

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Cerium dioksida, umumnya dikenal sebagai ceria, sangat menarik diaplikasikan sebagai katalis karena kemampuannya untuk menyimpan dan melepaskan oksigen. Selain itu, ceria juga merupakan katalis aktif dan digunakan untuk meningkatkan reaktivitas material lainnya. Misalnya, sebagai aditif pada katalis otomotif, untuk memberikan jalur energi yang lebih rendah pada berbagai reaksi reduksi-oksidasi untuk menghilangkan polutan dari aliran gas buang (knalpot) (Savoy, 2007). Industri semikonduktor menggunakan nanopartikel cerium dioksida sebagai *abrasif* dan *polishing agent* dalam pembuatan *chip* komputer (Badwal dkk., 2013).

Ceria yang didoping dengan oksida trivalen, khususnya oksida lantanida merupakan material yang potensial sebagai membran elektrolit dalam sensor oksigen dan Sel Bahan Bakar Oksida Padatan (*Solid Oxide Fuel Cell*, SOFC). SOFC merupakan sel bahan bakar elektrik yang memiliki efisiensi tinggi dan ramah lingkungan. Salah satu sifat yang paling dominan dari ceria terdoping adalah memiliki konduktivitas ion yang tinggi akibat adanya kekosongan oksigen yang mengimbangi muatan ceria ketika didoping dengan kation aliovalen (Wei dkk., 2009). Herle (1999) melaporkan bahwa ceria yang didoping dengan dua atau lebih kation menunjukkan konduktivitas ionik secara signifikan lebih tinggi daripada ceria tunggal (CeO_2).

Dalam penelitian ini akan dilakukan simulasi atomistik CeO_2 yang didoping dengan oksida trivalen. Dopan tersebut akan mensubstitusi secara parsial Ce^{4+} dari CeO_2 . Akibat substitusi tersebut, oksida padatan ceria yang diperoleh adalah $\text{Ce}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_{2-\delta}$ (x = konsentrasi dopan, M = dopan, dan δ = kekosongan oksigen). Dopan dalam penelitian ini adalah Lu^{3+} , Yb^{3+} , Er^{3+} , Y^{3+} , Gd^{3+} , Eu^{3+} , Sm^{3+} , dan La^{3+} , dimana konsentrasi (x) dopan dibatasi sampai 10%.

Metode komputasi yang akan dilakukan dalam penelitian ini adalah simulasi atomistik menggunakan perangkat lunak GULP (*General Utility Lattice Program*).

Simulasi atomistik dengan menggunakan GULP pada CeO_2 yang didoping dengan Zr^{4+} telah dilakukan oleh Savoy, (2007) untuk mempelajari penurunan energi Ce^{4+} menjadi Ce^{3+} . Simulasi atomistik CeO_2 yang didoping dengan oksida trivalen $\text{CeO}_2\text{-M}_2\text{O}_3$ ($M = \text{La}^{3+}, \text{Pr}^{3+}, \text{Sm}^{3+}, \text{Gd}^{3+}, \text{Dy}^{3+}, \text{Y}^{3+}, \text{Yb}^{3+}$) dan oksida aliovalen $\text{CeO}_2\text{-DO}$ ($N = \text{Cd}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Sr}^{2+}, \text{Ba}^{2+}$) telah dilakukan oleh Li dkk, (2013) untuk melihat cacat *cluster* pada kristal CeO_2 terdoping.

Simulasi merupakan suatu teknik meniru operasi-operasi atau proses-proses yang terjadi dalam suatu sistem dengan bantuan perangkat komputer dan dilandasi oleh beberapa asumsi tertentu sehingga sistem tersebut bisa dipelajari secara ilmiah. Sebuah sistem yang kompleks dapat diselesaikan lebih cepat dengan menggunakan simulasi. Dalam simulasi digunakan komputer untuk mempelajari sistem secara numerik, dimana dilakukan pengumpulan data untuk melakukan estimasi statistik untuk mendapatkan karakteristik asli dari sistem (Law and Kelton, 1991).

Metode simulasi atomistik juga cukup kuat untuk mempelajari termodinamika dan pemodelan multiskala. Penentuan energi kisi dapat dilakukan dengan cara simulasi atomistik. Simulasi atomistik $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ telah dilakukan Kilo, (2013) dan menentukan energi kisi yang terkandung didalamnya untuk mempelajari kestabilan senyawa tersebut. Pada dasarnya, penentuan energi kisi sangat penting dilakukan pada suatu senyawa ionik karena nilainya menjadi kendali termodinamika pembentukan senyawa tersebut. Akibatnya, kestabilan struktur ceria yang didoping dengan kation trivalen dapat dipelajari. Penelitian ini merupakan studi atomistik struktur kisi dari CeO_2 yang didoping dengan trivalen oksida menggunakan *code* GULP.

1.2 Rumusan Masalah

Rumusan masalah penelitian ini adalah bagaimana kestabilan struktur ceria yang didoping dengan kation trivalen menjadi senyawa $\text{Ce}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_{2-\delta}$ ($M = \text{Lu}^{3+}, \text{Yb}^{3+}, \text{Er}^{3+}, \text{Y}^{3+}, \text{Gd}^{3+}, \text{Eu}^{3+}, \text{Sm}^{3+}, \text{dan } \text{La}^{3+}; 0 \leq x \leq 0,1$) melalui simulasi atomistik.

1.3 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari kestabilan struktur ceria yang didoping dengan kation trivalen menjadi senyawa $Ce_{1-x}M_xO_{2-\delta}$ ($M = Lu^{3+}, Yb^{3+}, Er^{3+}, Y^{3+}, Gd^{3+}, Eu^{3+}, Sm^{3+}, dan La^{3+}; 0 \leq x \leq 0,1$) melalui simulasi atomistik.

1.4 Manfaat Penelitian

Manfaat dari penelitian ini adalah (1) dapat memperdalam pengetahuan penulis tentang oksida logam, khususnya Ceria (CeO_2), dan (2) dapat memperkenalkan penelitian komputasi atomistik dengan menggunakan *code* GULP (*General Utility Lattice Program*).