

Simulasi Dinamika Molekuler Ekuilibrium Separasi Propana/Propilena Dengan Kerangka Metal-Organik  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(X)$  (X= DABCO, Pirazina) = Equilibrium Molecular Dynamics Simulation  
Propane/Propylene Separation with Metal Organic-Framework  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(X)$  (X= DABCO, Pirazina)

Alfayed Baihaqi, author

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

---

Abstrak

Pemisahan campuran propana/propilena ( $C_3H_8/C_3H_6$ ) 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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(DABCO)$  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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(Pirazina)$  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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(DABCO)$  dan  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(Pirazina)$  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 ( $C_3H_8/C_3H_6$ ) 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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(DABCO)$  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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(Pirazina)$  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  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(DABCO)$  and  $Zn_2(BDC(CF_3)_2)_2(Pirazina)$  is 5.91 and 2.36, respectively. Diffusion selectivity at 298 K was also obtained, with values of 1.965 and 3.182, respectively.