

**KAJIAN STRUKTUR MATERIAL *METAL-ORGANIC FRAMEWORK*  
Zn-MOF-74 TERSUBSTITUSI PARSIAL DENGAN LOGAM ALKALI  
TANAH DAN INTERAKSINYA DENGAN CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, DAN NO<sub>2</sub>  
MENGUNAKAN METODE *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Muhammad Rifqi Najib

19/445675/PA/19499

**INTISARI**

Telah dilakukan kajian teoritis menggunakan *density functional theory* (DFT) untuk memodifikasi Zn-MOF-74 sebagai adsorben gas buang. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji struktur logam ganda pada M/Zn-MOF-74 (M= Be, Mg, Ca, Sr, Ba) dan mempelajari pengaruhnya terhadap struktur, kestabilan relatif, sifat elektronik, dan interaksi *host-guest* terhadap molekul CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, dan NO<sub>2</sub>. Penelitian dilakukan dengan mensubstitusi salah satu ion Zn<sup>2+</sup> pada Zn-MOF-74 dengan ion logam alkali tanah menjadi M/Zn-MOF-74. Pemodelan molekul dilakukan dengan memperhatikan sifat periodisitas dari struktur MOF dengan tahapan geometri optimasi dan perhitungan *single point energy*. Penelitian ini dilakukan menggunakan metode DFT dengan fungsional *Perdew-Burke-Ernzerhof* (PBE) untuk perhitungan optimasi. Kemudian perhitungan *single point energy* dilakukan menggunakan fungsional PBE dan *Heyd-Scuseria-Ernzerhof* (HSE). Kajian interaksi *host-guest* dilakukan dengan menambahkan molekul CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, dan NO<sub>2</sub> pada material MOF.

Hasil penelitian menunjukkan substitusi ion Zn<sup>2+</sup> dengan ion logam M<sup>2+</sup> mempengaruhi volume kisi dengan peningkatan secara bertahap sebanding dengan peningkatan radius ion logam M<sup>2+</sup>. Kestabilan relatif di setiap variasi posisi tidak memberikan perbedaan yang signifikan menunjukkan kemungkinan ion logam M<sup>2+</sup> mensubstitusi ion Zn<sup>2+</sup> di berbagai posisi dalam sistem periodik yang sama. Energi celah pita pada M/Zn-MOF-74 bervariasi di antara 2,84 - 3,08 eV. Analisis *density of states* (DOS) terhadap Zn-MOF-74 dan M/Zn-MOF-74 tidak menunjukkan perbedaan yang signifikan mengindikasikan substitusi ion logam tidak merusak kerangka MOF. Interaksi Ca/Zn-MOF-74 dengan molekul NO<sub>2</sub> memberikan kestabilan tertinggi disusul oleh kompleks Mg/Zn-MOF-74 dengan H<sub>2</sub>O dan kompleks Ca/Zn-MOF-74 dengan CO<sub>2</sub> berturut-turut. Oleh karena itu, gas buang yang paling mungkin untuk berinteraksi dengan M/Zn-MOF-74 adalah NO<sub>2</sub> > H<sub>2</sub>O > CO<sub>2</sub>.

Kata kunci: Adsorpsi, *density functional theory*, logam alkali tanah, Zn-MOF-74

**STRUCTURAL STUDY OF METAL-ORGANIC FRAMEWORKS  
Zn-MOF-74 PARTIAL SUBSTITUTED WITH EARTH ALKALINE  
METAL AND THEIR INTERACTION WITH CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, AND NO<sub>2</sub> USING  
DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD**

Muhammad Rifqi Najib

19/445675/PA/19499

**ABSTRACT**

Theoretical study using *density functional theory* (DFT) to modify Zn-MOF-74 as a flue gas adsorbent has been conducted. This research aims to design M/Zn-MOF-74 (M = Be, Mg, Ca, Sr, Ba) and investigate their effects on structure, relative stability, electronic properties, and host-guest interactions with CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, and NO<sub>2</sub> molecules. The research was performed on Zn-MOF-74 by substituting one of the Zn<sup>2+</sup> ions with an alkaline earth metal ion to obtain M/Zn-MOF-74. Molecular modeling is carried out by taking into account the periodicity properties of the MOF structure with geometry optimization and calculation of the *single point energy*. This research was conducted using the DFT method with Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) functional for optimization. Subsequently, single point energy calculations were performed using both PBE and Heyd-Scuseria-Ernzerhof (HSE) functionals. The investigation of host-guest interactions was executed by docking CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, and NO<sub>2</sub> molecule into the MOF material.

The research results indicate that substituting Zn<sup>2+</sup> ion with M<sup>2+</sup> ion affects the unit cell volume, gradually increasing in proportion to the increasing radius of the M<sup>2+</sup> ion. The relative stability at each substitution position shows no significant differences, indicating the potential for M<sup>2+</sup> ion to substitute Zn<sup>2+</sup> ion at various positions within the same periodic system. The band gap energy in M/Zn-MOF-74 ranges from 2.84 to 3.08 eV. Analysis of the density of states (DOS) for Zn-MOF-74 and M/Zn-MOF-74 shows no significant differences, indicating that metal ion substitution does not disrupt the MOF framework. The interaction of Ca/Zn-MOF-74 with NO<sub>2</sub> provides the highest stability, followed by the Mg/Zn-MOF-74 complex with H<sub>2</sub>O, and the Ca/Zn-MOF-74 complex with CO<sub>2</sub>, respectively. Therefore, exhaust gas most likely to interact with M/Zn-MOF-74 are NO<sub>2</sub> > H<sub>2</sub>O > CO<sub>2</sub>.

Keywords: Adsorption, *density functional theory*, earth alkaline metal, Zn-MOF-74