



PENDEKATAN TEORETIS MODEL ADSORPSI KARBON DIOKSIDA PADA PEROVSKIT SrBO_3 (B = Co, Fe, Mn) MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

MEYRA NURSAHADA



**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Pendekatan Teoretis Model Adsorpsi Karbon Dioksida pada Perovskit SrBO_3 ($B = \text{Co}, \text{Fe}, \text{Mn}$) Menggunakan *Density Functional Theory*” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Agustus 2026

Meyra Nursahada
G4401221089

- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

ABSTRAK

MEYRA NURSAHADA. Pendekatan Teoretis Model Adsorpsi Karbon Dioksida pada Perovskit SrBO_3 (B = Co, Fe, Mn) Menggunakan *Density Functional Theory*. Dibimbing oleh KOMAR SUTRIAH dan MOHAMMAD KHOTIB.

Perovskit oksida berbasis Sr (SrBO_3) berpotensi sebagai adsorben CO_2 karena kestabilan dan selektivitasnya yang unggul. Penelitian ini bertujuan menghitung energi adsorpsi CO_2 pada permukaan perovskit SrBO_3 (B = Co, Fe, Mn) menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) dan menjelaskan peran kation B dalam sistem adsorpsi untuk menentukan kation B paling potensial dari logam transisi yang dipilih. Sistem adsorpsi dengan konfigurasi H1, H2, dan V dioptimasi, kemudian energi adsorpsi CO_2 dihitung menggunakan fungsi pertukaran-korelasi GGA-PBE. Konfigurasi H2 sebagai konfigurasi paling stabil pada ketiga perovskit menghasilkan energi adsorpsi sebesar $-3,688$ eV (SrCoO_3), $-3,967$ eV (SrFeO_3), dan $-4,094$ eV (SrMnO_3). Perbandingan struktur elektronik perovskit murni dengan konfigurasi H2 mengungkapkan perbedaan energi adsorpsi dikendalikan oleh tingkat kovalensi ikatan B–O dan konfigurasi elektron kation B. Berdasarkan hasil kalkulasi, energi adsorpsi, derajat aktivasi geometri CO_2 , dan perubahan struktur elektronik, perovskit SrMnO_3 menunjukkan kemampuan adsorpsi terbaik.

Kata kunci: adsorpsi, DFT, karbon dioksida, kation B, perovskit oksida.

ABSTRACT

MEYRA NURSAHADA. Theoretical Study of Carbon Dioxide Adsorption on SrBO_3 Perovskites (B = Co, Fe, Mn) Using Density Functional Theory. Supervised by KOMAR SUTRIAH and MOHAMMAD KHOTIB.

Strontium-based oxide perovskites (SrBO_3) have attracted considerable attention as CO_2 adsorbents owing to their excellent stability and selectivity. This study aimed to calculate the CO_2 adsorption energies on SrBO_3 (B = Co, Fe, Mn) perovskite surfaces using Density Functional Theory (DFT) and to explain the role of B-site cations in the adsorption mechanism in order to identify the most promising transition metal among the selected compositions. Adsorption systems with H1, H2, and V configurations were geometrically optimized, and the CO_2 adsorption energies were calculated using the GGA-PBE exchange-correlation functional. The H2 configuration was found to be the most stable adsorption mode for all three perovskites, yielding adsorption energies of $-3,688$ eV (SrCoO_3), $-3,967$ eV (SrFeO_3), and $-4,094$ eV (SrMnO_3). Comparison of the electronic structures of the pristine perovskites and the H2 adsorption systems revealed that the differences in adsorption energies are governed by the covalency of the B–O bond and the electronic configuration of the B-site cation. Based on the calculated adsorption energies, the degree of CO_2 geometric activation, and the electronic structure modifications, SrMnO_3 exhibited the most favorable CO_2 adsorption performance among the investigated systems.

Keywords: adsorption, B cation, carbon dioxide, DFT, perovskite oxide.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



- Hak Cipta Dilindungi Undang-undang
1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
 2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 2026
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.



PENDEKATAN TEORETIS MODEL ADSORPSI KARBON DIOKSIDA PADA PEROVSKIT SrBO_3 ($\text{B} = \text{Co}, \text{Fe}, \text{Mn}$) MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

MEYRA NURSAHADA

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Kimia

**DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**

@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

- 1 Dr. Tetty Kemala, S.Si., M.Si.
- 2 Dr. Luthfan Irfana, S.Si., M.Si.
- 3 Dr. Deden Saprudin, S.Si., M.Si.



Judul Skripsi : Pendekatan Teoretis Model Adsorpsi Karbon Dioksida pada
Perovskit SrBO_3 (B = Co, Fe, Mn) Menggunakan *Density*
Functional Theory
Nama : Meyra Nursahada
NIM : G4401221089

@Hak cipta milik IPB University

Disetujui oleh
Pembimbing 1:
Dr. Drs. Komar Sutriah, M.Si.

Pembimbing 2:
Dr. Mohammad Khotib, M.Si., S.Si.

Diketahui oleh
Ketua Departemen Kimia:
Prof. Dr. Dra Dyah Iswantini Pradono, M.Sc.Agr.
NIP 196707301991032001

Tanggal Ujian: 20 Juli 2026

Tanggal Lulus:



vi

@Hak cipta milik IPB University

IPB University



IPB University
— Bogor Indonesia —

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Perpustakaan IPB University

PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan Januari sampai bulan Mei 2026 ini ialah kemampuan adsorpsi CO₂ pada permukaan perovskit, dengan judul “Pendekatan Teoretis Model Adsorpsi Karbon Dioksida pada Perovskit SrBO₃ (B = Co, Fe, Mn) Menggunakan *Density Functional Theory*”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. Drs. Komar Sutriah, M.Si., dan Dr. Mohammad Khotib, M.Si., S.Si., yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada Ayah Yuyun Sudarmono, Ibu Imas Samsiah, Nenek Manah, Kakak Hasia Nurlana Fijaswati, Adik Amrullah Syahputra, Adik Triyoga Darmawangsa, serta seluruh keluarga yang telah memberikan dukungan, doa, dan kasih sayangnya. Penulis juga menyampaikan terima kasih kepada Anastasia Putri, Nazwah Zahratul Hikmah, Siklononana, dan rekan-rekan kimia angkatan 59 yang telah membantu, memberikan masukan, saran, motivasi, dan dukungan moral sehingga penulis dapat melaksanakan dan menyelesaikan penelitian ini.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Agustus 2026

Meyra Nursahada



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	x
DAFTAR GAMBAR	x
DAFTAR LAMPIRAN	x
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	3
1.3 Tujuan	3
1.4 Manfaat	3
II METODE	4
2.1 Waktu dan Tempat	4
2.2 Alat dan Bahan	4
2.3 Prosedur Kerja	4
2.4 Analisis Data	6
III HASIL DAN PEMBAHASAN	7
3.1 Adsorpsi CO ₂ pada Permukaan SrBO ₃	7
3.2 Struktur Elektronik Permukaan SrBO ₃	10
3.3 Peran Kation B dalam Adsorpsi CO ₂ dan Penentuan Logam Transisi Terbaik	13
IV SIMPULAN DAN SARAN	15
4.1 Simpulan	15
4.2 Saran	15
DAFTAR PUSTAKA	16
LAMPIRAN	19
RIWAYAT HIDUP	28



DAFTAR TABEL

2.1	Data kristalografi perovskit SrCoO_3 , SrFeO_3 , dan SrMnO_3	4
2.2	Konfigurasi CO_2 pada sistem adsorpsi	5
3.1	Panjang ikatan dan sudut molekul CO_2 pada berbagai konfigurasi adsorpsi perovskit SrCoO_3 , SrFeO_3 , dan SrMnO_3	8
3.2	Energi adsorpsi CO_2 pada berbagai konfigurasi adsorpsi perovskit SrCoO_3 , SrFeO_3 , dan SrMnO_3	9

DAFTAR GAMBAR

1.1	Struktur kristal ideal perovskit tipe ABO_3	2
3.1	Sistem adsorpsi CO_2 —permukaan perovskit teroptimasi pada konfigurasi (a) H1, (b) H2, dan (c) V	7
3.2	Pemecahan orbital d dalam medan kristal kubik	9
3.3	Struktur elektronik (a) SrCoO_3 , (b) SrFeO_3 , dan (c) SrMnO_3 murni	10
3.4	Struktur elektronik (a) SrCoO_3 , (b) SrFeO_3 , dan (c) SrMnO_3 setelah adsorpsi CO_2	12
3.5	Konfigurasi elektron Co^{4+} , Fe^{4+} , dan Mn^{4+}	12

DAFTAR LAMPIRAN

1	Diagram alir penelitian	20
2	Contoh masukan QE untuk optimasi struktur	21
3	Contoh luaran koordinat kartesius QE setelah optimasi geometri	22
4	Contoh masukan QE untuk perhitungan energi total	23
5	Contoh luaran QE untuk perhitungan energi total	24
6	Contoh masukan QE untuk perhitungan struktur pita	24
7	Contoh masukan QE untuk perhitungan kerapatan keadaan	25
8	Hasil kalkulasi energi total kompleks, adsorbat, dan adsorben	27