

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 $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ (PBN) yang memiliki sifat feroelektrik. Ketika PBN didoping dengan La^{3+} untuk Bi^{3+} dan Mn^{3+} untuk Nb^{5+} 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 Pb^{2+} 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 ($x = 0,0, 0,1, \text{ dan } 0,3$). Oleh karena itu, penelitian ini mencari solusi untuk menjelaskan kedua hal tersebut dengan cara simulasi atomistik terhadap $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ ($x = 0,0, 0,1, \text{ dan } 0,3$) dengan menggunakan *code General Utility Lattice Program* (GULP). Hasil simulasi atomistik sesuai dengan hasil eksperimen berdasarkan parameter kisi senyawa induk, $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$. Bi^{3+} yang sebagian mensubstitusi Pb^{2+} pada lapisan perovskit menyebabkan struktur $\text{Pb}_{1-2x}\text{Bi}_{1.5+2x}\text{La}_{0.5}\text{Nb}_{2-x}\text{Mn}_x\text{O}_9$ ($x = 0, 0.1, \text{ dan } 0.3$) 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 dodecahedral dari lapisan perovskit. Peningkatan konsentrasi dopan menyebabkan fasa $\text{PbBi}_2\text{Nb}_2\text{O}_9$ yang didoping Mn^{3+} dan La^{3+} 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>.