UNIVERSITAS GADJAH MADA
Pengaruh Substitusi MgÂ²? pada Kerangka ZIF-67 terhadap Interaksi CO? dan Aktivitas Katalitik Reaksi
Sikloadisi CO? ke Epoksida: Studi DFT Periodik dan Eksperimental
Muhammad Abdurrohman, Fajar Inggit Pambudi, S.Si., M.Sc., Ph.D.; Prof. Dr. Drs. Suyanta, M.Si.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

DAFTAR ISI

PRAKATA iv
DAFTAR ISI v
DAFTAR GAMBAR vii
DAFTAR TABEL 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 5
BAB II TINJAUAN PUSTAKA DAN PERUMUSAN HIPOTESIS 6
II.1 Tinjauan Pustaka 6
II.1.1 Pendekatan komputasi periodik DFT dan metode analisis adsorpsi CO_2 pada ZIF-67 6
II.1.2 ZIF-67: struktur, metode sintesis dan aplikasinya 9
II.1.3 Karbonat siklik: aplikasi dan reaksi pembentukannya 10
II.1.4 Mekanisme reaksi sikloadisi CO_2 ke epoksida dan pengaruh faset 12
II.1.5 Substitusi logam pada kerangka ZIF-67: kelayakan, keterbatasan, dan implikasi elektronik 15
II.2 Perumusan Hipotesis 19
II.2.1 Perumusan hipotesis I 19
II.2.2 Perumusan hipotesis II 19
II.2.3 Perumusan hipotesis III 20
II.3 Rancangan Penelitian 20
BAB III METODE PENELITIAN 23
III.1 Alat 23
III.1.1 Perangkat lunak komputasi dan pengolahan data karakterisasi 23
III.1.2 Peralatan laboratorium 23
III.2 Bahan 25
III.3 Prosedur 25
III.3.1 Detail komputasi 25
III.3.2 Sintesis katalis 30
III.3.3 Karakterisasi material dan analisis unsur 31
III.3.4 Uji katalitik raksi sikloadisi CO_2 ke epiklorohidrin 32
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN 33

UNIVERSITAS
GADJAH MADA
Pengaruh Substitusi MgÂ²? pada Kerangka ZIF-67 terhadap Interaksi CO? dan Aktivitas Katalitik Reaksi
Sikloadisi CO? ke Epoksida: Studi DFT Periodik dan Eksperimental
Muhammad Abdurrohman, Fajar Inggit Pambudi, S.Si., M.Sc., Ph.D.; Prof. Dr. Drs. Suyanta, M.Si.
Universitas Gadjah Mada, 2026 | Diunduh dari http://etd.repository.ugm.ac.id/

IV.1 Karakterisasi Struktur dan Sifat Elektronik $Co_{6-x}Mg_x$ ZIF-67 melalui DFT 34
IV.1.1 Validasi dan analisis parameter struktural ZIF-67 hasil optimasi DFT 34
IV.1.2 Ekuivalensi situs logam dan karakter ikatan kerangka $Co_{6-x}Mg_x$-ZIF-67 36
IV.1.3 Analisis konfigurasi isomer dan pemilihan isomer referensi untuk studi adsorpsi 39
IV.2 Studi Adsorpsi CO_2 pada $Co_{6-x}Mg_x$ ZIF-67 melalui DFT 43
IV.2.1 Analisis posisi, energi adsorpsi, dan karakter interaksi adsorpsi CO_2 pada kerangka ZIF-67 bimetalik 43
IV.2.2 Studi muatan atom dari seri kerangka ZIF-67 bimetalik 47
IV.3 Karakterisasi Struktural dan Fisikokimia Seri ZIF-67 dengan variasi kandungan Mg 48
IV.3.1 Analisis Difraksi Sinar-X (XRD) 49
IV.3.2 Komposisi aktual dan morfologi seri ZIF-67 bimetalik 53
IV.3.3 Stabilitas termal dan sifat tekstural 56
IV.4 Aktivitas Katalitik Reaksi Sikloadisi CO_2 ke Epoksida Menggunakan Seri ZIF-67 dengan Variasi Kandungan Mg 60
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN 65
V.1 Kesimpulan 65
V.2 Saran 65
DAFTAR PUSTAKA 67
LAMPIRAN 74