

PERHITUNGAN KURVA HISTERESIS INTRINSIK MATERIAL ZINC OXIDE (ZnO)

Septian Rahmat Adnan^{1,2} dan Bambang Soegijono²

¹Teknik Industri, Fakultas Teknik, Universitas Esa Unggul

²Departemen Fisika, FMIPA, Universitas Indonesia

e-mail : septian.rahmat@esaunggul.ac.id

ABSTRAK

Energi bebas Gibbs dan kurva polarisasi spontan dari Zinc Oxide (ZnO) dihitung menggunakan Teori Landau-Devonshire. Program komputasi untuk menghitung Energi bebas Gibbs dan kurva polarisasi spontan dibuat pada Delphi 6. Dari hasil perhitungan menunjukkan bahwa energi bebas Gibbs terendah terdapat pada ZnO doping Li 1% yang menunjukkan struktur kristal paling stabil.

Kata kunci: Landau-Devonshire, ZnO, Ferroelektrik

1. PENDAHULUAN

Material Zinc Oxide (ZnO) telah banyak diteliti karena sifatnya yang merupakan semikonduktor dan menjadi material kandidat untuk aplikasi memori dan sensor. (Bornand, 2013). Bornand dan Merzy pada tahun 2013 menemukan bahwa Zinc Oxide (ZnO) dengan doping litium memiliki sifat ferroelektirk yang meningkat dikarenakan atom Li⁺ yang menggantikan atom Zn²⁺ dan posisi atom Li⁺ tidak tepat berada di pusat kristal menyebabkan adanya dipol elektrik permanen dan berpengaruh pada sifat ferroelektrisitasnya. Teori Landau-Devonshire telah banyak digunakan peneliti dikarenakan cukup memuaskan untuk menjelaskan sifat ferroelektrisitas suatu material. (Lines dkk, 1977, Hikam dkk, 2014, Tan, 2001)

Pada penelitian ini dilakukan perhitungan konstanta Landau dari Zinc Oxide (ZnO) Aldrich, eksperimen dan ZnO doping Li 1%. Teori Landau-Devonshire digunakan untuk menggambarkan dan menganalisa energi bebas Gibbs dan kurva polarisasi spontan dari ZnO.

2. METODE PENELITIAN

Fenomena sifat intrinsik ferroelektrisitas dari material Zinc Oxide (ZnO) dapat dihitung energi bebas Gibbnya dengan menggunakan teori Landau-Devonshire (LD) (Hikam dkk, 2014, Lines dkk, 1977, Tan dkk, 2001):

$$F(P, E) = F_0 + \frac{\alpha(T - T_c)}{2} P^2 - \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{1}{6} P^6 - EP \quad (1)$$

dimana T adalah suhu material pada saat dilakukan pengujian, T_c adalah suhu Currie dari material, P adalah Polarisasi, E adalah medan listrik yang diterapkan pada material, α dan β adalah konstanta Landau. Maka energi bebas Gibbs dapat disederhanakan menjadi :

$$F = \frac{\alpha}{2} P^2 - \frac{\beta}{4} P^4 + \frac{1}{6} P^6 - EP \quad (2)$$

Dengan menganggap energi bebas Gibbs pada material Zinc Oxide (ZnO) pada kondisi minimum, maka (Hikam dan Adnan, 2014, Padurariu dkk, 2016) :

$$\frac{F(P, E)}{dP} = \alpha(T - T_c)P - \beta P^3 + P^5 = 0 \quad (3)$$

nilai α dan β dapat dihitung dari data eksperimen dengan menggunakan persamaan berikut

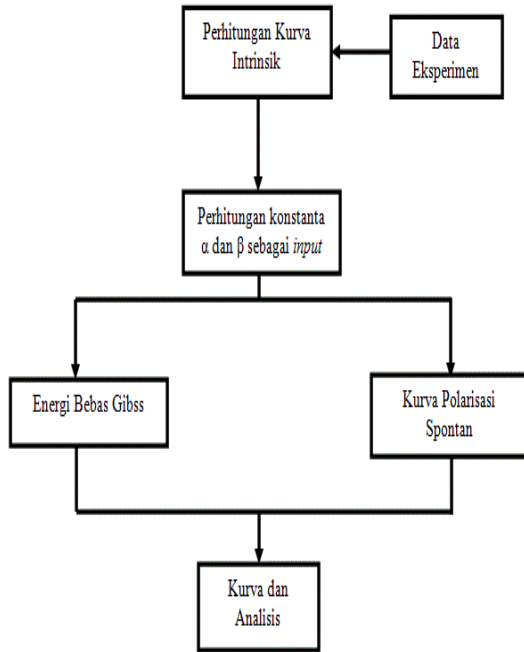
$$\alpha = \beta P_s^2 \quad (4)$$

$$\beta = \frac{3\sqrt{3}E_c}{2P_s^3} \quad (5)$$

dengan P_s adalah polarisasi spontan dan E_c adalah medan koersif.

Perhitungan energi Bebas Gibbs dan polarisasi spontan dari material Zinc Oxide (ZnO) dilakukan pada program Delphi 6 buatan sendiri. Dengan tahap pertama adalah perhitungan koefisien Landau dengan persamaan 4 dan 5 dari masing - masing jenis material, dilanjutkan dengan pembuatan program dengan

Delphi 6 dan menggunakan koefisien Landau sebagai data masukan untuk perhitungan Energi Bebas Gibbs dan kurva polarisasi spontan dari masing – masing material dengan menggunakan persamaan 2. Selanjutnya dilakukan analisa dari hasil yang didapat. Alur perhitungan Energi bebas Gibbs dan polariasi spontan ditunjukkan pada gambar 2.1.

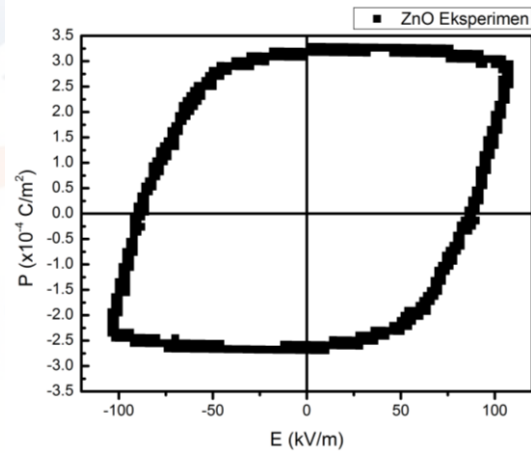


Gambar 2.1. Alur Penelitian

Nilai Polarisasi spontan dan medan koersif dari material Zinc Oxide (ZnO) diukur menggunakan rangkaian Sawyer-Tower.

3. HASIL DAN PEMBAHASAN

Hasil uji sifat ferroelektrisitas dari material ZnO eksperimen ditunjukkan pada gambar 3.1. Dari kura histeresis terlihat bahwa nilai medan koersif dari material ZnO eksperimen adalah 83 kV/m dan nilai polarisasi spontan adalah $2.7 \times 10^{-4} \text{ C/m}^2$



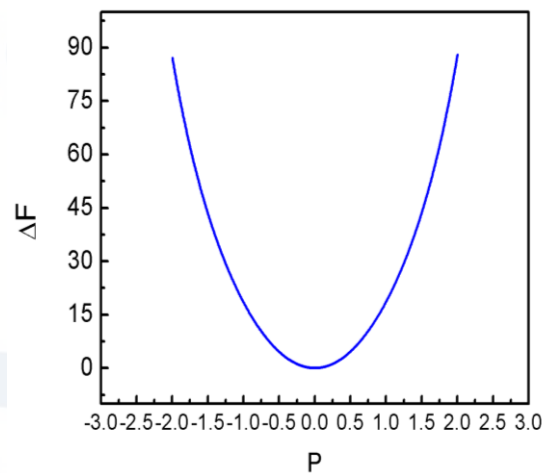
Gambar 3.1. Kurva Histeresis ZnO Eksperimen

Nilai koefisien Landau α dan β , ditunjukkan pada tabel 3.1. Dari tabel tersebut terlihat bahwa nilai α maksimum terdapat pada ZnO eksperimen begitu juga terjadi pada nilai konstanta Landau β . Sedangkan nilai konstanta Landau terendah terdapat pada ZnO *doping* Li 1%

Tabel 3.1. Koefisien Landau dari Zinc Oxide (ZnO)

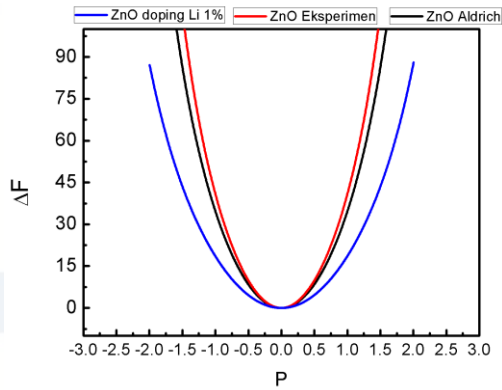
Materials and Model	Result	
	α (V/m) $\times 10^7$	β (m/F) $\times 10^{10}$
ZnO aldrich	67,84	5,97
ZnO eksperimen	78,95	9,85
ZnO <i>doping</i> Li 1%	37,11	1,63

Energi bebas Gibbs dari material Zinc Oxide yang di *doping* Li 1% ditunjukkan pada gambar 3.2.



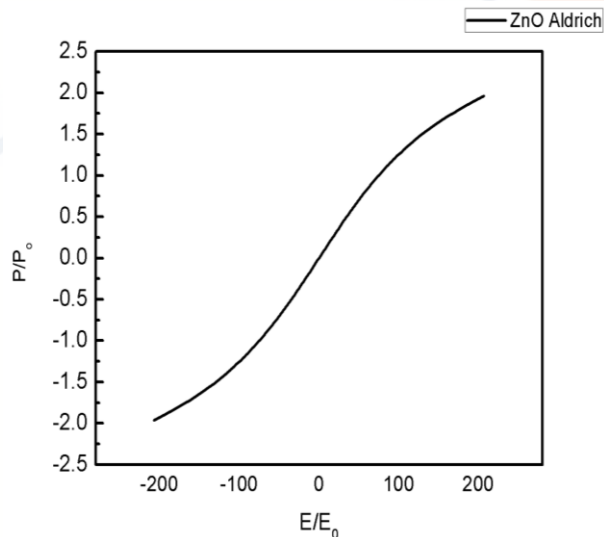
Gambar 3.2. Energi Bebas Gibbs Zinc Oxide (ZnO) *doping* Li 1%

Energi bebas Gibbs dari Zinc Oxide (ZnO) Aldrich, ZnO eksperimen dan ZnO *doping* Li 1% ditunjukkan pada gambar 3.3



Gambar 3.3. Energi Bebas Gibbs Zinc Oxide (ZnO) Aldrich (Hitam), Eksperimen (Merah) dan doping Li 1% (biru)

dari hasil perhitungan terlihat bahwa terjadi pergeseran nilai energi bebas Gibbs dari masing-masing material. Energi Bebas Gibbs dari ZnO eksperimen lebih tinggi dibandingkan ZnO Aldrich yang artinya bahwa ZnO Aldrich dalam kondisi lebih stabil dibandingkan dengan ZnO eksperimen. Hal ini juga terlihat dari koefisien Landau pada ZnO eksperimen lebih tinggi dibandingkan dengan ZnO Aldrich. Energi Bebas Gibbs terendah terjadi pada ZnO doping Li 1%, hal ini sesuai dengan nilai dari koefisien Landau. Serta pada ZnO yang didoping Li maka pada struktur kristal, sebagian atom Zn^{2+} akan digantikan dengan atom Li^+ yang mengakibatkan struktur atom ZnO menjadi lebih stabil dan berada tidak tepat pada pusat struktur hexagonal yang menyebabkan terjadinya dipol pada *unit cell*. (Bornand dan Mezy, 2013)

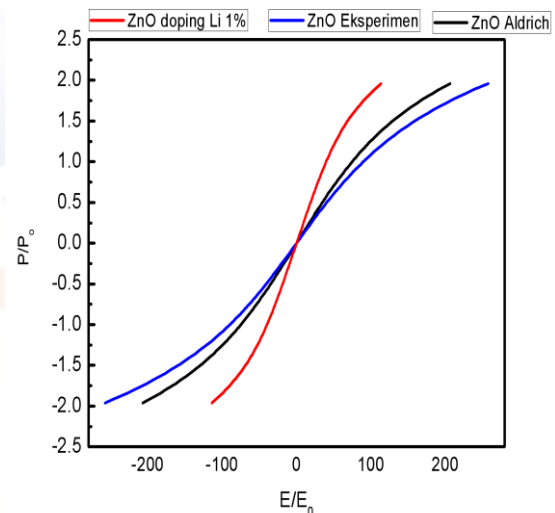


Gambar 3.4 Kurva polarisasi spontan (*virgin curve*) ZnO Aldrich

Kurva polarisasi spontan (*virgin curve*) dari ZnO Aldrich ditunjukkan pada gambar 3.4 dan kurva perbandingan ZnO Aldrich, ZnO eksperimen dan ZnO doping Li 1% ditunjukkan pada gambar 3.5.

Dari gambar terlihat bahwa terjadi pergeseran nilai polarisasi spontan (*virgin curve*) maksimum. Terlihat bahwa nilai polarisasi spontan maksimum terjadi pada ZnO doping Li 1%. Hal ini terjadi dikarenakan pada ZnO doping Li, atom Zn^{2+} digantikan oleh atom Li^+ yang menyebabkan struktur atom ZnO lebih stabil dan nilai total muatan pada satu unit sel serta total polarisasi keseluruhan menjadi lebih besar. (Bornand, 2015, Yadav dkk, 2016)

Dari hasil perhitungan ZnO eksperimen membutuhkan energi paling besar untuk mencapai polarisasi spontan maksimum. Hal ini terlihat bahwa dibutuhkan medan listrik 250 kV/m agar mencapai polarisasi maksimum. Hal ini disebabkan oleh struktur kristal dari ZnO eksperimen maksimum yang tidak tersusun sempurna. Sedangkan ZnO doping Li 1% membutuhkan energi paling rendah untuk mencapai polarisasi dikarenakan struktur kristal yang lebih stabil dan total muatan pada *unit cell* tidak sama dengan nol serta posisi atom Li pada strukturnya yang tidak tepat berada di pusat struktur (Bornand, 2015).



Gambar 3.5. Kurva polarisasi spontan (*virgin curve*) ZnO Aldrich (Hitam), ZnO Eksperimen (Biru) dan ZnO doping Li 1% (merah)

4. KESIMPULAN

Dari hasil perhitungan energi bebas Gibbs dan polarisasi spontan (*virgin curve*) dari material Zinc Oxide (ZnO). Didapatkan kesimpulan sebagai berikut:

1. Energi bebas Gibbs terendah dan polarisasi spontan maksimum dengan energi terendah didapatkan pada komposisi ZnO yang didoping Li 1%

2. Proses pembuatan material ZnO mempengaruhi nilai energi Bebas Gibbs dan medan koersif dari material ZnO
3. *Doping* litium dengan komposisi 1 % pada ZnO menyebabkan material ZnO menjadi lebih stabil dan polarisasi spontan (*virgin curve*) dapat dicapai dengan energi lebih rendah.

5. REFERENSI

- Bornand, V. (2015). Ferroelectric and Dielectric properties in Li-doped ZnO nanorods. *Thin Solid Films*. Vol. 571. 152-155
- Bornand, V. and Mezy, A. (2013) Morphological and ferroelectric studies of Li-doped ZnO thin films. *Materials Letters*. Vol. 107. 357-360
- Goel, S., Sinha, N., Yadav, H., Godara, S., Joseph, A. J., and Kumar, B. (2017). Ferroelectric Gd-doped ZnO nanostructure : Enhanced dielectric, ferroelectric and piezoelectric properties. *Materials Chemistry and Physics*. Vol. 202. 56-64.
- Hikam, M and Adnan, S. R. (2014). Intrinsic Hysteresis Loops Calculation of BZT Thin Films. *Journal of Physics : Conference Series (JPCS)*. 495. 012008
- Hikam, M and Adnan, S. R. (2014). Intrinsic Ferroelectric Coercive Field Calculation for BZT Films Doped by Indium and Lanthanum. *Advanced Materials Research*. Vol. 911. pp 256-259
- Lines, M. E. & Glass, A. M. (1977). *Principle and Applications of Ferroelectrics and Related Materials*. Clarendon Press. Oxford.
- Luo, B., Wang X., Tian, E., Song, H., Qu, H., Cai, Z., Li, B., and Li, L. (2018) Mechanism of ferroelectric properties of (BaCa)(ZrTi)O₃ from first principle calculations. *Ceramic Internasional*. Article in press.
- Padurariu, L., Petronela, L., and Mitoseriu, L. (2016). Nonlinear dielectric properties of paraelectric-dielectric composite described by a 3D Finite Element Method based on Landau-Devonshire theory. *Acta Materialia*. 103. 724-734
- Tan, E. K., Osman, J., Tilley, D. R. (2001). Calculation of Intrinsic Hysteresis Loop of Ferroelectric Thin Films. *Solid State Communications*. 117, 59-64.
- Yadav, H., Sinha, N., Goel, S. and Kumar, B. (2016). Eu-doped ZnO nanoparticles for dielectric, ferroelectric and piezoelectric application. *Journal of Alloys and Compound*. Vol. 689. 333-341