

ANALISIS ENERGI CELAH PITA DAN STRUKTUR ELEKTRONIK PEROVSKIT LAYER NaLnTiO_4 ($\text{Ln} = \text{Y}, \text{La}, \text{Nd}$) DENGAN METODE PENDEKATAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY SEBAGAI KANDIDAT MATERIAL SEL SURYA DAN ANTI-BAKTERI

Oleh: Hari Sutrisno, Eli Rohaeti, & Dyah Purwaningsih

ABSTRAK

Pemanfaatan energi matahari dalam pengembangan energi terbarukan dan antibakteri menghadapi beberapa tantangan yaitu untuk meningkatkan efisiensi dan mengurangi biaya produksi. Atas dasar hal tersebut, maka sangatlah penting pengembangan material yang berkaitan dengan pemanfaatan sinar matahari untuk diaplikasikan dalam sel surya dan antibakter tersebut. Berdasarkan hal tersebut di atas, pada penelitian ini melakukan analisis pada material perovskite layer NaLnTiO_4 dan turunannya yaitu $\text{NaY}_{(1-x)}\text{La}_x\text{TiO}_4$ dan $\text{NaLa}_{(1-x)}\text{Y}_x\text{TiO}_4$ ($x = 0.25, 0.50$ and 0.75) yang dinyatakan dalam tujuan berikut: (1). Mengetahui pengaruh metode perhitungan awal yaitu *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) terhadap nilai energi celah pita dan *density of states* (DOS) pada $\text{NaLn}_{(1-x)}\text{L}_x\text{TiO}_4$. ($\text{Ln} = \text{Y}, \text{La}$ dan $\text{L} = \text{La}, \text{Y}$), dan (2). Mengetahui pengaruh variasi konsentrasi pendadahan Lanthanum (La) terhadap nilai energi celah pita dan *density of states* (DOS) pada $\text{NaY}_{(1-x)}\text{La}_x\text{TiO}_4$ dan $\text{NaLa}_{(1-x)}\text{Y}_x\text{TiO}_4$ ($x = 0, 0.25, 0.5, \text{ dan } 0.75$). Implementasi perhitungan energi celah pita dan struktur elektronik menggunakan kode CASTEP. Data yang diperoleh melalui pendekatan *density functional theory* (DFT) dengan *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) sebagai fungsi korelasi perubahan berupa plot grafik dari struktur pita NaLnTiO_4 dan turunannya. Grafik tersebut diolah lebih lanjut untuk memperoleh informasi tentang besarnya energi celah pita (E_g) dan *density of states* (DOS) dari material tersebut. Hasil perhitungan energi celah pita NaYTiO_4 dan $\text{NaY}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_4$ ($x = 0.25, 0.50, \text{ dan } 0.75$) dengan variasi konsentrasi Lanthanum dan LDA sebagai fungsi korelasi perubahan diperoleh masing-masing sebesar 3,447 eV, 3,384 eV, 3,356 eV, dan 3,560 eV. Perhitungan dengan GGA+PBE sebagai fungsi korelasi perubahan masing-masing menghasilkan energi celah pita sebesar 3,250 eV, 3,039 eV, 2,963 eV, dan 2,930 eV. Hasil perhitungan karakter DOS untuk semua sampel menunjukkan pita valensi didominasi oleh orbital atom O-2p dan pita konduksi didominasi oleh orbital atom Ti-3d. Substitusi atom La pada atom Y *site* tidak dapat menghasilkan pita antara (*intermediate band*) melainkan hanya memperlebar atau mempersempit celah pita pada $\text{NaLa}_{(1-x)}\text{La}_x\text{TiO}_4$. Hasil penelitian ini menunjukkan bahwa NaLaTiO_4 beserta turunannya $\text{NaY}_{(1-x)}\text{Y}_x\text{TiO}_4$ memiliki jenis celah pita tidak langsung. Karakter DOS dalam penelitian ini menunjukkan peran utama orbital atom O 2p dan Ti 3d. NaLaTiO_4 memiliki energi celah pita sebesar 3,742 eV (LDA) dan 3,630 (GGA+PBE). Pada turunan NaLaTiO_4 diperoleh nilai energi celah pita dengan rentang 3,492 eV hingga 3,678 eV dengan LDA dan GGA+PBE sebagai fungsi korelasi perubahan. Metode perhitungan LDA memiliki hasil energi celah pita yang lebih besar dibandingkan dengan GGA+PBE. NaLaTiO_4 dan turunannya dapat diaplikasikan sebagai pembangkit listrik, katalis, dan baterai, mengingat sifat yang dihasilkan.

Kata Kunci: NaYTiO_4 , NaLaTiO_4 Perhitungan Prinsip Awal, DFT, Energi Celah Pita, DOS