

SINTESIS ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK (ZIF-8) MENGUNAKAN LIGAN CAMPURAN DAN INTERAKSINYA DENGAN CO₂: STUDI EKSPERIMENTAL DAN TEORITIS

Ukhti Chusnawati
19/445688/PA/19512

INTISARI

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan modifikasi ZIF-8 dengan menggunakan campuran dua ligan yaitu 2-metilimidazol (2-MeIm) dan 2-etilimidazol (2-EtIm) untuk menghasilkan *mixed-linker* ZIF-8, melakukan kajian awal studi interaksi CO₂ pada material *mixed-linker* ZIF-8, dan mempelajari pemodelan interaksi antara ZIF-8 dan CO₂ dengan metode DFT. Penelitian diawali dengan preparasi ZIF-8 menggunakan Zn(NO₃)₂·6H₂O, 2-MeIm, 2-EtIm, dan akuades. Sintesis dilakukan pada suhu ruang kemudian didiamkan pada vial tertutup selama 24 jam. Endapan yang diperoleh disaring dan dikeringkan dalam oven pada suhu 60°C selama 24 jam. Selanjutnya material dikarakterisasi dengan FTIR, XRD, SEM, dan TEM. Studi interaksi dengan CO₂ dilakukan melalui ex situ FT-IR dengan menggunakan material ZIF-8 pada vial tertutup dan gas CO₂ dialirkan menuju adsorben dengan laju alir ≤ 100 mL menit⁻¹ selama 5 menit. Studi interaksi antara *mixed-linker* ZIF-8 dengan CO₂ juga dipelajari dari aspek kimia komputasi.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa material *mixed-linker* ZIF-8 telah berhasil disintesis dan menghasilkan karakteristik material berupa padatan kristal berwarna putih dengan kristalinitas tinggi dan rata-rata unit sel sebesar 16,993 Å. Keberadaan dua ligan menyebabkan disorientasi dan terjadi pergeseran puncak difraktogram pada 2θ 7,4 dan 12,8°. Analisis Williamson-Hall (W-H) plot menunjukkan bahwa *mixed-linker* ZIF-8 tergolong dalam nanokristal dengan ukuran 72-126 nm dan kemungkinan adanya dua ligan berbeda mengakibatkan *defect* akibat semakin besarnya nilai regangan kisi. Penambahan dua ligan tidak berpengaruh secara signifikan terhadap morfologi dan struktur kristal yang berupa *rhombic dodecahedron*, tetapi terjadi penurunan ukuran diameter rata-rata seiring bertambahnya jumlah ligan 2-EtIm berdasarkan gambar SEM. Spektra IR yang ditunjukkan pada daerah pita serapan 644 cm⁻¹ menandakan adanya vibrasi tekuk CO₂. Berdasarkan studi komputasi, kehadiran dua ligan dapat menambah situs adsorpsi ketika CO₂ ditempatkan dekat dengan dua ligan dan secara tidak langsung dapat menstabilkan struktur karena semakin kecilnya energi interaksi.

Kata kunci: DFT, *mixed-linker*, sintesis MOF, ZIF-8.

SYNTHESIS OF ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK (ZIF-8) USING MIXED LIGANDS AND ITS INTERACTIONS WITH CO₂: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY

Ukhti Chusnawati
19/445688/PA/19512

ABSTRACT

This research aims to modify ZIF-8 by using a mixture of two ligands, namely 2-methylimidazole (2-MeIm) and 2-ethylimidazole (2-EtIm) to produce mixed-linker ZIF-8, conducting a preliminary study of CO₂ interaction studies on mixed-linker ZIF-8, and modeling the interaction between ZIF-8 and CO₂ using the density functional theory (DFT) method. The research was begun with the preparation of ZIF-8 material using Zn(NO₃)₂·6H₂O, 2-MeIm, 2-EtIm, and distilled water. Synthesis was carried out at room temperature and then left in a closed vial for 24 hours. The precipitate was filtered and dried in an oven at 60°C for 24 hours. Next, the material was characterized by FTIR, XRD, SEM, and TEM. The interaction study between ZIF-8 and CO₂ was carried out via ex situ FT-IR in a closed vial and CO₂ gas was flowed towards the adsorbent at a flow rate of ≤100 mL min⁻¹ for 5 minutes. The interaction study between mixed-linker ZIF-8 and CO₂ was also studied by DFT method.

The research results show that the ZIF-8 mixed-linker material has been successfully synthesized and produces material characteristics in the form of a white crystalline solid with high crystallinity and an average unit cell of 16.993 Å. The presence of two ligands causes disorientation and a peak shift occurs at 2θ of 7.4 and 12.8°. Williamson-Hall (W-H) plot analysis shows that the mixed-linker ZIF-8 belongs to nanocrystals with a size of 72-126 nm and the possibility of the presence of two different ligands causes defects due to the increasing value of the lattice strain. The addition of two ligands did not have a significant effect on the morphology and crystal structure in the form of a rhombic dodecahedron, but there was a decrease in the average diameter as the number of 2-EtIm ligands increased based on SEM images. The IR spectrum shown in the 644 cm⁻¹ absorption band area indicates the presence of CO₂ bending vibrations. Based on computational studies, the presence of two ligands can increase adsorption site when CO₂ is placed close to the two ligands and can indirectly stabilize the structure due to the smaller interaction energy.

Keywords: DFT, mixed-linker, MOFs synthesis, ZIF-8