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/**

# DAFTAR ISI

**HALAMAN PENGESAHAN** **ii**
**SURAT PERNYATAAN** **iii**
**PRAKATA** **iv**
**DAFTAR ISI** **v**
**DAFTAR TABEL** **vii**
**DAFTAR GAMBAR** **viii**
**DAFTAR LAMPIRAN** **ix**
**INTISARI** **x**
**ABSTRACT** **xi**
**BAB I PENDAHULUAN** **1**
I.1 Latar Belakang 1
I.2 Tujuan Penelitian 3
I.3 Manfaat Penelitian 4
**BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS** **5**
II.1 Tinjauan Pustaka 5
II.1.1 MOF-5 sebagai material adsorben $CO_2$ 5
II.1.2 Interaksi $CO_2$ dan $H_2O$ dalam sistem adsorpsi MOF 6
II.1.3 Simulasi GCMC dalam kajian adsorpsi gas 7
II.1.4 Metode DFT dan DDEC6 dalam analisis interaksi molekuler 8
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian 8
II.2.1 Perumusan hipotesis 1 8
II.2.2 Perumusan hipotesis 2 9
II.2.3 Rancangan penelitian 10
**BAB III METODE PENELITIAN** **11**
III.1 Bahan 11
III.2 Peralatan 11
III.3 Prosedur 12
III.3.1 Optimasi geometri struktur MOF-5 12
III.3.2 Analisis muatan parsial atom 12
III.3.3 Simulasi adsorpsi GCMC 12
III.3.4 Perhitungan energi ikatan dengan DFT 13
III.3.5 Analisis lanjutan dengan PQ Analysis 13
**BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN** **15**
IV.1 Karakteristik Pori MOF-5 15
IV.2 Simulasi Adsorpsi GCMC 18
IV.2.1 Isoterm adsorpsi $CO_2$ pada kondisi kering 18
IV.2.2 Isoterm adsorpsi $CO_2$ pada kondisi lembap 21
IV.2.3 Pengaruh kelembapan relatif (RH) terhadap adsorpsi $CO_2$ 24
IV.2.4 Selektivitas adsorpsi $CO_2/H_2O$ 26
IV.3 Analisis Energi Ikatan dengan CP2K 27
IV.3.1 Energi ikatan $CO_2$ pada MOF-5 27
IV.3.2 Energi ikatan $H_2O$ pada MOF-5 30
IV.4 Analisis Dinamika Molekul (MD) 33
IV.4.1 Radial Distribution Function (RDF) 33

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/**

IV.4.2 Koefisien Difusi (D) 35
IV.5 Pengaruh Kelembapan terhadap Kapasitas dan Selektivitas MOF-5 39
**BAB V KESIMPULAN** **42**
V.1 Kesimpulan 42
V.2 Saran 42
**DAFTAR PUSTAKA** **44**
**LAMPIRAN** **50**