

# BAB I

## PENDAHULUAN

### 1.1 Latar Belakang

Oksida Aurivillius mempunyai potensi sebagai kapasitor karena memiliki sifat feroelektrik. Sifat feroelektrik adalah kemampuan untuk menahan sisa polarisasi elektrik setelah tegangan listrik yang diberikan hilang. Kapasitor dapat dibuat dari material yang bersifat feroelektrik, kapasitor ini juga dapat dirangkai dengan suatu transistor untuk membentuk komponen FeRAM (*Ferroelectric Random Access Memory*) yang digunakan sebagai memori komputer (Mikrianto dkk., 2007).

Oksida Aurivillius merupakan senyawa oksida dengan struktur berlapis yang tersusun secara teratur dan silih berganti antara lapisan perovskit  $[A_{n-1}B_nO_{3n+1}]^{2-}$  dan lapisan  $[Bi_2O_2]^{2+}$ . 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  $Bi_2O_2$  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). Afifah dan Rosyidah melaporkan bahwa oksida Aurivillius lapis dua  $CaBi_2Ta_2O_9$  dan  $BaBi_2NbTaO_9$  yang mengalami perubahan substituen pada kation A (Ca, Ba) memberikan pengaruh yang berarti dalam pembentukan struktur Aurivillius sedangkan pada kation B ( $Ta_2$ , NbTa) kurang mempengaruhi struktur tapi mempengaruhi intensitas dan suhu sintesis.

Metode simulasi atomistik cukup kuat untuk mempelajari termodinamika dan pemodelan multiskala. Simulasi tingkat atom melibatkan pasangan potensial

dengan menggunakan model kaku ion atau model kulit yang telah banyak berhasil menggambarkan sifat defek sistem banyak-ion. Model kaku ion membutuhkan setengah parameter dibandingkan dengan model kulit. Model kaku ion ini jauh lebih cepat dan efektif untuk simulasi multiskala. Di sisi lain, kebutuhan parameter yang sedikit mendapatkan tantangan untuk mendapatkan model yang valid untuk interaksi atomik, terutama untuk sistem yang kompleks. Oleh karena itu, simulasi atomistik sebagian besar menggunakan kerangka kerja model *shell* (Lei, Chen, Lee. 2007). Penelitian ini merupakan studi atomistik struktur kisi dari oksida Aurivillius lapis empat  $ABi_4Ti_4O_{15}$  dimana A adalah Ca, Sr, dan Ba.

### **1.2 Rumusan Masalah**

Rumusan masalah penelitian ini adalah bagaimana kestabilan oksida Aurivillius lapis empat  $ABi_4Ti_4O_{15}$  ( $A = Ca, Sr, dan Ba$ ) melalui simulasi atomistik.

### **1.3 Tujuan Penelitian**

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari kestabilan oksida Aurivillius lapis empat  $ABi_4Ti_4O_{15}$  ( $A = Ca, Sr, dan Ba$ ) melalui simulasi atomistik.

### **1.4 Manfaat Penelitian**

Manfaat dari penelitian ini adalah (1) dapat memperdalam pengetahuan penulis tentang oksida logam, khususnya oksida Aurivillius, dan (2) dapat memperkenalkan penelitian komputasi atomistik dengan menggunakan code GULP (*General Utility Lattice Program*).