

Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada Zeolit ZSM-5 = Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Adsorption on ZSM-5 Zeolite

Muhammad Ihsan Widyantoro, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505128&lokasi=lokal>

Abstrak

Energi hidrogen memiliki potensial yang besar sebagai energi yang bersih untuk digunakan di masa depan. Penggunaan gas hidrogen sebagai energi saat ini masih memiliki kendala, yaitu dalam sistem distribusi dan penyimpanannya. Salah satu solusi untuk mengatasi permasalahan tersebut adalah dengan menggunakan metode adsorpsi. Material Zeolit merupakan salah satu material yang berpotensi untuk digunakan sebagai media penyimpanan gas hidrogen. Riset secara eksperimental umumnya memerlukan biaya yang tinggi. Maka, diperlukan metode riset lain yang dapat menunjangnya. Pada riset ini, penulis menggunakan metode Simulasi Dinamika Molekuler. Variasi temperatur yang digunakan pada simulasi ini adalah 77, 100, 150, 200, 273, dan 298 K dengan variasi tekanan pada tiap temperatur adalah 1, 2, 4, 6, 8, dan 10 bar. Hasil simulasi kemudian dibandingkan dengan hasil riset secara eksperimental yang telah dilakukan oleh peneliti lainnya. Pada tekanan rendah dan temperatur tinggi, hasil simulasi mendekati hasil riset secara eksperimental. Namun pada tekanan tinggi dan temperatur rendah, hasil simulasi memiliki perbedaan secara signifikan dari riset secara eksperimental.

.....Hydrogen energy has great potential to become one of the clean energies of the future. The current use of hydrogen gas as an energy source still has problems, especially in the distribution and storage system. One solution to overcome these problems is to use the adsorption method. Zeolite material is considered to be a good material to be used as a storage medium for hydrogen gas. Experimental research generally still requires a fairly high cost. Therefore, we need another method that can support it. In this research, the author used the Molecular Dynamics Simulation method. The variation of temperature used in this simulation is 77, 100, 150, 200, 273, and 298 K with a variation of pressure at each temperature is 1, 2, 4, 6, 8, and 10 bar. Our simulation results are then compared with the results of experimental research conducted by other researchers. At low pressure and high temperature, the results of our simulation are close to the results of experimental research. But at high pressure and low temperature, the results of our simulation are significantly different from the results of experimental research.