UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Pengaruh Kelembapan terhadap Kapasitas dan Selektivitas Adsorpsi CO2 pada MOF-5: Kajian Simulasi DFT dan GCMC
Syafira Dhita Puspita, Prof. Dr. rer. nat. Karna Wijaya, M.Eng.; Dr. rer. nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

PENGARUH KELEMBAPAN TERHADAP KAPASITAS DAN SELEKTIVITAS ADSORPSI CO_2 PADA MOF-5: KAJIAN SIMULASI DFT DAN GCMC

Syafira Dhita Puspita
22/502524/PA/21560

INTISARI

Penelitian ini bertujuan mengetahui pengaruh kelembapan terhadap kapasitas dan selektivitas adsorpsi CO_2 pada MOF-5 (IRMOF-1) menggunakan pendekatan komputasi. Struktur MOF-5 dioptimasi menggunakan metode DFT pada CP2K, kemudian distribusi muatan dianalisis menggunakan metode DDEC6 dengan Chargemol. Simulasi GCMC dengan RASPA dilakukan untuk menganalisis kapasitas adsorpsi, selektivitas, dan distribusi molekul CO_2 serta H_2O pada kondisi kering dan lembap. Interaksi adsorbat-adsorben diamati melalui perhitungan energi ikatan menggunakan DFT, sedangkan perilaku dinamis molekul dianalisis menggunakan simulasi MD melalui parameter RDF dan koefisien difusi.

Hasil penelitian menunjukkan bahwa MOF-5 memiliki karakteristik pori yang baik dengan Koefisien ruang kosong helium sebesar 0,80 (80%), luas permukaan 3790,25 $m^2\ g^{-1}$, dan ukuran pori 14,5 Å. Kapasitas adsorpsi CO_2 pada kondisi kering meningkat hingga 18,15 $mol\ kg^{-1}$ pada tekanan 20 bar, sedangkan keberadaan H_2O menyebabkan penurunan kapasitas dan selektivitas adsorpsi CO_2 secara signifikan. Energi ikatan H_2O terhadap MOF-5 (-33,55 hingga -130,47 $kJ\ mol^{-1}$) lebih kuat dibandingkan CO_2 (-25,06 hingga -38,82 $kJ\ mol^{-1}$), menunjukkan preferensi adsorpsi H_2O pada situs aktif MOF-5. Analisis RDF dan koefisien difusi mendukung bahwa H_2O mendominasi interaksi dalam pori MOF-5 dan menghambat adsorpsi CO_2 melalui mekanisme kompetisi adsorpsi.

Kata kunci: adsorpsi CO_2, MOF-5, kelembapan, simulasi DFT, simulasi GCMC.

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Pengaruh Kelembapan terhadap Kapasitas dan Selektivitas Adsorpsi CO2 pada MOF-5: Kajian Simulasi DFT dan GCMC
Syafira Dhita Puspita, Prof. Dr. rer. nat. Karna Wijaya, M.Eng.; Dr. rer. nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

EFFECT OF HUMIDITY ON CO_2 ADSORPTION CAPACITY AND SELECTIVITY IN MOF-5: A DFT AND GCMC SIMULATION STUDY

Syafira Dhita Puspita
22/502524/PA/21560

ABSTRACT

This study aimed to investigate the effect of humidity on the adsorption capacity andselectivity of CO_2 in MOF-5 (IRMOF-1) using a computational approach. The MOF-5 structure was optimized using DFT calculations implemented in CP2K, followed by charge distribution analysis using the DDEC6 method using Chargemol. GCMC simulations performed with RASPA were employed to evaluate the adsorption capacity, selectivity, andspatial distribution of CO_2 and H_2O molecules under dry and humid conditions. Adsorbate–adsorbent interactions were investigated through binding energy calculations using DFT, while the dynamic behavior of molecules within the MOF-5 pores was analyzed using MD simulations through RDF and diffusion coefficient analyses.

The results showed that MOF-5 possesses favorable porous characteristics, with a helium void fraction of 0.80, a surface area of 3790.25 $m^2 g^{-1}$, and an average pore size of 14.5 Å. The CO_2 adsorption capacity under dry conditions increased to 18.15 mol kg^{-1} at 20 bar, whereas the presence of H_2O significantly reduced both the adsorption capacity and selectivity of CO_2. The binding energy of H_2O on MOF-5 (-33.55 to -130.47 kJ mol^{-1}) was stronger than that of CO_2 (-25.06 to -38.82 kJ mol^{-1}), indicating a preferential adsorption of H_2O at the active sites of MOF-5. RDF and diffusion coefficient analyses further confirmed that H_2O dominates pore interactions and suppresses CO_2 adsorption through a competitive adsorption mechanism.

Keywords: CO_2 adsorption, DFT simulation, GCMC simulation, humidity, MOF-5.