

Simulasi Dinamika Molekuler Ekuilibrium Separasi Propana/Propilena Dengan Kerangka Metal-Organik $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{X})$ (X= DABCO, Pirazina) = Equilibrium Molecular Dynamics Simulation
Propane/Propylene Separation with Metal Organic-Framework $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{X})$ (X= DABCO, Pirazina)

Alfayed Baihaqi, author

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

Abstrak

Pemisahan campuran propana/propilena ($\text{C}_3\text{H}_8/\text{C}_3\text{H}_6$) 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{DABCO})$ 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{Pirazina})$ 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{DABCO})$ dan $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{Pirazina})$ 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 ($\text{C}_3\text{H}_8/\text{C}_3\text{H}_6$) 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{DABCO})$ 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{Pirazina})$ 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 $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{DABCO})$ and $\text{Zn}_2(\text{BDC}(\text{CF}_3)_2)_2(\text{Pirazina})$ is 5.91 and 2.36, respectively. Diffusion selectivity at 298 K was also obtained, with values of 1.965 and 3.182, respectively.