



UNIVERSITAS INDONESIA

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER ADSORPSI
HIDROGEN PADA *CARBON NANOTUBE* DENGAN VARIASI
TEMPERATUR**

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik

ABDUL JABBAR

0706266765

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

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS

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

Skripsi ini merupakan bagian dari skripsi yang dikerjakan bersama dengan rekan saya, saudara Mardi Santoso (0706267181) dan Ahmad Dzulfahmi (0706266815). Sehingga harap maklum jika ada beberapa bagian dari buku ini yang memiliki kesamaan.



Nama : Abdul Jabbar
NPM : 0706266765
Tanda Tangan : 
Tanggal : 24 Januari 2012

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Abdul Jabbar
NPM : 0706266765
Program Studi : Teknik Mesin
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi
Hidrogen Pada Carbon Nanotube Dengan
Variasi Temperatur

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, Meng.

Penguji : Dr. Ir. M. Idrus Alhamid

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

Penguji : Dr. rer.nat. Agustino Zulys, MSc

Penguji : Dr. Budhy Kurniawan

Ditetapkan di : Depok
Tanggal : 24 Januari 2012

“Dan Dia menundukkan malam dan siang, matahari dan bulan untukmu. Dan bintang – bintang itu ditundukkan (untukmu) dengan perintah-Nya. Sesungguhnya pada yang demikian itu benar – benar terdapat tanda – tanda (kekuasaan Allah) bagi kaum yang memahaminya.”

(An Nahl : 12)

“Barangsiapa menempuh perjalanan dengan tujuan untuk menuntut ilmu, akan Allah mudahkan baginya jalan menuju ke Syurga.”

(H.R. Muslim)

“Semua yang telah lewat adalah mati, sedang apa yang dicita-citakan masih ghaib disana. Maka, satu-satunya kesempatan bagimu adalah waktu dimana engkau sekarang berada.”

(Abdul Fattah Abu Ghuddah)

KATA PENGANTAR

Puji syukur saya panjatkan kepada Allah swt, 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 pada 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 yang sebesar-besanya kepada:

- (1) Dr-Ing. Ir. Nasrudin M.Eng, selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan saya dalam penyusunan skripsi ini hingga detik-detik terakhir penyusunan;
- (2) Mardi Santoso dan Ahmad Dzulfahmi, selaku rekan kerja yang selalu siap sedia meskipun harus bertarung melawan sakit;
- (3) Pak Supriyadi N. S., S.Si, M.Si, sebagai rekan kerja sekaligus pembimbing akan istilah-istilah yang asing dalam bidang dinamika molekuler;
- (4) orang tua dan keluarga saya yang telah memberikan bantuan dukungan materiil dan moril;
- (5) anggota Laboratorium Refrijerasi dan Tata Udara yang selalu setia menemani dalam pertemuan setiap Selasa sore;
- (6) rekan – rekan Laboratorium Manufaktur: Jediel B. R., Dede Sumantri, tri Purwadi, M.Arya.M.N., Arif Gunawan, Frisman S., yang selalu menemani penulis hingga akhir pengambilan data.
- (7) sahabat setia pejuang 4.5 yang telah banyak membantu saya dalam menyelesaikan skripsi ini dengan dukungan morilnya;
- (8) Dr. Budhy Kurniawan, sekretaris Departemen Fisika FMIPA UI, yang telah banyak membantu penulis dalam memahami istilah-istilah dibidang fisika serta bersedia menjadi dosen penguji;

- (9) Dr.rer.nat Agustino, yang telah meluangkan waktu untuk berdiskusi tentang atom dan molekul dan bersedia menjadi salah satu dosen penguji;
- (10) Pak Arif LAPAN yang membantu dalam mengkompilasi cygwin sehingga pemrograman LAMMPS bisa berjalan dengan baik;
- (11) Dr. Engkos A. Kosasih yang telah membantu dalam pencarian referensi dalam fisika kuantum;
- (12) Fighter 07 : Ma'ruffi Kurnia, Adhie Kurnia, Faisal Jamil, Irwansah, Arriyadhul Q., Lucky J., Ricky A., Ayat M., Maman A., Anton R.A., Diwangkoro K., Riyan N., Lutfi Prayogi, Tangguh W., Faris N.Z.,. terimakasih atas doa dan motivasinya;
- (13) teman-teman pekanan: Eko, Ma'ruffi, Maman, Dzil, Gama, Bowo dan Dr. M. Chalid atas motivasi, doa dan taustyahnya;
- (14) dan semua pihak yang tak dapat penulis sebutkan satu persatu yang telah memberikan dukungan baik secara materiil maupun morilnya;

Akhir kata, saya berharap Allah swt berkenan membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu.

Sebuah kesadaran bahwa apa yang dihasilkan dari penelitian ini masih sangat jauh dari kesempurnaan, akan tetapi mudah-mudahan bisa menjadi suatu awal yang baik bagi pengembangan dan ide-ide penelitian selanjutnya.

Depok, 13 Januari 2011

Penulis

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

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

Nama : Abdul Jabbar
NPM : 0706266765
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 penulis yang berjudul :

**SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER ADSORPSI HIDROGEN PADA
CARBON NANOTUBE DENGAN VARIASI TEMPERATUR**

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 penulis selama tetap mencantumkan nama penulis sebagai penulis/pencipta dan sebagai pemilik Hak Cipta.

Demikian pernyataan ini penulis buat dengan sebenarnya.

Dibuat di : Depok

Pada tanggal : 24 Januari 2012

Yang menyatakan



(Abdul Jabbar)

ABSTRAK

Nama : Abdul Jabbar
Program Studi : Teknik Mesin
Judul : Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada Carbon Nanotube Dengan Variasi Temperatur

Krisis energi merupakan salah satu permasalahan serius yang dihadapi saat ini. Kebutuhan akan sumber energi yang dapat diperbaharui dan bebas dari polusi menjadikan hidrogen sebagai salah satu sumber energi alternatif yang sangat berpotensi untuk dikembangkan. Namun, dalam penggunaan hidrogen sebagai sumber energi masih menemui kendala dalam proses penyimpanannya. Yakni, membutuhkan tangki bertekanan tinggi atau disimpan dalam keadaan dicairkan hingga suhu cryogenik. Salah satu cara mengatasi kendala tersebut adalah dengan sistem adsorpsi. Carbon Nanotube (CNT) merupakan media penyimpan yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar. Penelitian secara eksperimental umumnya masih memerlukan biaya yang mahal, maka perlu didukung metoda lain untuk menunjangnya seperti Simulasi Dinamika Molekular. Simulasi kali ini akan dilakukan dalam kondisi isothermis, dimana temperatur yang akan digunakan adalah 253 K, 273 K, dan 293 K pada tekanan yang bervariasi dari 1- 18 atm. Hasil simulasi menunjukkan temperatur 253 K memiliki kemampuan adsorpsi lebih baik dari temperatur lainnya.

Kata kunci:

Dinamika Molekular, Simulasi, CNT, Hidrogen, Adsorpsi, Temperatur

ABSTRACT

Name : Abdul Jabbar
Major : Mechanical Engineering
Title :Molecular Dynamic Simulation of Hidrogen Adsorption in Carbon nanotubes with Temperature Variations

Energy crisis is one of the serious problems faced at present. The need for renewable energy sources and free of pollution makes hydrogen as one of alternative energy sources that are potentially to be developed. However, in the use of hydrogen as an energy source are still encountered obstacles in the process of storage. That is, the need of a high-pressure tank or stored in a liquified state to cryogenic temperature. One way of overcoming these barriers is by adsorption system. Carbon Nanotubes (CNT) is a storage medium that is good because it has a large surface area and large pore. Experimental research is generally still require a high cost, then it needs to be supported by other methods to support it as Molecular Dynamics Simulations. Simulation of this time will be performed in conditions of isothermis, where the temperature is to be used is 253 K, 273 K, and 293 K at a pressure varying from 1-18 atm. The result shows that temperature 253 K have better adsorption than the others.

Key words:

Molecular Dynamic, Simulation, Carbon Nanotubes, Hydrogen, Adsorption, Temperature

DAFTAR ISI

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
KATA PENGANTAR	v
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vii
ABSTRAK	viii
ABSTRACT.....	ix
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR GAMBAR	xiv
DAFTAR TABEL.....	xvi
DAFTAR NOTASI.....	xvii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xviii
1 BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 LATAR BELAKANG.....	1
1.2 PERUMUSAN MASALAH.....	3
1.3 TUJUAN PENELITIAN	4
1.4 BATASAN MASALAH	4
1.5 METODOLOGI PENELITIAN	5
1.6 SISTEMATIKA PENELITIAN	5
2 BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 ADSORPSI HIDROGEN.....	7
2.1.1 Jenis – jenis Adsorpsi.....	7
2.1.2 Keseimbangan Adsorpsi	10
2.1.3 Metode Pengujian Adsorpsi	12
2.2 HIDROGEN	16
2.2.1 Penyimpanan Hidrogen	17
2.2.2 Tinjauan Hasil Eksperimen Penyimpanan Hidrogen	18
2.3 CARBON NANOTUBE	19
2.3.1 Jenis-Jenis Nanotube <i>Carbon Nanotubes</i>	20
2.3.2 Sifat-Sifat Carbon Nanotube	23
2.4 DINAMIKA MOLEKUL.....	24
2.4.1 Ensemble	25

2.4.2	Metode Dinamika Molekuler dan Metode Monte Carlo.....	26
2.5	MEKANIKA KLASIK.....	27
2.5.1	Mekanika Statistik.....	28
2.5.2	Model Interaksi Antar Molekul.....	31
2.5.3	Gaya Van der waals	34
2.5.4	Pemotongan Potensial	35
2.5.5	Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit	35
3	BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN.....	39
3.1	Inisialisasi Koordinat.....	40
3.1.1	Avogadro.....	40
3.1.2	VMD	41
3.2	Simulasi dengan menggunakan LAMMPS	43
3.3	Visualisasi	48
4	BAB 4 HASIL DAN PEMBAHASAN.....	49
4.1	Molekul Hidrogen Pada Temperatur 253 K.....	49
4.1.1	Tekanan 1 atm.....	49
4.1.2	Tekanan 2 atm.....	50
4.1.3	Tekanan 4 atm.....	50
4.1.4	Tekanan 6 atm.....	50
4.1.5	Tekanan 8 atm.....	51
4.1.6	Tekanan 10 atm.....	51
4.1.7	Tekanan 12 atm.....	51
4.1.8	Tekanan 14 atm.....	52
4.1.9	Tekanan 16 atm.....	52
4.1.10	Tekanan 18 atm.....	53
4.2	Molekul Hidrogen Pada Temperatur 273 K.....	53
4.2.1	Tekanan 1 atm.....	53
4.2.2	Tekanan 2 atm.....	53
4.2.3	Tekanan 4 atm.....	54
4.2.4	Tekanan 6 atm.....	54
4.2.5	Tekanan 8 atm.....	54
4.2.6	Tekanan 10 atm.....	55
4.2.7	Tekanan 12 atm.....	55
4.2.8	Tekanan 14 atm.....	55
4.2.9	Tekanan 16 atm.....	56

4.2.10	Tekanan 18 atm.....	56
4.3	Molekul Hidrogen Pada Temperatur 293 K.....	57
4.3.1	Tekanan 1 atm.....	57
4.3.2	Tekanan 2 atm.....	57
4.3.3	Tekanan 4 atm.....	57
4.3.4	Tekanan 6 atm.....	58
4.3.5	Tekanan 8 atm.....	58
4.3.6	Tekanan 10 atm.....	58
4.3.7	Tekanan 12 atm.....	59
4.3.8	Tekanan 14 atm.....	59
4.3.9	Tekanan 16 atm.....	59
4.3.10	Tekanan 18 atm.....	60
4.4	HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 253 K.....	60
4.4.1	Tekanan 1 atm.....	60
4.4.2	Tekanan 2 atm.....	61
4.4.3	Tekanan 4 atm.....	61
4.4.4	Tekanan 6 atm.....	62
4.4.5	Tekanan 8 atm.....	62
4.4.6	Tekanan 10 atm.....	63
4.4.7	Tekanan 12 atm.....	63
4.4.8	Tekanan 14 atm.....	64
4.4.9	Tekanan 16 atm.....	64
4.4.10	Tekanan 18 atm.....	65
4.5	HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 273 K.....	65
4.5.1	Tekanan 1 atm.....	65
4.5.2	Tekanan 2 atm.....	66
4.5.3	Tekanan 4 atm.....	66
4.5.4	Tekanan 6 atm.....	67
4.5.5	Tekanan 8 atm.....	67
4.5.6	Tekanan 10 atm.....	68
4.5.7	Tekanan 12 atm.....	68
4.5.8	Tekanan 14 atm.....	69
4.5.9	Tekanan 16 atm.....	69
4.5.10	Tekanan 18 atm.....	70
4.6	HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 293 k.....	70

4.6.1	Tekanan 1 atm.....	70
4.6.2	Tekanan 2 atm.....	71
4.6.3	Tekanan 4 atm.....	71
4.6.4	Tekanan 6 atm.....	72
4.6.5	Tekanan 8 atm.....	72
4.6.6	Tekanan 10 atm.....	73
4.6.7	Tekanan 12 atm.....	73
4.6.8	Tekanan 14 atm.....	74
4.6.9	Tekanan 16 atm.....	74
4.6.10	Tekanan 18 atm.....	75
4.7	GRAFIK HASIL SIMULASI.....	76
4.7.1	Temperatur 253 K.....	76
4.7.2	Temperatur 273 K.....	76
4.7.3	Temperatur 293 K.....	77
4.7.4	Perbandingan Ketiga Temperatur.....	77
4.8	ANALISIS HASIL.....	78
5	BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN.....	81
5.1	KESIMPULAN.....	81
5.2	SARAN.....	81
	DAFTAR REFERENSI.....	82
	LAMPIRAN.....	85
	Lampiran 1.....	85
	Lampiran 2.....	87

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi	9
Gambar 2.2 Grafik Data yang Diperoleh pada adsorpsi isothermal	10
Gambar 2.3 GrafikData Adsorpsi Isobar	11
Gambar 2.4 Grafik Data Adsorpsi Isostere	12
Gambar 2.5 Skema Metode Gravimetrik dengan <i>Two Beam Balance</i>	13
Gambar 2.6 Skema Metode gravimetrik dengan <i>Magnetic Suspension Balance</i> .	14
Gambar 2.7 Skema Metode Volumetrik	15
Gambar 2.8 Single Walled CNTs.....	21
Gambar 2.9 Multi-Walled CNTs.....	21
Gambar 2.10 Jenis CNTs berdasarkan sudut chiral	22
Gambar 2.11 Grafik Distribusi Maxwell-Boltzman.....	31
Gambar 2.12 Potensial Lennard-Jones.....	33
Gambar 3.1 Inisialisasi Kordinat Hidrogen dengan <i>software</i> avogadro	41
Gambar 3.2 Inisialisasi Kordinat CNTs dengan <i>software</i> VMD	42
Gambar 3.3 Penggabungan Koordinat CNTs dengan Hidrogen.....	42
Gambar 3.4 Hasil simulasi	48
Gambar 4.1 Kondisi akhir.....	60
Gambar 4.2 Kondisi awal.....	60
Gambar 4.3 Kondisi awal.....	61
Gambar 4.4 Kondisi akhir.....	61
Gambar 4.5 Kondisi akhir.....	61
Gambar 4.6 Kondisi awal.....	61
Gambar 4.7 Kondisi akhir.....	62
Gambar 4.8 Kondisi awal.....	62
Gambar 4.9 Kondisi awal.....	62
Gambar 4.10 Kondisi akhir.....	62
Gambar 4.11 Kondisi akhir.....	63
Gambar 4.12 Kondisi awal.....	63
Gambar 4.13 Kondisi awal.....	63
Gambar 4.14 Kondisi akhir.....	63
Gambar 4.15 Kondisi awal.....	64
Gambar 4.16 Kondisi akhir.....	64
Gambar 4.17 Kondisi awal.....	64
Gambar 4.18 Kondisi akhir.....	64
Gambar 4.19 Kondisi akhir.....	65
Gambar 4.20 Kondisi awal.....	65
Gambar 4.21 Kondisi akhir.....	65
Gambar 4.22 Kondisi awal.....	65
Gambar 4.23 Kondisi awal.....	66
Gambar 4.24 Kondisi akhir.....	66
Gambar 4.25 Kondisi awal.....	66

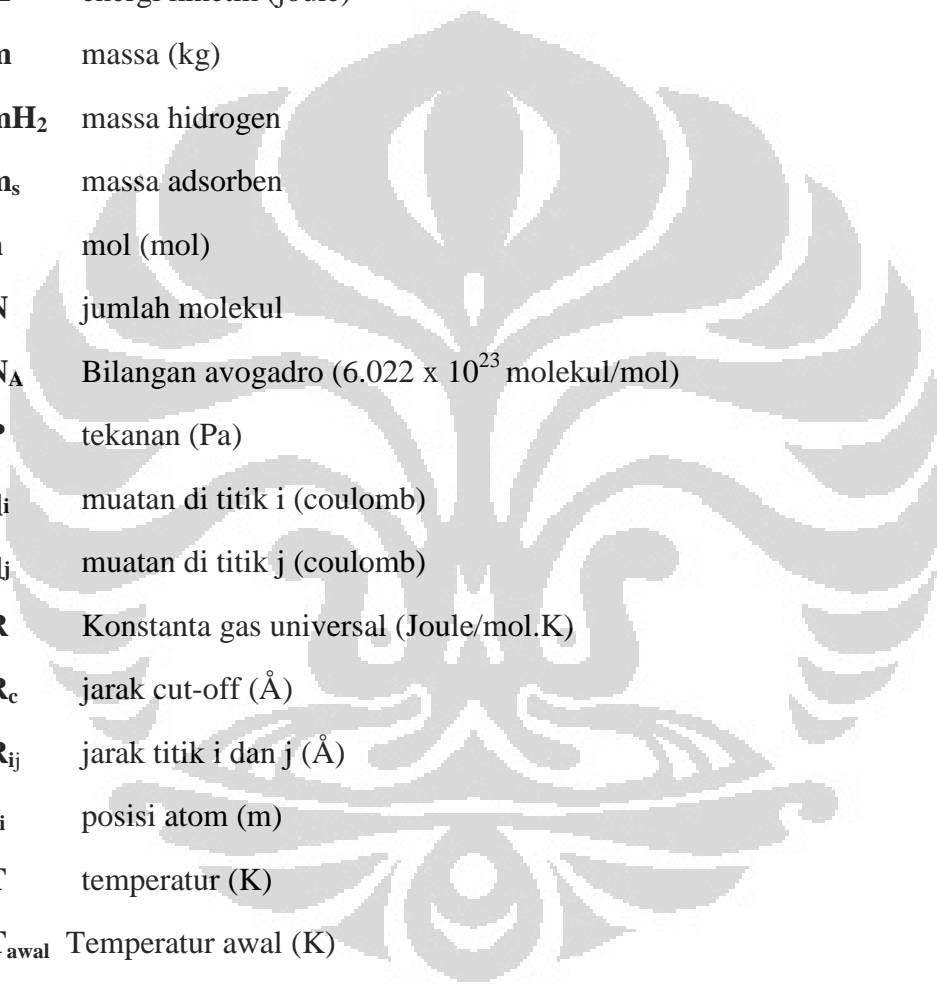
Gambar 4.26 Kondisi akhir.....	66
Gambar 4.27 Kondisi akhir.....	67
Gambar 4.28 Kondisi awal.....	67
Gambar 4.29 Kondisi akhir.....	67
Gambar 4.30 Kondisi awal.....	67
Gambar 4.31 Kondisi akhir.....	68
Gambar 4.32 Kondisi awal.....	68
Gambar 4.33 Kondisi awal.....	68
Gambar 4.34 Kondisi akhir.....	68
Gambar 4.35 Kondisi awal.....	69
Gambar 4.36 Kondisi akhir.....	69
Gambar 4.37 Kondisi akhir.....	69
Gambar 4.38 Kondisi awal.....	69
Gambar 4.39 Kondisi awal.....	70
Gambar 4.40 Kondisi akhir.....	70
Gambar 4.41 Kondisi akhir.....	70
Gambar 4.42 Kondisi awal.....	70
Gambar 4.43 Kondisi akhir.....	71
Gambar 4.44 Kondisi awal.....	71
Gambar 4.45 Kondisi akhir.....	71
Gambar 4.46 Kondisi awal.....	71
Gambar 4.47 Kondisi akhir.....	72
Gambar 4.48 Kondisi awal.....	72
Gambar 4.49 Kondisi akhir.....	72
Gambar 4.50 Kondisi awal.....	72
Gambar 4.51 Kondisi awal.....	73
Gambar 4.52 Kondisi akhir.....	73
Gambar 4.53 Kondisi akhir.....	73
Gambar 4.54 Kondisi awal.....	73
Gambar 4.55 Kondisi awal.....	74
Gambar 4.56 Kondisi akhir.....	74
Gambar 4.57 Kondisi akhir.....	74
Gambar 4.58 Kondisi awal.....	74
Gambar 4.59 Kondisi awal.....	75
Gambar 4.60 Kondisi akhir.....	75
Gambar 4.61 Grafik hasil simulasi pada temperatur 253 K.....	76
Gambar 4.62 Grafik hasil simulasi pada temperatur 273 K.....	76
Gambar 4.63 Grafik hasil simulasi pada Temperatur 293 K.....	77
Gambar 4.64 Grafik perbandingan hasil ketiga simulasi.....	77

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1 Tinjauan berbagai hasil eksperimen penyimpanan hidrogen.....	19
Tabel 3.1 Berbagai Parameter Simulasi	40
Tabel 4.1 Hasil Simulasi	78



DAFTAR NOTASI

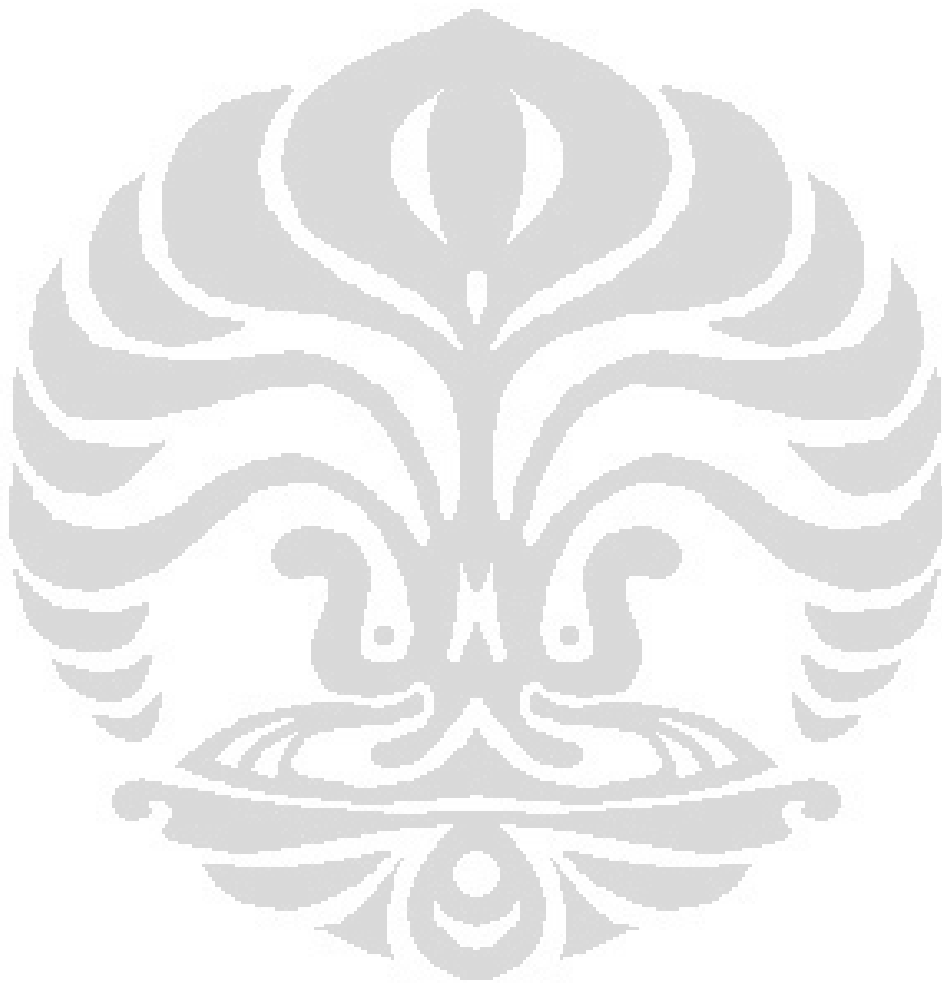


a	konstanta van der waals ($\text{Pa}\cdot\text{m}^6/\text{mol}^2$)
a	percepatan (m/s^2)
b	konstanta van der waals (m^3/mol)
ϵ	energi [kJ/mol]
F	gaya ($\text{kg}\cdot\text{m}/\text{s}^2$)
K	energi kinetik (joule)
m	massa (kg)
m_{H_2}	massa hidrogen
m_s	massa adsorben
n	mol (mol)
N	jumlah molekul
N_A	Bilangan avogadro (6.022×10^{23} molekul/mol)
P	tekanan (Pa)
q_i	muatan di titik i (coulomb)
q_j	muatan di titik j (coulomb)
R	Konstanta gas universal (Joule/mol.K)
R_c	jarak cut-off (\AA)
R_{ij}	jarak titik i dan j (\AA)
r_i	posisi atom (m)
T	temperatur (K)
T_{awal}	Temperatur awal (K)
T_{akhir}	Temperatur akhir (K)
U	Potensial Lennard-jones (kJ/mol)
V	Volume (m^3)
v	kecepatan partikel (m/s)
σ	jarak antar atom (\AA)

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1

Lampiran 2



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

Perumusan masalah dalam skripsi ini ialah untuk mengidentifikasi pengaruh temperatur dalam proses adsorpsi hidrogen oleh *carbon nanotubes*(CNT).

Universitas Indonesia

Dimana dalam simulasi dilakukan dengan tiga variasi temperatur yang berbeda. Kemudian dari hasil ketiga simulasi tersebut dikomparasikan hasilnya sehingga diketahui temperatur mana yang cocok digunakan dalam proses adsorpsi. Selain itu, hasil yang didapat juga akan dikomparasikan dengan hasil simulasi yang didapatkan oleh Soumik Banerjee.

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. Mengidentifikasi kondisi optimum untuk penyimpanan hidrogen dalam CNT dengan variasi temperatur pada sistem.
4. Mengetahui seberapa besar pengaruh variasi temperatur terhadap jumlah hidrogen yang teradsorpsi.

1.4 BATASAN MASALAH

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

1. Menghitung jumlah hidrogen yang diadsorpsi oleh CNT dengan variasi temperatur yang berbeda.
2. Ruang simulasi memiliki volume $4,35^{-25} m^3$, temperatur sistem dipilih 253 K, 273 K dan 293 K dengan tekanan bervariasi dari 1 atm hingga 18 atm, jumlah molekul hydrogen bergantung pada tekanan dan temperatur yang digunakan pada saat simulasi, panjang *Carbon Nanotube* (CNT) 2nm, dengan chiral CNT yang digunakan(10,10)
3. Pada proses simulasi temperatur sistem dijaga untuk selalu konstan. (T_{awal} sama dengan T_{akhir})
4. Pada simulasi, untuk potensial dan gaya antar molekul digunakan model potensial Lennard-Jones berdasarkan interaksi Coulomb.
5. Membandingkan jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dengan T yang berbeda-beda.

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 Perancangan Simulasi Dinamika Molekul

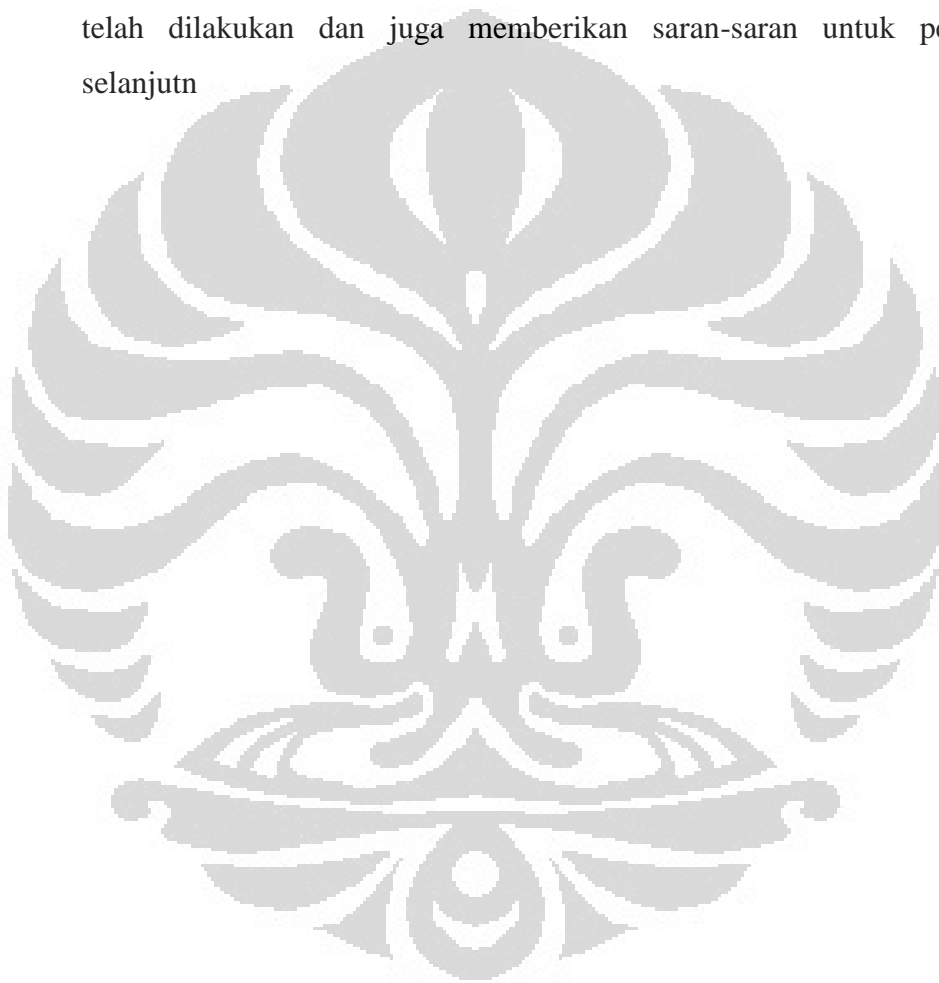
Bab ini membahas metodologi yang digunakan dalam melakukan penelitian.

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 selanjutn



BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 ADSORPSI HIDROGEN

Adsorpsi merupakan proses dimana komponen-komponen tertentu dari suatu fasa fluida berpindah ke permukaan zat padat yang digunakan sebagai material berpori (adsorben). Secara umum partikel-partikel kecil zat penyerap ditempatkan di dalam suatu hampan tetap (fixed bed), dan fluida lalu dialirkan melalui hampan tersebut sampai adsorben itu mendekati jenuh dan penyerapan yang diinginkan tidak dapat lagi berlangsung.

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. (Prasodjo, 2010)

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 fisis adalah adsorpsi yang terjadi karena adanya gaya Van Der Waals (gaya tarik-menarik yang relatif lemah) antara adsorbat dengan permukaan adsorben. Adsorpsi ini terjadi apabila suatu adsorbat dialirkan pada permukaan adsorben yang bersih.

Pada adsorpsi fisis, adsorbat tidak terikat kuat pada permukaan adsorben sehingga adsorbat dapat bergerak dari suatu bagian permukaan ke bagian permukaan lainnya, dan pada permukaan yang ditinggalkan oleh adsorbat yang satu dapat digantikan oleh adsorbat lainnya.

Adsorpsi fisis adalah suatu peristiwa yang reversibel, sehingga jika kondisi operasinya diubah akan membentuk kesetimbangan baru. Peristiwa adsorpsi gas terjadi sangat cepat. Proses adsorpsi disertai dengan pengeluaran panas sesuai dengan prinsip Le Chatelier. Panas yang terjadi atau dikeluarkan pada peristiwa adsorpsi disebut panas adsorpsi. Panas adsorpsi fisis umumnya rendah (5 – 10 kkal/grmol gas) dan terjadi pada temperatur rendah yaitu di bawah temperatur didih adsorbat. Hal ini yang menyebabkan kesetimbangan dari proses adsorpsi fisis reversibel dan berlangsung sangat cepat.

Proses adsorpsi fisis terjadi tanpa memerlukan energi aktivasi, sehingga pada proses tersebut akan membentuk lapisan multilayer pada permukaan adsorben. Ikatan yang terbentuk dalam adsorpsi fisika dapat diputuskan dengan mudah, yaitu dengan cara pemanasan pada temperatur 150 – 200 °C selama 2 – 3 jam. (Prasodjo, 2010)

2.1.1.2 Adsorpsi Kimia

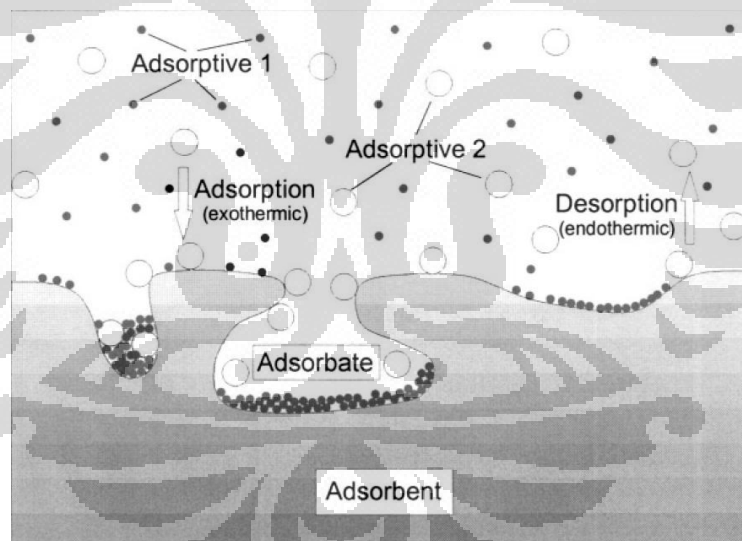
Adsorpsi kimia terjadi karena adanya reaksi antara molekul-molekul adsorbat dengan adsorben dimana terbentuk ikatan kovalen dengan ion. Gaya ikat adsorpsi ini bervariasi tergantung pada zat yang bereaksi. Adsorpsi jenis ini bersifat tidak *reversible* dan hanya dapat membentuk lapisan tunggal (*monolayer*). 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

Universitas Indonesia

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 2.6 memberikan gambaran yang lebih jelas mengenai definisi adsorpsi, desorpsi, adsorben, adsorbat, dan adsorptif. Pada Gambar 2.6 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.



Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005)

2.1.2 Kestimbangan Adsorpsi

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

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

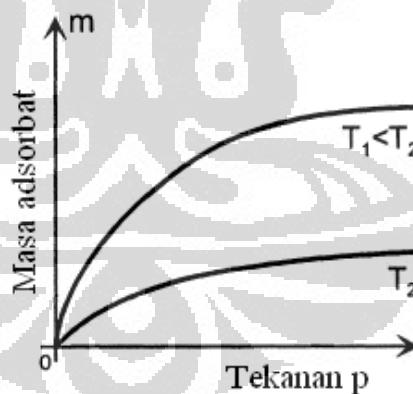
Dimana, x/m adalah jumlah adsorbat yang terserap per unit massa adsorben pada tekanan equilibrium dan pada temperatur adsorpsi.

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, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, 2005):

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



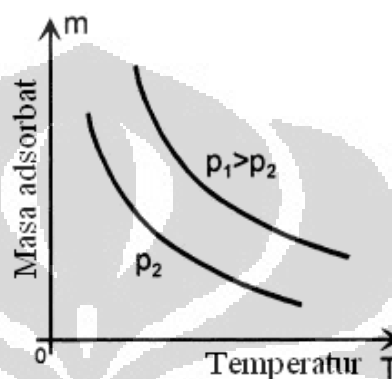
Gambar 2.2 Grafik Data yang Diperoleh pada adsorpsi isotermal

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005)

2.1.2.2 Adsorpsi Isobar

Pada adsorpsi isobar, tekanan adsorpsi dijaga konstan dan temperatur adsorpsi divariasikan dengan demikian x/m adalah (Bansal, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, 2005):

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



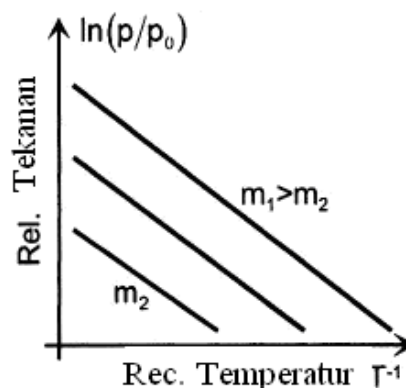
Gambar 2.3 Grafik Data Adsorpsi Isobar

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 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, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, 2005).

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



Gambar 2.4 Grafik Data Adsorpsi Isostere

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 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, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, 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, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, 2005).

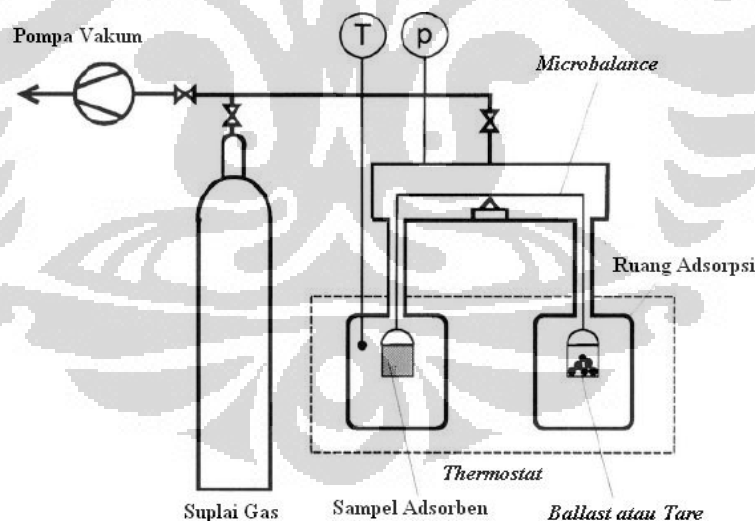
2.1.3 Metode Pengujian Adsorpsi

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, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005). 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).

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, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005). Alat uji adsorpsi menggunakan metode gravimetrik membutuhkan investasi yang cukup besar, karena untuk memiliki TGA dengan keakurasian tinggi harus menyediakan jutaan dollar (Rouquerol, J., Francois R., & Kenneth Sing, 1998). Skematik *Thermograph Microbalance Aparatus* sebagai berikut:

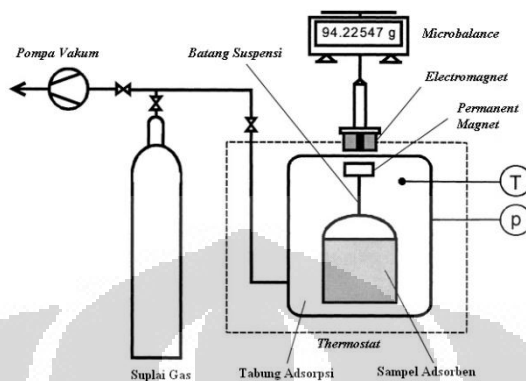


Gambar 2.5 Skema Metode Gravimetrik dengan *Two Beam Balance*

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005)

Pada Gambar 2.1.4 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 *Magnetic Suspension Balance*

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005)

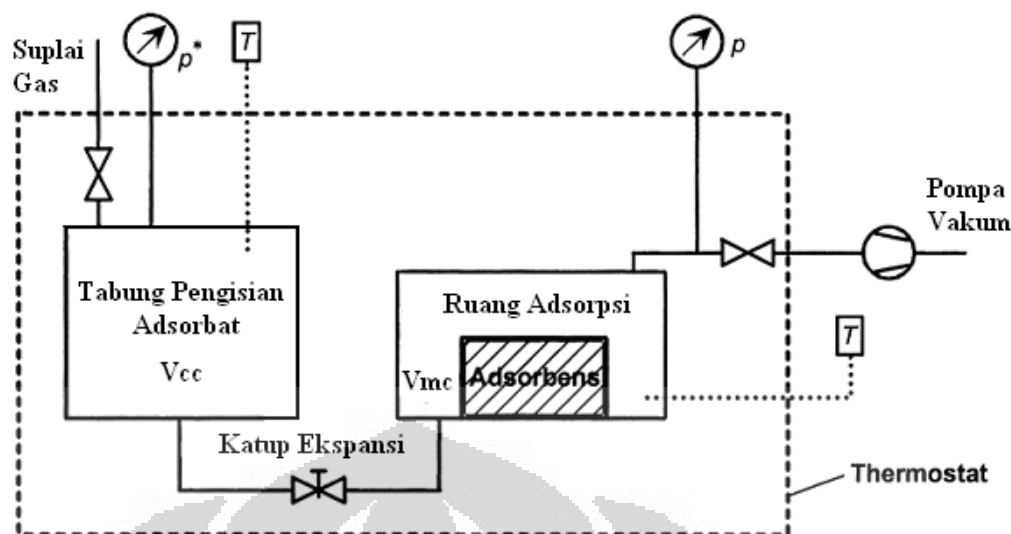
Pada Gambar 2.1.5 terlihat skema metode gravimetrik dengan menggunakan *Magnetic Suspension Balance*, dimana sampel adsorben diletakkan di dalam tabung dan selanjutnya ketika massa adsorben bertambah karena akibat terserapnya adsorbat, maka medan magnet juga akan berubah disebabkan karena adanya perubahan 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., Francois R., & Kenneth Sing, 1998). Skematik metode volumetrik terlihat pada Gambar 2.1.6.

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.

Universitas Indonesia



Gambar 2.7 Skema Metode Volumetrik

(Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 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 temperaturnya 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 U., Reiner Staudt, 2005).

Hal yang terpenting dalam pengukuran adsorpsi isothermal menggunakan metode volumetrik adalah, sebagai berikut (Keller, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005):

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, Jurgen U., Reiner Staudt, 2005)

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 hydrogen 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 (Sun Yan, 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 (Sun Yan, 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 hydrogen dari ikatan kimia dengan logamnya.

Teknik hidrogen bertekanan merupakan teknik menekan gas hydrogen 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 M., 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.

Porier dan kawan-kawan melaporkan kapasitas penyimpanan hydrogen dengan metode adsorpsi dalam karbon aktif lebih besar daripada dalam metode gas bertekanan. Pada kondisi yang sama, yaitu temperatur 77°C dan tekanan 50 bar, hidrogen dapat disimpan dalam metode adsorpsi sebesar 35 Kg/m^3 sedangkan dalam metode gas bertekanan sebesar 17 Kg/m^3 . 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 (Porrier, 2004).

2.2.2 Tinjauan Hasil Eksperimen Penyimpanan Hidrogen

Tabel berikut adalah berbagai hasil eksperimen yang telah dilakukan untuk mengetahui besarnya hidrogen yang mampu terserap oleh *carbon nanotube*. Namun, dari hasil yang telah didapat melalui eksperimen, tidak satu pun hasil yang telah diperkuat dengan dengan hasil yang didapat dengan menggunakan metode dinamika molekuler atau pun dengan metode monte carlo.

Tabel 2.1 Tinjauan berbagai hasil eksperimen penyimpanan hidrogen

No	Referensi	Material	Temperatur	Tekanan	Penyimpanan Maksimum (% berat)
			(K)	Mpa	
1	Callejas et al.,2004	Reduced CNT	77	0.04	3
2	Chen et al., 1999	Li-CNT	473-673	0.1	20
3	Chen et al., 1999	Li-CNT	<313	0.1	14
4	Chen et al., 2004	CNT	298	0.1	1
5	Darkrim et al., 2000	SWNT	80	10	11
6	Dillon et al., 1997	SWNT(low purity)	273	0.04	05-Okt
7	Dillon et al., 1997	SWNT(high purity)	298	0.04	3.5—4.5
8	Guay et al., 2004	CNT	293	10	<1
9	Haluska et al.,	SWNT	77	0.1	<0.46
10	Liu et al., 1999	SWNT(50% purity)	300	10.1	4.2
11	Lueking, 2004	CNT	300	0.1	0.1
12	Nishimiya et al., 2002	SWNT	295	0.1	0.86
			77	0.1	2.12
13	Panella et al.,2005	CNT	300	~6	~0.5
			77	~6	~2.5
14	Pinkerton et al., 2000	Li-CNT	473-663	0.1	0.72-4.2
15	Shen et al., 2004	CNT	300	<1.5	1
16	Tibbets et al., 2001	MWNT	296	3.59	0.04
17	Wang et al., 1999	SWNT	80	10	2
18	Yang et al., 2000	Li-MWNT	~473-673	0.1	~2.5
19	Ye et al., 1999	SWNT(high purity)	80	7.18	8.25
20	Yin et al., 2000	SWNT	300	16	6.5
21	Yoo et al., 2005	CNT	573	0.1	1.5
22	Zacharia et al., 2005	CNT(Pd Doped)	300	16	6.5
23	Zhu et al., 2001	MWNT	~290	~10	>3
			~293	~0.1	<2

(Banerjee, 2008)

2.3 CARBON NANOTUBE

Carbon Nanotubes (CNTs) merupakan struktur graphit (hibridisasi - sp^2) 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).

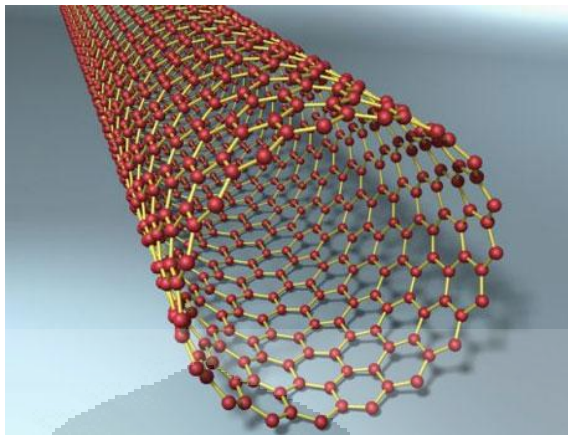
Pada tahun 1991, Sumio Iijima pada akhirnya menemukan hubungan antara fullerene dengan model carbon nanotube hingga akhirnya ia menemukan carbon nanotube pada saat ia bekerja di perusahaan NEC di Jepang dan berhasil mengemukakan penelitiannya dengan lengkap mengenai struktur dan sifat-sifat karbon nanotube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

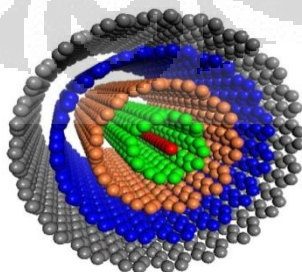
2.3.1.1 Single-walled carbon nanotubes (SWCNT)



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.

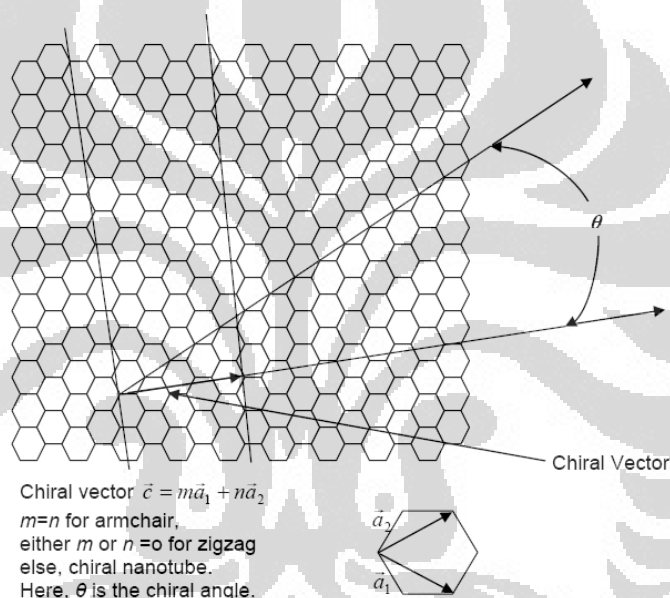
2.3.1.2 Multi-walled carbon nanotubes (MWCNT)



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

(Banerjee, 2008)

Gambar 3 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 Carbon Nanotube

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 merusak 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. (Yuliarto, 2005)

2.4 DINAMIKA MOLEKUL

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, A. Yunus, Michael A. Boles, 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,

Universitas Indonesia

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 Ensemble

Suatu ensemble adalah koleksi dari keadaan sistem yang mungkin yang memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis sama (Stote, R., et al., 2011). 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.

2.4.1.1 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.

2.4.1.2 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) .

2.4.1.3 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) .

2.4.2 Metode Dinamika Molekuler dan Metode Monte Carlo

Selain metode simulasi dinamika molekuler, terdapat metode lain yang sering digunakan yakni metode monte carlo. Kedua metode ini memiliki kelebihan dan kekurangan tergantung sistem dan properti yang digunakan dalam simulasi.

Dinamika molekuler merupakan sebuah metode deterministik yang menyelesaikan persamaan gerak dari setiap molekul dan memperhatikan evolusi waktu dari sistem, metode monte carlo klasik adalah metode yang stokastik dan sample molekul/atom mengalami gerak secara acak. Metode monte carlo juga tidak terbatas oleh waktu.

Dalam komputasi, kedua metode ini juga memiliki kelebihan dan kekurangan. Dalam metode dinamika molekuler, posisi setiap atom/molekul ditentukan berdasarkan persamaan gerak, sementara dalam metode monte carlo gerak atom/molekul stokastik(probabilistik) sehingga mengurangi waktu komputasi.

Metode monte carlo lebih cocok digunakan untuk simulasi fluida dengan densitas rendah, sedangkan metode dinamika molekuler cocok digunakan pada fluida dengan densitas tinggi seperti gas pada tekanan tinggi. Metode dinamika molekuler dapat diketahui properti dinamik (seperti difusi/viskositas dll.), sedangkan metode monte carlo tidak bisa. Grand kanonikal monte carlo dapat melakukan simulasi dengan jumlah partikel yang bervariasi sedang dinamika molekuler hanya dapat diimplementasikan pada jumlah partikel yang konstan.

Selain perbedaan di atas, kedua metode ini juga memiliki kesamaan. Persamaan kedua metode ini adalah dalam penggunaan fungsi potensial. Keakuratan metode dinamika molekuler dan monte carlo sangat bergantung pada keakuratan fungsi potensial yang digunakan. Oleh karena itu, pemilihan fungsi potensial harus sangat diperhatikan. (Banerjee, 2008)

2.5 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

$$a = \frac{\vec{F}}{m}$$

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.

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_i p_i \right) = \frac{d}{dt} \left(\sum_i m_i v_i \right) = 0$$

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

2.5.1 Mekanika Statistik

Mekanika statistik atau termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonversikan informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala makroskopik (Ercolessi, 2010). 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

2.5.1.1 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.

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

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

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.

2.5.1.2 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

$$K = \frac{3}{2} N k_b T$$

Atau

$$T = \frac{2 K}{3 N k_b}$$

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

2.5.1.3 Tekanan

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

$$P_x = \frac{F_x}{A}$$

Dengan menggunakan hukum Newton kedua,

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

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 .

$$\langle P_m \rangle = \frac{2N}{3V} \langle K \rangle$$

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

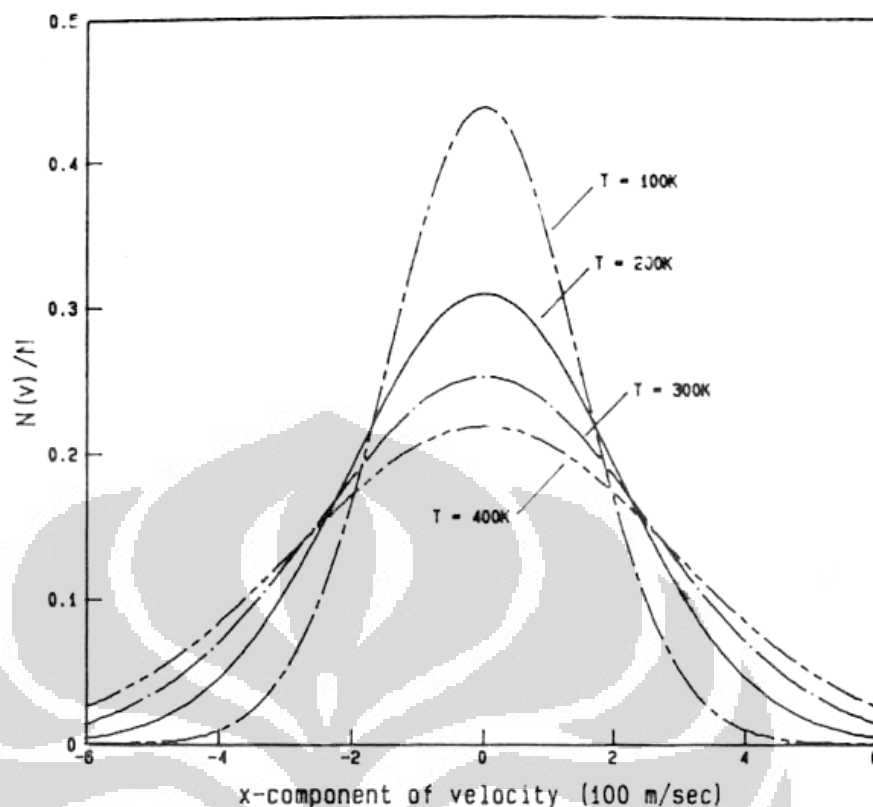
$$\langle P_f \rangle = \frac{1}{3V} \left\langle \sum_i \sum_j F_{ij} \overline{R_{ij}} \right\rangle$$

2.5.1.4 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, K., 1987). Distribusi Maxwell-Boltzmann bergantung dari temperatur, dirumuskan:

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



Gambar 2.11 Grafik Distribusi Maxwell-Boltzman

(Witoelar, 2002)

2.5.2 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.

Universitas Indonesia

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.

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

2.5.2.1 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:

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

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

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

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:

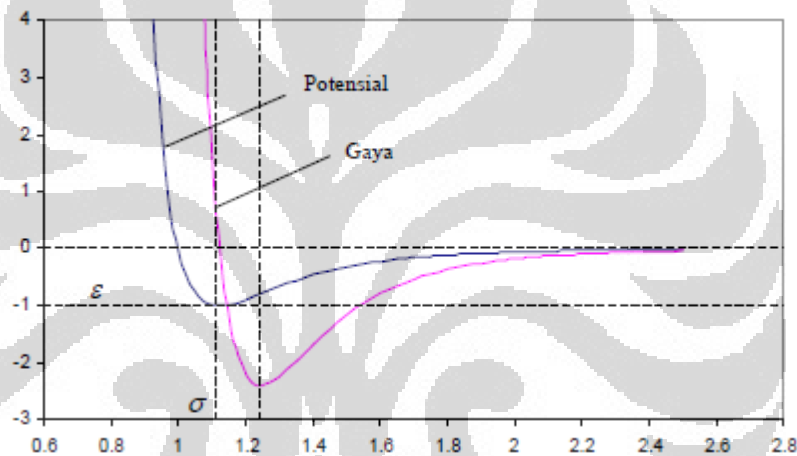
$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right]$$

2.5.2.2 Gaya Antar Molekul

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

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

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

(Witoelar, 2002)

Dapat diturunkan untuk masing-masing sumbu:

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

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

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

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

2.5.3 Gaya Van der waals

Dalam keadaan gas, pada suhu tinggi dan tekanan yang relatif rendah, molekul-molekul benar-benar berdiri sendiri, tidak ada gaya antarmolekul. Akan tetapi, pada suhu yang relatif rendah dan tekanan yang relatif tinggi, terdapat dua gaya tarik-menarik antarmolekul. Gaya ini juga yang mengikat molekul-molekul dalam zat cair atau zat padat. Karena itu, untuk mencairkan zat padat atau menguapkan zat cair diperlukan energi untuk mengatasi gaya antarmolekul tersebut. makin besar gaya antarmolekul, makin besar energi yang diperlukan.

2.5.3.1 Gaya London

Elektron senantiasa bergerak dalam orbital. Perpindahan elektron menyebabkan suatu molekul yang secara normal bersifat nonpolar menjadi polar sehingga terbentuk suatu dipol sesaat. Dipol yang terbentuk dengan cara tersebut disebut dipol sesaat karena dipol tersebut dapat berpindah milyaran kali ndalam satu detik. Pada saat berikutnya dipol itu hilang bahkan sudah berbalik arahnya.

Dipol sesaat pada suatu molekul dapat mengimbas molekul disekitarnya sehingga membentuk suatu dipol terimbas. Hasilnya adalah suatu gaya tarik-menarik antar molekul yang lemah. Penjelasan ini dikemukakan oleh Fritz London sehingga gaya ini disebut juga gaya London.

Gaya london adalah gaya yang relatif lemah. Zat yang molekulnya bertarikan hanya berdasarkan gaya London mempunyai titik leleh dan titik didih yang rendah dibandingkan dengan zat lain yang massa molekul relatifnya kira-kira sama,,jika molekulnya kecil, zat-zat itu berbentuk gas pada suhu kamar. Contohnya dalah hidrogen (H_2), nitrogen (N_2), metana (CH_4), dll.

2.5.3.2 Gaya Tarik Dipol-Dipol

Molekul yang sebaran muatannya tidak simetris bersifat polar dan mempunyai dua ujung yang berbeda muatan(dipol). Dalam zat polar, molekul-molekulnya cenderung menyusun diri dengan ujung(pol) positif

dengan ujung(pol) negatif dari molekul didekatnya. Gaya tarik dipol-dipol lebih kuat dari gaya London, sehingga zat polar cenderung mempunyai titik didih lebih tinggi dibandingkan zat polar yang massa molekulnya kira-kira sama.

Gaya-gaya antar molekul, yaitu gaya London dan gaya dipol-dipol, secara kolektif disebut gaya *van der Waals*. Gaya London terdapat pada setiap zat, baik polar maupun nonpolar. Gaya dipol-dipol yang terdapat pada zat polar menambah gaya dispersi pada zat tersebut.

2.5.4 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.

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

2.5.5 Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit

Dinamika molekuler 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, 1987)

2.5.5.1 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:

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

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

Penjumlahan persamaan diatas akan menghasilkan:

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

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

Atau

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

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

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:

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

Yang dapat dituliskan

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

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.

2.5.5.2 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 $-\frac{1}{2}\Delta t$:

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

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

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

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

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

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

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

Atau

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

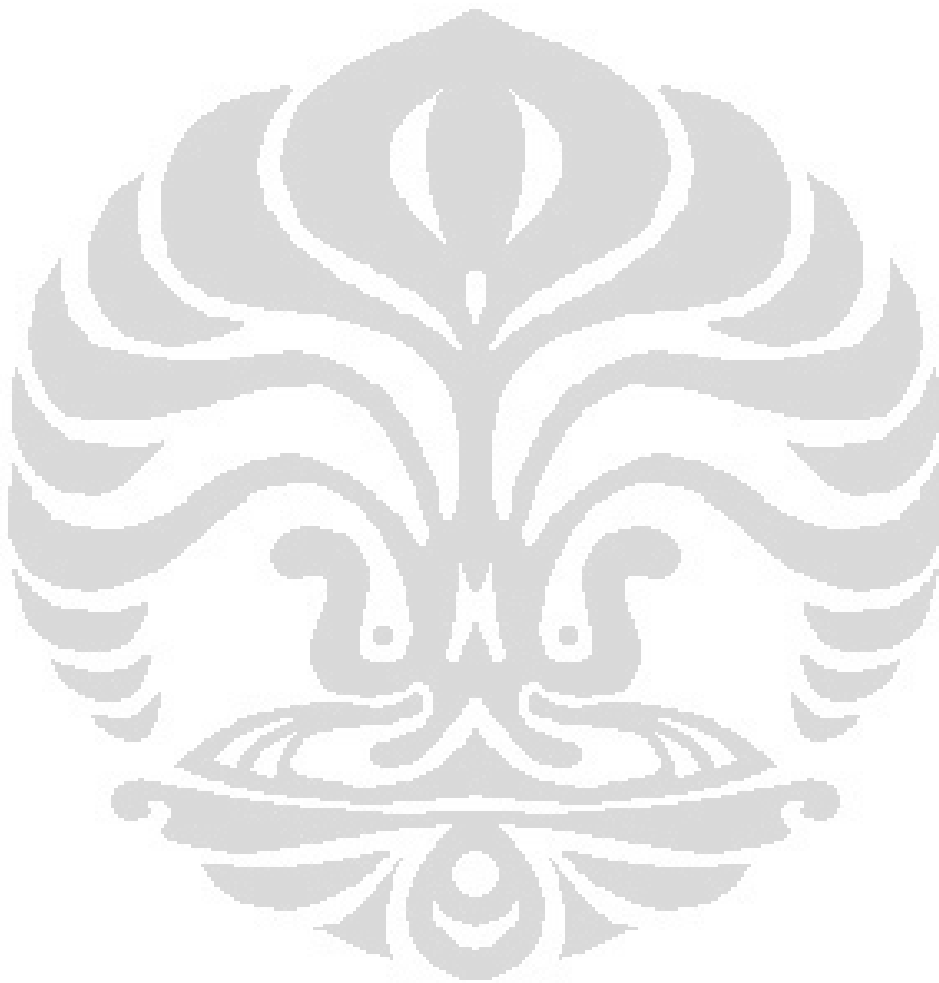
Dengan cara yang sama diperoleh persamaan untuk kecepatan:

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

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

Atau

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



BAB 3

METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian yang dilakukan kali ini menggunakan software LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) (Plimpton, 1995) yang dikeluarkan oleh *Sandia National Laboratories* Departemen Energi Amerika.

Nanotube yang disimulasikan berbentuk armchair dengan nilai chirality (10,10) dan panjang 2 nm. Temperatur sistem dibuat konstan sebesar 253 K, 273 K, dan 293 K dengan variasi tekanan antara 1 atmosfer hingga 18 atmosfer. Hidrogen diberi muatan positif dan negatif, sedangkan carbon pada nanotube diberikan muatan netral. Jumlah atom hidrogen yang disimulasikan bergantung besarnya temperatur dan tekanan.

Jarak cut-off yang digunakan untuk Potensial lennard-jones dan gaya Coulomb sebesar 9 Å. Potensial yang digunakan untuk menggambarkan interaksi yang terjadi antar atom dan antar molekul digunakan persamaan potensial Lennard-Jones dengan interaksi Coulomb.

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

Parameter σ_{ij} dan ε_{ij} , didapat dari literatur (Turner et al., 2002, Egorov et al., 2000, Mitchell et al., 2004) yang dipaparkan pada tabel 3.1 di bawah. Untuk parameter interaksi antara H₂-C digunakan aturan Lorentz- Berthelot :

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_{ii} + \sigma_{jj}}{2}$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_{ii}\varepsilon_{jj}}$$

Tabel 3.1 Berbagai Parameter Simulasi

Molekul	Situs Interaksi	σ (Å)	ϵ [kJ/mol]
Hidrogen	H	2.915	0.3158
Ion	Li	2.27	0.016
	Ti	1.13	1608
	Pd	2.45	33.08
Carbon nanotube	C	3.4	0.2327

(Turner, C.H., Brennan, J.K., Pikunic, J. & Gubbins, K.E., 2002)& (Banerjee, 2008)

Dalam merancang simulasi Penyerapan Hidrogen pada CNTs melalui beberapa tahap yaitu inisialisasi koordinat, menjalankan simulasi, dan visualisasi. Simulasi ini menggunakan beberapa piranti lunak yang mendukung pembuatan simulasi dinamika molekul, beberapa di antaranya yaitu piranti Avogadro, LAMMPS, dan VMD (Visualisasi Molekular Dynamics).

3.1 INISIALISASI KOORDINAT

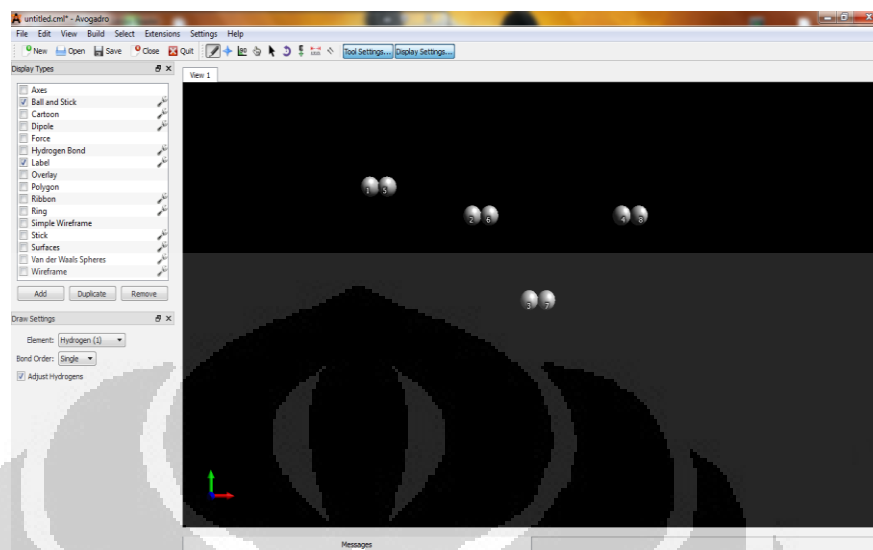
Sebelum melakukan simulasi, maka harus diketahui berapa banyak jumlah dan jenis atom dan molekul pada simulasi yang akan dilakukan, bentuk CNTs yang digunakan, dan posisi koordinat atom – atom pada saat awal sebelum melakukan simulasi atau saat $t = 0$. Dalam menginisialisasi koordinat, digunakan dua piranti lunak yang mendukung yaitu Avogadro dan VMD.

3.1.1 Avogadro

Piranti ini untuk membuat inisialisasi atom dan molekul hidrogen. Piranti ini membantu meletakkan posisi atom hidrogen pada posisi awal secara bebas. Setelah didapatkan koordinat hidrogen, maka didapat output file dari Avogadro yang berisi koordinat atom – atom hidrogen dalam

Universitas Indonesia

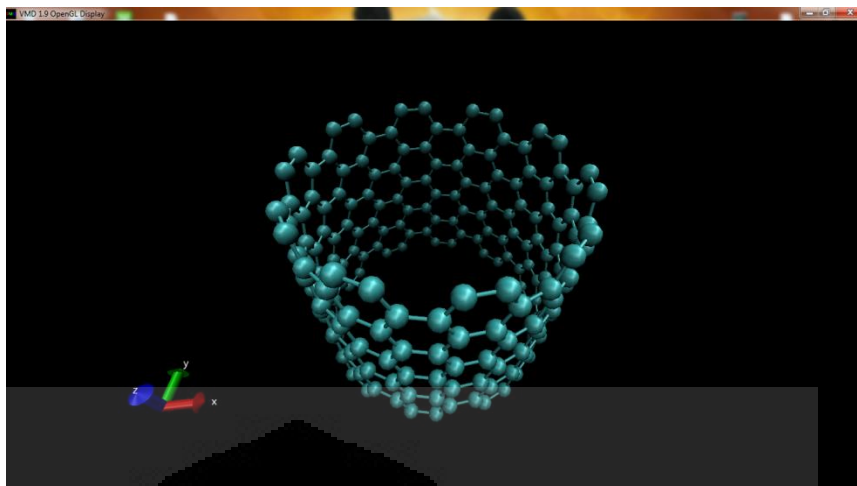
sumbu x, y, z. koordinat ini pun dapat diubah – ubah sesuai dengan kebutuhan simulasi saat digabungkan dengan koordinat CNTs.



Gambar 3.1 Inisialisasi Kordinat Hidrogen dengan *software avogadro*

3.1.2 VMD

Software ini tidak hanya digunakan untuk memvisualisasikan hasil simulasi (Humphrey, W., Dalke, A., Schulten, K., 1996) Namun, di dalamnya terdapat perangkat tambahan untuk membangun inisial koordinat dari Carbon Nanotube. Atom - atom hidrogen tidak dapat dibuat di dalam VMD, karena sepengetahuan penulis, VMD hanya dapat membuat sebuah kerangka atau rangkaian dalam satu jenis atom. Piranti ini tidak dapat membuat secara bersamaan suatu simulasi yang berisi berbagai atom. Namun, VMD dapat menggabungkan output geometri dari piranti Avogadro. Maka kami membuat inisialisasi hidrogen pada piranti Avogadro dan CNTs pada piranti VMD, setelah didapat output dari Avogadro maka dapat dimasukkan output file koordinat hidrogen ke dalam VMD.



Gambar 3.2 Inisialisasi Kordinat CNTs dengan *software* VMD

Sehingga hidrogen dan CNTs dapat bersatu, dengan begitu penulis dapat menyesuaikan apakah posisi hidrogen sudah tepat di dekat CNTs atau berada jauh dari area CNTs..



Gambar 3.3 Penggabungan Koordinat CNTs dengan Hidrogen

3.2 SIMULASI DENGAN MENGGUNAKAN LAMMPS

Dalam menjalankan simulasi dinamika molekul penyerapan hidrogen pada CNTs, penulis menggunakan piranti lunak bernama LAMMPS. Sehingga dalam membuat input file dan read data didasarkan pada pengaturan penggunaan piranti LAMMPS. LAMMPS merupakan piranti lunak computer yang digunakan untuk simulasi dinamika molekul. Piranti lunak ini dikembangkan di *Sandia National Laboratories* yang merupakan kewenangan dari Departemen Energi Amerika Serikat (US Department of Energy/ DOE) dan didanai pula oleh DOE.

Input skrip 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 skrip 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.

```
# 3-d LJ hidrogen storage
dimension 3
boundary p p p
atom_style full
neighbor 0.5 bin
neigh_modify delay 5
```

bagian ini merupakan bagian untuk menginisialisasi simulasi. “Dimension 3” menjelaskan bahwa simulasi dilakukan pada ruang 3 dimensi. Simulasi pada 2 dimensi juga dimungkinkan. “boundary p p p” menyatakan periodik, dimana atom dapat bergerak secara periodik pada arah x, y, dan z. “atom style full” menyatakan

bahwa atribut yang digunakan molekuler dan memiliki muatan. Semua satuan yang digunakan dalam simulasi ini menggunakan satuan lj, yaitu satuan yang besarnya telah direduksi.

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 skrip, karena banyaknya informasi yang diberikan dalam atom definition maka pemberian informasinya berupa lampiran file terpisah. Pada input skrip, perintah yang diberikan yaitu `read_data`, perintah ini akan memanggil nama lampiran yang berisikan atom definition yang sudah dibuat, berupa `.dat` file.

```
read_data temp253_1atm.dat
```

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. Sedangkan contoh dari isi lampiran atom definition sebagai berikut :

```
# Lammmps input file for carbon nanotube
2088 atoms
22 bonds
0 angles
0 dihedrals
0 impropers
3 atom types
1 bond types
0.0 89.083 xlo xhi
0.0 23.585 ylo yhi
0.0 23.585 zlo zhi
Masses
1 1.0
2 12.0
3 12.0
Atoms
```

```

1 1 1 1.0 9.969015121 9.969015121 9.969015121
2 1 1 -1.0 10.223014832 9.969015121 9.969015121
.....
43 22 1 1.0 79.752120972 19.938030243 19.938030243
44 22 1 -1.0 80.006118774 19.938030243 19.938030243
45 23 2 0.0 20.960548401 11.546074867 9.446883202
46 23 2 0.0 20.960548401 11.063755989 9.549403191
.....
2043 23 2 0.0 68.124099731 13.179007530 9.884426117
2044 23 2 0.0 68.124099731 12.283014297 9.485504150
.....
2087 66 3 0.0 42.500000000 12.500000000 20.000000000
2088 67 3 0.0 45.000000000 10.000000000 20.000000000
Bonds
1 1 1 2
2 1 3 4
.....

```

3. 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`.

Various simulation parameters are set by these perintahs: 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`. Berikut adalah contoh setting digunakan dalam input skrip LAMMPS :

```

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

```

“bond style harmonic” berarti didalam suatu molekul terjadi gerak harmonik atau dengan kata lain, ikatan antar molekul yang terjadi adalah ikatan harmonik yang mengikuti persamaan potensial :

$E = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2$. “bond coeff 1 1201.1 0.254” adalah bond coefficient untuk jenis ikatan harmonik. Dimana konstanta pertama menyatakan jenis ikatan, konstanta kedua adalah nilai k, dan konstanta ketiga adalah nilai r_0 .

```
# LJ potentials
pair_style      lj/cut/coul/cut 3.0
pair_coeff      1 1 1.0 1.0
pair_coeff      2 2 1.737 1.166
pair_coeff      1 2 1.858 1.083
```

pair style merupakan interaksi pairwise yang terjadi. Dalam simulasi kali ini, pair potensial yang digunakan adalah potensial lennard-jones dengan interaksi coulomb. Sehingga, pair coefficient akan mengikuti pair style yang digunakan. Pada pair_coeff perintah, konstanta pertama dan kedua menyatakan atom mana yang saling berinteraksi. Koefisien kedua menunjukkan besarnya nilai ϵ , dan koefisien ketiga menyatakan nilai σ . Untuk interaksi atom yang berlainan akan digunakan aturan pencampuran Berthelot.

```
# Define groups
group cnt type 2
group hyd type 1
```

perintah di atas dipakai untuk mendefinisikan grup dari atom yang digunakan.

```
# 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
```

“velocity hyd create 0.26316 482748 temp mobile” merupakan perintah untuk mengatur atau mengubah kecepatan kedalam suatu besaran tertentu.

“fix temp/rescale”, merupakan perintah untuk mengontrol temperatur dengan menggunakan *velocity rescaling*. Koefisien pertama menyatakan setiap berapa time step, velocity akan di rescale? Koefisien kedua dan

ketiga menyatakan berapa temperatur awal dan temperatur akhir yang diinginkan dari simulasi. Dalam menggunakan fix temp/rescale, kita harus menggunakan fix nve, hal ini dikarenakan fix temp/rescale hanya mengupdate velocity tapi tidak mengupdate posisi. Sehingga dengan penambahan fix nve, posisi juga senantiasa terupdate.

```
# Static nanotube and metal
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
```

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

```
# Run
timestep      0.0003
thermo        10000
thermo_style  custom step atoms temp pe ke evdwl
thermo_modify temp mobile
dump          1 all atom 1000 dump.temp293_18atm
run           130000
```

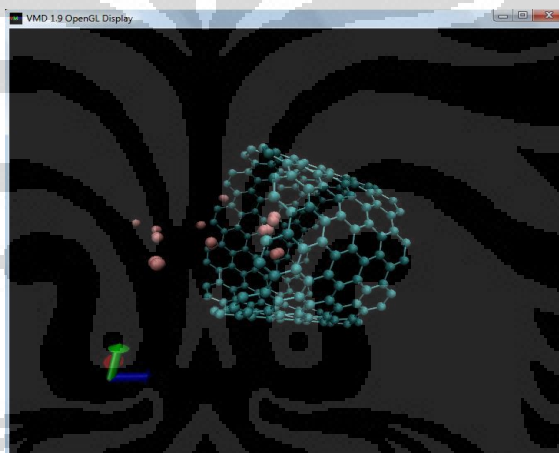
timestep menyatakan peningkatan waktu yang digunakan untuk mengupdate posisi dan kecepatan. “thermo 10000” menyatakan pengambilan nilai termodinamik dalam simulasi setiap 10000 run. “thermo style” menyatakan sifat termodinamika apa yang ingin dilihat. “dump” adalah perintah untuk output yang akan dilakukan visualisasi. “run 130000” merupakan lamanya simulasi dilakukan yang merupakan kelipatan dari timestep.

Ketika input skrip dan lampiran atom definition sudah siap, maka siap dijalankan simulasi dengan menggunakan LAMMPS. Simulasi dijalankan dengan cara membuka piranti cygwin kemudian ketik perintah LAMMPS dengan mnyebutkan nama input skrip yang sudah dibuat. Contoh :

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

3.3 VISUALISASI

Setelah simulasi selesai dijalankan, maka didapat dump file yang dapat digunakan untuk melihat visualisasi dari simulasi dinamika molekul yang telah dijalankan. Contohnya :



Gambar 3.4 Hasil simulasi

BAB 4

HASIL DAN PEMBAHASAN

Sebelum dilakukan simulasi, terlebih dahulu dilakukan perhitungan jumlah molekul hidrogen yang akan digunakan pada setiap simulasi. Karena hidrogen merupakan gas nyata, persamaan yang digunakan mengikuti persamaan gas nyata yang merupakan modifikasi dari gas ideal:

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

Dimana

P = Tekanan (atm) V = Volume (m^3) n = mol

R = Konstanta gas universal ($8,314 J/mol.K$) T = Temperatur (K)

a dan b adalah konstanta van der waals untuk gas nyata, dimana $a=(2.44 \times 10^{-7} m^6 atm/mol^2)$ dan $b = (2.661 \times 10^{-5}) m^3/mol$ CITATION Rob99 \l 1057. (Freitas, 1999)

Volume yang digunakan sebesar $2.75 \cdot 10^{-25} m^3$

4.1 MOLEKUL HIDROGEN PADA TEMPERATUR 253 K

4.1.1 Tekanan 1 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\begin{aligned} \left(1,01 \cdot 10^5 Pa + \frac{n^2 \cdot 2.44 \times 10^{-7}}{(2.75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2.75 \cdot 10^{-25} m^3 - n \cdot 2.661 \times 10^{-5}) \\ = n \cdot 8,314 \frac{J}{mol.K} \cdot 253K \end{aligned}$$

$$(1,01 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 8 \text{ molekul}$$

4.1.2 Tekanan 2 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(2,027 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(2,027 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 16 \text{ molekul}$$

4.1.3 Tekanan 4 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(4,05 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(4,05 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 32 \text{ molekul}$$

4.1.4 Tekanan 6 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(6,08 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(6,08 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 48 \text{ molekul}$$

4.1.5 Tekanan 8 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(8,11 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(8,11 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 64 \text{ molekul}$$

4.1.6 Tekanan 10 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(10,1 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(10,5 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 80 \text{ molekul}$$

4.1.7 Tekanan 12 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(12,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(12,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 96 \text{ molekul}$$

4.1.8 Tekanan 14 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(14,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(14,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 112 \text{ molekul}$$

4.1.9 Tekanan 16 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(16,21 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(16,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 124 \text{ molekul}$$

4.1.10 Tekanan 18 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(18,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 253 \text{ K}$$

$$(18,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,1 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 143 \text{ molekul}$$

4.2 MOLEKUL HIDROGEN PADA TEMPERATUR 273 K

4.2.1 Tekanan 1 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(1,01 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(1,01 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 7 \text{ molekul}$$

4.2.2 Tekanan 2 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(2,027 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(2,027 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

Universitas Indonesia

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 15 \text{ molekul}$$

4.2.3 Tekanan 4 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(4,05 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2} \right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(4,05 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 30 \text{ molekul}$$

4.2.4 Tekanan 6 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(6,08 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2} \right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(6,08 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 44 \text{ molekul}$$

4.2.5 Tekanan 8 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(8,11 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2} \right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(8,11 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

Universitas Indonesia

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 59 \text{ molekul}$$

4.2.6 Tekanan 10 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(10,1 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2} \right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(10,5 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 74 \text{ molekul}$$

4.2.7 Tekanan 12 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(12,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2} \right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(12,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 89 \text{ molekul}$$

4.2.8 Tekanan 14 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2} \right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(14,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(14,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 103 \text{ molekul}$$

4.2.9 Tekanan 16 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(16,21 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(16,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 118 \text{ molekul}$$

4.2.10 Tekanan 18 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(18,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(18,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,27 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 133 \text{ molekul}$$

4.3 MOLEKUL HIDROGEN PADA TEMPERATUR 293 K

4.3.1 Tekanan 1 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(1,01 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(1,01 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 7 \text{ molekul}$$

4.3.2 Tekanan 2 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(2,027 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(2,027 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 14 \text{ molekul}$$

4.3.3 Tekanan 4 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(4,05 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(4,05 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

Universitas Indonesia

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 28 \text{ molekul}$$

4.3.4 Tekanan 6 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(6,08 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(6,08 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 41 \text{ molekul}$$

4.3.5 Tekanan 8 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(8,11 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(8,11 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 55 \text{ molekul}$$

4.3.6 Tekanan 10 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(10,1 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(10,5 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

Universitas Indonesia

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 69 \text{ molekul}$$

4.3.7 Tekanan 12 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(12,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(12,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 83 \text{ molekul}$$

4.3.8 Tekanan 14 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(14,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 273 \text{ K}$$

$$(14,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 96 \text{ molekul}$$

4.3.9 Tekanan 16 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(16,21 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

$$(16,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

$$N = 110 \text{ molekul}$$

4.3.10 Tekanan 18 atm

$$\left(P + \frac{n^2 a}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

$$\left(18,2 \cdot 10^5 \text{ Pa} + \frac{n^2 \cdot 2,44 \times 10^{-7}}{(2,75 \times 10^{-25})^2}\right) \cdot (2,75 \cdot 10^{-25} \text{ m}^3 - n \cdot 2,661 \times 10^{-5})$$

$$= n \cdot 8,314 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}} \cdot 293 \text{ K}$$

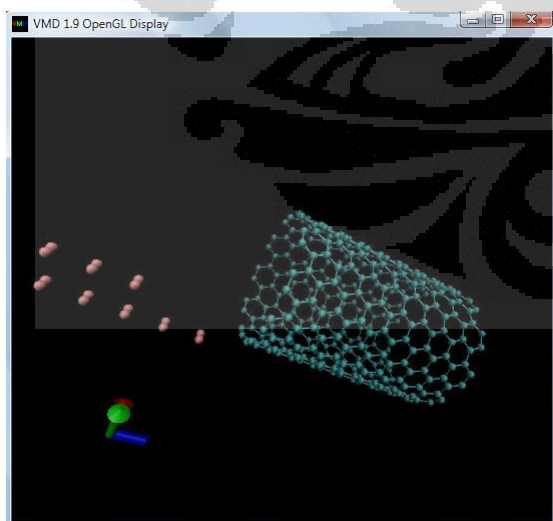
$$(18,2 \cdot 10^5 + n^2 \cdot 3,23 \cdot 10^{47})(2,75 \cdot 10^{-25} - n \cdot 2,661 \cdot 10^{-5}) = n \cdot 2,44 \cdot 10^3$$

$$N = N_A \cdot n$$

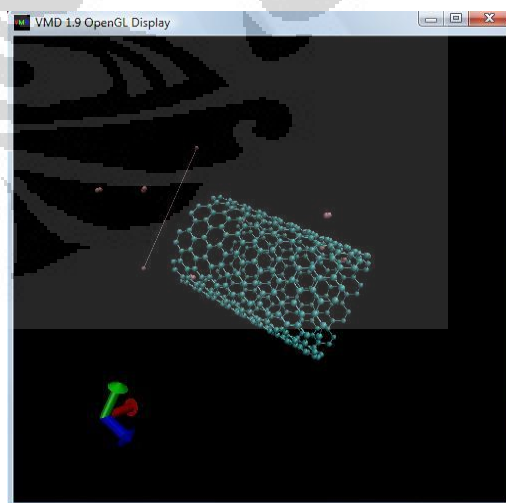
$$N = 124 \text{ molekul}$$

4.4 HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 253 K

4.4.1 Tekanan 1 atm

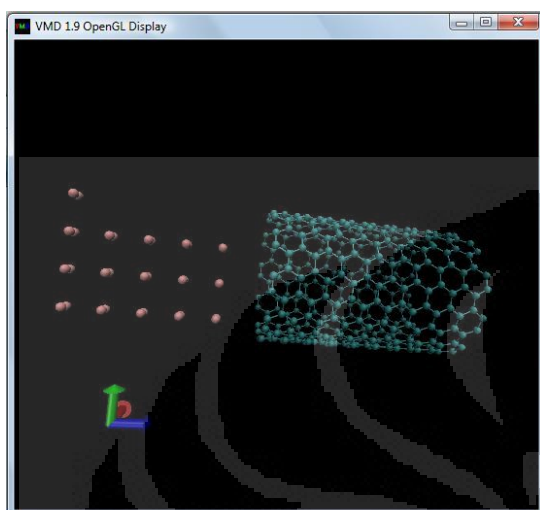


Gambar 4.2 Kondisi awal

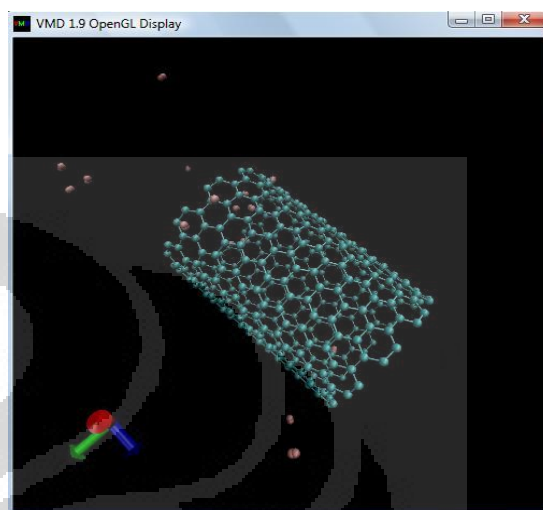


Gambar 4.1 Kondisi akhir

4.4.2 Tekanan 2 atm

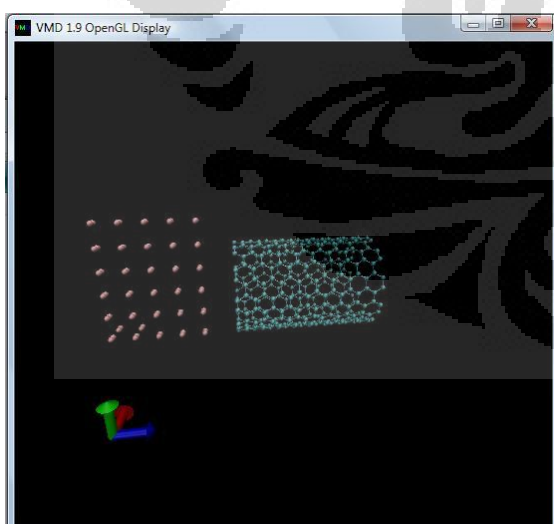


Gambar 4.3 Kondisi awal

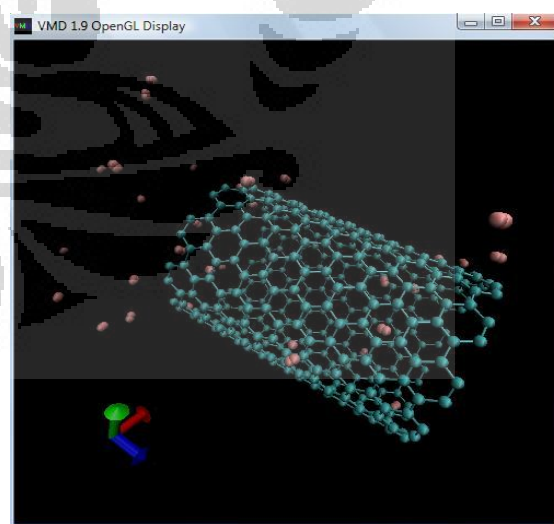


Gambar 4.4 Kondisi akhir

4.4.3 Tekanan 4 atm

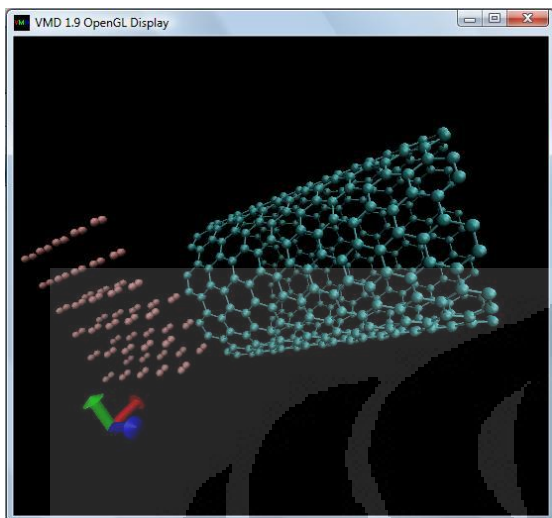


Gambar 4.6 Kondisi awal

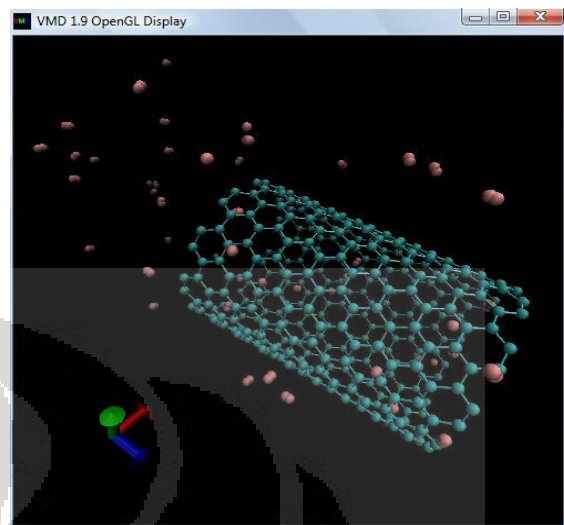


Gambar 4.5 Kondisi akhir

4.4.4 Tekanan 6 atm

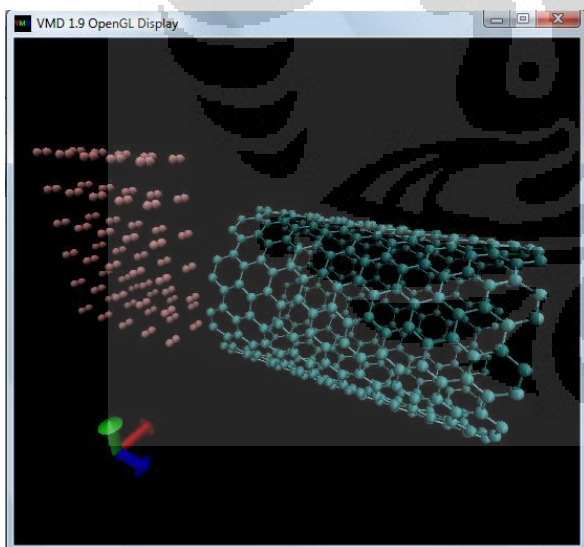


Gambar 4.8 Kondisi awal

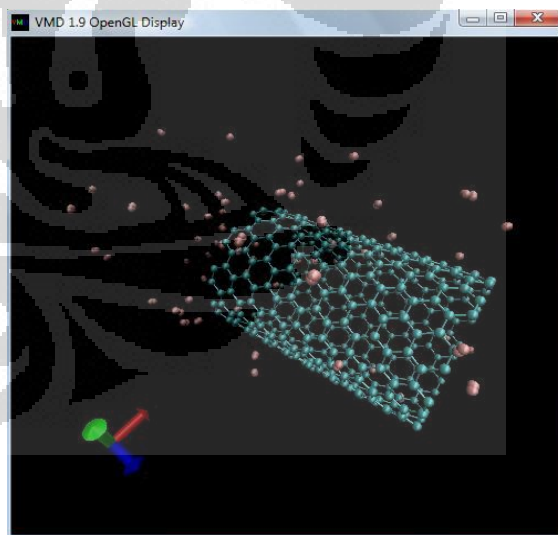


Gambar 4.7 Kondisi akhir

4.4.5 Tekanan 8 atm

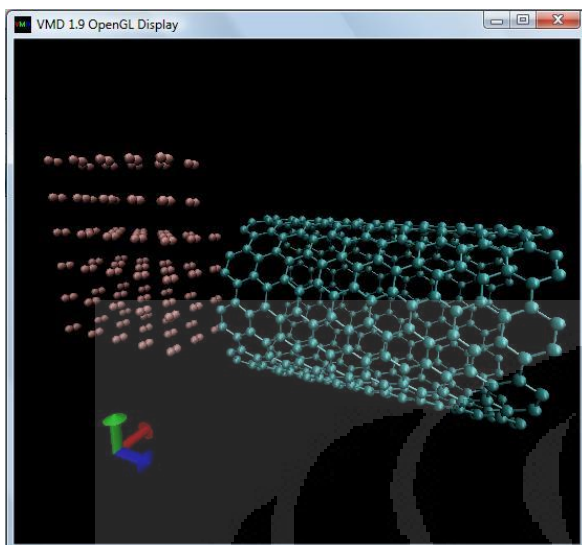


Gambar 4.9 Kondisi awal

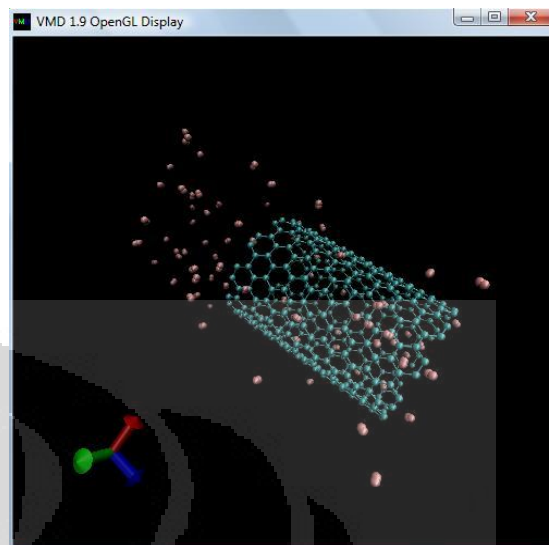


Gambar 4.10 Kondisi akhir

4.4.6 Tekanan 10 atm

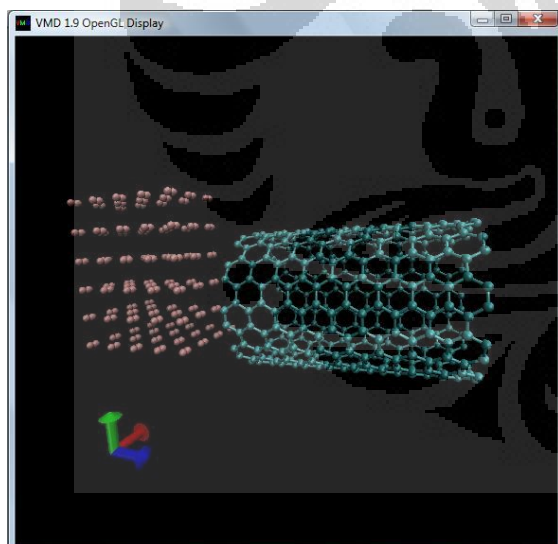


Gambar 4.12 Kondisi awal

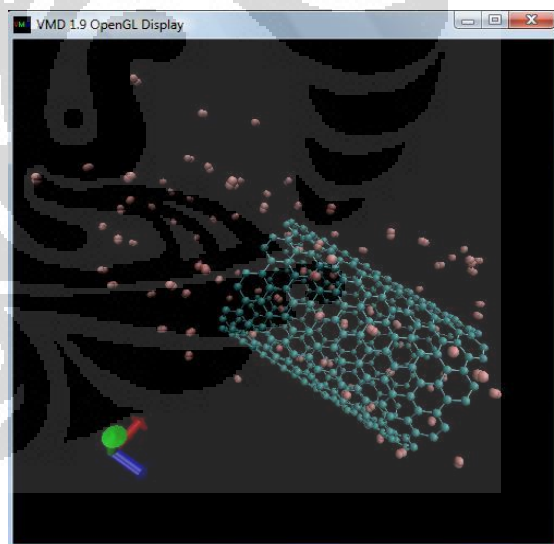


Gambar 4.11 Kondisi akhir

4.4.7 Tekanan 12 atm

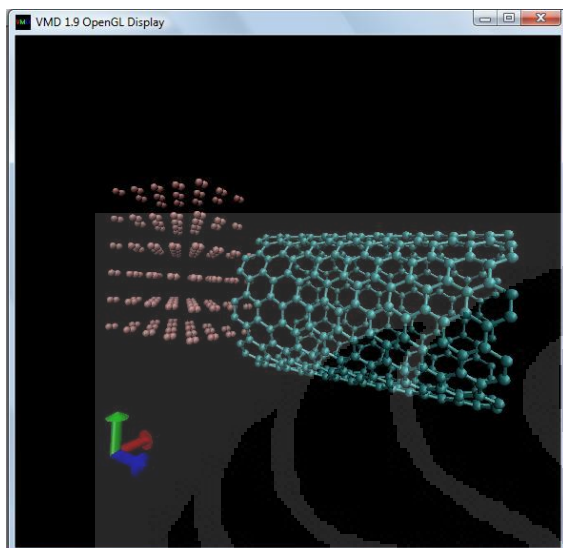


Gambar 4.13 Kondisi awal

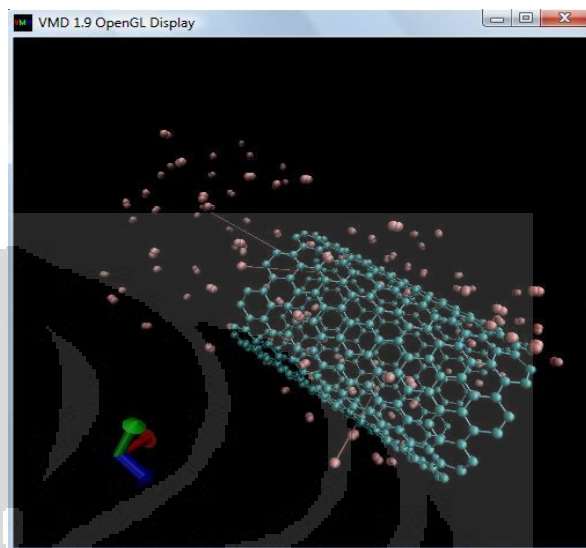


Gambar 4.14 Kondisi akhir

4.4.8 Tekanan 14 atm

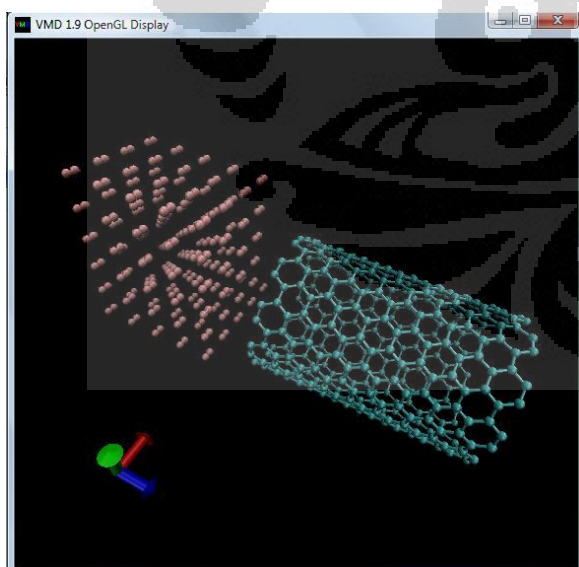


Gambar 4.15 Kondisi awal

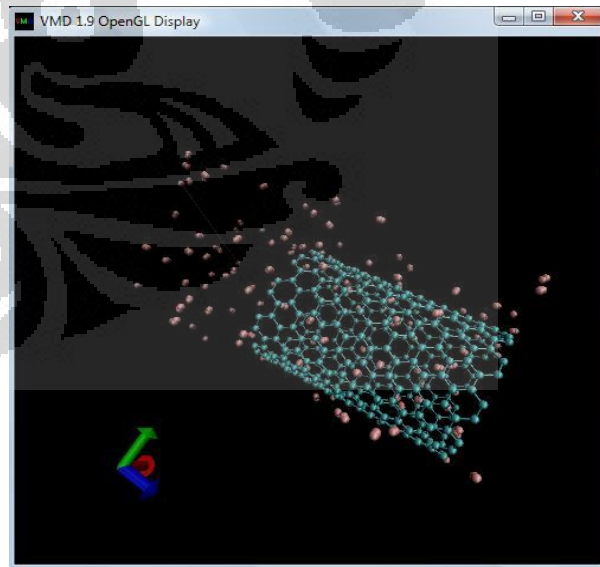


Gambar 4.16 Kondisi akhir

4.4.9 Tekanan 16 atm

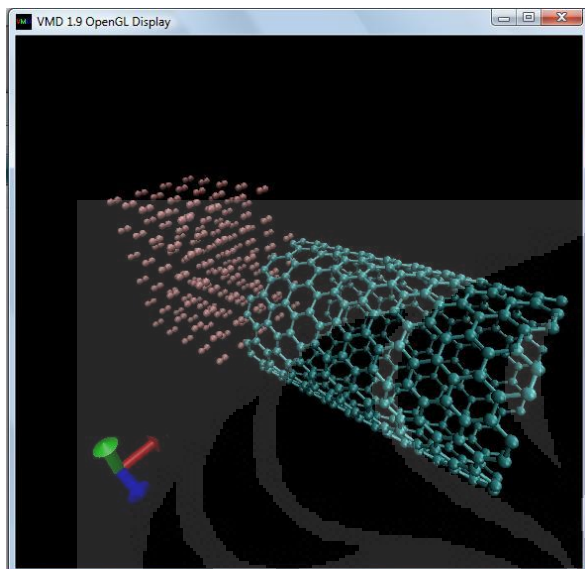


Gambar 4.17 Kondisi awal

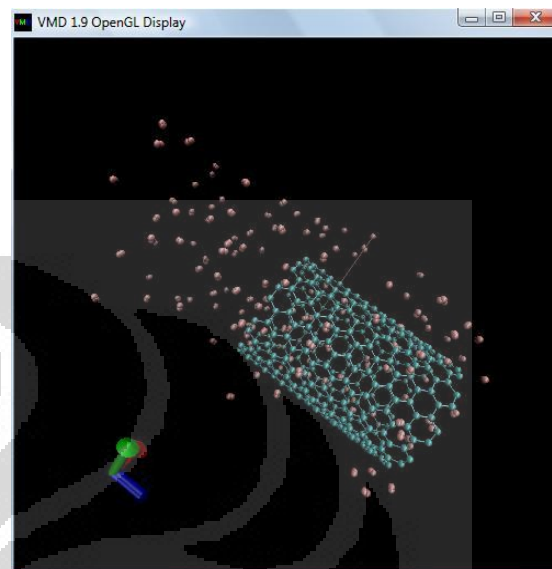


Gambar 4.18 Kondisi akhir

4.4.10 Tekanan 18 atm



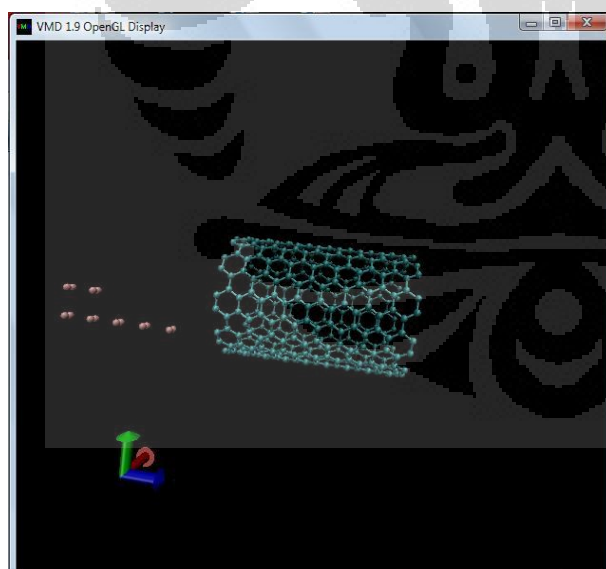
Gambar 4.20 Kondisi awal



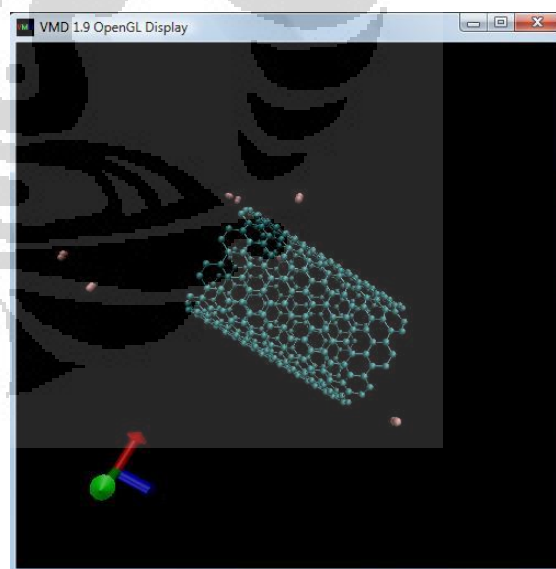
Gambar 4.19 Kondisi akhir

4.5 HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 273 K

4.5.1 Tekanan 1 atm

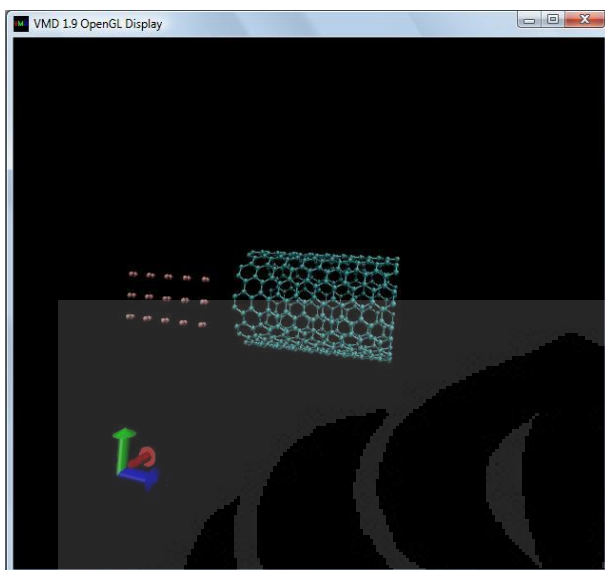


Gambar 4.22 Kondisi awal

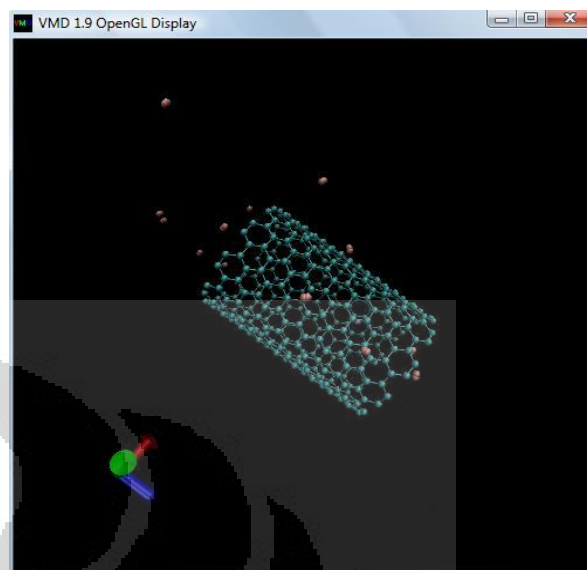


Gambar 4.21 Kondisi akhir

4.5.2 Tekanan 2 atm

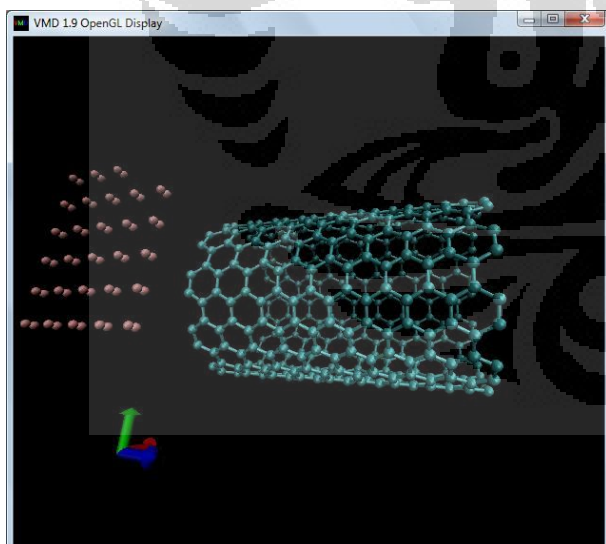


Gambar 4.23 Kondisi awal

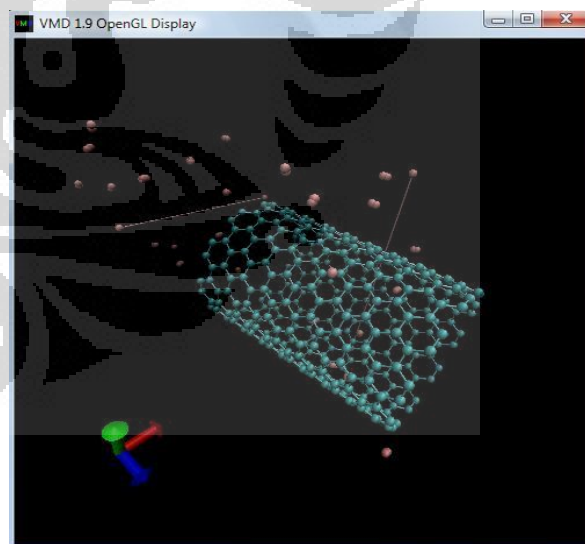


Gambar 4.24 Kondisi akhir

4.5.3 Tekanan 4 atm

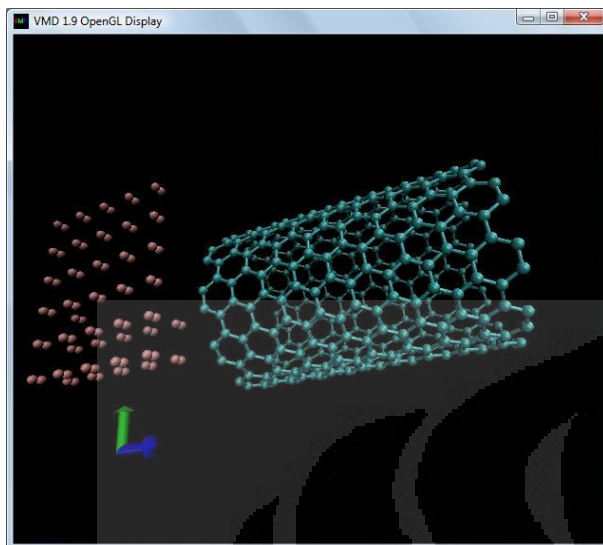


Gambar 4.25 Kondisi awal

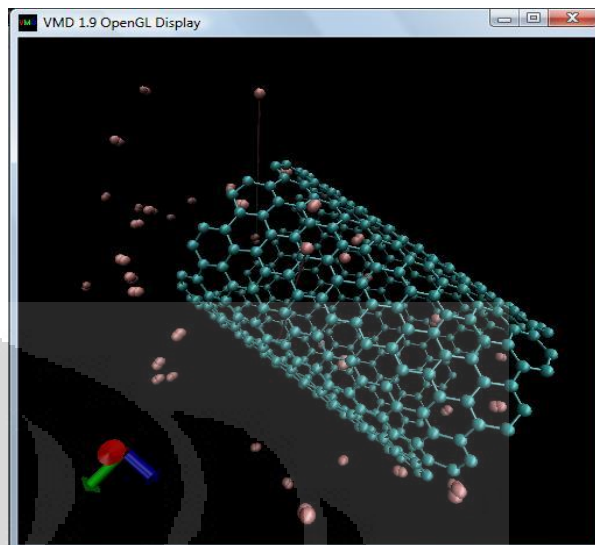


Gambar 4.26 Kondisi akhir

4.5.4 Tekanan 6 atm

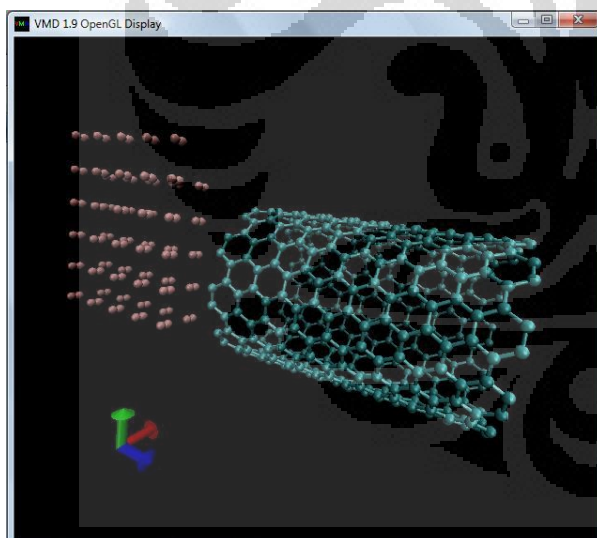


Gambar 4.28 Kondisi awal

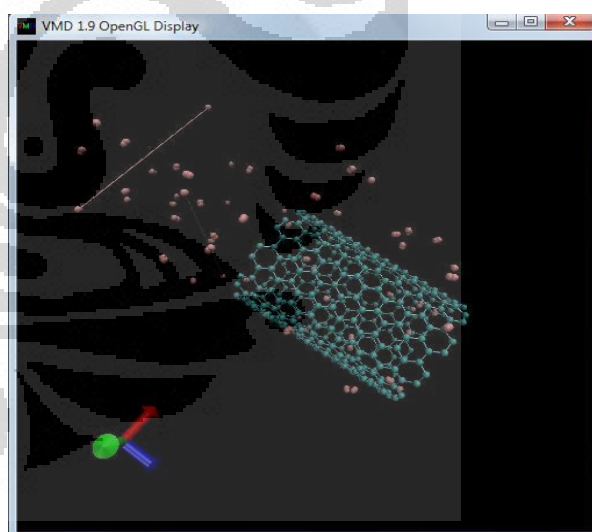


Gambar 4.27 Kondisi akhir

4.5.5 Tekanan 8 atm

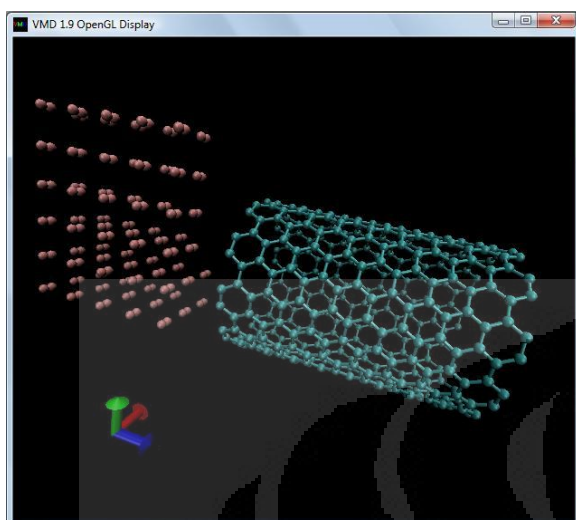


Gambar 4.30 Kondisi awal

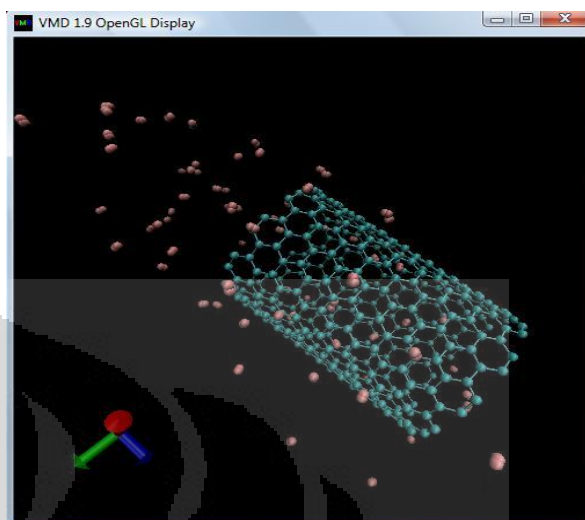


Gambar 4.29 Kondisi akhir

4.5.6 Tekanan 10 atm

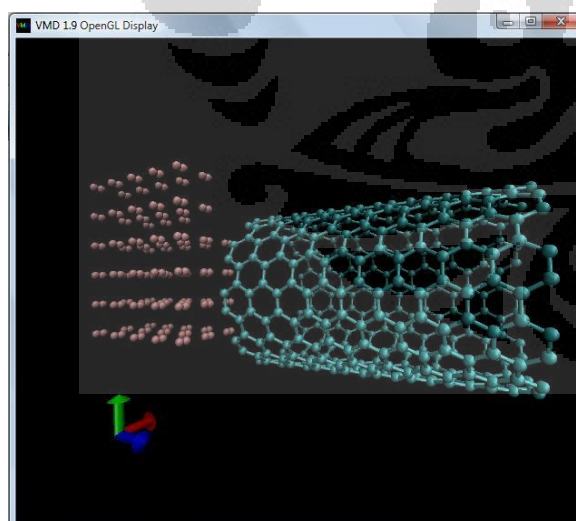


Gambar 4.32 Kondisi awal

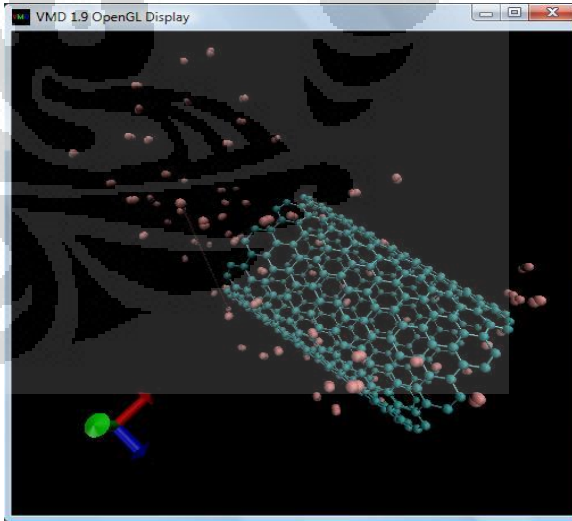


Gambar 4.31 Kondisi akhir

4.5.7 Tekanan 12 atm

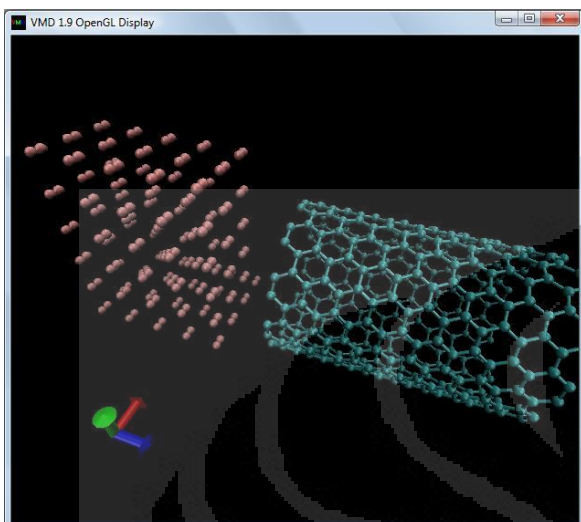


Gambar 4.33 Kondisi awal

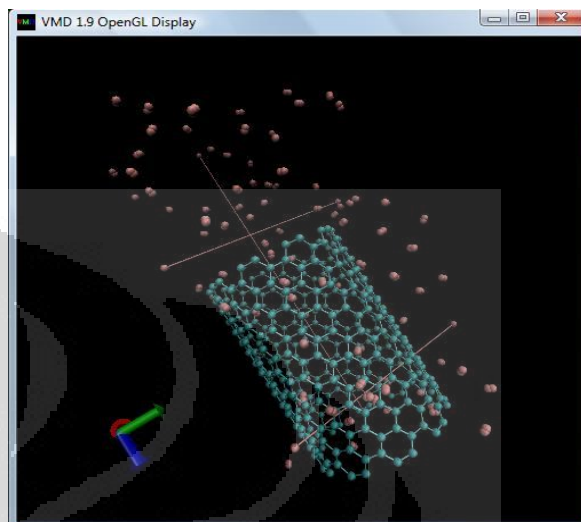


Gambar 4.34 Kondisi akhir

4.5.8 Tekanan 14 atm

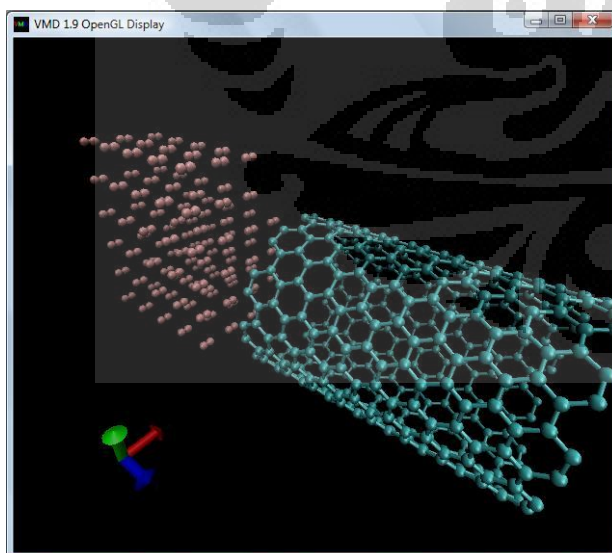


Gambar 4.35 Kondisi awal

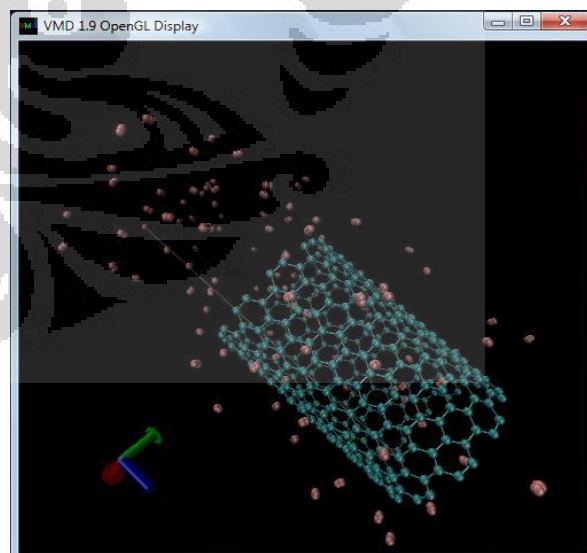


Gambar 4.36 Kondisi akhir

4.5.9 Tekanan 16 atm

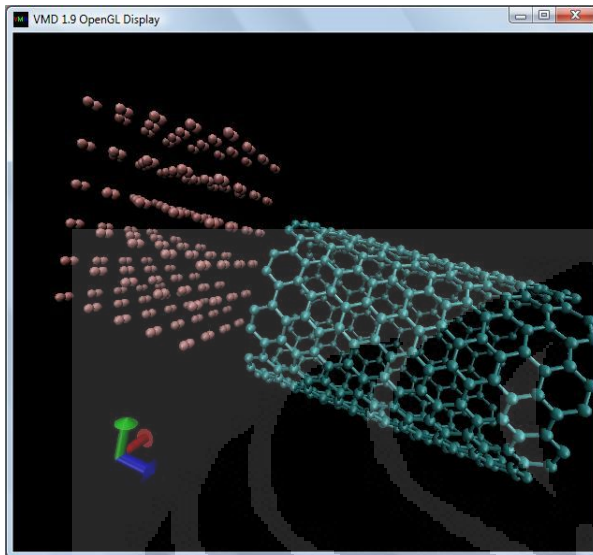


Gambar 4.38 Kondisi awal

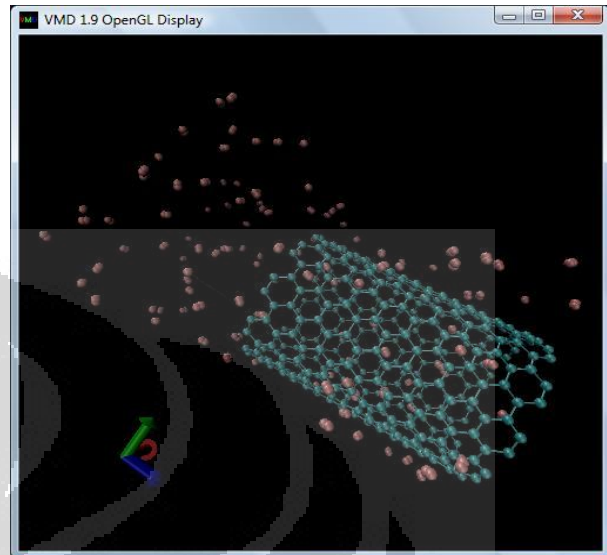


Gambar 4.37 Kondisi akhir

4.5.10 Tekanan 18 atm



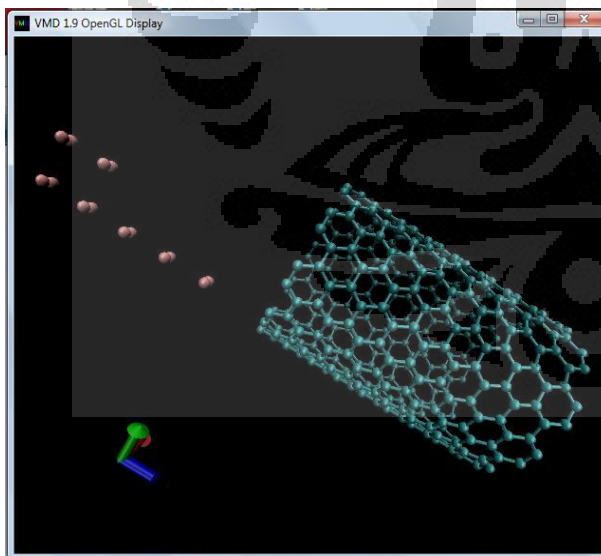
Gambar 4.39 Kondisi awal



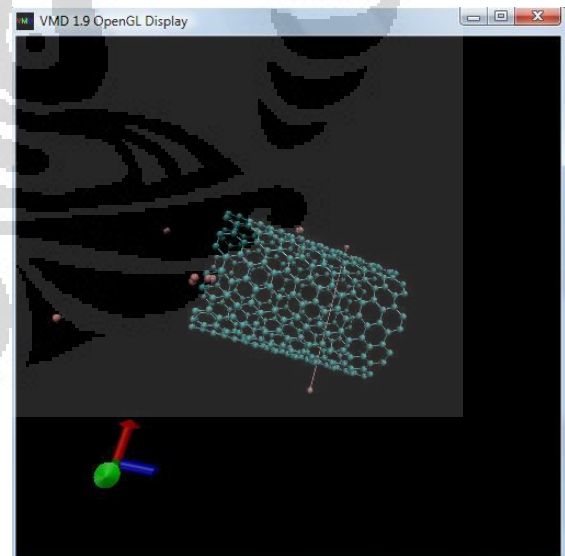
Gambar 4.40 Kondisi akhir

4.6 HASIL SIMULASI PADA TEMPERATUR 293 K

4.6.1 Tekanan 1 atm

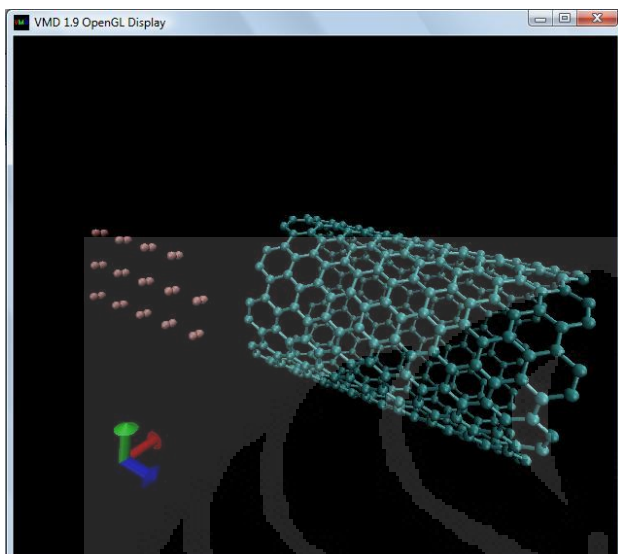


Gambar 4.42 Kondisi awal

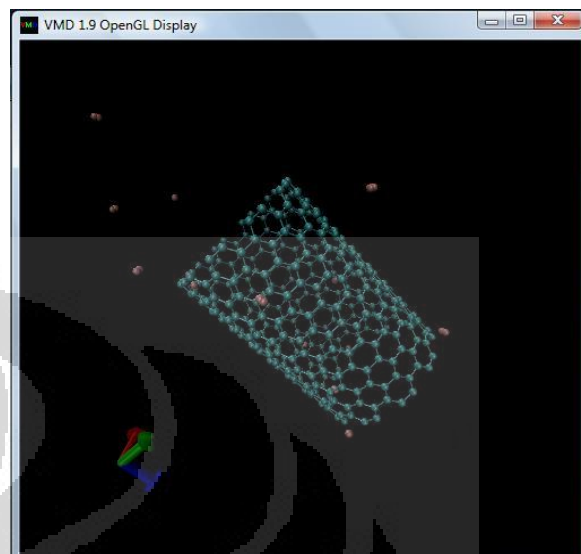


Gambar 4.41 Kondisi akhir

4.6.2 Tekanan 2 atm

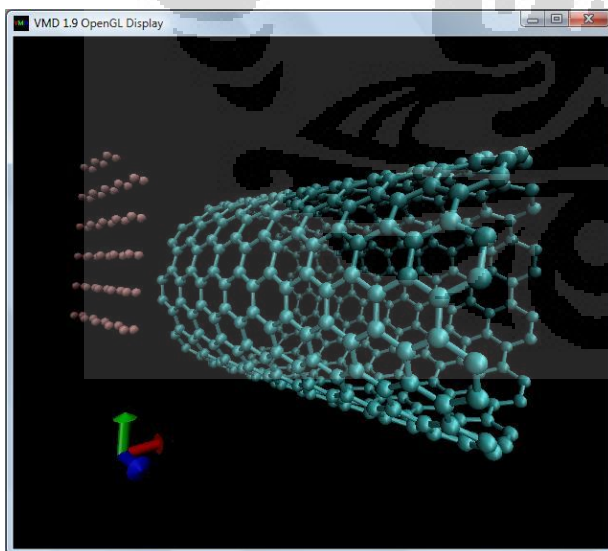


Gambar 4.44 Kondisi awal

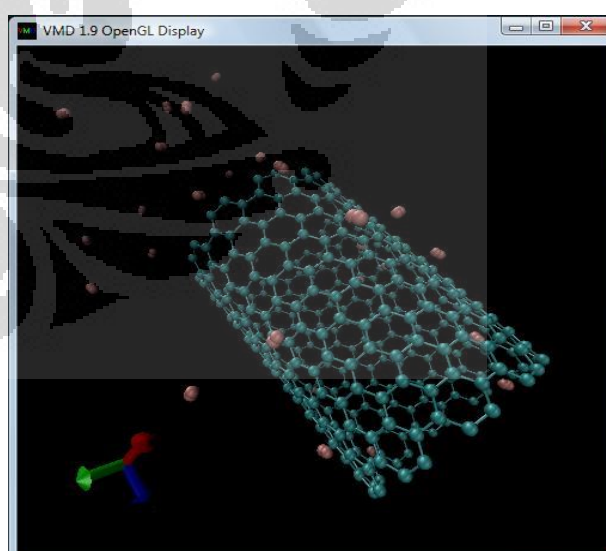


Gambar 4.43 Kondisi akhir

4.6.3 Tekanan 4 atm

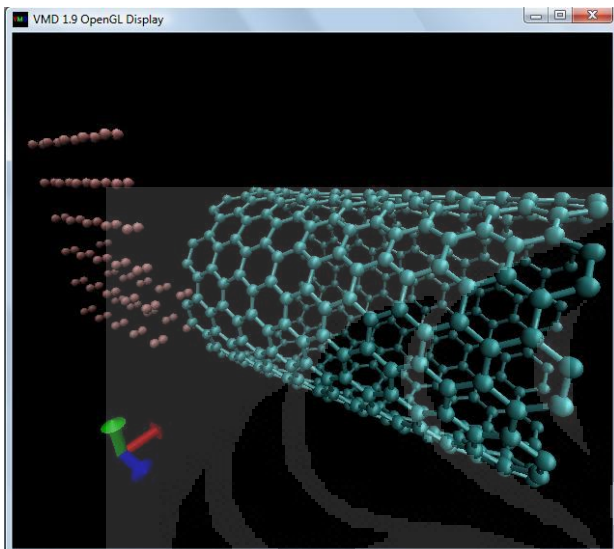


Gambar 4.46 Kondisi awal

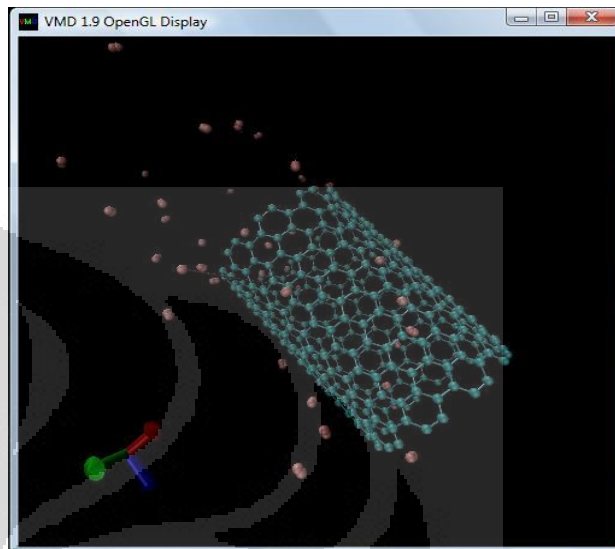


Gambar 4.45 Kondisi akhir

4.6.4 Tekanan 6 atm

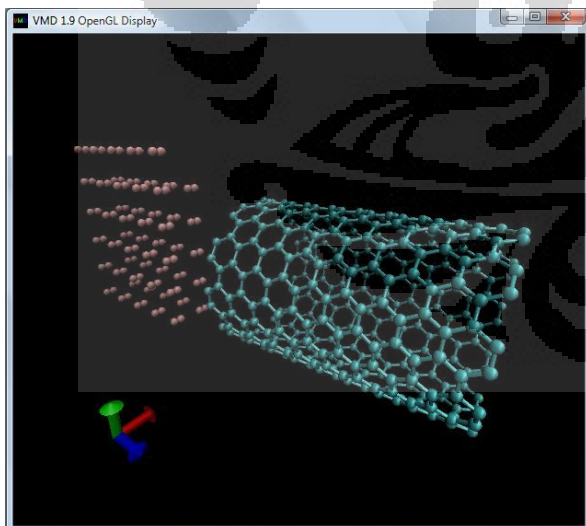


Gambar 4.48 Kondisi awal

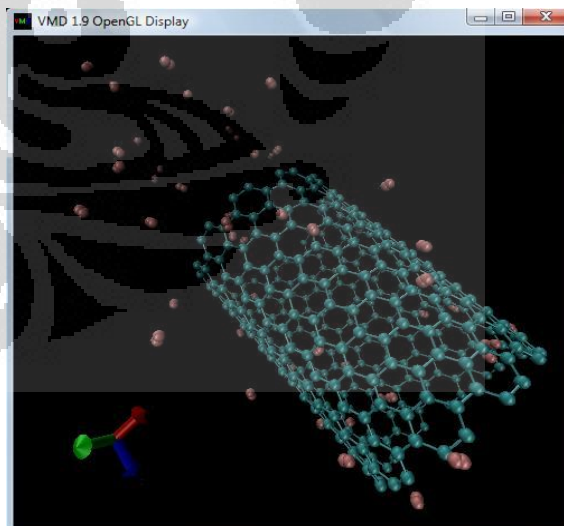


Gambar 4.47 Kondisi akhir

4.6.5 Tekanan 8 atm

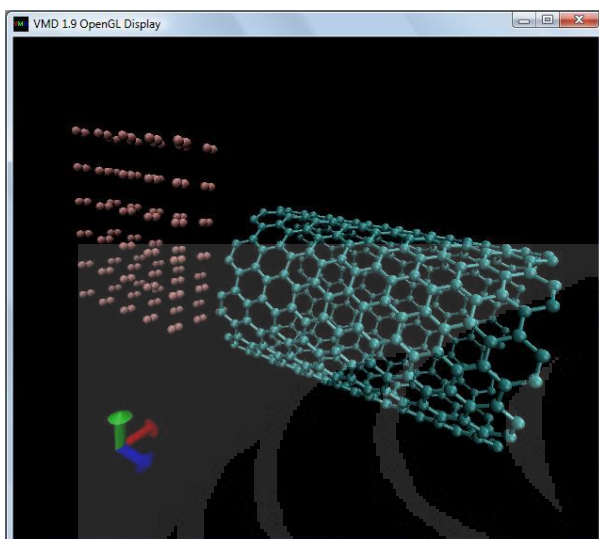


Gambar 4.50 Kondisi awal

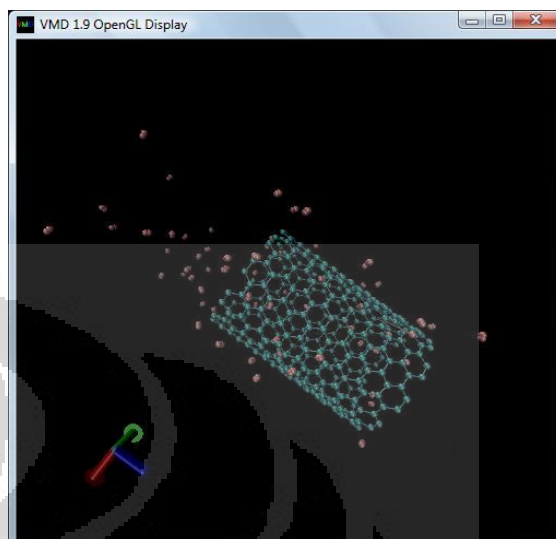


Gambar 4.49 Kondisi akhir

4.6.6 Tekanan 10 atm

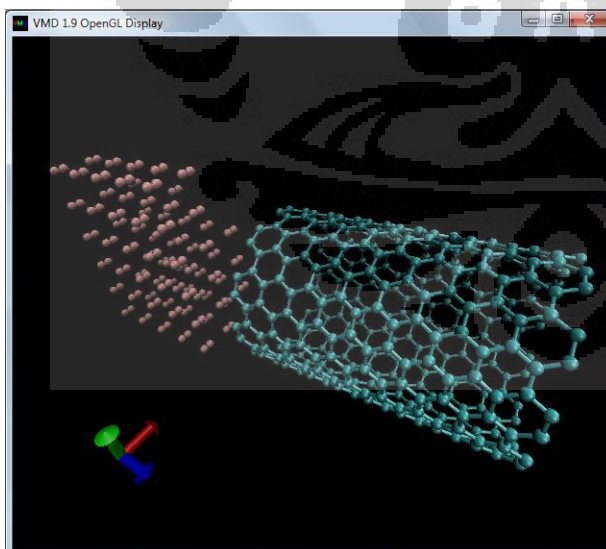


Gambar 4.51 Kondisi awal

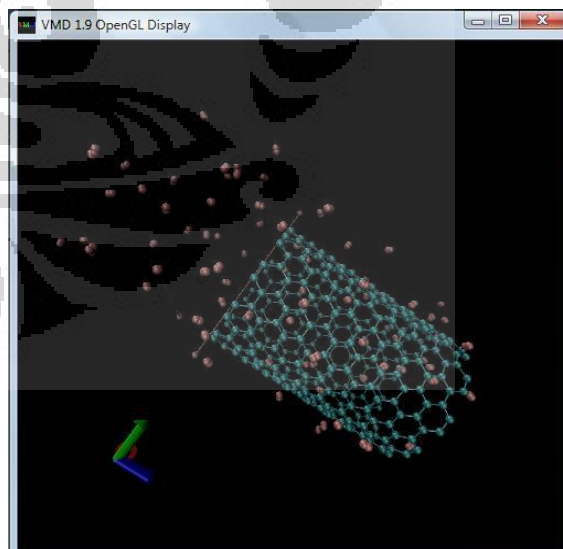


Gambar 4.52 Kondisi akhir

4.6.7 Tekanan 12 atm

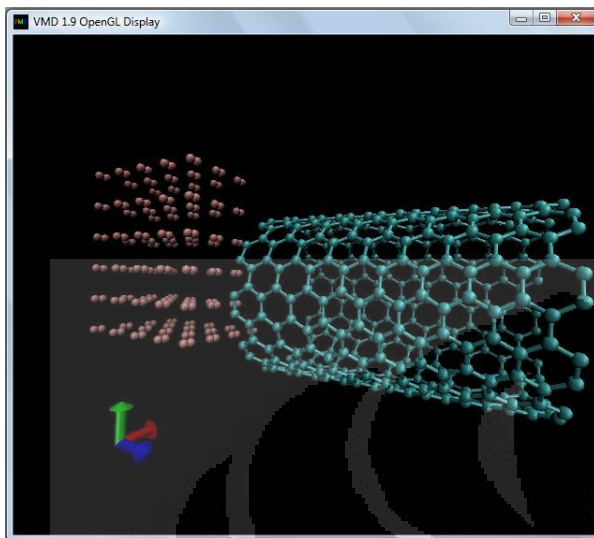


Gambar 4.54 Kondisi awal

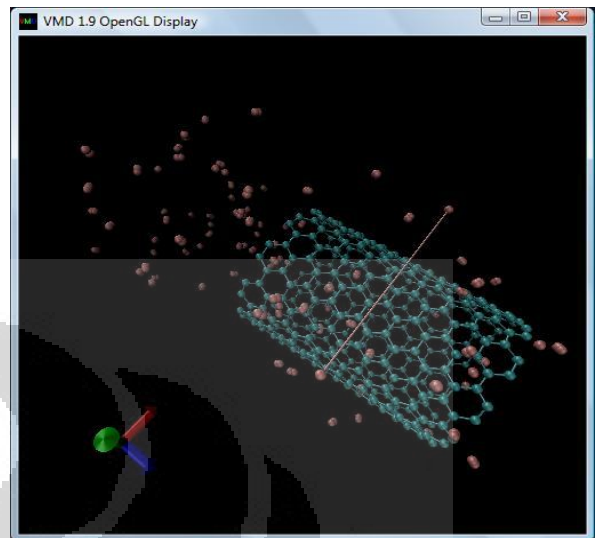


Gambar 4.53 Kondisi akhir

4.6.8 Tekanan 14 atm

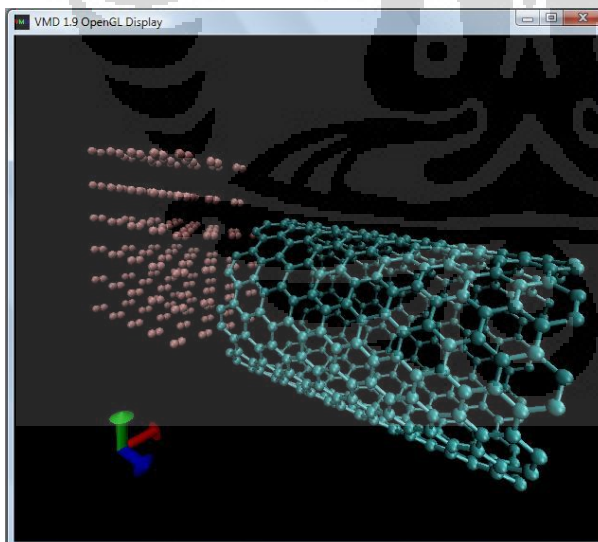


Gambar 4.55 Kondisi awal

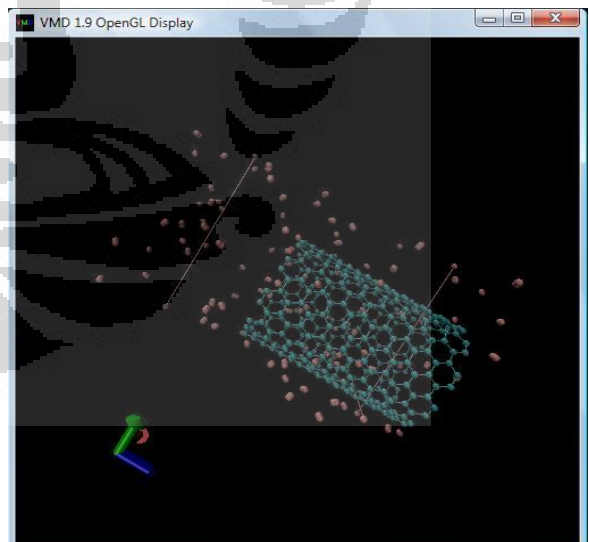


Gambar 4.56 Kondisi akhir

4.6.9 Tekanan 16 atm

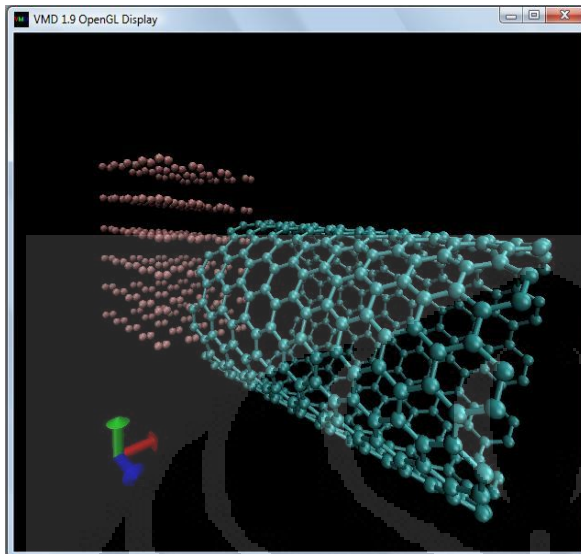


Gambar 4.58 Kondisi awal

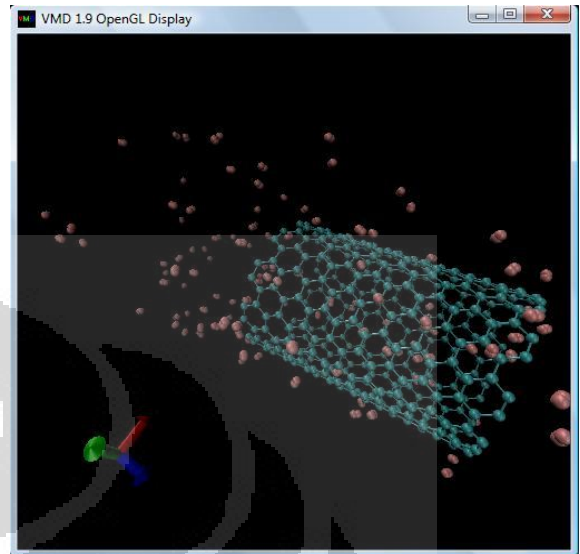


Gambar 4.57 Kondisi akhir

4.6.10 Tekanan 18 atm



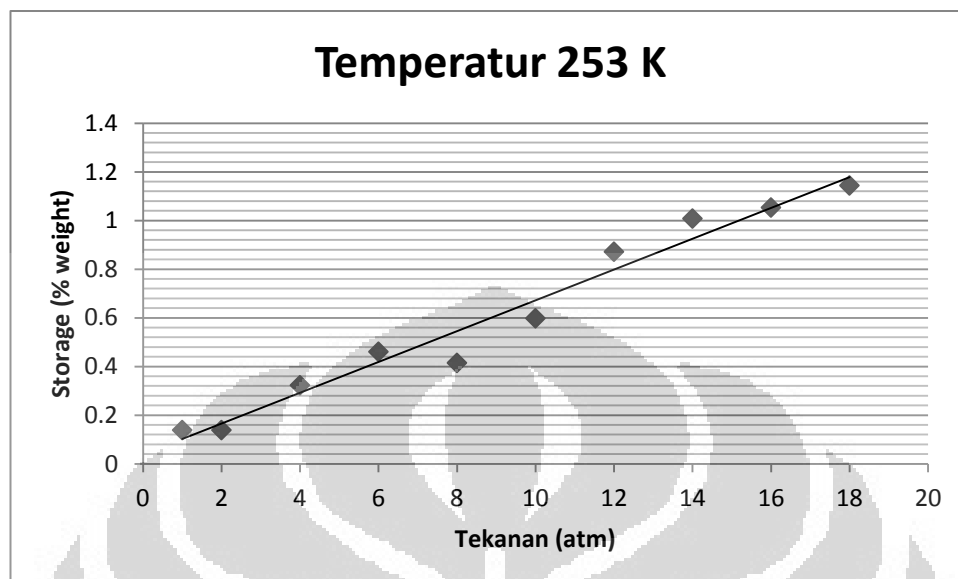
Gambar 4.59 Kondisi awal



Gambar 4.60 Kondisi akhir

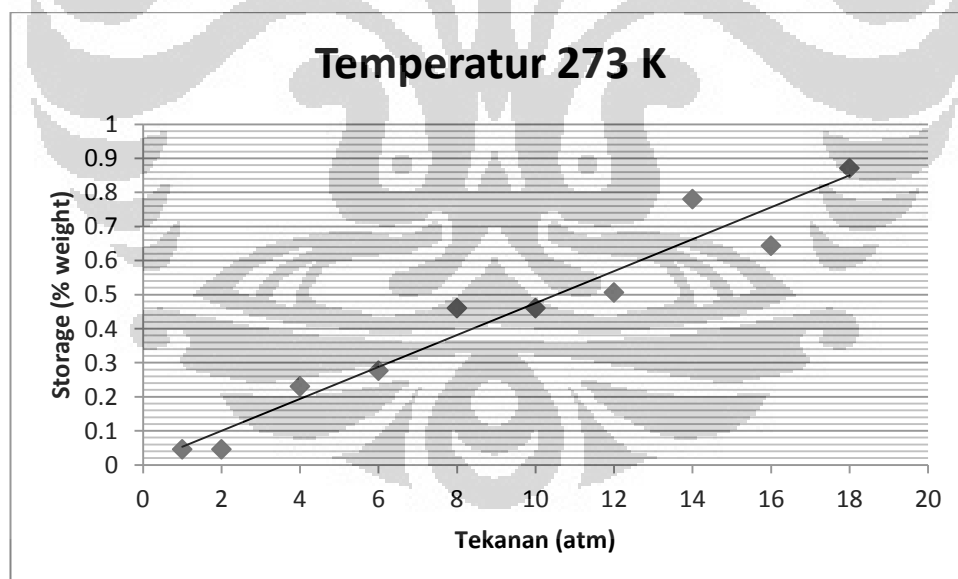
4.7 GRAFIK HASIL SIMULASI

4.7.1 Temperatur 253 K



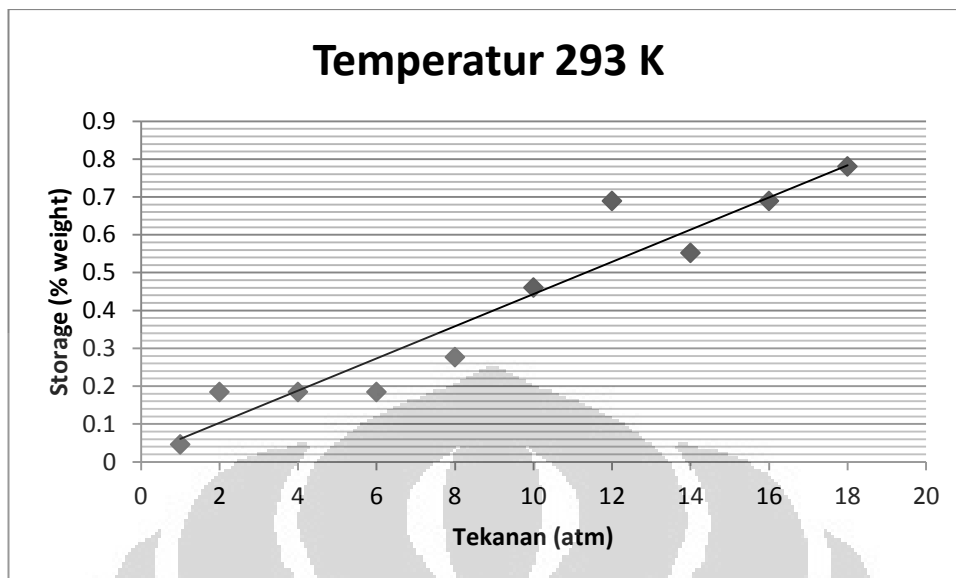
Gambar 4.61 Grafik hasil simulasi pada temperatur 253 K

4.7.2 Temperatur 273 K



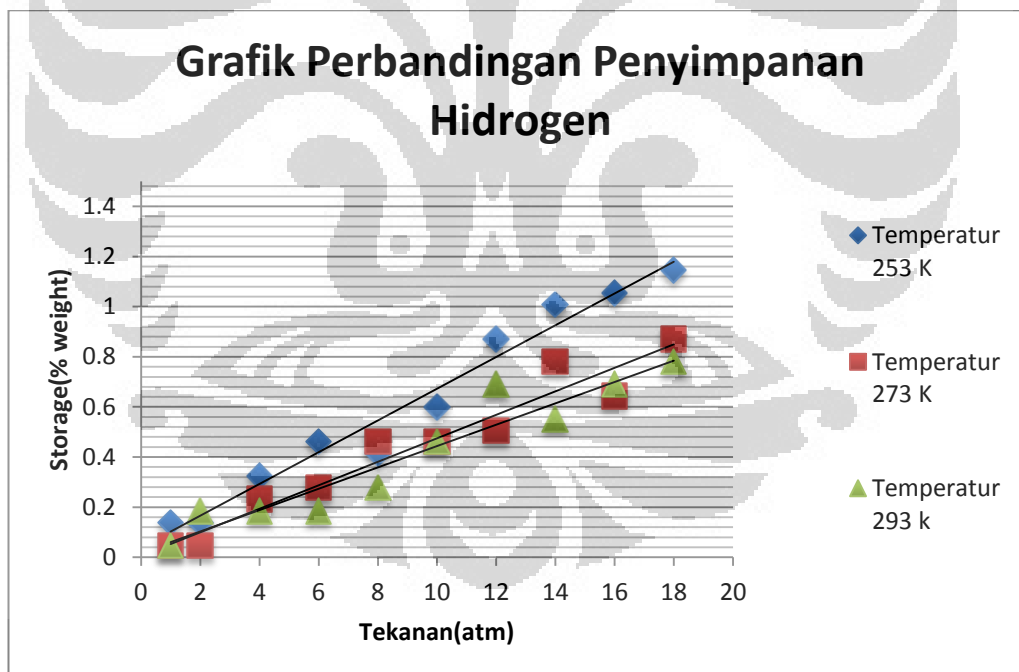
Gambar 4.62 Grafik hasil simulasi pada temperatur 273 K

4.7.3 Temperatur 293 K



Gambar 4.63 Grafik hasil simulasi pada Temperatur 293 K

4.7.4 Perbandingan Ketiga Temperatur



Gambar 4.64 Grafik perbandingan hasil ketiga simulasi

Tabel 4.1 Hasil Simulasi

No	Tekanan (atm)	Storage (% weight)		
		253 K	273 K	293 K
1	1	0.138696	0.046275	0.046275
2	2	0.138696	0.046275	0.184843
3	4	0.323027	0.230947	0.184843
4	6	0.460829	0.277008	0.184843
5	8	0.414938	0.460829	0.277008
6	10	0.598251	0.460829	0.460829
7	12	0.87196	0.506679	0.689655
8	14	1.008249	0.780891	0.552486
9	16	1.053596	0.643974	0.689655
10	18	1.144165	0.87196	0.780891

4.8 ANALISIS HASIL

Pada simulasi kali ini, jumlah hidrogen yang terserap dihitung berdasarkan metode gravimetrik, % wt, yakni berdasarkan massa hidrogen terserap (m_{H_2}) dan massa adsorban (m_s):

$$\%wt = \frac{m_{H_2}}{m_{H_2} + m_s}$$

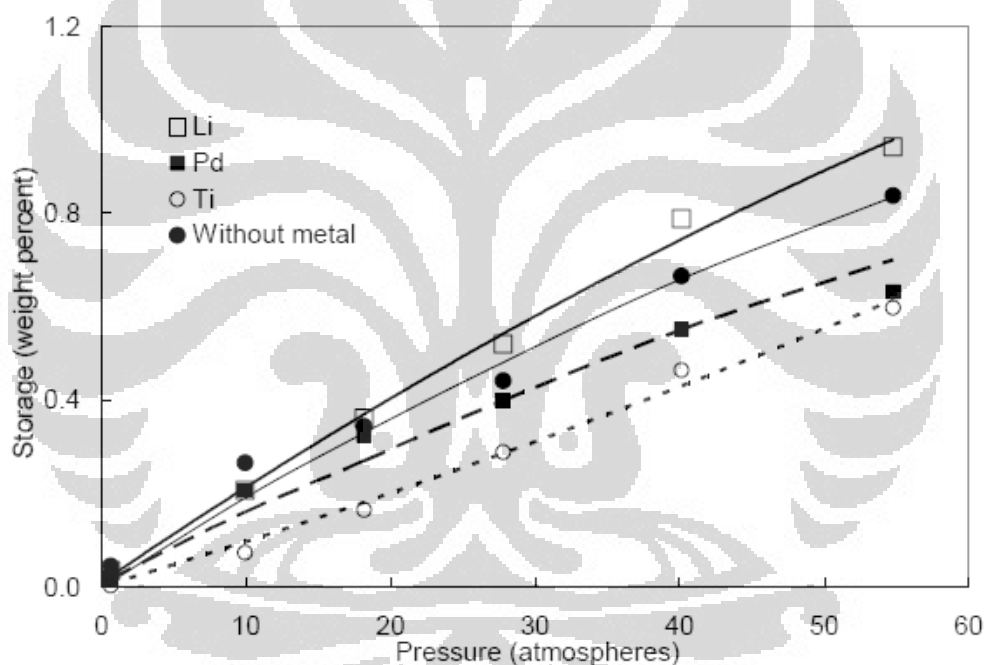
(Barbara, P., Michael H., 2010)

Berdasarkan Tabel 4.1 di atas terlihat bahwa semakin rendah temperatur, jumlah hidrogen yang mampu terserap semakin besar. Dimana pada temperatur 253 K

Universitas Indonesia

mampu menyerap hidrogen lebih banyak dibandingkan dengan temperatur lainnya, meskipun jumlah yang terserap memiliki perbedaan yang kecil.

Namun, pada tekanan 4 atmosfer, jumlah hidrogen yang teradsorp pada temperatur 273 K lebih tinggi dibandingkan temperatur 253 K. Hal yang sama juga terjadi pada tekanan 6 atm, dimana pada temperatur 293 K mengadsorp hidrogen lebih banyak dibandingkan pada temperatur 253K. Hal ini dikarenakan perbedaan temperatur dan tekanan yang kecil yang menyebabkan jumlah molekul hidrogen yang terlibat dalam simulasi tidak jauh berbeda. Sehingga jumlah molekul hidrogen yang teradsorp juga tidak jauh berbeda.



Gambar 4.65 Hasil simulasi soumik

(Banerjee, 2008)

Jika hasil simulasi yang didapat dibandingkan dengan hasil simulasi yang dilakukan oleh Soumik Banerjee, terjadi perbedaan yang cukup besar. Dimana pada hasil simulasi yang dilakukan Soumik, jumlah hidrogen yang terserap tidak lebih dari 1 % wt, sedangkan pada hasil simulasi pada Tabel 4.65 jumlah hidrogen yang terserap mencapai 1,28% wt. Hal ini mungkin dikarenakan oleh panjang

Universitas Indonesia

carbon nanotube yang digunakan. Pada simulasi yang dilakukan Soumik, panjang carbon nanotube yang digunakan dalam simulasi adalah 11,25 nm dengan melibatkan 2000 atom carbon, sedangkan dalam penelitian kali ini, panjang carbon nanotube yang digunakan hanya 2 nm. Panjang carbon nanotube dapat meningkatkan jumlah hidrogen yang terserap. Namun, jika pengukuran jumlah hidrogen yang terserap dilakukan dengan metode gravimetrik, terjadi penurunan jumlah hidrogen yang terserap.



BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 KESIMPULAN

1. Penyerapan hidrogen oleh CNT pada temperatur 253 K lebih baik dari temperatur 273 K dan 293 K pada variasi tekanan 1 sampai 18 atm.
2. Pada temperatur 253 K dengan tekanan 1 sampai 18 atm, hidrogen yang terserap berkisar antara 0.14 %wt - 1.144 %wt. Pada temperatur 273 K dengan tekanan 1 sampai 18 atm, hidrogen yang terserap berkisar antara 0.05 %wt - 0.87 %wt. Pada temperatur 293 K dengan tekanan 1 sampai 18 atm, hidrogen yang terserap berkisar antara 0.05 %wt - 0.78 %wt.
3. Temperatur merupakan faktor yang dapat mempengaruhi kemampuan adsorpsi. Semakin rendah temperatur, semakin baik kemampuan dalam menyerap hidrogen. Proses adsorpsi adalah proses eksotermis, berarti peningkatan temperatur pada tekanan yang tetap akan mengurangi jumlah senyawa yang teradsorpsi, berdasarkan prinsip *Le Chatelier*.
4. Selain temperatur, faktor lain yang mempengaruhi adsorpsi adalah tekanan. Semakin tinggi tekanan sistem, semakin tinggi pula jumlah hidrogen yang akan terserap.

5.2 SARAN

- Sebelum mempelajari dinamika molekul, sebaiknya mahasiswa terlebih dahulu mempelajari tentang Mekanika Statistik, Mekanika Kuantum, dll.
- Untuk meningkatkan jumlah molekul hidrogen, perlu dilakukan perilaku lain pada CNT. Misalnya dengan menambahkan material yang mampu meningkatkan penyerapan hidrogen. Hal ini dikarenakan jika hanya dengan CNT murni membutuhkan temperatur yang sangat kecil dan tekanan yang sangat besar.

DAFTAR REFERENSI

- Allen, M. P. (1987). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press.
- Banerjee, S. (2008). *Molecular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena*. Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University .
- Bansal, Roop Chand 1 & Goyal, Meenakshi. (2005). *Activated Carbon Adsorption*. USA: Taylor & Francis Group.
- Barbara, P., Michael H. (2010). Physisorption in Porous Materials. Dalam M. Hirscher, *Handbook of Hydrogen Storage: New Material for Future Energy Storage* (hal. 41). Weinheim: Wiley-CVH.
- Cengel, A. Yunus , Michael A. Boles. (1994). *Thermodynamics: An Engineering Approach*. New York: McGraw-Hill.
- Conte M. (2001). hydrogen Economy for a Sustainable Development : state-of-the art and technological perspectives. *Journal of Power Sources* , 171-187.
- Ercolessi, Furio. (2010). *A Molecular Dynamic Primer*. Dipetik Januari 10, 2012, dari www.sissa.it: www.sissa.it/furio/md
- Freitas, R. A. (1999). *Nanomedicine, Volume I : Basic Capabilities*. Dipetik Januari 22, 2012, dari [nanomedicine.com](http://www.nanomedicine.com): <http://www.nanomedicine.com/NMI/ListTables.htm>
- Haile, J. (1992). *Molecular Dynamic Simulations*. New York: John Wiley & Sons Ltd.
- Humphrey, W., Dalke, A., Schulten, K. (1996). VMD - Visual Molecular dynamic. *J.Molec. Graphics* , 33-38.
- K., H. (1987). *Statistical Mechanics*. New York: John Wiley & Sons Ltd.

- Keller, Jurgen U., Reiner Staudt. (2005). Gas Adsorption Equilibria; Experimental Methods and Adsorptive Isotherms. *Springer Science & Business Media* .
- Plimpton, S. (1995). Fast Parallel Algorithm For Short-Range Molecular-Dynamics. *Journal of Computational Physics* , 1-19.
- Porrier, E. (2004). Storage of Hydrogen on Single walled Carbon Nanotube and Other Carbon Nano. *Journal Appl. Phys.* , 961-967.
- Prasodjo, P. (2010). *Studi Kapasitas Adsorpsi serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon sebagai Penyimpan hidrogen*. Depok: Fakultas Teknik Universitas Indonesia.
- Rouquerol, J., Francois R.,& Kenneth Sing. (1998). Adsorption By Powders And Porous Solids. *Elsevier* .
- Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L. (t.thn.). *CHARMM Molecular dynamic Simulations*. Dipetik Januari 13, 2012, dari www.ch.embnet.org: http://www.ch.embnet.org/MD_Tutorial/
- Sun Yan. (2007). Impact of Supercritical Adsorption Mechanism on Research of Hydrogen Carrier. *Chinese Science Bulletin* , 1146-1152.
- Supriyadi & Nasruddin. (2010). Simulasi Dinamika Molekuler : Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi. *Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin (SNTTM)*. Palembang: Universitas Sriwijaya.
- Turner, C.H., Brennan, J.K., Pikunic, J. & Gubbins, K.E. (2002). Simulations of Chemical Reaction Equilibria and Kinetics in Heterogeneous Carbon Micropores. *Applied Surface Science, Vol. 196* , pp. 366-374.
- Witoelar, A. (2002). *Perancangan dan Analisa Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones*. Bandung: Institut Teknologi Bandung.

Yulianto, B. (2005, Januari). *Carbon Nanotube, Material Ajaib Primadona Teknologi Nano*. Dipetik Desember 10, 2011, dari www.nano.lipi.go.id:
<http://www.nano.lipi.go.id/utama.cgi?cetakartikel&1073086044>



Universitas Indonesia

LAMPIRAN

LAMPIRAN 1

-Tipikal input LAMMPS untuk adsorpsi hidrogen:

3-d LJ hydrogen storage

```
dimension          3
boundary           p p p
atom_style         full
neighbor           0.5 bin
neigh_modify       delay 5
read_data          temp273_10atm.dat

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

# LJ potentials

pair_style         lj/cut/coul/cut 3.0
pair_coeff         1 1 1.0 1.0
pair_coeff         2 2 1.737 1.166
pair_coeff         1 2 1.858 1.083

# Define groups

group             cnt type 2
group             hyd type 1

# Initial velocities

compute           mobile hyd temp
velocity          hyd create 7.18427 482748 temp mobile
fix               1 all nve
fix               2 hyd temp/rescale 10 7.18427 7.18427 0.02 1.0
fix_modify        2 temp mobile

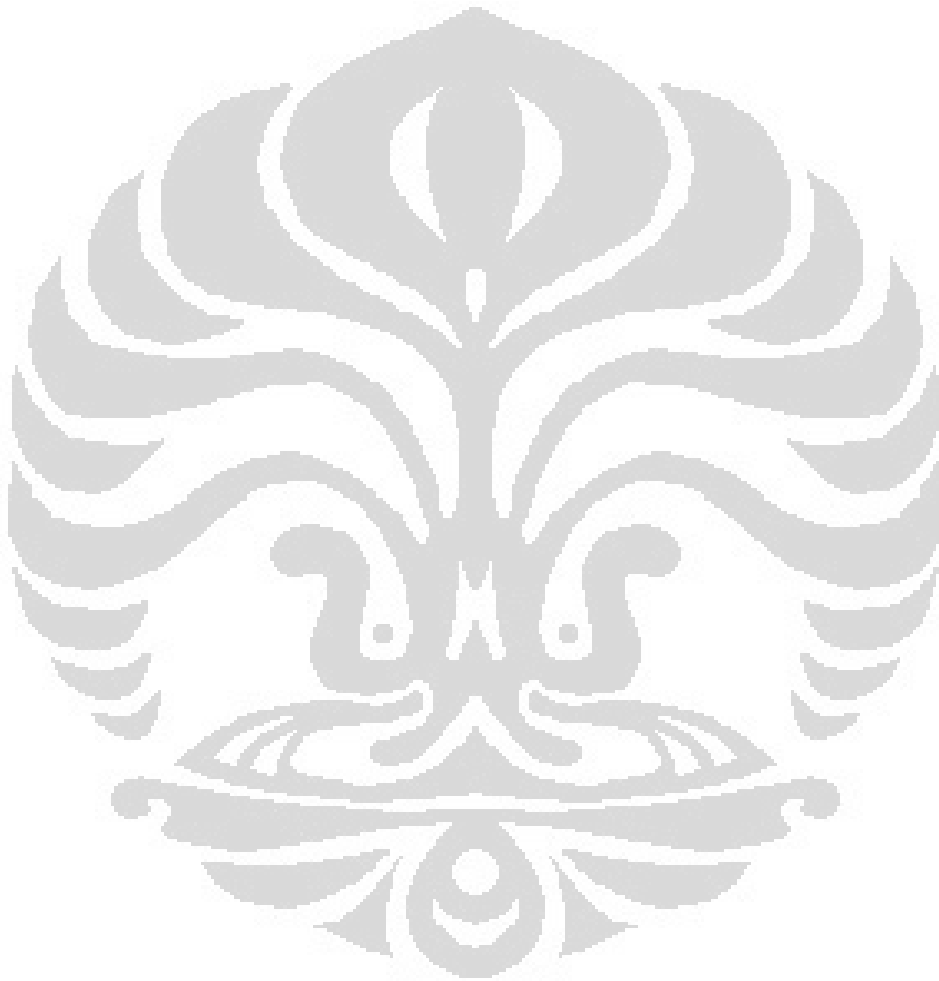
# Static nanotube

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 evdwl
thermo_modify temp mobile
dump 1 all atom 10000 dump.temp273_10atm
run 1000000



LAMPIRAN 2

Tipikal LAMMPS data file untuk menentukan konfigurasi awal untuk perhitungan adsorpsi hidrogen :

```
# Lammps input file for carbon nanotube
376 atoms
8 bonds
0 angles
0 dihedrals
0 impropers

2 atom types
1 bond types

-10.000 9.000 xlo xhi
-9.000 13.000 ylo yhi
-19.000 23.000 zlo zhi

Masses

1 1.0
2 12.0

Atoms

1 1 1 1.0 -7.279 -4.122 -16.567
2 2 1 1.0 -7.279 -4.122 -13.567
3 3 1 1.0 -7.279 -4.122 -10.567
4 4 1 1.0 -7.279 -4.122 -7.567
.....
13 5 1 -1.0 -6.539 -4.122 -4.567
14 6 1 -1.0 -6.539 -1.122 -16.567
15 7 1 -1.0 -6.539 -1.122 -13.567
16 8 1 -1.0 -6.539 -1.122 -10.567
17 9 2 0.0 6.770 0.000 0.000
18 9 2 0.0 6.623 1.408 0.000
19 9 2 0.0 6.439 2.092 1.228
20 9 2 0.0 5.863 3.385 1.228
21 9 2 0.0 5.477 3.980 0.000
22 9 2 0.0 4.530 5.031 0.000
.....
368 9 2 0.0 1.408 -6.623 20.876
```

369	9	2	0.0	2.092	-6.439	19.648
370	9	2	0.0	3.385	-5.863	19.648
371	9	2	0.0	3.980	-5.477	20.876
372	9	2	0.0	5.031	-4.530	20.876
373	9	2	0.0	5.477	-3.980	19.648
374	9	2	0.0	6.185	-2.754	19.648
375	9	2	0.0	6.439	-2.092	20.876
376	9	2	0.0	6.733	-0.708	20.876

Bonds

1	1	1	9
2	1	2	10
3	1	3	11
4	1	4	12
5	1	5	13
6	1	6	14
7	1	7	15
8	1	8	16

