

**KAJIAN SINTESIS ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK-8  
TERMODULASI CETYLTRIMETHYLAMMONIUM BROMIDE DALAM  
METANOL DAN STUDI TEORITIS INTERAKSI DENGAN KARBON  
DIOKSIDA**

Fiska Dewi Wulandhani  
19/445665/PA/19489

**INTISARI**

Pada penelitian ini sintesis *zeolitic imidazolate framework* (ZIF-8) dengan penambahan modulator setiltrimetilamonium bromida (CTAB) serta studi potensi interaksinya dengan gas CO<sub>2</sub> dikaji secara teoritis dan eksperimental. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji struktur dan morfologi ZIF-8 pada pelarut metanol dengan variasi penambahan modulator CTAB, dan mengetahui interaksi antara ZIF-8 dengan molekul CO<sub>2</sub> dan CTAB. Sintesis ZIF-8 dilakukan dengan metode konvensional pada temperatur ruang. Sintesis CTAB-ZIF-8 dilakukan dengan variasi penambahan CTAB 0,025, 0,050, 0,075, dan 0,1 mol. Fasa kristal material ZIF-8 hasil sintesis dikonfirmasi dengan XRD yang dilanjutkan dengan FTIR, FE-SEM, dan TEM. Interaksi CO<sub>2</sub> dengan ZIF-8 dianalisis secara eksperimen dengan ex-situ FTIR dan secara teoritis melalui pemodelan dengan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa material CTAB-ZIF-8 telah berhasil disintesis melalui metode konvensional pada temperatur ruang dengan wujud padatan serbuk berwarna putih dengan kristalinitas tinggi yang berukuran  $\pm 64$  nm berdasarkan distribusi ukuran rata-rata dari citra FE-SEM. Nilai puncak karakteristik XRD dari material CTAB-ZIF-8 pada sudut difraksi (2 $\theta$ ) sekitar 7,35° bersesuaian dengan bidang (110) yang mengindikasikan bentuk morfologi *rhombic dodecahedron* yang bersesuaian dengan hasil karakterisasi dari FE-SEM dan TEM. Penambahan CTAB tidak menyebabkan perubahan struktur pada ZIF-8 yang dilihat dari nilai unit sel sebesar 16,991 Å yang tidak mengalami perubahan signifikan. Hasil perhitungan ukuran dengan Williamson-Hall plot berkisar antara 44-80 nm yang bernilai tidak jauh berbeda dengan ukuran rata-rata dari citra FE-SEM. Pembentukan fase kristal ZIF-8 juga teramati dari munculnya serapan pada bilangan gelombang 421 cm<sup>-1</sup> yang menunjukkan terjadi ikatan kovalen antara Zn<sup>2+</sup> dengan ligan 2-metilimidazol. Berdasarkan perhitungan DFT diketahui interaksi intermolekuler yang stabil antara molekul CO<sub>2</sub> dan CTAB-ZIF-8 terjadi pada posisi molekul CO<sub>2</sub> dekat dengan gugus imidazol dan CTAB dengan energi interaksi sebesar -45,8 kJ/mol.

Kata kunci : CTAB, DFT, kerangka logam-organik, ZIF-8

## **SYNTHESIS OF ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORKS-8 MODULATED BY CETYLTRIMETHYLAMMONIUM BROMIDE IN METHANOL AND THEORETICAL STUDIES OF ITS INTERACTION WITH CARBON DIOXIDE**

Fiska Dewi Wulandhani  
19/445665/PA/19489

### **ABSTRACT**

In this work, the synthesis of zeolitic imidazolate framework (ZIF-8) using cetyltrimethylammonium bromide (CTAB) as modulator and its interaction potential studies with CO<sub>2</sub> gas were investigated both theoretically and experimentally. This study aims to examine the structure and morphology of ZIF-8 in methanol solvent with the addition of CTAB modulator, and analyze the interaction between ZIF-8 with CO<sub>2</sub> molecule and CTAB. The synthesis of ZIF-8 was carried out by conventional method at room temperature. The synthesis of CTAB-ZIF-8 was carried out with variations of CTAB addition of 0.025, 0.050, 0.075, and 0.1 mol. The ZIF-8 crystal phase of the product was confirmed by XRD. The ZIF-8 product was characterized by FTIR, FE-SEM, and TEM. The interaction of CO<sub>2</sub> and ZIF-8 was determined through experimentally via ex-situ FTIR and theoretically by modeling with the Density Functional Theory (DFT) approach.

The results showed that CTAB-ZIF-8 material has been successfully synthesized through conventional methods at room temperature in the form of white powder solids with high crystallinity measuring  $\pm 64$  nm based on average size distribution of FE-SEM images. The XRD peak values of CTAB-ZIF-8 material were observed at  $2\theta$  7.35° correspond to the (110) planes, which indicated the rhombic dodecahedron morphology which is consistent with the FE-SEM and TEM images. The addition of CTAB did not lead to structural changes in ZIF-8 as evidence by the unit cell value of 16.991 Å which undergo insignificant changes. The size calculation results with Williamson-Hall plot ranges around 40-80 nm which is closely resembles from the average size of the FE-SEM image. The formation of ZIF-8 was also observed from the presence of additional peak at 421 cm<sup>-1</sup> in the IR spectra indicating the coordination between Zn<sup>2+</sup> and 2-methylimidazolate. Based on DFT calculations, it is known that a stable intermolecular interaction between CO<sub>2</sub> molecules and CTAB-ZIF-8 occurs at the position of CO<sub>2</sub> molecules close to the imidazole and CTAB groups and its interaction energy was -45.8 kJ / mol.

Keywords : CTAB, DFT, metal-organic frameworks, ZIF-8