

IMOBILISASI NANOPARTIKEL PERAK PADA UiO-66 DENGAN CACAT LIGAN DAN POTENSI APLIKASINYA SEBAGAI KATALIS FIKSASI GAS CO₂ DARI EPIKLOROHIDRIN MENJADI KLOROMETIL ETILEN KARBONAT

Nabila Nur Agusti
23/524041/PPA/06556

INTISARI

Penelitian ini berfokus pada pengembangan katalis untuk reaksi fiksasi gas CO₂, menjadi senyawa klorometil etilen karbonat dari bahan baku epiklorohidrin. Material katalis ini dikembangkan dengan berbasis *Metal-Organic Framework* (MOF) UiO-66 yang dimodifikasi secara struktural. Modifikasi dilakukan dalam dua tahap: pertama, penciptaan cacat (*defect*) ligan menggunakan modulator asam format untuk menghasilkan UiO-66(D); kedua, imobilisasi nanopartikel perak (AgNPs) ke dalam kerangka UiO-66(D). Keberhasilan sintesis dan sifat material dikonfirmasi melalui karakterisasi dengan menggunakan alat XRD, FTIR, isoterm adsorpsi-desorpsi N₂, TEM, TGA-DSC, dan SR-UV, serta didukung oleh pemodelan *Density Functional Theory* (DFT) untuk mempelajari stabilitas penempatan AgNPs pada situs cacat.

Hasil karakterisasi mengonfirmasi keberhasilan sintesis material yang ditunjukkan oleh pola XRD khas UiO-66 serta morfologi kristal kubik dengan AgNPs sferis yang teramati melalui analisis SEM dan TEM. Analisis termal TGA-DSC memvalidasi modifikasi struktur dengan rumus molekul empiris Zr₆O_{6,26}(BDC)_{5,74}. Lebih lanjut, pengukuran isoterm adsorpsi-desorpsi N₂ menunjukkan adanya peningkatan luas permukaan spesifik pada sampel UiO-66(D) yang memfasilitasi aksesibilitas reaktan. Studi komputasi DFT mengungkapkan bahwa kluster Ag₃ memiliki stabilitas termodinamika tertinggi saat terimobilisasi pada situs cacat ligan. Dalam uji katalisis fiksasi CO₂ pada kondisi tekanan 1 atm selama 24 jam, katalis Ag@UiO-66(D) menunjukkan aktivitas superior dengan konversi sebesar 96,15%.

Kata kunci: DFT, fiksasi CO₂, kerangka logam-organik, UiO-66

IMMOBILIZATION OF SILVER NANOPARTICLES ON LIGAND-DEFECTIVE UiO-66 METAL-ORGANIC FRAMEWORK AND ITS POTENTIAL APPLICATION AS A CATALYST FOR CO₂ FIXATION

Nabila Nur Agusti
23/524041/PPA/06556

ABSTRACT

This study focuses on the development of a catalyst for the CO₂ fixation reaction, specifically converting epichlorohydrin into chloromethyl ethylene carbonate. The catalyst material was developed based on a structurally modified UiO-66 Metal-Organic Framework (MOF). The modification was performed in two stages: first, the creation of ligand defects using a formic acid modulator to yield UiO-66(D); and second, the immobilization of silver nanoparticles (AgNPs) onto the UiO-66(D) framework. The successful synthesis and material properties were confirmed via XRD, FTIR, N₂ adsorption-desorption isotherms, TEM, TGA-DSC, and SR-UV characterizations, supported by Density Functional Theory (DFT) modeling to investigate the stability of AgNPs deposited at the defect sites.

Characterization results confirmed the successful synthesis, indicated by the characteristic UiO-66 XRD patterns and the cubic crystal morphology with spherical AgNPs observed via SEM and TEM analysis. Thermal analysis (TGA-DSC) validated the structural modification with an empirical molecular formula of Zr₆O_{6.26}(BDC)_{5.74}. Furthermore, N₂ adsorption-desorption isotherm measurements demonstrated an increase in the specific surface area of the UiO-66(D) sample, facilitating reactant accessibility. DFT computational studies revealed that the Ag₃ cluster exhibited the highest thermodynamic stability when immobilized at the ligand defect sites. In the catalytic CO₂ fixation test under 1 atm pressure for 24 hours, the Ag@UiO-66(D) catalyst demonstrated superior activity with a conversion of 96.15%.

Keywords: CO₂ fixation, DFT, metal organic frameworks, UiO-66