

PEMODELAN KONDUKTIVITAS ION DALAM STRUKTUR γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$
(Modeling Ionic Conductivity in γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ Structure)

A. La Kilo*, D. Mazza**

*Jurusan Kimia, FMIPA, Universitas Negeri Gorontalo

e-mail: akram@ung.ac.id

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

Diterima: 3 Oktober 2011

Disetujui: 28 Oktober 2011

Abstrak

Fasa γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ merupakan material konduktor superionik yang dapat diaplikasikan sebagai baterai yang dapat diisi ulang (*rechargeable*). Ion Li^+ dalam struktur γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ dapat mengalami migrasi dari posisi terisi ke posisi kosong. Penelitian ini telah memodelkan migrasi ion Li^+ dalam struktur γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ dengan menggunakan metode *bond valence sum* (BVS). Metode ini dapat memprediksi bilangan oksidasi suatu atom berdasarkan jarak dengan atom-atom tetangga. *Source code* berbasis BVS yang digunakan adalah JUMPITER yang mensimulasi efek gaya listrik eksternal yang bertindak pada ion litium sehingga nilai BVS litium dapat dipetakan terhadap jarak. Hasil simulasi menunjukkan bahwa konduksi ion Li^+ dapat terjadi pada arah [010], [101], dan [120]. Namun, lintasan konduksi ion Li^+ lebih mudah terjadi pada arah [120] atau bidang *ab* dengan nilai maksimum BVS adalah 0,982.

Katakunci: konduktor superion litium; *bond valence sum*; konduksi ion Li^+

Abstract

*γ -phase of $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ is a lithium super ionic conductor which can be applied as a rechargeable lithium battery. Lithium ions of γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ can migrate from occupied site to vacant site. In this research, simulation of Li^+ ions migration in the structure of γ - $\text{Li}_2\text{Sc}_3(\text{PO}_4)_3$ carried out using bond valence sum (BVS) to predict the oxidation state of Li^+ ion based on the distance of the ion to neighboring atoms. BVS-based code used JUMPITER to simulate the effect of external electrical force acting on the lithium ions to produce the lithium BVS value which can be mapped to the distance. The simulation results shows that Li^+ ion conduction can be occurred on [010], [101], and [120] directions. However, the Li^+ ion conduction pathway occur more easily in the direction of [120] or *ab* plane with the BVS maximum value is 0.982.*

Keywords: lithium super ionic conductor; bond valence; ion conduction

PENDAHULUAN

Penggunaan minyak bumi secara terus menerus sebagai bahan bakar disamping akan menurunkan cadangan sumber energi, juga menghasilkan emisi gas CO_2 sebagai pemicu perubahan iklim secara global. Salah satu alternatif sumber energi yang potensial sebagai pengganti minyak bumi adalah baterai. Baterai merupakan salah satu sumber energi yang ramah lingkungan, dan dapat diaplikasikan dalam berbagai bidang kehidupan mulai dari mobil sampai *microchip* (Tarascon dan Armand, 2008).

Baterai yang dikembangkan pada abad ini adalah baterai yang dapat diisi ulang (*rechargeable lithium battery*) yang berbasis litium karena ion Li^+ paling elektropositif (-3,40 V) dan paling ringan sehingga dapat memfasilitasi desain sistem penyimpanan dengan kerapatan energi lebih tinggi (Tarascon dan Armand, 2001). Baterai litium yang dapat diisi ulang merupakan baterai masa depan yang menjanjikan karena memiliki tegangan sel lebih tinggi, kerapatan energi lebih tinggi, dan retensi muatan lebih lama. Penggunaan konduktor ion litium