

Simulasi dinamika molekular untuk desalinasi menggunakan membran carbon nanotube graphene dan graphene based triazine bermuatan =  
Molecular dynamic simulation of water desalination using charged cnt graphene and graphitic based triazine membrane

Lee, Steven, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20411113&lokasi=lokal>

---

Abstrak

**ABSTRAK**

Desalinasi dengan menggunakan membran memberikan potensi yang besar dalam menghasilkan air bersih dengan penggunaan energi yang efisien. Penemuan terbaru menunjukkan bahwa carbon nanotube (CNT) dan lembaran graphene memiliki potensi yang sangat besar dalam menyaring garam pada air laut. Kami memodelkan membran yang tersusun dari CNT, lembaran graphene dan graphitic ? based triazine serta pengaplikasian densitas muatan permukaan pada dinding membran. Performa penyaringan garam, pemisahan ion garam dan laju aliran molekul air dari variasi konfigurasi membran diteliti dengan menggunakan simulasi dinamika molekular. Kami menemukan bahwa pengaplikasian densitas muatan permukaan pada daerah tertentu pada membran dan variasi besar densitas muatan memberikan hasil yang berbeda pada performa penyaringan untuk setiap konfigurasi membran yang berbeda.

**ABSTRACT**

Desalination that utilize membrane provide great potential in producing fresh water with efficient energy consumption. Recent research found that cabon nanotube (CNT) and graphene sheet have great potential in filtering salt ion from sea water. We modeled a membrane that made from CNT, graphene sheet and graphitic - based triazine, also applying surface chage density to covers membrane walls. Membrane performance in filtering salt, separating salt ions and water molecules flow from various configuration of membranes are investigated using molecular dynamic simulation. We found that applying surface charge density to certain wall of membrane and the magnititude of the charge give various results to the filtering performance for each different membrane configuration.