

ABSTRAK

Zeolit adalah mineral non-logam dengan sifat berpori yang membuatnya dapat menangkap gas karbon dioksida. *Carbon Capture Storage* adalah teknologi untuk mengurangi emisi CO₂. Zeolit yang diberi tambahan kation MgO dianggap sebagai bahan penyimpanan yang lebih baik daripada zeolit murni. Dalam penelitian ini, interaksi CO₂ pada *MgO-doped Zeolite* menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan memperhitungkan koreksi van der Waals. Tujuan dari penelitian ini adalah untuk menentukan konfigurasi paling stabil dan mekanisme interaksi CO₂ pada *MgO-doped Zeolite*. Hasil menunjukkan bahwa konfigurasi paling stabil CO₂ pada *MgO-doped Zeolite* dicapai ketika CO₂ dekat dengan atom Si dari *MgO-doped Zeolite* pada jarak 2,2 Å. Ketika CO₂ berinteraksi dengan *MgO-doped Zeolite*, ikatan antara C dan O melemah. Hal ini terlihat adanya penurunan modulus vibrasi C – O dari 2.364,59 cm⁻¹ menjadi 2.036,94 cm⁻¹. Mekanisme transfer muatan juga diamati dalam interaksi *MgO-doped Zeolite* dengan CO₂.

Kata kunci: DFT, CCS, CO₂, *MgO-doped Zeolite*.



ABSTRACT

Zeolite is a non-metallic mineral with porous properties, which make it suitable for capturing carbon dioxide gases. Carbon Capture Storage is a technology to reduce CO₂ emissions. Zeolite doped with MgO cations is considered as a better storage material than pure zeolite. In this study, the interaction of CO₂ with MgO-doped zeolite is investigated using Density Functional Theory (DFT). The calculations also take into account van der Waals correction. The aims of this study is to determine the most stable configuration and the interaction mechanism of CO₂ with MgO-doped Zeolite. The results show that the most stable configuration of CO₂ on MgO-doped Zeolite is achieved when CO₂ is close to the Si atom of MgO-doped Zeolite, at a distance of 2.2 Å. When CO₂ interacts with MgO-doped Zeolite, the bond between C and O is weakened. This evident from the decrease of C – O stretching mode from 2,364.59 cm⁻¹ to 2,036.94 cm⁻¹. The charge transfer mechanism is also observed in interaction of MgO-doped Zeolite with CO₂.

Keyword: DFT, CCS, CO₂, MgO-doped Zeolite.

