

Pemodelan fenomena adsorpsi nitrogen pada Silika Amorf menggunakan metode dinamika molekuler = Modeling of nitrogen adsorption phenomena in Amorphous Silica using molecular dynamics method

Falah Riski Kuskendrianto, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20489958&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Nitrogen sebagai unsur yang banyak terdapat di alam dapat dimanfaatkan sebagai gas yang diserap untuk membantu dalam mengkarakterisasi material, khususnya pada permukaan material. Menurut Brunauer-Emmet-Teller (BET) teori, nitrogen digunakan sebagai gas pengkarakterisasi material karena kemampuan pada kemurniannya yang tinggi dan dapat berinteraksi dengan zat padat. Sejauh ini BET hanya menghasilkan data berupa sifat kuantitatif namun tidak menunjukkan fenomena-fenomena yang dapat terlihat oleh karena itu, digunakan simulasi dinamika molekuler dan membuat pemodelannya untuk mengamati fenomena yang terjadi pada saat adsorpsi nitrogen pada silika amorf yang merupakan material berpori dengan luas permukaan yang besar. Pada penelitian ini simulasi dinamika molekuler yang dilakukan diatur dalam keadaan isothermis, dimana temperatur yang digunakan sebanyak 3 variabel yakni : 77 K, 100 K, dan 150 K pada variasi tekanan yang digunakan 1,3,5,7, dan 10 atm. Berdasarkan hasil yang diperoleh dari simulasi menunjukkan pada saat temperatur 77 K memiliki kemampuan yang optimal dalam mengadsorpsi nitrogen dibandingkan temperatur 100 K dan 150 K.

Nitrogen as an element that is widely found in nature, can be used as a gas that is absorbed to help characterize materials, especially on the surface of the material. According Brunauer-Emmet-Teller (BET) is a theory where nitrogen is used as a gas characterizing material because of its ability to high purity and can interact with solid elements. So far, BET only produces data in the form of quantitative properties but does not show phenomena that can be seen, because of that, molecular dynamics simulations can be done and modeling it to observe the phenomenon that occurs during nitrogen adsorption in amorphous silica which is a porous material with a large surface area. In this study the molecular dynamics simulations are arranged in a state of isotherm, where the temperature used is 3 variables: 77 K, 100 K and 150 K in the variation of pressure used 1, 3, 5, 7, and 10 atm. Based on the results obtained from the simulation, it was found that on 77 K temperature had the optimal ability to adsorb nitrogen compared to 100 K and 150 K.