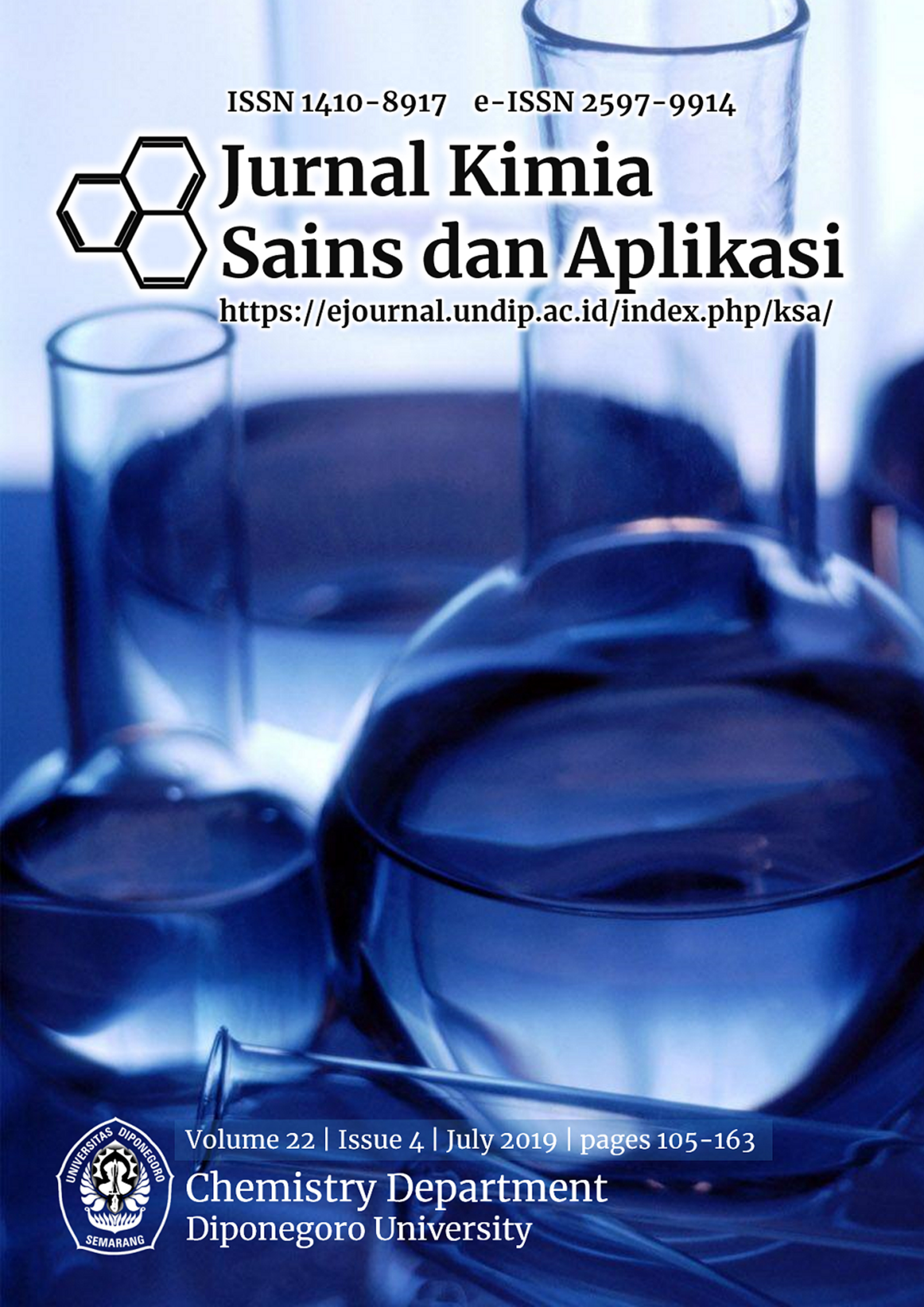
ISSN 1410-8917 e-ISSN 2597-9914

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi

https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/



Volume 22 | Issue 4 | July 2019 | pages 105-163

Chemistry Department
Diponegoro University

Jurnal Kimia Sains & Aplikasi

Jurnal Kimia Sains & Aplikasi

Journal of Scientific & Applied Chemistry

OPEN ACCESS

PEER REVIEW

ISSN: 1410-8917
e-ISSN: 2597-9914

Accredited by the Ministries of Research, Technology and Higher Education
No: 3/E/KPT/2019

Accreditation

sinta S2
Science and Technology Index

(http://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3652)

Currently, JKSA has Sinta-2 accreditation based on Ministry of Research, Technology and Higher Education Decree **No:3/E/KPT/2019**
(https://drive.google.com/file/d/1dlIBJgzWlSn4NgzJu9r-M22WNk2xTnHj/view?usp=sharing)



SERTIFIKAT

Direktorat Jenderal Penguatan Riset dan Pengembangan,
Kementerian Riset, Teknologi, dan Pendidikan Tinggi

RISTEKDIKTI

Kutipan dari Keputusan Direktur Jenderal Penguatan Riset dan Pengembangan,
Kementerian Riset, Teknologi, dan Pendidikan Tinggi Republik Indonesia
Nomor: 3/E/KPT/2019
Tentang Hasil Akreditasi Jurnal Ilmiah Periode 1 Tahun 2019

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi

E-ISSN: 25979914
Penerbit: Departemen Kimia, Universitas Diponegoro

Ditetapkan sebagai Jurnal Ilmiah

TERAKREDITASI PERINGKAT 2

Akreditasi berlaku selama 5 (lima) tahun, yaitu
Volume 21 Nomor 4 Tahun 2018 sampai Volume 26 Nomor 3 Tahun 2023

Jakarta, 14 Januari 2019
Direktur Jenderal Penguatan Riset dan Pengembangan

DIREKTORAT JENDERAL PENGUATAN RISET DAN PENGEMBANGAN

Dr. Muhammad Dimyati
NIP. 195912171984021001

TERAKREDITASI

Journal Profile

Last update: 20th April 2021
Number of documents: 524
Number of citations: 982
Google Scholar's IF: 982/524 = 1.874
h-Index: 12, i10-Index: 19

Google Scholar URL: **Click here (https://scholar.google.co.id/citations?hl=en&user=fzjW0kgAAAAJ)**
Cited in Scopus indexed papers: 168 citations from 107 documents **here (https://www.scopus.com/results/results.uri?cc=10&sort=cp-f&src=dm&st1=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&st2=J+Kim+Sains+Apl&nlo=&nlr=&nls=&sid=e14ccf10f495d7f8b4bb87fd4b2fb105&sot=b&sdt=b&sl=62&s=%28REF f&ps=r-f&editSaveSearch=&origin=resultslist&zone=resultslist)**

Editorial Team

Editor in Chief



Dr. Adi Darmawan (ScopusID: **55953897600 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55953897600)**)
(http://orcid.org/0000-0001-5744-5789) **(https://publons.com/researcher/3141033)**
Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia

Associate editors



Dr. Amin Fatoni (ScopusID: **55488648900 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55488648900)**)
(http://orcid.org/0000-0002-6550-2461) Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Jenderal Soedirman, Purwokerto, Indonesia



Dr. Choiril Azmiyawati (ScopusID: **55543514300 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55543514300)**)
(http://orcid.org/0000-0002-4143-9832) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia



Didik Setiyo Widodo (ScopusID: **57195404137 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57195404137)**)
(http://orcid.org/0000-0001-8411-9700) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia



Dr Fitria Rahmawati (ScopusID: **36053591500 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36053591500)**)
(http://orcid.org/0000-0002-3145-9063) Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Sebelas Maret University, Indonesia



Dr Gaurav A Bhaduri (ScopusID: **28367493600 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=28367493600)**)
(http://orcid.org/0000-0002-7714-8877) Indian Institute of Technology Jammu (IIT JMU), India



Dr. Guozhao Ji (ScopusID: **55262553900 (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55262553900)**)
School of Environmental Science and Technology, Dalian University of Technology Dalian, Liaoning, China


Dr. Ibrahim A. I. Hassan (ScopusID: **55652057500** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=55652057500))
Department of Chemistry, South Valley University Qena, Egypt, Egypt


Mr Ismiyarto Ismiyarto (ScopusID: **57217110370** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57217110370))
(http://orcid.org/0000-0002-3939-3433) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia


Dr. Mukhammad Asy'ari (ScopusID: **56117266100** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56117266100))
(http://orcid.org/0000-0002-3489-1644) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia


Dr. Mus'ab Abdul Razak (ScopusID: **38961852200** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=38961852200))
(http://orcid.org/0000-0001-5120-1345) Department of Chemical and Environmental Engineering, Faculty of Engineering, Universiti Putra Malaysia, Malaysia


Dr. Nor Basid Adiwibawa Prasetya (ScopusID: **56574376400** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=56574376400))
(http://orcid.org/0000-0002-6956-3667) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia


Dr. Yayuk Astuti (ScopusID: **57100033100** (http://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=57100033100))
(http://orcid.org/0000-0002-2107-3829) Chemistry Department, Faculty of Sciences and Mathematics, Diponegoro University Jl. Prof. Soedarto, SH., Tembalang, Semarang, Indonesia

---

Visitor: 167947 (http://statcounter.com/p11625216/?guest=1) View My Stats (http://statcounter.com/p11625216/?guest=1)

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi is indexed in:

sinta (http://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3652) DOAJ DIRECTORY OF OPEN ACCESS JOURNALS (https://doaj.org/toc/2597-9914?source=%7B%22query%22%3A%7B%22filtered%22%3A%7B%22filter%22%3A%7B%22bool%22%3A%7B%22must%22%3A%5B%7B%22terms%22%3A%7B%22index.issn.e 8917%22%2C%222597-9914%22%5D%7D%7D%2C%7B%22term%22%3A%7B%22_type%22%3A%22article%22%7D%7D%5D%7D%7D%2C%22query%22%3A%7B%22match_all%22%3A%7B%7D

Google Scholar (https://scholar.google.co.id/citations?view_op=list_works&hl=en&user=fzjW0kgAAAAJ) BASE (https://www.base-search.net/Search/Results?filter%5B%5D=f_dcsubject%3A%22Chemistry%22&lookfor=jurnal+kimia+sains+dan+aplikasi&type=all&sort=dcyear_sort+desc%2Cid+asc&oaboost=1&refid=dcdden&filter%5B

indonesia OneSearch (https://onesearch.id/Search/Results?lookfor=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&type=AllFields&sort=year&view=list&filter%5B%5D=institution%3A%22Universitas+Diponegoro%22&filter%5B%5D=format%3A%2

Crossref (https://search.crossref.org/?container-title=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&q=2597-9914&sort=year) 1findr (https://1findr.1science.com/search?query=%22jurnal%20kimia%20sains%20dan%20aplikasi%22)

OCLC WorldCat (https://www.worldcat.org/search?q=%22Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi%22&qt=results_page#%2528x0%253Aartchap%2Bx4%253Adigital%2529format) Dimensions (https://app.dimensions.ai/discover/publication?or_facet_journal=jour.1321534&and_facet_source_title=jour.1321534)

GARUDA GARBA RUJUKAN DIGITAL (http://garuda.ristekbrin.go.id/journal/view/1294) PKP|INDEX (https://index.pkp.sfu.ca/index.php/browse/index/3319?sortOrderId=5) CASSI A CAS SOLUTION (https://cassi.cas.org/publication.jsp?P=LglBQf5Q2NQyz133K_ll3zLPXfcr-WXflm6vidnOCthgsNyNg1ImezLPXfcr-WXfmMZfJel06lkyz133K_ll3zLPXfcr-WXfG77iY41l-Toi91Wr0cKULg)

Microsoft Academic (https://academic.microsoft.com/#/detail/2883313515) ROAD (https://portal.issn.org/resource/issn/2597-9914) Scilit (https://www.scilit.net/journal/1579377)

HARVARD LIBRARY (https://hollis.harvard.edu/primo-explore/search?query=any,contains,jurnal%20kimia%20sains%20dan%20aplikasi&tab=everything&search_scope=everything&sortby=date&vid=HVD2&facet=rtype,include,articles&mfacet=jtitl

SHERPA/RoMEO (https://v2.sherpa.ac.uk/id/publication/29034) Semantic Scholar (https://www.semanticscholar.org/search?q=%22Jurnal%20Kimia%20Sains%20dan%20Aplikasi%22&sort=pub-date)

(http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) This work is licensed under a **Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License** (http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/).

Copyright ©2021 **Universitas Diponegoro (https://www.undip.ac.id)**. Powered by **Public Knowledge Project OJS (https://pkp.sfu.ca/ojs/)** and **Mason Publishing OJS theme (https://github.com/masonpublishing/OJS-Theme)**.

Jurnal Kimia Sains & Aplikasi

Jurnal Kimia Sains & Aplikasi

Journal of Scientific & Applied Chemistry

OPEN ACCESS

PEER REVIEW

ISSN: 1410-8917
e-ISSN: 2597-9914

Accredited by the Ministries of Research, Technology and Higher Education
No: 3/E/KPT/2019

Issue Coverage

General Information

Published:	31-07-2019
Number of Articles: (including Editorial)	8
Number of Authors:	23

Total 1 Author's Country

Indonesia	(23)

Total 8 Author's Affiliations

Bogor Agricultural University	(4)
Diponegoro University	(2)
Indonesian Institute of Science (LIPI)	(3)
Lambung Mangkurat University	(3)
State University of Gorontalo	(3)
UIN Sunan Kalijaga	(2)
University of Surabaya	(3)
Universitas 17 Agustus 1945	(3)

Accreditation

sinta Science and Technology Index S2

(http://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3652)

Currently, JKSA has Sinta-2 accreditation based on Ministry of Research, Technology and Higher Education Decree No:3/E/KPT/2019
(https://drive.google.com/file/d/1dlIBJgzWlSn4NgzJu9r-M22WNk2xTnHj/view?usp=sharing)



Journal Profile

Last update: 20th April 2021
Number of documents: 524
Number of citations: 982
Google Scholar's IF: 982/524 = 1.874
h-Index: 12, i10-Index: 19
Google Scholar URL: **Click here (https://scholar.google.co.id/citations?hl=en&user=fzjW0kgAAAAJ)**
Cited in Scopus indexed papers: 168 citations from 107 documents **here (https://www.scopus.com/results/results.uri?cc=10&sort=cp-f&src=dm&st1=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&st2=J+Kim+Sains+Apl&nlo=&nlr=&nls=&sid=e14ccf10f495d7f8b4bb87fd4b2fb105&sot=b&sdt=b&sl=62&s=%28REF f&ps=r-f&editSaveSearch=&origin=resultslist&zone=resultslist)**

Journal Content

Search

Search Scope

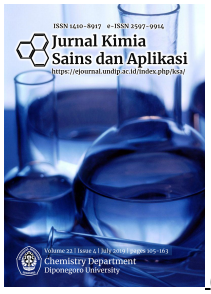
All

Search

Browse

- **By Issue (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/issue/archive)**
- **By Author (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/search/authors)**
- **By Title (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/search/titles)**
- **Other Journals (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/index/search)**
- **Categories (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/index/search/categories)**

Vol 22, No 4 (2019): Volume 22 Issue 4 Year 2019



(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/issue/view/2630/showToc)

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi

ISSN 1410-8917 and e-ISSN 2597-9914

Volume 22 Issue 4 Year 2019

July 2019

Table of Contents

Research Articles


(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22122)

Potensi Senyawa Antibakteri dari Ekstrak Akar Manis (Glycyrrhiza glabra L) terhadap Bacillus cereus (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22122) (https://ejournal.undip.ac.id/index.
Potential of Antibacterial Compounds from Sweet Root Extract (Glycyrrhiza glabra L) on Bacillus cereus

Gandi Sogandi, Wan Syurya Tri Darma, Raudatul Jannah
Views: 2633 (#) | | Language: ID (#) | DOI:
10.14710/jksa.22.4.105-111
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.105-111)
Received: 18 Feb 2019; Revised: 7 May 2019; Accepted: 13 May 2019; Published: 31 Jul 2019; Available online: 31 May 2019.

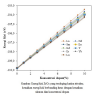

(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22340)

Efek Temperatur, Tekanan dan Waktu Reaksi pada Hidrogenasi Asam Heksadekanoat Menjadi 1-Eksadekanol Menggunakan Katalis Ru-Sn(3,0)/C (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22340) (https://ejournal.undip.ac.id/index.
Effect of Temperature, Pressure, and Reaction Time on Hydrogenation of Hexadecanoic Acid to 1-Hexadecanol Using a Ru-Sn(3.0)/C Catalyst

Nor Ain, Rodiansono Rodiansono, Kamilia Mustikasari
Views: 829 (#) | | Language: ID (#) | DOI:
10.14710/jksa.22.4.112-122
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.112-122)
Received: 11 Mar 2019; Revised: 2 May 2019; Accepted: 16 May 2019; Published: 31 Jul 2019.

Studi Teoritis Penggunaan Derivasi Asam Siano sebagai Akseptor Elektron dalam Pelargonidin sebagai Senyawa Pewarna Sel Surya Sensitasi (https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/20523) (https://ejournal.undip.ac.id/index.
Theoretical Study on the Use Cyano Acid Derivation as Electron Acceptors in Pelargonidin as Dye Compounds of Sensitized Solar Cells (DSSC)

Muhamad Imam Muslim, Sudarlin Sudarlin
Views: 604 (#) | | Language: ID (#) | DOI:
10.14710/jksa.22.4.123-128
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.123-128)
Received: 2 Oct 2018; Revised: 17 Jun 2019; Accepted: 20 Jun 2019; Published: 31 Jul 2019.



(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22954)

Studi Kestabilan Zirkonia Terdoping Kation Trivalen melalui Pemodelan Atomistik
(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22954)
Study on the Stability of Trivalent Cations Doped Zirconia through Atomistic Modeling

Akram La Kilo, Triwahyuni S. Umamah, Lukman A. R. Laliyo

Views: **827 (#)** | Language: **ID (#)** | DOI: **10.14710/jksa.22.4.129-135**
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.129-135)

Received: 30 Apr 2019; Revised: 23 Jul 2019; Accepted: 24 Jul 2019; Published: 31 Jul 2019.

(https://ejournal.undip.ac.id/index.



(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22978)

Pengaruh Rasio LiBOB:TiO2 dari Lembaran Polimer Elektrolit sebagai Pemisah terhadap Kinerja Elektrokimia Baterai Lithium-Ion Berbasis LTO
(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/22978)
The Effect of Ratio LiBOB:TiO2 of Electrolyte Polymer Sheets as separators on the Electrochemical Performance of LTO-Based Lithium-Ion Batteries

Agriccia Pangestica Saputry, Titik Lestariningsih, Yayuk Astuti

Views: **1218 (#)** | Language: **ID (#)** | DOI: **10.14710/jksa.22.4.136-142**
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.136-142)

Received: 2 May 2019; Revised: 27 Jun 2019; Accepted: 12 Jul 2019; Published: 31 Jul 2019.

(https://ejournal.undip.ac.id/index.



(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/23006)

Pengaruh Komposisi Elektrolit pada Proses Penyisihan Nikel dari Tiruan Air Limbah Elektroplating Menggunakan Sel Elektrodeposisi Dua Ruang
(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/23006)
Effect of Electrolyte Composition on Nickel Removal Process from Artificial Electroplating Wastewater Using Two-Room Electrodeposition Cells

Selly Ayu Janetasari, Djaenudin Djaenudin

Views: **552 (#)** | Language: **ID (#)** | DOI: **10.14710/jksa.22.4.143-149**
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.143-149)

Received: 6 May 2019; Revised: 15 Jul 2019; Accepted: 20 Jul 2019; Published: 31 Jul 2019.

(https://ejournal.undip.ac.id/index.



(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/23083)

Validasi Metode Analisis Residu Mometasone furoate dan CIP100 Setelah Proses Pembersihan Peralatan Produksi di Industri Farmasi "XYZ"
(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/23083)
Validation of Mometasone furoate and CIP100 Residue Analysis Methods After Cleaning of Production Equipment in the "XYZ" Pharmaceutical Industry

Amaandika Galih Arintowibowo, Ririn Sumiyani, Kusuma Hendrajaya

Views: **985 (#)** | Language: **ID (#)** | DOI: **10.14710/jksa.22.4.150-156**
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.150-156)

Received: 12 May 2019; Revised: 15 Jul 2019; Accepted: 15 Jul 2019; Published: 31 Jul 2019.

(https://ejournal.undip.ac.id/index.

Kompatibilitas Nanokristal Selulosa Termodifikasi Setrimonium Klorida (CTAC) dalam Matriks Poliasam Laktat sebagai Material Pengemas
(https://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa/article/view/23567)
Compatibility of Celluloce Nanocrystal Modified Cetrimmonium Chloride (CTAC) in Polylactic Acid Matrix as Packaging Material

Nina Hartati, Tetty Kemala, Komar Sutriah, Obie Farobie

Views: **561 (#)** | Language: **ID (#)** | DOI: **10.14710/jksa.22.4.157-163**
(https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.157-163)

Received: 9 Jun 2019; Revised: 5 Jul 2019; Accepted: 20 Jul 2019; Published: 31 Jul 2019.

Visitor: 167947 (http://statcounter.com/p11625216/?guest=1) View My Stats (http://statcounter.com/p11625216/?guest=1)

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi is indexed in:

(http://sinta.ristekbrin.go.id/journals/detail?id=3652) (https://doaj.org/toc/2597-9914?source=%7B%22query%22%3A%7B%22filtered%22%3A%7B%22filter%22%3A%7B%22bool%22%3A%7B%22must%22%3A%5B%7B%22terms%22%3A%7B%22index.issn.e 8917%22%2C%222597-9914%22%5D%7D%7D%2C%7B%22term%22%3A%7B%22_type%22%3A%22article%22%7D%7D%5D%7D%7D%2C%22query%22%3A%7B%22match_all%22%3A%7B%7D (https://scholar.google.co.id/citations?view_op=list_works&hl=en&user=fzjW0kgAAAAJ) (https://www.base-search.net/Search/Results?filter%5B%5D=f_dcsubject%3A%22Chemistry%22&lookfor=jurnal+kimia+sains+dan+aplikasi&type=all&sort=dcyear_sort+desc%2Cid+asc&oaboost=1&refid=dcdden&filter%5B (https://onesearch.id/Search/Results?lookfor=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&type=AllFields&sort=year&view=list&filter%5B%5D=institution%3A%22Universitas+Diponegoro%22&filter%5B%5D=format%3A%2 (https://search.crossref.org/?container-title=Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi&q=2597-9914&sort=year) (https://1findr.1science.com/search?query=%22jurnal%20kimia%20sains%20dan%20aplikasi%22) (https://www.worldcat.org/search?q=%22Jurnal+Kimia+Sains+dan+Aplikasi%22&qt=results_page#%2528x0%253Aartchap%2Bx4%253Adigital%2529format) (https://app.dimensions.ai/discover/publication?or_facet_journal=jour.1321534&and_facet_source_title=jour.1321534) (http://garuda.ristekbrin.go.id/journal/view/1294) (https://index.pkp.sfu.ca/index.php/browse/index/3319?sortOrderId=5) (https://cassi.cas.org/publication.jsp?P=LglBQf5Q2NQyz133K_ll3zLPXfcr-WXflm6vidnOCthgsNyNg1ImezLPXfcr-WXfmMZfJel06lkyz133K_ll3zLPXfcr-WXfG77iY41l-Toi91Wr0cKULg) (https://academic.microsoft.com/#/detail/2883313515) (https://portal.issn.org/resource/issn/2597-9914) (https://www.scilit.net/journal/1579377) (https://hollis.harvard.edu/primo-explore/search?query=any,contains,jurnal%20kimia%20sains%20dan%20aplikasi&tab=everything&search_scope=everything&sortby=date&vid=HVD2&facet=rtype,include,articles&mfacet=jtitl (https://v2.sherpa.ac.uk/id/publication/29034) (https://www.semanticscholar.org/search?q=%22Jurnal%20Kimia%20Sains%20dan%20Aplikasi%22&sort=pub-date)

(http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) This work is licensed under a Creative Commons Attribution-ShareAlike 4.0 International License (http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/).

Copyright ©2021 Universitas Diponegoro (https://www.undip.ac.id). Powered by Public Knowledge Project OJS (https://pkp.sfu.ca/ojs/) and Mason Publishing OJS theme (https://github.com/masonpublishing/OJS-Theme).

ISSN: 1410-8917
e-ISSN: 2597-9914

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi 22 (4) (2019): 129–135

Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi
Journal of Scientific and Applied Chemistry

Journal homepage: http://ejournal.undip.ac.id/index.php/ksa



Studi Kestabilan Zirkonia Terdoping Kation Trivalen melalui Pemodelan Atomistik

Akram La Kilo [a,*], Triwahyuni S. Umamah [b], Lukman A. R. Laliyo [b]

[a] Program Studi Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo, Kota Gorontalo 96128, Indonesia
[b] Program Studi Pendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo, Kota Gorontalo 96128, Indonesia

* Corresponding author: akram@ung.ac.id

https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.129-135

Article Info

Article history:

Received: 30 April 2019
Revised: 23 July 2019
Accepted: 24 July 2019
Online: 31 July 2019

Keywords:
zirconia; cation trivalent, lattice energy; atomistic modeling; bond valence sum

Abstract

Title: **Study on the Stability of Trivalent Cations Doped Zirconia through Atomistic Modeling**

The aim of this research was 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 atomistic modelling and bond valence sum method. Short range potential used in this study was Buckinghams' potential. Result of geometry optimization at constant pressure shown both cell parameters of ZrO_2 was in good agreement with experimental results because of the difference was only 0.11%. Increasing the concentration and the size of substituting dopant of ZrO_2 makes the lattice energy of the doped structure was 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 $Lu^{3+}$was smaller than ZrO_2 doped with La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+} and Gd^{3+}. BVS results shown that the structure of ZrO_2 doped with $La^{3+}$was not appropriate because it has different value of BVS was more than 0.1.

Kata Kunci:
zirkonia; kation trivalen; energi kisi; pemodelan atomistik, *bond valence sum*

Abstrak

Tujuan penelitian adalah mempelajari kestabilan struktur ZrO_2 yang didoping dengan kation 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 pemodelan atomistik dan kalkulasi *Bond Valence Sum*. Potensial jarak pendek yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial Buckingham. Hasil optimasi geometri pada tekanan tetap menunjukkan bahwa parameter sel ZrO_2 induk berkesesuaian dengan hasil eksperimen karena menunjukkan perbedaan nilai kecil, 0,11%. Semakin bertambah konsentrasi dan ukuran dopan yang mensubstitusi ZrO_2, maka energi kisi ZrO_2 terdoping semakin positif sehingga kestabilan 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 stabil karena memiliki perbedaan nilai valensi dan BVS lebih dari 0,1.

1. Pendahuluan

Selama dekade terakhir, pemahaman mengenai struktur kimia dari keramik oksida sebagai katalis, dielektrik, dan elektronik telah menghasilkan keuntungan secara ekstensif melalui pengembangan teknik pemodelan komputasi [1]. Struktur stabil yang

mungkin terjadi dari oksida keramik akibat didoping secara parsial dengan dopan dapat dipelajari terlebih dahulu melalui pemodelan atomistik sebelum material disintesis di laboratorium [2]. Salah satu material keramik oksida adalah zirkonium dioksida atau zirkonia (ZrO_2) yang merupakan bahan teknologi penting sebagai elektrolit (konduktor ion oksigen) dalam beberapa aplikasi industri, seperti elektrolit dari sel bahan bakar oksida padatan (*Solid Oxide Fuel Cell*, SOFC) dan katalis [3].

ZrO_2 adalah oksida polimorf dengan tiga fasa, yaitu monoklin, tetragonal, dan kubus [4]. Fasa yang disebutkan terakhir tidak stabil pada suhu rendah dan mengalami keretakan pada saat pendinginan [5]. Fasa kubus zirkonia tersebut perlu distabilkan dengan cara penambahan secara parsial kation yang lebih besar atau didoping menggunakan kation bervalensi lebih rendah yakni kation trivalen atau divalen untuk membuat kekosongan anion oksigen (*oxygen vacancy*), seperti Y^{3+} atau kombinasi dari dua efek tersebut [6]. Heuer melaporkan bahwa dopan divalen menyebabkan ketidakstabilan struktur dan terjadinya pemisahan fasa pada suhu tinggi, seperti pada $CaZr_4O_9$ [7]. Xia *dkk.* [1] melaporkan bahwa doping yang dilakukan menggunakan kation trivalen seperti itrium dapat menstabilkan fasa kubus ZrO_2. Kation trivalen menstabilkan fasa kubus berstruktur fluorit dengan cara menciptakan kekosongan oksigen.

Kestabilan kation trivalen (M^{3+}) dalam ZrO_2 bergantung pada faktor-faktor dari kecocokkan jari-jari antara Zr^{4+} (0,840 Å) dan kation M^{3+} serta konsentrasi kation tersebut [8]. Akibtanya, struktur stabil yang terbentuk pun ditentukan oleh faktor-faktor tersebut. Struktur oksida logam tanah jarang adalah bervariasi sesuai dengan radius kation. Struktur heksagonal stabil untuk kation yang lebih besar, yaitu La^{3+} dan Nd^{3+}. Kation tanah jarang terbesar La^{3+} (r = 1,160 Å) memiliki kecenderungan kuat menjadi piroklor $La_2Zr_2O_7$. Kemudian, kation Sm^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, dan kation yang lebih kecil memiliki kedua bentuk, yaitu monoklin dan kubus [9]. Dalam penelitian ini, kation trivalen dari logam tanah jarang (La^{3+} = 1,160, Nd^{3+} = 1,109, Sm^{3+} =1,079, Eu^{3+}= 1,066, Gd^{3+} = 1,053, Er^{3+} = 1,004, Yb^{3+} = 0,985, Lu^{3+}= 0,977 Å) dan Y^{3+} (1,019 Å) yang mensubsitusi secara parsial Zr^{4+} dari fasa kubus ZrO_2 dianalisis berdasarkan kenaikan konsentrasi kation M^{3+}.

Subtitusi secara parsial Zr^{4+} dari fasa kubus ZrO_2 oleh dopan trivalen (M^{3+}) menghasilkan senyawa $Zr_{1-x}M_xO_{2-\delta}$ (x = konsentrasi dopan, 0-10%; M = dopan tivalen; dan δ= kekosongan oksigen). Struktur kubus ZrO_2 yang tersubtitusi diperoleh dengan cara pemodelan atomistik dan kalkulasi *Bond Valence Sum* (BVS) yang masing-masing menggunakan perangkat lunak GULP (*General Utility Lattice Program*) [10] dan VESTA (*Visualization for Electronic and Structural Analysis*) [11]. Kestabilan struktur ZrO_2 akibat doping dianalisis berdasarkan perubahan energi kisi yang diperoleh dari pemodelan atomistik serta didukung oleh analisis ketepatan struktur ZrO_2 terdoping dengan menggunakan metode BVS.

2. Metodologi

Alat yang digunakan dalam penelitian ini terdiri atas perangkat keras *(hardware)* dan perangkat lunak *(software)*. Perangkat keras yang digunakan berupa sebuah *Personal Computer* (PC) dengan prosesor *Intel*(R) *Core*(TM) i5 CPU M540 dengan kecepatan 2,53 GHz, RAM 4,00 GB. Perangkat lunak yang digunakan adalah *Operating System* (OS) *Microsoft*(R) *Windows* 7 *Ultimate Service Pack* 1 64-*bit*, *software*GULP [10], *Microsoft Excel* 2013, dan VESTA [11]. Obyek penelitian ini adalah senyawa-senyawa La_2O_3, Nd_2O_3, Sm_2O_3, Eu_2O_3, Gd_2O_3, Y_2O_3, Er_2O_3, Yb_2O_3, dan Lu_2O_3 dengan data input parameter potensial jarak pendek yang diperoleh dari penelitian sebelumnya Wei *dkk.* [12] dan Xia *dkk.* [1]. Penelitian ini bersifat teoritis eksploratif. Semua bahan yang digunakan dalam penelitian ini berupa senyawa-senyawa yang hasil perhitungan potensial jarak pendeknya diambil dari penelitian sebelumnya. Penelitian ini menggunakan metode kimia komputasi untuk mengeksplorasi semua senyawa. Metode pemodelan atomistik menggunakan GULP dan kalkulasi BVS dan menggambarkan struktur VESTA.

2.1. Pembuatan Data Input *Code* GULP

Pemodelan dengan menggunakan *code* GULP dalam penelitian dilakukan untuk menghitung energi kisi dan parameter sel struktur ZrO_2 murni dan ZrO_2 terdoping. Pemodelan yang dilakukan memerlukan data input paremeter sel dan fraksional sel yang dilaporkan oleh Xia *dkk.* [1]. Selain data asli ZrO_2, data ZrO_2 terdoping kation trivalen dibuat juga berdasarkan kenaikan konsentrasi dopan dari 0 sampai 10%. Data tersebut disimpan dalam *software* GULP pada suatu *folder* sesuai nama dopan yang konsentrasinya sudah ditentukan sebesar 1% sampai 10%. Setelah pengumpulan data selesai, dilanjutkan dengan pengolahan data yang dilakukan dengan menggunakan *software* GULP dan BVS.

2.2. Metode Pemodelan Atomistik

Metode pemodelan atomistik didasarkan pada model Born dari suatu krisal ionik. Interaksi pada padatan kristal dideskripsikan dengan interaksi potensial interatomik yang terdiri dari interaksi long-range (interaksi Coulomb) dan interaksi short range. Interaksi short-range dihasilan dari gaya tolakan dan gaya tarik van der Waals. Oleh karena itu, energi kisi (U) direpresentasikan sebagai:

$$U = \frac{1}{2}\left(\sum_{i \neq j}\frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{i \neq j} S_{ij}\right)$$

di mana q adalah muatan ion, r adalah jarak antar atom, dan S_{ij} adalah interaksi *short-range*. Interaksi *short-range* dalam penelitian ini menggunakan potensial Buckingham yang dirumuskan:

$$S_{ij} = A\exp(-\frac{r_{ij}}{\rho}) - C/r_{ij}^6$$

di mana A, ρ, dan C adalah parameter empiris yang berhubungan dengan kekerasan ion (A), ukuran ion (ρ), dan interaksi van der Waals (C). Proses minimalisasi kisi pada penelitian ini dilakukan pada tekanan konstan. Dalam kondisi ini, dimensi sel satuannya dapat berubah sehingga *strain* pada sel dan ion-ion di dalamnya terminimalisasi.

2.3. Metode Bond Valence Sum (BVS)

BVS adalah adalah model empiris untuk menjelaskan valensi atau kekuatan ikatan dari padatan ion [13]. Metode ini dilakukan dengan menjumlahkan semua valensi ikatan di sekeliling atom, dengan menggunakan persamaan:

$$S_{ij}=\exp\left(\frac{r_0-r_{ij}}{b}\right)$$

Di mana s_{ij} merupakan valensi dari sebuah ikatan, r_{ij} merupakan panjang ikatan yang terukur, dan r_0 merupakan unit panjang ikatan yang dikembangkan untuk unit valensi ikatan (sebuah ikatan tunggal antara atom i dan j); b merupakan nilai konstan. Perhitungan valensi yang efektif harus dalam perbedaan 0,1 untuk valensi atom yang diduga [14]. Contohnya, untuk Zr, yang bilangan oksidasinya +4, maka valensi ikatan yang terhitung harus di antara 3,9 dan 4,1.

Teknik penentuan BVS menggunakan VESTA, struktur ZrO_2 terdoping dibuat dalam polihedral. Nilai parameter valensi ikatan, R_0, yang digunakan yaitu 1,928 [15]. Dalam VESTA, konstanta, b, yang digunakan telah ditentukan yakni 0,37, sebagaimana yang digunakan oleh La Kilo dkk. dalam memodelkan konduktivitas ion pada γ-$Bi_2VO_{5,5}$ [16].

3. Hasil dan Pembahasan

3.1. Struktur Senyawa Induk ZrO_2

Tahap awal pemodelan yang dilakukan pada penelitian ini yaitu melakukan optimasi dan pencocokan antara model yang dihasilkan melalui pemodelan dengan data hasil studi ZrO_2 yang dilaporkan [1]. Data input yang dibuat lebih baik jika bagian-bagian strukturnya (parameter sel satuan) diketahui terlebih dahulu, seperti *space group* (grup ruang), *cell parameter* (parameter sel) yang diperoleh dari data difraksi sinar-X. Data input senyawa ZrO_2 yang telah dibuat selanjutnya dimodelkan secara atomistik pada tekanan tetap dengan menggunakan GULP. Pemodelan struktur ini menyangkut parameter sel yaitu panjang sisi-sisinya, sudut, dan posisi dari atom-atom dalam struktur. Interaksi antar atom-atom yang diperhitungkan adalah interaksi ionik, gaya dispersi dan interaksi Buckingham. Interaksi Buckingham dipilih karena interaksi yang terjadi di dalam struktur adalah interaksi ionik. Hasil pemodelan yang diperoleh dapat dilihat pada tabel 1.

Tabel 1. Parameter struktur hasil pemodelan dan eksperimen ZrO_2

Parameter	Eksperimen	Hasil Pemodelan	Perbedaan (%)
Volume (Å)	130,324	130,746	0,32
a	5,070	5,076	0,11
b	5,070	5,076	0,11
c	5,070	5,076	0,11
Alfa	90	90	0,00
Beta	90	90	0,00
Gama	90	90	0,00
Zr *x*	0,000	0,000	0,00
Zr *y*	0,000	0,000	0,00
Zr *z*	0,000	0,000	0,00
O *x*	0,250	0,250	0,00
O *y*	0,250	0,250	0,00
O *z*	0,250	0,250	0,00

Pada tabel 1, dapat dilihat bahwa parameter kisi hasil pemodelan adalah berkesesuaian baik dengan parameter sel hasil eksperimen, dengan perbedaan panjang sisi-sisi hanya 0,11%. Xia *dkk.* [1] melaporkan bahwa paramater sel yang perbedaannya kurang dari 1% menunjukkan hasil optimasi geometri (pemodelan) berhasil [3].

3.2. Struktur dan Kekosongan Oksigen ZrO_2 Terdoping

Terdapat dua cara untuk mencapai kestabilan struktur ini, yaitu melakukan doping dengan kation yang bervalensi lebih besar untuk memperluas kisi atau doping dengan kation yang bervalensi lebih rendah seperti yang dilakukan dalam penelitian ini. Mekanisme doping dengan valensi yang lebih rendah dapat menciptakan defek kekosongan oksigen seperti pada persamaan reaksi berikut.

$$M_2O_3 + 2\,Zr^{\times}_{Zr} + \tfrac{1}{2}\,O_2 \rightarrow 2M'_{Zr} + V_O^{\cdot\cdot} + 2\,ZrO_2$$

Persamaan reaksi tersebut dapat dinyatakan bahwa dua ion M^{3+} mensubstitusi dua ion Zr^{4+} untuk menciptakan satu kekosongan oksigen. Pengurangan oksigen tersebut untuk mengimbangi muatan positif, sehingga ZrO_2 terdoping yang terbentuk bermuatan netral, tidak ada elektron bebas. Akibatnya, senyawa ZrO_2 terdoping yang terbentuk adalah senyawa elektrolit. Dopan yang digunakan dalam penelitian ini yakni kation trivalen yang berasal dari oksida trivalen logam tanah jarang ditambah satu logam transisi, Y^{3+}. Interaksi yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial ionik.

Konsentrasi dopan (kation trivalen) yang mensubsitusi secara parsial Zr adalah 1% sampai 10% sebab penelitian sebelumnya menunjukkan adanya aktivitas yang lebih besar pada ZrO_2 terdoping pada konsentrasi dopan di bawah 10%. Substitusi tersebut diimbangi dengan berkurangnya oksigen. Kalkulasi pengurangan tersebut memperhatikan muatan, konsentrasi, dan multiplisitas ion-ion dalam ZrO_2 yang terdoping. Semakin besar konsentrasi dopan yang

mensubstitusi Zr^{4+}, maka semakin kecil nilai okupansi dari oksigen (oksigen terisi). Penurunan okupansi oksigen mengindikasikan penambahan kekosongan oksigen pada ZrO_2 terdoping. Oleh karena itu, semakin besar konsentrasi dopan, maka kekosongan oksigen (vakansi) semakin besar pula.

3.3. Potensial Buckingham ZrO_2 yang Didoping dengan Kation Trivalen

Potensial Buckingham terdiri atas interaksi tolak-menolak dan interaksi dispersi. Dalam ZrO_2 terdoping kation trivalen, interaksi dispersi antar O^{2-} lebih tinggi dibandingkan dengan interaksi dispersi antar ion O^{2-} dan ion logam. Kemampuan dispersi oksigen yang lebih besar menunjukkan kemudahan migrasi ion oksigen dalam ZrO_2 yang terdoping. Migrasi ion oksigen inilah yang mengakibatkan ZrO_2 yang terdoping sebagai elektrolit dengan konduktivitas tinggi dibandingkan ZrO_2 tanpa doping. Potensial Buckingham antara ion dalam senyawa ZrO_2 yang terdoping ditunjukkan pada tabel 2.

Tabel 2. Potensial Buckingham ion-ion dari dopan (oksida trivalen) dalam senyawa ZrO_2

Short-range	A (eV)	ρ (Å)	C (eV·Å⁶)
Zr^{4+}-O^{2-}	985,87	0,3760	0,00
O^{2-}-O^{2-}	22764,00	0,1490	27,88
La^{3+}-O^{2-}	2088,79	0,3460	23,25
Eu^{3+}-O^{2-}	1925,71	0,3403	20,59
Sm^{3+}-O^{2-}	1944,44	0,3414	21,49
Gd^{3+}-O^{2-}	1885,75	0,3399	20,34
Y^{3+}-O^{2-}	1766,40	0,3385	19,43
Er^{3+}-O^{2-}	1739,91	0,3389	17,55
Yb^{3+}-O^{2-}	1649,80	0,3386	16,57
Lu^{3+}-O^{2-}	1618,80	0,3385	19,27

Berdasarkan potensial Buckingham di atas, baik gaya dispersi dan gaya tolak dari La^{3+} terhadap oksigen adalah tertinggi dari semua kation trivalen. Namun, La^{3+} memiliki polaribilitas terendah yang ditunjukkan oleh perbandingan antara kuadrat muatan kulit (shell) dan spring (k) sebagimana termuat pada tabel 3. Sementara Gd^{3+}, Lu^{3+}, dan Eu^{3+} memiliki polarisabiltas tinggi dan gaya tolak rendah dibandingkan dengan kation lainnya.

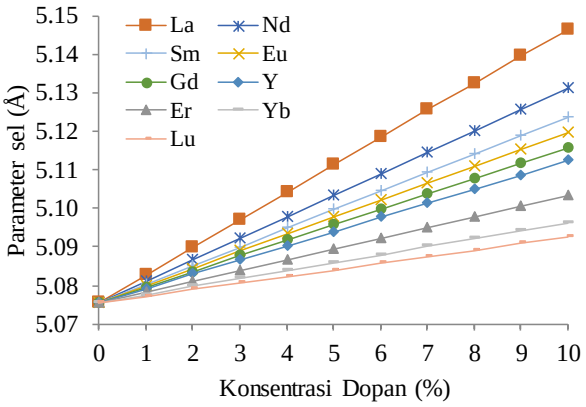
Tabel 3. Muatan dan *spring* ion-ion dalam senyawa ZrO_2 terdoping kation trivalen

Shell Model	k (eV Å^{-2})	Shell(e)
O^{2-}	27,290	-2,077
Zr^{4+}	69,617	1,350
La^{3+}	173,90	-2,149
Nd^{3+}	-	1,322
Eu^{3+}	304,92	3,991
Gd^{3+}	299,96	3,973
Lu^{3+}	308,91	3,278

Dibandingkan dengan kation lain, Sm^{3+}, Gd^{3+}, dan Y^{3+} justru tidak memiliki polarisabilitas namun memiliki memiliki gaya dispersi tinggi sehingga ketiga logam ini diduga akan memiliki keteraturan geometri yang dapat memudahkan ion oksigen bermigrasi. Ketiga dopan yang dituliskan terakhir diduga dapat memainkan peranan penting dalam meningkatkan kinerja elektrolit ZrO_2 terdoping pada konsentrasi tertentu. Bahkan, doping seperti ini dapat menurunkan suhu sintesis sebagaimana yang dilakukan pada material LSO dan LSGM [17].

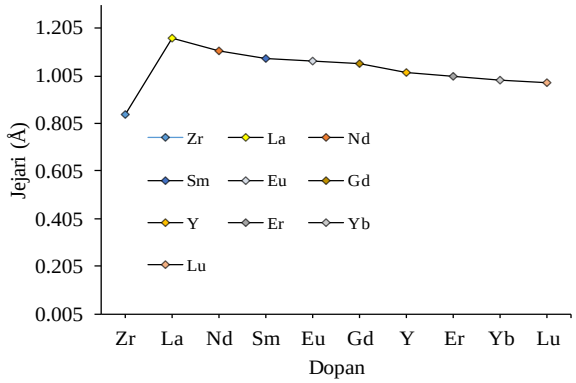
3.4. Parameter Sel

Adanya perubahan parameter sel satuan dari struktur ZrO_2 akibat masuknya dopan La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+}, Gd^{3+}, Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+} dan Lu^{3+} diketahui dengan cara optimasi struktur. Hasil pemodelan untuk parameter sel dapat dilihat pada gambar 1.



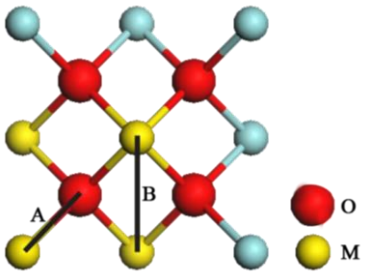
Gambar 1. Parameter sel ZrO_2 yang didoping dengan kation trivalen

Hasil pemodelan menunjukkan bahwa oksida ZrO_2 yang didoping dengan kation trivalen mengakibatkan oksida tersebut mengalami perubahan parameter sel, yaitu panjang sisi-sisinya (a, b, dan c). Dari hasil pemodelan juga dapat dilihat bahwa perubahan nilai parameter sel struktur ZrO_2 yang didoping dengan kation La^{3+}, Nd^{3+}, Sm^{3+}, Eu^{3+} dan Gd^{3+} lebih besar dibandingkan dengan yang didoping kation Y^{3+}, Er^{3+}, Yb^{3+}, dan Lu^{3+}. Kenaikan parameter sel hasil pemodelan dapat dihubungkan dengan jari-jari dopan. Dapat dilihat bahwa semakin besar jari-jari dopan (kation trivalen), maka parameter sel ZrO_2 yang terdoping semakin besar. Semakin besarnya jari-jari tiap dopan dapat dilihat pada gambar 2. Kenaikan konsentrasi dopan trivalen yang mensubtitusi secara parsial Zr dapat menaikan parameter sel pula.



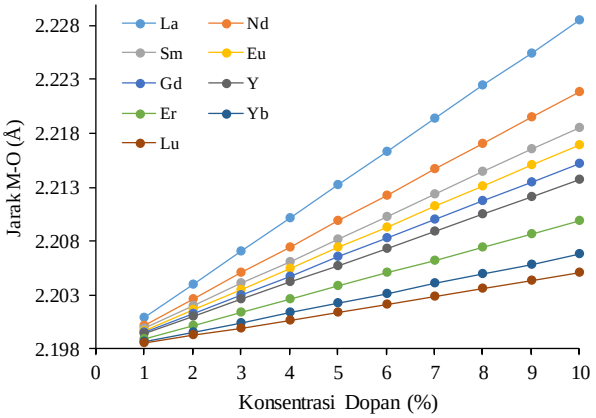
Gambar 2. Perbandingan Jejari Dopan

Untuk membuktikan adanya perubahan parameter sel dari kisi kristal, maka dilakukan perhitungan terhadap jarak antar ion-ion dalam kristal. Dua kation dopan yang mensubtitusi struktur ZrO_2 mengambil tempat terdekat dengan oksigen seperti yang ditunjukkan dalam gambar 3.

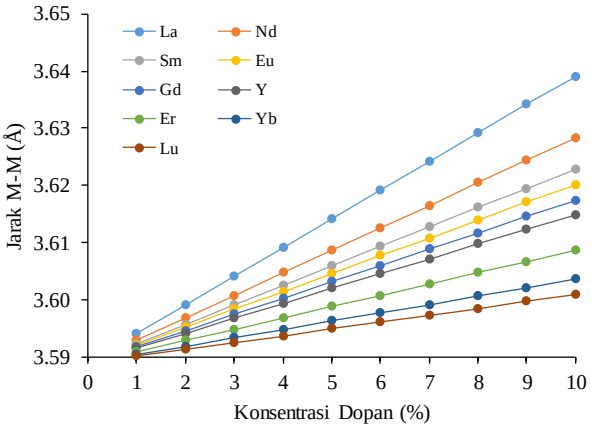


Gambar 3. Jarak antara M – O (A) dan M – M (B) dalam struktur ZrO_2 yang terdoping dengan oksida trivalen (Keterangan: Kekosongan oksigen tidak ditunjukkan dalam gambar)

Simbol A pada gambar merupakan jarak antara M dan O terdekat, sedangkan simbol B merupakan jarak antara M dan M terdekat. Hasil pemodelan ZrO_2 yang terdoping dengan dopan oksida trivalen menunjukkan bahwa jarak antara M dan O terdekat berada pada panjang berkisar 2,198 Å sampai 2,228 Å dan jarak antara M dan M terdekat berada pada panjang 3,59 Å sampai 3,639 Å, sebagaimana yang ditunjukkan pada gambar 4 dan 5.



Gambar 4. Jarak antara M-O dalam struktur ZrO_2 yang terdoping kation trivalen

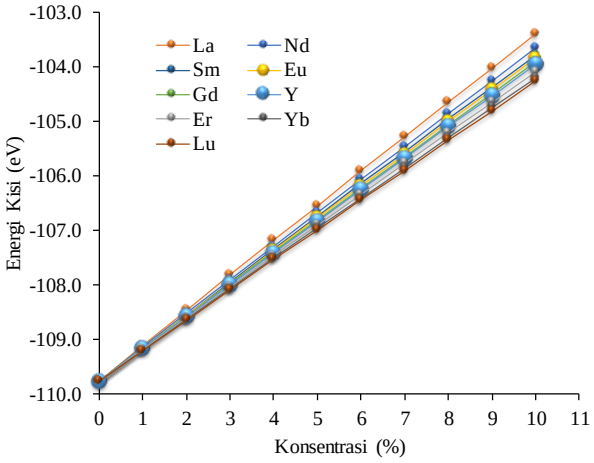


Gambar 5. Jarak antara M-M dalam struktur ZrO_2 yang terdoping kation trivalen

Semakin bertambahnya konsentrasi dan ukuran dopan yang mensubstitusi ZrO_2, maka jarak antar dopan dan antara dopan tersebut dengan O semakin besar karena semakin besarnya gaya tolak antar dopan dan antar oksigen dalam struktur. Hal inilah yang mengakibatkan parameter sel kisi semakin membesar dan kestabilan struktur ZrO_2 yang terdoping semakin menurun.

3.5. Energi Kisi

Pembentukan kation dan anion yang memenuhi aturan oktet dari atom-atomnya bukan merupakan sumber kestabilan suatu senyawa ionik [18]. Kestabilan senyawa-senyawa ionik bersumber pada energi kisi kristal yang dilepaskan pada pembentukan kristal. Berdasarkan hal ini, maka penentuan kestabilan struktur ZrO_2 terdoping dilakukan dengan cara menghitung energi kisi kristal. Hasil optimasi senyawa induk ZrO_2 didapatkan bahwa energi kisi senyawa induk ZrO_2 adalah -109,767 eV. Energi kisi ZrO_2 semakin besar dengan adanya dopan yang mensubstitusi secara parsial Zr seperti yang ditunjukkan pada gambar 6.



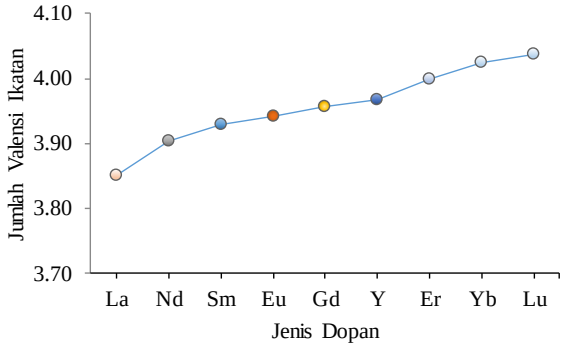
Gambar 6. Energi kisi ZrO_2 yang terdoping kation trivalen

Hasil perhitungan energi kisi melalui pemodelan atomistik menunjukkan bahwa perubahan energi kisi

berbanding lurus dengan konsentrasi dopan. Semakin besar nilai konsentrasi dopan maka nilai energi kisi kristal semakin positif sebagaimana ditunjukkan pada gambar 6. Pembentukan senyawa ionik dengan energi kisi menghasilkan perubahan entalpi negatif (ekstoterm) dikarenakan senyawa ionik tersebut dalam keadaan lebih stabil (energi ikatnya kuat). Dengan menghubungkan analisis parameter sel dan energi kisi dapat dikatakan semakin besar jari-jari dopan yang mensubsitusi Zr^{4+}, maka energi kisi ZrO_2 yang terdoping semakin naik (positif). Dengan masuknya dopan trivalen yang memiliki jari-jari lebih besar dari Zr^{4+} mengakibatkan struktur ZrO_2 menjadi kurang stabil karena adanya defek kekosongan yang terbentuk dan jarak antar ion dalam kristal semakin melebar sehingga menyebabkan energi ikat antar ion di dalamnya menjadi semakin lemah dan energi kisinya semakin positif.

3.6. Analisis Struktur ZrO_2 Terdoping dengan Metode Valensi Ikatan

Metode valensi ikatan dapat digunakan untuk menyelidiki ketepatan struktur eksperimen, menentukan bilangan oksidasi, atau untuk mengidentifikasi ketidakstabilan struktur. Hasil perhitungan *Bond Valence Sum* dari ZrO_2 terdoping kation trivalen ditunjukkan pada gambar 7.



Gambar 7. BVS dari ZrO_2 terdoping kation trivalen

Atom pusat pada ZrO_2 terdoping adalah Zr. Valensi Zr adalah 4, sehingga BVS dari struktur yang tepat adalah mendekati nilai 4. Menurut Brown jika perbedaan nilai antara BVS dan valensi dari atom lebih dari 0,1 satuan valensi, maka struktur tersebut tidak akurat atau tepat [13]. Berdasarkan gambar 7 dapat dilihat ZrO_2 yang didoping dengan La^{3+} memiliki perbedaan nilai lebih dari 0,1 maka struktur tersebut tidak tepat. BVS dari ZrO_2 yang didoping dengan Y^{3+}, Yb^{3+}, dan, Lu^{3+} memiliki nilai lebih besar dari 4. Hal ini disebabkan ikatan di dalam senyawa mendapat tekanan. Adanya tekanan tersebut menyebabkan beberapa ikatan mengalami peregangan (*strain*) dan pemampatan (*compress*), yang ditandai dengan BVS yang nilainya lebih besar (kation mengalami pemampatan) dan BVS yang nilainya lebih kecil (kation mengalami peregangan). Khusus, ZrO_2 yang didoping dengan Y, perbedaan nilai BVS dengan valensi Zr paling kecil dari semua, dan inilah yang menyebabkan struktur ZrO_2 terdoping Y dapat diaplikasi sebagai elektrolit pada sel bahan bakar padatan, sebagaimana yang dilaporkan oleh La Kilo dan Mazza [19] dalam memodelkan konduktivitas ion dalam struktur $Li_2Sc_3(PO_4)_3$.

4. Kesimpulan

ZrO_2 berstruktur kubus yang didoping dengan kation trivalen untuk mensubstitusi secara parsial Zr^{4+} mengakibatkan struktur ZrO_2 terdoping mengalami kekosongan oksigen dan kestabilan ZrO_2 terdoping menurun. Penurunan tersebut semakin besar dengan bertambahnya konsentrasi dan ukuran dopan yang mensubstitusi Zr^{4+} secara parsial dari ZrO_2. Penurunan tersebut ditunjukan dengan energi kisi yang semakin positif. 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 pemodelan juga diperkuat dengan hasil perhitungan *Bond Valence Sum*. Hasil penelitian dapat dijadikan sebagai petunjuk untuk sintesis ZrO_2 yang didoping oksida trivalen dalam meningkatkan kinerja elektrolit dan menurunkan suhu sintesis.

Daftar Pustaka

[1] Xin Xia, Richard Oldman, Richard Catlow, Computational Modeling Study of Bulk and Surface of Yttria-Stabilized Cubic Zirconia, *Chemistry of Materials*, 21, 15, (2009) 3576-3585 https://doi.org/10.1021/cm900417g

[2] Akram La Kilo, Simulasi Komputasi Hantaran Ion di BIMEVOX, Departemen Kimia, Institut Teknologi Bandung, Bandung

[3] Marco Cologna, Andre L. G. Prette, Rishi Raj, Flash-Sintering of Cubic Yttria-Stabilized Zirconia at 750°C for Possible Use in SOFC Manufacturing, *Journal of the American Ceramic Society*, 94, 2, (2011) 316-319 https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2010.04267.x

[4] Jérôme Chevalier, Laurent Gremillard, Anil V. Virkar, David R. Clarke, The Tetragonal-Monoclinic Transformation in Zirconia: Lessons Learned and Future Trends, *Journal of the American Ceramic Society*, 92, 9, (2009) 1901-1920 https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2009.03278.x

[5] Arun Suresh, Merrilea J. Mayo, Wallace D. Porter, Claudia J. Rawn, Crystallite and Grain-Size-Dependent Phase Transformations in Yttria-Doped Zirconia, *Journal of the American Ceramic Society*, 86, 2, (2003) 360-362 https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.2003.tb00025.x

[6] Andrew P.E. York, Tiancun Xiao, Malcom L.H. Green, Brief Overview of the Partial Oxidation of Methane to Synthesis Gas, *Topics in Catalysis*, 22, 3, (2003) 345-358 https://doi.org/10.1023/a:1023552709642

[7] R. A. Miller, J. L. Smialek, R. G. Garlick, Phase stability in plasma-sprayed, partially stabilized zirconia-yttria, in: A.H. Heuer, L.W. Hobbs (Eds.) *Advances in Ceramics. Science and Technology of Zirconia*, Columbus, 1981, pp. 241-253.

[8] F. Hund, Anomale Mischkristalle im System ZrO_2-Y_2O_3 Kristallbau der Nernst-Stifte, *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie*, 55, 5, (1951) 363-366 https://doi.org/10.1002/bbpc.19510550505

[9] Matvei Zinkevich, Thermodynamics of rare earth sesquioxides, *Progress in Materials Science*, 52, 4, (2007) 597-647 https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2006.09.002

[10] Julian D. Gale, Andrew L. Rohl, The General Utility Lattice Program (GULP), *Molecular Simulation*, 29, 5, (2003) 291-341 https://doi.org/10.1080/0892702031000104887

[11] Koichi Momma, Fujio Izumi, VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data, *Journal of Applied Crystallography*, 44, 6, (2011) 1272-1276 https://doi.org/10.1107/S0021889811038970

[12] Xi Wei, Wei Pan, Laifei Cheng, Bin Li, Atomistic calculation of association energy in doped ceria, *Solid State Ionics*, 180, 1, (2009) 13-17 https://doi.org/10.1016/j.ssi.2008.10.019

[13] I. David Brown, The Bond-Valence Method: An Empirical Approach to Chemical Structure and Bonding, in: M. O'Keeffe, A. Navrotsky (Eds.) *Industrial Chemistry Library*, Elsevier, 1981, pp. 1-30.

[14] I. David Brown, Bond Valence Theory, in: I.D. Brown, K.R. Poeppelmeier (Eds.) *Bond Valences*, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2014, pp. 11-58.

[15] I. David Brown, D. Altermatt, Bond-valence parameters obtained from a systematic analysis of the Inorganic Crystal Structure Database, *Acta Crystallographica Section B*, 41, 4, (1985) 244-247 https://doi.org/10.1107/S0108768185002063

[16] A. L. Kilo, B. Prijamboedi, M. A. Martoprawiro, Ismunandar, Modeling ionic conduction in γ-Bi2VO5.5, *2011 2nd International Conference on Instrumentation, Communications, Information Technology, and Biomedical Engineering*, (2011) 330-333 https://doi.org/10.1109/ICICI-BME.2011.6108652

[17] Yoga Trianzar Malik, Atiek Rostika Noviyanti, Dani Gustaman Syarif, Lowered Sintering Temperature on Synthesis of $La_{9.33}Si_6O_{26}$ (LSO)-$La_{0.8}Sr_{0.2}Ga_{0.8}Mg_{0.2}O_{2.55}$ (LSGM) Electrolyte Composite and the Electrical Performance on $La_{0.7}Ca_{0.3}MnO_3$ (LCM) Cathode, *Jurnal Kimia Sains dan Aplikasi*, 21, 4, (2018) 205-210 https://doi.org/10.14710/jksa.21.4.205-210

[18] Effendy, Ikatan Ionik dan Cacat-Cacat pada Kristal Ionik, Bayumedia Publishing, Malang, 2008.

[19] Akram La Kilo, D. Mazza, Pemodelan Konduktivitas Ion dalam Struktur $Li_2Sc_3(PO_4)_3$, *Jurnal Manusia dan Lingkungan*, 18, 3, (2011) 179-183 https://doi.org/10.22146/jml.18439