

**KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL ADSORPSI HIDROGEN
PADA *CARBONE NANOTUBE* DENGAN VARIASI *CHIRALITY*
DAN TEMPERATUR MENGGUNAKAN KODE LAMMPS**

(Skripsi)

Oleh

**Erika Marinda Mufida
1617041082**



**JURUSAN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
2021**

ABSTRAK

KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL ADSORPSI HIDROGEN PADA *CARBONE NANOTUBE* DENGAN VARIASI *CHIRALITY* DAN TEMPERATUR MENGGUNAKAN KODE LAMMPS

Oleh

ERIKA MARINDA MUFIDA

Telah disimulasikan adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotube* untuk penyerapan optimum hidrogen. Parameter yang mempengaruhi banyaknya hidrogen terserap telah dikaji, seperti pengaruh *chirality* dan temperatur terhadap penyerapan hidrogen pada CNT. Metode simulasi adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotube* menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS, menerapkan potensial interatomik *Lennard-Jones* dan pergerakan atom hidrogen menggunakan gaya *Van Der Waals* dengan *Ensemble Mikroknonikal*. Data analisis merupakan keluaran dari LAMMPS berupa data dengan format XYZ. Data tersebut berisi informasi berupa *step integrasi*, jumlah atom, temperatur, tekanan, energi potensial, energi kinetik, volume, energi *van der waals*, total waktu simulasi dan penyerapan hidrogen. Hasil simulasi menunjukkan bahwa penyerapan optimum terjadi pada *run* 10000 dan temperatur 100 K, untuk *chirality armchair* sebesar 10 atom, *chirality chiral* sebesar 12 atom dan *chirality zigzag* sebesar 5 atom. Pembentukan koordinat hidrogen dengan *software* Avogadro, pembentukan koordinat CNT dengan *software* VMD dan visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT menggunakan *software* VMD.

Kata kunci : Simulasi Dinamika Molekul, Adsorpsi, LAMMPS, Avogadro, VMD.

ABSTRACT

HYDROGEN ADSORPTION MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION STUDY ON CARBONE NANOTUBES WITH CHIRALITY VARIATIONS AND TEMPERATURE USING LAMMPS CODE

By

ERIKA MARINDA MUFIDA

Hydrogen adsorption has been simulated on carbon nanotubes for optimum hydrogen absorption. Parameters that affect the amount of hydrogen absorbed have been studied, such as the effect of chirality and temperature on hydrogen absorption in CNTs. The simulation method of hydrogen adsorption on carbone nanotubes uses molecular dynamics simulation code LAMMPS, applies Lennard-Jones interatomic potential and hydrogen atom movement using Van Der Waals force with Microcanonical Ensemble. Data analysis is the output of LAMPS in the form of data in XYZ format. The data contains information in the form of integration steps, number of atoms, temperature, pressure, potential energy, kinetic energy, volume, van der Waals energy, total simulation time and hydrogen absorption. The simulation results show that the optimum absorption occurs at run 10000 and a temperature of 100 K, for armchair chirality of 10 atoms, chirality of 12 atoms and zigzag chrality of 5 atoms. Formation of hydrogen coordinates with Avogadro software, formation of CNT coordinates with VMD software and visualization of hydrogen adsorption on CNTs using VMD software.

Keywords: *Molecular Dynamics Simulation, Adsorption, LAMMPS, Avogadro, VMD.*

**KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL ADSORPSI HIDROGEN
PADA *CARBONE NANOTUBE* DENGAN VARIASI *CHIRALITY*
DAN TEMPERATUR MENGGUNAKAN KODE LAMMPS**

Oleh

ERIKA MARINDA MUFIDA

Skripsi

Sebagai Salah Satu Syarat untuk Mencapai Gelar
SARJANA SAINS

Pada

**Jurusan Fisika
Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam**



**FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS LAMPUNG
BANDAR LAMPUNG
2021**

Judul Skripsi : **KAJIAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKUL ADSORPSI HIDROGEN PADA CARBONE NANOTUBE DENGAN VARIASI CHIRALITY DAN TEMPERATUR MENGGUNAKAN KODE LAMMPS**

Nama Mahasiswa : **Erika Marinda Mufida**

Nomor Pokok Mahasiswa : 1617041082

Jurusan : Fisika

Fakultas : Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



1. Komisi Pembimbing

Pembimbing I

Pembimbing II

Sri Wahyu Suciwati, S.Si., M.Si.
NIP. 197108291997032001

Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T.
NIP. 198010102005011002

Ketua Jurusan Fisika FMIPA

Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T.
NIP. 198010102005011002

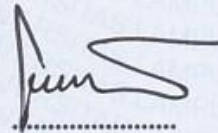
MENGESAHKAN

1. Tim Penguji

Ketua : **Sri Wahyu Suciwati, S.Si., M.Si**



Sekretaris : **Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T**



Penguji

Bukan Pembimbing : **Drs. Amir Supriyanto, M.Si**



2. Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam



Dr. Eng. Supto Dwi Yuwono, M.T.
NIP. 197407052000031001

Tanggal Lulus Ujian Skripsi : 12 Agustus 2021

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa dalam skripsi ini tidak terdapat karya yang pernah dilakukan orang lain dan sepengetahuan saya tidak ada karya atau pendapat yang ditulis atau diterbitkan oleh orang lain kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini sebagaimana disebutkan dalam daftar pustaka. Selain itu, saya menyatakan pula bahwa skripsi ini dibuat oleh saya sendiri.

Apabila ada pernyataan saya yang tidak benar, maka saya bersedia dikenai sanksi sesuai dengan hukum yang berlaku.

Bandar Lampung, 12 Agustus 2021



Erika Marinda Mufida
NPM. 1617041082

RIWAYAT HIDUP



Penulis dilahirkan di Adi Jaya, Kecamatan Negara Batin, Kabupaten Way Kanan, Provinsi Lampung pada 06 Maret 1998 sebagai anak pertama dari pasangan Bapak Eko Suprayitno dan Ibu Marini. Penulis memulai pendidikan Sekolah Dasar di SD Negeri Adi Jaya tahun 2006-2012. Penulis menempuh pendidikan Sekolah Menengah Pertama di SMP Negeri 04 Negara Batin tahun 2012-2014, saat menempuh pendidikan Sekolah Menengah Pertama penulis pernah menjadi bendahara OSIS (Organisasi Siswa Intra Sekolah) pada tahun 2013-2014. Kemudian melanjutkan Pendidikan Sekolah Menengah Atas di SMA Muhammadiyah 2 Bandar Lampung pada tahun 2014-2016. Selama menempuh Pendidikan Sekolah Menengah Atas penulis aktif mengik uti kegiatan PASIS (Pasukan Inti Siswa) dan HW (Hizbul Wathan). Pernah mendapatkan juara III PBB (Pasukan Baris Berbaris) Se-Provinsi Lampung, mendapatkan juara I PBB antar SMA dan SMK Muhammadiyah Se-Provinsi Lampung.

Penulis terdaftar sebagai mahasiswi Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung melalui jalur Seleksi Bersama Masuk Perguruan Tinggi Negeri (SBMPTN) pada tahun 2016. Selama menjadi mahasiswa, penulis aktif sebagai pengurus organisasi

Himpunan Mahasiswa Fisika (Himafi) bidang minat dan bakat pada tahun 2016-2017, bidang kesekretariatan pada tahun 2018 dan Rohani Islam (ROIS) bidang kemuslimahan pada tahun 2018.

Penulis menempuh kegiatan Praktik Kerja Lapangan (PKL) di PT. Bukit Asam Tbk. Unit Pelabuhan Tarahan pada tahun 2019 dengan penulisan laporan PKL yang berjudul “Analisis Sistem Pengukuran Massa dan *Loading Rate* Batubara Menggunakan *Belt Scale* CST IPC 14 SC pada CLT008 di PT. Bukit Asam Tbk. Unit Pelabuhan Tarahan”. Penulis juga menempuh kegiatan Kuliah Kerja Nyata (KKN) di pekon Trimulyo, Kecamatan Gedung Surian, Kabupaten Lampung Barat pada Januari-Februari 2020.

MOTTO

Katakanlah (Muhammad), "Sesungguhnya sholatku, ibadahku, hidupku, dan matiku hanyalah untuk Allah, Tuhan seluruh alam, tidak ada sekutu bagi-Nya; dan demikianlah yang diperintahkan kepadaku dan aku adalah orang yang pertama berserah diri (muslim)"

QS. Al-An'am : 162-163

"Dan Allah mengeluarkan kamu dari perut Ibumu dalam keadaan tidak mengetahui sesuatu pun, dan Dia memberimu pendengaran, pengelihatatan, dan hati nurani, agar kamu bersyukur"

QS. An-Nahl : 78

**"Sebaik-baik kalian adalah orang yang mempelajari Al-Qur'an dan mengerjakannya"
(HR. Bukhari & Muslim)**

PERSEMBAHAN

**Dengan Mengharapkan Ridho Allah *Subhanallahu Wata'ala* dan
Syafaat Kekasih Tercinta Dunia Akhirat Rasulullah Muhammad
*Shalallahu'Alaihi wa Sallam***

Karya ini kupersembahkan kepada Bapak dan Ibu Tercinta
Eko Suprayitno & Marini

Dan tak lupa kepada Adik-adikku Tersayang
Dwi Mufida Prakasa & Tri Mufida Ramadan

**Atas Do'a yang tidak pernah putus serta segala upaya untuk
memberikan segala hal yang terbaik.**

Almamaterku
UNIVERSITAS LAMPUNG

KATA PENGANTAR

Assalamu'alaikum Warahmatullah Wabarokatuh.

Puji syukur penulis haturkan atas karunia Allah *Subhanallahu Wata'ala*, karena atas berkat rahmat dan hidayah-Nya penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “**Kajian Simulasi Dinamika Molekul Adsorpsi Hidrogen pada *Carbone Nanotube* dengan Variasi *Chirality* dan Temperatur Menggunakan Kode LAMMPS**”. Penulis menyadari dalam penulisan skripsi ini masih terdapat banyak kesalahan dan kekurangan. Oleh karena itu, penulis mengharapkan kritik dan saran demi perbaikan kekurangan tersebut. Semoga skripsi ini dapat bermanfaat dan menjadi literatur serta rujukan bagi penelitian berikutnya.

Wa'alaikumussalam Warahmatullah Wabarokatuh.

Bandar Lampung, 12 Agustus 2021

Penulis

Erika Marinda Mufida

SANWACANA

Puji dan syukur penulis panjatkan kehadirat Allah Subhanahu wata'ala yang telah melimpahkan rahmat, karunia serta hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan penulisan skripsi dengan judul **“Kajian Simulasi Dinamika Molekul Adsorpsi Hidrogen pada *Carbone Nanotube* dengan Variasi *Chirality* dan Temperatur Menggunakan Kode LAMMPS”**. Sebagai syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains pada Jurusan Fisika FMIPA Universitas Lampung. Selama menyelesaikan skripsi ini, penulis telah menerima banyak bantuan secara langsung maupun tidak langsung. Dengan segala kerendahan hati, penulis menghaturkan terima kasih kepada;

1. Orang tuaku dan Adik-adik tercinta, serta Bude, Pakde, Mamas, Mba dan Adik sepupu yang telah mendo'akan, memberi tempat tinggal serta memberi perhatian, semangat dan dukungan kepada penulis sehingga penulis mampu menyelesaikan pendidikan di Universitas Lampung;
2. Ibu Sri Wahyu Suciwati, S.Si., M.Si. selaku Dosen Pembimbing I yang telah memberikan bimbingan, ilmu, saran, arahan dan motivasinya selama proses penelitian dan penulisan skripsi.
3. Bapak Gurus Ahmad Pauzi, S.Si., M.T. selaku Dosen Pembimbing II yang telah memberikan bimbingan, ilmu serta masukannya selama proses penelitian dan penulisan skripsi;

4. Bapak Drs. Amir Supriyanto, M.Si. selaku Dosen Pembahas yang telah memberikan ilmu serta saran untuk penulisan skripsi ini agar lebih baik lagi;
5. Bapak Gurum Ahmad Pauzi, S.Si., M.T. selaku Ketua Jurusan Fisika dan Ibu Yanti Yulianti selaku Sekertaris Jurusan Fisika;
6. Ibu Leni Rumiyantri, S.Pd., M.Si. selaku Dosen Pembimbing Akademik yang telah memberikan do'a, bimbingan dan arahnya;
7. Bapak dan Ibu Dosen Jurusan Fisika atas ilmu bermanfaat yang telah diberikan selama penulis menempuh bangku perkuliahan;
8. Bapak Dr. Eng. Suropto Dwi Yuwono, M.T. selaku Dekan Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan alam;
9. Staf jurusan Fisika (Bapak Badri, Bapak Edi, Tete Amnah dan Mas Hari) yang telah membantu selama berkuliah di Fisika;
10. Piana, Indri, Hasan, Ustadzah Dita, Ustadzah Masturoh, Ustadzah Alfi, squad Don't KTCDK dan Mr terima kasih atas bantuan, do'a dan dukungannya sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi ini.

Serta berbagai pihak yang tidak dapat penulis sebutkan satu-persatu, semoga Allah *Subhanahu Wata'ala* memberikan balasan dengan kebaikan berlipat ganda dan semoga Allah meridhoi segalanya.

Bandar Lampung, 12 Agustus 2021
Penulis

Erika Marinda Mufida

DAFTAR ISI

ABSTRAK	i
ABSTRACT	ii
HALAMAN JUDUL	iii
LEMBAR PERSETUJUAN	iv
LEMBAR MENGESAHKAN	v
PERNYATAAN	vi
RIWAYAT HIDUP	vii
MOTTO	ix
PERSEMBAHAN	x
KATA PENGANTAR	xi
SANWACANA	xii
DAFTAR ISI	x
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL	xiv
I. PENDAHULUAN	
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan masalah.....	5
1.3 Tujuan Penelitian.....	6
1.4 Manfaat Penelitian.....	6
1.5 Batasan Masalah.....	7

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Penelitian Terkait	8
2.2 Dinamika Molekuler.....	10
2.3 Adsorpsi.....	24
2.4 Hidrogen.....	28
2.5 <i>Carbone Nanotube</i> (CNT).....	30
2.6 <i>Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator</i>	36
2.7 Avogadro	38
2.8 VMD.....	39

III. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	42
3.2 Alat dan Bahan	42
3.3 Prosedur Penelitian.....	42

IV. HASIL DAN PEMBAHASAN

4.1 File <i>Input</i> (LAMMPS).....	51
4.2 File <i>Output</i> (LAMMPS)	62

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan.....	89
5.2 Saran.....	90

DAFTAR PUSTAKA

LAMPIRAN

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Sistem yang diamati dalam simulasi dinamika molekul	11
Gambar 2.2 Potensial <i>Lennard-Jones</i>	19
Gambar 2.3 Langkah-langkah Simulasi Dinamika Molekul	23
Gambar 2.4 (a) Grafik pengaruh tekanan dan (b) Grafik pengaruh suhu.....	30
Gambar 2.5 (a) <i>armchair</i> (b) <i>zigzag</i> (c) <i>chiral</i>	32
Gambar 2.6 <i>Single Walled Carbone Nanotube</i>	32
Gambar 2.7 Beberapa cara penggulungan Lembaran <i>graphene</i>	33
Gambar 2.8 <i>Multi Walled Carbone nanotube</i>	34
Gambar 2.9 Diagram alir proses simulasi LAMMPS.....	37
Gambar 2.10 Arsitektur kode umum <i>Avogadro</i>	39
Gambar 2.11 Tampilan aplikasi VMD	41
Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian	43
Gambar 3.2 Metode pengumpulan data.....	44
Gambar 3.3 Pembentukan Hidrogen pada Avogadro	45
Gambar 3.4 Pembentukan CNT pada VMD.....	46
Gambar 3.5 Penggabungan CNT dengan Hidrogen pada VMD	46
Gambar 3.6 <i>Carbone nanotube builder</i> pada VMD	49
Gambar 3.7 Penggabungan koordinat Hidrogen dan CNT pada VMD.....	49
Gambar 3.8 Contoh visualisasi simulasi adsorpsi hidrogen pada VMD	50

Gambar 4.1 Tampilan file <i>atom definition</i>	55
Gambar 4.2 Tampilan file koordinat hidrogen pada Notepad++	57
Gambar 4.3 Tampilan file koordinat CNT pada Notepad++.....	58
Gambar 4.4 Tampilan <i>Tk Console</i> pada <i>software</i> VMD	59
Gambar 4.5 Tampilan file koordinat CNT setelah melalui proses <i>Tk Console</i> ...	60
Gambar 4.6 Tampilan file koordinat hidrogen setelah proses <i>Tk Console</i>	61
Gambar 4.7 Tampilan File <i>log.lammps</i>	63
Gambar 4.8 Grafik temperatur terhadap hidrogen terserap <i>run</i> 10000	64
Gambar 4.9 Grafik temperatur terhadap hidrogen terserap <i>run</i> 20000	65
Gambar 4.10 Grafik temperatur terhadap hidrogen terserap <i>run</i> 30000	67
Gambar 4.11 Grafik pengaruh <i>run</i> terhadap variasi temperatur dan <i>armchair</i> ...	68
Gambar 4.12 Grafik pengaruh <i>run</i> terhadap variasi temperatur dan <i>chiral</i>	68
Gambar 4.13 Grafik pengaruh <i>run</i> terhadap variasi temperatur dan <i>zigzag</i>	69
Gambar 4.14 Tampilan file <i>dump</i> LAMMPS.....	77

DAFTAR TABEL

Tabel 2.2 Perbedaan antara adsorpsi fisik dan adsorpsi kimia.....	25
Tabel 4.1 Nilai parameter σ dan ε dari atom hidrogen dan <i>carbone</i>	62
Tabel 4.2 Nilai hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada setiap <i>index chirality</i>	70
Tabel 4.3 Nilai hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada setiap <i>index chirality</i>	72
Tabel 4.4 Nilai hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada setiap <i>index chirality</i>	74
Tabel 4.5 Data refrensi adsorpsi hidrogen pada CNT	76
Tabel 4.6 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality armchair</i>	78
Tabel 4.7 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality chiral</i>	79
Tabel 4.8 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality zigzag</i>	80
Tabel 4.9 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality armchair</i>	81
Tabel 4.10 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality chiral</i>	82
Tabel 4.11 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality zigzag</i>	84
Tabel 4.12 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality armchair</i>	85
Tabel 4.13 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality chiral</i>	86
Tabel 4.14 Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT <i>chirality zigzag</i>	87
Tabel 4.15 Data refrensi perhitungan penggunaan molekul hidrogen	88

I. PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia memiliki jumlah penduduk yang semakin meningkat, sehingga mengalami krisis energi yang berpengaruh langsung terhadap konsumsi bahan bakar. Energi yang dihasilkan dari fosil semakin menipis karena energi fosil termasuk energi yang tidak dapat diperbaharui. Selain itu, pencemaran lingkungan global menuntut tingkat kebersihan lingkungan yang baik, sehingga berbagai pakar energi berupaya untuk mengembangkan energi yang ramah lingkungan serta dapat menjaga keamanan pasokan energi yang berkesinambungan (Siregar, 2010). Banyak pihak yang sudah melakukan langkah antisipasi untuk mengatasi krisis energi yang sedang mengancam pada saat ini ataupun di masa depan. Langkah antisipasi yang dilakukan antara lain menghemat penggunaan energi, memanfaatkan energi baru dan terbarukan serta memanfaatkan teknologi yang berfungsi untuk mendapatkan sumber energi alternatif yang dapat digunakan. Salah satu energi alternatif yang diminati oleh para peneliti adalah hidrogen (Dzulfahmi, 2012).

Hidrogen adalah unsur yang terkandung di alam, merupakan sumber energi yang bersih namun tidak dapat ditambang seperti halnya sumber energi konvensional

bahan bakar minyak (BBM). Berbeda dengan energi fosil, hidrogen merupakan sumber energi yang diperoleh dari air, sumber nabati, maupun secara biologi dengan menggunakan bakteri atau dari gas alam. Konversi air dan bahan bakar nabati menjadi hidrogen dapat diperoleh hasil yang lebih bersih, namun biaya yang digunakan cukup tinggi dibandingkan dengan sumber energi fosil. Bervariasinya sumber energi yang dapat dirubah menjadi hidrogen, dan sedikitnya unsur polutan yang dihasilkan merupakan kelebihan sumber energi ini untuk menjadi sumber energi masa depan yang terbarukan (Chandrasa, 2009). Jika hidrogen menjadi bahan bakar masa depan tentu sangat efektif untuk digunakan, namun yang menjadi kendala adalah cara penyimpanan hidrogen yang sampai sekarang terus diteliti dan dikembangkan. Masalah utama yang berhubungan dengan hidrogen adalah kebocoran pada tangki selama penyimpanan, pemeliharaan dan isu keamanan (Kurniady dkk, 2014).

Melalui berbagai macam eksperimen untuk mengetahui teknologi penyimpanan gas hidrogen, telah dikenal empat macam sistem penyimpanan gas hidrogen, diantaranya teknik pencairan hidrogen, teknik hidrogen bertekanan, teknik metal hibrida, dan teknik adsorpsi pada material berpori (Santoso, 2012).

Dibandingkan dengan teknik lainnya, teknik pencairan merupakan sistem yang dapat menyimpan hidrogen dengan kapasitas terbesar, tetapi kekurangannya adalah biaya operasionalnya cukup besar, karena memerlukan energi yang besar untuk mencairkan hidrogen sampai minus 253°C dan kurang aman untuk digunakan. Begitu pula untuk teknik hidrogen bertekanan juga memerlukan dalam bentuk metal hibrida, karena mempunyai kapasitas penyimpanan hidrogen yang cukup besar serta relatif aman untuk digunakan, tetapi memiliki kekurangan

apabila digunakan sebagai sistem penyimpanan bahan bakar pada kendaraan bermotor, karena bobot yang dimiliki cukup berat dan untuk melepaskan hidrogen dari ikatan kimia dengan logamnya memerlukan panas yang tinggi (Dzulfahmi, 2012).

Kekurangan dari ketiga metode penyimpanan hidrogen sebelumnya dapat diatasi dengan cara menyimpan hidrogen pada karbon yang merupakan material berpori. Biaya operasi relatif murah, molekul yang cukup ringan membuat atom karbon sangat cocok sebagai media penyimpanan hidrogen dengan total tangki penyimpanan yang ringan. Sangat bermanfaat sebagai bahan bakar, terutama pada kendaraan bermotor dan relatif aman untuk digunakan (Prasodjo, 2010). Kulit orbital yang terisi setengah penuh disebut dengan karbon. Karbon menjadi *building blok* berbagai bentuk-bentuk struktur seperti Grafit, Grafena, Tabung karbon nano, *Fullerena* dan Hidrokarbon Aromatik Polisiklik (PAH) (Johannes, 2018). Kali ini kita akan membahas tentang teknologi penyimpanan hidrogen menggunakan CNT (*Carbon Nanotube*) atau tabung karbon nano.

Seperti namanya CNT merupakan karbon yang berbentuk tabung dimana diameternya sangat kecil yang berskala nano (Varshney, 2014). CNT sama dengan *graphene* yang digulung kedalam silinder yang membentuk *carbon nanotube* (CNT) (Kaushik dan majumder, 2015). Sistem penyimpanan hidrogen dengan cara adsorpsi pada material berpori telah menarik perhatian para peneliti dan tertarik untuk mempelajarinya (Dzulfahmi, 2012). *Carbon Nanotube* merupakan media penyimpanan yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar. Telah dilakukan berbagai macam percobaan untuk

mengetahui ukuran penyimpanan hidrogen pada *carbone nanotube*. Dalam percobaan atau eksperimen biasanya terkendala oleh alat dan tingkat keamanan yang kurang baik, sehingga untuk mengatasinya dibutuhkan biaya yang besar. Salah satu cara yang dapat mengatasi masalah tersebut yaitu dengan melakukan pemodelan dan simulasi dinamika molekuler (SDM) (Santoso, 2012). Metoda yang digunakan untuk melakukan suatu prediksi terhadap sifat-sifat dinamik maupun statik yang diturunkan langsung dari interaksi tingkat atom atau molekul disebut dengan MD *simulation* atau simulasi dinamika molekul. Dengan MD kita dapat menganalisis energi interaksi pada adsorpsi hidrogen dengan CNT (Lago, 2016).

Pada penelitian sebelumnya yang telah dilakukan oleh Dzulfahmi, 2012 tentang “Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbone Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Panjang” dengan jumlah hidrogen dan temperatur yang sama. Jumlah hidrogen yang dibuat adalah dua puluh molekul dan temperatur 10 K. Dalam simulasi yang dilakukan oleh Dzulfahmi, 2012 nilai *run* divariasikan mulai dari 10000, 25000, 50000 dan 100000 dengan setiap satu nilai *run* divariasikan dengan lima variasi panjang mulai dari panjang CNT 1.122 nm, 3 nm, 5 nm, 8 nm dan 10 nm. Penelitian lain mengenai adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotube* juga telah dilakukan oleh Santoso, 2012 mengenai “Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbone Nanotubes* (CNT) dengan Variasi *Chirality*” dengan *chirality* yang digunakan adalah hasil variasi dari penelitian Maruyama, 2000 yaitu sebesar (8,8), (10,10) dan (12,12) yang divariasikan menjadi 12 macam yaitu (8,0), (8,8), (8,10), (8,12), (10,0), (10,8), (10,10), (10,12) dan (12,0), (12,8), (12,10), (12,12). Penelitian tentang adsorpsi

hidrogen pada *carbone nanotube* juga telah dilakukan oleh Jabbar, 2012 dengan judul “Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbone Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Temperatur”. Pada penelitian ini temperatur yang digunakan adalah sebesar 253 K, 273 K dan 293 K, dengan masing-masing temperatur tekanannya sebesar 1, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16 dan 18 atm. Sedangkan penelitian tentang adsorpsi hidrogen pada *graphene* telah dilakukan oleh Kurniady dkk, 2014 tentang “Studi Analisis Pengaruh Suhu, Tekanan dan Ukuran Pori *Graphene* Terhadap Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen” dan dalam penelitian Kurniady dkk, 2014 ini melakukan analisa dari simulasi adsorpsi hidrogen terhadap pori-pori *graphene* dengan dua iterasi yang berbeda yakni 100000 dan 150000. Dimana lebar pori-pori yang digunakan sesuai dengan referensi Julio A. Alonso dalam penelitiannya yakni 6 Å, 8 Å dan 10 Å.

Carbone nanotube merupakan material yang terbentuk dari unsur karbon, hanya saja bentuknya yang menyerupai tabung silinder dengan ukuran nano dan berpori sehingga disebut dengan *carbone nanotube*. Oleh karena itu pada penelitian ini penulis akan mengkaji pengaruh *chirality* dan temperatur terhadap jumlah hidrogen yang dapat diserap oleh *carbon nanotube* sebagai media penyimpanan hidrogen secara simulasi.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah dari penelitian ini adalah bagaimana membuat pemodelan Hidrogen dan CNT dengan kode LAMMPS untuk mengetahui:

1. Berapakah hasil optimum penyimpanan hidrogen pada CNT?

2. Parameter apa sajakah yang sesuai dengan karakteristik adsorpsi hidrogen agar dapat menambah jumlah hidrogen yang dapat diserap?
3. Karakteristik apa yang dimiliki oleh CNT agar dapat menyerap hidrogen?

1.3 Tujuan Penelitian

Tujuan dilakukannya penelitian ini sebagai berikut:

- 1 Mampu mengetahui hasil optimum penyimpanan hidrogen pada CNT dalam simulasi.
- 2 Mampu mengetahui parameter apa saja yang mempengaruhi penyerapan hidrogen pada CNT.
- 3 Mampu mengetahui pengaruh variasi *chirality* dan temperatur pada simulasi dinamika molekul adsorpsi hidrogen menggunakan CNT, terhadap banyaknya jumlah hidrogen yang dapat diserap.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dilakukannya penelitian ini sebagai berikut:

1. Mengetahui metode simulasi dinamika molekul untuk penyerapan atau adsorpsi hidrogen pada CNT.
2. Menjadi sumber pengetahuan tentang visualisasi penyerapan gas hidrogen pada material berpori seperti CNT.
3. Dapat membantu mahasiswa untuk menambah pengetahuan tentang simulasi dinamika molekul kode LAMMPS dan mahasiswa dapat mengaplikasikannya pada penelitian simulasi lain dengan kode LAMMPS.

1.5 Batasan Masalah

Dalam penelitian ini memiliki batasan masalah diantaranya adalah:

1. Adsorpsi Hidrogen hanya pada material berpori CNT.
2. Simulasi dinamika molekul hanya menggunakan kode LAMMPS.
3. Visualisasi struktur molekul menggunakan Avogadro dan VMD.
4. Memperoleh grafik variasi temperatur material CNT menggunakan Excel.

II. TINJAUAN PUSTAKA

2.1 Penelitian Terkait

Dzulfahmi (2012) melakukan penelitian menggunakan simulasi dinamika molekuler untuk adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotubes* dengan variasi panjang. Penelitian ini menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS untuk menghitung hidrogen yang diserap oleh CNT dengan konfigurasi yang berbeda. Selain LAMMPS juga ada piranti lain yang utama pada simulasi ini yaitu Avogadro yang berfungsi sebagai pembentuk hidrogen dan VMD berfungsi sebagai pembentukan CNT. Penelitian pada simulasi ini menggunakan temperatur yang tetap pada setiap simulasi yang membedakan adalah panjang CNT karena penelitian ini menggunakan variasi panjang CNT. Proses *running* dilakukan pada empat sesi dengan nilai *run* yang berbeda-beda serta pada simulasi temperatur sistem dijaga untuk selalu konstan atau temperatur awal sama dengan temperatur akhir. Pada penelitian ini semakin panjang CNT maka semakin banyak hidrogen yang terserap.

Kurniady (2014) juga melakukan penelitian mengenai adsorpsi hidrogen pada *graphene*. Penelitian ini merupakan studi analisis pengaruh suhu, tekanan dan ukuran pori *graphene* terhadap dinamika molekuler adsorpsi hidrogen. Simulasi

ini menggunakan LAMMPS serta piranti lain yang digunakan sebagai pendukung simulasi adalah Avogadro yang berfungsi sebagai pembentukan hidrogen dan VMD sebagai pembentukan *graphene*. Pada penelitian ini temperatur atau suhu yang digunakan sebesar 77 K dan tekanan yang digunakan adalah sebesar 0,1-1 MPa. Lebar *graphene* sama pada setiap simulasi yaitu sebesar 6 Å dan iterasi yang digunakan sebesar 100000 dan 150000. Penyerapan maksimal sebesar 1,2 wt% terjadi pada suhu sebesar 77 K, tekanan sebesar 0,1-1 MPa dan lebar pori-pori sebesar 6 Å, sedangkan penyerapan minimum sebesar 0,2 wt% terjadi pada suhu sebesar 77 K – 1000 K, tekanan 0,1-1 MPa.

Santoso (2012) juga melakukan penelitian tentang simulasi dinamika molekuler untuk adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotubes* dengan variasi *chirality*. Penelitian ini menggunakan kode LAMMPS dan dua piranti penunjangnya yaitu Avogadro yang berfungsi sebagai pembentukan hidrogen dan VMD yang berfungsi sebagai pembentukan CNT. Pada penelitian ini penulis menggunakan variasi *chirality* (8,8), (10,10) dan (12,12). *Chirality* merupakan salah satu parameter yang ada pada piranti VMD untuk membentuk koordinat dari *carbone nanotube*. Pada penelitian ini CNT dengan jenis *Chirality Armchir*, semakin besar *chirality* yang digunakan maka semakin baik dalam menyerap hidrogen.

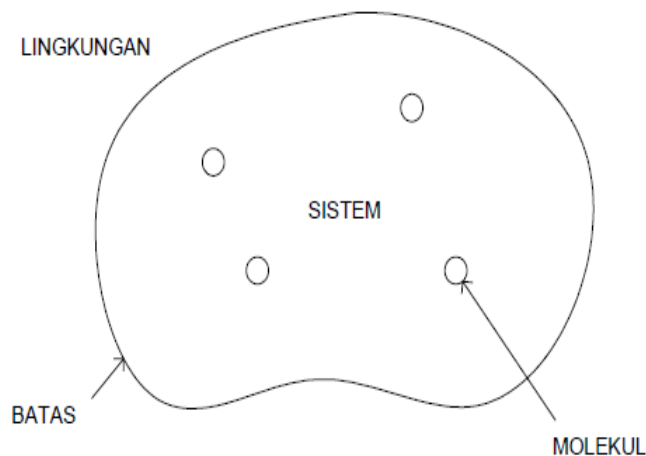
Jabbar (2012) juga telah melakukan penelitian tentang simulasi dinamika molekuler untuk adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotubes* dengan variasi Temperatur. Penelitian ini menggunakan piranti Avogadro sebagai pembentuk koordinat hidrogen serta piranti VMD yang berfungsi sebagai pembentuk koordinat CNT. Setelah koordinat hidrogen dan CNT sudah ditemukan di piranti Avogadro dan piranti VMD maka dapat digabungkan kedua koordinat molekul

tersebut menggunakan cara manual yaitu menggunakan piranti excel. Pada penelitian Jabbar (2012), salah satunya untuk mengetahui seberapa besar pengaruh variasi temperatur pada simulasi adsorpsi hidrogen tersebut. Variasi temperatur yang digunakan sebesar 253 K, 273 K dan 293 K, dengan masing-masing temperatur tekanannya sebesar 1, 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16 dan 18 atm. Pada penelitian ini hidrogen yang terserap oleh CNT pada temperatur 253 K lebih baik dari temperatur 273 K dan 293 K dengan variasi tekanan 1 sampai 18 atm.

2.2 Dinamika Molekuler

Dinamika molekul merupakan metode simulasi dengan komputer yang memungkinkan representasi molekul atom dalam periode waktu tertentu. Teknik dinamika molekul didasarkan pada Hukum Newton dan Hukum Mekanika Klasik (Astuti dan Mutiara, 2009).

Teknik simulasi komputer yang mengamati pergerakan molekul yang saling berinteraksi dengan menyimulasikan molekul yang saling tarik-menarik dan mendorong serta menabrak satu sama lain disebut dengan dinamika molekul. Simulasi dinamika molekul memberikan informasi statik dan dinamik pada skala atomik yang kemudian dapat diolah menjadi informasi skala makroskopik seperti temperatur dan tekanan (Witoelar, 2002). Peran simulasi dinamika molekuler (*molecular dynamic simulation* – MDS) adalah sebagai jembatan antara metoda penelitian didalam skala mikroskopik dengan skala makroskopik, serta menembus kesulitan metoda eksperimen fisik didalam skala atomik dan mikroskopik molekuler (Muchtardkk, 2012).



Gambar 2.1 Sistem yang diamati dalam simulasi dinamika molekul (Witoelar, 2002)

Sistem merupakan kuantitas materi atau volume untuk diamati. Sedangkan volume dan materi yang berada diluar sistem, disebut dengan lingkungan. Untuk batas merupakan pemisah antara sistem dan lingkungan, dimana batas tidak memiliki massa ataupun volume tersendiri secara teoritis. Pada **Gambar 2.1** merupakan molekul-molekul yang berada pada suatu sistem tertutup, sedang diamati oleh dinamika molekul. Jumlah molekul didalam sistem tidak berubah dan energi pada sistem dapat keluar ataupun masuk pada sistem. Sistem terbagi menjadi dua, yaitu jika suatu materi dapat menembus batas disebut dengan sistem terbuka dan jika suatu materi tidak dapat menembus batas disebut dengan sistem tertutup.

2.2.1 Ensemble

Suatu ensemble adalah koleksi dari keadaan sistem yang mungkin memiliki keadaan mikroskopis berbeda tetapi memiliki keadaan makroskopis sama. Sebagai contoh suatu sistem dengan konfigurasi posisi atau momentum yang berbeda, namun temperatur yang dimiliki sama. Ensemble mikrokanonikal,

ensemble kanonikal dan ensemble isobarik-isotermal merupakan beberapa ensemble yang sering digunakan dalam dinamika molekul (Witoelar, 2002).

2.2.1.1 Ensemble Mikrokanonikal (E, V, N)

EVN atau NVE yang dikenal sebagai ensemble mikrokanonik ini ditandai dengan jumlah konstan atom (N), volume tetap (V) dan energi tetap (E) yang sesuai dengan sistem adiabatik dimana suhu dan tekanan tidak diatur (Silva, 2017). Ensemble yang paling sederhana untuk simulasi dinamika molekul yaitu ensemble mikrokanonikal. Ensemble mikrokanonikal diperoleh dari sistem yang terisolasi sehingga tidak ada interaksi sistem dengan lingkungan. Dengan demikian, energi tidak dapat keluar dan masuk ke sistem, sehingga energi total memiliki harga konstan. Ensemble yang paling sederhana untuk simulasi dinamika molekul yaitu ensemble mikrokanonikal. Namun pada laboratorium ensemble ini kurang praktis untuk mensimulasikan keadaan eksperimen. Hal ini disebabkan karena energi total sistem sulit dipertahankan dalam keadaan konstan pada eksperimen (Jabbar,2012).

2.2.1.2 Ensemble Kanonikal (T, V, N)

TVN atau NVT juga dikenal sebagai ensemble kanonik ini mempertahankan jumlah atom (N), volume (V) dan suhu (T). Suhu dikontrol melalui termostat (Silva, 2017). Ensemble dengan keadaan makroskopis dengan suhu yang tetap disebut dengan ensemble kanonikal. Ensemble ini dinamakan dengan ensemble (T, V, N) karena jumlah volume dan molekul N tidak berubah. Eksperimen dalam laboratorium sering dilakukan pada temperatur konstan, karena temperatur sistem

lebih mudah dikendalikan daripada energi total sistem. Ensemble kanonikal dapat mendekati keadaan eksperimen pada temperatur konstan (Jabbar, 2012).

2.2.1.3 Ensemble Isobarik-Isotermal

Dengan mempertahankan tekanan dan temperatur sistem pada harga konstan, maka, dinamika molekul dapat dilakukan. Dalam eksperimen, tekanan dan temperatur mudah dikendalikan karena keduanya memiliki sifat makroskopis. Pada ensemble isobarik-isotermal, volume sistem dapat berubah atau menjadi suatu variabel dan jumlah molekul tidak berubah, maka ensemble ini juga dinamakan dengan ensemble (P, T, N) (Jabbar, 2012). PTN atau NPT ensemble isobarik-isotermal mempertahankan jumlah atom (N), tekanan (P), dan suhu (T). Ensemble ini hanya berlaku untuk sistem periodik (Silva, 2017).

2.2.2 Mekanika Klasik

Ketiga Hukum Newton digunakan dalam dinamika molekuler. Berikut ini adalah bunyi ketiga Hukum Newton.

- 1 Suatu partikel akan tetap diam atau bergerak dengan kecepatan tetap kecuali jika menerima gaya-gaya eksternal dengan resultan tidak sama dengan nol.
- 2 Jika partikel massa m menerima gaya \vec{F} maka partikel tersebut mengalami percepatan sebesar

$$\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m} \quad (2.1)$$

- 3 Jika partikel i memberikan gaya pada partikel j sebesar \vec{F}_{ij} maka partikel j memberikan gaya pada partikel i sebesar $-\vec{F}_{ij}$.

$$\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji} \quad (2.2)$$

Momentum pada masing-masing molekul dapat berubah-ubah akibat interaksi satu sama lain, namun momentum total tidak akan berubah, jika dalam suatu sistem mempunyai energi kinetik dan jumlah molekul tetap. Momentum total sistem dapat diamati untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal, dengan :

$$\frac{d}{dt} (\sum_i p_i) = \frac{d}{dt} (\sum_i m_i v_i) = 0 \quad (2.3)$$

dimana m adalah massa molekul dan p adalah momentum molekul (Nurdin dan Andrianto, 2012).

2.2.3 Mekanika Statistik

Untuk mengkonversi informasi pada skala atomik menjadi informasi pada skala makroskopik dibutuhkan mekanika statistik atau yang juga disebut termodinamika statistik. Sifat-sifat yang dimiliki materi tersebut ditentukan oleh konfigurasi posisi dan momentum pada molekul-molekul. Sifat-sifat yang dimiliki antara lain energi, temperatur, tekanan dan entalpi (Dzulfahmi, 2012).

2.2.3.1 Energi Total

Energi total pada suatu sistem tersusun dari energi potensial sistem serta energi kinetik sistem.

$$U = \sum_i U_i(R^N) \quad (2.4)$$

Pada persamaan diatas R^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul yaitu $R^N = \{R_1, R_2, R_3, \dots, R_N\}$. Energi kinetik sistem adalah jumlah dari energi kinetik setiap molekul.

$$K = \sum_i K_i(v_i) \quad (2.5)$$

dengan,

$$K_i = \frac{1}{2} m_i (v_i)^2 = \frac{p_i^2}{2m_i} \quad (2.6)$$

Untuk sistem terisolasi dimana tidak ada energi yang menembus batas, sistem tersebut bersifat konservatif atau energi sistem konstan. Konservasi energi ini adalah salah satu cara untuk memeriksa kebenaran simulasi ensemble mikrokanonikal (Dzulfahmi, 2012).

2.2.3.2 Temperatur

Temperatur adalah skala dari energi kinetik molekul-molekul penyusunnya menurut termodinamika statistik, sehingga hubungan antara energi kinetik dengan temperatur dapat dinyatakan oleh :

$$K = \frac{3}{2} N k_B T \quad (2.7)$$

atau,

$$T = \frac{2}{3} \frac{K}{N k_B} \quad (2.8)$$

Dari persamaan diatas, K adalah energi kinetik total sistem, sedangkan N adalah jumlah molekul sistem, k_B adalah konstanta *Boltzmann* dan T adalah Temperatur (Dzulfahmi, 2012).

2.2.3.3 Tekanan

Tekanan biasanya didefinisikan sebagai gaya yang bekerja tegak lurus pada suatu satuan luas.

$$P_x = \frac{F_x}{A} \quad (2.9)$$

Dengan P merupakan Tekanan (N/m^2), *index* x menyatakan tekanan atmosfer atau tekanan udara luar, F merupakan Gaya (Newton) dan A merupakan Luas Permukaan (m^2) (Danus, 2017).

Dengan menggunakan Hukum Newton II yaitu :

$$P_x = \frac{1}{A} \frac{d(mv_x)}{dt} \quad (2.10)$$

Dari persamaan diatas maka, tekanan merupakan suatu fluks momentum atau momentum yang menembus suatu satuan luas dalam suatu satuan waktu. Berikut merupakan **Persamaan 2.11** dan **Persamaan 2.12** menurut termodinamika statistik.

1. P_m , adalah fluks momentum akibat molekul yang menembus suatu permukaan luas selama dt .

$$\langle P_m \rangle = \frac{2N}{3V} \langle K \rangle \quad (2.11)$$

2. P_f , adalah fluks momentum akibat gaya yang bekerja antara dua molekul yang berada pada sisi yang berbeda dari permukaan luas (Santoso, 2012).

$$\langle P_f \rangle = \frac{1}{3V} \langle \sum_i \sum_j F_{ij} \vec{R}_{ij} \rangle \quad (2.12)$$

2.2.3.4 Distribusi Kecepatan

Dalam materi molekul-molekul mampu menghasilkan kecepatan yang berbeda-beda, sehingga terbentuk suatu distribusi kecepatan. Molekul-molekul yang paling banyak berada pada suatu kecepatan tertentu, sehingga semakin berkurang jumlah molekulnya maka semakin jauh kecepatan dari kecepatan sebelumnya yang diperoleh secara statistik. Molekul-molekul paling banyak yang berada pada suatu kecepatan tertentu, ketika jumlah molekul semakin berkurang, maka semakin

bertambah kecepatan tersebut dari kecepatan sebelumnya, yang diperoleh secara statistik. Molekul-molekul dalam materi akan saling bertabrakan dan berinteraksi satu sama lain yang akan menyebabkan adanya pemerataan energi kinetik. Hal ini karena molekul yang bergerak lebih cepat memberikan tambahan momentum pada molekul yang bergerak lebih lambat ataupun sebaliknya. Bentuk dari distribusi kecepatan yang terjadi adalah distribusi normal dan dinamakan Distribusi *Maxwell-Boltzmann*. Distribusi *Maxwell-Boltzmann* bergantung dari temperatur yang dirumuskan seperti **Persamaan 2.13** (Santoso, 2012).

$$f(v)dv = \frac{1}{c} \exp\left(\frac{mv^2}{2kT}\right) dv \quad (2.13)$$

dengan k merupakan konstanta *Boltzmann*, T adalah temperatur sistem dan v adalah kecepatan (Abdurrouf, 2012).

2.2.3.5 Entalpi (H)

Definisi entalpi adalah sebagai gabungan dari energi total sistem dengan energi aliran yaitu:

$$H = E + PV \quad (2.14)$$

dengan E merupakan energi sistem, P merupakan tekanan sistem dan V merupakan volume sistem (Zafira, 2020).

2.2.4 Model Interaksi Antar Molekul

Hukum gaya antar molekul diperlukan dalam model interaksi antar molekul, dimana hukum gaya antar molekul ekuivalen dengan fungsi energi potensial antara molekul. Sebelum simulasi dikerjakan, maka pemilihan fungsi energi potensial harus dilakukan terlebih dahulu. Kebenaran simulasi dari sudut pandang fisika

dipengaruhi oleh pemilihan model interaksi antar molekul yang sangat menentukan kebenarannya dalam sudut pandang fisika. Karena simulasi dalam skala atomik, maka interaksi secara prinsip diturunkan secara kuantum, sehingga berlaku prinsip ketidakpastian *Heisenberg*. Tetapi kita juga dapat menggunakan pendekatan mekanika klasik dengan menganggap atom atau molekul sebagai titik massa (Jabbar, 2012).

Dua buah kriteria harus terpenuhi dalam model interaksi ini. Pertama yaitu, molekul-molekul harus mampu menahan tekanan pasangan molekul yang saling berinteraksi, atau dapat diartikan bahwa ada gaya tolak-menolak antar molekul. Kedua yaitu, molekul-molekul itu harus saling mengikat, atau ada gaya tarik-menarik antara molekul. Jika molekul-molekul terlalu dekat, maka gaya resultan yang terjadi adalah gaya tolak-menolak dan gaya resultan akan menjadi gaya tarik-menarik jika molekul-molekul terlalu jauh. Ketika kedua gaya saling menghilangkan atau meniadakan pada jarak tertentu, maka resultan gaya tersebut sama dengan nol (Santoso, 2012).

Untuk N merupakan jumlah atom dalam suatu simulasi, maka fungsi energi potensial adalah $U(R^N)$, dimana R^N adalah set posisi titik pusat massa atom atau molekul, $R^N = \{R_1, R_2, R_3, \dots, R_N\}$. Model energi potensial sederhana dan yang umum digunakan adalah *pair-wise*, dimana potensial merupakan jumlah dari interaksi antara dua molekul yang diisolasikan (Jabbar, 2012).

$$U = \sum_i \sum_j U(R_{ij}) ; i < j \quad (2.15)$$

Potensial merupakan salah satu komponen yang penting dalam dinamika molekuler. Potensial *Lennard-Jones* menurunkan sebuah gaya yang bekerja pada

partikel. Potential *Lennard-Jones* adalah salah satu potensial yang sering digunakan (Fathurrahman dan Haryono, 2011).

2.2.4.1 Potensial *Lennard-Jones*

Potensial *Lennard-Jones* merupakan salah satu model energi potensial antara dua molekul yang telah dikembangkan. Model ini memiliki ketelitian yang baik untuk simulasi, walaupun model ini dianggap sebagai model yang paling sederhana (Witoelar, 2002). Model potensial ini dirumuskan sebagai:

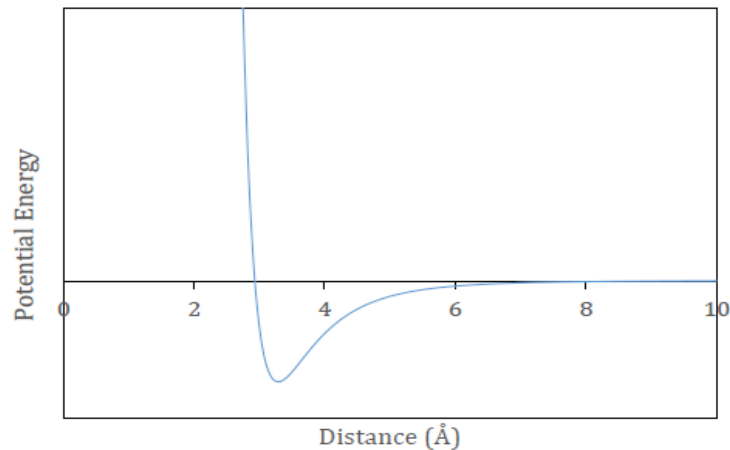
$$U(R_{ij}) = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^m \right] \quad (2.16)$$

Dimana $U(R_{ij})$ merupakan potensial *Lennard-Jones* (eV), σ merupakan panjang ikatan (Å) (parameter potensial *Lennard-Jones*), ε merupakan energi ikat (eV) (parameter potensial *Lennard-Jones*) dan k merupakan koefisien fungsi dari potensial *Lennard-Jones* yang diperoleh dari **Persamaan 2.17**.

$$k = \frac{n}{n-m} \left(\frac{n}{m} \right)^{m/(n-m)} \quad (2.17)$$

Sehingga dari **Persamaan 2.17** persamaan potensial *Lennard-Jones* berubah menjadi seperti berikut.

$$U(R_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2.18)$$



Gambar 2.2 Potensial *Lennard-Jones* (Silva, 2017)

Gambar 2.2 merupakan fungsi potensial *Lennard-Jones*, sebagai pembatas gerak oleh parameter *Lennard-Jones* mempengaruhi jarak pencapaian kesetimbangan atom untuk mengetahui berapa besar jarak dua atom dapat berdekatan (Sa'adah, 2015). Menggunakan interaksi silang dengan radius *cut-off* 9,5 Å sebagai pemodelan interaksi jarak jauh. Parameter ini diperoleh dari aturan pencampuran *Lorentz-Berthelot* yang dinyatakan oleh **Persamaan 2.19**.

$$\sigma_{ij} = \frac{(\sigma_{ii} + \sigma_{jj})}{2}, \quad (2.19)$$

Pada simulasi ini σ dan ε merupakan parameter potensial *Lennard-Jones* (Banerjee, 2008).

2.2.4.2 Gaya

Dari gradien potensial, gaya adalah negatif. Untuk potensial *Lennard-Jones*, besar gaya adalah:

$$F(R_{ij}) = -\frac{d}{dr}U(R_{ij}) = 24\frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^7 \right] \quad (2.20)$$

Gaya positif adalah gaya tolak-menolak, dan gaya negatif adalah gaya tarik-menarik. Model ini menggambarkan bahwa adanya gaya tolak-menolak dengan suku $\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{13}$ yang mendominasi pada jarak dekat serta gaya tarik-menarik dengan suku $\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^7$ yang mendominasi pada jarak jauh (Dzulfahmi, 2012).

2.2.4.3 Pemotongan Potensial

Proses yang paling lama dalam simulasi dinamika molekul adalah menghitung gaya-gaya yang terjadi antar molekul. Sering kali potensial diberikan jarak *cutoff* R_c dan interaksi antar atom yang berjarak lebih besar dari R_c diabaikan dan hal ini biasanya terjadi dalam prakteknya. Pemasangan *cutoff* yaitu pada jarak dimana interaksi seperti gaya dan potensial sudah kecil dan dapat diabaikan (Witoelar, 2002).

$$U(R_{ij}) = \begin{cases} 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R_{ij}}\right)^6 \right] & R_{ij} \leq R_c \\ 0 & R_{ij} > R_c \end{cases} \quad (2.21)$$

2.2.5 Pengembangan Persamaan Gerak Diskrit

Posisi dan derivasi yang diamati oleh dinamika molekul antara lain adalah kecepatan dan percepatan. Sehingga persamaan gerak menjadi:

$$\frac{dr_i(t)}{dt} = v_i(t) \quad (2.22)$$

$$\frac{dv_i(t)}{dt} = a_i(t) \quad (2.23)$$

Agar dapat dipecahkan secara numerik persamaan gerak ini harus dijadikan diskrit. Metode yang digunakan untuk pendiskritan yaitu metode beda hingga

(*finite difference*). Waktu yang diskrit memiliki langkah waktu (*time step*) Δt yang merupakan selisih antara dua waktu berturut-turut. Untuk melakukan metode beda hingga menggunakan ekspansi Taylor. Sebuah persamaan diferensial, akan selalu menimbulkan *truncation error* (error pemotongan) jika suatu metode beda hingga mengaproksimasi solusi persamaan tersebut. *Truncation error* dihitung dari suku bukan nol pertama yang dihilangkan dari ekspansi. Dalam hal ini, metode yang dipilih harus memberikan *error* yang kecil namun tidak terlalu kompleks, sehingga waktu komputasi yang diperlukan cukup lama (Witoelar, 2002).

2.2.5.1 Algoritma Verlet

Algoritma *verlet* adalah salah satu metoda integrasi persamaan gerak yang memberikan *error* kecil namun tidak begitu kompleks. Algoritmanya sederhana tetapi memiliki ketelitian yang baik, membuat algoritma *verlet* sering digunakan.

Menggunakan ekspansi Taylor untuk $t + \Delta t$ dan $t - \Delta t$ sebagai berikut:

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \frac{dr_i}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + \frac{1}{6} \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.24)$$

$$r_i(t - \Delta t) = r_i(t) - \frac{dr_i}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 - \frac{1}{6} \frac{d^3 r_i(t)}{dt^3} (\Delta t)^3 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.25)$$

dari penjumlahan persamaan diatas, maka dihasilkan :

$$r_i(t + \Delta t) + r_i(t - \Delta t) = 2r_i(t) + \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.26)$$

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} (\Delta t)^2 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.27)$$

atau,

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + a_i(t) \cdot (\Delta t)^2 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.28)$$

$$r_i(t + \Delta t) = 2r_i(t) - r_i(t - \Delta t) + \frac{F_i(t)}{m_i}(\Delta t)^2 + 0((\Delta t)^4) \quad (2.29)$$

Maka posisi molekul yang diperoleh pada $t + \Delta t$ dengan *truncation error* berorde $(\Delta t)^2$. Dengan mengurangkan persamaan diatas, maka diperoleh kecepatan pada t sebagai berikut:

$$r_i(t + \Delta t) - r_i(t - \Delta t) = 2 \frac{dr_i(t)}{dt}(\Delta t) + 0((\Delta t)^3) \quad (2.30)$$

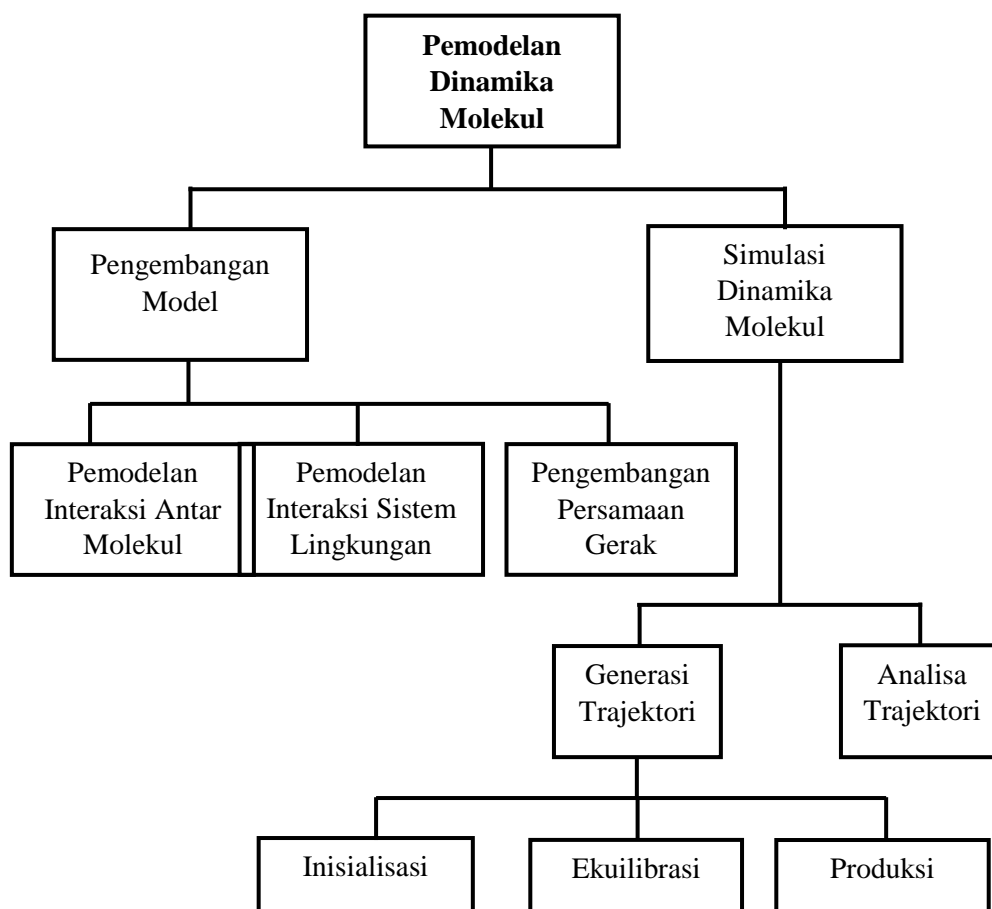
dapat dituliskan dengan :

$$v_i(t) = \frac{dr_i(t)}{dt} = \frac{r_i(t+\Delta t) - r_i(t-\Delta t) + 0((\Delta t)^3)}{2\Delta t} \quad (2.31)$$

Penanganan kecepatan kurang praktis, karena harus memprediksi posisi berikutnya sebelum dapat menghitung kecepatan sesaat. Selain itu, posisi sama sekali tidak ditentukan oleh kecepatan pada saat t , maka algoritma ini tidak mudah mempergunakan *velocity scaling* untuk simulasi pada T konstan yang merupakan kelemahan dari Algoritma *Verlet* (Santoso, 2012).

2.2.7 Langkah-langkah Simulasi Dinamika Molekul

Berikut ini **Gambar 2.3** merupakan langkah-langkah simulasi dinamika molekul.



Gambar 2.3 Langkah-langkah Simulasi Dinamika Molekul

Penjelasan langkah-langkah simulasi dinamika molekul adalah sebagai berikut.

1. Pengembangan Model

Pada simulasi dinamika molekul, pengembangan model harus dilakukan sebagai persiapan. Suatu model dapat diperoleh dari teori ataupun eksperimen. Jika molekul berinteraksi satu sama lain, maka model interaksi antar molekul akan dibutuhkan. Dibutuhkan model interaksi antara sistem dan lingkungan jika sistem tidak terisolasi. Untuk pengendalian temperatur sistem dan pengendalian tekanan sistem, maka interaksi antara sistem dan lingkungan dapat dipergunakan.

2. Simulasi Dinamika Molekul

Dengan penghasilan trajektori molekul-molekul dalam simulasi, maka tahap simulasi dapat dilakukan, kemudian analisa dapat dilakukan bersamaan atau setelah simulasi (Witoelar, 2002).

2.3 Adsorpsi

Suatu fenomena permukaan akibat akumulasi suatu spesies pada batas permukaan padat-cair disebut dengan adsorpsi. Adsorpsi dapat terjadi karena adanya gaya tarik-menarik (Widayatno dkk, 2017). Adsorpsi secara umum adalah substansi terlarut dalam larutan yang mengalami proses penggumpalan oleh permukaan suatu benda atau suatu zat penyerap sedangkan absorpsi terjadi ketika zat padat dimasuki oleh bahan yang mengumpul. Keduanya sering muncul bersamaan dengan suatu proses maka ada yang menyebutnya sorpsi (Giyatmi dkk, 2008).



Dari persamaan diatas A dan B menempel pada katalis, lalu bereaksi dan menghasilkan C. Kemudian C meninggalkan katalis dan mengikat fluida. Berikut ini **Tabel 2.1** merupakan perbedaan antara adsorpsi fisika/fisik dan adsorpsi kimia (Murachman dkk, 2014).

Tabel 2.1 Perbedaan antara adsorpsi fisik dan adsorpsi kimia (Murachman dkk, 2014)

No	Parameter	Adsorpsi Fisik	Adsorpsi Kimia
1.	Adsorben	Semua jenis	Terbatas
2.	Adsorbat	Semua gas	Kecuali gas mulia
3.	Jenis ikatan	Fisika	Kimia
4.	Panas adsorpsi	5-10 kkal/gmol gas	10-100 kkal/gmol gas
5.	Temperatur adsorpsi	Di bawah temperatur kritis	Di atas temperatur kritis

6.	Energi aktivasi	Kurang dari 1 kkal/gmol	10-60 kkal/gmol
7.	Reversibilitas	Reversibel	Tidak selamanya reversibel
8.	Tebal lapisan	Banyak (multilayer)	Satu (monolayer)
9.	Kecepatan adsorpsi	Besar	Kecil
10.	Jumlah zat yang teradsorpsi	Sebanding dengan kenaikan tekanan	Adsorben yang dapat bereaksi dengan adsorbat sebanding dengan banyak inti aktif

Widayatno dkk, 2017 mengatakan ada dua tipe adsorpsi, yaitu adsorpsi fisis atau adsorpsi *Van Der Waals* dan adsorpsi kimia. Adsorpsi fisis dan kimia, dalam hal ini adalah non-spesifik dan non-selektif. Gaya tarik menarik terjadi karena adanya ikatan koordinasi hidrogen dan gaya *Van Der Waals*. Ketika suatu permukaan adsorben dan adsorbat terikat dengan gaya *Van Der Waals*, maka dinamakan dengan adsorpsi fisis.

2.3.1 Jenis-jenis Adsorpsi

Adsorpsi dibagi menjadi dua bagian berdasarkan interaksi molekuler antara adsorpsi dengan adsorbat, yaitu adsorpsi fisika dan adsorpsi kimia (Santoso, 2012).

2.3.1.1 Adsorpsi Fisika

Adsorpsi fisika hanya terjadi di permukaan tanpa ada reaksi kimia yang terlibat. Adsorpsi fisik atau adsorpsi fisika terjadi apabila diberikan *mechanical force* seperti pengadukan atau penggoyangan dan adsorpsi ini akan berlangsung cepat (Murachman dkk, 2014).

2.3.1.2 Adsorpsi Kimia

Reaksi antara molekul-molekul adsorbat dengan adsorben serta terbentuknya ikatan kovalen dengan ion menyebabkan adsorpsi kimia terjadi. Sifat Adsorpsi kimia ini adalah irreversible dan hanya membentuk lapisan tunggal. Proses ini terjadi pada umumnya saat suhu tinggi atau suhu diatas suhu kritis adsorbat. Perpindahan gas atau cairan ke suatu permukaan padatan atau perpindahan gas ke suatu permukaan cairan disebut dengan adsorpsi, sedangkan adsorbat adalah suatu substansi yang terkonsentrasi pada permukaan dan material saat adsorbat terakumulasi disebut adsorben. Proses lepasnya adsorbat dari permukaan adsorben disebut sebagai proses desorpsi (Dzulfahmi, 2012).

2.3.2 Kestimbangan Adsorpsi

Jumlah adsorbat yang terserap pada kondisi equilibrium merupakan fungsi dari tekanan dan temperatur yang ada pada sistem adsorbat-adsorben.

$$\frac{x}{m} f(p, T) \quad (2.33)$$

Dimana, $\frac{x}{m}$ adalah jumlah adsorbat yang terserap per unit *massa* adsorben pada p tekanan equilibrium dan pada T temperatur adsorpsi. Tiga cara untuk mendekati adsorpsi equilibrium :

2.3.2.1 Adsorpsi Isotermal

Pada adsorpsi isotermal, temperatur adsorpsi dijaga konstan dengan demikian x/m tergantung pada tekanan equilibrium sehingga jumlah adsorbat yang terserap adalah :

$$\frac{x}{m} f(p) [T = \text{konstan}] \quad (2.34)$$

2.3.2.2 Adsorpsi Isobar

Pada adsorpsi isobar, tekanan adsorpsi dijaga konstan dan temperatur adsorpsi divariasikan. Dengan demikian $\frac{x}{m}$ adalah sebagai berikut (Jabbar,2012).

$$\frac{x}{m} f(T) \quad [p = \text{konstan}] \quad (2.35)$$

2.3.2.3 Adsorpsi Isosterik

Pada adsorpsi isosterik dimana jumlah adsorbat yang terserap per unit *massa* adsorben adalah konstan dan temperatur divariasikan sehingga tekanan menjadi fungsi yang sangat esensial untuk menjaga $\frac{x}{m}$ tetap konstan (Santoso, 2012).

$$p = f(T) \quad \left[\frac{x}{m} = \text{konstan}\right] \quad (2.36)$$

2.4 Hidrogen

Pada atmosfer, jarang di temukan atau sedikit ditemukan hidrogen, karena jika hidrogen dalam bentuk gas berbenturan dengan gas lain pada atmosfer bumi, maka hidrogen akan terlempar kembali keluar atmosfer bumi. Gas hidrogen (H₂) merupakan gas yang memiliki kelimpahan paling besar yaitu 75% penyusun alam semesta dan hampir 90% membentuk unsur di alam. Di bumi, hidrogen bersenyawa dengan unsur oksigen membentuk senyawa H₂O yang sering disebut dengan air (Afief dan Isana, 2017).

Hidrogen merupakan molekul yang penting bagi energi dan pangan. Ada dua masalah yang dapat diatasi akibat penggunaan hidrogen, yaitu pemanasan global dan kurangnya cadangan bahan bakar minyak. Hidrogen digunakan sebagai bahan baku pembuatan amonia untuk pupuk nitrogen pada bidang pangan. Air

merupakan senyawa yang mengandung hidrogen yang melimpah dan air memiliki harga yang murah. Untuk menghasilkan hidrogen, maka diperlukan sumber energi primer untuk merengkah molekul air. Nuklir merupakan sumber energi potensial yang dapat digunakan untuk mencapai tujuan tersebut (Huda, 2013).

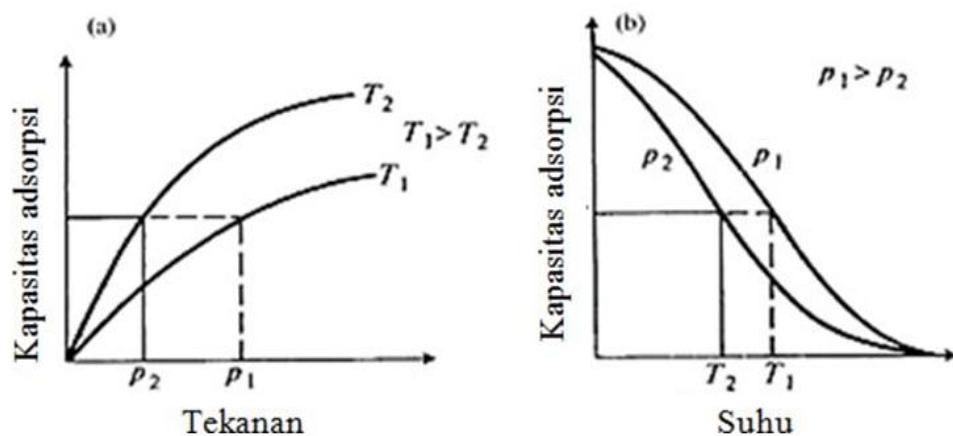
Gas hidrogen cocok untuk konversi energi tanpa menghasilkan emisi karbon, karena gas hidrogen (H_2) mempunyai gravimetrik densitas energi yang tertinggi diantara beberapa bahan bakar lainnya. Gas hidrogen banyak digunakan untuk berbagai keperluan seperti bahan pembuat amoniak, bahan untuk sel bahan bakar, dan sebagainya (Hakim dan Marsalin, 2016).

2.4.1 Penyimpanan Hidrogen

Penggunaan hidrogen sebagai sumber energi alternatif untuk transportasi memiliki beberapa keuntungan, seperti kelimpahan tinggi, ringan, menghasilkan pembakaran panas tinggi, reproduibel, dan non emisi polutan atau ramah lingkungan selama pembakaran (Sari dkk, 2016).

Beberapa kriteria penting untuk sistem penyimpanan hidrogen yaitu reversibilitas penyerapan dan pelepasan. Oleh karena itu, pemilihan bahan yang berinteraksi dengan hidrogen, serta bahan inert, adalah penting (Zuttel, 2003). Membuat bahan bakar dari hidrogen lebih mudah akan tetapi kendala yang harus dihadapi antara lain hidrogen harus disimpan terlebih dahulu sebelum diproduksi menjadi bahan bakar. Untuk menyimpan hidrogen dapat digunakan pada beberapa material-material anorganik seperti oksida logam dengan jumlah hidrogen yang tersimpan diketahui 1,2 wt%, hibrida dengan kapasitas hidrogen yang terserap 7,6 wt%, keramik dengan kandungan adsorpsi hidrogen mencapai 1,25, 2,5, 1,34, dan 1,9

wt%, zeolit dengan kapasitas adsorpsi hidrogen 1,43 wt%, *Graphene* dengan kapasitas menyerap hidrogen 1,2 wt% dan 0,1 wt%, serta material gabungan dari anorganik dan organik yang dikenal *metal organic framework* (MOF) dengan kapasitas 1,38 wt% menyerap hidrogen. Sampai saat ini para ilmuwan terus menerus meneliti berbagai jenis material untuk meningkatkan kapasitas adsorpsi hidrogen (Saputri, 2018). Sedangkan untuk penyimpanan hidrogen pada material berpori seperti *carbone nanotube*, setelah di pertimbangkan jenis adsorben juga di pertimbangkan ukuran dari adsorbat, maka suhu dan tekanan ternyata berpengaruh besar pada adsorpsi. Hal ini di tunjukan pada **Gambar 2.4**.



Gambar 2.4 (a) Grafik pengaruh tekanan dan (b) Grafik pengaruh suhu pada adsorpsi hidrogen

Gambar 2.4 menunjukkan bahwa kapasitas adsorpsi hidrogen semakin besar saat tekanan semakin besar dan suhu semakin kecil (Suci, 2016). Untuk menghitung besarnya molekul hidrogen yang dapat digunakan dalam penyerapan hidrogen dapat menggunakan **Persamaan 2.37**, persamaan gas nyata yang dimodifikasi dari gas ideal.

$$\left\{ P + a \left(\frac{n}{V_m} \right)^2 \right\} (V_m - nb) = nRT \quad (2.37)$$

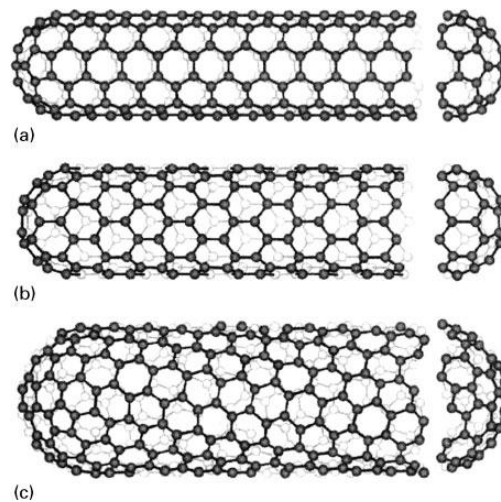
Dimana P merupakan tekanan (atm), a dan b melambangkan koefisien *Van Der Waals* untuk hidrogen, sedangkan V_m merupakan volume sistem (m^3), R merupakan konstanta gas universal ($\frac{8,314 J}{mol.K}$), T merupakan temperatur atau suhu (Jabbar, 2012) dan (Fatriansyah dkk, 2020).

2.5 *Carbone Nanotube (CNT)*

Carbone nanotube merupakan salah satu teknologi nano yang telah banyak digunakan dalam bidang pengetahuan seperti bidang kimia, bidang elektronik dan lain-lain (Sutanti dan Handayani, 2013). Tabung karbon nano adalah anggota keluarga struktural *fullerene*, yang juga termasuk bola bucky. Sedangkan *buckyballs* atau bola bucky berbentuk bola, CNT berbentuk silinder, ujung beberapa CNT terbuka, yang lain tertutup dengan tutup fullerene penuh. Nama CNT berasal dari ukurannya, karena diameter CNT berada di urutan beberapa nanometer (kira-kira 50.000 kali lebih kecil dari lebar rambut manusia), sementara mereka bisa sampai beberapa mikrometer. Aplikasi komersial untuk CNT telah berkembang agak lambat, terutama karena biaya produksi yang tinggi dari CNT kualitas terbaik (Aqel dkk, 2010). Sumio Iijima pada tahun 1991, akhirnya menemukan hubungan antara *fullerene* dengan model *carbone nanotube*. Hingga akhirnya ia menemukan *carbone nanotube* saat bekerja di perusahaan NEC di Jepang dan berhasil mengemukakan penelitiannya dengan lengkap mengenai struktur dan sifat-sifat *carbone nanotube* menggunakan mikroskop elektron beresolusi tinggi (Jabbar, 2012).

Nanotube yang ditemukan oleh Iijima memiliki struktur yang terkait erat dengan *fullerene*. Hal ini dapat diilustrasikan sangat jelas dengan mempertimbangkan dua

tabung nano karbon 'pola dasar' yang dapat dibentuk dengan memotong molekul C60 menjadi dua dan menempatkan silinder *graphene* diantara dua bagian. Membagi C60 di sepanjang salah satu dari lima sumbu lipat menghasilkan tabung nano 'kursi berlengan' Seperti pada gambar berikut ini (Harris, 2014).

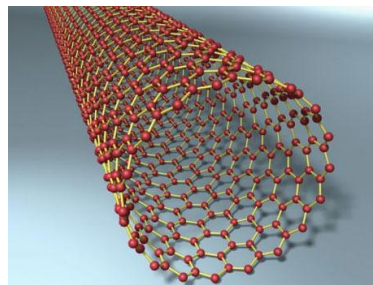


Gambar 2.5 (a) *armchair* (b) *zigzag* (c) *chiral* (Harris, 2014)

2.5.1 Jenis-Jenis CNT (*Carbone Nanotube*)

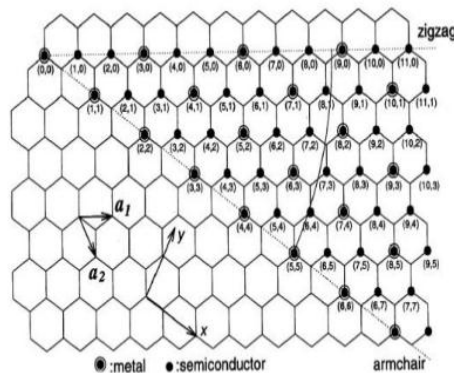
Nur dkk, 2007 mengatakan bahwa *carbone nanotube* terbagi menjadi dua tipe yaitu SWNT (*Single walled nanotube*) dan MWNT (*multi walled nanotube*).

2.5.1.1 *Single walled nanotube* (SWNT)



Gambar 2.6 *Single Walled Carbone Nanotube* (Santoso, 2012)

Secara teori, *Single Walled Carbone Nanaotube* adalah sebuah tabung karbon yang berhibridasi sp^2 , kemudian berikatan satu sama lain secara heksagonal dan terbentuk dengan cara menggulung lembaran *graphene* kedalam yang membentuk atau mengarah pada pengaturan kiral dan non kiral. Seperti yang telah ditunjukkan pada **Gambar 2.5** dengan tiga jenis struktur *Single Walled Carbone Nanotube* yaitu struktur *armchair*, *zig-zag* dan kiral. Tabung nano berdinding tunggal (SWNT) memiliki panjang tabung sekitar jutaan kali lebih panjang. *Nanotube* berdinding tunggal dibungkus dengan lapisan grafit, dimana lapisan selebaran atom disebut *graphene* yang digulung kedalam membentuk silinder. Lembaran *graphene* yang digulung diwakili oleh sepasang indeks (n,m) yang dikenal sebagai vector kiral (Prajapati dan Banik, 2011).



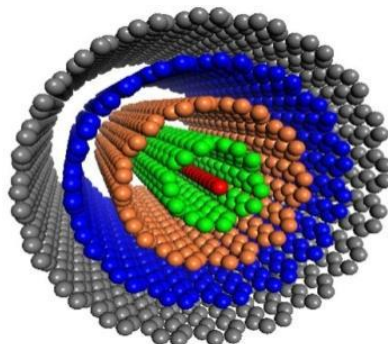
Gambar 2.7 Beberapa cara penggulungan Lembaran *graphene* (Deshpande dan Mahendru, 2018)

Untuk menghitung diameter SWNT menggunakan persamaan berikut:

$$d = \frac{a}{\pi} \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} \quad (2.38)$$

Dimana a sebesar 2.046 nm dan n, m merupakan vektor kiral pada SWNT (*Single Walled Carbone Nanotube*). Persamaan ini menurut refrensi Lago dkk pada tahun 2016 dan (Ingvason, 2013).

2.5.1.2 *Multi Walled Nanotube (MWNT)*



Gambar 2.8 *Multi Walled Carbon Nanotube* (Jabbar, 2012)

Beberapa lapisan struktur grafit yang digulung membentuk silinder disebut dengan *Multi Walled Carbon Nanotube* (MWNT). Atau dapat dikatakan MWNT tersusun oleh beberapa *single walled carbon nanotube* (SWNT) dengan diameter yang berbeda setiap lapisnya. MWNT terbentuk dari lapisan struktur grafit (*graphene*) dengan jumlah 2 sampai 30 lapisan yang tergulung membentuk silinder dengan panjang lebih dari 10 mikrometer dan diameter 10 sampai 5 nm. Sifat yang dimiliki SWNT tentu berbeda dengan sifat yang dimiliki oleh MWNT. MWNT hanya memiliki dua lapis dinding *Double Walled Carbon Nanotube* atau DWNT yang memiliki sifat penting karena sifatnya menyerupai SWNT dengan *chemical resistance* yang lebih baik. Apabila terdapat ikatan C=C yang rusak maka akan menghasilkan lubang di SWNT, karena SWNT hanya memiliki satu lapis dinding dan hal ini akan mengubah sifat elektrik dan mekanik dari ikatan SWNT tersebut. Sedangkan DWNT akan mempertahankan sifatnya karena DWNT masih memiliki satu lapis lagi di dalamnya (Asmarani, 2018). Ada dua jenis model yang dapat dijelaskan yaitu struktur tabung nano dinding banyak atau *multi walled carbon* dan SWNT. Menurut model boneka rusia, lembaran grafit disusun dalam silinder konsentris (0, 9) dan *nanotube* berdinding tunggal (SWNT)

lebih besar yaitu (0,18). Menurut model perkamen, satu lembar grafit digulung di sekitar MWNT, serupa dengan koran yang digulung atau digulungkan perkamen. Jarak antar lapisan *nanotube* berdinding banyak dekat dengan jarak antar lapisan *graphene* pada grafit yaitu 3,4 Å (Prajapati dan Banik, 2011).

2.5.2 Sifat-sifat *Carbone Nanotube*

Sifat *carbone nanotube* dapat dikatakan luar biasa, namun tetap mempunyai limit dari beberapa sifatnya. Berikut ini merupakan sifat-sifat yang dimiliki *carbone nanotube*.

a. *Tensile strength* yang sangat tinggi

Ikatan antar atom *nanotube* sp^2 membuatnya memiliki kekuatan tensile lebih besar dari baja dan kevlar. Ikatan antar atom *nanotube* ini lebih kuat daripada ikatan yang biasa ditemukan dalam berlian yaitu ikatan sp^3 .

b. Sangat Elastis dan Fleksibel Elastisitas

nanotube memiliki limit mencapai ~18% kegagalan mulur. saat dikenakan gaya tekan axial yang cukup tinggi akan membuat material *nanotube* mengalami *bending*, *buckling*, *dantwisting* yang tidak sampai merusak material *nanotube* itu sendiri. Dan ketika dilepas gayanya maka akan kembali ke bentuk semula.

c. Memiliki konduktivitas panas dan elektrik yang tinggi

Ketika *nanotube* bersifat sebagai konduktor, *nanotube* memiliki konduktivitas yang sangat tinggi. Diperkirakan pada saat *nanotube* bersifat sebagai konduktor maka ia mempunyai konduktivitas listrik sebesar 1 miliar Ampere per 1 cm^2 . Karena panas terlalu tinggi maka tidak cocok untuk material

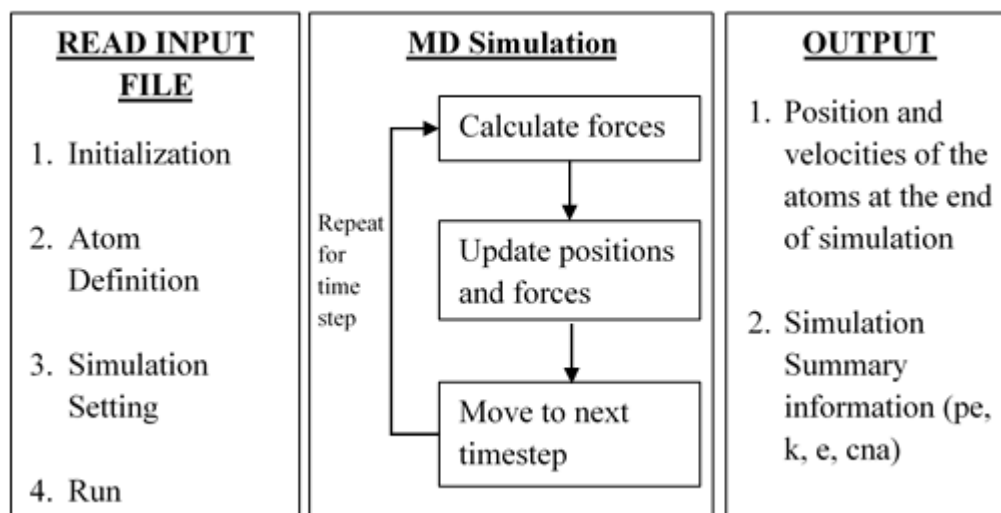
seperti tembaga, karena akan meleleh akibat panas yang tinggi. Karena hambatan yang rendah pada *nanotube* tidak akan menyebabkan panas yang tinggi. *Nanotube* juga memiliki konduktivitas panas yang baik. Hal ini yang kemudian *nanotube* diberi sebutan *ball stick conduction*. *Nanotube* memiliki kemampuan untuk mentransmisikan 6000 W/m/K di temperatur ruang (pada tembaga hanya 385 W/m/K).

- d. *Carbon nanotube* cukup baik sebagai *Good Electron Field Emitters* (Furoidah, 2018).

2.6 Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) adalah sebuah perangkat lunak *open source* yang dikembangkan oleh *Sandia National Laboratories* (Hidayat, 2019). LAMMPS adalah kode dinamika molekuler klasik yang memodelkan kumpulan partikel dalam keadaan cair, padat, dan orgase. Dapat memodelkan sistem atom, polimer, biologi, logam, granular, dan butiran kasar menggunakan berbagai medan gaya dan kondisi batas. LAMMPS berjalan secara efisien pada mesin desktop atau laptop prosesor tunggal, tetapi dirancang untuk komputer paralel. Dalam pengertian yang paling umum, LAMMPS mengintegrasikan persamaan gerak Newton untuk kumpulan atom, molekul, atau partikel makroskopik yang berinteraksi melalui gaya jarak pendek atau jarak jauh dengan variasi kondisi awal atau batas. Untuk efisiensi komputasi, LAMMPS menggunakan daftar tetangga untuk melacak partikel terdekat. Daftar tersebut dioptimalkan untuk sistem dengan partikel yang repulsif pada jarak pendek, sehingga kepadatan lokal partikel tidak pernah menjadi terlalu besar. Pada mesin

paralel, LAMMPS menggunakan teknik dekomposisi spasial untuk mempartisi domain simulasi menjadi sub-domain 3 dimensi kecil, yang salah satunya ditetapkan ke setiap prosesor (Plimpton dkk., 2003).



Gambar 2.9 Diagram alir proses simulasi LAMMPS (Yin, 2016)

File input berisi inisialisasi, definisi atom, dan pengaturan simulasi. Inisialisasi adalah tahap pertama untuk menetapkan parameter yang menentukan sistem molekuler dan domain simulasi. Ada tiga cara untuk mendefinisikan atom. Detailnya dapat dibaca dari file data baru, file restart dari simulasi sebelumnya, atau kisi input yang dapat dibuat sebagai bagian dari simulasi itu sendiri. Kemudian, langkah selanjutnya adalah mengatur parameter. Lokasi dan kecepatan setiap atom adalah 20 ditentukan dalam sistem sebelum menjalankan simulasi. Dalam proses ini, tumpang tindih yang signifikan tidak dapat terjadi di lokasi atom berdasarkan struktur model. Kecepatan bergantung pada perintah yang dapat memberikan kecepatan acak pada setiap atom pada suhu K . Lokasi dan kecepatan akan menjadi nilai awal. Pengaturan penting lainnya adalah kondisi batas. Karena molekul yang dihitung dibatasi oleh kecepatan dan kapasitas komputer, penelitian

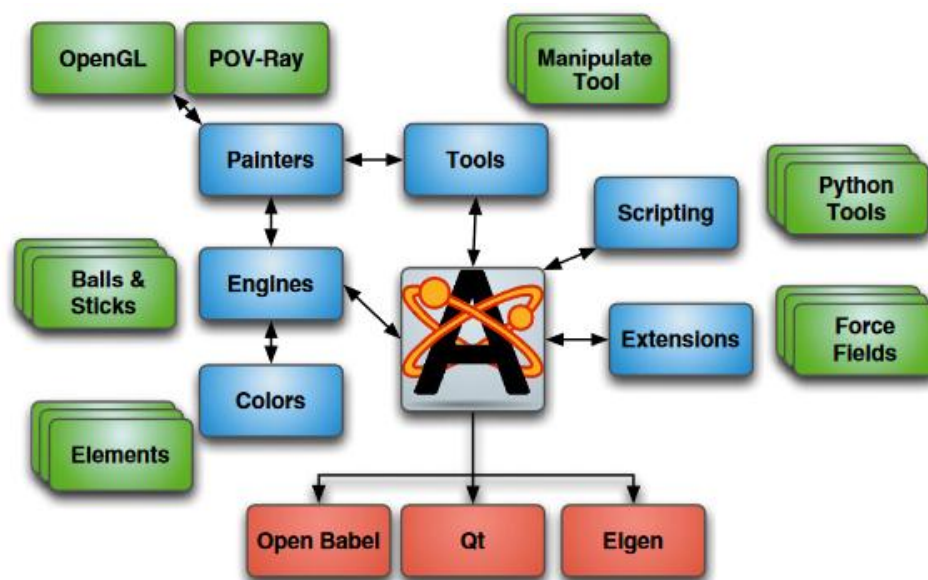
ini menggunakan kondisi batas periodik untuk mensimulasikan hasil. Dalam kondisi batas periodik, kotak simulasi kubus direplikasi ke seluruh ruang untuk membentuk kisi tak hingga. Secara bersamaan, parameter yang diperlukan seperti suhu awal, jumlah partikel, kepadatan, dan waktu berjalan ditetapkan. Setelah semua bidang yang diperlukan ditetapkan, simulasi akan berjalan selama waktu yang ditentukan (Yin, 2016).

2.7 Avogadro

Avogadro adalah editor dan visualisasi molekul tingkat lanjut, dirancang untuk digunakan dalam kimia komputasi, pemodelan molekul, bioinformatika, ilmu material, dan bidang terkait lainnya. Avogadro memiliki antarmuka grafis yang ramah, dapat dengan mudah dimanipulasi oleh pengguna untuk melihat struktur molekul dari berbagai sudut dalam tiga dimensi (Rayan dan Rayan, 2017).

Avogadro menawarkan pembangun dan platform kimia semantik untuk visualisasi dan analisis. Bagi pengguna, ini menawarkan pembangun yang mudah digunakan, dukungan terintegrasi untuk mengunduh dari database umum seperti PubChem dan Protein Data Bank, mengekstrak data kimia dari berbagai format, termasuk keluaran kimia komputasi dan asli, dukungan semantik untuk CML format file. Untuk pengembang, ini dapat dengan mudah diperluas melalui mekanisme plugin yang kuat untuk mendukung fitur baru dalam kimia organik, kompleks anorganik, desain obat, bahan, biomelekul dan simulasi. Kerangka Avogadro bekerja menggunakan paradigma model, view, dan pengontrol. Model terdiri dari kelas data inti seperti Molekul, Atom, dan Bond. Tampilan terdiri dari plugin mesin dan pengontrol yaitu alat (*mouse interaktif*) dan ekstensi (*non interaktif*, berbasis

formulir atau berbasis menu). Setiap *plugin* memiliki akses penuh ke model data inti, kecuali tampilan dan pengontrol *plugin* secara konseptual berbeda pandangan yang bertanggung jawab untuk menampilkan data dan pengontrol serta bertanggung jawab untuk memodifikasi atau mengubah data (Hanwell dkk, 2012).



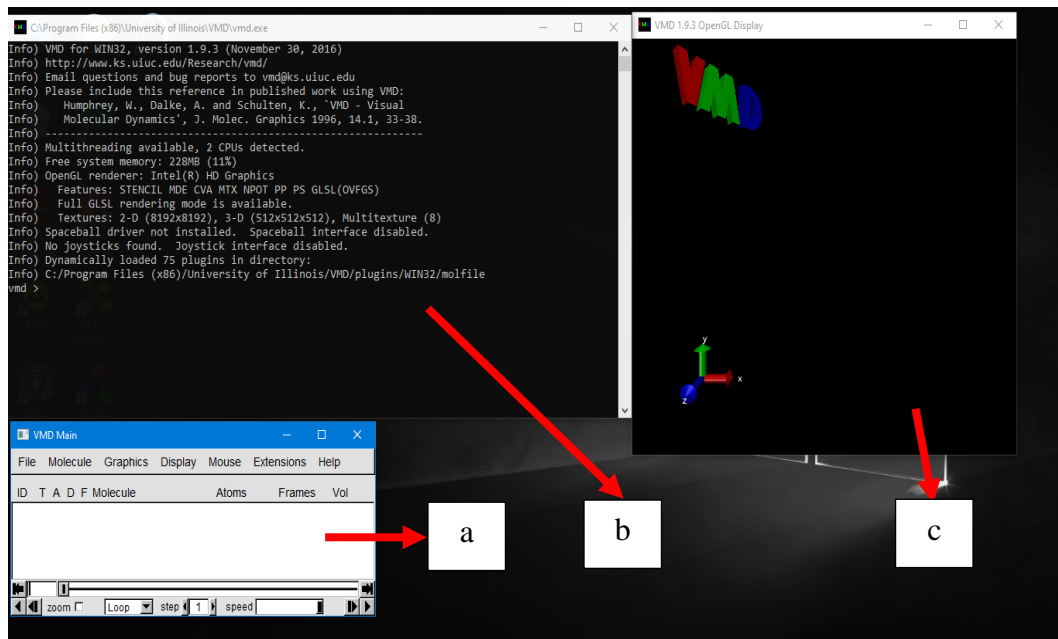
Gambar 2.10 Arsitektur kode umum *Avogadro* (Hanwell dkk, 2012)

Arsitektur kode umum *Avogadro* diatas, menunjukkan antarmuka *plugin* utama untuk warna, tampilan mesin, alat, dan ekstensi. Kotak merah menunjukkan ketergantungan kode *Avogadro*, kotak biru menunjukkan kelas API *plugin*, dan kotak hijau *indicate* contoh dari setiap jenis *plugin* (Hanwell dkk, 2012).

2.8 VMD

VMD (*Visual Molecular Dynamics*) adalah program grafik molekuler yang dirancang untuk tampilan dan analisis rakitan molekul, khususnya biopolimer seperti protein dan asam nukleat. Vmd dapat secara bersamaan menampilkan sejumlah struktur menggunakan berbagai variasi gaya *rendering* dan metode pewarnaan. Molekul ditampilkan sebagai satu atau lebih "representasi", dimana

setiap representasi mewujudkan metode *rendering* dan skema pewarnaan tertentu untuk subset atom yang dipilih. Atom yang ditampilkan disetiap representasi dipilih menggunakan sintaks pemilihan atom ekstensif, yang menyertakan operator *boolean* dan ekspresi reguler. VMD menyediakan antarmuka pengguna grafis lengkap untuk kontrol program, serta antarmuka teks menggunakan *parsertel embeddable* untuk memungkinkan skrip kompleks dengan substitusi variabel, kontrol, loop, dan pemanggilan fungsi. *Logging* sesi penuh didukung, yang menghasilkan skrip perintah vmd untuk pemutaran nanti. Gambar raster resolusi tinggi dari molekul yang ditampilkan dapat diproduksi dengan menghasilkan skrip *input* untuk digunakan oleh sejumlah aplikasi *rendering* gambar fotorealistik. VMD juga telah dirancang secara tegas dengan kemampuan untuk menganimasikan lintasan simulasi dinamika molekuler (MD), yang diimpor dari file atau dari koneksi langsung ke simulasi MD yang sedang berjalan. VMD adalah komponen visualisasi *MDScope*, seperangkat alat untuk pemecahan masalah interaktif dalam biologi struktural, yang juga mencakup program MD paralel NAMD, dan perangkat lunak MDCOMM yang digunakan untuk menghubungkan program visualisasi dan simulasi. VMD ditulis dalam C++, menggunakan desain berorientasi objek, program, termasuk kode sumber dan dokumentasi ekstensif (Humphrey dkk, 1996).



Gambar 2.11 Tampilan aplikasi VMD (a) VMD main (b) Program file (c) *OpenGL Display*

III. METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Pelaksanaan penelitian dilakukan di Laboratorium Elektronika Dasar Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung. Penelitian ini dilakukan sejak Maret 2020 hingga Mei 2021.

3.2 Alat dan Bahan

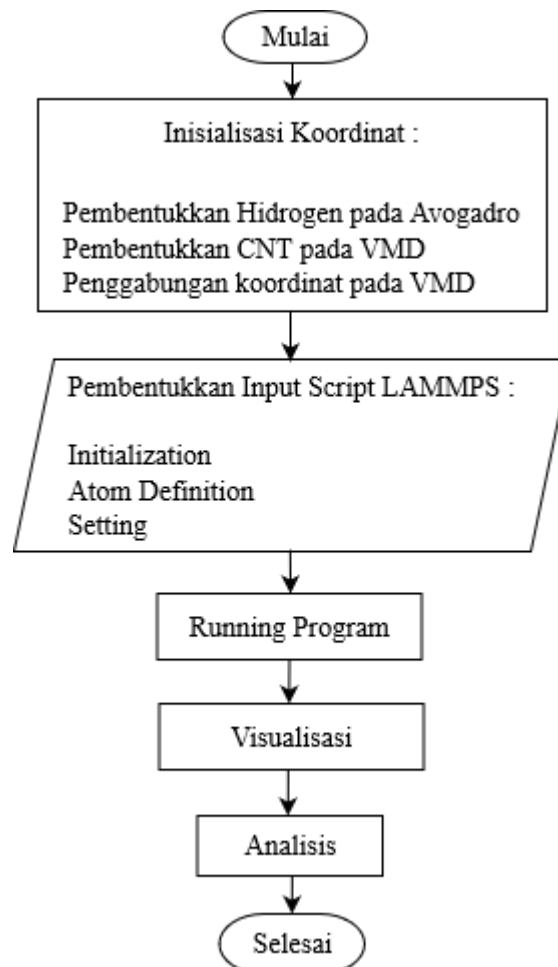
Alat yang digunakan pada penelitian ini adalah komputer yang diinstal sistem operasi windows 2010 pro dengan RAM 4 GB dan *processor intel core i5-8250U*. Untuk bahan yang digunakan adalah *software* program LAMMPS dan *Command Prompt* serta piranti Avogadro dan VMD.

3.3 Prosedur Penelitian

Penelitian ini dilakukan sesuai prosedur berikut ini dengan tahapan-tahapan penelitian antara lain pembuatan diagram alir, pengumpulan data, pembentukan *input script* dan analisis.

3.3.1 Diagram Alir

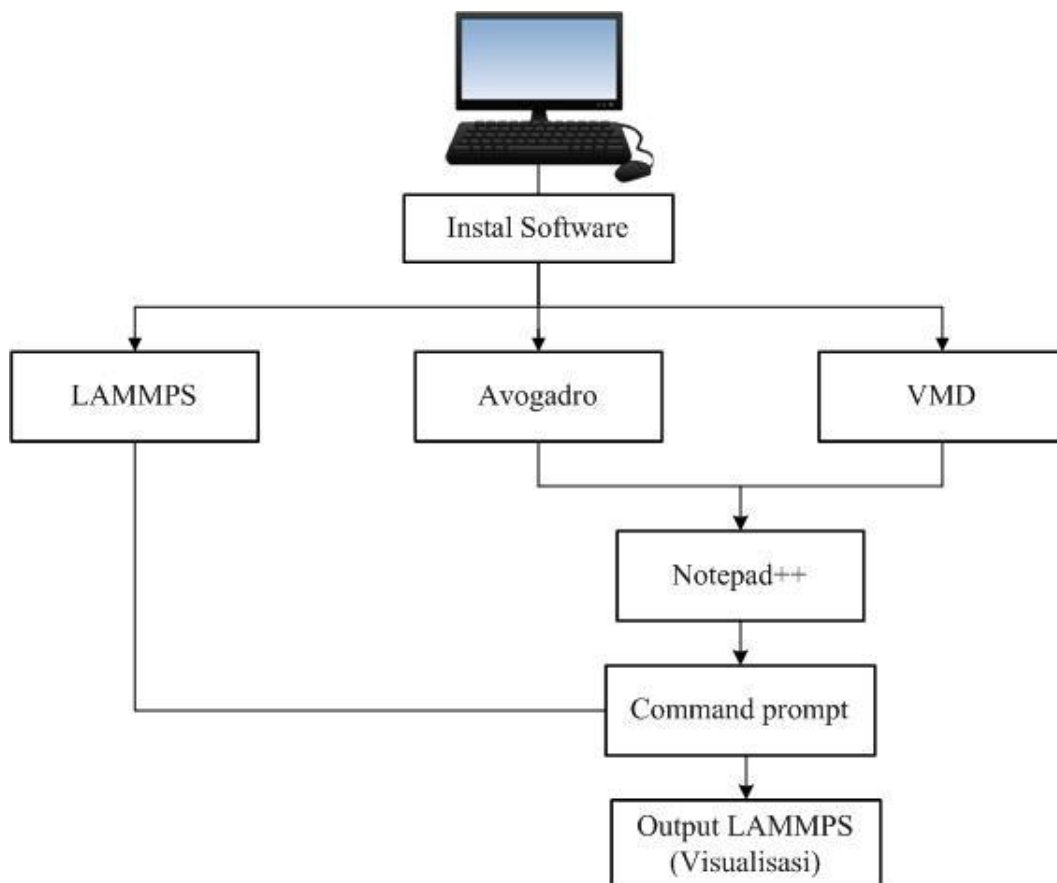
Diagram alir pada penelitian ini adalah sebagai berikut :



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.3.2 Metode Pengumpulan Data

Metode pengumpulan data adalah sebagai berikut :



Gambar 3.2 Metode pengumpulan data

Pada **Gambar 3.3**, langkah pertama adalah menyiapkan satu buah PC (*Personal Computer*), lalu menginstal empat buah *software* yaitu Avogadro, VMD, LAMMPS dan Notepad++. Kemudian menggabungkan file output koordinat atom hidrogen dari Avogadro dan file output koordinat CNT dari VMD secara manual pada Notepad++. File gabungan ini disebut sebagai *file atom definition* yang kemudian akan dibaca oleh LAMMPS melalui *Command Prompt* dan di hasilkan *output LAMMPS* sebagai *file input* visualisasi.

3.3.3 Prosedur Simulasi

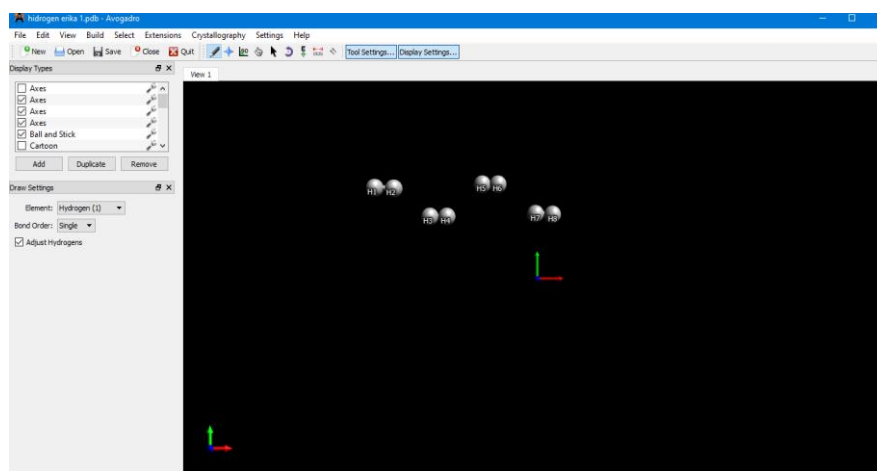
Simulasi dinamika molekul yang dilakukan adalah sebagai berikut :

3.3.3.1 Program Avogadro

a. Membuat inialisasi atom dan molekul hidrogen.

- 1) Meletakkan posisi atom hidrogen pada posisi awal secara bebas.
- 2) Setelah diperoleh koordinat maka didapat *output file* yang berisi koordinat sumbu x, y dan z.
- 3) Koordinat dapat diubah-ubah sesuai dengan kebutuhan simulasi. Seperti pada

Gambar 3.3.

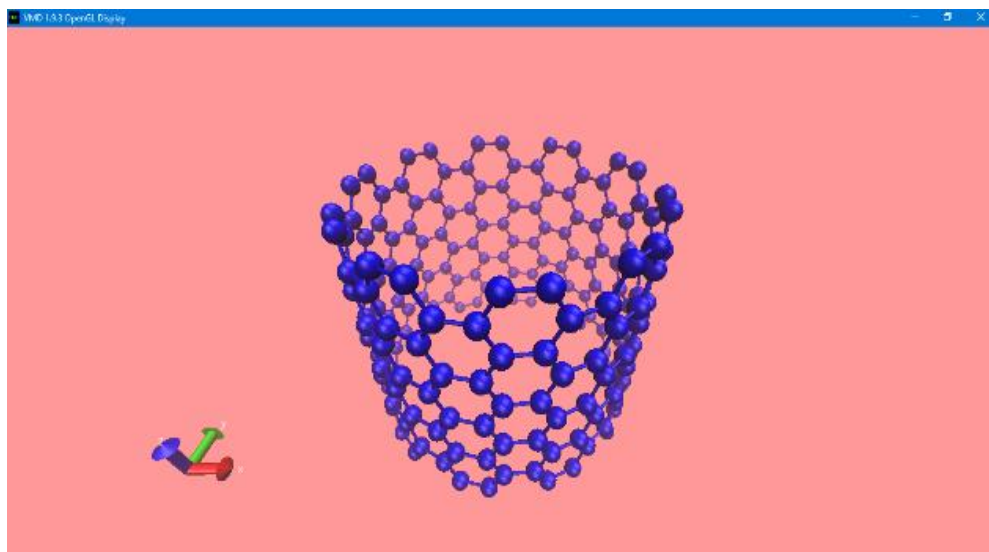


Gambar 3.3 Pembentukan Hidrogen pada Avogadro

3.3.3.2 Program VMD

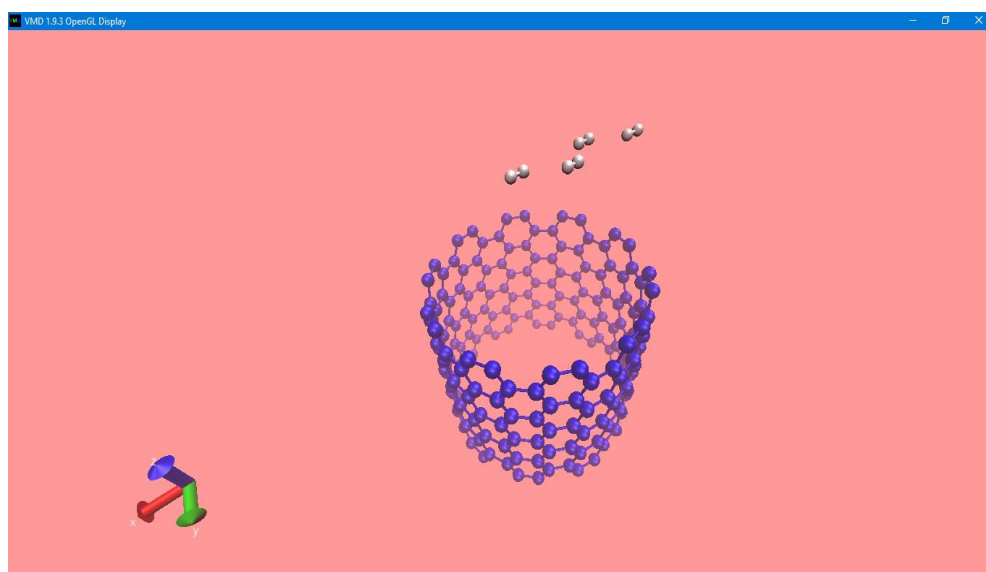
Membuat inialisasi koordinat atom *Carbone Nanotube* (CNT) serta visualisasi hasil simulasi.

- 1) Membuat pemodelan atom atau molekul *Carbone Nanotube*.
- 2) Memvisualisasikan *Carbone Nanotube*, seperti pada **Gambar 3.4**.



Gambar 3.4 Pembentukan CNT pada VMD

- 3) Menggabungkan output geometri Hidrogen dari aplikasi Avogadro atau memasukan *output file* yang berisi koordinat hidrogen kedalam aplikasi VMD dimana *output file* CNT juga sudah ada di VMD.
- 4) Setelah *Carbone Nanotube* dapat bersatu dengan Hidrogen maka penulis dapat menyesuaikan jarak antara hidrogen dengan *carbone* seperti yang terlihat pada **Gambar 3.5**.



Gambar 3.5 Penggabungan CNT dengan Hidrogen pada VMD

3.3.3.3 Program LAMMPS

3.3.3.3.1 Pembentukan *Input Script* Akan Digunakan Dalam Simulasi

LAMMPS menggunakan aplikasi Notepad++ yang disimpan dengan ekstensi “in”. *Input script* LAMMPS berisi informasi yang harus diberikan sebelum simulasi. Informasi ini berfungsi untuk mendefinisikan atom dan molekul beserta posisinya dan memberikan informasi parameter-parameter yang dibutuhkan dalam simulasi atau menciptakan sebuah kondisi yang diinginkan (Santoso, 2012). Langkah-langkah untuk membuat *file input* adalah sebagai berikut.

- a. Inisialisasi:
 - i. menentukan parameter-parameter yang akan digunakan;
 - ii. menentukan kondisi batas dan dimensi yang akan digunakan yaitu *boundary* dan dimensi.
- b. *Atom definition* atau definisi atom:
 - i. mendefinisikan jenis atom, jumlah atom dan molekul serta jumlah ikatan dan posisi awal koordinat atom;
 - ii. menentukan orientasi yang akan digunakan;
- c. Pengaturan simulasi:
 - i. menentukan potensial interatomik;
 - ii. menentukan jenis parameter simulasi waktu;
 - iii. menentukan jenis spesifikasi perhitungan yang tepat;
 - iv. menggunakan perintah “*dump*” untuk menghasilkan file *dump* yang akan digunakan sebagai kebutuhan visualisasi.
- d. Menjalankan simulasi:
 - i. membuat perintah pemanggilan untuk perintah perhitungan;

- ii. memilih perintah “*run*” untuk menjalankan simulasi MD.

3.3.3.3.2 Menjalankan *file Input Melalui Command Prompt*

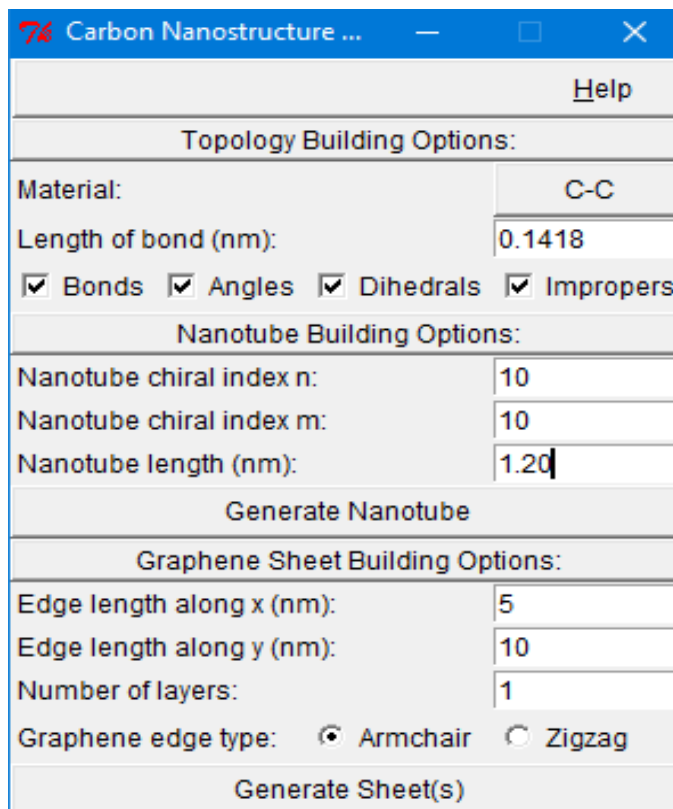
Dengan membuka folder tempat penyimpanan *file input script* melalui *command prompt* kemudian melakukan *running* dengan mengetikkan “*lmp_serial -i (nama file)*” lalu klik enter.

3.3.3.3.3 Hasil Output

Hasil output yang diperoleh terdapat dua jenis file yaitu file *dump* untuk visualisasi dan *file log.lammps* untuk menganalisis hasil adsorpsi hidrogen pada CNT dan mengetahui parameter yang mempengaruhi adsorpsi.

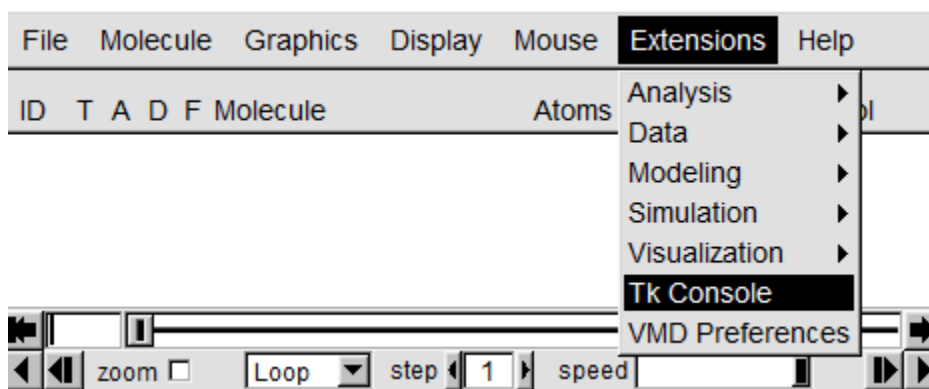
3.3.4 Metode Analisis

Pada penelitian ini penulis menggunakan piranti lunak yang bernama LAMMPS untuk menjalankan simulasi dinamika molekul adsorpsi hidrogen pada CNT. Pembuatan *input file* dan *read data* didasarkan pada pengaturan penggunaan piranti LAMMPS (Jabbar, 2012). Sebelum menggunakan piranti LAMMPS, langkah pertama pada penelitian ini yaitu pembentukan hidrogen pada piranti Avogadro. Pada Avogadro pembentukan hidrogen diletakkan secara bebas, kemudian setelah diperoleh output file koordinat hidrogen dari Avogadro, penelitian dilanjutkan pada pembentukan CNT pada piranti VMD. Pada piranti VMD setelah mengatur parameter-parameter yang dibutuhkan untuk pembentukan CNT, maka dapat dilakukan *generate CNT* seperti **Gambar 3.6.**



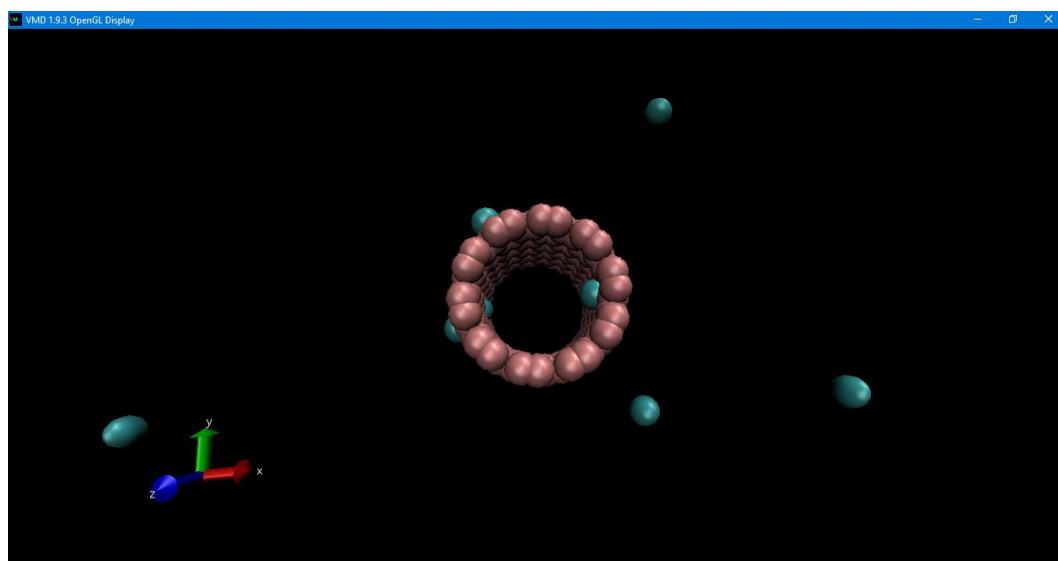
Gambar 3.6 Carbone nanotube builder pada VMD

Setelah diperoleh *output file* koordinat CNT pada VMD, selanjutnya menggabungkan *output file* koordinat hidrogen, dimana kedua material menggunakan koordinat x, y dan z. Kemudian keduanya digabungkan melalui VMD pada menu *Extensions* pada VMD dan memilih opsi *Tk Console* seperti pada **Gambar 3.7**.



Gambar 3.7 Penggabungan koordinat Hidrogen dan CNT pada VMD

Setelah *output file* koordinat hidrogen dan koordinat *carbone nanotube* berhasil tergabung maka di peroleh data file yang dapat digunakan sebagai *read data* untuk *input script* pada LAMMPS yang disebut dengan *file atom definition* dengan contoh format “*namafilename.dat*” Kemudian proses selanjutnya memasukkan *input script* pada *command prompt* LAMMPS dan melakukan *running* dengan cara mengetik “*lmp_serial -i (nama file)*” lalu klik *enter*. Setelah berhasil *running* maka diperoleh dua jenis *output file* yaitu “*log.lammps*” yang berisi data untuk menganalisis hasil simulasi adsorpsi hidrogen dan mengetahui jumlah tekanan, energi dan parameter-parameter lain yang mempengaruhi simulasi adsorpsi hidrogen. *Output file* kedua yaitu “*dump*” yang merupakan data untuk visualisasi hasil simulasi, kemudian divisualisasikan pada VMD dan diperoleh hasil visualisasi seperti **Gambar 3.8**.



Gambar 3.8 Contoh visualisasi simulasi adsorpsi hidrogen pada VMD

V. KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT menggunakan LAMMPS diperoleh kesimpulan sebagai berikut.

1. Metode simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS dengan potensial interatomik *Lennard-Jones* dan gaya *Van Der Waals* telah berhasil dilakukan.
2. Semakin kecil temperatur yang digunakan untuk simulasi adsorpsi hidrogen pada *chirality Armcahir*, *Chiral* dan *Zigzag* maka semakin besar hidrogen yang dapat diserap dan semakin besar temperatur semakin kecil hidrogen yang dapat diserap.
3. Diantara *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality armchair*, *chiral*, *zigzag* dengan temperatur masing-masing 100 K, 200 K dan 300 K, penyerapan optimum hidrogen terjadi pada *run* 10000.
4. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality armchair* berturut-turut sebesar 10 atom, 6 atom dan 2 atom.
5. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality chiral* berturut-turut sebesar 12 atom, 10 atom dan 10 atom.
6. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality zigzag* berturut-turut sebesar 5 atom, 1 atom dan 0 Atom.

5.2 Saran

Penelitian selanjutnya untuk simulasi dinamika molekul adsorpsi hidrogen pada *Carbone Nanotube* menggunakan kode LAMMPS sebaiknya dapat membuat simulasi adsorpsi hidrogen menggunakan CNT dengan variasi temperatur titik embun atau *dew point*. Nii dan Yoshihara pada tahun 1979 mengatakan temperatur titik embun hidrogen kering berkisar pada 228 K ~ 203 K dan perkiraan temperatur titik embun rata-rata berkisar pada 213 K.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdurrouf. 2012. Interkorelasi Antara Termodinamika dan Fisika Statistik: Keadaan Rata-rata Versus Fungsi Distribusi. *Erudio*. 1(1). 64-69.
- Afief, Abdurrohman dan Isana SYL. 2017. Produksi Gas Hidrogen Menggunakan Elektroda *Stainless Steel/Fe-Co-Ni* Dengan Media Tepung Biji Rambutan (*Nephelium lappaceum l.*). *Prosiding Seminar Nasional Kimia UNY 2017*. 259-268.
- Aqel, Ahmad., Kholoud, M.M Abou El-Nour, Reda A.A Ammar, dan Abdulrahman Al-Warthan. 2012. Carbon nanotubes, science and technology part (I) structure, synthesis and characterization. *Arabian Journal of Chemistry*. 5. 1-23.
- Asmarani, Sismiranda Putri. 2018. Pengaruh Variasi Waktu *Pirolisis* Terhadap Morfologi CNT (Carbon Nanotube) Berbasis Karbon Aktif Tempurung Kelapa. *Skripsi*. Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga.
- Astuti, A.D dan A.B. Mutiara. 2009. Performance Analysis on Molecular Dynamics Simulation of Protein Using GROMACS. *Thesis*. Universitas Gunadarma.
- Banerjee, Soumik. 2008. Molecular Simulation of Nanoscale Transport Phenomena. *Disertasi*. Virginia Polytechnic Institute and State University.
- Chandrasa, Ganesha Tri. 2009. Penelitian Hidrogen sebagai Bahan Bakar Sepeda Motor Listrik yang Berkesinambungan. *Prosiding Seminar Nasional Daur Bahan Bakar 2009*. 13-17.
- Danus, Antonia Meldiana. 2017. Meningkatkan Pemahaman Siswa Tentang Tekanan Dalam Fluida Statis Menggunakan Metode Demonstrasi dan Diskusi. *Skripsi*. Universitas Sanata Dharma.

- Deshpande, Prachi dan Ankush Mahendru. 2018. A Review Of Single Wall Carbon Nanotube: Structure And Preparation. *International Journal Of Scientific & Technology Research*. 7(4). 132-135.
- Dzulfahmi, Ahmad. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Panjang. *Skripsi*. Universitas Indonesia.
- Fathurrahman, Fadjar dan Suprijadi Haryono. 2011. Simulasi Dinamika Molekuler Proses Adhesi pada Model Nanopartikel 2D. *Prosiding Seminar Kontribusi Fisika 2011 (SKF 2011)*. 162-216.
- Fatriansyah, J. F., D, Dhaneswara, M. H. Abdurrahman, F.R. Kuskendrianto dan M. B. Yusuf. 2020. Modeling of Hydrogen Adsorption Phenomena in Amorphous Silica Using Molecular Dynamics Method. *Indonesian Journal of Energy*. 3(1). 25-33.
- Furoidah, Ayu. 2018. Analisis Hasil Simulasi Sifat Mekanik *Single-Walled Carbon Nanotube* Dengan Variasi Struktur Dibawah Pembebanan *Bending* dan *Buckling* Menggunakan FEM. *Skripsi*. Institut Teknologi Sepuluh Nopember.
- Giyatmi., Zaenul, Kamal, dan Damajati Melati. 2008. Penurunan Kadar Cu,Cr dan Ag Dalam Limbah Cair Industri Perak di Kotagede Setelah Diadsorpsi Dengan Tanah Liat Ddari Daerah Godean. *Seminar Nasional IV SDM Teknologi Nuklir*. 2-25.
- Hakim, Lukman dan Intan Marsalin. 2017. Pemanfaatan Limbah Aluminium Foil Untuk Produksi Gas Hidrogen Menggunakan Katalis Natrium Hidroksida (NaOH). *Jurnal Teknologi Kimia Unimal*. 6(1). 68 – 81.
- Hanwell, Marcus D., Donald, E Curtis, David C Lonie, Tim Vandermeersch, Eva Zurek dan Geoffrey R Hutchison. 2012. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. *Journal of Cheminformatics*. 4(1). 2-17.
- Harris, P. J. F. 2004. Carbon nanotube composites. *International Materials Reviews*. 49(1). 31-43.
- Hidayat, Aulia Fikri. 2019. Studi Evolusi Struktur pada Deposisi Tembaga Dalam Substrat Silikon Dengan Metode Dinamika Molekuler. *Jurnal Matematika*. 18(1). 21-28.

- Huda, Nurul. 2013. Penentuan Kapasitas Produksi Hidrogen Dari Perengkahan Air Berdasarkan Distribusi Kalor RGTT-Kogenerasi. *Sigma Epsilon*. 17(2). 54-61.
- Humphrey, William., Andrew, Dalke, dan Schulten. 1996. VMD: Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*. 14. 33-38.
- Hutahaean, Harvei Desmon 2018. Analisa Simulasi Monte Carlo Untuk Memprediksi Tingkat Kehadiran Mahasiswa Dalam Perkuliahan. *Journal Of Informatic Pelita Nusantara*. 3(1). 41-45.
- Ingvason, Guttormur Anar.2013. Molecular Dynamics Model of Carbon Nanotubes in EPON 862/DETDA Polymer. *Disertasi dan Thesis*. Embry-Riddle Aeronautical University-Daytona Beach.
- Jabbar, Abdul. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Temperatur. *Skripsi*. Universitas Indonesia.
- Johannes, Albert Zicko. 2018. Simulasi Perubahan Densitas Muatan Adsorpsi Atom Hidrogen-Grafena dengan Teori Fungsi Kerapatan. *Jurnal Fisika*. 3(2). 179-184.
- Kaushik, B. K. dan M. K. Majumder. 2015. Carbon Nanotube Based VLSI Interconnects Analysis and Design. *Springer Briefs in Applied Sciences and Technology*.
- Kurniady, A., Yoga, Satria Putra, dan I. D. Faryuni. 2014. Studi Analisis Pengaruh Suhu, Tekanan dan Ukuran Pori *Graphene* Terhadap Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen. *Prisma Fisika*. 2(3). 59 – 66.
- Lago, N Faginas., D, Yeni, F. Huarte, Y. Wang, M. Alcamí dan F. Martín. 2016. Adsorption of Hydrogen Molecules on Carbon Nanotubes Using Quantum Chemistry and Molecular Dynamics. *The Journal of Physical Chemistry*. 1(20). 6451-6458.
- Maruyama, Shigeo dan Tatsuto Kimura. 2000. Molecular Dynamics Simulation of Hydrogen Storage in Single-Walled Carbon Nanotube. *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exhibit*. Orland.
- Muchtar, Ahmad Rifqi., Wisnu, Hendradjit, dan Agus Samsi. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Sistem Molekul Argon dan Graphene Dengan Menggunakan Perangkat Lunak DL_POLY. *Prosiding Seminar Ilmiah Nasional Komputer dan Sistem Intelijen (KOMMIT 2012)*. 7. 473-481.

- Murachman, Bardi., Eddie, Sandjaya Putra, dan Wulandary. 2014. Dekolorisasi dan Deoilisasi Parafin menggunakan Adsorben Zeolit, Arang Aktif dan Produk Pirolisis Batu Bara. *Jurnal Rekayasa Proses*. 8(2). 40-48.
- Nii, Kazuyoshi dan Kazuhiro Yoshihara. 1979. The Effect of Oxygen Potential on the Surface Self-Diffusion Coefficient of α -Fe*. *Trans.JIM*. 20. 523-532.
- Noviyanto, R. Menner Zaglulsyah. 2011. Kapasitas Adsorpsi Tekanan Tinggi Gas Metana Pada Carbon Nanotube Untuk Aplikasi Adsorptive Storage. *Skripsi*. Universitas Indonesia.
- Nur, Adrian., Paryanto, Arif Jumari dan Endah Retno Dyartanti. 2007. Sintesis Karbon Nanotube Dari Etanol Dengan Metode Chemical Vapor Deposition. *Gema Teknik*. 2. 41-46.
- Nurdin, Wira Bahari dan Rian Andrianto. 2012. Simulasi Sifat Fisis Model Molekuler Dinamika Gas Argon dengan Potensial *Lennard-Jones*. *Jurnal Sainsmat*. 1(2). 147-155.
- Plimpton, S., A. Thompson, S. Moore, A. Kohlmeyer, dan R. Berger. 2003. *LAMMPS Users Manual Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*. Sandia National Laboratories. GNU General Publik License.
- Prajapati, Vivekanand., P, K. Sharma, dan Arunabha Banik. 2019. Carbon Nano Tubes, dan Applications. *International Journal of Pharmaceutical Sciences and Research*. 2(5). 1099-1107.
- Prasodjo, Prolessara. 2010. Studi Kapasitas Adsorpsi Serta Dinamika Adsorpsi dan Desorpsi dari Nanotube Karbon Sebagai Penyimpan Hidrogen. *Tesis*. Universitas Indonesia.
- Rayan, Baraa dan Anwar Rayan. 2017. Avogadro Program for Chemistry Education: To What Extent can Molecular Visualization and Three-dimensional Simulations Enhance Meaningful Chemistry Learning?. *World Journal of Chemical Education*. 5(4). 136-141.
- Sa'adah, Umi. 2015. Reduksi Korosi Besi dalam Logam PbBi Cair dengan Inhibitor Gas Mulia Menggunakan Simulasi Dinamika Molekul. *Skripsi*. Universitas Jember.
- Santoso, Mardi. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Chirality. *Skripsi*. Universitas Indonesia.

- Saputri, Yuriska Utagi. 2018. Hidroksi Lapis Ganda Mg-Fe dan Ca-Fe Sebagai Adsorben Gas Hidrogen. *Skripsi*. Universitas Sriwijaya.
- Sari, Nirmala., Adi, Rahwanto, dan Zulkarnain Jalil. 2016. Studi Katalis Ni Nano pada Material Penyimpan Hidrogen MgH₂ yang Dipreparasi melalui Teknik *Mechanical Alloying*. *Indonesian Journal of Applied Physics*. 1(1). 1-5.
- Silva, Suchitra Warnuni de. 2017. *Numerical Investigation on Low Dimensional Materials for Gas Adsorption and Separation*. Thesis. Queensland University of Technology.
- Siregar, Yusraini Dian Inayati. 2010. Produksi Gas Hidrogen Dari Limbah Alumunium. *Valensi*. 2(1). 362-367.
- Suci, Farradina Choria. 2016. ZTC: Sintesis, Karakterisasi, Mekanisme Penyimpanan, dan Studi Adsorpsi H₂. *Jurnal Ilmu dan Aplikasi Teknik*. 1(1). 1-12.
- Sutanti, Retno dan Susi Handayani. 2013. Studi Pengaruh Jenis dan Komposisi Katalis Pada Proses Pertumbuhan Carbon Nanotube (CNT). Dengan Metode Catalytic Chemical Vapour Deposition (CCVD) *Jurnal Teknologi Kimia dan Industri*. 2(2). 135-147.
- Varshney, Kalpna dan Assistant Professor. 2014. Carbon Nanotubes: A Review on Synthesis, Properties and Applications. *International Journal of Engineering Research and General Science*. 7(4). 660-677.
- Widayatno, Tri., Teti, Yuliawati, dan Agung Adi Susilo. 2017. Adsorpsi Logam Berat (Pb) Dari Limbah Cair Dengan Adsorben Arang Bambu Aktif. *Jurnal Teknologi Bahan*. 1(1). 17-23.
- Witoelar, Aree. 2002. Perancangan dan Analisa Simulasi Dinamika Molekul Ensemble Mikrokanonikal dan Kanonikal Dengan Potensial *Lennard Jones*. *Skripsi*. Institut Teknologi Bandung.
- Yin, Jielong. 2016. Molecular Dynamics Study on the Grain Growth in Nanocrystalline Aluminum. *Mechanical Engineering*. Santa Clara University. *Master*: 50.
- Zafira, Nadya Ragda. 2020. Pengaruh Model Pembelajaran Creative *Problem Solving* Terhadap Hasil Belajar Siswa pada Materi Termokimia di MAN 1 Aceh Barat. *Skripsi*. Universitas Islam Negeri Ar-Raniry.
- Zuttel, Andreas. 2003. Materials For Hydrogen Storage. *Review Featue*. 1-33.