

# Minimum Energy Path Study of Gas Diffusion Across Zr-X-fcu-MOF Membranes of Varied Linkers = Studi Jalur Energi Minimum Difusi Gas Melalui Zr-X-fcu-MOF Membran Dengan Beragam Linkers

Aqila Ammar Syarif, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920530232&lokasi=lokal>

---

## Abstrak

Teknik pemisahan gas digunakan di pabrik pengolahan gas alam untuk memisahkan CH<sub>4</sub> dari kontaminan gas utama seperti CO<sub>2</sub> dan N<sub>2</sub> yang dapat mengurangi nilai kalor, merusak pipa dan peralatan, dan kapasitas pipa limbah. Metode pemisahan berbasis membran sangat diinginkan karena teknologi yang bersih, penghematan energi, serta kemampuannya untuk menggantikan proses konvensional, berbeda dengan distilasi kriogenik yang membutuhkan konsumsi energi yang tinggi dan penyerapan berbasis amina. Baru-baru ini, pemisahan gas menggunakan membrane Metal-Organic Framework Zr-*umã\_67-ãmesã\_33-fcu-MOF* telah ditemukan untuk memisahkan CH<sub>4</sub> dari CO<sub>2</sub> dan N<sub>2</sub> secara selektif, dan analisis tekno-ekonomi menunjukkan bahwa menggunakan membran seperti itu pada skala industri menjanjikan karena dapat mengurangi secara simultan. penghilangan biaya CO<sub>2</sub> dan N<sub>2</sub> sekitar 73%, relatif terhadap distilasi kriogenik dan penangkapan CO<sub>2</sub> berbasis amina. Penelitian sebelumnya mengungkapkan bahwa mengendalikan aperture dari membran Zr-X-fcu-MOF dengan jenis yang berbeda dan variasi penghubungnya memiliki keunggulan. Dalam penelitian ini, dengan menggunakan teori fungsional densitas, kami menyelidiki secara komputasi apakah memperkenalkan penghubung asam malonat yang lebih kecil, atau asam mesakonit dan asam malat yang lebih fleksibel dapat meningkatkan pemilihan pemisahan CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>. Setelah membangun dan mengoptimalkan struktur membran, molekul gas individu (CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>) ditempatkan sebelum dan sesudah memasuki membran, dan jalur yang disukai secara energetik yang menghubungkan kedua keadaan dicari menggunakan metode climbing image-nudged elastic band (CI-NEB). Profil energi potensial yang dihasilkan dibandingkan dengan profil energi membrane Metal-Organic Framework Zr-*umã\_67-ãmesã\_33-fcu-MOF*, dan hubungan antara tinggi penghalang dan variasi penghubung akan dianalisis. Semua perhitungan dilakukan dengan menggunakan Quantum Espresso suite, dan VMD sebagai visualisasi. Hasil untuk keempat membran tersebut adalah struktur yang menguntungkan dan konfigurasi yang stabil. Diperoleh melalui perhitungan energi interaktif dengan rentang -13.23 kJ/mol hingga -34.81 kJ/mol. CH<sub>4</sub> memiliki hambatan energi yang lebih tinggi daripada CO<sub>2</sub>. Dengan menganalisis perbedaannya, diketahui bahwa penghubung mesakonit dan malik memiliki perbedaan hambatan energi tertinggi sebesar 9.15 kJ/mol dan 10.07 kJ/mol sesuai urutan, yang berarti lebih baik dalam pemisahan. Hambatan energi tertinggi terdapat pada penghubung malik, sementara hambatan energi terendah terdapat pada penghubung malonat.

.....Gas separation techniques are employed in natural-gas processing plants to separate CH<sub>4</sub> from major gas contaminants such as CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> that can reduce the heating value, damage pipelines and equipment, and waste pipeline capacity. Separation methods based on membranes are highly desirable because of a clean technology, saving energy, and its ability to replace conventional processes as compared to the energy-intensive cryogenic distillation and amine-based absorption. Very recently, gas separation using a Zr-*umã\_67-ãmesã\_33-fcu-MOF* membrane Metal-Organic Framework has been found to separate CH<sub>4</sub> from CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> selectively, and techno-economic analysis indicated that employing such membrane on an

industrial scale is promising as it can reduce simultaneous removal of CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub> cost by about 73%, relative to cryogenic distillation and amine-based CO<sub>2</sub> capture. Previous study revealed that controlling the aperture of Zr-X- fcu-MOF membranes with different type and variation of linkers is advantageous, and in the present study, using density functional theory, we investigate computationally whether introducing smaller malonic acid linker, or more flexible mesaconate acid and malic acid can improve CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> separation selectivity. After constructing and optimizing the structure of membranes, individual gas molecule (CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub>) is placed before and after entering membranes, and the energetically favoured path connecting the two states is searched using the climbing image nudged elastic band (CI-NEB) method. The resulting potential energy profiles are compared against those of membrane Metal-Organic Framework Zr-*fum*<sub>67</sub>-*mes*<sub>33</sub>-fcu-MOF, and the relation between barrier height and linker variation will be analyzed. All calculations are performed using Quantum Espresso suite, and VMD as visualization. The result for this study, all four membrane is a favorable structure and stable configuration. from interactive energy calculation with the range of -13.23 kJ/mol to -34.81 kJ/mol. CH<sub>4</sub> is the higher energy barrier than CO<sub>2</sub>, both mesaconate and malic linker is the highest differences of activation energy meaning a better at separation with the value of discrepancy 9.15 kJ/mol and 10.07 kJ/mol in order. The highest energy barrier would be malic linker and the lowest energy barrier would be malonic linker.