

Simulasi dinamika molekuler adsorpsi hidrogen pada Carbon Nanotube dengan variasi temperatur

Abdul Jabbar, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20296217&lokasi=lokal>

Abstrak

Krisis energi merupakan salah satu permasalahan serius yang dihadapi saat ini. Kebutuhan akan sumber energi yang dapat diperbaharui dan bebas dari polusi menjadikan hidrogen sebagai salah satu sumber energi alternatif yang sangat berpotensi untuk dikembangkan. Namun, dalam penggunaan hidrogen sebagai sumber energi masih menemui kendala dalam proses penyimpanannya. Yakni, membutuhkan tangki bertekanan tinggi atau disimpan dalam keadaan dicairkan hingga suhu cryogenik. Salah satu cara mengatasi kendala tersebut adalah dengan sistem adsorpsi. Carbon Nanotube (CNT) merupakan media penyimpan yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar. Penelitian secara eksperimental umumnya masih memerlukan biaya yang mahal, maka perlu didukung metoda lain untuk menunjangnya seperti Simulasi Dinamika Molekular. Simulasi kali ini akan dilakukan dalam kondisi isothermis, dimana temperatur yang akan digunakan adalah 253 K, 273 K, dan 293 K pada tekanan yang bervariasi dari 1- 18 atm. Hasil simulasi menunjukkan temperatur 253 K memiliki kemampuan adsorpsi lebih baik dari temperatur lainnya.Energy crisis is one of the serious problems faced at present. The need for renewable energy sources and free of pollution makes hydrogen as one of alternative energy sources that are potentially to be developed. However, in the use of hydrogen as an energy source are still encountered obstacles in the process of storage. That is, the need of a high-pressure tank or stored in a liquified state to cryogenic temperature. One way of overcoming these barriers is by adsorption system. Carbon Nanotubes (CNT) is a storage medium that is good because it has a large surface area and large pore. Experimental research is generally still require a high cost, then it needs to be supported by other methods to support it as Molecular Dynamics Simulations. Simulation of this time will be performed in conditions of isothermis, where the temperature is to be used is 253 K, 273 K, and 293 K at a pressure varying from 1-18 atm. The result shows that temperature 253 K have better adsorption than the others.