

## SIMULASI DINAMIKA MOLEKULAR: DAMPAK DAN PROSPEKNYA UNTUK PENGEMBANGAN MEDIA PENYIMPAN ENERGI

Supriyadi

Mahasiswa Program Pascasarjana Universitas Indonesia

Departemen Teknik Mesin, Fakultas Teknologi Industri, Universitas Trisakti

Jl. Kyai Tapa 1, Grogol, Jakarta Barat 11440

e-mail:supriyadins@gmail.com

Nasruddin

Departmen Teknik Mesin, Fakultas Teknik Universitas Indonesia

Kampus Baru UI Depok 16424

e-mail:nasruddin@eng.ui.ac.id

### ABSTRAK

*Krisis energi merupakan salah satu permasalahan serius yang dihadapi saat ini. Sumber energi dari bahan bakar fosil semakin menipis sementara pertumbuhan jumlah kendaraan bermotor meningkat tajam. Hal ini berkorelasi langsung dengan masalah lingkungan seperti pemanasan global. Hidrogen merupakan salah satu harapan untuk energi masa depan, sayangnya masih terkendala dalam proses distribusi dan penyimpanannya. Salah satu cara mengatasi kendala tersebut adalah dengan sistem adsorpsi. Tabung nano karbon (Carbon Nanotube/CNT) merupakan media penyimpan yang baik karena memiliki luas permukaan dan volume pori yang besar. Bagaimana meningkatkan kinerja CNT masih sangat menarik untuk diteliti. Penelitian secara eksperimental umumnya masih memerlukan biaya yang mahal, maka perlu didukung metoda lain untuk menunjangnya seperti Simulasi Dinamika Molekular.*

*Keywords:* Dinamika Molekular, Simulasi, CNT, Hidrogen, Adsorpsi.

### 1. Pendahuluan

Permasalahan energi tidak dapat lagi dipisahkan dari seluruh kehidupan manusia. Energi dibutuhkan dalam semua aktivitas mulai dari aktivitas di rumah, di perjalanan, di kantor maupun kebutuhan dalam skala yang lebih besar seperti dunia industri. Pada saat ini yang menjadi masalah utama adalah semakin minimnya cadangan bahan bakar fosil. Ketersediaan energi yang semakin terbatas membuat harga energi menjadi semakin mahal dan pada saatnya akan menjadi barang yang mewah.

Berbagai pihak sudah banyak melakukan langkah antisipasi untuk mengatasi krisis energi yang mengancam di depan mata. Langkah antisipasi yang dimaksud antara lain dengan melakukan penghematan penggunaan energi, pemanfaatan Energi Baru dan Terbarukan, pemanfaatan teknologi tepat guna serta mencari berbagai sumber energi alternatif yang mungkin seperti energi angin, energi surya, energi samudra, biodiesel, nuklir dan lainnya.

Hidrogen dipandang sebagai salah satu sumber energi masa depan, meskipun demikian masih banyak kendala dalam pemanfaatannya. Hidrogen merupakan gas yang sangat reaktif, dalam konsentrasi tertentu, dengan udara dapat membentuk campuran eksplosif yang secara spontan akan meledak jika dipicu oleh api, panas atau sinar matahari. Kendala lain yang dihadapi adalah masalah penyimpanan dan distribusi. Saat ini pipanisasi hidrogen dan gas alam masih sulit direalisasikan karena mahalnya biaya. Sedangkan distribusi dengan tangki bertekanan tinggi terkendala biaya produksi dan transportasi. Karena beberapa alasan inilah penggunaan hidrogen sebagai bahan bakar masih belum bisa diterapkan.

Berbagai teknologi penyimpanan gas hidrogen terus dikembangkan melalui berbagai eksperimen. Kendala dalam eksperimen umumnya keandalan alat dan tingkat keamanan yang pada akhirnya membutuhkan biaya yang mahal. Salah satu terobosan untuk mengatasi kendala tersebut antara lain dengan melakukan pemodelan dan Simulasi Dinamika Molekular (SDM).



## 2. Sekilas tentang Teknologi Penyimpanan Hidrogen

Pada saat ini berbagai teknologi penyimpanan hidrogen telah banyak dikembangkan. Waktu pengisian dan pengosongan (*charge and discharge*), tekanan, temperatur kerja serta efisiensinya merupakan isu utama untuk dikaji, dengan mempertimbangkan biaya, berat, volume, keawetan dan efisiensi. Berikut adalah beberapa teknologi penyimpanan hidrogen yang telah dikembangkan.

**Tangki bertekanan tinggi**, merupakan teknologi yang paling umum dan sederhana walaupun secara volumetrik dan grafimetrik tidak efisien. Semakin tinggi tekanan, semakin besar energi per unit volume.

**Tangki hidrogen cair**, pada teknologi ini, hidrogen dirubah dari fasa gas ke fasa cair pada suhu yang sangat rendah. Dibutuhkan temperatur hingga 22 K, pada tekanan 1 atm. Sayangnya untuk mendinginkan hidrogen pada kondisi ini dibutuhkan energi yang sangat besar.

**Proses Kimia**, pada teknologi ini, hidrogen disimpan dalam bentuk senyawa kimia yang lebih aman. Pada saat akan digunakan, senyawa ini baru diubah menjadi hidrogen melalui reaksi kimia. Senyawa-senyawa yang dapat menghasilkan hidrogen antara lain methanol, ammonia dan hidrida logam.

**Adsorpsi**, pada metode ini, hidrogen diadsorpsi pada permukaan bahan berpori seperti karbon aktif, CNT, nanofiber grafit, zeolit dan *Metal Organic Framework* (MOF).

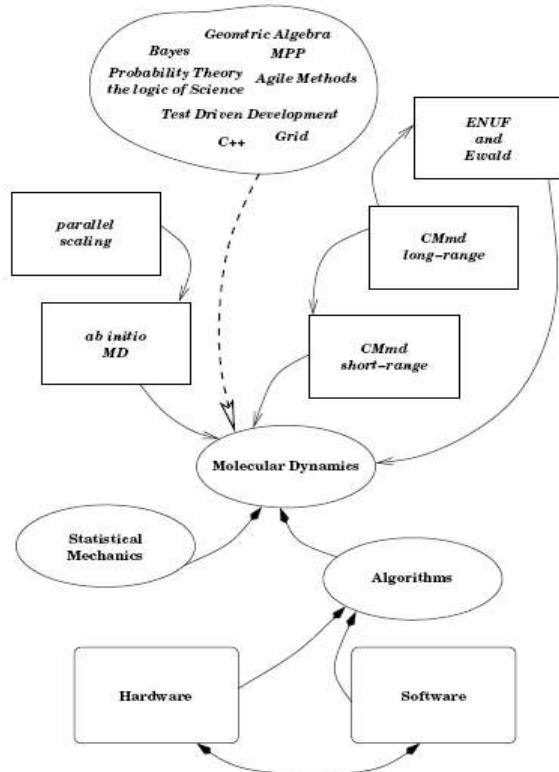
## 3. Simulasi Dinamika Molekular

Teori yang mendasari pengembangan dinamika molekular dibangun oleh beberapa ilmuwan besar antara lain Euler, Hamilton, Lagrange, Shrodinger dan Newton [9]. Pengamatan terhadap pergerakan atom dan molekul tidak terlepas dari mekanika klasik yang menyangkut masa, gerak, kecepatan dan gaya-gaya yang bekerja beserta resultannya yang diaplikasikan untuk N buah atom.

SDM merupakan teknik simulasi untuk mengamati pergerakan molekul yang saling berinteraksi. Teknik ini dibangun untuk mensimulasikan perilaku molekul yang saling menarik, mendorong dan membentur satu molekul dengan molekul lainnya. Simulasi tersebut memberikan informasi baik statik maupun dinamik seperti posisi, kecepatan dan gaya yang bekerja pada skala atom. Informasi ini selanjutnya diolah untuk melihat karakteristik fisik seperti temperatur, tekanan dan energi pada skala makroskopis.

Hal terpenting dalam SDM adalah pengamatan dan analisa tentang dinamika molekul itu sendiri. Posisi dinamika molekul dalam sistem secara keseluruhan secara lebih lengkap digambarkan oleh F. Hedman

(2006) sebagaimana disajikan dalam Gambar 1 [2]. Pendekatan ini tidaklah mutlak tergantung dari obyek dan cakupan aplikasinya.



Gambar 1. Perancangan SDM (F. Hedman et al, 2006).

Pandangan yang diusulkan oleh Hedman memberikan kontribusi besar dalam arah pengembangan SDM selanjutnya, karena dapat dilakukan pendekatan dari berbagai arah. Selain menyajikan perspektif mengenai medan SDM parallel, aspek-aspek lain seperti hardware dan software dikarakteristik dan peran keduanya didiskusikan secara singkat.

Faktor lain yang mendorong peneliti mengamati material sampai pada struktur atom karena secara empirik material nano memiliki banyak keunggulan dibandingkan material struktur makro. Keunggulan tersebut diantaranya: (1) memiliki kekuatan mekanik yang lebih besar (karena luas total permukaan partikel-partikel berukuran nanometer lebih besar), (2) dapat dipadatkan melalui pemanasan (sintering) pada suhu yang lebih rendah [7].

Jumlah atom yang dapat disimulasikan umumnya masih berkisar ratusan atau ribuan. Dengan demikian jika dibandingkan dengan jumlah atom/molekul pada skala makroskopik yang memiliki jumlah molekul sangat besar (bilangan Avogadro berorde  $10^{23}$ ), SDM masih memiliki banyak keterbatasan. Untuk mengkonversikan berbagai informasi pada skala atomik menjadi skala makroskopik dibutuhkan mekanika



statistik dan termodinamika statistik [1].

Selanjutnya SDM digunakan sebagai salah satu metoda untuk memahami karakteristik material pada skala makro, khususnya material baru. Karakteristik material seperti temperatur, tekanan, keseimbangan energi dapat ditentukan dari konfigurasi dan momentum molekul-molekulnya. Hasil tersebut dijadikan referensi pada skala makroskopis seperti temperatur, tekanan, total energi dan lain-lain. Simulasi ini akan sangat berharga untuk melengkapi hasil yang diperoleh secara teoritik maupun eksperimental.

Salah satu kelebihan SDM dibanding metoda lain adalah perubahan sistem terhadap waktu terpantau secara terus-menerus, oleh karena itu informasi dan dinamika sistem tersebut dapat diungkap sepenuhnya [1]. Untuk menguji keandalan sebuah simulasi maka dilakukan perbandingan dengan hasil-hasil simulasi yang lain dan hasil-hasil eksperimen.

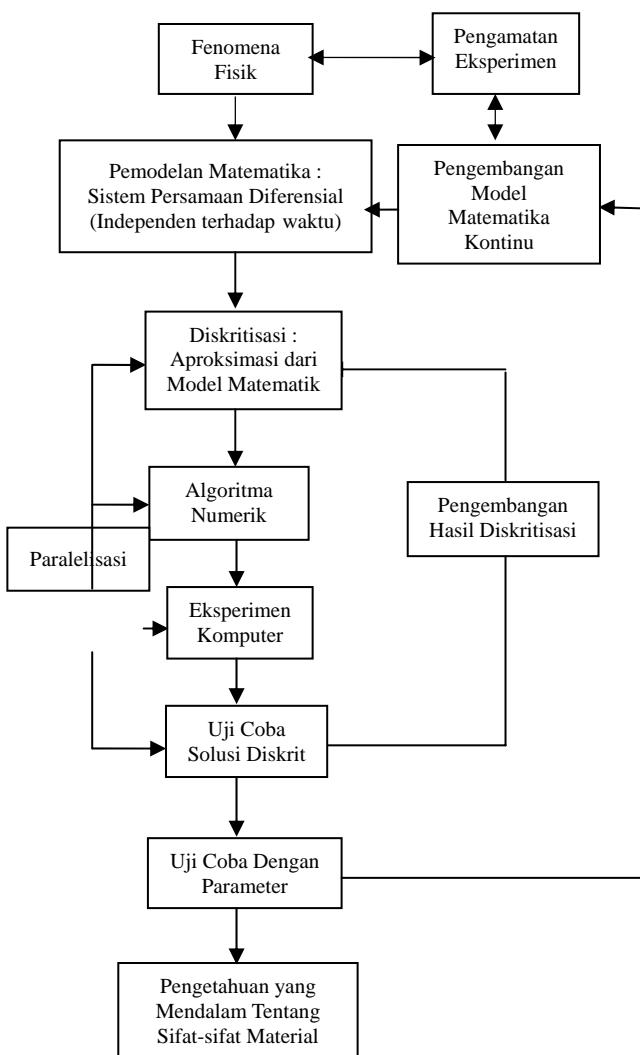
Seiring dengan pesatnya perkembangan teknologi komputer, dengan kecepatan dan memori yang semakin besar, semakin membuka peluang pengembangan SDM. Software aplikasi SDM juga semakin banyak dihasilkan untuk berbagai bidang, beberapa diantaranya yang populer adalah: GROMACS, GROMOS, COSMOS, CHARMM, Monte Carlo dan lain sebagainya.

#### 4. 1. Perancangan Simulasi

Perancangan merupakan langkah essensi utama dalam SDM untuk komputasi dan re-komputasi (*recomputes*) potensial interaksi antar atom maupun molekul pada setiap *time-step*. Perancangan dalam SDM umumnya didasarkan pada perancangan material baru yang dilakukan dengan eksperimen. Material baru yang dihasilkan dimaksudkan agar memiliki karakteristik tertentu yang sesuai untuk dapat diaplikasikan di berbagai bidang.

Langkah-langkah SDM secara garis besar dibangun dengan Pengembangan Model dan SDM itu sendiri. Model yang dimaksud dapat diperoleh secara teoritik maupun hasil-hasil eksperimental. Pengembangan model dalam SDM umumnya meliputi pemodelan interaksi antar molekul, pemodelan interaksi sistem dengan lingkungan dan pemodelan persamaan gerak. Pada tahap simulasi dilakukan dengan membuat trajektori molekul-molekul dalam sistem dan secara bertahap maupun paralel dilakukan analisa trajektori.

Metoda perancangan simulasi untuk dinamika molekul banyak melibatkan pendekatan simulasi numerik yang merupakan hasil pendekatan dari dinamika dan statistik mekanik. Langkah-langkah perancangan dengan pendekatan simulasi numerik dapat digambarkan dalam Gambar 2 di bawah ini.



Gambar 2. Skema Pendekatan untuk Simulasi Numerik [6]

Faktor terpenting dalam perancangan SDM adalah *ensemble*. *Ensemble* adalah koleksi dari kondisi sistem yang sangat mungkin memiliki kondisi mikroskopi berbeda akan tetapi memiliki kondisi makroskopis yang sama. Beberapa *ensemble* yang sering digunakan antara lain:

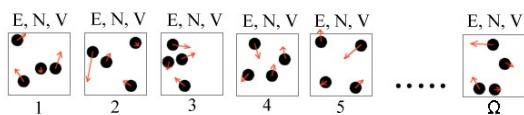
**Ensemble Mikrokanonikal**, adalah ensemble yang memiliki karakteristik jumlah molekul (N), volume (V) dan energi total (E) tidak berubah. Ensemble ini umumnya diperoleh dari sistem yang terisolasi.

**Ensemble Kanonikal**, adalah ensemble yang memiliki karakteristik jumlah molekul (N), volume (V) dan temperatur (T) tetap. Ensemble ini relatif mendekati kondisi eksperimen pada temperatur konstan.

**Ensemble Isobarik-Isotermal**, adalah ensemble yang mempertahankan kondisi pada temperatur (T) dan tekanan (P) konstan.



Secara sederhana ensemble mikrokanonikal dan makrokanonikal dapat digambarkan secara sederhana dalam Gambar 3 dan Gambar 4 di bawah ini.



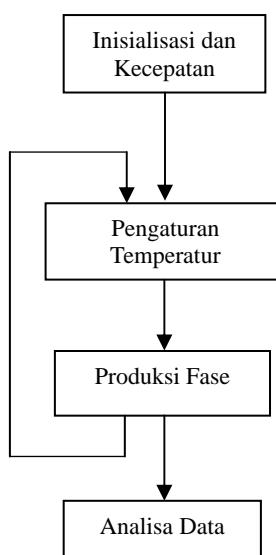
Gambar 3. Ensemble mikrokanonikal [11]

$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$
$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$
$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$	$N, V, T$

Gambar 4. Ensemble kanonikal [3]

Masing-masing elemen pada *ensemble* kanonikal dapat dipandang sebagai sel yang terdiri sejumlah molekul dalam *ensemble* mikrokanonikal. Sebagian penulis menyatakan dengan *ensemble grand canonical* jika jumlah elemennya sangat banyak.

Pada *ensemble* kanonikal dan *ensemble* Isobarik-Isothermal berlangsung pada suhu konstan. Untuk mempertahankan kondisi ini, salah satu caranya dengan menggunakan *thermostat*. Secara sederhana diagram simulasi untuk proses ini diilustrasikan dalam Gambar 5 di bawah ini.



Gambar 5. Diagram proses simulasi dengan Menggunakan thermostat [6].

## 4.2. Bidang Aplikasi

Saat ini hampir tidak ada satupun disiplin ilmu yang lepas dari pemanfaatan komputer untuk pengembangannya. Hampir semua masalah yang secara analitik sulit dicari solusi eksaknya, dapat dilakukan didiskritisasi untuk selanjutnya diselesaikan secara komputasi. Demikian halnya dengan SDM, banyak bidang ilmu mencapai percepatan luar biasa dengan berkembangnya SDM. Dalam beberapa dekade terakhir ini, beberapa bidang yang mengalami revolusi secara drastis antara lain:

- **Rekayasa Biokimia.** SDM untuk keperluan biokimia memungkinkan peneliti secara leluasa meniru model yang sudah ada pada makhluk hidup. Saat ini yang sering dilakukan adalah untuk memanipulasi dan merekayasa protein dengan teknik rekayasa genetika.
- **Elektronika Molekular.** SDM mendorong percepatan penggunaan bahan-bahan organik sebagai pengganti bahan-bahan semikonduktor inorganik sebagai komponen teknologi elektronika. Komponen-komponen organik ini dapat didesain dari atom/molekul penyusunnya untuk mendapatkan karakteristik fisik yang diinginkan.
- **Sains dan Rekayasa Material.** Dengan perkembangan SDM maka rekayasa material dilakukan tidak lagi mengandalkan metode *trial and error*, melainkan mulai menerapkan rekayasa kuantum melalui simulasi. Dengan simulasi ini material dapat dibangun dari penyusunan atom demi atom, kristal demi kristal dan seterusnya. Dari berbagai pendekatan rekayasa material saat ini sudah banyak ditemukan material nano dan salah satu yang paling populer saat ini adalah CNT.
- Dan masih banyak lagi bidang-bidang lain yang mengalami perkembangan yang pesat.

## 5.1. Pengembangan CNT sebagai Media Penyimpan Energi

Pada beberapa dekade belakangan ini, para ilmuwan tertarik meneliti aplikasi karbon aktif sebagai media penyimpan hidrogen karena diduga memiliki luas permukaan yang luas. Pengembangan karbon aktif untuk tujuan tersebut juga masih terus dilakukan sampai saat ini. Salah satu contoh, pemodelan molekular adsorpsi karbon aktif dilakukan oleh Jin-Chen Liu and P.A. Monson (2004). Ia membandingkan hasil simulasi komputer Monte Carlo dengan hasil eksperimen.

Pada dekade berikutnya, mulai banyak peneliti yang bergelut untuk mengembangkan CNT karena memiliki kinerja yang jauh lebih bagus daripada karbon aktif biasa. Perkembangan teknologi nano telah melahirkan revolusi baru dalam berbagai bidang



termasuk bidang energi. Pada tahun 2004, dalam desertasinya David Langohr meneliti dan melaporkan secara lengkap tentang teknik penyimpanan hidrogen. Penelitian dilakukan secara teoritik dan eksperimental. Selanjutnya ia meneliti proses sintesa dan karakterisasi CNT serta pemanfaatnya untuk menyimpan hidrogen. Dalam laporannya proses adsorpsi yang terjadi dibatasi pada proses adsorpsi secara fisika.

Selain secara eksperimental banyak peneliti lain mencoba melakukan simulasi bagaimana menyimpan hidrogen. Penyimpanan hidrogen dalam grafit, pada suhu 303 K dilakukan oleh Piotr Kowalczyk, dkk (2005) dengan menggunakan simulasi Grand Canonical Monte Carlo. Studi tentang penyimpanan hidrogen juga dilakukan oleh Xuan Peng, dkk (2009) yang melakukan karakterisasi secara komputasional penyimpanan hidrogen pada kawat nano karbon CMK-5.

Pemodelan dan simulasi penyimpanan hidrogen dengan karbon aktif yang menggunakan sistem hibrid dilakukan oleh Gabriele Zini dan Paolo Tartarini (2010). Pemodelan dan simulasi dibuat dengan memanfaatkan energi angin yang dikonversi secara elektrik untuk menghasilkan hidrogen melalui proses elektrolisis, selanjutnya hidrogen yang diperoleh disimpan dengan media karbon aktif sebagai adsorban.

Dalam sepuluh tahun terakhir perkembangannya CNT sebagai media penyimpan energi semakin pesat seiring dengan pesatnya perkembangan sains dan teknologi untuk mensintesa dan mengkarakterisasi CNT. Walaupun pengembangan CNT di Indonesia belum menjadi prioritas utama, namun prospeknya sangat menjanjikan karena Indonesia memiliki sumber daya alam yang sangat melimpah sebagai dasar untuk pembuatan material nano. Oleh karena itu sampai saat ini sebagai media penyimpan energi CNT masih sangat menarik untuk diteliti dan dikembangkan.

## 5.2. Dampak dan Prospek SDM untuk Pengembangan Media Penyimpan Energi

Kendala dalam SDM selama ini adalah memerlukan kemampuan komputasi yang besar karena jumlah molekul yang disimulasikan cukup banyak dan melibatkan algoritma yang kompleks. Selama ini salah satu cara untuk mengatasinya adalah dengan menggunakan paralelisasi komputer [6]. Dengan perkembangan teknologi komputer yang semakin pesat, kendala ini akan semakin berkurang, waktu komputasi yang dibutuhkan akan semakin singkat.

"Sekarang ini dunia sedang mengarah pada revolusi nanoteknologi di mana dalam periode 2010 sampai 2020 akan terjadi percepatan luar biasa dalam penerapan nanoteknologi di dunia industri," (Nurul Taufiq Rochman, sumber ANTARA 2010).

Pengenalan dan pemahaman ilmu dan teknologi nano sangat terkait dengan definisi nano, bahan berstruktur nano, ilmu dan teknologi nano itu sendiri. Perkembangan teknologi nano telah membawa lompatan luar biasa dalam berbagai bidang, khususnya teknologi material [13, 15]. Dalam pengembangan teknologi ini melibatkan hampir semua disiplin ilmu terlibat, dan sebagai konsekuensinya SDM juga sangat dibutuhkan.

Dalam pembuatan material nano umumnya digunakan dua pendekatan yaitu *top-down* dan *bottom-up*. Metoda top-down adalah metoda penghalusan *bulk* (materi dalam skala makro) dihaluskan secara terus-menerus sampai diperoleh orde nano. Pendekatan kedua yakni *bottom-up* dengan menyusun atom demi atom, molekul demi molekul menjadi material dalam skala makro yang memenuhi karakteristik tertentu yang diinginkan. Karena itu cara untuk memanipulasi dan menyusun atom/molekul tersebut mutlak diperlukan dan di sini sekali lagi peran SDM sangat penting.

Revolusi nanoteknologi digambarkan memberikan dampak yang setara dengan empat revolusi industri yang berlangsung selama dua abad. Aplikasinya sangat luas dan menyentuh hampir seluruh aspek kehidupan manusia seperti: bidang teknologi informasi dan komunikasi, farmasi dan kesehatan, biomedis, pangan dan pertanian, bidang material dan tak ketinggalan bidang energi.

Material nano sebagai adsorban untuk hidrogen terus dikembangkan dan diharapkan menjadi salah satu solusi untuk menghadapi krisis energi. Permasalahan lain terkait dengan pemanfaatan energi adalah pencemaran lingkungan. Dari penelitian-penelitian yang ada hidrogen merupakan energi yang ramah lingkungan.

## 6. Kesimpulan

Berbagai langkah telah dilakukan oleh banyak pihak untuk mengatasi krisis energi. Upaya pencarian energi alternatif dan energi baru dan terbarukan terus dikembangkan. Hidrogen dan gas alam yang lain dipandang sebagai salah satu energi alternatif yang sangat menjanjikan. Selain itu tuntutan masyarakat akan kebutuhan energi yang ramah lingkungan dapat dipenuhi. Seiring dengan pesatnya perkembangan CNT, maka memberikan harapan baru untuk mengadsorpsi hydrogen dengan lebih aman, efektif dan efisien. Salah satu pendekatan pembentukan CNT adalah dengan metoda *bottom-up* yakni dengan menyusun atom demi atom, molekul demi molekul. Untuk penyusunan dan manipulasi molekul-molekul tersebut SDM memberikan dampak yang besar, sehingga dapat dikatakan prospek untuk pengembangannya masih sangat terbuka. Faktor lain agar impian ini dapat segera diwujudkan adalah perkembangan sains dan teknologi komputer yang semakin pesat. Hal ini dapat mengurangi berbagai kendala dalam hal komputasi.



## DAFTAR PUSTAKA

- [1]. Ercolessi, Furio, *A Molecular Dynamics Primer*, Spring College in Computational Physics, ICTP, Trieste, 1997.
- [2]. F. Hedman, *Molecular Dynamics Simulations*, Desertasi, Stockholm University, Faculty of Science, Department of Physical, Inorganic and Structural Chemistry, 2006.
- [3]. Hinchliffe, Alan, *Molecular Modelling for Beginners*, 2<sup>nd</sup> Edition, John Wiley & Sons, West Sussex, 2008.
- [4]. Jin-Chen Liu and Monson, P.A., *Molecular Modeling of Adsorption in Activated Carbon: Comparison of Monte Carlo Simulations with Experiment*, Adsorption 11: page 5–13, Springer Science, 2005.
- [5]. Martin J. Field, *Simulation of Molecular Systems*, 2<sup>nd</sup> edition, Cambridge University Press, 2007.
- [6]. Michael Griebel, Stephan Knapek and Gerhard Zumbusch, *Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications*, Springer, New York, 2007.
- [7]. Mikrajuddin Abdullah, *Pengantar Nanosains*, Penerbit ITB, Bandung, 2009.
- [8]. Pradeep, T, *Nano the Essentials Understanding Nanoscience and Nanotechnology*, McGraw-Hills Companies, Digital Engineering Library, 2009.
- [9]. Rapaport, D.C, *The Art of Molecular Dynamics Simulation*, 2<sup>nd</sup> edition, Cambridge University Press, 2004.
- [10]. Sharon, Mahduri, *Carbon Nanoforms and Applications*, McGraw-Hills Companies, Digital Engineering Library, 2009.
- [11]. Theodorou, DN, *Progress and Outlook in Monte Carlo Simulations*, American Chemical Society, xxxx.
- [12]. <http://www.Icni.uoregon.edu/>
- [13]. <http://www.lipi.go.id/>
- [14]. <http://www.nano-indonesia.org/>
- [15]. <http://www.ristek.go.id/>

