

Analisis Sifat-Sifat Struktural, Elektronik, dan Optik dari Titanium Dioksida (TiO₂) Tipe Anatase Murni, Mono- dan Co-Doped (Co, Ni, N, dan S) sebagai Material Fotokatalitik yang Aktif dalam Sinar Tampak

Oleh: Hari Sutrisno, Dyah Purwaningsih dan Sunarto

ABSTRAK

Beberapa aspek pengembangan titanium dioksida (TiO₂) yaitu: (a). fotovoltaiik berbasis zat pewarna (sel Grätzel) dan fotovoltaiik berbasis *quantum dot*, (b). fotokatalis yang berperan dalam rangka pemurnian lingkungan air dan udara, (c). fotohidrofil (*superhydrophilicity*) yaitu pengembangan hidrofil aktif permukaan oleh sinar matahari dan ultra violet (UV) dan (d). anti bakteri. Untuk meningkatkan kinerja TiO₂, melalui cara pergeseran kinerja sinar yaitu dari sinar ultra violet ke sinar tampak. Pergeseran kinerja ini dilakukan melalui doping TiO₂ dengan atom logam (Co, Ni) dan atom non-logam (N, S). Berdasarkan hal tersebut, penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh *mono-* dan *co-doped* dari atom logam (Co dan Ni), atom non-logam (N, dan S) yang terdapat dalam titanium dioksida (TiO₂) tipe anatas terhadap struktur (parameter kisi), sifat elektronik (nilai energi celah pita dan *density of state* (DOS), dan sifat optik. Implementasi perhitungan energi atau analisis sifat-sifat struktural, elektronik, dan optik menggunakan kode CASTEP. Data yang diperoleh melalui pendekatan *density functional theory* (DFT) dengan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof *for solide* (GGA+PBESol) sebagai fungsi korelasi perubahan berupa plot grafik dari struktur pita TiO₂ murni, *mono-* dan *co-doped* (Co, Ni, N, S). Grafik tersebut diolah lebih lanjut untuk memperoleh informasi tentang besarnya energi celah pita (Eg) dan *density of states* (DOS) dari material tersebut.

Kata Kunci: *Anatas, Energi Celah Pita, Pita Valensi, Pita Konduksi*