



UNIVERSITAS INDONESIA

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER ADSORPSI
HIDROGEN PADA *CARBON NANOTUBES* (CNT) DENGAN
VARIASI CHIRALITY**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik

MARDI SANTOSO

0706267181

**FAKULTAS TEKNIK
PROGRAM STUDI TEKNIK MESIN
DEPOK
JANUARI 2012**

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

Skripsi ini adalah hasil karya saya sendiri, dan semua sumber baik yang dikutip maupun dirujuk telah saya nyatakan dengan benar.

Skripsi ini merupakan bagian dari skripsi yang dikerjakan bersama dengan rekan saya, saudara Ahmad Dzulfahmi (0706266815) dan Abdul Jabbar (0706266765). Sehingga harap maklum jika ada beberapa bagian dari buku ini yang memiliki kesamaan.

Nama : Mardi Santoso
NPM : 0706267181
Tanda Tangan : 
Tanggal : 26 Januari 2012

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Mardi Santoso
NPM : 0706267181
Program Studi : Teknik Mesin
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekular Adsorpsi Hidrogen
Pada *Carbon Nanotubes* (CNT) Dengan Variasi
Chirality

Telah berhasil dipertahankan di hadapan Dewan Penguji dan diterima sebagai bagian persyaratan yang diperlukan untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik pada Program Studi Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Indonesia

DEWAN PENGUJI

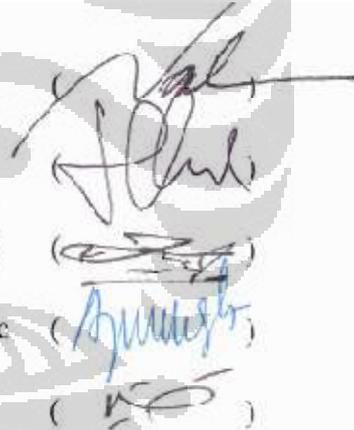
Pembimbing : Dr.-Ing. Ir. Nasruddin, M.Eng

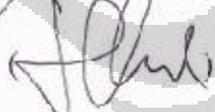
Penguji : Dr. Ir. M. Idrus Alhamid

Penguji : Dr. Ir. Engkos A. Kosasih, MT.

Penguji : Dr.rer.nat. Agustino Zulys, M.Sc

Penguji : Dr. Budhy Kurniawan



()
()
()
()
()

Ditetapkan di : Depok
Tanggal : 26 Januari 2012

UCAPAN TERIMA KASIH

Puji syukur saya panjatkan kepada Tuhan Yang Maha Esa, karena atas berkat dan rahmat-Nya, saya dapat menyelesaikan skripsi ini. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik jurusan Teknik Mesin Fakultas Teknik Universitas Indonesia. Saya menyadari bahwa, tanpa bantuan dan bimbingan dari berbagai pihak, dari masa perkuliahan sampai pada penyusunan skripsi ini, sangatlah sulit bagi saya untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, saya mengucapkan terima kasih kepada:

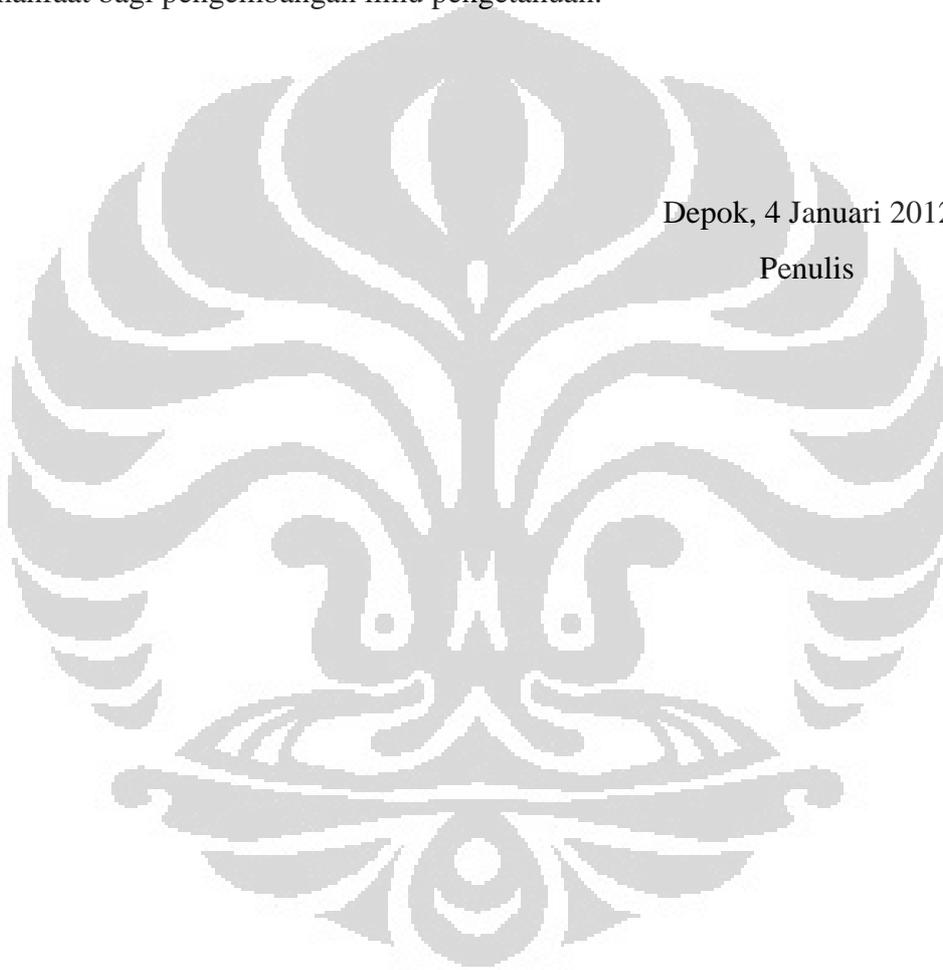
- a) Allah SWT yang telah memberikan nikmat berupa kuliah di Universitas Indonesia.
- b) Rasulullah SAW atas perjuangan beliau yang membawa menuju cahaya benderang Islam.
- c) Kepada para orang tua saya Ibunda Mursiyah, Ibunda Sri Lestari, Ibunda Suyati Nyatik dan Bapak Drs. Ni'am Hamzah yang selalu memberikan dukungan dan mendo'akan kebaikan untuk anaknya meskipun rasanya tidak pernah bisa saya membalasnya.
- d) Dr. Ing Nasruddin M. Eng, selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan skripsi ini.
- e) Sahabat skripik MD Abdul Jabbar dan Ahmad Dzulfahmi, yang selama kurang lebih setahun ini semoga bisa membuat ukhuwah kita lebih erat.
- f) Teman-teman SALAM UI 14, yang dalam setahun terakhir semoga kita dalam kebersamaan di kebaikan.
- g) Sahabat-sahabatku, M. Novan Luthfi, M. Rizal Ibrahim, Nanta Fakhri, Farid Hakimil I, dan lain-lain meskipun kita sering berolok-olok namun selalu merindukan kebersamaan itu.
- h) Pak Mauldi Ariesto, Mas Erik Winardi, Mr. Soumik Banerjee, Mr. Steve Plimpton atas bantuan korespondensi di dunia maya dalam pengerjaan skripsi ini.

- i) Mr Axel Kohlmeyer, atas “support”nya dalam pengerjaan skripsi ini melalui “kata-kata” penyemangatnya.
- j) Teman-teman pejuang 45 Mesin UI’07 yang selalu mengingatkan untuk mengerjakan skripsi
- k) Dan pihak-pihak lain yang tidak bisa saya sebutkan satu persatu disini.

Akhir kata, saya berharap Tuhan Yang Maha Esa berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi pengembangan ilmu pengetahuan.

Depok, 4 Januari 2012

Penulis



**HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS
AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS**

Sebagai sivitas akademik Universitas Indonesia, saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Mardi Santoso
NPM : 0706267181
Program Studi : Teknik Mesin
Departemen : Teknik Mesin
Fakultas : Teknik
Jenis karya : Skripsi

demi pengembangan ilmu pengetahuan, menyetujui untuk memberikan kepada Universitas Indonesia **Hak Bebas Royalti Noneksklusif (*Non-exclusive Royalty-Free Right*)** atas karya ilmiah saya yang berjudul :

“Simulasi Dinamika Molekular Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbon Nanotubes*
(CNT) Dengan Variasi Chirality”

beserta perangkat yang ada (jika diperlukan). Dengan Hak Bebas Royalti Noneksklusif ini Universitas Indonesia berhak menyimpan, mengalihmedia/formatkan, mengelola dalam bentuk pangkalan data (*database*), merawat, dan memublikasikan tugas akhir saya selama tetap mencantumkan nama saya sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini saya buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada tanggal : 26 Januari 2012

Yang menyatakan



(Mardi Santoso)

ABSTRAK

Nama : Mardi Santoso
Program Studi : Teknik Mesin
Judul : Simulasi Dinamika Molekular Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbon Nanotubes* (CNT) Dengan Variasi Chirality

Krisis energi merupakan salah satu permasalahan serius yang dihadapi saat ini. Sumber energy dari bahan bakar fosil semakin menipis sementara pertumbuhan akan kebutuhan energi sendiri semakihn 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.

Kata Kunci : CNT, Hidrogen, Adsorpsi, Chirality, Dinamika Molekuler

ABSTRACT

Name : Mardi Santoso
Major : Mechanical Engineering
Title : Molecular Dynamic Simulation of Hidrogen Adsorption on Carbon Nanotubes (CNT) With Various Chirality

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 diretly correlates with environment issues such as global warming. Hidrogen 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 nanotubes. Carbon Nanotubes is a good hidrogen 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 hidrogen 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 hidrogen adsortion by molecular dynamic simulation.

Keywords : CNT, Hidrogen, Adsorption, Chirality, Molecular Dynamic

DAFTAR ISI

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
UCAPAN TERIMA KASIH.....	iv
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vi
ABSTRAK	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR	xi
DAFTAR TABEL.....	xii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiii
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 LATAR BELAKANG.....	1
1.2 PERUMUSAN MASALAH.....	4
1.3 TUJUAN PENELITIAN	4
1.4 BATASAN MASALAH	4
1.5 METODOLOGI PENELITIAN	5
1.6 SISTEMATIKA PENELITIAN	5
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1. ADSORPSI HIDROGEN.....	7
2.1.1. Jenis – jenis Adsorpsi.....	7
2.1.1.1. Adsorpsi Fisika	7
2.1.1.2. Adsorpsi Kimia	8
2.1.2. Jenis – jenis Adsorpsi.....	9
2.1.2.1. Adsorpsi Isotermal	9
2.1.2.2. Adsorpsi Isobar	10
2.1.2.3. Adsorpsi Isosterik	10
2.1.3. Metode Pengujian Adsorpsi	11
2.1.3.1. Metode Gravimetrik.....	12
2.1.3.2. Metode Volumetrik.....	13
2.2. HIDROGEN	15
2.2.1. Penyimpanan Hidrogen.....	16
2.3. CARBON NANOTUBES	17
2.3.1. Jenis-Jenis Nanotube Carbon Nanotubes.....	18
2.3.1.1. Single-walled carbon nanotubes (SWCNT)	18
2.3.1.2. Multi-walled carbon nanotubes (MWCNT)	19
2.3.2. Sifat-Sifat Nanotube Karbon.....	20
2.4. DINAMIKA MOLEKULER.....	21
2.4.1. Perbedaan Dinamika Molekuler dengan Monte Carlo.....	23
2.4.2. Ensemble	24
2.4.2.1. Ensemble Mikrokanonikal (E,V,N).....	24
2.4.2.2. Ensemble Kanonikal (T,V,N).....	24

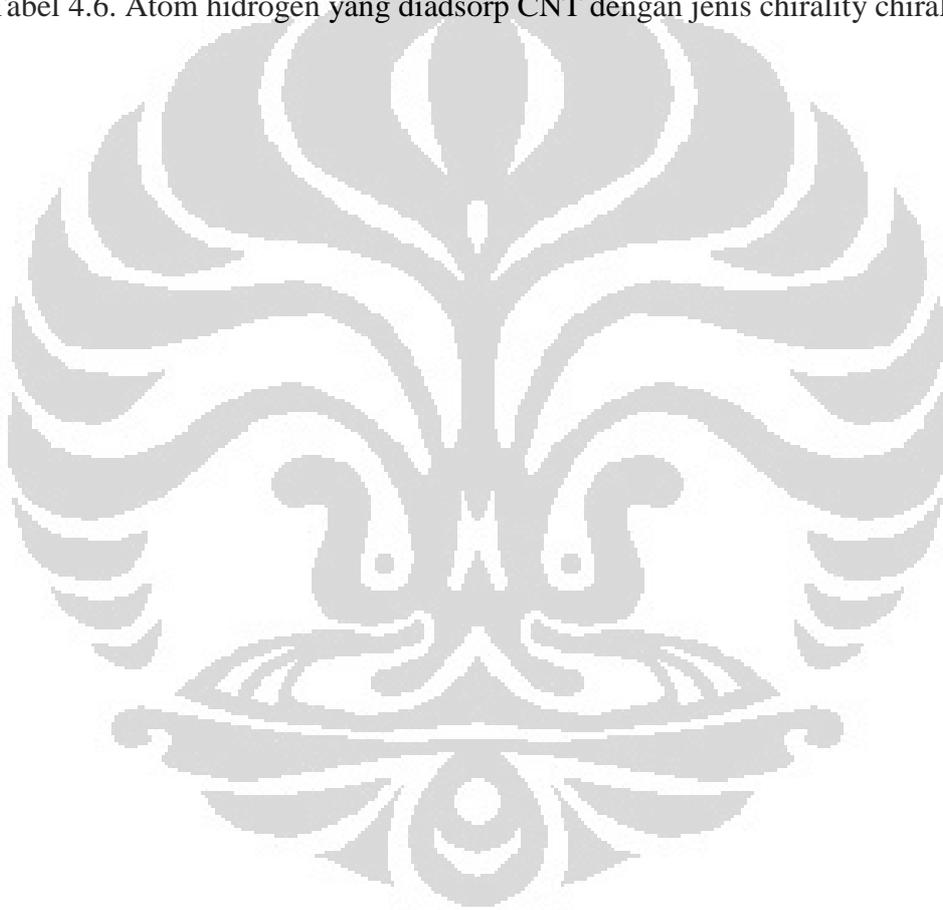
2.4.2.3.	Ensemble Isobarik Isothermal	25
2.4.3.	Mekanika Klasik	25
2.4.4.	Mekanika Statistik.....	26
2.4.4.1.	Energi Total	26
2.4.4.2.	Temperatur.....	27
2.4.4.3.	Tekanan.....	27
2.4.4.4.	Distribusi Kecepatan.....	27
2.4.4.5.	Entalphi.....	28
2.4.5.	Model Interaksi Antar Molekul.....	29
2.4.5.1.	Potensial Lennard Jones.....	29
2.4.5.2.	Gaya Antar Molekul	30
2.4.6.	Pemotongan Potensial	31
2.4.7.	Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit	31
2.4.7.1.	Algoritma Verlet	32
2.4.7.2.	Algoritma Leap-Frog	33
BAB 3	METODOLOGI PENELITIAN.....	34
3.1.	KOMPONEN SIMULASI	34
3.1.1.	LAMMPS.....	34
3.1.2.	Cygwin	34
3.1.3.	Avogadro.....	35
3.1.4.	VMD (Visualisasi Molekular Dynamics)	35
3.2.	PROSEDUR SIMULASI	35
3.2.2.	Inisialisasi Koordinat	35
3.2.2.1.	Pembentukan Hidrogen.....	36
3.2.2.2.	Pembentukan CNT.....	36
3.2.2.3.	Penggabungan Koordinat.....	38
3.2.3.	Pembentukan Input Script.....	38
3.2.4.	Running Program	46
3.2.5.	Visualisasi	46
BAB 4	HASIL DAN PEMBAHASAN.....	49
4.1.	HASIL	49
4.1.1.	Hasil Adsorpsi Hidrogen Running.....	50
4.1.2.	Hasil Visualisasi Simulasi Adsorpsi Hidrogen	54
4.2.	ANALISA	57
4.2.1.	Analisa Simulasi	57
4.2.2.	Analisa Hasil Data.....	58
4.2.3.	Analisa Grafik	60
BAB 5	KESIMPULAN DAN SARAN	63
5.1.	KESIMPULAN	63
5.2.	SARAN	63
DAFTAR	REFERENSI	64

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi	9
Gambar 2.2. Grafik Data yang Diperoleh pada Adsorpsi Isotermal	10
Gambar 2.3. Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi Isobar	10
Gambar 2.4. Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi <i>Isostere</i>	11
Gambar 2.5. Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan <i>Two Beam Balance</i>	12
Gambar 2.6. Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan <i>Magnetic Suspension Balance</i>	13
Gambar 2.7. Skema Metode Volumetrik	14
Gambar 2.8. Single Walled CNTs	18
Gambar 2.9. Multi-Walled CNTs	19
Gambar 2.10. Jenis CNTs berdasarkan sudut chiral	20
Gambar 2.11. Distribusi Kecepatan Molekul pada Berbagai Temperatur	28
Gambar 2.12. Potensial Lennard-Jones	30
Gambar 3.1. Inisialisasi Hidrogen	36
Gambar 3.2. Carbon Nanotube Builder pada VMD	37
Gambar 3.3. Inisialisasi CNT pada VMD	38
Gambar 3.4. Insert New Molecule pada VMD untuk visualisasi	47
Gambar 3.5. Molecule File Browser pada VMD	47
Gambar 3.6. Salah satu hasil adsorpsi hidrogen pada VMD	48
Gambar 4.1. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality armchair berdasarkan % wt	52
Gambar 4.2. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality armchair berdasarkan atom hidrogen yang diadsorp	53
Gambar 4.3. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality zigzag berdasarkan % wt	53
Gambar 4.4. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality zigzag berdasarkan atom hidrogen yang diadsorp	54
Gambar 4.5. Visualisasi kondisi awal CNT zigzag (8,0) running 150000	54
Gambar 4.6. Visualisasi kondisi akhir CNT zigzag (8,0) running 150000	55
Gambar 4.7. Visualisasi kondisi awal CNT armchair (10,10) running 100000	55
Gambar 4.8. Visualisasi kondisi akhir CNT armchair (10,10) running 100000	56
Gambar 4.9. Visualisasi kondisi awal CNT chiral (8,10) running 50000	56
Gambar 4.10. Visualisasi kondisi awal CNT chiral (8,10) running 50000	57

DAFTAR TABEL

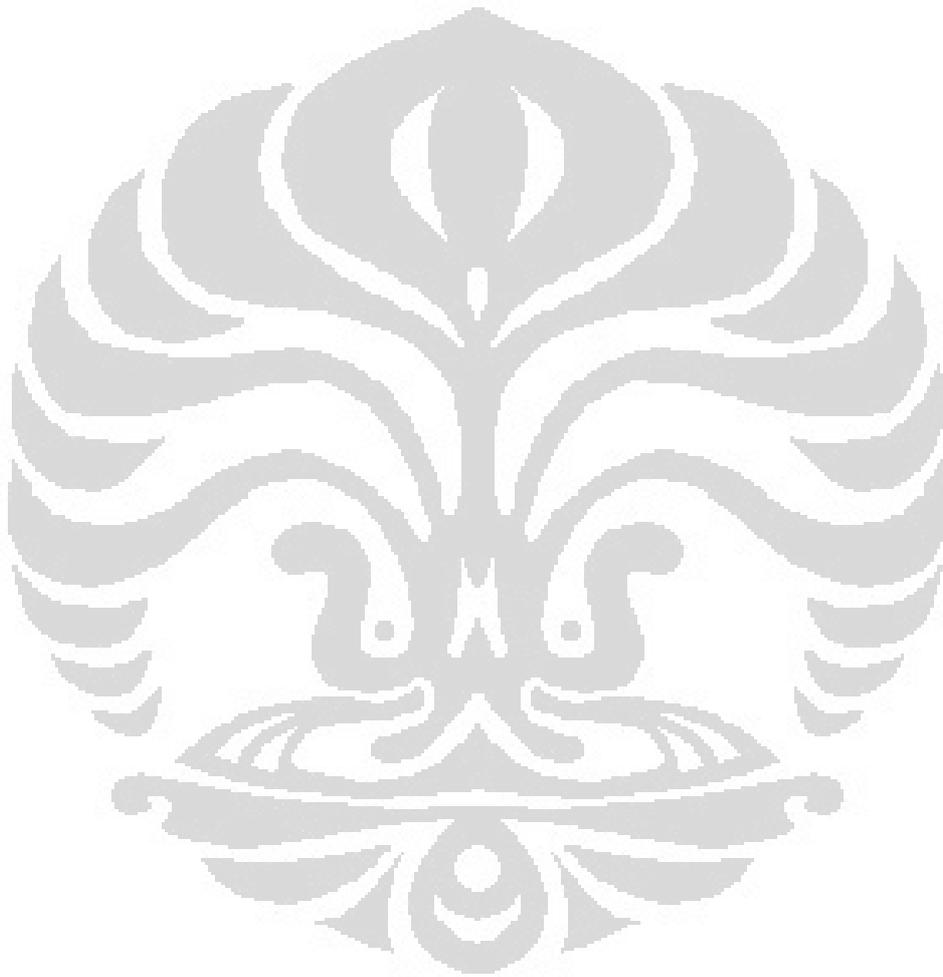
Tabel 3.1. Penjelasan Initialization pada LAMMPS.....	39
Tabel 3.2. Penjelasan Atom Definition pada LAMMPS.....	41
Tabel 3.3. Nilai parameter σ dan ϵ dari atom yang digunakan	42
Tabel 3.4. Penjelasan Setting pada LAMMPS.....	45
Tabel 3.5. Penjelasan Running pada LAMMPS	46
Tabel 4.1. Diameter CNT simulasi	50
Tabel 4.2. Hasil adsorpsi hydrogen pada CNT dan SWNT pada beberapa penelitian.....	50
Tabel 4.3. Hasil Adsorpsi hidrogen di semua chirality pada tiap time running....	51
Tabel 4.4. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality zigzag.....	51
Tabel 4.5. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality armchair ..	51
Tabel 4.6. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality chiral	52



DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1. Input script program simulasi adsorpsi hydrogen pada LAMMPS

Lampiran 2. Read_data file simulasi adsorpsi hydrogen pada LAMMPS



DAFTAR ISTILAH DAN SIMBOL

Simbol	Arti	Satuan
A	Luas	m^2
k	Konduktivitas termal	W/m.K
k_b	Konstanta Boltzmann	J/K
a_i	Percepatan molekul	m/s^2
l/L	Panjang	nm
T	Temperatur	K
E	Energi Total	kJ
F	Gaya	N/m
H	Entalpi	kJ
N	Jumlah Molekul	
P	Tekanan	Pa
P	Momentum	kg.m/s
R_c	Radius <i>Cut Off</i>	σ
R_i	Posisi Molekul I	σ
R_{ij}	Jarak antar molekul i dan j	σ
U	Energi Potensial	kJ
V	Volume	m^3
v_i	Kecepatan Molekul I	m/s
Δt	Time step	s
Huruf Yunani		
ϵ	Epsilon/Parameter kekuatan interaksi	kJ/mol
σ	Sigma/Parameter panjang interaksi	Å

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 LATAR BELAKANG

Permasalahan energi tidak dapat lagi dipisahkan dari seluruh kehidupan manusia. Energi dibutuhkan dalam semua aktivitas mulai dari aktivitas di rumah, di perjalanan, di kantor maupun kebutuhan dalam skala yang lebih besar seperti dunia industri. Pada saat ini yang menjadi masalah utama adalah semakin minimnya cadangan bahan bakar fosil. Ketersediaan energi yang semakin terbatas membuat harga energi menjadi semakin mahal dan pada saatnya akan menjadi barang yang mewah.

Berbagai pihak sudah banyak melakukan langkah antisipasi untuk mengatasi krisis energi yang mengancam di depan mata. Langkah antisipasi yang dimaksud antara lain dengan melakukan penghematan penggunaan energi, pemanfaatan Energi Baru dan Terbarukan, pemanfaatan teknologi tepat guna serta mencari berbagai sumber energi alternatif yang mungkin.

Salah satu sumber energi alternatif yang saat ini banyak menarik perhatian para peneliti adalah hidrogen. Hidrogen dipandang sebagai salah satu sumber energi masa depan yang sangat menjanjikan. Hal ini disebabkan karena hidrogen termasuk energi yang dapat diperbarui dan terbarukan serta ramah lingkungan. Sumber hidrogen di alam yang cukup melimpah dan emisi hasil pembakaran yang tidak menghasilkan CO₂ membuat hidrogen berpotensi sebagai salah satu energi masa depan yang patut dipertimbangkan dalam konteks penerapan energi yang berkelanjutan sesuai dengan blue print kebijakan energi nasional.

Meskipun demikian, masih banyak kendala dalam pemanfaatan hidrogen. Hidrogen merupakan gas yang sangat reaktif, dalam konsentrasi tertentu, dengan udara dapat membentuk campuran eksplosif yang secara spontan akan meledak jika dipicu oleh api, panas atau sinar matahari. Kendala lain yang dihadapi adalah masalah penyimpanan dan distribusi.

Berbagai teknologi penyimpanan gas hidrogen terus dikembangkan melalui berbagai eksperimen. Pada saat ini, telah dikenal empat sistem penyimpanan hidrogen, yaitu pencairan hidrogen, hidrogen bertekanan, metal hidrida, dan adsorpsi pada material berpori.

Teknik pencairan merupakan sistem yang dapat menyimpan hidrogen dengan kapasitas terbesar dibandingkan dengan teknik lainnya, tetapi biaya operasionalnya besar karena memerlukan energi yang besar untuk mencairkan hidrogen sampai minus 253°C dan kurang aman untuk digunakan. Begitupula teknik hidrogen bertekanan memerlukan tekanan yang besar untuk menyimpan hidrogen dalam kapasitas besar dan penggunaannya juga kurang aman. Teknik penyimpanan dalam bentuk metal hidrida relatif aman dan mempunyai kapasitas penyimpanan hidrogen yang cukup besar, tetapi memiliki kekurangan apabila digunakan sebagai sistem penyimpanan bahan bakar pada kendaraan karena memiliki bobot yang berat dan memerlukan panas yang tinggi untuk melepaskan hidrogen dari ikatan kimia dengan logamnya.

Teknik penyimpanan hidrogen dengan metode adsorpsi dalam material berpori seperti karbon menjawab semua kekurangan dari ketiga metode di atas. Selain relatif aman untuk digunakan, kondisi operasi yang relatif murah dan berat molekul yang rendah dari atom karbon dimana memberikan total tangki penyimpanan yang ringan sangat menjanjikan untuk diaplikasikan pada sistem penyimpanan hidrogen sebagai bahan bakar terutama pada kendaraan bermotor. Molekul gas yang disimpan dalam keadaan teradsorpsi pada adsorben mempunyai densitas yang mendekati densitas cairnya sehingga kapasitas penyimpanan hidrogen dalam teknik ini juga relatif besar walaupun masih lebih kecil dibandingkan dengan teknik pencairan (Prasodjo, 2010).

Sistem penyimpanan hidrogen dengan teknologi adsorpsi pada material berpori telah menarik banyak perhatian para peneliti untuk mempelajarinya. Nanotube karbon (CNT) merupakan salah satu material yang mempunyai kemampuan yang cukup baik untuk adsorpsi gas hidrogen. Nanotube karbon

(Carbon Nanotube/CNT) merupakan media penyimpanan yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar.

Berbagai eksperimen telah dilakukan untuk mengetahui kapasitas penyimpanan hidrogen dalam CNTs. Namun, dalam eksperimen umumnya terkendala oleh keandalan alat dan tingkat keamanan yang pada akhirnya membutuhkan biaya yang mahal. Salah satu terobosan untuk mengatasi kendala tersebut antara lain dengan melakukan pemodelan dan Simulasi Dinamika Molekuler (SDM).

Dinamika Molekul merupakan suatu teknik yang digunakan untuk mengamati pergerakan molekul yang saling berinteraksi. Pergerakan molekul ini dipengaruhi oleh suatu potensial yang dibentuk oleh medan gaya dari partikel-partikel lain disekitarnya. Hanya saja karena jumlah partikel yang berperan dalam membentuk potensial itu sangatlah banyak jumlahnya (Bilangan Avogadro berorde 10^{23}), maka akan sangat sulit untuk mengkalkulasikannya. Untuk itu, telah dikembangkan beberapa jenis penyederhanaan kalkulasi untuk menyelesaikan permasalahan dinamika molekuler ini, yang tentunya masing-masing metode pasti memiliki keterbatasan misalnya ketelitian masing-masing metode.

Salah satu model potensial yang sering digunakan dalam simulasi dinamika molekul adalah metode Potensial Lennard Jones. Salah satu keuntungan dari teknik simulasi ini adalah sifatnya yang deterministik yaitu jika suatu keadaan materi diketahui pada waktu tertentu, maka keadaan materi tersebut pada waktu yang lainnya akan dapat ditentukan. Ciri khas dari potensial ini adalah adanya fungsi batas (cut off function) yang membatasi jumlah atom yang terlibat selama perhitungan potensial yang bekerja pada suatu atom, sehingga dengan fungsi batas ini, atom-atom yang jauh terpisah dari atom dari suatu jarak tertentu yang lebih jauh dapat diabaikan sehingga mengurangi jumlah perhitungan (Supriyadi, Nasruddin., 2010).

1.2 PERUMUSAN MASALAH

Dalam merancang simulasi dinamika molekul tentu akan mengalami permasalahan. Permasalahan yang utama dalam melakukan simulasi ini adalah pemodelan sistem yang terdiri dari model interaksi antar molekul dan interaksi antara sistem dengan lingkungan.

Pemodelan sistem akan menentukan kebenaran hasil simulasi dari segi fisis. Namun hasil yang lebih akurat memerlukan model yang lebih kompleks dan sulit dipecahkan dan membutuhkan waktu komputasi lebih lama.

1.3 TUJUAN PENELITIAN

Tujuan dari penelitian yang dilakukan adalah :

1. Memahami prinsip dinamika molekuler yang terjadi pada adsorpsi hidrogen .
2. Mengetahui kuantitas hidrogen yang teradsorpsi oleh CNT.
3. Mengetahui seberapa besar pengaruh variasi chirality CNT terhadap adsorpsi hidrogen.
4. Membandingkan hasil adsorpsi hidrogen pada chirality yang berbeda-beda di setiap CNT.

1.4 BATASAN MASALAH

Pada penelitian dengan menggunakan metode simulasi dinamika molekuler ini menggunakan batasan:

1. Menghitung jumlah hidrogen yang diadsorp oleh CNT dengan konfigurasi yang berbeda.
2. Ruang simulasi memiliki volume yang sama dengan temperatur sistem 10 K, jumlah molekul hidrogen sebanyak 20, panjang *Carbon Nanotube* (CNT) 1,122 nm
3. Proses running dibatasi pada 50000, 100000, dan 150000.
4. Pada proses simulasi temperatur sistem dijaga untuk selalu konstan. (T_{awal} sama dengan T_{akhir})
5. Pada simulasi, untuk potensial dan gaya antar molekul digunakan model potensial Lennard-Jones berdasarkan interaksi Coulomb.

Universitas Indonesia

6. Membandingkan jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dengan konfigurasi yang berbeda / T dan P system yang berbeda.

1.5 METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian dilakukan dengan langkah-langkah sebagai berikut:

1. Studi literatur
Tahap pengumpulan literature mengenai termodinamika statistik, dinamika molekul, potensial lennard jones, Carbon nanotube (CNT), hidrogen, dan penyimpanan hidrogen pada CNT.
2. Perancangan perangkat lunak dalam simulasi dinamika molekuler
Perangkat lunak yang digunakan adalah LAMMPS (*Large Scale Atomic/Molecular Massively Paralel Simulator*)
3. Menjalankan simulasi dengan parameter yang telah ditentukan
4. Analisis hasil simulasi
5. Penulisan laporan

1.6 SISTEMATIKA PENELITIAN

Laporan tugas akhir ini disusun dalam lima bab yaitu sebagai berikut:

Bab I Pendahuluan

Bab ini menjelaskan latar belakang penelitian, tujuan penelitian, batasan masalah, dan sistematika pembahasan.

Bab II Tinjauan Pustaka

Bab ini menjelaskan landasan teori yang digunakan dalam penelitian, yaitu dasar persamaan gerak, mekanika statistik, dasar-dasar dinamika molekul, Carbon nanotube (CNT), model interaksi antarmolekul, penyimpanan hidrogen dalam CNT.

Bab III Metodologi Penelitian

Bab ini membahas mengenai peralatan yang dibutuhkan dalam simulasi dan prosedur pelaksanaan simulasi.

Bab IV Hasil dan Pembahasan

Bab ini memberikan hasil uji coba simulasi dinamika molekul yang telah dilakukan pada bab III untuk melihat kesesuaian spesifikasi metode yang digunakan sehingga dapat dianalisa hasil yang telah diperoleh.

Bab V Kesimpulan dan saran

Bab ini memberikan kesimpulan dari hasil perancangan program yang telah dilakukan dan juga memberikan saran-saran untuk penelitian selanjutnya



BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1. ADSORPSI HIDROGEN

Adsorpsi atau penyerapan adalah suatu proses yang terjadi ketika suatu fluida, cairan maupun gas, terikat kepada suatu padatan atau cairan (zat penyerap, adsorben) dan akhirnya membentuk suatu lapisan tipis atau film (zat terperap, adsorbat) pada permukaannya. Berbeda dengan absorpsi yang merupakan penyerapan fluida oleh fluida lainnya dengan membentuk suatu larutan .

Fenomena adsorpsi terjadi karena molekul-molekul pada permukaan zat padat atau zat cair yang memiliki gaya tarik dalam keadaan tidak setimbang yang cenderung tertarik ke arah dalam (gaya kohesi adsorben lebih besar daripada gaya adhesinya). Ketidakseimbangan gaya tarik tersebut mengakibatkan zat padat atau zat cair yang digunakan sebagai adsorben cenderung menarik zat-zat lain yang bersentuhan dengan permukaannya.

2.1.1. Jenis – jenis Adsorpsi

Berdasarkan interaksi molekular antara permukaan adsorben dengan adsorbat, adsorpsi dibagi menjadi dua bagian, yaitu adsorpsi fisika dan adsorpsi kimia.

2.1.1.1. Adsorpsi Fisika

Adsorpsi fisika terjadi bila gaya intermolekular lebih besar dari gaya tarik antar molekul atau gaya tarik menarik yang relatif lemah antara adsorbat dengan permukaan adsorben, gaya ini disebut gaya Van der Waals sehingga adsorbat dapat bergerak dari satu bagian permukaan ke bagian permukaan lain dari adsorben.

Gaya antar molekul adalah gaya tarik antara molekul-molekul tersebut dengan permukaan padat, sedangkan gaya intermolekular adalah gaya tarik antar molekul-molekul itu sendiri. Adsorpsi ini berlangsung cepat, dapat

membentuk lapisan jamak (*multilayer*), dan dapat bereaksi balik (*reversible*), karena energi yang dibutuhkan relatif rendah. Energi aktivasi untuk terjadinya adsorpsi fisika biasanya adalah tidak lebih dari 1 kkal/gr-mol, sehingga gaya yang terjadi pada adsorpsi fisika termasuk lemah. Adsorpsi fisika dapat berlangsung di bawah temperatur kritis adsorbat yang relatif rendah sehingga panas adsorpsi yang dilepaskan juga rendah yaitu sekitar 5 – 10 kkal/gr-mol gas, lebih rendah dari panas adsorpsi kimia.

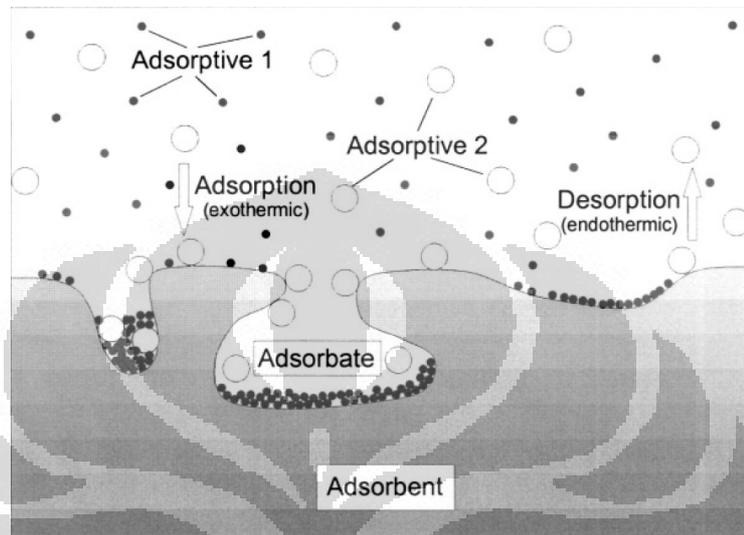
2.1.1.2. Adsorpsi Kimia

Adsorpsi kimia terjadi karena adanya reaksi antara molekul-molekul adsorbat dengan adsorben dimana terbentuk ikatan kovalen dengan ion. Gaya ikat adsorpsi ini bervariasi tergantung pada zat yang bereaksi. Adsorpsi jenis ini bersifat tidak *reversible* dan hanya dapat membentuk lapisan tunggal (*monolayer*). Umumnya terjadi pada temperatur tinggi di atas temperatur kritis adsorbat, sehingga panas adsorpsi yang dilepaskan juga tinggi, yaitu sekitar 10-100 kkal/gr-mol. Untuk dapat terjadinya peristiwa desorpsi dibutuhkan energi lebih tinggi untuk memutuskan ikatan yang terjadi antara adsorbat dengan adsorben. Energi aktivasi pada adsorpsi kimia berkisar antara 10 – 60 kkal/gr-mol.

Pada adsorpsi kimia molekul adsorbat terikat sangat kuat dengan atom atau molekul permukaan adsorben dan kedua molekul tersebut bereaksi secara kimia dan adsorpsi jenis ini bersifat *irreversible*, sehingga sulit untuk memisahkan antara molekul yang terserap dengan adsorben.

Jika interaksi antara padatan dan molekul yang mengembun relatif lemah, maka proses ini disebut adsorpsi fisik. Walaupun adsorpsi biasanya dikaitkan dengan perpindahan dari suatu gas atau cairan ke suatu permukaan padatan, perpindahan dari suatu gas ke suatu permukaan cairan juga terjadi. Substansi yang terkonsentrasi pada permukaan didefinisikan sebagai adsorbat dan material dimana adsorbat terakumulasi didefinisikan sebagai adsorben. Proses lepasnya adsorbat dari permukaan adsorben disebut sebagai proses desorpsi. Gambar 1 memberikan gambaran yang lebih jelas mengenai definisi adsorpsi, desorpsi, adsorben, adsorbat, dan adsorptif. Pada Gambar 1 terlihat

bahwa adsorbat didefinisikan sebagai gas atau molekul yang terserap oleh adsorben, adsorptif adalah adsorbat yang akan diserap oleh adsorben, adsorpsi adalah proses penyerapan adsorbat pada adsorben, dan desorpsi adalah proses pelepasan adsorbat dari adsorben (Keller dkk, 2005).



Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi

2.1.2. Jenis – jenis Adsorpsi

Pada sistem adsorbat-adsorben, jumlah adsorbat yang terserap pada kondisi equilibrium adalah merupakan fungsi dari tekanan dan temperatur (Bansal, R.C. dkk., 2005);

$$\frac{x}{m} = f(p, T) \quad (2.1)$$

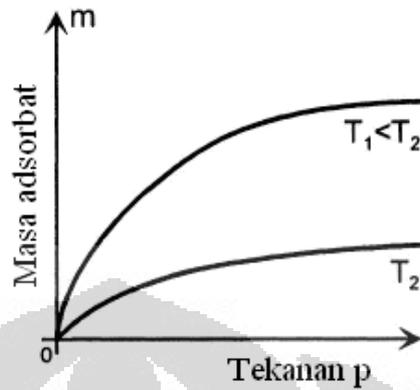
Dimana, x/m adalah jumlah adsorbat yang terserap per unit massa adsorben pada tekanan equilibrium dan pada temperatur adsorpsi.

Adsorpsi equilibrium dapat didekati dalam tiga cara, yaitu:

2.1.2.1. Adsorpsi Isotermal

Pada adsorpsi isotermal, temperatur adsorpsi dijaga konstan dengan demikian x/m tergantung pada tekanan equilibrium sehingga jumlah adsorbat yang terserap adalah (Bansal, R.C. dkk., 2005):

$$\frac{x}{m} = f(p) \quad [T = \text{kons tan}] \quad (2.2)$$



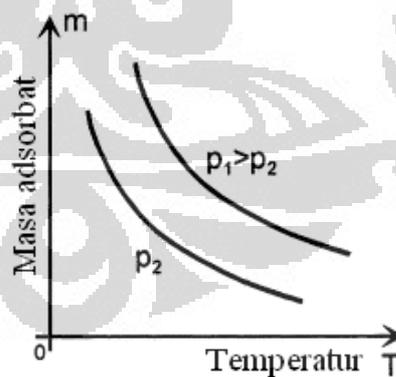
Gambar 2.2. Grafik Data yang Diperoleh pada Adsorpsi Isotermal

(Keller, Jurgen., 2005)

2.1.2.2. Adsorpsi Isobar

Pada adsorpsi isobar, tekanan adsorpsi dijaga konstan dan temperatur adsorpsi divariasikan dengan demikian x/m adalah (Bansal, R.C. dkk., 2005):

$$\frac{x}{m} = f(T) \quad [p = \text{kons tan}] \quad (2.3)$$



Gambar 2.3. Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi Isobar

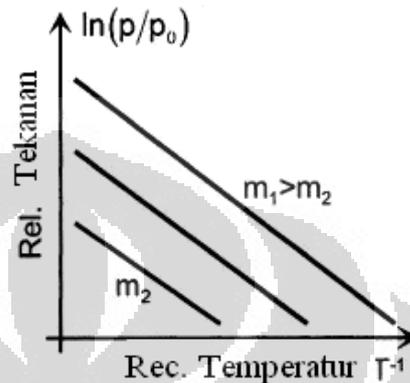
(Keller, Jurgen., 2005)

2.1.2.3. Adsorpsi Isosterik

Pada adsorpsi isosterik dimana jumlah adsorbat yang terserap per unit massa adsorben adalah konstan dan temperatur divariasikan sehingga tekanan

menjadi fungsi yang sangat esensial untuk menjaga x/m tetap konstan (Bansal, R.C. dkk., 2005).

$$p = f(T) \quad \left[\frac{x}{m} = \text{konstan} \right] \quad (2.4)$$



Gambar 2.4. Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi *Isostere*

(Keller, Jurgen., 2005)

Data eksperimen adsorpsi yang berupa jumlah adsorbat yang terserap pada adsorben biasanya dihasilkan dari proses adsorpsi isothermal, hal tersebut dikarenakan investigasi proses adsorpsi pada temperatur konstan adalah cara atau metode yang paling mudah. Selain itu, analisis teoritis data adsorpsi untuk asumsi pada pemodelan biasanya juga menggunakan data adsorpsi isothermal (Bansal, R.C. dkk., 2005).

Dikarenakan ketiga tipe adsorpsi equilibrium tersebut di atas adalah merupakan fungsi equilibrium, sehingga dimungkinkan untuk menghasilkan atau mendapatkan satu parameter dengan menggunakan parameter dari salah satunya (Bansal, R.C. dkk., 2005).

2.1.3. Metode Pengujian Adsorpsi

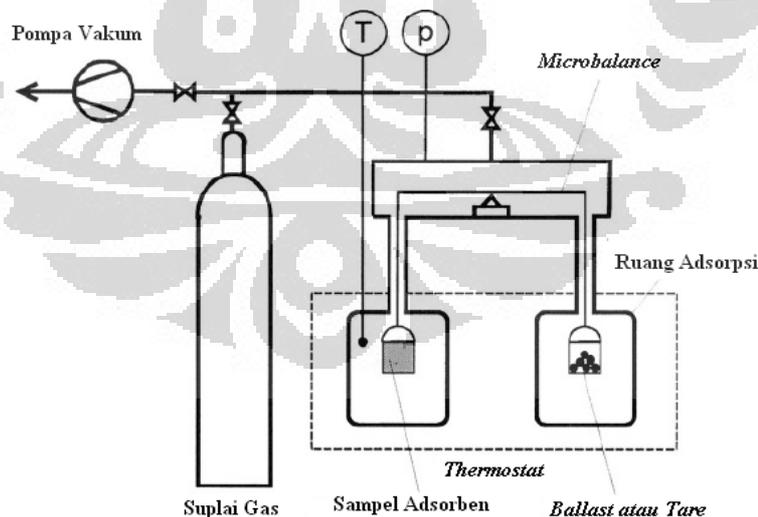
Terdapat empat metode pengukuran penyerapan adsorpsi, yaitu: metode carrier gas, metode volumetrik, metode gravimetrik dan metode kalorimetrik. Empat metode pengukuran penyerapan adsorpsi tersebut telah digunakan di berbagai negara dan telah diakui secara internasional (Keller, J.U et al, 2002).

Dalam tinjauan pustaka ini hanya akan dibahas dua buah metode yang paling banyak digunakan yaitu metode gravimetrik dan volumetrik.

2.1.3.1. Metode Gravimetrik

Metode gravimetrik memiliki akurasi untuk pengukuran paling tinggi diantara metode lain pada pengukuran adsorpsi isothermal. Pengukuran adsorpsi isothermal yang dapat dilakukan menggunakan metode gravimetrik, antara lain: massa yang terserap pada adsorben, tekanan gas dan temperatur. Alat yang digunakan untuk mengukur adsorpsi isothermal adalah *Thermograph Microbalance Aparatus* (TMA) (Rouquerol, J et al, 1998).

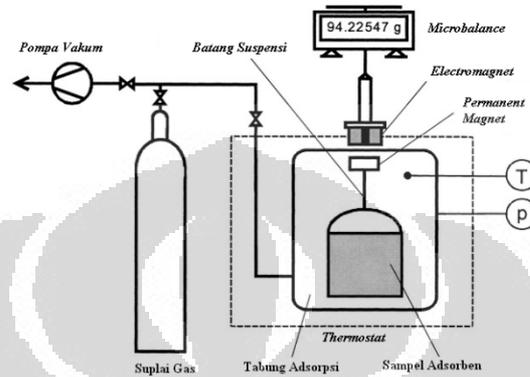
Preparasi sampel pengujian menggunakan metode gravimetrik mutlak dilakukan untuk mendapatkan pengujian yang optimum. Preparasi sampel dilakukan dengan *degassing* sampel untuk mendapatkan massa kering sampel serta temperatur, tekanan dan waktu untuk mendapatkan data pengujian yang valid (Keller, J.U et al, 2002). Alat uji adsorpsi menggunakan metode gravimetrik membutuhkan investasi yang cukup besar, karena untuk memiliki TGA dengan keakurasian tinggi harus menyediakan jutaan dollar (Rouquerol, J et al, 1998). Skematik *Thermograph Microbalance Aparatus* sebagai berikut:



Gambar 2.5. Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan Two Beam Balance

(Keller, Jurgen., 2005)

Pada Gambar 2.5 terlihat skema metode gravimetrik dengan menggunakan *Two Beam Balance*, dimana sampel adsorben diletakkan di dalam tabung, dan selanjutnya ketika massa adsorben bertambah karena akibat terserapnya adsorbat, maka *microbalance* langsung membaca perubahan berat sampel adsorben tersebut.



Gambar 2.6. Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan *Magnetic Suspension Balance*

(Keller, Jurgen., 2005)

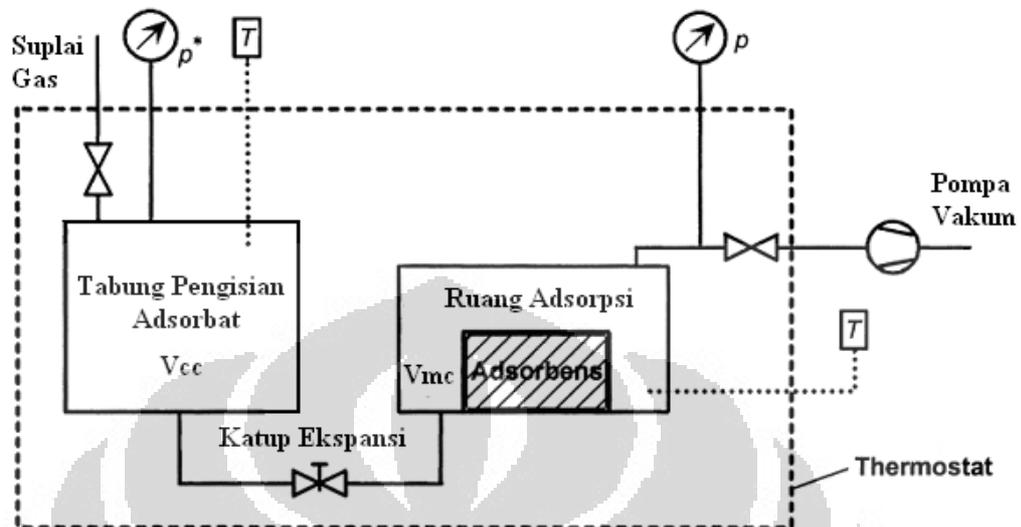
Pada Gambar 2.6 terlihat skema metode gravimetrik dengan menggunakan *Magnetic Suspension Balance*, dimana sampel adsorben diletakkan di dalam tabung dan selanjutnya ketika massa adsorben bertambah karena akibat terserapnya adsorbat, maka medan magnet juga akan berubah disebabkan karena adanya perubahan jarak antara *permanent magnet* dengan *electromagnet*.

2.1.3.2. Metode Volumetrik

Dasar pengukuran metode volumetrik adalah tekanan, volume, dan temperatur. Teknik pengukuran adsorpsi dengan metode volumetrik sekarang ini lebih sering digunakan, karena sederhana dan efektif selama alat ukur tekanan dan temperatur dapat memberikan informasi yang dibutuhkan pada proses adsorpsi (Rouquerol, J et al, 1998). Skematik metode volumetrik terlihat pada Gambar 2.7.

Data pengukuran pada metode volumetrik adalah tekanan dan temperatur, dimana data diukur saat adsorbat masuk ke tempat diletakkannya

adsorben (adsorption bulb). Setelah keseimbangan adsorpsi terjadi, jumlah adsorbat yang terserap dihitung dari perubahan tekanan yang terjadi.



Gambar 2.7. Skema Metode Volumetrik

(Keller, Jurgen., 2005)

Peralatan untuk pengukuran adsorpsi equilibrium dengan menggunakan metode volumetrik pada dasarnya terdiri atas *storage vessel* dan *adsorption chamber* yang keduanya dihubungkan dengan menggunakan *tube*. Kedua tabung tersebut harus ditempatkan dalam sebuah wadah yang dilengkapi dengan *thermostat*, sehingga temperturnya dapat dijaga konstan dan juga dilengkapi dengan katup sehingga gas atau adsorbat dapat disuplai dan dibuang, selain itu juga dilengkapi dengan termometer dan manometer, sehingga temperatur dan tekanan di dalam *vessel* dapat diukur (Keller, Jurgen., 2005).

Hal yang terpenting dalam pengukuran adsorpsi isothermal menggunakan metode volumetrik adalah, sebagai berikut (Keller, J.U et al, 2002):

1. Volume efektif alat uji harus diketahui.
2. Alat uji harus dapat mengukur temperatur dari gas yang menjadi adsorbat.
3. Keakuratan alat uji untuk mengukur perubahan tekanan pada metode volumetrik adalah hal yang utama.

4. Keseimbangan adsorpsi terjadi apabila tekanan relatif mencapai $p/p_0 = 1$, maka pengukuran berakhir.
5. Perhitungan adsorbat yang terserap dapat diukur menggunakan persamaan gas ideal.

Kelebihan metode volumetrik adalah dapat mengukur beberapa jenis sampel, dan memiliki *sensitivity* yang tinggi. Biaya pembuatan alat ukur menggunakan metode volumetrik murah dan mudah dibuat karena komponennya ada di pasar dan relatif murah (Keller, J.U et al, 2002).

2.2. HIDROGEN

Hidrogen pertama kali ditemukan pada tahun 1766 oleh Henry Cavendish dan dinamai oleh Lavoisier dengan bahasa Yunani, dengan menggunakan kata *hydro* yang berarti air dan *genes* yang berarti generator. Hidrogen merupakan elemen pertama dari tabel periodik kimia dan merupakan elemen yang paling melimpah di bumi.

Namun demikian, hidrogen tidak biasa ditemukan dalam bentuk aslinya, karena hidrogen selalu siap bersatu dengan elemen atau unsur lainnya. Hidrogen tidak berwarna, tidak berbau, tidak berasa, dan merupakan gas yang tidak beracun di bawah kondisi normal bumi. Karakter hidrogen merupakan molekul diatomic, artinya masing – masing molekul memiliki dua atom hidrogen, inilah alasan mengapa hidrogen murni ditulis dengan lambang “H₂”.

Dalam perkembangannya, hidrogen diarahkan untuk menjadi sumber energy alternative terbarukan. Dengan hadirnya teknologi *Fuel Cell*, hidrogen menjadi bahan utama untuk dilektrolisis sehingga menghasilkan aliran listrik yang dapat digunakan untuk menggerakkan motor listrik agar dapat menjalankan kendaraan. Namun, permasalahannya belum ditemukan tempat penyimpanan hidrogen yang tepat sesuai dengan karakteristik hidrogen tersebut, baik dari segi efisiensi, ukuran, berat, biaya, dan keamanan dalam penggunaannya sebagai sumber energy dalam transportasi atau pun kebutuhan energy lainnya.

2.2.1. Penyimpanan Hidrogen

Penyimpanan hidrogen telah menarik banyak perhatian dunia terkait isu perwujudan energi yang berkelanjutan dan ramah lingkungan. Problem utama dalam menyimpan hidrogen adalah karena hidrogen berbentuk gas pada temperatur dan tekanan kamar sehingga memerlukan volume yang besar untuk menyimpannya dan sulit untuk diaplikasikan terutama sebagai bahan bakar kendaraan bermotor. Satu kilogram hidrogen menempati 12,2 m³ pada temperature dan tekanan kamar. Karena dibutuhkan sedikitnya 5 kg hidrogen untuk memiliki kemampuan jarak tempuh yang sama dengan mobil berbahan bakar minyak, maka diperlukan usaha untuk mengurangi volume 5 kg hidrogen dari 60 m³ menjadi 0,06-0,1 m³ yang mana merupakan volume yang diperbolehkan untuk tangki bahan bakar (Yan dkk, 2007).

Pada saat ini, telah dikenal empat sistem penyimpanan hidrogen, yaitu pencairan hidrogen, hidrogen bertekanan, metal hidrida, dan adsorpsi pada material berpori. Teknik pencairan dan metal hidrida merupakan sistem yang dapat mengurangi volume hidrogen 600 sampai 1000 kali dari volume pada kondisi kamarnya (Yan dkk, 2007).

Walaupun begitu beberapa kekurangan dari kedua teknik ini menyebabkan kurang dapat digunakan secara komersial sebagai penyimpan hidrogen. Teknik pencairan hidrogen memerlukan energi yang besar untuk mencairkan hidrogen pada temperatur minus 253 °C dan sering terjadi boil off. Teknik penyimpanan dalam bentuk metal hidrida relatif aman, tetapi memiliki bobot yang berat dan memerlukan panas yang tinggi untuk melepaskan hidrogen dari ikatan kimia dengan logamnya.

Teknik hidrogen bertekanan merupakan teknik menekan gas hidrogen pada tekanan tinggi untuk memperoleh kerapatan gas hidrogen yang lebih besar sehingga dapat disimpan lebih banyak. Tekanan yang digunakan dalam teknik penyimpanan ini dapat mencapai 70 MPa (Conte dkk, 2001)

Selain memerlukan energi yang besar dan fabrikasi vessel yang cukup mahal, teknik ini juga kurang aman untuk digunakan karena bekerja pada

tekanan yang tinggi. Teknik penyimpanan hidrogen dengan metode adsorpsi dalam material berpori seperti karbon merupakan teknik hidrogen bertekanan yang efektif dan dapat menjawab semua kekurangan dari ketiga metode di atas. Selain relatif aman untuk digunakan, kondisi operasi yang relatif murah dan berat molekul yang rendah dari atom karbon dimana memberikan total tangki penyimpanan yang ringan sangat menjajikan untuk diaplikasikan pada sistem penyimpanan hidrogen sebagai bahan bakar terutama pada kendaraan. Molekul gas pada yang disimpan dalam keadaan teradsorpsi pada adsorben mengalami kondensasi dimana densitasnya mendekati densitas cair sehingga kapasitas penyimpanan hidrogen dalam teknik ini juga relatif besar walaupun masih lebih kecil dibandingkan dengan teknik pencairan gas.

Poirier dan kawan-kawan melaporkan kapasitas penyimpanan hidrogen dengan metode adsorpsi dalam karbon aktif lebih besar daripada dalam metode gas bertekanan. Pada kondisi yang sama, yaitu temperatur 77 OC dan tekanan 50 bar, hidrogen dapat disimpan dalam metode adsorpsi sebesar 35 Kg/m³ sedangkan dalam metode gas bertekanan sebesar 17 Kg/m³. Walaupun begitu metode adsorpsi ini dapat menjadi kurang efisien pada tekanan yang cukup tinggi (di atas 100 bar) karena sudah mengalami kejenuhan sehingga kapasitas penyimpanannya menjadi lebih kecil dibandingkan dengan metode gas bertekanan pada tekanan yang sama (Poirier dkk, 2004)

2.3. CARBON NANOTUBES

Carbon Nanotubes (CNTs) merupakan struktur graphit (hibridisasi - sp²) terbuat dari karbon yang mempunyai dimensi dalam satuan nanometer. Carbon nanotube atau yang dikenal dengan CNTs sebenarnya telah lama ditemukan. Pada tahun 1970, seorang peneliti dari Jepang, bernama Morinobu Endo yang menjalankan penelitiannya di University of Orleans, Prancis telah menemukan filamen karbon berukuran 7 nanometer. Namun, hasil penemuannya tersebut tidak menarik perhatian peneliti yang lain untuk meneruskan penemuannya tersebut. Kemudian pada tahun 1985, ditemukannya bahan fullerene oleh Robert Curl, Harold Kroto, dan Richard Smalley (Pemenang Hadiah Nobel Kimia tahun 1996).

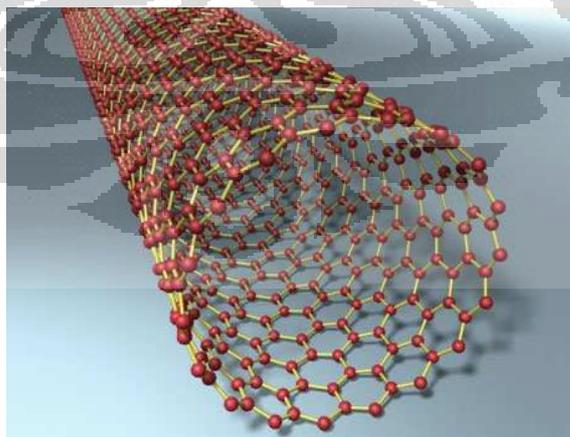
Pada tahun 1991, Sumio Iijima pada akhirnya menemukan hubungan antara fullerenes dengan model carbon nanotube hingga akhirnya ia menemukan carbon nanotube pada saat ia bekerja di perusahaan NEC di Jepang dan berhasil mengemukakan penelitiannya dengan lengkap mengenai struktur dan sifat-sifat karbon nanotube menggunakan mikroskop elektron beresolusi tinggi.

Carbon nanotube yang ditemukan Profesor Iijima ini merupakan suatu rantai atom karbon yang terikat di antara satu sama lain secara heksagonal (segi enam) berbentuk silinder tak pejal yang mempunyai diameter 1-2 nanometer dengan satu atau lebih dinding silinder pada ukuran bervariasi dari 1 nm hingga 100 nm. Panjang silinder dapat mencapai ukuran dalam rentang mikrometer hingga sentimeter.

2.3.1. Jenis-Jenis Nanotube *Carbon Nanotubes*

Sampai saat ini ada dua jenis CNT. Pertama adalah CNT berdinding tunggal di mana hanya ada satu tabung silinder karbon. Kedua adalah CNT berdinding ganda di mana satu tabung silinder CNT terdiri atas beberapa CNT di dalamnya, layaknya lingkaran lapisan pada kayu yang berlapis-lapis.

2.3.1.1. *Single-walled carbon nanotubes (SWCNT)*

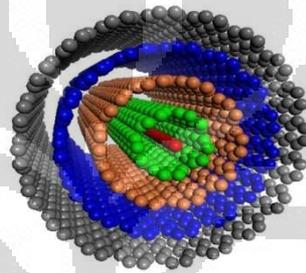


Gambar 2.8. Single Walled CNTs

Strukturnya ialah sebuah silinder karbon (yang terbentuk dari grafit) dan memiliki penutup yang merupakan gabungan dari beberapa pentagon dan

heksagon. Penutup dari silinder ini merupakan salah satu fullerene. Diameter terkecil dari tube yang pernah dicapai yaitu 0,4 nm. Lebar diameter yang terbentuk tergantung dari proses yang digunakan. Ditemukan sebuah fenomena dimana nanotube dapat mempunyai sifat seperti metal, atau seperti semikonduktor. Hal ini ditentukan antara lain oleh arah penggulungan dari lembaran grafit yang dibentuk. Bila arah pembentukan grafitnya adalah zigzag maka bisa dihasilkan nanotube yang bersifat semikonduktor, sedangkan yang chiral dan armchair mempunyai sifat elektrik seperti metal.

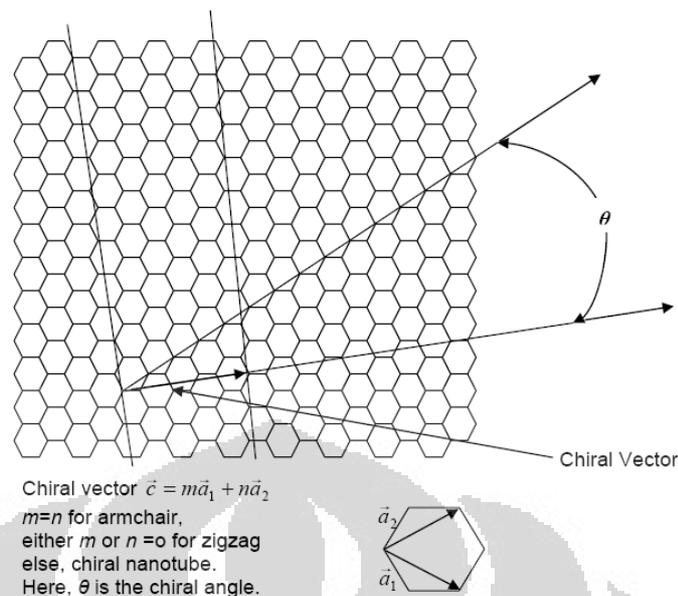
2.3.1.2. *Multi-walled carbon nanotubes (MWCNT)*



Gambar 2.9. Multi-Walled CNTs

Multi walled carbon nanotube ialah nanotube dengan model seperti Russian doll, yaitu ada tube di dalam tube. Artinya adalah carbon nanotube yang dihasilkan memiliki beberapa lapis dinding. Sifat yang dihasilkan dari jenis ini kurang baik daripada jenis single walled. Salah satu hal yang menarik adalah pada double walled carbon nanotube, dimana sifat sifatnya mirip dengan SWCNT tetapi memiliki ketahanan kimiawi yang lebih baik.

Jika dilihat berdasarkan penggulungannya, jenis CNT terbagi menjadi ; (1) armchair, (2) zigzag, (3) chiral.



Gambar 2.10. Jenis CNTs berdasarkan sudut chiral

Gambar 2.10 di atas menggambarkan chiral vektor $\vec{c} = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2$ dengan sudut *chiral* θ . Ketika besarnya θ adalah 30° , nanotube bertipe *zigzag*. Ketika besarnya θ adalah 0° , nanotube bertipe *armchair* dan ketika besarnya θ selain keduanya, maka nanotube bertipe *chiral*. Chiral vektor \vec{c} memiliki unit vektor \vec{a}_1 dan \vec{a}_2 , sedangkan konstanta m dan n menentukan tipe dari nanotube apakah bertipe *armchair*, *zigzag* atau *chiral*. Nanotube bertipe *armchair* jika $m=n$, *zigzag* jika m atau n bernilai nol dan tipe *chiral* untuk selainnya. (Banerjee, 2008)

2.3.2. Sifat-Sifat Nanotube Karbon

Dari hasil karakterisasi yang dilakukan Iijima menunjukkan bahwa CNT merupakan fiber terkuat yang pernah dibuat sampai saat ini. Konduktivitas listriknya jauh melampaui tembaga, sedangkan kemampuan menghantarkan panas lebih tinggi dari berlian. CNT mampu menghantarkan energi jauh lebih baik dibandingkan dengan seluruh material penghantar energi yang ada. Keunikan lainnya adalah CNT ternyata memiliki daya tahan terhadap temperatur tinggi serta lebih ringan dari aluminium.

Salah satu sifat yang menarik dari CNT ini adalah dia dapat diatur sifat elektroniknya sesuai yang diinginkan, mulai dari bersifat superkonduktor, semikonduktor, hingga insulator, tergantung pada arah ikatan heksagonal pada dinding CNT itu. Dikarenakan ukuran diameter yang berskala nano ini, maka CNT dapat digolongkan sebagai struktur elektronik satu dimensi (hanya panjang CNT saja yang memiliki dimensi). Kondisi ini mengakibatkan elektron dapat berjalan sepanjang CNT tanpa hambatan sedikitpun. Berapa pun arus yang diberikan dalam CNT akan dapat dialirkan tanpa sedikitpun menimbulkan panas.

Sifat elektrik seperti ini dikenal dengan sebutan konduktor balistik. Inilah model pengirim energi masa depan yang akan menggantikan kabel listrik yang mengalirkan tegangan tinggi dari sumbernya ke pemakai di rumah-rumah. Lebih jauh dengan model struktur satu dimensi ini, CNT juga memungkinkan untuk menghantarkan panas jauh lebih baik dari penghantar panas yang selama ini dipakai seperti berlian.

Sifat lain dari CNT adalah material ini memiliki nilai modulus Young dan kekuatan meregang yang tinggi. Kedua sifat mekanik ini menyebabkan CNT merupakan material yang sangat keras dan kuat tetapi mudah dibengkokkan. Sebuah eksperimen dari Stanford University bahkan melaporkan bahwa CNT mampu dibengkokkan sampai 1.200 dan dikembalikan ke bentuk semula tanpa kerusakan sedikitpun. Sifat mekanik ini akan membuat penghantar listrik yang dibuat dari bahan CNT akan memiliki kelenturan yang tinggi, yang memungkinkan fleksibilitas dalam pemakaiannya akan jauh lebih tinggi dibandingkan dengan jenis penghantar tegangan tinggi yang ada saat ini (Yulianto, 2011).

2.4. DINAMIKA MOLEKULER

Dinamika molekuler merupakan suatu metode untuk menyelidiki struktur dari zat padat, cair dan gas. Umumnya dinamika molekuler menggunakan teknik persamaan hukum newton dan mekanika klasik. Dinamika molekuler pertama kali diperkenalkan oleh Alder dan Wainwright

pada akhir tahun 1950-an, metode ini digunakan untuk mempelajari interaksi pada bola keras. Dari studi tersebut mereka mempelajari mengenai sifat sebuah cairan sederhana. Pada tahun 1964, Rahman melakukan simulasi pertama menggunakan energi potensial terhadap cairan argon. Dan di tahun 1974, Rahman dan Stillinger melakukan simulasi dinamika molekuler pertama menggunakan sistem yang realistic yaitu simulasi dengan menggunakan air. Kemudian pada tahun 1977, muncul pertama kali simulasi terhadap protein yaitu simulasi sebuah inhibitor enzim tripsin *bovine* pancreas (BPTI)

Dinamika molekuler mengamati molekul-molekul dalam suatu sistem tertutup, dimana jumlah materi (molekul) dalam sistem tidak berubah. Energi dapat keluar atau masuk sistem, tergantung dari jenis simulasi yang dilakukan. Suatu sistem adalah suatu kuantitas materi atau volume yang dipilih untuk diamati, sedangkan materi dan volume di luar sistem disebut lingkungan (Cengel dkk, 1994). Pemisah antara sistem dan lingkungan disebut batas, yang secara teoritis tidak memiliki massa ataupun volume tersendiri. Sistem terbagi atas sistem tertutup, jika materi tidak dapat menembus batas, dan sistem terbuka, jika materi dapat menembus batas

Materi pada skala makroskopis terdiri dari molekul-molekul berjumlah sangat besar (bilangan Avogadro berorde 10^{23}). Karena keterbatasan komputasi, maka simulasi dinamika molekul hanya dapat melakukan perhitungan untuk ratusan atau ribuan molekul. Semakin banyak molekul dalam simulasi, semakin realistis hasil yang diperoleh, tetapi biaya komputasi semakin mahal.

Tujuan pertama simulasi dinamika molekul adalah menghasilkan trajektori molekul-molekul sepanjang suatu jangka waktu terhingga. Pada setiap waktu, molekul-molekul dalam simulasi memiliki suatu posisi dan momentum tertentu untuk masing-masing sumbu. Untuk N molekul dalam ruang 3 dimensi, terdapat ruang posisi berdimensi $3N$ dan ruang momentum berdimensi $3N$, sehingga terbentuk ruang fasa berdimensi $6N$. Suatu konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul dapat diartikan sebagai koordinat dalam ruang fasa tersebut

2.4.1. Perbedaan Dinamika Molekuler dengan Monte Carlo

Simulasi molekuler mengacu pada metode teoritis dan teknik komputasi untuk memodelkan atau meniru perilaku molekul. Teknik ini sering digunakan dalam bidang kimia komputasi, biologi komputasi dan ilmu material untuk mempelajari sistem molekul mulai dari atom dalam jumlah sedikit sampai dengan sistem jutaan molekul.

Simulasi molekuler dapat digunakan untuk mempelajari banyak hal penting yang belum terjawab yang berkaitan dengan permeasi, adsorpsi, dan selektivitas gas dalam bahan nanoporous (Sourirajan dan Matsuura, 1985) yang terutama melibatkan kekuatan molekul dan yang tidak bisa langsung ditangani dengan pendekatan kontinum. Pendekatan mendasar molekul (seperti Dinamika Molekuler) dapat mengatasi masalah ini secara langsung dan jelas. Metode Dinamika Molekuler (Allen, 1987, Haile, 1992, Evans dan Morris, 1990, dalam Banerjee 2008) telah digunakan untuk menyelidiki berbagai sifat statis dan dinamis dari cairan dalam nanopores (Murad et al., 1993, Lin dan Murad, 2001, Murad et al, 1998, Murad et al., 2003 dalam Banerjee, 2008) dan menunjukkan bahwa osmosis, reverse osmosis, pertukaran ion dan pemisahan gas dapat diamati untuk nonpolar, kutub dan elektrolit solusi. Dalam simulasi molekuler pada umumnya ada dua metode yang bisa digunakan yakni dinamika molekuler dan metode Monte Carlo

Dinamika molekuler dan metode Monte Carlo memiliki masing-masing keunggulan dan kekurangan tergantung pada sistem dan sifat yang disimulasikan. Sementara Dinamika Molekuler adalah metode deterministik yang menyelesaikan untuk persamaan gerak molekul individu dan melihat pada perubahan waktu dari sistem, Monte Carlo adalah metode stokastik dengan mengambil satu set sampel gerakan acak dari atom atau molekul, menerima atau menolak berdasarkan energi konfigurasi. Monte Carlo biasanya tidak terikat pada waktu. Dalam Dinamika molekuler posisi setiap atom atau molekul ditentukan dengan memecahkan persamaan gerak, sedangkan pada Monte Carlo gerakan atom atau molekul diambil sampel secara stokastik sehingga umumnya memerlukan sedikit waktu untuk komputasi. Monte Carlo lebih sesuai untuk simulasi fluida dengan densitas

menengah sedangkan Dinamika Molekuler memiliki kelebihan dalam hal fluida dengan densitas yang tinggi seperti gas atau cairan bertekanan tinggi. Selanjutnya, Dinamika Molekuler dapat digunakan untuk menghitung sifat-sifat dinamis sementara Monte Carlo. Kedua metode ini memiliki kesamaan dalam hal penggunaan fungsi potensial. Keakuratan hasil yang dihasilkan oleh Monte Carlo atau Dinamika Molekuler tergantung pada akurasi pada fungsi potensial. Oleh karena itu perlu berhati-hati dalam memilih fungsi potensial.

2.4.2. Ensemble

Suatu ensemble adalah koleksi dari keadaan sistem yang mungkin yang memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis sama (Stote dkk, n.d.). Contohnya adalah sistem dengan konfigurasi posisi atau momentum yang berbeda namun memiliki temperatur yang sama.

Beberapa ensemble yang sering digunakan dalam dinamika molekul adalah ensemble mikrokanonikal, ensemble kanonikal dan ensemble isobarik-isotermal.

2.4.2.1. Ensemble Mikrokanonikal (E, V, N)

Ensemble mikrokanonikal adalah ensemble yang memiliki karakteristik jumlah molekul N dan volume yang tidak berubah serta energi total yang konstan. Ensemble ini diperoleh dari sistem yang terisolasi sehingga tidak ada interaksi sistem dengan lingkungan. Dengan demikian energi tidak dapat keluar dan masuk ke sistem dan energi total memiliki harga konstan. Ensemble ini biasa dinamakan ensemble (E, V, N). Ensemble mikrokanonikal adalah ensemble yang paling sederhana untuk simulasi dinamika molekul, namun kurang praktis mensimulasi keadaan eksperimen dalam laboratorium. Ini disebabkan energi total sistem sulit dipertahankan konstan dalam eksperimen.

2.4.2.2. Ensemble Kanonikal (T, V, N)

Ensemble kanonikal adalah ensemble dengan keadaan makroskopis suhu yang tetap. Selain itu jumlah molekul N dan volume tidak berubah, maka dinamakan ensemble (T, V, N). Dalam laboratorium, temperatur sistem lebih

mudah dikendalikan daripada energi total sistem, maka eksperimen sering dilakukan pada temperatur konstan. Ensemble kanonikal mendekati keadaan eksperimen pada temperatur konstan.

Dinamika molekul juga dapat dilakukan dengan mempertahankan tekanan dan temperatur sistem pada harga yang konstan. Tekanan dan temperatur adalah sifat makroskopis yang mudah dikendalikan dalam eksperimen. Dalam ensemble isobarik-isothermal, volume sistem dapat berubah atau menjadi suatu variabel. Jumlah molekul tidak berubah, maka ensemble ini juga dinamakan ensemble (P, T, N).

2.4.2.3. Ensemble Isobarik Isothermal

Dinamika molekul juga dapat dilakukan dengan mempertahankan tekanan dan temperatur sistem pada harga yang konstan. Tekanan dan temperatur adalah sifat makroskopis yang mudah dikendalikan dalam eksperimen. Dalam ensemble isobarik-isothermal, volume sistem dapat berubah atau menjadi suatu variabel. Jumlah molekul tidak berubah, maka ensemble ini juga dinamakan ensemble (P, T, N).

2.4.3. Mekanika Klasik

Dalam dinamika molekul digunakan ketiga Hukum Newton:

1. Suatu partikel akan tetap diam atau bergerak dengan kecepatan tetap kecuali jika menerima gaya-gaya eksternal dengan resultan tidak sama dengan nol.
2. Jika partikel dengan massa m menerima gaya \vec{F} , maka partikel itu akan mengalami percepatan sebesar:

$$\alpha = \frac{\vec{F}}{m} \quad (2.5)$$

3. Jika partikel i memberikan gaya pada partikel j sebesar \vec{F}_{ij} , maka partikel j memberikan gaya pada partikel i sebesar $-\vec{F}_{ij}$,

Hukum Newton ini memberikan konsekuensi hukum kekekalan momentum. Dalam suatu sistem terisolasi, momentum masing-masing molekul dapat berubah-ubah akibat interaksi satu sama lain, namun

momentum total tidak akan berubah. Momentum total sistem dapat diamati untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal.

$$\frac{d}{dt}(\sum_i p_i) = \frac{d}{dt}(\sum_i m_i v_i) = 0. \quad (2.6)$$

di mana m adalah massa molekul dan p adalah momentum molekul.

2.4.4. Mekanika Statistik

Mekanika statistik atau termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonversikan informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala makroskopik (Ercolessi, n.d.). Konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul menentukan sifat-sifat yang dimiliki materi tersebut. Sifat-sifat itu antara lain adalah energi, temperatur, tekanan dan entalpi. Menurut mekanika statistik, kuantitas fisis diperoleh sebagai rata-rata konfigurasi tersebut terhadap waktu

2.4.4.1. Energi Total

Energi total suatu sistem tersusun dari energi potensial sistem dan energi kinetik sistem. Energi potensial adalah jumlah dari semua energi potensial molekul-molekul dalam system.

$$U = \sum_i U_i(R_N)$$

R^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $R^N = \{R_1, R_2, R_3, \dots, R_N\}$.

Energi kinetik sistem adalah jumlah dari energi kinetik setiap molekul.

$$K = \sum_i K_i(v_i)$$

$$\text{Dengan } K_i = \frac{1}{2} m_i (v_i)^2 = \frac{p_i^2}{2m_i} \quad (2.7)$$

Untuk sistem terisolasi di mana tidak ada energi yang menembus batas, sistem bersifat konservatif atau energi sistem konstan. Konservasi energi ini adalah salah satu cara untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal.

2.4.4.2. Temperatur

Menurut termodinamika statistik, temperatur tidak lain adalah suatu skala dari energi kinetik molekul-molekul penyusunnya. Untuk tiga dimensi, hubungan antara energi kinetik dengan temperatur dinyatakan oleh

$$K = \frac{3}{2} N k_b T \quad (2.8)$$

Atau

$$T = \frac{2K}{3 N k_b} \quad (2.9)$$

di mana K adalah energi kinetik total sistem, N adalah jumlah molekul sistem, k_B adalah konstanta Boltzmann dan T adalah temperatur.

2.4.4.3. Tekanan

Tekanan didefinisikan sebagai gaya yang bekerja tegak lurus pada suatu satuan luas.

$$P_x = \frac{F_x}{A} \quad (2.10)$$

Dengan menggunakan hukum Newton kedua,

$$P_x = \frac{1}{A} \frac{d(mv_x)}{dt} \quad (2.11)$$

Maka tekanan adalah suatu fluks momentum atau momentum yang menembus suatu satuan luas dalam suatu satuan waktu (Haile, 1992). Menurut termodinamika statistik, ini terdiri dari dua bagian yaitu:

1. P_m , adalah fluks momentum akibat molekul yang menembus suatu permukaan luas selama dt.

$$\langle P_m \rangle = \frac{2N}{3V} \langle K \rangle \quad (2.12)$$

2. P_f , adalah fluks momentum akibat gaya yang bekerja antara dua molekul yang berada pada sisi yang berbeda dari permukaan luas.

$$\langle P_f \rangle = \frac{1}{3V} \langle \sum_i \sum_j F_{ij} \bar{R}_{ij} \rangle \quad (2.13)$$

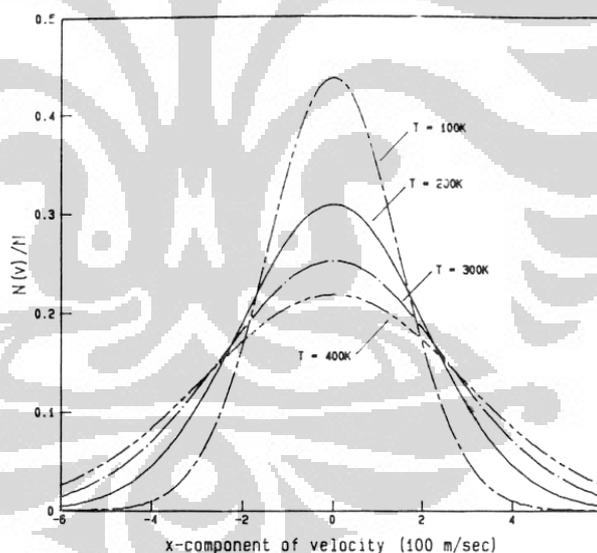
2.4.4.4. Distribusi Kecepatan

Molekul-molekul dalam materi dapat memiliki kecepatan yang berbeda-beda, sehingga terbentuk suatu distribusi kecepatan. Secara

statistik dapat diperoleh bahwa molekul-molekul akan paling banyak berada pada suatu kecepatan tertentu, dan semakin berkurang jumlah molekulnya dengan semakin jauh kecepatan dari kecepatan tersebut.

Salah satu penyebabnya adalah karena molekul-molekul dalam materi akan saling bertabrakan dan berinteraksi. Interaksi ini menyebabkan adanya pemerataan energi kinetik, karena molekul yang bergerak lebih cepat memberikan tambahan momentum pada molekul yang bergerak lebih lambat dan sebaliknya. Distribusi kecepatan yang terjadi berbentuk distribusi normal, dan dinamakan Distribusi Maxwell-Boltzmann (Huang, 1987). Distribusi Maxwell-Boltzmann bergantung dari temperatur, dirumuskan:

$$f(v)dv = \frac{1}{c} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (2.14)$$



Gambar 2.11. Distribusi Kecepatan Molekul pada Berbagai Temperatur

2.4.4.5. Entalpi

Entalpi didefinisikan sebagai gabungan dari energi total sistem dengan energi aliran

$$H = E + PV \quad (2.15)$$

2.4.5. Model Interaksi Antar Molekul

Model interaksi antar molekul yang diperlukan adalah hukum gaya antar molekul, yang ekuivalen dengan fungsi energi potensial antar molekul. Pemilihan fungsi energi potensial harus dilakukan sebelum simulasi apa pun dapat dikerjakan.

Pemilihan model interaksi antar molekul sangat menentukan kebenaran simulasi dari sudut pandang fisika. Karena berada dalam skala atomik, interaksi secara prinsip harus diturunkan secara kuantum, di mana berlaku prinsip ketidakpastian Heisenberg. Namun kita dapat melakukan pendekatan mekanika klasik di mana atom atau molekul dianggap sebagai suatu titik massa.

Model interaksi itu harus memenuhi dua buah kriteria. Pertama, molekul-molekul harus mampu menahan tekanan pasangan molekul yang saling berinteraksi. Ini dapat diartikan bahwa ada gaya tolak-menolak antar molekul. Kedua, molekul-molekul itu harus saling mengikat, atau ada gaya tarik-menarik antara molekul. Jika molekul-molekul terlalu dekat, gaya resultan adalah gaya tolak-menolak. Sebaliknya, jika terlalu jauh, maka gaya resultan adalah gaya tarik-menarik. Pada suatu jarak tertentu, kedua gaya tersebut saling meniadakan sehingga gaya resultannya sama dengan nol.

Untuk N jumlah atom dalam suatu simulasi maka fungsi energi potensial adalah $U(R^N)$ di mana R^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $R^N = \{R_1, R_2, R_3, \dots, R_N\}$. Model energi potensial yang sederhana dan umum digunakan adalah pair-wise, di mana potensial adalah jumlah dari interaksi antara dua molekul yang diisolasikan.

$$U = \sum_i \sum_j U(R_{ij}); i < j$$

2.4.5.1. Potensial Lennard Jones

Salah satu model energi potensial antara dua molekul yang dikembangkan adalah Potensial Lennard-Jones. Model ini dianggap paling sederhana, namun memiliki ketelitian yang baik untuk simulasi. Model Potensial ini dirumuskan:

$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (2.16)$$

n dan m adalah bilangan bulat positif yang dipilih dimana $n > m$

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (2.17)$$

Dan $n > m$

Dan i dan j adalah indeks dari molekul, $R_{ij} \equiv |R_i - R_j|$ atau jarak antara molekul i dan j . Sedangkan σ adalah parameter jarak, dan ε adalah parameter yang menyatakan kekuatan interaksi. Pilihan yang umum untuk m dan n adalah $m=6$ dan $n=12$, sehingga persamaan di atas menjadi:

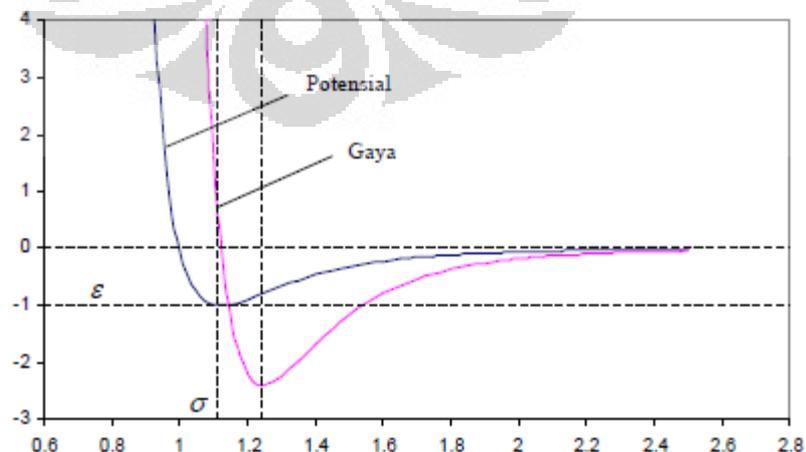
$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.18)$$

2.4.5.2. Gaya Antar Molekul

Gaya adalah negatif dari gradien potensial. Untuk potensial Lennard-Jones, besar gaya adalah:

$$F(R_{ij}) = -\frac{d}{dr} U(R_{ij}) = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^7 \right] \quad (2.19)$$

Menurut konvensi, gaya positif adalah gaya tolak-menolak, dan gaya negatif adalah gaya tarik-menarik. Model ini menggambarkan adanya gaya tolak-menolak dengan suku $\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13}$ yang mendominasi pada jarak dekat dan gaya tarik-menarik dengan suku $\left(\frac{\sigma}{r} \right)^7$ yang mendominasi pada jarak jauh.



Gambar 2.12. Potensial Lennard-Jones

Dapat diturunkan untuk masing-masing sumbu:

$$F = -\nabla \cdot U(R_{ij})$$

$$F_x = -\frac{\partial}{\partial x} U(R_{ij}) = 24\varepsilon \frac{r_x}{R_{ij}} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.20)$$

$$F_y = -\frac{\partial}{\partial y} U(R_{ij}) = 24\varepsilon \frac{r_y}{R_{ij}} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.21)$$

$$F_z = -\frac{\partial}{\partial z} U(R_{ij}) = 24\varepsilon \frac{r_z}{R_{ij}} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.22)$$

2.4.6. Pemotongan Potensial

Penghitungan gaya-gaya yang terjadi antar molekul adalah proses yang paling lama dalam simulasi dinamika molekul. Dalam prakteknya, sering kali potensial diberikan jarak cutoff R_c dan interaksi antar atom yang berjarak lebih besar dari R_c diabaikan. Cutoff ini dipasang pada jarak di mana interaksi seperti potensial dan gaya sudah kecil dan dapat diabaikan.

$$U(R_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] & R_{ij} \leq R_c \\ 0 & R_{ij} > R_c \end{cases} \quad (2.23)$$

2.4.7. Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit

Dinamika molecular mengamati posisi dan derivasinya antar lain kecepatan dan percepatan. Maka persamaan gerak dapat dituliskan:

$$\frac{dr_i(t)}{dt} = v_i(t)$$

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = a_i(t)$$

Persamaan gerak ini harus dijadikan diskrit agar dapat dipecahkan secara numeric. Pendiskritan ini dilakukan dengan metode beda hingga (finite difference). Waktu yang diskrit memiliki langkah waktu (time step) Δt yang merupakan selisih antara dua waktu berturutan.

Metode beda hingga dilakukan dengan melakukan ekspansi Taylor. Suatu metode beda hingga yang mengaproksimasi solusi sebuah persamaan diferensial,

akan selalu menimbulkan truncation error (error pemotongan). Truncation error dihitung dari suku bukan nol pertama yang dihilangkan dari suatu ekspansi.

Metode yang dipilih harus memberikan error kecil namun tidak terlalu kompleks sehingga memerlukan waktu komputasi yang lama. Beberapa metode integrasi persamaan gerak antara lain adalah algoritma Verlet, algoritma Leap-Frog dan algoritma Velocity-Form (Allen, Tildesley, 1987).

2.4.7.1. Algoritma Verlet

Algoritma Verlet sering digunakan karena algoritmanya yang sederhana namun memiliki ketelitian yang baik. Caranya adalah dengan menggunakan ekspansi Taylor untuk $t+\Delta t$ dan $t - \Delta t$ sebagai berikut:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \frac{dr_i}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4) \quad (2.24)$$

$$r_i(t - \Delta t) = r_i(t) - \frac{dr_i}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + O((\Delta t)^4) \quad (2.25)$$

Penjumlahan persamaan diatas akan menghasilkan:

$$r_i(t + \Delta t) + r_i(t - \Delta t) = 2r_i(t) + \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4) \quad (2.26)$$

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4) \quad (2.27)$$

Atau

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + a_i(t) \cdot (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4) \quad (2.28)$$

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{F_i(t)}{m_i} \cdot (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^4) \quad (2.29)$$

Maka diperoleh posisi molekul pada $t+\Delta t$ dengan truncation error berorde $(\Delta t)^2$

Sedangkan kecepatan pada t diperoleh dengan mengurangkan persamaan di atas:

$$r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t) = 2 \frac{dr_i(t)}{dt} (\Delta t) + O((\Delta t)^3) \quad (2.30)$$

Yang dapat dituliskan

$$v_i(t) = \frac{dr_i(t)}{dt} = \frac{r_i(t+\Delta t) - r_i(t-\Delta t) + O((\Delta t)^3)}{2\Delta t} \quad (2.31)$$

Kelemahan dari algoritma Verlet adalah penanganan kecepatan kurang praktis, karena harus memprediksi posisi berikutnya sebelum dapat menghitung kecepatan sesaat. Selain itu, posisi sama sekali tidak ditentukan oleh kecepatan pada saat t , maka algoritma ini tidak mudah mempergunakan velocity scaling untuk simulasi pada T konstan.

2.4.7.2. Algoritma Leap-Frog

Algoritma Leap-Frog adalah metode dimana kecepatan melompati percepatan, dan posisi melompati kecepatan. Menggunakan ekspansi Taylor sampai orde kedua untuk $t + \frac{1}{2}\Delta t$ dan $-\frac{1}{2}\Delta t$:

$$r_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = r_i(t) + \frac{dr_i(t)}{dt}\frac{1}{2}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2r_i(t)}{dt^2}\left(\frac{1}{2}\Delta t\right)^2 + O(\Delta t)^3 \quad (2.32)$$

$$r_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) = r_i(t) - \frac{dr_i(t)}{dt}\frac{1}{2}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2r_i(t)}{dt^2}\left(\frac{1}{2}\Delta t\right)^2 + O(\Delta t)^3 \quad (2.33)$$

Dengan cara yang sama dengan perhitungan kecepatan Verlet yaitu pengurangan persamaan diatas maka diperoleh:

$$r_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) - r_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) = 2\frac{dr_i(t)}{dt}\frac{1}{2}\Delta t + O(\Delta t)^3 \quad (2.34)$$

$$r_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = r_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{dr_i(t)}{dt}\Delta t + O(\Delta t)^3 \quad (2.35)$$

Dengan mentranslasi seluruh persamaan sebesar $\frac{1}{2}\Delta t$, diperoleh:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \frac{dr_i(t+\frac{1}{2}\Delta t)}{dt}\Delta t + O(\Delta t)^3 \quad (2.36)$$

Atau

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right)\Delta t + O(\Delta t)^3 \quad (2.37)$$

Dengan cara yang sama diperoleh persamaan untuk kecepatan:

$$v_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) - v_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) = 2\frac{dv_i(t)}{dt}\left(\frac{1}{2}\Delta t\right) + O(\Delta t)^3 \quad (2.38)$$

$$v_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = v_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{dv_i(t)}{dt}(\Delta t) + O(\Delta t)^3 \quad (2.39)$$

Atau

$$v_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = v_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{F_i(t)}{m_i}(\Delta t) + O(\Delta t)^3 \quad (2.40)$$

BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

3.1.KOMPONEN SIMULASI

Dalam menjalankan simulasi adsorpsi hidrogen terhadap CNT, dibutuhkan beberapa komponen penunjang berupa piranti lunak komputer yang mendukung pembentukan simulasi. Komponen penunjang tersebut adalah piranti lunak bernama LAMMPS, cygwin, Avogadro, dan VMD.

3.1.1. LAMMPS

Piranti ini merupakan komponen utama dalam menjalankan simulasi adsorpsi hidrogen terhadap CNT, karena piranti ini dapat membuat sebuah sistem pemodelan dari bermacam – macam jenis atom dan molekul untuk disimulasikan. Tentu saja piranti ini dapat membantu membuktikan fenomena – fenomena atom dan molekul yang selama ini dilakukan secara eksperimental dengan menghabiskan waktu, tenaga, biaya dan resiko yang cukup besar. Nama LAMMPS merupakan akronim dari *Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*, karena piranti ini dirancang untuk mensimulasikan banyak atom dan molekul dalam skala besar, baik dilakukan dengan satu maupun dua *processor*. LAMMPS didistribusikan oleh *Sandia National Laboratories*, yaitu sebuah laboratorium *US Department of Energy (DOE)* atau Departemen Energi Amerika Serikat. Pembiayaannya pun disokong oleh DOE dan instansi lainnya sehingga penggunaan piranti ini pun tidak dipungut biaya. Tentunya piranti ini sangat berpotensi untuk simulasi mengenai atom dan molekul di masa sekarang dan yang akan datang.

3.1.2. Cygwin

Piranti cygwin merupakan piranti pendukung yang sangat penting dalam simulasi ini, karena cygwin merupakan perangkat yang dapat membantu piranti lunak lain yang merupakan piranti dari *Operating System* Linux, sehingga dapat terbaca atau dapat dijalankan di OS Windows. Pada dasarnya piranti LAMMPS merupakan piranti yang hanya dapat digunakan

pada Linux, namun melalui cygwin, piranti LAMMPS dapat dijalankan di komputer yang menggunakan OS Windows.

3.1.3. Avogadro

Avogadro adalah sebuah piranti lunak komputer yang digunakan sebagai editor dan visualisasi dalam sebuah pembentukan simulasi atom dan molekul. Piranti ini digunakan dalam kimia komputasi, pemodelan molekuler, bioinformatika, ilmu material dan bidang lainnya. Penggunaan piranti ini pun tidak dipungut biaya, sehingga dapat bebas diunduh oleh para pengguna. Dalam simulasi ini, piranti ini digunakan untuk membuat koordinat model dari atom hidrogen. Sehingga dapat digunakan dalam simulasi.

3.1.4. VMD (Visualisasi Molekular Dynamics)

VMD adalah sebuah piranti lunak komputer yang dirancang untuk pemodelan dan visualisasi dari sebuah simulasi, serta merupakan komponen untuk menganalisis sistem – sistem biologi, seperti protein, asam nukleida, dan lain – lain. Penggunaannya pun tidak dipungut biaya. Piranti ini tidak dapat menjalankan simulasi secara langsung, namun piranti ini dapat menerima *output* dari piranti lain untuk dapat divisualisasikan proses dan hasil simulasi tersebut.

3.2. PROSEDUR SIMULASI

3.2.2. Inisialisasi Koordinat

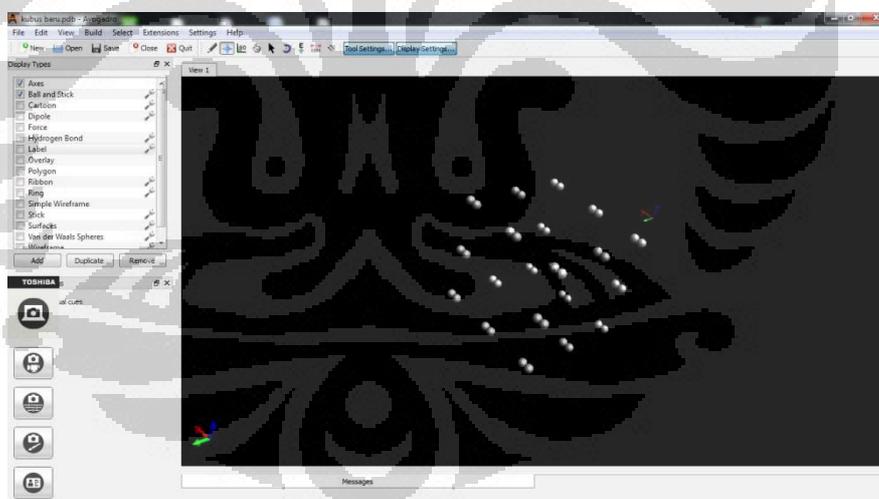
Sebelum melakukan simulasi, maka harus diketahui seberapa banyak jumlah dan jenis atom ataupun molekul pada simulasi yang akan dilakukan. Selain itu bentuk CNTs yang digunakan dan posisi koordinat atom – atom pada saat awal sebelum melakukan simulasi atau saat $t = 0$. Dalam menginisialisasi koordinat, ada dua pembentukan pemodelan koordinat atom yaitu pembentukan hidrogen dan pembentukan CNT. Kedua pembentukan tersebut dilakukan pada piranti yang berbeda, dikarenakan memang kapasitas fungsi dari piranti yang berbeda.

3.2.2.1. Pembentukan Hidrogen

Dalam pembentukan inialisasi posisi koordinat atom dan molekul hidrogen dilakukan pada piranti Avogadro. Penyusunan posisi koordinat dibentuk seperti kubus, hal ini semata – mata dilakukan hanya sebagai sebuah sampel pemodelan agar dapat memudahkan penulis dalam memindahkan posisi koordinat atom hidrogen pada variasi simulasi yang berbeda.

Pada simulasi ini penulis membentuk sampel dua puluh molekul hidrogen atau empat puluh atom hidrogen. Dengan jarak antar atom hidrogen sebesar $0,74 \text{ \AA}$. Kemudian nilai cut off sebesar 3.2, hal ini didasarkan pada referensi yang merujuk nilai cut off dari 2.5 hingga 3.2.

Setelah didapatkan koordinat hidrogen, maka didapat output file dari Avogadro yang berisi koordinat atom – atom hidrogen dalam sumbu x, y, z, koordinat ini pun dapat diubah – ubah atau digeser sesuai dengan kebutuhan simulasi saat digabungkan dengan koordinat CNTs.



Gambar 3.1. Inialisasi Hidrogen

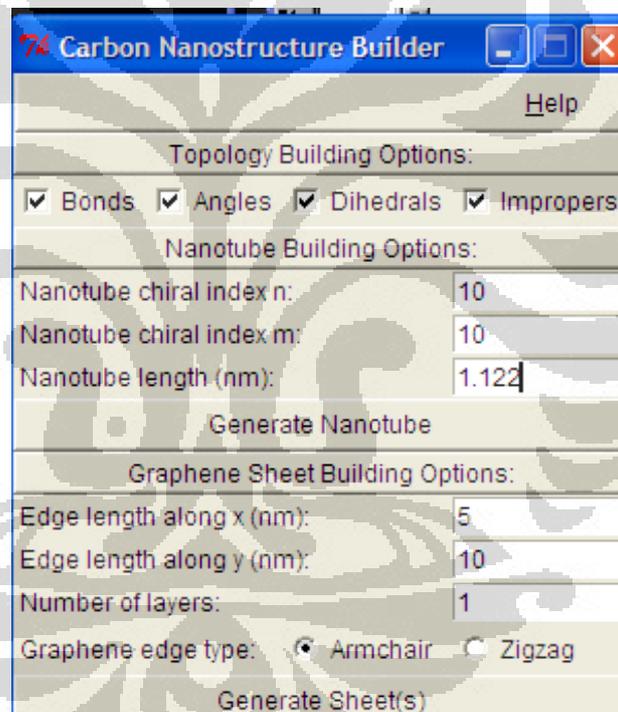
3.2.2.2. Pembentukan CNT

Dalam simulasi ini, pembentukan posisi koordinat CNT dilakukan pada piranti VMD. Ada beberapa jenis parameter pada VMD untuk membentuk koordinat CNT, di antaranya adalah chirality dan panjang CNT.

Chirality yang dipakai divariasikan dari hasil penelitian (Maruyama, Kimura., 2000) (8,8), (10,10),(12,12) menjadi 12 macam variasi yakni:

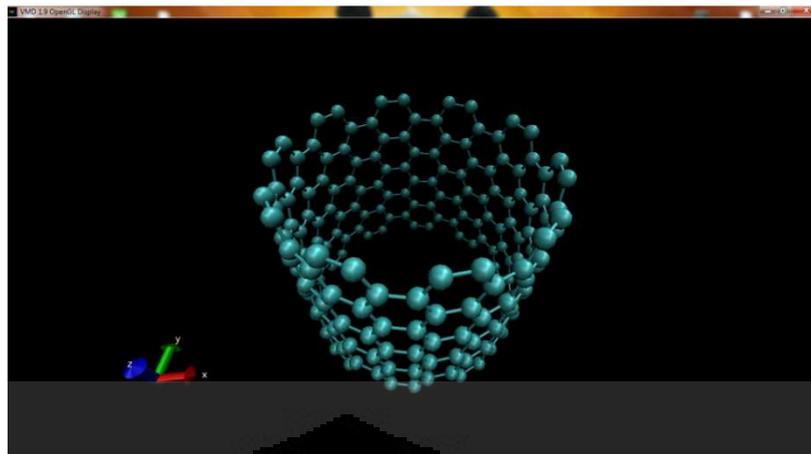
- | | | |
|----------|-----------|-----------|
| - (8,0) | - (10,0) | - (12,0) |
| - (8,8) | - (10,8) | - (12,8) |
| - (8,10) | - (10,10) | - (12,10) |
| - (8,12) | - (10,12) | - (12,12) |

Sedangkan panjang yang digunakan diseragamkan semua yakni 1,122 nm mengacu pada CNT yang dipergunakan dalam penelitian (Banerjee, 2008) Setelah mengatur parameter yang dibutuhkan VMD dalam membentuk CNT, maka dilakukanlah generate CNT.



Gambar 3.2. Carbon Nanotube Builder pada VMD

Sehingga didapatkanlah koordinat – koordinat atom CNT secara otomatis dan didapatkan hasil seperti gambar di bawah ini:



Gambar 3.3. Inisialisasi CNT pada VMD

3.2.2.3. Penggabungan Koordinat

Setelah didapatkan *output* koordinat dari Avogadro dan VMD, maka dapat digabungkan koordinat – koordinat atom hidrogen dan CNT untuk dimasukkan dalam input script. Penggabungan koordinat dilakukan pada Excel secara manual. Ketika hidrogen dan CNT dapat bersatu, dengan begitu dapat menyesuaikan apakah posisi hidrogen sudah tepat di dekat CNT atau berada jauh dari area CNT. Pada semua simulasi, jarak antara atom hidrogen dan CNT disamakan yakni sebesar 2 Å.

3.2.3. Pembentukan *Input Script*

Input script LAMMPS merupakan informasi yang harus diberikan sebelum simulasi, berupa file notepad ++. Informasi ini berguna untuk mendefinisikan atom dan molekul beserta posisinya, sekaligus memberikan parameter – parameter yang dibutuhkan untuk menciptakan sebuah kondisi yang diinginkan. Konten *input script* pada LAMMPS terdiri dari empat bagian penting yang harus diperhatikan, diantaranya sebagai berikut :

1. *Initialization*, merupakan pengaturan parameter awal dalam simulasi. Parameter – parameter yang perlu ditentukan dalam pengaturan awal yaitu unit, dimensi, boundary, atom_style, neighbor, dan neigh_modify. Untuk parameter *initialization* yang dipakai dalam simulasi penelitian ini adalah sebagai berikut:

Command	Argumen	Keterangan
Dimension	3	Dimensi yang dipakai untuk ruang simulasi adalah dimensi tiga.
Boundary	p p p	Jenis boundary (batasan) ini merupakan batasan periodik.
Atom_style	full	Atom_style jenis full dipakai karena pada simulasi ini memperhitungkan muatan pada setiap atom.
Neighbor	0.3 bin	Merupakan command yang digunakan untuk menentukan parameter yang mempengaruhi ikatan antar atom.

Tabel 3.1. Penjelasan Initialization pada LAMMPS

2. Atom definition, merupakan bagian pengaturan untuk mendefinisikan jenis atom, jumlah atom, jumlah atom dan molekul, jumlah ikatan, dan posisi awal koordinat atom. Pendefinisian ini tidak dalam *input script*, karena banyaknya informasi yang diberikan dalam atom definition maka pemberian informasinya berupa lampiran file terpisah. Pada *input script*, perintah yang diberikan yaitu `read_data`, perintah ini akan memanggil nama lampiran yang berisikan atom definition yang sudah dibuat, berupa .dat file. Contohnya :

```
read_data INPUT_LMP_570.dat (Banerjee, 2008)
```

Posisi awal koordinat atom – atom dalam lampiran atom definition merupakan hasil penggabungan koordinat hidrogen dari piranti Avogadro dan koordinat CNTs dari VMD. Setelah digabungkan dalam file notepad++ berupa dat file, maka lampiran siap digunakan dalam simulasi. Berikut ini adalah penjelasan salah satu lampiran yang digunakan pada simulasi yakni pada CNT dengan chirality (10,8).

Command	Penjelasan
528 atoms	Simulasi yang dipakai terdiri dari 528
20 bonds	atom (40 atom hidrogen dan 488 atom
0 angles	karbon).
0 dihedrals	

0 impropers					
2 atom types					Dalam simulasi ini ada dua jenis atom yang dipakai, yakni atom hidrogen dan carbon. Dan hanya ada satu ikatan yakni ikatan hidrogen, sedangkan ikatan pada CNT tidak diperhitungkan.
1 bond types					
-9.0000 9.0000 xlo xhi -9.0000 9.0000 ylo yhi -12.0000 42.0000 zlo zhi					Ini adalah volume dari ruang simulasi yang dipakai. Memiliki batas terendah untuk sumbu x -9.0000 dan batas tertinggi sumbu x 9.000. Memiliki batas terendah untuk sumbu y -9.0000 dan batas tertinggi sumbu y 9.000. Memiliki batas terendah untuk sumbu z -12.0000 dan batas tertinggi sumbu z 42.000.
Masses					Ini adalah berat massa yang digunakan dalam simulasi. Jenis pertama adalah massa atom hidrogen. Jenis kedua adalah massa atom karbon.
1 1.0					
2 12.0					
Atoms					Ini adalah penjelasan mengenai tiap atom yang digunakan pada simulasi. Kolom pertama menunjukkan ID atom. Kolom kedua menunjukkan ID molekul. Semua atom karbon dihitung sebagai satu kesatuan di CNT sehingga diberi ID molekul 1. Sedangkan untuk molekul hidrogen yang terdiri dari 2 atom hidrogen dihitung tiap molekul. Sehingga molekul hidrogen memiliki ID molekul dari 2-21. Kolom ketiga merupakan jenis atom. Dalam simulasi ini atom karbon
1	1	2	0	5.767	
	2.006	31.863			
2	1	2	0	5.152	
	3.277	31.772			
.....					
508	21	1	1.0	-1.000	
	2.000	-8.000			
509	2	1	-1.0	-3.787	
	4.000	-2.000			

				dimasukkan sebagai jenis atom 2 dan atom hidrogen dimasukkan sebagai jenis atom 1. Kolom keempat merupakan muatan yang dimiliki oleh atom. Pada atom karbon tidak memiliki muatan sehingga diberi nilai 0.0. untuk atom hidrogen memiliki 2 jenis muatan, muatan positif (1.0) dan negative (-1.0). sedangkan kolom kelima, keenam dan ketujuh adalah koordinat dari atom (x, y, z)
Bonds				Ini merupakan pendefinisian ikatan yang ada dalam simulasi, yakni ikatan dalam molekul hidrogen. Kolom pertama merupakan no urut ikatan. Kolom kedua merupakan jenis atom (hidrogen merupakan atom jenis 1 disimulasi). Kolom ketiga dan keempat adalah ID atom yang berpasangan dalam satu molekul. Sebagai contoh molekul pertama hidrogen merupakan susunan dari pasangan atom dengan ID atom 489 dan 509.
1	1	489	509	
2	1	490	510	
3	1	491	511	
4	1	492	512	
5	1	493	513	

Tabel 3.2. Penjelasan Atom Definition pada LAMMPS

- Settings, merupakan bagian tentang pengaturan koefisien ikatan, parameter – parameter kondisi simulasi yang diinginkan, dan output. Contoh perintah pengaturan koefisien yaitu `pair_coeff`, `bond_coeff`, `angle_coeff`, `dihedral_coeff`, `improper_coeff`, `kpace_style`, `dielectric`, `special_bonds`. Pengaturan variasi simulasi dijelaskan dengan perintah – perintah seperti `neighbor`, `neigh_modify`, `group`, `timestep`, `reset_timestep`, `run_style`, `min_style`, `min_modify`. Untuk kondisi batas, integrasi waktu, dan pilihan diagnostic dijelaskan dengan perintah `fix`. Sedangkan variasi jenis perhitungan dijelaskan dengan perintah `compute`, `compute_modify`, dan `variable`. Selain itu, Output diperintah dengan `thermo`, `dump`, and `restart`. Pada proses ini

harus memperhitungkan nilai parameter dari tiap atom yakni nilai σ (jarak inter atom dalam molekul) dan nilai ϵ (energi atom). Nilai parameter yang dipergunakan adalah sebagai berikut (Banerjee, 2008) :

Molekul	Atom	σ [Å]	ϵ [kJ/mol]
Hidrogen (H ₂)	H	2.915	0.3158
Carbon Nanotube (CNT)	C	3.40	0.2327

Tabel 3.3. Nilai parameter σ dan ϵ dari atom yang digunakan

Berikut adalah salah satu contoh setting digunakan dalam *input script* pada simulasi :

Command	Argumen	Keterangan
#kpace_style	Ewald 1.0e-2	Mendefinisikan timestep untuk menghitung interaksi coulomb dengan menggunakan standar penjumlahan Ewald dengan presisi sebesar 1×10^{-2}
Bond_style	harmonic	Jenis ikatan yang dipakai adalah jenis ikatan harmonic dikarenakan simulasi menggunakan potensial Lennard-Jones.
Bond_coeff	1 1201.1 0.254	Untuk menentukan koefisien gaya ikatan untuk satu atau lebih jenis ikatan. Kolom pertama menunjukkan jumlah tipe ikatan. Dalam simulasi ini hanya ada satu jenis ikatan yakni ikatan hydrogen. Kolom kedua dan ketiga menunjukkan koefisien atom disimulasi yakni atom karbon dan hydrogen. Koefisien ini diperoleh dengan mereduksi ke satuan lj.
Pair_style	Lj/cut/coul/cut 3.2	Jenis pasangan yang dipakai disimulasi adalah Lennard-Jones dengan memperhitungkan muatan tiap atom. Sehingga persamaannya menjadi: $U(R_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] + \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$ Nilai cut off yang dipergunakan pada

					simulasi sebesar 3,2 dalam satuan lj.
Pair_coeff	1	1	1.0	1.0	Ini adalah penjelasan mengenai koefisien pasangan yang digunakan pada atom hidrogen. Kolom pertama dan kedua menunjukkan hubungan atom pasangan yang dalam command ini antara hidrogen dengan hidrogen. Kolom ketiga dan keempat adalah nilai reduksi dari satuan Å ke satuan lj. Nilai ini dipat dengan membagi nilai σ dan ϵ atom yang dihitung dengan nilai σ dan ϵ atom acuan (hidrogen). Sehingga diperoleh nilai 1.0 dan 1.0
Pair_coeff	2	2	0.737	1.166	Ini adalah penjelasan mengenai koefisien pasangan yang digunakan pada atom karbon di CNT. Kolom pertama dan kedua menunjukkan hubungan atom pasangan yang dalam command ini antar atom karbon. Kolom ketiga dan keempat adalah nilai reduksi dari satuan Å ke satuan lj. Nilai ini dipat dengan membagi nilai σ dan ϵ atom yang dihitung yakni karbon dengan nilai σ dan ϵ atom acuan (hidrogen). Sehingga diperoleh nilai 0.737 dan 1.166
Pair_coeff	1	2	0.858	1.083	Ini adalah penjelasan mengenai koefisien pasangan yang digunakan pada atom karbon dan hidrogen. Kolom pertama dan kedua menunjukkan hubungan atom pasangan yang dalam command ini antara atom karbon dan hidrogen. Kolom ketiga dan keempat adalah nilai reduksi dari satuan Å ke satuan lj. Nilai ini dipat dengan membagi nilai σ dan ϵ atom yang dihitung yakni karbon dengan nilai σ dan

		<p>ϵ atom acuan (hidrogen). Namun karena ini adalah interaksi antara pasangan atom yang berbeda maka nilai σ dan ϵ didapat dengan menggunakan persamaan Lorentz-Berthelot:</p> $\sigma_{ij} = (\sigma_{ii} + \sigma_{jj})/2$ $\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_{ii}\epsilon_{jj}}$ <p>Sehingga diperoleh nilai 0.858 dan 1.083</p>
Group	Cnt type 2	Memberikan label kelompok pada atom disimulasi. Dalam command ini CNT adalah kelompok atom 2
Group	Hyd type 1	Memberikan label kelompok pada atom disimulasi. Dalam command ini hidrogen adalah kelompok atom 1
Compute	Modile hyd temp	Menentukan perhitungan yang akan digunakan pada kelompok atom tertentu. Dalam command ini yang dihitung adalah pergerakan atom hydrogen.
Velocity	Hyd create 0.26316 48278 temp mobile	Menentukan inisialisasi kecepatan hydrogen. Nilai 0,26316 merupakan temperatur simulasi yang direduksi ke satuan Ij. Sedangkan 48278 merupakan <i>random seed number</i> .
Fix	1 all nve	Menentukan integrasi NVE pada simulasi.
Fix	2 hyd temp/rescale 100 0.26316 0.26316 0.02 1.0	Menentukan temperature supaya dipertahankan konstan yakni pada 0,26316 (10 K).
Fix_modify	2 temp mobile	Mengubah satu atau lebih parameter pada command fix sebelumnya.
Velocity	Cnt set 0.0 0.0 0.0 units box	Memberikan kecepatan awal pada atom disimulasi. Dikarenakan CNT tidak bergerak, maka semua kecepatannya diberi nilai 0.0.

Fix	3 cnt setforce 0.0	0.0	0.0	Memberikan kecepatan awal pada atom disimulasi. Dikarenakan CNT tidak bergerak, maka semua kecepatannya diberi nilai 0.0.
Fix	4 cnt aveforce 0.0	0.0	0.0	Memberikan kecepatan awal pada atom disimulasi. Dikarenakan CNT tidak bergerak, maka semua kecepatannya diberi nilai 0.0.

Tabel 3.4. Penjelasan Setting pada LAMMPS

4. Run a simulation, simulasi dinamika molekul dijalankan dengan menggunakan perintah run. Contoh dari parameter – parameter yang berada di dalam run, sebagai berikut :

Command	Argumen	Keterangan
Timestep	0.0003	Menentukan ukuran timestep untuk simulasi yakni sebesar 0,0003 satuan lj.
Thermo	10000	Menampilkan data termodinamik setiap 10000 iterasi
Thermo_style	Custom step atoms temp pe ke etotal evdwl	Menampilkan data termodinamika yang terjadi yakni iterasi (step), energy potensial (pe), energy kinetik (ke), energi total (etotal), dan energy van der waals (evdwl)
Thermo_modify	Temp mobile	
Dump	Mydump all atom 1000 dump.CNT_10_8_150000	Dump digunakan untuk input data visualisasi di VMD. Dump yang digunakan merekam pergerakan dari semua atom disimulasi setiap 1000 iterasi. Dan akan dihasilkan dump file dengan nama dump.CNT_10_8_150000
Run	150000	Melakukan proses iterasi simulasi

selama 150000 kali.

Tabel 3.5. Penjelasan Running pada LAMMPS

3.2.4. *Running Program*

Ketika *input script* dan lampiran atom definition sudah siap, maka siap dijalankan simulasi dengan menggunakan LAMMPS. Simulasi dijalankan program Cygwin kemudian ketik perintah LAMMPS dengan menyebutkan nama *input script* yang sudah dibuat. Contoh :

```
M.Yahdi@MYahdi-PC ~
# lmp_win_no-mpi.exe < in.skripik_new
```

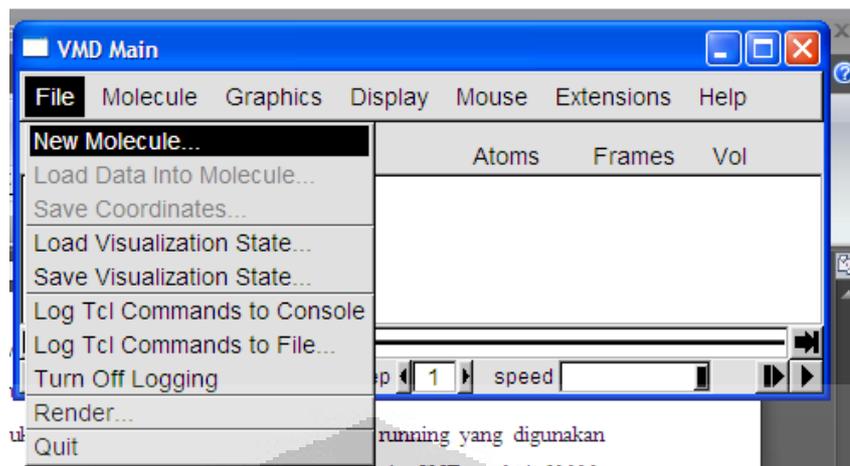
Untuk semua simulasi pada penelitian ini, running yang digunakan divariasikan menjadi tiga macam untuk semua jenis CNT yakni 50000, 100000, 150000.

3.2.5. *Visualisasi*

Setelah simulasi berjalan pada panel Cygwin, maka akan muncul dump dan log file dari simulasi tersebut. Hasil dump simulasi tersebut digunakan sebagai input untuk visualisasi di VMD. Contoh dump file yang dihasilkan dari proses perhitungan LAMMPS adalah sebagai berikut:

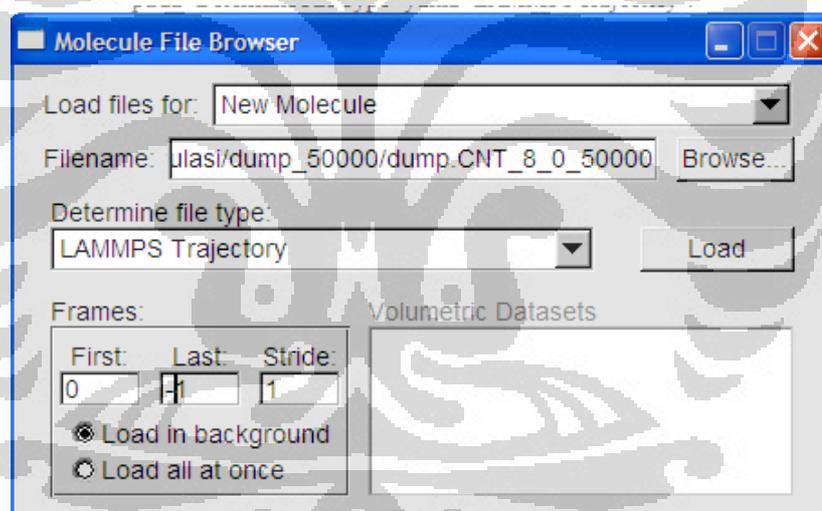
```
dump.CNT_8_0_50000
```

Untuk membuat visualisasi menggunakan VMD, harus memasukkan dump file yang dihasilkan ke dalam VMD melalui perintah dari bagian “New Molecule”.



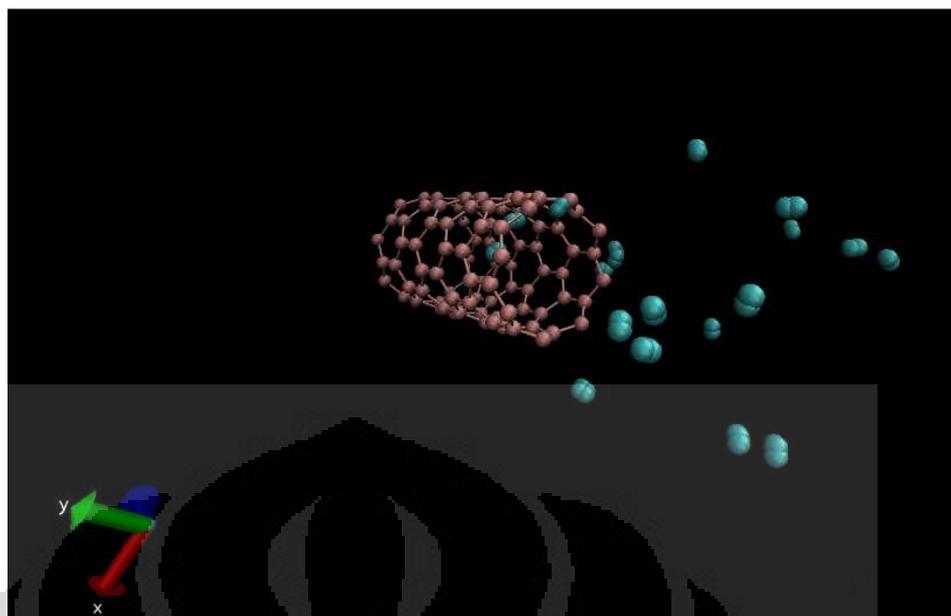
Gambar 3.4. Insert New Molecule pada VMD untuk visualisasi

kemudian memasukkan dump file yang akan divisualisasikan melalui “Molecule File Browser”. Dan memilih tipe file yang akan divisualisasikan pada “Determine File Type” yakni “LAMMPS Trajectory”.



Gambar 3.5. Molecule File Browser pada VMD

Kemudian di klik button “Load”, dan akan diperoleh hasil seperti di bawah ini.



Gambar 3.6. Salah satu hasil adsorpsi hidrogen pada VMD

BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1. HASIL

Pada bab ini ditampilkan hasil dan analisa dari simulasi adsorpsi hidrogen terhadap CNT dengan tiga time running yang berbeda yakni 50000, 100000, dan 150000. Dengan jumlah hidrogen, temperatur, dan volume yang sama. Sedangkan untuk chirality yang digunakan adalah variasi dari chirality yang pernah digunakan oleh Maruyama dalam penelitiannya yakni chirality (8,8), (10,10), (12,12) yang dikembangkan menjadi dua belas macam variasi yakni:

- | | | |
|----------|-----------|-----------|
| - (8,0) | - (10,0) | - (12,0) |
| - (8,8) | - (10,8) | - (12,8) |
| - (8,10) | - (10,10) | - (12,10) |
| - (8,12) | - (10,12) | - (12,12) |

Divariasikan menjadi dua belas macam untuk mengetahui perbandingan adsorpsi pada CNT dengan chirality yang beragam yakni armchair ($n=m$), zigzag (salah satu dari n atau m bernilai 0), dan chiral (yang nilai n atau m nya selain dari jenis armchair dan zigzag).

Diameter dari CNT sendiri bisa dihitung berdasarkan vector n dan m dengan menggunakan rumus:

$$d = \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + n.m}}{0.0783}$$

Sehingga diperoleh diameter dari masing-masing CNT yang disimulasikan adalah sebagai berikut:

No	CNT		
	n	m	Diameter [nm]
1	8	10	1,223085
2	8	12	1,365207
3	10	8	1,223085
4	10	12	1,493869
5	12	8	1,365207
6	12	10	1,493869
7	8	8	1,084957
8	10	10	1,356196
9	12	12	1,627435
10	8	0	0,6264
11	10	0	0,783
12	12	0	0,9396

Tabel 4.1. Diameter CNT simulasi

Parameter yang digunakan ketika simulasi adalah temperatur tetap 10 K, jumlah molekul sama yakni 20 molekul hidrogen (40 atom hidrogen), dan ruang simulasi yang sama.

Dan berikut ini adalah beberapa referensi hasil simulasi dari beberapa penelitian (Banerjee, 2008).

Referensi	Material	Temperatur [K]	Tekanan [MPa]	Penyimpanan Maksimum (%wt)
Chen et al., 2004	CNT	298	0.1	1
Darkrim et al., 2000	SWNT	80	10	11
Guay et al., 2004	CNT	293	10	<1
Haluska et al., 2004	SWNT	77	0.1	< 0.46
Lueking, 2004	CNT	300	0.1	~0.1
Nishiyama et al.,	SWNT	295	0.1	0.86

Tabel 4.2. Hasil adsorpsi hidrogen pada CNT dan SWNT pada beberapa penelitian

4.1.1. Hasil Adsorpsi Hidrogen Running

Di bawah ini adalah table hasil simulasi yang menunjukkan adsorpsi hidrogen pada setiap CNT dengan chirality yang berbeda-beda.

No	CNT			50000		100000		150000	
	n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
1	8	10	1,223085	10	10	10	10	10	10
2	8	12	1,365207	0	0	18	9	18	9
3	10	8	1,223085	10	3,333333	10	3,333333	10	3,333333
4	10	12	1,493869	2	0,5	4	1	4	1
5	12	8	1,365207	0	0	18	3,6	18	3,6
6	12	10	1,493869	2	0,333333	4	0,666667	4	0,666667
7	8	8	1,084957	2	0,285714	8	1,142857	6	0,857143
8	10	10	1,356196	4	0,5	14	1,75	14	1,75
9	12	12	1,627435	16	1,777778	16	1,777778	18	2
10	8	0	0,6264	8	0,8	8	0,8	14	1,4
11	10	0	0,783	12	1,090909	16	1,454545	16	1,454545
12	12	0	0,9396	16	1,333333	16	1,333333	16	1,333333

Tabel 4.3. Hasil Adsorpsi hidrogen di semua chirality pada tiap time running

Dan jika dibagi berdasarkan jenis chiralitynya maka didapatkan table sebagai berikut:

1. CNT dengan chirality zigzag

CNT			50000		100000		150000	
n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt%	H ₂	wt%	H ₂	wt%
8	0	0,6264	8	0,058824	8	0,058824	14	0,102941
10	0	0,783	12	0,075	16	0,1	16	0,1
12	0	0,9396	16	0,086957	16	0,086957	16	0,086957

Tabel 4.4. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality zigzag

2. CNT dengan chirality armchair

CNT			50000		100000		150000	
n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
8	8	1,084957	2	0,01	8	0,04	6	0,03
10	10	1,356196	4	0,016667	14	0,058333	14	0,058333
12	12	1,627435	16	0,057143	16	0,057143	18	0,064286

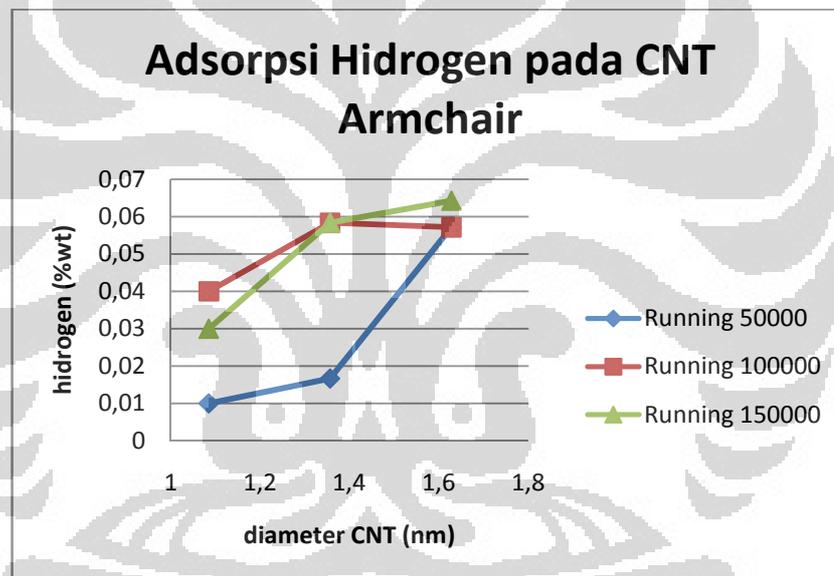
Tabel 4.5. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality armchair

3. CNT dengan chirality chiral

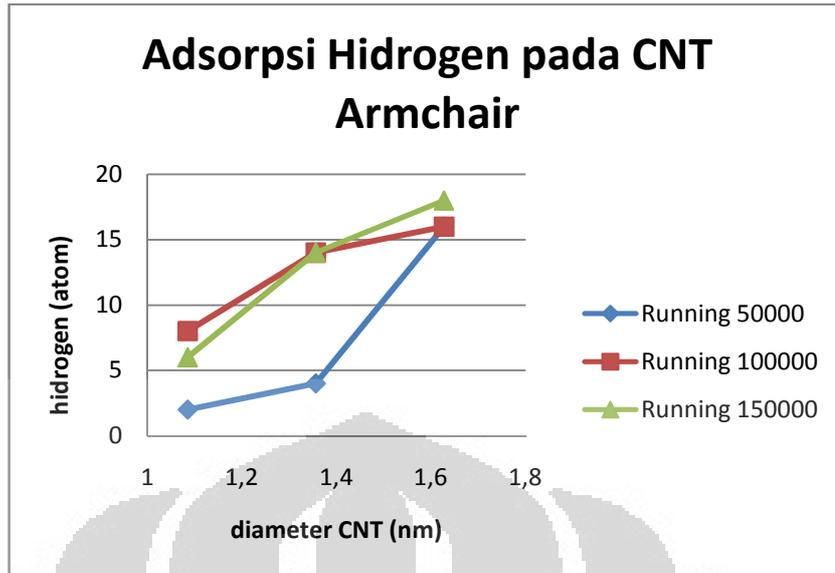
CNT			50000		100000		150000	
N	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
8	10	1,223085	10	0,018939	10	0,018939	10	0,018939
8	12	1,365207	0	0	18	0,052326	18	0,052326
10	8	1,223085	10	0,018939	10	0,018939	10	0,018939
10	12	1,493869	2	0,002604	4	0,005208	4	0,005208
12	8	1,365207	0	0	18	0,052326	18	0,052326
12	10	1,493869	2	0,002604	4	0,005208	4	0,005208

Tabel 4.6. Atom hidrogen yang diadsorp CNT dengan jenis chirality chiral

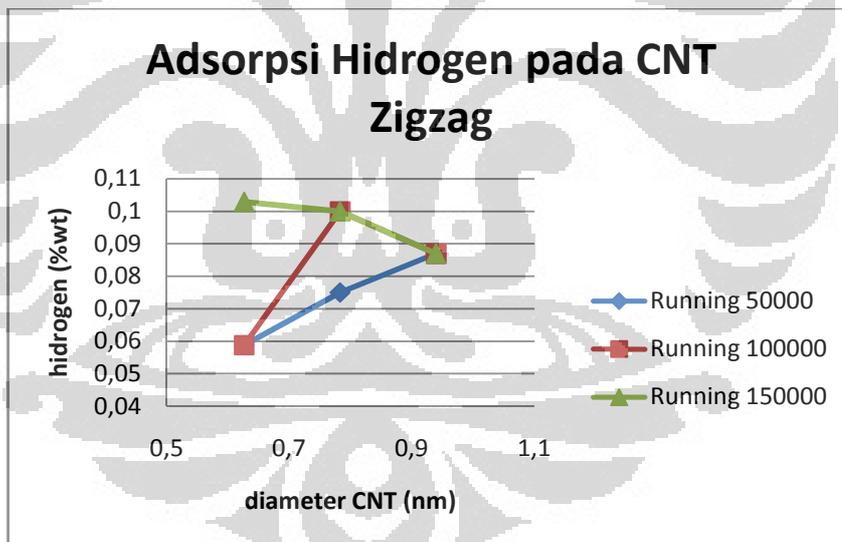
Dan didapatkan grafik antara jumlah total atom tiap simulasi (CNT dan hidrogen) dengan jumlah atom hidrogen yang diadsorpsi oleh CNT (satu molekul hidrogen terdiri dari dua atom hidrogen).



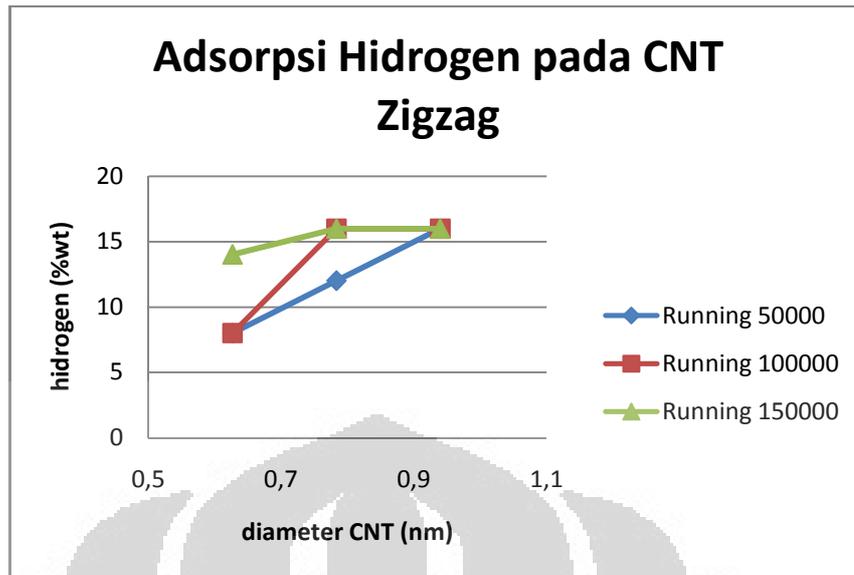
Gambar 4.1. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality armchair berdasarkan %wt



Gambar 4.2. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality armchair berdasarkan atom hidrogern yang diadsorp



Gambar 4.3. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality zigzag berdasarkan %wt



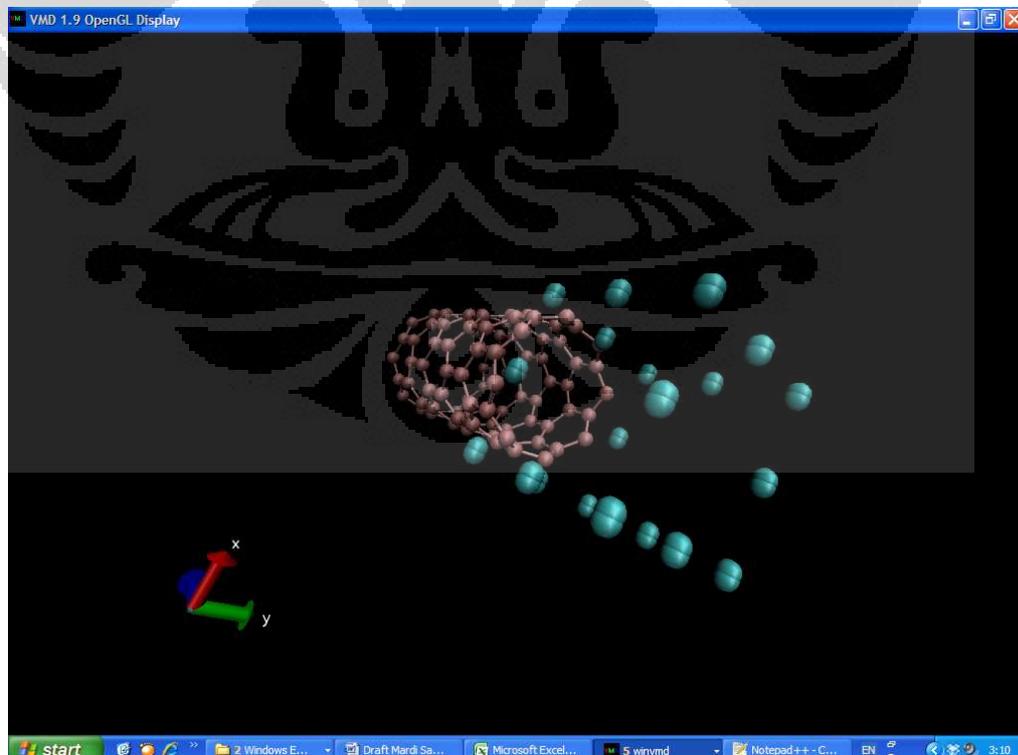
Gambar 4.4. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality zigzag berdasarkan atom hidrogern yang diadsorp

4.1.2. Hasil Visualisasi Simulasi Adsorpsi Hidrogen

Berikut ini adalah tampilan dari beberapa visualisasi melalui VMD (merupakan perwakilan dari tiap jenis chirality):

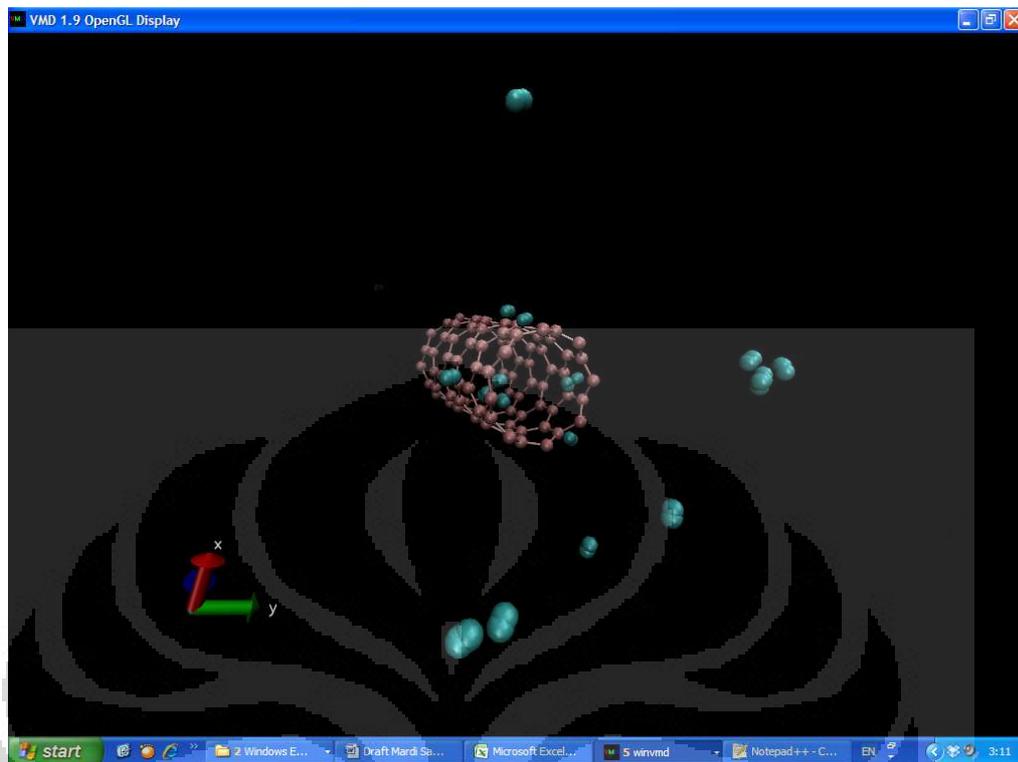
1. CNT zigzag (8,0) running 150000

Kondisi awal



Gambar 4.5. Visualisasi kondisi awal CNT zigzag (8,0) running 150000

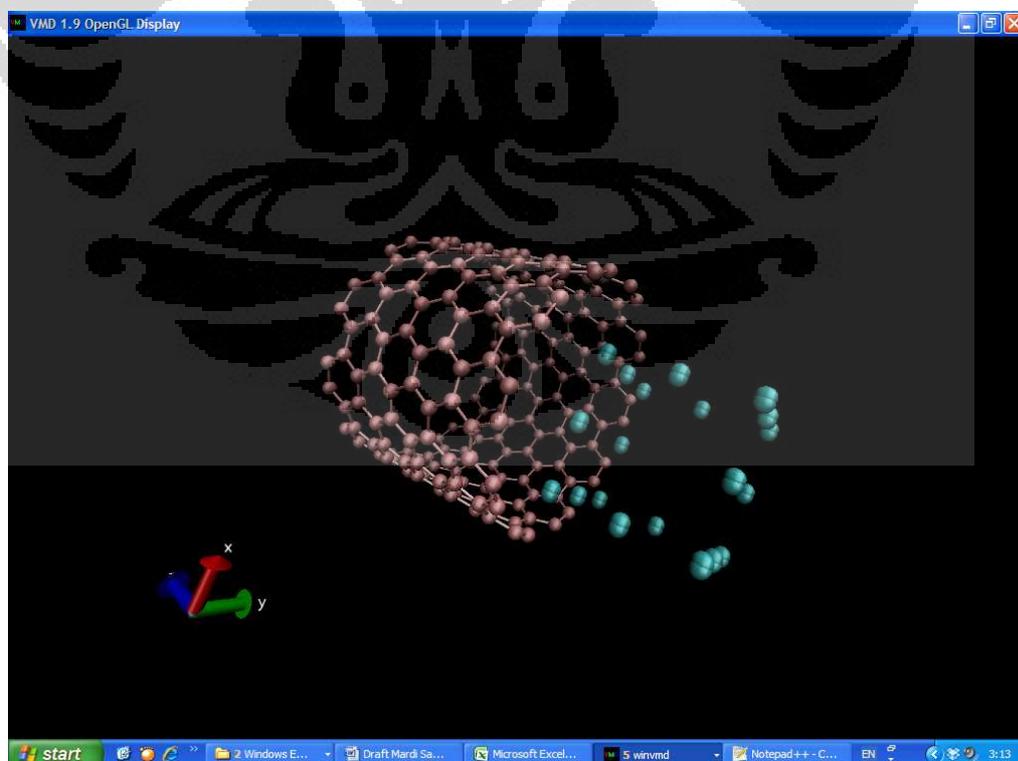
Kondisi akhir



Gambar 4.6. Visualisasi kondisi akhir CNT zigzag (8,0) running 150000

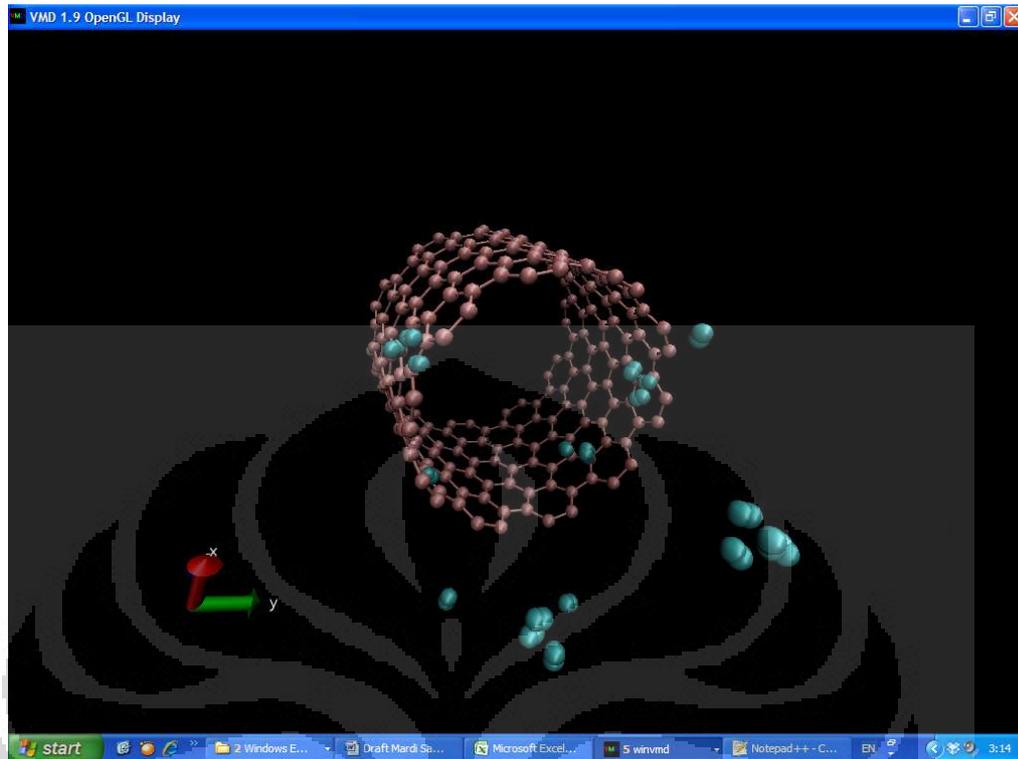
2. CNT armchair (10,10) running 100000

Kondisi awal



Gambar 4.7. Visualisasi kondisi awal CNT armchair (10,10) running 100000

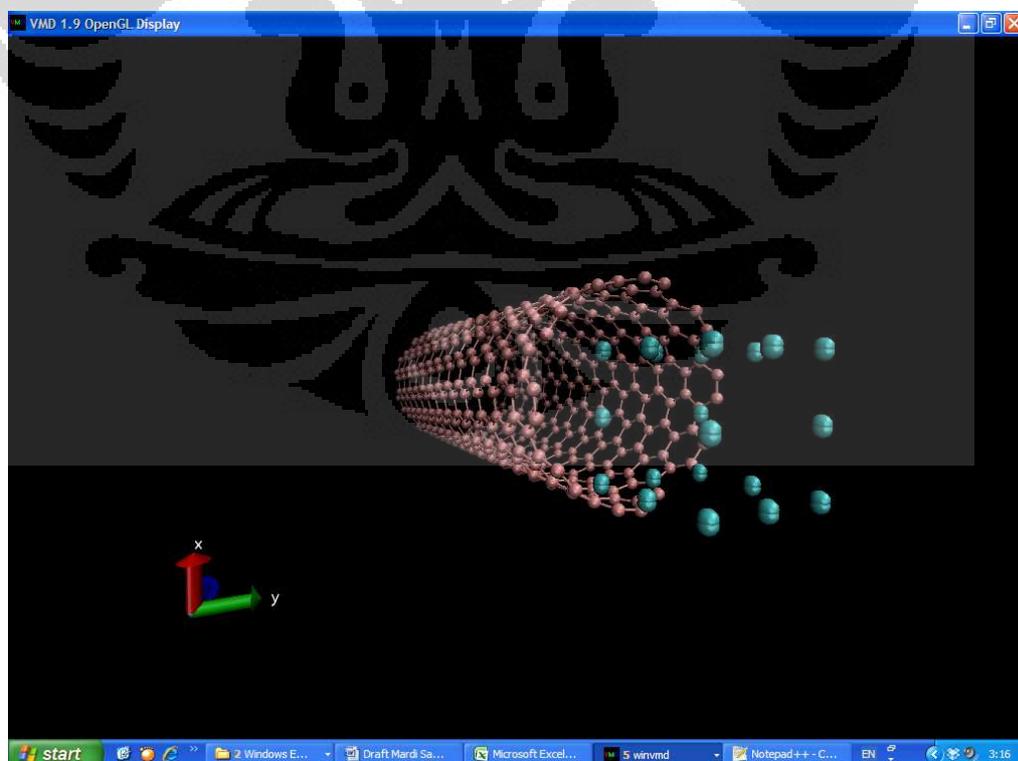
Kondisi akhir



Gambar 4.8. Visualisasi kondisi akhir CNT armchair (10,10) running 100000

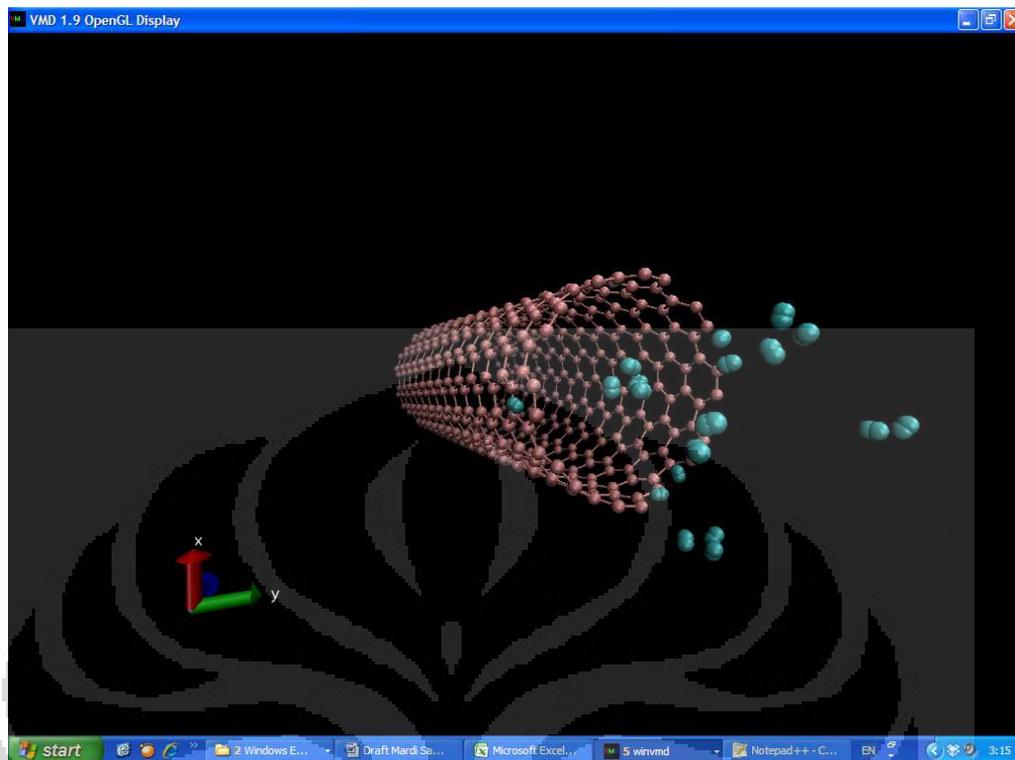
3. CNT chiral (8,10) running 50000

Kondisi awal



Gambar 4.9. Visualisasi kondisi awal CNT chiral (8,10) running 50000

Kondisi akhir



Gambar 4.10. Visualisasi kondisi awal CNT chiral (8,10) running 50000

4.2. ANALISA

4.2.1. Analisa Simulasi

Pada semua simulasi jarak antara hidrogen dengan CNT telah diatur sedemikian rupa sehingga seluruh simulasi memiliki jarak yang sama antara hidrogen dengan CNT yakni sekitar 2 \AA dan inisialisasi awal dari seluruh koordinat hidrogen dibentuk menjadi bentuk kubus dengan tujuan memudahkan dalam pengaturan. Molekul hidrogen yang digunakan sebanyak 20 molekul. Untuk point of reference (titik acuan) yang digunakan adalah titik awal dari koordinat CNT yang dihasilkan. Koordinat awal CNT itu sendiri dipengaruhi oleh chirality index yang dimiliki oleh CNT. Pada CNT dengan chirality index tipe armchair dimana ($n=m$) maka titik awalan CNT yang menjadi titik acuan simulasi adalah (0,0). Sedangkan untuk jenis chirality index selain armchair maka point of reference simulasi bisa dipastikan tidak berawal dari (0,0).

Ruang simulasi yang digunakan semuanya diseragamkan yakni :

- Untuk sumbu x memiliki nilai minimum (-9.0000) dan nilai maksimum (9.0000)
- Untuk sumbu y memiliki nilai minimum (-9.0000) dan nilai maksimum (9.0000)
- Untuk sumbu z memiliki nilai minimum (-12.0000) dan nilai maksimum (42.0000)

4.2.2. Analisa Hasil Data

No	CNT			50000		100000		150000	
	n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
1	8	10	1,223085	10	10	10	10	10	10
2	8	12	1,365207	0	0	18	9	18	9
3	10	8	1,223085	10	3,333333	10	3,333333	10	3,333333
4	10	12	1,493869	2	0,5	4	1	4	1
5	12	8	1,365207	0	0	18	3,6	18	3,6
6	12	10	1,493869	2	0,333333	4	0,666667	4	0,666667
7	8	8	1,084957	2	0,285714	8	1,142857	6	0,857143
8	10	10	1,356196	4	0,5	14	1,75	14	1,75
9	12	12	1,627435	16	1,777778	16	1,777778	18	2
10	8	0	0,6264	8	0,8	8	0,8	14	1,4
11	10	0	0,783	12	1,090909	16	1,454545	16	1,454545
12	12	0	0,9396	16	1,333333	16	1,333333	16	1,333333

Dari table adsorpsi di atas dapat kita lihat bahwa CNT dengan jenis chirality index chiral (no. 3, 4, 6, 8, 10, 11) akan memiliki hasil yang sama ketika nilai n dan m berlawanan di setiap running yang sama. Seperti pada CNT dengan chirality index (8,10) akan memiliki adsorp hidrogen yang sama dengan CNT dengan chirality index (10,8).

CNT			50000		100000		150000	
n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
8	10	1,223085	10	0,018939	10	0,018939	10	0,018939
8	12	1,365207	0	0	18	0,052326	18	0,052326
10	8	1,223085	10	0,018939	10	0,018939	10	0,018939
10	12	1,493869	2	0,002604	4	0,005208	4	0,005208
12	8	1,365207	0	0	18	0,052326	18	0,052326
12	10	1,493869	2	0,002604	4	0,005208	4	0,005208

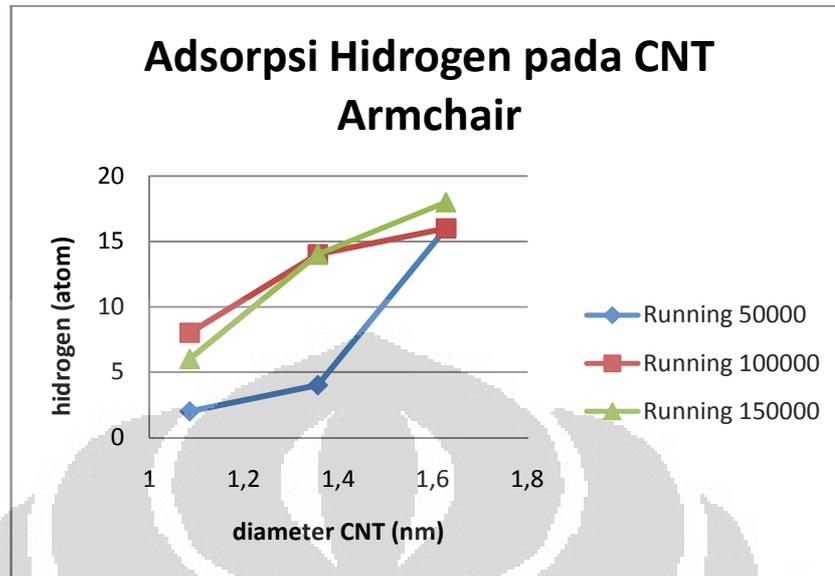
Sedangkan untuk CNT dengan chirality index armchair, dari penelitian Maruyama menyatakan bahwa semakin besar chirality indeks pada CNT dengan jenis armchair seharusnya semakin banyak pula hidrogen yang bisa diadsorp oleh CNT. Teori tersebut sesuai dengan data di atas (no. 2, 7, 12). Dari data tersebut terlihat bahwa semakin besar chirality indeks CNT jenis armchair semakin banyak hidrogen yang diadsorp.

CNT			50000		100000		150000	
n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt %	H ₂	wt %	H ₂	wt %
8	8	1,084957	2	0,01	8	0,04	6	0,03
10	10	1,356196	4	0,016667	14	0,058333	14	0,058333
12	12	1,627435	16	0,057143	16	0,057143	18	0,064286

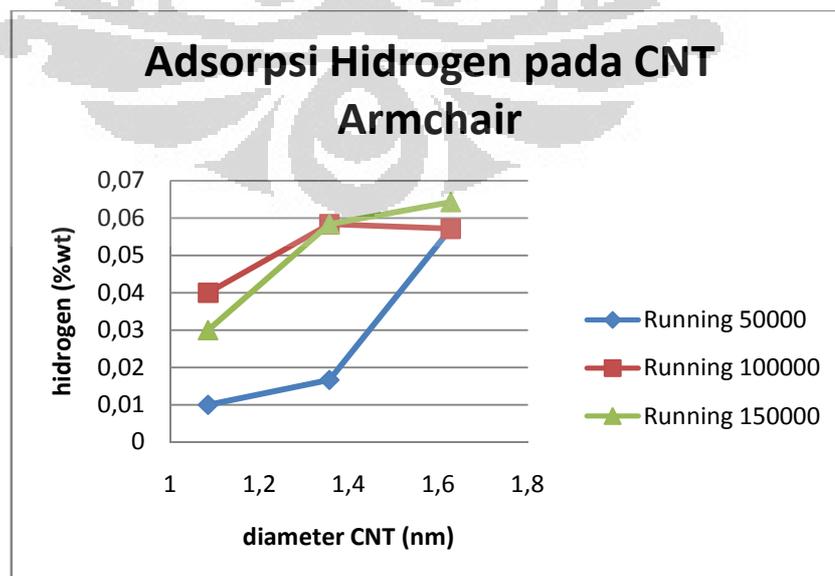
Pada CNT dengan chirality index zigzag mengalami kenaikan jumlah hidrogen yang diadsorpsi ketika nilai indeks chiralitinya semakin besar.

CNT			50000		100000		150000	
n	m	Diameter [nm]	H ₂	wt%	H ₂	wt%	H ₂	wt%
8	0	0,6264	8	0,058824	8	0,058824	14	0,102941
10	0	0,783	12	0,075	16	0,1	16	0,1
12	0	0,9396	16	0,086957	16	0,086957	16	0,086957

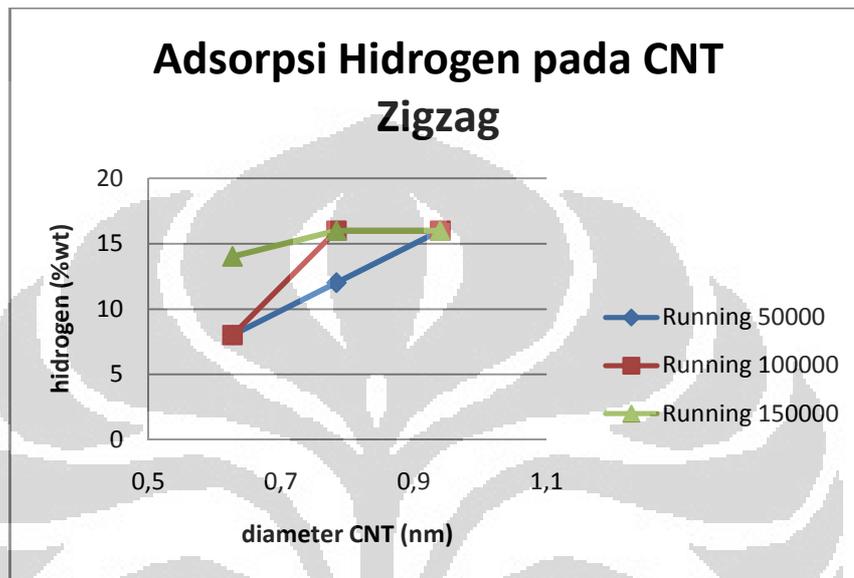
4.2.3. Analisa Grafik



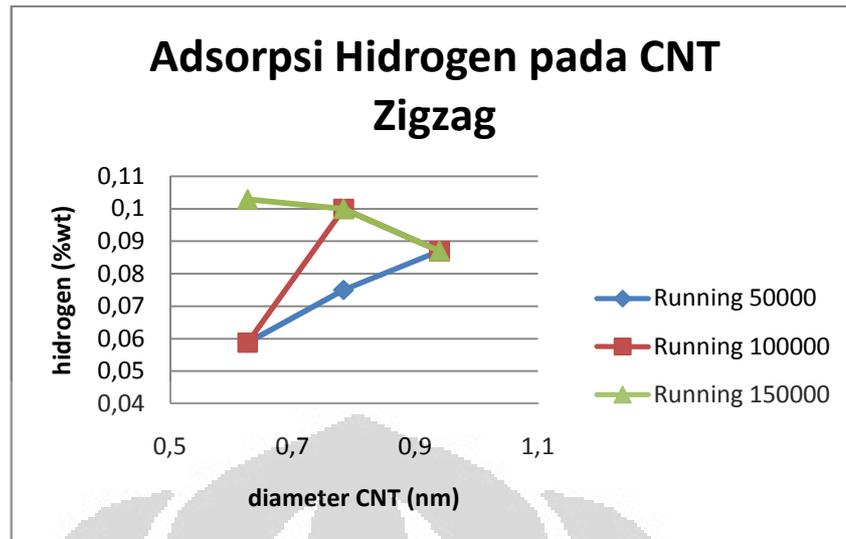
Dari grafik di atas dapat dilihat bahwa time running yang optimum untuk melakukan adsorpsi pada hidrogen pada CNT jenis chirality armchair (8,8) adalah ketika dirunning 100000 yakni sekitar 4 molekul hidrogen (8 atom hidrogen). Sedangkan untuk armchair (10,10) memiliki nilai optimum untuk adsorpsi dirunning 100000 dan 150000 yang mengadsorpsi 7 molekul hidrogen (14 atom hidrogen). Dan untuk armchair (12,12) nilai optimum untuk adsorpsi hidrogen didapatkan ketika running di 150000 yakni sekitar 9 molekul hidrogen (18 atom hidrogen).



Namun jika kita melihat secara weight percent hydrogen yang diadsorp, maka akan terjadi penurunan pada grafik. Hal ini dikarenakan jumlah total seluruh atom tidaklah sama. Karena dengan adanya perbedaan nilai vector n dan m dari suatu chirality CNT maka berbeda pula jumlah atom karbon yang menyusun CNT.



Dari grafik di atas dapat dilihat bahwa time running yang optimum untuk melakukan adsorpsi pada hidrogen pada CNT jenis chirality zigzag (8,0) adalah ketika dirunning 150000 yakni sekitar 7 molekul hidrogen (14 atom hidrogen). Sedangkan untuk zigzag (10,0) memiliki nilai optimum untuk adsorpsi dirunning 100000 dan 150000 yang mengadsorpsi 8 molekul hidrogen (16 atom hidrogen). Dan untuk armchair (12,12) nilai optimum untuk adsorpsi hidrogen didapatkan disemua running 50000, 100000, dan 150000 yakni sekitar 8 molekul hidrogen (16 atom hidrogen). Hal ini menunjukkan bahwa nilai optimum untuk mencapai adsorpsi yang maksimal tidak bergantung pada lamanya waktu dan bisa dipengaruhi oleh indeks chirality dari CNT.



Sedangkan ketika grafik diubah berdasarkan weight percent, grafik yang terbentuk juga menurun. Hal ini juga terjadi pada CNT dengan chirality armchair, yang bisa terjadi dikarenakan perbedaan vector n dan m pada chirality CNT berpengaruh pada jumlah atom karbonnya.

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1. KESIMPULAN

Dari hasil simulasi adsorpsi hidrogen dengan menggunakan LAMMPS diperoleh hasil sebagai berikut:

- CNT dengan jenis *chirality armchair*, semakin besar indeks *chirality*-nya maka akan semakin baik dalam melakukan adsorpsi hidrogen. Misalkan CNT *armchair* dengan indeks *chirality* (10,10) akan melakukan adsorpsi yang lebih banyak dibanding dengan CNT *armchair* dengan *chirality* indeks (8,8).
- CNT dengan jenis *chirality zigzag*, memiliki karakteristik yang hampir sama dengan CNT jenis *armchair* yakni semakin besar indeks *chirality*-nya makin akan semakin baik dalam melakukan adsorpsi.
- Jika ada CNT dengan jenis *chirality chiral* memiliki indeks *chirality* yang berkebalikan maka memiliki kemampuan adsorpsi yang sama. Sebagai contoh CNT jenis *chiral* dengan indeks *chirality* (8,10) akan memiliki kemampuan adsorpsi yang sama dengan CNT jenis *chiral* dengan indeks (10,8).
- Nilai optimum untuk mencapai adsorpsi hidrogen yang maksimal bukan berdasarkan lamanya waktu running, namun dipengaruhi oleh indeks *chirality* dari CNT.

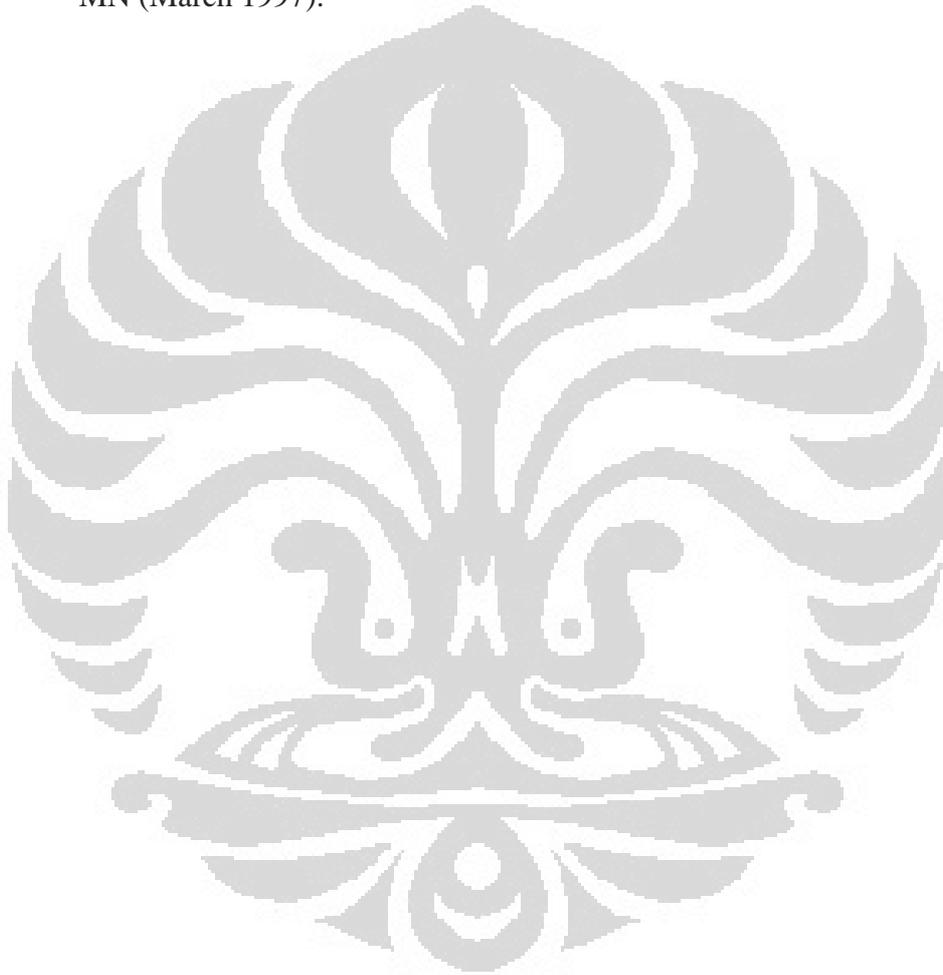
5.2. SARAN

Penulis memberikan saran untuk penelitian berikutnya agar ketika melakukan simulasi Dinamika Molekuler harus dipersiapkan dasar-dasar ilmu yang digunakan (Fisika Kuantum, Statistika Mekanik, Persamaan Gerak) dengan baik. Sehingga bisa mempertimbangkan hal-hal tersebut ketika melakukan simulasi. Dan bisa mengerti bagaimana kerja dari software bekerja.

DAFTAR REFERENSI

1. Prasodjo, P.(2010). *Studi Kapasitas Adsorpsi serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon sebagai Penyimpan Hidrogen*. Fakultas Teknik Universitas Indonesia: Depok]
2. Supriyadi, Nasruddin.(2010).Simulasi Dinamika Molekuler: Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi. Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin(SNTTM). Universitas Sriwijaya: Palembang]
3. <http://meingstein.wordpress.com/>
4. Keller, Jürgen U, Reiner Staudt, 2005, *Gas adsorption equilibria; Experimental methods and Adsorptive isotherms*, Springer Science + Business Media, Inc., Boston, United States of America, 2005
5. Yan, Sun et al. (2007). Impact of Supercritical Adsorption Mechanism on Research of Hidrogen Carrier. Chinese Science Bulletin, 52 (8), 1146-1152.]
6. Conte, M et al. (2001). Hidrogen Economy for a Sustainable Development : state-of-the art and technological perspectives. Journal of Power Sources, 100, 171-187.].
7. Poirier, E et al. (2004). Storage of Hidrogen on Single-walled Carbon Nanotube and Other Carbon Structures.Appl. Phys. A, 78, 961-967].
8. Banerjee, S. (2008). Molecular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena. Virginia Polytechnic and State University, Blackburg]
9. Yulianto, Brian.“Carbon Nanotube, Material Ajaib Primadona Teknologi Nano.” <http://www.nano.lipi.go.id/utama.cgi?cetakartikel&1073086044> (diakses tanggal 10 Desember 2011)
10. Cengel, Yunus A., dan Boles, Michael A., Thermodynamics: An Engineering Approach, McGraw-Hill Inc, 1994
11. Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L., CHARMM Molecular Dynamics Simulations, http://www.ch.embnet.org/MD_tutorial/
12. Ercolessi, Furio, A Molecular Dynamics Primer, <http://www.sissa.it/furio/md>.
13. Haile, J.M., Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods, John Wiley & Sons, Inc., 1992.
14. Huang, Kerson, Statistical Mechanics, John Wiley & Sons, Inc., 1987.
15. Allen, M.P. and Tildesley, D.J., Computer Simulation of Liquids, Oxford University Press, 1987.

16. Maruyama, S., Kimura T. Molecular Dynamic Simulation of Hydrogen Storage in Single-Walled Carbon Nanotubes. ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibit, Orland, November 5-11, 2000
17. S. J. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J Comp Phys*, 117, 1–19 (1995).
18. S. J. Plimpton, R. Pollock, M. Stevens, Particle-Mesh Ewald and rRESPA for Parallel Molecular Dynamics Simulations, in Proc of the Eighth SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, Minneapolis, MN (March 1997).



LAMPIRAN

Lampiran 1. Input Script Program Simulasi Adsorpsi Hidrogen pada LAMMPS

3-d LJ hidrogen storage

dimension 3
boundary p p p

atom_style full
neighbor 0.3 bin
neigh_modify delay 5

read_data CNT_8_0.dat

#kpace_style ewald 1.0e-2
bond_style harmonic
bond_coeff 1 1201.1 0.254

LJ potentials

pair_style lj/cut/coul/cut 3.2
pair_coeff 1 1 1.0 1.0
pair_coeff 2 2 0.737 1.166
pair_coeff 1 2 0.858 1.083

Define groups

group cnt type 2
group hyd type 1

Initial velocities

compute mobile hyd temp
velocity hyd create 0.26316 482748 temp mobile
fix 1 all nve
fix 2 hyd temp/rescale 100 0.26316 0.26316 0.02 1.0
fix_modify 2 temp mobile

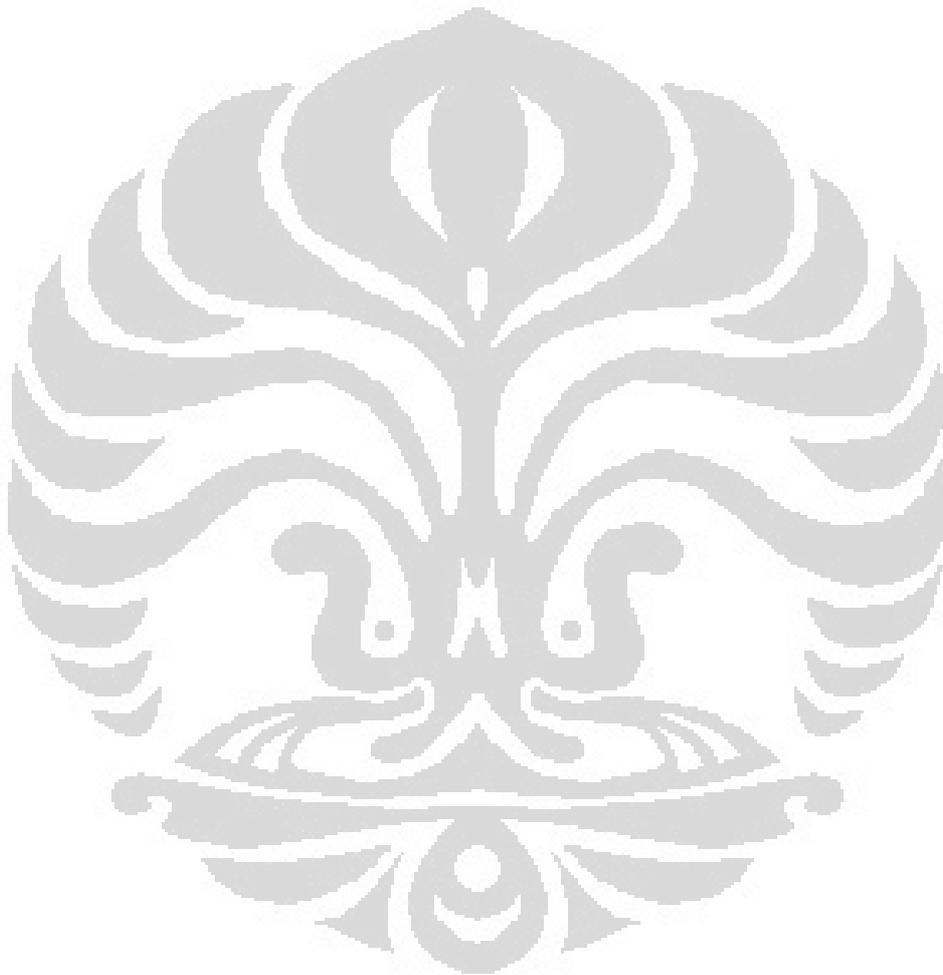
Static nanotube

velocity cnt set 0.0 0.0 0.0 units box
fix 3 cnt setforce 0.0 0.0 0.0
fix 4 cnt aveforce 0.0 0.0 0.0

Run

```
timestep          0.0003
thermo            10000
thermo_style      custom step atoms temp pe ke etotal evdwl
thermo_modify     temp mobile

dump              mydump all atom 1000 dump.CNT_8_0_150000
run               150000
```



Lampiran 2. Read_data file Simulasi Adsorpsi Hidrogen pada LAMMPS

Lammgs input file for carbon nanotube

136 atoms
20 bonds
0 angles
0 dihedrals
0 impropers

2 atom types
1 bond types

-9.0000 9.0000 xlo xhi
-9.0000 9.0000 ylo yhi
-12.0000 42.0000 zlo zhi

Masses

1 1.0
2 12.0

Atoms

1	1	2	0.0	2.889	1.197	2.127
2	1	2	0.0	2.211	2.211	1.418
3	1	2	0.0	1.197	2.889	2.127
4	1	2	0.0	0.000	3.127	1.418
.....						
97	2	1	1.0	-4.000	-4.000	-3.291
98	3	1	1.0	-4.000	-4.000	-6.291
99	4	1	1.0	-4.000	-4.000	-9.291
100	5	1	1.0	-4.000	-1.000	-9.291
.....						
117	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-3.291
118	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-6.291
119	4	1	-1.0	-3.787	-4.000	-9.291
120	5	1	-1.0	-3.787	-1.000	-9.291
.....						
133	18	1	-1.0	2.213	2.000	-9.291
134	19	1	-1.0	2.213	-4.000	-6.291
135	20	1	-1.0	2.213	2.000	-6.291
136	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-9.291

Bonds

1	1	97	117
2	1	98	118
.....			
19	1	115	135
20	1	116	136

