

Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada Grafena Oksida = Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Adsorption on Graphene Oxides

Billy Adhitya Ramadhan, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20505875&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Hidrogen merupakan salah satu unsur yang melimpah dimuka bumi, hidrogen ditemukan bersenyawa dengan atom lain sehingga banyak terdapat di udara (seperti H₂ dan NH₂) maupun air (H₂O), ketersediannya di kerak bumi sebesar 15,4%. Karena ketersediannya yang melimpah dan kemampuan menghasilkan sumber energi tanpa menghasilkan polusi udara dan air, maka hidrogen diproyeksikan sebagai sumber energi masa depan. Namun pemilihan material untuk alat penyimpanan hidrogen sangat penting karena hidrogen dalam fasa gas merupakan molekul yang reaktif sehingga membutuhkan penyimpanan dengan material yang tepat. Selain dari faktor keamanan, efektivitas adsorpsi hidrogen ke permukaan material juga menjadi fokus utama. Oleh karena itu dipilihlah Grafena oksida, Grafena oksida adalah lembaran yang terbentuk dari lapisan tunggal Grafit oksida yang mudah untuk disintesis yang memiliki sifat elektronik dan optik yang baik. Kelebihan menggunakan material Grafena oksida adalah harganya yang lebih murah dibanding Grafena murni dan tersedia dengan jumlah yang banyak. Gas yang dapat diserap material ini antara lain H₂, CH₄, CO₂, N₂, NH₃, NO₂, H₂S, dan SO₂. Riset yang dilakukan secara simulasi ini memungkinkan untuk menguji efektivitas adsorpsi dengan variasi temperatur dan tekanan yang lebih luas dan menggunakan biaya yang relatif lebih rendah dibandingkan dengan riset eksperimental. Maka riset yang dilakukan penulis menggunakan metode Simulasi Dinamika Molekuler. Variasi temperatur yang digunakan adalah 77 K, 100 K, 200 K, 250 K, 295K dan tekanan memiliki variasi 1 bar, 5 bar, 10 bar, 20 bar, 40 bar dan 80 bar pada sistem yang dibuat konstan. Hasil yang didapat akan dibandingkan dengan literatur hasil riset secara ekperimental.

<hr>

<i>ABSTRACT</i>

Hydrogen is one of the abundant elements on earth, hydrogen is found in compound with other atoms so that there are many in the air (such as H₂ and NH₂) and water (H₂O), its availability in the earth's crust is 15.4%. Due to its abundant availability and ability to produce energy sources without producing air and water pollution, hydrogen is projected as a future energy source. But the selection of materials for hydrogen storage devices is very important because hydrogen in the gas phase is a reactive molecule that requires storage with the right material. Aside from safety factors, the effectiveness of hydrogen adsorption onto the surface of the material is also the main focus. Therefore graphene oxide was chosen, graphene oxide is a sheet formed from a single layer of graphite oxide which is easy to synthesize which has good electric and optical properties. The advantage of using graphene oxide material is that the price is cheaper than pure graphene and is available in large quantities. The gases that can be absorbed by this material include H₂, CH₄, CO₂, N₂, NH₃, NO₂, H₂S, and SO₂. Research conducted in this simulation makes it possible to test the effectiveness of adsorption with a wider variety of temperatures and pressures and uses a relatively lower cost compared to experimental research. Then the research conducted by the author uses the

Molecular Dynamics Simulation method. The temperature variations used are 77 K, 100 K, 200 K, 250 K, 295 K, the pressure has a variation of 1 bar, 5 bar, 10 bar, 20 bar, 40 bar and 80 bar in a constant system. The results obtained will be compared with the research results experimentally.<i/>