

Analisa termodinamika molekuler: fenomena adsorpsi hidrogen pada karbon nanostruktur dengan substitusi boron untuk aplikasi PEMFC = Analysis of molecular thermodynamics: the hydrogen adsorption phenomenon in carbon nanostructures with boron substitution for pemfc applications

Dian Hapsari Safitri, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20473515&lokasi=lokal>

Abstrak

Dewasa ini pengembangan teknologi penyimpanan gas Hidrogen sebagai energi tanpa emisi terus dilakukan, terutama sebagai bahan bakar kendaraan ringan. Penggunaan material Boron Triazine sebagai modifikasi Carbon Nano Tube CNT untuk menyimpan gas Hidrogen secara adsorpsi merupakan salah satu pilihan untuk meningkatkan kapasitas CNT dalam menyimpan gas Hidrogen dan ringan sehingga mengurangi berat sistem secara keseluruhan dalam tangki penyimpanan. Penelitian ini menggunakan 2 metode sebagai perbandingan yaitu metode simulasi dinamika molekul dengan struktur modifikasi CNT pada ruang penyebaran hidrogen VMD, Packmol, Lammmps yang kemudian diikuti dengan analisa termodinamika molekuler, dan metode Artificial Neural Network dengan menggunakan MATLAB. Kedua metode ini dilakukan untuk mengetahui kapasitas CNT yang sudah dimodifikasi untuk menyimpan gas Hidrogen. Wt yang tinggi dimiliki oleh Boron-Triazin CNT dengan temperatur 77 Kelvin yaitu 7.81. Konversi penggunaan Hidrogen pada 1 CNT material Boron Triazin menjadi listrik sebesar 0.17182 kWh/kg.

.....Nowadays the development of storage technology for Hydrogen as energy without emissions continues to be done, especially as light vehicle fuel. The use of Boron Triazine material as a modified Carbon Nano Tube CNT to store Hydrogen by adsorption is one of options to increase CNT capacity in storing Hydrogen and also light weight thereby reducing the overall system weight in storage tanks. This research uses two methods as comparison which are molecular dynamics simulation method with CNT modification structure on hydrogen dispersion chamber VMD, Packmol, Lammmps followed by molecular thermodynamic analysis, and Artificial Neural Network method using Matlab. Both methods are performed to determine the capacity of CNT that have been modified to store Hydrogen. Highest wt is owned to Boron Triazine CNT with temperature 77 Kelvin which is 7.81 . So conversion of Hydrogen usage on 1 CNT of Boron Triazin material into electricity is 0.17182 kWh kg.