

RINGKASAN

Simulasi komputasi konduktivitas ion oksida BIMEVOX yang mempunyai struktur berlapis dan simetri yang tinggi merupakan studi yang baru dan memberi tantangan tersendiri. Oksida tersebut berpotensi memainkan peranan penting dalam sel bahan bakar padatan, khususnya sebagai elektrolit, karena mempunyai konduktivitas yang tinggi. Namun pada suhu rendah γ - $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$ menjadi tidak stabil, akan berubah menjadi fasa β kemudian menjadi fasa α . Untuk menstabilkan pada suhu rendah dilakukan substitusi parsial Me menggantikan V pada oksida γ - $\text{Bi}_4\text{V}_2\text{O}_{11}$, menghasilkan $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{Me}_x\text{O}_{11}$ yang sering disebut BIMEVOX. Penelitian yang telah berhasil disimulasi adalah BIMEVOX dengan dopan (ME) Cu, Ga, dan Ta, yang masing-masing bervalensi 2, 3, dan 5. Hasil penelitian tersebut mempunyai kesesuaian yang baik dengan hasil eksperimen, bahkan material yang didoping dengan Ga (yang belum disintesis) telah dapat diprediksi konsentrasi maksimal yang memiliki konduktivitas tertinggi.

Dalam penelitian ini, seharusnya BIMEVOX yang disimulasi adalah BIMEVOX yang ion logamnya (ME) bervalensi 4, yaitu $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{Ti}_x\text{O}_{11}$. Metode studi konduktivitas yang rencana dilakukan adalah metode simulasi komputasi berbasis analisis defek dan dinamika molekul. Metode itu diharapkan dapat menganalisis defek dan sifat transpor material oksida sehingga dapat diprediksi konsentrasi maksimum Ti dari senyawa $\text{Bi}_4\text{V}_{2-x}\text{Ti}_x\text{O}_{11}$ yang memiliki konduktivitas ion tertinggi. Namun, keterbatasan dana mengakibatkan simulasi hanya dilakukan pada α - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$ dan β - $\text{Bi}_2\text{VO}_{5,5}$.

Penelitian ini bertujuan untuk menentukan energi kisi 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. Hasil penelitian ini akan dipresentasikan pada Seminar Nasional di Universitas Tadulako, dan dipublikasikan di Prosiding/Jurnal Nasional Terakreditasi.