

ISBN: 978-602-8824-49-1

PROSIDING

Seminar Nasional Sains dan Matematika II

**Peran Sains, Matematika dan Pendidikan
Dalam Mengatasi Masalah Bangsa**

Universitas Tadulako, 23 Nopember 2013

Diselenggarakan oleh:



Jurusan Pendidikan MIPA
Fakultas Keguruan dan Ilmu Pendidikan
Universitas Tadulako

Penerbit UNTAD PRESS

DAFTAR MAKALAH

Kode Makalah	Judul	Hal
	<i>Pemakalah Utama</i>	
U-01	Potensi Sari Mesokarp Berbagai Buah Sebagai Inhibitor Lipase Pankreas <i>Subandi, Muntholib, Elly Hendrik Sanjaya, Laurent Octavia dan Siti Rachmania</i>	1
U-02	Development of Simple Method to Synthesize Nanostructured-Materials and Its Application for Energy Related Devices <i>Agus Purwanto</i>	9
U-03	Profil Kemampuan dan Daya Juang Mahasiswa <i>Quitter, Camper</i> dan <i>Climber</i> pada Program Studi Pendidikan Guru Sekolah Dasar dalam Menyelesaikan Masalah Matematika <i>Sударman Benu</i>	13
U-04	Studi Tentang Bahan Antifertilitas dan Implikasi Prospeknya Sebagai Kontrasepsi Pria <i>Achmad Ramadhan</i>	18
U-05	Perbandingan Performansi Sel Surya Tersensitisasi <i>Dye</i> (DSSC) Alami: Ketan Hitam, Kunyit dan Bunga Kembang Sepatu <i>Darsikin, Sahrul Saehana, Khairurrijal dan Mikrajuddin Abdullah</i>	23
	<i>A. Bidang Biologi dan Pendidikan Biologi</i>	
A-01	Kestabilan populasi tumbuhan <i>mangrove Rhizopora apiculata</i> dan <i>Rhizopora mucronata</i> di Laguna Tasilaha Kabupaten Donggala <i>Samsurizal M. Suleman</i>	28
A-02	Keterampilan Berpikir Kritis dan Penguasaan Konsep IPA Biologi Dalam Pembelajaran Berstrategi Kooperatif Tipe STAD <i>Hartono D. Mamu</i>	35
A-03	Peran Pendidikan Dalam Pembangunan Bangsa <i>Nadjamuddin Ramly</i>	42
A-04	Uji efek antidiabetes infusa kulit batang paliasa (<i>melochia umbellata</i>) terhadap kelinci dengan induksi aloksan <i>Ririen Hardani</i>	55
A-05	Pengaruh Beberapa Pendekatan Pembelajaran terhadap Aktivitas dan Hasil Belajar Siswa Kelas IX RSBI SMP Negeri I Palu pada Kosnsep Pewarisan Sifat <i>Hestiana</i>	59
A-06	Pengaruh Penggunaan Multimedia terhadap Keterampilan Generik Sains dan Penguasaan Konsep Sains pada Siswa Kelas VIII SMP Negeri 2 Parigi <i>Muhasabe</i>	66
A-07	Keanekaragaman Tumbuhan Di Lingkungan Sekolah dan Implementasinya Dalam Pembelajaran Di SMP Negeri 21 Palu <i>Ratna Musa, Mohammad Jamhari dan Musdalifah</i>	73

B-05	Meningkatkan Kemampuan Berpikir Kritis dengan Menggunakan Model Pembelajaran Berbasis Masalah (PBM) pada Siswa Kelas XI SMA Mustakim, Haeruddin dan I Wayan Darmadi	184
B-06	Analisis Kemampuan Menginterpretasikan Grafik Termodinamika Siswa SMA Endang Sulastri, Nurjannah dan I Komang Werdhiana	191
B-07	Perancangan Single Axis Tracking System Yusnaini Arifin, Ramang Magga dan Rustan Hatib	196
B-08	Sel Surya DSSC dengan Memanfaatkan Getah Pohon Kayu Jawa (<i>Lanneacoromandelica (Houtt.) merr</i>) sebagai Komponen Polimer Sahrul Saehana	199
B-09	Survey Sumber Daya Sekolah dan Pelaksanaan Ujian Praktek Mata Pelajaran Fisika SMA di Kota Palu Syamsu, Amiruddin Kade, dan Haeruddin	206
B-10	Pengembangan Bahan Alam Pasir Besi Sebagai Material Nanopartikel Magnetik Fe_3O_4 Untuk Bahan Aktif Biosensor SPR Lufsyi Mahmudin, Iqbal dan Sandra Kasim	211
B-11	Mengidentifikasi Tingkat Kemurnian Air Berdasarkan Indeks Biasanya dengan Menggunakan Lensa Cembung Arda Arif, Widji Lestari, Muhammad Ali dan Sahrul Saehana	216
B-12	Pengaruh Waktu Pengeringan Serat Kapuk Dengan Udara Panas Terhadap Adsorpsi Partikulat Dalam Air Melvatrria Karim, Mohamad Jahja, Yayu I. Arifin dan Nawir Sune	221
B-13	Pengaruh Model Pembelajaran Kooperatif Tipe Group Investigation Berbantuan Laboratorium Terhadap Hasil Belajar Fisika Pada Siswa SMA Negeri 3 Palu Muhammad Fachrurrozy Muslimin dan Syamsu	227
B-14	Analisis Penguasaan Konsep Listrik Mahasiswa Calon Guru Fisika Heny Asvarinda, I Komang Werdhiana dan Jusman Mansyur	232
B-15	Alternatif Teknologi Hybrid untuk Mendukung Pembelajaran Sekolah Terpencil di Sulawesi Tengah Unggul Wahyono	239
B-16	Pengembangan Kompetensi Guru dan Motivasi Berprestasi Siswa Melalui Model Pembelajaran Konstruktivis dalam Meningkatkan Hasil Belajar Fisika Siswa di SMP Sekotamadya Palu I Wayan Darmadi dan Nurasyah Dewi Napitupulu	244
B-17	Pengaruh Pendekatan Kontekstual Terhadap Penguasaan Konsep Fisika dan Keterampilan Berpikir Kritis Pada Siswa MAN 2 Model Palu Nikmat	248
B-18	Pemetaan Tingkat Perkembangan Kognitif Siswa Kelas XI SMA LAB School Palu Marungkil Pasaribu, Yusuf Kendek, Emi Sianturi	256
B-19	Perbandingan Pembelajaran Model Learning Cycle dan Problem Based Learning Tika Puji Astuti, Haeruddin, dan Sahrul Saehana	262
C. Bidang Kimia dan Pendidikan Kimia		
C-01 ✓	RS-NoK dan BCA-Bensin sebagai Cara Pengendalian Distribusi Bensin melalui Stasiun Pengisian Bahan Bakar Umum (SPBU) di Gorontalo Ni Nyoman Widiyanti, Ayu Putri Karmila, Akram La Kilo	267
C-02 ✓	Penentuan Energi Kisi α -dan β -Bi ₂ VO _{5,5} melalui Simulasi Atomistik Akram La Kilo	273
C-03	Pemanfaatan tongkol jagung dalam industri briket sebagai bahan bakar alternative Sitti Rahmawati dan Jamaluddin Sakung	278

Studi Kestabilan α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ melalui Simulasi Atomistik

Akram La Kilo

Email: akram@ung.ac.id

Jurusan Pendidikan Kimia Universitas Negeri Gorontalo
 Jl. Jend. Sudirman No. 6 Kota Gorontalo 96128

Abstrak. $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ merupakan material elektrolit yang memiliki konduktivitas ionik tinggi dibandingkan dengan konduktivitas ionik zirkonia terstabilkan itria (YSZ). Akibatnya, $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ mempunyai potensi aplikasi sebagai elektrolit untuk menggantikan YSZ yang selama ini telah diaplikasikan sebagai elektrolit Sel Bahan Bakar Oksida Padatan (*Solid Oxide Fuel Cell*, SOFC). Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui kestabilan oksida α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ melalui pendekatan simulasi atomistik dengan menggunakan *code* GULP (*General Utility Lattice Program*). Pemodelan atomistik ini menggambarkan interaksi antara ion dalam struktur kristal berdasarkan model padatan yang diusulkan Born. Potensial *short-range* yang digunakan dalam penelitian ini adalah potensial Buckingham. Hasil optimasi geometri pada tekanan tetap menunjukkan bahwa parameter sel satuan oksida padatan α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ berkesesuaian baik dengan parameter sel satuan hasil eksperimen kedua oksida tersebut. Energi kisi kedua oksida tersebut masing-masing adalah -321,464 eV dan -320,324 eV. Nilai-nilai tersebut jauh lebih negatif dibandingkan dengan energi kisi oksida γ - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$, -220,348 eV yang telah kami publikasikan. Hal ini berarti bahwa fasa alfa dan beta oksida tersebut lebih stabil dibandingkan dengan fasa gamma. Hasil ini juga berkesesuaian baik dengan hasil eksperimen bahwa fasa gamma hanya akan eksis pada suhu tinggi, karena fasa gamma akan segera berubah menjadi fasa beta, kemudian fasa alfa pada suhu rendah.

Kata kunci: $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$, simulasi atomistik, energi kisi

I. PENDAHULUAN

Struktur $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dapat dianggap merupakan turunan dari oksida Aurivillius lapis satu, seperti Bi_2WO_6 atau γ - Bi_2MoO_6 , dengan pembentukan kekosongan ion oksida pada lapisan-lapisan logam. Oksida Aurivillius merupakan suatu senyawa yang mempunyai struktur berlapis, yaitu terdiri atas lapisan $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$ dan lapisan $[\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}]^{2-}$, perovskit [1]. A merupakan kation-kation yang bermuatan +1, +2, atau +3 dengan koordinasi dodekahedral. Kation A yang berukuran besar umumnya adalah logam alkali, alkali tanah, unsur tanah jarang atau campurannya. Sedangkan kation B merupakan suatu unsur transisi dengan koordinasi oktahedral yang berukuran lebih kecil dari kation A, dan n merupakan bilangan bulat yang menunjukkan jumlah oktahedral pada lapisan perovskit. Oleh karena itu, $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ terdiri dari lapisan $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$ dan lapisan mirip-perovskit $(\text{VO}_{3,5}\square_{0,5})^{2-}$, dimana \square adalah kekosongan ion oksida intrinsik [2,3].

Senyawa $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ menunjukkan polimorfi yang kompleks, dengan tiga morf utama, yaitu α , β , dan γ . Pada suhu kamar, fasa stabil (α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$) mengkristal dalam simetri monoklinik [4]. Pada pemanasan, fasa α mengalami transisi ke fasa β (447 °C) dan kemudian fasa γ (567 °C). Transisi

fasa tersebut berhubungan dengan *ordering* kekosongan dalam subkisi oksida. Namun, energi yang terlibat di dalamnya belum pernah ditentukan secara eksperimen. Hubungan parameter sel satuan antara polimorf dinyatakan dengan dimensi sel ortorombik rata-rata [5] yaitu $a_m \approx 5,53$, $b_m \approx 5,61$, $c_m \approx 15,28$ Å, dimana α -ortorombik, $a \approx 3a_m$, $b \approx b_m$, $c \approx c_m$; α -monoklinik, $a \approx 6a_m$, $b \approx b_m$, $c \approx c_m$, $\beta = 89,756^\circ$; β -ortorombik, $a \approx 2a_m$, $b \approx b_m$, $c \approx c_m$; γ -tetragonal, $a \approx a_m/\sqrt{2}$, $c \approx c_m$.

Metode komputasi yang telah dilakukan dalam penelitian ini adalah simulasi atomistik, dengan menggunakan perangkat lunak GULP (*General Utility Lattice Program*) [6]. GULP banyak digunakan dalam padatan, seperti senyawa berstruktur perovskit, LaMO_3 ($M = \text{Co}$, Mn , Ga) [7]. Simulasi atomistik dengan menggunakan GULP pada fasa gamma γ - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ telah dilakukan oleh akram dkk. untuk mempelajari sifat transpor fasa tersebut [8]. Namun, untuk α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ belum dilakukan analisisnya dengan menggunakan metode atomistik, khususnya dalam menentukan energi kisi yang terlibat di dalamnya.

II. METODE PENELITIAN

Simulasi atomistik ini dilakukan melalui prosedur optimasi geometri dengan menggunakan komputer berbasis linux yang dilengkapi dengan *code General Utility lattice Program (GULP)*. Pemodelan atomistik menggambarkan interaksi antara ion dalam struktur kristal berdasarkan model padatan yang diusulkan Born [9] (Born dan Huang, 1954). Pemodelan interaksi antar ion dapat dipahami melalui fungsi energi potensial terhadap sistem, khususnya sistem dua benda yang menggambarkan interaksi tersebut. Energi potensial tarikan dan tolakan antar masing-masing pasangan ion dalam kristal padat pada nol Kelvin dinyatakan sebagai energi kisi statis yang dirumuskan sebagai:

$$E_L = \sum_{ij} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \sum_{ij} \theta_{ij} + \sum_{ijk} \theta_{ijk} \quad (1)$$

Suku pertama dari persamaan (1) adalah energi kisi statis dari tarikan Coulomb *long-range* untuk susunan ion-ion yang tak terbatas. Suku kedua menyatakan sifat difusi dari awan elektron yang mengelilingi inti yang terdiri dari interaksi *short-range* yang terkait dengan tolakan Pauli antara awan elektron bertetangga dan komponen tarik-menarik van der Waals dari *short-range*. Suku ketiga menggambarkan interaksi tiga benda, dalam padatan ion, interaksi dua benda yang mendominasi. Dalam model ion kaku, interaksi *short-range* didominasi terutama oleh efek ion tetangga terdekat. Fungsi potensial *short-range* dapat digambarkan oleh potensial Buckingham dalam bentuk:

$$\theta_{ij} = A_{ij} \exp\left(-\frac{r_{ij}}{\rho_{ij}}\right) - \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6} \quad (2)$$

dimana A_{ij}, ρ_{ij} dan C_{ij} adalah tetapan dan r_i adalah jarak antar ion. Suku pertama pada persamaan (2) 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 [10]. Model tersebut merepresentasikan ion sebagai sebuah kulit bermuatan dengan massa yang sangat kecil (menggambarkan awan elektron valensi terluar) yang terikat pada inti bermassa besar oleh pegas harmonis. Energi tambahan akibat interaksi kulit dengan inti dinyatakan oleh persamaan (3):

$$U_s = \sum_i k_i^s r_i^2 \quad (3)$$

dimana k_i^s adalah tetapan pegas dan r_i adalah jarak antara inti dengan kulit. Persamaan (4) mendeskripsikan polarisasi ion, yang diperlukan untuk perhitungan energi defek dan tetapan dielektrik. Polarisasi ion dirumuskan dengan persamaan (4):

$$\alpha_i = \sum \frac{(Y_i e)^2}{k_i^s} \quad (4)$$

dimana Y_i adalah muatan kulit dan e adalah muatan elektron.

Perhitungan interaksi Coulomb dalam penelitian ini menggunakan metode Ewald dengan *code GULP*. Sementara, potensial *short-range* yang digunakan adalah potensial Buckingham [6,11].

III. HASIL DAN PEMBAHASAN

Data kristalografi α -Bi₂VO_{5,5} dan β -Bi₂VO_{5,5} yang digunakan adalah parameter sel satuan yang dilaporkan oleh Vannier dkk. [12]. Fraksional setiap atom dalam α -Bi₂VO_{5,5} dan β -Bi₂VO_{5,5} melibatkan *core* (inti) dan *shell* (kulit) yang menggambarkan interaksi atom-atom pada kulit dan inti sebagaimana ditunjukkan pada Tabel 1 dan Tabel 2.

TABEL 1. PARAMETER SEL α -Bi₂VO_{5,5} SEBAGAI INPUT DALAM SIMULASI ATOMISTIK

Cell						
	a	b	c	$\alpha\beta\gamma$		
	16,5942	5,61	15,2699	9090 90,267		
Fractional						
Species	x	y	z	Mua-tan	Oku-pansi	
Bi1 core	0,0822	0,2059	0,1650	8,51	1	
Bi1 shel	0,0822	0,2059	0,1650	-5,51	1	
Bi2 core	0,0870	0,7238	0,3240	8,51	1	
Bi2 shel	0,0870	0,7238	0,3240	-5,51	1	
Bi3 core	0,2544	0,7667	0,1700	8,51	1	
Bi3 shel	0,2544	0,7667	0,1700	-5,51	1	
Bi4 core	0,2456	0,2876	0,3330	8,51	1	
Bi4 shel	0,2456	0,2876	0,3330	-5,51	1	
Bi5 core	0,4149	0,2738	0,1720	8,51	1	
Bi5 shel	0,4149	0,2738	0,1720	-5,51	1	
Bi6 core	0,4135	0,7614	0,3360	8,51	1	
Bi6 shel	0,4135	0,7614	0,3360	-5,51	1	
V1 core	0,2466	0,3160	-0,0080	1,25	1	
V1 shel	0,2466	0,3160	-0,0080	3,75	1	

V2	core	0,0678	0,7190	-0,0010	1,25	1
V2	shel	0,0678	0,7190	-0,0010	3,75	1
V3	core	0,4324	0,8290	-0,0040	1,25	1
V3	shel	0,4324	0,8290	-0,0040	3,75	1
O11	core	0,0000	0,0000	0,2500	0,04	1
O11	shel	0,0000	0,0000	0,2500	-2,04	1
O12	core	0,0000	0,2500	0,2440	0,04	1
O12	shel	0,0000	0,2500	0,2440	-2,04	1
O13	core	0,2500	0,0000	0,2610	0,04	1
O13	shel	0,2500	0,0000	0,2610	-2,04	1
O14	core	0,2500	0,2500	0,2480	0,04	1
O14	shel	0,2500	0,2500	0,2480	-2,04	1
O15	core	0,1720	-0,0140	0,2470	0,04	1
O15	shel	0,1720	-0,0140	0,2470	-2,04	1
O16	core	0,3320	-0,0180	0,2520	0,04	1
O16	shel	0,3320	-0,0180	0,2520	-2,04	1
O17	core	0,3310	0,5010	0,2580	0,04	1
O17	shel	0,3310	0,5010	0,2580	-2,04	1
O18	core	0,8450	0,5090	0,2460	0,04	1
O18	shel	0,8450	0,5090	0,2460	-2,04	1
O21	core	0,2160	0,1800	0,0880	0,04	1
O21	shel	0,2160	0,1800	0,0880	-2,04	1
O22	core	0,0780	0,8090	0,0910	0,04	1
O22	shel	0,0780	0,8090	0,0910	-2,04	1
O23	core	0,4250	0,7280	0,1140	0,04	1
O23	shel	0,4250	0,7280	0,1140	-2,04	1
O24	core	0,3990	0,7080	-0,1050	0,04	1
O24	shel	0,3990	0,7080	-0,1050	-2,04	1
O25	core	0,0780	0,8410	-0,0940	0,04	1
O25	shel	0,0780	0,8410	-0,0940	-2,04	1
O26	core	0,2290	0,1440	-0,0920	0,04	1
O26	shel	0,2290	0,1440	-0,0920	-2,04	1
O31	core	0,4830	0,0850	-0,0140	0,04	0,5
O31	shel	0,4830	0,0850	-0,0140	-2,04	0,5
O32	core	0,3380	-0,0400	0,0280	0,04	1
O32	shel	0,3380	-0,0400	0,0280	-2,04	1
O33	core	0,0507	0,3460	-0,0060	0,04	1
O33	shel	0,0507	0,3460	-0,0060	-2,04	1
O34	core	0,3400	0,4420	0,0250	0,04	1
O34	shel	0,3400	0,4420	0,0250	-2,04	1
O35	core	0,5170	0,4050	-0,0350	0,04	0,5
O35	shel	0,5170	0,4050	-0,0350	-2,04	0,5
O36	core	0,1870	0,5850	0,0130	0,04	1
O36	shel	0,1870	0,5850	0,0130	-2,04	1

TABEL 2. PARAMETER SEL β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ SEBAGAI INPUT DALAM SIMULASI ATOMISTIK

Cell						
	a	b	c	off		
	11,2331	5,6491	15,3469	90	90	90
Fractional						
Species	x	y	z	Mua- tan	Oku- pansi	
Bi core	0,0000	0,0000	0,1692	8,51	1	
Bi shel	0,0000	0,0000	0,1692	5,51	1	
Bi2 core	0,2500	0,5364	0,1688	8,51	1	
Bi2 shel	0,2500	0,5364	0,1688	5,51	1	
V1 core	0,0190	0,4800	0,0000	1,25	0,5	
V1 shel	0,0190	0,4800	0,0000	3,75	0,5	
V2 core	0,2500	0,0460	0,0000	1,25	1	
V2 shel	0,2500	0,0460	0,0000	3,75	1	
O1 core	0,2210	0,2510	0,2484	0,04	1	
O1 shel	0,2210	0,2510	0,2484	2,04	1	
O2 core	0,2500	0,9480	0,1006	0,04	1	
O2 shel	0,2500	0,9480	0,1006	2,04	1	
O3 core	0,1250	0,2330	0,0000	0,04	1	
O3 shel	0,1250	0,2330	0,0000	2,04	1	
O4 core	0,0740	0,6520	0,0655	0,04	0,75	
O4 shel	0,0740	0,6520	0,0655	2,04	0,75	
Space grup						
A M A M						

Berdasarkan parameter di atas, okupansi ion pada setiap posisi harus mendapatkan perhatian khusus karena *code* GULP akan membacanya sebagai *default* (okupansi ion sama dengan 1) jika tidak disertakan dalam data input, dan dapat menyebabkan kesalahan perhitungan. Kesalahan ini dapat disebabkan oleh data yang dimasukkan menghasilkan struktur sel satuan dengan muatan senyawa yang tidak netral ($\neq 0$). Jika muatan material tidak netral, maka harus dimasukkan koreksi terhadap energi penetralan, namun dalam penelitian ini, koreksi itu tidak diizinkan sehingga struktur sel satuan benar-benar dalam keadaan netral. Oleh karena itu, struktur material yang memiliki kekosongan ion pada posisi tertentu harus diperhatikan okupansi yang tepat.

Optimasi geometri α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ menggunakan parameter di atas ditambah dengan potensial antar iondan *springconstant* (tetapan pegas) ion. Dalam optimasi ini,

komponen-komponen yang berpengaruh adalah tetapan pegas masing-masing ion, muatan-muatan ion baik muatan *core* maupun muatan *shell*, dan interaksi *short range* (potensial Buckingham) antar ion. Hasil simulasi menunjukkan bahwa tetapan pegas ion, muatan *shell* ion, dan potensial Buckingham yang cocok untuk struktur α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ ditunjukkan dalam Tabel 3.

TABEL 3. KOMPONEN POTENSIAL BUCKINGHAM UNTUK STRUKTUR α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ DAN β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$

a) Short-range	A (eV)	r (Å)	C (eV Å ⁻⁶)
$\text{Bi}^{3+} \dots \text{O}^{2-}$	49.529,35	0,2223	0,0
$\text{V}^{5+} \dots \text{O}^{2-}$	6.870,52	0,243	27,0
$\text{O}^{2-} \dots \text{O}^{2-}$	576,940	0,33236	0,0

b) Shell model		
Species	k (eV Å ⁻²)	Shell(e)
Bi^{3+}	359,55	-5,51
V^{5+}	97	3,01
O^{2-}	74,92	-2,04

Potensial Buckingham ion-ion dalam struktur $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ yang ditabelkan di atas sama dengan potensial $\text{Bi}^{3+} \dots \text{O}^{2-}$ untuk senyawa Bi_2WO_6 dan fasa Aurivillius lainnya [13-15]. Sementara, potensial $\text{O}^{2+} \dots \text{O}^{2+}$ yang paling baik di sini berbeda dengan potensial yang digunakan dalam simulasi fasa Aurivillius yang dilaporkan tersebut. Fasa Aurivillius ini mempunyai kesamaan struktur dengan $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$, yaitu strukturnya berlapis yang terdiri dari lapisan $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ dan lapisan perovskit. Namun, perbedaannya adalah senyawa Aurivillius tidak memiliki kekosongan ion oksida instrinsik pada lapisan perovskitnya sebagaimana senyawa $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$. Oleh karena itu, interaksi *short range* antara ion O^{2-} dengan O^{2-} berbeda antara Aurivillius dengan $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$. Perbedaan antara dimensi sel satuan α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ hasil simulasi dan eksperimen ditampilkan dalam Tabel 4. Hasil optimasi geometri pada tekanan tetap menunjukkan bahwa parameter sel satuan oksida padatan α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ berkesesuaian baik dengan parameter sel satuan hasil eksperimen masing-masing oksida tersebut.

Perbedaan parameter hasil eksperimen dan perhitungan tidak lebih dari 9% untuk c, dan kurang dari 1% untuk a dan b. Pirovokk melaporkan perbedaan parameter sel satuan hasil eksperimen dan perhitungan terhadap senyawa

Bi_2WO_6 , yaitu a = -0,48%, b = 2,07%, dan c = 1,39%. Dalam senyawa Aurivillius yang lain, yaitu $\text{Bi}_2\text{PbNb}_2\text{O}_9$, perbedaan parameter sel satuan hasil eksperimen dan perhitungan semakin besar dengan naiknya konsentrasi Pb dalam lapisan $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ pada proses anti-posisi Bi-Pb. Besarnya perbedaan parameter sel satuan adalah a = 4,87%, b = -2,12%, dan c = -10,34%. Dengan demikian terlihat perbedaan parameter sel satuan hasil eksperimen dan perhitungan dalam senyawa α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ masih dalam rentang yang biasa didapatkan dalam simulasi atomistik.

TABEL 4. PARAMETER SEL SATUAN HASIL EKPERIMEN DAN PERHITUNGAN $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$

Parameter	Eksperimen	Kalkulasi	Perbedaan	%
α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$				
a (Å)	16,5942	16,4338	-0,160423	-0,97
b (Å)	5,6100	5,4152	-0,194784	-3,47
c (Å)	15,2700	16,5948	1,3250	8,68
V (Å ³)	1421,5124	1476,8113	55,2989	3,89
β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$				
a (Å)	11,233100	10,753523	-0,479577	-4,27
b (Å)	5,649100	5,460637	-0,188463	-3,34
c (Å)	15,346900	16,019564	1,1119	4,38
Volume (Å ³)	973,86678	940,68628	-33,1805	0,67

Perbandingan muatan sel dengan tetapan pegas untuk ion V^{5+} dan ion Bi^{3+} adalah besar. Hal ini menunjukkan bahwa kedua ion itu mempunyai kemampuan yang besar untuk mempolarisasi ion oksida. Dalam senyawa $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$, ion Bi^{3+} akan mempolarisasi ion oksida di lapisan bismut, dan ini tidak memberikan pengaruh terhadap hantaran ion oksida karena dalam lapisan bismut tidak terdapat kekosongan ion oksida. Namun, orbital pasangan elektron bebas pada Bi^{3+} memberikan pengaruh terhadap lintasan migrasi ion oksida di lapisan mirip-perovskit. Sebaliknya, ion V^{5+} akan mempolarisasi ion oksida O(2) dan O(3) di lapisan mirip-perovskit. Hal ini memberikan pengaruh terhadap hantaran ion dalam senyawa $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ karena terdapat kekosongan dalam lapisan mirip-perovskit. Oleh karena itu, senyawa $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ memiliki hantaran jenis ion yang lebih tinggi dibandingkan dengan senyawa YSZ (zirkonium terstabilkan itria) pada suhu yang sama. Akibat polarisasi itu juga maka $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ akan beroperasi pada suhu lebih rendah

dibandingkan dengan YSZ, namun karakter ionik $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ berkurang.

Energi kisi $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ yang diperoleh dari simulasi masing-masing adalah -321,464 eV dan -320,324 eV. Energi kisi tersebut mendekati energi kisi Aurivillius satu lapis yang ideal, seperti dalam senyawa Bi_2WO_6 , dengan energi kisi -349,71 eV [15]. Sebaliknya, energi kisi $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ jauh berbeda dengan energi kisi senyawa Bi_2GeO_5 , -259,33 eV [15]. Perbedaan ini kemungkinan disebabkan oleh jenis ion, jumlah ion, dan jenis polihedral koordinasi kation di lapis mirip-perovskit. Koordinasi Ge dalam lapisan mirip-perovskit di Bi_2GeO_5 , seluruhnya tetrahedral, sementara V dan O dalam $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ berkoordinasi campuran (tetrahedral, koordinasi 5, dan oktahedral). Nilai-nilai energi kisi fasa alfa dan beta dari oksida tersebut juga jauh lebih negatif dibandingkan dengan energi kisi oksida fasa gamma ($\gamma\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$), -234,00 eV yang telah kami publikasikan. Hal ini berarti bahwa fasa alfa dan beta oksida tersebut lebih stabil dibandingkan dengan fasa gamanya. Hasil ini juga berkesesuaian baik dengan hasil eksperimen bahwa fasa gamma hanya akan eksis pada suhu tinggi, karena fasa gamma akan segera berubah menjadi fasa beta, kemudian fasa alfa pada suhu rendah.

IV. KESIMPULAN

Penelitian telah berhasil menentukan energi kisi oksida $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ melalui simulasi atomistik dengan menggunakan code GULP (*General Utility Lattice Program*). Parameter sel satuan oksida padatan $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ berkesesuaian baik dengan parameter sel satuan hasil eksperimen kedua oksida tersebut. Energi kisi kedua oksida tersebut masing-masing adalah -321,464 eV dan -320,324 eV. Hal ini berarti bahwa fasa $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ lebih stabil dibandingkan dengan fasa gamma $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ yang memiliki energi kisi -234,00 eV. Oleh karena itu, fasa beta dan fasa gamma akan eksis pada suhu yang lebih rendah dibandingkan dengan fasa gamanya. Hasil simulasi ini berkesesuaian baik dengan hasil eksperimen. Metode atomistik ini dapat diterapkan pada penelitian berikutnya pada senyawa zirkonia seperti YSZ sehingga dapat dibandingkan dengan $\alpha\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan $\beta\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dalam penerapannya sebagai elektrolit pada suhu rendah.

V. DAFTAR PUSTAKA

- [1] Aurivillius, B., (1949), Mixed Oxides with Layer Lattices, *Arkiv for Kemi Bond*, **2**, 37.
- [2] Bruce, P. (1997): *Solid State Electrochemistry*, Cambridge University Press, UK.
- [3] Mairesse, G., Roussel, P., Vannier, R.N., Anne, M., Pirovano, C., Nowogrocki, G. (2003): Crystal Structure Determination of α -, β - and $\gamma\text{-Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ Polymorphs: Part II: Crystal Structure of $\gamma\text{-Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$, *Solid State Sciences*, **5**, 851-859.
- [4] Joubert, O., Jouanneaux, A., Ganne, M., Vannier, R.N. and Mairesse, G. (1994): Solid Phase Synthesis and Characterization of New BIMEVOX series: $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{M}_x\text{O}_{11}$ (M=Sb^v, Nb^v), *Solid State Ionics*, **73**, 309.
- [5] Pernot E., Anne, M., Bacmann, M., and Strobel, P. (1994): Structure and Conductivity of Cu and Ni-substituted $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ Compounds, *Solid State Ionic*, **70/71**, 259-263.
- [6] Gale, J.D. (1997): GULP: A Computer Program for the Symmetry-adapted Simulation of Solids, *Journal of Chemical Society Faraday Transactions*, **93**, 629-637.
- [7] Islam, M.S., Cherry, M., and Winch, L. J., Defect Chemistry of LaBO_3 (B = Al, Mn or Co) Perovskite-type Oxides: Relevance to Catalytic and Transport Behaviour, *Journal of Chemical Society Faraday Transactions*, 1996, **92**, 479.
- [8] Kilo, A.L., Prijamboedi, B., Martoprawiro, M.A., Ismunandar, (2011): Modeling ionic conduction in $\gamma\text{-Bi}_2\text{VO}_{5,5}$, *Proceedings International Conference on Instrumentation, Communication, Information Technology and Biomedical Engineering (ICICI-BME)*, 6108652, 330-333.
- [9] Born, B. and Huang, K. (1954) Dynamical Theory of Crystal Lattices. *Oxford University Press, Oxford*.
- [10] Dick, B.G, and Overhauser, A.W. (1958) Theory of the Dielectric Constants of Alkali Halide Crystals, *Physical Review.*, **90**, 112.
- [11] Gale, J.D., Rohl, A.L. (2003): The General Utility Lattice Program, *Molecular Simulation*, **29**, 291-341.
- [12] Vannier, R.N., Pernot, E., Anne, M., Isnard, O., Nowogrocki, G., Mairesse, G. (2003): $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ Polymorph Crystal Structures Related to Their Electrical Properties, *Solid State Ionics*, **157**, 147- 153.
- [13] Islam, M.S. and Winch L.J., Defect Chemistry and Oxygen Diffusion in the $\text{HgBa}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+\delta}$ Superconductor: A Computer Simulation Study, *Physical Review. B*, 1995, **52**, 10510-10515.
- [14] Islam, M.S., Lazure, S., Vannier, R.N., Nowogrocki, G., Mairesse, G. (1998): *Journal of Materials Chemistry*, **8(3)**, 655-660.
- [15] Pirovano, C., Islam, M.S., Vannier, R.N., Nowogrocki, G. and Mairesse G. (2001): Modelling the Crystal Structures of Aurivillius Phases, *Solid State Ionics*, **140**, 115-123.