

PENGARUH MODULASI ASAM BENZOAT PADA PERTUMBUHAN KRISTAL ZIF-67 DALAM APLIKASI KONVERSI GAS CO₂ MENJADI SENYAWA BERNILAI TAMBAH

Clarasakti Suryani Gollu
21/479759/PA/20807

INTISARI

Sintesis *Zeolitic Imidazolate Framework-67* (ZIF-67) dan ZIF-67 termodulasi asam benzoat dengan variasi rasio konsentrasi molar telah dilakukan secara eksperimental dan teoritis. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji karakteristik ZIF-67 serta efektivitasnya sebagai katalis dalam proses konversi CO₂. Karakteristik material hasil sintesis dikonfirmasi dengan karakterisasi XRD yang dilanjutkan dengan FTIR, UV-Vis, FE-SEM, dan SAA. Efektivitas pada aplikasi katalisis dikonfirmasi dengan karakterisasi H-NMR. Interaksi antara ZIF-67 dengan asam benzoat dianalisis lebih lanjut dengan menggunakan pendekatan *Density Functional Theory* (DFT).

Hasil penelitian menunjukkan bahwa modulasi ZIF-67 dengan penambahan asam benzoat berdampak pada morfologi dan fase kristal ZIF-67, serta berpengaruh terhadap proses konversi CO₂. Karakterisasi menggunakan XRD, FTIR, FE-SEM, SAA, dan UV-Vis menunjukkan adanya perubahan signifikan pada struktur dan morfologi material yang mengurangi jumlah dan distribusi situs aktif. Hasil ini diperkuat dengan pendekatan DFT yang menunjukkan adanya kompetisi antara ligan 2-metilimidazolate dan asam benzoat yang mempengaruhi stabilitas struktur material. Material ZIF-67 pristine menunjukkan konversi CO₂ tertinggi sebesar 51%, sementara material yang dimodulasi dengan asam benzoat pada konsentrasi 0,5 mmol, 2 mmol, dan 10 mmol hanya menghasilkan konversi CO₂ berturut-turut sebesar 15%, 17%, dan 15%. Hal ini menunjukkan bahwa perubahan struktur karena penambahan asam benzoat mengurangi efektivitas katalis dalam proses konversi CO₂.

Kata kunci: asam benzoat, DFT, konversi CO₂, ZIF-67.

THE EFFECT OF BENZOIC ACID MODULATION ON ZIF-67 CRYSTAL GROWTH IN THE APPLICATION OF CO₂ GAS CONVERSION INTO VALUE-ADDED COMPOUNDS

Clarasakti Suryani Gollu
21/479759/PA/20807

ABSTRACT

The synthesis of Zeolitic Imidazolate Framework-67 (ZIF-67) and ZIF-67 modulated with benzoic acid at varying molar concentration ratios has been conducted experimentally and theoretically. This study aims to investigate the characteristics of ZIF-67 and its effectiveness as a catalyst in the CO₂ conversion process. The characteristics of the synthesized material were confirmed through XRD characterization, followed by FTIR, UV-Vis, FE-SEM, and SAA. Catalytic effectiveness was confirmed with H-NMR characterization. The interaction between ZIF-67 and benzoic acid was further analyzed using a Density Functional Theory (DFT) approach.

The results show that modulation of ZIF-67 with the addition of benzoic acid affects the morphology and crystal phase of ZIF-67 and influences the CO₂ conversion process. Characterization using XRD, FTIR, FE-SEM, SAA, and UV-Vis reveals significant changes in the structure and morphology of the material, which reduce the number and distribution of active sites. This finding is supported by the DFT approach, which shows competition between the 2-methylimidazolate ligand and benzoic acid, affecting the stability of the material structure. The ZIF-67 pristine material exhibited the highest CO₂ conversion at 51%, while materials modulated with benzoic acid at concentrations of 0.5 mmol, 2 mmol, and 10 mmol only resulted in CO₂ conversions of 15%, 17%, and 15%, respectively. This indicates that the structural changes due to the addition of benzoic acid reduce the catalyst effectiveness in the CO₂ conversion process.

Keywords: benzoic acid, DFT, CO₂ conversion, ZIF-67.