

ABSTRAK

Oksida Aurivillius adalah struktur berlapis yang memiliki sifat ferroelektrik yang dapat aplikasikan sebagai memori, sensor, dan katalis. Penelitian ini bertujuan untuk mempelajari kestabilan dari Aurivillius $A_x\text{Bi}_{4-x}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ ($A = \text{Ca}, \text{Sr}$ dan Ba), nilai x adalah jumlah konsentrasi dopan (A) yang mensubstitusi secara parsial Bi pada posisi Bi(1) maupun pada posisi Bi(2). Penelitian ini menggunakan simulasi atomistik dengan *code* GULP, simulasi dilakukan dengan cara optimasi geometri $A_x\text{Bi}_{4-x}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ pada tekanan konstan, dengan menggunakan potensial *Buckingham*. Hasil penelitian menunjukkan bahwa peningkatan konsentrasi dopan yang menggantikan Bi secara parsial disertai dengan peningkatan energi kisi, dimana Aurivillius paling stabil adalah $\text{Ca}_x\text{Bi}_{4-x}\text{Ti}_4\text{O}_{15}$ ($x = 16,3\%$) pada substitusi Bi oleh dopan di posisi Bi(2), dengan energi kisi, $-1668,227$ eV. Stabilitas Aurivillius berkurang dengan meningkatkan ukuran dopan, jumlah konsentrasi maksimum A dopan yang menggantikan Bi. Hasil penelitian ini dapat memberikan petunjuk untuk mensintesis oksida Aurivillius yang didoping dengan ion alkali tanah.

Kata Kunci : *Simulasi Atomistik; Oksida Aurivillius Lapis Empat*