Jurnal ENTROPi

Inovasi Penelitian, Pendidikan dan Pembelajaran Sains

Diterbitkan oleh :
Jurusan Pendidikan Kimia
Fakultas MIPA Universitas Negeri Gorontalo

VOLUME X | NOMOR 2 | HALAMAN 1081 - 1200 | AGUSTUS 2015 | ISSN 1907-1965

JE

ISSN 1907 -1965

Jurnal Entropi

Inovasi Penelitian Pendidikan dan Pembelajaran Sains

Volume 10, Nomor 2, Agustus 2015

Jurnal Entropi (JE) terbit 2 (dua) kali setahun pada bulan Februari dan Agustus, berisi tulisan, artikel, hasil pemikiran dan penelitian yang ditulis oleh para pakar, ilmuwan, praktisi dan pengkaji inovasi penelitian pendidikan dan pembelajaran sains.

Ketua Penyunting

Lukman A. R. Laliyo

Penyunting Pelaksana

Mardjan Paputungan

Mangara Sihaloho

Erni Mohamad

JulhimTangio

Suleman Duengo

Hendri Iyabu

Deasy Natalia Botutihe

Aprilyanto Suleman

Ahmad Kadir Kilo

PenyuntingAhli

Evie Hulukati

Weni J. A. Musa

Ishak Isa

Astin Lukum

Nurhayati Bialangi

Yuszda Salimi

Akram La Kilo

Netty Ino Ischak

Opir Rumape

Pelaksana Tata Usaha

Erni Isa

Fatmawati

Jurnal Entropi (JE) diterbitkan oleh Jurusan Pendidikan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (MIPA) Universitas Negeri Gorontalo (UNG). **Dekan**: Evie Hulukati; **Ketua Jurusan:** Dr. Akram La Kilo, M.Si. Terbit pertama kali pada tahun 2006 dan konsisten mempublikasikan karya ilmiah dosen dan praktisi di Gorontalo dan sekitarnya. Upaya memperbaiki kualitasisi, bahasa dan tampilan terus dilakukan; hingga memenuhi standar kelayakan jurnal terakreditasi.

Pertanggunganjawaban Isi Artikel

Naskah/artikel yang disumbangkan kepada JE harus memenuhi aturan dalam "Petunjuk bagi (Calon) Penulis Jurnal Entropi (JE) di sampul belakang, halaman bagian dalam. Isi artikel dan semua akibat yang ditimbulkan oleh artikel itu menjadi tanggungjawab mutlak penulisnya. JE juga melayani permintaan tukar menukar jurnal secara gratis sepanjang tiras masih tersedia.

Jurnal Entropi (JE) diterbitkan dengan tiras *(oplaag)* 350 (tiga ratus lima puluh) eksemplar.

JE

ISSN 1907 -1965

Jurnal Entropi

Inovasi Penelitian Pendidikan dan Pembelajaran Sains

Volume 10, Nomor 2, Agustus 2015

DAFTAR ISI

halaman

1 Keterlaksanaan Sintaks pada Implementasi Pembelajaran Kimia dengan Menghubungkan Representasi Kimia Makroskopik, Submikroskopik, dan Simbolik untuk Mereduksi Miskonsepsi Siswa (Penelitian Hibah Bersaing Tahap II) 1081 - 1087

Masrid Pikoli, Mangara Sihaloho
Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

2 Implementasi Perangkat Pembelajaran Sains dengan Menggunakan Model-Model Pembelajaran Berbasis Masalah pada Siswa SMP 1088 - 1094

Muhammad Yusuf, Sari Rahayu Rahman
Jurusan Fisika, Fakultas Matematika dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

3 Cara Berpikir Kreatif Siswa dengan Menggunakan Model Pembelajaran Inkuiri pada Mata Pelajaran IPA di Kelas V SD Laboratorium UNG 1095 - 1102

Gamar Abdullah
Jurusan Pendidikan Guru Sekolah Dasar FIP Universitas Negeri Gorontalo

4 Meningkatkan Hasil Belajar Peserta Didik Kelas XII IPA.3 SMA Negeri 2 Kota Gorontalo pada Konsep Reaksi Oksidasi-Reduksi dalam Sistem Elektrokimia melalui Pembelajaran Kooperatif Tipe STAD 1103 - 1113

Iskandar Hasan, Raflin Arief
Dinas Pendidikan, Kota Gorontalo, Provinsi Gorontalo

5 Upaya Meningkatkan Hasil Belajar Peserta Didik melalui Metode Pemberian Tugas pada Materi Tragedi Nasional pada Siswa Kelas IX_2 SMP Negeri 2 Limboto 1114 - 1126

Eva Moha
SMP Negeri 2 Limboto, Kabupaten Gorontalo, Provinsi Gorontalo

6 Profil Miskonsepsi Mahasiswa tentang Konsep Kepolaran Molekul dengan Menggunakan CRI (Certainty of Response Index) 1127 - 1133

Lilik Sugiyanti, Lukman AR Laliyo, Hendri Iyabu
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

7 Isolasi dan Identifikasi Senyawa Flavonoid dari Ekstrak Metanol Bunga Tanaman Sirsak 1134 - 1140

Rahman Adam, Nurhayati Bialangi, Netty Ino Ischak
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

8 Identifikasi Pemahaman Siswa pada Konsep Atom, Ion, dan Molekul Menggunakan Two-Tier Test Multiple Choice 1141 - 1147

Norma, Astin lukum, La Ode Aman
Jurusan Kimia Fakultas Matematika dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

9 Pengaruh Subtitusi Bi secara Parsial oleh Dopan (A = Ba, Ca, Sr dan Pb) dalam Lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$ pada Oksida Aurivillius $ABi_4Ti_4O_{15}$ 1148 - 1154

Sarsiyanti S. Sadapu, Weny J.A Musa, Akram La Kilo
Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan IPA Universitas Negeri Gorontalo

10 Penerapan Pendekatan Inquiri berbsis *Lesson Study* untuk Meningkatkan Hasil Belajar Siswa pada Materi Sistem Koloid Kelas XI IPA SMA Muhammadiyah Batudaa 1155 - 1160

Agustina Mooduto. Ishak Isa, Astin Lukum
Jurusan Kimia, Fakultas Matematika dan IPA Universitas Negeri Gorontalo

11 Identifikasi Kesulitan Belajar Siswa pada Materi Persamaan Reaksi Di Kelas X dan XI IPA MAN Batudaa 1161 - 1169

Fatmawati, Mardjan Paputungan, Rakhmawaty A. Asui
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

12 Pengaruh Model Demonstrasi Interaktif dengan Menggunakan Multimedia terhadap Hasil Belajar Siswa SMA Negeri 1 Kabila pada Materi Sistem Koloid 1170 - 1175

Husni, Netty Ino Ischak, Suleman Duengo
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

13 Identifikasi Pemahaman Konsep Perubahan Wujud Zat dengan Menggunakan Instrumen Tes Tiga Tingkat(*Three-Tier Test*) pada Siswa Kelas VII MTS Negeri Model Limboto 1176 - 1185

Sri Ayu Saputri Daud, Lukman A.R Laliyo, Julhim S. Tangio
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

14 Kajian Representasi Submikroskopik Siswa tentang Konsep Kelarutan Zat 1186 - 1194

Nursanti Abas, Weny J.A Musa, La Alio
Jurusan Kimia, Fakultas MIPA, Universitas Negeri Gorontalo

15 Uji Aktivitas Antifeedant dari Ekstrak Metanol Biji Mahoni terhadap *Epilachna Varivestis* Mulsant 1195 - 1200

Nur Fauzia A. Utina, Weny JA. Musa, Opir Rumape
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA, Universitas Negeri Gorontalo

Pengaruh Subtitusi Bi Secara Parsial oleh Dopan (A = Ba, Ca, Sr dan Pb) dalam Lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$ pada Oksida Aurivillius $ABi_4Ti_4O_{15}$

Sarsiyanti S. Sadapu, Weny J.A Musa, Akram La Kilo
Jurusan Kimia, Fakultas Matematikan dan IPA
Universitas Negeri Gorontalo

Abstrak
Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari kestabilan $ABi_4Ti_4O_{15}$yang didoping dengan Ca, Sr, Ba dan Pb melalui simulasi atomistik dengan menggunakan code GULP. Secara khusus, penelitian ini *bertujuan untuk (1) optimasi geometri* $ABi_4Ti_4O_{15}$*(A = Ca, Sr, Ba dan Pb) dan (2) menentukan energi* kisi dari struktur $ABi_4Ti_4O_{15}$yang teroptimasi. Energi kisi menunjukan semakin besar variasi konsentrasi dopan yang mensubtitusi Bi3 secara parsial maka semakin besar energi kisinya. Jumlah konsentrasi maksimum dari dopan yang mensubtitusi secara parsial Bi3 pada $ABi_4Ti_4O_{15}$adalah berturut-turut Ba 33%, Sr 33%, Ca 32 % dan Pb 21%. Hasil penelitian ini dapat dijadikan sebagai acuan untuk mensubtitusi $ABi_4Ti_4O_{15}$, khususnya yang didoping dopan Ba, Ca, Sr dan Pb pada lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$.

Kata Kunci : *Oksida Aurivillius, Simulasi Atomistik, Energi Kisi*

PENDAHULUAN

Seiring dengan berkembangnya kemajuan ilmu dan teknologi serta peningkatan kebutuhan hidup manusia, berbagai macam bahan teknologi terus dikembangkan. Salah satu jenis bahan yang terus dikembangkan adalah material feroelektrik. Material feroelektrik merupakan subkelompok dari bahan piroelektrik. Sedangkan bahan piroelektrik merupakan subkelompok dari bahan piezoelektrik, sehingga bahan feroelektrik memiliki sifat piroelektrik dan piezoelektrik. Feroelektrik adalah kemampuan untuk menahan sisa polarisasi elektrik setelah tegangan listrik yang diberikan dihilangkan (Umam, dkk., 2013).

Kegunaan dari senyawa yang bersifat feroelektrik adalah bahan superkonduktor, katalis dalam industri petrokimia, bahan penyimpan memori seperti FRAM, *Dynamic Random Acsess Memory* (DRAM), konduktor, material magnetik, katalis, *optical display*, dan kapasitor. Salah satu material yang dapat bersifat feroelektrik adalah oksida Aurivillius (Sabarani, 2006).

Aurivillius adalah suatu nama yang diberikan untuk kelompok senyawa oksida lapisan bismut yang juga dirujuk sebagai fasa Aurivillius. Secara umum, fasa rumus Aurivillius adalah $Bi_2A_{n-1}B_nO_{3n+1}$,(n = 1,2,3,...) dan dapat digambarkan sebagai kombinasi antara struktur $[Bi_2O_2]^{2+}$ dengan struktur yang berbasis perovskit $[A_{n-1}B_nO_{3n}+1]^{2-}$. Kation A merupakan ion-ion yang berkoordinasi dodekahedral, yang bermuatan +1, +2, atau +3, seperti alkali, alkali tanah, unsur tanah jarang atau campurannya. Kation B merupakan ion-ion dengan koordinasi oktahedral yang biasanya unsur-unsur transisi dengan ukuran

©2015 by Department of Chemistry,
Gorontalo State University - Indonesia

lebih kecil dari kation A. Sedangkan *n* adalah bilangan bulat yang menunjukkan jumlah oktahedral pada lapisan perovskit(Borg, dkk., 2002).

Oksida berlapis memiliki fleksibilitas struktur dan komposisi yang memungkinkan untuk dikontrol melalui doping dengan dopan baik ion A maupun ion B. Pasangan elektron bebas pada Bi(III) di lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$ berperan penting dalam mengontrol fluktuasi valensi dan penstabilan non-stoikiometri sehingga memunculkan berbagai sifat fisika dan kimia. Perbedaan sifat fisika dan sifat kimia ini berpengaruh terhadap kualitas material oksida Aurivillius tersebut dalam penggunaan untuk aplikasi selanjutnya (Ismunandar dan Kennedy, 1996; Ismunandar dkk., 2008).

Code simulasi digunakan meminimalkan kisi yang dilakukan secara berulang (iteratif). Selama proses ini, gaya-gaya pada setiap ion dihitung, dan kemudian ion digeser sedikit sebanding dengan gaya yang bekerja padanya. Proses ini terus berlanjut, sampai gaya-gaya yang bekerja pada semua ion adalah nol.

Sebagaimana disebutkan di atas bahwa simulasi dilakukan hingga semua gaya yang betindak pada ion-ion itu adalah nol, dengan rumus, yaitu :

$$F = \frac{\partial U_L}{\partial r} = 0$$

dimana : F = gaya pada system, U_L= energi kisi, r= sistem koordinat.

Hasil-hasil penelitian belum melaporkan secara lengkap distribusi presentase dopan seperti Ca, Sr, Ba, dan Pb dalam lapisan $Bi_2O_2^{2+}$. Oleh karena itu, penelitian ini melaporkan distribusi dopan-dopan tersebut yang disertai dengan konsentrasi maksimum dan energi kisinya. Dopan-dopan tersebut dapat mensubtitusi secara parsial Bi dalam lapisan $Bi_2O_2^{2+}$.

METODE PENELITIAN

Lokasi Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan di Laboratorium Kimia Komputasi, Jurusan Pendidikan Kimia Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Negeri Gorontalo (UNG).

Perangkat

Perangkat keras yang digunakan dalam simulasi ini adalah komputer dengan sistem operasi windows 7 dengan System 3,2 *Windows Experience Index*, Processor AMD C-60 APU with Radeon (tm) HD Graphics 1.00 GHz, *Installed memory* (RAM) 2,00 GB (1,73 GB usable), *system type 32-bit operating system, Pen and Touch No pen or Touch Input is available for this Display*. Sementara perangkat lunaknya adalah *General Utility Lattice Program* (GULP). Selain itu, perangkat lunak untuk menggambarkan struktur dan grafik masing-masing menggunakan VESTA dan Microsoft excel.

Data Input

Data input yang digunakan dalam simulasi ini adalah data difraksi sinar_X dan neutron dari oksida Aurivillius lapis empat, yaitu $ABi_4Ti_4O_{15}$ (A = Ca, Sr, dan Ba).

Metode Simulasi Atomistik

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode simulasi atomistik dengan menggunakan potensial Buckingham. Penggunaan metode simulasi ini didasarkan pada minimasi energi dari sistem yang diperoleh dari potensial antar atom atau dengan kata lain energi dianggap sebagai fungsi dari koordinat atom-atom. Model interaksi itu dimodelkan dengan model Born dengan energi sistem terdiri dari dua interaksi, yaitu interaksi Coulomb (*long-range*) dan interaksi *short-range*. Interaksi yang menggambarkan tolakan dan gaya van der waals antara awan muatan elektron. Bentuk persamaan yang digunakan pada interaksi *short-range* adalah potensial Buckingham. Persamaan potensial Buckingham dapat dilihat pada persamaan berikut.

$$V(r) = Ae^{-r/\rho} - \frac{C}{r^6}$$

dimana : V = Energi potensial Buckingham, C = Interaksi Dispersi, r = Jarak antar ion, A = matriks tetapan gaya, ρ = Kerapatan elektron.

Langkah-langkah Penelitian

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah simulasi atomistik dengan menggunakan potentsial Buckingham, dengan langkah-langkah kerja sebagai berikut:

a. Tahap Pembuatan Data Input

Data input yang akan dibuat akan lebih baik jika bagian-bagian dari strukturnya (parameter sel satuan) diketahui terlebih dahulu, seperti *space group* (grup ruang), *cell parameters* (parameter sel) yang diperoleh dari data difraksi sinar-X dan neutronnya.

b. Tahap Simulasi Komputasi

Pada proses pengolahan data menggunakan Softwere GULP yang pertama dilakukan adalah:

1. Klik Star pada laptop kemudian pilih All Program
2. Klik Accessories dan pilih Command Prompt
3. Setelah muncul tampilan Command Prompt data yang sebelumnya adalah data C diubah menjadi data D. Dengan mengetik D: pada Command Prompt kemudian enter.
4. Langkah selanjutnya untuk masuk ke folder master, ketik cd (tab) (spasi) dan tab lagi sampai didapatkan folder master, kemudian enter.
5. Untuk masuk ke Softwere Gulp, perlakuannya sama dengan yang diatas.
6. Untuk masuk kedalam folder exe, perlakuannya sama dengan yang diatas.
7. Setelah masuk kedalam folder exe untuk memperoleh data gin-nya dilakukan cara dengan mengklik >gulp<nama file yang tersimpan dalam exe.gin kemudian enter.
8. Setelah masuk kedalam folder exe untuk memperoleh data gout-nya dilakukan cara dengan mengklik >gulp<nama file yang tersimpan dalam exe.gin>nama file yang tersimpan dalam exe kemudian mengetik .gout kemudian enter.

HASIL PENELITIAN

Optimasi Geometri $ABi_4Ti_4O_{15}$

Senyawa Aurivillius $ABi_4Ti_4O_{15}$ (Ba, Ca, Sr dan Pb) telah disimulasi pada tekananan tetap dengan menggunakan *code* GULP. Simulasi ini adalah memastikan bahwa perbedaan hasil simulasi dengan data eksperimen harus dijaga agar tetap minimum selama proses*fitting*. Simulasi dilakukan dengan memasukkan data hasil percobaan difraksi sinar-X seperti parameter sel *a, b, c,* space group kemudian dalam data input itu akan dimasukkan potensial Buckingham, tetapan pegas atom-atom, muatan inti dan kulit dari atom-atom.

Pada data input ini, parameter sel yang digunakan adalah 5,4505, 5,437, 40,9841 A yang masing-masing nilai untuk *a, b* dan *c* dengan sudut masing-masing adalah 90, 90, dan 90 derajat. Parameter sel satuan dan data fractional diperoleh dari data difraksi sinar-X yang dilaporkan sebelumnya oleh : (Wolfe, dkk., 1971), (Thompson, dkk., 1991), (Nalini, dkk., 2003). PadaTabel 1dapat dilihat bahwa Pb memiliki tetapan pegas yang lebih besar dari Ca, Sr dan Ba. Ca dan Ba memiliki tetapan pegas yang sama, namun memiliki muatan kulit yang berbeda. Sr dan Ba memiliki muatan kulit yang sama yaitu 1,831 e, tetapi keduanya memiliki tetapan pegas yang berbeda. Perbedaan muatan kulit atau tetapan pegas menunjukkan bahwa kemudah anion-ion dopan dipolarisasi (polarisabilitas) jugaberbeda. Polarisasi terjadi karena adanya interaksi antara atom satu dengan atom lainnya. Perbedaan polarisabilitas teoritis dan hasil simulasi berbeda antara badan Sr, dimana hasil simulasi menunjukkan Sr lebih mudah dipolarisasi dibandingkan dengan Ba. Hal ini disebabkan oleh lemahnya ikatan antara inti atom dengan elekron-elektron sebagaimana ditunjukkan dengan tetapan pegas Sr yang kecil, 21 ($eVÅ^{-2}$).

Simulasi pada penelitian ini sangat ditentukan oleh potensial Buckingham dan muatan ion-ion (*shellmodel*) dari oksida Aurivillius $ABi_4Ti_4O_{15}$ (Ba, Ca, Sr dan Pb), sebagaimana ditunjukkan dalam Tabel 1.

Tabel 1 Potensial Buckingham (*short-range*) dan *shell model* ion-ion dari oksida Aurivillius $ABi_4Ti_4O_{15}$ (Ca, Sr, Ba dan Pb).

a)*Short-range*	*A*(eV)	*r*(Å)	*C*(eVÅ^{-6})
$Bi^{3+}...O^{2-}$	49.529,35	0,2223	0,0
$Ca^{2+}...O^{2-}$	1186,6	0,2970	0,0
$Sr^{2+}...O^{2-}$	1956,702	0,3252	0,0
$Ba^{2+}...O^{2-}$	4818,416	0,3067	0,0
$O^{2-}...O^{2-}$	576,940	0,33236	0,0
$Pb^{2+}...O^{2-}$	1640,34	0,3507	19,50

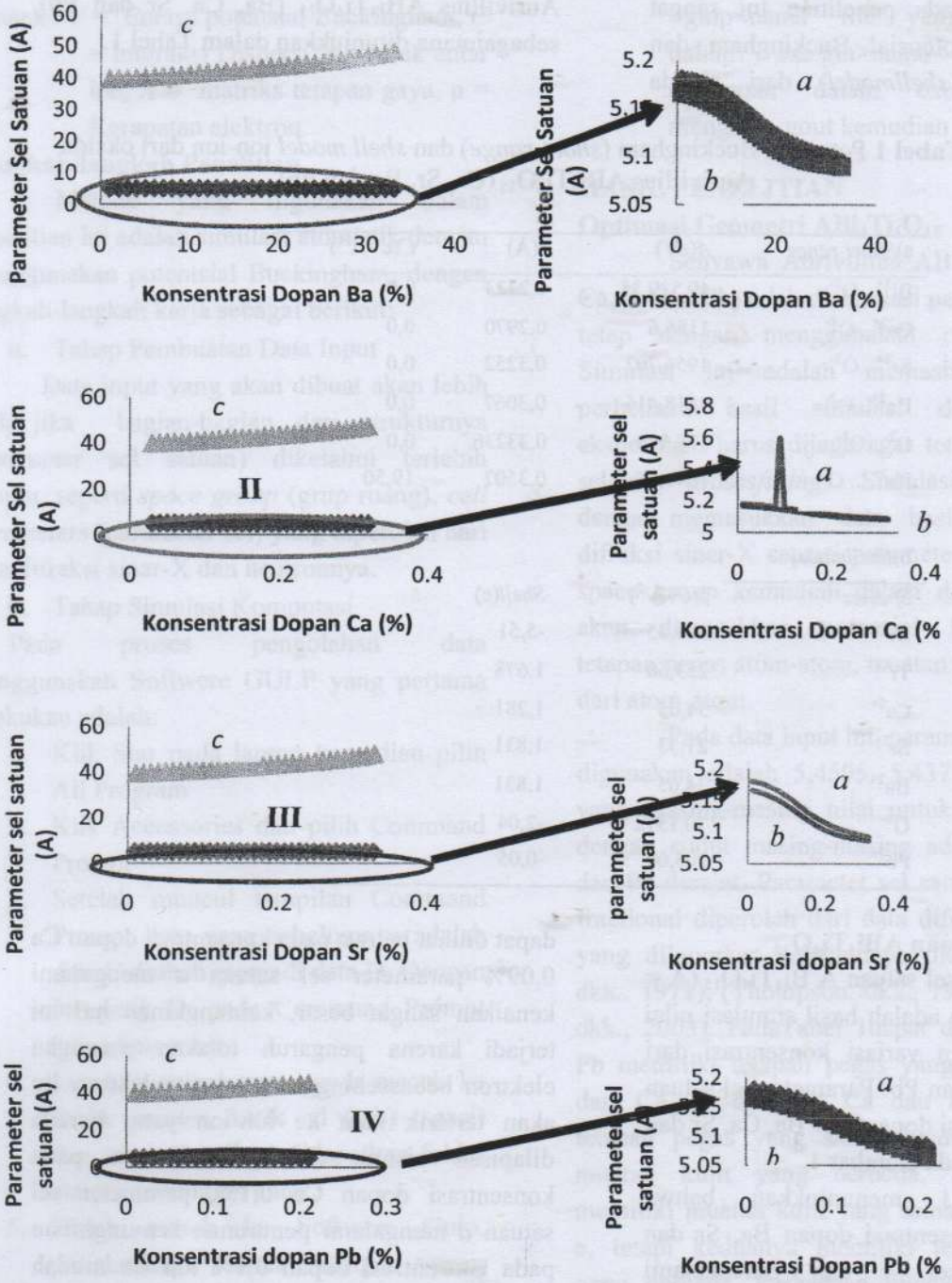
b)*Shellmodel*		
Species	*k*(eVÅ^{-2})	*Shell*(e)
Bi^{3+}	359,55	-5,51
Ti^{4+}	253,60	1,678
Ca^{2+}	34,05	1,281
Sr^{2+}	21,53	1,831
Ba^{2+}	34,05	1,831
O^{2-}	70,1512	-2,04
Pb^{2+}	205,00	-0,05

Parameter Sel Satuan $ABi_4Ti_4O_{15}$

Parameter sel satuan A $Bi_4Ti_4O_{15}$ (A = Ba, Ca, Sr dan Pb) adalah hasil simulasi nilai *a*, *b* dan *c* dengan variasi konsentrasi dari dopan Ba, Ca, Sr dan Pb. Parameter sel satuan terhadap konsentrasi dopan(A = Ba, Ca, Sr dan Pb) dapat dilihat pada Gambar 1.

Gambar 1 menunjukkan bahwa semakin besar konsentrasi dopan Ba, Sr dan Pb, parameter sel *a* dan *b*mengalami penurunan hal ini kemungkinan disebabkan oleh ion Ba, Sr dan Pb mudah dipolarisasi oleh anion. Sedangkan parameter sel *c* mengalami kenaikan, hal ini kemungkinan disebabkan oleh pengaruh tolakan pasangan elektron bebas Bi yang berada di lapisan bismut $(Bi_2O_2)^{2+}$.

Grafik parameter sel satuan konsentrasi dopan Ca dalam $CaBi_{4-x}Ti_4O_{15}$ dapat dilihat bahwa pada konsentrasi dopan Ca 0,09% parameter sel satuan *a* mengalami kenaikan sangat besar, kemungkinan hal ini terjadi karena pengaruh tolakan pasangan elektron bebassehingga membuat elektron itu akan tertarik kuat ke ion-ion yang berada dilapisan bismut $(Bi_2O_2)^{2+}$. Namun pada konsentrasi dopan Ca 0,1%, parameter sel satuan *a* mengalami penurunan kemungkinan pada konsentrasi dopan 0,1% ion Ca mudah dipolarisasi oleh anion. Sementara untuk parameter sel satuan konsentrasi dopan Ca nilai *b* tetap menurun seiring dengan bertambahnya konsentrasi dopan Ca. Sedangkan parameter sel satuan konsentrasi dopan Ca nilai *c* mengalami kenaikan hal ini juga disebabkan oleh pengaruh tolakan pasangan elektron bebas Bi yang berada di lapisan bismut $(Bi_2O_2$.

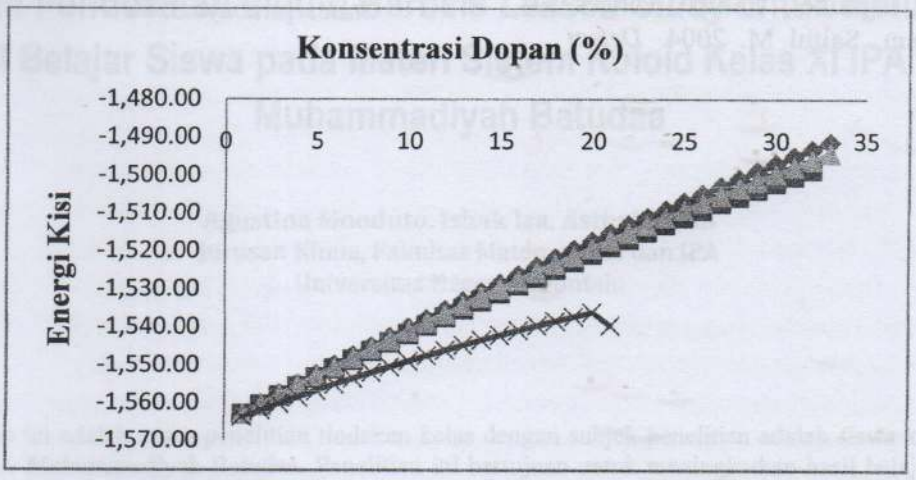


Gambar 1 Parameter Sel Satuan terhadap Konsentrasi Dopan : (I) Parameter sel satuan terhadap konsentrasi dopan Ba dalam $Ba_xBi_{4-x}Ti_4O_{15}$, (II) parameter sel satuan konsentrasi dopan Ca dalam $CaBi_{4-x}Ti_4O_{15}$, (III) parameter sel satuan konsentrasi dopan Sr d alam $SrBi_{4-x}Ti_4O_{15}$, (IV) parameter sel satuan konsentrasi dopan Pb dalam $PbBi_{4-x}Ti_4O_{15}$.

ENERGI KISI AURIVILLIUS TERDOPING

Variasi konsentrasi dopan dalam penelitian ini bertujuan untuk mencari batas konsentrasi dopan yang dapat mensubtitusi Bi dalam lapisan $Bi_2O_2^{2+}$. Setiap struktur $ABi_4Ti_4O_{15}$ pada konsentrasi tertentu dan dopan disimulasi secara atomistik dengan menggunakan *code* GULP. Hasil simulasi menunjukkan bahwa $Ba_xBi_{4-x}Ti_4O_{15}$energi kisi paling besar yaitu-1491,41803200 eV final Gnormalnya 0,00799319, $Ca_xBi_{4-x}Ti_4O_{15}$

energi kisi paling besar yaitu -1498,56044341 eV Final Gnormnya 0,00030528, $Sr_xBi_{4-x}Ti_4O_{15}$ energikisi paling besar yaitu -1494,33811909 eV dan Final Gnormnya 0,00166516, $Pb_xBi_{4-x}Ti_4O_{15}$ energi kisi paling besar yaitu -1536,10182721eV dan Final Gnormnya 0,00091348. Energi kisi terhadap berbagai konsentrasi dopan Ba, Ca, Sr dan Pb dapat dilihat pada Gambar 2.



Gambar 2 Variasi Konsentrasi dopan dan energi kisi

Berdasarkan grafik di atasdapat disimpulkan bahwa semakin besar variasi konsentrasi dopan yang mensubtitusi Bi3 secara parsial maka semakin besar energi kisinya. Jumlah konsentrasi maksimum dari dopan yang mensubtitusi secara parsial Bi3 pada $ABi_4Ti_4O_{15}$adalah berturut-turut Ba 33%, Sr 33%, Ca 32 % dan Pb 21%.

KESIMPULAN

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan bahwa optimasi geometri $ABi_4Ti_4O_{15}$(A = Ca, Sr, Ba dan Pb) dengan menggunakan simulasi atomistik menunjukkan perbedaan tetapan pegas dan muatan kulit dari dopan Ca, Sr, Ba dan Pb. Pbmemiliki tetapan pegas yang lebih besar dari Ca, Sr dan Ba. Ca dan Ba memiliki tetapan pegas yang sama, namun memiliki muatan kulit yang berbeda. Sr dan Ba memiliki muatan kulit yang sama yaitu 1,831 e, tetapi keduanya memiliki tetapan pegas yang berbeda.

Energi kisi menunjukan semakin besar variasi konsentrasi dopan yang mensubtitusi Bi3 secara parsial maka semakin besar energi kisinya. Jumlah konsentrasi maksimum dari dopan yang mensubtitusi secara parsial Bi3 pada $ABi_4Ti_4O_{15}$adalah berturut-turut Ba 33%, Sr 33%, Ca 32 % dan Pb 21%.

SARAN

Dapat dilakukan penelitian lebih lanjut untuk melihat pengaruh substitusi Bi dalam Lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$ dan hasil simulasidengan menggunakan metode reaksi kimia padat.

DAFTAR PUSTAKA

Brog S., Svensson G dan Bovin J. 2002. Journal of Solid State Chemistry. *"Structure Study of and (m= 2-4) by Neutron Powder Diffraction and Electron Microscopy"*. Sweden : Department of Inorganic Chemistry, Chalmers University of Technology.

Ismunandar., Kennedy B.J., Gunawan dan Marsongkohadi. 1996. Journal of Solid State Chemistry. *"Strukture of $ABi_2Nb_2O_9$ (A = Sr, Ba) Refenement of Powder Neutron Diffraction Data "*.

Ismunandar, Kamiyama,T.,Hoshikawa, A., Zhou,Q., Kennedy,B.J., Kubota, Y., Kato, K., 2004. *Structural studies of five layer Aurivillius oxide: $A_2Bi_4Ti_5O_{18}$ (A=Ca, Sr, Ba and Pb).*

Snedden, Alan., Lightfoot, Philip., Dinges, Tim., Islam, Saiful M. 2004. *Defect and dopant properties of the Aurivillius phase $Bi_4Ti_3O_{12}$.*

Umam, Jahidul., Rosyidah Afifah. 2013. *Sintesis dan Karakterisasi AurivilliusCa$Bi_2Nb_2O_9$ dan $LaBi_2TiNbO_9$ dengan Metode Solid State*. Surabaya : ITS