

SINTESIS DAN KARAKTERISASI ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK-67 (ZIF-67) TERMODIFIKASI LOGAM Mg SEBAGAI KATALIS FIKSASI CO₂

Dea Aryana Lestari
21/480144/PA/20844

INTISARI

Telah dilakukan penelitian mengenai sintesis dan karakterisasi *Zeolitic Imidazolate Framework-67* (ZIF-67), modifikasi ZIF-67 dengan logam magnesium (Mg@ZIF-67), serta aplikasinya sebagai katalis dalam reaksi fiksasi CO₂. Penelitian ini bertujuan untuk mengkaji metode sintesis ZIF-67 dan yang termodifikasi dengan logam Mg (Mg@ZIF-67), mempelajari struktur dan morfologi kristal, serta menilai efektivitas material sebagai katalis untuk reaksi fiksasi CO₂. ZIF-67 dan Mg@ZIF-67 disintesis melalui metode non-solvothermal dengan prekursor utama kobalt nitrat heksahidrat dan 2-metilimidazolat dalam pelarut metanol. Sintesis Mg@ZIF-67 dilakukan dengan penambahan variasi molar magnesium nitrat heksahidrat dengan rasio molar Co:Mg (2:0,125; 2:0,375; 2:0,625; 2:0,875; 2:2; 1:2 dan 0:2). Material hasil sintesis dikarakterisasi dengan XRD, FTIR, dan FE SEM-EDX. Aplikasi ZIF-67 dan Mg@ZIF-67 sebagai katalis reaksi fiksasi CO₂ dilakukan dengan menguji keberhasilan konversi reaksi fiksasi CO₂ dengan reaktan epiklorohidrin dan produk yang terbentuk adalah karbonat kloropropilena.

Hasil karakterisasi material menunjukkan ZIF-67 dan Mg@ZIF-67 berhasil disintesis. Penambahan Mg tidak menyebabkan perubahan struktur pada ZIF-67 yang dapat dilihat dari ukuran kisi melalui *Le Bail refinement*. Spektra FTIR, kerangka ZIF pada Mg@ZIF-67 terutama Co–N pada puncak 424,34 cm⁻¹ tidak mengalami pergeseran, ini menunjukkan bahwa kerangka dasar ZIF-67 tetap utuh dan tidak mengalami kerusakan. Morfologi kristal ZIF-67 dan Mg@ZIF-67 berupa struktur sodalit dodekahedral. Diameter rata-rata kristal ZIF-67 adalah 360 nm, sedangkan Mg@ZIF-67 memiliki diameter rata-rata kristal sebesar 597–667 nm, kecuali untuk variasi molar 1:2 yang memiliki diameter rata-rata 287 nm. Hasil perhitungan energi ikat menunjukkan bahwa substitusi atau inhibisi oleh Mg membuat sistem lebih reaktif dan kurang terorganisir secara kristalin. Aplikasi material menjadi katalis reaksi fiksasi CO₂ menunjukkan performa yang baik, dengan Mg@ZIF-67 pada rasio molar 2:0,875 mencapai tingkat konversi tertinggi sebesar 89,29%. Nilai ini secara signifikan lebih tinggi dibandingkan ZIF-67 murni, yang hanya menghasilkan konversi sebesar 62,89%.

Kata kunci: DFT, fiksasi CO₂, katalis, Mg@ZIF-67, ZIF-67

***SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF Mg METAL-MODIFIED
ZEOLITIC IMIDAZOLATE FRAMEWORK-67 (ZIF-67) AS A CATALYST
FOR CO₂ FIXATION***

Dea Aryana Lestari
21/480144/PA/20844

ABSTRACT

A study has been conducted on the synthesis and characterization of Zeolitic Imidazolate Framework (ZIF-67), the modification of ZIF-67 with magnesium metal (Mg@ZIF-67), and its application as a catalyst in CO₂ fixation reactions. The research aimed to evaluate the synthesis method of ZIF-67 and its magnesium-modified derivative (Mg@ZIF-67), examine their crystal structure and morphology, and assess the material's effectiveness as a catalyst for CO₂ fixation reactions. ZIF-67 and Mg@ZIF-67 were synthesized using a non-solvothermal method with cobalt nitrate hexahydrate and 2-methylimidazole as primary precursors in a methanol solvent. The synthesis of Mg@ZIF-67 was performed by varying the molar ratio of magnesium nitrate hexahydrate with Co:Mg ratios of 2:0.125; 2:0.375; 2:0.625; 2:0.875; 2:2; 1:2, and 0:2. The synthesized materials were characterized using XRD, FTIR, and FE SEM-EDX. The application of ZIF-67 and Mg@ZIF-67 as catalysts for CO₂ fixation reactions was evaluated by testing the conversion efficiency in the reaction between epichlorohydrin and CO₂, producing chloropropylene carbonate as the product.

The characterization results confirmed the successful synthesis of ZIF-67 and Mg@ZIF-67. The addition of Mg did not alter the structure of ZIF-67, as evidenced by lattice parameters determined through Le Bail refinement. FTIR spectra showed that the ZIF framework in Mg@ZIF-67, particularly the Co–N bond at 424.34 cm⁻¹, remained unchanged, indicating that the fundamental ZIF-67 framework was intact and undamaged. The crystal morphology of ZIF-67 and Mg@ZIF-67 exhibited a sodalite dodecahedral structure. The average crystal diameter of ZIF-67 was 360 nm, while Mg@ZIF-67 showed an average crystal diameter ranging from 597–667 nm, except for the 1:2 molar ratio variation, which had an average diameter of 287 nm. The binding energy calculations show that substitution or inhibition by Mg makes the system more reactive and less structurally organized as a crystal. As a catalyst for CO₂ fixation reactions, the material demonstrated excellent performance, with Mg@ZIF-67 at a Co:Mg molar ratio of 2:0.875 achieving the highest conversion rate of 89.29%. This value was significantly higher than that of pure ZIF-67, which only achieved a conversion rate of 62.89%.

Keywords: catalyst, CO₂ fixation, DFT, Mg@ZIF-67, ZIF-67