



EFEK FLUORINASI COFs IPB TERHADAP ADSORPSI DAN PERMEABILITAS H₂O DENGAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

ALIFFA SYIFA FATHIA



**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Efek Fluorinasi COFs IPB terhadap Adsorpsi dan Permeabilitas H₂O dengan Simulasi Dinamika Molekuler” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Februari 2026

Aliffa Syifa Fathia
G4401201064

ABSTRAK

ALIFFA SYIFA FATHIA. Efek Fluorinasi pada COFs IPB terhadap Adsorpsi dan Permeabilitas H₂O dengan Simulasi Dinamika Molekuler. Dibimbing oleh NOVIYAN DARMAWAN dan YUSUF BRAMASTYA APRILIYANTO.

Emisi gas CO₂ berlebih di atmosfer mengakibatkan pemanasan global. Salah satu solusinya adalah dengan *carbon capture and storage* (CCS) menggunakan *covalent organic frameworks* (COFs). Performa COFs sering terganggu oleh kehadiran H₂O. Fluorinasi struktur COFs diharapkan meningkatkan ketahanan membran terhadap uap air. Penelitian ini bertujuan menganalisis pengaruh fluorinasi pada COFs IPB pada adsorpsi dan permeabilitas H₂O menggunakan simulasi dinamika molekuler (MD) dengan *ensemble* kanonik (NVT) pada suhu 353 K dan 5 ragam tekanan. Hasil simulasi menunjukkan IPB-2F2 berkapasitas adsorpsi H₂O yang lebih rendah secara gravimetri dibandingkan dengan IPB-2H akibat meningkatnya massa membran akibat fluorinasi. Analisis energi interaksi antarmolekul dengan *density functional theory* (DFT) menunjukkan nilai IPB-2F2 yang lebih negatif, mengindikasikan adanya interaksi kuat antarmolekul karena keberadaan atom fluorin, sehingga menurunkan laju permeasi dan koefisien difusi H₂O. Adsorpsi dan permeabilitas H₂O yang rendah pada IPB-2F2 berpotensi meningkatkan ketersediaan situs adsorpsi yang dapat diakses oleh molekul CO₂ dalam gas buang pascapembakaran sebagai aplikasi CCS di industri.

Kata kunci: adsorpsi, fluorinasi, komputasi, membran, permeabilitas

ABSTRACT

ALIFFA SYIFA FATHIA. The Effect of Fluorination on COFs IPB toward H₂O Adsorption and Permeability Using Molecular Dynamics Simulation. Supervised by NOVIYAN DARMAWAN and YUSUF BRAMASTYA APRILIYANTO.

Excessive CO₂ emissions in the atmosphere contribute to global warming. Carbon capture and storage (CCS) with covalent organic frameworks (COFs) is one proposed option. However, the presence of water frequently interferes with the performance of COFs. Fluorination of COFs is predicted to increase membrane resistance to water vapor. The purpose of this work is to investigate the influence of fluorination on IPB COFs in terms of H₂O adsorption and permeability using molecular dynamics (MD) simulations in the canonical (NVT) ensemble at 353 K and 5 pressure variations. The MD simulation findings show that IPB-2F2 has poorer gravimetric H₂O uptake than IPB-2H due to higher membrane mass caused by fluorination. Intermolecular interaction study using density functional theory (DFT) showed higher negative energies for IPB-2F2, indicating stronger intermolecular contacts produced by fluorine substitution, resulting in a lower H₂O penetration rate and diffusion coefficient. The decreased H₂O adsorptivity and permeability of IPB-2F2 may conserve accessible CO₂ adsorption sites in post-combustion flue gas, emphasizing the feasibility of fluorinated COFs IPB for CCS membrane applications in industrial contexts.

Keywords: adsorption, computational, fluorination, membrane, permeability



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2026
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



EFEK FLUORINASI COFs IPB TERHADAP ADSORPSI DAN PERMEABILITAS H₂O DENGAN SIMULASI DINAMIKA MOLEKULER

ALIFFA SYIFA FATHIA

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Kimia

**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1. Betty Marita Soebrata, S.Si., M.Si.

2. Dr. Wulan Tri Wahyuni, S.Si., M.Si.

3. Dr. Budi Arifin, S.Si., M.Si.




Judul Skripsi : Efek Fluorinasi COFs IPB terhadap Adsorpsi dan Permeabilitas H₂O dengan Simulasi Dinamika Molekuler
Nama : Aliffa Syifa Fathia
NIM : G4401201064

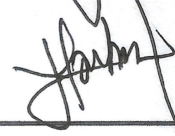
@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Disetujui oleh

Pembimbing 1:
Dr. rer. nat. Noviyan Darmawan, S.Si., M.Sc.





Pembimbing 2:
Yusuf Bramastya Apriliyanto, S.Si., M.Sc.

Diketahui oleh

Ketua Program Studi:
Prof. Dr. Dra. Dyah Iswantini Pradono M.Sc.Agr.
NIP 196707301991032001





Tanggal Ujian: 12 Februari 2026

Tanggal Lulus:



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanahu waa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Juni 2025 sampai bulan Agustus 2025 ini ialah studi komputasi dengan judul “Efek Fluorinasi COFs IPB terhadap Adsorpsi dan Permeabilitas H₂O dengan Simulasi Dinamika Molekuler”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. rer. nat. Noviyana Darmawan, S.Si., M.Sc. dan Yusuf Bramastya Apriliyanto, S.Si., M.Sc. yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada moderator seminar dan penguji luar komisi pembimbing. Di samping itu, penghargaan penulis sampaikan kepada saudara Andreas Ary Chrisna Jati S.Si yang telah membantu selama proses pengumpulan data. Selain itu, saya ucapkan terima kasih kepada kepada Ibu, Bapak, serta seluruh rekan yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Februari 2026

Aliffa Syifa Fathia



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
II METODE	4
2.1 Waktu dan Tempat	4
2.2 Alat dan Bahan	4
2.3 Prosedur Kerja	4
2.4 Analisis Data	7
III HASIL DAN PEMBAHASAN	8
IV SIMPULAN DAN SARAN	18
4.1 Simpulan	18
4.2 Saran	18
DAFTAR PUSTAKA	19
LAMPIRAN	22
RIWAYAT HIDUP	34



DAFTAR TABEL

2.3	Jumlah molekul H ₂ O dan variasi tekanan pada suhu 353 K	6
3.1	Suhu rata-rata, energi total, dan energi konfigurasi IPB-2F2 selama simulasi MD	12
3.2	Energi Coulomb dan van der Waals IPB-2F2 selama simulasi MD	12
3.3	Perbandingan laju permeasi H ₂ O pada IPB-2H dan IPB-2F2	12
3.4	Koefisien difusi dan adsorpsi H ₂ O pada 353 K	17

DAFTAR GAMBAR

1.1	Unit penyusun IPB-2H serta struktur IPB-2H dan IPB-2F2	2
2.1	<i>Supercell</i> dengan kisi Bravais berupa heksagonal dan model fragmen IPB-2H dan IPB-2F2 dilengkapi dengan pelabelan atom	5
3.1	Interaksi H ₂ O–IPB-2H dan IPB-2F2	9
3.2	Perbedaan Jenis Interaksi H ₂ O–IPB-2H dan IPB-2F2	10
3.3	Visualisasi kotak simulasi MD IPB-2F2 dengan molekul H ₂ O pada 3,18 atm	11
3.4	Permeasi gas pada 3,18 atm dan laju permeasi H ₂ O	13
3.5	Kurva perbandingan kerapatan gas sepanjang sumbu <i>z</i> IPB-2H dan IPB-2F2	14
3.6	Profil kerapatan gas sepanjang sumbu <i>z</i> pada 5,47 atm	15
3.7	Isoterm adsorpsi H ₂ O pada permukaan COFs IPB	16

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir penelitian	23
2	Muatan parsial atom COFs IPB dan geometri COFs IPB yang digunakan dalam simulasi MD	24
3	Ukuran pori efektif IPB-2H dan IPB-2F2	25
4	Parameter ILJ yang digunakan dalam simulasi MD	26
5	Energi interaksi antarmolekul H ₂ O–COFs IPB	27
6	Suhu rata-rata, energi total, energi konfigurasi (Energi van der Waals dan energi Coulomb) IPB-2H selama simulasi MD	28
7	Perbandingan adsorpsi H ₂ O dalam skala molekuler dan gravimetri	29
8	Kurva Permeasi H ₂ O pada tekanan lainnya	30
9	Kurva kerapatan H ₂ O sepanjang sumbu <i>z</i> pada tekanan lainnya	32