

# Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada Grafit = Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Adsorption on Graphite

Muhammad Zaky Rahmatullah, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505237&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Gas Hidrogen memiliki potensial yang cukup baik untuk digunakan sebagai sumber energi yang bersih pada masa depan. Gas hidrogen yang digunakan sebagai energi saat ini masih memiliki kendala, dimana dalam sistem penyimpanan gas hidrogen itu sendiri. Ada salah satu cara untuk mengatasinya dimana dengan menggunakan metode yang dinamakan adsorpsi. Material Grafit merupakan material yang memiliki potensial yang digunakan sebagai material penyimpanan gas hidrogen. Pada riset secara eksperimental memerlukan biaya yang sangat tinggi. Sehingga, dibutuhkan metode riset lain yang melakukan riset tersebut. Pada riset yang dilakukan, penulis menggunakan metode simulasi salah satunya adalah metode Simulasi Dinamika Molekuler. Pada riset simulasi yang dilakukan adanya variasi temperatur adalah 77 K, 100 K, 150 K, 200 K, 273 K, dan 296 K dan variasi tekanan pada temperatur adalah pada 1 atm, 8 atm, 10 atm, 14 atm, 18 atm, dan 20 atm. Kemudian hasil simulasi dibandingkan dengan hasil riset eksperimental yang telah dilakukan oleh peneliti sebelumnya.

Hydrogen gas has good potential to be used as a clean energy source in the future. Hydrogen gas that is used as energy at this time still has an administration, whereas in the hydrogen storage system itself. There is one way to overcome it where by using a method called adsorption. Graphite is a material that has the potential to be used as a hydrogen gas storage material. In this study, the cost of experiments is very high. Required, other research methods are needed that conduct the research. In the research conducted, the author uses simulation methods, one of which is the Molecular Dynamics Simulation method. In the simulation research conducted there are variations in temperature namely 77 K, 100 K, 150 K, 200 K, 273 K, and 296 K and variations in pressure at temperatures are 1 atm, 8 atm, 10 atm, 14 atm, 18 atm, and 20 atm. Then the results of the experiment are compared with the results of experimental studies that have been done by previous researchers.