

PERSETUJUAN PEMBIMBING

Skripsi yang berjudul: **Simulasi Atomistik Oksida Ceria (CeO₂) yang Didoping Oksida Trivalen**

Oleh

Kusrini

Nim: 441 412 004

Telah diperiksa dan disetujui untuk diuji

Pembimbing I



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

Pembimbing II



Deasy N. Botutihe, S.Pd, M.Si
NIP. 19841219 201404 2 001

Mengetahui,

Ketua Jurusan Kimia



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

LEMBAR PENGESAHAN

Skripsi yang berjudul: **Simulasi Atomistik Oksida Ceria (CeO₂) yang Didoping Oksida Trivalen**

Oleh

Kusrini


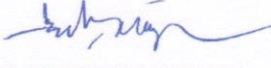



Nim: 441 412 004

Telah dipertahankan di depan dewan Penguji

Hari/Tanggal : Rabu, 23 Desember 2015

Waktu : 13.00 – 14.00 WITA

Penguji:

- | | |
|--|---|
| 1. <u>Dr. Opir Rumape, M.Si</u>
NIP. 19580903 198703 1 001 | 1.....
 |
| 2. <u>Dr. Netty Ino Ischak, M.Kes</u>
NIP. 19680223 199303 2 001 | 2.....
 |
| 3. <u>Erni Mohamad, S.Pd, M.Si</u>
NIP. 19690812 200501 2 002 | 3.....
 |
| 4. <u>Dr. Akram La Kilo, M.Si</u>
NIP. 19770411 200312 1 001 | 4.....
 |
| 5. <u>Deasy N. Botutihe, S.Pd, M.Si</u>
NIP. 19841219 201404 2 001 | 5.....
 |

Mengetahui,

DEKAN FAKULTAS MATEMATIKA DAN IPA


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



ABSTRAK

Kusrini. 2015. *Simulasi Atomistik Oksida Ceria (CeO₂) yang Didoping Oksida Trivalen*. Skripsi, Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo. Pembimbing I Dr. Akram La Kilo, M.Si dan Pembimbing II Deasy N. Botutihe, S.Pd, M.Si.

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari Kestabilan struktur CeO₂ yang didoping oksida trivalen menjadi senyawa Ce_{1-x}M_xO_{2-δ} (M= Lu³⁺, Yb³⁺, Er³⁺, Y³⁺, Gd³⁺, Eu³⁺, Sm³⁺, dan La³⁺ melalui simulasi atomistik, nilai x adalah jumlah konsentrasi dopan yang mensubstitusi Ce⁴⁺ secara parsial dan konsentrasi dopan dibatasi sampai 10%. Penelitian ini bersifat teoritis eksploratif dengan menggunakan metode kimia komputasi melalui simulasi atomistik menggunakan perangkat lunak GULP (*General Utility Lattice Program*). Obyek pada penelitian adalah 8 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 perbedaan parameter sel CeO₂ induk yang terdoping sebelum dan sesudah simulasi atomistik berkesesuaian baik dengan hasil eksperimen yaitu hanya 0,02%. Hasil penelitian menunjukkan bahwa kestabilan struktur CeO₂ yang didoping oksida trivalen mengalami penurunan dengan meningkatnya konsentrasi dopan. Penurunan kestabilan CeO₂ yang didoping dengan Lu, Ce, Er, Gd, Eu, Nd dan La lebih besar dibandingkan dengan penurunan kestabilan CeO₂ yang didoping dengan Sm, Y, dan Yb.

Kata Kunci : CeO₂, Kimia komputasi, Simulasi atomistik,

ABSTRACT

Kusrini. 2015. Atomistic simulations of ceria oxide (CeO_2) which Doped with trivalent oxide. Skripsi, Chemistry Department, Mathematics and Natural Sciences Faculty, Gorontalo State University. Supervisor I Dr. Akram La Kilo, M.Si, and Supervisor II Deasy N. Botutihe, S.Pd, M.Si.

This research aims to study the stability of CeO_2 structure which doped with trivalent oxide which become $\text{Ce}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_{2-\delta}$ ($\text{M} = \text{Lu}^{3+}, \text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}, \text{Y}^{3+}, \text{Gd}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{Sm}^{3+}, \text{ dan } \text{La}^{3+}$) compound through atomistic simulation, the value of x present the concentration number of the substitution dopant of Ce^{4+} partially and the concentration of the dopant is limited to 10%. This research is explorative theoretical using methods of computational chemistry by atomistic simulating using GULP (General Utility Lattice Program) software. The objects in this study was 8 trivalent oxide with the short-range potential as the input data. Potential short-range used in this study is the Buckingham potential. The results of geometry optimization at a constant pressure showed the differences between cell parameters of doped CeO_2 before and after the atomistic simulation corresponds with the experimental results is only 0.02%. The results showed that the stability of doped CeO_2 structure is decreased with increasing concentrations of dopants. A decrease in the stability of CeO_2 doped with Lu, Ce, Er, Gd, Eu, Nd and La is greater than the decrease in the stability of CeO_2 doped with Sm, Y and Yb.

Keywords: Atomistic Simulations, CeO_2 , Computational Chemistry