

SINTESIS DAN KARAKTERISASI ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK-8 (ZIF-8) SERTA APLIKASINYA SEBAGAI ELEKTRODA BATERAI LITIUUM ION

Tika Dwi Utari
19/445687/PA/19511

INTISARI

Pada penelitian ini, telah dilakukan sintesis dan karakterisasi *Zeolitic Imidazolate Frameworks-8* (ZIF-8) yang digunakan sebagai elektroda pada baterai litium ion. Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui aktivitas elektrokimia dari ZIF-8 sebagai elektroda baterai litium ion, serta untuk mengetahui interaksi yang terjadi antara ZIF-8 dengan ion litium dalam kerangka ZIF-8. Penelitian diawali dengan mensintesis ZIF-8 menggunakan metode solvotermal, dengan $Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$ dan 2-metilimidazol sebagai prekursor dan metanol sebagai pelarut. Analisis elektrokimia elektroda ZIF-8 dilakukan menggunakan baterai koin setengah sel (*half-cell*) 2032 dengan *lithium foil* sebagai elektroda *counter*. Setelah itu dilakukan juga pemodelan menggunakan metode DFT untuk mengetahui interaksi antara ion litium dengan ZIF-8.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa ZIF-8 berhasil disintesis pada suhu ruang dengan wujud berupa serbuk berwarna putih. Hasil analisis XRD menunjukkan ZIF-8 hasil sintesis memiliki kristalinitas tinggi dengan unit sel $16,992 \text{ \AA}$ dari analisis *Le-bail fitting*. ZIF-8 hasil sintesis memiliki karakteristik morfologi dedokahedron dan ukuran partikel rata-rata 55-60 nm dengan luas permukaan BET ZIF-8 sebesar $990,9 \text{ m}^2/\text{g}$. Analisis elektrokimia elektroda ZIF-8 menunjukkan reversibilitas yang cukup baik berdasarkan voltamogram. Pada siklus pertama dalam voltamogram muncul puncak *Solid Electrolyte Interface (SEI)* sekitar puncak 0,005; 0,58; dan 1,28 V. Hasil analisis EIS elektroda ZIF-8 memiliki memiliki Rp sebesar 303 \Omega memungkinkan terjadinya transfer muatan antara elektrolit dengan elektroda ZIF-8. Hasil perhitungan DFT menunjukkan ion litium yang disisipkan ke dalam ZIF-8 mengakibatkan penyusutan kerangka ZIF-8, sedangkan substitusi ion litium ke dalam kerangka ZIF-8 menyebabkan ekspansi kerangka ZIF-8. Posisi ion Li pada ZIF-8 yang ideal adalah ketika menempel pada atom N gugus imidazol (ZIF-8₂).

Kata kunci : Baterai litium ion, DFT, elektroda, ZIF-8.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK-8 (ZIF-8) AND ITS APPLICATION AS LITHIUM-ION BATTERY ELECTRODE

Tika Dwi Utari
19/445687/PA/19511

ABSTRACT

In this research, Zeolitic Imidazolate Frameworks-8 (ZIF-8) has been synthesis and analyzed as a lithium-ion battery electrode. This study aims to assess the electrochemical behavior of ZIF-8 as a lithium-ion battery electrode and to understand the interactions that occur between ZIF-8 and lithium ions in the ZIF-8 framework. The research begins by synthesizing ZIF-8 using solvothermal method, with $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ and 2-methylimidazole as precursor and methanol as solvent. Electrochemical analysis of ZIF-8 electrodes was carried out using a 2032 half-cell coin battery with lithium foil as the counter electrode. After that, modeling using DFT was carried out to determine the interaction between lithium ions and ZIF-8.

The results showed that ZIF-8 was successfully synthesized at room temperature as a white powder. XRD analysis showed that the synthesized ZIF-8 has high crystallinity with a unit cell of 16,992 Å from the Le-bail fitting analysis. The synthesized ZIF-8 has a characteristic of dodecahedron morphology and an average particle size of 55-60 nm with a BET surface area of 990,9 m²/g. Electrochemical analysis of ZIF-8 electrodes showed good reversibility based on voltammograms. SEI peaks appeared around 0,005; 0,58; dan 1,28 V. The results of EIS analysis of ZIF-8 electrodes have an R_p of 303 Ω allowing charge transfer between the electrolyte and the ZIF-8 electrode. The DFT results show that lithium ions inserted into ZIF-8 result in the shrinkage of the ZIF-8 framework. In contrast, substituting lithium ions into the ZIF-8 framework causes the expansion of the ZIF-8 framework. The ideal Li-ion position in ZIF-8 is when it is attached to the nitrogen atom of the imidazole group (ZIF-8₂).

Keyword : DFT, electrode, Li-ion battery, ZIF-8.