

**SINTESIS ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK (ZIF-8)  
TERMODULASI NaCl DALAM PELARUT METANOL DAN STUDI  
TEORITIK INTERAKSINYA DENGAN CO<sub>2</sub>**

Amarilis Aliefa  
19/439167/PA/18990

**INTISARI**

Sintesis *zeolitic imidazole framework* (ZIF-8) dan ZIF-8 termodulasi dengan NaCl telah dilakukan. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji pengaruh konsentrasi NaCl pada ZIF-8 dan aplikasinya sebagai adsorben gas CO<sub>2</sub>. Penelitian diawali dengan sintesis ZIF-8 menggunakan metode *direct precipitation* dengan prekursor zink nitrat heksahidrat dan 2-metilimidazol menggunakan metanol sebagai pelarut. Modifikasi ZIF-8 dilakukan dengan konsentrasi NaCl sebesar 0,3; 0,7; 1,0; dan 2,0 mmol. Material hasil sintesis dikarakterisasi dengan FTIR, XRD, SEM-EDX, dan TEM, sedangkan interaksi antara ZIF-8 dan NaCl@ZIF-8 dengan CO<sub>2</sub> dipelajari dari aspek kimia komputasi.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa material ZIF-8 dan NaCl@ZIF-8 telah berhasil disintesis melalui metode *direct precipitation* dengan karakteristik berupa padatan serbuk berwarna putih dengan kristalinitas tinggi dan rata-rata unit sel sebesar 16,993 Å. Keberadaan NaCl menyebabkan disorientasi pada susunan atom kristal ZIF-8 dibuktikan dengan pergeseran puncak 7,4; 12,8; dan 18,2° ke sudut difraksi yang lebih besar. Analisis *Williamson-Hall* plot menunjukkan bahwa ZIF-8 dan NaCl@ZIF-8 tergolong ke dalam nanokristal dengan ukuran berkisar antara 63-92 nm dan kemungkinan adanya *defect* akibat penambahan NaCl dibuktikan dengan regangan kisi NaCl@ZIF-8 yang lebih kecil daripada ZIF-8. Penambahan NaCl tidak merubah morfologi ZIF-8 yang berupa *rhombic dodecahedron*, tetapi terjadi peningkatan ukuran diameter rata-rata didasari oleh citra SEM-EDX dan TEM. Karakterisasi FTIR menunjukkan adanya daerah serapan CO<sub>2</sub> pada bilangan gelombang 644 cm<sup>-1</sup> yang merupakan vibrasi tekuk dari CO<sub>2</sub>. Berdasarkan aspek kimia komputasi, kehadiran molekul NaCl dapat menambah situs adsorpsi tambahan ketika CO<sub>2</sub> ditempatkan di dekat NaCl dan secara tidak langsung dapat menstabilkan struktur karena adanya penurunan energi interaksi.

Kata kunci: ZIF-8, NaCl, karbon dioksida

**SYNTHESIS OF ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK (ZIF-8)  
MODULATED WITH NaCl IN METHANOL AND THEORITICAL  
STUDIES ON ITS INTERACTION WITH CO<sub>2</sub>**

Amarilis Aliefa  
19/439167/PA/18990

**ABSTRACT**

Synthesis of zeolitic imidazole framework (ZIF-8) and ZIF-8 modulated with NaCl have been carried out. This research aims to examined the effect of NaCl on ZIF-8 and its application as an adsorbent for CO<sub>2</sub> gas. The research began with the synthesis of ZIF-8 using the direct precipitation method with zinc nitrate hexahydrate and 2-methylimidazole using methanol as solvent. Modification of ZIF-8 was carried out by concentration of NaCl 0.3; 0.7; 1.0; and 2.0 mmol. The synthesized material was characterized by FTIR, XRD, SEM-EDX, and TEM, while the interactions between ZIF-8 and NaCl@ZIF-8 with CO<sub>2</sub> were observed from computational perspective.

The results showed that the ZIF-8 and NaCl@ZIF-8 materials were successfully synthesized using direct precipitation method and had the characteristic of a white solid powder with high crystallinity and average unit cell of 16.993 Å. The presence of NaCl caused disorientation in the atomic arrangement of the ZIF-8 crystals as evidenced by a peak shift of 7.4; 12.8; and 18.2° to larger diffraction angles. Williamson-Hall plot analysis showed that ZIF-8 and NaCl@ZIF-8 belong to nanocrystals with sizes around 63-92 nm and the possibility of defect due to addition of NaCl proved by the lattice strain of NaCl@ZIF-8 smaller than ZIF-8. The addition of NaCl did not change the morphology of ZIF-8 which was rhombic dodecahedron, but there was an increment in diameter size based on the average particle distribution from SEM-EDX and TEM. FTIR characterization showed that there was a CO<sub>2</sub> absorption area at 644 cm<sup>-1</sup> which was the bending vibration of CO<sub>2</sub>. Based on computational chemistry aspects, the presence of NaCl molecule can added additional adsorption sites when CO<sub>2</sub> placed near NaCl and can indirectly stabilized the structure due to decrement in interaction energy.

Keywords: ZIF-8, NaCl, carbon dioxide