



**KONTRAK PENELITIAN
DASAR**
Tahun Anggaran 2022
Nomor : B/ 142 /UN47.D1/PT.01.03/2022

Pada hari ini **Kamis** tanggal **Enam Belas** bulan Juni tahun Dua Ribu Dua Puluh Dua, kami yang bertandatangan di bawah ini :

- 1. Prof. Dr. Novri Y.
Kandowangko, M.P** : Ketua LPPM Universitas Negeri Gorontalo, dalam hal ini bertindak untuk dan atas nama Universitas Negeri Gorontalo, yang berkedudukan di Jln. Jenderal Sudirman No. 6 Kota Gorontalo, untuk selanjutnya disebut **PIHAK PERTAMA**;
- 2. Dr. Akram La Kilo, M.Si.** : Dosen Fakultas Matematika dan IPA Universitas Negeri Gorontalo, dalam hal ini bertindak sebagai pengusul dan Ketua Pelaksana Penelitian Tahun Anggaran 2022 untuk selanjutnya disebut **PIHAK KEDUA**.

PIHAK PERTAMA dan **PIHAK KEDUA**, secara bersama-sama sepakat mengikatkan diri dalam suatu Kontrak Penelitian Dasar Tahun Anggaran 2022 dengan ketentuan dan syarat-syarat sebagai berikut :

Pasal 1
Ruang Lingkup Kontrak

PIHAK PERTAMA memberi pekerjaan kepada **PIHAK KEDUA** dan **PIHAK KEDUA** menerima pekerjaan tersebut dari **PIHAK PERTAMA**, untuk melaksanakan dan menyelesaikan Penelitian Dasar Tahun Anggaran 2022 dengan judul "**Analisis Posisi Dopan Mn dan La yang Didoping pada Fasa Aurivillius PbBi₂Nb₂O₉ sebagai Material Feroelektronmagnetik: Simulasi Atomistik**".

Pasal 2
Dana Penelitian

- (1) Besarnya dana untuk melaksanakan penelitian dengan judul sebagaimana dimaksud pada Pasal 1 adalah sebesar **Rp. 15.000.000 (Lima Belas Juta Rupiah)** sudah termasuk pajak
- (2) Dana Penelitian sebagaimana dimaksud pada ayat (1) dibebankan pada Daftar Isian Pelaksanaan Anggaran (DIPA) Universitas Negeri Gorontalo Nomor : **SP DIPA : 023.17.2.677521/2022 tanggal 17 November 2021**

Pasal 3 **Personalia Penelitian**

Susunan personalia penelitian ini sebagai berikut :

- (1) Ketua Penelitian : Dr. Akram La Kilo, M.Si.
(2) Anggota : Jafar La Kilo, S.Pd, M.Sc

Pasal 4 **Tata Cara Pembayaran Dana Penelitian**

- (1) **PIHAK PERTAMA** akan membayarkan Dana Penelitian kepada **PIHAK KEDUA** secara bertahap dengan ketentuan sebagai berikut:
- Pembayaran Tahap Pertama sebesar 70% dari total dana penelitian yaitu $70\% \times 15.000.000 = \text{Rp. } 10.500.000$ (**Sepuluh Juta Lima Ratus Ribu Rupiah**), yang akan dibayarkan oleh **PIHAK PERTAMA** kepada **PIHAK KEDUA** setelah **PARA PIHAK** menandatangani kontrak penelitian.
 - Pembayaran Tahap Kedua sebesar 30% dari total dana penelitian yaitu $30\% \times \text{Rp. } 15.000.000 = \text{Rp. } 4.500.000$ (**Empat Juta Lima Ratus Ribu Rupiah**), dibayarkan oleh **PIHAK PERTAMA** kepada **PIHAK KEDUA** setelah **PIHAK KEDUA** menyelesaikan semua kewajiban yaitu Laporan Akhir Penelitian, Catatan Harian, Catatan Keuangan, Unggah SIMLIT-UNG dan Luaran Penelitian.
- (2) Dana Penelitian sebagaimana dimaksud pada ayat (1) akan disalurkan oleh **PIHAK PERTAMA** kepada **PIHAK KEDUA** ke rekening sebagai berikut :

Nama	:	Akram La Kilo
Nomor Rekening	:	0074816636
Nama Bank	:	BNI

Pasal 5 **Jangka Waktu**

Jangka waktu pelaksanaan penelitian sebagaimana dimaksud dalam Pasal 1 sampai selesai 100%, adalah terhitung sejak **Tanggal 17 Juni 2022** dan berakhir pada **Tanggal 10 November 2022**

Pasal 6 **Target Luaran**

- (1) **PIHAK KEDUA** berkewajiban untuk mencapai target luaran wajib penelitian berupa **Jurnal Internasional Bereputasi Q3** dan **Jurnal Nasional Terakreditasi Sinta 2** yang keseluruhan pendanaan administrasi dibiayai oleh **PIHAK KEDUA**.
- (2) **PIHAK KEDUA** berkewajiban untuk menyampaikan luaran sebagaimana dimaksud pada ayat (1) kepada **PIHAK PERTAMA**.

Pasal 7
Hak dan Kewajiban

(1) Hak dan Kewajiban **PIHAK KEDUA**:

- a. **PIHAK KEDUA** berhak menerima dana penelitian dari **PIHAK PERTAMA** dengan jumlah sebagaimana dimaksud dalam Pasal 2 ayat (1);
- b. **PIHAK KEDUA** berkewajiban untuk bertanggungjawab dalam penggunaan dana penelitian yang diterimanya sesuai dengan proposal kegiatan yang telah disetujui;

Pasal 8
Pencantuman Pemberi Dana Penelitian Dalam Publikasi Ilmiah

- (1) **PIHAK KEDUA** berkewajiban mencantumkan sumber pembiayaan atas dana yang diterima pada publikasi ilmiah yang diterbitkan;
- (2) Pencantuman sumber pembiayaan dimaksud, ditulis pada *hardcopy* laporan hasil publikasi ilmiah baik halaman sampul dan lembar identitas publikasi tersebut;
- (3) **PIHAK KEDUA** mencantumkan lembar identitas luaran penelitian berupa sumber pemberi dana dalam hal ini **Lembaga Penelitian dan Pengabdian kepada Masyarakat Universitas Negeri Gorontalo** tahun anggaran 2022.

Pasal 9
Laporan Pelaksanaan Penelitian

- (1) **PIHAK KEDUA** berkewajiban untuk menyampaikan kepada **PIHAK PERTAMA** berupa laporan akhir penelitian mengenai luaran penelitian dan rekapitulasi penggunaan anggaran sesuai dengan jumlah dana yang diberikan oleh **PIHAK PERTAMA** yang tersusun secara sistematis sesuai pedoman yang ditentukan oleh **PIHAK PERTAMA**.
- (2) **PIHAK KEDUA** berkewajiban mengunggah Laporan Akhir Penelitian dan Catatan harian penelitian yang telah dilaksanakan ke SIMLIT-UNG paling lambat **8 November 2022**
- (3) **PIHAK KEDUA** berkewajiban menyerahkan *Hardcopy* Laporan Akhir Penelitian dan Rekapitulasi Penggunaan Anggaran 100% kepada **PIHAK PERTAMA**, paling lambat **12 November 2022**
- (4) **PIHAK KEDUA** berkewajiban mengunggah Laporan Akhir pada SIMLIT-UNG

Pasal 10
Monitoring dan Evaluasi

PIHAK PERTAMA dalam hal ini Lembaga Penelitian dan Pengabdian Kepada Masyarakat (LPPM) Universitas Negeri Gorontalo akan melakukan Monitoring dan Evaluasi internal terhadap kemajuan pelaksanaan Penelitian di **bulan September 2022**.

Pasal 11 Penilaian Luaran

Penilaian luaran penelitian dilakukan oleh Komite Penilai/*Reviewer* Luaran sesuai dengan ketentuan yang berlaku.

Pasal 12 Penggantian Ketua Pelaksana

- (1) Apabila **PIHAK KEDUA** selaku ketua pelaksana tidak dapat melaksanakan Penelitian ini, maka **PIHAK KEDUA** wajib mengusulkan pengganti ketua pelaksana yang merupakan salah satu anggota tim kepada **PIHAK PERTAMA**.
- (2) Apabila **PIHAK KEDUA** tidak dapat melaksanakan tugas dan tidak ada pengganti ketua sebagaimana dimaksud pada ayat(1), maka **PIHAK KEDUA** harus mengembalikan dana penelitian kepada **PIHAK PERTAMA** yang selanjutnya disetor ke Kas Negara.
- (3) Bukti setor sebagaimana dimaksud pada ayat (2) disimpan oleh **PIHAK PERTAMA**.

Pasal 13 Sanksi

- (1) Apabila sampai dengan batas waktu yang telah ditetapkan untuk melaksanakan Penelitian ini telah berakhir, namun **PIHAK KEDUA** belum menyelesaikan tugasnya diantaranya Laporan Akhir Penelitian, Catatan Harian, Catatan Keuangan, Unggah SIMLIT-UNG dan Luaran wajib/tambahan, maka **PIHAK KEDUA** dikenakan sanksi administratif berupa penghentian pembayaran dan tidak dapat mengajukan proposal penelitian dalam kurun waktu dua tahun berturut-turut.
- (2) Apabila **PIHAK KEDUA** tidak dapat mencapai target luaran sebagaimana dimaksud dalam Pasal 5, maka kekurangan capaian target luaran tersebut akan dicatat sebagai hutang **PIHAK KEDUA** kepada **PIHAK PERTAMA** yang apabila tidak dapat dilunasi oleh **PIHAK KEDUA**, akan berdampak pada kesempatan **PIHAK KEDUA** untuk mendapatkan pendanaan penelitian atau hibah lainnya yang dikelola oleh **PIHAK PERTAMA**.

Pasal 14 Pembatalan Perjanjian

- (1) Apabila dikemudian hari terhadap judul Penelitian sebagaimana dimaksud dalam Pasal 1 ditemukan adanya duplikasi dengan Penelitian lain dan/atau ditemukan adanya ketidakjujuran, itikad tidak baik, dan/atau perbuatan yang tidak sesuai dengan kaidah ilmiah dari atau dilakukan oleh **PIHAK KEDUA**, maka perjanjian Penelitian ini dinyatakan batal dan **PIHAK KEDUA** wajib mengembalikan dana penelitian yang telah diterima kepada **PIHAK PERTAMA** yang selanjutnya akan disetor ke Kas Negara.
- (2) Bukti setor sebagaimana dimaksud pada ayat (1) disimpan oleh **PIHAK PERTAMA**.

Pasal 15
Pajak-Pajak

Hal-hal dan/atau segala sesuatu yang berkenaan dengan kewajiban pajak berupa PPN dan/atau PPh menjadi tanggungjawab **PIHAK KEDUA** dan harus dibayarkan oleh **PIHAK KEDUA** ke kantor pelayanan pajak setempat sesuai ketentuan yang berlaku.

Pasal 16
Peralatan dan/atau alat Hasil Penelitian

Hasil Pelaksanaan Penelitian ini yang berupa peralatan dan/atau alat yang dibeli dari pelaksanaan Penelitian ini adalah milik Negara yang dapat dihibahkan kepada Universitas Negeri Gorontalo sesuai dengan ketentuan peraturan perundang-undangan.

Pasal 17
Penyelesaian Sengketa

Apabila terjadi perselisihan antara **PIHAK PERTAMA** dan **PIHAK KEDUA** dalam pelaksanaan perjanjian ini akan dilakukan penyelesaian secara musyawarah dan mufakat, dan apabila tidak tercapai penyelesaian secara musyawarah dan mufakat maka penyelesaian dilakukan melalui proses hukum.

Pasal 18
Lain-lain

- (1) **PIHAK KEDUA** menjamin bahwa penelitian dengan judul tersebut di atas belum pernah dibiayai dan/atau diikutsertakan pada Pendanaan Penelitian lainnya, baik yang diselenggarakan oleh instansi, lembaga, perusahaan atau yayasan, baik di dalam maupun di luar negeri.
- (2) Segala sesuatu yang belum cukup diatur dalam Perjanjian ini dan dipandang perlu diatur lebih lanjut dan dilakukan perubahan oleh **PARA PIHAK**, maka perubahan-perubahannya akan diatur dalam perjanjian tambahan atau perubahan yang merupakan satu kesatuan dan bagian yang tidak terpisahkan dari Perjanjian ini.

Perjanjian ini dibuat dan ditandatangani oleh PARA PIHAK pada hari dan tanggal tersebut di atas, dibuat dalam rangkap 2 (dua) dan bermaterai cukup sesuai dengan ketentuan yang berlaku, yang masing-masing mempunyai kekuatan hukum yang sama.

PIHAK PERTAMA



Prof. Dr. Novri Y. Kandowangko, M.P.
NIP. 196811101993032002

PIHAK KEDUA

Dr. Akram La Kilo, M.Si.
NIP. 197704112003121001



KEMENTERIAN PENDIDIKAN, KEBUDAYAAN,
RISET, DAN TEKNOLOGI
UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO
Jalan Jenderal Sudirman, Nomor 6, Kota Gorontalo
Telepon (0435) 821125, Faksimile (0435) 821752
Laman www.ung.ac.id

**KEPUTUSAN REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO
NOMOR 510 /P/2022**

TENTANG

**DOSEN PENERIMA PENDANAAN PENELITIAN
PENERIMAAN NEGARA BUKAN PAJAK TAHUN ANGGARAN 2022**

REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO,

Menimbang : a. bahwa dalam rangka mendukung pelaksanaan Tri Dharma Perguruan Tinggi di lingkungan Universitas Negeri Gorontalo, maka perlu memberikan pendanaan kepada Dosen dalam melaksanakan penelitian;
b. bahwa berdasarkan pertimbangan sebagaimana dimaksud dalam huruf a, perlu menerbitkan Keputusan Rektor Universitas Negeri Gorontalo tentang Dosen Penerima Pendanaan Penelitian Penerimaan Negara Bukan Pajak Tahun Anggaran 2022;

Mengingat : 1. Undang-Undang Nomor 17 Tahun 2003 tentang Keuangan Negara (Lembaran Negara Republik Indonesia Tahun 2003 Nomor 47, Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 4286);
2. Undang-Undang Nomor 20 Tahun 2003 tentang Sistem Pendidikan Nasional (Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 4301);
3. Undang-Undang Nomor 14 Tahun 2005 tentang Guru dan Dosen (Lembaran Negara Republik Indonesia Tahun 2005 Nomor 157, Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 4586);
4. Undang-Undang Nomor 12 Tahun 2012 tentang Pendidikan Tinggi (Lembaran Negara Republik Indonesia Tahun 2012 Nomor 158, Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 5336);
5. Peraturan Pemerintah Nomor 37 Tahun 2009 tentang Dosen (Lembaran Negara Republik Indonesia Tahun 2009 Nomor 76, Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 5007);

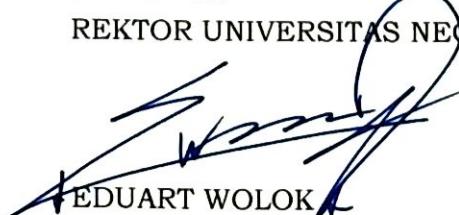
6. Peraturan Pemerintah Nomor 4 Tahun 2014 tentang Penyelenggaraan Pendidikan Tinggi dan Pengelolaan Pendidikan Tinggi (Lembaran Negara Republik Indonesia Tahun 2014 Nomor 16, Tambahan Lembaran Negara Republik Indonesia Nomor 5500);
7. Peraturan Menteri Riset, Teknologi dan Pendidikan Tinggi Nomor 11 tahun 2015 tentang Organisasi dan Tata Kerja Universitas Negeri Gorontalo (Berita Negara Republik Indonesia Tahun 2015 Nomor 605);
8. Peraturan Menteri Riset, Teknologi, dan Pendidikan Tinggi Nomor 82 Tahun 2017 tentang Statuta Universitas Negeri Gorontalo (Berita Negara Republik Indonesia Tahun 2017 Nomor 1919);
9. Peraturan Menteri Pendidikan dan Kebudayaan Nomor 3 Tahun 2020 tentang Standar Nasional Pendidikan Tinggi (Berita Negara Republik Indonesia Tahun 2020 Nomor 47);
10. Keputusan Menteri Keuangan Nomor 131/KMK.05/2009 tentang Penetapan Universitas Negeri Gorontalo pada Departemen Pendidikan Nasional Sebagai Instansi Pemerintah yang menerapkan Pengelolaan Keuangan Badan Layanan Umum (PK-BLU);
11. Keputusan Menteri Riset, Teknologi, dan Pendidikan Tinggi Nomor 32029/M/KP/2019 tentang Pengangkatan Rektor Universitas Negeri Gorontalo Periode Tahun 2019-2023.

MEMUTUSKAN:

- Menetapkan : KEPUTUSAN REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO TENTANG DOSEN PENERIMA PENDANAAN PENELITIAN PENERIMAAN NEGARA BUKAN PAJAK TAHUN ANGGARAN 2022.
- KESATU : Menetapkan Dosen penerima pendanaan penelitian penerimaan negara bukan pajak tahun anggaran 2022, sebagaimana tercantum dalam lampiran yang merupakan bagian tidak terpisahkan dari Keputusan Rektor ini;
- KEDUA : Biaya yang timbul sehubungan dengan surat keputusan ini dibebankan pada Daftar Isian Pelaksanaan Anggaran (DIPA) Universitas Negeri Gorontalo Tahun 2022 Nomor: 023.17.2.677521/2021 tanggal 17 November 2021;
- KETIGA : Keputusan Rektor ini berlaku pada tanggal ditetapkan.

Ditetapkan di Gorontalo
pada tanggal 6 Juni 2022

REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO,



A handwritten signature in black ink, appearing to read "EDUART WOLOK". The signature is fluid and includes a stylized circular mark to the right.

LAMPIRAN
KEPUTUSAN REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO
NOMOR 510 /P/2022
TENTANG
DOSEN PENERIMA PENDANAAN PENELITIAN
PENERIMAAN NEGARA BUKAN PAJAK TAHUN ANGGARAN
2022

DOSEN PENERIMA PENDANAAN PENELITIAN
PENERIMAAN NEGARA BUKAN PAJAK TAHUN ANGGARAN 2022

NO	KETUA DAN ANGGOTA PENELITI	JUDUL	SKEMA	BIAYA
1	Dr. Ismail Djakaria, M.Si Dr. Hasan S. Pangoro, M.Si	Dinamika Model Epidemi SIS-Orde Fraksional (Susceptible-Infected-Susceptible) dengan Laju Pertumbuhan Logistik dan Efek Allee	Penelitian Dasar	Rp 15.000.000
2	Wiwini Rewini Kunusa, S.Pd, M.Si La Alio, S.Pd, M.Si - Drs. Mangara Sihaloho, M.Pd	Sintesis dan Karakterisasi 5-Hidroksimetilfurfural Berbasis Konversi Selulosa Ampas Sagu sebagai Prekursor Biofuel dalam Media ZnCl ₂ dan Katalis CrCl ₃	Penelitian Dasar	Rp 15.000.000
3	Dr. Yuliana Retnowati, S.Si, M.Si Dr. Abubakar Sidik Katili, S.Pd, M.Sc	Biodiversitas Bakteri Penghasil Antibiotik Yang Berasosiasi Dengan Sponge Di Perairan Pesisir Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp 15.000.000

4	Drs. Muh Rifai Katili, M.Kom., Ph.D. Lanto Ningrayati Amali, S.Kom, M.Kom, Ph.D Sri Nilawaty Lahay, S.Kom, M.Kom	Analisis Faktor-faktor Yang Mempengaruhi Implementasi Knowledge Management di Universitas Negeri Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
5	Zamroni Abdussamad, SH.MH Mellisa Towadi, SH, MH	ANALISIS KONSEPSI NEUTRALITY LAW DALAM PERSPEKTIF PERANG DI ERA DIGITAL: STUDI KASUS RUSIA v. UKRAINA	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
6	Dr. I Wayan Sudana, S.Sn, M.Sn Isnawati Mohamad, S.Pd, M.Pd	SENI KERAJINAN TIOHU GORONTALO: POTENSI, PERMASALAHAN, DAN KONSEP PENGEMBANGANNYA	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
7	Dr. Mohamad Syafri Tuloli, ST, MT	Pengembangan Aplikasi Pendekripsi Dugaan Kecurangan pada Ujian berbasis Formulir Online	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
8	Muhammad Sarlin, S.Pd, M.Pd Ikhwan Hidayat, S.Kom, MT - Muhammad Yasser Arafat, S.Pd, M.Pd - Dr. Candra Cuga, M.Pd	Self-Study Platform (SSP) Bebasis Solar Sell Untuk Meningkatkan Mutu Pendidikan Di Daerah 3T	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
9	Ernawati, ST, MT Niniiek Pratiwi, ST, MT	Model Eco-Cooler Ramah Lingkungan Dari Material Pengelolaan Limbah	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
10	Miftahul Khair Kadim, S.Pi, M.P Faizal Kasim, S.Ik, M.Si	Larva Trichoptera (Familii Hydropsychidae) sebagai Indikator Perairan Terkontaminasi Logam Berat (Studi Kasus di Sungai Bone, Gorontalo)	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
11	Dr. Herlina Rasjid, SE., MM Dr. Harun Blongkod, S.Pd, Ak, MSA	Manajemen Aset dan Dana Pihak Ketiga Terhadap Nilai Perusahaan dengan Profitabilitas Sebagai Variabel Antara pada Industri Keuangan di Bursa Efek Indonesia	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000

12	Lanto Miriatin Amali, S.Sos, M.Si Srie Isnawaty Pakaya, S.Pd, M.Si	PENGARUH MEKANISME CORPORATE GOVERNANCE DAN LAVERAGE TERHADAP MANAJEMEN LABA DAN KINERJA KEUANGAN PERUSAHAAN (STUDI PADA PERUSAHAAN MANUFAKTUR YANG TERDAFTAR DI BURSA EFEK INDONESIA)	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
13	Resmawan, S.Pd., M.Si Sri Lestari Mahmud, S.Pd, M.Si	Model Matematika Penyebaran Penyakit Kolera dengan Treatment dan Sanitasi Lingkungan	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
14	Wawan Pembengo, SP, M.Si Suyono Dude, S.Ag, M.Pd.I	EFEKTIFITAS TEKNIK GRAFTING PADA TANAMAN DURIAN (Durio zibethinus Murr) BERDASARKAN PANJANG ENTERES DAN TIPE SUNGKUP	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
15	Ns. Yuniar Mansye Soeli, M.Kep.,Sp.Kep.J. Zulkifli B. Pomalango, S.Kep, Ns M.Kep	Pengaruh simulasi bystander CPR dan butterfly hug therapy terhadap peningkatan kemampuan memberikan pertolongan kegawatdaruratan henti jantung akibat bencana pada siswa SMA Muhammadiyah Kota Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
16	Weny Almoravid Dungga, SH., MH Abdul Hamid Tome, SH, MH	Kajian Model Perlindungan Hukum bagi Usaha Mikro Kecil dan Menengah (UMKM) di Kota Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
17	Funco Tamipu, ST.MA Munirah Tuli, S.Pi, M.Si	Peran Sosial Kelembagaan Desa dalam Rangka Penguatan Ekonomi Kawasan Masyarakat Pesisir Kabupaten Pohuwato Provinsi Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000
18	Dr. Akram La Kilo, M.Si. Jafar La Kilo, S.Pd, M.Sc	Analisis Posisi Dopan Mn dan La yang Didoping pada Fasa Aurivillius PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ sebagai Material Feroelektromagnetik: Simulasi Atomistik	Penelitian Dasar	Rp	15.000.000

19	Dr. Usman Pakaya, S.S., M.A Titien Fatmawaty Mohammad, S.Pd, M.App.Ling	Covid-19 terms: is it neologism?	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
20	Nurwan, S.Pd., M.Si Isran K. Hasan, S.Pd, M.Si	Implementasi Fuzzy Geographically Weighted Clustering dengan Optimasi Gravitational Search Algorithm pada Data Stunting di Indonesia .	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
21	Dr. Hapsawati Taan, ST., M.M Dr. Rahmatiah, S.Pd, M.Si Dondick W. Wirot, S.Ip, M.S	PENGARUH AKSES INFORMASI DAN INOVASI DALAM MENINGKATKAN KINERJA UKM INDUSTRI GULA AREN DI KABUPATEN BONE BOLANGO	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
22	Jafar Lantowa, S.Pd., M.A Rahmatan Idul, SS, MA	Konstruksi Ideologi Media Digital terkait Diskursus Kebijakan Pemerintah di Tengah Pandemi	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
23	Mahdalena Sy. Pakaya, S.Farm., M.Si. Apt. Endah Nurrohwinta Djuarno, M.Sc, Apt	Efektivitas Kombinasi Ekstrak Kulit Jeruk Nipis dan Daun Miana Terhadap Bakteri <i>Staphylococcus aureus</i> , <i>Streptococcus pneumoniae</i> dan <i>Klebsiella pneumoniae</i> Penyebab Pneumonia	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
24	Dewa Gede Eka Setiawan, S.Pd., M.Sc. Idawati Supu, S.Si, M.Si	Pembuatan Film ZnO (Zinc Oxide) Tersintesisasi Dye Alami Untuk Aplikasi Sel Surya	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
25	Dra. Aryati Abdul, M.Kes Febriyanti, S.Pd, M.Sc	Komparasi Struktur Morfologi Dan Anatomi Daun Coideum Varigatum Yang Digenunakan Sebagai Tanaman Adat Di Provinsi Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000
26	Zulfia K. Abdussamad, SE, M.Si	PENERAPAN PRINSIP KUALITAS PELAYANAN PUBLIK DI BIRO AKADEMIK, KEMAHASISWAAN DAN PERENCANAAN UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO	Penelitian Dasar	Rp 10.000.000

27	Dr. Jolanda Hulda Debora Pilongo, M.Pd Sri Rumiyatiningsih Luwiti, S.Pd, M.Pd	Meningkatkan kemampuan berfikir kritis berbasis HOTS dengan menerapkan model problem based learning dalam pembelajaran bahasa Inggris di SMP Negeri 2 Sumalata Timur	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
28	Dra. Elsie Louise Sambouw, M.Hum Haris Daniyal, S.Pd, MA	CONSTRUCTING INTERACTIVE DIGITIZING MATERIALS IN SEMANTIC AND PRAGMATICS COURSE TO ENHANCE STUDENTS' COMPETENCE	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
29	Syahrizal Koem, S.Pd, M.Si Rakhmat Jaya Lahay, S.Si, M.Sc	Estimasi Variabilitas Curah Hujan Dari Data CHIRPS Satellite-Rainfall Untuk Monitoring Perubahan Lingkungan	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
30	Dr. Ramli Mahmud, S.Pd., MA Rasid Yunus, S.Pd, M.Pd Zulfikar Adjie, S.Pd, M.Pd	BUDAYA POLITIK BIROKRASI PADA PEMILU 2019 DI KABUPATEN BOALEMO	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
31	Dr. Nasrun Pakaya, S.Kep, Ns., M.Kep Wirda Y. Dulahu, S.Kep, Ns, M.Kep	IDENTIFIKASI TINGKAT STRES KERJA PADA PERAWAT BARU DI PROVINSI GORONTALO	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
32	Ayu Rakhma Wuryandini, S.E., MSA Lukman Pakaya, S.Pd, MSA Siti Pratiwi Husain, SE, M.Si	Jelajah Evaluasi Fraud Control Plan Sebagai Alat Pencegahan Fraud	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000
33	Selvi, SE, M.Si Dr. Drs. Abd. Rahman Pakaya, M.Si	Pengaruh Literasi Keuangan Pengetahuan Keuangan Terhadap Perilaku Manajemen Keuangan Pada Pelaku Usaha UMKM di Kota Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	10.000.000

34	Erman I. Rahim, S.Pd, MH Nuvazria Achir, SH, MH	PENGARUH KEBIJAKAN PELAKSANAAN PILKADES MELALUI SISTEM E-VOTING DI KABUPATEN BOALEMO (Studi Kasus Desa Pentadu Timur, Mohungo dan Diloato)	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
35	Arfiani Rizki Paramata, S.Pi., M.Si. Nur Ayini S. Lalu, SKM, M.Kes	ANALISIS KANDUNGAN MIKROPLASTIK PADA BEBERAPA JENIS IKAN DI PERAIRAN KOTA GORONTALO	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
36	Daud Yusuf, S.Kom, M.Si Mulis, S.Pi, M.Sc Dr. Eng. Sri Maryati, S.Si	ESTIMASI STOK KARBON HUTAN MANGROVE DI KAWASAN PESISIR TELUK TOMINI MENGGUNAKAN CITRA LANDSAT 8	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
37	Risna Podungge, S.Pd.,M.Pd Rusni Podungge, S.Pd, MA	Desain Model Pembelajaran dalam Meningkatkan Kemampuan Guru Memilih dan Mengembangkan Strategi Pembelajaran Pendidikan Jasmani Olahraga dan Kesehatan di SMK I Kota Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
38	Citron S. Payu, S.Pd,M.Pd Dewa Gede Eka Setiawan, S.Pd, M.Sc	Model Pembelajaran IPA Berbasis Kearifan Lokal Huyula untuk Meningkatkan Kreativitas dan Hasil Belajar Siswa SMP Negeri I Batudaa Kabupaten Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
39	Endi Rahman, SE., MM Rezkiawan Tantawi, SE, MM	Pengaruh Creative Intelligence dan Kinerja Bisnis terhadap Keunggulan Bersaing pada Usaha Mikro dan Kecil (UMK) kuliner di Wilayah Kota Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
40	Mulis, S.Pi., M.Sc Waode Mustika, SH, MH	Analisis Hukum Konsep Archipelago State dan Maritim State Suatu Negara: Penerapan di Indonesia	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
41	Dr. Mery Balango, M.Hum Yusna Bantulu, S.Pd, MA	Feminism's language character in The Help Movie	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000

42	Drs. Rusli Isa, M.Si Dr. Yanti Aneta, S.Pd, M.Si	Optimalisasi Kebijakan Pemerintah Dalam Dalam Pemungutan Pajak Retoran Di Kabupaten Gorontalo	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
43	Idham Ishak, SE, M.Si Dr. Hais Dama, SE, M.Si	ANALISIS DAMPAK KREDIT USAHA RAKYAT (KUR) DALAM PENGEMBANGAN USAHA MIKRO KECIL MENENGAH DI KEC. TELAGA JAYA, KAB. GORONTALO	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
44	Sutrisno Mohamad, S.Pd., M.Pd Andris K. Malae, S.Pd, M.Pd	MENELOUSURI JEJAK BANGSA BELANDA DI PESISIR UTARA GORONTALO (Studi Kasus Di Kecamatan Kwandang)	Penelitian Dasar	Rp	8.500.000
45	Lillyan Hadjaratie, S.Kom, M.Si Ahmad Azhar Kadim, S.Kom, M.Kom	Implementasi Sistem Informasi Penilaian dan Pemantauan Indeks Inovasi Daerah Provinsi Gorontalo Berbasis Web Mobile	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
46	Ir. Agus Bahar Rachman, S.Pt, M.Si, PhD Dr. Ir. Ellen J. Saleh, MP	Pengaruh Gula Sorgum terhadap Sifat Rheologi Sosis Ayam	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
47	Lisna Ahmad, S.TP, M.Si Arif Murtaqi Ahmad MS, STP, M.Si	Modifikasi Pati Jagung Ketan (<i>Zea mays ceratina</i>) Dengan Metode Fermentasi Terkontrol dengan Khamir Saccharomyces cereviceae	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
48	Dr. Sardi Salim, M.Pd Ade Irawati Tolago, ST, MT	Pembangkit Listrik Energi Terbarukan Sistem Hybrid synchronization controller untuk penghematan Energi Listrik di kampus baru UNG Kabupaten Bone Bolango	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000

49	Heryati, ST, MT Moh. Faizal Dunggio, ST, MT	PUSAT APPRESIASI SENI DENGAN PENDEKATAN ARSITEKTUR MODERN DI GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
50	Yasin Mohamad, ST.,MT	PEMETAAN KETERSEDIAAN TANAMAN LAMTORO DALAM MENUNJANG PROGRAM CO-FIRING PADA PEMBANGKIT LISTRIK TENAGA UAP (PLTU 2x 25 MW) ANGGREK	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
51	Dr. Maryam Rahim, M.Pd Prof. Dr. Wenny Hulukati, M.Pd Nurul Maulida Alwi, S.Pd, M.Pd	Pengembangan Career Pocket Book sebagai Media Layanan Informasi Karir untuk Meningkatkan Pemahaman Karir Siswa Sekolah Dasar Laboratorium Universitas Negeri Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
52	Dr. Hasan S. Panigoro, S.Pd., M.Si. Resmawan, S.Pd, M.Si	Interaksi antara Trinil Kaki-Merah (Tringa totanus) dan Pipit Eurasia (Accipiter nisus) : Pemodelan, Analisis, Simulasi, dan Interpretasi Biologisnya	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
53	Umin Kango, S.Pd, M.Si Tineke Wolok, ST, MM	Penguatan manajemen strategi pemasaran produk Usaha Mikro Kecil Menengah (UMKM) Karawo Pasca pandemic covid 19 di Kabupaten Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
54	Ulin Naini, S.Pd,M.Sn Hasmah, S.Pd, M.Sn	PENERAPAN TEKNIK ECOPRINT DENGAN MEMANFAATKAN DAUN LOKAL GORONTALO PADA PRODUK KARAWO FASHION	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
55	Sri Agriyanti Mestari, S.Pd., M.Ed.TESOL Haris Daniyal, S.Pd, M.A Titien Fatmawaty Mohammad, S.Pd, M.App.Ling	Designing ESP Learning Instruction in Managements Study Program: A Survey on Students' Needs	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
56	Ervan Hasan Harun, ST.,MT Jumiati Ilham, ST, MT	Kajian Potensi Sampah Organik Pasar Sentral Kota Gorontalo Sebagai Bahan Baku Reaktor Biogas	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000

57	Dr. Ismet Sulila, SE, M.Si Sartika Dewi Usman, ST, MT	Penerapan model manajemen diversifikasi produk olahan Rumput Laut untuk meningkatkan nilai tambah ekonomi yang berkelanjutan bagi masyarakat pesisir pelaku UKM di Kabupaten Gorontalo Utara Provinsi Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
58	Idham Halid Lahay, ST., M.Sc	STRATEGI PENINGKATAN LAYANAN KEMAHASISWAAN MENGHADAPI AKREDITASI PROGRAM STUDI DI FAKULTAS TEKNIK UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	15.000.000
59	Supartin, S.Pd,M.Pd Dr. Frida Maryati Yusuf, S.Pd, M.Pd Dr. Trisnawaty Junus Buhungo, S.Pd, M.Pd	Pengembangan perangkat pembelajaran menggunakan Model pembelajaran OPthree berbasis literasi sains pada mata pelajaran IPA di SMP	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
60	Moh. Randhan Arif Kaluku, S.Kom., M.Kom Hilmansyah Gani, S.Kom, M.Kom	SISTEM INFORMASI PEMILIHAN BANTUAN STIMULAN RUMAH SWADAYA MENGGUNAKAN METODE AHP-SAW	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
61	La Alio, S.Pd, M.Si Prof. Dr. Ishak Isa, M.Si Haris Munandar, S.Pd, M.Pd	KAPASITAS ADSORPSI ARANG AKTIF MESOPORIDARI BIOCHARLIMBAH AMPAS TEBUTERIMMOBILISASI DITHIZON TERHADAP ION Hg2+, Cr2+ DAN Cd2+	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
62	Dr. Sri Yulianty Mozin, ST, MPA	Model Strategi Transformasi Tata Kelola Biro Umum dan Keuangan melalui Penguatan Kapasitas Kelembagaan untuk Mendukung Rektor menuju Pencapaian Renstra UNG	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
63	Nikmasari Pakaya, S.Kom., M.T. Indhitya R. Padiku, S.Kom, MT	Rancang Bangun Sistem Layanan Informasi Publik Berbasis Web Portal di Kabupaten Bone Bolango	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000

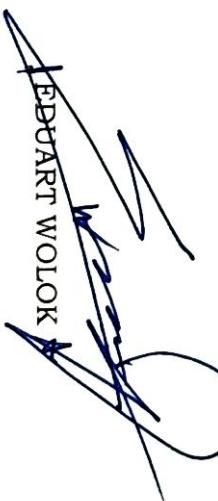
64	Ramlan Amir Isa, SE, MM Zulfia K. Abdussamad, SE, M.Si	PENERAPAN DIGITAL MARKETING DALAM MENUNJANG DISTRIBUSI PEMASARAN KAKAO DI KABUPATEN POHUWATO	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
65	Dr. Tirtawaty Abdul, S.Pd, M.Pd Nancy Katili, M.Pd	PENGEMBANGAN PERANGKAT PEMBELAJARAN RYLEAC BERBASIS VIRTUAL LABORATORY PADA KONSEP GELOMBANG DAN BUNYI DI SEKOLAH SMP NEGERI TANGAGAH KECAMATAN BOLAANG UKI	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
66	Lydia Surijani Tatara, ST, M.Si Ir. Sri Sutarni Arifin, S.Hut, M.Si	Penataan Permukiman Nelayan Kelurahan Tanjung Kramat Kota Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
67	Prof. Dr. Abdul Rahmat, S.Sos.I., M.Pd Dr. Muhammad Zubaidi, M.Pd Mira Mirnawati, S.Pd, M.Pd.	Model Team Based Project Learning pada Mata Kuliah Merdeka Belajar Kampus Merdeka di Jurusan Pendidikan Luar Sekolah Universitas Negeri Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	10.000.000
68	Dr. Irwan Wunarlan, S.T., M.Si Berni Idji, ST, M.Sc	Analisis Keragaman Pembangunan Pesisir Teluk Tomini Berdasarkan Fungsi Kawasan (Studi Kasus Kota Gorontalo Provinsi Gorontalo)	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
69	Roviana Dai, S.Kom, MT Tajuddin Abdillah, S.Kom, M.Cs	RANCANG BANGUN APLIKASI KONTROL PERENCANAAN KEGIATAN DESA PESISIR TELUK TOMINI SEBAGAI UPAYA KETERBUKAAN INFORMASI DI KAWASAN EKONOMI KHUSUS	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
70	Prof. Dr. Astin Lukum, M.Si Dr. Tirtawaty Abdjul, S.Pd, M.Pd	PENGEMBANGAN PERANGKAT PEMBELAJARAN QUIDED INQUIRY BERBANTUAN GOOGLE SITES PADA KONSEP GETARAN DAN GELOMBANG SISWA KELAS VIII SMP NEGERI 3 GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000

71	Kalih Trumansyahjaya, S.T., M.T. Satar Saman, ST, M.Sc	EKSPLORASI DESAIN RUMAH TINGGAL BERBASIS KEARIFAN BUDAYA LOKAL BAGI GOLONGAN MASYARAKAT BERPENGHASILAN RENDAH DI KOTA GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
72	Dr. Rahmani Kadarmingsih, ST, MT Aryati Alitu, ST, MT Yuliyanti Kadir, ST, MT	POTENSI PEMANFAATAN LIMBAH ABU BATU BARA (FLY ASH DAN BOTTOM ASH) DI PROVINSI GORONTALO SEBAGAI BAHAN CAMPURAN BETON	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
73	Gamar Abdullah, S.Si., M.Pd. Dr. Isnanto, S.Pd, M.Ed	Penerapan Model Pembelajaran IPA Dengan Menggunakan Metode Keterampilan Berfikir Kreatif Siswa Dan Pemahaman Konsep IPA Siswa SD Negeri Di Kecamatan Telaga Biru Kabupaten Gorontalo	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
74	Salahudin Olii, ST.,MT Muhktisulfatih Latief, S.Kom, MT	Pemetaan Potensi Unggulan Ekonomi Desa Berbasis Sistem Informasi Geografis Sebagai Upaya Untuk Pemberdayaan Masyarakat Pesisir di Kawasan Teluk Tomini	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
75	Dr. Hartono Hadjarati, S.Pd, M.Pd Resa Sukardi Massa, S.Pd, M.Pd	PENGARUH PEMBERIAN MINUMAN ISOTONIK TERHADAP PEMULIHAN DENYUT NADI SETELAH LATIHAN PADA ATLIT PENCAK SILAT PPLP GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
76	Dr. Rusdin Djibu, M.Pd Moh. Syahrur Ibrahim, S.Pd, M.Ed, Ph.D Dra. Hakop Walangadi, M.Si Endah Setiyowati, S.Pd, M.Pd	PENGEMBANGAN e-LKPD BERBASIS PROJECT BASED LEARNING PADA PEMBELAJARAN EKONOMI DI KELAS XII PROGRAM PAKET C DI SKB KOTA GORONTALO	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000

77	Suryani Une, S.TP,M.Sc Ir. Zainudin Antuli, M.Si	Identifikasi Bakteri Asam Laktat (BAL) Pati Jagung Ketan pada Kondisi Fermentasi Yang Berbeda	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
78	Ir. Fentje Abdul Rauf, M.T. Jamal Darussalam Giu, ST, MT	Komposit Meterial Peredam Suara Berbahan Polyester Diperkuat Partikel Limbah Gelas Plastik Dan Serat Biokomposit	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
79	Rosma Kadir, S.Pd., MA Zilfa A. Bagtayan, S.Pd, MA	IMPLEMENTASI SIKAP BAHASA MASYARAKAT DI KECAMATAN SUAWA TIMUR	Penelitian Terapan	Rp	8.500.000
80	Marleni Limonu, SP., M.Si Adnan Engelen, STP, M.Si	Pengembangan Produk Nori Rumput Laut (Kappapycus alvarezi) Kaya Antioksidan dengan Fortifikasi Daun Kelor (Moringa oleifera lam)	Penelitian Pengembangan	Rp	15.000.000
81	DR. Yuszda K. Salimi, M.Si Dr. Netty Ino Ischak, M.Kes	Pengembangan senyawa bahan alam Terminalia catappa dan Ipomoea pes-caprae sebagai antioksidan dan antikanker	Penelitian Pengembangan	Rp	15.000.000
82	Sitti Suhada, S.Kom, MT Agus Lahinta, ST, M.Kom Sunardi, S.Pd., M.Pd	Pengembangan Modul Pembelajaran Berbasis Proyek Mengintegrasikan Nilai Kearifan Lokal pada Mata Pelajaran Kompetensi Keahlian Produk Kreatif dan Kewirausahaan di Sekolah Menengah Kejuruan	Penelitian Pengembangan	Rp	15.000.000
83	Ir. Rully Tuiyo, M.Si Zulkifli Arsalam MoO, S.Pi, M.Si	PENGEMBANGAN BUDIDAYA RUMPUT LAUT (Kappaphycus alvarezii) DENGAN MENGGUNAKAN TEKNOLOGI KULTUR JARINGAN SECARA MASSAL BASMINGRO DI KABUPATEN GORONTALO UTARA	Penelitian Pengembangan	Rp	10.000.000
84	Prof. Dr. Hariadi Said, MS Ella H. Tumaloto, S.Pd, M.Pd	PENGEMBANGAN MEDIA PEMBELAJARAN UALAR TANGGA PADA PERMAINAN TRADISIONAL UNTUK SEKOLAH DASAR DI KOTA GORONTALO	Penelitian Pengembangan	Rp	8.500.000

85	Dr. Salam, S.Pd., M.Pd Eka Sartika, S.Pd, M.Pd Zulkipli, S.Pd, M.Sn	PENGEMBANGAN SISTEM INFORMASI KURIKULUM PRODI (SIK-PRODI) BERBASIS WEB DI LINGKUNGAN FAKULTAS SASTRA DAN BUDAYA, UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO	Penelitian Pengembangan	Rp	8.500.000
86	Dr. Zainal Abidin Umar, M.Si Dr. Abd Rahman Pakaya, M.Si	STRATEGI PENGEMBANGAN UMKM BERBASIS KEARIFAN LOKAL UNGGULAN WILAYAH DI KAWASAN EKONOMI KHUSUS BOALEMO PROVINSI GORONTALO	Penelitian Pengembangan	Rp	8.500.000
87	Dr. Beby Sintia Dewi Banteng, ST, M.Si.P	PERSEPSI PARA PEKERJA KONSTRUKSI BANGUNAN TENTANG PENGGUNAAN ALAT KESEHATAN, DAN KESELAMATN KERJA LINGKUNGAN (K3L)	Penelitian Pengembangan	Rp	8.500.000
Jumlah Total					Rp 1.004.500.000

REKTOR UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO,



**LAPORAN AKHIR
PENELITIAN DASAR
DANA PNBP TAHUN ANGGARAN 2022**



**ANALISIS POSISI DOPAN Mn dan La YANG DIDOPING PADA FASA
AURIVILLIUS $PbBi_2Nb_2O_9$ SEBAGAI MATERIAL
FEROELEKTROMAGNETIK: SIMULASI ATOMISTIK**

Dr. Akram La Kilo, S.Pd., M.Si. (Ketua, NIDN 0011047702)

Jafar La Kilo, S.Pd., M.Sc., (Anggota, NIDN 0011047702)

**UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO
NOVEMBER 2022**

IDENTITAS PENELITIAN

No.	Nama dan Gelar Akademik	Bidang Keahlian	Instansi	Alokasi Waktu (jam/minggu)
1	Dr. Akram La Kilo, M.Si.	Kimia Anorganik Komputasi	UNG	8
2	Jafar La Kilo, S.Pd., M.Sc.	Kimia Fisik Komputasi	UNG	6

6. Objek penelitian (jenis material yang akan diteliti dan segi penelitian): Fasa Aurivillius PbBi₂Nb₂O₉ yang didoping dengan Mn dan La
 7. Masa pelaksanaan penelitian : 8 bulan
 8. Mulai : April 2022
 9. Berakhir : November 2022
 10. Anggaran yang diusulkan : Rp. 15.000.000,-
 11. Lokasi penelitian : Lab Kimia Komputasi UNG
 12. Hasil yang ditargetkan (temuan baru/paket teknologi/hasil lain): Mengetahui posisi dopan La dan Mn yang stabil yang didoping pada fasa Aurivillius PbBi₂Nb₂O₉ sebagai material feroelekromagnetik
 13. Keterangan lain yang dianggap perlu: Luaran penelitian ini adalah jurnal internasional terindeks scopus, Jurnal Molekul dengan e-ISSN: 2503-0310.

SISTEM INFORMASI PENELITIAN
HALAMAN PENGESAHAN
PENELITIAN PENELITIAN DASAR

2. 11:49 AM

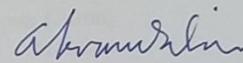
: Analisis Posisi Dopan Mn dan La yang Didoping pada Fasa Aurivillius PbBi₂Nb₂O₉ sebagai Material Feroelektronmagnetik:
I Kegiatan : Simulasi Atomistik

IA PENELITI : Dr. Akram La Kilo, M.Si.
ama Lengkap : 0011047702
DN : Lektor Kepala
batan Fungsional : Pendidikan Kimia
ogram Studi : 082118118303
xnor HP : akram@ung.ac.id
ail

GOTA PENELITI (1)
ama Lengkap : Jafar La Kilo, S.Pd, M.Sc
DN :
rguruan Tinggi : UNIVERSITAS NEGERI GORONTALO

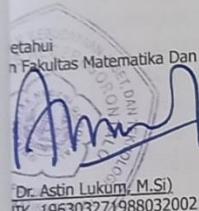
3 Penelitian : 8 bulan
lurhan : 1
litian Tahun Ke : Rp 15.000.000,-
3 Penelitian : - Diusulkan Ke Lembaga : Rp 15.000.000,-
lurhan : -
3 Tahun Berjalan : -
- Dana Internal PT : -
- Dana Institusi Lain : -

Gorontalo, 9 November 2022
Ketua Peneliti,



(Dr. Akram La Kilo, M.Si.)
NIP/NIK. 197704112003121001

etahui
n Fakultas Matematika Dan Ilmu Pengetahuan Alam


Dr. Astin Lukum, M.Si.
NIK. 196303271988032002



RINGKASAN

Aurivillius merupakan oksida bismuth berlapis yang memiliki potensi aplikasinya dalam *ferroelectric random acces memory*, katalis dalam industri petrokimia, dan sebagai sensor. Oksida ini juga berperan dalam sel bahan bakar, terutama sebagai elektrolit karena konduktivitas ionik yang tinggi. Karena apotensi aplikasi tersebut, maka oksida ini banyak dipelajari dan disintesis serta sejalan dengan RENSTRA Universitas Negeri Gorontalo dalam pengembangan energi terbarukan. Salah satu Aurivillius adalah PbBi₂Nb₂O₉ (PBN) yang memiliki sifat feroelektrik. Ketika PBN didoping dengan La³⁺ untuk Bi³⁺ dan Mn³⁺ untuk Nb⁵⁺ maka menghasilkan sampel fase tunggal non-polar, dengan struktur A21am ortorombik yang berifat feroelektromagnetik. Namun, hasil ini tidak mengkonfirmasi bahwa senyawa yang dihasilkan bermuatan atau tidak karena diklaim bahwa Pb²⁺ masuk menggantikan Bi secara parsial di lapisan bismut oksida. Di samping itu, hasil ini juga tidak memperhitungkan multiplitas dari ion-ion sehingga posisi dopan tidak dapat ditentukan dalam senyawa yang terbentuk dengan variasi konsentrasi ($x = 0,0, 0,1,$ dan $0,3$). Oleh karena itu, penelitian ini mencari solusi untuk menjelaskan kedua hal tersebut dengan cara simulasi atomistik terhadap Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ ($x = 0,0, 0,1,$ dan $0,3$) dengan menggunakan *code General Utility Lattice Program* (GULP). Hasil simulasi atomistik sesuai dengan hasil eksperimen berdasarkan parameter kisi senyawa induk, PbBi₂Nb₂O₉. Bi³⁺ yang sebagian mensubstitusi Pb²⁺ pada lapisan perovskit menyebabkan struktur Pb_{1-2x}Bi_{1.5 + 2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ ($x = 0, 0,1,$ dan $0,3$) memanjang. Sebaliknya, jika Pb²⁺ digantikan oleh La³⁺ maka pemanjangan tersebut tidak terjadi. La³⁺ lebih suka menempati lapisan oksida bismut daripada situs A dodecahedral dari lapisan perovskit. Peningkatan konsentrasi dopan menyebabkan fasa PbBi₂Nb₂O₉ yang didoping Mn³⁺ dan La³⁺ menjadi kurang stabil. PBNLM-Bi lebih mudah disintesis dibandingkan PBNLM-A. Hasil penelitian ini telah dipublikasikan di jurnal internasional terindeks scopus (Jurnal Molekul) dengan e-ISSN: 2503-0310, Q3, Jurnal Molekul
DOI: <https://doi.org/10.20884/1.jm.2022.17.2.6346>.

PRAKATA

Alhamdulillah, puji syukur kepada Allah atas kelancaran pelaksanaan penelitian ini. Salawat dan salam semoga senantiasa tercurah kepada Nabi Muhammad SAW yang telah memberi teladan terbaik untuk umat manusia.

Penelitian ini adalah tentang senyawa Aurivillius $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ dan turunannya yang dianalisis melalui simulasi komputasi dengan menggunakan *code General Utility Lattice Program* (GULP). Hasil yang diperoleh telah dipublikasi di jurnal interanasional Q3, Jurnal Molekul DOI: <https://doi.org/10.20884/1.jm.2022.17.2.6346>: LA KILO, Akram et al. Atomistic Simulation of La and Mn-Doped $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ Aurivillius Phase. **Molekul**, [S.I.], v. 17, n. 2, p. 245-251, 2022. ISSN 2503-0310. Semoga luaran penelitian ini dapat bertambah berupa publikasi ilmiah dengan judul *Study Structural and Mechanical Properties of $\text{Pb}_{0.6}\text{La}_{0.5}\text{Bi}_{1.9}\text{Nb}_{1.8}\text{Mn}_{0.4}\text{O}_9$ under Hydrostatic Pressure*.

Terima kasih kepada LPPM UNG yang telah membiayai penelitian dasar ini dengan nomor hibah B/142/UNG47.D1/PT.01.03/2022. Terima kasih juga kepada semua pihak yang telah membantu kelancaran penelitian ini.

DAFTAR ISI

HALAMAN SAMPUL.....	i
IDENTITAS PENELITIAN	ii
HAL AMAN PENGESAHAN	iii
RINGKASAN.....	iv
PRAKATA	v
DAFTAR ISI	vi
BAB 1. PENDAHULUAN.....	vii
BAB 2. TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN.....	3
1.1 Tujuan Penelitian	3
1.2 Manfaat Penelitian	3
BAB 3. KAJIAN PUSTAKA	4
2.1 Struktur Aurivillius	4
2.2 Material PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ dan Turunannya	5
2.3 Hasil Penelitian yang telah Diperoleh.....	6
2.4 <i>Road Map</i> Penelitian	7
BAB 4. METODE PENELITIAN	9
3.1 Perangkat Simulasi.....	9
3.2 Data Input.....	9
3.3 Metode Simulasi Atomistik	9
3.4. Prosedur Simulasi	10
BAB 5. HASIL DAN PEMBAHASAN	12
BAB 6. KESIMPULAN DAN SARAN	20
DAFTAR PUSTAKA.....	21
LAMPIRAN	23
1. Susunan Organisasi dan Pembagian Tugas Tim Peneliti.....	23
2. Publikasi.....	24

DAFTAR TABEL

Tabel 1. Parameter sel senyawa PBNO	9
Tabel 2. Parameter Cell of Calculated and Experimental PbBi ₂ Nb ₂ O ₉	13
Tabel 3. Interatomic potential of PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ and Pb _{1-2x} Bi _{1.5+2x} La _{0.5} Nb _{2-x} Mn _x O ₉	15

DAFTAR GAMBAR

Gambar 1. Struktur Aurivillius lapis (m) 1, 2, 3, 4, dan 5.....	4
Gambar 2. Struktur Fasa Aurivillius PbBi ₂ Nb ₂ O ₉	5
Gambar 3. Peta Jalan Penelitian	8
Gambar 4. Prosedur Penelitian Siamulasi Atomistik PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ yang Didpoing dengan La ³⁺ dan Mn ³⁺	11
Gambar 5. Crystal Structure of PbBi ₂ Nb ₂ O ₉	12
Gambar 6. Lattice parameter of La ³⁺ and Mn ³⁺ -doped PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ Aurivillius Phase	14
Gambar 7 Lattice Energy of Mn ³⁺ and La ³⁺ -doped PbBi ₂ Nb ₂ O ₉	17

BAB 1. PENDAHULUAN

Aurivillius merupakan oksida bismuth berlapis yang memiliki potensi aplikasinya dalam ferroelectric random acces memory, katalis dalam industri petrokimia, dan digunakan sebagai (Prakash et al., 2007; Zhang et al., 2020). Oksida ini juga berperan dalam sel bahan bakar, terutama sebagai elektrolit karena konduktivitas ionik yang tinggi. Bahan elektrolit padat dengan konduktivitas oksida yang tinggi pada suhu rendah secara intensif diteliti untuk memperoleh sel bahan bakar oksida padat yang mampu beroperasi pada suhu rendah (La Kilo, Costanzo, et al., 2020). Karena potensi aplikasi tersebut, maka oksida ini banyak dipelajari dan disintesis serta sejalan dengan RENSTRA Universitas Negeri Gorontalo pada bidang energi terbarukan.

Aurivillius adalah senyawa oksida logam yang terdiri dari lapisan bismut dan lapisan perovskit dengan rumus umum $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}(\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1})^{2-}$ (Aurivillius, 1949a, 1949b). Kation *A* merupakan ion-ion yang bermuatan +1, +2, +3 yang memiliki koordinasi dodekahedral. Kation *A* berupa logam alkali, alkali tanah, unsur tanah jarang, atau campurannya. Kation *B* yang berukuran lebih kecil dari kation *A* adalah unsur transisi yang memiliki koordinasi oktahedral. Jumlah oktahedral di lapisan perovskit ditunjukkan oleh bilangan bulat *n* dengan nilai $1 \leq n \leq 8$. Peningkatan sifat elektrik dari Aurivillius dapat dilakukan dengan cara melakukan doping baik pada lapisan perovskit maupun pada lapisan bismut oksida. Di lapisan perovskit, ion yang dapat disubstitusi adalah pada posisi A oktahedral dan dodekahedral. Sementara, substitusi Bi hanya dapat dilakukan secara parsial oleh ion logam tertentu sehingga masih terbatas hasil penelitiannya (La Kilo, Alio, et al., 2020; Sadapu, 2015).

Senyawa Aurivilius yang menarik perhatian adalah $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ karena memiliki sifat feroelektrik. $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ yang memiliki simetri ortorombik dengan grup *A21am* dengan $a = b = 5,496 \text{ \AA}$ dan $c = 25.55 \text{ \AA}$, dimana Pb menempati posisi A dan Nb menempati posisi B. Pada oksida aurivillius lapis dua $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ ditemukan disorder kation antara Pb^{2+} dan Bi^{2+} di lapis perovskit dengan kadar yang tinggi. Hal itu disebabkan karena Pb^{2+} dan Bi^{2+} keduanya memiliki pasangan elektron bebas dan kation ini memiliki kecenderungan sama dalam menempati posisi lapis perovskit dan bismut. Disorder kation ini mampu berpengaruh pada struktur Aurivillius yang dihasilkan karena ukuran Pb^{2+} dan

Bi^{3+} berbeda (Ismunandar et al., 1996; Zhang et al., 2020). Akibatnya terjadi distorsi kecil pada ini $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ sebagai penentu sifat feroelektrik.

Selain sifat feroelektrik, PBN dapat bersifat feroelektromganetik dengan cara mendopingnya dengan dopan yang memiliki elektron bebas pada orbital *d*. Wendari *et al.* telah berhasil mensintesis senyawa aurivillius $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ dengan melakukan doping La^{3+} untuk Bi^{3+} dan Mn^{3+} untuk Nb^{5+} (Wendari et al., 2019). Pada penelitian ini dihasilkan sampel fase tunggal non-polar, dengan struktur *A₂Iam* ortorombik untuk $x = 0, 0.1$, dan 0.3 . Namun, mereka tidak mengkonfirmasi bahwa senyawa yang dihasilkan bermuatan atau tidak karena mereka mengklaim bahwa Pb^{2+} masuk menggantikan Bi secara parsial di lapisan bismut oksida. Di samping itu, mereka juga tidak memperhitungkan multiplitas dari ion-ion sehingga tidak dapat menentukan posisi dopan yang mungkin dalam senyawa yang terbentuk dengan variasi konsentrasi ($x = 0,0, 0,1$, dan $0,3$). Oleh karena itu, penelitian ini bertujuan mencari solusi untuk menjelaskan kedua hal tersebut dengan cara simulasi atomistik terhadap $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ ($x = 0,0, 0,1$, dan $0,3$) dengan menggunakan *code General Utility Lattice Program* (GULP).

BAB 2. TUJUAN DAN MANFAAT PENELITIAN

1.1 Tujuan Penelitian

Penelitian ini bertujuan untuk menganalisis posisi dopan Mn^{3+} dan La^{3+} yang didoping pada fasa Aurivillius $PbBi_2Nb_2O_9$ sebagai material feroelektromagnetik. Posisi dopan dimaksud adalah pada lapisan perovskit dan bismut dari $PbBi_2Nb_2O_9$ sehingga menghasilkan senyawa Aurivillius $Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO_9$ ($x = 0,0, 0,1,$ dan $0,3$). Penelitian ini akan dilakukan secara simulasi atomistik dengan menggunakan GULP.

1.2 Manfaat Penelitian

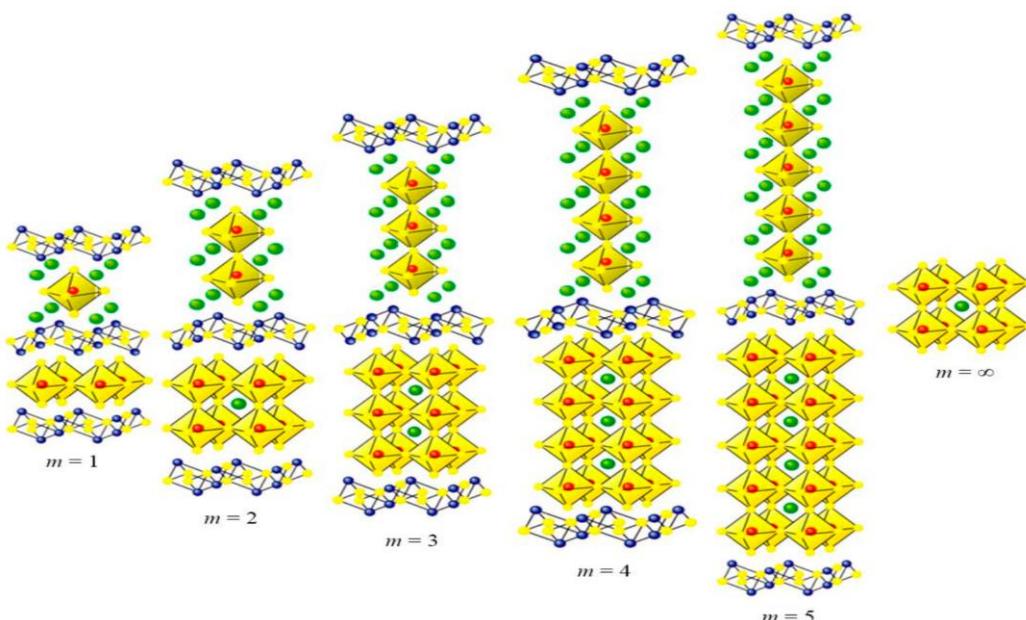
Penelitian ini akan memberikan urgensi dimana posisi yang paling mungkin dari dopan La^{3+} yang mensubstitusi secara parsial pada Bi^{3+} dan Pb^{2+} , serta Mn^{3+} yang mensubstitusi secara parsial Nb^{5+} pada fasa Aurivillius $PbBi_2Nb_2O_9$. Selain itu, penelitian ini akan memberikan jalan keluar bagaimana cara mensintesis (secara eksperimen) material $PbBi_2Nb_2O_9$ yang didoping dengan Mn^{3+} dan La^{3+} sebagai material feroelektromagnetik. Fasa Aurivillius ini juga memiliki potensi sebagai elektroda atau elektrolit dari sel bahan bakar padatan (SOFC). Penelitian ini berkesesuaian dengan RENSTRA UNG dalam pencarian energi terbarukan, dimana tururnan dari Aurivillius, yakni BIMEVOX dapat diaplikasikan sebagai elektrolit sel bahan bakar padatan (La Kilo, Costanzo, et al., 2020).

BAB 3. KAJIAN PUSTAKA

2.1 Struktur Aurivillius

Oksida Aurivillius pertama kali dilaporkan oleh Bengt Aurivillius pada tahun 1949, namun sifat feroelektrik dari oksida Aurivillius baru diidentifikasi oleh Subbarao tahun 1960-an pada oksida Aurivillius $ABi_2Nb_2O_9$ ($A = Sr, Ba,$ dan Pb) (Subbarao, 1962). Setelah adanya penemuan ini, penelitian tentang struktur dan sifat feroelektrik pada oksida Aurivillius sangat banyak dilakukan, oksida Aurivillius dikembangkan sesuai dengan manfaat dan penggunaannya, oksida ini dapat digunakan sebagai bahan superkonduktor, katalis dalam industri petrokimia, keramik di bidang kesehatan, bahan penyimpan memori seperti FRAM, DRAM, konduktor, material magnetik, katalis, *optical display*, dan kapasitor (Benčan et al., 2004).

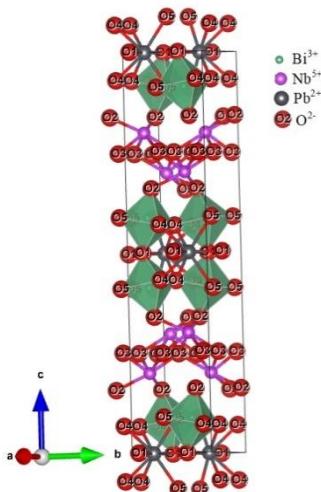
Oksida logam Aurivillius merupakan suatu senyawa oksida yang terdiri dari struktur berlapis yang terbentuk dari lapisan perovskit $[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]^{2-}$ dan lapisan Bismut $[Bi_2O_2]^{2+}$. Kation A merupakan ion-ion yang bermuatan +1, +2 atau +3 yang mempunyai koordinasi dodekahedral. Kation A yang berukuran besar ini diantaranya adalah beberapa logam alkali dan alkali tanah. Sedangkan kation B merupakan suatu unsur transisi dengan koordinasi oktaedral yang berukuran lebih kecil dari kation A dan n merupakan bilangan bulat ($1 \leq n \leq 5$) yang menunjukkan jumlah oktaedral pada lapisan perovskit. Struktur senyawa Aurivillius berbagai lapis dapat dilihat pada **Gambar 3**.



Gambar 1. Struktur Aurivillius lapis (m) 1, 2, 3, 4, dan 5.

2.2 Material PbBi₂Nb₂O₉ dan Turunannya

PbBi₂Nb₂O₉ adalah oksida oksida lapis dua yang terdiri dari lapisan (Bi₂O₂)²⁺ dan (Pb_{n-1}Nb_nO_{3n+1})²⁻ dimana n (jumlah lapisan oktahedral di lapisan perovskit) adalah 2. Semua Bi³⁺ menempati lapisan bismut oksida sedangkan Pb²⁺ dan Nb⁵⁺ menempati lapisan perovskit masing-masing sebagai A dodekahedral dan B oktahedral sebagaimana ditunjukkan pada **Error! Reference source not found.**. Senyawa ortorombik ini memiliki grup ruang $A_{21}am$, dimana Bi dan Nb memiliki multiplisitas 8, sementara multiplisitas Pb²⁺ adalah 4. Oksigen dalam struktur ini menempati lima posisi yang masing-masing dibedakan dengan O1, O2, O3, O4, dan O5 dengan multiplisitas 8, kecuali O1 dengan multiplisitas 4.



Gambar 2. Struktur Fasa Aurivillius PbBi₂Nb₂O₉

Kation A yang disubstitusi dengan gilingan lantanida (Ln³⁺) telah banyak dilakukan/dipelajari. ; Bi₂LnNbTiO₉ (Ln = Nd–Gd) yang merupakan Airivillius lapis-2 mengalami kenaikan kemiringan ekuatorial struktur oktahedral BO₆ dengan pengurangan jari-jari ion lantanida menghasilkan struktur yang lebih polar (Missyul et al., 2010). Selain itu, substitusi kation Ln³⁺ terhadap kation Bi³⁺ meningkatkan sifat dielektrik dan menurunkan konduktivitas senyawa yang disebabkan terbentuknya kekosongan oksigen karena penguapan ion Bi³⁺ (Diao et al., 2016; Nayak et al., 2016).

Diyakini bahwa pengurangan pembentukan kekosongan oksigen dengan substitusi kation Ln^{3+} pada Bi^{3+} dikarenakan kestabilan ikatan $\text{Ln}-\text{O}$ lebih tinggi dibandingkan $\text{Bi}-\text{O}$ (Zhang et al., 2020). Selain peningkatan sifat alami feroelektrik senyawa Aurivillius, fokus penelitian mengenai sifat ini telah mencapai pada pengembangan sifat multiferoik. Sifat multiferoik (ferolektromegantik) menunjukkan adanya gabungan dua atau lebih sifat feroik seperti 4 feroelektrik, feromagnetik, feroelastik dalam satu fasa Aurivillius. Pada senyawa Aurivillius sifat multiferoik ini umumnya berupa gabungan sifat feroelektrik dan magnetik. Sifat multiferoik ini diketahui lebih menguntungkan dalam aplikasi perangkat elektronik salah satunya dalam aplikasi sel memori RAM. Substitusi kation transisi magnetik d^n ($n \neq 0$) terhadap kation d^0 (Nb^{5+} , Ti^{4+}) pada posisi-B memungkinkan untuk mendapatkan sifat magnetik. Beberapa kation magnetik golongan transisi yang umum digunakan seperti Fe^{3+} , Co^{3+} , Mn^{3+} , Cr^{3+} , dan Ni^{3+} , dikarenakan adanya elektron tidak berpasangan pada orbital d (Zhao et al., 2018). Lebih jauh, substitusi kation magnetik d^n juga memungkinkan dalam peningkatan sifat feroelektrik dikarenakan efek perbedaan jari-jari ion pada kation B dapat menyebabkan pergeseran posisi kation B dari pusat simetri dan distorsi struktur oktahedral BO_6 .

Fenomena kemunculan sifat magnetik sekaligus peningkatan dielektrik dengan adanya substitusi kation d^n ditunjukkan pada senyawa Aurivillius $\text{Bi}_{3,5}\text{La}_{0,5}\text{Ti}_2\text{Fe}_{0,5}\text{Nb}_{0,5}\text{O}_{12}$ (Rehman et al., 2016), $\text{Pb}_{1-x}\text{Bi}_{4+x}\text{Ti}_{4-x}\text{Mn}_x\text{O}_{15}$ (Zulhadjri et al., 2011), $\text{Bi}_5\text{Ti}_3\text{Mn}_x\text{Fe}_{1-x}\text{O}_{15}$ (Yuan et al., 2015). Sifat magnetik pada senyawa Aurivillius dilaporkan juga muncul dengan substitusi kation lantanida yang memiliki elektron tidak berpasangan pada orbital f (Koval et al., 2018).

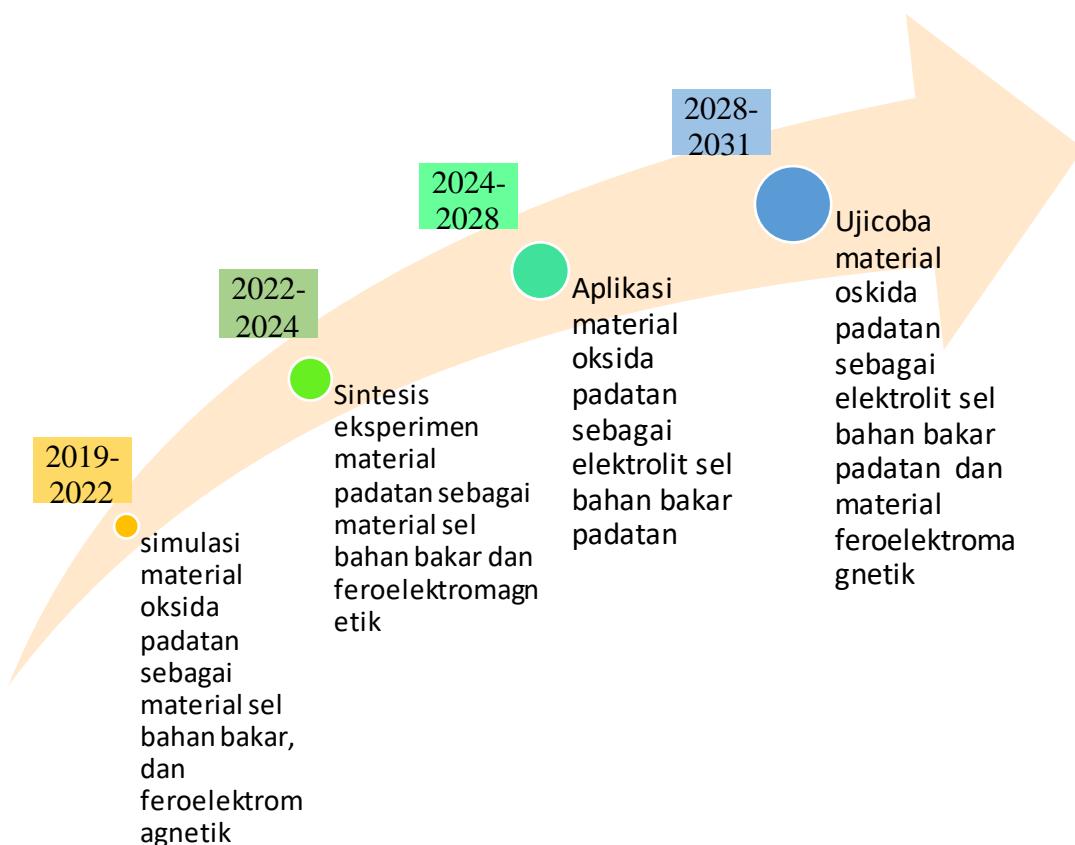
2.3 Hasil Penelitian yang telah Diperoleh

Hasil penelitian yang telah diperoleh terkait dengan fasa Aurivillius dan Oksida logam telah dipublikasikan baik nasional maupun internasional, yaitu:

1. La Kilo, A., Costanzo, A., Mazza, D., Martoprawiro, M. A., Prijamboedi, B., & Ismunandar, I. (2020). Highest Ionic Conductivity of BIMEVOX (ME = 10% Cu, 10% Ga, 20% Ta): Computational Modeling and Simulation. *Indonesian Journal of Chemistry*, 20(3), 510. <https://doi.org/10.22146/ijc.42635> (Jurnal Internasional Terindeks scopus)

- La Kilo, A., Alio, L., La Kilo, J., & others. (2020). Stability study of four layer Aurivillius oxide of $AxBi_4-xTi_4O_{15}$ ($A = Ca, Sr, Ba$): Atomistic simulation. *Acta Chimica Asiana*, 3(2), 157–162. ((kolaborasi dengan mahasiswa untuk penyelesaian skripsi) (La Kilo, Alio, et al., 2020) (Jurnal nasional terakreditasi sinta 3)
- La Kilo, A., Umamah, T. S., & Laliyo, L. A. R. (2019). Study on the Stability of Trivalent Cations Doped Zirconia through Atomistic Modeling. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 22(4), 129–135. <https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.129-135> (kolaborasi dengan mahasiswa untuk penyelesaian skripsi). (La Kilo et al., 2019). (Jurnal Nasional Terakreditasi sinta 2)
- La Kilo, A., Kusrini, K., & Botutihe, D. N. (2021). The Relationship between Stability and Ion Conduction of Trivalent Cation Doped Ceria. *Jambura Journal of Chemistry*, 3(1), 45-56. (kolaborasi dengan mahasiswa untuk penyelesaian skripsi, telah diterima di jurnal nasional terakreditasi sinta 3).

2.4 Road Map Penelitian



Gambar 3. Peta Jalan Penelitian

BAB 4. METODE PENELITIAN

3.1 Perangkat Simulasi

Perangkat keras yang digunakan dalam simulasi 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) i5-8250U CPU @ 1.60GHz 1.80 GHz dan RAM 4,00 GB. Perangkat lunak yang digunakan adalah 64-bit Operating System, x64-based processor, Microsoft Windows 10 Pro 32-Bit, dan software simulasi atomistik, yaitu General Utility Lattice Program (GULP) (Gale, 1997; Gale & Rohl, 2003). Software lain yang membantu untuk menganalisis sifat feroelektromagnetik adalah CRYSTAL17 dan BVS.

3.2 Data Input

Data input yang digunakan dalam simulasi ini adalah data difraksi sinar-X dan neutronnya dari oksida aurivillius $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ yang diambil dari peneliti sebelumnya (Miura, 2002) seperti dirangkum pada Tabel 1 yang menunjukkan parameter sel dari oksida aurivillius.

Tabel 1. Parameter sel senyawa PBNO

PbBi ₂ Nb ₂ O ₉			
Space group		A ₂₁ am	
<i>a</i>		5,49600	
<i>b</i>		5,49600	
<i>c</i>		25,5500	
Atom	<i>x</i>	<i>y</i>	<i>z</i>
Pb1	0,96961	0,25824	0,00000
Bi1	0,44498	0,77868	0,20026
Nb1	0,47756	0,74760	0,41300
O1	0,50852	0,30289	0,00000
O2	0,50389	0,67855	0,34012
O3	0,71276	0,99281	0,25155
O4	0,73770	0,98977	0,93090
O5	0,77588	0,97094	0,58889

3.3 Metode Simulasi Atomistik

Simulasi dilakukan pada senyawa induk, yaitu : $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ (PBN). Metode simulasi pada penelitian ini menggunakan metode atomistik dengan sistem minimasi energi yang

dilakukan dengan menggunakan perangkat lunak GULP. Dasar dari simulasi ini adalah interaksi antara ion dalam struktur kristal (Born & Mayer, 1932). Pemodelan interaksi antar ion dapat dipahami melalui fungsi energi potensial terhadap sistem, khususnya sistem dua benda yang menggambarkan interaksi tersebut. Dalam model ion, interaksi short-range didominasi terutama oleh efek ion tetangga terdekat. Fungsi potensial short-range dapat digambarkan oleh potential Buckingham dalam bentuk persamaan (1):

$$\theta_{ij} = A_{ij} \exp\left(\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6}$$

Dimana A_{ij} , ρ_{ij} dan C_{ij} adalah tetapan dan r_{ij} adalah jarak antar ion. Suku pertama pada persamaan ini menggambarkan tolakan short-range, sedangkan suku kedua menunjukkan tarikan dipol-dipol terinduksi (van der Waals).

Selain model interaksi antar ion di atas, model juga dapat mencakup deskripsi polarisasi ion. Model tersebut menggambarkan ion sebagai sebuah kulit (menggambarkan awan elektron valensi terluar) yang terikat pada inti bermassa besar oleh pegas harmonis. Energi tambahan antara inti dengan kulit dinyatakan oleh persamaan (2) :

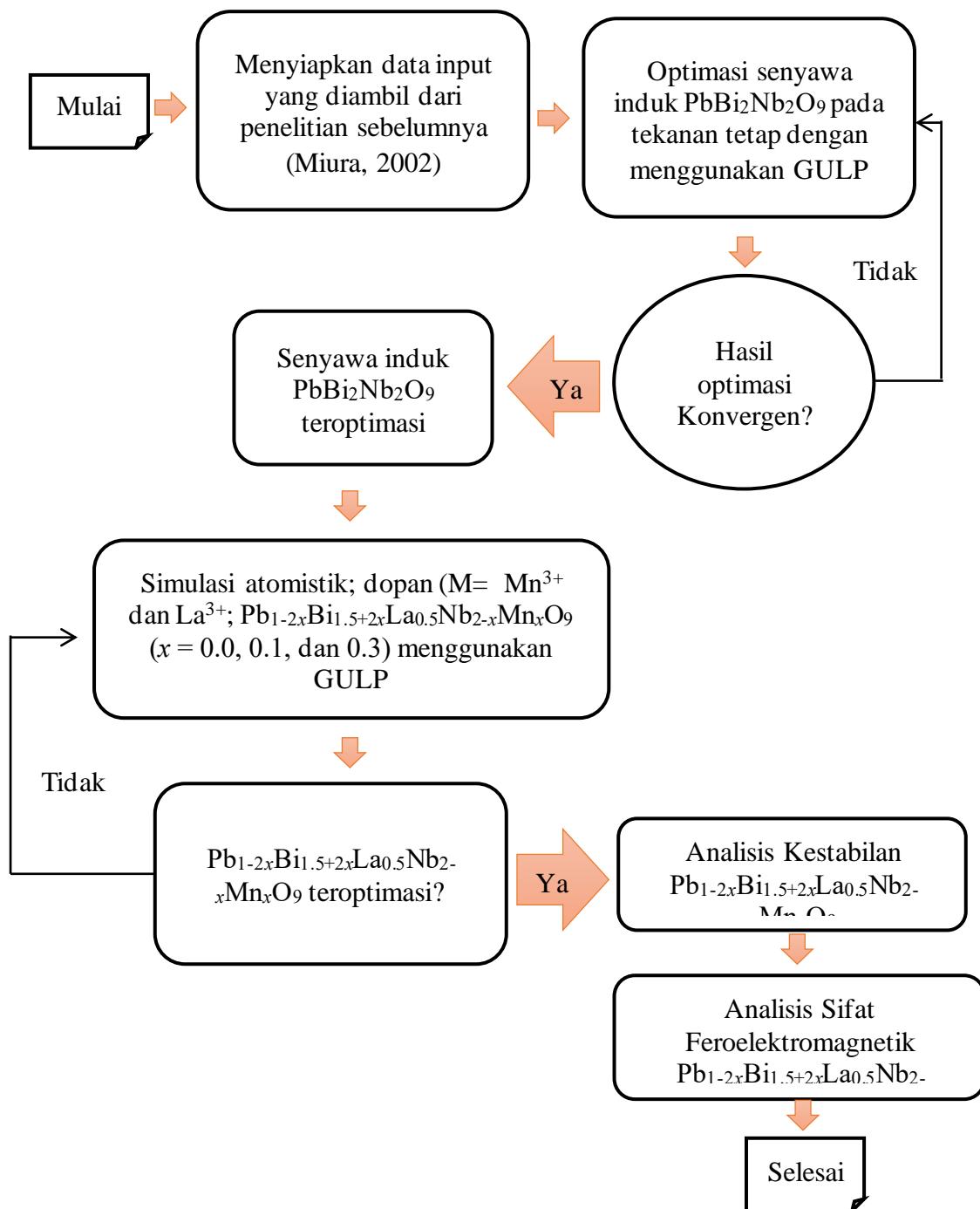
$$U_3 = \sum_i k_i^s r_i^2$$

Dimana k_i^s adalah tetapan pegas dan r_i adalah jarak antara inti dengan kulit. Persamaan (2) mendeskripsikan polarisasi ion yang diperlukan untuk perhitungan energy defek dan tetapan dielektrik. Polarissasi ion dirumuskan dengan persamaan (3):

$$\alpha_i = \sum \frac{(Y_i e)^2}{k_i^s}$$

dimana Y_i adalah muatan kulit dan e adalah muatan elektron.

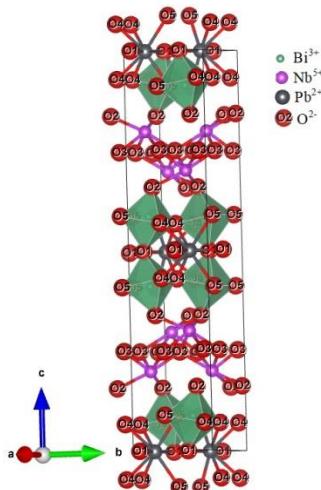
3.4. Prosedur Simulasi



Gambar 4. Prosedur Penelitian Siamulasi Atomistik $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ yang Didpoing dengan La^{3+} dan Mn^{3+} .

BAB 5. HASIL DAN PEMBAHASAN

$\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ adalah oksida oksida lapis dua yang terdiri dari lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ dan $(\text{Pb}_{n-1}\text{Nb}_n\text{O}_{3n+1})^{2-}$ dimana n (jumlah lapisan oktahedral di lapisan perovskit) adalah 2. Semua Bi^{3+} menempati lapisan bismut oksida sedangkan Pb^{2+} dan Nb^{5+} menempati lapisan perovskit masing-masing sebagai A dodekahedral dan B oktahedral sebagaimana ditunjukkan pada Gambar 5. Senyawa ortorombik ini memiliki grup ruang $A_{21}am$, dimana Bi dan Nb memiliki multiplisitas 8, sementara multiplisitas Pb^{2+} adalah 4. Oksigen dalam struktur ini menempati lima posisi yang masing-masing dibedakan dengan O_1 , O_2 , O_3 , O_4 , dan O_5 dengan multiplisitas 8, kecuali O_1 dengan multiplisitas 4.



Gambar 5. Crystal Structure of $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$

Oksida tersebut bermuatan netral, tidak ada kekosongan, dan tidak ada elektron yang bergerak bebas. Oleh karena itu, meskipun perhitungan jumlah mol atau konsentrasi material pereaksi untuk membentuk senyawa $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ adalah benar, namun dalam sintesis senyawa itu dapat menghasilkan elektron atau vakansi. Hasil sintesis sulit diperoleh senyawa yang tak bermuatan, sehingga perhitungan komputasi diperlukan untuk mengatasi hal tersebut. Simulasi komputasi senyawa ini dalam keadaan tidak bermuatan dengan semua unsur-unsurnya memiliki okupansi satu. Hasil optimasi geometri senyawa ini berkesesuaian baik dengan hasil eksperimen sebagaimana yang ditunjukkan oleh parameter selnya pada **Tabel 2**. Perbedaan parameter hasil simulasi dan hasil sintesis adalah kecil, yaitu 0,68, 1.81, dan 0.53% masing-masing untuk parameter a , b , dan c . Perbedaan

ini berkesesuaian baik dengan Aurivillius lapis dua dari $\text{Bi}_3\text{TiNbO}_9$ yang dilaporkan oleh Rosyidah *et al.* (Rosyidah *et al.*, 2008). Untuk senyawa sederhana dan bukan merupakan struktur berlapis dapat memiliki perbedaan parameter kisi yang jauh lebih kecil (La Kilo *et al.*, 2019).

Tabel 2. Parameter Cell of Calculated and Experimental $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$

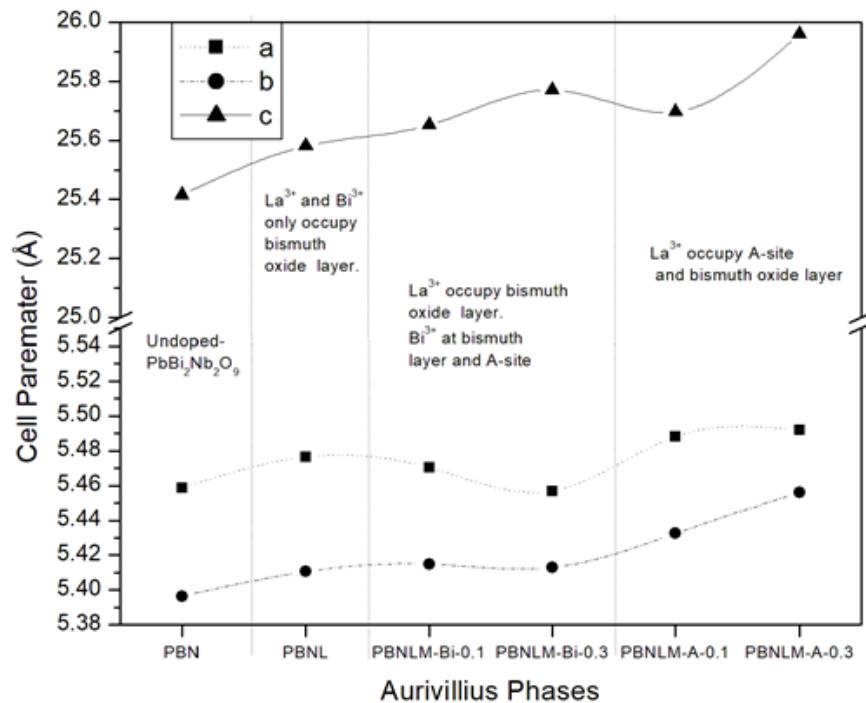
Parameter	Calculated	Exp.(Miura, 2002)	$\Delta(\text{exp-calc}) (\%)$
c (\AA)	5.4587	5.4960	0.68
b (\AA)	5.3965	5.4960	1.81
c (\AA)	25.4154	25.550	0.53
$\alpha = \beta = \gamma$ (degree)	90	90	
Lattice energy (eV)	-1005.8448		

Nilai a dan b yang dihasilkan dalam simulasi ini adalah tidak sama sebagaimana yang dilaporkan Miura et al, namun berkesesuaian dengan hasil sintesis $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ yang dilaporkan oleh kim *et al.* (Kim *et al.*, 2004). Paramater sel a , b , dan c masing-masing adalah 5.503(4), 5.495(4), dan 25.531(5). Paremater sel Aurivllius dengan perbedaan sangat kecil antara hasil eksperimen dan hasil simulasi telah dilaporkan juga beberapa peneliti. Perbedaan parameter sel ini disebabkan oleh perbedaan metode sintesis. Perbedaan parameter sel yang sangat kecil antara hasil eksperimen dan simulasi menggambarkan bahwa senyawa yang disimulasi telah benar dan dapat dijadikan sebagai standar data input untuk melakukan simulasi doping $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ dengan La^{3+} dan Mn^{3+} .

Dalam penelitian ini, dopan La^{3+} dapat menempati posisi Bi^{3+} atau keduanya Bi^{3+} dan A, sementara Mn^{3+} menempati posisi B. Lima senyawa akibat doping yang dihasilkan dalam penelitian ini dilambangkan dengan PBNL, PBNLM-Bi-0.1, PBNLM-Bi-0.3, PBNLM-A-0.1, dan PBNLM-A-0.3. PBNL adalah senyawa $\text{PbBi}_{1.5}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_9$ ($x = 0.0$) dimana semua La menempati lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ dengan okupansi 25% dari 1 okupansi Bi. PBNLM-Bi-0.1 adalah $\text{Pb}_{0.8}\text{Bi}_{1.7}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$, dimana $x = 0.1$, La^{3+} menempati 0,25% posisi Bi di lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$, Mn^{3+} 5% menempati posisi Nb^{5+} di lapisan oktahedral

perovskit, dan Bi 20% menempati dodekahedral Pb^{2+} di lapisan perovskit. PBNLM-Bi-0.3 adalah $\text{Pb}_{0.4}\text{Bi}_{2.1}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$ ($x = 0,3$) dimana La^{3+} menempati 0,25% posisi Bi di lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$, Mn 15% menempati posisi Nb di lapisan oktahedral perovskit, Bi 60% menempati dodekahedral Pb di lapisan perovskit. PBNLM-A-0.1 adalah $\text{Pb}_{0.8}\text{La}_{0.7}\text{Bi}_{1.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$ ($x = 0,1$), dimana La^{3+} menempati 25% posisi Bi^{3+} di lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ dan 20% di Pb^{2+} , Mn 5% menempati posisi Nb^{5+} di lapisan oktahedral perovskit. PBNLM-A-0.3 adalah $\text{Pb}_{0.4}\text{La}_{1.1}\text{Bi}_{1.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$, dimana $x = 0,3$, La^{3+} menempati 0,25% posisi Bi di lapisan $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ dan 60% menempati dodekahedral Pb^{2+} di lapisan perovskit.

Hasil simulasi dari doping senyawa ditunjukkan pada Gambar 6.



Gambar 6. Lattice parameter of La^{3+} and Mn^{3+} -doped $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ Aurivillius Phase

Paremeter sel a , b , dan c kelima senyawa Aurivillius di atas naik dari senyawa induknya. Ketika $x = 0$, paramter sel naik seiring dengan jari-jari ion La^{3+} (1.16 Å) yang lebih besar daripada Bi^{3+} (1.17) untuk koordinasi lipat-6 [15]. Kenakain parmater itu semakin besar ketika La terdistribusi secara parsial pada kedua lapisan dari bismut oksida dan perovskit (PBNLM-A-0.1 dan PBNLM-A-0.3). Sebaliknya, ketika La^{3+} di lapisan bismut oksida dan Bi^{3+} menempati posisi A di lapisan perovskit, maka parameter sel turun. Jika dibandingkan dengan PBNL, parameter kisi a cenderung konstan, b turun dan c naik untuk senyawa PBNLM-Bi-0.1 dan PBNLM-Bi-0.3. Paremeter sel kedua senyawa tersebut mengalami elongasi. Wendari melaporkan bahwa parameter sel a relatif konstan, sementara parameter kisi a dan b menurun seiring dengan kenaikan nilai x . Mereka mengusulkan bahwa hal ini konsisten dengan jejari dari Pb^{2+} yang lebih besar dari Bi^{3+} untuk koordinasi 8, dimana Pb^{2+} ditemukan pada lapisan Bi^{3+} . Jika demikian maka kami memprediksi bahwa senyawa yang mereka hasilkan bukanlah senyawa netral $\text{Pb}_{0.8}\text{Bi}_{1.7}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$ dan $\text{Pb}_{0.4}\text{Bi}_{2.1}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$ seperti yang mereka klaim (Wendari et al., 2019).

Paramater kisi dipengaruhi juga oleh polarisasi ion-ion. Dalam penelitian ini, kekuatan polarisasi dari kation adalah $\text{Bi}^{3+} > \text{Nb}^{5+} > \text{Pb}^{2+}$. Sedangkan polarisasi ion Mn^{3+} dn La^{3+} adalah nol karena semua muatan hanya terpusat pada core (+3). Akibat polarisasi ion, maka senyawa lapisan bismut oksida dan lapasian perovskit akan terdistorsi sebagaimana yang diperkuat oleh laporan Shikawa *et al.* pada senyawa $\text{SrBi}_2(\text{Ta}_{1-x}\text{Nb}_x)_2\text{O}_9$ (Shimakawa et al., 2000). Distorsi seperti ini mengindikasikan juga bahwa suatu ion dalam senyawa tidak lagi memiliki *Bond Valence Sum* (BVS) yang sempurna ([Kilo et al., 2011](#); [La Kilo & Mazza, 2011](#)). Polarisasi ion dalam penelitian ini dimodelkan dengan model kulit sebagaimana Tabel 3.

Tabel 3. Interatomic potential of $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ and $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$

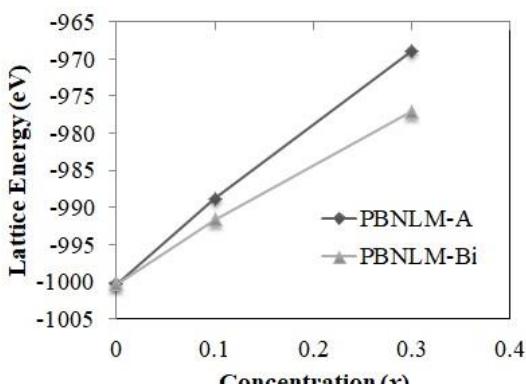
	A (eV)	ρ (Å)	C (eV Å)
a) Buckingham			
short range			
b...O	5564.374	0.2610	0.0
Nb...O	1796.30	0.3459	0.0
Bi...O	49529.35	0.2223	0.0
O...O	9547.96	0.2192	32.0

b) Shell model

Species	k (eV Å ²)	Shell (e)
Pb ²⁺	205.00	1.00
Nb ⁵⁺	1358.58	-4.497
Bi ³⁺	359.55	-5.51
O ²⁻	6.3	-2.04

Berdasarkan **Error! Reference source not found.**, gaya tolak antara kulit kation dan anion berturut trurut adalah Bi...O>Pb...O>Nb...O sebagaimana yang ditunjukkan pada potensial Buckingham. Hal ini menggambarkan bahwa jumlah ion Bi³⁺ yang akan menggantikan ion A di lapisan perovskit hanya secara parsial dibandingkan dengan ion Pb²⁺. Namun demikian kedua ion tersebut memiliki karakter kimia yang sama, yaitu adanya pasangan elektron bebas pada orbital s^2 ([La Kilo et al., 2020](#)). Pasangan elektron pada Bi³⁺ menyebabkan terjadinya elongasi pada struktur PBNLM-Bi-0.1 dan PBNLM-Bi-0.3. Hal ini konsisten dengan laporan Sadapu *et al.* bahwa kenaikan nilai c karena pengaruh tolakan pasangan elektron bebas Bi³⁺ di lapisan bismut oksida dari ABi₄Ti₄O₁₅ (A = Ba, Ca, Sr dan Pb) ([Sadapu, 2015](#)).

Energi kisi ini jauh kebih kecil dibandingkan energi kisi Bi₃TiNbO₉ yang dilaporkan oleh Rosyidah dkk. (Rosyidah et al., 2008). Semakin banyak jumlah lapisan oktahedral dalam perovskit, maka semakin negatif energi kisi Aurivillius. Aurivillius ini adalah aurivillus lapis dua yang secara teori akan energinya lebih besar dibandingkan dengan energi kisi Aurivilius yang lapisan oktahedral di atasnya. Namun hasil tersebut bertolak belakang dengan yang diharapkan. Justru PbBi₂Nb₂O₉ memiliki energi kisi yang lebih rendah dibandingkan dengan energi kisi Aurivillius lapis empat dari BaBi₄Ti₄O₁₅ (-770.6459 eV dan Ba₂Bi₄Ti₅O₁₈ (-927.2781 eV). Hal ini berarti senyawa PbBi₂Nb₂O₉ sangat stabil sehingga tidak heran jika banyak peneliti mencoba untuk memodifikasi struktur ini sehingga lebih potensial sebagai material feroelektromagnetik di industri. Ketika PbBi₂Nb₂O₉ dengan La dan Mn, maka energi kisi Aurivillius yang dihasilkan menjadi lebih besar sebagaimana ditunjukkan Gambar 7.



Gambar 7 Lattice Energy of Mn³⁺ and La³⁺-doped PbBi₂Nb₂O₉

Energi kisi PBNLM-Bi-0.1 dan PBNLM-Bi-0.3 lebih kecil daripada PBNLM-A-0.1 dan PBNLM-A-0.3. Artinya, substitusi Pb²⁺dalam lapisan perovskit lebih mudah terjadi oleh dopan Bi³⁺ daripada La³⁺. Hal ini juga mengkonfirmasi bahwa elongasi yang terjadi Pb_{1-2x}Bi_{1.5} + 2xLa_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ ($x = 0, 0.1, \text{ and } 0.3$) dengan kenaikan konsentrasi karena Bi³⁺ menempati lapisan perovskit menggantikan posisi A (Pb²⁺), bukan pada Bi₂O₂²⁺ sebagaimana yang dilaporkan oleh [Wendari et al. \(2019\)](#).

Stabilitas struktural PbBi₂Nb₂O₉ dapat diprediksi dengan menghitung toleransi perovskit Goldschmidt yang dirumuskan:

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2}(r_B + r_O)}$$

di mana r_A , r_B , dan r_O masing-masing adalah jari-jari ion kation A, B, dan anion oksigen (Goldschmidt, 1926). Wendari et al. (2019) melaporkan bahwa nilai toleransi perovskit yang dihitung dari PbBi₂Nb₂O₉ adalah 0,945 ketika jari-jari ionik Pb²⁺ sebagai kation A adalah 1,29 Å (Shannon, 1976). Jari-jari ionik ini adalah 8 koordinasi, sedangkan Pb²⁺ pada perovskit adalah 12 koordinasi, dengan radius 1,49 Å , sehingga nilai toleransi untuk perovskit adalah 0,999. Namun, selisih antara kedua hasil tersebut masih dikategorikan sebagai struktur perovskit dengan nilai t antara 0,825 dan 1,059. Jika $t = 1$, struktur yang dibentuk oleh perovskit adalah kubik ideal, sedangkan t yang memiliki simpangan sangat besar dari satu diprediksikan merupakan struktur yang tidak stabil.

Sebagai hasil substitusi parsial untuk menghasilkan lima senyawa, stabilitas struktur diprediksi dari nilai rata-rata jari-jari ion atau panjang ikatan, yang dirumuskan:

$$t = \frac{[(1-x)r_A + xr_{A'} + r_o]}{\sqrt{2}[(1-x)r_B + xr_{B'} + r_o]}$$

Toleransi ini melibatkan substitusi parsial kation A dengan A' dan/atau B dengan B' dengan konsentrasi x. Hasil perhitungan toleransi perovskit menunjukkan bahwa adanya dopan pada PBN menyebabkan nilai t menurun (Tabel 2) sebagai indikasi bahwa struktur yang terbentuk semakin ortorombik. Pengurangan ini lebih signifikan ketika La³⁺ menempati lapisan perovskit daripada lapisan bismut karena perbedaan jari-jari ion yang besar antara La³⁺ (1,36 Å) dan Pb²⁺ (1,49 Å) dibandingkan dengan jari-jari ionik La³⁺ dan Bi³⁺ (1,40 Å).

Table 1. Perovskite Tolerance Factor of La³⁺ and Mn³⁺-doped PbBi₂Nb₂O₉ Aurivillius Phase

Dopant composition (x)	Aurivillius	t	t ^a
0,0	PBNL	0.999	0.945
0,1	PBNLM-Bi-0.1	0.993	0.944
	PBNLM-A-0.1	0.990	
0,3	PBNLM-Bi-0.3	0.980	0.940
	PBNLM-A-0.3	0.972	

^a(Wendari et al., 2019)

Nilai t perhitungan ini berbeda dengan Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ yang dilaporkan (Wendari et al., 2019) karena selain perbedaan nilai jari-jari ion Pb²⁺ juga distribusi komposisi dopan pada posisi A pada lapisan perovskit dan posisi Bi pada (Bi₂O₂)²⁺.

Keberadaan multiferroisitas Aurivillius seperti Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ ditentukan oleh sejumlah faktor, termasuk struktur kristal, simetri, sifat elektronik, dan sifat kimia. Hanya ada tiga belas titik kelompok yang dapat menimbulkan perilaku multiferroik. Ferromagnetisme membutuhkan logam transisi dengan elektron 3d yang tidak berpasangan dan orbital 3d yang tidak terisi; sedangkan polarisasi feroelektrik membutuhkan logam transisi dengan orbital 3d yang terisi. Karena asal yang berbeda, senyawa multiferroik fase tunggal jumlahnya sedikit terutama multiferro magnetoelektrik. Bahan multiferroik menunjukkan fitur yang sangat menarik; menunjukkan sifat feroelektrik serta sifat

magnetik, yang menunjukkan aplikasi multifungsi. Senyawa Aurivillius terbukti sebagai bahan feroelektrik dan magnet memiliki asal yang berbeda. Ferroelektrik berasal dari elektron d0 situs-B . Sedangkan sifat kemagnetan membutuhkan elektron dk (k_0). Apalagi keberadaan polarisasi membutuhkan struktur kristal asimetris yang terdistorsi, sedangkan feromagnetisme membutuhkan struktur simetris. Multiferroik cenderung menunjukkan efek magnetoelectric (ME), yang merupakan fenomena penyetelan sifat magnet dengan penerapan medan listrik eksternal dan sifat listrik dengan medan magnet. Dengan kata lain, kita dapat mengontrol sifat magnet dengan medan listrik dan sifat listrik dengan medan magnet. Efek ME memberikan tingkat kebebasan tambahan untuk fabrikasi perangkat seperti beberapa memori. Penelitian lanjut untuk sifat feroelektromagnetik untuk senyawa Aurivillius ini perlu dilakukan dengan menggunakan sismulasi komputasi dengan menggunakan metode makanika kuantum.

BAB 6. KESIMPULAN DAN SARAN

Hasil simulasi atomistik sesuai dengan hasil eksperimen berdasarkan parameter kisi senyawa induk, $PbBi_2Nb_2O_9$. Bi^{3+} yang sebagian mensubstitusi Pb^{2+} pada lapisan perovskit menyebabkan struktur $Pb_{1-2x}Bi_{1.5 + 2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO_9$ ($x = 0, 0.1$, dan 0.3) memanjang. Sebaliknya, jika Pb^{2+} digantikan oleh La^{3+} maka pemanjangan tersebut tidak terjadi. La^{3+} lebih suka menempati lapisan oksida bismut daripada situs A dodekahedral dari lapisan perovskit. Peningkatan konsentrasi dopan menyebabkan fasa $PbBi_2Nb_2O_9$ yang didoping Mn^{3+} dan La^{3+} menjadi kurang stabil. PBNLM-Bi lebih mudah disintesis dibandingkan PBNLM-A.

Perlu dilakukan kajian terhadap sifat feroelekromagnetik dan sifat mekanik senyawa Aurivillius $PbBi_2Nb_2O_9$ ini serta turunannya.

DAFTAR PUSTAKA

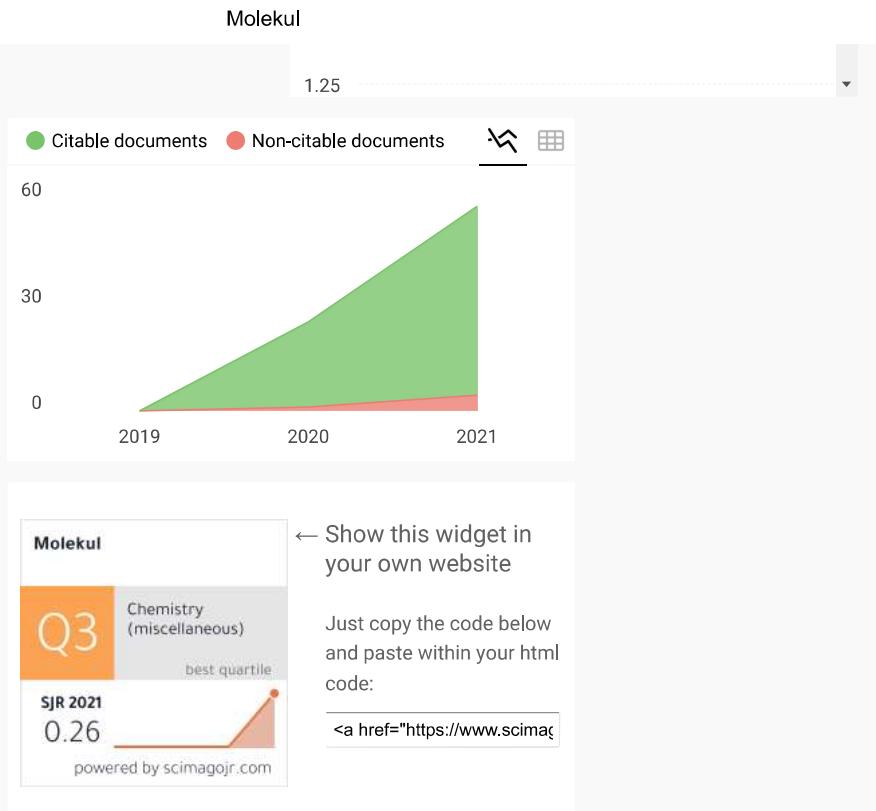
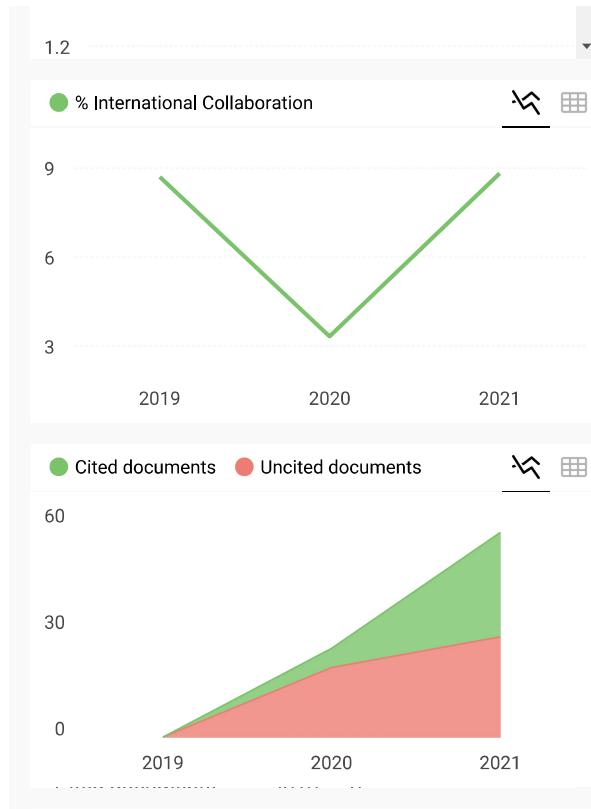
- Aurivillius, B. (1949a). Mixed Bismuth Oxides with Layer lattices: I The Structure Type of CaBi₂Nb₂O₉. *Arkiv Kemi Band I*.
- Aurivillius, B. (1949b). Mixed bismuth oxides with layer lattices. II. Structure of Bi₄Ti₃O₁₂. *Arkiv for Kemi*.
- Benčan, A., Boullay, P., & Mercurio, J. P. (2004). Characterisation of BaBi₂Nb₂O₉ powders and thin films prepared by a solution synthesis technique. *Solid State Sciences*, 6(6), 547–551.
- Born, M., & Mayer, J. E. (1932). Zur Gittertheorie der Ionenkristalle. *Zeitschrift Für Physik*. <https://doi.org/10.1007/BF01340511>
- Diao, C., Li, H., Chen, Z., & Zheng, H. (2016). Effect of samarium substitution on the dielectric and ferroelectric properties of BaBi_{4-x}Sm_xTi₄O₁₅ ceramics. *Ceramics International*, 42(1), 621–626.
- Gale, J. D. (1997). GULP: A computer program for the symmetry-adapted simulation of solids. *Journal of the Chemical Society - Faraday Transactions*. <https://doi.org/10.1039/a606455h>
- Gale, J. D., & Rohl, A. L. (2003). The General Utility Lattice Program (GULP). *Molecular Simulation*. <https://doi.org/10.1080/0892702031000104887>
- Ismunandar, Kennedy, B. J., Gunawan, & Marsongkohadi. (1996). Structure of ABi₂Nb₂O₉ (A = Sr, Ba): Refinement of powder neutron diffraction data. *Journal of Solid State Chemistry*. <https://doi.org/10.1006/jssc.1996.0321>
- Koval, V., Skorvanek, I., Viola, G., Zhang, M., Jia, C., & Yan, H. (2018). Crystal chemistry and magnetic properties of Gd-substituted Aurivillius-type Bi₅FeTi₃O₁₅ ceramics. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(27), 15733–15743.
- La Kilo, A., Alio, L., La Kilo, J., & others. (2020). Stability study of four layer Aurivillius oxide of AxBi_{4-x}Ti₄O₁₅ (A= Ca, Sr, Ba): Atomistic simulation. *Acta Chimica Asiana*, 3(2), 157–162.
- La Kilo, A., Costanzo, A., Mazza, D., Martoprawiro, M. A., Prijamboedi, B., & Ismunandar, I. (2020). Highest Ionic Conductivity of BIMEVOX (ME = 10% Cu, 10% Ga, 20% Ta): Computational Modeling and Simulation. *Indonesian Journal of Chemistry*, 20(3), 510. <https://doi.org/10.22146/ijc.42635>
- La Kilo, A., Umamah, T. S., & Laliyo, L. A. R. (2019). Study on the Stability of Trivalent Cations Doped Zirconia through Atomistic Modeling. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 22(4), 129–135. <https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.129-135>
- Missyul, A. B., Zvereva, I. A., Palstra, T. T. M., & Kurbakov, A. I. (2010). Double-layered Aurivillius-type ferroelectrics with magnetic moments. *Materials Research Bulletin*, 45(5), 546–550.

- Miura, K. (2002). Electronic properties of ferroelectric SrBi₂Ta₂O₉, SrBi₂Nb₂O₉, and PbBi₂Nb₂O₉ with optimized structures. *Applied Physics Letters*. <https://doi.org/10.1063/1.1474607>
- Nayak, P., Badapanda, T., & Panigrahi, S. (2016). Dielectric, ferroelectric and conduction behavior of tungsten modified SrBi₄Ti₄O₁₅ ceramic. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 27(2), 1217–1226.
- Prakash, P., Garg, A., Roy, M. K., & Verma, H. C. (2007). Novel low-temperature synthesis of ferroelectric neodymium-doped bismuth titanate nanoparticles. *Journal of the American Ceramic Society*. <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2007.01539.x>
- Rehman, F., Li, J.-B., Dou, Y.-K., Zhang, J.-S., Zhao, Y.-J., Rizwan, M., Khalid, S., & Jin, H.-B. (2016). Dielectric relaxations and electrical properties of Aurivillius Bi₃.5La₀.5Ti₂Fe₀.5Nb₀.5O₁₂ ceramics. *Journal of Alloys and Compounds*, 654, 315–320.
- Sadapu, S. (2015). Pengaruh Subtitusi Bi secara Parsial oleh Dopan (A= Ba, Ca, Sr dan Pb) dalam Lapisan [Bi₂O₂]₂₊ pada Oksida Aurivillius ABi₄Ti₄O₁₅. *Skripsi*, 1(441410014).
- Subbarao, E. C. (1962). Crystal chemistry of mixed bismuth oxides with layer-type structure. *Journal of the American Ceramic Society*, 45(4), 166–169.
- Wendari, T. P., Arief, S., Mufti, N., Suendo, V., Prasetyo, A., Ismunandar, Baas, J., Blake, G. R., & Zulhadjri. (2019). Synthesis, structural analysis and dielectric properties of the double-layer Aurivillius compound Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉. *Ceramics International*, 45(44), 17276–17282. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.05.285>
- Yuan, B., Yang, J., Song, D. P., Zuo, X. Z., Tang, X. W., Zhu, X. B., Dai, J. M., Song, W. H., & Sun, Y. P. (2015). Structural, magnetic, and dielectric studies of the Aurivillius compounds SrBi₅Ti₄MnO₁₈ and SrBi₅Ti₄Mn_{0.5}Co_{0.5}O₁₈. *Journal of Applied Physics*, 117(2), 23907.
- Zhang, Y., Zhang, X., Guo, C., Xu, Y., Cheng, X., Zhang, F., Major, Z., & Huo, L. (2020). Novel two-dimensional WO₃/Bi₂W₂O₉ nanocomposites for rapid H₂S detection at low temperatures. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(49), 54946–54954.
- Zhao, H., Wang, H., Cheng, Z., Fu, Q., Tao, H., Ma, Z., Jia, T., Kimura, H., & Li, H. (2018). Electric and magnetic properties of Aurivillius-phase compounds: Bi₅Ti₃XO₁₅ (X= Cu, Mn, Ni, V). *Ceramics International*, 44(11), 13226–13231.
- Zulhadjri, Z., Prijamboedi, B., Nugroho, A. A., Mufti, N., Fajar, A., Palstra, T. T. M., & others. (2011). Aurivillius phases of PbBi₄Ti₄O₁₅ doped with Mn³⁺ synthesized by molten salt technique: structure, dielectric, and magnetic properties. *Journal of Solid State Chemistry*, 184(5), 1318–1323.

LAMPIRAN

1. Susunan Organisasi dan Pembagian Tugas Tim Peneliti

Tim	Tugas
Dr. Akram La Kilo, M.Si.	Simulasi Atomistik Senyawa Induk PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ , analisis data, penulisan artikel
Jafar La Kilo, S.Pd., M.Sc.	Simulasi Atomistik Senyawa PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ yang didoping dengan Mn ³⁺ , instal GULP dan VESTA
Mahasiswa	Simulasi Atomistik PbBi ₂ Nb ₂ O ₉ yang didoping dengan La ³⁺ , membantu anggota dalam penginstalan GULP pada server.



Scientific Programming Journal

High Quality Open Access Original Research In Scientific Programming
Publish With Us

Hindawi



Metrics based on Scopus® data as of April 2022

[Search](#)[HOME](#) / [ARCHIVES](#) / [VOL 17 NO 2 \(2022\)](#) / Articles

Atomistic Simulation of La and Mn-Doped PbBi₂Nb₂O₉ Aurivillius Phase

Atomistic Simulation of La and Mn-Doped PbBi₂Nb₂O₉

Akram La Kilo

Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo

<http://orcid.org/0000-0002-4885-1838>

Ramona Nintias R. Abas

Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo

Alberto Costanzo

Dipartimento di Scienza dei Materiali e' Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino

Daniele Mazza

Dipartimento di Scienza dei Materiali e' Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino

Deasy N Botutihe

Department of Educational Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo

Jafar La Kilo

Department of Educational Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo

DOI: <https://doi.org/10.20884/1.jm.2022.17.2.6346>

ABSTRACT

This study aims to determine the effect of Mn³⁺ and La³⁺ dopants on the structure of PbBi₂Nb₂O₉ (PBN) using atomistic simulation. PBN phase geometry was optimized before the Mn³⁺ and La³⁺-doped phase. Mn³⁺ partially substituted octahedral Nb⁵⁺ in the perovskite layer. While La³⁺ partially substituted Bi³⁺ in the bismuth layer and dodecahedral Pb²⁺ in the perovskite layer. The concentration (x) of dopants that doped PBN was made in such a way that it produces a phase of Pb_{1-2x}Bi_{1.5 + 2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ (x = 0, 0.1, and 0.3) which was not charged. The simulation results showed that the optimized PBN cell parameters were in a good agreement with the experimental result. Increasing the concentration of dopants result in the Pb_{1-2x}Bi_{1.5 + 2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ phase (PBNM-Bi and PBNM-A) being less stable, as indicated by the increased lattice energy. PBNLM-Bi structures experiences an elongation which was showed by the cell parameters of c increase while a and b decrease. La³⁺ prefers to occupy bismuth oxide layer rather than the dodecahedral A-site of the perovskite layer. The results of this simulation can explain the PBLNM structure of experimental results that do not pay attention to the multiplicity of doped PBN with certain dopant concentrations.

Jurnal Ilmiah Kimia

MOLEKUL

Volume 17, Issue 2, July 2022

The figure shows two microscopy images labeled (a) and (b). Image (a) shows a dense cluster of dark particles, while image (b) shows a more elongated, linear arrangement of particles. Both images include a 100 nm scale bar. Below each image is a histogram of particle size distribution. The x-axis for both histograms is 'Particle size (nm)' ranging from 10 to 50. The y-axis is 'Count (%)'. A red bar chart represents the experimental data, and a blue curve represents the diameter distribution. In image (a), the peak of the distribution is around 15 nm. In image (b), the distribution is broader, peaking around 15 nm but extending to larger sizes up to 45 nm.

Indexed by Scopus

Department of Chemistry
Faculty of Mathematics and Natural Sciences
Universitas Jenderal Soedirman
Purwokerto

Molekul	Volume 17	Issue 2	pp. 145 - 291	July 2022	P-ISSN 1907-9761	E-ISSN 2503-0310
---------	-----------	---------	---------------	-----------	------------------	------------------

 PDF

PUBLISHED

2022-07-21

HOW TO CITE

LA KILO, Akram et al. Atomistic Simulation of La and Mn-Doped PbBi₂Nb₂O₉ Aurivillius Phase. **Molekul**, [S.l.], v. 17, n. 2, p. 245-251, july 2022. ISSN 2503-0310. Available at:
<<http://jos.unsoed.ac.id/index.php/jm/article/view/6346>>. Date accessed: 09 nov. 2022. doi:
<https://doi.org/10.20884/1.jm.2022.17.2.6346>.

CITATION FORMATS

[ABNT](#)[APA](#)[BibTeX](#)[CBE](#)[EndNote - EndNote format \(Macintosh & Windows\)](#)[MLA](#)[ProCite - RIS format \(Macintosh & Windows\)](#)[RefWorks](#)[Reference Manager - RIS format \(Windows only\)](#)[Turabian](#)

ISSUE

[Vol 17 No 2 \(2022\)](#)

SECTION

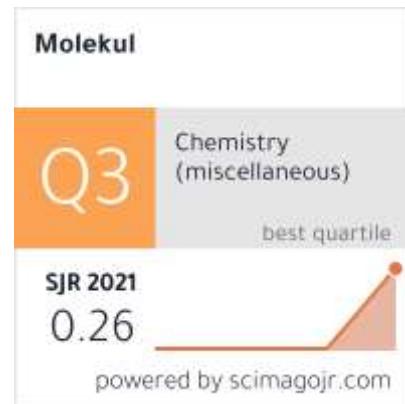
Articles

Authors agree with the statements below:

1. Authors automatically transfer the copyright to the MOLEKUL journal and grant the journal right of first publication with the work simultaneously licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](#) (CC BY 4.0).

2. Authors are able to enter into separate permission for the non-exclusive distribution of the journal's published version of the work (e.g., post it to an institutional repository or publish it in a book), with an acknowledgment of its initial publication in this journal.

[MAKE A SUBMISSION](#)[FOCUS AND SCOPE](#)[GUIDE FOR AUTHORS](#)[VIEW ARTICLES](#)[EDITORIAL BOARD](#)[PUBLICATION ETHICS](#)[PEER REVIEW PROCESS](#)[PLAGIARISM POLICY](#)[CONTACT](#)



Indexing and Abstracting:

Scopus®

INDEX COPERNICUS
INTERNATIONAL

 **sinta**
Science and Technology Index

DOAJ DIRECTORY OF
OPEN ACCESS
JOURNALS

 **CAS**
A DIVISION OF THE
AMERICAN CHEMICAL SOCIETY

Google
scholar

 **Crossref**

GOOGLE ANALYTICS

Google Analytics

Matomo

Molekul



Jurnal Ilmiah Kimia
Department of Chemistry, Faculty of Mathematics
and Natural Sciences,
Universitas Jenderal Soedirman, Purwokerto,
Indonesia



This work is licensed under
a [Creative Commons](#)
[Attribution 4.0](#)
[International License](#).

Platform & workflow by



PKP | PUBLIC KNOWLEDGE PROJECT

Atomistic Simulation of La and Mn-Doped PbBi₂Nb₂O₉ Aurivillius Phase

Akram La Kilo^{1,2*}, Ramona Nintias R. Abas¹, Alberto Costanzo³, Daniele Mazza³, Deasy N. Botutihe^{1,2}, Jafar La Kilo^{1,2}

¹Department of Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo, Jl. Habibie, Desa Moutong, Kec. Tilongkabila, Bone Bolango Gorontalo, 96554, Indonesia

²Department of Educational Chemistry, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Universitas Negeri Gorontalo, Jl. Habibie, Desa Moutong, Kec. Tilongkabila, Bonebolango Gorontalo, 96554, Indonesia

³Dipartimento di Scienza dei Materiali e' Ingegneria Chimica, Politecnico di Torino, Corso Duca degli Abruzzi 24, 10129 Torino, Italy

*Corresponding author email: akram@ung.ac.id

Received November 09, 2020; Accepted March 15, 2022; Available online July 20, 2022

ABSTRACT. This study aims to determine the effect of Mn³⁺ and La³⁺ dopants on the structure of PbBi₂Nb₂O₉ (PBN) using atomistic simulation. PBN phase geometry was optimized before the Mn³⁺ and La³⁺-doped phase. Mn³⁺ partially substituted octahedral Nb⁵⁺ in the perovskite layer. While La³⁺ partially substituted Bi³⁺ in the bismuth layer and dodecahedral Pb²⁺ in the perovskite layer. The concentration (x) of dopants that doped PBN was made in such a way that it produces a phase of Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ (x = 0, 0.1, and 0.3) which was not charged. The simulation results showed that the optimized PBN cell parameters were in a good agreement with the experimental result. Increasing the concentration of dopants result in the Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉ phase (PBNM-Bi and PBNM-A) being less stable, as indicated by the increased lattice energy. PBNM-Bi structures experiences an elongation which was showed by the cell parameters of c increase while a and b decrease. La³⁺ prefers to occupy bismuth oxide layer rather than the dodecahedral A-site of the perovskite layer. The results of this simulation can explain the PBLNM structure of experimental results that do not pay attention to the multiplicity of doped PBN with certain dopant concentrations.

Keywords: Atomistic simulation, Aurivillius, lanthanide dopants, manganese and PbBi₂Nb₂O₉

INTRODUCTION

Aurivillius is a layered bismuth oxide that has potential applications in ferroelectric random access memory, a catalyst in the petrochemical industry, and is used as a sensor (Prakash et al., 2007). This oxide also plays a role in fuel cells, especially as an electrolyte because of its high ionic conductivity. Solid electrolyte materials with high oxide conductivity at low temperatures are intensively investigated to obtain solid oxide fuel cell that is capable of operating at low temperatures (Kilo et al., 2011). Because of the potential application, the oxide is widely studied and synthesized.

Aurivillius is a metal oxide compound consisting of a bismuth and perovskite layers with the general formula (Bi₂O₂)²⁺(A_{n-1}B_nO_{3n+1})²⁻ (Aurivillius, 1949a, 1949b). Cation A is an ion with a charge of +1, +2, and 3 which has dodecahedral coordination. Cation A is in the form of alkali metal, earth alkaline, rare-earth elements, or mixtures thereof. Cation B which is smaller than cation A is a transition element that has octahedral coordination. The number of octahedral in the perovskite layer is shown by integer's n with a value

of $1 \leq n \leq 8$. The electrical properties of Aurivillius can be improved by doping both the perovskite and the bismuth oxide layers. In the perovskite layer, the ions that can be substituted are in the A octahedral and dodecahedral sites. Meanwhile, Bi₃₊ substitution can only be done partially by certain metal ions so that the research results are still limited (Sadapu, 2015).

Aurivillius compound that attracts attention is PbBi₂Nb₂O₉ (PBN) because it has ferroelectric properties. PbBi₂Nb₂O₉ has orthorhombic symmetry, A2₁am group space with $a = b = 5.496$, and $c = 25.55$ Å, where Pb²⁺ occupies A site and Nb⁵⁺ occupies B site. In the two-layer Aurivillius of PBN there is found a cation disorder between Pb²⁺ and Bi²⁺ in the perovskite layer at high level. That is because Pb²⁺ and Bi²⁺ both have lone pairs and this cation has the same tendency to occupy the perovskite and bismuth layers. Cationic disorder can affect the Aurivillius structure that is produced because the sizes of Pb²⁺ and Bi²⁺ are different (Ismunandar et al., 1996). The result is a small distortion in this PBN as a determinant of ferroelectric properties.

In addition to ferroelectric properties, PBN can be ferroelectromagnetic by doping it with dopants that have free electrons in *d* orbital. Wendari *et al.* has successfully synthesized the Aurivillius $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ compound by partial substitution of La^{3+} for Bi^{3+} and Mn^{3+} for Nb^{5+} (Wendari *et al.*, 2019). In their study, non-polar single-phase samples were produced, with orthorhombic $A2_1am$ structures for $x = 0, 0.1$, and 0.3 . However, they did not confirm that the compounds produced were charged or not because they claimed that Pb^{2+} occupied partially Bi^{3+} site in the bismuth oxide layer. Besides, they also do not take into account the multiplicity of ions so that they cannot determine the possible site of dopants in compounds formed with variations of concentration ($x = 0.0, 0.1$, and 0.3). Therefore, this research look for completion to explain these two things by means of atomistic simulation of $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ ($x = 0.0, 0.1$, and 0.3) using the General Utility Lattice Program (GULP) code. The code uses the basis of classical atomistic simulation theory to study the various systems and properties of materials such as solid materials (Dutra *et al.*, 2021). Aurivillius is a solid material with a layered structure and has metal ions with large atomic numbers and many so that the code that can be used is GULP as reported by researchers (Islam *et al.*, 1998; Mczka *et al.*, 2011; Phillipot *et al.*, 2007; Snedden *et al.*, 2004; Xiaojing *et al.*, 2016; Yang *et al.*, 2018).

EXPERIMENTAL SECTION

Materials and Method

The device used in this simulation consists of hardware and software. The hardware used is a computer processor Intel (R) Core (TM) i5-8250U CPU @ 1.60GHz 1.80 GHz and RAM 4.00 GB. The software used is 64-bit Operating System, x64-based processor, Microsoft Windows 10 Pro 32-Bit and General Utility Lattice Program (GULP) code for atomistic simulation (Gale, 1997; Gale & Rohl, 2003).

The parent compound that was simulated was $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ (PBN) from the results of X-ray diffraction and its neutrons reported by Miura (2002). Then, the optimized parent compound was doped with La^{3+} and Mn^{3+} ions with a certain concentration (x) to obtain $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ ($x = 0.0, 0.1$, and 0.3) compounds. All compounds are made in an uncharged state, where the interactions between cations and anions are ionic interactions. As a result of this interaction, the interatomic potential used is the Buckingham potential. All these compounds were optimized at constant pressure with the conditions of the Newton-Raphson optimizer and BFGS hessian update, and the results were declared convergent if the Gnorm value was less than 0.01.

The simulation method uses atomistic with an energy minimization system that is carried out using GULP code. The basis of this simulation is the

interaction between ions in the crystal structure (Born & Mayer, 1932). Modeling interactions between ions can be understood through the function of potential energy to the system, especially the two-body system that describes these interactions. In the ion model, the short-range interaction is dominated mainly by the effect of the nearest neighbor ion. The short-range potential function can be described by Buckingham potential in the form of equation (1):

$$\theta_{ij} = A_{ij} \exp\left(\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (1)$$

where A_{ij} , ρ_{ij} , and C_{ij} are constants and r_{ij} is the distance between ions. The first term in this equation represents a short-range repulsion, while the second term shows the pull of induced dipoles (van der Waals). In addition to the inter ion interaction, the model can also include ion polarization. The model describes the ion as a shell (depicting the outer valence electron cloud) bound to a large mass nucleus by a harmonious spring. Additional energy between the nucleus and the shell is expressed by equation (2):

$$U_3 = \sum_i k_i^s r_i^2 \quad (1)$$

Where k_i^s is the spring constant and r_i is the distance between the nucleus and shell. Equation (2) describes the ion polarization needed for the calculation of energy defects and dielectric constants. Ion polarization is formulated by equation (3):

$$\alpha_i = \sum \frac{(Y_i e)^2}{k_i^s} \quad (2)$$

where Y_i and e are the shell charge and electron charge, respectively

In addition to the lattice energy generated from the atomistic simulation, structural stability of $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ can be predicted by calculating the Goldschmidt perovskite tolerance formulated:

$$t = \frac{r_A + r_O}{\sqrt{2}(r_B + r_O)} \quad (4)$$

where r_A , r_B , and r_O are the ionic radii of cations A, B, and oxygen anions, respectively (Goldschmidt, 1926)

RESULTS AND DISCUSSION

$\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ is a two-layer Aurivillius consisting of $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2-}$ dan $(\text{Pb}_{n-1}\text{Nb}_n\text{O}_{3n+1})^{2-}$ layers, where n (the number of octahedral layers in the perovskite layer) is 2. All Bi^{3+} occupy the bismuth oxide layer while Pb^{2+} and Nb^{5+} occupy the perovskite layer respectively as A dodecahedral and B octahedral. These orthorhombic compounds have a space group $A2_1am$, where Bi^{3+} and Nb^{5+} have a multiplicity of 8, while the multiplicity of Pb^{2+} is 4. Oxygen in this structure occupies five sites each distinguished with O1, O2, O3, O4, and O5 with multiplicity 8, except O1 which has a multiplicity of 1.

Wendari *et al.* (2019) reported that the perovskite tolerance value calculated from $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ is 0.945 when the ionic radius of Pb^{2+} as a cation A is 1.29 Å (Shannon, 1976). This ionic radius is 8 coordination,

whereas the Pb^{2+} in perovskite is 12 coordination, with a radius of 1.49 Å, so the tolerance value for perovskite is 0.999. However, the difference between the two results is still categorized as a perovskite structure with a t value between 0.825 and 1.059. If $t = 1$, the structure formed by perovskite is an ideal cubic, while t which has a very large deviation from one is predicted to be an unstable structure.

The oxide is neutral; there are no vacancy and electrons that move freely. Therefore, although the calculation of the number of moles or the concentration of reagent material to form $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ compounds is correct, in the synthesis of compounds, it can produce electrons or vacancies. Synthesis results are difficult to obtain uncharged compounds, so

computational calculations are needed to overcome this. This simulation of this compound is uncharged with all its elements having occupancy of one. The results of the optimization of the geometry of these compounds are in good agreement with the experimental results as shown by the lattice parameters in **Table 1**. The difference between the parameter results of the simulation and the synthesis is small, namely 0.68, 1.81, and 0.53% for parameters of a , b , and c , respectively. This difference is a good agreement to the two layer Aurivillius of $\text{Bi}_3\text{TiNbO}_9$ reported by Rosyidah et al. (2008). For simple compounds that are not layered structures, they can have much smaller lattice parameter differences (La Kilo et al., 2019).

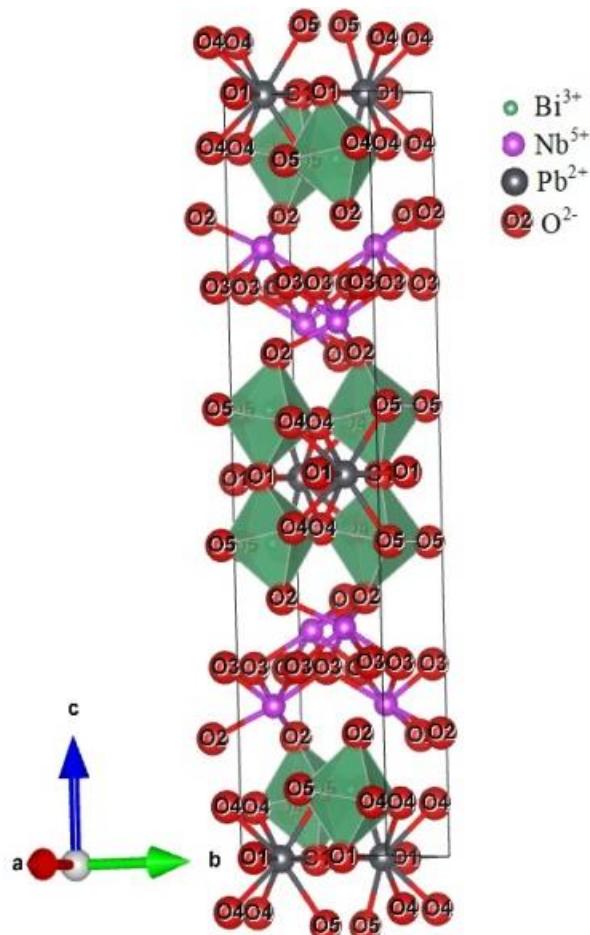


Figure 1. Crystal Structure of $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ (Wendari et al., 2019)

Table 1. Parameter cell of calculated and experimental $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$

Parameter	Calculated	Exp.(Miura, 2002)	$\Delta_{(\text{exp}-\text{calc})}$ (%)
c (Å)	5.4587	5.4960	0.68
b (Å)	5.3965	5.4960	1.81
c (Å)	25.4154	25.550	0.53
$\alpha = \beta = \gamma$ (degree)	90	90	
Lattice energy (eV)	-1005.8448		

The a and b lattice parameters produced in this simulation are not the same as those reported by Miura et al., but its are consistent with the results of the $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ synthesis reported by Kim et al. (2004). Cell parameters of a , b , and c are 5.503(4), 5.495(4), and 25.531(5), respectively. Aurivillius cell parameters with very small differences between experimental and simulation results have also been reported by several researchers. The difference in cell parameters is caused by differences in synthesis methods. The very small difference in cell parameters between the experimental and simulation results indicated that the simulated compound is correct and can be used as a standard of input data for simulating $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ doping with La^{3+} and Mn^{3+} .

In this study, La^{3+} dopant can occupy Bi^{3+} of $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ or both bismuth oxide and A sites, while Mn^{3+} occupies B site. The five doping compounds produced in this study are denoted by PBNL, PBNLM-Bi-0.1, PBNLM-Bi-0.3, PBNLM-A-0.1, and PBNLM-A-0.3. PBNL is a compound of $\text{PbBi}_{1.5}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_2\text{O}_9$ ($x = 0.0$) where all La^{3+} occupies a layer of $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ with an occupancy of 25% of 1 Bi occupancy. PBNLM-Bi-0.1 is $\text{Pb}_{0.8}\text{Bi}_{1.7}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$, where $x = 0.1$, La^{3+} occupies 0.25% of Bi site in the $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ layer, 5% of Mn^{3+} occupies the Nb^{5+} site in the octahedral layer of perovskite, and 20% of Bi^{3+} occupy the dodecahedral Pb^{2+} in the perovskite layer. PBNLM-Bi-0.3 is $\text{Pb}_{0.4}\text{Bi}_{2.1}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$ ($x = 0.3$) where La^{3+} occupies 0.25% of the site of Bi^{3+} in the $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ layer, 15% of Mn^{3+} occupies the site of Nb^{5+} in the octahedral layer of perovskite, 60% of Bi^{3+} occupy the Pb^{2+} dodecahedral in the perovskite layer. PBNLM-A-0.1 is $\text{Pb}_{0.8}\text{La}_{0.7}\text{Bi}_{1.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$ ($x = 0.1$), where La^{3+} occupies 25% of the Bi^{3+} site in the $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ layer and 20% in Pb^{2+} ; Mn^{3+} 5% occupies the site of Nb^{5+} in the perovskite octahedral layer. PBNLM-A-0.3 is $\text{Pb}_{0.4}\text{La}_{1.1}\text{Bi}_{1.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$, where $x = 0.3$, La^{3+} occupies 0.25% of the Bi^{3+} site in the $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$ layer and 60% occupies the Pb^{2+} dodecahedral in the perovskite layer.

As a result of partial substitution to produce the five compounds, the stability of the structure is predicted from the average value of the ionic radius or bond length, which is formulated:

$$t = \frac{[(1-x)r_A + xr_{A'} + r_O]}{\sqrt{2}[(1-x)r_B + xr_{B'} + r_O]} \quad (5)$$

This tolerance involves partial substitution of cations A and/or B by A' and B' , respectively, with a concentration of x . The results of the calculation of perovskite tolerance indicate that the presence of dopants in PBN causes the t value to decrease (Table 2) as an indication that the structures formed are increasingly orthorhombic. This reduction was more significant when La^{3+} occupied the perovskite layer rather than the bismuth layer due to the large ionic radii difference between La^{3+} (1.36 Å) and Pb^{2+} (1.49 Å) compared to the ionic radii of La^{3+} and Bi^{3+} (1.40 Å).

Simulation results of the compounds are shown in Figure 2. Lattice parameters of a , b , and c of the five Aurivillius compounds rise from their parent compounds. When $x = 0$, the cell parameter rises along with the radius of the La^{3+} (1.16 Å) which is greater than Bi^{3+} (1.17 Å) for 8-fold coordination (Shannon, 1976). The increase in parameters was even greater when La^{3+} was partially distributed in both layers of bismuth oxide and perovskite (PBNLM-A-0.1 and PBNLM-A-0.3). Conversely, when La^{3+} in the bismuth oxide layer and Bi^{3+} occupies A site in the perovskite layer, the cell parameters decrease. When compared with PBNL, the lattice parameter a tends to be constant, b decreases, and c increases for both PBNLM-Bi-0.1 and PBNLM-Bi-0.3 compounds. The cell parameter of the both compound is elongated. The increase in Bi occupancy in layer of A results in a larger octahedral distortion (Ismunandar et al., 1996). Wendari reported that the cell parameter of a was relatively constant, while the lattice parameters of a and b decrease with increasing value of x . They propose that this is consistent with the ionic radius of Pb^{2+} which is greater than Bi^{3+} for 8-fold coordination, where Pb^{2+} is found in the Bi^{3+} layer. If so then we predict that the compound they have synthesized is not the neutral compounds of $\text{Pb}_{0.8}\text{Bi}_{1.7}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_9$ and $\text{Pb}_{0.4}\text{Bi}_{2.1}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{1.7}\text{Mn}_{0.3}\text{O}_9$ as they claim (Wendari et al., 2019).

Table 2. Perovskite tolerance factor of La^{3+} and Mn^{3+} -doped $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ aurivillius phase

Dopant composition (x)	Aurivillius	t	t (Wendari et al., 2019)
0.0	PBNL	0.999	0.945
	PBNLM-Bi-0.1	0.993	
0.1	PBNLM-A-0.1	0.990	0.944
	PBNLM-Bi-0.3	0.980	
0.3	PBNLM-A-0.3	0.972	0.940

The t value of this calculation is different from $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ that reported (Wendari et al., 2019) because in addition to the difference in the value of the Pb^{2+} ionic radius, it is also the distribution of the dopant composition at position A in the perovskite layer and the position of Bi in $(\text{Bi}_2\text{O}_2)^{2+}$.

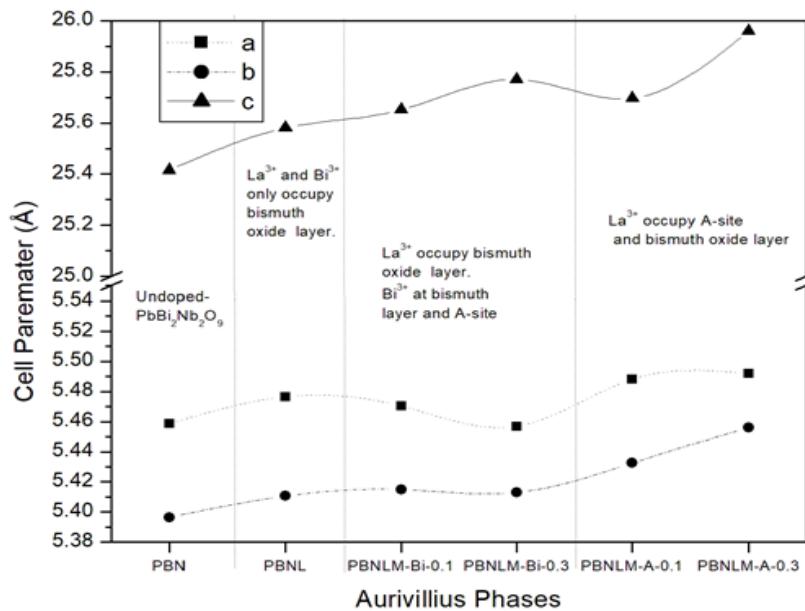


Figure 2. Lattice parameter of La^{3+} and Mn^{3+} -doped $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ Aurivillius Phase

Table 3. Interatomic potential of $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ and $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$

	A (eV)	ρ (Å)	C (eV Å)
a) Buckingham short range			
Pb...O	5564.374	0.2610	0.0
Nb...O	1796.30	0.3459	0.0
Bi...O	49529.35	0.2223	0.0
O...O	9547.96	0.2192	32.0
b) Shell model			
Species	k (eV Å ²)	Shell (e)	
Pb^{2+}	205.00	1.00	
Nb^{5+}	1358.58	-4.497	
Bi^{3+}	359.55	-5.51	
O^{2-}	6.3	-2.04	

The lattice parameter is also affected by the polarization of ions. In this study, the polarization strength of cations is $\text{Bi}^{3+} > \text{Nb}^{5+} > \text{Pb}^{2+}$. While the polarization of the Mn^{3+} and La^{3+} ions is zero because all charges are centered on the core (+3). Due to ion polarization, the bismuth oxide layer and perovskite layer is distorted as reinforced by the report of Shikawa et al. in $\text{SrBi}_2(\text{Ta}_{1-x}\text{Nb}_x)_2\text{O}_9$ compounds (Shimakawa et al., 2000). Such distortion also indicates that an ion in a compound no longer has a perfect Bond Valence Sum (BVS) (Kilo et al., 2011; La Kilo & Mazza, 2011). The ion polarization in this study was modeled with a shell model as shown in **Table 3**.

Based on **Table 3**, the repulsive force between cationic and anionic shells is $\text{Bi}... \text{O} > \text{Pb}... \text{O} > \text{Nb}... \text{O}$ as shown in the Buckingham potential. This indicated that the number of Bi^{3+} ions which replace A ion in perovskite layer is only partially compared to Pb^{2+} ion. However, the two ions have the same chemical character, namely the presence of lone pair electron in s^2 orbital (La Kilo et al., 2020). The electron pair in

bismuth oxide layer causes elongation in the PBNLM-Bi-0.1 and PBNLM-Bi-0.3 structures. This is consistent with the report of Sadapu et al. that the increase in c cell parameter is due to the repulsion effect of the free electron pair of Bi^{3+} in the bismuth oxide layer of $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ ($\text{A} = \text{Ba}, \text{Ca}, \text{Sr}, \text{and Pb}$) (Sadapu, 2015). The increase in ionic polarization as a result of the increase of displacement along the axes of a and b (Shimakawa et al., 2000).

$\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ lattice energy is much smaller than the $\text{Bi}_3\text{TiNbO}_9$ lattice energy reported by Rosyidah et al. (Rosyidah et al., 2008). The more the number of octahedral layers in the perovskite, the more negative the Aurivillius lattice energy of the compound. This compound is a two-layer Aurivillius which in theory will have more energy than the Aurivillius lattice energy with the octahedral layer above it. But these results are contrary to what is expected. In fact, $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ has a lower lattice energy compared to the four-layer Aurivillius lattice energy of $\text{BaBi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ (-770.64590 eV) and $\text{Ba}_2\text{Bi}_4\text{Ti}_5\text{O}_{18}$ (-927.2781 eV), which means

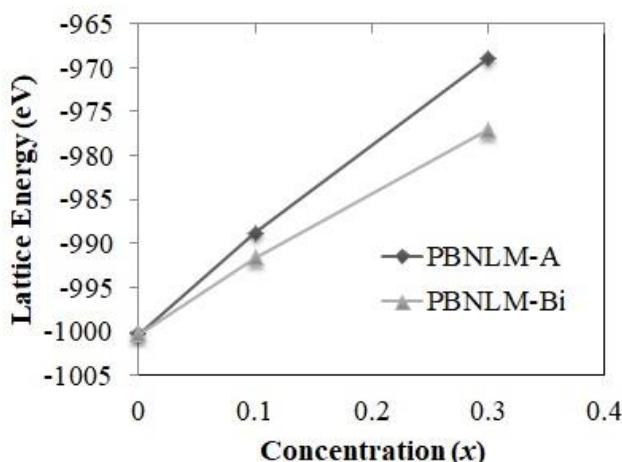


Figure 3. Lattice Energy of Mn^{3+} and La^{3+} -doped $PbBi_2Nb_2O_9$

that the $PbBi_2Nb_2O_9$ lattice energy is very stable so it is not surprising if many researchers try to modify this structure as a potential as ferro electromagnetic material in industry. When $PbBi_2Nb_2O_9$ is doped with La^{3+} and Mn^{3+} , the resulting Aurivillius lattice energy are becoming greater as shown in **Figure 3**.

PBNLM-Bi-0.1 and PBNLM-Bi-0.3 lattice energy is smaller than PBNLM-A-0.1 and PBNLM-A-0.3. That is, the Pb^{2+} substitution in the perovskite layer is easier to occur by Bi^{3+} than La^{3+} dopants. This also confirms that the elongation of $Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO_9$ structure with an increase in concentration ($x = 0, 0.1$, and 0.3) because Bi^{3+} which occupies the perovskite layer replaces the site of A (Pb^{2+}), not $(Bi_2O_2)^{2+}$ layer as shown reported by Wendari *et al.* (2019). This indicates that PBNLM-Bi is easier to synthesize than PBNLM-A. However, La^{3+} that enters both layers from Aurivillius, it is predicted that the structure of the compound will be more distorted, and in a higher concentration of La^{3+} dopant, Aurivillius compound will not be formed. Luckily, the Mn^{3+} that enters is only at site of B and in small amounts, partially substitutes Nb^{5+} which carries ferroelectric properties. Mn^{3+} which has four unpaired electrons in the d orbital causes Aurivillius to also have magnetic properties. These no spherical d orbital add to the octahedral distortion of the perovskite layer.

CONCLUSIONS

The atomistic simulation results were in good agreement with the experimental results based on the lattice parameters of the parent compound, $PbBi_2Nb_2O_9$. Bi^{3+} which partially substituted Pb^{2+} in the perovskite layer causes the structure of $Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO_9$ ($x = 0, 0.1$, and 0.3) to elongate. Conversely, if Pb^{2+} was substituted by La^{3+} then that elongation did not occur. La^{3+} prefers to occupy bismuth oxide layer rather than the dodecahedral A-site of the perovskite layer. Increasing the concentration of dopants results Mn^{3+} and La^{3+} -doped $PbBi_2Nb_2O_9$ phase being less stable. PBNLM-Bi is

predicted more easily synthesized compared to PBNLM-A.

ACKNOWLEDGMENTS

The authors thank to Ms. Triwahyuni Umamah for technical assistance. The research was financed by Universitas Negeri Gorontalo with grant number: B/142/UN47.D1/PT.01.03/202 of PNBP Basic research.

REFERENCES

- Aurivillius, B. (1949a). Mixed Bismuth Oxides with Layer lattices: I The Structure Type of $CaBi_2Nb_2O_9$. *Arkiv Kemi Band I*.
- Aurivillius, B. (1949b). Mixed bismuth oxides with layer lattices. II. Structure of $Bi_4Ti_3O_12$. *Arkiv for Kemi*.
- Born, M., & Mayer, J. E. (1932). Zur Gittertheorie der Ionenkristalle. *Zeitschrift Für Physik*. <https://doi.org/10.1007/BF01340511>
- Dutra, J. D. L., Bispo, T. D., de Freitas, S. M., & dos S. Rezende, M. V. (2021). ParamGULP: An efficient Python code for obtaining interatomic potential parameters for General Utility Lattice Program. *Computer Physics Communications*, 265, 107996. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.107996>
- Gale, J. D. (1997). GULP: A computer program for the symmetry-adapted simulation of solids. *Journal of the Chemical Society - Faraday Transactions*. <https://doi.org/10.1039/a606455h>
- Gale, J. D., & Rohl, A. L. (2003). The General Utility Lattice Program (GULP). *Molecular Simulation*. <https://doi.org/10.1080/0892702031000104887>
- Goldschmidt, V. M. (1926). Die gesetze der krystallochemie. *Naturwissenschaften*, 14(21), 477–485.
- Islam, M. S., Lazure, S., Vannier, R., Nowogrocki, G., & Mairesse, G. (1998). Structural and computational studies of Bi 2 WO 6 based

- oxygen ion conductors. *Journal of Materials Chemistry*, 8(3), 655–660.
- Ismunandar, Kennedy, B. J., Gunawan, & Marsongkohadi. (1996). Structure of ABi₂Nb₂O₉ (A = Sr, Ba): Refinement of powder neutron diffraction data. *Journal of Solid State Chemistry*, 126(1), 135. <https://doi.org/10.1006/jssc.1996.0321>
- Kilo, A. La, Prijamboedi, B., Martoprawiro, M. A., & Ismunandar. (2011). Modeling ionic conduction in γ -Bi 2VO 5.5. *Proceedings - International Conference on Instrumentation, Communication, Information Technology and Biomedical Engineering 2011, ICICI-BME 2011*. 2011. <https://doi.org/10.1109/ICICI-BME.6108652>
- Kim, H. G., Hwang, D. W., & Lee, J. S. (2004). An undoped, single-phase oxide photocatalyst working under visible light. *Journal of the American Chemical Society*, 125(29). <https://doi.org/10.1021/ja049676a>
- La Kilo, A., Costanzo, A., Mazza, D., Martoprawiro, M. A., Prijamboedi, B., & Ismunandar, I. (2020). Highest ionic conductivity of BIMEVOX (ME = 10% Cu, 10% Ga, 20% Ta): Computational modeling and simulation. *Indonesian Journal of Chemistry*, 20(3), 510. <https://doi.org/10.22146/ijc.42635>
- La Kilo, A., & Mazza, D. (2011). Pemodelan konduktivitas ion dalam struktur Li₂Sc₃(PO₄)₃ (Modeling ionic conductivity in Li₂Sc₃(PO₄)₃ structure). *Jurnal Manusia Dan Lingkungan*, 18(3), 179–183. <https://doi.org/10.22146/jml.18439>
- La Kilo, A., Umamah, T. S., & Laliyo, L. A. R. (2019). Study on the Stability of Trivalent Cations Doped Zirconia through Atomistic Modeling. *Jurnal Kimia Sains Dan Aplikasi*, 22(4), 129–135. <https://doi.org/10.14710/jksa.22.4.129-135>
- Mczka, M., Paraguassu, W., Macalik, L., Freire, P. T. C., Hanuza, J., & Mendes Filho, J. (2011). A Raman scattering study of pressure-induced phase transitions in nanocrystalline Bi₂MoO₆. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 23(4), 45401.
- Miura, K. (2002). Electronic properties of ferroelectric SrBi₂Ta₂O₉, SrBi₂Nb₂O₉, and PbBi₂Nb₂O₉ with optimized structures. *Applied Physics Letters*, 80, 2967. <https://doi.org/10.1063/1.1474607>
- Phillpot, S. R., Sinnott, S. B., & Asthagiri, A. (2007). Atomic-level simulation of ferroelectricity in oxides: Current status and opportunities. *Annu. Rev. Mater. Res.*, 37, 239–270.
- Prakash, P., Garg, A., Roy, M. K., & Verma, H. C. (2007). Novel low-temperature synthesis of ferroelectric neodymium-doped bismuth titanate nanoparticles. *Journal of the American Ceramic Society*, 90(4). <https://doi.org/10.1111/j.1551-2916.2007.01539.x>
- Rosyidah, A., Onggo, D., Khairurrijal, & Ismunandar. (2008). Atomic simulations of Aurivillius oxides: Bi₃TiNbO₉, Bi₄Ti₃O₁₂, BaBi₄Ti₄O₁₅ and Ba₂Bi₄Ti₅O₁₈ doped with Pb, Al, Ga, In, Ta. *Journal of the Chinese Chemical Society*, 55(1). <https://doi.org/10.1002/jccs.200800018>
- Sadapu, S. (2015). Pengaruh Subtitusi Bi secara Parsial oleh Dopan (A= Ba, Ca, Sr dan Pb) dalam Lapisan [Bi₂O₂]²⁺ pada Oksida Aurivillius ABi₄Ti₄O₁₅. *Skripsi*, 1(441410014).
- Shannon, R. D. (1976). Revised effective ionic radii and systematic studies of interatomic distances in halides and chalcogenides. *Acta Crystallographica Section A*, A32, 751–767. <https://doi.org/10.1107/S0567739476001551>
- Shimakawa, Y., Kubo, Y., Tauchi, Y., Kamiyama, T., Asano, H., & Izumi, F. (2000). Structural distortion and ferroelectric properties of SrBi₂(Ta_{1-x}Nb_x)₂O₉. *Applied Physics Letters*, 77, 2749. <https://doi.org/10.1063/1.1319509>
- Snedden, A., Lightfoot, P., Dinges, T., & Islam, M. S. (2004). Defect and dopant properties of the Aurivillius phase Bi₄Ti₃O₁₂. *Journal of Solid State Chemistry*, 177(10), 3660–3665.
- Wendari, T. P., Arief, S., Mufti, N., Suendo, V., Prasetyo, A., Ismunandar, Baas, J., Blake, G. R., & Zulhadjri. (2019). Synthesis, structural analysis and dielectric properties of the double-layer Aurivillius compound Pb_{1-2x}Bi_{1.5+2x}La_{0.5}Nb_{2-x}Mn_xO₉. *Ceramics International*, 45(44), 17276–17282. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.05.285>
- Xiaojing, Y., Shihua, D., & Xiobing, L. (2016). The dielectric relaxor behaviour of BaTiO₃ based ceramics doped with Bi and Mn. *Ferroelectrics*, 499(1), 115–122.
- Yang, X., Liu, X., & Ding, S. (2018). The defect and dielectric properties of Nb and Mn co-doping BaTiO₃ ceramics. *Ferroelectrics*, 533(1), 132–138.