Kajian DFT dan GCMC terhadap Pengaruh Fungsionalisasi ZIF-8 oleh Metilamina dan Etilendiamina pada
Adsorpsi CO2 dan Selektivitas CO2/C2H2
Asma' Nadia Hanifah, Dr. rer. nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.; Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M.Eng.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL **i**
HALAMAN PENGESAHAN **ii**
HALAMAN PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI **iii**
HALAMAN PERSEMBAHAN **iv**
PRAKATA **v**
DAFTAR ISI **vi**
DAFTAR TABEL **viii**
DAFTAR GAMBAR **ix**
DAFTAR LAMPIRAN **x**
INTISARI **xi**
ABSTRACT **xii**
BAB I PENDAHULUAN **1**
I.1 Latar Belakang 1
I.2 Tujuan Penelitian 4
I.3 Manfaat Penelitian 4
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS **5**
II.1 Tinjauan Pustaka 5
II.1.1 *Metal-Organic Frameworks* 5
II.1.2 *Zeolitic Imidazolate Framework*-8 (ZIF-8) 7
II.1.3 Fungsionalisasi ZIF-8 dengan gugus amina 8
II.1.4 Adsorpsi dan pemisahan CO_2/C_2H_2 10
II.1.5 *Density Functional Theory* (DFT) 11
II.1.6 *Grand Canonical* Monte Carlo (GCMC) 13
II.1.7 *Ideal Adsorbed Solution Theory* (IAST) 14
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian 17
II.2.1 Perumusan hipotesis 1 17
II.2.2 Perumusan hipotesis 2 17
II.2.3 Perumusan hipotesis 3 18
II.2.4 Rancangan penelitian 19
BAB III METODE PENELITIAN **21**
III.1 Bahan Penelitian 21
III.2 Alat Penelitian 21
III.3 Prosedur Penelitian 22
III.3.1 Optimasi struktur ZIF-8 22
III.3.2 Fungsionalisasi ZIF-8 dengan metilamina dan etilendiamina 23
III.3.3 Perhitungan *single point energy* dan analisis muatan parsial 23
III.3.4 Perhitungan energi adsorpsi 24
III.3.5 Analisis *Electrostatic Potential Map* (ESP) 25
III.3.6 Simulasi *Grand Canonical* Monte Carlo (GCMC) 25
III.3.7 Analisis selektivitas adsorpsi dengan IAST 27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN **28**
IV.1 Struktur dan Karakteristik ZIF-8, ZIF-8-MA, dan ZIF-8-ED 28

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Kajian DFT dan GCMC terhadap Pengaruh Fungsionalisasi ZIF-8 oleh Metilamina dan Etilendiamina pada Adsorpsi CO2 dan Selektivitas CO2/C2H2
Asma' Nadia Hanifah, Dr. rer. nat. Niko Prasetyo, S.Si., M.Sc.; Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si., M.Eng.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

IV.1.1 Validasi dan optimasi struktur ZIF-8 28
IV.1.2 Struktur ZIF-8-metilamina dan ZIF-8-etilendiamina 32
IV.2 Analisis Sifat Elektronik 35
IV.2.1 Muatan parsial (DDEC6) 35
IV.2.2 *Electrostatic Potential Map* (ESP) 37
IV.3 Energi Adsorpsi CO2 dan C2H2 39
IV.4 Karakterisasi Struktur Pori Material 45
IV.4.1 *Helium void fraction* 45
IV.4.2 Luas permukaan 47
IV.4.3 Distribusi ukuran pori 50
IV.5 Isoterm Adsorpsi CO_2 dan C_2H_2 54
IV.6 Analisis Termodinamika Adsorpsi 63
IV.7 Analisis *Radial Distribution Function* (RDF) 66
IV.8 Analisis Selektivitas CO_2/C_2H_2 70
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN **75**
V.1 Kesimpulan 75
V.2 Saran 76
DAFTAR PUSTAKA **78**
LAMPIRAN **85**