UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Analisis Pengaruh Substitusi Kation Transisi Co/Ni dan Doping Ligan B(OH)2 Terhadap Penyimpanan
Hidrogen pada MOF-650 Berbasis DFT dan GCMC**
Meilafaisa Wilis Alfidia, Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M. Eng ; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

SKRIPSI **i**
HALAMAN PENGESAHAN **ii**
PERNYATAAN **iii**
HALAMAN PERSEMBAHAN **iv**
PRAKATA **iv**
DAFTAR ISI **vi**
DAFTAR TABEL **viii**
DAFTAR GAMBAR **ix**
DAFTAR LAMPIRAN **xi**
INTISARI **xii**
ABSTRACT **xiii**
BAB I PENDAHULUAN **1**
I.1 Latar Belakang 1
I.2 Tujuan Penelitian 5
I.3 Manfaat Penelitian 5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA **6**
II.1 Tinjauan Pustaka 6
II.1.1 Hidrogen dan media penyimpanannya 6
II.1.2 Mekanisme adsorpsi hidrogen pada material berpori 7
II.1.3 *Metal-Organic Framework* (MOFs) 10
II.1.4 MOF-650 12
II.1.5 *Density Functional Theory* (DFT) 14
II.1.6 *Grand Canonical Monte Carlo* (GCMC) 16
II.2 Perumusan Hipotesis dan Perancangan Penelitian 18
II.2.1 Perumusan hipotesis I 18
II.2.2 Perumusan hipotesis II 18
II.2.3 Perumusan hipotesis III 19
II.2.4 Rancangan penelitian 19
BAB III METODE PENELITIAN **21**
III.1 Peralatan Penelitian 21
III.1.1 Perangkat keras 21
III.1.2 Perangkat lunak 21
III.2 Prosedur Penelitian 21
III.2.1 Perhitungan *Density Functional Theory* (DFT) 21
III.2.2 Simulasi *Grand Canonical Monte Carlo* (GCMC) 25
III.3 Analisis Data 26
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN **27**
IV.1 Struktur MOF-650 dan MOF-650 Termodifikasi 27
IV.2 Analisis Properti Pori 31
IV.3 Analisis Muatan Parsial 34
IV.4 Visualisasi *Electrostatic Potential* (ESP) 41
IV.5 Analisis *Density of States* (DOS) 44
IV.6 Analisis Energi Pengikatan Hidrogen (*Binding Energy*) 47

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
**Analisis Pengaruh Substitusi Kation Transisi Co/Ni dan Doping Ligan B(OH)2 Terhadap Penyimpanan
Hidrogen pada MOF-650 Berbasis DFT dan GCMC**
Meilafaisa Wilis Alfidia, Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M. Eng ; Dr.rer.nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

IV.7 Analisis Kapasitas Adsorpsi Hidrogen 50
IV.8 Analisis Afinitas Tekanan Rendah (K_H) dan Panas Adsorpsi ($\boldsymbol{Qst}$) 54
IV.9 Analisis *Radial Distribution Function* (RDF) 57
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN **65**
V.1 Kesimpulan 65
V.2 Saran 66
DAFTAR PUSTAKA **67**
LAMPIRAN **72**