

## Pengaruh Pb terhadap struktur kristal dan kerapatan elektron keramik $Ba_{1-x}Pb_xTiO_3$ dengan $X$ (Nominal) = 0,5

Nofrijon Bin Imam Sofyan, supervisor

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=75640&lokasi=lokal>

---

### Abstrak

#### <b>ABSTRAK</b>

Telah dipelajari pengaruh Pb terhadap struktur kristal dan kerapatan elektron keramik  $Ba_{1-x}Pb_xTiO_3$  dengan  $x$  (nominal) = 0,5. Sampel dalam percobaan ini didapat melalui sintesis metalurgi serbuk dari bahan asal  $BaCO_3$ ,  $PbCO_3$  dan  $TiO_2$ , yang merupakan reagen dengan kemurnian lebih dari 99% yang tersedia secara komersial dari E-Merck. Difraktogram sinar-X yang diperoleh pada suhu kamar dianalisis menggunakan paket program kristallografi GSAS. Analisis struktur memperlihatkan bahwa kristalnya adalah  $Ba_{0,7}Pb_{0,3}TiO_3$  dengan tipe struktur perovskite  $BaTiO_3$ , grup ruang tetragonal  $P4mm$ ,  $a = 3,943(1)$  Å,  $c = 4,055(1)$  Å,  $V = 63.035(63)$  Å<sup>3</sup>,  $\chi^2 = 2,115$ ,  $R_p = 18,630$  dan  $R_{wp} = 23,640$  dengan jumlah variabel 19. Hal ini memberikan arti bahwa penambahan Pb terhadap keramik  $BaTiO_3$  tidak merubah struktur nonsentrosimetrik bahan, akan tetapi hanya sedikit berpengaruh terhadap kontraksi sumbu  $a$  dan  $b$  dan pemanjangan terhadap sumbu  $c$ . Analisis kerapatan elektron dalam bahan memperlihatkan bahwa ada konsistensi pengukuran kerapatan elektron dengan parameter struktur kalkulasi dengan  $\rho_{max} = 7.965$  e Å<sup>-3</sup> dan  $\rho_{min} = 2.555$  e Å<sup>-3</sup>.

Hasil akhir memperlihatkan bahwa, bila dibandingkan dengan barium titanat murni yang dalam percobaan ini mempunyai kerapatan elektron  $\rho_{max} = 115,129$  e Å<sup>-3</sup> dan  $112,467$  e Å<sup>-3</sup> masing-masing untuk nilai observasi dan perhitungan, terjadi penambahan kerapatan elektron pada posisi ion substitusi dengan  $\rho_{max} = 180,069$  e Å<sup>-3</sup> dan  $172,105$  e Å<sup>-3</sup> masing-masing untuk nilai observasi dan nilai perhitungan. Selanjutnya, pengukuran diferensial termal dari bahan  $Ba_{0,7}Pb_{0,3}TiO_3$  memperlihatkan bahwa kemungkinan titik lelehnya lebih rendah dari  $BaTiO_3$ , sedangkan hasil pengukuran konstanta dielektrik memperlihatkan bahwa temperatur Curie dan konstanta dielektrik pada temperatur tersebut masing-masing adalah 210 °C dan 5440.

#### <i><b>ABSTRACT</b></i>

The effect of Pb on crystallographic structure and electron density of  $Ba_{1-x}Pb_xTiO_3$  ceramic, where  $x$  (nominal) = 0.5, has been investigated. The samples in this study were synthesized using powder metallurgy from  $BaCO_3$ ,  $PbCO_3$  and  $TiO_2$ , which were reagents with purity better than 99% available commercially from E-Merck. The X-ray diffractograms, which were obtained at room temperature, were refined using the crystallographic software package GSAS. Structural analysis shows that the crystal is  $Ba_{0.7}Pb_{0.3}TiO_3$  with the perovskite-type  $BaTiO_3$  structure, the space group tetragonal  $P4mm$ ,  $a = 3.943(1)$  Å,  $c = 4.055(1)$  Å,  $V = 63.035(63)$  Å<sup>3</sup> with 19 refined variables, the goodness of fit  $\chi^2$  is of 2.115 and the residual parameters  $R_p$  and  $R_{wp}$  are 18.630% and 23.640% respectively.

These results imply that Pb has no effect on the noncentrosymmetric structural change of barium titanate except to contract  $a$  and  $b$  axis and to extend  $c$  axis. Studies on electron density show that the electron density measurements are consistent with the calculated structural parameters with  $\rho_{max} = 7.965$  e

A-3 and min.  $\rho = -2.555 \text{ e A}^{-3}$ . Final results show that, as compared to that of pure BaTiO<sub>3</sub>, which in this study has the value of max.  $\rho$  115,129 e A<sup>3</sup> and 112,467 e A<sup>-3</sup> for the observed and the calculated value respectively, there is an increasing of electron density at the substitute ion positions with max.  $\rho$  180.069 e A<sup>-3</sup> and 172,105 e A<sup>-3</sup> for the observed and the calculated value respectively. Furthermore, differential thermal analyzer measurements on Ba<sub>0.7</sub>Pb<sub>0.3</sub>TiO<sub>3</sub> show that its melting point might be lower than that of BaTiO<sub>3</sub>, while dielectric constants measurement shows that the Curie temperature and corresponding dielectric constant are 210 °C and 5440 respectively.