

Monte carlo simulation of adsorption of gases in a volumetric apparatus and the development of adsorption potentials for finite surfaces =
Simulasi monte carlo dari adsorpsi pada fase gas di dalam
apparatusvolumetrik dan pengembangan gaya atraksi pada adsorpsi
dengan luasan yang terbatas

Arkanata Akram, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20429921&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Isoterm dari proses adsorpsi biasanya digunakan untuk karakterisasi distribusi ukuran pori dan biasanya diukur secara eksperimental dengan alat volumetrik, yang terdiri dari sel dosis dan sel sampel. Skripsi ini bertujuan untuk membangun keseimbangan antara fase gas dan fase adsorben dengan menggunakan Simulasi 2V-NVT Monte Carlo, dengan dua volume untuk mewakili perangkat tersebut. Efek dari ukuran pori dan volume dosis pada karakteristik isoterm adsorpsi yang dipelajari menggunakan model adsorpsi argon dalam pori graphitic carbon pada temperatur 87 K. Dalam simulasi Monte Carlo untuk sistem adsorpsi, potensi fluida-fluida dan potensi solid-fluida merupakan bagian penting. Potensi fluida-fluida umumnya digambarkan oleh persamaan 12-6 Lennard-Jones, sementara potensi solid-fluida membutuhkan penjumlahan dari semua interaksi antara molekul adsorbat dan semua atom yang ada di permukaan adsorben. Tujuan kedua dari skripsi ini adalah untuk mendapatkan potensi solid-fluida untuk luasan adsorben terbatas yang berbentuk persegi panjang dan lingkaran. Pencapaian utama dari skripsi ini adalah untuk menurunkan persamaan tersebut. Sebagai rekomendasi ke depan, model solid-fluida yang telah dikembangkan sebaiknya diintegrasikan ke dalam Simulasi Monte Carlo.

ABSTRACT

Adsorption isotherms are commonly used for the characterization for pore size distribution and are usually measured experimentally with a volumetric device, which consists of a dosing cell and a sample cell. This project aims to establish an equilibrium between the gas phase and adsorbed phase by using 2V-NVT Monte Carlo simulation, with two volumes to represent such device. The effects of the sizes of pore and dosing volume on the behaviour of the adsorption isotherm are studied, where the model used is argon adsorption at 87K in a graphitic pore. In a Monte Carlo simulation of an adsorption system, the fluid-fluid potential and the solid-fluid potential are important. The former is commonly described by the 12-6 Lennard-Jones equation, while the solid-fluid potential requires the summation of all interactions between adsorbate molecule and all solid atoms in the surface. The second major aim of the project is to obtain the solid-fluid potential for a finite rectangular and disk shape patches. Under certain conditions these potentials become intermediate, and the major achievement of this project is to derive the limits of these equations, resolving the issue of intermediate problem. For future works, the developed solid-fluid model should be implemented into the simulation