

PENGARUH PENAMBAHAN CTAB PADA SINTESIS ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK (ZIF-8) DAN INTERAKSINYA DENGAN GAS CO₂: TINJAUAN EKSPERIMEN DAN TEORITIS

Nadiyah Sekar Pratiwi
19/445678/PA/19502

INTISARI

Penelitian ini bertujuan untuk melakukan sintesis dan karakterisasi modifikasi ZIF-8 dengan menambahkan surfaktan CTAB, melakukan pengujian adsorpsi CO₂ pada material ZIF-8 dan CTAB@ZIF-8 serta mempelajari interaksi antara ZIF-8 termodifikasi CTAB dengan CO₂ menggunakan permodelan DFT. Terdapat dua metode penelitian yang dilakukan yaitu eksperimental dan komputasi. Prosedur penelitian eksperimental dilakukan dengan mensintesis kristal ZIF-8 dan CTAB@ZIF-8. Sintesis kristal dilakukan pada suhu kamar dan didiamkan selama 24 jam hingga terbentuk koloid. Hasil sintesis didapatkan melalui penyaringan kemudian dikeringkan menggunakan oven selama 24 jam pada suhu 60°C. Hasil sintesis selanjutnya dikarakterisasi dengan spektrofotometer FT-IR, XRD, SEM dan TEM. Sementara itu, prosedur komputasi dilakukan dengan menggunakan metode komputasi berbasis *Density Functional Theory* (DFT). Permodelan molekul yang dibuat antara lain, kluster ZIF-8, kluster CTAB@ZIF-8 dengan penambahan molekul CO₂ dan H₂O. Pengujian adsorpsi CO₂ dilakukan dengan mengalirkan gas CO₂ ke dalam vial yang berisi kristal dengan laju alir maksimal 80 mL menit⁻¹ selama 5 menit. Setelah pengujian gas CO₂, sampel selanjutnya dikarakterisasi dengan spektrofotometer FT-IR.

Berdasarkan hasil penelitian, material CTAB@ZIF-8 berhasil disintesis melalui metode konvensional dalam bentuk berupa padatan kristal berwarna putih. Pola difraksi XRD kristal CTAB@ZIF-8 pada sudut difraksi (2θ) sekitar 12,8° pada bidang (110) dengan bentuk morfologi *truncated cubes* yang telah sesuai dengan hasil karakterisasi dari SEM-EDX, FE-SEM dan TEM. Distribusi ukuran rata-rata kristal dari citra SEM-EDX dan FE-SEM adalah sebesar ±79 nm. Penambahan CTAB tidak merubah struktur pada ZIF-8 dengan nilai unit sel sebesar 16,991 Å yang menandakan tidak terbentuknya fase kristal baru. Hasil perhitungan ukuran kristal dengan Williamson-Hall plot berkisar antara 173-198 nm. Pembentukan fase kristal ZIF-8 teramati pada bilangan gelombang 421 cm⁻¹. Kalkulasi DFT pada energi interaksi ditunjukkan oleh struktur yang memiliki posisi lebih stabil yaitu CTAB@ZIF-8 dengan CO₂ dan H₂O yang dekat dengan gugus 2-metilimidazol menghasilkan energi interaksi sebesar -45,7 kJ/mol.

Kata kunci: CTAB, DFT, MOF, ZIF-8.

**THEORITICAL AND EXPERIMENTAL STUDY: THE EFFECT OF
ADDITIONAL CTAB ON THE SYNTHESIS OF ZEOLITIC
IMIDADOLATE FRAMEWORK (ZIF-8) USING WATER SOLVENTS ON
THEIR APPLICATION IN CO₂ GAS ADSORPTION**

Nadiyah Sekar Pratiwi
19/445678/PA/19502

ABSTRACT

This research aims to synthesize and characterize modified ZIF-8 by adding CTAB surfactant, conducting CO₂ adsorption test on ZIF-8 and CTAB@ZIF-8 materials and study the interaction between CTAB modified ZIF-8 and CO₂ using DFT modeling. There are two methods of research: experimental and computational. The experimental research procedure was carried out by synthesizing ZIF-8 and CTAB@ZIF-8 crystals. The crystal synthesis was performed at room temperature and then inhabited for 24 hours until a colloid was formed. The results are obtained by filtering and then dried in the oven for 24 hour at 60°C. The results of the synthesis is characterized by FT-IR, XRD, SEM and TEM. Meanwhile, the computational procedures are performed using DFT (Density Functional Theory) based computational methods. The molecular modeling was made, among other things, cluster ZIF-8, cluster CTAB@ZIF-8 with the addition of molecules CO₂ and H₂O. CO₂ adsorption testing was carried out by flowing CO₂ gas into a vial containing the crystal at a flow rate of maximal 80 mL minute⁻¹ for 5 minutes. After testing the gas CO₂, the sample was further characterized by the FT-IR spectroscopic photometer.

Based on the results, the CTAB@ZIF-8 material was successfully synthesized by conventional methods in the form of a solid white crystal. The CTAB@ZIF-8 XRD crystal diffraction pattern is at a diffraction angle (2θ) of approximately 12.8° at the field (110) with the morphological shape of truncated cubes that has corresponded to the characterization results of SEM-EDX, FE-SEM and TEM. The average crystal size distribution of the SEM-EDX and FE-SEM images is ± 79 nm. The addition of CTAB does not change the structure of ZIF-8 with a cell unit value of 16,991 Å indicating no new crystal phase formation. The result of the calculation of the size of the crystal with the Williamson-Hall plot ranges between 173-198 nm. The ZIF-8 crystal phase formation was observed at a wave number of 421 cm⁻¹. The calculation of DFT on the energy of interaction is shown by a structure that has a more stable position, CTAB@ZIF-8 with CO₂ and H₂O close to the 2-methylimidazole group, producing interaction energy of -45,7 kJ/mol.

Keywords: CTAB, DFT, MOF, ZIF-8.