

**PENENTUAN ENERGI BEBAS GIBBS PEMBENTUKAN
SENYAWA DARI DIAGRAM FASE BERBASIS *PYTHON*
*MATERIALS GENOMIC (PYMATGEN) DAN APPLICATION
PROGRAMMING INTERFACE (API) KEY***

TUGAS AKHIR

Untuk memenuhi sebagian persyaratan
mencapai derajat Sarjana S-1

Program Studi Fisika



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
diajukan oleh :
Syamsul Andry
17106020016

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UIN SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA
2021**



PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1023/Un.02/DST/PP.00.9/06/2021

Tugas Akhir dengan judul : PENENTUAN ENERGI BEBAS GIBBS PEMBENTUKAN SENYAWA DARI DIAGRAM FASE BERBASIS PYTHON MATERIALS GENOMIC (PYMATGEN) DAN APPLICATION PROGRAMMING INTERFACE (API) KEY

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : SYAMSUL ANDRY
Nomor Induk Mahasiswa : 17106020016
Telah diujikan pada : Selasa, 08 Juni 2021
Nilai ujian Tugas Akhir : A-

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang

Anis Yuniati, S.Si., M.Si., Ph.D.

SIGNED

Valid ID: 60d2a10af371e



Penguji I

Dr. Widayanti, S.Si. M.Si.

SIGNED

Valid ID: 60d1f3741d0cb



Penguji II

Frida Agung Rakhmadi, S.Si., M.Sc.

SIGNED

Valid ID: 60d1422fe7324



Yogyakarta, 08 Juni 2021

UIN Sunan Kalijaga

Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.

SIGNED

Valid ID: 60d3b34d0454d

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Syamsul Andry

NIM : 17106020016

Program Studi : Fisika

Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “Penentuan Energi Bebas Gibbs Pembentukan Senyawa dari Diagram Fase Berbasis *Python Materials Genomic* (Pymatgen) dan *Application Programming Interface (API) Key*” merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Yogyakarta, 21 Juni 2021

Penulis,



Syamsul Andry
17106020016



SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan skripsi

Lamp : -

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : SYAMSUL ANDRY

NIM : 17106020016

Judul Skripsi : **PENENTUAN ENERGI BEBAS GIBBS PEMBENTUKAN SENYAWA DARI DIAGRAM FASE BERBASIS PYTHON MATERIALS GENOMIC (PYMATGEN) DAN APPLICATION PROGRAMMING INTERFACE (API) KEY**

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Fisika.

Dengan ini kami berharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqsyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 10 Januari 2021

Pembimbing

Anis Yuniati, S.Si., M.Si., Ph.D
NIP. 19830614 200901 2 009

**PENENTUAN ENERGI BEBAS GIBBS PEMBENTUKAN SENYAWA
DARI DIAGRAM FASE BERBASIS *PYTHON MATERIALS GENOMIC*
(PYMATGEN) DAN *APPLICATION PROGRAMMING INTERFACE* (API)
KEY**

Syamsul Andry
17106020016

INTISARI

Energi bebas Gibbs pembentukan senyawa dari diagram fase berbasis *Python Materials Genomic* (Pymatgen) dan *Application Programming Interface* (API) Key berhasil ditentukan. Senyawa yang ditampilkan merupakan senyawa yang stabil disintesis dari kombinasi atom Li-P dan Li-Fe-O. Kestabilan ini ditunjukkan dari nilai Energi bebas Gibbs pembentukan senyawa yang diperoleh dari diagram fase masing-masing kombinasi atom. Diagram tersebut dibuat dari integrasi antara Python dan database dari *Materials Project* melalui *API Key* menggunakan Pymatgen. Dari penelitian yang dilakukan untuk kombinasi atom Li-P, senyawa dan Energi bebas Gibbs pembentukan yang ditampilkan adalah Li_3P (-0.697 eV/atom), LiP (-0.523 eV/atom), Li_3P_7 (-0.36 eV/atom), dan LiP_7 (-0.159 eV/atom). Untuk kombinasi atom Li-Fe-O, senyawa dan Energi bebas Gibbs pembentukan yang ditampilkan adalah Li_5FeO_4 (- 2.117 eV/atom), LiFeO_2 (-2.072 eV/atom), LiO_2 (-2.067 eV/atom), Li_2FeO_2 (-1.979 eV/atom), Li_2FeO_3 (-1.965 eV/atom), Fe_2O_3 (-1.907 eV/atom), Fe_3O_4 (-1.858 eV/atom), FeO (-1.728 eV/atom), Li_2O_2 (-1.651 eV/atom), dan LiO_8 (-0.414 eV/atom).

Kata kunci: Energi bebas Gibbs pembentukan senyawa, Pymatgen, *API Key*

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN MOTTO



“Dalam berkarya, sedikit lebih beda lebih baik dari sedikit lebih baik”



Pandji Pragiwaksono

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Dengan mengucapkan syukur kepada Allah *Subhanahu wa Ta'ala* Karya ini penulis persembahkan kepada:

Allah *Subhanahu wa Ta'ala* dan Nabi Muhammad *Shallallahu 'alaihi Wasallam*

Program Studi Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

Fakultas Sains dan Teknologi

Almarhum Bapak Durokhman, Ibu Munaenah, Ang Wahyudin, Nang Tarmiji

Taher

Neng Dewi Nushratuz Zihani, Amd. A.K

Sahabat Fisika 2017

Seluruh penikmat keilmuan Sains dan Teknologi

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Assalamualaikum Warahmatullahi Wabarakatuh

Puji syukur kehadirat Allah *Subhanahu wa Ta'ala* yang telah melimpahkan rahmat, taufik serta hidayah-Nya sehingga penulis dapat menyelesaikan tugas penelitian dengan judul “*Penentuan Energi Bebas Gibbs Pembentukan Senyawa dari Diagram Fase Berbasis Python Materials Genomic (Pymatgen) dan Application Programming Interface (API) Key*” dengan baik. Laporan ini disusun secara khusus sebagai bukti bahwa penulis telah melaksanakan tugas akhir sebagai salah satu syarat kelulusan meraih gelar sarjana.

Proposal ini dapat terselesaikan dengan adanya bantuan dan dukungan dari berbagai pihak. Oleh karena itu, penulis mengucapkan banyak terima kasih kepada:

1. Prof. Dr. Phil Al Makin, MA. selaku rektor UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
2. Dr. Khurul Wardati, M.Si. selaku dekan Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta
3. Anis Yuniati, Ph.D. selaku Ketua Program Studi Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, Dosen Pembimbing Akademik, sekaligus dosen pembimbing tugas akhir yang selalu sabar membimbing, memberi nasihat, saran, doa, serta waktu yang diberikan selama penyusunan laporan ini.
4. Seluruh Dosen Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta yang telah memberikan ilmunya.

5. Almarhum Bapak Durokhman, Ibu Munaenah, Wahyudin, Mbak Nurul Ibah, dan Tarmiji Taher, selaku keluarga yang selalu memberikan kasih sayang, semangat, dan doa bagi penulis.
6. Bapa Tua Masudin dan Bibi Masturoh, serta Bpk. H. Juki (Alm.) dan Ibu Hj, Satini (Almh.) selaku Kakek/Nenek yang selalu mendoakan Saya setiap saat, terutama ketika Saya akan berangkat ke Yogyakarta
7. Dewi Nushratuz Zihani, Amd.A.K. selaku pendamping yang selalu memberikan semangat, doa, dan motivasi bagi penulis.
8. Teman-teman Fisika 2017 UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

Penulis berharap supaya penelitian ini dapat berguna dan bermanfaat bagi semua pihak. Semoga penelitian ini dapat bermanfaat untuk semua pihak dan dapat menjadi sumber referensi yang representatif, dijadikan sebagai acuan dalam melakukan kajian riset.

Indramayu, 10 Januari 2021

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Penulis

DAFTAR ISI

SURAT PENGESAHAN TUGAS AKHIR.....	i
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN SKRIPSI.....	ii
SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR.....	iii
INTISARI.....	iv
ABSTRACT.....	v
HALAMAN MOTTO.....	vi
HALAMAN PERSEMBAHAN.....	vii
KATA PENGANTAR.....	viii
DAFTAR ISI.....	x
DAFTAR GAMBAR.....	xiii
DAFTAR TABEL.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah.....	6
1.3 Tujuan Penelitian.....	6
1.4 Batasan Penelitian.....	7
1.5 Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	8
2.1 Studi Pustaka.....	8
2.2 Landasan Teori.....	10

2.2.1	Kestabilan fase.....	10
2.2.2	Energi bebas Gibbs.....	12
2.2.3	Fraksi Mol.....	14
2.2.4	Python Materials Genomic (Pymatgen).....	16
2.2.5	Litium.....	21
2.2.6	Fosfor.....	22
2.2.7	Oksigen.....	24
2.2.8	Besi.....	25
2.2.9	Presisi.....	27
BAB III METODE PENELITIAN.....		30
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian.....	30
3.2	Alat dan Bahan Penelitian.....	30
3.2.1	Perangkat keras (Hardware).....	30
3.2.2	Perangkat lunak (Software).....	30
3.3	Tahapan Penelitian.....	31
3.3.1	Instalasi Pymatgen.....	31
3.3.2	Pembuatan Diagram Fase.....	33
3.3.3	Penentuan Nilai Energi bebas Gibbs Pembentukan Senyawa.....	37
3.3.4	Penentuan komposisi Li-P untuk setiap senyawa.....	37
3.3.5	Analisis Data.....	38

BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN.....	43
4.1 Hasil Penelitian.....	43
4.1.1 Diagram fase material.....	43
4.1.2 Energi bebas Gibbs pembentukan senyawa.....	44
4.1.3 Komposisi Fosfor.....	45
4.1.4 Presisi Hasil yang sudah didapat.....	45
4.2 Pembahasan.....	47
4.2.1 Pembuatan diagram fase.....	47
4.2.2 Energi bebas Gibbs pembentukan senyawa (G_f°).....	48
4.2.3 Fraksi mol Fosfor dari diagram fase Li-P.....	48
4.2.4 Presisi hasil yang didapat.....	50
BAB V KESIMPULAN DAN SARAN.....	51
5.1 Kesimpulan.....	51
5.2 Saran.....	52
DAFTAR PUSTAKA.....	53
LAMPIRAN.....	56

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1 Gambaran umum cara kerja Pymatgen.....	17
Gambar 2.2 Contoh diagram fase.....	21
Gambar 2.3 Impedansi Li3P.....	23
Gambar 2.4 Difraksi sinar-X dari Li3P.....	24
Gambar 2.5 Representasi struktur kristal LiFeO2.....	26
Gambar 2.6 Uji kapasitansi LiFeO2.....	26
Gambar 3.1 Diagram alir instalasi Pymatgen.....	31
Gambar 3.2 Diagram alir pembuatan diagram fase berbasis Pymatgen.....	34
Gambar 3.3 Diagram alir Penentuan nilai fraksi mol.....	38
Gambar 4.1 Diagram fase Li-P.....	43
Gambar 4.2 Diagram fase Li-Fe-O.....	44

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

DAFTAR TABEL

Tabel 2.1. Penelitian-penelitian yang menjadi tinjauan pustaka.....	8
Tabel 2.2. Energi bebas Gibbs pembentukan standar beberapa senyawa.....	13
Tabel 3.1. Perangkat lunak (software) yang digunakan dalam penelitian.....	30
Tabel 4.1. Nilai G_f° dari Li-P sebagai atom penyusun.....	44
Tabel 4.2. Nilai G_f° dari Li-Fe-O sebagai atom penyusun.....	44
Tabel 4.3. Nilai Fraksi mol Fosfor dari Li-P sebagai atom penyusun.....	45
Tabel 4.4 Tingkat presisi repetability nilai G_f° Li-P.....	46
Tabel 4.5 Tingkat presisi repetability nilai G_f° Li-Fe-O.....	46
Tabel 4.6 Tingkat presisi repetability nilai fraksi mol Li-P.....	46

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Material atau biasa dikenal sebagai bahan merupakan sebuah zat yang dibutuhkan untuk membuat sesuatu (Ashby dkk., 2007). Pembentukan suatu bahan telah diabadikan dalam Al-Qur'an yang menjelaskan penciptaan langit dan bumi dan kehendak Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* untuk menciptakan sesuatu, seperti yang terkandung dalam Al-Baqarah ayat 117 berikut:

بَدِيعُ السَّمٰوٰتِ وَالْاَرْضِ وَاِذَا قَضٰى اَمْرًا فَاِنَّمَّا يُقُوْلُ لَهٗ كُنْ فَيَكُوْنُ

Artinya:

“Allah Pencipta langit dan bumi, dan bila Dia berkehendak (untuk menciptakan) sesuatu, Maka (cukuplah) Dia hanya mengatakan kepadanya: “Jadilah!” lalu jadilah ia” (Ali, 2016).

Ayat tersebut mengandung wawasan dan nilai Islami yang menjelaskan kekuasaan Allah *Subhanahu Wa Ta'ala* untuk menciptakan apapun hanya dengan sabda-Nya. Alam semesta dan material yang ada di dalamnya dengan mudah Dia ciptakan dengan kehendak dan kuasa-Nya (Jamarudin, 2010). Disinilah sains modern berusaha untuk menjelaskan secara logis bagaimana sesuatu bisa tercipta dari kehendak Tuhan, termasuk semua bahan yang ada dalam alam semesta ini.

Hal penting yang kurang diperhatikan dalam riset pembentukan suatu bahan adalah seberapa besar energi yang dibutuhkan untuk membuat bahan tersebut. Besaran ini dikenal sebagai energi bebas Gibbs pembentukan senyawa. Jika energi bebas Gibbs pembentukan dari suatu senyawa memenuhi nilai tertentu, maka senyawa tersebut tidak mudah reaktif ketika digunakan pada keadaan normal dan tetap mempertahankan manfaatnya pada skala waktu yang diharapkan. Pada keadaan yang menunjukkan nilai energi bebas Gibbs pembentukan suatu senyawa tidak memenuhi nilai tertentu, senyawa yang disintesis akan mudah korosi, terurai, polimerisasi, terbakar, atau meledak di bawah kondisi yang sudah diantisipasi atau kondisi lingkungan (Stull, 1971).

Sains modern menjelaskan setidaknya ada tiga cara untuk menentukan energi bebas Gibbs pembentukan senyawa, yaitu penelitian dengan pendekatan eksperimen, pendekatan matematis dengan perhitungan manual, dan pendekatan komputasi atau numerik (Ong dkk., 2013). Pada pendekatan eksperimen yang memanfaatkan penggunaan instrumen, prinsip yang paling populer digunakan adalah peleburan bahan baku penyusun senyawa yang akan dibuat. Dari proses tersebut, terjadi perubahan suhu dan tekanan pada sistem. Perubahan ini diidentifikasi oleh sensor suhu dan tekanan sebagai data fisis yang dibutuhkan untuk memperoleh energi bebas Gibbs pembentukan senyawa. Pada beberapa penelitian, pendekatan ini memang banyak dipakai, tetapi instrumen yang digunakan relatif berdimensi besar dan tidak semua peneliti memilikinya. Ditambah lagi, nilai energi bebas Gibbs pembentukan senyawanya hanya bisa didapat setelah peneliti memasukkan bahan baku yang

digunakan sehingga peneliti membutuhkan bahan baku secara fisik hanya untuk memperoleh nilai energi pembentukan senyawa yang disintesis (Taruminkeng dkk., 2016). Cara lain dalam menentukan energi bebas Gibbs yaitu dengan pendekatan matematis. Cara ini bisa dilakukan dengan menetapkan nilai suhu dan tekanan serta data-data fisis lain terkait bahan baku yang digunakan seperti entalpi dan energi dalam sistem (Ong dkk., 2008). Kendala utama pendekatan ini adalah ketersediaan sumber informasi dan data-data pendukung serta perhitungan yang relatif memakan waktu karena dilakukan secara manual oleh peneliti. Keterbatasan ini bisa diatasi menggunakan pendekatan komputasi. Dengan proses yang dilakukan komputer, pengguna membutuhkan ijin akses ke sumber informasi mengenai data terkait material dan menentukan material apa yang dijadikan sebagai bahan baku pembentukan senyawa. Pendekatan komputasi ini membutuhkan waktu yang relatif cepat sehingga efektif dilakukan dan tidak membutuhkan bahan baku secara fisik untuk memperoleh nilai nilai energi pembentukan senyawa (Ong dkk., 2013).

Pendekatan komputasi yang bisa dilakukan untuk memperoleh nilai energi bebas Gibbs pembentukan senyawa adalah dengan menggunakan Pymatgen. Pymatgen atau *Python Materials Genomics* merupakan pustaka pemrograman yang ditulis dalam bahasa Python yang dapat menampilkan *data science* dan statistik, termasuk nilai energi bebas Gibbs pembentukan senyawa (Ong dkk., 2013). Pustaka ini dapat diunduh secara gratis pada laman <http://materialsproject.github.com/pymatgen> yang merupakan bagian dari situs

Materials Project, kumpulan data hasil penelitian untuk kajian material. Media ini menyediakan data berupa data numerik dari struktur kristal, struktur pita, besaran termodinamika, diagram fase, momen magnet, dan sebagainya berupa *database* yang bisa diakses melalui laman <https://materialsproject.org>. Situs *Materials Project* juga menyediakan data pendukung kajian stabilitas material dan pembuatan diagram fase yang dapat digunakan untuk menentukan nilai energi bebas Gibbs pembentukan suatu senyawa. *Materials Project* dikelola oleh grup riset *Massachusetts Institute of Technology* atau MIT, perguruan tinggi di Amerika Serikat (Jain dkk., 2013). *Materials Project* menyediakan banyak data fisis dan kimia dari suatu material, termasuk di dalamnya adalah material baterai Litium. Litium merupakan material baterai yang mampu mencapai siklus pengisian sampai 1000 siklus, artinya densitas energi yang dimiliki cukup tinggi. Beberapa industri juga memanfaatkan tipe baterai ini karena memakan biaya produksi yang relatif lebih murah dibandingkan dengan baterai lain. Selain itu, baterai Litium memiliki kapasitas yang relatif tinggi dan aman ketika digunakan. Untuk mencapai keadaan tersebut, Litium perlu berikatan dengan atom lain (Mao dkk., 2020) (Marom dkk., 2011).

Unsur yang dapat berikatan dengan Litium sehingga terbentuk material baterai adalah Fosfor dan Besi. Dua atom ini memiliki permitivitas bahan yang baik sehingga sangat mempengaruhi nilai kapasitas material baterai yang dibuat. Karena, eksperimen menunjukkan bahwa permitivitas suatu bahan sebanding dengan kapastansi bahan tersebut. Jika permitivitas suatu bahan tinggi, maka kapasitas bahan tersebut juga tinggi. Selain itu, Fosfor dan Besi

juga memiliki konduktivitas termal relatif tinggi yang mampu menyebarkan panas lebih merata sehingga baterai yang digunakan lebih aman digunakan (Mao dkk., 2020) (Photos, 1989). Proses pembentukan material baterai ini juga menggunakan Oksigen sebagai unsur yang berperan agar elektron lebih mudah mengalir ketika baterai digunakan (Satriady dkk., 2016). Kombinasi atom yang bisa ditetapkan adalah kombinasi antara Li-P dan Li-Fe-O. Dari kombinasi tersebut, akan terbentuk senyawa-senyawa konduktor ionik padat yang jika diberi arus semakin tinggi hingga mencapai batas tertentu, maka impedansi atau hambatan dalam senyawa tersebut semakin rendah. Sehingga material baterai yang dihasilkan membutuhkan waktu yang relatif cepat ketika melakukan pengisian daya (Nazri, 1989).

Unsur-unsur tersebut direaksikan dengan komposisi yang tepat sesuai dengan bagian mol yang dibutuhkan untuk mensintesis senyawa tertentu agar tidak ada bahan baku yang tersisa pada reaksi dan senyawa yang disintesis lebih stabil. Jadi, peneliti bisa mengupayakan kestabilan fase suatu senyawa dengan memperhatikan komposisi bahan dari senyawa tersebut. Komposisi bahan yang tepat bisa membantu tercapainya nilai energi bebas Gibbs pembentukan senyawa yang memenuhi nilai tertentu (Macneil dkk., 2014).

Berdasarkan uraian di atas, maka pada penelitian ini dilakukan kajian terhadap penentuan energi bebas Gibbs pembentukan senyawa dari ikatan atom Litium dengan Fosfor, serta ikatan atom Litium dengan Besi dan Oksigen menggunakan Pymatgen. Kajian dimulai dari pembuatan diagram fase dari senyawa Li-P dan Li-Fe-O menggunakan Pymatgen, yang kemudian dapat

diperoleh besarnya energi bebas Gibbs dari pembentukan senyawa tersebut. Dari proses ini akan dapat diketahui komposisi masing-masing unsur agar dapat bersifat stabil.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah diuraikan, maka rumusan masalah dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Bagaimanakah diagram fase dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O menggunakan Pymatgen?
2. Berapakah nilai energi bebas Gibbs pembentukan masing-masing senyawa dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O?
3. Berapakah komposisi Litium dan Fosfor agar senyawa yang terbentuk dari susunan atom Li-P bisa stabil disintesis?

1.3 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah tersebut, maka tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui diagram fase dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O menggunakan Pymatgen
2. Mengetahui nilai energi bebas Gibbs pembentukan masing-masing senyawa yang terbentuk dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O
3. Menghitung komposisi Litium dan Fosfor agar senyawa yang terbentuk dari susunan atom Li-P bisa stabil disintesis

1.4 Batasan Penelitian

Berdasarkan latar belakang dan rumusan masalah yang telah diuraikan, maka batasan penelitian ini adalah sebagai berikut

1. Diagram fase yang dibuat berada pada keadaan sistem 0 Kelvin dan 0 atm
2. Material yang digunakan adalah Litium, Fosfor, Besi, dan Oksigen

1.5 Manfaat Penelitian

Manfaat yang diharapkan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Sebagai sumber informasi tentang skema diagram fase Li-P dan Li-Fe-O yang bisa digunakan sebagai pembandingan untuk penelitian lain
2. Sebagai sumber informasi terkait kestabilan senyawa ditinjau dari besar energi bebas Gibbs pembentukan senyawanya, khususnya pada senyawa Li-P dan Li-Fe-O
3. Sebagai sumber informasi terkait komposisi suatu senyawa yang bersifat stabil, khususnya untuk senyawa Li-P

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

BAB V

KESIMPULAN DAN SARAN

5.1 Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan pembahasan penelitian, maka dapat diperoleh kesimpulan sebagai berikut:

1. Diagram fase dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O berhasil diketahui menggunakan Pymatgen
2. Nilai energi bebas Gibbs pembentukan masing-masing senyawa yang terbentuk dari susunan atom Li-P dan Li-Fe-O berhasil diperoleh. Dari penelitian yang dilakukan untuk kombinasi atom Li-P, senyawa dan Energi bebas Gibbs pembentukan yang ditampilkan adalah Li_3P (-0.697 eV/atom), LiP (-0.523 eV/atom), Li_3P_7 (-0.36 eV/atom), dan LiP_7 (-0.159 eV/atom). Untuk kombinasi atom Li-Fe-O, senyawa dan Energi bebas Gibbs pembentukan yang ditampilkan adalah Li_5FeO_4 (- 2.117 eV/atom), LiFeO_2 (-2.072 eV/atom), LiO_2 (-2.067 eV/atom), Li_2FeO_2 (-1.979 eV/atom), Li_2FeO_3 (-1.965 eV/atom), Fe_2O_3 (-1.907 eV/atom), Fe_3O_4 (-1.858 eV/atom), FeO (-1.728 eV/atom), Li_2O_2 (-1.651 eV/atom), dan LiO_8 (-0.414 eV/atom).
3. Komposisi Litium dan Fosfor berhasil dihitung sehingga senyawa yang terbentuk dari susunan atom Li-P bisa stabil disintesis. Dari penelitian yang dilakukan, komposisi Litium yang dibutuhkan untuk berikatan dengan 1 gram Fosfor yang akan berikatan menjadi senyawa yang terbentuk dari

kombinasi keduanya adalah Li_3P (0.677 gram), LiP (0.226 gram), Li_3P_7 (0.097 gram), dan LiP_7 (0.03 gram).

5.2 Saran

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, terdapat beberapa hal yang perlu dikembangkan untuk penelitian yang akan dilakukan berikutnya. Saran pengembangan untuk penelitian selanjutnya adalah sebagai berikut:

1. Penelitian ini baru menampilkan nilai G_f° yang diperoleh dari diagram fase berbasis Pymatgen dan memungkinkan untuk dibandingkan dengan penelitian lain. Oleh karena itu, dibutuhkan berbagai perbandingan hasil dari basis keadaan fisis yang sama untuk memperkaya informasi terkait nilai G_f° suatu material.
2. Penelitian ini baru menjelaskan pembuatan diagram fase dan sangat mungkin untuk dikombinasikan dengan analisis lain yang bisa dilakukan menggunakan Pymatgen. Oleh karena itu, dibutuhkan berbagai kombinasi analisis material dalam satu *worksheet* yang ditulis seperti *chemical balance*, *chemical potential diagram*, dan lain-lain untuk mendapatkan analisis dan informasi material lebih lengkap.
3. Penelitian ini mencari tahu informasi dari dua material baterai. Oleh karena itu, penelitian selanjutnya perlu dilakukan penentuan material lain untuk mengetahui keadaan fisis material tersebut.

DAFTAR PUSTAKA

- Abdel-Ghany, A. E., Mauger, A., Groult, H., Zaghib, K., dan Julien, C. M. (2012): Structural properties and electrochemistry of α -LiFeO₂, *Journal of Power Sources*, **197**, 285–291. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2011.09.054>
- Ali, M. M. (2016): *Qur'an Suci Terjemah & Tafsir*, Citra Mulia Agung, Bekasi, 21.
- Ashby, M., Shercliff, H., dan Cebon, D. (2007): *Materials Engineering Science Processing and Design*, Cambridge, 15.
- Beegle, B. L., Modell, M., dan Reid, R. C. (1974): Thermodynamic stability criterion for pure substances and mixtures, *AIChE Journal*, **20**(6), 1200–1206. <https://doi.org/10.1002/aic.690200621>
- Ellis, B. D., dan Macdonald, C. L. B. (2006): Phosphorus(I) iodide: A versatile metathesis reagent for the synthesis of low oxidation state phosphorus compounds, *Inorganic Chemistry*, **45**(17), 6864–6874. <https://doi.org/10.1021/ic060186o>
- Huang, Kerson. (2001): *Introduction to Statistical Physics*. Institut Teknologi Massachusetts: Cambridge
- Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., dan Persson, K. A. (2013): Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation, *APL Materials*, **1**(1). <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- Jamarudin, A. (2010): Konsep Alam Semesta Menurut Al-Quran, *Jurnal Ushuluddin*, diperoleh melalui situs internet: <http://ejournal.uin-suska.ac.id/index.php/ushuludin/article/view/670/621>, **16**(2), 136–151.
- Katharina, L. (2003): Solar System Abundances and Condensation Temperatures of the Elements, *The Astrophysical Journal*, diperoleh melalui situs internet: <http://stacks.iop.org/0004-637X/591/i=2/a=1220>, **591**(2), 1220.
- Kearns, D. R. (1971): Physical and chemical properties of singlet molecular oxygen, *Chemical Reviews*, **71**(4), 395–427. <https://doi.org/10.1021/cr60272a004>
- Krupenie, P. H. (1972): The Spectrum of Molecular Oxygen, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, **1**(2), 423–534. <https://doi.org/10.1063/1.3253101>

- Lide, D. R., dan Baysinger, G. (2003): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, Oliver Sacks, New York, 153.
- Macneil, J. H., Massi, D. M., Zhang, J. H., Rosmus, K. A., Brunetta, C. D., Gentile, T. A., dan Aitken, J. A. (2014): Synthesis, structure, physicochemical characterization and electronic structure of thio-lithium super ionic conductors, Li₄GeS₄ and Li₄SnS₄, *Journal of Alloys and Compounds*, **586**, 736–744. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2013.10.011>
- Mao, E., Wang, W., Wan, M., Wang, L., He, X., dan Sun, Y. (2020): Confining ultrafine Li₃P nanoclusters in porous carbon for high-performance lithium-ion battery anode, *Nano Research*, **13**(4), 1122–1126. <https://doi.org/10.1007/s12274-020-2756-2>
- Marom, Rotem, S. Francis Amalraj, Nicole Leifer, David Jacob, dan Doron Aurbach (2011). A review of advanced and practical lithium battery materials. *Journal of Materials Chemistry*. <https://doi.org/10.1039/c0jm04225k>
- McNaught, A. D dan A Milkinson. (1997). *Compendium of Chemical Terminology, 2nd ed. (the Gold Book)*. Oxford: Blackwell Scientific Publications
- Nazri, G. (1989): Preparation, structure and ionic conductivity of lithium phosphide, *Solid State Ionics*, **34**(1-2), 97–102. [https://doi.org/10.1016/0167-2738\(89\)90438-4](https://doi.org/10.1016/0167-2738(89)90438-4)
- Ong, S., Davidson, W., Jain, A., Hautier, G., Kocher, M., Cholia, S., Gunter, D., Chevrier, V. L., Persson, K. A., dan Ceder, G. (2013): Python Materials Genomics (Pymatgen): A robust, open-source python library for materials analysis, *Computational Materials Science*, **68**, 314–319. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2012.10.028>
- Ong, S., Davidson, Cholia, S., Gunter, D., Chevrier, V. L., Persson, K. A., dan Ceder, G. (2008): Li-Fe-O₂ Phase Diagram with First Principle Calculation *Materials Science*, 189, 314–319. <https://doi.org/10.1949/j.2008.10.134>
- Photos, E. (1989): The question of meteoritic versus smelted nickel-rich iron: Archaeological evidence and experimental results, *World Archaeology*, **20**(3), 403–421. <https://doi.org/10.1080/00438243.1989.9980081>
- Pointon, A. . (1967): *An Introduction to Statistical Physics for Students*, Longman, New York, 937.
- Ram, R. S., dan Bernath, P. F. (2003): Fourier transform emission spectroscopy of the g₄Δ-a₄Δ system of FeCl, *Journal of Molecular Spectroscopy*, **221**(2), 261–

268. [https://doi.org/10.1016/S0022-2852\(03\)00225-X](https://doi.org/10.1016/S0022-2852(03)00225-X)

Róg, G., Kucza, W., dan Kozłowska-Róg, A. (2004): The standard Gibbs free energy of formation of lithium manganese oxides at the temperatures of (680, 740 and 800) K, *Journal of Chemical Thermodynamics*, **36**(6), 473–476. <https://doi.org/10.1016/j.jct.2004.02.009>

Satriady, A., Alamsyah, W., Saad, A. H. I., dan Hidayat, S. (2016): Pengaruh Luas Elektroda Terhadap Karakteristik Baterai LiFePO₄, **06**(02), 43–48.

Struzhkin, V. V., Eremets, M. I., Gan, W., Mao, H. K., dan Hemley, R. J. (2002): Superconductivity in dense lithium, *Science*, **298**(5596), 1213–1215. <https://doi.org/10.1126/science.1078535>

Stull, D. R. (1971): Identification of Potential Chemical Reaction Hazards, **48**(1239), 18–24.

Subekti, S. P. (2020): Fraksi Mol, diperoleh January 17, 2021, melalui situs internet: <https://www.zenius.net/prologmateri/kimia/a/134/fraksi-mol>.

Taruminkeng, S., Mustopa, E. J., dan Hendrajaya, L. (2016): Termodinamika Dalam Memahami Proses Pengolahan Mineral, **V**, SNF2016–ERE–37–SNF2016–ERE–42. <https://doi.org/10.21009/0305020607>

Tuoriniemi, J., Juntunen-Nurmilaukas, K., Uusvuori, J., Pentti, E., Salmela, A., dan Sebedash, A. (2007): Superconductivity in lithium below 0.4 millikelvin at ambient pressure, *Nature*, **447**(7141), 187–189. <https://doi.org/10.1038/nature05820>

Weiss, H. M. (2008): Appreciating oxygen, *Journal of Chemical Education*, **85**(9), 1218–1219. <https://doi.org/10.1021/ed085p1218>

STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

CURRICULUM VITAE

Biodata Pribadi

Nama Lengkap : Syamsul Andry
Jenis Kelamin : Laki-laki
Tempat, Tanggal Lahir : Indramayu, 17 September 1998
Alamat : Blok Brungut No. 43
RT. 07 RW. 02 Sukagumiwang, Indramayu
Email : syamsulandry@gmail.com
No. HP : 089 537 462 593 6



Latar Belakang Pendidikan Formal

Jenjang	Instansi Pendidikan	Tahun
SD	MI GUPPI Brungut	2004-2011
SMP	MTsN 13 Indramayu	2011-2014
SMA	SMAN Sukagumiwang	2014-2017
S1	Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta	2017-2021

Pengalaman Pekerjaan

Staff Administrasi BKB Nurul Fikri Yogyakarta (Mei 2017-Juni 2018)

- Bertanggung jawab penuh atas pengelolaan dan pencatatan keuangan seperti melayani pembayaran biaya bimbingan belajar, biaya pendaftaran, dan mengatur keuangan untuk *salary* karyawan

Peneliti Magang Lembaga Pengetahuan Indonesia Tangerang Selatan

- Bertanggung jawab penuh atas berjalannya riset material anti korosi seperti pengadaan alat dan bahan penelitian, penjadwalan riset, dan menyampaikan hasil yang didapatkan
- Achievement* pekerjaan: Menciptakan material $Zn_3(PO_4)_2$ sebagai material anti korosi yang dibutuhkan di perusahaan logam di Indonesia