

Simulasi Dinamika Molekular Adsorpsi Hidrogen pada Carbon Nanotubes (CNT) Dengan Variasi Panjang

Nasruddin^a, Engkos A. Kosasih^a, Ahmad Dzulfahmi^a, Supriyadi^b

^a Departemen Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Indonesia
Kampus Baru Depok, Depok 16424

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

ABSTRACT

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 problems are production costs and storage characteristics. The special hydrogen adsorbing characteristics of carbon nanomaterials make them rather suited as hydrogen storage devices. This paper makes a case that molecular simulation of hydrogen adsorption with variation of CNT length. It identifies the influence of CNT length to the number quantity of hydrogen inside the CNT. We observe adsorption capacity hydrogen storage in three various CNT's length i.e. 1.122, 3, 5 and 8 nm. Hydrogen-hydrogen and hydrogen-carbon interactions are both modeled with Lennard-Jones potential with Coulombic Forces. Adsorption of different length of CNT observed at 10 K with four running times (10000, 25000, 50000 and 100000). The simulation describes that the amount of hydrogen adsorption as a function of CNT's length. The results are: 1.122 nm CNT length can be obtained 0.25 wt % and linearly increased to 0.5 wt % for 8 nm CNT length.

Keywords: hidrogen, simulasi, dinamika molekular, adsorpsi dan CNT

Pendahuluan

Salah satu sumber energi alternatif yang banyak menarik perhatian para peneliti saat ini adalah hidrogen. Hidrogen dipandang sebagai salah satu sumber energi yang menjanjikan di masa mendatang. Hal ini dikarenakan hidrogen termasuk energi yang dapat diperbaharui, terbarukan serta ramah lingkungan. Sumber energi hidrogen tersedia sangat melimpah di alam dan emisi hasil pembakarannya tidak menghasilkan CO₂. Karakteristik ini membuat hidrogen berpotensi sebagai salah satu energi masa depan yang layak dipertimbangkan dalam konteks penerapan energi yang berkelanjutan sesuai dengan cetak biru kebijakan energi nasional [1 - 4].

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 [3, 4].

Penyimpanan hidrogen telah menarik banyak perhatian dunia terkait isu untuk mewujudkan energi yang berkelanjutan. Meskipun demikian, masih banyak kendala dalam pemanfaatan hidrogen. Kendala utama dalam penyimpanan hidrogen adalah karena densitas hidrogen sangat rendah. Hidrogen berbentuk gas pada temperatur dan tekanan ruang dan untuk satu kilogram hidrogen menempati 12,2 m³ sehingga memerlukan volume ruang yang besar, akibatnya sulit diaplikasikan untuk berbagai kebutuhan [5,6].

Berbagai teknologi penyimpanan gas hidrogen terus dikembangkan melalui berbagai eksperimen. Pada saat ini telah dikembangkan empat sistem penyimpanan hidrogen yaitu pencairan hidrogen, hidrogen bertekanan, metal hidrida dan adsorpsi pada material berpori. Teknik penyimpanan hidrogen dengan metoda adsorpsi pada material seperti karbon merupakan metoda yang memiliki banyak keunggulan secara komparatif dibandingkan ketiga metoda yang lain. Selain aman, kondisi operasi yang relatif murah sangat menjanjikan untuk diaplikasikan 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 menjadirelatif besar walaupun masih lebih kecil jika dibandingkan dengan teknik pencairan [5, 6]

Sistem penyimpanan hidrogen dengan teknologi adsorpsi pada material berpori telah menarik banyak perhatian para peneliti untuk mengembangkannya. Tabung nano-karbon/Carbon Nanotubes(CNT) merupakan salah satu material yang mempunyai kemampuan cukup baik untuk adsorpsi gas hidrogen karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar [7, 8].

CNT merupakan struktur grafit unsur karbon yang memiliki dimensi dalam satuan nanometer, berbentuk silinder tidak pejal, yang memiliki satu atau lebih dinding tergantung dari jenisnya. Diameter CNT umumnya berkisar antara 1 hingga 100 nm dan variasi panjang bisa mencapai hingga ukuran centimetre. Akibat besarnya perbandingan ukuran panjang dan diameter CNT seolah-olah berdimensi satu. Ikatan karbon dalam CNT berbentuk heksagonal dan masing-masing karbon terikat dengan tiga karbon dengan ikatan sp^2 . Hibridisasi sp^2 terjadi jika satu elektron tereksitasi ke orbital p . Akibatnya, atom karbon yang terhibridisasi sp^2 hanya dapat membentuk tiga ikatan σ dan satu ikatan π . Ikatan π terjadi sebagai akibat dari tumpang tindihnya elektron pada orbital $2p-2p$. Kombinasi ikatan ini yang menyebabkan struktur CNT secara mekanik lebih kuat, secara elektrik dan termal lebih konduktif dan secara kimia maupun biologi lebih aktif dari grafit maupun intan [8, 9].

Berbagai eksperimen telah dilakukan untuk mengetahui kapasitas penyimpanan hidrogen dalam CNT. Namun, dalam eksperimen umumnya terkendala oleh keandalan alat dan tingkat keamanan yang pada akhirnya membutuhkan biaya yang sangat mahal. Salah satu terobosan untuk mengatasi masalah tersebut adalah dengan melakukan pemodelan dan simulasi dinamika molekular [4, 10].

Dinamika molekular 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 disekitarnya. Jumlah partikel yang berperan dalam membentuk potensial itu sangat banyak jumlahnya, maka akan sangat sulit mengkalkulasikannya. Untuk itu telah dikembangkan beberapa jenis penyederhanaan kalkulasi untuk menyelesaikan permasalahan dinamika molekular tersebut [10, 11, 12].

Salah satu model potensial yang sering digunakan adalah potensial Lennard-Jones. Salah satu keuntungan dari teknik simulasi ini adalah sifatnya

yang deterministic 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 suatu jarak tertentu diabaikan [10, 11, 12].

Metoda Simulasi dan Fasilitas Yang Digunakan

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.

LAMMPS

Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), merupakan komponen utama dalam menjalankan simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT. Piranti ini dapat membuat sebuah sistem pemodelan dari berbagai jenis atom dan molekul untuk disimulasikan. Kelebihan piranti ini adalah dapat membantu membuktikan berbagai fenomena atom dan molekul yang selama ini dilakukan secara eksperimental dengan menghabiskan waktu, tenaga, biaya dan resiko yang cukup besar. Karena piranti ini dirancang untuk mensimulasikan banyak atom dan molekul dalam skala besar, baik dilakukan dengan satu maupun dua processor [13].

Cygwin

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 (OS)* 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.

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 molekular, bioinformatika, ilmu material dan bidang lainnya.

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 biologi, seperti protein, asam nukleat, dan lain-lain. Piranti ini tidak dapat menjalankan simulasi secara langsung, namun piranti ini dapat menerima *output* dari piranti lain agar proses dan hasil simulasi tersebut divisualisasikan.

Prosedur Simulasi

Inisialisasi Koordinat

Sebelum melakukan simulasi, harus diketahui jumlah dan jenis atom ataupun molekul yang akan disimulasikan. 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.

Pembentukan Hidrogen

Dalam pembentukan inisialisasi posisi koordinat atom dan molekul hidrogen dilakukan pada piranti Avogadro. Penyusunan posisi koordinat dibentuk seperti kubus, hal ini semata-mata dilakukan hanya sebagai sebuah sampel pemodelan agar dapat memudahkan penulis dalam memindahkan posisi koordinat atom hidrogen pada variasi simulasi yang berbeda. Pada simulasi ini penulis membentuk sampel dua puluh molekul hidrogen atau empat puluh atom hidrogen. Dengan jarak antar atom hidrogen sebesar $0,74 \text{ \AA}$. Kemudian nilai cut off sebesar 3.2, hal ini didasarkan pada referensi yang merujuk nilai cut off dari 2.5 hingga 3.2. Setelah didapatkan koordinat hidrogen, maka didapat *output* file dari Avogadro yang berisi koordinat atom-atom hidrogen dalam sumbu x, y, z. Koordinat ini masih dapat diubah atau digeser sesuai dengan kebutuhan simulasi sebelum digabungkan dengan koordinat CNT.

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 chiralitas dan panjang CNT. Jenis chiralitas 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 pembentukan CNT.

Penggabungan Koordinat

Setelah didapatkan *output* koordinat dari Avogadro dan VMD, maka dapat digabungkan 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.

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 berbagai parameter yang dibutuhkan untuk menciptakan sebuah kondisi yang diinginkan. Konten *input script* pada LAMMPS terdiri dari empat bagian penting yang harus diperhatikan, diantaranya adalah:

Initialization, merupakan pengaturan parameter awal dalam simulasi. Parameter-parameter yang perlu ditentukan dalam pengaturan awal yaitu unit, dimensi, boundary, atom_style, neighbor, dan neighbor_modify.

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, yang akan memanggil nama lampiran yang berisikan atom definition yang sudah dibuat.

Settings, merupakan bagian tentang pengaturan koefisien ikatan, parameter-parameter kondisi simulasi yang diinginkan, dan output.

Run a simulation, simulasi dinamika molekul dijalankan dengan menggunakan perintah run.

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.

Visualisasi

Setelah simulasi berjalan pada panel Cygwin, maka akan muncul dumpfile dari simulasi tersebut. Kemudian membuka program VMD untuk menjalankan visualisasi dari hasil simulasi tersebut.

Skema Numerik

Mekanika statistik dan termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonversi informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala makroskopik. Konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul menentukan sifat-sifat yang dimiliki materi tersebut. Sifat ini antara lain adalah energi, temperatur, tekanan dan entalpi. Salah satu model energi potensial antara dua molekul yang dikembangkan adalah Potensial Lennard-Jones. Model ini dianggap palingsederhana, namun memiliki ketelitian yang baik untuk simulasi. Model Potensial ini dirumuskan [10, 11, 12]:

$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (1)$$

n dan m adalah bilangan bulat positif yang dipilih $n > m$, i dan j indeks dari molekul dan $R_{ij} = |R_i - R_j|$. Sedangkan σ adalah parameter jarak dan ε parameter yang menyatakan kekuatan interaksi. Pilihan yang umum untuk m dan n adalah $m=6$ dan $n=12$, sehingga persamaan di atas menjadi [10, 11, 12]:

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

Hasil dan Pembahasan

Analisa hasil dari simulasi adsorpsi hidrogen dalam CNT meliputi tiga variasi panjang dengan jumlah molekul hidrogen, temperature dan volume system yang sama. Jumlah hidrogen yang dibuat adalah dua puluh molekul dan temperature 10K. 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. Jumlah hidrogen yang terserap dalam berbagai kondisi yang disimulasikan dapat dilihat dalam table di bawah ini.

Tabel 1. 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	18

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

Pada run 10000, jumlah hidrogen 20 molekul dan suhu dijaga konstan 10 K. Dari simulasi diperoleh hasil bahwa penambahan panjang CNT menyebabkan jumlah hidrogen yang diserap bertambah. Hal ini menjelaskan bahwa pada run 10000, variasi panjang

cukup mempengaruhi jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dari panjang 1,122 hingga panjang 8 nm.

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

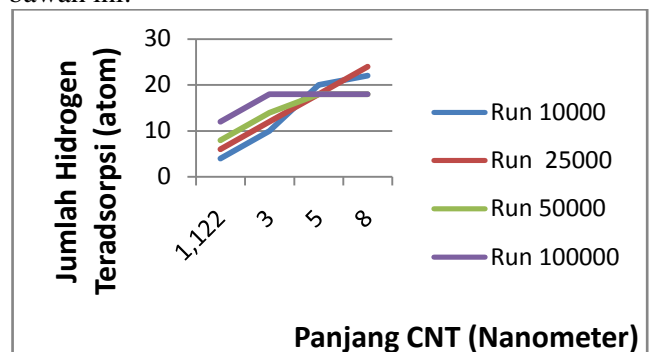
Pada run 25000 juga terjadi hal yang sama, yaitu terjadi penambahan jumlah atom dengan semakin besarnya panjang CNT. Hal ini diiringi pula dengan penambahan jumlah adsorpsi hidrogen lebih besar dari run 10000. Karena semakin lama waktu interaksinya akan mempengaruhi gerakan atom hidrogen yang terikat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

Pada saat 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.

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 kemungkinan dikarenakan terjadi adsorpsi fisika yang menyebabkan atom hidrogen mudah tertangkap, namun mudah juga lepas.

Secara umum terjadi total pertambahan rata-rata jumlah hidrogen pada masing-masing varian panjang meningkat dari run sebelumnya. Namun terjadi penurunan pada panjang CNT 5 nm, hal ini dapat disebabkan karena adanya tumbukan antar hidrogen sehingga menghalangi hidrogen yang akan masuk. Berat persen dari adsorpsi hidrogen secara umum meningkat, tapi tetap secara kualitas dapat jelas terlihat dari kurva yang menunjukkan penurunan berat persen adsorpsi hidrogen terhadap variasi panjang CNT.

Dari keseluruhan simulasi dapat dilihat pada grafik di bawah ini.



Gambar 1. Grafik Adsorpsi Hidrogen Terhadap Variasi Panjang CNT.

Grafik tersebut menunjukkan bahwa semakin bertambah panjang CNT, maka semakin besar jumlah hidrogen yang teradsorpsi, walaupun pertambahannya kurang signifikan. Namun, dapat dianggap bahwa pada penambahan 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.

Dari grafik di atas, dapat menjelaskan bahwa secara kualitas, berat persen dari hidrogen yang terserap mengalami penurunan persentase. Bahkan terlihat pada semakin meningkatnya nilai run, persentase penurunan berat persen cenderung semakin besar nilai penurunannya dari panjang 1.122 hingga 8 nm, yaitu pada run 100000 panjang 1.122 memiliki nilai berat persen 0.25% dan panjang 8 nm hanya memiliki nilai berat persen sebesar 0.05%. Selisih berat persen menjadi semakin besar dengan meningkatnya nilai run. Hal ini dikarenakan peningkatan kuantitas hidrogen yang teradsorpsi pada setiap penambahan panjang CNT nilainya tidak sebanding dengan total jumlah massa atom yang berada dalam kotak simulasi. Berat persen merupakan jumlah massa dari seluruh atom hidrogen yang teradsorpsi dibagi dengan keseluruhan massa atom hidrogen dan karbon dalam simulasi.

Dalam sebuah referensi dijelaskan bahwa panjang CNT dan kelengkungannya dapat memengaruhi termodinamika penyimpanan, hal ini dapat dilihat dari hasil simulasi bahwa semakin besar nilai panjang CNT mulai dari 1.122, 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 pertambahan jumlah hidrogen teradsorpsi tidak sebanding dengan pertambahan jumlah atom dalam kotak simulasi, sehingga berat persennya semakin menurun. Perubahan ukuran terkait panjang CNT dan pertambahan 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.

Kesimpulan

Hasil simulasi dinamika molekular adsorpsi hidrogen pada CNT dengan menggunakan variasi panjang 1,122, 3, 5 dan 8 nm, secara keseluruhan dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Pengaturan perbedaan panjang pada CNT dalam fenomena adsorpsi hidrogen ternyata sangat mempengaruhi kuantitas hidrogen yang teradsorpsi masuk ke dalam CNT ataupun 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. Namun nilai berat persen pada panjang 1,122, 3, 5 dan 8 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.

Referensi

- [1]. Banerjee, S.. *Molekular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena*. Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University (2008).
- [2]. Langohr, D., *A Study on Hydrogen Storage Through Adsorption in Nanostructured Carbons*, Desertasi, Ecole Des Mines De Paris, College Doctoral (2004).
- [3]. Conte M, *Hydrogen Economy for a Sustainable Development : state-of-the-art and technological perspectives*, *Journal of Power Sources* , 171-187. (2001).
- [4]. Supriyadi & Nasruddin, *Simulasi Dinamika Molekuler : Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi*. Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin (SNTTM), Universitas Sriwijaya, Palembang (2010).
- [5]. Prasodjo, P., *Studi Kapasitas Adsorpsi serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon sebagai Penyimpan hidrogen*, Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2010).
- [6]. Bansal, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, *Activated Carbon Adsorption*, Taylor & Francis Group, USA (2005).
- [6]. Porrier, E. *Storage of Hydrogen on Single walled Carbon Nanotube and Other Carbon Nano*. *Journal Appl. Phys.* , 961-967, (2004).
- [7]. Rouquerol, J., Francois R., & Kenneth Sing. *Adsorption by Powders And Porous Solids*. Elsevier (1998).
- [8]. Yulianto, B. *Carbon Nanotube, Material Ajaib Primadona Teknologi Nano* (2005, Januari). Dipetik Desember 10, 2011, dari <http://www.nano.lipi.go.id/utama.cgi?cetakartikel&1073086044>
- [9]. Mohsin, Y. http://www.chem-is-try.org/tabel_periodik/hidrogen / (2004). Dipetik 15 januari 2012.
- [10]. Ercolessi, Furio. *A Molekular Dynamic Primer* (2010). Dipetik Januari 10, 2012, dari www.sissa.it: www.sissa.it/furio/md
- [11]. Haile, J. *Molekular Dynamic Simulations*. John Wiley & Sons Ltd, New York (1992).
- [12]. Witoelar, A. , *Perancangan dan Analisa Dinamika Molekul Ensemble Mikrokonal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones*. Bandung: Institut Teknologi Bandung (2002).
- [13]. Aidan Thompshon, S. P., *LAMMPS Users Manua*, GNU Public License (GPL), (2003).
- Allen, M. P. (1987). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press.
- Humphrey, W., Dalke, A., Schulten, K. (1996). VMD - Visual Molekular dynamic. *J. Molec. Graphics* , 33-38.
- Keller, Jurgen U., Reiner Staudt. (2005). Gas Adsorption Equilibria; Experimental Methods and Adsorptive Isotherms. *Springer Science & Business Media* .
- 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 Molekular-Dynamics. *Journal of Computational Physics* , 1-19.
- Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L. (t.thn.). *CHARMM Molekular 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.

Simulasi Dinamika Molekular Adsorpsi Hidrogen pada Carbon Nanotubes (CNT) Dengan Variasi Panjang

Nasruddin^a, Engkos A. Kosasih^a, Ahmad Dzulfahmi^a, Supriyadi^b

^a Jurusan Teknik Mesin, Fakultas Teknik, Universitas Indonesia
Kampus Baru Depok, Depok 16424

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

ABSTRACT

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 problems are production costs and storage characteristics. The special hydrogen adsorbing characteristics of carbon nanomaterials make them rather suited as hydrogen storage devices. This paper makes a case that molecular simulation of hydrogen adsorption with variation of CNT length. It identifies the influence of CNT length to the number quantity of hydrogen inside the CNT. We observe adsorption capacity hydrogen storage in three various CNT's length i.e. 1.122, 3, 5 and 8 nm. Hydrogen-hydrogen and hydrogen-carbon interactions are both modeled with Lennard-Jones potential with Coulombic Forces. Adsorption of different length of CNT observed at 10 K with four running times (10000, 25000, 50000 and 100000). The simulation describes that the amount of hydrogen adsorption as a function of CNT's length. The results are: 1.122 nm CNT length can be obtained 0.25 wt % and linearly increased to 0.5 wt % for 8 nm CNT length.

Keywords: hidrogen, simulasi, dinamika molekular, adsorpsi dan CNT

Pendahuluan

Salah satu sumber energi alternatif yang banyak menarik perhatian para peneliti saat ini adalah hidrogen. Hidrogen dipandang sebagai salah satu sumber energi yang menjanjikan di masa mendatang. Hal ini dikarenakan hidrogen termasuk energi yang dapat diperbaharui, terbarukan serta ramah lingkungan. Sumber energi hidrogen tersedia sangat melimpah di alam dan emisi hasil pembakaran yang tidak menghasilkan CO₂ membuat hidrogen berpotensi sebagai salah satu energi masa depan yang layak dipertimbangkan dalam konteks penerapan energi yang berkelanjutan sesuai dengan cetak biru kebijakan energi nasional [1 - 4].

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 [3, 4].

Penyimpanan hidrogen telah menarik banyak perhatian dunia terkait isu untuk mewujudkan energi yang berkelanjutan. Kendala utama dalam penyimpanan hidrogen adalah karena densitas hidrogen sangat rendah. Hidrogen berbentuk gas pada temperatur dan tekanan ruang dan untuk satu kilogram hidrogen menempati 12,2 m³ sehingga memerlukan volume ruang yang besar, akibatnya sulit diaplikasikan untuk berbagai kebutuhan [5,6].

Berbagai teknologi penyimpanan gas hidrogen terus dikembangkan melalui berbagai eksperimen. Pada saat ini telah dikembangkan empat sistem penyimpanan hidrogen yaitu pencairan hidrogen, hidrogen bertekanan, metal hidrida dan adsorpsi pada material berpori. Teknik penyimpanan hidrogen dengan metoda adsorpsi pada material seperti karbon merupakan metoda yang memiliki banyak keunggulan secara komparatif dibandingkan ketiga metoda yang lain. Selain aman, kondisi operasi yang relatif sangat menjanjikan untuk diaplikasikan 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 jika dibandingkan dengan teknik pencairan [5, 6]

Sistem penyimpanan hidrogen dengan teknologi adsorpsi pada material berpori telah menarik banyak perhatian para peneliti untuk mengembangkannya. Tabung nano-karbon/Carbon Nanotubes(CNT) merupakan salah satu material yang mempunyai kemampuan cukup baik untuk adsorpsi gas hidrogen karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar [7, 8].

CNT merupakan struktur grafit unsur karbon yang memiliki dimensi dalam satuan nanometer, berbentuk silinder tidak pejal, yang memiliki satu atau lebih dinding tergantung dari jenisnya. Diameter CNT umumnya berkisar antara 1 hingga 100 nm dan variasi panjang bisa mencapai hingga ukuran centimetre. Akibat besarnya perbandingan ukuran panjang dan diameter CNT seolah-olah berdimensi satu. Ikatan karbon dalam CNT berbentuk heksagonal dan masing-masing karbon terikat dengan tiga karbon dengan ikatan sp^2 . Hibridisasi sp^2 terjadi jika satu elektron tereksitasi ke orbital p . Akibatnya, atom karbon yang terhibridisasi sp^2 hanya dapat membentuk tiga ikatan σ dan satu ikatan π . Ikatan π terjadi sebagai akibat dari tumpang tindihnya elektron pada orbital $2p-2p$. Kombinasi ikatan ini yang menyebabkan struktur CNT secara mekanik lebih kuat, secara elektrik dan termal lebih konduktif dan secara kimia maupun biologi lebih aktif dari grafit maupun intan [8, 9].

Berbagai eksperimen telah dilakukan untuk mengetahui kapasitas penyimpanan hidrogen dalam CNT. Namun, dalam eksperimen umumnya terkendala oleh keandalan alat dan tingkat keamanan yang pada akhirnya membutuhkan biaya yang sangat mahal. Salah satu terobosan untuk mengatasi masalah tersebut adalah dengan melakukan pemodelan dan simulasi dinamika molekular [4, 10].

Dinamika molekular 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 disekitarnya. Jumlah partikel yang berperan dalam membentuk potensial itu sangatlah banyak jumlahnya, maka akan sangat sulit mengkalkulasikannya. Untuk itu telah dikembangkan beberapa jenis penyederhanaan kalkulasi untuk menyelesaikan permasalahan dinamika molekular tersebut [10, 11, 12].

Salah satu model potensial yang sering digunakan adalah potensial Lennard-Jones. Salah satu keuntungan dari teknik simulasi ini adalah sifatnya yang deterministic 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 suatu jarak tertentu diabaikan [10, 11, 12].

Metoda Simulasi dan Fasilitas Yang Digunakan

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.

LAMMPS

Large-scale Atomic/Molekular Massively Parallel Simulator (LAMMPS), merupakan komponen utama dalam menjalankan simulasi adsorpsi hidrogen terhadap CNT. Piranti ini dapat membuat sebuah sistem pemodelan dari berbagai jenis atom dan molekul untuk disimulasikan. Kelebihan piranti ini adalah dapat membantu membuktikan berbagai fenomena atom dan molekul yang selama ini dilakukan secara eksperimental dengan menghabiskan waktu, tenaga, biaya dan resiko yang cukup besar. Karena piranti ini dirancang untuk mensimulasikan banyak atom dan molekul dalam skala besar, baik dilakukan dengan satu maupun dua processor [13].

Cygwin

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 (OS)* Linux, sehingga dapat dibaca 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.

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 molekular, bioinformatika, ilmu material dan bidang lainnya.

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. Piranti ini tidak dapat menjalansimulasi secara langsung, namun piranti ini dapat menerima *output* dari pirantilain agar proses dan hasil simulasi tersebutdivisualisasikan.

Prosedur Simulasidapat

Inisialisasi Koordinat

Sebelum melakukan simulasi, harus diketahui jumlah dan jenis atom ataupun molekul yang akan disimulasikan. Selainitu bentuk CNTs yang digunakan dan posisi koordinat atom –atom pada saat awasebelum melakukan simulasi atau saat $t = 0$. Dalam menginisialisasi koordinat,ada dua pembentukan pemodelan koordinat atom yaitu pembentukan hidrogendan pembentukan CNT. Kedua pembentukan tersebut dilakukan pada piranti yangberbeda, dikarenakan memang kapasitas fungsi dari piranti yang berbeda.

Pembentukan Hidrogen

Dalam pembentukan inisialisasi posisi koordinat atom dan molekulhidrogen dilakukan pada piranti Avogadro. Penyusunan posisi koordinat dibentuk seperti kubus, hal ini semata –mata dilakukan hanya sebagai sebuah sampelpemodelan agar dapat memudahkan penulis dalam memindahkan posisi koordinatatom hidrogen pada variasi simulasi yang berbeda.Pada simulasi ini penulis membentuk sampel dua puluh molekul hidrogenatau empat puluh atom hidrogen. Dengan jarak antar atom hidrogen sebesar 0,74Å. Kemudian nilai cut off sebesar 3.2, hal ini didasarkan pada referensi yangmerujuk nilai cut off dari 2.5 hingga 3.2.Setelah didapatkan koordinat hidrogen, maka didapat output file dariAvogadro yang berisi koordinat atom –atom hidrogen dalam sumbu x, y, z. Koordinat ini masih dapat diubah atau digeser sesuai dengan kebutuhansimulasi sebelum digabungkan dengan koordinat CNT.

Pembentukan CNT

Dalam simulasi ini, pembentukan posisi koordinat CNT dialakukan padapiranti VMD. Ada beberapa jenis parameter pada VMD untuk membentukkoordinat CNT, di antaranya adalah chiralitas dan panjang CNT. Jenis chiralitasyang dibuat adalah jenis armchair (10,10). Sedangkan panjang yang ditetapkandibuat dalam tiga variasi, yaitu variasi panjang 1.122, 5, dan 8 nm. Setelahmengatur parameter yang dibutuhkan VMD dalam membentuk CNT, makadilakukanlah pembentukan CNT.

Penggabungan Koordinat

Setelah didapatkan *output* koordinat dari Avogadro dan VMD, makadapat digabungkan koordinat atom

hidrogen dan CNT untukdimasukkan dalam *input script*. Penggabungan koordinat dilakukan pada Excelsecara manual. Ketika hidrogen dan CNT dapat bersatu, dengan begitu dapatmenyesuaikan apakah posisi hidrogen sudah tepat di dekat CNT atau berada jauh dari area CNT.

Pembentukan Input Script

Input script LAMMPS merupakan informasi yang harus diberikasebelum simulasi, berupa file notepad ++. Informasi ini berguna untukmendefinisikan atom dan molekul beserta posisinya, sekaligus memberikan Berbagai parameter yang dibutuhkan untuk menciptakan sebuah kondisi yangdinginkan. Konten *input script* pada LAMMPS terdiri dari empat bagian pentingyang harus diperhatikan, diantaranya adalah:

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

Atom definition, merupakan bagian pengaturan untuk mendefinisikan jenisatom, jumlah atom, jumlah atom dan molekul, jumlah ikatan, dan posisiawal koordinat atom. Pendefinisian ini tidak dalam *input script*, karenabanyaknya informasi yang diberikan dalam atom definition makapemberian informasinya berupa lampiran file terpisah. Pad *input script*,perintah yang diberikan yaitu read_data, yang akan memanggilnama lampiran yang berisikan atom definition yang sudah dibuat.

Settings, merupakan bagian tentang pengaturan koefisien ikatan,parameter–parameter kondisi simulasi yang diinginkan, dan output.

Run a simulation, simulasi dinamika molekul dijalankan denganmenggunakan perintah run.

Running Program

Ketika *input script* dan lampiran atom definition sudah siap, maka siapdijalankan simulasi dengan menggunakan LAMMPS. Simulasi dijalankan program Cygwin kemudian ketik perintah LAMMPS dengan mnyebutkan namainput script yang sudah dibuat.

Visualisasi

Setelah simulasi berjalan pada panel Cygwin, maka akan muncul dumpfile dari simulasi tersebut. Kemudian membuka program VMD untukmenjalankan visualisasi dari hasil simulasi tersebut.

Skema Numerik

Mekanika statistik dan termodinamika statistik dibutuhkan untuk mengkonvrsi informasi pada skala

atomik menjadi informasi pada skala makroskopik. Konfigurasi posisi dan momentum molekul-molekul menentukan sifat-sifat yang dimiliki materi tersebut. Sifat ini antara lain adalah energi, temperatur, tekanan dan entalpi. 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 [10, 11, 12]:

$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (1)$$

n dan m adalah bilangan bulat positif yang dipilih $n > m$, i dan j indeks dari molekul dan $R_{ij} = |R_i - R_j|$. Sedangkan σ adalah parameter jarak dan ε parameter yang menyatakan kekuatan interaksi. Pilihan yang umum untuk n dan m adalah $m=6$ dan $n=12$, sehingga persamaan di atas menjadi [10, 11, 12]:

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

Hasil dan Pembahasan

Analisa hasil dari simulasi adsorpsi hidrogen dalam CNT meliputi tiga variasi panjang dengan jumlah molekul hidrogen, temperature dan volume system yang sama. Jumlah hidrogen yang dibuat adalah dua puluh molekul dan temperature 10K. 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. Jumlah hidrogen yang terserap dalam berbagai kondisi yang disimulasikan dapat dilihat dalam table di bawah ini.

Tabel 1. 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	18

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

Pada run 10000, jumlah hidrogen 20 molekul dan suhu dijaga konstan 10 K. Dari simulasi diperoleh hasil bahwa penambahan panjang CNT menyebabkan jumlah hidrogen yang diserap bertambah. Hal ini menjelaskan bahwa pada run 10000, variasi panjang cukup mempengaruhi jumlah hidrogen yang diserap oleh CNT dari panjang 1,122 hingga panjang 8 nm.

Berat persen yang terjadi akibat penambahan panjang CNT cenderung menurun. Hal ini mungkin disebabkan semakin panjang CNT semakin besar jumlahnya.

Dengan demikian jika jumlah massa atom hidrogen yang terserap dibagi dengan jumlah total seluruh atom, berat persennya akan menurun.

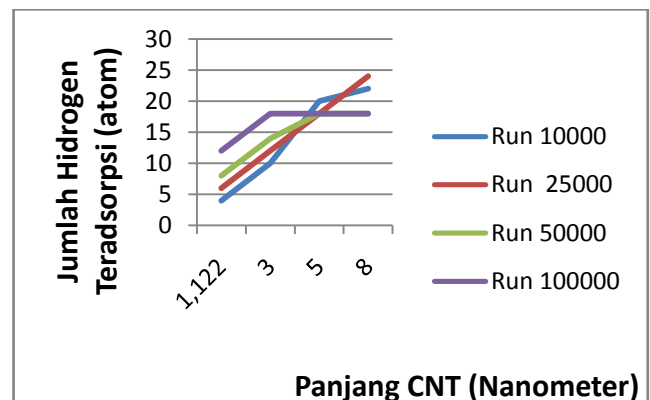
Pada run 25000 juga terjadi hal yang sama, yaitu terjadi penambahan jumlah atom dengan semakin besarnya panjang CNT. Hal ini diiringi pula dengan penambahan jumlah adsorpsi hidrogen lebih besar dari run 10000. Karena semakin lama waktu interaksinya akan mempengaruhi gerakan atom hidrogen yang terikat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

Pada saat 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.

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 kemungkinan dikarenakan terjadi adsorpsi fisika yang menyebabkan atom hidrogen mudah tertangkap, namun mudah juga lepas.

Secara umum terjadi total pertambahan rata-rata jumlah hidrogen pada masing-masing varian panjang meningkat dari run sebelumnya. Namun terjadi penurunan pada panjang CNT 5 nm, hal ini dapat disebabkan karena adanya tumbukan antar hidrogen sehingga menghalangi hidrogen yang akan masuk. Berat persen dari adsorpsi hidrogen secara umum meningkat, tapi tetap secara kualitas dapat jelas terlihat dari kurva yang menunjukkan penurunan berat persen adsorpsi hidrogen terhadap variasi panjang CNT.

Dari keseluruhan simulasi dapat dilihat pada grafik di bawah ini.



Gambar 1. Grafik Adsorpsi Hidrogen Terhadap Variasi Panjang CNT.

Grafik tersebut menunjukkan bahwa semakin bertambah panjang CNT, maka semakin besar jumlah hidrogen yang teradsorpsi, walaupun pertambahannya kurang signifikan. Namun, dapat dianggap bahwa pada penambahan 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.

Dari grafik di atas, dapat menjelaskan bahwa secara kualitas, berat persen dari hidrogen yang terserap mengalami penurunan persentase. Bahkan terlihat pada semakin meningkatnya nilai run, persentase penurunan berat persen cenderung semakin besar nilai penurunannya dari panjang 1.122 hingga 8 nm, yaitu pada run 100000 panjang 1.122 memiliki nilai berat persen 0.25% dan panjang 8 nm hanya memiliki nilai berat persen sebesar 0.05%. Selisih berat persen menjadi semakin besar dengan meningkatnya nilai run. Hal ini dikarenakan peningkatan kuantitas hidrogen yang teradsorpsi pada setiap penambahan panjang CNT nilainya tidak sebanding dengan total jumlah massa atom yang berada dalam kotak simulasi. Berat persen merupakan jumlah massa dari seluruh atom hidrogen yang teradsorpsi dibagi dengan keseluruhan massa atom hidrogen dan karbon dalam simulasi.

Dalam sebuah referensi dijelaskan bahwa panjang CNT dan kelengkungannya dapat memengaruhi termodinamika penyimpanan, hal ini dapat dilihat dari hasil simulasi bahwa semakin besar nilai panjang CNT mulai dari 1.122, 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.

Kesimpulan

Hasil simulasi dinamika molekular adsorpsi hidrogen pada CNT dengan menggunakan variasi panjang 1,122, 3, 5 dan 8 nm, secara keseluruhan dapat disimpulkan sebagai berikut:

1. Pengaturan perbedaan panjang pada CNT dalam fenomena adsorpsi hidrogen ternyata sangat mempengaruhi kuantitas hidrogen yang teradsorpsi masuk ke dalam CNT ataupun 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. Namun nilai berat persen pada panjang 1,122, 3, 5 dan 8 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.

Referensi

- [1]. Banerjee, S.. *Molekular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena*. Virginia: Virginia Polytechnic Institute and State University (2008).
- [2]. Langohr, D., *A Study on Hydrogen Storage Through Adsorption in Nanostructured Carbons*, Desertasi, Ecole Des Mines De Paris, College Doctoral (2004).
- [3]. Conte M, *Hydrogen Economy for a Sustainable Development : state-of-the-art and technological perspectives*, *Journal of Power Sources* , 171-187. (2001).
- [4]. Supriyadi & Nasruddin, *Simulasi Dinamika Molekuler : Dampak dan Prospeknya untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi*. Seminar Nasional Tahunan Teknik Mesin (SNTTM), Universitas Sriwijaya, Palembang (2010).
- [5]. Prasodjo, P., *Studi Kapasitas Adsorpsi serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon sebagai Penyimpan hidrogen*, Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok (2010).
- [6]. Bansal, Roop Chand I & Goyal, Meenakshi, *Activated Carbon Adsorption*, Taylor & Francis Group, USA (2005).
- [6]. Porrier, E. *Storage of Hydrogen on Single walled Carbon Nanotube and Other Carbon Nano*. *Journal Appl. Phys.* , 961-967, (2004).
- [7]. Rouquerol, J., Francois R., & Kenneth Sing. *Adsorption by Powders And Porous Solids*. Elsevier (1998).
- [8]. Yulianto, B. *Carbon Nanotube, Material Ajaib Primadona Teknologi Nano* (2005, Januari). Dipetik Desember 10, 2011, dari <http://www.nano.lipi.go.id/utama.cgi?cetakartikel&1073086044>
- [9]. Mohsin, Y. http://www.chem-is-try.org/tabel_periodik/hidrogen/ (2004). Dipetik 15 Januari 2012.
- [10]. Ercolessi, Furio. *A Molekular Dynamic Primer* (2010). Dipetik Januari 10, 2012, dari www.sissa.it: www.sissa.it/furio/md
- [11]. Haile, J. *Molekular Dynamic Simulations*. John Wiley & Sons Ltd, New York (1992).
- [12]. Witoelar, A. , *Perancangan dan Analisa Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal dengan Potensial Lennard-Jones*. Bandung: Institut Teknologi Bandung (2002).
- [13]. Aidan Thompson, S. P., *LAMMPS Users Manua*, GNU Public License (GPL), (2003).
- Allen, M. P. (1987). *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press.
- Humphrey, W., Dalke, A., Schulten, K. (1996). VMD - Visual Molekular dynamic. *J. Molec. Graphics* , 33-38.
- Keller, Jürgen U., Reiner Staudt. (2005). Gas Adsorption Equilibria; Experimental Methods and Adsorptive Isotherms. *Springer Science & Business Media* .
- 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 Molekular-Dynamics. *Journal of Computational Physics* , 1-19.
- Stote, R., Dejaegere, A., Kuznetsov, D., dan Falquet, L. (t.thn.). *CHARMM Molekular 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.