

[HOME](#) [ABOUT](#) [ISSN](#) [SEARCH](#) [CONTACT](#) [ABOUT](#) [PRATIPLUJANAT](#)
[PRATIPLUJANAT](#) [DOKUMEN](#) [PORTAL](#) [BIBLIOTIK](#) [BIBLIOTIK](#) [BIBLIOTIK](#) [BIBLIOTIK](#)

ISSN : 1979-5920
 P-ISSN : 1979-5920
 E-ISSN : 1979-5920

CHEMISTRY PROGRESS
Majalah Publikasi Ilmu Kimia

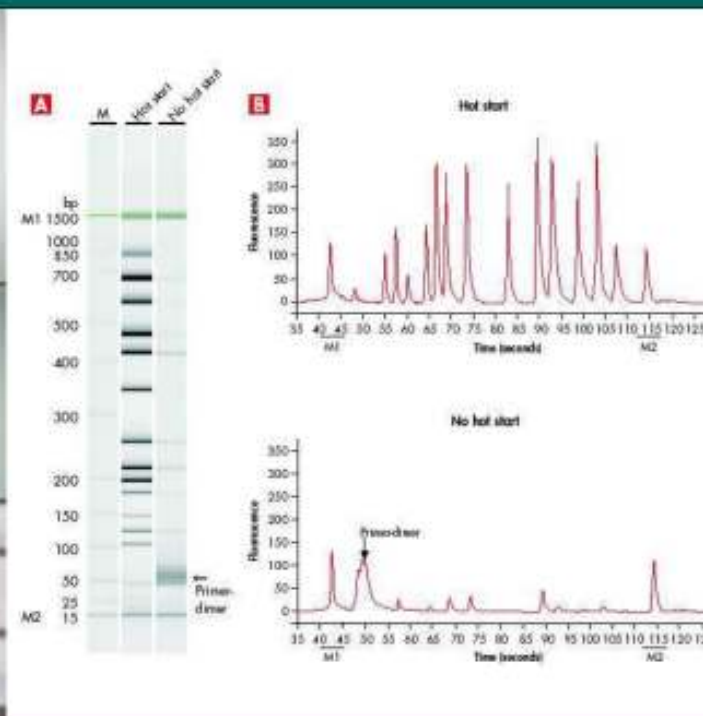
Volume 8, Nomor 2
 November 2015

ISSN : 1979-5920

CHEMISTRY PROGRESS
Majalah Publikasi Ilmu Kimia

Volume 8, Nomor 2
 November 2015

ISSN : 1979-5920



Chem.Prog.	Vol. 8	No. 2	Hal. 47-86	Mauado, November 2015	ISSN : 1979-5920
------------	--------	-------	------------	-----------------------	------------------

Diterbitkan Oleh
JURUSAN KIMIA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS SAM RATULANGI
HIMPUNAN KIMIA INDONESIA CABANG SULAWESI UTARA

Editorial Team

ejournal.unsrat.ac.id/index.php/chemprog/about/editorialTeam

CHEMISTRY PROGRESS

HOME ABOUT LOG IN SEARCH CURRENT ARCHIVES WEBSITE UNSRAT
 WEBSITE UNSRAT PORTAL AKADEMIK PORTAL E-JOURNAL REPOSITORY UNSRAT

Home > About the Journal > Editorial Team

EDITORIAL TEAM

PENANGGUNG JAWAB
 Prof. A. Edris de Qozjo, Universitas San Raffaele, Indonesia

KETUA REDAKSI
 Prof. Dr. Edi Suprianto, Universitas San Raffaele, Indonesia

SEKRETARIS
 D. Andy Wharta, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Pradya Waharsoo, Universitas San Raffaele, Indonesia

BENDAHARA
 Jolaly A. Roesag, Universitas San Raffaele, Indonesia

DEWAN REDAKSI
 Dra. Melinda Saqi, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Lidya Mawati, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Dra. Mering Tanghawan, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Dera G. Karja, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Henry Antonang, Universitas San Raffaele, Indonesia
 D. Mary Kolesnaga, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Dra. Jeny-Abdich, Universitas San Raffaele, Indonesia
 Muzono Kusnanto, Universitas San Raffaele, Indonesia

PRODUKSI & DISTRIBUSI
 Marinda Margara Fitri, Universitas San Raffaele, Indonesia

USER
 Username:
 Password:
 Remember me

JOURNAL CONTENT
 Search:
 All

 Some
 By Issue
 By Author
 By Title
 Other Journals

Home Help
 NOTIFICATIONS
 View
 Subscribe / Unsubscribe
 FONT SIZE

 INFORMATION
 For Authors
 For Authors
 For Librarians

Vol 8, No 2 (2015)

ejournal.unsrat.ac.id/index.php/chemprog/issue/view/1440/showToc

CHEMISTRY PROGRESS

HOME ABOUT LOG IN SEARCH CURRENT ARCHIVES WEBSITE UNSRAT
 WEBSITE UNSRAT PORTAL AKADEMIK PORTAL E-JOURNAL REPOSITORY UNSRAT

Home > Archives > Vol 8, No 2 (2015)

VOL 8, NO 2 (2015)

TABLE OF CONTENTS

COVER
 Cover 100

DAFTAR ISI
 Daftar Isi 100

ARTICLES

NILAI GHI, FITOKRIMA DAN KADAR TOTAL FENOL DARI BEBERAPA UNDAI LOKAL SULAWESI TENGGARA <i>Dr. Wahyuni, Fey Subandri</i>	100
PREDESI ENERGI CELAH PITA DALAM TIKO-ANATAS DAN TIKO-ANATAS TERDAMPAR PERAK (Ag) <i>Mari Sartono</i>	100
AKTIVITAS ANTIOKSIDAN EKSTRAK AIR DAN ETANOL DARI EMPULUR BATANG SAGU BARUK (<i>Assaga macrocarpa</i>) AKTIVITAS ANTIHEMORAGIK EKSTRAK AIR DAN ETANOL DARI EMPULUR BATANG SAGU BARUK (<i>Assaga macrocarpa</i>) <i>Ahlini Pebriyanti Giwang, Edi Suprianto, Lidya Dina Mawati</i>	100
ISOLASI CAPSACIN DARI OLEOREGIN CABAI SAWIT <i>Nurita Triati, Deva Gede Kaga, Henry Fendri Ariyanto</i>	100
KONVERSI ARANG TERBUANG KELAPA MENJADI ELEKTRODA KARBON <i>Mega Juana Ronggo</i>	100

USER
 Username:
 Password:
 Remember me

JOURNAL CONTENT
 Search:
 All

 Some
 By Issue
 By Author
 By Title
 Other Journals

CURRENT ISSUE

Home Help
 NOTIFICATIONS
 View
 Subscribe / Unsubscribe
 FONT SIZE

 INFORMATION
 For Authors
 For Authors
 For Librarians

PREDIKSI ENERGI CELAH PITA DALAM TiO₂-ANATAS DAN TiO₂-ANATAS TERDADAH PERAK (Ag)

Hari Sutrisno

Jurusan Pendidikan Kimia, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam
Universitas Negeri Yogyakarta

ABSTRACT

Hari Sutrisno. 2016. Prediction of the Band Gaps on Pure TiO₂-anatase and Ag-Doped TiO₂-anatase

The band gaps of pure TiO₂-anatase and Ag-doped TiO₂-anatase have been predicted with density functional theory (DFT) approach. Kohn-Sham density functional theory calculations are performed using local density approximation (LDA) and generalized gradient approximation from Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) for exchange-correlation functionals. The first-principle calculations were done using unit cell conventional dan supercell (2x1x1) methods for TiO₂-anatase and Ag-doped TiO₂-anatase, respectively, as implemented within Amsterdam Density Functional (ADF) package of ADF-BAND version 2014.10. The calculated band gaps of pure TiO₂-anatase from LDA and GGA+PBE were 2.74 and 2.87 eV, respectively. The intermediate band has been resulted from the calculation of Ag-doped TiO₂-anatase using LDA and GGA+PBE as exchange-correlation functionals. The calculated band gaps of Ag-doped TiO₂-anatase using LDA were 0.92 eV above valence band and 1.74 eV below conduction band, meanwhile from GGA+PBE were 1.02 eV above valence band and 1.78 eV below conduction band.

Keywords: anatase, TiO₂, first-principle calculation, band gap

ABSTRAK

Hari Sutrisno. 2016. Prediksi Energi celah pita dalam TiO₂-Anatas dan TiO₂-Anatas Terdada Perak (Ag)

Energi celah pita dalam TiO₂-anatas dan TiO₂-anatas terdada perak (Ag-TiO₂-anatas) dapat diprediksi dengan pendekatan *density functional theory* (DFT). Persamaan Kohn-Sham digunakan untuk perhitungan berdasarkan pendekatan *density-functional theory* (DFT) dengan fungsi korelasi perubahan *local density approximation* (LDA) and *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE). Perhitungan prinsip awal energi celah pita dilakukan menggunakan metode unit sel konvensional TiO₂-anatas dan supersel (2x1x1) Ag-TiO₂-anatas dengan program ADF-BAND versi 2014.10 yang terdapat dalam paket program Amsterdam Density Functional (ADF). Hasil perhitungan energi celah pita untuk TiO₂-anatas diperoleh nilai energi celah pita berdasarkan LDA dan GGA+PBE sebagai fungsi korelasi perubahan, masing-masing sebesar 2,74 dan 2,87 eV. Pita antara (*intermediate band*) dihasilkan dari perhitungan energi celah pita dalam Ag-TiO₂-anatas berdasarkan pendekatan DFT dengan fungsi korelasi perubahan LDA and GGA+PBE). Hasil perhitungan energi celah pita dalam Ag-TiO₂-anatas dengan LDA sebesar 0,92 eV di atas pita valensi dan 1,74 eV di bawah pita konduksi, sedangkan dengan GGA+PBE sebesar 1,02 eV di atas pita valensi dan 1,78 eV di bawah pita konduksi.

Kata kunci: anatas, TiO₂, perhitungan prinsip awal, energi celah pita

PENDAHULUAN

Titanium dioksida atau titania (TiO₂) merupakan salah satu material yang sangat menjanjikan untuk diterapkan dalam kehidupan manusia, dikarenakan sifa-sifat yang baik tentang stabilitas fisika-kimia, afinitas oksidasi, kekerasan mekanik, superior fotoreaktivitas, dan sifat-sifat optoelektronik. Titania digunakan secara luas sebagai pigmen putih dalam cat, kosmetik, fotoelektrokimia, dan fotokatalis dalam

industri. Titanium dioksida merupakan semikonduktor tipe-n yang potensial untuk aplikasi dalam sel fotovoltaik (Grätzel, 2005; Tan & Wu, 2006), superhidrofilik dan amfifilik permukaan (Ashkarran & Mohammadzadeh, 2008; Masuda & Kato, 2008), fotokatalis (Awati dkk., 2003; Muctuma dkk., 2015; Zhang dkk., 2016), antibakteri (Galkina dkk., 2014; Haghi dkk., 2012; Huang dkk., 2000; Verdier, dkk.,

2014), dan sensor (Goyal dkk., 2010; Pustelny dkk., 2012).

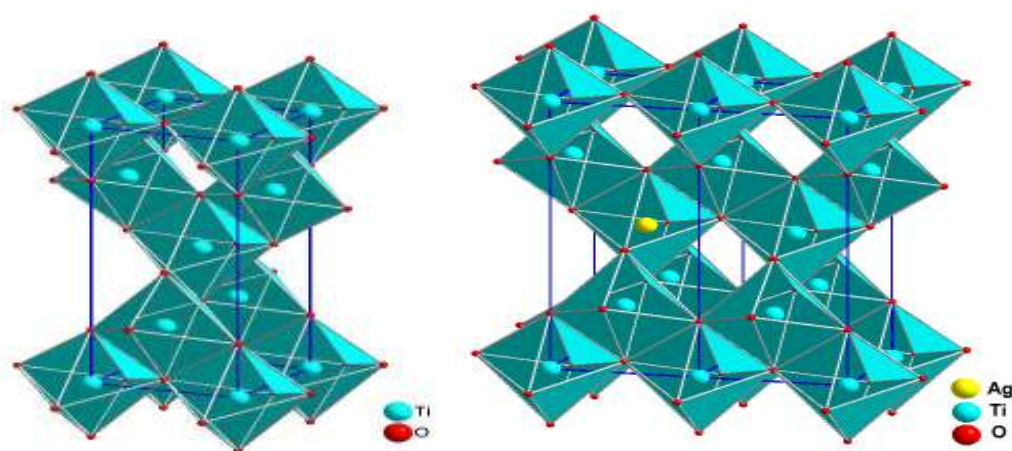
Titanium dioksida ditemukan hingga saat ini ada sebelas jenis alotropik, namun di alam terdapat tiga fasa TiO_2 yaitu anatas, rutil dan brookit (Mo dkk., 1995). Anatas dan rutil merupakan bentuk struktur yang paling stabil dan keduanya diproduksi dalam skala industri untuk berbagai aplikasi. Aplikasi TiO_2 berkaitan dengan sifat-sifat optik., oleh karena itu umumnya efektifitas dan efisiensi penggunaan TiO_2 ditentukan energi celah pitanya. Energi celah pita TiO_2 (*bulk*) fasa anatas sebesar 3,2 eV (Asahi dkk., 2001), fasa rutil sebesar 3.0 eV (Grant, 1959), dan fase brookit sebesar 3,4 eV (Tang dkk., 1994). Ketika TiO_2 diradiasi dengan sinar yang memiliki energi sama atau lebih tinggi dari energi celah pita, maka terjadi perpindahan elektron dari pita valensi ke pita konduksi yang menghasilkan suatu kekosongan (*hole* atau h^+) pada pita valensi dan elektron bebas (e^-) pada pita konduksi. Peningkatan fotoaktivitas TiO_2 dilakukan dengan menurunkan energi celah pita. Sejumlah metode telah diteliti untuk menurunkan energi beda pita TiO_2 . Metode yang banyak dilakukan dengan cara memasukkan pendadah (*dopant*) logam, seperti: Cr, Ce, Sc, V, Mn, Fe, Cu, Co, W, dll. (Chang dkk., 2014; Tian dkk., 2012; Thuy dkk., 2012; Zhang dkk., 2013) dan non-logam, seperti: S, N, C dll. (Dong dkk., 2008; Xu dkk., 2006; Zhao dkk., 2013) ke dalam struktur TiO_2 melalui penggantian (*substitution*) dan penyisipan (*interstition*) atom untuk memodifikasi struktur elektroniknya. Adanya pendadah tersebut dapat meningkatkan tepi pita valensi dan menurunkan energi celah

pita tanpa menurunkan pita konduksi atau terbentuknya pita antara (*intermediate band*).

Logam perak (Ag) merupakan salah satu pendadah logam yang digunakan melalui penggantian dan penyisipan dalam struktur TiO_2 yang banyak digunakan sebagai bahan antibakteri dan fotokatalisator (Al-Hartomy, 2014; Ashkarran, 2011; Gupta dkk., 2013; Harikishore dkk., 2014; Ma dkk., 2014). Akhir-akhir ini, penelitian tentang pendadah logam perak disubstitusikan ke dalam struktur TiO_2 telah secara intensif dipelajari baik secara eksperimen maupun perhitungan teoritik dalam usaha untuk menggeser serapan TiO_2 dari daerah sinar UV ke daerah sinar tampak sehingga fotoaktivitasnya lebih baik. Berdasarkan hal tersebut, artikel ini membahas perhitungan awal untuk memprediksi energi celah pita TiO_2 -anatas terdadah perak (Ag- TiO_2 -anatas) berdasarkan pendekatan *density-functional theory* (DFT) dengan *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) sebagai fungsi korelasi perubahan.

BAHAN DAN METODE

Persamaan Kohn-Sham digunakan pada perhitungan prinsip awal secara *ab-initio* berbasis pendekatan *density-functional theory* (DFT) dengan *local density approximation* (LDA) (Kohn & Sham, 1965) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) (Perdew dkk., 1996) sebagai fungsi korelasi perubahan dengan paket program Amsterdam Density Functional (ADF) ADF-BAND versi 2014.10 (Team SCM, 2014).



Gambar 1. Model struktur: (a) TiO_2 -anatas (unit sel) dan (b) TiO_2 -anatas terdadah perak (Ag- TiO_2 -anatas) dengan metode supersel ($2 \times 1 \times 1$)

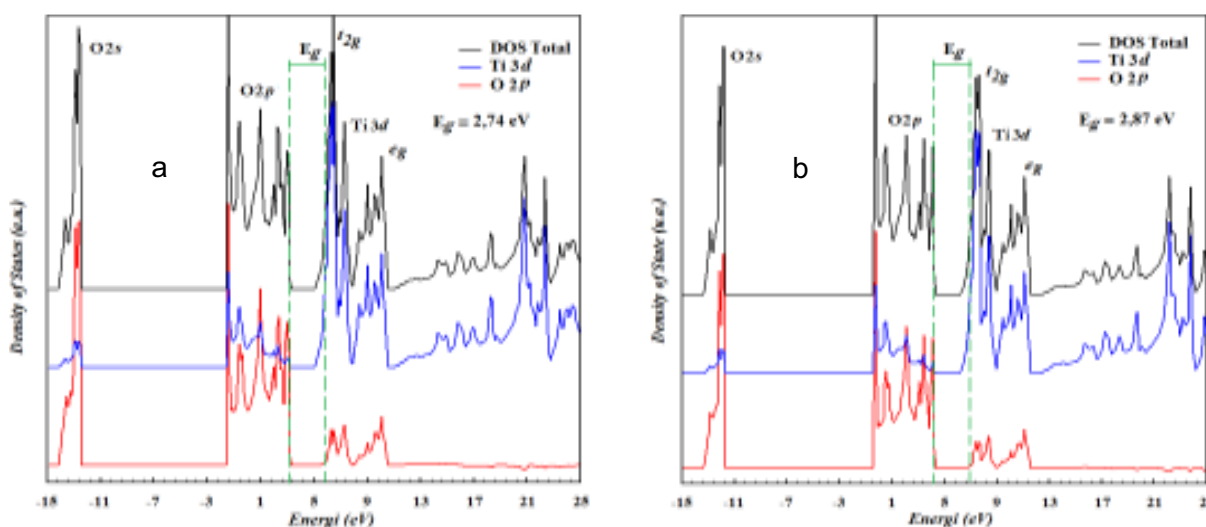
Model struktur yang digunakan dalam perhitungan ini berasal dari model struktur TiO₂-anatas eksperimen tanpa dilakukan optimasi geometri, yang memiliki sistem kristal tetragonal dan grup ruang $I4_1/amd$, dengan parameter kisi: $a = b = 3,8048 \text{ \AA}$ dan $c = 9,5962 \text{ \AA}$ (Hari Sutrisno, 2012). Struktur anatas digambarkan dalam keteraturan tiga dimensi terhubungan sisi dan puncak dari oktahedral TiO₆. Masing-masing ion Ti⁴⁺ dikelilingi secara oktahedral oleh enam ion oksigen (O²⁻). Atom titanium (Ti⁴⁺) dalam TiO₂-anatas disubstitusi oleh atom pendadah perak (Ag⁺) dalam metode super-sel (2x1x1) yang berisi total 24 atom, sehingga membentuk rumus molekul: Ti₈AgO₁₅ dengan prosentase berat atom perak sebesar 14,76%.

HASIL DAN DISKUSI

Density of states (DOS) berbasis pendekatan *density-functional theory* (DFT) dengan *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) sebagai fungsi korelasi perubahan untuk TiO₂-anatas ditampilkan dalam Gambar 2, sedangkan untuk TiO₂-anatas terdadah perak (Ag-TiO₂-anatas) ditampilkan dalam Gambar 3. Berdasarkan perhitungan untuk karakter DOS-anatas (Gambar 2), orbital atom: 1s, 2s, 2p dari Ti, dan orbital atom 1s dari O sebagai *core state*; orbital atom: 3s, 3p dari Ti, orbital atom 2s dari O sebagai *semi-core state*; orbital atom: 3d, 4s dari Ti, dan orbital atom 2p dari O sebagai *valence state*. Karakter DOS total untuk TiO₂-anatas menunjukkan bahwa pita valensi utamanya

kontribusi dari orbital atom O 2p, sedangkan pita konduksi kontribusi dari orbital atom Ti 3d.

Gambar 2(a) merupakan karakter DOS TiO₂-anatas dengan LDA sebagai fungsi korelasi perubahan, tampak terdapat tiga grup pita yaitu pada daerah sekitar -14 eV hingga -12,5 eV merupakan orbital atom O 2s, daerah sekitar -1,5 eV hingga 3 eV (pita valensi) yang terletak di bawah Energi Fermi (E_F) utamanya tersusun dari orbital atom O 2p dan daerah sekitar 5,5 eV hingga 10,5 eV (pita konduksi) yang terletak di atas Energi Fermi utamanya tersusun dari orbital atom Ti 3d. Gambar 2(b) merupakan karakter DOS TiO₂-anatas dengan GGA+PBE sebagai fungsi korelasi perubahan, tampak terdapat tiga grup pita yaitu pada daerah sekitar -13 eV hingga -12 eV merupakan orbital atom O 2s, daerah sekitar -0,5 eV hingga 4 eV (pita valensi) yang terletak di bawah Energi Fermi (E_F) utamanya tersusun dari orbital atom O 2p dan daerah sekitar 6,5 eV hingga 11,5 eV (pita konduksi) yang terletak di atas Energi Fermi utamanya tersusun dari orbital atom Ti 3d. Secara struktur, ion Ti⁴⁺ dalam anatas dikelilingi 6 ion O²⁻ dalam bentuk oktahedral. Tingkat energi 3d merupakan kontribusi terbentuknya pita konduksi terbelah menjadi dua tingkat energi yaitu tingkat energi lebih rendah t_{2g} (berisi 3 orbital: 3d_{xy}, 3d_{xz} dan 3d_{yz}) dan tingkat energi lebih tinggi e_g (berisi 2 orbital: 3d_{x²-y²} dan 3d_{z²}). Hasil perhitungan berdasar pendekatan DFT dengan LDA pada TiO₂-anatas diperoleh lebar tingkat energi t_{2g} sebesar 2,27 eV dan lebar tingkat energi e_g sebesar 2,47 eV, sedangkan berdasar pendekatan DFT dengan GGA+PBE diperoleh lebar tingkat energi t_{2g} sebesar 2,15 eV dan lebar tingkat energi e_g sebesar 2,55 eV.

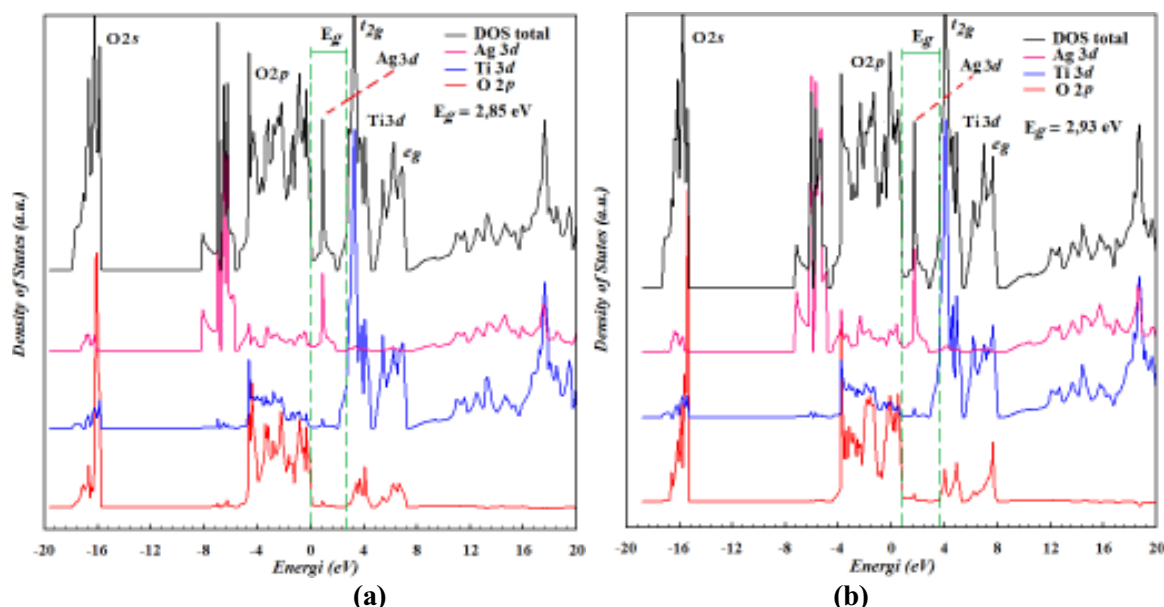


Gambar 2. *Density of States* (DOS) total dan parsial TiO₂-anatas berdasar fungsi korelasi perubahan: (a). LDA dan (b). GGA+PBE

Hasil perhitungan diperoleh lebar pita valensi sebesar 4,75 eV (LDA) dan 4,76 eV (GGA+PBE) yang sesuai dengan data eksperimen yaitu 4,75 eV serta penelitian terdahulu (Mo & Ching, 1995; Rubio-Ponce dkk., 2008). Hasil perhitungan energi celah pita minimal untuk TiO₂-anatase sebesar 2,74 eV (LDA) dan 2,8 eV (GGA+PBE), yang lebih kecil dari nilai pengukuran eksperimen yaitu 3.20 eV (Asahi dkk., 2001; Tang dkk., 1994). Hal ini dikarenakan perhitungan teoritik mengasumsikan kristal sempurna tanpa adanya defek, sebaliknya TiO₂-anatase hasil eksperimen bukanlah kristal sempurna dan banyak ditemui defek atau kekosongan atom O dan Ti. Hasil perhitungan energi celah pita TiO₂-anatase sebesar 2,74 eV tersebut mirip dengan hasil perhitungan energi celah pita kristal TiO₂-anatase menggunakan LDA sebagai fungsi perubahan potensial sebesar 2,0 - 2,7 eV (Mo & Ching, 1995) dan 2,47 eV (Xu dkk., 2006).

Gambar 3 menunjukkan DOS total dan parsial untuk Ag-TiO₂-anatase dari substitusi atom Ti oleh pendah atom Ag dalam struktur TiO₂-anatase. Berdasarkan perhitungan untuk karakter DOS-anatase (Gambar 3), orbital atom: 1s, 2s, 2p dari Ti, dan orbital atom: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p dari Ag, orbital atom 1s dari O sebagai *core state*; orbital atom: 3s, 3p dari Ti, orbital atom: 4s, 4p

dari Ag, orbital atom 2s dari O sebagai *semi-core state*; orbital atom: 3d, 4s dari Ti, orbital atom: 4d, 5s dari Ag, dan orbital atom 2p dari O sebagai *valence state*. Karakter DOS total untuk TiO₂-anatase menunjukkan bahwa pita valensi kontribusi utama dari orbital atom O 2p, dan pita antara kontribusi utama dari orbital atom Ag 4d, sedangkan pita konduksi kontribusi utama dari orbital atom Ti 3d. Secara struktur, ion Ti⁴⁺ dalam anatase dikelilingi 6 ion O²⁻ dalam bentuk oktahedral. Tingkat energi 3d merupakan kontribusi terbentuknya pita konduksi terbelah menjadi dua tingkat energi yaitu tingkat energi lebih rendah t_{2g} (berisi 3 orbital: 3d_{xy}, 3d_{xz} dan 3d_{yz}) dan tingkat energi lebih tinggi e_g (berisi 2 orbital: 3d_{x²-y²} dan 3d_{z²}). Hasil perhitungan berdasar pendekatan DFT dengan LDA pada Ag-TiO₂-anatase diperoleh lebar tingkat energi t_{2g} sebesar 2,07 eV dan lebar tingkat energi e_g sebesar 2,25 eV, sedangkan berdasar pendekatan DFT dengan GGA+PBE diperoleh lebar tingkat energi t_{2g} sebesar 2,12 eV dan lebar tingkat energi e_g sebesar 2,27 eV. Hasil ini mirip dengan hasil perhitungan Wu *et. al.* (2011) dengan metode FP-LAPW dalam TiO₂-anatase terdapat perak (Ag-TiO₂-anatase) yaitu lebar tingkat energi t_{2g} sebesar 2,14 eV dan lebar tingkat energi e_g sebesar 2,24 eV.



Gambar 3. *Density of States* (DOS) total dan parsial Ag-TiO₂-anatase berdasar fungsi korelasi perubahan: (a). LDA dan (b). GGA+PBE

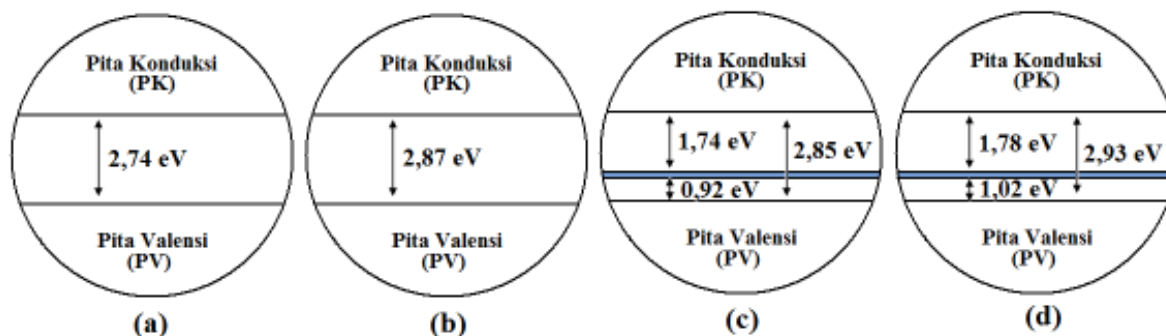
Gambar 3(a) dan 3(b) terlihat empat grup pita yaitu pada daerah sekitar -17,5 eV hingga -16 eV merupakan orbital atom O 2s, pita pada daerah sekitar -8 eV hingga 0 eV (pita valensi)

yang terletak di bawah Energi Fermi (E_F) utamanya tersusun dari orbital atom O 2p merupakan orbital O 2p dan Ag 4d, daerah sekitar 0,5 eV hingga 1,2 eV merupakan orbital

atom Ag 4d (pita antara), dan daerah sekitar 2 eV hingga 7 eV (pita konduksi) yang terletak di atas Energi Fermi utamanya tersusun dari orbital atom Ti 3d. Pita antara setebal 0,29 eV pada daerah sekitar 0,85 eV yang diperoleh dengan LDA, sedangkan pita antara setebal 0,31 eV pada daerah sekitar 0,85 eV yang diperoleh dengan GGA+PBE merupakan kontribusi dari orbital atom Ag 4d. Energi celah pita antara pita valensi dengan pita konduksi sebesar 2,85 eV (LDA) dan 2,93 eV (GGA+PBE). Adanya pita antara

tersebut menghasilkan 2 energi celah pita yaitu 0,92 eV dan 1,74 eV dengan LDA, sedangkan dengan GGA+PBE yaitu 1,02 eV dan 1,78 eV.

Berdasarkan penjelasan di atas, dapat diketahui bahwa penambahan pendadahan atom Ag dalam struktur TiO₂-anatas melalui substitusi atom Ti menyebabkan terbentuknya pita antara (*intermediate band*) yang terlokalisasi dekat pita valensi dan menghasilkan energi celah pita baru sebesar 1,74 eV (LDA) dan 1,78 eV (GGA+PBE) (Gambar 4).



Gambar 4. Energi celah pita: (a). TiO₂-anatas (LDA), (b). TiO₂-anatas (GGA+PBE), (c). Ag-TiO₂-anatas (LDA), dan (d). Ag-TiO₂-anatas (GGA+PBE)

Tabel 1. Energi celah pita TiO₂-anatas dan Ag-TiO₂-anatas dari hasil perhitungan dan berbagai penelitian

	Energi celah pita (E _g) (eV)			
	TiO ₂ -anatas		Ag-TiO ₂ -anatas	
	(O2p - Ti3d)	(O2p-Ag4d)	(Ag4d-Ti3d)	(O2p-Ti3d)
<i>Artikel ini :</i>				
<i>Fungsi Korelasi Perubahan</i>				
LDA	2,74	0,92	1,74	2,85
GGA+PBE	2,87	1,02	1,78	2,93
<i>Kajian Teori</i>				
GGA (Huo dkk.,2009)	2,30			
GGA (Zhou, 2013)	2,54			
FP-LAPW (Wu dkk., 2011)	2,04	0,83	1,20	2,50
<i>Eksperimen</i>				
Nanopartikel (Zhao dkk., 2007)	3,28			
Nanopartikel (3 nm) (Reddy dkk., 2001)	3,167			
Nanopartikel (6 nm) (Reddy dkk., 2001)	3,145			
<i>Bulk</i> (Asahi dkk., 2001)	3,20			

Hasil perhitungan untuk TiO₂-anatas menghasilkan energi celah pita sebesar 2,74 eV (LDA) dan 2,87 eV (GGA+PBE). Penambahan pendadahan atom Ag sebesar 14,76 % menghasilkan pita antara setebal 0,29 eV yang berjarak dari pita valensi sebesar 0,92 eV dan jarak ke pita konduksi sebesar 1,74 eV dengan LDA, sedangkan dengan GGA+PBE menghasilkan pita antara sebesar 0,31 eV yang

berjarak dari pita valensi sebesar 1,02 eV dan jarak ke pita konduksi sebesar 1,78 eV. Tabel 1 menunjukkan energi celah pita hasil perhitungan dan berbagai energi celah pita dari hasil penelitian maupun perhitungan terdahulu. Berdasarkan Tabel 1, hasil perhitungan energi celah pita selalu lebih kecil dari nilai pengukuran eksperimen. Hal ini dikarenakan perhitungan teoritik mengasumsikan kristal sempurna tanpa

adanya defek, sebaliknya TiO₂-anatase hasil eksperimen bukanlah kristal sempurna dan banyak ditemui defek atau kekosongan atom O dan Ti.

KESIMPULAN

Energi celah pita TiO₂-anatase dan TiO₂-anatase terdapat perak (Ag-TiO₂-anatase) telah berhasil dipelajari berdasarkan perhitungan prinsip awal secara *ab-initio* menggunakan pendekatan *density functional theory* dengan *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) sebagai fungsi perubahan korelasi dengan metode supersel (2x1x1). Hasil perhitungan untuk TiO₂-anatase menghasilkan energi celah pita sebesar 2,74 eV (LDA) dan 2,87 eV (GGA+PBE). Penambahan pendadahan atom Ag sebesar 14,76 % menghasilkan pita antara setebal 0,29 eV yang berjarak dari pita valensi sebesar 0,92 eV dan jarak ke pita konduksi sebesar 1,74 eV berdasarkan LDA, sedangkan berdasarkan GGA+PBE menghasilkan pita antara sebesar 0,31 eV yang berjarak dari pita valensi sebesar 1,02 eV dan jarak ke pita konduksi sebesar 1,78 eV.

DAFTAR PUSTAKA

- Al-Hartomy, O.A. 2014. Synthesis, Characterization, Photocatalytic and Photovoltaic Performance of Ag-Doped TiO₂ Load on the Pt-carbon Spheres. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 27, 71-78.
- Asahi, R., Morikawa, T., Ohwaki, T., Aoki, K., & Taga, Y. 2001. Visible-Light Photocatalysis in Nitrogen-Doped Titanium Oxides. *Science*, 293(5528), 269-271.
- Ashkarran, A.A. 2011. Antibacterial Properties of Silver-Doped TiO₂ Nanoparticles under Solar Simulated Light. *Journal of Theoretical and Applied Physics*, 4-4, 1-8.
- Ashkarran, A.A. & Mohammadizadeh, M.R. 2008. Superhydrophilicity of TiO₂ Thin Films Using TiCl₄ as a Precursor. *Materials Research Bulletin*, 43, 522-530.
- Awati, P.S., Awate, S.V., Shah, P.P. & Ramaswamy, V. 2003. Photocatalytic Decomposition of Methylene Blue Using Nanocrystalline Anatase Titania Prepared by Ultrasonic Technique. *Catalysis Communications*, 4, 393-400.
- Chang, S. M., & Liu, W. S., 2014. The Roles of Surface-Doped Metal Ions (V, Mn, Fe, Cu, Ce and W) in the Interfacial Behavior of TiO₂ Photocatalysts. *Applied Catalysis B: Environmental*, 156-157, 466-475.
- Dong, F., Zhao, W., & Wu, Z. 2008. Characterization and Photocatalytic Activities of C, N and S co-doped TiO₂ with 1D Nano-Structure Prepared by the Nano-Confinement Effect. *Nanotechnology*, 19, 365607-365617.
- Galkina, O. L., Sycheva, A., Blagodatskiy, A., Kaptay, G., Katanaev, V. L., Seisenbaeva, G. A., Kessler, V. G., & Agafonov, A.V. 2014. The Sol-Gel Synthesis of Cotton/TiO₂ Composites and Their Antibacterial Properties. *Surface and Coatings Technology*, 253, 171-179.
- Goyal, R. N., Kaur, D. & Pandey, A. K. 2010. Voltammetric Sensor Based on Nano TiO₂ Powder Modified Glassy Carbon Electrode for Determination of Dopamine. *The Open Chemical and Biomedical Methods Journal*, 3, 115-122.
- Grant F. A. 1959. Properties of Rutile (Titanium Dioxide). *Reviews of Modern Physics*, 31, 646-650.
- Grätzel, M. 2005. Solar Energy Conversion by Dye-Sensitized Photovoltaic Cells. *Inorganic Chemistry*, 44, 6841-6851.
- Gupta, K., Singh, R.P., Pandey, A. & Pandey, A. 2013. Photocatalytic Antibacterial Performance of TiO₂ and Ag-doped TiO₂ Against *S. aureus*, *P. aeruginosa* and *E. coli*. *Beilstein Journal of Nanotechnology*, 4, 345-351.
- Haghi, M., Hekmatfashar, M., Janipour, M.B., Gholizadeh S.S., Faraz, M.K., Sayyadifar, F., & Ghaedi, M., 2012. Antibacterial Effect of TiO₂ Nanoparticles On Pathogenic Strain of *E. coli*. *International Journal of Advanced Biotechnology and Research*, 3(3), 621-624.
- Hari Sutrisno. 2012. Transformasi Polimorfik dan Karakterisasi Mikrostruktur Fasa TiO₂ yang Dihasilkan Melalui Kalsinasi Nanopita Hidrogen Titanat. *Jurnal Sains Dasar*, 1(1), 18-32.

- Harikishore, M., Sandhyarani, M., Venkateswarlu, K., Nellaippan, T.A., & Rameshbabu, N., 2014. Effect of Ag Doping on Antibacterial and Photocatalytic Activity of Nanocrystalline TiO₂. *Procedia Materials Science*, 6, 557-566.
- Huang, Z., Maness, P. C., Blake, D. M., Wolfrum, E. J., Smolinski, S. and Jacoby, W. A. 2000. Bacteri-cidal Mode of Titanium Dioxide Photocatalysis. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 130, 163-170
- Huo, X.G., Huang, M.D., Wu, X.L., & Liu, A.D. 2009. First-Principle Calculations on Implanted TiO₂ by 3d Transition Metal Ions. *Science in China Series G: Physics, Mechanics & Astronomy*, 52(6), 838-842.
- Kohn, W., & Sham, L.J. 1965. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review B*, 140, A1133- A1137.
- Ma, J., Guo, X., Zhang, Y., & Ge, H. 2014. Catalytic Performance of TiO₂@Ag Composites Prepared by Modified Photo-Deposition Method. *Chemical Engineering Journal*, 258, 247-253.
- Masuda, Y. & Kato, K. 2008. Liquid-Phase Patterning and Microstructure of Anatase TiO₂ Films on SnO₂:F Substrates Using Superhydrophilic Surface. *Chemistry of Material*, 20, 1057-1063.
- Mo, S. D. & Ching, W. Y. 1995. Electronic and Optical Properties of Three Phases of Titanium Dioxide: Rutile, Anatase, and Brookite. *Physical Review B*, 51, 13023-13032.
- Muctuma, B. K., Shao, G. N., Kim, W. D., & Kim, H. T. 2015. Sol-Gel Synthesis of Mesoporous Anatase-Brookite and Anatase-Brookite-Rutile TiO₂ Nanoparticles and Their photocatalytic Properties. *Journal of Colloid Interface Science*, 442, 1-7.
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. 1996. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letter*, 77(18), 3865-3868.
- Pustelny, T., Procek, M., Maciak, E., Stolarczyk, A., Drewniak, S., Urbańczyk, M., Setkiewicz, M., Gut, K., & Opilski, Z. 2012. Gas Sensors Based on Nanostructures of Semiconductors ZnO and TiO₂. *Bulletin of the Polish Academy of Sciences Technical Sciences*, 60(4), 853-959.
- Reddy, K.M., Reddy, C.V.G. & Manorama, S.V. 2001. Preparation, Characterization, and Spectral Studies on Nanocrystalline Anatase-TiO₂. *Journal of Solid State Chemistry*, 158, 180-186.
- Rubio-Ponce, A., Conde-Gallardo, A. & Olguín, D. 2008. First-Principles Study of Anatase and Rutile TiO₂ Doped with Eu Ions: A Comparison of GGA and LDA+U Calculations. *Physical Review B*, 78, 035107-1- 035107-8.
- Tan, B., & Wu, Y. 2006. Dye-Sensitized Solar Cells Based on Anatase TiO₂ Nanoparticle/ C nanowire Composites. *Journal of Physical Chemistry B*, 110, 15932-15938.
- Tang H., Prasad K., Sanjinès R., Schmidt P. E., & Lévy F. 1994. Electrical and Optical Properties of TiO₂ Anatase Thin Films. *Journal of Applied Physics*, 75, 2042-2047.
- Team SCM, 2014. ADF-Band version 2014.10, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands. <http://www.scm.com>
- Thuy, N.M., Van, D.Q., & Hai, L.T.H., 2012. The Visible Light Activity of the TiO₂ and TiO₂:V⁴⁺ Photocatalyst. *Nanomaterial and Nanotechnology*, 2, 1-8.
- Tian, B., Li, C., & Zhang, J. 2012. One Step Preparation, Characterization and Visible-Light Photo-Catalytic Activity of Cr-Doped TiO₂ with Anatase and Rutile Bicrystalline Phases. *Chemical Engineering Journal*, 191, 402-409.
- Verdier, T., Coutand, M., Bertron, A., & Roques, C. 2014. Antibacterial Activity of TiO₂ Photocatalyst Alone or in Coatings on *E. Coli*: the Influence of Methodological Aspects. *Coatings*, 4, 670-686.
- Wu, X.Y., Liao, B., Liang, H. Zhang, X. & Liu, A.D. 2011. Theoritic and Experimental Studies on Titania Nanotube Doped with Ag Metal Ions. *Chinese Journal of Structural Chemistry*, 30(9), 1332-1340.
- Xu, T. H., Song C. L., Liu, Y., & Han, G. R. 2006. Band Structures of TiO₂ Doped with N, C and B. *Journal of Zhejiang University Science B*, 7(4), 299-303.

- Zhang, D. R., Liu, H. N., Han, S. Y., & Piao, W. X., 2013. Synthesis of Sc- and V-Doped TiO₂ Nano-Particles and Photodegradation of Rhodamine-B. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 19, 1838-1844.
- Zhang, J., Wu, B., Huang, L., Liu, P., Wang, X., Lu, Z., Xu, G., Zhang, E., Wang, H., Kong, Z., Xi, J., & Ji, Z. 2016. Anatase Nano-TiO₂ With Exposed Curved Surface for High Photocatalytic Activity. *Journal of Alloys and Compounds*, 661, 441-447.
- Zhao, K., Wu, Z., Tang, R., & Jiang, Y. 2013. Preparation of Highly Visible-Light Photocatalytic Active N-Doped TiO₂ Microcuboids. *Journal of Korean Chemical Society*, 57(4), 489-492.
- Zhao, Y., Li, C., Liu, X., Gu, F., Jiang, H., Shao, W., Zhang, L. & He, Y. 2007. Synthesis and Optical Properties of TiO₂ Nanoparticles. *Materials Letters*, 61, 79-83.
- Zhou, X. 2013. Electronic Structure Primary Principle Based on Anatase Phase TiO₂. *International Journal of Advancements in Computing Technology*, 5(9), 230-237.