

Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada Selambar Reduced Graphene Oxide (RGO) = Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Adsorption on a Sheet of Reduced Graphene Oxide (RGO)

Rahman Hadi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505123&lokasi=lokal>

Abstrak

Gas Hidrogen memiliki manfaat sebagai bahan bakar yang bermanfaat untuk sumber energi masa depan karena menurunkan ketergantungan akan minyak bumi dan pengurangan polusi udara. Penyimpanan hidrogen adalah masalah utama yang harus ditaklukkan untuk keberhasilan implementasi teknologi sel bahan bakar dalam aplikasi transportasi dan ini merupakan tantangan ilmu material utama. Salah satu solusi untuk mengatasi permasalahan tersebut adalah dengan menggunakan metode adsorpsi. Material reduced Graphene Oxide (rGO) merupakan salah satu material yang berpotensi untuk digunakan sebagai media penyimpanan gas hidrogen. Pada penelitian ini, penulis ingin melihat pengaruh temperatur dan tekanan terhadap adsorpsi hidrogen pada reduced Graphene Oxide (rGO) dengan menggunakan simulasi dinamika molekuler menggunakan potensial Lennard-Jones. Pada riset ini, penulis menggunakan metode Simulasi Dinamika Molekuler. Variasi temperatur yang digunakan pada simulasi ini adalah 77, 100, 150, 200, 273, dan 298 K dengan variasi tekanan pada tiap temperatur adalah 1, 2, 5, 10, 15, 20, 40, 80, dan 100 bar. Hasil simulasi kemudian dibandingkan dengan hasil riset secara eksperimental yang telah dilakukan oleh peneliti lainnya. Pada temperatur tinggi, hasil simulasi mendekati hasil riset secara eksperimental. Namun pada temperatur rendah, hasil simulasi memiliki perbedaan secara signifikan dari riset secara eksperimental.

<hr>

Hydrogen gas has benefits as a useful fuel for future energy sources because it reduces dependence on petroleum and reduces air pollution. Hydrogen storage is a major problem that must be conquered for the successful implementation of fuel cell technology in transportation applications and this is a major material science challenge. One solution to overcome these problems is to use the adsorption method. Reduced Graphene Oxide (rGO) material is a material that has the potential to be used as a storage medium for hydrogen gas. In this study, the authors wanted to see the effect of temperature and pressure on hydrogen adsorption on reduced Graphene Oxide (rGO) using molecular dynamics simulations using Lennard-Jones potential. In this research, the authors used the Molecular Dynamics Simulation method. Temperature variations used in this simulation are 77, 100, 150, 200, 273, and 298 K with variations in pressure at each temperature are 1, 2, 5, 10, 15, 20, 40, 80, and 100 bar. The simulation results are then compared with the results of experimental research conducted by other researchers. At high temperatures, the simulation results approach experimental research results. However, at low temperatures, the simulation results have a significant difference from experimental research.