

ABSTRAK

Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari kestabilan $ABi_4Ti_4O_{15}$ yang didoping dengan Ca, Sr, Ba dan Pb melalui simulasi atomistik dengan menggunakan code GULP. Secara khusus, penelitian ini bertujuan untuk (1) optimasi geometri $ABi_4Ti_4O_{15}$ ($A = Ca, Sr, Ba$ dan Pb) dan (2) menentukan energi kisi dari struktur $ABi_4Ti_4O_{15}$ yang teroptimasi.

Energi kisi menunjukkan semakin besar variasi konsentrasi dopan yang mensubstitusi Bi_3 secara parsial maka semakin besar energi kisinya. Jumlah konsentrasi maksimum dari dopan yang mensubstitusi secara parsial Bi_3 pada $ABi_4Ti_4O_{15}$ adalah berturut-turut Ba 33%, Sr 33%, Ca 32 % dan Pb 21%. Hasil penelitian ini dapat dijadikan sebagai acuan untuk mensubstitusi $ABi_4Ti_4O_{15}$, khususnya yang didoping dopan Ba, Ca, Sr dan Pb pada lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$.

Kata Kunci : *Oksida Aurivillius, Simulasi Atomistik, Energi Kisi*