

Pemodelan fenomena adsorpsi hidrogen pada silika amorf menggunakan metode dinamika molekuler = Modeling of hydrogen adsorption phenomena in amorphous silica using molecular dynamics method

Muhammad Hanif Abdurrahman, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20489942&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Hidrogen merupakan salah satu sumber energi masa depan karena bersifat ramah lingkungan. Namun dalam pengembangannya masih terdapat beberapa masalah dalam metode penyimpanannya. Pada beberapa penelitian, ditemukan bahwa material berbasis silikon merupakan salah satu kandidat yang baik sebagai media penyimpanan hidrogen. Pada penelitian ini, penulis ingin melihat pengaruh temperatur dan tekanan terhadap adsorpsi hidrogen pada silika amorf dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler menggunakan potensial Lennard-Jones. Pada simulasi ini temperatur yang digunakan yaitu 233, 253, 273 dan 293 K serta tekanan pada setiap temperatur bervariasi yaitu 1, 2, 5, 10 dan 15 atm. Simulasi ini berhasil menggambarkan dan mengindikasikan bahwa silika amorf memiliki kemampuan untuk menyimpan hidrogen yang cukup baik dimana temperatur dan tekanan mempengaruhi jumlah hidrogen yang teradsorpsi. Pengaruh temperatur yaitu pada temperatur yang lebih rendah (233 K), maka jumlah konsentrasi hidrogen yang terserap pada silika amorf akan semakin besar. Sementara pada temperatur yang lebih tinggi maka hasilnya akan menurun. Hasil adsorpsi terbaik terjadi pada tekanan yang lebih tinggi (15 atm) pada temperatur rendah (233 K) dengan konsentrasi hidrogen sebesar 0,048116%.

ABSTRACT

Hydrogen is one of the future source energy because it has environmentally friendly. However, there are still some problems in the storage method of hydrogen. In several studies, it was found that Silicon based material is a promising candidate as a hydrogen storage medium. In this study, the effect of various temperature and pressure to the adsorption of hydrogen on amorphous silica with molecular dynamics simulation using Lennard-Jones potential. In this simulation, the temperature that i used are 233, 253, 273 and 293 K with pressure at each temperature are 1, 2, 5, 10, and 15 atm. The simulations had successfully visualize and indicate that amorphous silica has a good hydrogen storage capability where temperature and pressure affect the amount of hydrogen adsorbed.. At low temperature (233 K), the hydrogen concentration are relatively high than at higher temperature. The best result of hydrogen capacity is 0,048116% that occurred at high pressure (15 atm) with low temperature (233 K) condition.