

Studi Perhitungan Awal Struktur Elektronik Semikonduktor Titanium Dioksida (TiO₂) Tipe Anatase Terdadah Logam dan Non-Logam: Ti_(1-x)M_xO_(2-y)L_y dengan (M = V, Cr dan L = N, C) sebagai Kandidat Material Fotokatalis, Fotohidrofilisitas dan Fotovoltaik

Oleh: Hari Sutrisno, K. H. Sugiyarto, Dyah Purwaningsih, dan Cahyorini Kusumawardani

ABSTRAK

Pemanfaatan energi matahari dalam pengembangan energi terbarukan dan antibakteri menghadapi beberapa tantangan yaitu untuk meningkatkan efisiensi dan mengurangi biaya produksi. Berdasarkan hal tersebut, maka sangatlah penting pengembangan material yang berkaitan dengan pemanfaatan sinar matahari untuk diaplikasikan sebagai material sel surya, antibakter dan superfotohidrofilisitas. Berdasarkan hal tersebut, penelitian ini dilaksanakan pengembangan material semikonduktor titanium dioksida (TiO₂) tipe struktur anatase dan turunannya: Ti_(1-x)M_xO_(2-y)L_y (M = V, Cr dan L = N, C dengan x = 0,00; 0,25; 0,5 dan y = 0,5; 0,25; 0,00). Penelitian direncanakan selama 1 tahun dengan tujuan untuk mengetahui energi celah pita dan struktur elektronik atau *density of state* (DOS) dalam semikonduktor TiO₂ tipe struktur anatase berdasarkan perhitungan awal (*ab initio*) karena: (1). pengaruh jenis dan prosentase atom pendadah logam yaitu V dan Cr, (2). pengaruh jenis dan prosentase atom pendadah non-logam yaitu N dan S, (3). pengaruh jenis dan prosentase atom pendadah logam (V, Cr) dan non logam (N, C) secara simultan.

Generalized gradient approximation dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) digunakan untuk menjabarkan *the exchange-correlation functional*. Suatu gelombang medan energi *cutoff* sebesar 500 eV dan *k-point*: 10x10x 4 (hasil ini diperoleh dari optimasi energi *cut off* dan *k-point* dari kristal TiO₂ anatase). Perhitungan struktur elektronik dan DOS dilakukan masing-masing untuk unt sel: 1x1x1, dan super sel: 2x1x1 dan 2x2x1 pada kristal TiO₂ anatase terdadah logam V, Cr dan non-logam N, C.

Berdasarkan hasil perhitungan secara teoritis dengan metode pendekatan *density functional theory* (DFT) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) disimpulkan (1). Pendadah atom Cr dalam TiO₂-anatase memiliki energi celah pita selalu lebih kecil daripada pendadah atom V pada berbagai persen konsentrasi yang mirip.

Penambahan pendadah atom Cr sebesar 4,06% sudah menghasilkan energi celah pita pada daerah sinar tampak yaitu 2,377 eV, sedangkan penambahan pendadah atom V sebesar 3,98% sudah menghasilkan energi celah pita pada daerah sinar tampak yaitu 2,917 eV. Energi celah pita paling kecil sebesar 1,663 eV dihasilkan dari pendadah atom Cr dalam TiO₂-anatase sebanyak 32,55%, sedangkan energi celah pita terkecil sebesar 2,397 eV dihasilkan dari pendadah atom V dalam TiO₂-anatase sebanyak 31,89%; dan (2). Pendadah atom N dalam TiO₂-anatase memiliki energi celah pita selalu lebih kecil daripada pendadah atom C pada berbagai persen konsentrasi yang mirip. Penambahan pendadah atom C sebesar 0,94% sudah menghasilkan energi celah pita pada daerah sinar tampak yaitu 1,92 eV, sedangkan penambahan pendadah atom N sebesar 1,095% menghasilkan energi celah pita pada daerah sinar tampak yaitu 1,85 eV. Energi celah pita paling kecil sebesar 1,54 eV dihasilkan dari pendadah atom N dalam TiO₂-anatase sebanyak 4,38%, sedangkan energi celah pita terkecil sebesar 1,74 eV dihasilkan dari pendadah atom V dalam TiO₂-anatase sebanyak 3,75%

Kata Kunci: *Anatas, Energi Celah Pita, Struktur Elektronik*