

Carbon and methane capture - simulasi molekular proses adsorpsi gas CH₄ dan CO₂ dengan MOF Zn-DOBDC menggunakan *software* RASPA

Faiq Shahabi^a, Fayza Yulia^b, Sholahudin^a, Nasruddin^{a,1},

^aDepartemen Teknik Mesin, Fakultas Teknik Universitas Indonesia, Depok, 16424

^bProgram Studi Teknik Mesin, Universitas Pertamina, Jakarta, 12220

¹nasruddin@ui.ac.id

ABSTRACT

Pemanasan global semakin menjadi ancaman yang nyata. Salah satu kontributor terbesar dalam meningkatnya suhu bumi adalah meningkatnya kandungan gas polutan CH₄ dan CO₂. Pada skripsi ini, penulis akan meriset salah satu bentuk Carbon Capture, Utilization, and Storage (CCUS) menggunakan adsorpsi terhadap gas buang CH₄ dan CO₂ dalam rasio 85% metana dan 15% karbon dioksida untuk simulasi kondisi gas buang. Adapun penelitian yang dilakukan adalah menggunakan MOF Zn-DOBDC yang akan dikarakterisasi menggunakan XRD dan PSD untuk mengetahui karakteristik adsorben untuk kemudian dilakukan simulasi menggunakan *software* RASPA. Penelitian akan dilakukan dalam variasi temperature 300 – 323 K serta tekanan hingga 35 bar. Puncak uptake (g/g) didapatkan pada variasi temperature 300 K dan tekanan 35 bar, dimana uptake mencapai angka 0,51 g/g yang berarti 0,51 gram dari CH₄ dan CO₂ teradsorpsi untuk setiap 1 gram Zn-DOBDC. Didapatkan kesimpulan bahwa dengan meningkatnya temperature, uptake dalam satuan mmol/g mengalami penurunan, sementara dengan meningkatnya tekanan uptake mengalami kenaikan. Hasil adsorpsi juga kemudian akan dilakukan fitting terhadap korelasi adsorpsi isothermal Langmuir, Freundlich, dan Langmuir-Freundlich (sips) serta analisis terhadap panas adsorpsi dalam satuan kJ/mol. Hasil dari simulasi kemudian diteliti lebih lanjut menggunakan modelling Artificial Neural Network (ANN), dimana didapatkan tingkat akurasi pada training sebesar R = 0.9986 dan testing sebesar R = 0.99403.

Keywords: carbon capture, adsorption, Metal Organic Framework (MOF), RASPA

Received 2 September 2024; **Presented** 2 Oktober 2024; **Publication** 20 Januari 2025

DOI: 10.71452/590519

PENDAHULUAN

Pemanasan global dan perubahan iklim merupakan isu kritis yang telah menarik perhatian signifikan karena dampak buruknya terhadap lingkungan dan kehidupan manusia. Kenaikan suhu global terutama didorong oleh peningkatan konsentrasi *greenhouse gases* di atmosfer, terutama karbon dioksida (CO₂) dan metana (CH₄) (IPCC, 2023). Gas-gas ini menjebak panas di dalam atmosfer Bumi, menyebabkan fenomena seperti mencairnya es kutub, kenaikan permukaan laut, dan cuaca ekstrem. Menurut Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), konsentrasi CO₂ di atmosfer telah meningkat sekitar 40% sejak era pra-industri, sementara tingkat CH₄ telah meningkat lebih dari dua kali lipat (IPCC, 2023). Mengatasi emisi gas-gas berbahaya ini sangat penting untuk mengurangi dampak pemanasan global dan memastikan keberlanjutan lingkungan.

Gas buang dari berbagai proses industri, seperti pemrosesan gas alam dan pembangkit listrik, sering mengandung jumlah metana (CH₄) dan karbon

dioksida (CO₂) yang signifikan. Komposisi khas gas-gas ini adalah 85% CH₄ dan 15% CO₂ (Shah et al., 2017). Metana, meskipun merupakan gas rumah kaca yang kuat, juga merupakan sumber energi yang berharga, sehingga penangkapannya dan pemanfaatannya sangat bermanfaat. Pemisahan CH₄ dan CO₂ dari gas buang merupakan tugas yang menantang karena sifat fisik mereka yang serupa.

Dalam menangani isu ini, telah dilakukan penelitian untuk menangani secara mendalam mempelajari perilaku adsorpsi CO₂ dan CH₄, dengan fokus pada pemisahan gas CO₂ dan CH₄. Iddphonce dan Wang (2021) meneliti adsorpsi kompetitif gas-gas ini selama produksi gas serpih yang ditingkatkan, dan menunjukkan tingkat selektivitas yang lebih tinggi pada CO₂. Sebelumnya, Rios et al. (2013) mempelajari adsorpsi campuran CO₂/CH₄ menggunakan karbon aktif, menekankan potensi bahan berbasis karbon dalam teknologi *gas separation*. Baru-baru ini, Liu dan Hou (2020) melakukan studi simulasi molekular tentang adsorpsi selektif campuran

CO₂ dan CH₄, hal ini membuka jalan untuk melakukan riset secara simulasi untuk efisiensi proses.

Fokus penelitian ini adalah untuk mengeksplorasi adsorpsi CO₂ dan CH₄ menggunakan *metal organic framework* (MOF) khususnya Zn-DOBDC (zinc 4,6-dioxido-1,3-benzenedicarboxylate). MOF adalah kelas material berpori yang dikenal karena luas permukaan yang tinggi dan struktur pori yang dapat disesuaikan, sehingga cocok untuk aplikasi adsorpsi gas (Furukawa et al., 2010). Studi ini akan memanfaatkan RASPA, sebuah software simulasi molekuler yang menggunakan metode Grand Canonical Monte Carlo (GCMC), untuk memodelkan perilaku adsorpsi CO₂ dan CH₄ pada Zn-DOBDC. Selain itu, untuk lebih meningkatkan pemahaman dan prediksi perilaku adsorpsi, model *artificial neural network* (ANN) akan dikembangkan. Model ANN dalam penelitian ini akan dilatih menggunakan data yang diperoleh dari simulasi RASPA. Model ini bertujuan untuk mengoptimalkan kondisi adsorpsi dan memprediksi kinerja Zn-DOBDC dalam menangkap CO₂ dan CH₄, berkontribusi pada pengembangan teknologi carbon capture yang efisien.

REVIEW LITERATUR

Carbon Capture, Utilization, and Storage (CCUS)

Carbon capture, utilization, and storage (CCUS) merupakan teknologi yang bertujuan menangkap emisi karbon dioksida (CO₂) yang dihasilkan dari pembakaran bahan bakar fosil yang terdapat di udara hasil pembangkit listrik dan kegiatan industri. CCUS adalah pilihan teknologi utama untuk pengolahan CO₂ dan mencakup tiga langkah yaitu penangkapan CO₂ (*capture*), pemanfaatan CO₂ (*utilization*), dan penyimpanan CO₂ (*storage*). Carbon capture terutama digunakan untuk memisahkan dan memperkaya CO₂ dari berbagai sumber emisi dan bahkan secara langsung dari udara (Zhang, et al. 2023). Pada umumnya, teknologi carbon capture dapat dibagi menjadi tiga, yaitu *Pre-Combustion Carbon Capture*, *Post-Combustion Carbon Capture*, dan *Oxyfuel Carbon Capture* (Dziejarski, et al. 2023).

Adsorben

Bergantung kepada penggunaannya, MOF telah disintesis melalui berbagai pendekatan termasuk solvothermal/hydrothermal, bantuan mikrowave, elektrokimia, mekanokimia, sono-kimia, dan lain sebagainya. Struktur MOF dapat disesuaikan dengan mengubah pelarut, menggunakan agen yang mengarahkan struktur, mengubah prekursor logam, serta memodifikasi ligan organik. Beberapa metode sintesis MOF yaitu hydrothermal synthesis yang melibatkan suhu dan tekanan, electrochemical

synthesis yang memanfaatkan prinsip dan ikatan elektrokimia, microwave synthesis yang menggunakan radiasi microwave, dan sonochemical synthesis yang menggunakan gelombang ultrasonic (Sahoo et al., 2020).

Adsorpsi

Secara definitif, adsorpsi merupakan sebuah fenomena fisik yang terjadi pada saat molekul gas atau cair terjadi kontak dengan suatu permukaan padatan dan sebagian dari molekul tersebut mengembun pada permukaan padatan tersebut (Yulia, 2021).

Adsorbat sebenarnya juga dapat didefinisikan sebagai substansi yang terkonsentrasi pada permukaan dan adsorben didefinisikan sebagai material dimana adsorbat terakumulasi (Yulia, 2021). Adsorpsi diketahui merupakan proses penyerapan adsorbat pada adsorben sedangkan desorpsi diketahui merupakan proses pelepasan adsorbat dari adsorben. Selain itu, adsorptif adalah adsorbat yang akan diserap oleh adsorben.

RASPA

RASPA adalah paket perangkat lunak yang banyak digunakan yang dirancang untuk simulasi molekuler adsorpsi dan difusi dalam bahan nanopori yang fleksibel dan kaku. Hal ini sangat berguna dalam studi material seperti kerangka logam-organik (MOFs), zeolit, dan kerangka organik kovalen (COFs), yang memiliki aplikasi dalam penyimpanan gas, proses pemisahan, dan katalisis. RASPA menggunakan teknik Monte Carlo dan Dinamika Molekuler untuk mensimulasikan perilaku molekul dalam struktur berpori ini, sehingga memungkinkan peneliti memperoleh wawasan tentang sifat dan kinerja bahan-bahan ini pada tingkat molekuler (Dubbeldam, et al. 2015).

Artificial Neural Network (ANN)

Artificial Neural Network (ANN) adalah sebuah sistem komputasi yang terinspirasi oleh struktur dan fungsi otak manusia. ANN terdiri dari sekumpulan node atau "neuron" yang terhubung satu sama lain melalui "sinapsis" yang menyerupai cara neuron-neuron dalam otak manusia berkomunikasi (Goodfellow, Bengio, & Courville, 2016). Setiap neuron dalam ANN menerima input, memrosesnya, dan menghasilkan output yang kemudian diteruskan ke neuron-neuron lainnya dalam jaringan. ANN umumnya terdiri dari tiga jenis lapisan: lapisan input, lapisan tersembunyi, dan lapisan output. Lapisan input menerima data mentah dari luar jaringan, lapisan tersembunyi melakukan sebagian besar pemrosesan, dan lapisan output menghasilkan output akhir dari

jaringan yang bisa berupa prediksi atau klasifikasi tergantung pada tugas yang diberikan (Haykin, 1998; Schmidhuber, 2015).

ANN telah digunakan secara luas dalam bidang adsorpsi untuk memodelkan dan memprediksi perilaku adsorpsi berbagai zat pada material adsorben. Penggunaan ANN dalam adsorpsi melibatkan pelatihan jaringan dengan data eksperimen untuk memprediksi kapasitas adsorpsi dan memahami mekanisme adsorpsi yang kompleks. Contoh penggunaan ANN dalam adsorpsi meliputi pemodelan isoterm adsorpsi, prediksi kapasitas adsorpsi, dan optimasi kondisi operasi. ANN dapat memprediksi isoterm Langmuir, Freundlich, dan model lainnya dengan tingkat akurasi yang tinggi dibandingkan dengan metode konvensional (Karri, Sahu, & Jayakumar, 2018).

METODOLOGI

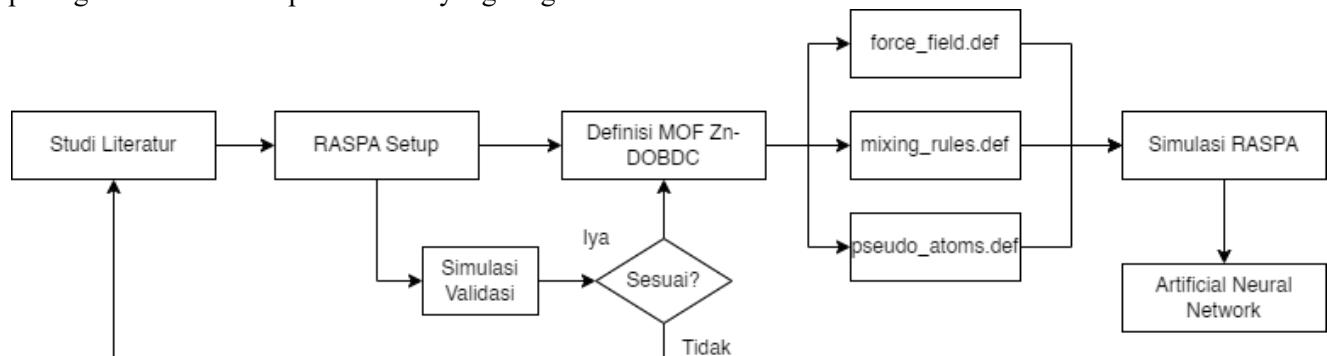
Simulasi Adsorpsi menggunakan RASPA

Kemampuan adsorpsi menggunakan MOF terhadap gas CH₄ dan CO₂ disimulasikan menggunakan perangkat lunak. Adapun MOF yang digunakan

adalah menggunakan MOF Zn-DOBDC dan simulasi menggunakan perangkat lunak RASPA. Penelitian dilakukan pada variasi temperature 300 – 323 K dan tekanan 1 – 35 bar dengan komposisi rasio gas campuran 85% CH₄ dan 15% CO₂. Hasil dari penelitian yang akan dianalisis berupa uptake dari adsorpsi yaitu jumlah gas CH₄ dan CO₂ yang teradsorpsi, panas adsorpsi dalam satuan kJ/mol, serta selectivity yaitu rasio antara CO₂ dan CH₄ yang berhasil teradsorpsi secara sekaligus. Hasil ini kemudian akan disimulasikan menggunakan model ANN untuk pengembangan model ilmiah.

Training dan Testing data menggunakan ANN

Dalam penelitian ini, penulis menggunakan ANN untuk memprediksi kemampuan MOF dalam adsorpsi (Q) serta entalpi pada adsorpsi (H) sebagai output layer. Adapun input yang digunakan dalam adalah variasi temperature pada rentang 300 – 323 K serta tekanan hingga 35 bar sebagai input layer. Penulis kemudian menggunakan 10 neuron untuk mendeteksi kemampuan terbaik dalam memprediksi hasil adsorpsi dan entalpi.



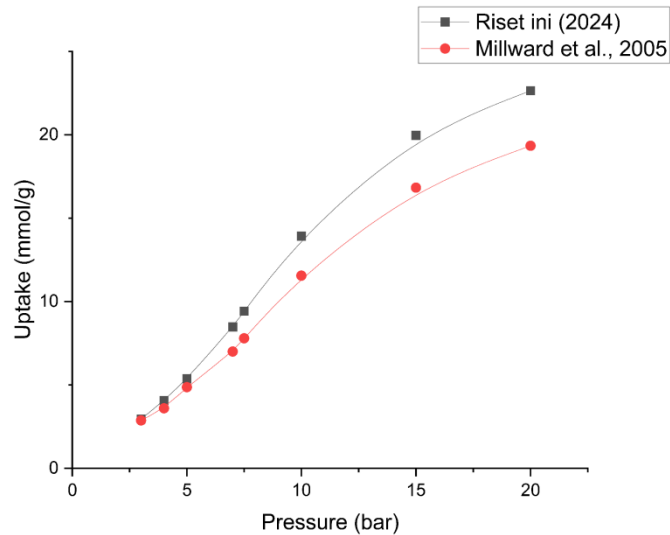
Gambar 1. Diagram alir untuk penelitian

HASIL DAN PEMBAHASAN

Validasi simulasi RASPA

Untuk validasi hasil adsorpsi menggunakan software RASPA, penulis akan melakukan simulasi adsorpsi dengan output *uptake* yaitu satuan yang berhasil teradsorpsi dalam satuan mmol/g menggunakan

adsorben IRMOF-1 terhadap gas CO₂ dengan pada temperatur 298 K dengan variasi tekanan 3-25 bar. Hasil kemudian akan dibandingkan dengan eksperimen yang sebelumnya dilakukan oleh Millward (2005) menggunakan adsorben yang sama dengan kondisi temperatur dan tekanan yang sama.



Gambar 2. Perbandingan hasil adsorpsi pada IRMOF-1 menggunakan software RASPA terhadap eksperimen (Millward et al., 2005)

Dari hasil yang disajikan pada Gambar 2, dapat dilihat bahwa terdapat perbedaan antara hasil eksperimen dan simulasi menggunakan RASPA dengan nilai $R = 0,88$. Hasil *uptake* pada simulasi RASPA menunjukkan hasil yang sedikit lebih tinggi, hal ini dapat terjadi karena kondisi simulasi yang dilakukan dalam kondisi ideal dan tanpa losses pada eksperimen yang dilakukan oleh Millward.

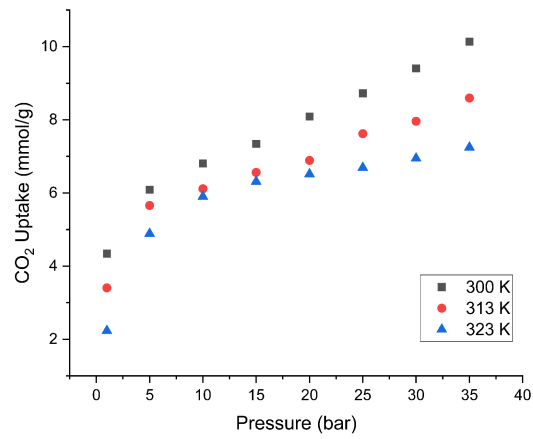
Hasil Adsorpsi Gas CH₄ dan CO₂ menggunakan RASPA

Pada subbab ini, penulis akan menjelaskan hasil simulasi adsorpsi pada kondisi serupa menggunakan RASPA. Adapun variable yang digunakan penulis untuk menguji variasi data pada adsorpsi adalah temperature pada rentang 300-323 K serta pressure (tekanan) pada rentang 1-35 bar. Hasil yang diperoleh dari simulasi berupa adsorption capacity/uptake untuk gas CO₂ dan CH₄ serta panas adsorpsi pada tiap variasi temperature dan tekanan.

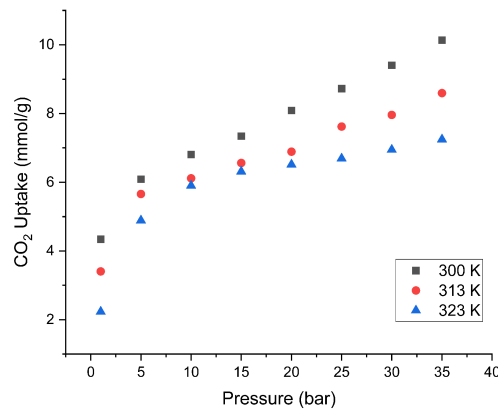
Hasil simulasi RASPA mengenai kapasitas adsorpsi kemudian menunjukkan perilaku uptake yang

meningkat dengan kenaikan tekanan dan menurun dengan kenaikan temperatur. Jumlah tertinggi uptake terdapat pada temperatur 300 K dengan tekanan 35 bar, dimana uptake menunjukkan hasil 0,51 g/g yang berarti 0,51 gram dari gas CH₄ dan CO₂ yang teradsorpsi untuk setiap 1 gram dari MOF Zn-DOBDC. Hasil dari adsorpsi pada variasi temperatur kemudian akan dibandingkan dengan model Langmuir, Freundlich, dan Langmuir-Freundlich. Membandingkan hasil simulasi dengan isoterm Langmuir dan Freundlich digunakan sebagai standar dalam mempelajari dan memprediksi perilaku adsorpsi pada berbagai material.

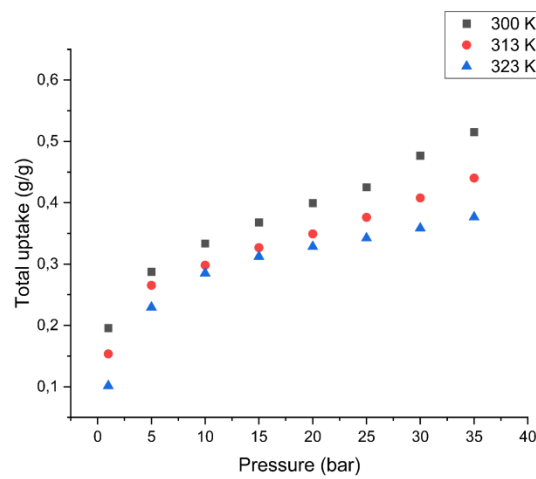
Perilaku uptake yang meningkat dengan kenaikan tekanan dan menurun dengan kenaikan temperatur. Jumlah tertinggi uptake terdapat pada temperatur 300 K dengan tekanan 35 bar, dimana uptake menunjukkan hasil 0,51 g/g yang berarti 0,51 gram dari gas CH₄ dan CO₂ yang teradsorpsi untuk setiap 1 gram dari MOF Zn-DOBDC.



(a)



(b)



(c)

Gambar 3. Adsorpsi pada suhu 300 K, 313 K, dan 323 K pada CO₂ (a), CH₄ (b), serta campuran CO₂/CH₄ dengan satuan g/g

Korelasi adsorpsi isotermal (Langmuir, Freundlich, Langmuir-Freundlich)

Korelasi yang digunakan dalam konteks adsorpsi isotermal sangat banyak dan lengkap dengan parameter-parameternya tersendiri, termasuk apakah model tersebut berbasis empiris atau teoritis. Beberapa contoh korelasi yang umum digunakan dalam adsorpsi isotermal dengan adsorben metal-organic framework adalah adsorpsi isotermal Langmuir-Freundlich (Sips), yang menyatukan korelasi Langmuir dan Freundlich sehingga mendapatkan hasil uji regresi yang sangat baik dan memiliki uji statistik yang dapat diterima hipotesanya melalui chi-square test (Yulia, 2021). Adapun perumusan dari korelasi adsorpsi isotermal dapat dilihat pada persamaan (1), (2), dan (3).

$$Q_{Langmuir} = \frac{Q_m \times K_L \times P}{1 + (K_L \times P)} \quad (1)$$

$$Q_{Freundlich} = K_F \times P^{\frac{1}{n}} \quad (2)$$

$$Q_{Sips} = \frac{Q_m \times (b \times P)^n}{(1 + (b \times P)^n)} \quad (3)$$

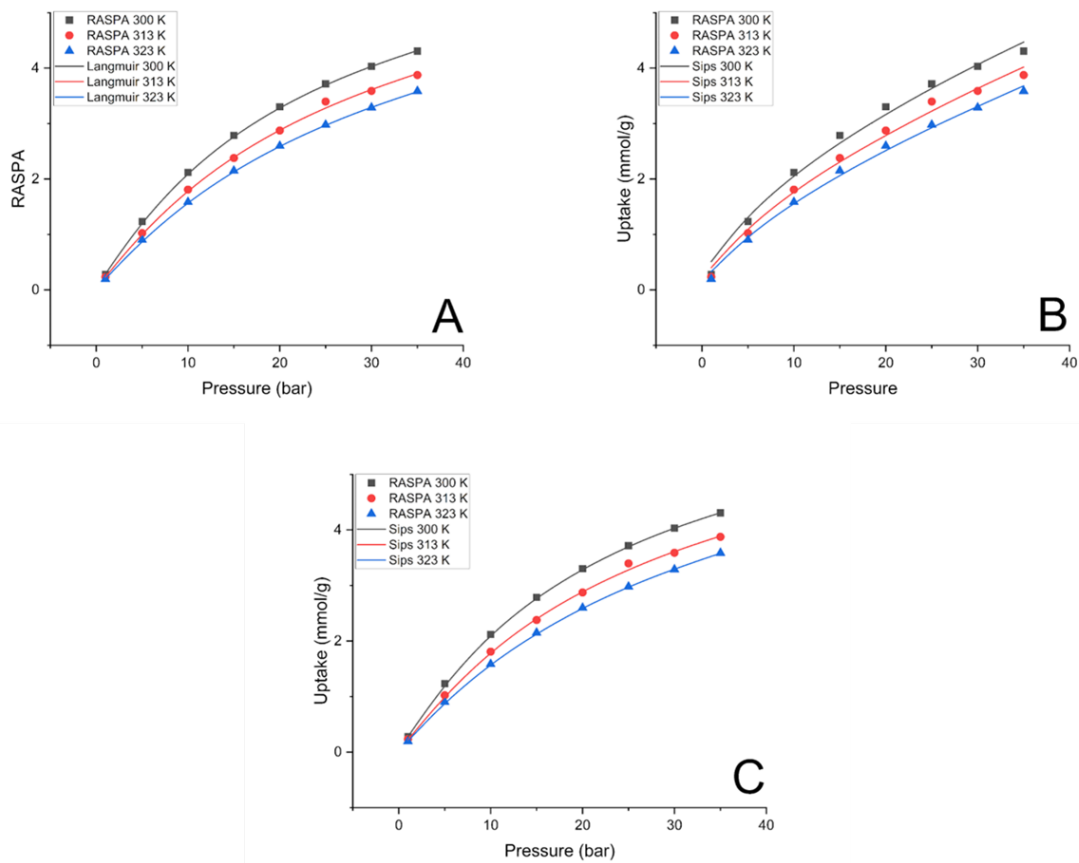
Sebagaimana dinyatakan, fitting model korelasi dalam penelitian ini menggunakan tiga korelasi utama: Langmuir, Freundlich, dan Langmuir-Freundlich (Sips), lengkap dengan parameternya masing-masing. Penelitian sebelumnya mendapatkan hasil korelasi yang memuaskan dengan adsorpsi isotermal Langmuir-Freundlich (Yulia, 2021), sehingga dalam penelitian ini juga digunakan Langmuir-Freundlich, ditambah dengan korelasi Langmuir dan Freundlich secara terpisah. Tujuannya adalah untuk menguji korelasi dari parameter Langmuir yang berbasis teoritis dan parameter Freundlich yang berbasis empiris (eksperimental). Kombinasi ini memungkinkan evaluasi yang lebih komprehensif terhadap data adsorpsi dan membantu dalam menentukan model yang paling sesuai dengan perilaku adsorpsi material Zn-DOBDC.

Adapun uji regresi R² yang digunakan, perlu diperhatikan perbandingan antara hasil uptake adsorpsi yang didapatkan dari simulasi (Q_{sim}) terhadap uptake hasil korelasi adsorpsi isothermal (Q_{model}).

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{n=1}^n (Q_{sim} - Q_{model})^2}{\sum_{n=1}^n (Q_{sim} - Q_{model})^2} \quad (4)$$

Isotherms	Parameters			
	Qm (mmol/g)	K	n	R ²
T= 300 K				
Langmuir	4.32	0.041		0.999982
Freundlich	4.47	2.08	1.3	0.980768
Langmuir-Freundlich (Sips)	4.31	0.043	1.02	0.999997
T= 313 K				
Langmuir	3.90	0.033		0.999912
Freundlich	4.02	1.82	1.26	0.985314
Langmuir-Freundlich (Sips)	3.89	0.036	1.03	0.999666
T= 323 K				
Langmuir	3.57	0.029		0.999981
Freundlich	3.59	1.65	1.22	0.986876
Langmuir-Freundlich (Sips)	3.58	0.028	0.99	0.999972

Gambar 4. Perhitungan korelasi adsorpsi isotermal terhadap gas CH₄



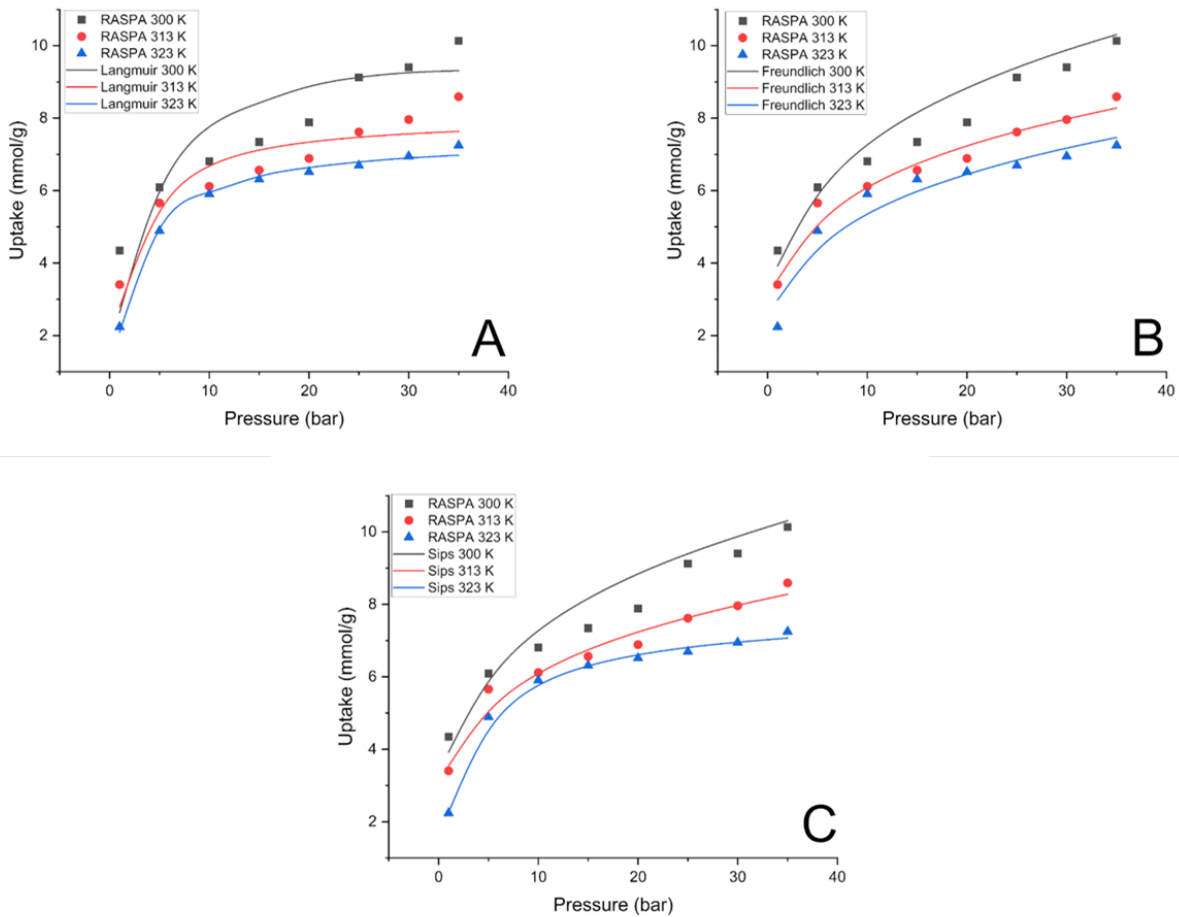
Gambar 5. Fitting adsorpsi isothermal Langmuir (a), Freundlich (b), dan Langmuir-Freundlich (c) terhadap CH₄

Hasil perbandingan adsorpsi menggunakan gas CH₄ dengan korelasi adsorpsi isothermal Langmuir, Freundlich, dan Langmuir-Freundlich (sips) menunjukkan bahwa kecocokan tertinggi ada pada fitting korelasi Langmuir-Freundlich dengan R

sebesar 99,99%, dan terendah pada korelasi adsorpsi Freundlich pada 300 K dengan R sebesar 99%. Namun, dapat disimpulkan secara keseluruhan bahwa fitting menggunakan korelasi adsorpsi isothermal tersebut dapat menggambarkan kondisi adsorpsi.

Isotherms	Parameters			
	Qm (mmol/g)	K	n	R ²
T= 300 K				
Langmuir	9.56	0.464		0.869765227
Freundlich	10.31	1.1	4.26	0.994916748
Langmuir-Freundlich (Sips)	10.31	0.48	0.73	0.999571807
T= 313 K				
Langmuir	7.63	0.529		0.998769851
Freundlich	8.28	1.08	4.14	0.999172458
Langmuir-Freundlich (Sips)	8.28	0.49	0.74	0.992411978
T= 323 K				
Langmuir	6.98	0.387		0.998772405
Freundlich	7.47	1.06	3.17	0.999190154
Langmuir-Freundlich (Sips)	7.07	0.34	0.85	0.999904966

Gambar 6. Perhitungan korelasi adsorpsi isothermal terhadap gas CO₂



Gambar 7. Fitting adsorpsi isothermal Langmuir (a), Freundlich (b), dan Langmuir-Freundlich (c) terhadap CO₂

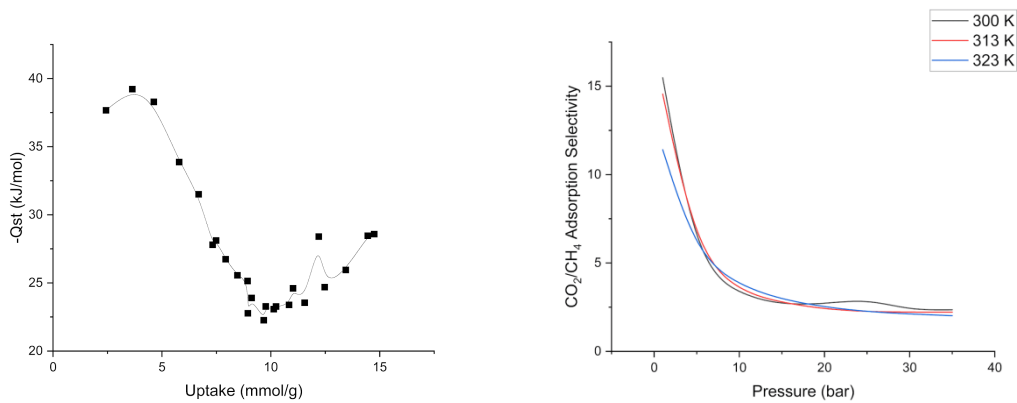
Hasil perbandingan simulasi adsorpsi menggunakan gas CO₂ dengan korelasi adsorpsi isothermal Langmuir, Freundlich, dan Langmuir-Freundlich (sips) menunjukkan tingkat *error* yang lebih tinggi. Fitting terhadap ketiga korelasi adsorpsi isothermal ini menunjukkan bahwa kecocokan tertinggi ada pada fitting korelasi Freundlich pada temperatur 313 K dengan R sebesar 99%, dan terendah pada korelasi adsorpsi Langmuir pada 300 K dengan R sebesar 86%. Hal ini dapat menggambarkan bahwa hasil simulasi belum dapat di-fit secara baik menurut teori, dan dapat menjadi penelitian yang dilanjutkan.

Panas dan Selektivitas Adsorpsi

Entalpi adsorpsi untuk CO₂ dan CH₄ menggunakan Zn-DOBDC pada berbagai suhu—300 K, 313 K, dan 323 K—menunjukkan perilaku yang berbeda seiring dengan perubahan tekanan. Pada suhu 300 K, entalpi adsorpsi awalnya menurun dengan cepat seiring peningkatan tekanan, mencapai nilai minimum sekitar

10 bar. Setelah titik ini, entalpi secara bertahap meningkat dan mulai stabil pada tekanan yang lebih tinggi. Tren ini menunjukkan afinitas tinggi Zn-DOBDC terhadap adsorbat pada tekanan rendah, yang melemah seiring semakin terisinya situs adsorpsi.

Sementara itu, analisis selektivitas adsorpsi CO₂ dan CH₄ menggunakan Zn-DOBDC menunjukkan pola yang jelas di mana material ini menunjukkan preferensi yang signifikan untuk CO₂ dibandingkan CH₄ pada tekanan rendah di semua suhu yang diuji, yaitu 300 K, 313 K, dan 323 K. Pada tekanan rendah, selektivitas sangat tinggi, mencerminkan kemampuan Zn-DOBDC untuk lebih efektif mengadsorpsi CO₂ daripada CH₄. Misalnya, pada tekanan 1 bar, selektivitas mencapai 15,48 pada 300 K, 14,56 pada 313 K, dan 11,41 pada 323 K. Ini menunjukkan bahwa pada kondisi ini, material ini memiliki kecenderungan yang sangat kuat untuk memilih CO₂ dibandingkan CH₄.

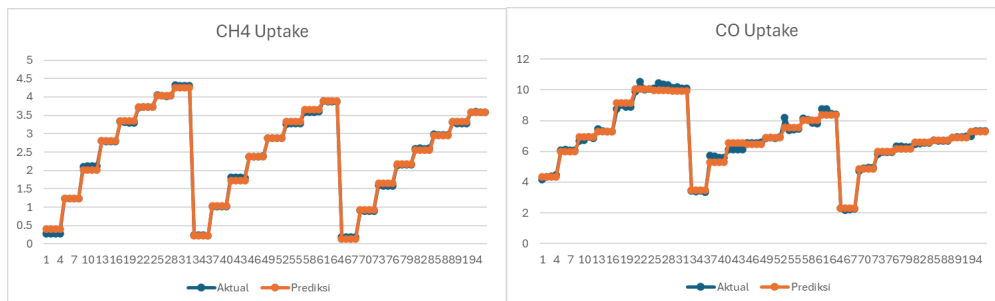


Gambar 8. Panas Adsorpsi (kiri) dan selektivitas adsorpsi (kanan)

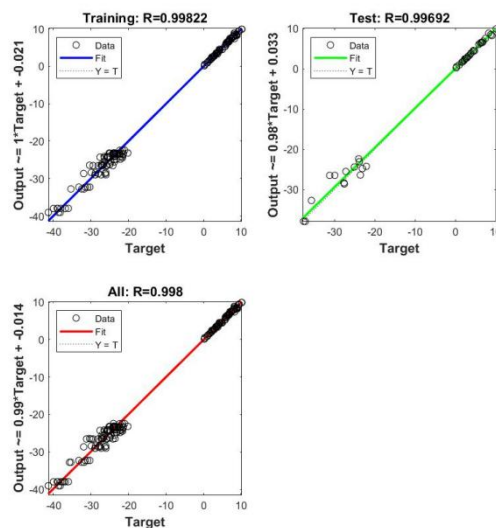
Permodelan ANN pada adsorpsi CH4 dan CO2

Dari hasil yang disajikan pada Gambar 4.16, dapat dilihat bahwa hasil uptake dalam mmol/g terhadap CO2 dan CH4 mendekati hasil dari simulasi ketika di-

fitting. Beberapa error dari hasil simulasi yang terlihat pun juga diprediksi untuk mengikuti pola dari prediksi pada ANN. Hal ini memungkinkan untuk penelitian lanjut terkait penggunaan ANN dalam adsorpsi.



Gambar 6. Hasil Prediksi nilai adsorpsi pada ANN untuk CH4 (kiri) dan CO2 (kanan)



Gambar 7. Nilai Regresi pada training dan testing ANN

Hasil ANN dan simulasi memiliki $R=0.9986$ pada training serta $R=0.99403$ pada testing. Hasil ini mendukung argument bahwa model ANN yang digunakan untuk adsorpsi dapat diimplementasikan untuk penggunaan prediksi adsorpsi menggunakan MOF Zn-DOBDC berikutnya dengan error yang minim.

KESIMPULAN

Penelitian ini menggunakan software simulasi rassa untuk memodelkan perilaku adsorpsi campuran gas CO_2 dan CH_4 dengan rasio 85:15 di bawah berbagai kondisi tekanan 1-35 bar dan temperature 300-323 k pada zn-dobdc. hasil dari simulasi sendiri menunjukkan uptake tertinggi pada 0,51 g/g yang berarti 0,51 gram CH_4 dan CO_2 untuk 1 gram zn-dobdc. selain itu, penemuan lainnya adalah pengaruh temperature dan tekanan terhadap uptake adsorpsi, dimana dengan meningkatnya temperature uptake akan semakin rendah dan dengan meningkatnya tekanan uptake akan semakin tinggi.

hasil penelitian menunjukkan bahwa mof zn-dobdc memiliki kemampuan selektif yang tinggi untuk adsorpsi CO_2 pada tekanan rendah dan temperature rendah, mencapai perbandingan 15:1 pada tekanan 1 bar dan temperature 300 k, namun selektivitas ini menurun seiring dengan meningkatnya tekanan. pada tekanan rendah, rasio selektivitas CO_2 terhadap CH_4 sangat tinggi, menunjukkan bahwa material ini sangat efektif untuk penangkapan CO_2 pada kondisi tersebut. namun, pada tekanan yang lebih tinggi, kompetisi antara molekul CO_2 dan CH_4 untuk situs adsorpsi meningkat, yang menyebabkan penurunan selektivitas.

selain itu, penelitian ini juga mengembangkan model artificial neural network (ann) untuk memprediksi perilaku adsorpsi berdasarkan data simulasi dan eksperimen. ann telah terbukti efektif dalam memodelkan proses adsorpsi yang kompleks dengan $r=0.9986$ pada training serta $r=0.99403$ pada data testing.

KONTRIBUSI PENULIS

Faiq Shahabi sebagai penulis dan periset dalam publikasi tersebut, serta konsep dan *code* dalam menjalankan simulasi RASPA.

Fayza Yulia sebagai pembimbing serta membantu dalam literatur dalam pemahaman terkait metal-organic frameworks (MOFs) dan proses adsorpsi, terutama proses adsorpsi multikomponen terhadap campuran gas CH_4 dan CO_2 .

Sholahuddin sebagai kontributor untuk subbab *artificial neural network* (ANN), dimana beliau membuat kode menggunakan MATLAB untuk dijalankan sehingga dapat digunakan untuk riset ini.

Nasruddin sebagai pembimbing akademis dari penulis serta konseptor utama dalam menentukan fokus dan *scope* serta menjalankan riset.

DAFTAR PUSTAKA

- [1]. Dubbeldam, S. Calero, D.E. Ellis, and R.Q. Snurr, RASPA: Molecular Simulation Software for Adsorption and Diffusion in Flexible Nanoporous Materials, *Mol. Simulat.*, <http://dx.doi.org/10.1080/08927022.2015.1010082>, 2015
- [2]. Dziejarski, B., Krzyżyńska, R., & Andersson, K. (2023). Current status of carbon capture, utilization, and storage technologies in the global economy: A survey of technical assessment. In *Fuel* (Vol. 342). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.127776>
- [3]. Iddphonce, R., & Wang, J. (2021). Investigation of CO_2 and CH_4 competitive adsorption during enhanced shale gas production. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 205, 108802. <https://doi.org/10.1016/J.PETROL.2021.108802>.
- [4]. Li, Z. (2023). Assessment of adsorption materials for carbon capturing and storage in the context of carbon neutrality. In *Highlights in Science, Engineering and Technology ESAET* (Vol. 2023).
- [5]. Liu, Y., & Hou, J. (2020). Selective adsorption of CO_2/CH_4 mixture on clay-rich shale using molecular simulations. *Journal of CO₂ Utilization*, 39, 101143. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2020.02.013>.
- [6]. Mason, J. A., McDonald, T. M., Bae, T. H., Bachman, J. E., Sumida, K., Dutton, J. J., Kaye, S. S., & Long, J. R. (2015). Application of a High-Throughput Analyzer in Evaluating Solid Adsorbents for Post-Combustion Carbon Capture via Multicomponent Adsorption of CO_2 , N_2 , and H_2O . *Journal of the American Chemical Society*, 137(14), 4787–4803. <https://doi.org/10.1021/jacs.5b00838>
- [7]. Millward, R., Yaghi, O. (2005). Metal–Organic Frameworks with Exceptionally High Capacity for Storage of Carbon Dioxide at Room Temperature. *J. Am. Chem. Soc.* 2005, 127, 51, 17998–17999. <https://doi.org/10.1021/Ja0570032>

- [8]. Mondal, M. K., Balsora, H. K., & Varshney, P. (2012). Progress and trends in CO₂ capture/separation technologies: A review. *Energy*, 46(1), 431–441. <https://doi.org/10.1016/j.energy.2012.08.006>
- [9]. Rios, R., Stragliotto, F., Peixoto, H., Torres, A., Bastos-Neto, M., Azevedo, D., & Cavalcante, C. (2013). Studies on the adsorption behavior of CO₂-CH₄ mixtures using activated carbon. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 30, 939-951. <https://doi.org/10.1590/S0104-66322013000400024>.
- [10]. Sahoo, S., Kumar, R., Dhakal, G., & Shim, J. J. (2023). Recent advances in synthesis of metal-organic frameworks (MOFs)-derived metal oxides and its composites for electrochemical energy storage applications. In *Journal of Energy Storage* (Vol. 74). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.est.2023.109427>
- [11]. Sharmin, E., & Zafar, F. (2016). Introductory Chapter: Metal Organic Frameworks (MOFs). In *Metal-Organic Frameworks*. InTech. <https://doi.org/10.5772/64797>
- [12]. Yulia, F., Utami, V. J., Nasruddin, & Zulys, A. (2019). Synthesis, characterizations, and adsorption isotherms of Co₂ on chromium terephthalate (MIL-101) metal-organic frameworks (MOF). *International Journal of Technology*, 10(7), 1427–1436. <https://doi.org/10.14716/ijtech.v10i7.3706>
- [13]. Zhang, L., Song, Y., Shi, J., Shen, Q., Hu, D., Gao, Q., Chen, W., Kow, K. W., Pang, C., Sun, N., & Wei, W. (2022). Frontiers of CO₂ Capture and Utilization (CCU) towards Carbon Neutrality. In *Advances in Atmospheric Sciences* (Vol. 39, Issue 8, pp. 1252–1270). Science Press. <https://doi.org/10.1007/s00376-022-1467-x>