Universitas Indonesia Library >> UI - Skripsi Membership

Simulasi Dinamika Molekuler Ekuilibrium Separasi Propana/Propilena Dengan Kerangka Metal-Organik Zn2(BDC(CF3)2)2(X) (X= DABCO, Pirazina) = Equilibrium Molecular Dynamics Simulation Propane/Propylene Separation with Metal Organic-Framework Zn2(BDC(CF3)2)2(X) (X= DABCO, Pirazina)

Alfayed Baihaqi, author

Deskripsi Lengkap: https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920545334&lokasi=lokal

----

Abstrak

Pemisahan campuran propana/propilena (C3H8/C3H6) merupakan salah satu proses penting tetapi menantang dalam industri petrokimia akibat konsumsi energi yang besar. Metode pemisahan dengan menggunakan membran berbasis kerangka metal-organik merupakan teknik modern yang dapat mengurangi kebutuhan energi dibandingkan metode separasi konvensional. Penelitian baru-baru ini, (Wang, dkk., Advanced Materials, 2023, 35, 2207955) menemukan kerangka metal-organik Zn2(BDC(CF3)2)2(DABCO) untuk pemisahan campuran propana/propilena. Membran tersebut mampu menghasilkan produk propilena dengan tingkat puritas 99.99% dengan selektivitas hingga 2.18 pada kondisi tekanan 1 bar dan temperatur 298 K. Dalam penelitian ini, simulasi dinamika molekuler digunakan untuk mendapat nilai selektivitas adsorpsi dan difusi serta membandingkannya dengan kerangka metal organik Zn2(BDC(CF3)2)2(Pirazina) karena memiliki berat yang lebih ringan dan meningkatkan luas permukaan adsorpsi dalam berat yang sama. Pada tekanan 1 bar dan 298 K, selektivitas adsorpsi untuk Zn2(BDC(CF3)2)2(DABCO) dan Zn2(BDC(CF3)2)2(Pirazina) adalah sebesar 5,91 dan 2,36. Selektivitas difusi pada temperatur 298 K juga diperoleh dengan besaran nilai 1,965 dan 3,182.

......The separation of propane/propylene (C3H8/C3H6) mixtures is a crucial yet challenging process in the petrochemical industry due to its high energy consumption. Separation methods using metal-organic framework (MOF) membranes are modern techniques that can reduce energy requirements compared to conventional separation methods. Recent research (Wang et al., Advanced Materials, 2023, 35, 2207955) discovered the metal-organic framework Zn2(BDC(CF3)2)2(DABCO) for the separation of propane/propylene mixtures. This membrane is capable of producing propylene with a purity level of 99.99% and a selectivity of up to 2.18 under conditions of 1 bar pressure and 298 K temperature. In this study, molecular dynamics simulations is used to obtain adsorption and diffusion selectivity values and compare them with the metal-organic framework Zn2(BDC(CF3)2)2(Pirazina) because it has a lighter weight and increases the surface area for adsorption in the same weight. At a pressure of 1 bar and 298 K, the adsorption selectivity for Zn2(BDC(CF3)2)2(DABCO) and Zn2(BDC(CF3)2)2(Pirazina) is 5.91 and 2.36, respectively. Diffusion selectivity at 298 K was also obtained, with values of 1.965 and 3.182, respectively.