

Optimasi unsur doping pada nanostruktur berbasis karbon sebagai media penyimpanan hidrogen: analisa termodinamika molekular = Optimizing doping particle of carbon based nanostructured adsorbent materials as hydrogen storage media molecular thermodynamics analysis

Supriyadi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20454006&lokasi=lokal>

Abstrak

Berbagai upaya meningkatkan kapasitas adsorpsi hidrogen pada Carbon Nanotubes CNT banyak dilakukan diantaranya melalui: optimasi struktur, pengaturan unsur doping serta modifikasi pada CNT sehingga diperoleh CNT dengan karakteristik baru, atau material dengan struktur baru. Jenis material nanostruktur yang sekarang banyak menarik perhatian adalah Boron Carbide, Boron Nitride dan Carbon Nitride.

Pada penelitian ini model struktur yang dibahas adalah Single-walled Triazine Nanotube SWTNT, SWTNT dengan substitusi Boron, Boron Substituted-Single Walled Triazine Nanotube SWBTNT serta SWTNT substitusi boron dengan doping lithium: Lithium Doped on Boron Substituted Single-walled Triazine Nanotube SWBTLi₂NT yang secara struktur maupun aplikasi untuk penyimpanan hidrogen belum banyak dibahas.

Pada tahap awal penelitian dilakukan kajian semi empirik untuk mendapatkan diameter optimum untuk menyimpan hidrogen. Diperoleh diameter optimum pada diameter kurang dari 5? atau pada diameter antara 11 ndash; 14 ?. Berdasarkan hasil tersebut selanjutnya dilakukan simulasi adsorpsi hidrogen Single-walled Carbon Nanotube SWCNT dan berbagai material nanostruktur dengan chiralitas 18, 0. Analisa termodinamik yang paling penting dilakukan adalah perhitungan nilai luas permukaan spesifik specific surface area/SSA.

Dari hasil perhitungan berbagai model material diperoleh nilai SSA berturut-turut 2600, 2730 dan 2828 dan 2458 m²/g. Dengan demikian maka dapat diduga modifikasi struktur dengan substitusi/doping logam pada material berbasis karbon akan meningkatkan kapasitas adsorpsi hidrogen. Modifikasi tersebut juga mengidentifikasi adanya peningkatan energi adsorpsi hidrogen secara signifikan yang besarnya berturut-turut 1,2; 1,97; 2,25 dan 9,7 kkal/mol.

Simulasi dinamika molekular MD memberikan hasil kapasitas adsorpsi pada temperatur ruang berturut-turut sebesar 1,59; 2,17; 2,31 dan 6,31 wt , di tekanan 120 atm. Pada temperatur 233 K kapasitas adsorpsi meningkat menjadi 2,26; 2,96; 3,23 dan 6,82 wt serta 6,1; 6,84; 7,73 dan 8,52 wt pada temperatur 77 K.

Untuk memverifikasi hasil simulasi dilakukan perbandingan dengan regresi model adsorpsi isothermal, perbandingan dengan hasil eksperimen, perbandingan dengan perhitungan Density Functional Theory DFT , simulasi Grand Canonical Monte Carlo GCMC serta hasil simulasi MD dari hasil yang telah terpublikasi.

Perbandingan dengan perhitungan semi empirik maupun eksperimen, secara umum hasil simulasi lebih tinggi sekitar 10 ndash; 20 . Dengan hasil DFT dan GCMC, hasil MD lebih rendah 10 ndash; 20 dan dengan hasil MD peneliti lain perbedaannya berkisar 5-10. Hasil MD juga menunjukkan adanya kesesuaian dengan model adsorpsi isothermal Langmuir, model isothermal Sips maupun model isothermal Toth dengan nilai koefisien determinasi di atas 0,99 pada temperatur 298 K, di atas 0,95 pada temperatur 233 K dan di atas 0,85 pada temperatur 77 K.

Analisa monolayer coverage menunjukkan bahwa tanpa doping lithium daerah yang sanggup dicover tidak melebihi 30, 40 dan 55 masing-masing pada temperatur 298, 233 dan 77 K. Dengan doping lithium coveragennya naik hingga 300. Dicapai coverage hampir 100 pada temperatur 298, 233 dan 77 K berturut-turut pada tekanan 100, 30 dan 5 atm. Berbagai ukuran termodinamik menunjukkan bahwa tanpa modifikasi sulit bagi SWCNT memenuhi kriteria untuk aplikasi penyimpanan hidrogen.

Langkah modifikasi yang dilakukan melalui substitusi dan doping logam merupakan peta jalan yang mengarah untuk didapatkannya material baru yang dapat memenuhi target Departemen Energi Amerika Serikat US DoE. Dengan demikian SWBTLi₂NT dapat diusulkan sebagai material jenis baru yang memenuhi berbagai persyaratan untuk aplikasi hydrogen storage.

.....Various efforts have been conducted intensively to increase the hydrogen adsorption capacity of Carbon Nanotubes CNT, such as structure optimization, doping element arrangement and structure modification to obtain new characteristics of CNTs, or newly acquired materials. New types of materials that now attract a lot of attention are Boron Carbide, Boron Nitride and Carbon Nitride.

The structural models discussed in this study are Single walled Triazine Nanotube SWTNT, Boron Substituted Single walled Triazine Nanotube SWBTNT and Single walled Triazine Nanotube with substitution of boron and lithium doping SWBTLi₂NT which structurally and in application for hydrogen storage has not been much discussed.

Based on semi empirical study, it is obtained that the optimum diameter to store hydrogen is diameter less than 5 or diameter between 11-14. From this results, a Single walled Carbon Nanotube SWCNT simulation was performed on chirality 18,0. The choice of chirality is to assure three dimensional symmetrical properties, when the material type is replaced by a more complex type of material.

Based on the results, further simulations were made on various material variations with 18,0 chirality. The first thermodynamic analysis performed was calculation of SSA value and in various models the material obtained the value of SSA respectively of 2600, 2730 and 2828 and 2458 m² g. Thus it can be predicted that structural modification by substitution and doping on carbon based materials will increase the hydrogen adsorption capacity. The modification also identified a significant increase in hydrogen adsorption energy of 1.2, 1.97, 2.25 and 9.7 kcal mole.

The molecular dynamics simulation gives the result of adsorption capacity at room temperature is respectively of 1.59, 2.17, 2.31 and 6.31 wt. At temperature of the adsorption capacity increased to 2.26, 2.96, 3.23 and 6.82 wt while 6.1, 6.84, 7.73 and 8.52 wt at a temperature of 77 K.

To verify the simulation results, a comparison with the regression of the isothermal adsorption model, the comparison with the experimental results, the comparison with Density Functional Theory DFT calculations, Grand Canonical Monte Carlo GCMC simulations and MD simulation results from published reports were held.

In general comparison with semi empirical and experimental calculations, the simulation result is higher about 10-20. With DFT and GCMC results, MD results were lower about 10-20 and with the other MD results about 5-10. The MD results also indicate compatibility with the Langmuir isothermal model of adsorption, Sips Langmuir isothermal model and Toth Langmuir isothermal model with a coefficient of determination above 0.99 at a temperature of 298 K, above 0.95 at a temperature of 233 K and above 0.85 at a temperature of 77 K.

The monolayer coverage analysis showed that without lithium doping the covered area did not exceed 30, 40 and 55 respectively at temperatures of 298, 233 and 77 K. With lithium coverage doping rise up to 300

and achieved coverage of nearly 100 at 298, 233 and 77 K temperatures at 100, 30 and 5 atm pressure, respectively. The various thermodynamic properties showed that without modification it is too difficult for SWCNT to meet the criteria for hydrogen storage applications.

The modification step made through substitution and metal doping is a roadmap that leads to the discovery of new materials that can meet the US Department of Energy US DoE targets. Thus SWBTLi₂NT can be proposed as a new type of material that meets various requirements for hydrogen storage applications.