

SKRIPSI

STUDI *DENSITY FUNCTIONAL THEORY* (DFT) DAN *GRAND CANONICAL MONTE CARLO* (GCMC) TERHADAP PENGARUH DOPING ATOM B, N SERTA LOGAM Mg DALAM MENINGKATKAN KAPASITAS PENYIMPANAN HIDROGEN PADA MOF-650

STUDY OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) AND GRAND CANONICAL MONTE CARLO (GCMC) ON THE EFFECT OF DOPING B, N ATOMS AND Mg METAL IN ENHANCING HYDROGEN STORAGE CAPACITY OF MOF-650

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat memperoleh derajat
Sarjana Sains Ilmu Kimia



AHMAD SIRRULLAH
19/442498/PA/19247

**PROGRAM STUDI KIMIA
DEPARTEMEN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS GADJAH MADA
YOGYAKARTA**

2023

HALAMAN PENGESAHAN

SKRIPSI

**STUDI DENSITY FUNCTIONAL THEORY (DFT) DAN GRAND
CANONICAL MONTE CARLO (GCMC) TERHADAP PENGARUH
DOPING ATOM B, N SERTA LOGAM Mg DALAM MENINGKATKAN
KAPASITAS PENYIMPANAN HIDROGEN PADA MOF-650**

Telah dipersiapkan dan disusun oleh

AHMAD SIRRULLAH
19/442498/PA/19247

Telah dipertahankan di depan Tim Pengujian
Pada tanggal 24 Juli 2023

Susunan Tim Penguji

Mengetahui,
a.n. Dekan FMIPA UGM
Wakil Dekan Bidang Pendidikan, Pengajaran
dan Kesiswaan

Prof. Drs. Roto, M.Eng., Ph.D.
NIP. 196711171993031020



**Dr. rer. nat Niko Prasetyo, S.Si.,
M.Sc.**
Pembimbing I



**Fajar Inggit Pambudi, S.Si., M.Sc.,
Ph.D.**
Penguji I



**Mokhammad Fajar Pradipta, S.Si.,
M.Eng.**
Pembimbing II



**Dr. M. Idham Darussalam Mardjan,
S.Si., M.Sc.**
Penguji II