

Simulasi Pengaruh Chiralitas CNT pada Kapasitas Penyimpanan Hidrogen dengan Menggunakan Program LAMMPS

Supriyadi^a, Nasruddin^b, Engkos A. Kosasih^b, Mardi Santoso^b

^aJurusan Teknik Mesin, Universitas Trisakti Jakarta
Jl. Kyai Tapa, Grogol 11440, Jakarta Barat
e-mail: supriyadins@yahoo.co.id

^bDepartemen Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Indonesia
Kampus Baru Depok, Depok 16424

ABSTRACT

With the rapid consumption of fossil energy and increasing environmental pollution, there is an urgent need to develop alternatives solution. The technical challenge for the coming years is to found energy resources that are that are environmentally friendly and renewable energy sources and carriers Hydrogen has been under investigation for its potential use as an alternative energy for some recent decades. Hydrogen is a rich resource that exist in the gaseous state and by far is the best alternative fuel due to its unique qualities of being non-polluting, renewable and to its high thermal energy efficiency. Hydrogen has a wide range of possible applications, as both stationary and mobile use. The application of hydrogen as a fuel is still very limited because of the lack of economic way for its storage. Several studies have been carried out on hydrogen storage in carbon nanotubes have been considered to be ideal for adsorption of hydrogen due to it has a large surface area and high pore volume. The CNT with high surface area, interesting porosities and pore size distribution posses appropriate characteristics for hydrogen storage. How to improve the performance of carbon nanotubes is still very interesting. Experimental research on carbon nanotubes generally still too expensive, therefore it is necessary to be supported by another method ie Molecular Dynamics Simulation. The aim of this work is to build and to make simulation models using LAMMPS to study hydrogen storage capacity on various chirality of CNT. Hydrogen adsorption capacity of single-wall carbon nanotubes (SWNT) dependent on chirality, temperature and running time is investigated. Molecular dynamics simulation was carried out to investigate the behavior of (8, m), (10, m) and (12, m) where $m = 0, 8, 10, 12$ armchair CNT in hydrogen adsorption. Molecular dynamics simulation based on statistic mechanics and statistic thermodynamics to simulate the particles' interactions and consists of several processing methods, such as trajectories, position updates, the cut-off radius, and the initial condition. Hydrogen-hydrogen and hydrogen-carbon interactions are both modeled with Lennard-Jones potential. From the simulation can be identified that the amount of adsorpted hydrogen as a function of chirality of CNT.

Keywords : CNT, Hydrogen, Adsorption, Chirality, Molecular Dynamic, LAMMPS

Pendahuluan

Adsorpsi Hidrogen pada CNT

Apakah CNT merupakan media penyimpan hydrogen yang efektif, merupakan pertanyaan yang menarik bagi banyak peneliti di berbagai negara. Hal ini terkait erat dengan berbagai upaya bagaimana memanfaatkan hydrogen melalui metoda adsorpsi, sehingga diperlukan material yang dapat menyerap dan melepaskan kembali hydrogen dengan sama baiknya. Salah satu kendala sulitnya meningkatkan kapasitas penyimpanan hydrogen pada struktur nano adalah terbatasnya kuantitas dan kemurnian unsur karbon dalam struktur tersebut [1, 2].

Teknik penyimpanan hidrogen dengan metode

adsorpsi dalam material berpori seperti karbon merupakan teknik penyimpanan hidrogen bertekanan yang efektif dan dapat menjawab semua kekurangan dari ketiga metode yang sudah ada. Material karbon aman terhadap lingkungan, biaya operasionalnya relatif murah dan berat molekul atom karbon tidak menambah berat total tangki penyimpanan secara signifikan [2, 3, 4]. Molekul gas yang disimpan dalam keadaan teradsorpsi pada adsorben mengalami kondensasi dimana densitasnya adsorbat mendekati densitas cair sehingga kapasitas penyimpanan hidrogen dalam teknik ini juga relatif besar walaupun masih lebih kecil dibandingkan dengan teknik pencairan gas [5, 6, 7].

Porier dan kawan-kawan melaporkan kapasitas

penyimpanan hydrogen dengan metode adsorpsi dalam karbon aktif lebih besar daripada dalam metode gas bertekanan. Pada kondisi yang sama, yaitu temperatur 77°C dan tekanan 50 bar, hidrogen dapat disimpan dalam metode adsorpsi sebesar 35 Kg/m^3 sedangkan dalam metode gas bertekanan sebesar 17 Kg/m^3 . Walaupun begitu metode adsorpsi ini dapat menjadi kurang efisien pada tekanan yang cukup tinggi (di atas 100 bar) karena sudah mengalami kejenuhan sehingga kapasitas penyimpanannya menjadi lebih kecil dibandingkan dengan metode gas bertekanan pada tekanan yang sama [8].

Upaya untuk mencari jawaban di atas telah dilakukan oleh Hirscher M, dan kawan-kawan (2003). Hirscher berpendapat bahwa penyimpanan hydrogen dalam material karbon merupakan tema yang sangat menarik karena material karbon memiliki kapasitas penyimpanan yang tinggi secara gravimetric. Disamping itu dalam material karbon, hydrogen dapat disimpan dalam temperature dan tekanan yang tidak terlalu ekstrim. Isu utama yang diteliti oleh Hirscher dan kawan-kawan adalah: (i) analisa kuantitatif kapasitas penyimpanan dengan thermal desorption spectroscopy, (ii) penyimpanan hydrogen di SWNT dalam temperature dan tekanan ruang, (iii) keterkaitan kapasitas penyimpanan dengan luas permukaan dan (iv) kapasitas penyimpanan hydrogen pada karbon struktur nano dengan ball milling.

Dilon, 1997, mempublikasikan kapasitas penyimpanan hydrogen pada SWNT tidak murni, pada temperature dan tekanan ruang. Dengan menggunakan thermal desorption spectroscopy diperoleh 0.01 wt%. Berdasarkan hasil yang diperoleh Dilon, Hirscher memprediksi jika SWNT dimurnikan, maka kapasitas penyimpanan hydrogen akan meningkat menjadi berkisar 5 – 10 wt%.

Dalam sepuluh tahun terakhir pembahasan penyimpanan hydrogen pada berbagai material carbon struktur nano masih merupakan hal yang menarik. Pengukuran kapasitas penyimpanan hydrogen dalam material jenis ini, yang sudah banyak dipublikasikan di berbagai jurnal berkisar antara 0,1 wt% hingga 67 wt%. Hasil spektakular hingga 67 wt% , jauh melampaui target yang ditetapkan oleh DOE yaitu sebesar 6,5 wt% atau sebesar $62 \text{ kgH}_2 \cdot \text{M}^{-3}$, dilakukan oleh Baker dan Rodriguez pada karbon jenis nanofiber pada tekanan 110 atm, pada suhu ruang dan dimonitor selama 24 jam [2].

Selanjutnya Becher dan kawan-kawan melakukan penelitian tentang hydrogen storage pada CNT pada kondisi sebaliknya, yaitu pada tekanan rendah. Hasil yang dilakukan oleh peneliti sebelumnya seperti M. Heben berkisar antara 5 – 10 wt%. Penelitian adsorpsi hydrogen dalam CNT pada suhu ruang juga dilakukan oleh Zhu H, dan kawan-kawan, pada

tekanan moderat (3 - 10 atm), hasil yang diperoleh sebesar 3 wt%.

Hasil eksperimen yang diperoleh Becher lebih baik yaitu sebesar 3,5 wt%, selanjutnya Becher menyatakan untuk melampaui target 6,5 harus dilakukan pada tekanan 900 atm, yang berarti jauh lebih besar dari tekanan maksimum tabung hydrogen bertekanan tinggi.

Callejas dan kawan-kawan (2004) melakukan penelitian untuk meningkatkan kapasitas penyimpanan hydrogen pada SWNT melalui reduksi sampel. SWNT hasil produksi arc-discharge dimodifikasi dengan menggunakan Ni/Y sebagai katalis dengan persentase yang berbeda. SWNT yang disintesa dengan menggunakan metoda electric-arc discharge memiliki rasio unsure logam dan katalis 2/0,5 dan 4/1 (Ni/Y). Selanjutnya diperiksa kandungan logam dan nilai BETnya dan diperoleh: Ni/Y 2/0,5 (266), Ni/Y 2/0,5 + $350^{\circ}\text{C}/1 \text{ jam}$ (728), Ni/Y 4/1 (207), Ni/Y 4/1 + $350^{\circ}\text{C}/1 \text{ jam}$ (585).

Hentsche M (2004) melakukan upaya peningkatan kapasitas penyimpanan hydrogen dengan proses ball-milling. Adsorpsi hydrogen pada ball-milled graphite diamati pada temperature antara 35 – 110 K pada tekanan 20 MPa.

Simulasi Dinamika Molekular

Dinamika molekular merupakan suatu metode untuk menyelidikistruktur dari zat padat, cair dan gas. Umumnya dinamika molekular menggunakan teknik persamaan hukum newton dan mekanika klasik. Dinamika molekular 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 molekular pertama menggunakan sistem yang realistic yaitu simulasi dengan menggunakan air. Kemudian pada tahun 1977, muncul pertama kali simulasi terhadap proteinyaitu simulasi sebuah inhibitor enzim tripsin bovine pancreas (BPTI)

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

jika materi tidak dapat menembus batas, dan sistem terbuka, jika materi dapat menembus batas.

Tujuan utama simulasi dinamika molekul adalah menghasilkan trajektori molekul-molekul sepanjang suatu jangka waktu tertentu. 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 [5, 9].

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

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

Dalam aplikasinya Monte Carlo lebih sesuai untuk simulasi fluida dengan densitas menengah sedangkan Dinamika Molekular memiliki kelebihan dalam half fluida dengan densitas yang tinggi seperti gas atau cairan bertekanan tinggi. Kedua metode ini memiliki kesamaan dalam hal penggunaan fungsi potensial. Keakuratan hasil yang dihasilkan oleh Monte Carlo atau Dinamika Molekular tergantung pada akurasi pada fungsi potensial. Oleh karena itu perlu berhati-hati dalam memilih fungsi potensial.

Metoda Simulasi dan Fasilitas Yang Digunakan

Pada penelitian ini simulasi dinamika molekular dilakukan pada CNT dengan berbagai variasi chiralitas, diameter dan panjang CNT, yaitu (8, m), (10, m) dan (12, m). Hasil yang diperoleh selanjutnya digunakan untuk membangun model pada karbon

aktif dalam bentuk granular. Interaksi antara atom dalam simulasi dihitung dengan menggunakan potensial Lennard-Jones, gaya Coulomb dan gaya Van Der Waals. Potensial Lennard-Jones (LJ 12-6) mendominasi pada jarak pendek sehingga jarak antar atom yang melebihi jari-jari cut off akan diabaikan, sedangkan untuk gaya Coulomb lebih mendominasi pada jarak yang lebih panjang, sehingga selama muatan antar atom masih signifikan nilainya masih dihitung walaupun jarak antar atomnya relatif besar. Ini untuk mengubah tekanan atau temperature dilakukan dengan memvariasikan jumlah hydrogen atau juga dapat dilakukan dengan mengubah volume ruang simulasinya.

Tujuan simulasi dinamika molekular adalah melakukan update posisi, arah dan kecepatan setiap saat, akibat saling tabrak, saling dorong, akibat gaya-gaya yang bekerja pada setiap partikel. Kondisi paling sulit adalah menentukan kondisi awal seluruh atom yang disimulasikan. Posisi, jarak dan toleransi harus disesuaikan dengan kondisi sistem yang ada. Dalam simulasi ini untuk menentukan kondisi awal dilakukan melalui beberapa tahap. Untuk menentukan satu atau beberapa gugus molekul dibuat dalam program Avogadro, koordinat semua atom disimpan dalam bentuk file.pdb, sedangkan untuk membangun CNT dapat menggunakan berbagai software antara lain CNT Generator, CNT Wrapping dan VMD. Dalam simulasi ini menggunakan fasilitas Nano Builder yang ada dalam VMD. Koordinat semua atom yang diperoleh disimpan dalam bentuk file.pdb. Selanjutnya untuk menentukan berapa banyak molekul yang diinginkan, posisinya di mana serta berapa toleransi antar molekul, digunakan program packmol. Packmol membutuhkan masukkan program sederhana dan data database file.pdb, input file dalam bentuk file.inp sedangkan outputnya dalam bentuk file.pdb.

Untuk melakukan update posisi setiap atom dijalankan dengan software LAMMPS (Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Input dari program ini berupa program utama dan data yang masing-masing disajikan dalam format notepad++. Program LAMMPS ini hanya melakukan penghitungan untuk update posisi, sedangkan untuk menampilkan hasilnya diperlukan lagi program visualisasi seperti Atom Eyes, Pizza, dan VMD. Dalam penelitian ini digunakan program VMD sebagai alat bantu untuk visualisasinya [10, 11]

Skema Numerik

Peran utama komputasi dalam DM adalah mengintegrasikan persamaan gerak berupa persamaan diferensial simultan, yang diturunkan dari persamaan Newton [11].

$$m_i \frac{dv_i}{dt} = \sum_j F_2(r_i, r_j) + \sum_j \sum_k F_3(r_i, r_j, r_k) + \dots$$

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i \tag{1}$$

Di mana m_i adalah massa partikel, sedangkan r_i dan v_i masing-masing menyatakan vektor posisi dan kecepatan. F_2 fungsi gaya yang menyatakan interaksi antar dua partikel berpasangan, F_3 menyatakan interaksi 3 partikel berpasangan.

Salah satu model energi yang digunakan untuk menganalisa saling keterkaitan antar molekul adalah Potensial Lennard-Jones (LJ), yang paling umum digunakan dalam simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT adalah [12, 13]:

$$U_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \tag{2}$$

Pada saat ini model potensial LJ dapat dikatakan sebagai model potensial standar karena dapat diaplikasikan untuk berbagai geometri dan ikatan molekul (padat, cair, permukaan, kluster, sistem dua dimensi dan sebagainya). Xing BW menggabungkan potensial LJ dan reactive empirical bond order (REBO), pada simulasi untuk menentukan modulus young [14].

Hasil dan Pembahasan

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

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

Divariasikan menjadi dua belas macam untuk mengetahui perbandingan adsorpsi pada CNT dengan chirality yang beragam yakni armchair (n=m), zigzag (salah satu dari n atau m bernilai 0), dan chiral (yang nilai n atau m nya selain dari jenis armchair dan zigzag). Parameter yang digunakan ketika simulasi adalah temperatur tetap 10K, jumlah molekul sama yakni 20 molekul hidrogen (40 atom hidrogen), dan ruang simulasi yang sama.

Diameter dari CNT sendiri bisa dihitung berdasarkan vector n dan m dan untuk chirality CNT yang disimulasikan diperoleh diameter dari masing-masing CNT yang disimulasikan adalah sebagai berikut:

Tabel 1. Chiralitas dan Diameter CNT Simulasi

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

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

Tabel 2. Hasil Adsorpsi Hidrogen pada Berbagai Ukuran Chiralitas

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

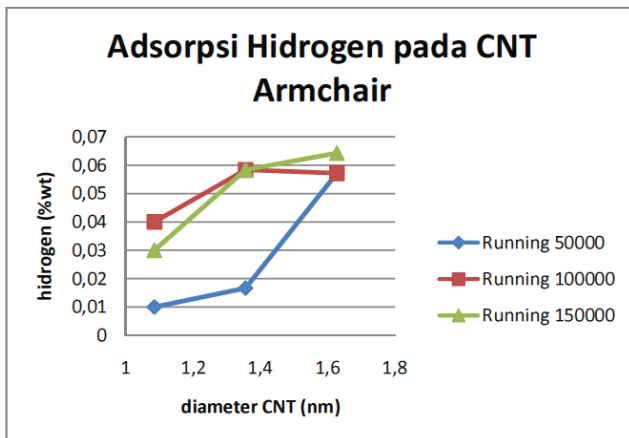
Dari table adsorpsi di atas dapat kita lihat bahwa CNT dengan jenis chirality index chiral (no. 3, 4, 6, 8, 10, 11) akan memiliki hasil yang sama ketika nilai n dan m berlawanan di setiap running yang sama. Seperti pada CNT dengan chirality index (8,10) akan memiliki adsorpsi hidrogen yang sama dengan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

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

tidakberawal dari (0,0).Ruang simulasi yang digunakan semuanya diseragamkan yakni :

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

Pada CNT dengan chirality index zigzag mengalami kenaikan jumlahhidrogen yang diadsorpsi ketika nilai indeks chiralitynya semakin besar.Perbandingan antara jumlah total atom tiap simulasi (CNT danhidrogen) dengan jumlah atom hidrogen yang diadsorpsi oleh CNT (satumolekul hidrogen terdiri dari dua atom hidrogen), dapat dilihat dalam grafik berikut.



Gambar 2. Grafik Adsorpsi hidrogen CNT chirality armchair berdasarkan %wt

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

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

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

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

Kesimpulan

Hasil simulasi dinamika molekular adsorpsi hidrogen pada CNT dengan menggunakan variasi panjang 1, 1,22, 3, 5 dan 8 nm , secara keseluruhan dapat disimpulkan sebagai berikut:

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

Referensi

- [1]. Sang-Hun Nam, Seong H. J, Soon-Bo Lee, and Jin-Hyo Boo, *Investigation of hydrogen adsorption on single wall carbon nanotubes*, Physics Procedia 32 279 – 284(2012).
- [2]. Becher M, Haluska M, Hircher M, *Hydrogen storage in Carbon Nanotubes*, Comptes Rendus Physique vol 4 hal 1055 – 1062 (2003).
- [3]. Banerjee, S.. *Molekular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena*. Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University (2008).
- [4]. Langohr, D., *A Study on Hydrogen Storage Through Adsorption in Nanostructured Carbons*, Desertasi, Ecole Des Mines De Paris, College Doctoral (2004).
- [5]. Supriyadi & Nasruddin, *Simulasi Dinamika Molekular: Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi*. Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin (SNTTM), Universitas Sriwijaya, Palembang(2010).
- [6]. Prasodjo, P., *Studi Kapasitas Adsorpsi serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon sebagai Penyimpan hidrogen*, Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok(2010).
- [7]. Bansal, Roop Chand 1 & Goyal, Meenakshi, *Activated Carbon Adsorption*, Taylor & Francis Group, USA(2005).
- [8]. Porrier, E. *Storage of Hidrogen on Single walled Carbon Nanotube and Other Carbon Nano*. *Journal Appl. Phys.* , 961-967, (2004).
- [9]. Witoelar, A. , *Perancangan dan Analisa Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones*. Bandung: Institut Teknologi Bandung(2002).
- [10]. Aidan Thompshon, S. P., *LAMMPS Users Manua*, GNU Public License(GPL), (2003).
- [11]. Humphrey, W., Dalke, A., Schulten, K. *VMD - Visual Molekular dynamic*. *J.Molec. Graphics* , 33-38(1996).
- [12]. Ercolessi, Furio. *A Molekular Dynamic Primer*(2010). Dipetik Januari 10, 2012, dari www.sissa.it: www.sissa.it/furio/md
- [13]. Haile, J. *Molekular Dynamic Simulations*. John Wiley & Sons Ltd, New York(1992).
- [14]. Allen, M. P. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press, (1987).
- [15]. Keller, Jurgen U., Reiner Staudt. *Gas Adsorption Equilibria; Experimental Methods and Adsorptive Isotherms*. Springer Science & Business Media. (2005).