

Simulasi dinamika molekuler proses adsorpsi karbon dioksida pada material Bio-Metal Organic Framework Cobalt (II) Glutamate = Molecular dynamics simulation on carbon dioxide adsorption on Bio-Metal Organic Framework Material Cobalt (II) Glutamate

Faqih Hanif, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20527874&lokasi=lokal>

Abstrak

Gas karbon dioksida atau CO₂ merupakan salah satu bagian dari kelompok gas yang menjadi kontributor utama efek rumah kaca dan pemanasan global dimana emisinya yang semakin meningkat di setiap pergantian tahun dan tingkat konsentrasinya yang sudah sangat tinggi sejak beberapa dasawarsa yang lalu berpotensi memicu perubahan iklim dunia. Antara langkah mitigasi yang dilakukan terhadap isu ini adalah dengan melakukan kegiatan carbon capture atau memerangkap gas CO₂. Proses adsorpsi gas merupakan salah satu caranya dan melalui penelitian ini akan dijelaskan tentang simulasi dalam skala molekuler untuk memerhatikan proses penyerapan gas CO₂ pada material yang berpotensi sebagai adsorben. Material yang di dalam penelitian ini adalah jaringan logam organik atau Metal Organic Framework. Terdapat beberapa variabel yang dikendalikan dalam simulasi ini yaitu diantaranya volume MOF, temperatur serta tekanan adsorbat yaitu gas CO₂. Perangkat lunak utama yang digunakan untuk proses simulasi pada penelitian ini adalah LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Metode simulasi molekuler yang digunakan adalah dinamika molekuler dan Grand Canonical Monte Carlo (GCMC). Hasil dari simulasi ini kemudiannya akan dibandingkan dengan hasil percobaan secara eksperimen untuk melihat tren dari kegiatan adsorpsi yang berlaku pada material yang sama. Simulasi ini dilakukan dengan bantuan beberapa perangkat lunak lain yang diintegrasikan dalam proses persiapan, eksekusi dan pengolahan data.

.....Carbon dioxide or CO₂ gas is one of the greenhouse gases that causes the global warming phenomenon. Based on observational data from various environmental organizations and agencies, the amount and concentration of CO₂ gas in the earth's atmosphere have been increasing annually. Therefore, preventive measures to maintain the safe concentration of CO₂ gas should be more carried out more often. One of them is by doing the carbon capture activities or trapping CO₂ gas by adsorption. This research explained about simulation on a molecular scale to observe the adsorption process of CO₂ gas in materials that have the potential to act as an adsorbent. The material used to in this study is the Bio- Metal Organic Framework. There are several variables that were controlled in this simulation, including MOF volume, adsorbate's temperature and pressure. The results of this simulation will then be compared with the experimental results to see the trend of adsorption activity that applies to the same material. This simulation is carried out with the help of several software which are integrated in the process of data preparation, simulation, and data processing. The software which author used for this research is mainly the LAMMPS or (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator).