliki sifat asam dapat berperan dalam mengisi ruang bebas di dalam struktur polimer, serupa dengan fungsi asam lain, seperti asam fosfat. Sehingga tetrazole dapat meningkatkan stabilitas jaringan ikatan hidrogen dan menyediakan situs transfer proton (Javed et al., 2023).

2.4 Energi Penghalang (*Barrier Energy*)

Energi penghalang merupakan energi minimum yang dibutuhkan suatu sistem agar reaksi kimia dapat berlangsung (Sundarti, 2017). Energi ini merepresentasikan

hambatan energi yang memisahkan keadaan awal (reaktan) dan akhir (produk) sepanjang lintasan reaksi (Bao & Truhlar, 2017). Besarnya energi penghalang berperan penting dalam menentukan laju reaksi, karena sistem harus memiliki energi yang cukup untuk melalui hambatan energi tersebut (Okamoto, 2003).

Ketika sistem bergerak dari reaktan ke produk, sistem harus melewati keadaan transisi (*transition state*) yang berada pada *saddle point* di permukaan energi potensial (*potential energy surface*/PES). PES divisualisasikan sebagai lanskap topografi, di mana reaktan dan produk mewakili keadaan stabil (minimal energi) dan *saddle point* atau puncak mewakili keadaan transisi (Bao & Truhlar, 2017). Dalam proses transfer proton, PES menggambarkan perubahan energi sistem seiring dengan perpindahan proton dari atom donor ke atom akseptor (Chen et al., 2023). Berdasarkan representasi ini, energi penghalang dapat didefinisikan sebagai selisih energi antara keadaan transisi dan reaktan, yang secara matematis dapat dinyatakan sebagai:

$$E_{\text{barrier}} = E_{\text{TS}} - E_{\text{reaktan}} \quad (2.2)$$

di mana E_{barrier} adalah energi penghalang, E_{TS} adalah *transition state* atau energi keadaan transisi dan E_{reaktan} adalah energi potensial minimum reaktan pada PES (Karmakar & Datta, 2020).

Metode perhitungan energi penghalang umumnya melibatkan penggunaan kimia kuantum komputasi, seperti teori fungsional kerapatan (*Density Functional Theory*/DFT), untuk menyelesaikan persamaan Schrödinger dan menghitung energi potensial elektronik sistem (Erkartal et al., 2016). Metode seperti *Nudged Elastic Band* (NEB) digunakan untuk menentukan jalur reaksi minimum dan menemukan *saddle point* pada PES, sedangkan *Transition State Theory* (TST) digunakan untuk

mengaitkan energi penghalang dengan konstanta laju reaksi. Setelah energi potensial elektronik diperoleh, koreksi termodinamika ditambahkan, yang mencakup kontribusi vibrasi, rotasi, dan translasi (menggunakan statistik mekanika), untuk mendapatkan energi bebas aktivasi atau entalpi aktivasi pada suhu tertentu (Chen et al., 2023).

Besarnya energi penghalang dipengaruhi oleh beberapa faktor, antara lain sifat reaktan, keberadaan katalis, konfigurasi molekul serta medium (Long, 2024). Orientasi molekul juga berperan penting, karena proton harus berada dalam posisi yang tepat untuk dapat berpindah dari donor ke akseptor. Jika orientasi molekul tidak sesuai, proton sulit berpindah ke akseptor dan energi penghalangnya semakin tinggi (Bao & Truhlar, 2017). Selain itu, meningkatnya jumlah molekul yang memiliki energi kinetik cukup untuk melewati penghalang disebabkan oleh adanya peningkatan suhu, sehingga proses transfer proton berlangsung lebih cepat (Long, 2024).

2.5 Density Functional Theory (DFT)

Komputasi prinsip pertama (*first-principles calculation*) atau yang sering dikenal dengan *ab initio* merupakan metode teoritis untuk menghitung suatu fenomena fisika dengan parameter yang sesuai sekecil mungkin (Wella et al., 2021). Perhitungan *ab initio* didasarkan pada persamaan kuantum, yaitu persamaan Schrödinger (Yakin, 2024). Pada dasarnya persamaan Schrödinger dapat mengidentifikasi semua besaran fisis dalam sistem kuantum (Rahman & Purqon, 2015). Persamaan Schrödinger dapat diselesaikan secara analitis untuk contoh sederhana seperti atom hidrogen dengan satu proton dan satu elektron (Yakin, 2024). Namun persamaan Schrödinger sulit dilakukan secara analitis untuk

menghitung struktur dan interaksi elektron-elektron pada banyak atom, sehingga dibutuhkan teknik komputasi untuk menyelesaikannya (Togatorop & Ahmad, 2024).

W. Kohn memperkenalkan metode yang dapat menyederhanakan perhitungan kuantum dalam kasus banyak partikel yang dikenal sebagai *Density Functional Theory* (DFT). Ide utama DFT muncul dari teori Hohenberg-Kohn dimana kerapatan elektron dalam keadaan dasar secara prinsip dapat digunakan untuk menghitung fungsi gelombang dalam keadaan dasar (Rahman & Purqon, 2015). Fungsi gelombang yang biasanya didefinisikan dalam fungsi dari banyak variabel dapat diganti dengan fungsi gelombang yang merupakan fungsional dari kerapatan elektron saja (Linome et al., 2024).

2.5.1 Mekanika Kuantum Banyak Partikel

Pada sistem fisis dalam material, tinjauan studi kuantum ini melibatkan dua jenis partikel, yaitu inti dan elektron (Togatorop & Ahmad, 2024). Konfigurasi elektronik dalam material didefinisikan dari interaksi-interaksi antara elektron dan inti yang terlibat dalam material tersebut. Konfigurasi elektronik ini dapat diperoleh dengan menyelesaikan persamaan Schrödinger untuk banyak partikel (Rahman & Purqon, 2015). Jika sistem diasumsikan dalam keadaan tunak, persamaan Schrödinger memiliki bentuk sebagai berikut (Schrödinger, 1926):

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (2.3)$$

Dengan bentuk hamiltonian ($\hat{H}$) pada banyak partikel (Schrödinger, 1926):

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (2.4)$$

$$\hat{H} = -\sum_{i=1} \frac{\hbar^2}{2m_{e_i}} \nabla^2 - \sum_{I=1} \frac{\hbar^2}{2m_{N_I}} \nabla^2 + \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1} \sum_{j=1} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1} \sum_{J=1} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1} \sum_{j=1} \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_j|} \quad (2.5)$$

Keterangan: $\hat{H}$ = operator hamiltonian

ψ = fungsi gelombang banyak partikel

E = energi total sistem

$\hat{T}$ = operator energi kinetik

$\hat{V}$ = operator energi potensial

$\hbar = 1,054571817 \times 10^{-34} \text{ Js}$ = konstanta Planck

$m_e = 9,1093837015(28) \times 10^{-31} \text{ kg}$ = massa elektron

m_N = massa inti (kg)

$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 8,9875 \times 10^9 \text{ Nm}^2/\text{C}^2$ = konstanta Coulomb

$e = -1,602176634 \times 10^{-19} \text{ C}$ = muatan elementer

Z = nomor atom

r = jarak elektron (m)

R = jarak inti (m)

Dari Persamaan (2.5), dapat dibagi ke dalam lima suku yang dilambangkan seperti pada Persamaan (2.6) (Hohenberg & Kohn, 1964):

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{T}_n + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{nn} + \hat{V}_{en} \quad (2.6)$$

Keterangan: $\hat{T}_e = - \sum_{i=1} \frac{\hbar^2}{2m_{e_i}} \nabla^2$ = operator energi kinetik elektron

$\hat{T}_n = - \sum_{I=1} \frac{\hbar^2}{2m_{N_I}} \nabla^2$ = operator energi kinetik inti

$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1} \sum_{j=1} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$ = operator energi potensial interaksi

elektron-elektron

$\widehat{V}_{nn} = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1} \sum_{J=1} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|}$ = operator energi potensial interaksi inti-inti

$\widehat{V}_{en} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1} \sum_{j=1} \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_j|}$ = operator energi potensial interaksi elektron-inti.

2.5.2 Pendekatan Born-Oppenheimer

Persamaan (2.6) masih terlalu rumit untuk dipecahkan dan memerlukan pendekatan yang disederhanakan (Yakin, 2024). Dengan mempertimbangkan perbedaan massa yang signifikan antara inti dan elektron, kita dapat mengasumsikan $m \approx \infty$. Dapat juga diasumsikan bahwa elektron bergerak lebih cepat daripada inti dan bahwa gerakan inti diabaikan, sehingga dari Persamaan (2.5) dapat disederhanakan menjadi $\hbar = m_e = e = 4\pi\epsilon_0 = 1$ (Wella et al., 2021). Oleh karena itu, bentuk $\widehat{T}_n$ dan $\widehat{V}_{nn}$ dihilangkan. Aproksimasi ini dikenal sebagai aproksimasi Born-Oppenheimer (Yakin, 2024). Berdasarkan hal tersebut, persamaan Hamiltonian direpresentasikan sebagai persamaan berikut (Hohenberg & Kohn, 1964):

$$\widehat{H} = \widehat{T}_e + \widehat{V}_{ee} + \widehat{V}_{en} \quad (2.7)$$

Sehingga persamaan Schrödinger yang baru dapat dinyatakan dengan persamaan berikut:

$$\widehat{H} \psi = \left[-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum \frac{Z}{|R - r|} + \frac{1}{2} \sum \frac{1}{|r - r'|} \right] \psi = E \psi \quad (2.8)$$

di mana $-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2}$ merupakan operator energi kinetik elektron, $-\sum \frac{Z}{|R - r|}$ merupakan operator energi potensial interaksi elektron-inti, dan $\frac{1}{2} \sum \frac{1}{|r - r'|}$ merupakan operator energi potensial interaksi elektron-elektron (Schrödinger, 1926). Meskipun

Persamaan (2.8) sudah sangat sederhana, masih diperlukan metode aproksimasi tereduksi untuk menyelesaikan nilai eigen (Wella et al., 2021).

2.5.3 Aproksimasi Hartree-Fock

Aproksimasi Hartree-Fock digunakan untuk menyederhanakan banyak elektron dalam persamaan Schrödinger (Wella et al., 2021). Dengan tidak menganggap interaksi antar elektron ini, fungsi gelombang banyak partikel dapat dituliskan dengan lebih eksplisit (Hartree, 1928):

$$\psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \phi(r_1)\phi(r_2) \dots \phi(r_N) \quad (2.9)$$

Sehingga persamaan Hartree dapat ditulis (Hohenberg & Kohn, 1964):

$$\left[-\sum_i \frac{\nabla^2}{2} - \frac{1}{2} \sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{i \neq j} \int d^3r' \frac{|\phi'(r')|^2}{|r-r'|} \right] \phi = E\phi(r) \quad (2.10)$$

Asas larangan pauli menyebutkan bahwa dua buah elektron dalam sebuah atom tidak dapat memiliki bilangan kuantum yang sama (tingkat energi), kecuali memiliki spin berbeda. Namun, aproksimasi Hartree tidak mengikutsertakan anti-simetri fungsi gelombang elektron. Padahal fungsi gelombang elektron harus anti-simetri terhadap pertukaran posisi dan spin (Wella et al., 2021).

Dengan menggunakan cara *Slater Determinant*, yaitu kombinasi linear dari *Hartree product* yang menghasilkan fungsi gelombang anti-simetris sesuai dengan prinsip larangan pauli:

$$\psi(r_1, r_2) = -\psi(r_2, r_1) \quad (2.11)$$

kita dapat menambahkan syarat anti-simetri dan muncullah kontribusi pertukaran (*exchange*). Sehingga persamaan Hartree-Fock menjadi (Hartree, 1928):

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} - \sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} + \sum_{i \neq j} \int d^3r' \frac{|\phi'(r')|^2}{|r-r'|} - \sum_j \int d^3r' \frac{|\phi^{*'}(r')\phi(r')|}{|r-r'|} \right] \phi = E\phi(r) \quad (2.12)$$

di mana: $-\frac{\nabla^2}{2}$ = energi kinetik elektron

$-\sum_{i,l} \frac{Z}{|r-R|} = \text{tarikan coulomb elektron-inti}$

$\sum_{i \neq j} \int d^3r' \frac{|\phi'(r')|^2}{|r-r'|} = \text{tolakan Coulomb antar elektron}$

$-\sum_j \int d^3r' \frac{|\phi^*(r')\phi(r')|}{|r-r'|} = \text{operator pertukaran (exchange operator) akibat}$

sifat antisimetri fungsi gelombang banyak elektron (prinsip Pauli)

$\phi(r) = \text{orbital satu-elektron dalam pendekatan Hartree-Fock}$

2.5.4 Teorema Hohenberg-Kohn

DFT adalah teori struktur elektronik yang secara prinsip akurat, didasarkan pada distribusi kepadatan elektron $n(\vec{r})$, bukan pada fungsi gelombang banyak elektron $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ (Kohn et al., 1996). Hal ini muncul dari ide bahwa untuk suatu nilai $n(\vec{r})$ tertentu, maka akan merepresentasikan fungsi gelombang yang tertentu pula (Rahman & Purqon, 2015). Secara umum, terdapat 2 teorema Hohenberg-Kohn untuk menentukan operator Hamilton dan sifat-sifat sistem berdasarkan kerapatan elektron yang berbunyi (Hohenberg & Kohn, 1964):

Teorema 1. Kerapatan elektron keadaan dasar $n_0(r)$ menentukan potensial eksternal $V_{ext}(r)$ secara unik

$$V_{ext} = f[n_0(r)] \quad (2.13)$$

Teorema 2. Kerapatan elektron dalam keadaan dasar dapat mendefinisikan secara unik energi total dalam keadaan dasar.

$$E[n] = F[n] + \int n(r)V_{ext}(r)dr \quad (2.14)$$

dengan: $E[n]$ = energi total keadaan dasar kerapatan elektron n

$F[n] = T_e + V_{ee}$ = fungsi kerapatan elektron n

$n(r)$ = kerapatan elektron pada posisi- r

2.5.5 Pendekatan Kohn-Sham

Kohn dan Sham mendefinisikan ulang permasalahan ini dalam bentuk yang lebih mudah dipahami, yang kemudian menghasilkan implementasi DFT yang praktis. Pendekatan Kohn-Sham digunakan untuk mengganti sistem elektron yang berinteraksi dengan sistem non-elektron yang dipengaruhi oleh potensial efektif. Potensial efektif mencakup potensial eksternal, interaksi Coulomb antar elektron, serta interaksi pertukaran dan korelasi (Yakin, 2024). Dengan menyelesaikan persamaan tersebut, kita dapat menentukan kerapatan dan energi keadaan dasar, dimana fungsional energi Kohn-Sham dituliskan sebagai persamaan (Kohn & Sham, 1965):

$$E_{KS} = T_S[n] + \int V_{ext}(r)n(r)d^3r + E_H[n] + E_{XC}[n] \quad (2.15)$$

dengan,

$$T_S[n] = \sum_i \int \psi_i^*(r) \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 \right) \psi_i(r) dr \quad (2.16)$$

$$n(r) = \sum |\psi_i(r)|^2 \quad (2.17)$$

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (2.18)$$

di mana E_{KS} adalah energi total keadaan dasar pendekatan Kohn-Sham, $T_S[n]$ adalah energi kinetik elektron yang tidak berinteraksi, $n(r)$ adalah kerapatan elektron pada posisi- r , $E_H[n]$ adalah energi Hartree dan $E_{XC}[n]$ adalah energi *exchange-correlation* (Wella et al., 2021).

Energi *exchange-correlation* ini merupakan bentuk koreksi energi dari pendekatan Kohn-Sham. Energi *exchange* merupakan koreksi energi akibat dari dua partikel yang saling dipertukarkan (Togatorop & Ahmad, 2024). Sedangkan, energi *correlation* merupakan koreksi energi berupa selisih energi antara sistem partikel

yang saling berinteraksi dengan sistem partikel yang tidak saling berinteraksi (Rahman & Purqon, 2015).

Masalah dalam pendekatan Kohn–Sham dapat dipandang sebagai upaya meminimalkan energi sistem terhadap kerapatan elektron $n(r)$. Solusi energi minimum ini diperoleh dengan melakukan turunan fungsional terhadap fungsional energi (Yakin, 2024). Dengan menerapkan prinsip variasi pada fungsional energi E , persamaan Kohn–Sham dapat diturunkan sebagai bentuk persamaan Schrödinger efektif untuk sistem banyak partikel (Kohn & Sham, 1965):

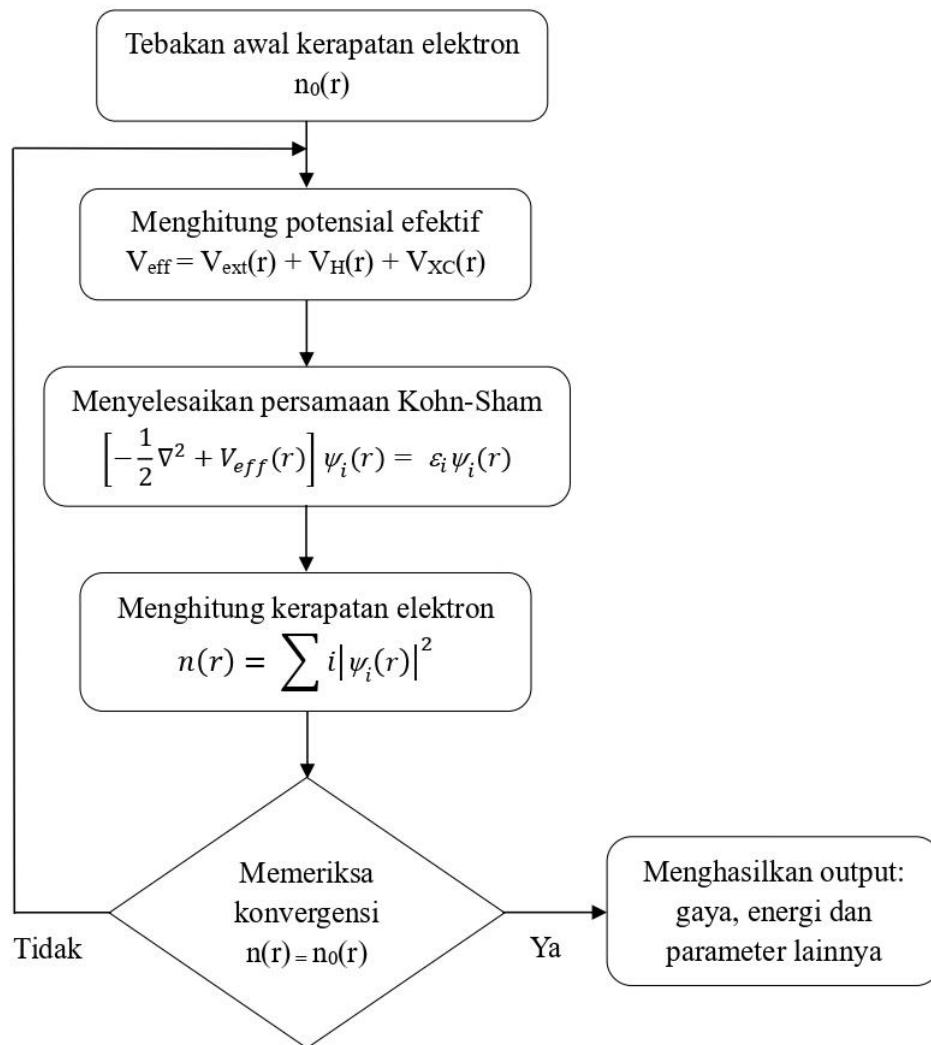
$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_{ext}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r) \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \quad (2.19)$$

di mana: $V_{ext}(r)$ = potensial eksternal

$$V_H(r) = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' = \text{potensial Hartree}$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} = \text{potensial } exchange\text{--}correlation$$

Untuk menyelesaikan persamaan Kohn-Sham ini, diperlukan suatu nilai tebakan kerapatan elektron dan kemudian dapat diperoleh solusi persamaan Kohn-Sham yang dapat digunakan untuk menghitung kerapatan elektron (Togatorop & Ahmad, 2024). Pada akhirnya dapat diperoleh kerapatan elektron baru untuk digunakan menyelesaikan persamaan Kohn-Sham kembali. Hal ini membentuk siklus yang dinamakan *Self Consistent Field* (SCF). Skema lengkap dari perhitungan SCF ditunjukkan pada Gambar 2.4. Jika siklus ini dilakukan berulang sehingga mendapat besaran kerapatan elektron yang konsisten, maka diperoleh kerapatan elektron pada keadaan dasar dengan energi yang minimal (Rahman & Purqon, 2015).



Gambar 2.4 Skema perhitungan SCF persamaan Kohn-Sham (Yakin, 2024)

2.6 Nudged Elastic Band (NEB)

Dalam Studi teoritis tentang mekanisme transisi keadaan dan estimasi laju peristiwa perpindahan atom atau rotasi momen magnetik, diperlukan pencarian lintasan energi minimum (*Minimum Energy Path* / MEP) yang menghubungkan keadaan awal dan akhir pada permukaan energi sistem (Koistinen et al., 2017). Selain itu, perhitungan laju transisi dalam teori keadaan transisi harmonik membutuhkan pencarian energi tertinggi di sepanjang MEP, yang merepresentasikan titik pelana (*saddle point*) orde pertama pada permukaan energi (Smidstrup et al., 2014). Titik tertinggi pada MEP ini bersesuaian dengan titik

pelana orde pertama pada permukaan energi dan memberikan estimasi energi aktivasi untuk proses tersebut. Cara umum untuk menemukan MEP adalah dengan metode *Nudged Elastic Band* (NEB), di mana rantai konfigurasi atom (*images*) yang awalnya terletak di sepanjang jalur uji yang menghubungkan titik minimum yang diberikan, secara berulang bergerak menuju MEP terdekat (Koistinen et al., 2019).

Metode *Nudged Elastic Band* (NEB) adalah teknik komputasi yang digunakan untuk menemukan MEP yang menghubungkan dua keadaan stabil, yaitu reaktan dan produk pada permukaan energi potensial (Nesse et al., 2015). Metode ini berperan penting dalam mempelajari mekanisme transisi keadaan dan estimasi laju perpindahan atom atau rotasi momen magnetik yang paling mungkin dilalui oleh sistem saat bertransisi dari keadaan awal ke keadaan akhir (Koistinen et al., 2017).

Lintasan direpresentasikan sebagai serangkaian konfigurasi sistem yang disebut *images*, yang mewakili nilai dari seluruh derajat kebebasan sistem pada suatu titik di sepanjang lintasan (Koistinen et al., 2017). Jumlah *images* yang digunakan biasanya berkisar antara 4 hingga 20 (Nufus, 2025). Untuk menjaga kelancaran lintasan, setiap *image* dihubungkan dengan pegas yang menyerupai sebuah pita elastis (Henkelman et al., 2000). Lintasan ini kemudian dioptimalkan dengan meminimalkan gaya yang bekerja pada setiap *image* untuk memperoleh lintasan dengan energi minimum (Nufus, 2025).

Images dapat dilambangkan dengan $[R_0, R_1, \dots, R_N]$, di mana posisi awal dan akhir ditentukan oleh keadaan reaktan ($R_1 = R$) dan produk ($R_N = P$). Sementara itu, $N-1$ *images* intermediet $[R_1, R_2, \dots, R_{N-1}]$, akan disesuaikan oleh algoritma

optimasi untuk menemukan energi minimum (Koistinen et al., 2019). Pendekatan paling sederhana dalam metode NEB adalah dengan memperpendek panjang MEP dengan fungsi S yang dapat dituliskan dalam persamaan berikut (Jonsson et al., 1998):

$$S(R_1, R_2, \dots, R_N) = \sum_{i=1}^{N-1} E(R_i) + \sum_{i=1}^{N-1} \frac{k}{2} (R_i - R_{i-1})^2 \quad (2.20)$$

dengan kondisi stasioner,

$$\frac{\partial S(R_1, R_2, \dots, R_{p-1})}{\partial R_k} \rightarrow 0 \quad (2.21)$$

Fungsi S di atas merepresentasikan energi total dari setiap gambar dalam lintasan reaksi, $N-1$ adalah jumlah *images* intermediat, R adalah posisi image ke- i , dan k adalah konstanta pegas (Yakin, 2024). Pendekatan ini dikenal dengan *Plain Elastic Band* (PEB) atau metode pita elastis sederhana. Metode PEB sering menyebabkan pergeseran (*drift*) lintasan energi, sehingga diperlukan cara lain untuk menghindari pergeseran jalur energi (Jonsson et al., 1998).

Gaya total pada *image* ke- k (F_k) dapat dinyatakan sebagai:

$$F_k = - \frac{\partial S}{\partial R_k} \quad (2.22)$$

di mana,

$$\frac{\partial S}{\partial R_k} = \left(\frac{\partial E(R_k)}{\partial (R_k)} \right)_{\parallel} + \left(\frac{\partial E(R_k)}{\partial (R_k)} \right)_{\perp} + \left(\frac{\partial E_{pegas}}{\partial R_k} \right)_{\parallel} + \left(\frac{\partial E_{pegas}}{\partial R_k} \right)_{\perp} \quad (2.23)$$

dengan $\left(\frac{\partial E(R_k)}{\partial (R_k)} \right)_{\parallel}$ adalah energi kinetik sejajar, $\left(\frac{\partial E(R_k)}{\partial (R_k)} \right)_{\perp}$ adalah energi kinetik tegak lurus, $\left(\frac{\partial E_{pegas}}{\partial R_k} \right)_{\parallel}$ adalah energi potensial sejajar, dan $\left(\frac{\partial E_{pegas}}{\partial R_k} \right)_{\perp}$ adalah energi potensial tegak lurus (Jonsson et al., 1998). Komponen gaya sejajar dari energi kinetik dapat menyebabkan distribusi *image* tidak merata sepanjang jalur energi. Di sisi lain, komponen gaya tegak lurus dari energi potensial dapat menggeser lintasan

energi ke atas menjauhi MEP. Untuk mengatasi hal ini, NEB hanya mempertahankan 2 komponen, yaitu gaya tegak lurus dari energi kinetik dan gaya sejajar dari energi potensial. Sehingga, diperoleh gaya efektif (Jonsson et al., 1998):

$$F_k = -\left(\frac{\partial E(R_k)}{\partial(R_k)}\right) - \left(\frac{\partial E_{pegas}}{\partial R_k}\right) \quad (2.24)$$

Proses optimasi kemudian dilakukan dengan menggunakan algoritma kecepatan proyeksi berbasis algoritma Verlet untuk menggerakkan *images* menuju konfigurasi optimal (Henkelman et al., 2000). Setelah beberapa iterasi, *images* akan mendekati MEP dan magnitudo gaya pada setiap *image* akan berkurang hingga mencapai kriteria konvergensi tertentu (Henkelman & Jónsson, 2000). Dengan menggunakan konstanta pegas yang seragam untuk semua pegas, *images* akan terdistribusi secara merata di sepanjang MEP (Nufus, 2025).

2.7 Selisih Energi HOMO-LUMO

Selisih energi HOMO-LUMO adalah perbedaan atau selisih energi antara orbital molekul terisi tertinggi (*Highest Occupied Molecular Orbital* / HOMO) dan orbital molekul kosong terendah (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital* / LUMO), yang digunakan untuk menentukan stabilitas energi molekul (Kohn et al., 1996). Dalam reaksi transfer proton, sistem diukur sebagai selisih energi antara HOMO (yang mewakili donor elektron) dan LUMO (yang mewakili akseptor elektron). Semakin kecil selisih energinya, maka semakin mudah elektron berpindah dan molekul menjadi lebih reaktif. Hal ini disebabkan oleh donor elektron yang hanya mengeluarkan energi untuk melompat ke orbital kosong akseptor (Klopman, 1968).

2.8 Muatan Atom Mulliken

Muatan atom Mulliken atau *Mulliken atomic charges* merupakan salah satu metode yang paling umum digunakan untuk memperkirakan muatan atom

berdasarkan perhitungan mekanika kuantum (Huzinaga et al., 1990). Metode ini membagi kerapatan elektron total menjadi populasi atom bersih dan populasi atom tumpang tindih, di mana populasi tumpang tindih dibagi rata antara dua atom yang terikat. Muatan Mulliken dihasilkan oleh analisis populasi Mulliken yang memberikan metode untuk memperkirakan muatan atom parsial melalui perhitungan kimia komputasi (Mulliken, 1955).

Analisis populasi Mulliken beroperasi dengan membagi kerapatan muatan total dan mempertimbangkan tumpang tindih antar fungsi basis berdasarkan fungsi basis pada atom-atom tertentu dalam molekul (Neese, 2012). Metode ini juga membagi populasi elektron berdasarkan kontribusi orbital atom, sehingga dapat memperkirakan atom mana yang bertindak sebagai donor atau akseptor elektron (Mulliken, 1955). Hasil akhir dari analisis ini adalah model muatan titik molekul, yang terdiri dari kumpulan muatan atom kotor yang didefinisikan dengan:

$$Q_a = Z_a - N(a) \quad (2.25)$$

di mana Q_a adalah muatan atom Mulliken, Z_a adalah nomor atom a (jumlah proton) dan $N(a)$ adalah jumlah elektron pada atom a (Huzinaga et al., 1990).

2.9 Rasio Populasi Boltzmann

Distribusi Boltzmann merupakan suatu konsep distribusi probabilitas yang digunakan untuk menentukan probabilitas suatu sistem berada pada keadaan energi tertentu. Konsep ini pertama kali dirumuskan oleh Ludwig Boltzmann pada tahun 1868, yang menunjukkan probabilitas sistem berada dalam keadaan tertentu sebagai fungsi dari energi keadaan tersebut dan suhu sistem (Lev & Evgenii, 1980). Distribusi ini menunjukkan bahwa keadaan dengan energi yang lebih rendah

memiliki probabilitas lebih tinggi untuk ditempati dibandingkan keadaan dengan energi yang lebih tinggi (Ludwig, 1909).

Distribusi Boltzmann sering digunakan untuk menggambarkan rasio probabilitas antara dua tingkat energi yang berbeda pada kesetimbangan termal, yang dikenal sebagai rasio populasi Boltzmann (Al-Obaidi & Abdulmunem, n.d.). Rasio ini diperoleh dengan membandingkan faktor Boltzmann dari dua keadaan. Untuk dua keadaan energi, rasio tersebut diberikan oleh persamaan berikut:

$$\frac{P_i}{P_j} = \exp\left(\frac{\varepsilon_j - \varepsilon_i}{k_B T}\right) \quad (2.28)$$

di mana P_i = probabilitas sistem dalam keadaan-i, ε_i = energi keadaan-i, k_B = konstanta Boltzmann ($1,380649 \times 10^{-23}$ J/K) dan T = suhu (Ludwig, 1909).

2.10 Energi Ikatan Hidrogen

Ikatan hidrogen adalah interaksi molekuler yang terjadi ketika atom hidrogen (H) yang terikat secara kovalen dengan atom elektronegatif berinteraksi dengan atom elektronegatif lain yang memiliki pasangan elektron bebas (Weinhold & Klein, 2014). Atom elektronegatif yang terikat kovalen dengan hidrogen disebut donor proton, sedangkan atom yang tidak terikat kovalen dengan hidrogen disebut akseptor proton (Arunan et al., 2011). Kekuatan ikatan hidrogen dipengaruhi oleh berbagai faktor, meliputi lingkungan, geometri molekul, dan sifat molekul (Afonin & Roszak, 2024).

Energi ikatan hidrogen atau *Hydrogen Bond Energy* (E_{HB}) merupakan parameter yang digunakan untuk mengukur kekuatan ikatan hidrogen. E_{HB} didefinisikan sebagai selisih antara energi total pasangan molekul dan energi total molekul donor serta akseptor (Yakin, 2024). E_{HB} pada pasangan molekul didefinisikan dengan (Afonin & Roszak, 2024):

$$E_{HB} = E_{\text{pair}} - (E_{\text{donor pair}} + E_{\text{acceptor pair}}) + E_{CP} \quad (2.26)$$

di mana E_{pair} adalah total energi molekul berpasangan, $E_{\text{donor pair}}$ merupakan energi total molekul donor dalam pasangan (tanpa molekul akseptor), $E_{\text{acceptor pair}}$ adalah energi total molekul akseptor dalam pasangan (tanpa molekul donor) dan E_{CP} adalah energi koreksi penyeimbang (*counterpoise correction energy*). Persamaan E_{CP} didefinisikan dengan:

$$E_{CP} = (E_{\text{donor pair}} - E_{\text{donor}}) - (E_{\text{acceptor pair}} - E_{\text{acceptor}}) \quad (2.27)$$

di mana E_{donor} adalah energi total molekul donor yang terpisah dan E_{acceptor} adalah energi total molekul akseptor yang terpisah (Yakin, 2024).

2.11 Kajian Terkait Penelitian dalam Perspektif Islam

Islam sejak awal telah menempatkan ilmu pengetahuan sebagai bagian yang tidak terpisahkan dari ajaran agama. Tidak hanya terbatas pada ilmu keagamaan semata, melainkan mencakup seluruh cabang ilmu yang bermanfaat bagi kehidupan manusia (Azzahra & Maysithoh, 2024). Al-Qur'an secara eksplisit mendorong manusia untuk mengkaji fenomena alam dan memahami keteraturan hukum-hukum ciptaan Allah (*sunnatullah*), baik pada skala makroskopik maupun mikroskopik (Hidayati et al., 2024). Dalam perspektif Islam, fenomena alam tidak terjadi secara acak, melainkan mengikuti hukum yang dapat dipelajari dan dianalisis secara rasional (Asiyah et al., 2019). Dorongan untuk mengkaji alam semesta ini tercantum dalam surah Ali Imran ayat 190–191:

إِنَّ فِي خَلْقِ السَّمُوتِ وَالْأَرْضِ وَاخْتِلَافِ اللَّيْلِ وَالنَّهَارِ لَآيَاتٍ لِّأُولِي الْأَلْبَابِ ﴿١٩٠﴾ الَّذِينَ يَذْكُرُونَ اللَّهَ قِيَامًا وَقُعُودًا وَعَلَىٰ جُنُوبِهِمْ وَيَتَفَكَّرُونَ فِي خَلْقِ السَّمُوتِ وَالْأَرْضِ رَبَّنَا مَا خَلَقْتَ هَذَا بَاطِلًا سُبْحَانَكَ فَقِنَا عَذَابَ النَّارِ ﴿١٩١﴾

Artinya: “Sesungguhnya dalam penciptaan langit dan bumi serta pergantian malam dan siang terdapat tanda-tanda (kebesaran Allah) bagi orang yang berakal.

(Yaitu) orang-orang yang mengingat Allah sambil berdiri, duduk, atau dalam keadaan berbaring, dan memikirkan tentang penciptaan langit dan bumi (seraya berkata), “Ya Tuhan kami, tidaklah Engkau menciptakan semua ini sia-sia. Mahasuci Engkau. Lindungilah kami dari azab neraka.” (QS. Ali Imran [3]: 190–191).

Ayat ini menggambarkan bagaimana manusia didorong untuk menggunakan akalnya dalam merenungkan fenomena alam, memperkuat keimanan melalui dzikir, serta mengembangkan ilmu pengetahuan sebagai sarana memahami tanda-tanda kebesaran Allah (Ghoni & Barni, 2025). Quraish Shihab dalam Tafsir Al-Misbah menjelaskan bahwa ayat ini mengajak manusia agar berpikir, karena pada hakikatnya penciptaan alam semesta dan isinya dapat terarah dengan baik menjadi pertanda bahwa Allah memiliki kekuasaan didalamnya (Shihab, 2002). Namun tidak semua ciptaan Allah dapat diamati secara langsung oleh mata manusia. Sebagian besar materi di alam semesta tersusun dari partikel-partikel yang sangat kecil dan tidak tampak, yang dalam kajian sains modern dikenal sebagai atom (Maulahibati et al., 2023). Al-Qur’an sendiri mengisyaratkan keberadaan partikel yang sangat kecil melalui istilah *dzarrah*, sebagaimana yang termuat dalam surah Az-Zalzalah ayat 7-8:

فَمَنْ يَعْمَلْ مِثْقَالَ ذَرَّةٍ خَيْرًا يَرَهُ ﴿٧﴾ وَمَنْ يَعْمَلْ مِثْقَالَ ذَرَّةٍ شَرًّا يَرَهُ ﴿٨﴾

Artinya: “Siapa yang mengerjakan kebaikan seberat zarrah, dia akan melihat (balasan)-nya. Siapa yang mengerjakan kejahatan seberat zarrah, dia akan melihat (balasan)-nya.” (QS. Az-Zalzalah [99]: 7-8).

Menurut Hamka pada tafsir al-Azhar, dalam ilmu modern sekarang, lafadz *dzarrah* dikaitkan dengan atom. Selain kata *dzarrah*, atom juga disebut dengan *al-jauharul fard* yang artinya benda yang sangat halus dan tidak dapat dibagi-bagi lagi. Dalam ayat ini juga terlihat bahwa atom itu mempunyai berat (massa) dan besaran. Karena dari ayat ini disebutkan “seberat *dzarrah*” berarti atom (*dzarrah*) mempunyai massa (Maulahibati et al., 2023; Sabarni, 2019).

Dalam konteks penelitian ini, upaya memahami mekanisme transfer proton pada molekul tetrazole merupakan salah satu dari bentuk berpikir. Perhitungan energi penghalang yang menggambarkan hambatan energi yang harus dilewati proton saat berpindah dari atom donor ke atom akseptor pada hakikatnya adalah usaha manusia untuk membaca dan mengurai keteraturan yang Allah tanamkan pada interaksi antarmolekul pada tingkat subatom. Dengan demikian terbukti bahwa Al-Qur'an telah lebih dahulu mengungkapkan teori atom beberapa abad sebelum para ilmuwan menemukan teori tentang adanya partikel penyusun atom yang ukurannya lebih kecil dari atom, meski nama-nama partikel penyusun tersebut tidak dijelaskan secara gamblang di dalam Al Qur'an, hal ini dikarenakan Allah ingin kita senantiasa berpikir sehingga ada keinginan untuk meneliti tentang segala kejadian alam yang akan membuat kita semakin yakin akan kekuasaan Allah yang tertulis dalam Al-Qur'an (Sabarni, 2019).

Pemahaman mendalam terhadap fenomena alam pada skala molekuler tidak hanya bernilai ilmiah, tetapi juga merupakan tanggung jawab manusia sebagai khalifah yang dapat menjaga serta melindungi lingkungan dengan baik. Upaya pengembangan *fuel cell* sebagai energi terbarukan yang bersih dan ramah lingkungan merupakan perwujudan dari amanah manusia untuk menjaga segala yang ada di bumi dan mencegah kerusakan alam akibat eksploitasi alam yang berlebihan (Azzahra & Maysithoh, 2024). Dengan demikian, penelitian ini bukan hanya sekedar aktivitas ilmiah, melainkan juga upaya dan ikhtiar dalam mencapai kelestarian hubungan antar makhluk dengan lingkungan sebagai perwujudan tujuan pembangunan kehidupan yang seutuhnya.

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Jenis Penelitian

Penelitian ini merupakan penelitian komputasi teoritis menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT) dan metode *Nudged Elastic Band* (NEB). Data yang diambil berupa struktur geometri molekul, energi total sistem, dan energi penghalang transfer proton yang dihitung secara numerik melalui simulasi komputasi. Struktur energi stabil dan energi penghalang dihitung pada level teori B3LYP/6-311+ +G** dan basis set DFT-D4.

3.2 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilakukan pada bulan Oktober 2025 sampai April 2026 di Laboratorium Medan Magnet Jurusan Fisika Fakultas Sains dan Teknologi Universitas Islam Negeri Maulana Malik Ibrahim Malang.

3.3 Alat dan Bahan Penelitian

3.3.1 Perangkat Keras

Penelitian ini dilakukan dengan menjalankan simulasi menggunakan workstation dan laptop dengan spesifikasi sebagai berikut:

Tabel 3.1 Spesifikasi perangkat keras

	Spesifikasi	Keterangan
Laptop	Merk	RedmiBook 15
	Processor	11th Gen Intel(R) Core(TM) i3-1115G4 @ 3.00GHz (3.00 GHz)
	RAM	8,00 GB
	Versi Windows	Windows 11 Home Single Language 64-bit
Workstation	Merk	HP Z640
	Processor	Intel ®Xeon(R) CPU E5-2698 v3 @2.300GH x 64
	Disk, Memory	589,4 GB, 62,8 GiB
	Tipe OS	64-bit

3.3.2 Perangkat Lunak

Dalam menjalankan simulasi, diperlukan beberapa perangkat lunak yang perlu digunakan sebagai penunjang penelitian. Perangkat lunak yang digunakan ialah sebagai berikut

Tabel 3.2 Perangkat lunak yang digunakan

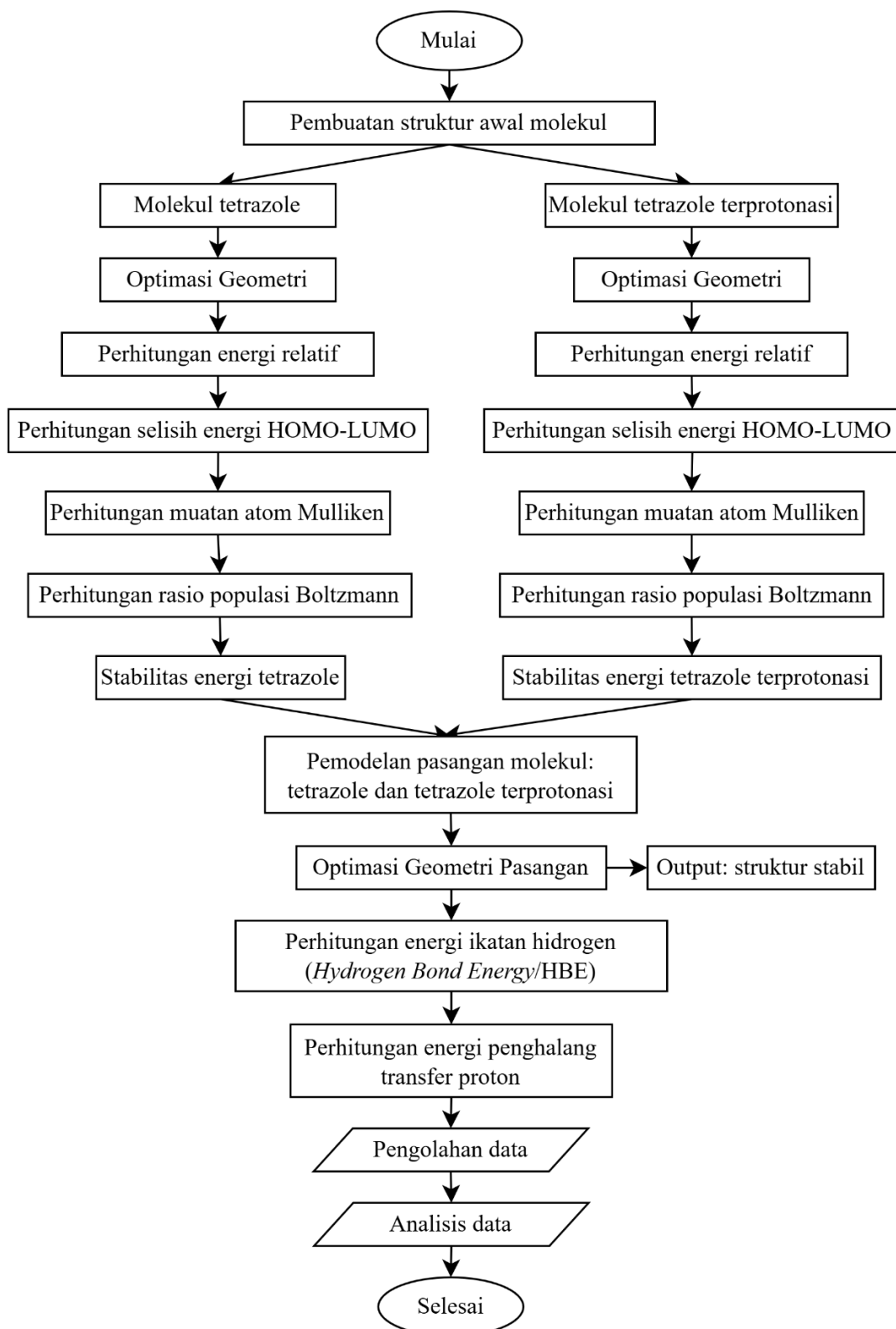
Nama	Keterangan Fungsi
Avogardo 1.2.0	Untuk membuat molekul
Orca 6.0.0	Untuk perhitungan DFT
Terminal	Untuk membuat file input pemrograman
Vesta 3.90.5a	Untuk menampilkan geometri dari output running program
Gnuplot 6.0 patchlevel 4	Untuk membuat grafik
Microsoft Excel 2021	Untuk mengolah data angka yang didapatkan dari output running program
Microsoft Word 2021	Untuk menulis hasil penelitian

3.4 Variabel Penelitian

Variabel yang digunakan dalam penelitian ini yaitu:

1. Variabel bebas: jenis medium, keadaan molekul tetrazole.
2. Variabel terikat: Energi Penghalang transfer proton, energi relatif, selisih energi HOMO-LUMO, muatan atom Mulliken dan populasi boltzmann.
3. Variabel kontrol: metode komputasi B3LYP, DFT-D4 dan basis set 6-311++G**, metode NEB, model medium implisit.

3.5 Diagram Alir Penelitian



Gambar 3.1 Diagram alir penelitian

3.6 Prosedur Penelitian

Adapun langkah-langkah yang dilakukan dalam penelitian ini adalah:

3.6.1 Pemodelan Struktur Molekul Tetrazole

1. Buka perangkat lunak Avogadro.
2. Gunakan menu *Draw Settings* untuk mulai membuat struktur molekul.
3. Aktifkan opsi *Adjust Hydrogens* agar penambahan atom hidrogen (H) dilakukan secara otomatis.
4. Buat struktur cincin lima anggota yang terdiri dari 4 atom nitrogen (N) dan satu atom karbon (C).
5. Pastikan setiap atom dalam cincin memiliki ikatan valensi yang benar. Atom-atom harus membentuk ikatan tunggal dan rangkap yang sesuai untuk memperoleh konfigurasi yang stabil.
6. Untuk molekul tetrazole yang terprotonasi, tambahkan 1 atom H pada atom N yang menjadi lokasi protonasi.
7. Setelah struktur dasar terbentuk, lakukan optimasi geometri menggunakan fitur *Optimize Geometry* pada menu *Extensions*.

3.6.2 Optimasi Geometri

1. Buat file (.inp) dengan langkah-langkah berikut:
 - a. Gunakan metode DFT di ORCA 6.0.0 dengan fungsional CAM-B3LYP dan basis set 6-311++G **, serta koreksi dispersi DFT-D4 untuk memperoleh struktur geometri minimum dan distribusi elektron pada molekul tetrazole dan tetrazole terprotonasi. Perhitungan dijalankan dengan NormalSCF.

- b. Blok %geom dan %scf berfungsi untuk mengontrol proses komputasi. MaxIter 300 di %geom mengatur bahwa ORCA akan mencoba hingga 300 langkah untuk mencapai geometri yang stabil. Demikian pula, MaxIter 300 pada %scf memberikan hingga 300 iterasi agar densitas elektron dapat tercapai.
 - c. Blok %maxcore 3000 mengalokasikan 3000 MB memori utama per prosesor untuk perhitungan.
 - d. Dalam blok ! CPCM, menunjukkan penggunaan model medium implisit CPCM. Setel Epsilon = 80,1 untuk konstanta dielektrik air dan untuk konstanta dielektrik DMSO gunakan $\epsilon = 47,2$.
 - e. Blok %pal dengan nprocs 5 menentukan bahwa simulasi akan menggunakan 5 core CPU untuk mempercepat waktu komputasi.
 - f. Blok * xyz 0 1 angka 0 menunjukkan muatan total molekul adalah nol (netral). Angka 1 menunjukkan multiplisitas spin dalam keadaan singlet. Blok berikutnya menunjukkan koordinat atom dalam format (.xyz).
2. Jalankan perhitungan di terminal dengan langkah-langkah berikut:
 - a. Buka terminal pada sistem.
 - b. Arahkan terminal ke folder file (.inp) berada.
 - c. Jalankan ORCA dengan memanggil executable diikuti nama file (.inp) > nama file (.out).
 - d. Tekan enter untuk menjalankan perhitungan.
3. Setelah perhitungan selesai, periksa file (.out) untuk memastikan optimasi geometri telah berhasil dan telah terdapat tulisan *Optimization Run Done*.

3.6.3 Perhitungan Selisih Energi HOMO-LUMO

Selisih energi HOMO-LUMO diperoleh dari file output (.out) hasil optimasi geometri setiap molekul tunggal. Setelah proses optimasi selesai, bagian “*Orbital Energy*” pada file output menampilkan daftar energi orbital molekul. Dari daftar tersebut, ditentukan energi orbital terisi tertinggi (E_{HOMO}) dan energi orbital kosong terendah (E_{LUMO}). Selisih antara kedua energi tersebut (E_{gap}) dihitung menggunakan persamaan:

$$|E_{\text{gap}}| = E_{\text{HOMO}} - E_{\text{LUMO}} \quad (3.1)$$

3.6.4 Perhitungan Muatan Atom Mulliken

Nilai muatan atom diperoleh dari file output (.out) hasil optimasi geometri setiap molekul tunggal. Setelah proses optimasi selesai, bagian “*Mulliken Atomic Charges*” yang paling akhir (bawah) pada file output menampilkan nilai muatan untuk setiap atom. Nilai-nilai muatan tersebut kemudian dicatat untuk digunakan dalam analisis.

3.6.5 Perhitungan Rasio Populasi Boltzmann

Rasio populasi Boltzmann dihitung menggunakan energi relatif dari setiap struktur yang diperoleh setelah optimasi. Nilai energi relatif ini kemudian dimasukkan ke dalam persamaan distribusi Boltzmann untuk mendapatkan persentase populasi masing-masing struktur pada temperatur 500 K. Rasio populasi tersebut dihitung menggunakan persamaan:

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}\right)$$

di mana, N_2 dan N_1 = populasi (jumlah partikel) pada tingkat energi atas dan bawah, E_2 = energi molekul (J), E_1 = energi molekul terendah, $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K konstanta Boltzmann dan T = suhu (K).

3.6.6 Optimasi Geometri Pasangan

1. Optimasi dilakukan pada dua jenis struktur, yaitu pasangan molekul tetrazole sebagai reaktan dan tetrazole terprotonasi sebagai produk. Kedua struktur dihitung secara terpisah untuk memperoleh bentuk geometri minimum yang paling stabil.
2. Untuk optimasi reaktan, hanya struktur reaktan yang disertakan di dalam file (.inp). Sedangkan untuk optimasi produk, file (.inp) hanya memuat struktur produk yang akan dihitung.
3. Penyusunan file (.inp) dilakukan dengan menambahkan perintah constraints pada blok %geom apabila terdapat jarak antaratom tertentu yang perlu dijaga selama proses optimasi berlangsung.
4. Nilai muatan total serta multiplisitas spin dicantumkan pada blok * xyz sesuai kondisi ionisasi masing-masing molekul agar perhitungan dapat berjalan secara tepat.
5. Seluruh proses optimasi dijalankan melalui terminal dengan memanggil ORCA sesuai nama file input yang telah disiapkan.
6. Setelah perhitungan selesai, file output (.out) diperiksa untuk memastikan bahwa optimasi telah konvergen dan nilai *single point energy* telah berhasil diperoleh.

3.6.7 Perhitungan Energi Ikatan Hidrogen

Energi ikatan hidrogen dihitung menggunakan energi total pasangan molekul dan energi masing-masing monomer yang diperoleh dari file output hasil optimasi geometri. Nilai energi tersebut kemudian digunakan dalam persamaan perhitungan energi ikatan hidrogen. Energi ikatan hidrogen dihitung menggunakan persamaan:

$$E_{HB} = E_{pair} - (E_{donor\ pair} + E_{acceptor\ pair}) + E_{CP}$$

dengan koreksi counterpoise diberikan oleh:

$$E_{CP} = [(E_{donor\ pair} - E_{donor}) - (E_{acceptor\ pair} - E_{acceptor})]$$

3.6.8 Perhitungan Energi Penghalang Transfer Proton

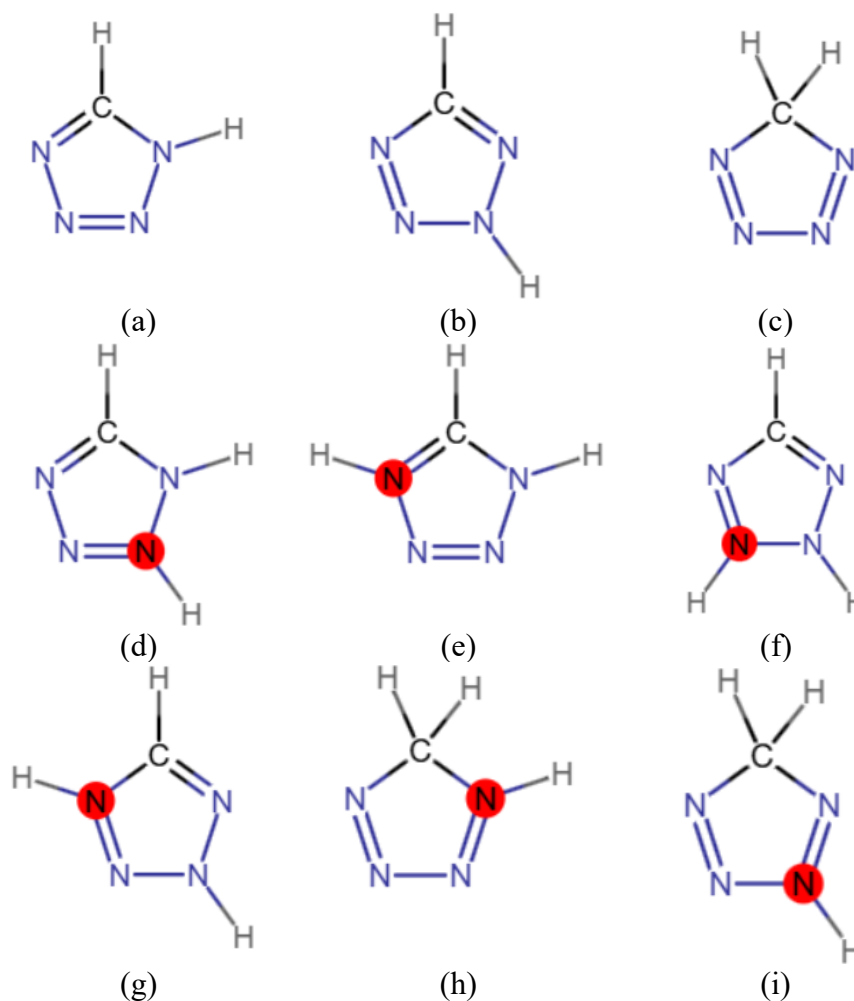
1. Siapkan geometri reaktan dan produk dari optimasi sebelumnya.
2. Pastikan jumlah atom dan urutan atom dalam file reaktan dan produk sama.
3. Buat file (.inp) dengan langkah-langkah berikut:
 - a. Gunakan metode NEB di ORCA 6.0.0 dengan fungsional CAM-B3LYP, basis set 6-311++G **, serta koreksi dispersi DFT-D4 untuk memperoleh struktur geometri minimum dan distribusi elektron pada molekul reaktan dan produk. Perhitungan dijalankan dengan TightSCF. Gunakan NEB-TS untuk mencari geometri transisi melalui jalur energi minimum / MEP. Hitung *zero point energy* dengan freq.
 - b. Dalam blok ! NEB, sertakan file struktur produk dengan kode NEB_END_XYZFILE “nama file produk .xyz” dan Nimages 15 untuk membagi jalur NEB menjadi 15 *intermediate images*.
 - c. Dalam blok ! CPCM, menunjukkan penggunaan model medium implisit CPCM. Setel Epsilon = 80,1 untuk konstanta dielektrik air dan untuk konstanta dielektrik DMSO gunakan $\epsilon = 47,2$.
 - d. Dalam blok %pal, setel nprocs 10 untuk menggunakan 10 *core* CPU guna mempercepat komputasi.
 - e. Dalam blok * xyz 1 1, angka 1 menunjukkan muatan total molekul dan multiplisitas spin secara berurutan. Sertakan “nama file reaktan (.xyz)”

untuk menunjukkan koordinat atom yang digunakan adalah koordinat dari atom reaktan.

4. Jalankan perhitungan di terminal dengan mengarahkan terminal ke folder file (.inp) berada, lalu panggil executable ORCA diikuti nama file (.inp) > nama file (.out).
5. Setelah perhitungan selesai, periksa file (.out) untuk memastikan bahwa perhitungan energi penghalang telah berhasil.

3.7 Pengambilan Data

3.7.1 Energi Relatif



Gambar 3.2 Tautomer tetrazole dan tetrazole terprotonasi, yaitu: (a) Te1, (b) Te2, (c) Te3, (d) TeH¹, (e) TeH², (f) TeH³, (g) TeH⁴, (h) TeH⁵, (i) TeH⁶

Tabel 3.3 Energi relatif tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Tautomer Tetrazole	Energi Relatif (Ev)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
Te1		
Te2		
Te3		

Tabel 3.4 Energi relatif tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Tautomer Tetrazole Terprotonasi	Energi Relatif (eV)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
TeH ⁺ 1		
TeH ⁺ 2		
TeH ⁺ 3		
TeH ⁺ 4		
TeH ⁺ 5		
TeH ⁺ 6		

3.7.2 Selisih Energi HOMO-LUMO

Tabel 3.5 Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	E _{HOMO} (eV)	E _{LUMO} (eV)	Selisih Energi (eV)
Air ($\epsilon = 80,1$)	Te1			
	Te2			
	Te3			
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Te1			
	Te2			
	Te3			

Tabel 3.6 Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole Terprotonasi	E _{HOMO} (eV)	E _{LUMO} (eV)	Selisih Energi (eV)
Air ($\epsilon = 80,1$)	TeH ⁺ 1			
	TeH ⁺ 2			
	TeH ⁺ 3			
	TeH ⁺ 4			
	TeH ⁺ 5			
	TeH ⁺ 6			
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	TeH ⁺ 1			
	TeH ⁺ 2			
	TeH ⁺ 3			
	TeH ⁺ 4			

	TeH ⁺ 5			
	TeH ⁺ 6			

3.7.3 Muatan Atom Mulliken

Tabel 3.7 Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	C1	N1	N2	N3	N4	H1	H2
Air ($\epsilon = 80,1$)	Te1							
	Te2							
	Te3							
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Te1							
	Te2							
	Te3							

Tabel 3.8 Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	C1	N1	N2	N3	N4	H1	H2	H3
Air ($\epsilon = 80,1$)	TeH ⁺ 1								
	TeH ⁺ 2								
	TeH ⁺ 3								
	TeH ⁺ 4								
	TeH ⁺ 5								
	TeH ⁺ 6								
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	TeH ⁺ 1								
	TeH ⁺ 2								
	TeH ⁺ 3								
	TeH ⁺ 4								
	TeH ⁺ 5								
	TeH ⁺ 6								

3.7.4 Rasio Populasi Boltzmann

Tabel 3.9 Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K

Molekul Tetrazole	Populasi Boltzmann (%)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
Te1		
Te2		
Te3		

Tabel 3.10 Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K

Molekul Tetrazole	Populasi Boltzmann (%)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
TeH+1		
TeH+2		
TeH+3		
TeH+4		
TeH+5		
TeH+6		

3.7.5 Pemodelan Pasangan Molekul Tetrazole

Tabel 3.11 Struktur pasangan molekul tetrazole, energi relatif, energi ikatan hidrogen (hydrogen bond energy/HBE) dan jarak donor-akseptor proton (proton donor-acceptor distance/PDAD) pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

No	Medium	Pasangan Molekul	Struktur	Energi Relatif (eV)	HBE (eV)	PDAD (Å)
1	Air ($\epsilon = 80,1$)	Pasangan tetrazole-1				
2		Pasangan tetrazole-2				
3		Pasangan tetrazole-3				
4						
1	DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Pasangan tetrazole-1				
2		Pasangan tetrazole-2				
3		Pasangan tetrazole-3				
4						

3.7.6 Energi Penghalang (*Barrier Energy*) Transfer Proton

Tabel 3.12 Energi penghalang pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO.

No	Medium	Molekul	Struktur	Energi Penghalang	
				Reaktan (eV)	Produk (eV)
1	Air ($\epsilon = 80,1$)	Pasangan tetrazole-1			
2		Pasangan tetrazole-2			
3		Pasangan tetrazole-3			
					
1	DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Pasangan tetrazole-1			
2		Pasangan tetrazole-2			
3		Pasangan tetrazole-3			
4					

BAB IV

HASIL DAN PEMBAHASAN

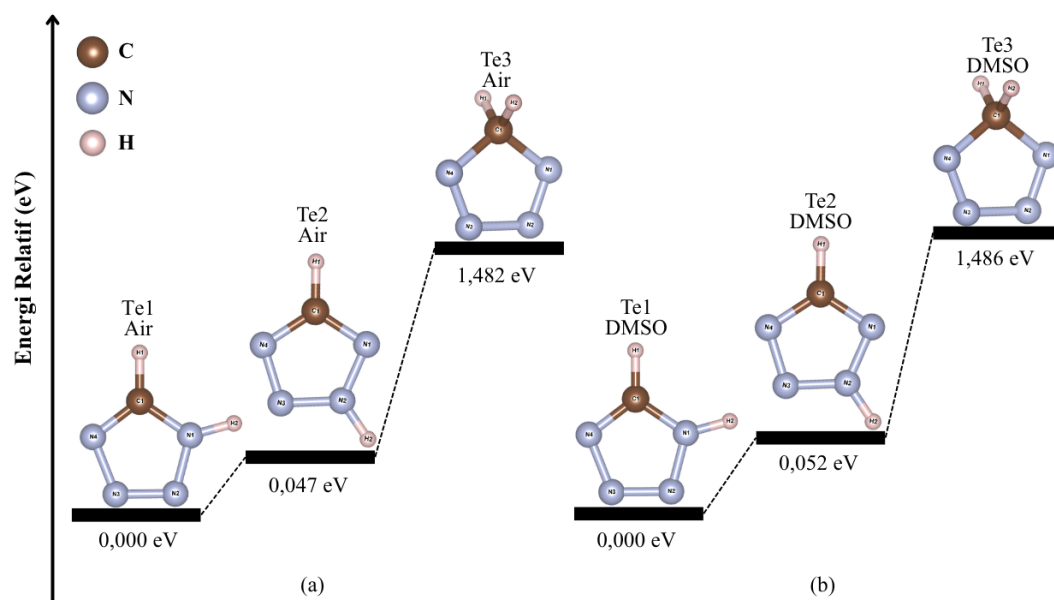
4.1. Hasil Penelitian

Perhitungan energi penghalang (*barrier energy*) transfer proton pada molekul tetrazole dilakukan menggunakan perangkat lunak Orca versi 6.0.0 dengan metode *Density Functional Theory* (DFT) pada tingkat teori B3LYP/6-311++G** serta koreksi dispersi DFT-D4. Perhitungan ini menggunakan medium yang dimodelkan secara implisit menggunakan *Conductor-like Polarizable Continuum Model* (CPCM) dalam dua medium, yaitu air ($\epsilon = 80,1$) dan dimetil sulfoksida (DMSO) ($\epsilon = 46,7$). Kedua medium ini dipilih untuk membandingkan pengaruh medium terhadap transfer proton pada pasangan molekul tetrazole. Energi penghalang dihitung menggunakan metode *Nudged Elastic Band* (NEB). Hasil perhitungan mencakup konfigurasi molekul tetrazole dengan energi terendah, konfigurasi molekul tetrazole terprotonasi dengan energi terendah, dan energi penghalang transfer proton pada pasangan molekul tetrazole.

4.1.1 Konfigurasi Molekul Tetrazole dengan Energi Terendah

Perhitungan energi terendah molekul tetrazole diawali dengan optimasi geometri masing-masing konfigurasinya. Tetrazole memiliki tiga bentuk tautomer dengan rumus kimia yang sama namun susunan atomnya berbeda, yaitu tautomer Te1, Te2 dan Te3. Optimasi geometri ini dilakukan dengan menggunakan metode DFT pada level teori B3LYP/6-311++G** dalam dua jenis medium, yaitu air dan DMSO. Optimasi geometri tautomer tetrazole menghasilkan energi relatif setiap tautomer yang disajikan pada Gambar 4.1. Dari data yang diperoleh, tautomer Te1 menunjukkan energi relatif paling rendah, yaitu 0 eV pada medium air dan DMSO,

diikuti oleh tautomer Te2 dengan energi relatifnya 0,047 eV pada medium air dan 0,052 eV pada medium DMSO. Sementara itu, tautomer Te3 memiliki energi relatif paling tinggi, yaitu 1,482 eV pada medium air dan 1,486 eV pada medium DMSO. Perbedaan energi relatif ini menunjukkan bahwa tingkat stabilitas tautomer tetrazole berbeda-beda, sehingga diperlukan analisis lebih lanjut untuk mengetahui faktor-faktor yang memengaruhi energi masing-masing tautomer.



Gambar 4.1 Energi relatif dari (a) tautomer tetrazole dalam medium air dan (b) tautomer tetrazole dalam medium DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Salah satu parameter yang dapat digunakan untuk menjelaskan perbedaan stabilitas antar tautomer ini adalah selisih energi HOMO-LUMO. Nilai selisih energi ini diperoleh dengan menghitung perbedaan energi antara energi HOMO dan energi LUMO yang didapatkan dari *file output* hasil optimasi geometri. Adapun hasil perhitungan selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole ditunjukkan pada Tabel 4.1. Berdasarkan Tabel 4.1, tautomer Te1 memiliki selisih energi HOMO-LUMO paling besar, yaitu 10,903 eV (air) dan 10,899 eV (DMSO). Tautomer Te2 berada di urutan berikutnya dengan selisih energi sebesar 10,589 eV

pada kedua medium. Sementara itu, tautomer Te3 menunjukkan selisih energi yang lebih kecil, yaitu 8,123 eV pada medium air dan 8,121 eV pada medium DMSO.

Tabel 4.1 Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	Selisih Energi (eV)
Air ($\epsilon = 80,1$)	Te1	-10,388	0,515	10,903
	Te2	-10,381	0,208	10,589
	Te3	-9,351	-1,228	8,123
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Te1	-10,384	0,515	10,899
	Te2	-10,381	0,208	10,589
	Te3	-9,349	-1,228	8,121

Selain selisih energi HOMO-LUMO, urutan stabilitas tautomer tetrazole juga dapat dijelaskan menggunakan muatan atom Mulliken (*Mulliken atomic charges*). Nilai muatan atom Mulliken menunjukkan distribusi muatan pada setiap atom penyusun tautomer tetrazole. Adapun hasil perhitungan muatan atom Mulliken tautomer tetrazole ditunjukkan pada Tabel 4.2 berikut:

Tabel 4.2 Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	Muatan Atom Mulliken (e)						
		C1	N1	N2	N3	N4	H1	H2
Gas ($\epsilon = 0$)	Te1	-0,082	-0,162	-0,045	-0,344	-0,192	0,176	0,338
	Te2	-0,034	-0,151	-0,058	0,007	-0,190	0,183	0,354
	Te3	-0,455	-0,085	0,074	0,073	-0,084	0,238	0,238
Air ($\epsilon = 80,1$)	Te1	-0,063	-0,141	-0,086	-0,094	-0,269	0,241	0,413
	Te2	-0,131	-0,218	-0,005	-0,050	-0,252	0,232	0,424
	Te3	-0,460	-0,089	0,029	0,027	-0,087	0,290	0,290
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Te1	-0,063	-0,141	-0,086	-0,093	-0,268	0,240	0,412
	Te2	-0,131	-0,217	-0,005	-0,050	-0,251	0,232	0,423
	Te3	-0,460	-0,089	0,029	0,028	-0,087	0,289	0,290

Berdasarkan tabel tersebut, muatan negatif paling besar pada tautomer Te1 terdapat pada atom N4, yaitu -0,25 e (air) dan -0,249 e (DMSO). Pada tautomer Te2, muatan negatif paling besar juga terdapat pada atom N4, yaitu -0,252 e (air) dan -0,251 e

(DMSO). Berbeda dengan Te1 dan Te2, muatan negatif paling besar pada tautomer Te3 terdapat pada atom C1, yaitu $-0,460 e$ di kedua medium.

Keberadaan tautomer tetrazole dalam sistem eksperimen selanjutnya dapat diketahui melalui perhitungan rasio populasi Boltzmann. Perhitungan ini dilakukan untuk mengetahui ketersediaan masing-masing tautomer tetrazole pada eksperimen dengan temperatur 500 K. Temperatur ini dipilih karena *fuel cell* beroperasi pada suhu tinggi. Rasio populasi dihitung menggunakan persamaan Boltzmann (persamaan 2.28) berdasarkan energi relatif masing-masing tautomer yang telah diperoleh pada Gambar 4.1. Adapun hasil perhitungan rasio populasi Boltzmann terdapat pada Tabel 4.3 berikut:

Tabel 4.3 Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K

Tautomer Tetrazole	Populasi Boltzmann (%)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
Te1	100	100
Te2	33,237	29,901
Te3	$1,160 \times 10^{-13}$	$1,057 \times 10^{-13}$

Tabel 4.3 menunjukkan bahwa tautomer Te1 memiliki nilai rasio populasi Boltzmann paling besar, yaitu 100% pada kedua medium. Sedangkan, tautomer Te2 hanya memiliki nilai populasi sebesar 33,237% pada medium air dan 29,901% pada medium DMSO. Sementara itu, tautomer Te3 menunjukkan nilai populasi yang sangat kecil, yaitu $1,160 \times 10^{-13}\%$ pada medium air dan $1,057 \times 10^{-13}\%$ pada medium DMSO. Nilai populasi yang sangat kecil pada tautomer Te3 menunjukkan bahwa keberadaan tautomer ini pada eksperimen sangat rendah dibandingkan tautomer Te1 dan Te2.

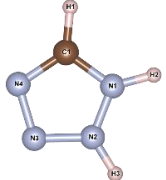
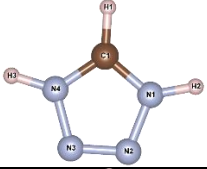
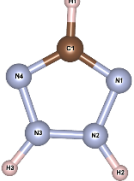
Dalam penelitian ini, tautomer dengan rasio populasi Boltzmann minimal 20% dianggap tersedia dalam sistem eksperimen, sehingga hanya tautomer Te1 dan

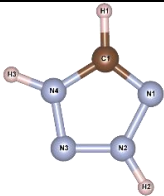
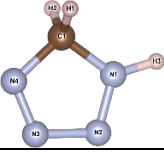
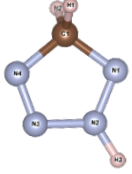
Te2 yang memenuhi kriteria tersebut. Hal ini juga didukung oleh hasil analisis stabilitas energi yang menunjukkan bahwa Te1 dan Te2 memiliki energi relatif yang lebih rendah, selisih energi HOMO-LUMO lebih besar, serta tolakan pasangan elektron bebas yang lebih kecil dibandingkan Te3. Oleh karena itu, tautomer Te1 dan Te2 dipilih sebagai akseptor dalam mekanisme transfer proton.

4.1.2 Konfigurasi Molekul Tetrazole Terprotonasi dengan Energi Terendah

Perhitungan energi terendah molekul tetrazole diawali dengan optimasi geometri masing-masing strukturnya. Tautomer tetrazole terprotonasi merupakan bentuk dari tautomer tetrazole yang memperoleh penambahan satu proton (H^+) pada atom nitrogennya. Protonasi ini menghasilkan 6 bentuk tautomer, yaitu tautomer TeH^+1 , TeH^+2 , TeH^+3 , TeH^+4 , TeH^+5 , dan TeH^+6 . Optimasi geometri dilakukan dengan menggunakan metode DFT pada level teori B3LYP/6-311++G** dalam dua jenis medium, yaitu air dan DMSO. Optimasi geometri ini menghasilkan energi relatif setiap tautomer yang disajikan pada Tabel 4.4 berikut:

Tabel 4.4 Energi relatif tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Tautomer Tetrazole Terprotonasi	Struktur	Energi Relatif (eV)	
		Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
TeH^+1		0,574	0,578
TeH^+2		0,000	0,000
TeH^+3		0,660	0,663

TeH^+4		0,147	0,147
TeH^+5		2,343	2,348
TeH^+6		2,184	2,186

Berdasarkan Tabel 4.4, tautomer TeH^+2 menunjukkan energi relatif paling rendah, yaitu 0 eV pada medium air dan DMSO, diikuti oleh tautomer TeH^+4 dengan energi relatifnya 0,147 eV pada kedua medium. Sementara itu, tautomer TeH^+5 menunjukkan energi relatif paling tinggi, yaitu 2,343 eV (air) dan 2,348 eV (DMSO). Perbedaan energi relatif ini menunjukkan bahwa tingkat stabilitas tautomer tetrazole terprotonasi berbeda-beda, sehingga diperlukan analisis lebih lanjut untuk mengetahui faktor-faktor yang memengaruhi energi masing-masing tautomer.

Salah satu parameter yang dapat digunakan untuk menjelaskan perbedaan stabilitas antar tautomer ini adalah selisih energi HOMO-LUMO. Nilai selisih energi ini diperoleh dengan menghitung perbedaan energi antara energi HOMO dan energi LUMO yang didapatkan dari file output hasil optimasi geometri. Adapun hasil perhitungan selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole terprotonasi ditunjukkan pada Tabel 4.5. Berdasarkan tabel tersebut, tautomer TeH^+2 memiliki selisih energi HOMO-LUMO paling besar pada medium air dan DMSO, yaitu 11,467 eV pada medium air dan 11,465 eV pada medium DMSO. Tautomer TeH^+4 berada di urutan berikutnya dengan selisih energi sebesar 10,672 eV pada kedua

medium. Sementara itu, selisih energi paling kecil terdapat pada tautomer TeH^+5 , yaitu 7,971 eV pada medium air dan 7,966 eV pada medium DMSO.

Tabel 4.5 Selisih energi HOMO-LUMO tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole Terprotonasi	E_{HOMO} (eV)	E_{LUMO} (eV)	Selisih Energi (eV)
Air ($\epsilon = 80,1$)	TeH^+1	-11,590	-1,457	10,132
	TeH^+2	-12,023	-0,557	11,467
	TeH^+3	-11,834	-1,713	10,122
	TeH^+4	-11,947	-1,275	10,672
	TeH^+5	-11,421	-3,450	7,971
	TeH^+6	-11,689	-3,015	8,674
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	TeH^+1	-11,630	-1,504	10,125
	TeH^+2	-12,064	-0,599	11,465
	TeH^+3	-11,879	-1,760	10,119
	TeH^+4	-11,993	-1,321	10,672
	TeH^+5	-11,463	-3,497	7,966
	TeH^+6	-11,726	-3,043	8,683

Selain selisih energi HOMO-LUMO, urutan stabilitas tautomer tetrazole terprotonasi juga dapat dijelaskan menggunakan muatan atom Mulliken (*Mulliken atomic charges*). Nilai muatan atom Mulliken menunjukkan distribusi muatan pada setiap atom penyusun tautomer tetrazole. Adapun hasil perhitungan muatan atom Mulliken tautomer tetrazole ditunjukkan pada Tabel 4.6. Berdasarkan Tabel 4.6, muatan negatif paling besar pada tautomer TeH^+1 terdapat pada atom N1, yaitu -0,344 (air) dan -0,154 (DMSO). Pada tautomer TeH^+2 , muatan negatif paling besar terdapat pada atom N1, yaitu -0,179 (air) dan -0,178 (DMSO). Pada tautomer TeH^+3 , muatan negatif paling besar terdapat pada atom C1, yaitu -0,136 (air) dan -0,135 (DMSO). Pada tautomer TeH^+4 , muatan negatif paling besar terdapat pada atom N2, yaitu -0,103 (air) dan -0,102 (DMSO). Pada tautomer TeH^+5 , muatan negatif paling besar terdapat pada atom N1, yaitu -0,461 pada kedua medium.

Sementara itu, pada tautomer TeH^+6 , muatan negatif paling besar terdapat pada atom N1, yaitu -0,498 pada kedua medium.

Tabel 4.6 Muatan atom Mulliken tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

Medium	Tautomer Tetrazole	Muatan Atom Mulliken (e)							
		C1	N1	N2	N3	N4	H1	H2	H3
Gas ($\epsilon = 0$)	TeH^+1	-0,046	-0,098	-0,011	0,137	-0,098	0,271	0,413	0,432
	TeH^+2	-0,037	-0,141	0,141	-0,032	-0,046	0,267	0,415	0,433
	TeH^+3	0,037	-0,144	0,067	0,068	-0,144	0,270	0,423	0,423
	TeH^+4	-0,109	-0,045	0,030	0,030	-0,045	0,433	0,433	0,271
	TeH^+5	-0,037	-0,046	-0,032	0,141	-0,140	0,267	0,433	0,415
	TeH^+6	-0,459	-0,082	0,223	0,226	0,016	0,328	0,328	0,420
Air ($\epsilon = 80,1$)	TeH^+1	-0,344	0,008	-0,104	0,434	0,021	0,311	0,311	0,363
	TeH^+2	-0,179	0,026	-0,163	0,095	0,446	0,287	-0,036	0,523
	TeH^+3	-0,136	-0,119	-0,136	0,064	0,063	0,286	0,489	0,489
	TeH^+4	0,468	-0,042	-0,103	-0,052	0,133	0,285	-0,142	0,453
	TeH^+5	0,009	-0,461	-0,041	0,214	0,089	0,361	0,361	0,469
	TeH^+6	-0,030	-0,498	0,070	0,105	0,144	0,362	0,363	0,484
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	TeH^+1	-0,154	-0,069	-0,076	0,029	0,022	0,292	0,470	0,486
	TeH^+2	-0,178	0,026	-0,163	0,095	0,446	0,287	-0,036	0,522
	TeH^+3	-0,135	-0,119	-0,135	0,063	0,062	0,286	0,489	0,489
	TeH^+4	0,468	-0,042	-0,102	-0,052	0,133	0,285	-0,142	0,453
	TeH^+5	0,010	-0,461	-0,042	0,214	0,090	0,360	0,360	0,468
	TeH^+6	-0,030	-0,498	0,071	0,105	0,144	0,362	0,362	0,483

Keberadaan tautomer tetrazole dalam sistem eksperimen selanjutnya dapat diketahui melalui perhitungan rasio populasi Boltzmann. Perhitungan ini dilakukan untuk mengetahui ketersediaan masing-masing tautomer tetrazole pada eksperimen dengan temperatur 500 K. Temperatur ini dipilih karena *fuel cell* beroperasi pada suhu tinggi. Rasio populasi dihitung menggunakan persamaan Boltzmann (Persamaan 2.28) berdasarkan energi relatif masing-masing tautomer yang telah diperoleh pada Tabel 4.4. Hasil perhitungan rasio populasi Boltzmann ditunjukkan pada Tabel 4.7. Tabel 4.7 menunjukkan bahwa tautomer TeH^+2 memiliki nilai rasio populasi Boltzmann paling besar, yaitu 100% pada kedua medium. Sedangkan,

tautomer TeH^+5 menunjukkan nilai populasi yang sangat kecil, yaitu $2,393 \times 10^{-22}\%$ pada medium air dan $2,176 \times 10^{-22}\%$ pada medium DMSO. Nilai populasi yang sangat besar pada tautomer TeH^+2 menunjukkan bahwa keberadaan tautomer ini pada eksperimen sangat tinggi dibandingkan tautomer lainnya.

Tabel 4.7 Rasio populasi Boltzmann tautomer tetrazole terprotonasi pada medium air dan DMSO dalam temperatur 500 K

Tautomer Tetrazole Terprotonasi	Populasi Boltzmann (%)	
	Air ($\epsilon = 80,1$)	DMSO ($\epsilon = 47,2$)
TeH^+1	$1,653 \times 10^{-4}$	$1,476 \times 10^{-4}$
TeH^+2	100	100
TeH^+3	$2,231 \times 10^{-5}$	$2,097 \times 10^{-5}$
TeH^+4	3,324	3,283
TeH^+5	$2,393 \times 10^{-22}$	$2,176 \times 10^{-22}$
TeH^+6	$9,588 \times 10^{-21}$	$9,337 \times 10^{-21}$

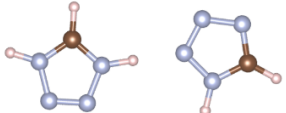
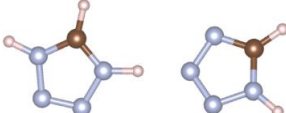
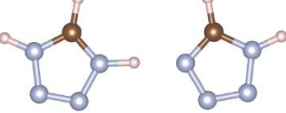
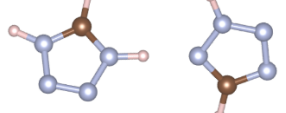
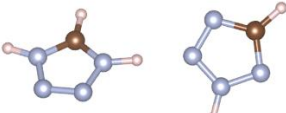
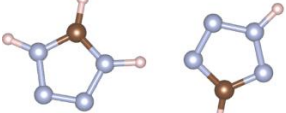
Dalam penelitian ini, tautomer dengan rasio populasi Boltzmann minimal 20% dianggap tersedia dalam sistem eksperimen, sehingga hanya tautomer TeH^+2 yang memenuhi kriteria tersebut. Hal ini juga didukung oleh hasil analisis stabilitas energi yang menunjukkan bahwa TeH^+2 memiliki energi relatif yang lebih rendah, selisih energi HOMO-LUMO lebih besar dibandingkan tautomer tetrazole terprotonasi lainnya. Oleh karena itu, tautomer TeH^+2 dipilih sebagai donor dalam mekanisme transfer proton.

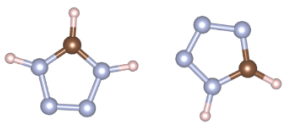
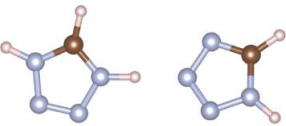
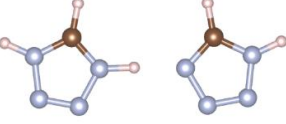
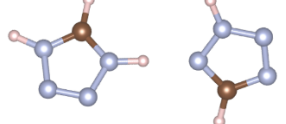
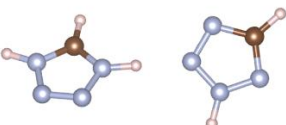
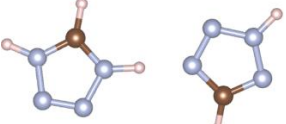
4.1.3 Energi Penghalang Transfer Proton pada Pasangan Molekul Tetrazole

Perhitungan energi penghalang transfer proton pasangan molekul tetrazole diawali dengan optimasi geometri struktur pasangan tetrazole untuk mendapatkan energi relatif masing-masing pasangan molekul. Pasangan molekul tetrazole dibentuk dari kombinasi tautomer tetrazole, yaitu Te1 dan Te2 sebagai molekul akseptor proton, serta tautomer tetrazole terprotonasi, yaitu TeH^+2 sebagai molekul donor proton berdasarkan hasil analisis sebelumnya. Pasangan molekul Te1 dan TeH^+2 menghasilkan 3 variasi pasangan molekul, yaitu pasangan molekul 1, 2 dan

3. Sedangkan pasangan molekul Te_2 dan TeH^+_2 juga menghasilkan 3 variasi pasangan molekul tetrazole, yaitu pasangan molekul 4, 5 dan 6. Perhitungan dilakukan dengan menggunakan metode DFT pada level teori B3LYP/6-311++G** dalam dua jenis medium, yaitu air dan DMSO. Selain energi relatif, dihitung pula energi ikatan hidrogen (*hydrogen bond energy* / HBE) menggunakan Persamaan 2.26 dan 2.27, serta jarak donor-akseptor proton (*proton donor-acceptor distance*/PDAD). Hasil optimasi seluruh pasangan molekul tetrazole ditunjukkan pada Tabel 4.8 berikut:

Tabel 4.8 Struktur pasangan molekul tetrazole, energi relatif, energi ikatan hidrogen (*hydrogen bond energy*/HBE) dan jarak donor-akseptor proton (*proton donor-acceptor distance*/PDAD) pada medium air dan DMSO. Perhitungan dilakukan pada level teori B3LYP/6-311++G**.

No	Medium	Pasangan Molekul	Struktur	Energi Relatif (eV)	HBE (eV)	PDAD (Å)
1	Air ($\epsilon = 80,1$)		Asimetris	0,121	-0,318	2,791
2			Asimetris	0,030	-0,415	2,721
3			Simetris	0,000	-0,443	2,703
4			Asimetris	0,176	-0,327	2,783
5			Asimetris	0,187	-0,315	2,798
6			Asimetris	0,082	-0,424	2,714

1	DMSO ($\epsilon = 47,2$)		Asimetris	0,120	-0,326	2,787
2			Asimetris	0,025	-0,428	2,720
3			Simetris	0,000	-0,451	2,701
4			Asimetris	0,179	-0,329	2,782
5			Asimetris	0,189	-0,320	2,805
6			Asimetris	0,079	-0,426	2,713

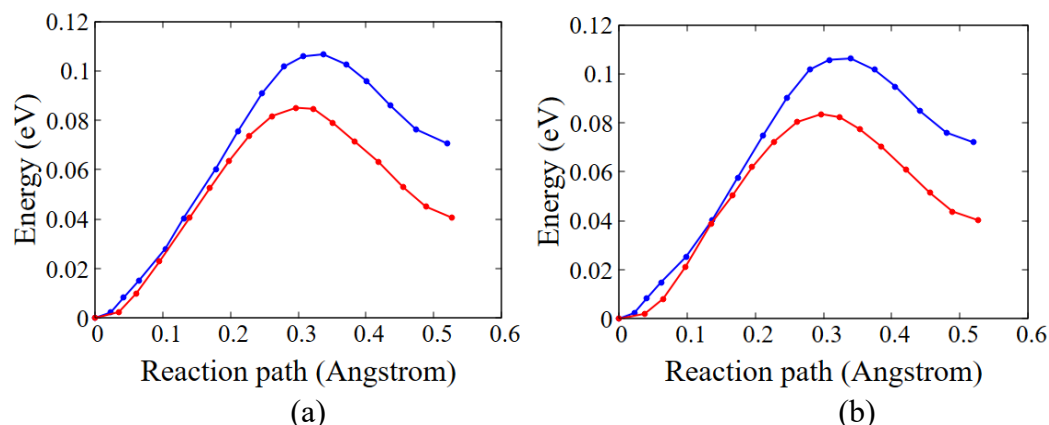
Berdasarkan tabel tersebut, struktur pasangan molekul 3 merupakan satu-satunya pasangan molekul simetris, sedangkan pasangan lainnya merupakan pasangan asimetris. Dari seluruh konfigurasi pasangan, pasangan molekul 3 memiliki energi relatif terendah, yaitu 0 eV pada kedua medium, diikuti oleh pasangan molekul 2 dan 6 dengan energi relatifnya masing-masing 0,030 eV (air) dan 0,025 eV (DMSO) serta 0,082 eV (air) dan 0,079 eV (DMSO). Energi relatif terendah pada pasangan 3 menjadikan pasangan ini pasangan paling stabil daripada pasangan lainnya. Nilai HBE seluruh pasangan bernilai negatif dengan nilai negatif paling besar terdapat pada pasangan molekul 3, yaitu -0,443 eV (air) dan -0,451 eV (DMSO). Diikuti oleh pasangan molekul 2 sebesar -0,415 eV (air) dan -0,428 eV (DMSO) dan pasangan molekul 6 sebesar -0,424 eV (air) dan -0,426 eV (DMSO). Selain itu, nilai PDAD seluruh pasangan molekul berada pada rentang 2,701 - 2,805 Å, di mana

jarak paling pendek terdapat pada pasangan molekul 3, yaitu 2,703 Å (air) dan 2,701 Å (DMSO). Kemudian diikuti oleh pasangan molekul 2 dan 6 yang juga memiliki jarak pendek, yaitu 2,721 Å (air) dan 2,720 Å (DMSO) pada pasangan 2 serta 2,714 Å (air) dan 2,713 Å (DMSO) pada pasangan 6. Berdasarkan hasil tersebut, pasangan molekul 2, 3, dan 6 merupakan pasangan paling stabil sehingga dipilih untuk dilakukan perhitungan energi penghalang transfer proton selanjutnya.

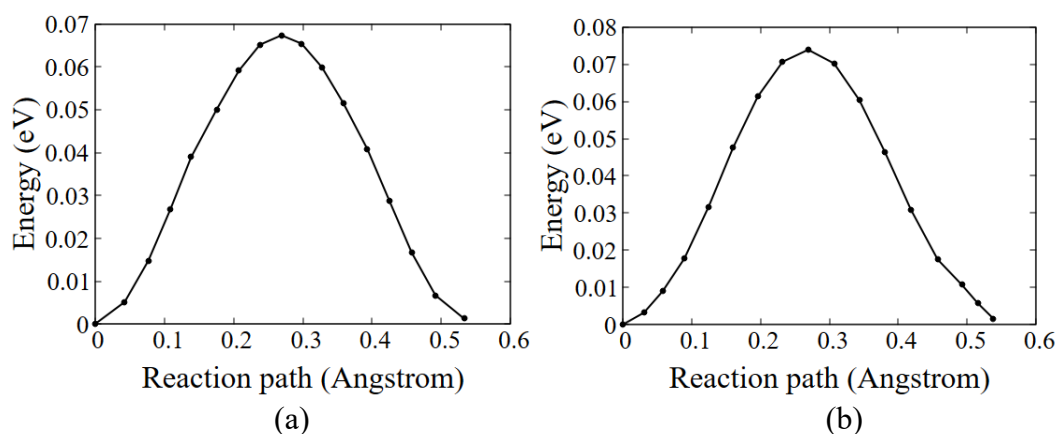
Salah satu faktor yang sangat memengaruhi proses transfer proton adalah energi penghalang (*barrier energy*), di mana semakin besar energi penghalang maka semakin sulit proton untuk berpindah. Energi penghalang diperoleh dari selisih antara energi keadaan transisi (*transition state*) dengan energi reaktan dan produk. Dalam penelitian ini, lintasan energi minimum dibagi menjadi 15 *images* dan digunakan tiga pasangan molekul tetrazole paling stabil, yaitu pasangan molekul 2 (asimetris), 3 (simetris) dan 6 (asimetris). Adapun jalur reaksi transfer proton pasangan molekul tetrazole ditunjukkan oleh Gambar 4.2 dan 4.3, mekanisme transfer proton ditunjukkan pada Gambar 4.4, sementara hasil perhitungan energi penghalang transfer proton pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO ditunjukkan pada Tabel 4.9.

Berdasarkan Gambar 4.2, jalur reaksi transfer proton pasangan asimetris pada medium air maupun DMSO tidak menunjukkan banyak perbedaan. Pada medium air, keadaan transisi pasangan molekul 2 terjadi pada *image* ke-10 dengan energi transisi 0,101 eV. Sedangkan pada pasangan 6, keadaan transisi terjadi pada *image* ke-9 dengan energi transisi 0,085 eV. Pada medium DMSO, keadaan transisi pasangan molekul 2 terjadi pada *image* ke-11 dengan energi transisi 0,106 eV. Sedangkan keadaan transisi pasangan 6 terjadi pada *image* ke-9 dengan energi

transisi 0,084 eV. Hal ini menunjukkan bahwa jalur reaksi pasangan asimetris 6 memiliki energi transisi yang lebih rendah dibandingkan pasangan 2 pada kedua medium.

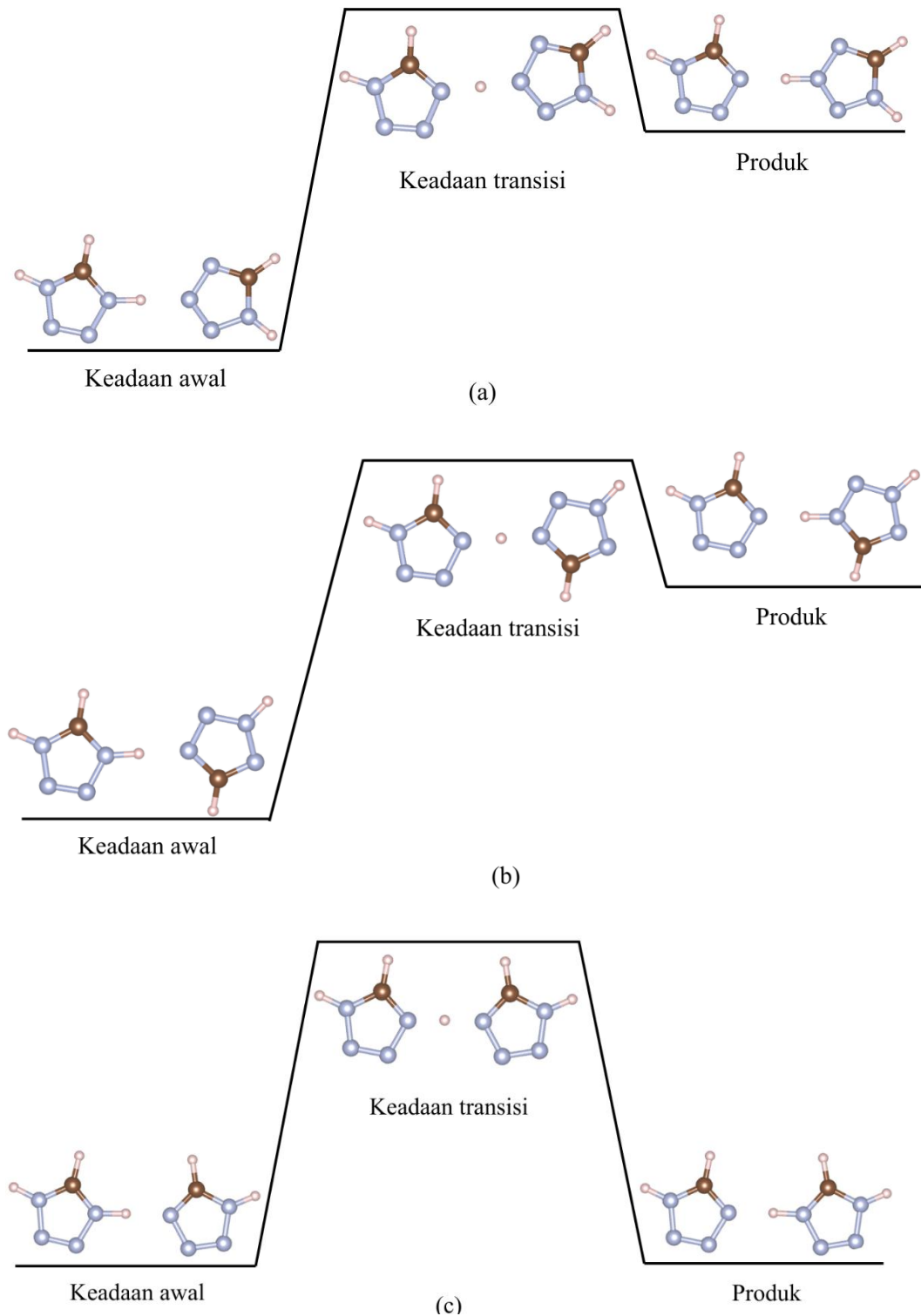


Gambar 4.2 Jalur reaksi transfer proton pada struktur asimetris pasangan molekul 2 (kurva biru) dan 6 (kurva merah) pada (a) medium air ($\epsilon = 80,1$) dan (b) medium DMSO ($\epsilon = 47,2$)



Gambar 4.3 Jalur reaksi transfer proton pada struktur simetris pasangan molekul 3 pada (a) medium air ($\epsilon = 80,1$) dan (b) medium DMSO ($\epsilon = 47,2$)

Berdasarkan Gambar 4.3, jalur reaksi transfer proton pasangan simetris pada medium air maupun DMSO menunjukkan adanya perbedaan energi transisi. Pada medium air, keadaan transisi pasangan molekul 3 terjadi pada *image* ke-8 dengan energi transisi 0,067 eV. Sedangkan pada pasangan medium DMSO, keadaan transisi terjadi pada *image* ke-8 dengan energi transisi 0,074 eV. Perbedaan energi transisi antara pasangan asimetris dan simetris ini selanjutnya dapat dikonfirmasi melalui hasil perhitungan energi penghalang pada Tabel 4.9.



Gambar 4.4 Mekanisme transfer proton pada (a) pasangan molekul asimetris 2, (b) pasangan asimetris molekul 6, dan (c) pasangan simetris molekul 3. Keadaan awal merupakan kondisi sebelum transfer proton, keadaan dengan energi tertinggi dalam jalur reaksi merupakan keadaan transisi dan keadaan akhir disebut produk.

Tabel 4.9 Energi penghalang pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO.

Medium	Molekul	Struktur	Energi Penghalang	
			Reaktan (eV)	Produk (eV)
Air ($\epsilon = 80,1$)	Pasangan molekul 2	Asimetris	0,107	0,036
	Pasangan molekul 3	Simetris	0,067	0,066
	Pasangan molekul 6	Asimetris	0,085	0,044
DMSO ($\epsilon = 47,2$)	Pasangan molekul 2	Asimetris	0,106	0,034
	Pasangan molekul 3	Simetris	0,074	0,072
	Pasangan molekul 6	Asimetris	0,084	0,043

Berdasarkan Tabel 4.9, pasangan molekul 2 memiliki energi penghalang reaktan paling besar pada kedua medium, yaitu 0,107 eV (air) dan 0,106 eV (DMSO). Pasangan 2 juga memiliki energi penghalang produk paling kecil, yaitu 0,036 eV (air) dan 0,034 eV (DMSO). Sementara, pasangan molekul 3 memiliki energi penghalang reaktan dan produk yang berdekatan, yaitu 0,067 eV (air) dan 0,074 eV (DMSO) untuk energi penghalang reaktan serta 0,066 eV (air) dan 0,072 eV (DMSO) untuk energi penghalang produk. Sedangkan, pasangan molekul 6 memiliki energi penghalang reaktan yang lebih kecil dari pasangan 2, yaitu 0,085 eV (air) dan 0,084 eV (DMSO), serta energi penghalang produk yang lebih kecil dari pasangan 3, yaitu 0,044 eV (air) dan 0,043 eV (DMSO).

4.2. Pembahasan

4.2.1 Konfigurasi Molekul Tetrazole dengan Energi Terendah

Hasil optimasi geometri tautomer tetrazole menunjukkan bahwa tautomer Te1 merupakan konfigurasi paling stabil di antara tautomer tetrazole lainnya, baik dalam medium air maupun DMSO. Hal ini ditunjukkan oleh energi relatif Te1 yang paling rendah, yaitu 0 eV pada kedua medium. Stabilitas tautomer Te1 yang lebih tinggi dibandingkan Te2 dan Te3 ini dipengaruhi oleh adanya pengaruh dari medium. Hasil ini sejalan dengan penelitian oleh Khabazi & Alireza (2023), yang

menyatakan bahwa tautomer Te1 adalah bentuk tetrazole yang paling stabil dalam medium dengan konstanta dielektrik tinggi, sedangkan dalam fase gas, tautomer Te2 justru menunjukkan stabilitas yang lebih tinggi dibandingkan Te1.

Perbedaan stabilitas antar tautomer ini dapat dijelaskan melalui selisih energi HOMO-LUMO. Selisih energi HOMO-LUMO merupakan energi yang diperlukan agar elektron dapat berpindah dari orbital molekul terisi tertinggi (*Highest Occupied Molecular Orbital* / HOMO) ke orbital molekul kosong terendah (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital* / LUMO). Selisih energi ini berhubungan langsung dengan stabilitas molekul, di mana semakin besar selisih energinya, semakin sulit elektron untuk berpindah, sehingga menjadikan molekul lebih stabil dan kurang reaktif (Antogia et al., 2025). Berdasarkan Tabel 4.1, tautomer Te1 memiliki selisih energi HOMO-LUMO terbesar dibandingkan Te2 dan Te3 pada kedua medium. Hal ini menunjukkan bahwa selisih energi HOMO-LUMO yang besar pada Te1 menyebabkan perpindahan elektron menjadi lebih sulit terjadi, sehingga tautomer ini memiliki stabilitas yang lebih tinggi dibandingkan Te2 dan Te3. Hasil ini juga sesuai dengan energi relatifnya, di mana tautomer Te1 dengan selisih energi HOMO-LUMO paling besar memiliki energi relatif paling rendah dan menjadi bentuk yang paling stabil dalam medium air dan DMSO.

Selain selisih energi HOMO-LUMO, perbedaan stabilitas antar tautomer juga dapat dijelaskan melalui distribusi muatan atom. Salah satu faktor yang memengaruhi distribusi muatan ini adalah posisi atom hidrogen dalam strukturnya. Ketika atom hidrogen berikatan dengan atom nitrogen, sebagian elektron di sekitar nitrogen tersebut digunakan untuk membentuk ikatan, sehingga kerapatan elektron di atom tersebut berkurang dan distribusi elektron dalam cincin tetrazole berubah

(Wieczorkiewicz et al., 2024). Kondisi ini dapat distabilkan melalui interaksi elektrostatik dengan medium polar, seperti air dan DMSO, di mana ujung medium yang bermuatan negatif akan tertarik mendekati atom yang bermuatan positif, sedangkan ujung medium yang bermuatan positif akan tertarik ke atom yang bermuatan negatif (Khabazi & Alireza, 2023).

Pada Te1, ikatan N-H pada N1 menyebabkan pasangan elektron bebas antara N1 dengan N2 dan C1 berkurang. Akibatnya, terdapat muatan negatif yang besar di sekitar N3 dan N4 akibat pasangan elektron bebas yang besar, sementara di sekitar atom H bermuatan positif. Distribusi muatan yang tidak merata ini menjadikan Te1 sangat polar dan interaksinya dengan medium lebih kuat, sehingga Te1 menjadi lebih stabil. Pada Te2, ikatan N-H pada N2 menyebabkan pasangan elektron bebas antara N2 dengan N1 dan N3 berkurang, namun muatan yang terbentuk tidak terkonsentrasi pada satu sisi, melainkan lebih tersebar secara merata dalam molekul. Kondisi ini menyebabkan polaritas Te2 lebih kecil dibandingkan Te1, sehingga interaksi elektrostatik dengan medium menjadi lebih lemah dan stabilitasnya lebih rendah daripada Te1. Sementara itu, pada Te3 atom hidrogen justru berikatan dengan C1. Hal ini menyebabkan atom C1 bermuatan negatif cukup besar, sedangkan atom H bermuatan positif, sehingga terdapat polarisasi. Namun, polarisasi ini hanya terdapat pada ikatan C-H dan tidak terdistribusi dengan baik ke cincin tetrazole. Akibatnya, distribusi muatan menjadi kurang optimal dan interaksi dengan medium polar menjadi lebih lemah, sehingga stabilitas Te3 lebih rendah dibandingkan tautomer lainnya.

Keberadaan tautomer tetrazole dalam sistem eksperimen selanjutnya dapat diketahui melalui perhitungan rasio populasi Boltzmann. Perhitungan ini dilakukan

untuk mengetahui ketersediaan masing-masing tautomer tetrazole pada eksperimen dengan temperatur 500 K. Temperatur ini dipilih karena *fuel cell* beroperasi pada suhu tinggi. Berdasarkan persamaan Boltzmann, tautomer dengan energi relatif lebih rendah memiliki populasi yang lebih besar karena tautomer tersebut lebih stabil dan lebih mudah ditemukan pada kondisi kesetimbangan (Claramunt et al., 2024). Berdasarkan Gambar 4.1, tautomer Te1 memiliki rasio populasi Boltzmann paling besar karena memiliki energi relatif paling rendah. Sedangkan Te3 menunjukkan populasi yang sangat kecil karena memiliki energi relatif paling tinggi, sehingga hanya sedikit tautomer Te3 yang tersedia dalam eksperimen pada temperatur 500 K. Hal ini menunjukkan bahwa semakin tinggi energi relatif suatu tautomer, maka semakin kecil kemungkinan tautomer tersebut tersedia dalam sistem. Selain itu, hanya tautomer Te1 dan Te2 yang memenuhi kriteria rasio populasi Boltzmann minimal 20%. Oleh karena itu, tautomer Te1 dan Te2 dipilih sebagai akseptor dalam mekanisme transfer proton.

Berdasarkan analisis di atas, didapatkan bahwa tautomer Te1 merupakan tautomer paling stabil, baik pada medium air maupun DMSO. Hal ini ditandai dengan energi paling rendah, molekul yang kurang reaktif berdasarkan selisih energi HOMO-LUMO dan muatan atom Mulliken. Selain itu, keberadaan medium dapat memengaruhi stabilitas tautomer tetrazole, di mana stabilitas tautomer pada fase medium berbeda dengan fase gas. Meskipun medium air dan DMSO memiliki konstanta dielektrik yang berbeda, keduanya menunjukkan konfigurasi molekul tetrazole dengan energi terendah atau stabilitas yang sama. Hasil ini menunjukkan bahwa perbedaan konstanta dielektrik pada medium tidak mempengaruhi stabilitas

tautomer, sehingga tautomer Te1 merupakan tautomer yang paling stabil, baik pada medium air maupun DMSO.

4.2.2 Konfigurasi Molekul Tetrazole Terprotonasi dengan Energi Terendah

Hasil optimasi geometri menunjukkan bahwa tautomer TeH^{+2} memiliki energi relatif paling rendah daripada tautomer tetrazole terprotonasi lainnya, baik dalam medium air maupun DMSO, sehingga menjadikan TeH^{+2} merupakan tautomer tetrazole terprotonasi paling stabil. Sementara itu, tautomer TeH^{+5} menunjukkan energi relatif paling tinggi. Energi relatif yang tinggi pada tautomer TeH^{+5} menunjukkan bahwa tautomer ini merupakan tautomer yang kurang stabil dibandingkan tautomer tetrazole terprotonasi lainnya.

Perbedaan stabilitas antar tautomer ini dapat dijelaskan melalui selisih energi HOMO-LUMO. Selisih energi HOMO-LUMO merupakan energi yang diperlukan agar elektron dapat berpindah dari orbital molekul terisi tertinggi (*Highest Occupied Molecular Orbital* / HOMO) ke orbital molekul kosong terendah (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital* / LUMO). Selisih energi ini berhubungan langsung dengan stabilitas molekul, di mana semakin besar selisih energinya, semakin sulit elektron untuk berpindah, sehingga menjadikan molekul lebih stabil dan kurang reaktif (Antogia et al., 2025). Berdasarkan Tabel 4.5 Tautomer TeH^{+2} memiliki selisih energi HOMO-LUMO terbesar di antara tautomer tetrazole terprotonasi lainnya pada kedua medium, diikuti oleh TeH^{+4} , sementara TeH^{+5} menunjukkan selisih energi terkecil. Hal ini menunjukkan bahwa selisih energi HOMO-LUMO yang besar pada TeH^{+2} menyebabkan perpindahan elektron menjadi lebih sulit terjadi, sehingga tautomer ini memiliki stabilitas yang lebih tinggi dibandingkan tautomer lainnya. Hasil ini juga sesuai dengan energi relatifnya, di mana tautomer

TeH² dengan selisih energi HOMO-LUMO paling besar memiliki energi relatif paling rendah dan menjadi bentuk yang paling stabil dalam medium air dan DMSO.

Selain selisih energi HOMO-LUMO, perbedaan stabilitas antar tautomer juga dapat dijelaskan melalui distribusi muatan atom akibat adanya protonasi. Ketika proton (H⁺) berikatan dengan atom nitrogen, pasangan elektron bebas pada nitrogen tersebut digunakan untuk membentuk ikatan N-H, sehingga nitrogen kehilangan elektron bebasnya dan muatannya menjadi lebih positif. Muatan positif ini kemudian tersebar ke beberapa atom nitrogen lainnya, yang menyebabkan molekul menjadi kurang stabil. Namun, kondisi ini dapat distabilkan melalui interaksi elektrostatik dengan medium polar, seperti air dan DMSO, di mana ujung medium yang bermuatan negatif akan tertarik ke atom yang bermuatan positif, begitu pula sebaliknya (Khabazi & Alireza, 2023).

Berdasarkan Tabel 4.6, protonasi pada tautomer TeH² menyebabkan muatan atomnya terdistribusi merata, di mana muatan positif dan negatif tersebar dalam cincin. Akibatnya, ketika berinteraksi dengan medium, muatan atom tidak mengalami perubahan yang besar, sehingga TeH² menjadi tautomer paling stabil. Sedangkan pada TeH⁵, protonasi menyebabkan muatan atom pada C1 bermuatan negatif cukup besar dan atom H bermuatan sangat positif, sehingga terdapat polarisasi. Namun, polarisasi ini hanya terdapat pada ikatan C-H dan tidak terdistribusi dengan baik ke cincin tetrazole. Akibatnya, distribusi muatan menjadi kurang optimal dan interaksi dengan medium polar menjadi lebih lemah, sehingga tautomer TeH⁵ memiliki stabilitas yang lebih rendah daripada tautomer tetrazole terprotonasi lainnya.

Keberadaan tautomer tetrazole terprotonasi dalam sistem eksperimen selanjutnya dapat diketahui melalui perhitungan rasio populasi Boltzmann. Perhitungan ini dilakukan untuk mengetahui ketersediaan masing-masing tautomer tetrazole pada eksperimen dengan temperatur 500 K. Temperatur ini dipilih karena *fuel cell* beroperasi pada suhu tinggi. Berdasarkan persamaan Boltzmann, tautomer dengan energi relatif lebih rendah memiliki populasi yang lebih besar karena tautomer tersebut lebih stabil dan lebih mudah ditemukan pada kondisi kesetimbangan (Claramunt et al., 2024). Berdasarkan Tabel 4.5, tautomer TeH^{+2} memiliki rasio populasi Boltzmann paling besar karena memiliki energi relatif paling rendah. Sedangkan tautomer TeH^{+5} menunjukkan populasi yang sangat kecil karena memiliki energi relatif paling tinggi, sehingga hanya sedikit tautomer TeH^{+5} yang tersedia dalam eksperimen pada temperatur 500 K. Hal ini menunjukkan bahwa semakin tinggi energi relatif suatu tautomer, maka semakin kecil kemungkinan tautomer tersebut tersedia dalam sistem. Selain itu, hanya tautomer TeH^{+2} yang memenuhi kriteria rasio populasi Boltzmann minimal 20%. Oleh karena itu, TeH^{+2} dipilih sebagai donor dalam mekanisme transfer proton.

Berdasarkan analisis di atas, didapatkan bahwa tautomer TeH^{+2} merupakan tautomer paling stabil, baik pada medium air maupun DMSO. Hal ini ditandai dengan energi paling rendah, molekul yang kurang reaktif berdasarkan selisih energi HOMO-LUMO dan muatan atom Mulliken. Meskipun medium air dan DMSO memiliki konstanta dielektrik yang berbeda, keduanya menunjukkan konfigurasi molekul tetrazole dengan energi terendah atau stabilitas yang sama. Hasil ini menunjukkan bahwa perbedaan konstanta dielektrik pada medium tidak

mempengaruhi stabilitas tautomer, sehingga tautomer TeH^+2 merupakan tautomer yang paling stabil, baik pada medium air maupun DMSO.

4.2.3 Energi Penghalang Transfer Proton pada Pasangan Molekul Tetrazole

Hasil optimasi geometri pasangan molekul tetrazole menunjukkan bahwa dari keenam pasangan molekul tetrazole, pasangan molekul 3 merupakan pasangan paling stabil dengan energi relatif terendah, yaitu 0 eV pada kedua medium. Pasangan molekul 2 dan 6 berada di urutan berikutnya, sedangkan pasangan molekul 4 dan 5 menunjukkan energi relatif paling tinggi sehingga menjadi pasangan yang kurang stabil. Urutan stabilitas pasangan molekul ini dapat dijelaskan melalui energi ikatan hidrogen (*hydrogen bond energy*/HBE). HBE merupakan selisih antara energi total pasangan molekul dan energi total molekul donor serta akseptor (Yakin et al., 2024b). Semakin rendah nilai HBE, maka semakin kuat ikatan hidrogen yang terbentuk sehingga energi relatifnya semakin rendah dan semakin stabil (Chopra et al., 2018). Pasangan molekul 3 memiliki nilai HBE paling rendah, diikuti oleh pasangan molekul 2 dan 6. Ikatan hidrogen yang kuat ini dipengaruhi oleh jarak donor-akseptor proton (PDAD), di mana jarak donor akseptor yang semakin kecil menunjukkan interaksi antara donor dan akseptor yang semakin kuat (Yakin et al., 2024b). Pasangan molekul 3 yang merupakan pasangan simetris memiliki PDAD paling kecil, diikuti oleh pasangan 2 dan 6 yang merupakan pasangan asimetris.

Berdasarkan analisis di atas, pasangan molekul 3 yang merupakan pasangan simetris menjadi pasangan molekul yang paling stabil. Sedangkan pada pasangan asimetris, pasangan molekul 2 dan 6 menunjukkan konfigurasi paling stabil. Hal ini ditandai dengan energi relatif paling terendah, ikatan hidrogen paling kuat dan jarak

donor proton paling kecil. Setelah perhitungan optimasi geometri, selanjutnya dilakukan perhitungan energi penghalang transfer proton pada seluruh pasangan molekul tetrazole untuk mengetahui pasangan molekul yang dapat mengalami proses transfer proton.

Pada proses transfer proton, reaktan yang terdiri dari donor proton dan akseptor proton (pasangan molekul) berada dalam kondisi stabil. Untuk memulai proses transfer proton, pasangan molekul harus melewati energi penghalang hingga mencapai keadaan transisi. Energi penghalang reaktan dihitung dari selisih antara energi keadaan transisi dengan energi reaktan. Pada keadaan transisi, proton berada di antara donor dan akseptor, di mana ikatan dengan donor hampir putus dan ikatan dengan akseptor mulai terbentuk (Wieczorkiewicz et al., 2024). Ketika proton berhasil melewati hambatan energi ini, akan terjadi pemutusan ikatan dengan donor dan membentuk ikatan baru dengan akseptor, sehingga pasangan molekul turun ke tingkat energi yang lebih rendah dan membentuk produk yang stabil (Hoedl et al., 2023). Berdasarkan proses transfer proton pada pasangan molekul tetrazole, hanya pasangan molekul 2, 3, dan 6 yang dapat melakukan proses transfer proton. Ketiga pasangan tersebut juga merupakan pasangan molekul dengan stabilitas paling tinggi berdasarkan hasil optimasi geometri sebelumnya. Hasil ini menunjukkan bahwa stabilitas pasangan molekul mempengaruhi kemampuannya dalam melakukan transfer proton.

Berdasarkan Tabel 4.9, pasangan molekul 2 memiliki energi penghalang reaktan paling besar pada kedua medium. Hal ini menunjukkan bahwa proton membutuhkan energi paling besar untuk mencapai keadaan transisi dibandingkan pasangan lainnya. Pasangan molekul 6 memiliki energi penghalang reaktan yang

lebih kecil daripada pasangan 2 pada medium air dan DMSO, sedangkan pasangan molekul 3 dengan struktur simetris memiliki energi penghalang reaktan paling kecil, baik pada medium air dan DMSO. Selain energi penghalang reaktan, energi penghalang produk menunjukkan energi yang dibutuhkan untuk membalikkan reaksi, yaitu proton kembali dari akseptor ke donor. Semakin kecil energi penghalang produk, semakin stabil produk yang terbentuk karena reaksi balik semakin sulit terjadi. Pada medium air dan DMSO, pasangan molekul 2 memiliki energi penghalang produk paling kecil, diikuti pasangan molekul 6 sebesar. Hal ini menunjukkan bahwa reaksi balik (produk kembali menjadi reaktan) pada pasangan 2 dan 6 menjadi sangat sulit terjadi karena produk berada pada tingkat energi yang jauh lebih rendah dan stabil. Sedangkan, pasangan molekul 3 memiliki energi penghalang reaktan dan produk yang hampir sama. Kondisi ini menunjukkan bahwa reaktan dan produk pasangan 3 sama-sama stabil, sehingga reaksi maju dan reaksi balik dapat terjadi dengan mudah.

Selain stabilitas tautomer, medium juga mempengaruhi proses transfer proton, terutama pada pasangan molekul asimetris. Penelitian oleh Yakin (2024), menunjukkan bahwa pada pasangan simetris, transfer proton berlangsung efisien pada fase gas dengan PDAD yang kecil, sedangkan pada pasangan asimetris proses transfer proton cenderung terhambat. Adanya medium menjadikan PDAD meningkat, sehingga transfer proton tidak hanya terjadi pada pasangan simetris tetapi juga pada pasangan asimetris. Hal ini menunjukkan bahwa medium dapat meningkatkan kemungkinan terjadinya transfer proton terutama pada pasangan asimetris. Hal tersebut sesuai dengan hasil penelitian ini, di mana mekanisme

transfer proton pasangan molekul tetrazole pada medium air dan DMSO dapat terjadi pada pasangan simetris maupun asimetris.

Dalam penelitian ini, transfer proton pada medium dengan konstanta dielektrik yang berbeda dapat terjadi pada pasangan molekul yang sama. Hal ini menunjukkan bahwa perbedaan konstanta dielektrik medium tidak berpengaruh terhadap proses transfer proton pasangan molekul tetrazole. Selain itu, nilai energi penghalang transfer proton pada kedua medium menunjukkan perbedaan yang sangat kecil, kecuali pada pasangan 3. Perbedaan ini dapat terjadi karena pasangan 3 merupakan pasangan simetris dan memiliki struktur yang sama, sehingga pengaruh medium dalam transfer proton lebih terlihat. Kemampuan air yang lebih baik dalam membentuk ikatan hidrogen dengan molekul menyebabkan energi penghalang transfer proton pada medium air lebih rendah daripada DMSO (Schaller, 2022).

Hasil analisis di atas menunjukkan bahwa pasangan molekul 3 yang juga pasangan simetris memiliki energi penghalang paling rendah daripada pasangan molekul 2 dan 6, baik pada medium air dan DMSO. Hal ini menunjukkan bahwa proses transfer proton paling mudah terjadi pada pasangan ini. Medium menjadikan transfer proton dapat terjadi pada pasangan simetris maupun asimetris, namun perbedaan konstanta dielektrik tidak mempengaruhi energi penghalang transfer proton pada pasangan molekul tetrazole.

Hasil perhitungan energi penghalang transfer proton pada penelitian ini selanjutnya dibandingkan dengan penelitian serupa pada senyawa triazole yang telah diteliti oleh Yakin et al. (2024) untuk mengetahui pengaruh perbedaan struktur molekul terhadap proses transfer proton pada kedua senyawa heterosiklik.

Berdasarkan penelitian tersebut, terdapat 4 pasangan molekul triazole yang dapat melakukan proses transfer proton, terdiri dari 1 pasangan simetris dan 3 pasangan asimetris. Energi penghalang transfer proton pada pasangan triazole berkisar antara 7,47 - 20,19 kJ/mol (0,078 - 0,209 eV), di mana pasangan simetris memiliki energi penghalang terendah sebesar 7,47 kJ/mol (0,078 eV). Sementara, pasangan asimetris menunjukkan energi penghalang yang bervariasi, yaitu 7,55 kJ/mol (0,078 eV), 6,76 kJ/mol (0,07 eV) dan 20,19 kJ/mol (0,209 eV) (Yakin et al., 2024b).

Sedangkan, pada penelitian ini terdapat 3 pasangan molekul tetrazole yang dapat melakukan transfer proton, yaitu 1 pasangan simetris dan 2 pasangan asimetris. Energi penghalang transfer proton pada pasangan tetrazole berkisar antara 0,067 - 0,107 eV, di mana pasangan simetris memiliki energi penghalang terendah sebesar 0,067 eV, sementara pasangan asimetris menunjukkan nilai yang lebih besar yaitu 0,085 eV dan 0,107 eV. Dibandingkan triazole, tetrazole memiliki jumlah pasangan transfer proton yang lebih sedikit, namun energi penghalang transfer proton pada tetrazole berada pada rentang yang lebih rendah dibandingkan triazole. Hal ini menunjukkan bahwa proses transfer proton pada tetrazole lebih mudah terjadi daripada triazole karena memiliki energi penghalang yang lebih kecil.

4.2.4 Keterkaitan Hasil Penelitian dalam Perspektif Islam

Energi penghalang transfer proton sangat dipengaruhi oleh stabilitas energi molekul. Tautomer Te1 dan TeH⁺3 merupakan struktur paling stabil berdasarkan energi relatif, selisih energi HOMO-LUMO, dan distribusi muatan. Selain itu, pasangan molekul 3 dengan struktur simetris merupakan pasangan molekul yang paling stabil dan memiliki energi penghalang transfer proton paling rendah

dibandingkan pasangan asimetris. Hal ini menunjukkan bahwa stabilitas energi molekul berperan penting dalam mempermudah proses transfer proton. Selain itu, medium air dan DMSO juga memengaruhi stabilitas melalui interaksi elektrostatik dengan atom.

Dalam perspektif islam, kestabilan energi molekul ini sejalan dengan prinsip keseimbangan yang telah ditetapkan oleh Allah SWT dalam penciptaan alam. Sebagaimana firman Allah SWT dalam QS. Ar-Rahman ayat 7-9:

وَالسَّمَاءَ رَفَعَهَا وَوَضَعَ الْمِيزَانَ ﴿٧﴾ أَلَّا تَطْغَوْا فِي الْمِيزَانِ ﴿٨﴾ وَأَقِيمُوا الْوَزْنَ بِالْقِسْطِ وَلَا تُخْسِرُوا الْمِيزَانَ ﴿٩﴾

Artinya: “Langit telah Dia tinggikan dan Dia telah menciptakan timbangan (keadilan dan keseimbangan). Agar kamu tidak melampaui batas dalam timbangan itu. Tegakkanlah timbangan itu dengan adil dan janganlah kamu mengurangi timbangan itu.” (QS. Ar-Rahman [55]: 7-9).

Menurut tafsir al-mishbah, Kata الميزان, memiliki makna yang sangat kaya dan mendalam. Selain sebagai alat menimbang, “mizan” juga merujuk pada konsep keseimbangan. Pada ayat ke-8, mengingatkan kita akan tujuan Allah menurunkan mizan itu. Jika memahaminya dengan keseimbangan maka implikasinya adalah mengajarkan kita untuk tidak berlebihan dalam segala hal. Manusia diharapkan mampu meneladani penciptaan alam, yang tidak terlepas dari pertimbangan dan perimbangan. Hal tersebut meliputi perintah Allah SWT untuk bersikap adil dan seimbang (Shihab, 2002). Prinsip keseimbangan yang terkandung dalam ayat ini tidak hanya berlaku dalam konteks agama, tetapi juga dalam semua aspek kehidupan. Dalam penelitian ini, keseimbangan distribusi elektron yang menyebabkan tautomer stabil adalah bukti nyata bahwa hukum alam beroperasi di atas prinsip *mizan* yang ditetapkan Allah.

Selain itu, mekanisme transfer proton yang dipengaruhi oleh energi penghalang menunjukkan bahwa setiap proses perubahan energi dalam suatu sistem berlangsung mengikuti hukum ketetapan Allah (sunnatullah) yang terukur dan sistematis. Hal ini sejalan dengan firman Allah SWT dalam QS. Al-Qamar ayat 49:

إِنَّا كُلَّ شَيْءٍ خَلَقْنَاهُ بِقَدَرٍ ﴿٤٩﴾

Artinya: “*Sesungguhnya Kami menciptakan segala sesuatu sesuai dengan ukuran.*” (QS. Al-Qamar [54]: 49).

Dalam kitab Fi Zilalil Qur'an, Sayyid Qutb menjelaskan bahwa segala sesuatu di alam semesta, baik yang bersifat material maupun immaterial, bergerak maupun diam, hingga peristiwa yang telah lalu maupun yang akan datang, seluruhnya diciptakan Allah berdasarkan ukuran (qadar) yang sangat presisi. Ukuran ini mencakup hakikat, sifat, kadar, waktu, tempat, hingga keterkaitannya dengan sekitarnya yang memengaruhi keberadaan alam. Menurut Sayyid Qutb, ketetapan ini bukanlah batasan, melainkan sistem keteraturan yang membuktikan bahwa tidak ada satu pun detail di alam semesta ini yang tercipta secara kebetulan atau tanpa tujuan yang jelas (Qutb, 1970). Dalam penelitian ini, transfer proton pasangan tetrazole dapat terjadi bukan karena kebetulan, melainkan karena terdapat faktor energi penghalang yang memengaruhi reaksi transfer proton dapat berlangsung atau tidak.

Berdasarkan hasil penelitian di atas, kajian ini dapat dikaitkan dengan maqashid syariah. Maqashid syariah adalah tujuan-tujuan yang hendak dicapai dari suatu penetapan hukum. Imam al-Ghazali merumuskan maqashid syariah menjadi 5 tujuan pokok syariah (*al-kulliyat al-khams*), yaitu menjaga agama (*hifz ad-din*), menjaga jiwa (*hifz an-nafs*), menjaga akal (*hifz al-'aql*), menjaga keturunan (*hifz an-nasl*), dan menjaga harta (*hifz al-mal*) (Marwinata et al., 2026). Menjaga agama

merupakan hak setiap manusia untuk menjalankan ibadah dan ajaran agamanya, karena agama merupakan pedoman yang mengarahkan manusia menuju kebaikan. Aspek maqashid syariah yang kedua adalah menjaga jiwa. Menjaga jiwa bukan hanya sekedar membela diri, melainkan menciptakan kehidupan yang lebih baik bagi diri sendiri dan lingkungan. Aspek ketiga adalah menjaga akal. Menjaga akal berarti memanfaatkan anugerah akal yang diberikan Allah sebaik-baiknya untuk hal-hal yang bermanfaat, karena akal merupakan salah satu pemberian Allah yang paling berharga. Aspek keempat adalah menjaga keturunan. Menjaga keturunan berkaitan dengan keberlangsungan nasab sebagai dasar kehidupan sosial. Aspek kelima adalah menjaga harta. Adapun menjaga harta bertujuan untuk memastikan bahwa harta diperoleh dengan cara yang halal serta dimanfaatkan untuk hal-hal yang baik dan bermanfaat (Al-muqorrobin et al., 2025).

Seiring dengan perkembangan zaman, Syekh Yusuf al-Qardawi, seorang ulama islam kontemporer, menyatakan bahwa menjaga lingkungan (*hifzh al-bi'ah*) merupakan bagian dari maqashid syariah yang berperan penting dalam menjaga agama, jiwa, akal, keturunan, dan harta dari kerusakan. Hal ini dikarenakan manusia tidak dapat dipisahkan dari lingkungan sebagai tempat berlangsungnya kehidupan. Oleh karena itu, menjaga kelestarian lingkungan pada hakikatnya berarti turut menjaga kemaslahatan manusia sendiri. Dalam kitab *Ri'āyah al-Bī'ah fī Sharā'ah al-Islām*, al-Qardawi menegaskan bahwa lingkungan yang terjaga dengan baik akan mendukung terciptanya keseimbangan alam, sehingga manusia berkewajiban menerapkan prinsip-prinsip agama dalam setiap interaksinya dengan alam demi menjaga ketersediaan alam tetap baik (Saputra, 2020). Berdasarkan aspek-aspek maqashid syariah tersebut, penelitian ini erat kaitannya dengan aspek

menjaga akal, menjaga jiwa dan menjaga lingkungan seperti yang telah dijelaskan pada Tabel 4.10.

Tabel 4.10 Keterkaitan hasil penelitian dengan maqashid syariah.

Pendapat	Maqashid Syariah	Keterkaitan dengan Hasil Penelitian
Ulama Klasik (Imam Al-Ghazali)	Menjaga agama	Tidak berkaitan, karena hasil penelitian tidak menjelaskan tentang agama sebagai pedoman kehidupan manusia.
	Menjaga jiwa	Berkaitan, karena hasil penelitian menjelaskan tentang bahan bakar <i>fuel cell</i> yang bersih sehingga tidak membahayakan kesehatan.
	Menjaga akal	Berkaitan, karena hasil penelitian menjelaskan penggunaan akal dalam memahami metode DFT pada mekanisme transfer proton.
	Menjaga keturunan	Tidak berkaitan, karena hasil penelitian tidak menjelaskan tentang keturunan maupun kehidupan sosial.
	Menjaga harta	Tidak berkaitan, karena hasil penelitian tidak menjelaskan tentang hal-hal yang berkaitan dengan harta maupun cara memperolehnya.
Ulama Kontemporer (Syekh Yusuf al-Qardawi)	Menjaga lingkungan	Berkaitan, karena hasil penelitian menjelaskan tentang penggunaan bahan bakar <i>fuel cell</i> yang ramah lingkungan.

BAB V

PENUTUP

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil penelitian dan analisis, terdapat beberapa kesimpulan sebagai berikut:

1. Tautomer Te1 memiliki energi terendah, baik pada medium air maupun DMSO, sehingga menjadi konfigurasi tetrazole yang paling stabil. Kestabilan ini dipengaruhi oleh selisih energi HOMO-LUMO yang besar dan distribusi muatan lebih merata. Selain itu, perbedaan konstanta dielektrik medium menunjukkan konfigurasi tetrazole paling stabil yang sama.
2. Tautomer TeH⁺2 memiliki energi terendah, baik pada medium air maupun DMSO, sehingga menjadi konfigurasi tetrazole terprotonasi yang paling stabil. Kestabilan ini dipengaruhi oleh selisih energi HOMO-LUMO yang besar dan distribusi muatan lebih merata. Selain itu, perbedaan konstanta dielektrik medium menunjukkan konfigurasi tetrazole terprotonasi paling stabil yang sama.
3. Berdasarkan proses transfer proton, hanya pasangan molekul 2, 3, dan 6 yang dapat melakukan transfer proton. Ketiga pasangan ini merupakan pasangan paling stabil dengan energi relatif rendah, ikatan hidrogen kuat dan nilai PDAD yang lebih pendek. Berdasarkan perhitungan energi penghalang, pasangan 3 memiliki energi penghalang paling rendah pada kedua medium, yaitu 0,067 eV (air) dan 0,074 eV (DMSO). Sebaliknya, pasangan 2 memiliki energi penghalang paling besar pada kedua medium, yaitu 0,107 eV (air) dan 0,106 eV (DMSO). Sedangkan, pasangan 6 memiliki energi penghalang yang

lebih kecil dari pasangan 2, yaitu 0,085 eV (air) dan 0,084 eV (DMSO). Hal ini menunjukkan bahwa proses transfer proton paling mudah terjadi pada pasangan 3 yang juga merupakan pasangan simetris.

5.2 Saran

Berdasarkan hasil penelitian yang diperoleh, beberapa saran yang dapat diberikan untuk pengembangan penelitian lebih lanjut adalah sebagai berikut:

1. Penelitian selanjutnya dapat mengkaji mekanisme transfer proton molekul tetrazole dengan menggunakan medium lain yang memiliki konstanta dielektrik berbeda, sehingga diperoleh pemahaman yang lebih luas mengenai pengaruh medium terhadap proses transfer proton.
2. Pada perhitungan rasio populasi Boltzmann, dapat mempertimbangkan variasi temperatur untuk mengetahui pengaruh temperatur terhadap populasi molekul.

DAFTAR PUSTAKA

- Afonin, A. V., & Roszak, D. R. (2024). Quantification of Hydrogen Bond Energy Based on Equations Using Spectroscopic, Structural, QTAIM-based, and NBO-based Descriptors Which Calibrated by the Molecular Tailoring Approach. *Journal of Molecular Modeling*, 30(18), 1–13. <https://doi.org/10.1007/s00894-023-05811-1>
- Agarwal, A., Singh, V., Maurya, A., Kumar, S., & Joshi, G. (2025). Design, Synthesis, and Antimicrobial Evaluation of New Triazole-tethered Tetrazole Hybrids via DNA Gyrase Inhibition. *Scientific Reports*, 15(1), 1–16. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-15919-4>
- Al-muqorrobin, U., Holis, & Makhtum, A. (2025). Implementasi maqashid syariah terhadap olahan produk halal bebek sinjay dalam perspektif ulama pesantren bangkalan madura. *JURNAL MEDIA AKADEMIK (JMA)*, 3(10).
- Al-Obaidi, R., & Abdulmunem, O. M. (n.d.). *Basic Concepts of Laser System*. https://uomustansiriyah.edu.iq/media/lectures/6/6_2021_02_05!10_01_13_P M.pdf#:~:text=Proses membuat N2 %3E N1 disebut inversi,bahwa pada kesetimbangan termal%2C N1 %3E N2.
- Antogia, S. J. F., Kilo, A. La, & Sukamto, K. (2025). Analisis Energi Adsorpsi dan HOMO-LUMO Nanopartikel Perak Ag₆ Terhadap Fragmen Asam α -mikolat. *Jurnal Entropi*, 1, 6–13. <https://doi.org/https://doi.org/10.34312/je.v20i1.32399>
- Ariesta, N. (2022). Sulfonated Nano-Bentonit as Doping Material in Chtiosan/PVA Membrane in Fuel cell Application. *ALKIMIA : Jurnal Ilmu Kimia Dan Terapan*, 5(1), 122–129. <https://doi.org/10.19109/alkimia.v5i1.10220>
- Arunan, E., Desiraju, G. R., Klein, R. A., Sadlej, J., Scheiner, S., Alkorta, I., Clary, D. C., Crabtree, R. H., Dannenberg, J. J., Hobza, P., Kjaergaard, H. G., Legon, A. C., Mennucci, B., & Nesbitt, D. J. (2011). Definition of the Hydrogen Bond (IUPAC Recommendations 2011). *Pure and Applied Chemistry*, 83(8), 1637–1641. <https://doi.org/10.1351/PAC-REC-10-01-02>
- Ashenhurst, J. (2023, September 14). *Carboxylic Acid Derivatives*. Master Organic Chemistry. <https://www.masterorganicchemistry.com/2010/05/19/proton>
- Asiyah, Walid, A., Mustamin, A. A., & Topano, A. (2019). Ilmu Alamiah Dasar dalam Perspektif Islam. In *penerbit Vanda Marcom, Bengkulu*.
- Azzahra, S., & Maysithoh, S. (2024). Peran Muslim Dalam Dalam Pelestarian Lingkungan: Ajaran Dan Praktik. *At-Thullab : Jurnal Mahasiswa Studi Islam*, 6(1), 1563–1574. <https://doi.org/10.20885/tullab.vol6.iss1.art8>
- Bao, J. L., & Truhlar, D. G. (2017). Variational Transition State Theory: Theoretical Framework and Recent Developments. *Chemical Society Reviews*, 46(24), 7548–7596. <https://doi.org/10.1039/c7cs00602k>

- Chen, L., Chen, Y., & Tao, W.-Q. (2023). Schroeder's Paradox in Proton Exchange Membrane Fuel Cells: A Review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 173, 113050. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.113050>
- Chopra, N., Kaur, D., & Chopra, G. (2018). Nature and Hierarchy of Hydrogen-Bonding Interactions in Binary Complexes of Azoles with Water and Hydrogen Peroxide. *American Chemical Society Omega*, 3, 12688–12702. <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01523>
- Claramunt, R. M., Sanz, D., Alkorta, I., & Elguero, J. (2024). Addition Reaction of Azoles to Acetone-d₆: NMR and Computational Studies. *Journal of Physical Organic Chemistry*, 37(8), 1–17. <https://doi.org/10.1002/poc.4612>
- da Silva, L., Salas, M. M., de León Santillán, A., Siller-Ceniceros, A. A., Acosta, D. M., Magnago, R. F., & Benavides, R. (2021). Synthesis and Characterization of Styrene-Vinyl Tetrazole Copolymers for Their Application as a Solid Electrolyte. *Reactive and Functional Polymers*, 167, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2021.105007>
- Dewi, E. L., Ismujanto, T., & Chandrasa, G. T. (2018). Pengembangan dan Aplikasi Fuel Cell. *Prosiding Seminar Nasional Teknoin 2008*, 3169887(021), A51-A5Dewi, E. L., Ismujanto, T., Chandrasa, G.
- Energy, U. S. D. of. (n.d.). *Types of Fuel Cells* | Department of Energy. Retrieved November 5, 2025, from <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/types-fuel-cells>
- Erkartal, M., Aslan, A., Erkilic, U., Dadi, S., Yazaydin, O., Usta, H., & Sen, U. (2016). Anhydrous Proton Conducting Poly (Vinyl Alcohol) (PVA)/ Poly (2-Acrylamido-2-Methylpropane Sulfonic Acid) (PAMPS)/1,2,4-Triazole Composite Membrane. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(26), 11321–11330. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.04.152>
- Erwin, E., Fernanda, R., Dharma P, M., Faiq R, N., & Rafi K, I. (2022). Kajian Penerapan Sistem Fuel Cell Sebagai Sumber Energi Alternatif Ramah Lingkungan Pada Kendaraan Bermotor. *Jurnal Pendidikan Teknik Mesin Undiksha Source Environmentally Friendly Motor Vehicles*, 10(2), 104–116.
- Ghoni, M. S. A., & Barni, M. (2025). Pendidikan Akal, Iman, Dan Ilmu Pengetahuan Dalam Perspektif Qs. Ali Imran Ayat 190–191. *Advances In Education Journal*, 2(3), 1548–1554.
- Hartree, D. R. (1928). The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field Part I Theory and methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 89–110. <https://doi.org/10.1017/S0305004100011919>
- Henkelman, G., & Jónsson, H. (2000). Improved Tangent Estimate in the Nudged Elastic Band Method for Finding Minimum Energy Paths and Saddle Points. *Journal of Chemical Physics*, 113(22), 9978–9985. <https://doi.org/10.1063/1.1323224>

- Henkelman, G., Uberuaga, B. P., & Jónsson, H. (2000). A Climbing Image Nudged Elastic Band Method for Finding Saddle Points and Minimum Energy Paths. *Journal of Chemical Physics*, 113(22), 9901–9904. <https://doi.org/10.1063/1.1329672>
- Henkensmeier, D., Duong, N. M. H., Brela, M., Dyduch, K., Michalak, A., Jankova, K., Cho, H., Jang, J. H., Kim, H. J., Cleemann, L. N., Li, Q., & Jensen, J. O. (2015). Tetrazole Substituted Polymers for High Temperature Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(27), 14389–14400. <https://doi.org/10.1039/c5ta01936b>
- Hidayati, A. G., Putri, N. A., & Revalina. (2024). Kimia Dan Keajaiban Penciptaan: Bukti Kebesaran Allah Swt Dalam Sains. *Islamologi: Jurnal Ilmiah Keagamaan*, 1(2).
- Hirata, K., Akasaka, K., Dopfer, O., Ishiuchi, S. I., & Fujii, M. (2024). Transition From Vehicle to Grotthuss Proton Transfer in a Nanosized Flask: Cryogenic Ion Spectroscopy of Protonated P-Aminobenzoic Acid Solvated with D₂O. *Chemical Science*, 15(8), 2725–2730. <https://doi.org/10.1039/d3sc05455a>
- Hoedl, M. F., Chesnokov, A., Gryaznov, D., Merkle, R., Kotomin, E. A., & Maier, J. (2023). Proton Migration Barriers in BaFeO_{3-δ} - Insights from DFT Calculations. *Journal of Materials Chemistry A*, 11(12), 6336–6348. <https://doi.org/10.1039/d2ta08664f>
- Huzinaga, S., Sakai, Y., Miyoshi, E., & Narita, S. (1990). Extended Mulliken Electron Population Analysis. *Journal of Chemical Physics*, 93(5), 3319–3325. <https://doi.org/10.1063/1.458812>
- Ishikita, H., & Saito, K. (2014). Proton Transfer Reactions and hydrogen-Bond Networks in Protein Environments. *Journal of the Royal Society Interface*, November 2013.
- Javed, A., Palafox Gonzalez, P., & Thangadurai, V. (2023). A Critical Review of Electrolytes for Advanced Low- and High-Temperature Polymer Electrolyte Membrane Fuel Cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 15(25), 29674–29699. <https://doi.org/10.1021/acsami.3c02635>
- Jonsson, H., Mills, G., & Jacobsen, K. W. (1998). Nudged Elastic Band Method for Finding Minimum Energy Paths of Transitions. *World Scientific*, 385–404. https://doi.org/10.1142/9789812839664_0016
- Karmakar, S., & Datta, A. (2020). Heavy-Atom Tunneling in Organic Transformations. *Journal of Chemical Sciences*, 132(1). <https://doi.org/10.1007/s12039-020-01809-x>
- Karol, V., Sharma, P., Singh, A., Goel, D., & Kaur, S. (2024). Review of Energy Storage Devices : Fuel Cells, Hydrogen Storage Fuel Cells, Rechargeable Batteries, PV Solar Cells [Chapter]. *Materials for Boosting Energy Storage.*, 3, 1–15. <https://doi.org/10.1021/bk-2024-1488.ch001>

- Kaushik, N., Kumar, N., Kumar, A., & Singh, U. K. (2018). Tetrazoles: Synthesis and Biological Activity. *Immunology, Endocrine & Metabolic Agents in Medicinal Chemistry*, 18(1), 3–21. <https://doi.org/10.2174/1871522218666180525100850>
- Khabazi, M. E., & Alireza, N. C. (2023). DFT Study on Corrosion Inhibition by Tetrazole Derivatives: Investigation of the Substitution Effect. *ACS Omega*, 8(11), 9978–9994. <https://doi.org/10.1021/acsomega.2c07185>
- Kiselev, V. G., Cheblakov, P. B., & Gritsan, N. P. (2011). Tautomerism and Thermal Decomposition of Tetrazole: High-Level ab initio Study. *Journal of Physical Chemistry A*, 115(9), 1743–1753. <https://doi.org/10.1021/jp112374t>
- Klopman, G. (1968). Chemical Reactivity and the Concept of Charge and Frontier Controlled Reactions. *Journal of American Chemical Society*, 90(2), 223–234. <https://doi.org/10.1021/ja01004a002>
- Kohn, W., Becke, A. D., & Parr, R. G. (1996). Density Functional Theory of Electronic Structure. *Journal Physical Chemistry*, 100(31), 12974–12980. <https://doi.org/10.1021/jp960669l>
- Koistinen, O. P., Ásgeirsson, V., Vehtari, A., & Jónsson, H. (2019). Nudged Elastic Band Calculations Accelerated with Gaussian Process Regression Based on Inverse Interatomic Distances. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 15(12), 6738–6751. <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.9b00692>
- Koistinen, O. P., Dagbjartsdóttir, F. B., Ásgeirsson, V., Vehtari, A., & Jónsson, H. (2017). Nudged Elastic Band Calculations Accelerated with Gaussian Process Regression. *Journal of Chemical Physics*, 147(15). <https://doi.org/10.1063/1.4986787>
- Lev, L., & Evgenii, L. (1980). *Course of Theoretical Physics: Statistical Physics* (3rd ed.). Butterworth-Heinemann. https://openlibrary.org/books/OL7971898M/Statistical_Physics_%28Course_of_Theoretical_Physics_Volume_5%29
- Li, J., Cai, Q., & Amini Horri, B. (2024). Highly conductive and stable electrolytes for solid oxide electrolysis and fuel cells: fabrication, characterisation, recent progress and challenges. *Materials Advances*, 6(1), 39–83. <https://doi.org/10.1039/d4ma00690a>
- Li, W., Deng, W., Wang, G., & Xu, G. (2020). Conductive MOFs. *EnergyChem*, 100029(March). <https://doi.org/10.1016/j.enchem.2020.100029>
- Linome, D. W., Hali, A. S., Bani, M. D. S., & Hauwali, N. U. J. (2024). Studi Sifat Elektronik Grafit Menggunakan Metode Density Functional Theory. *Wahana Fisika*, 9(2), 125–132. <https://doi.org/10.17509/wafi.v9i2.73959>
- Long, B. (2024). Reaction Mechanisms and Practical Applications of Activation Energy. *Journal of Chemical Engineering & Process Technology*, 15(2), 1–2. <https://doi.org/10.35248/2157-7048.24.15.499>

- Ludueno, G. A., Kuhne, T. D., & Sebastiani, D. (2011). Mixed Grotthuss and Vehicle Transport Mechanism in Proton Conducting Polymers from Ab initio Molecular Dynamics Simulations. *Chemistry of Materials*, 23(6), 1424–1429. <https://doi.org/10.1021/cm102674u>
- Ludwig, B. (1909). Studien Über das Gleichgewicht der Lebendigen Kraft Zwischen Bewegten Materiellen Punkten. *Wissenschaftliche Abhandlungen*, 1, 49–96. <https://doi.org/10.1017/CBO9781139381420.006>
- Ma'aruf, H. M., & Widiarsa, F. A. (2016). Fuel Cell sebagai Sumber Energi Listrik Alternatif Pengisi. *Jurnal Teknik Mesin*, 12(1), 45–54.
- Mangiatordi, G. F., Hermet, J., & Adamo, C. (2011). Modeling Proton Transfer in Imidazole-Like Dimers: A Density Functional Theory Study. *Journal of Physical Chemistry A*, 115(12), 2627–2634. <https://doi.org/10.1021/jp111327m>
- Marwinata, P., Khotimah, W. D., Pahlevi, Y., & Hamidah, T. (2026). PERKEMBANGAN MAQASHID SYARIAH PADA PERIODE KLASIK: STUDI PEMIKIRAN AL-JUWAINI DAN AL-GHAZALI. *Jurnal Mahasiswa FIAI-UII*, 8, 252–260. <https://doi.org/10.20885/tullab.vol8.iss1.art18>
- Maulahibati, F. F., Syarifah, U., & Minarno, E. B. (2023). Studi Tafsir Tematik: Kajian Nanopartikel Menurut Al-Qur'an Serta Pemanfaatannya di Bidang Medis. *Es-Syajar: Journal of Islamic Integration Science and Technology*, 1(2), 89–101. <https://doi.org/10.18860/es.v1i2.23329>
- Muhd Shafi, A., Rabilu Abdullahi, S., Sharma, R., Dahiru, A., Sulaiman, M., & Sulaiman, M. (2024). Research Progress on Tetrazole Derivatives. *Journal of Science and Technology*, 09(08), 2456–5660. <https://doi.org/10.46243/jst.2024.v9.i08.pp01-34>
- Muliawati, E. C., Rianto, A. F. F., Salado, A. D., Firmansach, D. R., Rahmadhan, G., & Widodo, D. P. (2025). Literature Review Inovasi, Analisis Kinerja dan Prospek Sel Bahan Bakar Untuk Aplikasi Maritim di Indonesia. *Jurnal Tecnoscienza*, 9(2), 290–302. <https://doi.org/10.51158/gkfxss85>
- Muliawati, N. (2008). *Hidrogen Sebagai Bahan Bakar: Sumber Energi Masa Depan*. Universitas Lampung.
- Mulliken, R. S. (1955). Electronic Population Analysis on LCAOMO Molecular Wave Functions. *Journal of Chemical Physics*, 23(10), 1833–1840. <https://doi.org/10.1063/1.1740588>
- Neese, F. (2012). The ORCA Program System. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 2(1), 73–78. <https://doi.org/10.1002/wcms.81>
- Neochoritis, C. G., Zhao, T., & Domling, A. (2019). Tetrazoles via Multicomponent Reactions. *Chemical Reviews*, 119(3), 1970–2042.

<https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00564>

- Nesse, F., Bosserhoff, A., & Krappweis, A. (2015). *ORCA Input Library - Continuum Solvation (CPCM, COSMO, SMD)*. <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/continuum-solvation-cpcmcosmo-smd>
- Nufus, S. B. R. (2025). ANALISA REDUKSI CO₂ PADA GRAPHENE NANORIBBONS DENGAN KATALIS NIKEL TUNGGA MENGGUNAKAN TEORI KEADAAN TRANSISI [ITB]. In *Perpustakaan ITB*. <https://digilib.itb.ac.id/gdl/view/87517>
- Okamoto, Y. (2003). Proton Transfer Between C₂₀ (OH)₂ Molecules: An Ab Initio Study. *Chemical Physics Letters*, 368(1–2), 224–229. [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(02\)01797-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(02)01797-9)
- Oziminski, W. P. (2016). The Kinetics of Water-Assisted Tautomeric 1, 2-Proton Transfer in Azoles: a Computational Approach. *Structural Chemistry*, 27, 1845–1854. <https://doi.org/10.1007/s11224-016-0813-y>
- P, H., & W, K. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev*, 136(3B), B864–B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864%0A%0A>
- Pan, J., Wu, B., Wu, L., He, Y., Miao, J., Ge, L., & Xu, T. (2016). Proton Exchange Membrane from Tetrazole-Based Poly (Phthalazinone Ether Sulfone Ketone) for High-Temperature Fuel Cells. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(28), 12337–12346. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.05.148>
- Qutb, S. (1970). *Fi Zilalil Qur'an*. Kairo: Dar Al-Shuruq. <https://archive.org/details/00-muqaddimah/00 muqaddimah/>
- Raczynska, E. D., Gal, J. F., Maria, P. C., & Szelag, M. (2009). Proton Transfer Chemistry in the Gas Phase. Is a Spontaneous “Neutralization” Reaction a Myth or a Reality? *Croatica Chemica Acta*, 82(1), 87–103.
- Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂. *PROSIDING SKF 2015*, 497–503.
- Rifzikka, S. A. (2024). Studi Analisis Tafsir Surah Ar-Rum Ayat 41 Tentang Kerusakan Lingkungan. *Journal of Islamic Studies and Humanities*, 9(2), 254–298. doi: <http://dx.doi.org/10.21580/jish.v9i2.23659>
- Riniati, Hulupi, M., Anggraini, R., & Dewi, S. S. (2010). Aplikasi Metoda Loading Katalis Secara Painting Dan Screen Printing Pada Mea Dalam Pembuatan Sel Bahan Bakar Hidrogen (Hydrogen Fuel Cell). *Prosiding Industrial Research Workshop and National Seminar*, 1(022), 1–7.
- Sabarni, S. (2019). Struktur Atom Berdasarkan Ilmu Kimia Dan Perspektif Al-Quran. *Lantanida Journal*, 7(1), 87–100. <https://doi.org/10.22373/lj.v7i1.4647>

- Saputra, A. S. (2020). *HIFDH AL-BĪ'AH SEBAGAI BAGIAN DARI MAQĀṢID AL-SHARĪ'AH (Pandangan Yusuf Al-Qardhawi Dalam Kitab Ri'āyat al-Bī'ah fi Sharī'ah al-Islām)*.
- Schaller, C. P. (2022). *Acidity and Solvent*. Structure & Reactivity in Organic, Biological and Inorganic Chemistry. [https://employees.csbsju.edu/cschaller/Principles Chem/acid/acid_solvent.htm](https://employees.csbsju.edu/cschaller/Principles_Chem/acid/acid_solvent.htm)
- Schrödinger, E. (1926). Quantisierung als Eigenwertproblem. *Annalen Der Physik*, 384(4), 361–376. <https://doi.org/10.1002/andp.19263840602>
- Sebastian, O., & Sitorus, T. B. (2013). Analisa Efisiensi Elektrolisis Air Dari Hydrofill Pada Sel Bahan Bakar. *Jurnal Dinamis*, 2(12), 16–25.
- Shihab, M. Q. (2002). *Tafsir Al-Mishbah: Pesan, Kesan dan Keserasian Al-Qur'an vol 13*. Lentera Hati. [https://ia803106.us.archive.org/22/items/etaoin/Tafsir Al-Mishbah Jilid 13 -Dr. M. Quraish Shihab.pdf](https://ia803106.us.archive.org/22/items/etaoin/Tafsir_Al-Mishbah_Jilid_13_-Dr._M._Quraish_Shihab.pdf)
- Smidstrup, S., Pedersen, A., Stokbro, K., & Jónsson, H. (2014). Improved Initial Guess for Minimum Energy Path Calculations. *Journal of Chemical Physics*, 140(21). <https://doi.org/10.1063/1.4878664>
- Song, M. K., Li, H., Li, J., Zhao, D., Wang, J., & Liu, M. (2014). Tetrazole-Based, Anhydrous Proton Exchange Membranes for Fuel Cells. *Advanced Materials*, 26(8), 1277–1282. <https://doi.org/10.1002/adma.201304121>
- Sulistiyawati, I., Rahayu, N. L., Purwitaningrum, F. S., Biologi, P. S., Nahdlatul, U., & Purwokerto, U. (2020). Produksi Biolistrik Menggunakan Microbial Fuel Cell (MFC) Lactobacillus bulgaricus dengan Substrat Limbah Tempe dan Tahu. *Majalah Ilmiah Biologi Biosfera: A Scientific Journal*, 37(2), 112–117. <https://doi.org/10.20884/1.mib.2020.37.2.1147>
- Sundarti, L. W. (2017). *Kajian Teoritis Mekanisme Transport Proton pada Model Membran Komposit Kitosan / Asam Fosfat untuk Sistem Direct Methanol Fuel Cell (DMFC)*. Institut Teknologi Sepuluh Nopember.
- Tetrazole*. (2023). Chemical Book. https://www.chemicalbook.com/ChemicalProductProperty_EN_CB4230898.htm
- Togatorop, S. D. W., & Ahmad, A. (2024). Studi Struktur Elektronik GaAs Sebagai Material Kandidat Sensor Gas Berbasis Semikonduktor Menggunakan Density Functional Theory. *Conference Paper ICHSE*, 1–8.
- W, K., & L.J., S. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev*, 140, A1133–A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133%0A%0A>
- Weinhold, F., & Klein, R. A. (2014). What is a Hydrogen Bond? Resonance Covalency in the Supramolecular Domain. *Chemistry Education Research and*

Practice, 15, 276–285. <https://doi.org/10.1039/c4rp00030g>

- Wella, S. A., Suprayoga, E., Nugraha, A. R. T., Hasdeo, E. H., Ukhtary, M. S., & Hanna, M. Y. (2021). *Research Starter Kit: Modul Praktis untuk Teori dan Komputasi Material*. Pusat Penelitian Fisika Lembaga Ilmu Pengetahuan Indonesia.
- Wieczorkiewicz, P. A., Krygowski, T. M., & Szatylowicz, H. (2024). Substituent effects and electron delocalization in five-membered N-heterocycles. *Phys. Rev*, 26, 19398–19410. <https://doi.org/10.1039/d4cp01709a>
- Yakin, K. (2024). *First-Principles Study on Proton Transfer in Triazole Molecules*. Kanazawa University.
- Yakin, K., Yamaguchi, N., Nakajima, T., Mizuno, M., & Ishii, F. (2024a). Effect of Poly(Acrylic Acid) on Proton Transfer in Triazole Molecules: A First-Principles Study. *Chemical Physics Letters*, 856, 69–81. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2024.141582>
- Yakin, K., Yamaguchi, N., Nakajima, T., Mizuno, M., & Ishii, F. (2024b). First-Principles Study on Proton Transfer in Triazole Molecules. *Chemical Physics Letters*, 856(3B), 141582. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2024.141582>
- Yuan, Y., Li, M., Apostolopoulos, V., Matsoukas, J., Wolf, W. M., Blaskovich, M. A. T., Bojarska, J., & Ziora, Z. M. (2024). Tetrazoles: A Multi-Potent Motif in Drug Design. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 279, 116870. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2024.116870>

LAMPIRAN

Lampiran 1. Energi molekul tetrazole, tetrazole terprotonasi dan pasangan molekul sebelum dan sesudah optimasi geometri

1. Energi molekul tetrazole sebelum dan sesudah optimasi geometri

Medium	Tautomer Tetrazole	Energi Sebelum Optimasi (eV)	Energi Sesudah Optimasi (eV)	Selisih (eV)
Air	Te1	-7027,0031	-7027,0879	0,0848
	Te2	-7026,8787	-7027,0245	0,1458
	Te3	-7025,3708	-7025,5902	0,2193
DMSO	Te1	-7026,9959	-7027,0807	0,0847
	Te2	-7026,8737	-7027,0199	0,1462
	Te3	-7025,3663	-7025,5862	0,2199

2. Energi molekul tetrazole terprotonasi sebelum dan sesudah optimasi geometri

Medium	Tautomer Tetrazole	Energi Sebelum Optimasi (eV)	Energi Sesudah Optimasi (eV)	Selisih (eV)
Air	TeH ⁺ 1	-7037,9822	-7038,0904	0,1082
	TeH ⁺ 2	-7037,1021	-7038,6586	1,5564
	TeH ⁺ 3	-7037,8888	-7038,0041	0,1153
	TeH ⁺ 4	-7038,3168	-7038,5173	0,2006
	TeH ⁺ 5	-7035,9922	-7036,3205	0,3283
	TeH ⁺ 6	-7036,0613	-7036,4795	0,4182
DMSO	TeH ⁺ 1	-7037,9503	-7038,0583	0,1080
	TeH ⁺ 2	-7037,0715	-7038,6286	1,5572
	TeH ⁺ 3	-7037,8590	-7037,9742	0,1152
	TeH ⁺ 4	-7038,2893	-7038,4896	0,2003
	TeH ⁺ 5	-7035,9611	-7036,2892	0,3281
	TeH ⁺ 6	-7036,0326	-7036,4512	0,4186

3. Energi pasangan molekul tetrazole sebelum dan sesudah optimasi geometri

Medium	Pasangan Molekul	Energi Sebelum Optimasi (eV)	Energi Sesudah Optimasi (eV)	Selisih (eV)
Air	Pasangan molekul 1	-14065.755	-14066.055	0.300
	Pasangan molekul 2	-14065.817	-14066.146	0.329
	Pasangan molekul 3	-14065.852	-14066.176	0.324
	Pasangan molekul 4	-14065.625	-14066.000	0.374
	Pasangan molekul 5	-14065.462	-14065.988	0.527
	Pasangan molekul 6	-14065.774	-14066.093	0.320
DMSO	Pasangan molekul 1	-14065.755	-14066.026	0.271
	Pasangan molekul 2	-14065.901	-14066.120	0.219
	Pasangan molekul 3	-14065.815	-14066.146	0.331
	Pasangan molekul 4	-14065.716	-14065.967	0.251
	Pasangan molekul 5	-14065.431	-14065.956	0.525
	Pasangan molekul 6	-14065.784	-14066.067	0.282

Lampiran 2. Input optimasi geometri

1. Input optimasi geometri molekul tetrazole pada medium air

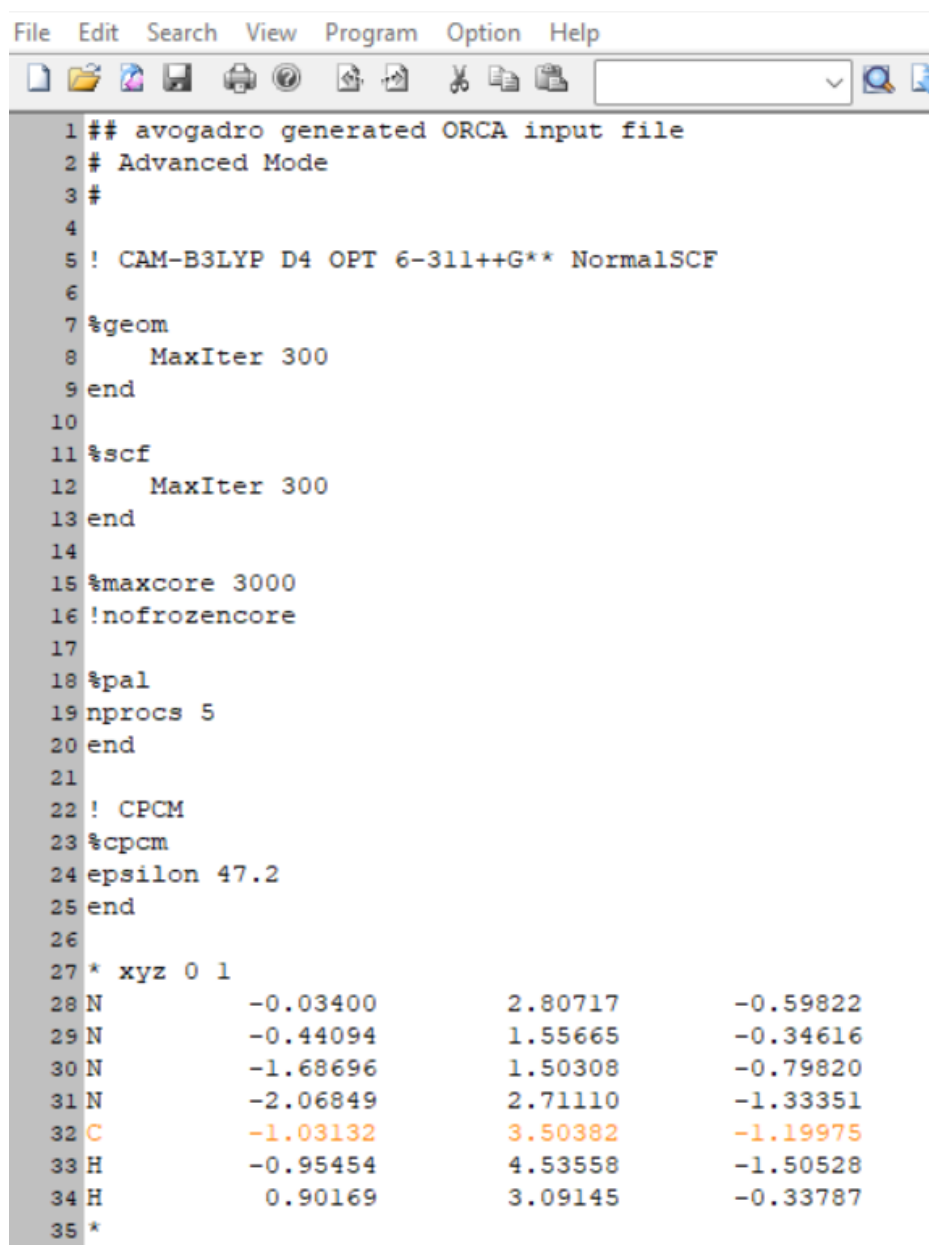
```

File Edit Search View Program Option Help
[Icons] [Dropdown] [Icons]

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8   MaxIter 300
9 end
10
11 %scf
12   MaxIter 300
13 end
14
15 %maxcore 3000
16 !nofrozenscore
17
18 %pal
19 nprocs 5
20 end
21
22 ! CPCM
23 %cpcm
24 epsilon 80.4
25 end
26
27 * xyz 0 1
28 N      -0.03400      2.80717      -0.59822
29 N      -0.44094      1.55665      -0.34616
30 N      -1.68696      1.50308      -0.79820
31 N      -2.06849      2.71110      -1.33351
32 C      -1.03132      3.50382      -1.19975
33 H      -0.95454      4.53558      -1.50528
34 H       0.90169      3.09145      -0.33787
35 *

```

3. Input optimasi geometri molekul tetrazole pada medium DMSO



```

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8     MaxIter 300
9 end
10
11 %scf
12     MaxIter 300
13 end
14
15 %maxcore 3000
16 !nofrozencore
17
18 %pal
19 nprocs 5
20 end
21
22 ! CPCM
23 %cpcm
24 epsilon 47.2
25 end
26
27 * xyz 0 1
28 N      -0.03400      2.80717      -0.59822
29 N      -0.44094      1.55665      -0.34616
30 N      -1.68696      1.50308      -0.79820
31 N      -2.06849      2.71110      -1.33351
32 C      -1.03132      3.50382      -1.19975
33 H      -0.95454      4.53558      -1.50528
34 H       0.90169      3.09145      -0.33787
35 *

```

4. Input optimasi geometri molekul tetrazole terprotonasi pada medium air

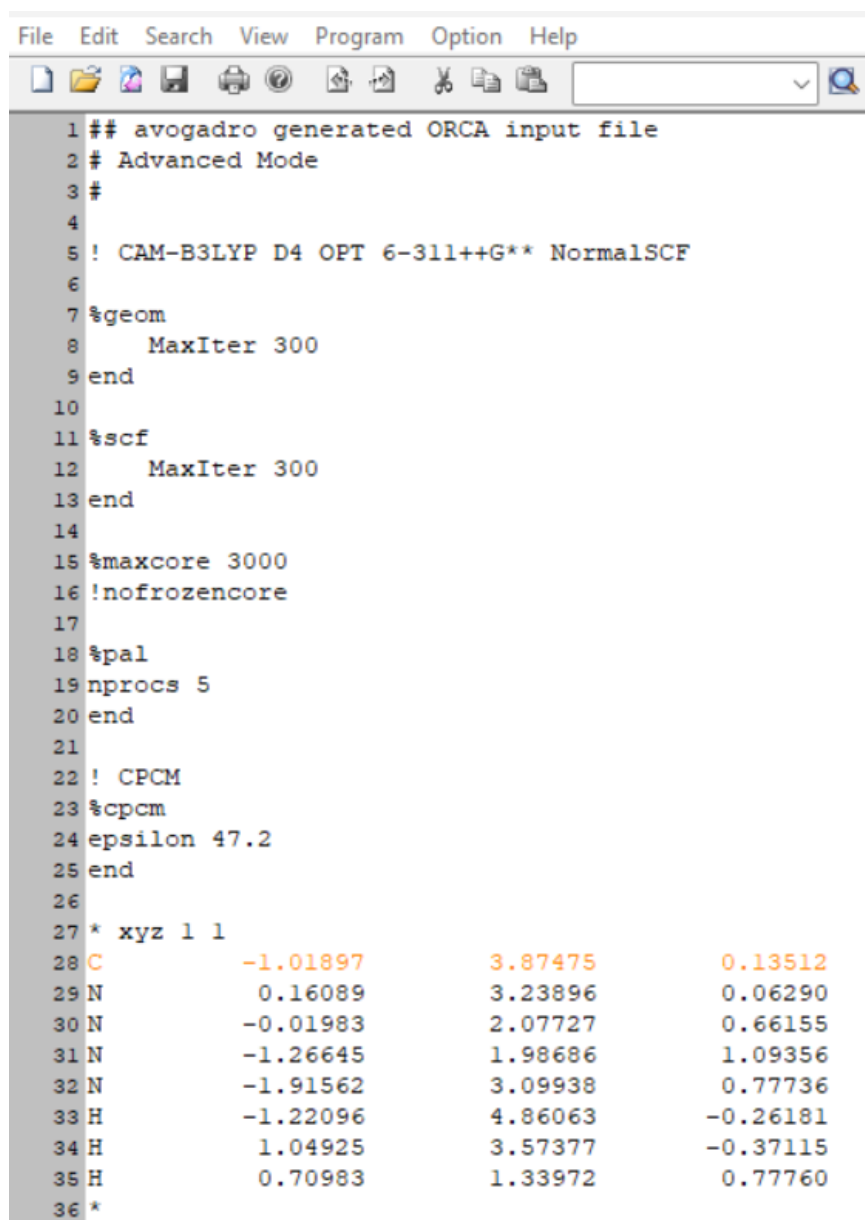
```

File Edit Search View Program Option Help
[Icons] [Search Box] [Magnifying Glass]

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8     MaxIter 300
9 end
10
11 %scf
12     MaxIter 300
13 end
14
15 %maxcore 3000
16 !nofrozencore
17
18 %pal
19 nprocs 5
20 end
21
22 ! CPCM
23 %cpcm
24 epsilon 80.4
25 end
26
27 * xyz 1 1
28 C      -1.01897      3.87475      0.13512
29 N      0.16089      3.23896      0.06290
30 N     -0.01983      2.07727      0.66155
31 N     -1.26645      1.98686      1.09356
32 N     -1.91562      3.09938      0.77736
33 H     -1.22096      4.86063     -0.26181
34 H      1.04925      3.57377     -0.37115
35 H      0.70983      1.33972      0.77760
36 *

```

5. Input optimasi geometri molekul tetrazole pada medium DMSO



```

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 OPT 6-311++G** NormalSCF
6
7 %geom
8     MaxIter 300
9 end
10
11 %scf
12     MaxIter 300
13 end
14
15 %maxcore 3000
16 !nofrozencore
17
18 %pal
19 nprocs 5
20 end
21
22 ! CPCM
23 %cpcm
24 epsilon 47.2
25 end
26
27 * xyz 1 1
28 C      -1.01897      3.87475      0.13512
29 N       0.16089      3.23896      0.06290
30 N     -0.01983      2.07727      0.66155
31 N     -1.26645      1.98686      1.09356
32 N     -1.91562      3.09938      0.77736
33 H     -1.22096      4.86063     -0.26181
34 H      1.04925      3.57377     -0.37115
35 H      0.70983      1.33972      0.77760
36 *

```

5. Input energi penghalang transfer proton pasangan molekul tetrazole pada medium air

```

File Edit Search View Program Option Help
1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 6-311++G** NEB-TS normalPrint normalSCF
6
7 ! NEB
8 %neb
9 NEB_END_XYZFILE "produk.xyz"
10 Nimages 15
11 end
12
13 %pal
14 nprocs 10
15 end
16
17 ! CPCM
18 %cpcm
19 epsilon 80.4
20 end
21
22 * xyz 1 1 reaktan.xyz
23 N      1.44829467016524      1.99048324108820      -0.13028988450509
24 N      0.94322707348183      0.75678031992563      -0.06025570642625
25 N     -0.32823775099705      0.88401116786794      -0.02183895756890
26 N     -0.66820980905380      2.18798661194089      -0.06526327629787
27 C      0.45140080961242      2.87027738740430      -0.13290068420411
28 H      2.44948359705394      2.14663971445994      -0.16989019833126
29 H      0.56353193662385      3.94081649637264      -0.18262692040452
30 C     -3.84229713490319      4.07968806329558      -0.03409635954346
31 N     -3.27766874226082      2.89218702986526      -0.03690800805253
32 N     -4.22801650975911      1.94454048633107      -0.03495592060853
33 H     -2.22870559304014      2.63177071064879      -0.04087362251539
34 N     -5.36061427427146      2.51665998668316      -0.03114346026347
35 N     -5.14018562682097      3.83908709574402      -0.03048878066913
36 H     -3.35613218760856      5.04253403366006      -0.03483572593928
37 H     -5.91294045822213      4.50009765471245      -0.02818249467022
38 *

```

6. Input energi penghalang transfer proton pasangan molekul tetrazole pada medium DMSO

```

File Edit Search View Program Option Help
[Icons] [Search] [Up]

1 ## avogadro generated ORCA input file
2 # Advanced Mode
3 #
4
5 ! CAM-B3LYP D4 6-311++G** NEB-TS normalPrint normalSCF
6
7 ! NEB
8 %neb
9 NEB_END_XYZFILE "produk.xyz"
10 Nimages 15
11 end
12
13 %pal
14 nprocs 20
15 end
16
17 ! CPCM
18 %cpcm
19 epsilon 47.2
20 end
21
22 * xyz 1 1 reaktan.xyz
23 N      1.29933138374113      2.41365626043829      -0.11683898606552
24 N      0.86106345209335      1.15743652613214      -0.00721350716579
25 N     -0.41574516331234      1.21678329649591       0.01894320158898
26 N     -0.82495421674923      2.49797262646513     -0.07193203204873
27 C      0.25660192288736      3.23756344598082     -0.15603289176199
28 H      2.29091285714262      2.62243459652887     -0.15539334479208
29 H      0.31039914001661      4.31029503599995     -0.24207320260278
30 C     -4.10556183457636      4.20318419608400     -0.02451420657944
31 N     -3.46845984120076      3.05344520433443     -0.04370200963806
32 N     -4.35826609173467      2.04853603727300     -0.04349181032054
33 H     -2.40575682992912      2.85548342181319     -0.05683022027664
34 N     -5.52411988175170      2.54885146866450     -0.02442396070389
35 N     -5.38614216565302      3.88262186805177     -0.01275596096983
36 H     -3.67971894719941      5.19404440901631     -0.01910773768104
37 H     -6.19790378377436      4.49441160672156      0.00355666901736
38 *

```



JURNAL BIMBINGAN SKRIPSI/TESIS/DISERTASI

IDENTITAS MAHASISWA

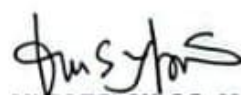
NIM : 220604110028
Nama : ALVIA AZ ZAHRA
Fakultas : SAINS DAN TEKNOLOGI
Jurusan : FISIKA
Dosen Pembimbing 1 : Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si
Dosen Pembimbing 2 : MUBASYIROH, S.S., M.Pd.I
Judul Skripsi/Tesis/Disertasi : STUDI ENERGI PENGHALANG (BARRIER ENERGY) TRANSFER PROTON MOLEKUL TETRAZOLE PADA BEBERAPA MEDIUM

IDENTITAS BIMBINGAN

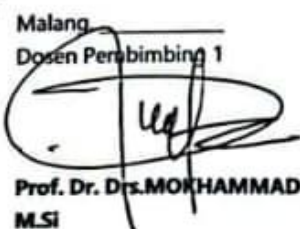
No	Tanggal Bimbingan	Nama Pembimbing	Deskripsi Proses Bimbingan	Tahun Akademik	Status
1	09 Oktober 2025	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
2	27 November 2025	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
3	04 Desember 2025	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
4	10 Desember 2025	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan proposal	Ganjil 2025/2026	Sudah Dikoreksi
5	20 Februari 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Revisi proposal	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
6	11 Mei 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
7	13 Mei 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
8	18 Mei 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
9	20 Mei 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Bimbingan bab 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
10	22 Mei 2026	MUBASYIROH, S.S., M.Pd.I	Bimbingan integrasi bab 2 dan 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
11	25 Mei 2026	MUBASYIROH, S.S., M.Pd.I	Revisi integrasi bab 2 dan 4	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi
12	03 Juni 2026	Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO, M.Si	Revisi bab 4 dan tanda tangan skripsi	Genap 2025/2026	Sudah Dikoreksi

Telah disetujui
Untuk mengajukan ujian Skripsi/Tesis/Desertasi

Dosen Pembimbing 2


MUBASYIROH, S.S., M.Pd.I

Malang
Dosen Pembimbing 1


Prof. Dr. Drs.MOKHAMMAD TIRONO,
M.Si


Kajur / Kaprodi,

FARID SAMSU HANANTO, M.T