

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
HALAMAN PENGESAHAN	ii
PERNYATAAN BEBAS PLAGIASI	iii
HALAMAN PERSEMBAHAN	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
DAFTAR GAMBAR	viii
DAFTAR TABEL	ix
DAFTAR LAMPIRAN	x
INTISARI	xi
ABSTRACT	xii
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 Pemisahan gas dalam industri	5
II.1.2 <i>Metal-organic frameworks</i> (MOF)	6
II.1.3 <i>Zinc fluoride metal-organic framework</i> (ZnFMOF).....	8
II.1.4 Interaksi π pada benzena dan atom flour dalam pemisahan gas .	10
II.1.5 <i>Density functional tight binding</i> (DFTB).....	12
II.1.6 Simulasi <i>grand canonical</i> Monte Carlo (GCMC).....	15
II.1.7 <i>Ideal adsorbed solution theory</i> (IAST).....	17
II.2 Perumusan Hipotesis dan Rancangan Penelitian.....	20
II.2.1 Perumusan hipotesis 1	20
II.2.2 Perumusan hipotesis 2.....	20
II.2.3 Perumusan hipotesis 3.....	21
II.2.4 Rancangan penelitian	22
BAB III METODE PENELITIAN	24
III.1 Peralatan Penelitian	24

III.1.1 Perangkat keras	24
III.1.2 Perangkat lunak.....	24
III.2 Prosedur Penelitian.....	24
III.2.1 Optimasi struktur ZnFMOF	24
III.2.2 Simulasi <i>grand canonical</i> Monte Carlo (GCMC).....	25
III.2.3 Energi interaksi ZnFMOF dengan CH ₄ , n-butana, dan CO ₂	26
III.2.4 Kalkulasi <i>ideal adsorbed solution theory</i> (IAST).....	27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	29
IV.1 Optimasi Struktur ZnFMOF	29
IV.2 Kapasitas dan Isoterm Adsorpsi Gas Tunggal.....	33
IV.3 Energi Interaksi Adsorbat-Adsorben pada ZnFMOF	38
IV.4 Selektivitas Pemisahan Gas (IAST)	40
IV.5 Analisis <i>Pore Size Distribution</i> (PSD)	44
IV.6 Analisis <i>Radial Distribution Functions</i> (RDF)	46
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN	50
V.1 Kesimpulan.....	50
V.2 Saran	51
DAFTAR PUSTAKA	52
LAMPIRAN	66