

Simulasi dinamika molekular adsorpsi hidrogen pada carbon nanotubes (CNT) dengan variasi chirality

Mardi Santoso, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20292788&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Krisis energi merupakan salah satu permasalahan serius yang dihadapi saat ini. Sumber energi dari bahan bakar fosil semakin menipis sementara pertumbuhan akan kebutuhan energi sendiri semakin meningkat. Hal ini berkorelasi langsung dengan masalah lingkungan seperti pemanasan global. Hidrogen merupakan salah satu harapan untuk energi masa depan, namun hal itu masih terkendala dalam proses distribusi dan penyimpanannya. Salah satu cara mengatasi kendala tersebut adalah dengan sistem adsorpsi menggunakan Carbon

Nanotubes. Carbon Nanotube (CNT) merupakan media penyimpan hidrogen yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar. Bagaimana meningkatkan kinerja CNT masih sangat menarik untuk diteliti. Banyak faktor yang mempengaruhi CNT dalam melakukan adsorpsi hidrogen, salah satunya adalah chirality dari CNT. Namun penelitian secara eksperimental banyak terkendala dalam hal biaya, maka perlu didukung metoda lain untuk menunjangnya seperti Simulasi Dinamika Molekular. Tulisan ini membahas mengenai pengaruh dari chirality CNT terhadap kemampuan dalam adsorpsi hidrogen yang dilakukan dengan simulasi dinamika molekular.

ABSTRACT

Energy crisis is one of the serious problem in the last decade. Energy sources from fossil fuels are running low while need of energy is extremely increase. This directly correlates with environment issues such as global warming. Hydrogen is one of hope for energy future, but its have some problems with distribution and storage process. One of many solution on adsorption system is using carbon nano tubes. Carbon Nano tubes is a good hydrogen storage media because it has large surface area and pore volume. How to improve the performance of CNT in adsorption is a interesting study. There are some factor

that affect hydrogen adsorption in CNT, one of them is chirality of CNT. However, many experimental studies have some problem in high cost, so it is necessary other methods to solve this problem such as molecular dynamic simulation. This paper discusses about effect of CNT chirality in hydrogen adsorption by molecular dynamic simulation