

PERSETUJUAN PEMBIMBING

Skripsi yang berjudul:

**Kestabilan Oksida Zirkonia (ZrO_2) yang didoping Oksida Trivalen melalui
Simulasi Atomistik**

Oleh

Triwahyuni S. Umamah

441412080

Telah diperiksa dan disetujui untuk diuji

Pembimbing I

Pembimbing II



Dr. Akram La Kilo, M.Si
NIP. 19770411 200312 1 001



Dr. Lukman A.R. Laliyo, M.Pd, MM
NIP. 19691124 199403 1 001

Mengetahui,
Ketua Jurusan Kimia



Dr. Akram La Kilo, M.Si
NIP. 19770411 200312 1 001

LEMBAR PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul : **Kestabilan Oksida Zirkonia (ZrO_2) yang didoping Oksida Trivalen melalui Simulasi Atomistik**

Oleh

Triwahyuni S. Umamah

NIM. 441 412 080

Telah dipertahankan di depan dewan Penguji

Hari/Tanggal : Jumat, 25 November 2016

Waktu : 13.00 - 14.00 WITA

Penguji:

1. **Drs. Mardjan Paputungan, M.Si**

NIP. 19600215 198803 1 001

1. 


2. **Dr. Netty Ino Ischak, M.Kes**

NIP. 19680223 199303 2 001

2. 

3. **Deasy N. Botutihe, S.Pd, M.Si**

NIP. 19841219 201404 2 001

3. 

4. **Dr. Akram La Kilo, M.Si**

NIP. 19770411 200312 1 001

4. 

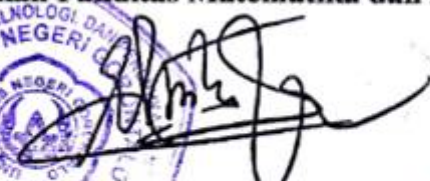
5. **Dr. Lukman A.R. Laliyo, M.Pd, MM**

NIP. 19691124 199403 1 001

5. 

Mengetahui,

Dekan Fakultas Matematika dan IPA


Prof. Dr. Hj. Evi Hulukati, M.Pd
NIP. 19600530 198603 2 001

ABSTRAK

Triwahyuni S. Umamah, 2016. Kestabilan Oksida Zirkonia (ZrO_2) yang didoping Oksida Trivalen melalui Simulasi Atomistik. Skripsi. Gorontalo: Program Studi Pendidikan Kimia, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo, Pembimbing I Dr. Akram La Kilo, M.Si dan Pembimbing II Dr. Lukman A.R. Laliyo, M.Pd, MM.

Tujuan dari penelitian ini yaitu untuk mempelajari Kestabilan struktur ZrO_2 yang didoping oksida trivalen menjadi senyawa $Zr_{1-x}M_xO_{2-\delta}$ ($M= La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+}$ dan Lu^{3+} melalui simulasi atomistik dimana konsentrasi dopan dibatasi sampai 10%. Variabel yang digunakan untuk mempelajari kestabilan adalah melalui energi kisi dan *Bond Valence Sum* (BVS). Penelitian ini bersifat teoritis eksploratif dengan menggunakan metode kimia komputasi melalui simulasi atomistik menggunakan perangkat lunak GULP (*General Utility Lattice Program*) dan VESTA (*Visualization for Electronic and Structural Analysis*). Obyek pada penelitian adalah sembilan senyawa oksida trivalen dengan data input potensial jarak pendek. Potensial jarak pendek yang digunakan dalam penelitian ini adalah Potensial Buckingham. Hasil optimasi geometri pada tekanan tetap menunjukkan bahwa parameter sel ZrO_2 induk hasil simulasi dengan hasil eksperimen berkesesuaian dengan baik karena menunjukkan perbedaan hanya sebesar 0,11%. Semakin bertambahnya konsentrasi dan ukuran dopan yang mensubstitusi ZrO_2 , energi kisi dari struktur ZrO_2 terdoping semakin positif sehingga kestabilan dari struktur ZrO_2 terdoping semakin menurun. Penurunan kestabilan ZrO_2 yang didoping Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+} dan Lu^{3+} lebih kecil dibandingkan penurunan kestabilan ZrO_2 yang didoping dengan $La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}$ dan Gd^{3+} . Hasil BVS menunjukkan bahwa struktur ZrO_2 yang didoping dengan La^{3+} tidak tepat karena memiliki perbedaan nilai valensi dan BVS lebih dari 0,1.

Kata Kunci : $Zr_{1-x}M_xO_{2-\delta}$, Energi Kisi, *Bond Valence Sum*

ABSTRACT

Triwahyuni S. Umamah, 2016. Stability of Zirconia Oxide (ZrO_2) which doped by Trivalent Oxide through Atomistic Simulations. Skripsi. Gorontalo: Study Program of Chemistry Education, Chemistry Department, Faculty of Mathematic and Natural Science, State University of Gorontalo, Principal Supervisor Dr. Akram La Kilo, M.Si and co-Supervisor Dr. Lukman A.R. Laliyo, M.Pd, MM.

The aim of this research is to study the stability of the structure of the ZrO_2 doped with trivalent oxide $Zr_{1-x}M_xO_{2-\delta}$ ($M = La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+}$ and Lu^{3+}) through simulation atomistic where the dopant concentration is limited up to 10%. The variables used to study the stability used in this research are Lattice energy and Bond Valence Sum (BVS). this research is theoretical exploration using computational chemistry by atomistic simulation using GULP (General Utility Lattice Program) and VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis). Research objects are nine trivalent oxides with short range potential input data. short range potential used in this study is Buckingham's potential. Result of geometry optimization at constant pressure shows both cell parameters ZrO_2 through simulation results with experimental results are corresponds well because the difference is only 0.11%. Increasing the concentration and the size of substituting dopant of ZrO_2 makes the lattice energy of the doped structure more positive so that the stability of the doped ZrO_2 structure decreases. The decrease in the stability of ZrO_2 doped with Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+} and Lu^{3+} is smaller than the decrease in the stability of ZrO_2 doped with $La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}$ and Gd^{3+} . BVS results show that the structure of ZrO_2 doped with La^{3+} is not appropriate because it has different value of valence and BVS more than 0.1.

Keywords: $Zr_{1-x}M_xO_{2-\delta}$, Lattice Energy, Bond Valence Sum