

Pengaruh 0,5 mol berat Si terhadap struktur kristal, kerapatan elektron dan konstanta dielektrik barium titanat

Sulhajji Jompa, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=75558&lokasi=lokal>

Abstrak

Penambahan Si yang memiliki sifat glass former pada barium titanat, diharapkan memungkinkan pembuatan bahan amorf berbasis barium titanat sehingga terbentuk bahan murah dengan sifat optika non linear sebagai syarat awal terjadinya efek fotorefraktif. Telah dilakukan analisis tentang pengaruh penambahan 0,5 mol berat Si terhadap struktur kristal, kerapatan elektron dan konstanta dielektrik barium titanat yang disintesis dengan teknik metalurgi serbuk dan perlakuan panas maksimum 950 °C, dari dua kelompok bahan yang berbeda, sampel terbaik didapat dari sintesis 1:1:1 mol berat bahan anal BaTiO₃, SiO₂ dan BaCO₃ yang merupakan reagen dari E-Merck. Difraktogram sinar-X diperoleh dengan $k(\text{Co K}\alpha) = 1,7889 \text{ \AA}$, penambahan secara kontinu pada temperatur kamar dan dianalisis menggunakan paket program kristalografi GSAS dari Amerika Serikat.

Analisis struktur memperlihatkan bahwa bahan terdiri dari 4 fasa ; BaTi_{0,5}Si_{0,5}O₃ sebagai fasa utama dengan grup ruang tetragonal P4mm (40,87 %). dan tiga fasa pengotor adalah O₂Si pada grup ruang tetragonal P42212 (47,29 %). Ba₂Si dan BaSi₂ masing-masing dengan grup ruang ortorombik Pnma (masing-masing 7,35 % dan 4,49 %). Analisis struktur lebih lanjut terhadap fasa utama memberikan informasi $a = 3,991(1) \text{ \AA}$, $c = 4,014(1) \text{ \AA}$, $V = 63,95(5) \text{ \AA}^3$, $2\theta = 4,639$, $R_p = 0,293$, $R_{wp} = 0,399$.

Analisis kerapatan elektron menunjukkan bahwa bila dibandingkan dengan barium titanat murni yang mempunyai kerapatan elektron berdasarkan observasi dan hasil perhitungan masing-masing adalah $p_{\text{max}} = 115,129 \text{ e \AA}^{-3}$ dan $112,467 \text{ e \AA}^{-3}$ pada BaTi_{0,5}Si_{0,5}O₃ terjadi penambahan kerapatan elektron yang masing-masing adalah $p_{\text{max}} = 148,9 \text{ e \AA}^{-3}$ dan $143,8 \text{ e \AA}^{-3}$.

Hasil pengukuran konstanta dielektrik menunjukkan bahwa terjadi peningkatan konstanta dielektrik pada temperatur kamar sampai 70 °C yaitu pada barium titanat murni konstanta dielektrik ϵ_r adalah 597,9 sampai 811,5, dan pada Ba(Ti-Si)_{0,5}O₃ konstanta dielektrik ϵ_r adalah 1562,4 sampai 1712,9.

Barium titanate doped with Si, which is one of a glass formers, is expected to enable barium titanate based amorphous material synthesis. This material might be further developed in order to have an optical non-linear material, which is a basic characteristic of photo refractive effect. Effect of 0,5 molar weight Si on crystallographic structure, electron density and dielectric constant of barium titanate samples have been analyzed. The samples were synthesized using powder metallurgy method with the constraint that the maximum heat treatment is of 950 °C. The best samples in this study were synthesized with stoichiometric amounts BaTiO₃, SiO₂ and BaCO₃ that the reagents from E-Merck. The X-ray diffractograms, which were obtained with continuous scans and $\lambda(\text{Co K}\alpha) = 1,7889 \text{ \AA}$ at room temperature, were refined using the crystallographic software package GSAS. Structural analysis shows that the crystal are BaTi_{0,5}Si_{0,5}O₃ as the main phase with the space group tetragonal P4mm (40,87 %). O₂Si with the space group tetragonal P42212 (47,29 %). Ba₂Si and BaSi₂ with the space orthorhombic Pnma (7,35 % and 4,49 %) as the impurity phase respectively.

Structural analysis from the main phase show that the lattice parameters $a = 3,991(1) \text{ \AA}$, $c = 4,014(1) \text{ \AA}$, the

crystal volume $V = 63,95(5) \text{ \AA}^3$, the goodness of fit χ^2 is of 4,639, and the residual parameters R_p and R_{wp} are of 29,3 % and 39,9 % respectively.

Studies on electron density shows that, as compared to that of pure BaTiO_3 with $\rho_{\text{max.}} 115,129 \text{ e \AA}^{-3}$ and $112,467 \text{ e \AA}^{-3}$ for the observed and the calculated value respectively, there is an increasing electron density at $\text{BaTi}_{0,5}\text{Si}_{0,5}\text{O}_3$ with $\rho_{\text{max.}} 148,9 \text{ e \AA}^{-3}$ and $143,8 \text{ e \AA}^{-3}$ for the observed and the calculated value respectively.

The dielectric constraints measurements at room temperature to 70°C show that, as compared to that of pure BaTiO_3 with dielectric constant ϵ_r is of 597,9 to 811,5, there is an increasing of dielectric constant at $\text{Ba}(\text{Ti-Si})\text{O}_3$ with ϵ_r is of 1562,4 to 1712,9.