

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

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).

Penggunaan material feroelektrik sebagai memori dewasa ini sangat menguntungkan bila dibandingkan dengan sistem magnetik. Sistem magnetik hanya mampu menyimpan  $10^5$  bit/cm<sup>2</sup>, sedangkan memori yang terbuat dari material feroelektrik mampu menyimpan hingga  $10^8$  bit/cm<sup>2</sup>. Keuntungan lain adalah sebagai memori permanen yang mampu menekan kehilangan informasi selama proses berulang. Kegunaan dari senyawa yang bersifat feroelektrik adalah bahan superkonduktor, katalis dalam industri petrokimia, bahan penyimpanan memori seperti FRAM, *Dynamic Random Access 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. Aurivillius merupakan salah satu jenis oksida logam yang menarik untuk dipelajari karena banyak potensi aplikasi yang dimiliki, seperti sifat feroelektrik. Sifat feroelektrik dalam fasa Aurivillius disebabkan oleh strukturnya yang terdistorsi.

Secara umum, fasa rumus Aurivillius adalah  $\text{Bi}_2\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}$ , ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ) dan dapat digambarkan sebagai kombinasi antara struktur  $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$  dengan struktur yang berbasis perovskit  $[\text{A}_{n-1}\text{B}_n\text{O}_{3n+1}]^{2-}$ . 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 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  $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$  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).

Ada beberapa hasil pengamatan terbaru yang dilaporkan tentang oksida Aurivillius  $\text{ABi}_2\text{B}_2\text{O}_9$  dimana  $n = 2$ , yaitu: (a) terdapat banyak ketidakaturan yang terjadi antara tipe-A perovskit dan lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ , dan (b) berkurangnya ukuran kation A dapat menginduksi kemiringan  $\text{BO}_6$  oktahedral. Dalam oksida  $n = 2$ , gangguan dari kation ke dalam  $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$  lapisan memainkan peran penting dalam mengoptimalkan jarak antara atom dan lapisan perovskit. Dibandingkan dengan Aurivillius lapis 2, Aurivillius lapis 4, seperti  $\text{BaBi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  digambarkan menjadi tetragonal pada suhu kamar, sedangkan oksida yang lainnya  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}$ ) digambarkan sebagai ortorombik. Menurut Kojima bahwa ketidakaturan kation dalam  $\text{BaBi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  besar dibandingkan  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $A = \text{Ca}, \text{Sr}$  atau  $\text{Pb}$ ). Hal ini menunjukkan bahwa beberapa ion Ba secara acak menempati posisi Bi yang mirip dari lapisan perovskit. Tellier et al. menyimpulkan bahwa Ba secara parsial mengalami disorder dalam lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2$ , Ca dari  $\text{CaBi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  tidak dapat terdistribusi dalam lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$  (Ismunandar dkk., 2008).

Hasil-hasil penelitian di atas belum melaporkan secara lengkap distribusi presentase dopan seperti Ca, Sr, Ba, dan Pb dalam lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ . Oleh karena itu, penelitian ini melaporkan distribusi dopan-dopan tersebut yang disertai dengan konsentrasi maksimum dan energi kisinya. Dopan-dopan tersebut dapat mensubstitusi secara parsial Bi dalam lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ .

## **1.2 Rumusan Masalah**

Rumusan masalah penelitian ini adalah Ca, Sr, Ba dan Pb belum ditemukan konsentrasi maksimal yang dapat mensubstitusi Bi dalam lapisan  $\text{Bi}_2\text{O}_2^{2+}$ . Bagaimana kestabilan  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  yang didoping dengan Ca, Sr, Ba dan Pb?

## **1.3 Tujuan Penelitian**

Tujuan penelitian ini adalah mempelajari kestabilan  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  yang didoping dengan Ca, Sr, Ba dan Pb melalui simulasi atomistik dengan menggunakan code GULP. Secara khusus, penelitian ini bertujuan untuk (1) optimasi geometri  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  ( $A = \text{Ca, Sr, Ba dan Pb}$ ) dan (2) menentukan energi kisi dari struktur  $\text{ABi}_4\text{Ti}_4\text{O}_{15}$  yang teroptimasi.

## **1.4 Manfaat Penelitian**

Manfaat penelitian ini adalah dapat memberikan informasi kepada peneliti dan mahasiswa, khususnya mahasiswa kimia tentang senyawa Aurivillius yang dilakukan dengan metode simulasi atomistik.