

## Simulasi dinamika molekuler proses adsorpsi hidrogen pada carbon nanotube dengan lithium sebagai unsur doping = Molecular dynamic simulation of hydrogen adsorption process on lithium doped carbon nanotubes

Ihsan Ahmad Zulkarnain, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20332294&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

Penggunaan gas hidrogen sebagai sumber energi pada sel bahan bakar menjadikannya sebagai potensi sumber energi di masa depan. Salah satu permasalahan yang cukup perlu diperhatikan pada pemanfaatan hidrogen sebagai sumber energi ini adalah media penyimpanannya. Untuk dapat menyimpan hidrogen dalam jumlah besar diperlukan tekanan operasi yang sangat tinggi dan temperatur yang sangat rendah.

Penyimpanan hidrogen dapat ditingkatkan dengan pemanfaatan fenomena adsorpsi gas hidrogen pada media berporos seperti Carbon Nanotube (CNT). Kapasitas adsorpsi hidrogen pada CNT ini juga dapat ditingkatkan dengan menyisipkan unsur doping pada CNT. Salah satunya adalah dengan menyisipkan senyawa alkali metal seperti Lithium. Simulasi dinamika molekuler proses adsorpsi hidrogen pada CNT dengan Lithium sebagai unsur doping ini memberikan perkiraan bahwa kapasitas adsorpsi hidrogen dapat meningkat hingga 100 dibandingkan dengan kapasitas adsorpsi hidrogen pada CNT tanpa doping Lithium pada tekanan 40 atm dan temperatur 293 K dari sebelumnya 1 wt menjadi 2 wt.

.....The uses of hydrogen gas as energy resources in fuel cell let it to be future energy resources potential. One of the problems which need to be concerned about the uses of hydrogen gas as energy resources is its storage medium. To be able to store hydrogen gas in large amount, very high operational pressure and very low operational temperature are required. Hydrogen storage capacity can be improved by using adsorption phenomena of hydrogen gas on porous medium like Carbon Nanotube (CNT). Hydrogen adsorption capacity of CNT can be improved too by inserting alkaline metal such as Lithium into CNT. Molecular dynamic simulation of hydrogen adsorption process on Lithium doped CNT predicts that its hydrogen adsorption capacity can be improved until 100 compared to its hydrogen adsorption capacity without Lithium at pressure of 40 atm and temperature of 293 K from 1 wt become 2 wt.