

BAB V

SIMPULAN DAN SARAN

5.1 Simpulan

Berdasarkan penelitian yang telah dilakukan, maka dapat disimpulkan bahwa optimasi geometri $ABi_4Ti_4O_{15}$ ($A = Ca, Sr, Ba$ dan Pb) dengan menggunakan simulasi atomistik menunjukkan perbedaan tetapan pegas dan muatan kulit dari dopan Ca, Sr, Ba dan Pb . Pb memiliki tetapan pegas yang lebih besar dari Ca, Sr dan Ba . Ca dan Ba memiliki tetapan pegas yang sama, namun memiliki muatan kulit yang berbeda. Sr dan Ba memiliki muatan kulit yang sama yaitu 1,831 e, tetapi keduanya memiliki tetapan pegas yang berbeda.

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%.

5.2 Saran

Dapat dilakukan penelitian lebih lanjut untuk melihat pengaruh substitusi Bi dalam Lapisan $[Bi_2O_2]^{2+}$ dan hasil simulasi dengan menggunakan metode reaksi kimia padat.