



JOURNAL OF ENERGY, MATERIAL, AND INSTRUMENTATION TECHNOLOGY

Journal Webpage <https://jemit.fmipa.unila.ac.id/>



Kajian Simulasi Dinamika Molekul Adsorpsi Hidrogen pada *Carbone Nanotube* dengan Variasi *Chirality* dan Temperatur Menggunakan Kode LAMMPS

Erika Marinda Mufida^a, Sri Wahyu Suciati^b, Gurum Ahmad Pauzi^c, dan Amir Supriyanto

Jurusan Fisika, Universitas Lampung, Bandar Lampung, Indonesia, 35141

Article Information

Article history:

Received April 20th, 2021

Received in revised form

May 10th, 2021

Accepted May 17th, 2021

Keywords:

Molecular Dynamics
Simulation, Adsorption,
LAMMPS, Avogadro, VMD.

Abstract

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.

Informasi Artikel

Proses artikel:

Diterima 20 April 2021

Diterima dan direvisi dari
10 Mei 2021

Accepted 17 mei 2021

Kata kunci:

Simulasi Dinamika
Molekul, Adsorpsi,
LAMMPS, Avogadro, VMD.

Abstrak

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 Mikrokanonikal*. 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.

1. Pendahuluan

Salah satu energi alternatif yang diminati oleh para peneliti adalah hidrogen (Dzulfahmi, 2012). Hidrogen adalah unsur yang terkandung di alam, sumber energi bersih namun tidak dapat ditambang seperti sumber energi konvensional BBM (Bahan Bakar Minyak). Sedikitnya unsur polutan yang dihasilkan oleh hidrogen merupakan suatu kelebihan untuk menjadi sumber energi masa depan yang terbarukan (Chandrasa, 2009). Gas hidrogen (H_2) 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 H_2O yang sering disebut dengan air (Afief dan Isana, 2017). Gas hidrogen cocok untuk konversi energi tanpa menghasilkan

* Corresponding author.

E-mail address: (a*) erikammufida1998@gmail.com, (b) ayoe1971@fmipa.unila.ac.id, (c) gurum@fmipa.unila.ac.id

emisi karbon, karena gas hidrogen (H_2) mempunyai gravimetrik densitas energi yang tertinggi diantara beberapa bahan bakar lainnya (Hakim dan Marsalin, 2016).

Membuat bahan bakar dari hidrogen lebih mudah, akan tetapi kendala yang harus di hadapi antara lain hidrogen harus disimpan terlebih dahulu sebelum diproduksi menjadi bahan bakar (Saputri, 2018). Sedangkan kekurangannya adalah sering mengalami kebocoran pada tangki (Kurniady dkk, 2014). Persoalan penyimpanan hidrogen dapat diatasi dengan 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 (Prasodjo, 2010).

Adsorpsi secara umum adalah substansi terlarut dalam larutan yang mengalami proses penggumpalan oleh permukaan suatu benda atau 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). Adsorpsi dapat terjadi karena adanya gaya tarik-menarik. Akibat koordinasi ikatan hidrogen dan gaya *Van der Waals*. Pada saat permukaan adsorben dan adsorbat terikat oleh gaya *Van der Waals*, maka terjadilah adsorpsi fisis (Widayatno dkk, 2017). Karakteristik penting suatu sistem Penyimpanan Hidrogen antara lain reversibilitas penyerapan dan pelepasan, sehingga pemilihan bahan yang mampu berinteraksi dengan hidrogen, serta bahan inert menjadi penting (Zuttel, 2003). Pembuatan bahan bakar hidrogen sangat mudah, namun kendalanya pada penyimpanan hidrogen yang harus dilakukan sebelum diproduksi menjadi bahan bakar (Saputri, 2018). CNT merupakan hasil teknologi nano digunakan dalam bidang pengetahuan seperti bidang kimia, bidang elektronik dan lain-lain (Sutanti dan Yani, 2013). CNT berbentuk silinder, dengan salah satu ujung CNT terbuka dan ujung lain ditutup dengan *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) sampai beberapa mikrometer.

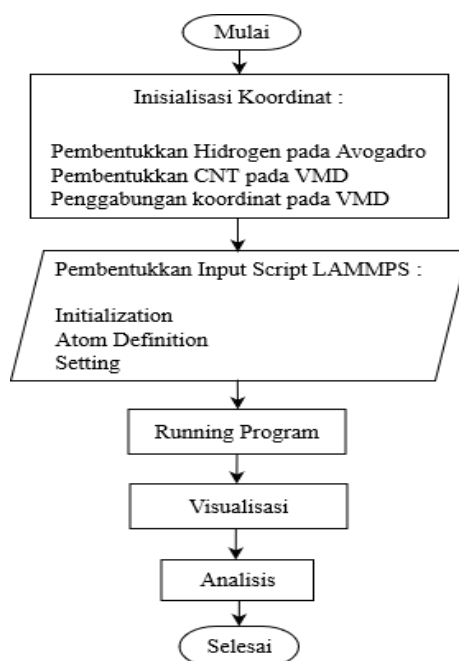
Carbone Nanotube (CNT) merupakan media penyimpanan yang baik, karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar, melalui pemodelan dan simulasi dinamika molekuler dapat dianalisis energi interaksi adsorpsi hidrogen dengan CNT (Lago, 2016). Dinamika molekul merupakan metode simulasi dengan komputer yang memungkinkan representasi molekul atom dalam periode waktu tertentu (Astuti dan Mutiara, 2009). Penelitian Dzulfahmi (2012) menggunakan simulasi dinamika molekuler adsorpsi hidrogen pada CNT dengan variasi penyerapan dua puluh molekul hidrogen pada temperatur 10 K. Penelitian lain mengenai adsorpsi hidrogen pada *carbon nanotube* juga dilakukan oleh Santoso, 2012 mengenai "Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen Pada *Carbone Nanotubes* (CNT) menggunakan variasi *chirality* dengan *chairlity* yang digunakan adalah hasil variasi dari penelitian maruyama (2000) yaitu sebesar (8,8), (10,10) dan (12,12). Jabbar, pada tahun 2012 juga melakukan penelitian adsorpsi hidrogen pada CNT dengan variasi temperatur 253 K, 273 K dan 293 K, hasil penyerapan hidrogen yang diperoleh pada temperatur 253 K lebih baik dari temperatur 273 K dan 293 K. Penelitian lain tentang adsorpsi hidrogen pada *graphene* dilakukan oleh Kurniady dkk, 2014 yang menganalisis pengaruh suhu, tekanan dan ukuran pori *graphene* terhadap dinamika molekuler. Hasil penelitian Kurniady dkk, (2014) dengan dua iterasi berbeda yakni 100000 dan 150000, dimana lebar pori-pori yang digunakan adalah variasi yang pernah digunakan pada penelitian Julio A. Alonso sebesar 6, 8 dan 10 Å.

Avogadro merupakan editor dan visualisasi molekul tingkat lanjut, dirancang untuk digunakan dalam kimia komputasi (Rayan dan Rayan, 2017). *Visual Molecular Dynamics* (VMD) merupakan program grafik molekuler yang dirancang untuk tampilan dan analisis perakitan molekul. VMD ditulis dalam C++, menggunakan desain berorientasi objek, program, termasuk kode sumber dan dokumentasi ekstensif (Humphrey dkk, 1996). LAMMPS (*Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator*) adalah sebuah perangkat lunak *open source* yang dikembangkan oleh *Sandia National Laboratories* (Hidayat, 2019). 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.

Tujuan simulasi dinamika molekul pada artikel ini adalah memprediksi adsorpsi hidrogen pada CNT melalui variasi ukuran CNT untuk penyimpanan hidrogen menggunakan LAMMPS. Kajian simulasi dinamika molekul ini, antara lain menganalisis file output LAMMPS berupa data energi interaksi, tekanan dan waktu simulasi, serta menganalisis hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT berupa visualisasi tiga dimensi pada *software* VMD (*Visual Molecular Dynamics*). Hasil yang diharapkan berupa kode perangkat lunak LAMMPS yang berkoordinasi dengan *software* Avogadro dan VMD.

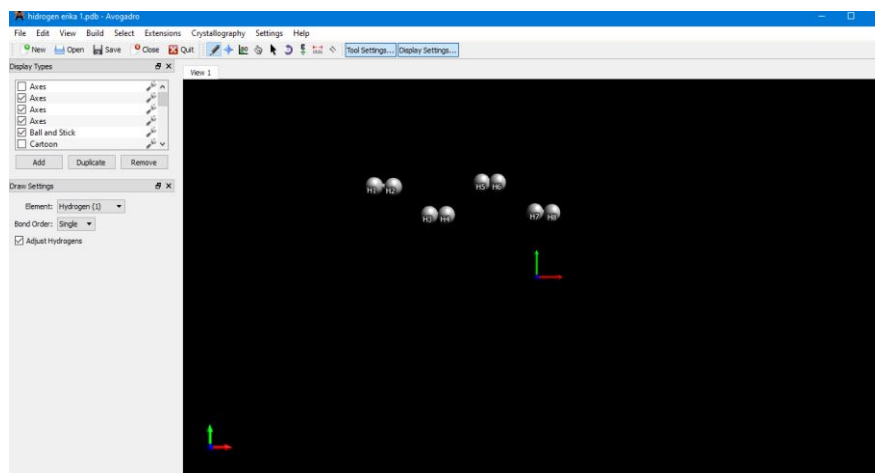
2. Metode Penelitian

Pelaksanaan penelitian dilakukan di Laboratorium Elektronika Dasar Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung. 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 *software* Avogadro dan VMD. Prosedur penelitian yang dilakukan terdiri dari langkah simulasi pada *software* Avogadro, VMD dan program LAMMPS. Secara umum prosedur penelitian ditunjukkan pada **Gambar 1**.

**Gambar 1.** Diagram Alir Penelitian

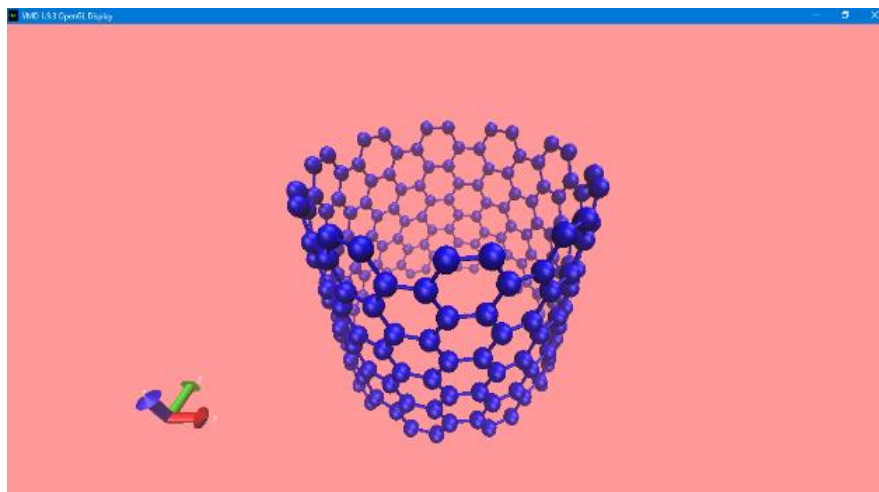
2.1 Prosedur Simulasi

Program Avogadro. Membuat inisialisasi atom dan molekul hidrogen dengan meletakkan posisi atom hidrogen pada posisi awal secara bebas.

**Gambar 2.** Pembentukan Hidrogen pada Avogadro

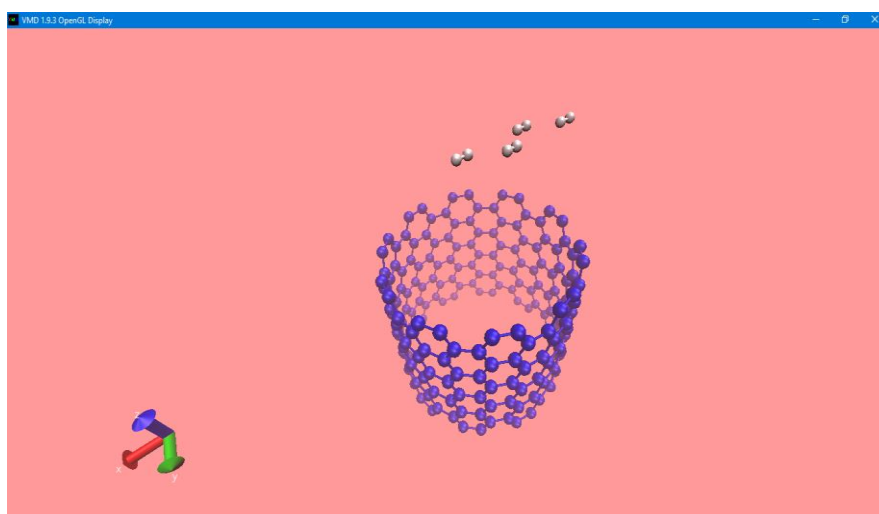
Pada program Avogadro setelah diperoleh koordinat maka di dapat output file yang berisi koordinat sumbu x, y dan z. Koordinat dapat diubah-ubah sesuai dengan kebutuhan simulasi.

Program VMD. Membuat inisialisasi koordinat atom *Carbon Nanotube* serta memvisualisasikan hasil simulasi seperti pada **Gambar 3**.



Gambar 3. Pembentukan CNT pada VMD

Langkah selanjutnya adalah menggabungkan output geometri Hidrogen dari Avogadro atau memasukkan output file yang berisi koordinat hidrogen kedalam VMD, dimana output file CNT juga sudah ada di VMD. Setelah *Carbon Nanotube* dapat bersatu dengan Hidrogen maka penulis dapat menyesuaikan jarak antara hidrogen dengan karbon seperti pada **Gambar 4**.



Gambar 4. Penggabungan CNT dengan Hidrogen pada VMD

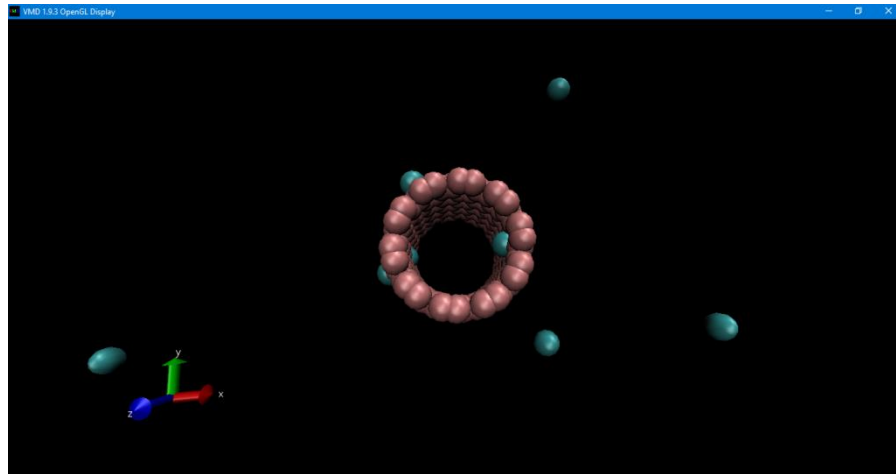
Program LAMMPS. Pembentukan *input script* yang digunakan dalam simulasi LAMMPS menggunakan piranti Notepad++ yang disimpan dengan ekstensi ".in". Input script LAMMPS berisi informasi yang harus diberikan sebelum simulasi. Menjalankan file input melalui *command prompt*, dengan membuka folder tempat penyimpanan file *input script* melalui *command prompt* kemudian melakukan *run* dengan mengetikkan "*lmp_serial -i (nama file)*" lalu enter. Hasil output yang diperoleh terdapat dua jenis file yaitu file *dump* untuk visualisasi dan file *log.lammps* untuk menganalisis hasil adsorpsi hidrogen pada CNT, salah satunya waktu dalam simulasi.

2.2. Metode Analisis

Sebelum menggunakan *software* LAMMPS langkah pertama pada penelitian ini yaitu pembentukan hidrogen pada *software* Avogadro. Pada Avogadro pembentukan hidrogen diletakkan secara bebas, kemudian setelah diperoleh output file koordinat hidrogen dari Avogadro, penelitian di lanjutkan dengan pembentukan CNT pada *software* VMD. Setelah di peroleh 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*.

Setelah output file koordinat hidrogen dan koordinat *carbon nanotube* berhasil tergabung maka di peroleh data file yang dapat digunakan sebagai *read data* untuk input script pada LAMMPS. 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 di visualisasikan pada VMD dan di peroleh hasil visualisasi seperti **Gambar 5**. Hasil visualisasi merupakan gambar bergerak, dimana atom-atom hidrogen akan masuk kearah dalam CNT melalui pori-pori CNT yang memuai akibat di berikan suhu panas, sesuai dengan fisisorpsi atom-atom hidrogen akan di tahan secara bebas pada permukaan dalam CNT.



Gambar 5. Contoh visualisasi simulasi adsorpsi hidrogen pada VMD

3. Hasil Dan Pembahasan

3.1 Hasil dan Data Pengamatan

Hasil output simulasi menggunakan kode LAMMPS berupa file *log.lammps* dan file *dump*. File *log.lammps* berisi data-data informasi yang diproses oleh LAMMPS. Data tersebut berupa parameter-parameter yang kita inginkan dalam simulasi dan file *dump* merupakan file yang akan digunakan sebagai file input pada *software* VMD untuk menampilkan visualisasi hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT. Terdapat tiga jenis struktur pada CNT yang disebut dengan *index chirality armchair*, *chiral* dan *zigzag* dengan masing-masing nilai *index m* berbeda sesuai dengan ketentuan penggolongan CNT. Penyerapan optimum terjadi pada *run* 10000 dan penyerapan optimum *index chirality armchair* pada temperatur 100 K, *chirality chiral* pada temperatur 100 K dan *chirality zigzag* pada temperatur 100 K. Metode simulasi adsorpsi hidrogen pada CNT ini menggunakan simulasi dinamika molekul kode LAMMPS dengan potensial interatomik *Lennard-Jones* dan gaya *Van der Waals*.

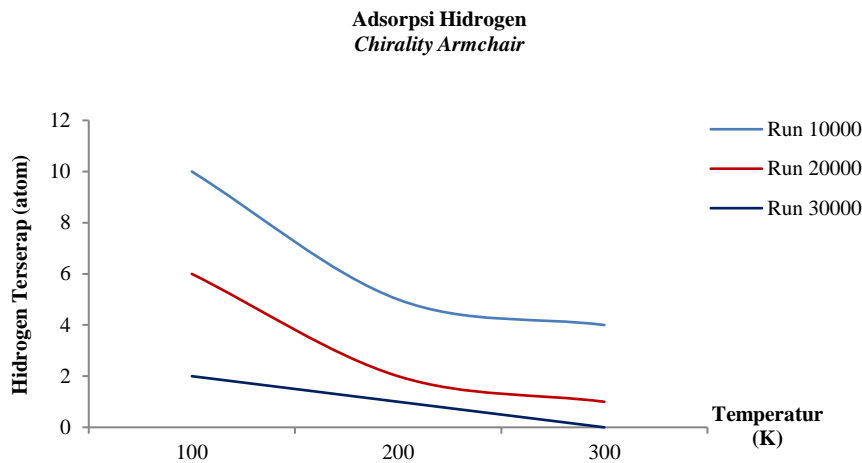
3.2 Simulasi Adsorpsi Hidrogen pada CNT

Hasil output LAMMPS berupa file *log.lammps* dan file *dump*, kemudian dianalisis menggunakan grafik Excel. Pada penelitian ini terdapat tiga *run* yang digunakan yaitu *run* 10000, *run* 20000 dan *run* 30000 dengan tiga *index chirality* yaitu *armchair* dengan nilai *index n* sebesar 10 nm, m sebesar 10 nm dan diameter 11,28 nm, *chirality chiral* memiliki nilai n sebesar 10 nm, m sebesar 6 nm, diameter sebesar 9,11 nm dan *chirality zigzag* memiliki nilai n sebesar 10 nm, m sebesar 0 nm dan diameter sebesar 6,51 nm. Perhitungan diameter CNT dapat dilihat pada **Persamaan 1**.

$$d = \frac{a}{\pi} \sqrt{(n^2 + nm + m^2)} \quad (1)$$

Pada **Persamaan 1**, nilai *a* sebesar 2.046 nm dan n, m merupakan vektor kiral pada SWNT (*Single Walled Carbone Nanotube*) atau CNT yang digunakan pada simulasi.

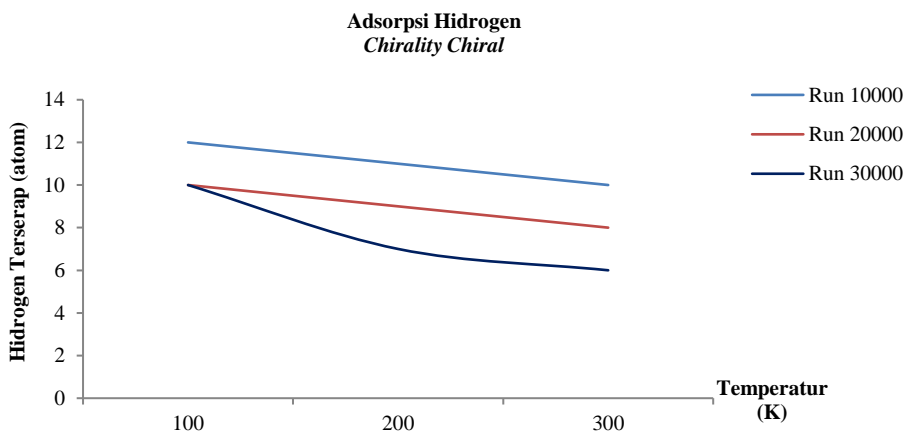
1. Variasi suhu untuk *chirality armchair*. Analisis pada *index chirality armchair* dengan temperatur 100 K, 200 K dan 300 K dapat dilihat pada **Gambar 6**.



Gambar 6. Grafik temperatur terhadap jumlah hidrogen terserap *chirality armchair*

Berdasarkan metode simulasi menggunakan gaya *Van der Waals*, pada **Gambar 6** yang merupakan grafik temperatur terhadap jumlah hidrogen terserap dengan Run 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality armchair* dapat dilihat bahwa semakin tinggi temperatur semakin kecil kapasitas penyerapan hidrogen, karena semakin tinggi temperatur gaya tarik-menarik (*Van der Waals*) antara hidrogen dan CNT semakin lemah. Dengan tinggi temperatur 100 K, 200 K dan 300 K, saat *run* 10000, hidrogen yang terserap berturut-turut sebesar 10 atom, 5 atom dan 4 atom. Lalu *run* menjadi 20000, hidrogen terserap berturut-turut sebesar 6 atom, 2 atom, 1 atom dan saat *run* 30000 adsorpsi hidrogen sebesar 2 atom, 1 atom dan 0 atom.

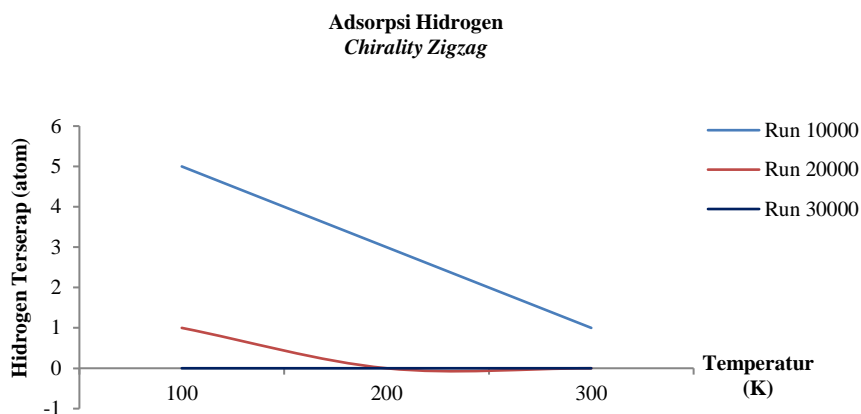
2. Variasi suhu untuk *chirality chiral*. Analisis pada *index chirality chiral* dengan tinggi temperatur berturut-turut 100 K, 200 K dan 300 K dapat dilihat pada **Gambar 7**.



Gambar 7. Grafik temperatur terhadap jumlah hidrogen terserap *chirality chiral*

Berdasarkan **Gambar 7**, *run* 10000, 20000 dan 30000 dengan tinggi temperatur yaitu 100 K, 200 K dan 300 K, diperoleh kapasitas adsorpsi hidrogen pada *chirality chiral* pada *run* 10000 berturut-turut sebesar 12 atom, 11 atom dan 10 atom. *Run* 20000 sebesar 10 atom, 9 atom dan 8 atom. Terakhir dengan *run* 30000 kapasitas adsorpsi setiap temperatur berturut-turut sebesar 10 atom, 7 atom dan 6 atom.

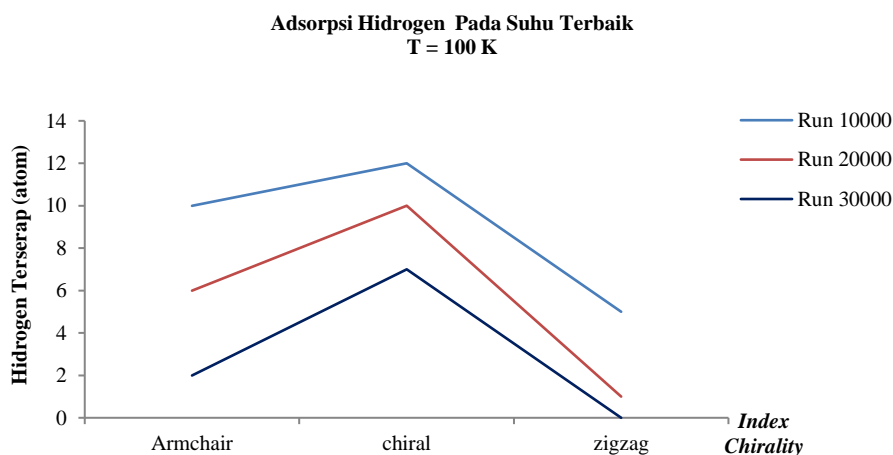
3. Variasi suhu untuk *chirality zigzag*. Analisis pada *index chirality zigzag*, dengan tinggi temperatur berturut-turut 100 K, 200 K dan 300 K dapat dilihat pada **Gambar 8**.



Gambar 8. Grafik temperatur terhadap jumlah hidrogen terserap *chirality zigzag*

Pada **Gambar 8** dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 temperatur yang digunakan pada simulasi sama seperti grafik sebelumnya yaitu 100 K, 200 K dan 300 K. Kapasitas adsorpsi pada *chirality zigzag* *run* 10000 berturut-turut pada setiap temperatur sebesar 5 atom, 3 atom dan 1 atom. Saat *run* 20000 berturut-turut sebesar 1 atom 0 atom dan 0 atom. Saat *run* 30000 pada semua temperatur tidak ada hidrogen yang teradsorpsi atau 0 atom.

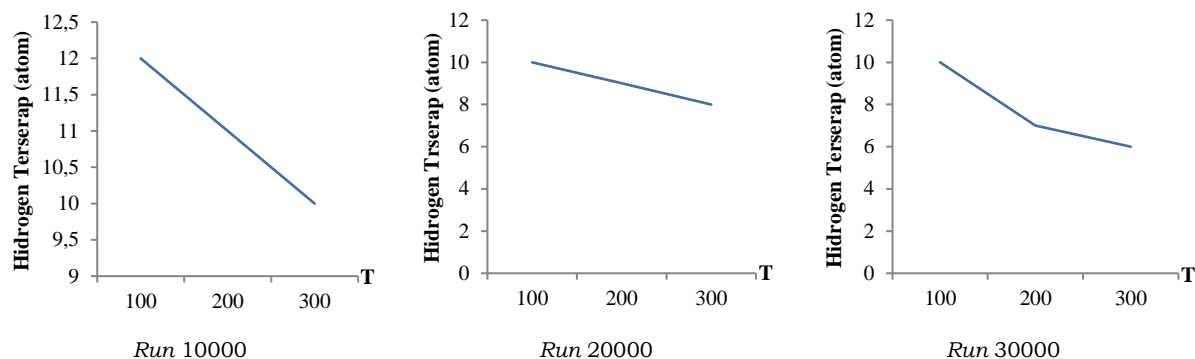
4. Suhu atau temperatur terbaik pada setiap variasi *chirality*. Terdapat tiga variasi *chirality* pada penelitian, yaitu *armchair*, *chiral* dan *zigzag* dengan tiga variasi *run* dapat dilihat pada **Gambar 9**.



Gambar 9. Grafik penyerapan hidrogen terhadap variasi *chirality* pada suhu terbaik

Pada **Gambar 9** terlihat variasi *chirality* pada suhu terbaik atau menjadi penyerapan optimum dalam simulasi dengan tinggi suhu yaitu 100 K dan tiga variasi *run* berbeda yaitu *run* 10000, 20000 dan 30000. Untuk *chirality armchair* adsorpsi hidrogen optimum pada setiap *run* berturut-turut 10 atom, 6 atom dan 2 atom, *chirality chiral* berturut-turut 12 atom, 10 atom dan 10 atom, *chirality zigzag* sebesar 5 atom, 1 atom dan *run* 30000 pada *chirality zigzag* tidak ada hidrogen terserap (0 atom).

5. Pengaruh *run* terhadap *chirality* terbaik (*chirality chiral*) dan variasi temperatur. Analisis pada temperatur yang digunakan dalam penelitian yaitu 100 K, 200 K dan 300 K dan *run* 10000, 20000 dan 30000 dapat dilihat pada **Gambar 10**.



Gambar 10. Pengaruh Run terhadap *chirality chiral* dan variasi temperatur

Pada penelitian ini terdapat tiga variasi *running* yang digunakan yaitu 10000, 20000 dan 30000 dengan tiga variasi *chirality* yaitu *armchair*, *chiral* dan *zigzag*, serta tiga variasi temperatur yaitu 100 K, 200 K dan 300 K. Diantara tiga variasi *chirality*, *chirality chiral* merupakan yang terbaik dalam penyerapan optimum hidrogen. Pada **Gambar 10** terlihat bahwa setiap variasi *running* pada *chirality chiral*, saat temperatur semakin tinggi hidrogen yang terserap semakin sedikit dan diantara ketiga variasi *running* penyerapan optimum terjadi saat *running* 10000. Pada penelitian ini pengaruh *running* adalah pada waktu proses simulasi, ketika *run* semakin banyak maka proses simulasi penyerapan hidrogen pada CNT semakin lama. Karena suhu yang digunakan pada penelitian ini cukup besar dan semakin besar, maka semakin lama proses simulasi pori-pori CNT semakin besar akibat memuai dan gaya *Van der Waals* semakin lemah sehingga hidrogen yang terserap semakin sedikit.

3.3 Hasil Adsorpsi Hidrogen pada *Carbone Nanotube*

Setelah dilakukan penelitian simulasi MD adsorpsi hidrogen pada *carbone nanotube* kode LAMMPS, diperoleh data hasil simulasi pada **Tabel 1**. Terdapat data input simulasi antara lain *index chirality*, jumlah atom dan temperatur (Kelvin) serta data output meliputi, waktu (detik) dan penyerapan hidrogen (atom). Data berikut merupakan data penyerapan optimum hidrogen pada CNT yaitu saat *run* 10000.

Tabel 1. Nilai hasil simulasi adsorpsi hidrogen pada setiap *index chirality* run 10000

No	Index Chirality	n (nm)	m (nm)	Atom	Temperatur (K)	Waktu (detik)	Hidrogen Terserap (Atom)
1.	Armchair	10	10	384	100	2	10
2.					200	3	5
3.					300	3	4
4.	Chiral	10	6	416	100	4	12
5.					200	4	11
6.					300	5	10
7.	Zigzag	10	0	324	100	2	5
8.					200	2	3
9.					300	2	1

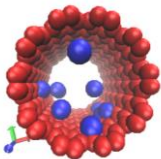
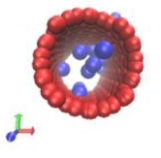
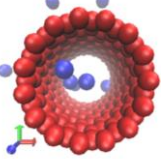
Jumlah atom dan nilai index n, m setiap *index chirality* pada penelitian ini tetap sama. Data pada **Tabel 1** menunjukkan perubahan waktu pada setiap temperatur, saat temperatur semakin tinggi waktu simulasi semakin lama atau tetap (konstan). Sedangkan hasil penyerapan optimum pada setiap *chirality* tepat pada temperatur terendah yaitu 100 K dan ketika temperatur semakin tinggi hasil penyerapan semakin kecil. Pada permukaan material karbon adsorpsi yang digunakan adalah jenis adsorpsi fisik atau fisisorpsi (Suci, 2016).

Adsorpsi fisik terjadi apabila adsorbat dan permukaan adsorben terikat dengan gaya *Van der Waals* saja (Widayatno dkk, 2017). Saat suhu tinggi hidrogen akan lebih cepat bergerak secara bebas pada ruang simulasi dengan waktu yang sesuai dengan **Tabel 1**. Pengaruh suhu menyebabkan interaksi gaya *Van der Waals* melemah, sehingga ketika pergerakan hidrogen semakin cepat, maka semakin sulit CNT menyerap hidrogen. Saat suhu meningkat atau lebih tinggi, maka kapasitas adsorpsi hidrogen menjadi semakin kecil (Suci, 2016).

3.4 Visualisasi Adsorpsi Hidrogen pada CNT

VMD telah dirancang dengan kemampuan untuk menganimasikan simulasi dinamika molekuler (MD), yang diimpor dari file atau dari koneksi langsung ke simulasi MD yang sedang berjalan (Humphrey dkk, 1996). Berikut merupakan visualisasi VMD penyerapan optimum pada *run* 10000 dan temperatur 100 K pada *index chirality armchair*, *chiral* dan *zigzag* yang diberikan pada **Tabel 2**.

Tabel 2. Hasil visualisasi adsorpsi hidrogen pada CNT *chirality armchair*, *chiral* dan *zigzag run* 10000

<i>Index Chirality</i>	Diameter (nm)	Temperatur (K)	Visualisasi
Armchair	11,28	100	
Chiral	9,11	100	
Zigzag	6,51	100	

Berdasarkan **Tabel 2**, terdapat hasil visualisasi dengan dengan *index chirality* yang berbeda. Masing-masing *chirality* memiliki nilai *index n, m* yang berbeda, sehingga jumlah atom juga berbeda. *Armchair* memiliki total atom sebesar 384 atom dengan 360 atom CNT dan 24 atom hidrogen, kapasitas adsorpsi hidrogen sebesar 10 atom. *Chiral* memiliki total atom sebesar 416 atom, dengan 392 atom CNT dan 24 atom hidrogen, kapasitas adsorpsi hidrogen sebesar 12 atom. *Zigzag* memiliki total atom 324 atom, dengan 300 atom CNT 24 atom hidrogen dan kapasitas adsorpsi sebesar 5 atom. Tekanan yang dihasilkan dari penyerapan optimum ini, saat diberi temperatur 100 K pada *chirality armchair* sebesar 1,05 atm, *chirality chiral* sebesar 246,19 atm dan *chirality zigzag* sebesar 14159,03 atm. Ketiga *chirality* memiliki volume yang konstan sebesar 59140 nm dan diameter yang berbeda sesuai dengan *index n* dan *m* yang mewakili pembungkusan *graphene* menjadi CNT (Varshney, 2014).

Visualisasi pada VMD mendapatkan bentuk tiga dimensi dari adsorpsi, VMD juga memvisualisasikan secara presentasi video atau biasa disebut dengan visualisasi dinamis, sehingga visualisasi dapat menampilkan layaknya proses adsorpsi hidrogen pada CNT sebenarnya yang sedang berlangsung.

4. Kesimpulan

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. Pada proses simulasi, semakin kecil temperatur yang digunakan untuk simulasi adsorpsi hidrogen pada *chirality Armchair*, *Chiral* dan *Zigzag*, maka semakin besar hidrogen yang dapat diserap. Semakin besar temperatur, semakin kecil hidrogen yang dapat diserap. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality armchair* berturut-turut sebesar 10 atom, 6 atom dan 2 atom. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality chiral* berturut-turut sebesar 12 atom, 10 atom dan 10 atom. Penyerapan optimum hidrogen dengan *run* 10000, 20000 dan 30000 pada *chirality zigzag* berturut-turut sebesar 5 atom, 1 atom dan 0 Atom. Hasil maksimum penyerapan hidrogen pada CNT saat *run* 10000 dengan tipe *index chirality chiral*.

Ucapan Terima kasih

Penulis mengucapkan terima kasih kepada Kepala Laboratorium Elektronika Dasar dan Instrumentasi dan Ketua Jurusan Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Lampung yang telah membantu dalam penyelesaian penelitian ini.

5. Daftar Pustaka

- 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.
- Astuti, A.D dan A.B. Mutiara. 2009. Performance Analysis on Molecular Dynamics Simulation of Protein Using GROMACS. *Thesis*. Universitas Gunadarma.
- Chandrasa, Ganesha Tri. 2009. Penelitian Hidrogen sebagai Bahan Bakar Sepeda Motor Listrik yang Berkesinambungan. *Prosiding Seminar Nasional Daur Bahan Bakar 2009*. 13-17.
- Dzulfahmi, Ahmad. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Panjang. *Skripsi*. Universitas Indonesia.
- 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.
- Hidayat, Aulia Fikri. 2019. Studi Evolusi Struktur pada Deposisi Tembaga Dalam Substrat Silikon Dengan Metode Dinamika Molekuler. *Jurnal Matematika*. 18(1). 21-28.
- Humphrey, William., Andrew, Dalke, dan Schulten. 1996. VMD: Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*. 14. 33-38.
- Jabbar, Abdul. 2012. Simulasi Dinamika Molekuler Adsorpsi Hidrogen pada *Carbon Nanotubes* (CNT) dengan Variasi Temperatur. *Skripsi*. Universitas Indonesia.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.

Zuttel, Andreas. 2003. Materials For Hydrogen Storage. *Review Featue*. 1-33.