



UNIVERSITAS INDONESIA

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

SKRIPSI

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Teknik

AHMAD DZULFAHMI

0706266815

**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 Abdul Jabbar (0706266765). Sehingga harap maklum jika ada beberapa bagian dari buku ini yang memiliki kesamaan.

Nama : Ahmad Dzulfahmi
NPM : 0706266815
Tanda Tangan : 
Tanggal : 24 Januari 2012

HALAMAN PENGESAHAN

Skripsi ini diajukan oleh :
Nama : Ahmad Dzulfahmi
NPM : 0706266815
Program Studi : Teknik Mesin
Judul Skripsi : Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi
Hidrogen pada *Carbon Nanotubes (CNT)*
dengan Variasi Panjang

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

DEWAN PENGUJI

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



Penguji : Dr. Ir. M. Idrus Alhamid

()

Penguji : Dr. Ir. Engkos A. Kosasih, M.T.



Penguji : Dr. Budhy Kurniawan

()

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

()

Ditetapkan di : Depok
Tanggal : 24 Januari 2012

UCAPAN TERIMA KASIH

Segala puji dan syukur, penulis panjatkan ke Hadirat Allah SWT, Zat pengenggam seluruh alam, atas limpahan nikmat iman dan Islam, serta anugerah dan karunia – Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “*Molecular Dynamic Simulation*”. Shalawat dan salam semoga selalu tercurah pada junjungan Nabi Besar Muhammad SAW. Penulisan skripsi ini dilakukan dalam rangka memenuhi salah satu syarat untuk mencapai gelar Sarjana Teknik Jurusan Teknik Mesin di Fakultas Teknik Universitas Indonesia. Penulis menyadari bahwa tanpa bantuan, dukungan, dan bimbingan dari berbagai pihak, baik moral maupun materiil, dari masa perkuliahan hingga pada penyusunan skripsi, sangatlah sulit bagi penulis untuk menyelesaikan skripsi ini. Oleh karena itu, penulis mengucapkan terima kasih kepada:

- (1) Dua orang yang penulis muliakan, Letkol Drs. H. M. Yahdi, M.Ag dan Hanimah, Ayah dan Umi. Serta adik – adik tercinta (Mutiara dan Salsa) yang selalu mendoakan dan mendukung penulis sedari kecil hingga pada detik ini.
- (2) Dr. Ir. Nasruddin, M.Eng, selaku dosen pembimbing yang telah menyediakan waktu, tenaga, dan pikiran untuk mengarahkan penulis dalam penyusunan skripsi ini, serta dukungan dan semangat yang tiada henti hingga akhirnya terwujud skripsi ini.
- (3) Pak Supri, selaku rekan satu tim *Molecular Dynamics*, sekaligus sebagai pengarah teori dalam menyusun skripsi ini.
- (4) Dua sahabat setia skripik, Abdul Jabbar dan Mardi Santoso, tim yang selama satu tahun berjuang bersama untuk *Molecular Dynamics*.
- (5) Teman – teman 2007, khususnya Angkatan 4.5 mesin tingkat atas. Arian Dwi Putra, Ozi, Anton Royanto Ahmad, Arif Gunawan (tetangga kosan) dan D’Kampretz yang selalu ada di kala senang maupun susah.
- (6) Pak Budhy, Sekretaris Departemen Fisika UI, sebagai pihak yang telah membantu Tim MD mengajarkan dasar MD sekaligus dosen penguji.

- (7) Pak Arif dari LAPAN, sebagai pihak yang telah membukakan jendela Simulasi MD, karena berkat bantuan beliau, piranti Cygwin dan LAMMPS dapat terinstalasi di computer.
- (8) Seluruh karyawan Departemen Teknik Mesin UI, yang telah membantu dan memperlancar segala urusan menyangkut kuliah, skripsi, dan lain – lain.
- (9) Saudari Risty Afriyanti, sebagai pihak yang selalu memberikan semangat dan doa di setiap waktu, sehingga penulis dapat terus semangat dalam membuat buku ini.
- (10) Untuk piranti LAMMPS, Cygwin, Avogadro, dan VMD. Khususnya untuk komunitas milis LAMMPS terutama operator milis, yaitu Steve Plimpton dan Axel.
- (11) Dr. Ir. M. Idrus Alhamid, Dr. Ir. Engkos A. Kosasih, M.T., dan Dr.rer.nat. Agustino Zulys, M.Sc selaku dosen penguji yang telah mencermati dan memberikan arahan pada hasil skripsi ini.

Penulis sadar bahwa kebaikan berbagai pihak tak akan terbalaskan oleh penulis, maka dari itu penulis berharap Allah SWT membalas segala kebaikan semua pihak yang telah membantu dan mendukung terwujudnya skripsi ini. Semoga skripsi ini membawa manfaat bagi kehidupan yang hanya sementara ini.

Depok, 24 Januari 2012

Penulis

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

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

Nama : Ahmad Dzulfahmi
NPM : 0706266815
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 NANOTUBES (CNT) DENGAN VARIASI PANJANG**

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



(Ahmad Dzulfahmi)

ABSTRAK

Nama : Ahmad Dzulfahmi
Program Studi : Teknik Mesin
Judul : Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotube (CNT)* dengan Variasi Panjang

Kelangkaan bahan bakar fosil dan pemanasan global langsung mengarahkan perhatian pada pencarian bahan bakar alternatif. Bahan bakar alternatif secara luas diharapkan bahwa penggunaan karbon bebas pembawa energi dapat membalikkan fenomena rumah kaca. Hidrogen dianggap sebagai bahan bakar alternatif ideal untuk banyak pengubah energi karena memiliki pembakaran alami yang bersih dan sebagai pembawa energi yang efisien mengurangi dampak terhadap lingkungan. Meskipun hidrogen memiliki keuntungan yang signifikan, hidrogen pun memiliki kekurangan dalam pemanfaatannya. Masalahnya adalah biaya produksi dan karakteristik penyimpanan. Karakteristik penyerapan hidrogen khusus oleh CNT (*Carbon Nanotubes*) membuat CNT sedikit lebih cocok sebagai tempat penyimpanan hidrogen. Tulisan ini membuat sebuah kasus simulasi molekuler adsorpsi hidrogen pada CNT. Simulasi ini mengidentifikasi pengaruh variasi panjang CNT terhadap kuantitas jumlah hidrogen yang masuk ke dalam CNT.

Kata Kunci :

Hidrogen, adsorpsi, *Carbon Nanotubes (CNT)*

ABSTRACT

Name : Ahmad Dzulfahmi
Major : Mechanical Engineering
Title : Molecular Dynamics Simulation Hydrogen Adsoption in *Carbon Nanotubes (CNT)* with Length Variations

The scarcity of fossil fuels and global warming have directed attention towards the search of alternative fuels. It is widely hoped that the use of carbon-free energy carriers could reverse the greenhouse phenomenon. Hydrogen is considered as an ideal alternative fuel for many energy converters because of its clean-burning nature and efficient energy carrier with a significantly reduced impact on the environment. Although hydrogen possesses significant advantages, it also exhibits major drawbacks in its utilization. The probems are production costs and storage characteristics. The special hidrogen adsorbing characteristics of carbon nanomaterials make them rather suited as hidrogen storage devices. This paper make a case that molecular simulation of hidrogen adsorbtion with variation of CNT length. It is identify the influence of CNT length to number quantity of hidrogen inside to CNT.

Key words :
Hydrogen, adsorption, *Carbon Nanotubes (CNT)*

DAFTAR ISI

HALAMAN PERNYATAAN ORISINALITAS.....	ii
HALAMAN PENGESAHAN.....	iii
UCAPAN TERIMA KASIH.....	iv
HALAMAN PERNYATAAN PERSETUJUAN PUBLIKASI TUGAS AKHIR UNTUK KEPENTINGAN AKADEMIS	vi
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR	xiii
DAFTAR TABEL.....	xv
DAFTAR LAMPIRAN.....	xvi
BAB 1 PENDAHULUAN	1
1.1 LATAR BELAKANG.....	1
1.2 PERUMUSAN MASALAH.....	4
1.3 TUJUAN PENELITIAN	4
1.4 BATASAN MASALAH	4
1.5 METODOLOGI PENELITIAN.....	5
1.6 SISTEMATIKA PENELITIAN.....	5
BAB 2 TINJAUAN PUSTAKA	7
2.1 ADSORPSI HIDROGEN.....	7
2.1.1 Jenis – Jenis Adsorpsi	7
2.1.1.1 Adsorpsi Fisika	7
2.1.1.2 Adsorpsi Kimia.....	8
2.1.2 Keseimbangan Adsorpsi	9
2.1.2.1 Adsorpsi Isotermal.....	10
2.1.2.2 Adsorpsi Isobar	10
2.1.2.3 Adsorpsi Isosterik	11
2.1.3 Metode Pengujian Adsorpsi	12

2.1.3.1	Metode Gravimetrik.....	12
2.1.3.2	Metode Volumetrik.....	14
2.2	HIDROGEN	15
2.2.1	Penyimpanan Hidrogen.....	16
2.3	<i>CARBON NANOTUBES (CNT)</i>	18
2.3.1	Jenis-Jenis Nanotube <i>Carbon Nanotubes</i>	19
2.3.1.1	Single-walled carbon nanotubes (SWCNT)	19
2.3.1.2	Multi-walled carbon nanotubes (MWCNT)	20
2.3.2	Sifat-Sifat Nanotube Karbon.....	21
2.4	Dinamika Molekul.....	23
2.4.1	Ensemble	24
2.4.1.1	Ensemble Mikrokanonikal (E,V,N).....	25
2.4.1.2	Ensemble Kanonikal (T,V,N).....	25
2.4.1.3	Ensemble Isobarik Isothermal	26
2.4.2	MEKANIKA KLASIK	26
2.4.3	MEKANIKA STATISTIK.....	26
2.4.3.1	Energi Total	27
2.4.3.2	Temperatur.....	27
2.4.3.3	Tekanan.....	28
2.4.3.4	Distribusi Kecepatan.....	28
2.4.3.5	Entalphi.....	29
2.4.4	Model Interaksi Antar Molekul.....	29
2.4.4.1	Potensial Lennard Jones.....	30
2.4.4.2	Gaya Antar Molekul	31
2.4.4.3	Gaya Van Der Waals	32
2.4.5	Pemotongan Potensial	33
2.4.6	Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit	33
2.4.6.1	Algoritma Verlet	34

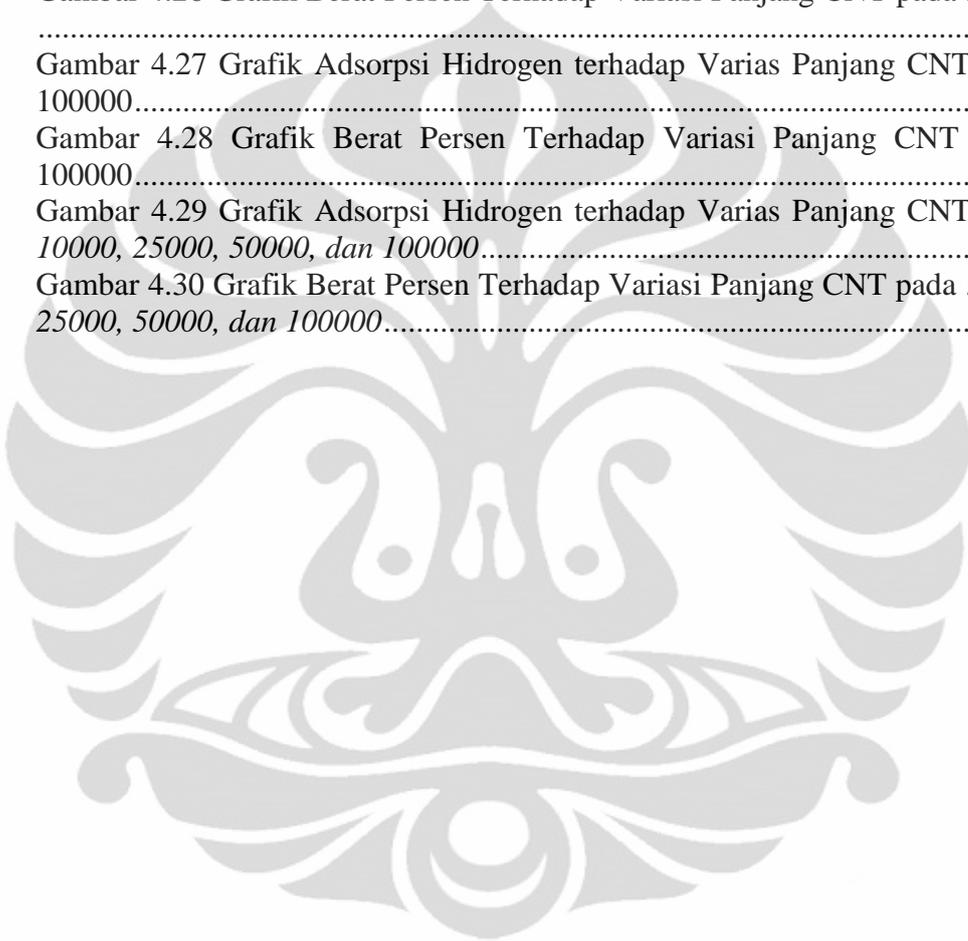
2.4.6.2	Algoritma Leap-Frog	35
BAB 3	METODOLOGI PENELITIAN.....	37
3.1	KOMPONEN SIMULASI	37
3.1.1	LAMMPS	37
3.1.2	Cygwin	37
3.1.3	Avogadro.....	38
3.1.4	VMD (Visualisasi Molekular Dynamics)	38
3.2	PROSEDUR SIMULASI	38
3.2.1	INISIALISASI KOORDINAT	38
3.2.1.1	Pembentukan Hidrogen.....	39
3.2.1.2	Pembentukan CNT.....	39
3.2.1.3	Penggabungan Koordinat.....	40
3.2.2	Pembentukan <i>Input Script</i>	41
3.2.3	<i>Running Program</i>	47
3.2.4	Visualisasi	47
BAB 4	HASIL DAN ANALISA.....	49
4.1	HASIL	49
4.1.1	<i>Run 10000</i>	49
4.1.1.1	Panjang CNT 1.122 nm	49
4.1.1.2	Panjang CNT 3 nm	50
4.1.1.3	Panjang CNT 5 nm	51
4.1.1.4	Panjang CNT 8 nm	52
4.1.2	<i>Run 25000</i>	53
4.1.2.1	Panjang CNT 1.122 nm	53
4.1.2.2	Panjang CNT 3 nm	54
4.1.2.3	Panjang CNT 5 nm	54
4.1.2.4	Panjang CNT 8 nm	55
4.1.3	<i>Run 50000</i>	55
4.1.3.1	Panjang CNT 1.122 nm	55

4.1.3.2	Panjang CNT 3 nm	56
4.1.3.3	Panjang CNT 5 nm	56
4.1.3.4	Panjang CNT 8 nm	57
4.1.4	<i>Run</i> 100000	58
4.1.4.1	Panjang CNT 1.122 nm	58
4.1.4.2	Panjang CNT 3 nm	58
4.1.4.3	Panjang CNT 5 nm	59
4.1.4.4	Panjang CNT 8 nm	59
4.2	ANALISA	60
4.2.1	<i>Run</i> 10000	60
4.2.2	<i>Run</i> 25000	62
4.2.3	<i>Run</i> 50000	63
4.2.4	<i>Run</i> 100000	64
BAB 5 KESIMPULAN DAN SARAN		68
5.1	KESIMPULAN	68
5.2	SARAN	69
DAFTAR PUSTAKA		70
LAMPIRAN		73

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi	9
Gambar 2.2 Grafik Data yang Diperoleh pada Adsorpsi Isotermal	10
Gambar 2.3 Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi Isobar	11
Gambar 2.4 Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi <i>Isostere</i>	11
Gambar 2.5 Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan <i>Two Beam Balance</i>	13
Gambar 2.6 Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan <i>Magnetic Suspension</i>	13
Gambar 2.7 Skema Metode Volumetrik	14
Gambar 2.8 Single Walled CNTs.....	19
Gambar 2.9 Multi-Walled CNTs.....	20
Gambar 2.10 Jenis CNTs berdasarkan sudut chiral	21
Gambar 2.11 Distribusi Maxwell-Boltzman	29
Gambar 2.12 Grafik Potensial LJ.....	31
Gambar 3.1 Pembentukan Hidrogen pada Avogadro	39
Gambar 3.2 Visualisasi pada VMD	40
Gambar 3.3 Contoh Hasil Visualisasi	48
Gambar 4.1 Kondisi Awal <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 1,122 nm.....	49
Gambar 4.2 Kondisi Akhir <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 1,122 nm.....	50
Gambar 4.3 Kondisi Awal <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 3 nm.....	50
Gambar 4.4 Kondisi Akhir <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 3 nm.....	51
Gambar 4.5 Kondisi Awal <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 5 nm.....	51
Gambar 4.6 Kondisi Akhir <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 5 nm.....	52
Gambar 4.7 Kondisi Awal <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 8 nm.....	52
Gambar 4.8 Kondisi Akhir <i>Run</i> 1000 dengan Panjang CNT 8 nm.....	53
Gambar 4.9 Kondisi Akhir <i>Run</i> 25000 dengan Panjang CNT 1,122 nm.....	53
Gambar 4.10 Kondisi Akhir <i>Run</i> 25000 dengan Panjang CNT 3 nm.....	54
Gambar 4.11 Kondisi Akhir <i>Run</i> 25000 dengan Panjang CNT 5 nm.....	54
Gambar 4.12 Kondisi Akhir <i>Run</i> 25000 dengan Panjang CNT 8 nm.....	55
Gambar 4.13 Kondisi Akhir <i>Run</i> 50000 dengan Panjang CNT 1,122 nm.....	55
Gambar 4.14 Kondisi Akhir <i>Run</i> 50000 dengan Panjang CNT 3 nm.....	56
Gambar 4.15 Kondisi Akhir <i>Run</i> 50000 dengan Panjang CNT 5 nm.....	56
Gambar 4.16 Kondisi Akhir <i>Run</i> 50000 dengan Panjang CNT 8 nm.....	57
Gambar 4.17 Kondisi Akhir <i>Run</i> 100000 dengan Panjang CNT 1,122 nm.....	58
Gambar 4.18 Kondisi Akhir <i>Run</i> 100000 dengan Panjang CNT 3 nm.....	58
Gambar 4.19 Kondisi Akhir <i>Run</i> 100000 dengan Panjang CNT 5 nm.....	59
Gambar 4.20 Kondisi Akhir <i>Run</i> 100000 dengan Panjang CNT 8 nm.....	59
Gambar 4.21 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada <i>run</i> 10000.....	60

Gambar 4.22 Grafik Berat Porsen Terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 10000	61
Gambar 4.23 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 25000.....	62
Gambar 4.24 Grafik Berat Porsen Terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 25000	62
Gambar 4.25 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 50000.....	63
Gambar 4.26 Grafik Berat Porsen Terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 50000	63
Gambar 4.27 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 100000.....	64
Gambar 4.28 Grafik Berat Porsen Terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 100000.....	64
Gambar 4.29 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 10000, 25000, 50000, dan 100000.....	65
Gambar 4.30 Grafik Berat Porsen Terhadap Variasi Panjang CNT pada <i>run</i> 10000, 25000, 50000, dan 100000.....	66



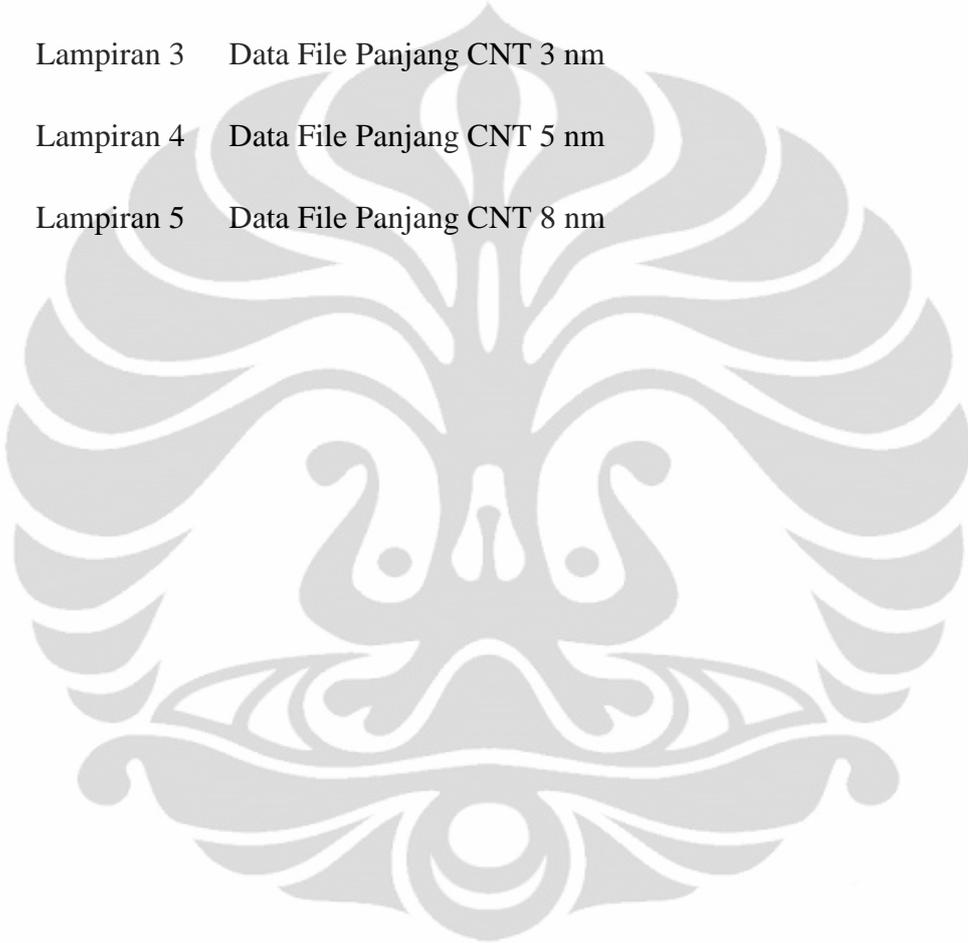
DAFTAR TABEL

Tabel 4.1 Tabel Jumlah Hasil Hidrogen yang Teradsorpsi dengan Empat Variasi Panjang CNT.....	60
--	----



DAFTAR LAMPIRAN

- Lampiran 1 Input File Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada CNT dengan menggunakan piranti lunak LAMMPS
- Lampiran 2 Data File Panjang CNT 1.122 nm
- Lampiran 3 Data File Panjang CNT 3 nm
- Lampiran 4 Data File Panjang CNT 5 nm
- Lampiran 5 Data File Panjang CNT 8 nm



DAFTAR ISTILAH DAN SIMBOL

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

BAB 1

PENDAHULUAN

1.1 LATAR BELAKANG

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

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

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

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

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

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

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

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).Simulasi Dinamika Molekuler: Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi. Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin(SNTTM). Universitas Sriwijaya: Palembang]

1.2 PERUMUSAN MASALAH

Dalam mendapatkan kondisi optimal dari tempat penyimpanan hidrogen, diperlukan sebuah parameter yang sesuai dengan karakteristik adsorpsi hidrogen, sehingga dapat meningkatkan jumlah hidrogen yang diserap. Pada tulisan ini, simulasi dilakukan dengan memvariasikan panjang *Carbon Nanotubes (CNT)*, hal ini untuk mengetahui seberapa besar pengaruh panjang CNT dalam proses penyerapan hidrogen.

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 panjang CNT.
4. Mengetahui seberapa besar pengaruh panjang CNT terhadap adsorpsi hidrogen.

1.4 BATASAN MASALAH

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

1. Menghitung jumlah hidrogen yang diadsorpsi oleh CNT dengan konfigurasi yang berbeda.
2. Simulasi dilakukan dengan temperatur sistem 10 K, jumlah molekul hidrogen sebanyak dua puluh, chiralitas (10,10), panjang *Carbon Nanotube (CNT)* divariasikan pada panjang 1.122, 3, 5, 8, dan 10 nanometer nm.
3. Proses running dilakukan pada empat sesi, dengan nilai *run* 10000, 25000, 50000, dan 100000.
4. Pada proses simulasi temperatur sistem dijaga untuk selalu konstan (T_{awal} sama dengan T_{akhir})

5. Pada simulasi, untuk potensial dan gaya antar molekul digunakan model potensial Lennard-Jones berdasarkan interaksi Coulomb.
6. Pendekatan teori gas seharusnya menggunakan pendekatan teori gas riil, namun pada simulasi ini menggunakan pendekatan teori gas ideal. Dikarenakan keterbatasan dalam simulasi.
7. Membandingkan jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dengan konfigurasi yang berbeda.

1.5 METODOLOGI PENELITIAN

Penelitian dilakukan dengan langkah-langkah sebagai berikut:

1. Studi literatur

Tahap pengumpulan literature mengenai termodinamika statistik, dinamika molekul, potensial lennard jones, Carbon nanotube (CNT), hidrogen, dan penyimpanan hidrogen pada CNT.

2. Perancangan perangkat lunak dalam simulasi dinamika molekuler

Perangkat lunak yang digunakan adalah LAMMPS (*Large Scale Atomic/Molecular Massively Paralel Simulator*)

3. Menjalankan simulasi dengan parameter yang telah ditentukan
4. Analisis hasil simulasi
5. Penulisan laporan

1.6 SISTEMATIKA PENELITIAN

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

Bab I Pendahuluan

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

Bab II Tinjauan Pustaka

Bab ini menjelaskan landasan teori yang digunakan dalam penelitian, yaitu dasar persamaan gerak, mekanika statistik, dasar-dasar dinamika molekul,

Carbon nanotube (CNT), model interaksi antarmolekul, penyimpanan hidrogen dalam CNT.

Bab III Perancangan Simulasi Dinamika Molekul

Bab ini membahas

Bab IV Hasil dan Pembahasan

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

Bab V Kesimpulan dan saran

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

BAB 2

TINJAUAN PUSTAKA

2.1 ADSORPSI HIDROGEN

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

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

2.1.1 Jenis – Jenis Adsorpsi

Berdasarkan interaksi molekular antara permukaan adsorben dengan adsorbat, adsorpsi dibagi menjadi dua bagian, yaitu adsorpsi fisika dan adsorpsi kimia. <http://meingstein.wordpress.com/>

2.1.1.1 Adsorpsi Fisika

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

Adsorpsi ini berlangsung cepat, dapat membentuk lapisan jamak (*multilayer*), dan dapat bereaksi balik (*reversible*), karena energi yang dibutuhkan

relatif rendah. Energi aktivasi untuk terjadinya adsorpsi fisika biasanya adalah tidak lebih dari 1 kkal/gr-mol, sehingga gaya yang terjadi pada adsorpsi fisika termasuk lemah. Adsorpsi fisika dapat berlangsung di bawah temperatur kritis adsorbat yang relatif rendah sehingga panas adsorpsi yang dilepaskan juga rendah yaitu sekitar 5 – 10 kkal/gr-mol gas, lebih rendah dari panas adsorpsi kimia.

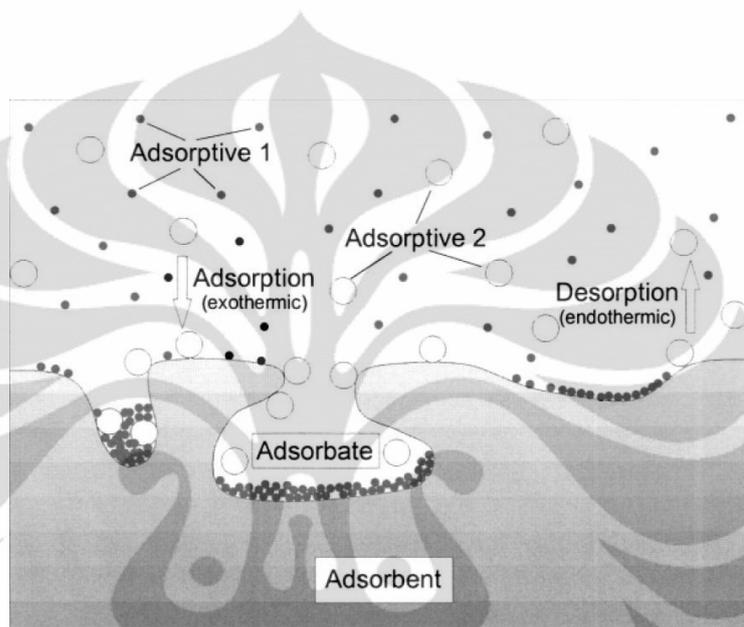
2.1.1.2 Adsorpsi Kimia

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

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

Jika interaksi antara padatan dan molekul yang mengembun relatif lemah, maka proses ini disebut adsorpsi fisik. Walaupun adsorpsi biasanya dikaitkan dengan perpindahan dari suatu gas atau cairan ke suatu permukaan padatan, perpindahan dari suatu gas ke suatu permukaan cairan juga terjadi. Substansi yang terkonsentrasi pada permukaan didefinisikan sebagai adsorbat dan material dimana adsorbat terakumulasi didefinisikan sebagai adsorben. Proses lepasnya adsorbat dari permukaan adsorben disebut sebagai proses desorpsi. Gambar 2.1.1 memberikan gambaran yang lebih jelas mengenai definisi adsorpsi, desorpsi, adsorben, adsorbat, dan adsorptif. Pada Gambar 2.1.1 terlihat bahwa adsorbat

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



Gambar 2.1 Nomenklatur Adsorpsi

2.1.2 Kesetimbangan Adsorpsi

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

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

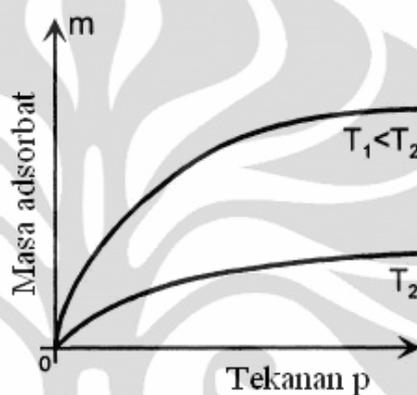
Dimana, x/m adalah jumlah adsorbat yang terserap per unit massa adsorben pada tekanan equilibrium dan pada temperatur adsorpsi.

Adsorpsi equilibrium dapat didekati dalam tiga cara, yaitu:

2.1.2.1 Adsorpsi Isotermal

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

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



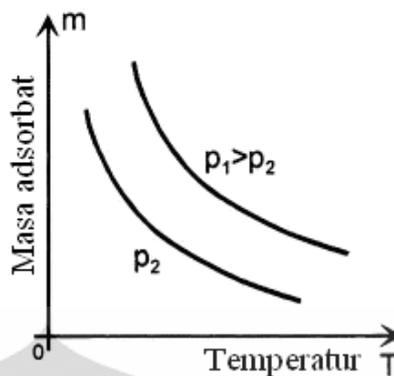
Gambar 2.2 Grafik Data yang Diperoleh pada Adsorpsi Isotermal

(Keller, Jurgen., 2005)

2.1.2.2 Adsorpsi Isobar

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

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



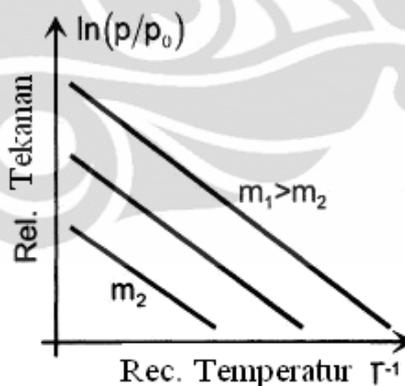
Gambar 2.3 Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi Isobar

(Keller, Jurgen., 2005)

2.1.2.3 Adsorpsi Isosterik

Pada adsorpsi isosterik dimana jumlah adsorbat yang terserap per unit massa adsorben adalah konstan dan temperatur divariasikan sehingga tekanan menjadi fungsi yang sangat esensial untuk menjaga x/m tetap konstan (Bansal, R.C. dkk., 2005).

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



Gambar 2.4 Grafik Data yang Diperoleh Pada Adsorpsi *Isostere*

(Keller, Jurgen., 2005)

Data eksperimen adsorpsi yang berupa jumlah adsorbat yang terserap pada adsorben biasanya dihasilkan dari proses adsorpsi isothermal, hal tersebut

dikarenakan investigasi proses adsorpsi pada temperatur konstan adalah cara atau metode yang paling mudah. Selain itu, analisis teoritis data adsorpsi untuk asumsi pada pemodelan biasanya juga menggunakan data adsorpsi isotermal (Bansal, R.C. dkk., 2005).

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

2.1.3 Metode Pengujian Adsorpsi

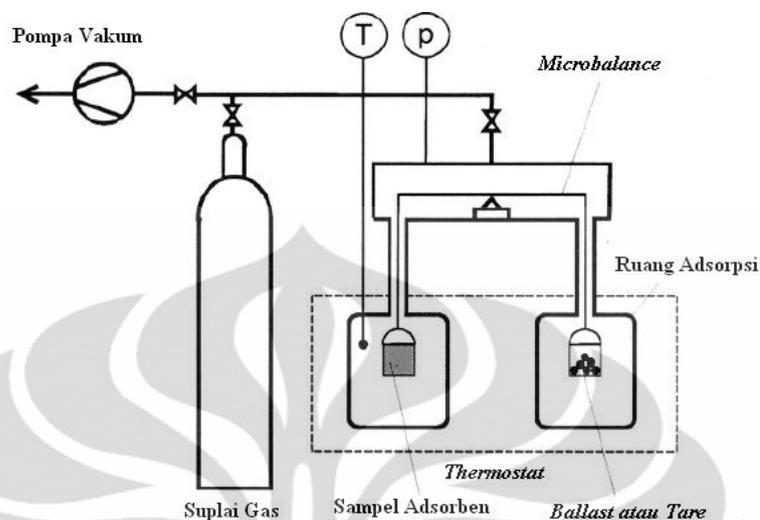
Terdapat empat metode pengukuran penyerapan adsorpsi, yaitu: metode *carrier gas*, metode volumetrik, metode gravimetrik dan metode kalorimetrik. Empat metode pengukuran penyerapan adsorpsi tersebut telah digunakan di berbagai negara dan telah diakui secara internasional (Keller, J.U et al, 2002). Dalam tinjauan pustaka ini hanya akan dibahas dua buah metode yang paling banyak digunakan yaitu metode gravimetrik dan volumetrik.

2.1.3.1 Metode Gravimetrik

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

Preparasi sampel pengujian menggunakan metode gravimetrik mutlak dilakukan untuk mendapatkan pengujian yang optimum. Preparasi sampel dilakukan dengan *degassing* sampel untuk mendapatkan massa kering sampel serta temperatur, tekanan dan waktu untuk mendapatkan data pengujian yang valid (Keller, J.U et al, 2002). Alat uji adsorpsi menggunakan metode gravimetrik membutuhkan investasi yang cukup besar, karena untuk memiliki TGA dengan

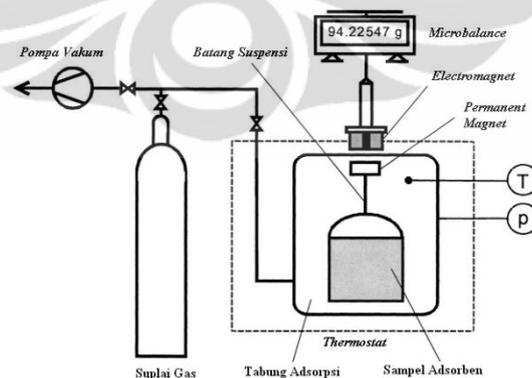
keakurasaan tinggi harus menyediakan jutaan dollar (Rouquerol, J et al, 1998). Skematik *Thermograph Microbalance Aparatus* sebagai berikut:



Gambar 2.5 Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan *Two Beam Balance*

(Keller, Jurgen., 2005)

Pada Gambar 2.11 terlihat skema metode gravimetrik dengan menggunakan *Two Beam Balance*, dimana sampel adsorben diletakkan di dalam tabung, dan selanjutnya ketika massa adsorben bertambah karena akibat terserapnya adsorbat, maka *microbalance* langsung membaca perubahan berat sampel adsorben tersebut.



Gambar 2.6 Skema Metode Gravimetrik dengan Menggunakan *Magnetic Suspension*

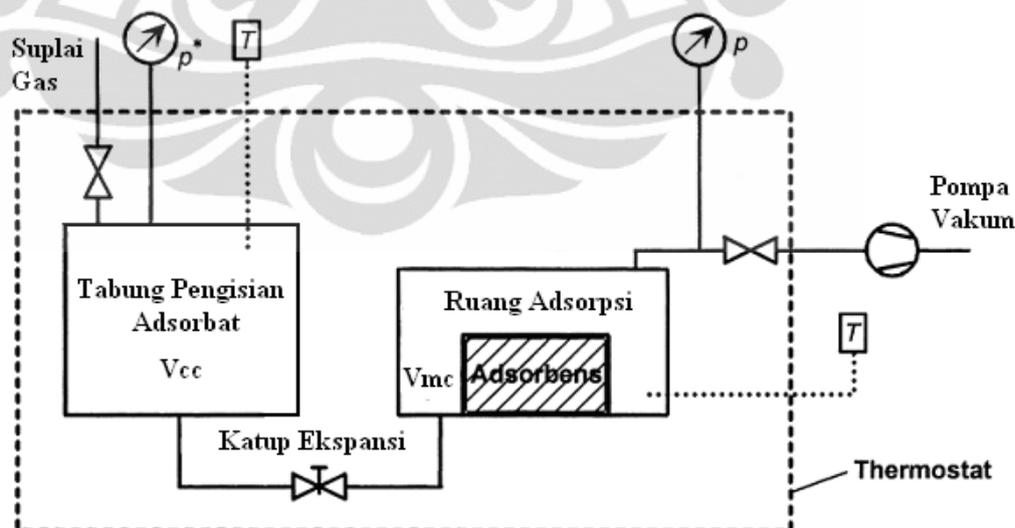
(Keller, Jurgen., 2005)

Pada Gambar 2.12 terlihat skema metode gravimetrik dengan menggunakan *Magnetic Suspension Balance*, dimana sampel adsorben diletakkan di dalam tabung dan selanjutnya ketika massa adsorben bertambah karena akibat terserapnya adsorbat, maka medan magnet juga akan berubah disebabkan karena adanya perubahan jarak antara *permanent magnet* dengan *electromagnet*.

2.1.3.2 Metode Volumetrik

Dasar pengukuran metode volumetrik adalah tekanan, volume, dan temperatur. Teknik pengukuran adsorpsi dengan metode volumetrik sekarang ini lebih sering digunakan, karena sederhana dan efektif selama alat ukur tekanan dan temperatur dapat memberikan informasi yang dibutuhkan pada proses adsorpsi (Rouquerol, J et al, 1998). Skematik metode volumetrik terlihat pada Gambar 2.1.7.

Data pengukuran pada metode volumetrik adalah tekanan dan temperatur, dimana data diukur saat adsorbat masuk ke tempat diletakkannya adsorben (adsorption bulb). Setelah keseimbangan adsorpsi terjadi, jumlah adsorbat yang terserap dihitung dari perubahan tekanan yang terjadi.



Gambar 2.7 Skema Metode Volumetrik

(Keller, Jurgen., 2005)

Peralatan untuk pengukuran adsorpsi equilibrium dengan menggunakan metode volumetrik pada dasarnya terdiri atas *storage vessel* dan *adsorption chamber* yang keduanya dihubungkan dengan menggunakan *tube*. Kedua tabung tersebut harus ditempatkan dalam sebuah wadah yang dilengkapi dengan *thermostat*, sehingga 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., 2005).

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

1. Volume efektif alat uji harus diketahui.
2. Alat uji harus dapat mengukur temperatur dari gas yang menjadi adsorbat.
3. Keakuratan alat uji untuk mengukur perubahan tekanan pada metode volumetrik adalah hal yang utama.
4. Kesetimbangan adsorpsi terjadi apabila tekanan relatif mencapai $p/p_0 = 1$, maka pengukuran berakhir.
5. Perhitungan adsorbat yang terserap dapat diukur menggunakan persamaan gas ideal.

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

2.2 HIDROGEN

Hidrogen pertama kali ditemukan pada tahun 1776 oleh Henry Cavendish dan dinamai oleh Lavoisier dengan bahasa Yunani, dengan menggunakan kata *hydro* yang berarti air dan *genes* yang berarti generator. Hidrogen merupakan

Universitas Indonesia

elemen pertama dari tabel periodik kimia dan merupakan elemen yang paling melimpah di bumi. (Mohsin, 2004)

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

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

2.2.1 Penyimpanan Hidrogen

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

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

2.3 *CARBON NANOTUBES (CNT)*

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.

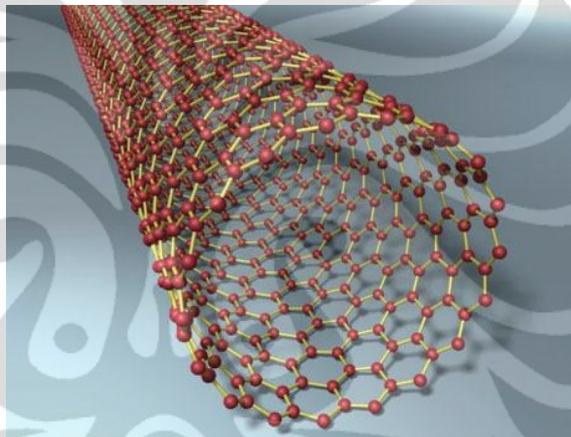
Carbon nanotube yang ditemukan Profesor Iijima ini merupakan suatu rantai atom karbon yang terikat di antara satu sama lain secara heksagonal (segi enam) berbentuk silinder tak pejal yang mempunyai diameter 1-2

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.

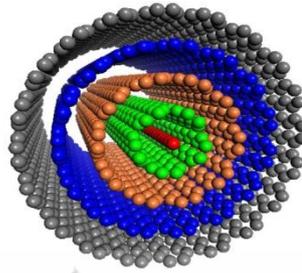
2.3.1.1 *Single-walled carbon nanotubes (SWCNT)*



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.

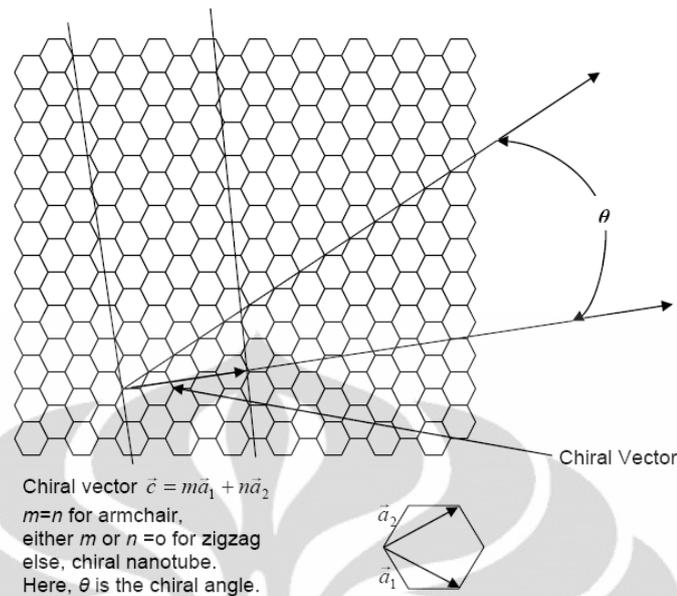
2.3.1.2 *Multi-walled carbon nanotubes (MWCNT)*



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.

Dalam membentuk CNT maka terkait pula dengan chirality, chirality merupakan arah gulungan sebelum CNT digulung, dimana arah tersebut merupakan resultan dari dua satuan yang disebutkan dalam chirality. Jika dilihat berdasarkan penggulungannya, jenis CNT terbagi menjadi ; (1) armchair, (2) zigzag, (3) chiral.



Gambar 2.10 Jenis CNTs berdasarkan sudut chiral

Gambar 2.3.3 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 Nanotube Karbon

Dari hasil karakterisasi yang dilakukan Iijima menunjukkan bahwa CNT merupakan fiber terkuat yang pernah dibuat sampai saat ini. Konduktivitas listriknya jauh melampaui tembaga, sedangkan kemampuan menghantarkan panas lebih tinggi dari berlian. CNT mampu menghantarkan energi jauh lebih baik dibandingkan dengan seluruh material penghantar energi yang ada. Keunikan

lainnya adalah CNT ternyata memiliki daya tahan terhadap temperatur tinggi serta lebih ringan dari aluminium.

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

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

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

Metode *Molecular Dynamics* atau dinamika molekuler dan Monte Carlo memiliki keunggulan dan kerugian relatif yang tergantung pada sistem dan sifat yang disimulasikan. Selain itu MD adalah metode deterministik yang memecahkan untuk persamaan gerak molekul individu dan terlihat pada evolusi waktu dari sistem, sedangkan konvensional Monte Carlo adalah stokastik dan sampel satu dari set gerakan acak dari atom /molekul, memilih atau menolak atom /molekul berdasarkan konfigurasi energi. Monte Carlo biasanya bebas terhadap waktu. Terlalu komputasi metode ini memiliki manfaat relatif dan kerugian

didasarkan pada system di tangan. Dalam MD, posisi setiap atom /molekul ditentukan dengan memecahkan persamaan gerak, sedangkan dalam kasus Monte Carlo, gerakan adalah sampe berpeluang dan sebab itu umumnya melibatkan sedikit waktu komputasi. Namun, jika ada sejumlah besar penolakan dalam gerakan stokastik (misalnya cairan padat), yang meningkatkan waktu komputasi.

Monte Carlo lebih cocok untuk simulasi cairan dengan kepadatan yang lunak atau rendah, sedangkan MD menguntungkan dalam kasus cairan kepadatan lebih tinggi seperti gas di bawah tekanan tinggi atau cairan. Selanjutnya, MD dapat digunakan untuk menghitung sifat-sifat dinamis, sementara konvensional Monte Carlo tidak dapat menentukan properti ini. Monte Carlo Kanonikal besar dapat menangani sebuah variabel jumlah partikel, dimana biasanya MD diimplementasikan dengan jumlah konstan dari partikel. Satu kesamaan dalam kedua metode ini adalah penggunaan fungsi potensial. Keakuratan hasil diprediksi oleh Monte Carlo atau MD tergantung pada akurasi dari fungsi potensial. Oleh karena itu perlu berhati-hati dalam memilih fungsi potensial.

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

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

2.4.1 Ensemble

Suatu ensemble adalah koleksi dari keadaan sistem yang mungkin yang memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis sama (Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L.)

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-isotermal, 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 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 \bar{F} , maka partikel itu akan mengalami percepatan sebesar

$$\mathbf{a} = \frac{\bar{F}}{m} \quad (2.5)$$

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

Hukum Newton ini memberikan konsekuensi hukum kekekalan momentum. Dalam suatu sistem terisolasi, momentum masing-masing molekul dapat berubah-ubah akibat interaksi satu sama lain, namun momentum total tidak akan berubah. Momentum total sistem dapat diamati untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal.

$$\frac{d}{dt}(\sum_i \mathbf{p}_i) = \frac{d}{dt}(\sum_i m_i \mathbf{v}_i) = \mathbf{0} \quad (2.6)$$

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

2.4.3 MEKANIKA STATISTIK

Mekanika statistik atau termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonversikan informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala

makroskopik (Ercolessi, Furio, 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

2.4.3.1 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.

$$U = \sum_i U_i(\mathbf{R}_N) \quad (2.7)$$

\mathbf{R}^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $\mathbf{R}^N = \{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N\}$.

Energi kinetik sistem adalah jumlah dari energi kinetik setiap molekul.

$$K = \sum_i K_i(\mathbf{v}_i) \quad (2.8)$$

Dengan $K_i = \frac{1}{2} m_i (\mathbf{v}_i)^2 = \frac{p_i^2}{2m_i}$

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.

2.4.3.2 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

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

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

2.4.3.3 Tekanan

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

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

Dengan menggunakan hukum Newton kedua,

$$P_x = \frac{1}{A} \frac{d(mv_x)}{dt} \quad (2.10)$$

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.

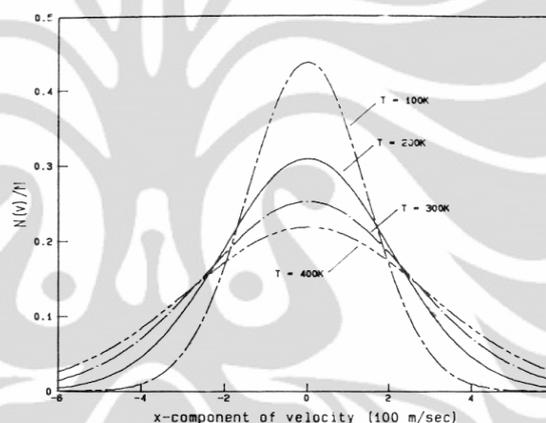
$$\langle P_f \rangle = \frac{1}{3V} \langle \sum_i \sum_j F_{ij} \overline{R_{ij}} \rangle \quad (2.11)$$

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

$$f(v)dv = \frac{1}{c} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (2.12)$$



Gambar 2.11 Distribusi Maxwell-Boltzman

2.4.3.5 Entalpi

Entalpi didefinisikan sebagai gabungan dari energi total sistem dengan energi aliran

$$H = E + PV \quad (2.13)$$

2.4.4 Model Interaksi Antar Molekul

Model interaksi antar molekul yang diperlukan adalah hukum gaya antar molekul, yang ekuivalen dengan fungsi energi potensial antar molekul. Pemilihan

fungsi energi potensial harus dilakukan sebelum simulasi apa pun dapat dikerjakan.

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

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

Untuk N jumlah atom dalam suatu simulasi maka fungsi energi potensial adalah $U(\mathbf{R}^N)$ di mana \mathbf{R}^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $\mathbf{R}^N = \{\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N\}$. Model energi potensial yang sederhana dan umum digunakan adalah pair-wise, di mana potensial adalah jumlah dari interaksi antara dua molekul yang diisolasikan.

$$U = \sum_i \sum_j U(\mathbf{R}_{ij}); i < j \quad (2.14)$$

2.4.4.1 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:

$$U(\mathbf{R}_{ij}) = k\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (2.15)$$

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

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m}\right)^{m/(n-m)} \quad (2.16)$$

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:

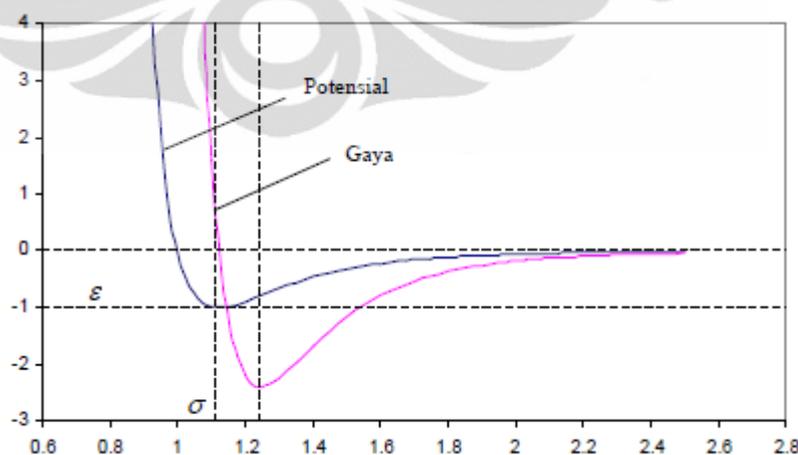
$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^6 \right]$$

2.4.4.2 Gaya Antar Molekul

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

$$F(R_{ij}) = -\frac{d}{dr} U(R_{ij}) = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^7 \right] \quad (2.17)$$

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 Grafik Potensial LJ

Dapat diturunkan untuk masing-masing sumbu:

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

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

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

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

2.4.4.3 Gaya Van Der Waals

Gaya van der Waals dalam ilmu kimia merujuk pada jenis tertentu gaya antar molekul. Istilah ini pada awalnya merujuk pada semua jenis gaya antar molekul, dan hingga saat ini masih kadang digunakan dalam pengertian tersebut, tetapi saat ini lebih umum merujuk pada gaya-gaya yang timbul dari polarisasi molekul menjadi dipol.

Hal ini mencakup gaya yang timbul dari dipol tetap (gaya Keesom), dipol rotasi atau bebas (gaya Debye) serta pergeseran distribusi awan elektron (gaya London).

Gaya van der waals adalah gaya tarik di antara atom atau molekul, gaya ini jauh lebih lemah dibandingkan gaya yang timbul karena ikatan valensi dan besarnya ialah 10^{-7} kali jarak antara atom-atom atau molekul-molekul. Gaya ini menyebabkan sifat tak ideal pada gas dan menimbulkan energi kisi pada kristal molekular. (Pangganti, 2010)

Ada tiga hal yang menyebabkan gaya ini :

- a. Interaksi dwikutub-dwikutub, yaitu tarikan elektrostatis di antara dua molekul dengan moment dwikutub permanen.
- b. Interaksi dwikutub imbasan, artinya dwikutub timbul karena adanya polarisasi oleh molekul tetangga.

- c. Gaya dispersi atau gaya London yang timbul karena dwikutub kecil dan bersifat sekejap dalam atom.

2.4.5 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.

$$U(\mathbf{R}_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] & \mathbf{R}_{ij} \leq R_c \\ 0 & \mathbf{R}_{ij} > R_c \end{cases} \quad (2.18)$$

2.4.6 Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit

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

$$\begin{aligned} \frac{dr_i(t)}{dt} &= v_i(t) \\ \frac{dv_i(t)}{dt} &= \mathbf{a}_i(\mathbf{t}) \end{aligned} \quad (2.19)$$

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).

2.4.6.1 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

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{t}) = \frac{d\mathbf{r}_i(\mathbf{t})}{dt} = \frac{\mathbf{r}_i(\mathbf{t}+\Delta\mathbf{t}) - \mathbf{r}_i(\mathbf{t}-\Delta\mathbf{t}) + O((\Delta\mathbf{t})^3)}{2\Delta\mathbf{t}} \quad (2.20)$$

Kelemahan dari algoritma Verlet adalah penanganan kecepatan kurang praktis, karena harus memprediksi posisi berikutnya sebelum dapat menghitung kecepatan

sesaat. Selain itu, posisi sama sekali tidak ditentukan oleh kecepatan pada saat t , maka algoritma ini tidak mudah mempergunakan velocity scaling untuk simulasi pada T konstan.

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

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

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

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:

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

Atau

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

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

$$v_i\left(t + \frac{1}{2}\Delta t\right) = v_i\left(t - \frac{1}{2}\Delta t\right) + \frac{F_i(t)}{m_i}(\Delta t) + \mathbf{O}(\Delta t)^3 \quad (2.21)$$



BAB 3 METODOLOGI PENELITIAN

3.1 KOMPONEN SIMULASI

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

3.1.1 LAMMPS

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

3.1.2 Cygwin

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

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

3.1.3 Avogadro

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

3.1.4 VMD (Visualisasi Molekular Dynamics)

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

3.2 PROSEDUR SIMULASI

3.2.1 INISIALISASI KOORDINAT

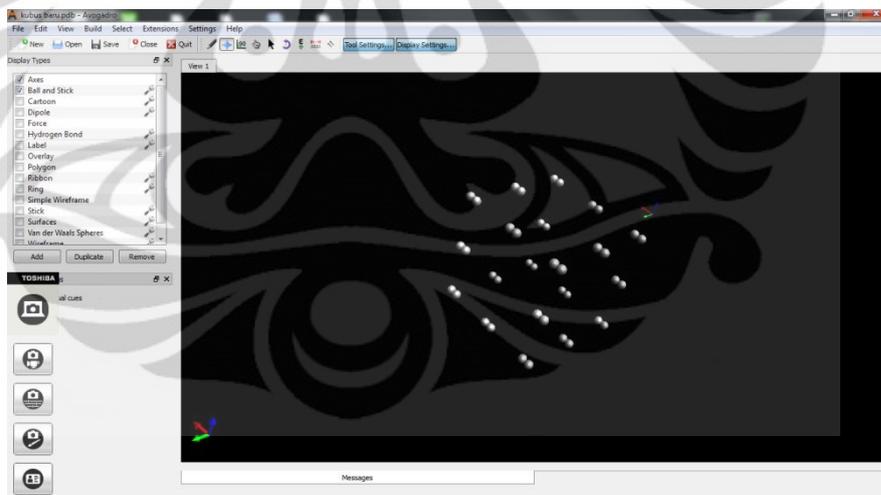
Sebelum melakukan simulasi, maka harus diketahui seberapa banyak jumlah dan jenis atom ataupun molekul pada simulasi yang akan dilakukan. Selain itu bentuk CNTs yang digunakan dan posisi koordinat atom – atom pada saat awal sebelum melakukan simulasi atau saat $t = 0$. Dalam menginisialisasi koordinat,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

3.2.1.1 Pembentukan Hidrogen

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

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

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

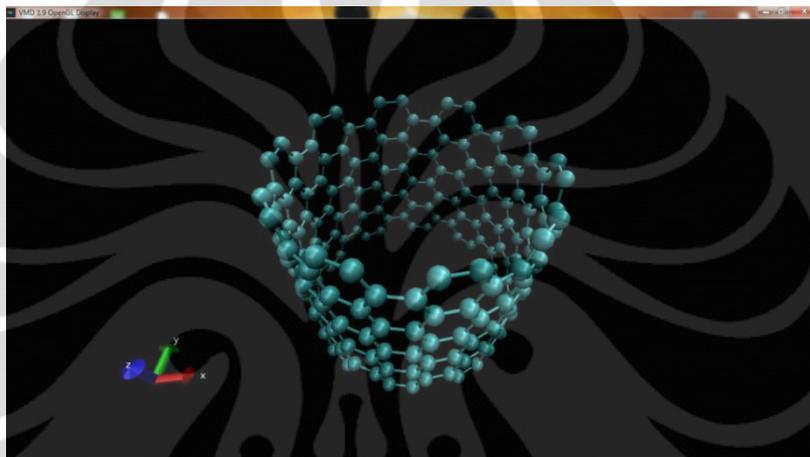


Gambar 3.1 Pembentukan Hidrogen pada Avogadro

3.2.1.2 Pembentukan CNT

Dalam simulasi ini, pembentukan posisi koordinat CNT dilakukan pada piranti VMD. Ada beberapa jenis parameter pada VMD untuk membentuk

koordinat CNT, di antaranya adalah chirality dan panjang CNT. Jenis chirality yang dibuat adalah jenis armchair (10,10). Sedangkan panjang yang ditetapkan dibuat dalam tiga variasi, yaitu variasi panjang 1.122, 5, dan 8 nm. Setelah mengatur parameter yang dibutuhkan VMD dalam membentuk CNT, maka dilakukanlah generate CNT, sehingga didapatkanlah koordinat – koordinat atom CNT secara otomatis dan didapatkan hasil seperti gambar di bawah ini:



Gambar 3.2 Visualisasi pada VMD

3.2.1.3 Penggabungan Koordinat

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

3.2.2 Pembentukan *Input Script*

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

1. *Initialization*, merupakan pengaturan parameter awal dalam simulasi. Parameter – parameter yang perlu ditentukan dalam pengaturan awal yaitu unit, dimensi, boundary, atom_style, neighbor, dan neigh_modify.

Contohnya :

```
dimension      3
boundary      p p p

atom_style     full
neighbor       0.3 bin
neigh_modify   delay 5
```

Dimension menjelaskan tentang jenis dimensi simulasi yang akan kita lakukan, pada simulasi ini tertulis tiga, artinya simulasi kali ini dijalankan dengan tiga dimensi. Boundary merupakan perintah yang menjelaskan tentang sifat batasan dalam kotak simulasi, sifat boundary kali ini (p p p) menjelaskan bahwa sifat boundary pada batas x, y, dan z adalah periodik (*periodic*) artinya atom dalam simulasi dapat menembus batas boundary sehingga dapat berpindah dari sisi satu ke sisi lainnya. Atom style di atas menggunakan jenis full, artinya jenis kuantitas yang perlu dicantumkan adalah molekuler dan muatan.

2. Atom definition, merupakan bagian pengaturan untuk mendefinisikan jenis atom, jumlah atom, jumlah atom dan molekul, jumlah ikatan, dan posisi awal koordinat atom. Pendefinisian ini tidak dalam *input script*, karena

banyaknya informasi yang diberikan dalam atom definition maka pemberian informasinya berupa lampiran file terpisah. Pada *input script*, perintah yang diberikan yaitu `read_data`, perintah ini akan memanggil nama lampiran yang berisikan atom definition yang sudah dibuat, berupa `.dat` file. Contohnya : `read_data kubuslama.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
1360 atoms
20 bonds
0 angles
0 dihedrals
0 impropers

2 atom types
1 bond types

-33.000    33.000 xlo xhi
-38.000    38.000 ylo yhi
-50.000    105.000zlo zhi
Masses
1 1.0
2 12.0

Atoms
1      1      2      0.0    6.770  0.000  0.000
2      1      2      0.0    6.623  1.408  0.000
3      1      2      0.0    6.439  2.092  1.228
4      1      2      0.0    5.863  3.385  1.228
5      1      2      0.0    5.477  3.980  0.000
.....
1319   1      2      0.0    6.439  -2.092  79.822
1320   1      2      0.0    6.733  -0.708  79.822
1321   2      1      1.0   -4.000  -4.000  -2.000
1322   3      1      1.0   -4.000  -4.000  -5.000
.....
```

1339	20	1	1.0	2.000	2.000	-5.000
1340	21	1	1.0	-1.000	2.000	-8.000
1341	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-2.000
1342	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-5.000
.....						
1359	20	1	-1.0	2.213	2.000	-5.000
1360	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-8.000

Bonds

1	1	1321	1341
2	1	1322	1342
3	1	1323	1343
.....			
17	1	1337	1357
18	1	1338	1358
19	1	1339	1359
20	1	1340	1360

Baris pertama, tertuliskan 1360 atom, menjelaskan bahwa simulasi ini terdiri dari 1360 atom. Memiliki dua puluh ikatan molekuler hidrogen. Terdapat 2 jenis tipe atom, yaitu hidrogen dan karbon. Satu jenis ikatan, yaitu ikatan hidrogen. Di bawah jenis ikatan terdapat batas koordinat dari nilai x, y, dan z paling rendah hingga koordinat x, y, dan z paling besar. Selanjutnya adalah jenis massa, baris satu menjelaskan tipe satu yaitu hidrogen dengan besar massa 1.0, sedangkan nomor dua adalah massa karbon sebesar 12.

Kemudian di bawah keterangan massa terdapat keterangan koordinat atom. Dimana kolom pertama, menjelaskan tentang nomor identitas masing – masing atom. Kolom kedua adalah kolom yang menjelaskan nomor identitas ikatan tiap molekul yang ada di simulasi. Kolom ketiga adalah keterangan tentang jenis atom yang menjelaskan apakah nomor atom tersebut adalah atom jenis hidrogen atau karbon. Sedangkan kolom keempat adalah besar muatan pada masing – masing atom dan setelah itu ketiga kolom menjelaskan tentang posisi atom dalam kotak simulasi pada saat inisialisasi dengan urutan x, y, z.

Di bawah keterangan atoms, terdapat keterangan tentang bonds. Pada bagian ini menjelaskan ID ikatan setiap molekul hidrogen dan pasangan antar masing – masing molekul hidrogen sesuai dengan nomor atomnya.

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, kspace_style, dielectric, special_bonds.

Pengaturan variasi simulasi dijelaskan dengan perintah – perintah seperti neighbor, neigh_modify, group, timestep, reset_timestep, run_style, min_style, min_modify. Untuk kondisi batas, integrasi waktu, dan pilihan diagnostic dijelaskan dengan perintah fix. Sedangkan variasi jenis perhitungan dijelaskan dengan perintah compute, compute_modify, dan variable. Selain itu, Output diperintah dengan thermo, dump, and restart. Berikut adalah contoh setting digunakan dalam *input script* LAMMPS :

```
#kspace_style ewald 1.0e-2
bond_style harmonic
bond_coeff 1 12.011 0.254
```

Pada baris kspace style menunjukkan standar untuk menggunakan potensial Lennard – Jones dalam perhitungan interaksi antar molekul dan nilai 10^{-2} adalah nilai konstanta pada potensial harmonic. Bond_style menunjukkan perintah harmonic bahwa simulasi ini menggunakan potensial harmonic dalam perhitungannya. Baris selanjutnya menjelaskan nilai koefisien ikat hidrogen dan nilai jarak hidrogen dalam satuan LJ. Penggunaan tanda kres (#) di awal bukan merupakan perintah untuk *command* pada baris tersebut, sehingga tidak berpengaruh dalam simulasi. Hanya sebagai keterangan.

```
# LJ potentials
pair_style      lj/cut/coul/cut 3.2
pair_coeff      1 1 1.0 1.0
pair_coeff      2 2 0.737 1.166
pair_coeff      1 2 0.858 1.083
```

Pair style menjelaskan bahwa simulasi ini menggunakan potensial LJ, satuan LJ, dan menggunakan Gaya Coulomb dalam interaksi antar atom. Pair coeff menjelaskan dua kolom pertama adalah interaksi antar jenis atom. Seperti baris pertama menjelaskan hubungan antara atom jenis 1 dan atom jenis 1, baris kedua hubungan antara atom jenis 2 (karbon) dan atom jenis jenis 2 pula (karbon). Sedangkan baris ketiga interaksi antara atom jenis 1 (hidrogen) dan atom jenis 2 (karbon).

Pada kolom ketiga menjelaskan tentang nilai epsilon (ϵ).atom yang dibagi dengan epsilon hidrogen. Interaksi 1 1 nilai sigmanya tetap 1.0, karena nilai epsilon hidrogen dibagi dengan nilai epsilon sendiri. Sedangkan pada interaksi 2 dan 2, nilai epsilon karbon dibagi dengan epsilon hidrogen, sehingga dihasilkan nilai 1.166. Berbeda dengan interaksi 1 dan 2, nilai epsilon hidrogen dikalikan dengan nilai epsilon karbon kemudian hasilnya diakarkan Kolom keempat mekanismenya sama dengan kolom ketiga namun bukan epsilon melainkan nilai sigma

Pada kolom keempat pair_coeff menjelaskan nilai sigma (σ) suatu jenis atom yang dibagi dengan sigma hidrogen. Pada interaksi 1 1 nilai epsilon tetap 1.0, karena nilai sigma hidrogen dibagi dengan nilai sigmanya sendiri. Sedangkan pada interaksi 2 dan 2, nilai sigma karbon dibagi dengan sigma hidrogen, sehingga dihasilkan nilai 0.737. Berbeda dengan interaksi 1 dan 2, nilai sigma hidrogen dijumlahkan dengan nilai sigma karbon kemudian hasilnya dibagi dua.

```

# Define groups
group cnt type 2
group hyd type 1

#Initial velocities

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

# Static nanotube 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

```

Angka 0.26316 menjelaskan tentang temperature yang digunakan dalam simulasi ini. Temperaturnya adalah 10 K diubah ke dalam satuan LJ. Cara pengubahan satuan SI ke satuan LJ ada dalam manual LAMMPS. (Aidan Thompshon, 2003)

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        0.001
thermo          1000

```

```
thermo_style      custom step atoms temp pe ke eng evdwl
thermo_modify     temp mobile
dump              mydump all atom 10 dump.cntpanjang3run 10000
run               25000
print             "KAMPRETOS"
```

Time step berguna untuk nilai kelipatan dalam *run* simulasi. Semakin kecil nilai run semakin detail proses simulasi. Perintah thermo menjelaskan tentang pencatatan parameter kondisi kotak simulasi, jadi setiap kelipatan 1000 maka akan muncul nilai – nilai yang diinginkan, sebagaimana dijelaskan pada thermo_style yaitu temperature, energi potensial, energi kinetik, energi total dan energi vander waals.

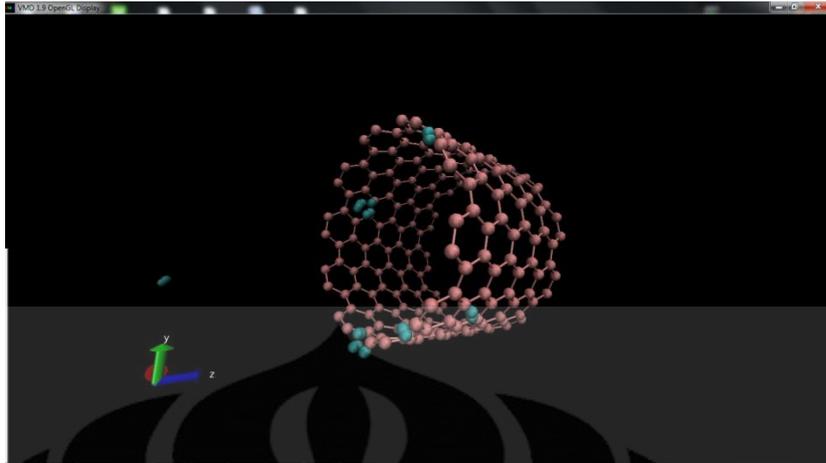
3.2.3 *Running Program*

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

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

3.2.4 *Visualisasi*

Setelah simulasi berjalan pada panel Cygwin, maka akan muncul dump file dari simulasi tersebut. Kemudian membuka program VMD untuk menjalankan visualisasi dari hasil simulasi tersebut. Berikut adalah contoh visualisasi dari VMD :



Gambar 3.3 Contoh Hasil Visualisasi



BAB 4

HASIL DAN ANALISA

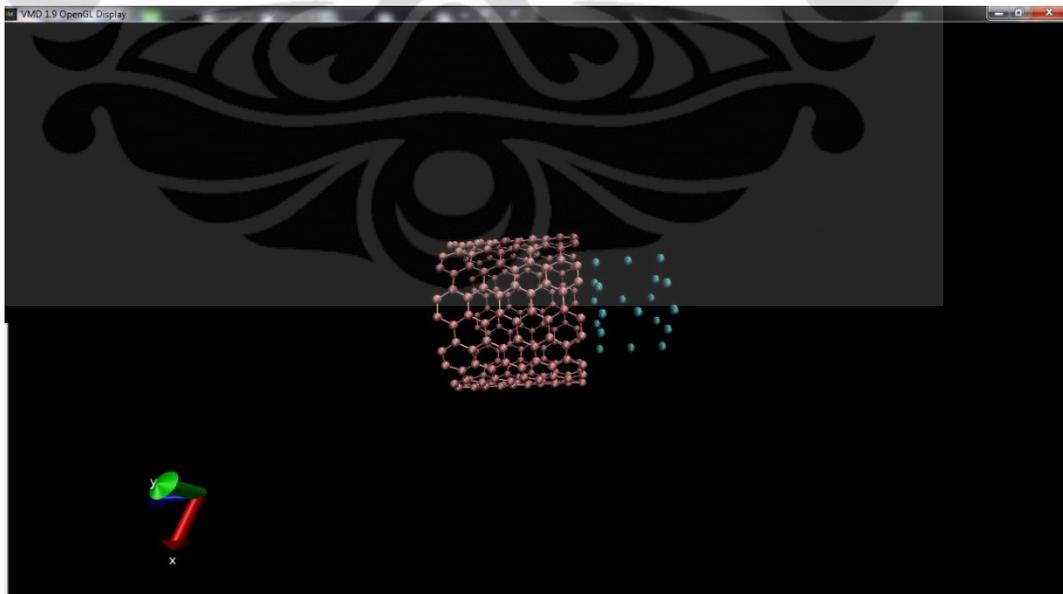
4.1 HASIL

Pada bab ini ditampilkan hasil dan analisa dari tiga variasi panjang pada simulasi adsorpsi hidrogen terhadap CNT. Dengan jumlah hidrogen, temperatur, dan volume yang sama. Jumlah hidrogen yang dibuat adalah dua puluh molekul dan temperatur 10 K. dalam simulasi ini nilai *run* divariasikan mulai dari 10000, 25000, 50000, dan 100000. Setiap satu nilai *run* divariasikan lima variasi panjang, mulai dari panjang CNT 1,122, 3, 5, 8, dan 10 nm.

4.1.1 *Run* 10000

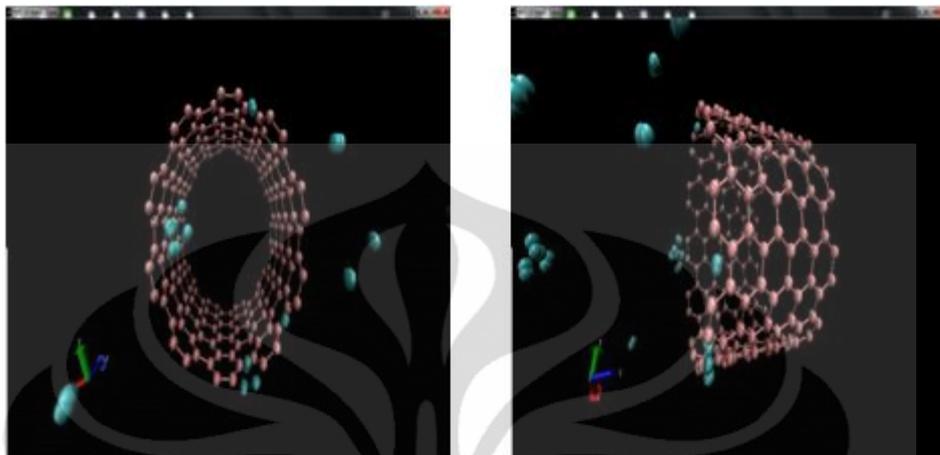
4.1.1.1 Panjang CNT 1,122 nm

a. Kondisi Awal



Gambar 4.1 Kondisi Awal *Run* 1000 dengan Panjang CNT 1,122 nm

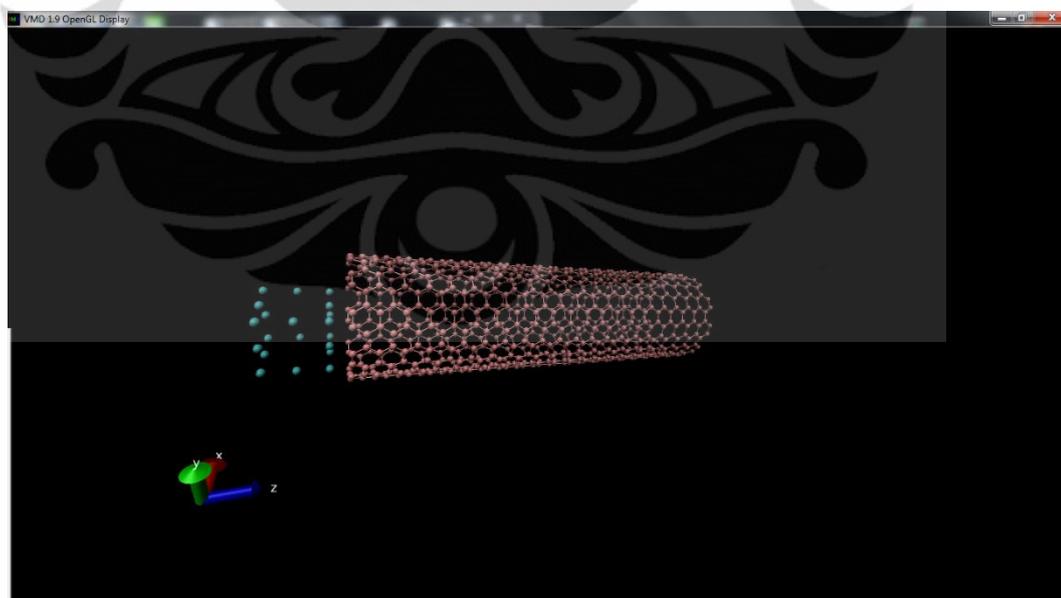
b. Kondisi Akhir



Gambar 4.2 Kondisi Akhir *Run* 1000 dengan Panjang CNT 1,122 nm

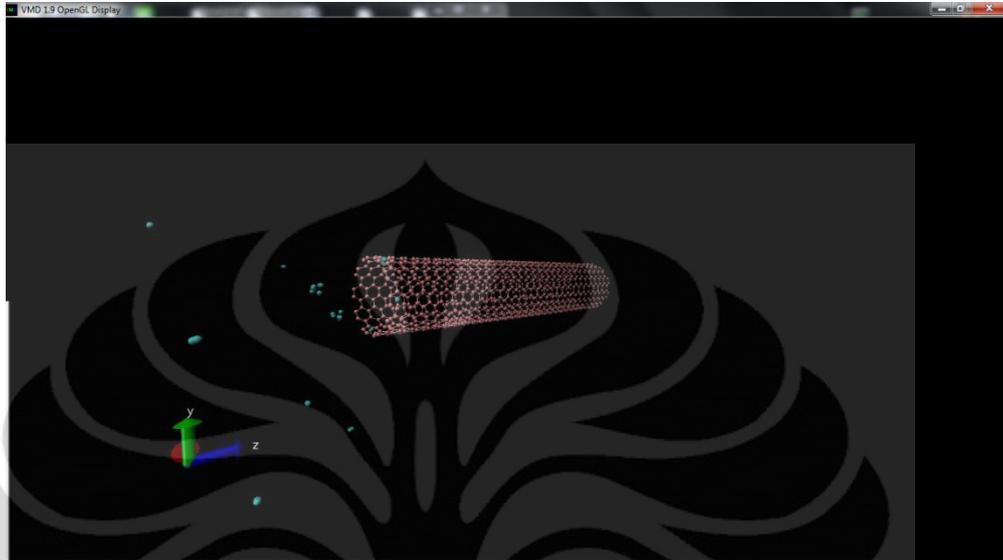
4.1.1.2 Panjang CNT 3 nm

a. Kondisi Awal



Gambar 4.3 Kondisi Awal *Run* 1000 dengan Panjang CNT 3 nm

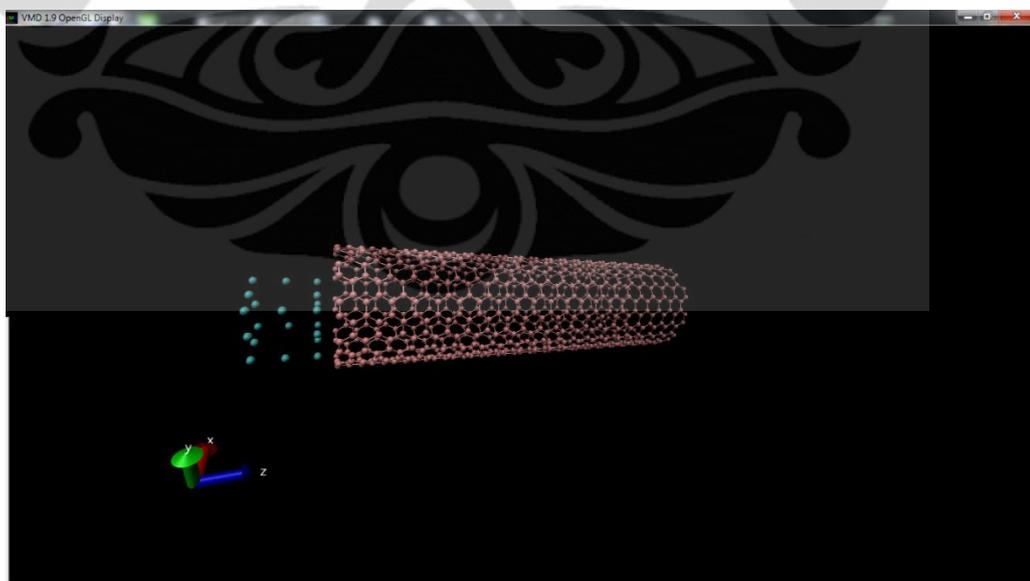
b. Kondisi Akhir



Gambar 4.4 Kondisi Akhir *Run* 1000 dengan Panjang CNT 3 nm

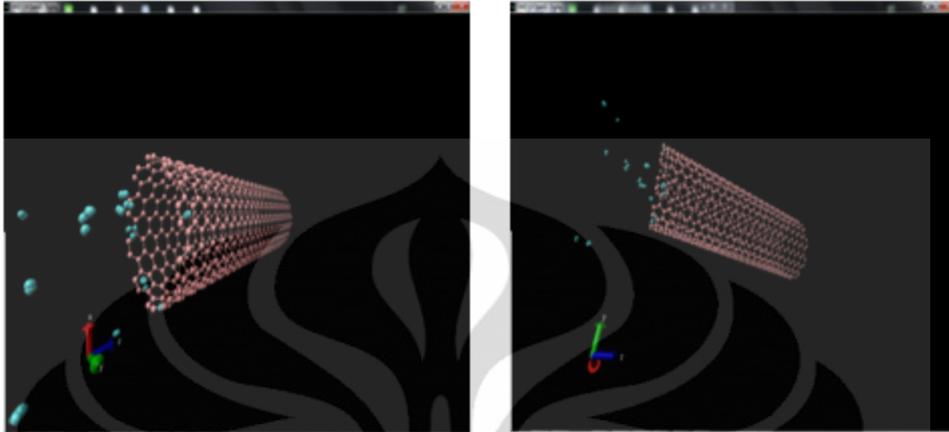
4.1.1.3 Panjang CNT 5 nm

a. Kondisi Awal



Gambar 4.5 Kondisi Awal *Run* 1000 dengan Panjang CNT 5 nm

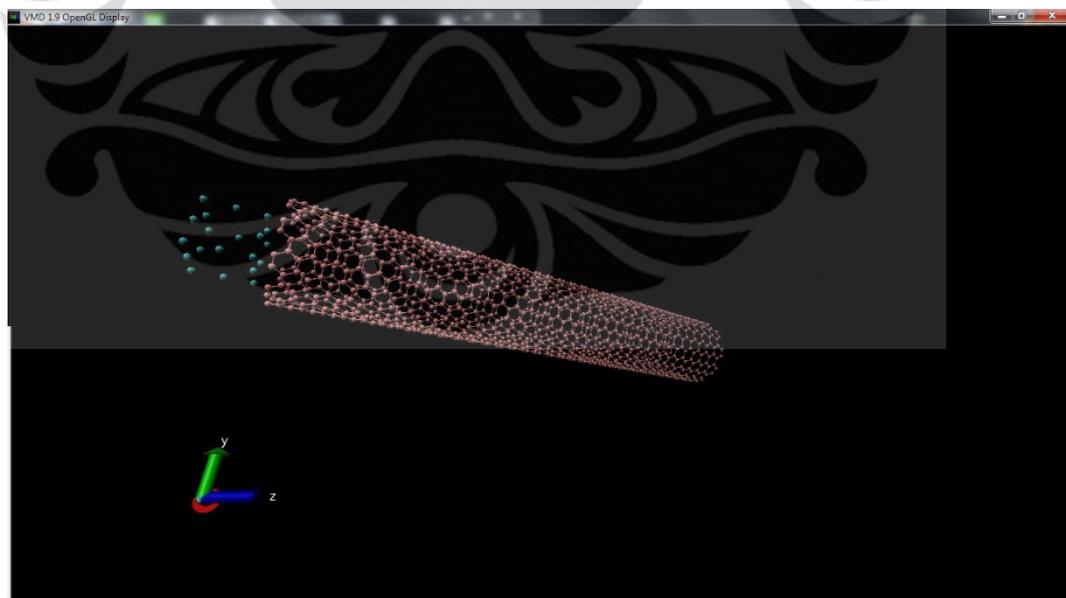
b. Kondisi Akhir



Gambar 4.6 Kondisi Akhir *Run* 1000 dengan Panjang CNT 5 nm

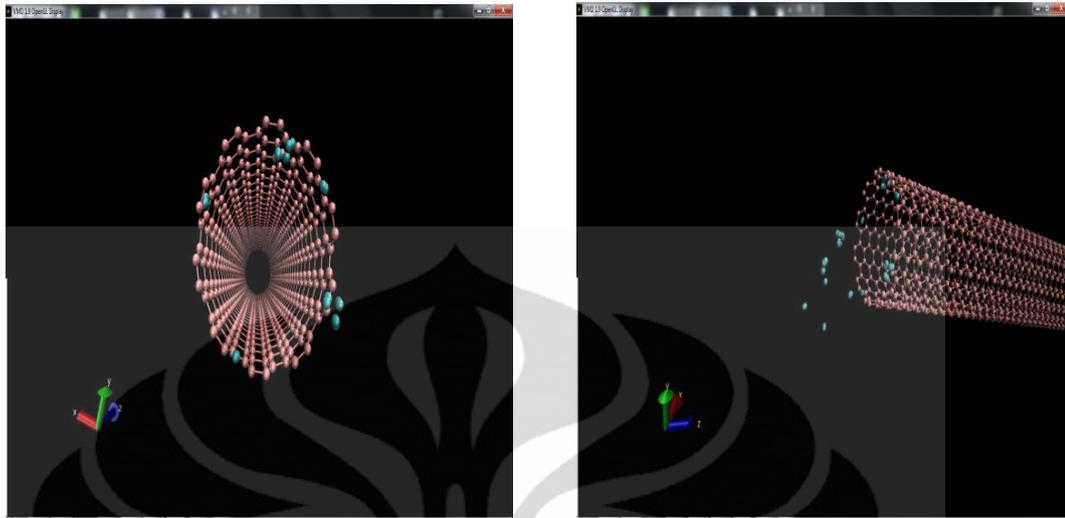
4.1.1.4 Panjang CNT 8 nm

a. Kondisi Awal



Gambar 4.7 Kondisi Awal *Run* 1000 dengan Panjang CNT 8 nm

b. Kondisi Akhir

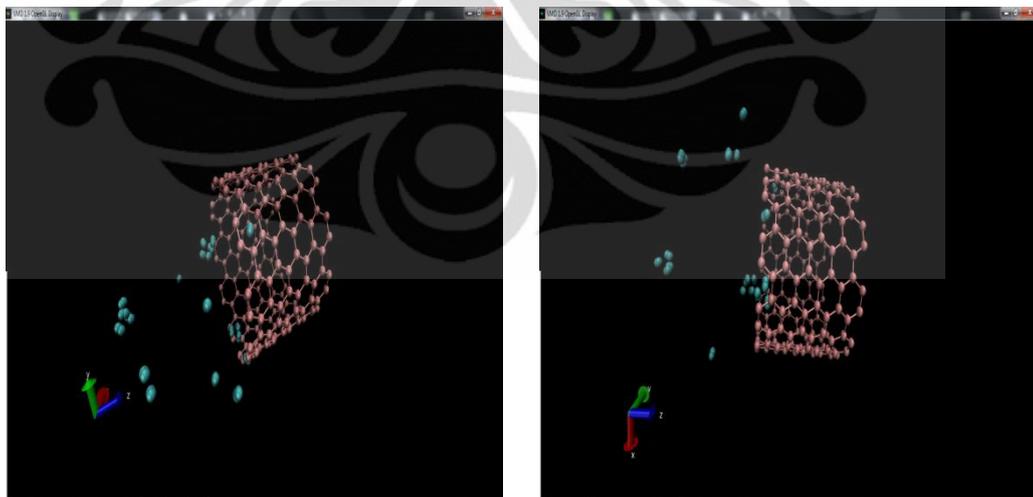


Gambar 4.8 Kondisi Akhir *Run* 1000 dengan Panjang CNT 8 nm

4.1.2 *Run* 25000

4.1.2.1 Panjang CNT 1,122 nm

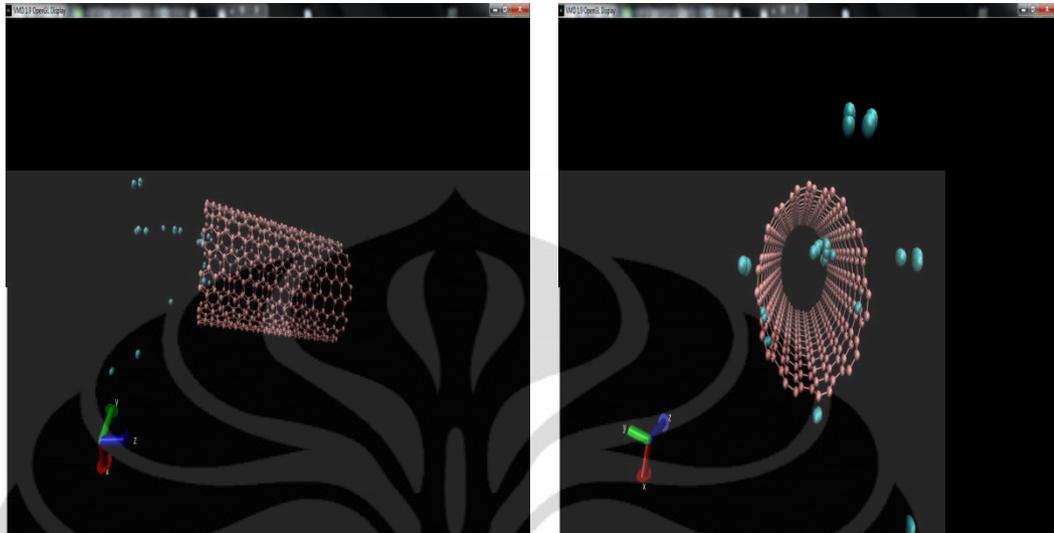
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.9 Kondisi Akhir *Run* 25000 dengan Panjang CNT 1,122 nm

4.1.2.2 Panjang CNT 3 nm

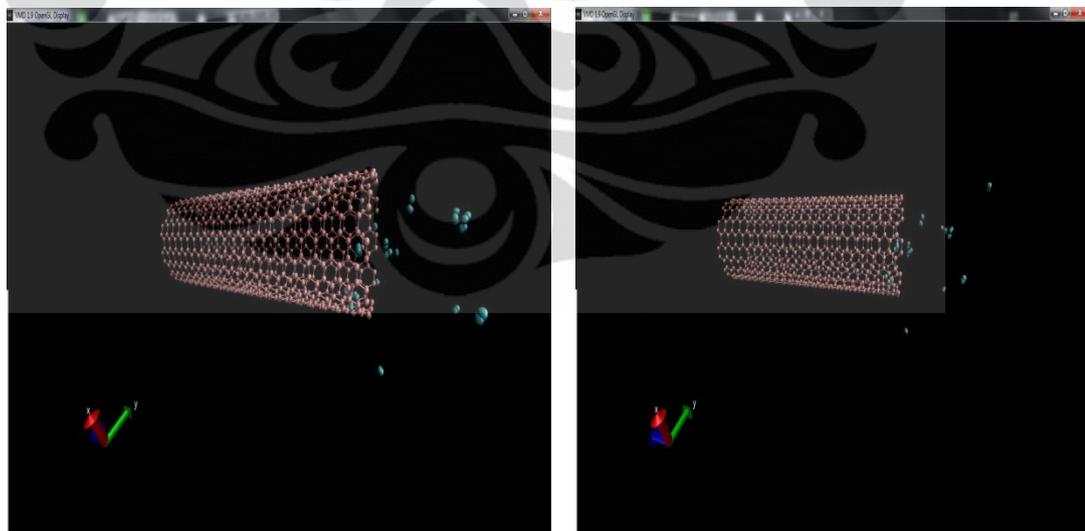
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.10 Kondisi Akhir *Run* 25000 dengan Panjang CNT 3 nm

4.1.2.3 Panjang CNT 5 nm

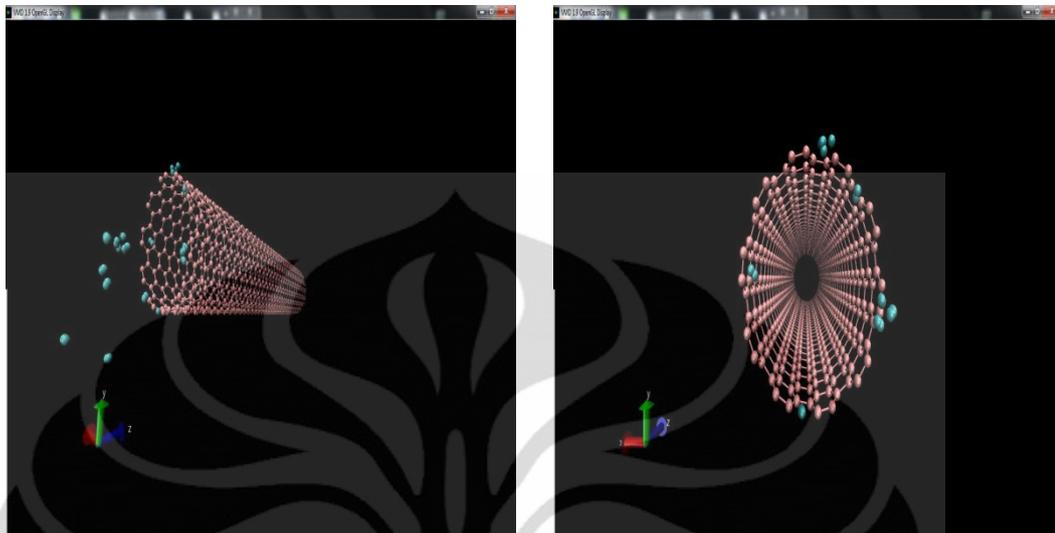
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.11 Kondisi Akhir *Run* 25000 dengan Panjang CNT 5 nm

4.1.2.4 Panjang CNT 8 nm

a. Kondisi Akhir

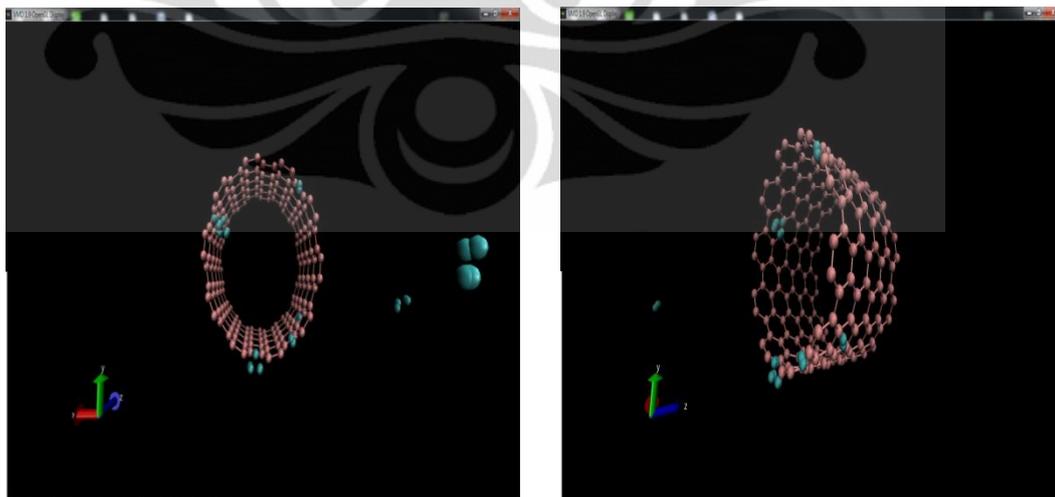


Gambar 4.12 Kondisi Akhir *Run* 25000 dengan Panjang CNT 8 nm

4.1.3 *Run* 50000

4.1.3.1 Panjang CNT 1,122 nm

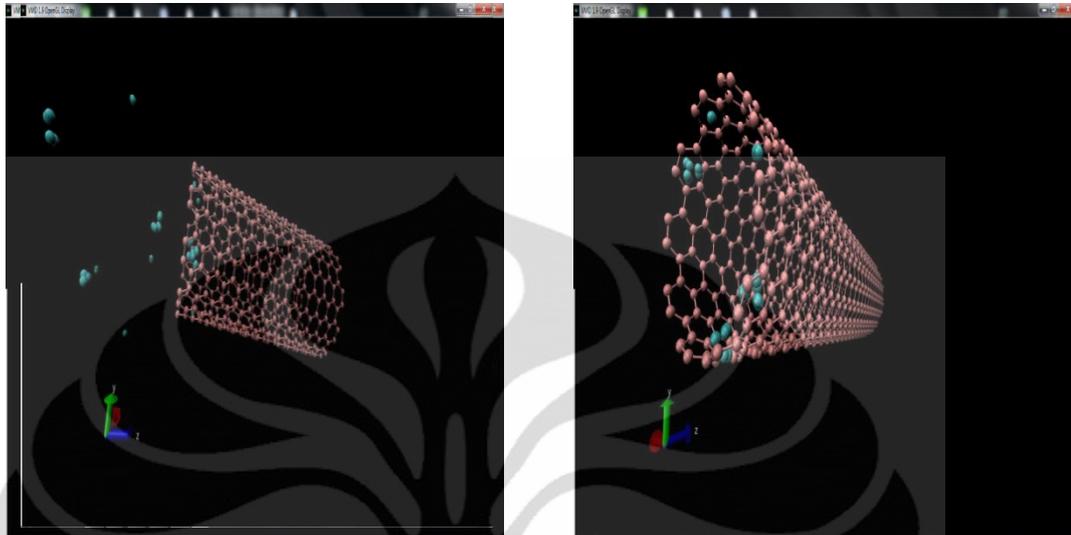
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.13 Kondisi Akhir *Run* 50000 dengan Panjang CNT 1,122 nm

4.1.3.2 Panjang CNT 3 nm

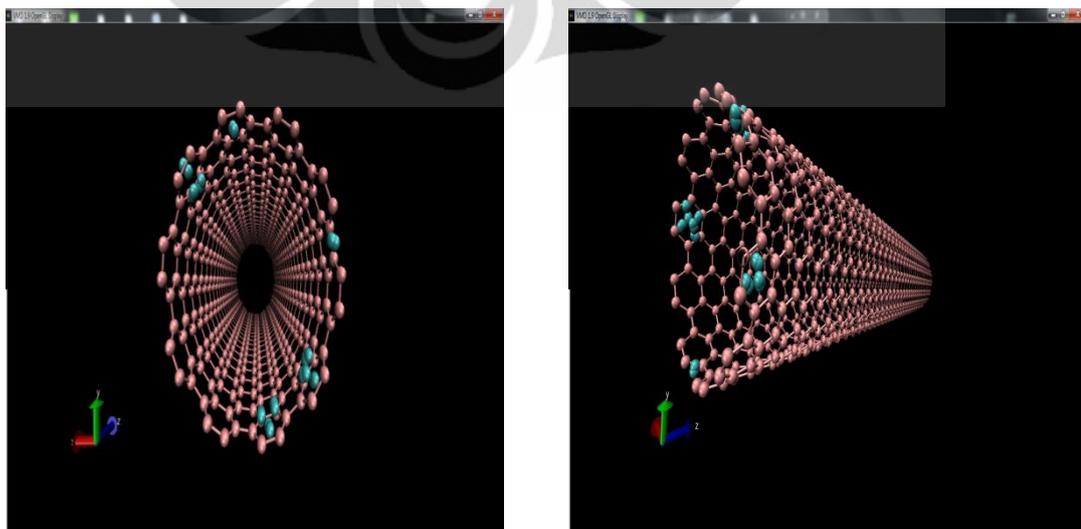
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.14 Kondisi Akhir *Run* 50000 dengan Panjang CNT 3 nm

4.1.3.3 Panjang CNT 5 nm

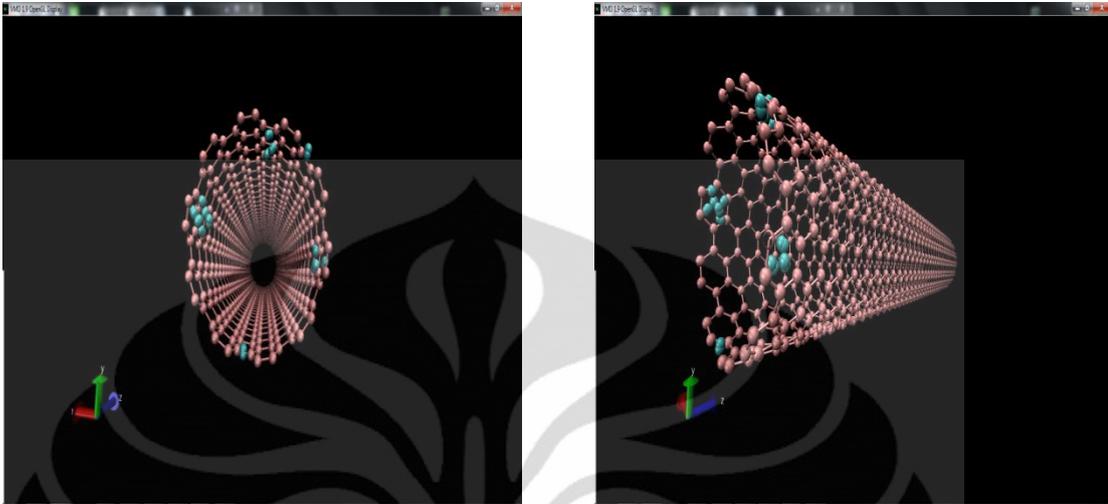
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.15 Kondisi Akhir *Run* 50000 dengan Panjang CNT 5 nm

4.1.3.4 Panjang CNT 8 nm

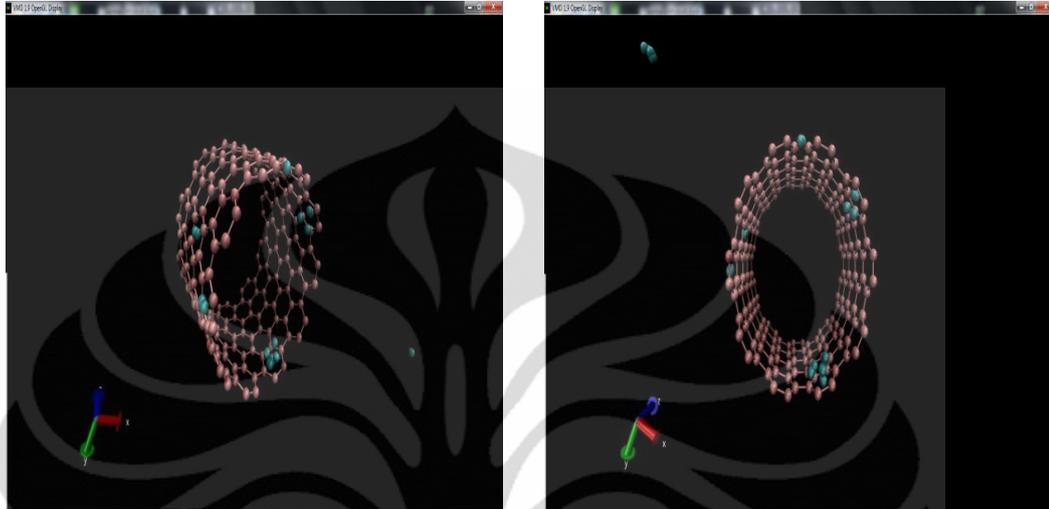
a. Kondisi Akhir



Gambar 4.16 Kondisi Akhir *Run* 50000 dengan Panjang CNT 8 nm

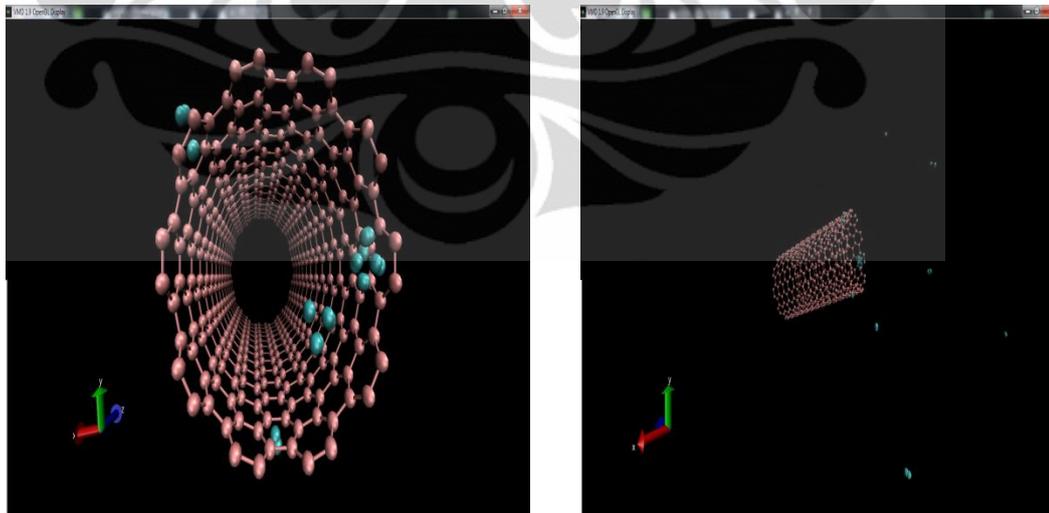
4.1.4 *Run* 100000

4.1.4.1 *Panjang CNT 1,122 nm*



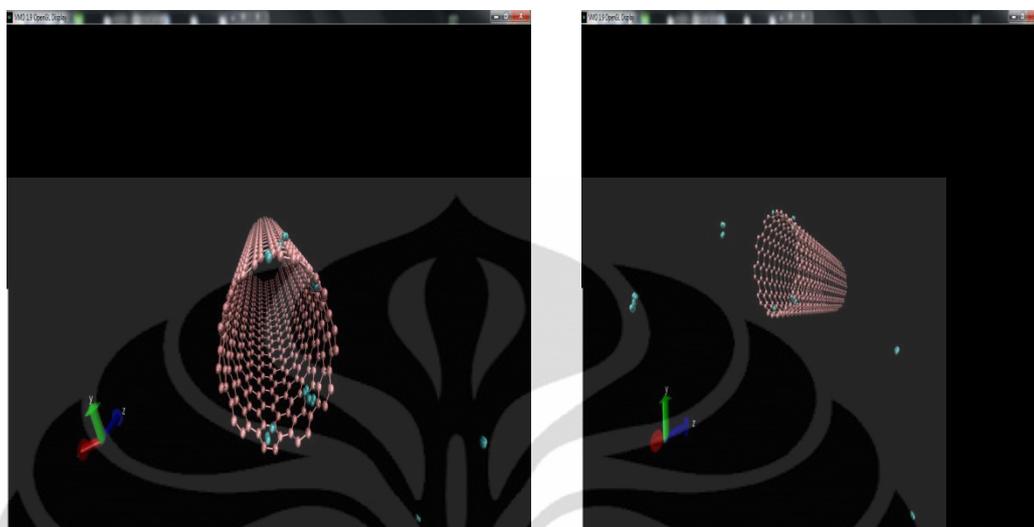
Gambar 4.17 Kondisi Akhir *Run* 100000 dengan Panjang CNT 1,122 nm

4.1.4.2 *Panjang CNT 3 nm*



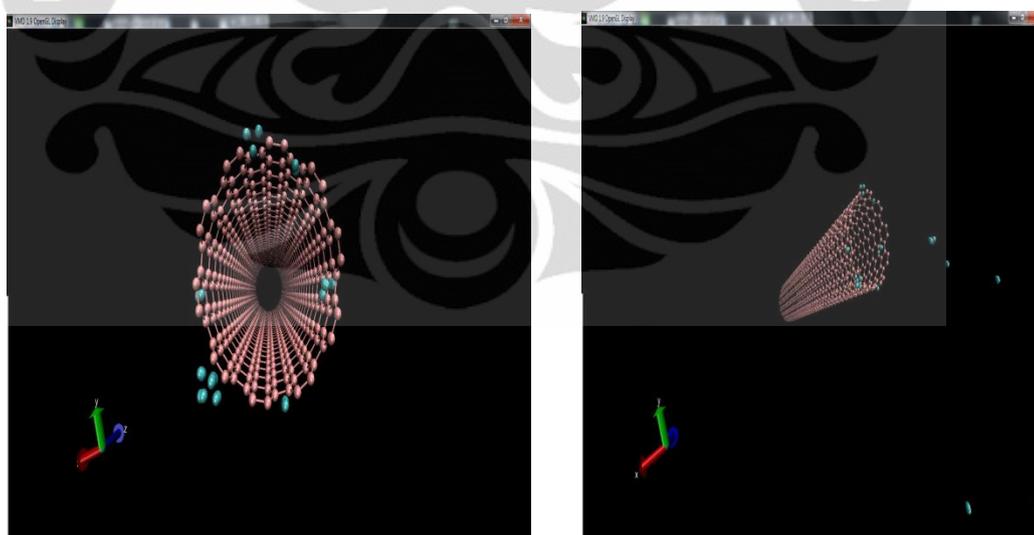
Gambar 4.18 Kondisi Akhir *Run* 100000 dengan Panjang CNT 3 nm

4.1.4.3 Panjang CNT 5 nm



Gambar 4.19 Kondisi Akhir Run 100000 dengan Panjang CNT 5 nm

4.1.4.4 Panjang CNT 8 nm



Gambar 4.20 Kondisi Akhir Run 100000 dengan Panjang CNT 8 nm

Tabel 4.1 Tabel Jumlah Hasil Hidrogen yang Teradsorpsi dengan Empat Variasi Panjang CNT

Panjang CNT nm	1.122	3	5	8
Run 10000	4	6	8	12
Run 25000	10	12	14	18
Run 50000	20	18	18	18
Run 100000	22	24	18	28

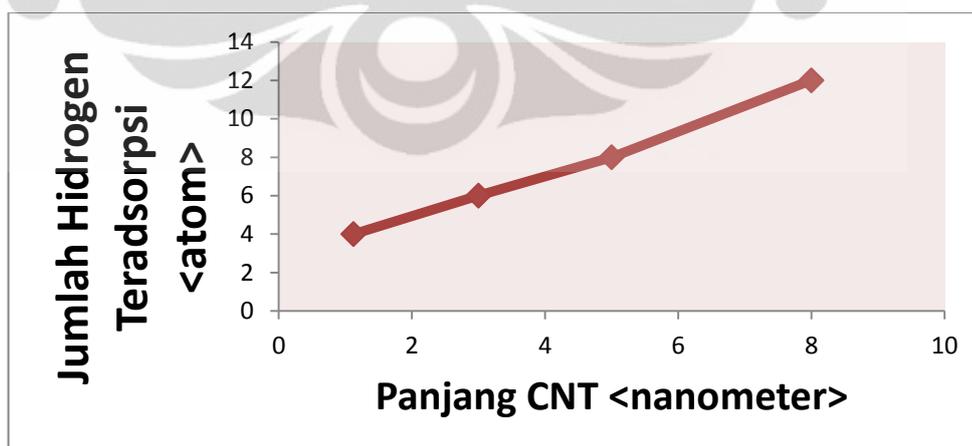
Keterangan : jumlah yang ditunjukkan dalam satuan atom

Satuan yang diunakan adalah dalam jumlah atom. Dari tabel terlihat bahwa terjadi penambahan jumlah hidrogen yang teradsorpsi pada setiap penambahan panjang.

4.2 ANALISA

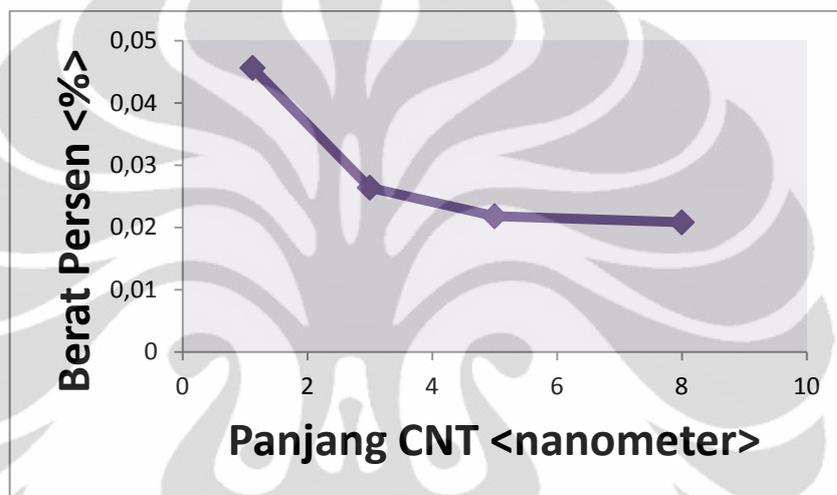
4.2.1 *Run 10000*

Pada run 10000, jumlah hidrogen 20 molekul dan suhu konstan 10 K. Dihasilkan dari simulasi bahwa penambahan panjang CNT menyebabkan jumlah hidrogen yang diserap bertambah. Seperti grafik yang ditunjukkan pada gambar di bawah ini :



Gambar 4.21 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada *run 10000*

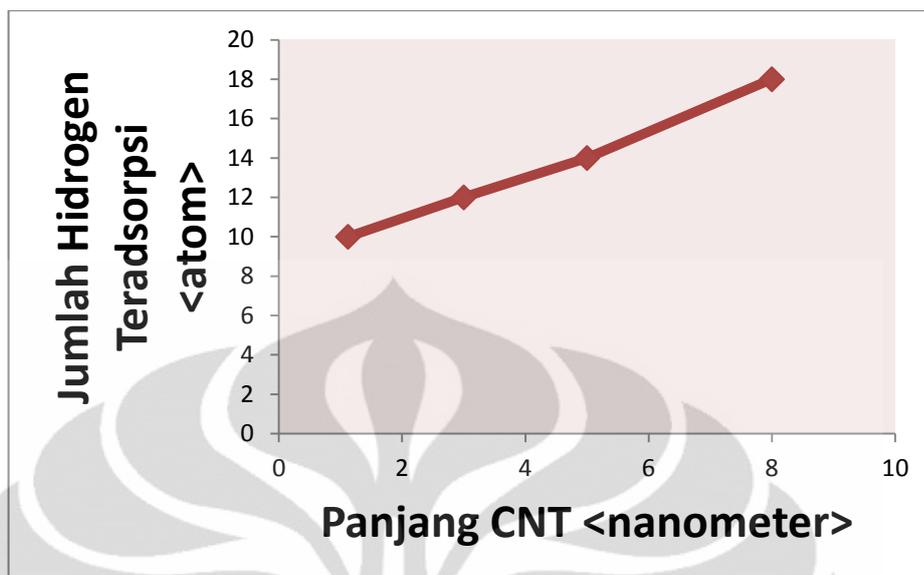
Grafik di atas menjelaskan bahwa pada run 10000, variasi panjang cukup mempengaruhi jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dari panjang 1.122 hingga pada panjang 8 nm. Hal ini mungkin dapat dikarenakan semakin besar panjang maka akan semakin besar pula jumlah atom karbon. Ketika semakin banyak atom karbon, maka semakin besar pula daya tarik atau peluang untuk menyerap hidrogen.



Gambar 4.22 Grafik Berat Persen Terhadap Variasi Panjang CNT pada run 10000

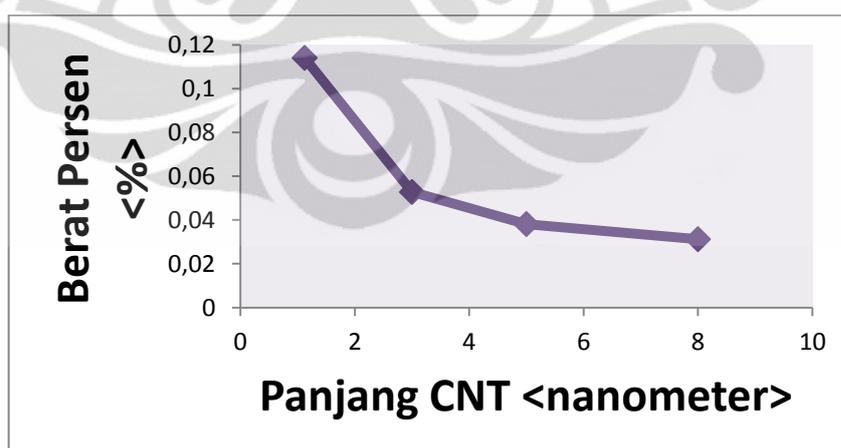
Berat persen yang terjadi akibat penambahan panjang CNT cenderung menurun. Hal ini mungkin disebabkan semakin besar panjang CNT maka semakin besar jumlah atomnya. Sehingga jika jumlah massa atom hidrogen yang masuk dibagi dengan jumlah massa total seluruh atom yang semakin besar, maka berat persennya akan menurun.

4.2.2 Run 25000



Gambar 4.23 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada run 25000

Pada run 25000 juga terjadi hal yang sama dengan run pada 10000, terjadi penambahan jumlah atom dengan semakin besarnya panjang CNT. Hal ini diiringi pula dengan penambahan jumlah adsorpsi hidrogen lebih besar dari run 10000. Karena semakin besar waktunya akan memengaruhi gerakan atom hidrogen yang terikat dengan CNT.

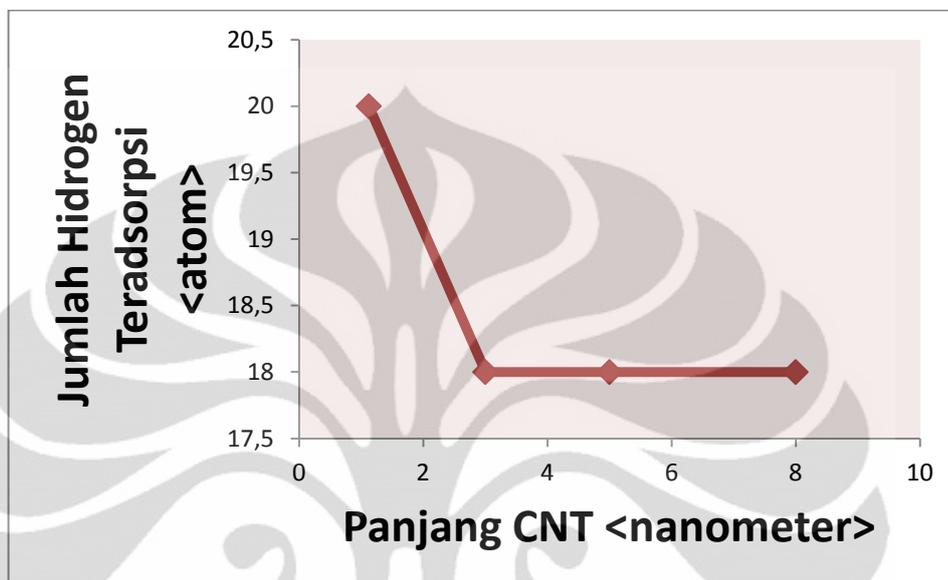


Gambar 4.24 Grafik Berat Persen Terhadap Variasi Panjang CNT pada run 25000

Pada berat persen run 25000 masih menunjukkan bahwa pengaruh panjang secara kualitas belum signifikan karena berat persen dari hasil simulasi ini

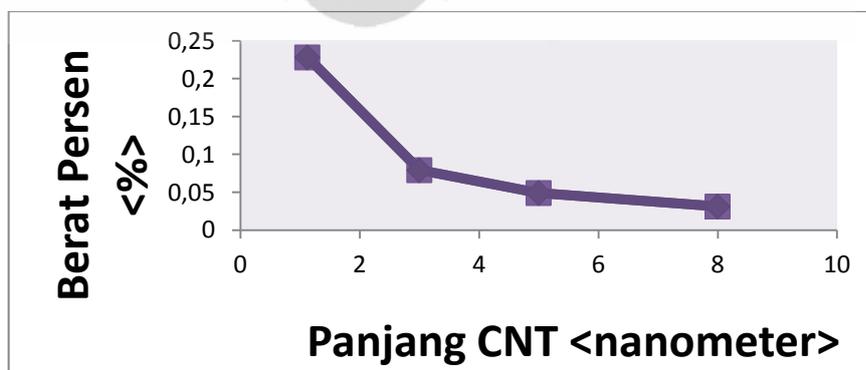
cenderung menurun dengan semakin bertambahnya panjang CNT. Namun secara umum, terjadi penambahan jumlah atom hidrogen yang teradsorpsi pada CNT. Ditunjukkan dengan meningkatnya garis kurva berat persen.

4.2.3 Run 50000



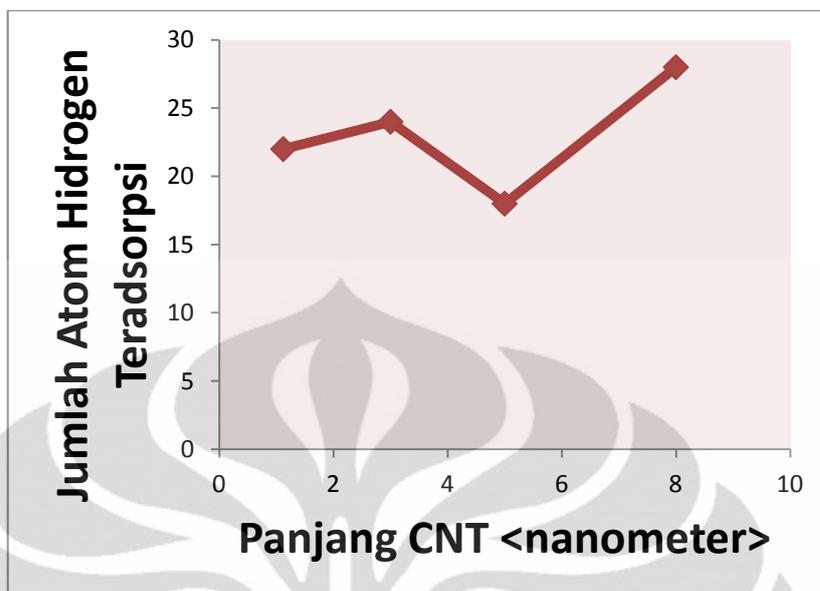
Gambar 4.25 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada run 50000

Pada run 50000 terjadi penurunan jumlah atom yang teradsorpsi dari panjang CNT 1.122 hingga 8 nm. Namun secara nilai keseluruhan jumlah atom yang terserap lebih besar dibandingkan dengan jumlah atom yang diserap pada run 25000. Hal ini mungkin dikarenakan terjadi adsorpsi fisika yang menyebabkan atom hidrogen mudah tertangkap dan mudah pula untuk terlepas.



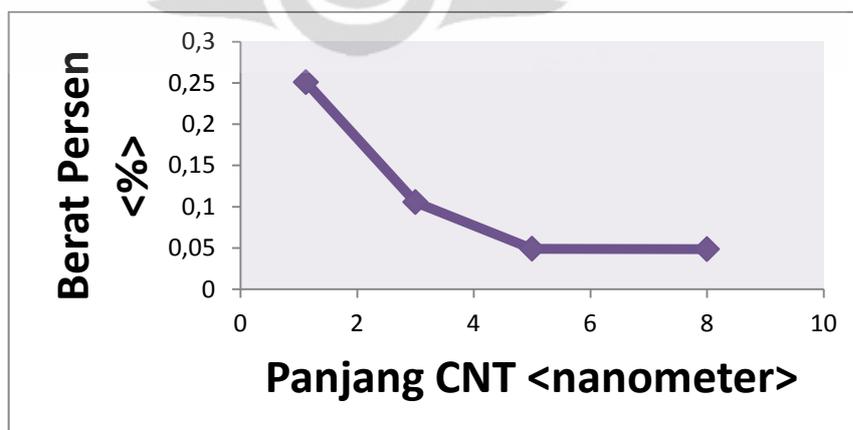
Gambar 4.26 Grafik Berat Persen Terhadap Variasi Panjang CNT pada run 50000

4.2.4 Run 100000



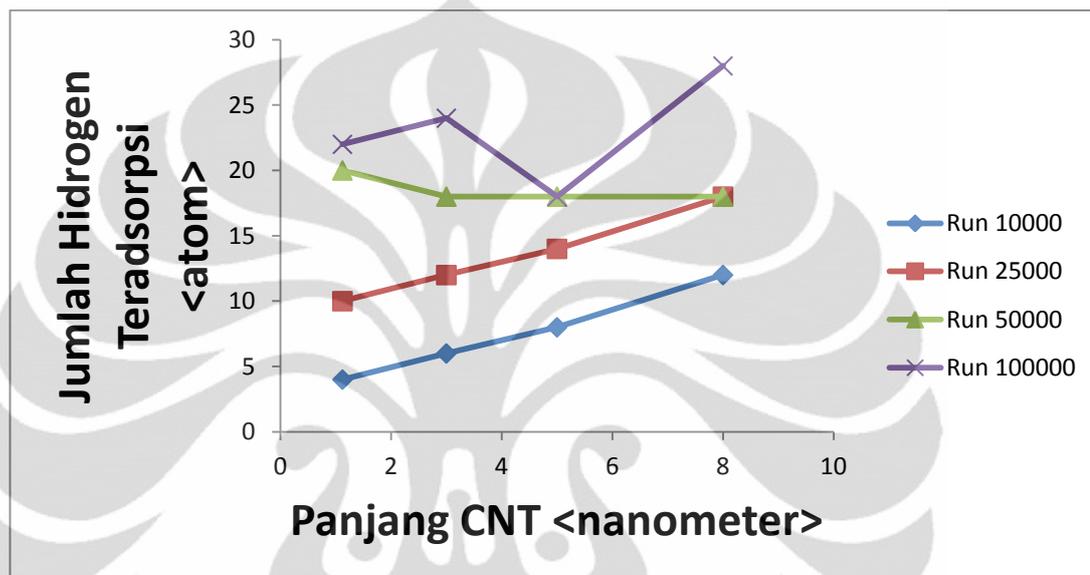
Gambar 4.27 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada run 100000

Dari grafik di atas, secara umum terjadi total pertambahan rata – rata jumlah hidrogen pada masing – masing varian panjang meningkat dari run sebelumnya. Namun terjadi penurunan panjang CNT 5 nm, hal ini dapat disebabkan karena adanya tumbukan antar hidrogen sehingga menghalangi hidrogen yang akan masuk CNT.



Gambar 4.28 Grafik Berat Persen Terhadap Variasi Panjang CNT pada run 100000

Berat persen dari adsorpsi hidrogen lai meningkat secara umum, tapi tetap secara kualitas kurva masih menunjukkan penurunan berat persen adsorpsi hidrogen terhadap variasi panjang CNT.



Gambar 4.29 Grafik Adsorpsi Hidrogen terhadap Varias Panjang CNT pada run 10000, 25000, 50000, dan 100000

Dari keseluruhan simulasi dapat dilihat pada graik di atas. Grafik tersebut menunjukkan bahwa semakin bertambahnya panjang CNT, maka semakin besar pula jumlah hidrogen yang teradsorpsi, meski pertambahannya kurang signifikan. Namun, dapat dianggap bahwa pada pertambahan panjang CNT pada 1.122, 3, 5, dan 8 nm memengaruhi jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT. Hal ini kemungkinan dapat dikarenakan semakin panjang CNT maka semakin besar pula jumlah atom carbon. Semakin banyak jumlah atom karbon, maka semakin banyak ikatan yang terbentuk. Ikatan tersebut membuat peluang semakin besar bagi hidrogen untuk teradsorpsi pada CNT.

Dalam sebuah referensi dijelaskan bahwa panjang CNT dan kelengkungannya dapat memengaruhi termodinamika penyimpanan (Banerjee, 2008), hal ini dapat dilihat dari hasil simulasi bahwa semakin besar nilai panjang CNT mulai dari 1, 2, 3, 5, dan 8 nm, maka semakin banyak pula jumlah atom dan semakin memiliki kemampuan untuk mengikat atom H, sehingga semakin bertambah panjang CNT cenderung meningkatkan kuantitas hidrogen yang teradsorpsi pada CNT. Namun demikian, semakin panjang CNT semakin besar jumlah atom maka semakin besar pula massa dari total atom dalam simulasi. Hal ini menyebabkan penambahan jumlah hidrogen teradsorpsi tidak sebanding dengan penambahan jumlah atom dalam kotak simulasi, sehingga berat persennya semakin menurun. Perubahan ukuran terkait panjang CNT dan penambahan jumlah atom pada kotak simulasi merupakan faktor yang tidak dapat dipisahkan, karena satu sama lain merupakan penyebab dalam meningkatkan kuantitas hidrogen teradsorpsi dan sekaligus penyebab besarnya nilai berat persen menurun.

BAB 5

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 KESIMPULAN

Hasil simulasi dinamika molekuler adsorpsi hidrogen pada *carbon nanotubes* (CNT) dengan menggunakan variasi panjang 1.122, 3, 5, dan 8 nm, secara keseluruhan dapat disimpulkan sebagai berikut :

1. Pengaturan perbedaan panjang pada *carbon nanotubes* (CNT) dalam fenomena adsorpsi hidrogen ternyata cukup memengaruhi kuantitas hidrogen yang teradsorpsi masuk ke dalam CNT atau pun menempel pada permukaan.
2. Simulasi adsorpsi hidrogen pada panjang CNT 1.122, 3, 5, dan 8 nm cenderung meningkatkan kuantitas atom hidrogen yang diadsorpsi oleh CNT. Hal ini terlihat pada setiap peningkatan panjang, secara total cenderung meningkatkan kuantitas atom hidrogen yang masuk maupun menempel pada permukaan CNT. Meskipun masih terdapat deviasi dalam beberapa data.
3. Kurva adsorpsi hidrogen terhadap penambahan panjang CNT secara keseluruhan mengalami peningkatan. Peningkatan tersebut ditunjukkan dengan naiknya posisi kurva penyerapan hidrogen pada nilai *run* mulai dari 10000, 25000, 50000, hingga 100000.
4. Peningkatan kuantitas hidrogen yang teradsorpsi pada setiap penambahan panjang CNT nilainya tidak sebanding dengan total berat persen dari massa hidrogen teradsorpsi dengan keseluruhan massa atom hidrogen dan karbon. Walaupun terjadi penambahan jumlah yang diadsorpsi. Namun, nilai berat persen pada panjang 1.122, 3, 5, dan 8 nm cenderung jauh menurun. Hal ini dikarenakan kuantitas atom terserap tidak sebanding dengan nilai penambahan panjang CNT, dimana semakin panjang CNT maka semakin banyak pula jumlah atom karbon pada CNT. Sehingga semakin panjang CNT, berat persennya semakin menurun.

5.2 SARAN

Pada simulasi dinamika molekuler adsorpsi hidrogen kali ini penulis akui masih terdapat banyak kekurangan. Oleh karena itu untuk penelitian selanjutnya, diharapkan :

1. Sebelum mempelajari dinamika molekul, sebaiknya mahasiswa terlebih dahulu mempelajari tentang Mekanika Statistik, Mekanika Kuantum, dan lain – lain.
2. 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 PUSTAKA

- Aidan Thompson, S. P. (2003). LAMMPS Users Manual. GNU Public License (GPL).
- 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 I & Goyal, Meenakshi. (2005). *Activated Carbon Adsorption*. USA: Taylor & Francis Group.
- 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
- 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* .
- Khurmi, R. S., & Gupta, J. K. (2005). *First Multicolour Edition: A Text Book of Machine Design*. New Delhi: Eurasia Publishing House.

meingstein. (2008, Juni 14). <http://meingstein.wordpress.com/>. Dipetik januari 15, 2012

Mohsin, Y. (2004, oktober 30). http://www.chem-is-try.org/tabel_periodik/hidrogen/. Dipetik januari 15, 2012, dari <http://www.chem-is-try.org>.

Pangganti, E. (2010, Agustus 13). <http://esdikimia.wordpress.com/2010/08/13/ikatan-hidrogen-dan-ikatan-van-der-waals/>. Dipetik januari 23, 2012, dari <http://esdikimia.wordpress.com>.

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.

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>



LAMPIRAN

Lampiran 1 Input File Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada CNT dengan menggunakan piranti lunak LAMMPS

Berikut adalah input file yang digunakan untuk menginisialisasi simulasi adsorpsi hidrogen :

```
# 3-d LJ hydrogen storage
dimension          3
boundary           p p p
atom_style         full
neighbor           0.3 bin
neigh_modify       delay 5
read_data          kubuslama.dat

#kspace_style ewald 1.0e-2
bond_style         harmonic
bond_coeff         1 12.011 0.254

# LJ potentials
pair_style         lj/cut/coul/cut 3.2
pair_coeff         1 1 1.0 1.0
pair_coeff         2 2 0.737 1.166
pair_coeff         1 2 0.858 1.083
```

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

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

# Static nanotube
velocity       cnt set 0.0 0.0 0.0 units box
fix            3 cnt setforce 0.0 0.0 0.0
fix            4 cnt aveforce 0.0 0.0 0.0

# Run
timestep       0.001
thermo         1000
thermo_style   custom step atoms temp pe ke etotal evdwl
thermo_modify  temp mobile
dump           mydump all atom 10 dump.kubuslama
run            10000
print         "KAMPRETOS"
```

Lampiran 2 Data File Panjang CNT 1.122 nm

Berikut lampiran data file atau read_data dari CNT dengan panjang 1.122 nm :

Lammmps input file for carbon nanotube

240 atoms

20 bonds

0 angles

0 dihedrals

0 impropers

2 atom types

1 bond types

-33.000 33.000 xlo xhi

-38.000 38.000 ylo yhi

-50.000 105.000 zlo zhi

Masses

1 1.0

2 12.0

Atoms

1 1 2 0.0 6.770 0.000 0.000

2 1 2 0.0 6.623 1.408 0.000

3	1	2	0.0	6.439	2.092	1.228
4	1	2	0.0	5.863	3.385	1.228
5	1	2	0.0	5.477	3.980	0.000
6	1	2	0.0	4.530	5.031	0.000
7	1	2	0.0	3.980	5.477	1.228
8	1	2	0.0	2.754	6.185	1.228
9	1	2	0.0	2.092	6.439	0.000
10	1	2	0.0	0.708	6.733	0.000

199	1	2	0.0	6.439	-2.092	11.052
200	1	2	0.0	6.733	-0.708	11.052
201	2	1	1.0	-4.000	-4.000	-2.000
202	3	1	1.0	-4.000	-4.000	-5.000
203	4	1	1.0	-4.000	-4.000	-8.000

217	18	1	1.0	2.000	2.000	-8.000
218	19	1	1.0	2.000	-4.000	-5.000
219	20	1	1.0	2.000	2.000	-5.000
220	21	1	1.0	-1.000	2.000	-8.000
221	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-2.000
222	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-5.000
223	4	1	-1.0	-3.787	-4.000	-8.000
224	5	1	-1.0	-3.787	-1.000	-8.000

233	14	1	-1.0	-0.787	2.000	-2.000
-----	----	---	------	--------	-------	--------

234	15	1	-1.0	-0.787	-4.000	-8.000
235	16	1	-1.0	2.213	-4.000	-8.000
236	17	1	-1.0	2.213	-1.000	-8.000
237	18	1	-1.0	2.213	2.000	-8.000
238	19	1	-1.0	2.213	-4.000	-5.000
239	20	1	-1.0	2.213	2.000	-5.000
240	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-8.000

Bonds

1	1	201	221
2	1	202	222
3	1	203	223
4	1	204	224
5	1	205	225
6	1	206	226
7	1	207	227
8	1	208	228
9	1	209	229
10	1	210	230
11	1	211	231
12	1	212	232
13	1	213	233
14	1	214	234
15	1	215	235
16	1	216	236
17	1	217	237
18	1	218	238

19	1	219	239
20	1	220	240



Lampiran 3 Data File Panjang CNT 3 nm

Berikut lampiran data file atau read_data dari CNT dengan panjang 3 nm :

```
# Lammmps input file for carbon nanotube
```

```
560 atoms
```

```
20 bonds
```

```
0 angles
```

```
0 dihedrals
```

```
0 impropers
```

```
2 atom types
```

```
1 bond types
```

```
-33.000      33.000 xlo xhi
```

```
-38.000      38.000 ylo yhi
```

```
-50.000     105.000zlo zhi
```

```
Masses
```

```
1 1.0
```

```
2 12.0
```

Atoms

1	1	2	0.0	6.770	0.000	0.000
2	1	2	0.0	6.623	1.408	0.000
3	1	2	0.0	6.439	2.092	1.228
4	1	2	0.0	5.863	3.385	1.228
5	1	2	0.0	5.477	3.980	0.000
6	1	2	0.0	4.530	5.031	0.000
7	1	2	0.0	3.980	5.477	1.228
8	1	2	0.0	2.754	6.185	1.228
9	1	2	0.0	2.092	6.439	0.000
10	1	2	0.0	0.708	6.733	0.000

517	1	2	0.0	5.477	-3.980	29.473
518	1	2	0.0	6.185	-2.754	29.473
519	1	2	0.0	6.439	-2.092	30.701
520	1	2	0.0	6.733	-0.708	30.701
521	2	1	1.0	-4.000	-4.000	-2.000
522	3	1	1.0	-4.000	-4.000	-5.000
523	4	1	1.0	-4.000	-4.000	-8.000

524	5	1	1.0	-4.000	-1.000	-8.000
-----	---	---	-----	--------	--------	--------

.....

539	20	1	1.0	2.000	2.000	-5.000
-----	----	---	-----	-------	-------	--------

540	21	1	1.0	-1.000	2.000	-8.000
-----	----	---	-----	--------	-------	--------

541	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-2.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

542	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-5.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

543	4	1	-1.0	-3.787	-4.000	-8.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

544	5	1	-1.0	-3.787	-1.000	-8.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

545	6	1	-1.0	-3.787	2.000	-8.000
-----	---	---	------	--------	-------	--------

.....

558	19	1	-1.0	2.213	-4.000	-5.000
-----	----	---	------	-------	--------	--------

559	20	1	-1.0	2.213	2.000	-5.000
-----	----	---	------	-------	-------	--------

560	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-8.000
-----	----	---	------	--------	-------	--------

Bonds

1	1	521	541
---	---	-----	-----

2	1	522	542
---	---	-----	-----

3	1	523	543
---	---	-----	-----

4	1	524	544
---	---	-----	-----

5 1 525 545

6 1 526 546

.....

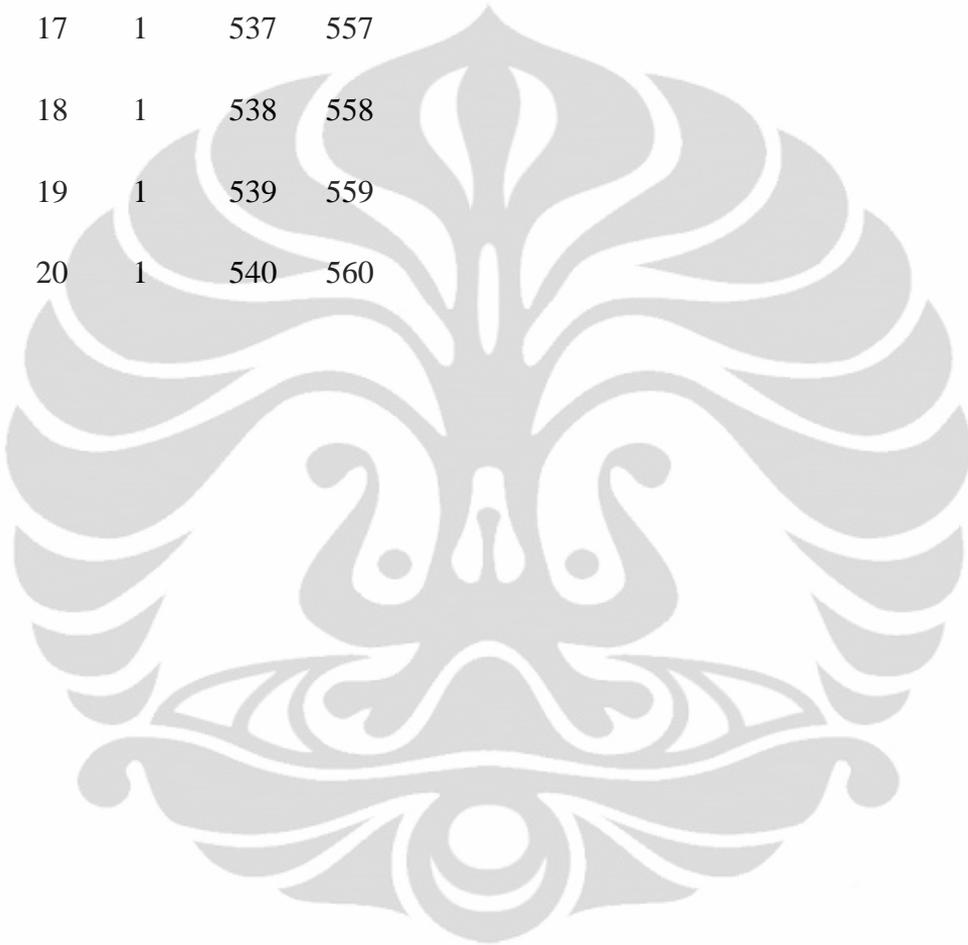
16 1 536 556

17 1 537 557

18 1 538 558

19 1 539 559

20 1 540 560



Lampiran 4 Data File Panjang CNT 5 nm

Berikut lampiran data file atau read_data dari CNT dengan panjang 5 nm :

```
# Lammmps input file for carbon nanotube
```

```
880 atoms
```

```
20 bonds
```

```
0 angles
```

```
0 dihedrals
```

```
0 impropers
```

```
2 atom types
```

```
1 bond types
```

```
-33.000      33.000 xlo xhi
```

```
-38.000      38.000 ylo yhi
```

```
-50.000     105.000zlo zhi
```

```
Masses
```

```
1 1.0
```

```
2 12.0
```

Atoms

1	1	2	0.0	6.770	0.000	0.000
2	1	2	0.0	6.623	1.408	0.000
3	1	2	0.0	6.439	2.092	1.228
4	1	2	0.0	5.863	3.385	1.228
5	1	2	0.0	5.477	3.980	0.000
6	1	2	0.0	4.530	5.031	0.000
7	1	2	0.0	3.980	5.477	1.228
8	1	2	0.0	2.754	6.185	1.228
9	1	2	0.0	2.092	6.439	0.000
10	1	2	0.0	0.708	6.733	0.000

839	1	2	0.0	6.439	-2.092	50.349
840	1	2	0.0	6.733	-0.708	50.349
841	2	1	1.0	-4.000	-4.000	-2.000
842	3	1	1.0	-4.000	-4.000	-5.000

859	20	1	1.0	2.000	2.000	-5.000
860	21	1	1.0	-1.000	2.000	-8.000

861	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-2.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

862	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-5.000
-----	---	---	------	--------	--------	--------

.....

869	10	1	-1.0	-0.787	-4.000	-2.000
-----	----	---	------	--------	--------	--------

870	11	1	-1.0	2.213	-4.000	-2.000
-----	----	---	------	-------	--------	--------

871	12	1	-1.0	2.213	-1.000	-2.000
-----	----	---	------	-------	--------	--------

...../

874	15	1	-1.0	-0.787	-4.000	-8.000
-----	----	---	------	--------	--------	--------

.....

879	20	1	-1.0	2.213	2.000	-5.000
-----	----	---	------	-------	-------	--------

880	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-8.000
-----	----	---	------	--------	-------	--------

Bonds

1	1	841	861
---	---	-----	-----

2	1	842	862
---	---	-----	-----

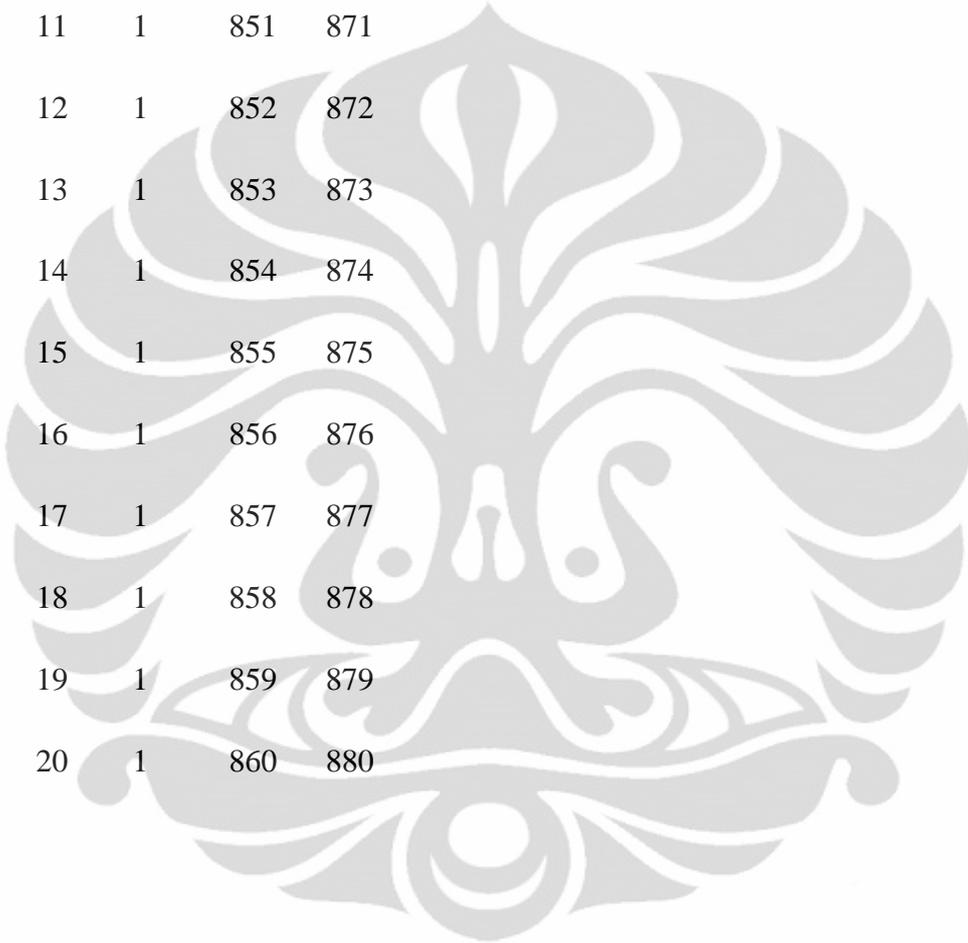
3	1	843	863
---	---	-----	-----

4	1	844	864
---	---	-----	-----

5	1	845	865
---	---	-----	-----

6	1	846	866
---	---	-----	-----

7	1	847	867
8	1	848	868
9	1	849	869
10	1	850	870
11	1	851	871
12	1	852	872
13	1	853	873
14	1	854	874
15	1	855	875
16	1	856	876
17	1	857	877
18	1	858	878
19	1	859	879
20	1	860	880



Lampiran 5 Data File Panjang CNT 8 nm

Berikut lampiran data file atau read_data dari CNT dengan panjang 8 nm :

```
# Lammmps input file for carbon nanotube
```

```
1360 atoms
```

```
20 bonds
```

```
0 angles
```

```
0 dihedrals
```

```
0 impropers
```

```
2 atom types
```

```
1 bond types
```

```
-33.000      33.000 xlo xhi
```

```
-38.000      38.000 ylo yhi
```

```
-50.000     105.000zlo zhi
```

```
Masses
```

```
1 1.0
```

```
2 12.0
```

Atoms

1	1	2	0.0	6.770	0.000	0.000
2	1	2	0.0	6.623	1.408	0.000
3	1	2	0.0	6.439	2.092	1.228
4	1	2	0.0	5.863	3.385	1.228
5	1	2	0.0	5.477	3.980	0.000
6	1	2	0.0	4.530	5.031	0.000
7	1	2	0.0	3.980	5.477	1.228
8	1	2	0.0	2.754	6.185	1.228
9	1	2	0.0	2.092	6.439	0.000
10	1	2	0.0	0.708	6.733	0.000

1319	1	2	0.0	6.439	-2.092	79.822
1320	1	2	0.0	6.733	-0.708	79.822
1321	2	1	1.0	-4.000	-4.000	-2.000
1322	3	1	1.0	-4.000	-4.000	-5.000
1323	4	1	1.0	-4.000	-4.000	-8.000

1336	17	1	1.0	2.000	-1.000	-8.000
------	----	---	-----	-------	--------	--------

1337	18	1	1.0	2.000	2.000	-8.000
1338	19	1	1.0	2.000	-4.000	-5.000
1339	20	1	1.0	2.000	2.000	-5.000
1340	21	1	1.0	-1.000	2.000	-8.000
1341	2	1	-1.0	-3.787	-4.000	-2.000
1342	3	1	-1.0	-3.787	-4.000	-5.000
1343	4	1	-1.0	-3.787	-4.000	-8.000
1344	5	1	-1.0	-3.787	-1.000	-8.000
.....						
1358	19	1	-1.0	2.213	-4.000	-5.000
1359	20	1	-1.0	2.213	2.000	-5.000
1360	21	1	-1.0	-0.787	2.000	-8.000

Bonds

1	1	1321	1341
2	1	1322	1342
3	1	1323	1343
4	1	1324	1344
5	1	1325	1345
6	1	1326	1346

7 1 1327 1347

.....

16 1 1336 1356

17 1 1337 1357

18 1 1338 1358

19 1 1339 1359

20 1 1340 1360

