

## ESTIMASI KAPASITAS ADSORPSI HIDROGEN PADA SWCNT MELALUI METODA SEMI EMPIRIK DENGAN KOREKSI GEOMETRIK

Supriyadi<sup>1\*</sup>, Nasruddin<sup>1</sup>, Engkos A. Kosasih<sup>1</sup>, I. A. Zulkarnain<sup>2</sup>

<sup>1\*</sup> Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering University of Indonesia, Depok

<sup>3</sup> Faculty of Engineering President University, Cikarang, Indonesia 17550

\* e-mail : supriyadins@gmail.com

### INTISARI

Potensi gas hidrogen untuk diimplementasikan sebagai pembawa energi alternatif sangat menjanjikan karena bersih dan efisien. Namun ada sejumlah kendala kenapa belum dapat direalisasikan secara masif hingga saat ini, yakni masalah pengembangan teknologi penyimpanan gas hidrogen. Untuk dapat meningkatkan kapasitas penyimpanan gas hidrogen sudah banyak dilakukan penelitian baik teoritik, eksperimen, maupun simulasi guna mendapatkan material baru yang memenuhi kriteria, salah satunya adalah adsorben karbon nanostruktur seperti carbon nanotube (CNT). Salah satu jenis CNT yang paling baik adalah Single-Wall Carbon Nanotubes (SWCNT). Hingga saat ini banyak penelitian eksperimen yang tidak memberikan hasil yang reproducibile menyebabkan perlunya ada pengembangan penelitian teoritis adsorpsi gas hidrogen dengan pendekatan termodinamika molekuler. Dengan kalkulasi struktur elektronik, energi potensial interaksi antar molekul gas hidrogen diestimasi dan antara gas hidrogen dengan SWCNT. Energi potensial tersebut direpresentasikan ke dalam persamaan nilai parameter potensial klasik sebagai fungsi dari diameter SWCNT agar didapatkan model potensial yang paling akurat. Setelah mendapatkan nilai-nilai parameter potensial interaksinya, simulasi dinamika molekuler dilakukan untuk menganalisa adsorpsi gas hidrogen pada permukaan bagian luar dan bagian dalam SWCNT. Dari perhitungan yang dilakukan diperoleh nilai SSA sebesar 2600 m<sup>2</sup>/g. Dengan nilai SSA tersebut memberikan kisaran hasil kapasitas adsorpsi sebesar 0,9 wt % pada temperatur 298 K, 1,2 wt % pada temperatur 233 K dan 4,8 wt% pada temperatur 77 K di tekanan sekitar 100 atm. Diameter optimum untuk adsorpsi diperoleh pada diameter kurang dari 5 Å dan pada diameter antara 12 – 14 Å.

**Kata Kunci:** Hidrogen, Kapasitas Adsorpsi, SSA, SWCNT

### 1. PENDAHULUAN

Ketersediaan energi merupakan salah satu faktor yang sangat penting bagi suatu Negara untuk menggerakkan roda perekonomian dan kehidupan sosial. Bukan hanya sebagai penentu kemajuan suatu bangsa, ketersediaan energi juga sangat menentukan kualitas hidup rakyatnya. Saat ini Indonesia terus membangun pembangkit listrik untuk memenuhi kebutuhan energi yang semakin meningkat, sayangnya masih didominasi oleh energi berbahan dasar fosil, seperti batubara, minyak bumi dan gas (Nasruddin, dkk, 2016). Permintaan energi Indonesia terus mengalami kenaikan yang mencapai 9 persen setiap tahun dan pertumbuhan listrik yang mencapai 14% per tahun yang merupakan kenaikan terbesar di kawasan Asia Tenggara untuk kurun waktu 40 tahun terakhir. Kondisi ini cukup mengkhawatirkan karena kemampuan produksi minyak dalam negeri terus mengalami penurunan sementara bauran energi nasional didominasi minyak dan gas bumi selama bertahun-tahun mencapai hampir 50% (Darma, 2014). Untuk kawasan Asia Tenggara diprediksi permintaan energy primer akan mencapai kenaikan hingga 80% pada tahun 2040.

Hingga saat ini sumber energi berbahan dasar fosil hanya dimiliki oleh sebagian kecil negara maka seiring dengan meningkatnya kebutuhan mengakibatkan harga bahan bakar fosil di pasar dunia semakin mahal, karena cadangan energy fosil semakin berkurang. Sektor energi juga sangat mempengaruhi dan dipengaruhi berbagai sektor lainnya. Dari uraian di atas dapat dikatakan dua tema besar: energi dan kelestarian lingkungan menjadi permasalahan serius yang dihadapi masyarakat dunia pada saat ini. Oleh karena itu diperlukan upaya ekstra untuk memenuhi pasokan energi Indonesia di antaranya dengan meningkatkan peran energi terbarukan agar tercapai keseimbangan dalam pengelolaan energy antara pasokan dan permintaan. Langkah ini merupakan langkah strategis sesuai dengan Kebijakan Energi Nasional yang baru tahun 2014, yang menetapkan bahwa target pengembangan energy terbarukan di Indonesia adalah 23% dari total konsumsi energy

pada tahun 2025 dan 31% pada tahun 2050. Dengan demikian pengembangan energy terbarukan untuk penyediaan energy menjadi sangat menantang mengingat penggunaan energy terbarukan pada saat ini masih rendah yaitu sebesar 6% dari bauran energy nasional (Darma, 2014).

Selain faktor ketersediaan yang semakin menurun sumber energi berbahan dasar fosil juga memiliki potensi melepaskan emisi gas karbon dioksida dalam jumlah besar yang menjadi kontributor terbesar dalam pencemaran lingkungan. Emisi gas karbon dioksida yang terakumulasi di atmosfer menjadi salah satu penyebab terjadinya pemanasan global dan perubahan iklim (Martin, 2010). Diperkirakan penambahan konsentrasi gas CO<sub>2</sub> di udara lebih dari 50% berasal dari sektor energi (Karekezi, 2002). Jika eksplorasi dan eksploitasi sumber energi fosil terus dilakukan maka kualitas lingkungan akan terus mengalami penurunan.

Dari aspek lain hidrogen sangat menarik perhatian dalam beberapa dekade terakhir karena memenuhi beberapa kriteria antara lain: terbarukan, bersih, (Srinivasa, M., dkk, 2014), ketersediaan dan keberlangsungannya terjamin, serta ringan (Gayathri, V., dkk, 2011). Hidrogen ramah lingkungan karena sisa pembakaannya berupa air, memiliki efisiensi termal yang tinggi, tersedia melimpah di alam dan mudah diproduksi dari berbagai senyawa yang mengandung hydrogen (Satyapal, dkk, 2007). Berbagai faktor ini menjadikan hidrogen dipandang sebagai sumber energi yang sangat menjanjikan untuk diaplikasikan di masa mendatang baik untuk aplikasi kendaraan maupun stasioner (Peng, 2011). Untuk aplikasi kendaraan, penggeraknya adalah motor listrik yang memperoleh tenaga listriknya dari campuran hydrogen dengan udara di dalam perangkat *fuel cell*.

Faktor utama belum dapat diaplikasikannya energi hidrogen secara masal adalah teknologi penyimpanan dan distribusi. Untuk menjawab permasalahan tersebut para peneliti telah mengembangkan berbagai teknologi penyimpanan gas hydrogen (Chen dan Huang, 2008). Pada saat ini sistem penyimpanan hidrogen yang banyak digunakan adalah hidrogen bertekanan (Zheng, dkk, 2012) dan hydrogen cair (Aceves dkk, 2010). Kedua cara ini bukan hanya mahal dan tidak aman, tetapi tidak efisien secara volumetrik dan losses yang tinggi akibat penguapan (Zhou, 2005). Hidrida logam memiliki kapasitas penyimpanan yang tinggi secara gravimetrik, tetapi ongkos produksinya mahal dan membutuhkan temperature yang tinggi untuk melepaskan kembali hydrogen pada saat akan digunakan (Sakintuna dkk, 2007). Sistem penyimpanan hydrogen yang lain adalah dalam bentuk senyawa kimia dengan ikatan kovalen maupun ion. Secara teknis kedua metoda terakhir ini pun juga memiliki kelemahan serius, yaitu kesulitan saat pelepasan kembali (Hamilton dkk, 2009).

Pilihan paling menarik untuk menyimpan hidrogen pada material padat adalah penyimpanan dengan cara adsorpsi, dimana material berbahan dasar karbon memegang peranan yang sangat penting (Barghi dkk, 2014). Di antara berbagai pilihan penyimpanan hidrogen, hanya penyimpanan dalam bahan padat berpori yang tampaknya berpotensi untuk diterapkan (Sankaran & Viswanathan, 2007), karena material ini memiliki sejumlah karakteristik: reversibilitas yang baik, cepat secara kinetik, dan memiliki kapasitas penyimpanan yang tinggi (Qiu et al., 2014).

Diantara bahan adsorben yang sering digunakan dalam system adsorpsi adalah Alumina Aktif, Silica Gel, Zeolit, Karbon Aktif dan Karbon Struktur-nano. Dua material yang disebut terakhir adalah material yang banyak digunakan untuk aplikasi penyimpanan hydrogen. Banyak penelitian telah dilakukan untuk menemukan bahan adsorben terbaik untuk menyimpan molekul gas hydrogen dan salah satu kandidat yang menjanjikan adalah Carbon nanotube (CNT). CNT memiliki sejumlah kelebihan seperti sifat pori, luas permukaan yang tinggi, stabilitas tinggi dan ringan (Knippenberg, dkk, 2008), yang memungkinkan adsorpsi hidrogen terjadi di kedua sisi CNT, baik pada bagian luar maupun bagian dalam CNT. Metoda adsorpsi dapat meningkatkan kapasitas penyimpanan hidrogen cukup baik jika dibandingkan dengan sistem penyimpanan hidrogen bertekanan karena densitas gas hidrogen yang teradsorpsi dapat mendekati nilai densitasnya dalam fase cair (Gayathri & Geetha, 2007). Kelebihan lain dari pemanfaatan material karbon adalah ringan secara gravimetrik, sehingga keberadaannya dalam tangki penyimpanan tidak menambah berat system secara keseluruhan. Faktor utama yang paling berpengaruh terhadap kapasitas adsorpsi hidrogen pada CNT adalah jenis CNT, diameter dan tentu saja tekanan dan temperatur operasional. CNT yang berbeda memiliki karakteristik yang berbeda dan kemampuan untuk menyimpan hidrogen berbeda pula. Penelitian ini membahas pengaruh ukuran diameter CNT terhadap kapasitas penyimpanan hidrogen. Dengan cara itu diharapkan akan diperoleh diameter

CNT yang paling optimal sebagai media penyimpan hidrogen. Tahap berikutnya adalah menentukan struktur paling optimum pada diameter optimum tersebut. Adapun jenis CNT yang dikaji difokuskan pada jenis CNT berdinding tunggal (Single Walled Carbon Nanotube/SWCNT).

## 2. METODOLOGI

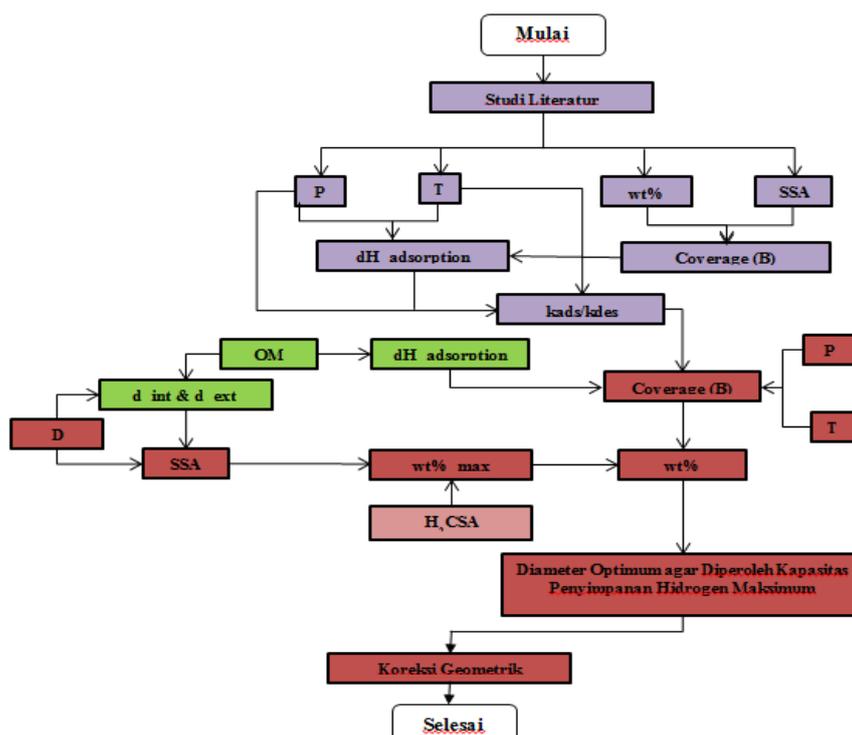
Penelitian ini terdiri tiga bagian penelitian yaitu pemodelan material adsorben, analisa dan karakterisasi material serta optimasi kapasitas penyimpanan hidrogen pada SWCNT, Triazine dan Boron-Triazine dengan doping Lithium melalui simulasi dinamika molekul. Pada tahap awal dikaji kaitan antara kapasitas adsorpsi dengan diameter adsorben, untuk mencari ukuran yang optimum. Optimasi tersebut dilakukan dengan menggabungkan dua pendekatan yaitu pendekatan teoritis (perhitungan mekanika kuantum) dan kajian semi empiris.

Pendekatan teoritis dibatasi pada kondisi dimana persamaan adsorpsi isothermal nonolayer masih berlaku. Pada tahap ini dilakukan analisa yang meliputi analisa *specific surface area* (SSA), energi adsorpsi, dan estimasi kapasitas adsorpsi hidrogen pada SWCNT. Hasil estimasi ini dianalisa dengan pendekatan adsorpsi monolayer menggunakan model adsorpsi isothermal monolayer Toth. Diameter optimum SWCNT yang diperoleh pada tahap ini selanjutnya digunakan untuk menentukan ukuran nanostruktur berbasis karbon pada tahap selanjutnya.

### 2.1 Diagram Alir Penelitian

Metodologi penelitian dalam tulisan ini dapat diilustrasikan dalam diagram alir penelitian seperti pada Gambar 1. Penelitian diawali dengan studi literatur untuk dapat melakukan perumusan masalah dan penyusunan metode penyelesaian masalah. Dari hasil studi literatur, didapatkan bahwa penyelesaian permasalahan ini meliputi perhitungan energi interaksi antar molekul hidrogen dan antara molekul hidrogen dengan SWCNT, lalu melakukan metode *force-matching* untuk mendapatkan model potensial yang akurat, kemudian melakukan simulasi dinamika molekul. Hasil simulasi dinamika molekul ini kemudian dianalisa sebagai fenomena adsorpsi monolayer menggunakan pendekatan termodinamika molekul. Pada akhirnya, hasil penelitian teoritis ini akan divalidasi dengan beberapa hasil penelitian eksperimen dari beberapa literatur sebelumnya.

Untuk mendapatkan model potensial yang akurat dilakukan aproksimasi terhadap fungsi potensial Lennard-Jones dengan menggunakan metode *force-matching*. Selanjutnya dengan menggabungkan hasil eksperimen dengan metoda mekanika kuantum dapat diestimasi chiralitas SWCNT yang paling sesuai dan diameter optimum dari SWCNT untuk aplikasi *hydrogen storage*.



Gambar 1. Metodologi Penelitian

## 2.2 Kalkulasi Mekanika Kuantum

Untuk kalkulasi *ab-initio*, penelitian ini menggunakan perangkat lunak PSI4 yang telah dipercaya dan digunakan oleh beberapa penelitian lainnya (Turney et al., 2011; Zulkarnain, 2014). Dalam studi *ab-initio*, kita menghitung beberapa perhitungan energi satu-titik dalam berbagai jarak antara dinding nanotube dan pusat molekul hidrogen. Molekul hidrogen ditempatkan dalam orientasi tegak lurus di atas pusat struktur heksagonal dari CNT (situs berongga), karena itu adalah tempat di mana konfigurasi interaksi kuat antara molekul hidrogen dan CNT terjadi. Interaksi energi potensial antara hidrogen dan CNT dihitung menggunakan persamaan berikut:

$$\Delta E = E_{H_2-ADS} - (E_{ADS} + E_{H_2}) \quad (1)$$

Dimana  $\Delta E$  adalah besar energi potensial interaksi antara molekul adsorben dan molekul hidrogen pada jarak  $r$  tertentu;  $E_{H_2-ADS}$  adalah besar energi total sistem yang mengandung molekul adsorben dan molekul adsorbate yang berinteraksi pada jarak  $r$  tertentu;  $E_{ADS}$  adalah besar energi total sistem yang mengandung hanya molekul adsorben; dan  $E_{H_2}$  adalah besar energi total sistem yang mengandung hanya molekul hidrogen.

Energi potensial interaksi antara hidrogen dan SWCNT dihitung dalam berbagai diameter dengan memvariasikan chiralitasnya. Karena SWCNT terkecil yang dapat disintesis adalah 3 Å, maka dipilih SWCNT dengan ukuran yang mendekati yaitu SWCNT jenis zigzag dengan chiralitas (6, 0) berdiameter 4,692 Å. Beberapa CNT dengan pilinan yang lebih besar dan diameter juga diselidiki untuk mendapatkan jumlah yang cukup data untuk regresi. Perhitungan energi interaksi antar molekul hydrogen dengan SWCNT dilakukan dengan mengabaikan efek orientasi hydrogen terhadap SWCNT.

Molekul hydrogen disederhanakan dalam bentuk model *united-atom* atau disebut juga model isotropik sebagai mana yang telah digunakan pada literatur sebelumnya (Mahdizadeh & Goharshadi, 2014). Dan model fungsi potensial yang digunakan adalah potensial Lennard-Jones (Jones, 1924), sebagaimana persamaan berikut.

$$\Delta E(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2)$$

Dimana,  $\Delta E(r)$  adalah energi potensial interaksi pada jarak  $r$ ;  $\epsilon$  adalah besar energi potensial terendah;  $\sigma$  adalah jarak interaksi dimana nilai energi potensial sama dengan nol; dan  $r$  adalah jarak antar partikel.

Metode *force-matching* yang dilakukan adalah dengan menjumlahkan seluruh interaksi antar partikel model dan kemudian mencocokkannya dengan besar nilai energi potensial interaksi hasil kalkulasi *ab-initio*. Penjumlahan seluruh interaksi dalam persamaan (3) menghasilkan persamaan energi potensial interaksi total molekul sebagai berikut.

$$\Delta E_{Total}(r) = 4\epsilon \sum_{j>i}^N \sum_{i=1}^{N-1} \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (3)$$

## 3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Dengan menggunakan persamaan (1), nilai energi potensial adsorpsi monolayer dihitung sebagai fungsi jarak antara molekul hidrogen dengan dinding SWCNT. Hasil kalkulasi *ab-initio* dan *force-matching* untuk (5,0), (10,0), dan (20,0) disajikan pada Tabel 1.

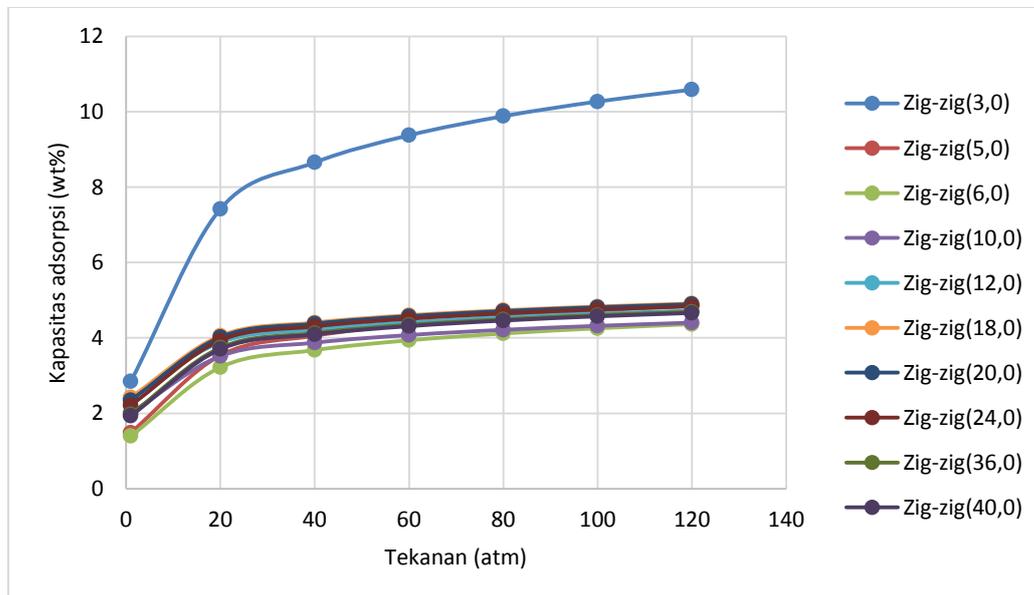
Hasil ini menunjukkan bahwa energi potensial interaksi antara molekul hidrogen dengan CNT dipengaruhi oleh diameter CNT walaupun tidak terlalu signifikan, hanya berkisar antara 1,057 – 1,142 kcal/mol. Pengaruh diameter ternyata sangat dominan pada nilai parameter potensial yang membuat rentang nilai parameternya cukup lebar, yakni 0,0899 – 0,1134 kcal/mol.

**Tabel 1. Hasil kalkulasi *ab-initio* dan *force-matching* untuk interaksi molekul hidrogen dengan berbagai diameter CNT**

Diameter [Å]	Energi Adsorpsi [kcal/mol]	Force-matched $\epsilon$ [kcal/mol]
3,909	1,101	0,1134
4,69	1,080	0,1084
6,254	1,063	0,1024
7,817	1,058	0,0992
9,38	1,057	0,097
11,726	1,063	0,0953
15,634	1,073	0,0936
(Graph ene)	1,142	0,0899

### Estimasi Kapasitas Adsorpsi pada berbagai model SWCNT

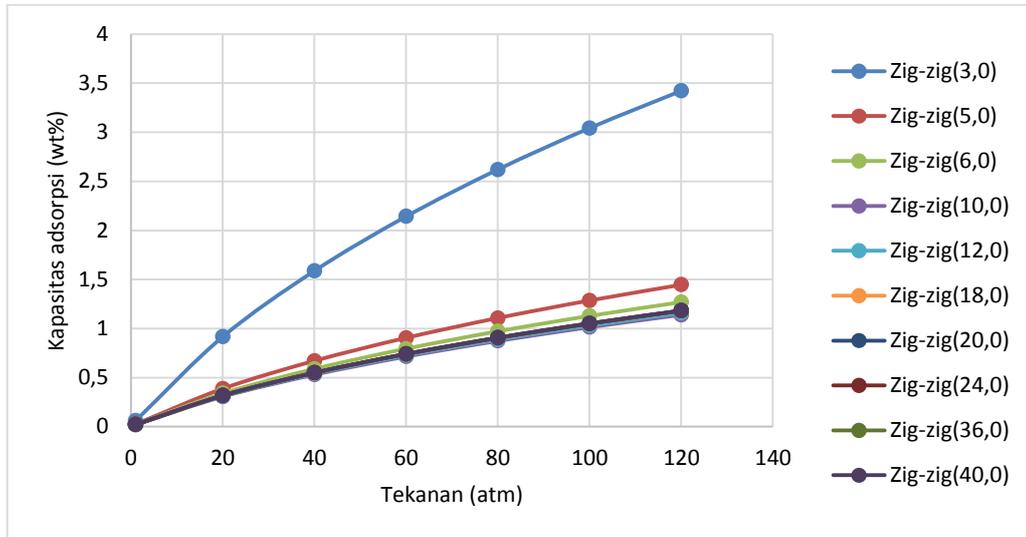
Melalui kajian semi empiris, dalam bagian ini akan dilakukan estimasi kapasitas adsorpsi pada berbagai model SWCNT sebagai fungsi diameter. Kkapasitas adsorpsi berbagai model SWCNT pada berbagai tekanan kesetimbangan dirangkum pada Gambar 2 dan 3 berikut ini.



**Gambar 2. Estimasi kapasitas adsorpsi hidrogen pada SWCNT sebagai fungsi dari diameter pada temperatur 77 K**

Kapasitas adsorpsi hidrogen pada SWCNT (3,0) jauh lebih tinggi dibandingkan kapasitas adsorpsi hidrogen pada SWCNT (40, 0). Perbandingan kedua kapasitas tersebut mencapai 2, 2,5 dan 3 kali masing-masing pada temperatur 77 K, 233 K dan 298 K. Perbedaan hasil yang sangat

signifikan inilah yang menjelaskan kenapa dalam berbagai hasil eksperimen dan simulasi kapasitas adsorpsi hidrogen pada berbagai diameter CNT belum memberikan hasil yang konvergen.



**Gambar 3. Estimasi kapasitas adsorpsi hidrogen pada SWCNT sebagai fungsi dari diameter pada temperatur 298 K**

#### Koreksi Geometrik Pemodelan SWCNT

Faktor yang mempengaruhi adalah pendekatan geometris terhadap masing-masing model SWCNT. Pada pendekatan teoritis semua jenis SWCNT diasumsikan berbentuk tabung lingkaran tegak. Demikian juga lapisan monolayer yang terbentuk baik pada bagian interior maupun eksterior SWCNT berupa lapisan tipis berbentuk tabung dengan ketebalan tertentu. Pendekatan seperti ini berpeluang menghasilkan error karena adanya over estimate terhadap kondisi yang sebenarnya. Kesalahan perhitungan teoritis ini secara sederhana dapat dilustrasikan dalam Gambar 4 berikut.

**Tabel 2. Tabel Luas Irisan Penampang Model Curvatur Nanostruktur dan Model Pendekatan**

Chiralitas	Radius	MODEL	PENDEKATAN	ERROR
(3,0)	1.173	39.22546	65.00584	25.78038
(5,0)	1.955	64.58894	74.83274	10.2438
(6,0)	2.346	72.18	79.74619	7.566187
(10,0)	3.91	98.43018	102.0015	3.571363
(12,0)	4.692	115.2811	118.2208	2.939791
(18,0)	7.038	174.7412	176.8842	2.142989
(20,0)	7.82	194.5368	196.538	2.001276
(24,0)	9.384	234.0373	235.8456	1.808337

#### 4. KESIMPULAN

Keakuratan koreksi geometrik terhadap pemodelan direpresentasikan dalam nilai RSME. Dari hasil perhitungan diperoleh nilai RMSE sebesar  $9,2 \times 10^{-20} \text{ m}^2$  dengan koefisien variasi sebesar 5,3%. Jika SWCNT (3, 0) tidak dimasukkan dalam perhitungan maka akan diperoleh nilai RMSE sebesar  $4,7 \times 10^{-20} \text{ m}^2$  dengan koefisien variasi sebesar 2,5%. Hasil konvergensi data akan semakin bagus jika dua data pertama yang mempunyai error cukup besar. Dengan cara ini akan

diperoleh nilai RMSE sebesar  $3,46 \times 10^{-20} \text{ m}^2$  dengan koefisien variasi sebesar 1,7%. Melalui koreksi tersebut diperoleh hasil kapasitas adsorpsi sebesar 0,9 wt % pada temperatur 298 K, 1,2 wt % pada temperatur 233 K dan 4,8 wt% pada temperatur 77 K di tekanan sekitar 100 atm. Diameter optimum untuk adsorpsi diperoleh pada diameter kurang dari 5 Å dan pada diameter antara 12 – 14 Å.

#### ACKNOWLEDGMENTS

Kami menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada segenap pimpinan Fakultas Teknologi Industri dan Lembaga Penelitian Universitas Trisakti, yang telah membantu kelancaran pelaksanaan penelitian melalui bantuan pendanaan Proposal Penelitian Tahun Akademik 2014/2015 dan 2015/2016.

#### DAFTAR PUSTAKA

- Aceves, S. M., et. al (2010). High-density automotive hydrogen storage with cryogenic capable pressure vessels. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(3), 1219-1226.
- Barghi, S. H., dkk (2014). Chemisorption, physisorption and hysteresis during hydrogen storage in carbon nanotubes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(3), 1390-1397.
- Chen, C.-H., & Huang, C.-C. (2008). Enhancement of hydrogen spillover onto carbon nanotubes with defect feature. *Microporous and Mesoporous Materials*, 109(1–3), 549-559.
- Darma, S. (2014). *Pengembangan Bioenergi Untuk Ketahanan Energi Nasional Indonesia* Retrieved from
- Devarakonda, M., et. al (2012). Systems modeling, simulation and material operating requirements for chemical hydride based hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*.
- Gayathri, V., Devi, N. R., & Geetha, R. (2010). Hydrogen storage in coiled carbon nanotubes. *International Journal of Hydrogen Energy*, 35(3), 1313-1320.
- Gayathri, V., & Geetha, R. (2007). Hydrogen adsorption in defected carbon nanotubes. *Adsorption*, 13(1), 53-59.
- Hamilton, C. W., Baker, R. T., Staubitz, A., & Manners, I. (2009). B–N compounds for chemical hydrogen storage. *Chemical Society Reviews*, 38(1), 279-293.
- Jones, J. (1924). On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas. *Proceedings of The Royal Society A*, 106(738), 463-477.
- Karekezi, S. (2002). Renewables in Africa—meeting the energy needs of the poor. *Energy Policy*, 30(11), 1059-1069.
- Knippenberg, M. T., dkk (2008). Molecular dynamics simulations on hydrogen adsorption in finite single walled carbon nanotube bundles. *Journal of molecular modeling*, 14(5), 343-351.
- Luo, Y., dkk, (2007). Enhanced hydrogen storage properties of MgH<sub>2</sub> co-catalyzed with NbF<sub>5</sub> and single-walled carbon nanotubes. *Scripta materialia*, 56(9), 765-768.
- Mahdizadeh, S., & Goharshadi, E. (2014). Hydrogen storage on silicon, carbon, and silicon carbide nanotubes: A combined quantum mechanics and grand canonical Monte Carlo simulation study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(4), 1719-1731.
- Martin, A. (2010). *Adsorpsi Isotermal Karbon Dioksida Dan Metana Pada Karbon Aktif Berbahan Dasar Batubara Sub Bituminus Indonesia Untuk Pemurnian Dan Penyimpanan Gas Alam*. (Doctoral), University of Indonesia, Depok.
- Nasruddin, et. al (2016). Potential of geothermal energy for electricity generation in Indonesia: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 53, 733-740.
- Oriňáková, R., & Oriňák, A. (2011). Recent applications of carbon nanotubes in hydrogen production and storage. *Fuel*, 90(11), 3123-3140.
- Peng, L. (2011). Atomistic Modeling of Hydrogen Storage in Nanostructured Carbons.
- Qiu, N.-x., et. al (2014). A first-principle study of calcium-decorated BC<sub>2</sub>N sheet doped by boron or carbon for high hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 39(17), 9307-9320.
- Sakintuna, B., Lamari-Darkrim, F., & Hirscher, M. (2007). Metal hydride materials for solid hydrogen storage: a review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 32(9), 1121-1140.

- Sankaran, M., & Viswanathan, B. (2007). Hydrogen storage in boron substituted carbon nanotubes. *Carbon*, 45(8), 1628-1635.
- Sarkar, A., & Banerjee, R. (2004). A quantitative method for characterization of carbon nanotubes for hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*, 29(14), 1487-1491.
- Satyapal, S., et. al (2007). The US Department of Energy's National Hydrogen Storage Project: Progress towards meeting hydrogen-powered vehicle requirements. *Catalysis Today*, 120(3).
- Srinivasa Murthy, S., & Anil Kumar, E. (2014). Advanced materials for solid state hydrogen storage: "Thermal engineering issues". *Applied Thermal Engineering*, 72(2), 176-189.
- Turney, J., et. al, & et.al. (2011). PSI4: an open source ab initio electronic structure program. *WIREs Computational Molecular Science*, 2(4), 556-565.
- Wang, Y., dkk, (2009). Three-dimensional modeling of hydrogen sorption in metal hydride hydrogen storage beds. *Journal of Power Sources*, 194(2), 997-1006.
- Zheng, J., Liu, X., Xu, P., Liu, P., Zhao, Y., & Yang, J. (2012). Development of high pressure gaseous hydrogen storage technologies. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(1), 1048-1057.
- Zhou, L. (2005). Progress and problems in hydrogen storage methods. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 9(4), 395-408.
- Zulkarnain, I. A. (2014). *Optimasi Struktur Material Adsorben Karbon Nanostruktur sebagai Media Penyimpanan Hidrogen: Studi Termodinamika Molekuler*. University of Indonesia.