

**PENGARUH *BIAXIAL* DAN *UNIAXIAL STRAIN* PADA
STRUKTUR ELEKTRONIK TiO₂ ANATASE: KAJIAN
KOMPUTASI MENGGUNAKAN *DENSITY*
*FUNCTIONAL THEORY***

TUGAS AKHIR

Diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh derajat Sarjana S1
Program Studi Fisika



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

Diajukan oleh

Farahdina Zain

19106020045

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
UIN SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA**

2023

LEMBAR PENGESAHAN



KEMENTERIAN AGAMA
UNIVERSITAS ISLAM NEGERI SUNAN KALIJAGA
FAKULTAS SAINS DAN TEKNOLOGI
Jl. Marsda Adisucipto Telp. (0274) 540971 Fax. (0274) 519739 Yogyakarta 55281

PENGESAHAN TUGAS AKHIR

Nomor : B-1444/Un.02/DST/PP.00.9/06/2023

Tugas Akhir dengan judul : Pengaruh Biaxial dan Uniaxial Strain pada Struktur Elektronik TiO₂ Anatase: Kajian Komputasi Menggunakan Density Functional Theory

yang dipersiapkan dan disusun oleh:

Nama : FARAHDINA ZAIN
Nomor Induk Mahasiswa : 19106020045
Telah diujikan pada : Kamis, 25 Mei 2023
Nilai ujian Tugas Akhir : A

dinyatakan telah diterima oleh Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

TIM UJIAN TUGAS AKHIR



Ketua Sidang
Sholihun, M.Sc.D.Sc.
SIGNED

Valid ID: 64828b9ed916



Penguji I
Dr. Nita Handayani, S.Si, M.Si
SIGNED

Valid ID: 648013ee10e68



Penguji II
Cecilia Yanuarief, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 648003524779a



Yogyakarta, 25 Mei 2023
UIN Sunan Kalijaga
Dekan Fakultas Sains dan Teknologi
Dr. Dra. Hj. Khurul Wardati, M.Si.
SIGNED

Valid ID: 6483d7d14416d

SURAT PERNYATAAN KEASLIAN

Saya yang bertanda tangan di bawah ini:

Nama : Farahdina Zain
NIM : 19106020045
Program Studi : Fisika
Fakultas : Sains dan Teknologi

Menyatakan bahwa skripsi saya yang berjudul “Pengaruh *Biaxial* dan *Uniaxial Strain* pada Struktur Elektronik TiO₂ Anatase: Kajian Komputasi Menggunakan *Density Functional Theory*” merupakan hasil penelitian saya sendiri, tidak terdapat karya yang pernah diajukan untuk memperoleh gelar kesarjanaan di suatu perguruan tinggi, dan sepanjang pengetahuan saya tidak terdapat karya atau pendapat yang pernah ditulis atau diterbitkan orang lain kecuali yang secara tertulis diacu dalam naskah ini dan disebutkan dalam daftar pustaka.

Yogyakarta, 17 Mei 2023

Penulis



Farahdina Zain
NIM. 19106020045

HALAMAN PERSETUJUAN SKRIPSI



Universitas Islam Negeri Sunan Kalijaga



FM-UINSK-BM-05-03/R0

SURAT PERSETUJUAN SKRIPSI/TUGAS AKHIR

Hal : Persetujuan skripsi

Lamp : -

Kepada

Yth. Dekan Fakultas Sains dan Teknologi

UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta

di Yogyakarta

Assalamu'alaikum wr. wb.

Setelah membaca, meneliti, memberikan petunjuk dan mengoreksi serta mengadakan perbaikan seperlunya, maka kami selaku pembimbing berpendapat bahwa skripsi Saudara:

Nama : FARAHDINA ZAIN
NIM : 19106020045
Judul Skripsi : Pengaruh *Biaxial* dan *Uniaxial Strain* pada Struktur Elektronik TiO₂ Anatase: Kajian Komputasi Menggunakan *Density Functional Theory*

sudah dapat diajukan kembali kepada Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Strata Satu dalam bidang Fisika.

Dengan ini kami mengharap agar skripsi/tugas akhir Saudara tersebut di atas dapat segera dimunaqsyahkan. Atas perhatiannya kami ucapkan terima kasih.

Wassalamu'alaikum wr. wb.

Yogyakarta, 17 Mei 2023

Pembimbing II

Pembimbing I

D. Widayanti, S.Si., M.Si.
NIP. 19760526 200604 2 005

Sholihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc
NIP. 111198405201205101

**PENGARUH *BIAXIAL* DAN *UNIAXIAL STRAIN* PADA STRUKTUR
ELEKTRONIK TiO₂ ANATASE: KAJIAN KOMPUTASI
MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Farahdina Zain
19106020045

INTISARI

Telah dilakukan kajian komputasi tentang pengaruh *biaxial* dan *uniaxial strain* terhadap struktur geometri dan struktur elektronik TiO₂ anatase. Penelitian ini bertujuan untuk melakukan optimasi geometri, pemodelan struktur kristal teroptimasi, dan perhitungan struktur elektronik dari TiO₂ anatase dengan variasi *biaxial* dan *uniaxial strain*. Metode yang digunakan pada penelitian ini adalah *Density Functional Theory* dengan fungsi *exchange-correlation generalized gradient approximation* (GGA) berbasis Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dan tipe *pseudopotensial Ultrasoft*. Tahapan penelitian terdiri dari konstruksi unit sel 12 atom, optimasi konstanta kisi dengan *fitting* BM-EOS, pemberian *biaxial* dan *uniaxial strain* dengan variasi 4%, -4%, 8%, -8%, 12%, -12%, 16% dan -16%, serta perhitungan struktur elektronik untuk setiap variasi *strain*. Hasil yang didapatkan dari penelitian ini menunjukkan bahwa perubahan terjadi pada struktur kristal dan struktur elektronik TiO₂ anatase akibat *strain*. Pemberian *strain* pada struktur kristal TiO₂ anatase memperlihatkan bahwa ketika kisi kristal mengalami *strain*, atom-atom dalam kisi tersebut akan bergerak untuk mengatasi deformasi. Jika regangan melebihi kemampuan material untuk mengatasi deformasi, ikatan antar atom dapat putus dan menyebabkan pembentukan cacat kristal. Hasil pemberian *biaxial tensile strain* 16% pada unit sel TiO₂ anatase menunjukkan ikatan yang putus dan dapat mengganggu kestabilan geometri material. *Biaxial* dan *uniaxial strain* terbukti dapat mengubah nilai energi celah pita, jika dibandingkan dengan sistem murni yang memiliki energi celah pita sebesar 1,704 eV. Pemberian *biaxial compressive strain* (-4%, -12%, -16%) cenderung memperbesar energi celah pita dan *biaxial tensile strain* (4%, 12%, 16%) memperkecil energi celah pita. Sedangkan pada *uniaxial strain*, kecenderungan tersebut terbalik. Struktur pita dari semua sistem unit sel TiO₂ anatase pada penelitian ini menunjukkan karakteristik *indirect band gap*.

Kata kunci: *Density Functional Theory*, TiO₂ anatase, *Biaxial strain*, *Uniaxial strain*, Struktur elektronik

***EFFECT OF BIAXIAL AND UNIAXIAL STRAIN ON ELECTRONIC
STRUCTURE OF TiO₂ ANATASE: COMPUTATIONAL STUDY USING
DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

Farahdina Zain
19106020045

ABSTRACT

A computational study has been done on the effect of biaxial and uniaxial strains on the geometric structure and electronic structure of anatase TiO₂. This study aims to perform geometry optimization, optimized crystal structure modeling, and calculation of the electronic structure of anatase TiO₂ with biaxial and uniaxial strain variations. The method used in this study is Density Functional Theory with an exchange-correlation generalized gradient approximation (GGA) function based on Perdew-Burke Ernzerhof (PBE) and Ultrasoft pseudopotential types. The research stages consisted of constructing a 12-atom unit cell, optimizing lattice constants with BM-EOS fittings, and administering biaxial and uniaxial strains with variations of 4%, -4%, 8%, -8%, 12, -12%, 16% and -16%, as well as the calculation of the electronic structure for each strain variation. The results obtained from this study indicate that changes occur in the crystal structure and electronic structure of anatase TiO₂ due to strain. Applying strain to the anatase TiO₂ crystal structure shows that when the crystal lattice is strained, the atoms in the lattice will move to overcome the deformation. If the strain exceeds the material's ability to cope with the deformation, the bonds between atoms can break and lead to the formation of crystal defects. The results of giving a 16% biaxial tensile strain to the anatase TiO₂ unit cell show broken bonds and can disrupt the stability of the material geometry. Biaxial and uniaxial strains are proven to change the band gap energy value when compared to a pure system with a band gap energy of 1.704 eV. Biaxial compressive strain (-4%, -12%, -16%) tends to increase band gap energy, and biaxial tensile strain (4%, 12%, 16%) reduces band gap energy. Whereas in uniaxial strains, the tendency is reversed. This study's band structure of all anatase TiO₂ unit cell systems show indirect band gap characteristics.

Keywords: *Density Functional Theory, TiO₂ anatase, Biaxial strain, Uniaxial strain, Electronic structure*

MOTTO

مَنْ جَدَّ وَجَدَ

“Barangsiapa yang bersungguh-sungguh, pasti akan berhasil”

-Pepatah Arab-

“It turns out that adversity and failure are actually useful and even necessary for developing strong-minded and successful adults.”

-Mark Manson-



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

HALAMAN PERSEMBAHAN

Karya ini penulis persembahkan untuk kedua orang tua tercinta

Mama Ulfah Rosyidah dan Ayah Zainul Abas



STATE ISLAMIC UNIVERSITY
SUNAN KALIJAGA
YOGYAKARTA

KATA PENGANTAR

Puji syukur penulis ucapkan kepada Allah SWT atas limpahan rahmat dan karunia-Nya sehingga tugas akhir ini dapat terselesaikan dengan baik. Skripsi atau tugas akhir merupakan syarat wajib yang harus dipenuhi mahasiswa Program Studi Fisika Fakultas Sains dan Teknologi UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta untuk menyelesaikan strata S1.

Tugas akhir ini dapat terlaksana karena dukungan berbagai pihak. Maka dari itu, penulis menyampaikan ucapan terima kasih yang sebesar-besarnya kepada semua pihak yang telah membantu dalam penelitian tugas akhir termasuk penyusunan laporan ini, di antaranya kepada:

1. Ibu Anis Yuniati, S. Si., M. Si., Ph. D., selaku Ketua Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, yang telah memberikan izin pelaksanaan skripsi ini.
2. Bapak Sholihun, S.Si., M. Sc., Ph.D.Sc., selaku dosen pembimbing pertama, yang senantiasa memberikan pengarahan dan bimbingan penuh dalam pelaksanaan penelitian skripsi.
3. Ibu Dr. Widayanti, S. Si., M.Si. selaku dosen pembimbing kedua, atas segala arahan dalam pelaksanaan penelitian dan penyusunan laporan skripsi.
4. Bapak Dr. Thaqibul Fikri Niyartama, S.Si., M.Si., selaku dosen pembimbing akademik yang telah memberikan arahan dan dukungan dalam pelaksanaan tugas akhir.
5. Seluruh dosen Fisika UIN Sunan Kalijaga Yogyakarta, yang telah mengarahkan dan membantu penguasaan dasar-dasar materi Fisika, sehingga

dapat menyusun laporan penelitian tugas akhir dengan baik.

6. Keluarga tercinta (Mama, Ayah, Hana dan Nabil) atas cinta, doa, dan dukungannya tanpa henti, sehingga penulis dapat menjalani segala proses pendidikan dengan baik.
7. Seluruh rekan di *Computational Nanomaterials Research Grup* UGM, termasuk Vina, Mba Nurul, Mba Malika, Mas Harmon, Bu Hida, Anggita dan Abdur yang telah banyak membantu dalam proses penelitian skripsi.
8. *Partner* terbaik, M. Faqih Ulinuha, atas semangat, dukungan, dan keikhlasan menemani penulis menuntaskan pendidikan S1.
9. Teman-teman Fisika UIN Sunan Kalijaga angkatan 2019 dan teman-teman lainnya yang tidak dapat disebutkan satu-persatu, atas semangat dan dukungan yang luar biasa dalam seluruh rangkaian pelaksanaan tugas akhir.

Demikian pengantar ini dibuat. Penulis menyadari masih terdapat banyak kekurangan dalam penyusunan laporan tugas akhir ini. Maka dari itu, penulis mengharapkan adanya saran dan kritik membangun untuk pengembangan penelitian di masa yang akan datang. Semoga laporan ini dapat bermanfaat bagi penulis dan pembaca pada umumnya.

Yogyakarta, 15 Mei 2023

Penulis

Farahdina Zain

DAFTAR ISI

HALAMAN JUDUL	i
LEMBAR PENGESAHAN	ii
SURAT PERNYATAAN KEASLIAN	iii
HALAMAN PERSETUJUAN SKRIPSI.....	iv
INTISARI	v
ABSTRACT	vi
MOTTO	vii
HALAMAN PERSEMBAHAN	viii
KATA PENGANTAR.....	ix
DAFTAR ISI.....	xi
DAFTAR TABEL	xiii
DAFTAR GAMBAR.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN.....	1
1.1. Latar Belakang.....	1
1.2. Rumusan Masalah.....	6
1.3. Tujuan Penelitian.....	6
1.4. Batasan Masalah	6
1.5. Manfaat Penelitian.....	7
BAB II TINJAUAN PUSTAKA.....	8
2.1. Studi Pustaka	8
2.2. Landasan Teori	11
2.2.1. Titanium Dioxida (TiO ₂).....	11
2.2.2. Sistem Banyak Partikel	13
2.2.3. <i>Density Functional Theory</i> (DFT)	18
2.2.4. Potensial <i>Exchange-Correlation</i>	20
2.2.5. <i>Pseudopotensial</i>	22
2.2.6. <i>Self-Consistent Field</i>	24
2.2.7. Struktur Kristal.....	26
2.2.8. <i>Strain</i>	28
2.2.9. Wawasan Keislaman	29

BAB III METODOLOGI PENELITIAN	31
3.1. Waktu dan Tempat Penelitian.....	31
3.1.1. Waktu Penelitian	31
3.1.2. Tempat Penelitian	31
3.2. Sarana Penelitian	31
3.3. Prosedur Penelitian	32
3.3.1. Konstruksi Unit Sel.....	33
3.3.2. Optimasi Konstanta Kisi	35
3.3.3. Pemberian <i>Biaxial</i> dan <i>Uniaxial Strain</i>	37
3.3.4. Perhitungan Struktur Elektronik	38
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN	41
4.1. Hasil Penelitian.....	41
4.1.1. Optimasi Konstanta Kisi	41
4.1.2. Struktur Kristal Teroptimasi, Jarak Antar Atom dan Sudut Ikatan TiO ₂ Anatase dengan Variasi <i>Biaxial</i> dan <i>Uniaxial</i> <i>Strain</i>	42
4.1.3. Struktur Pita, Rapat Keadaan, dan Energi Celah Pita TiO ₂ Anatase dengan Variasi <i>Biaxial</i> dan <i>Uniaxial Strain</i>	47
4.2. Pembahasan	56
4.2.1. Analisis Hasil Optimasi Konstanta Kisi.....	56
4.2.2. Analisis Struktur Kristal Teroptimasi, Jarak Antar Atom dan Sudut Ikatan TiO ₂ Anatase dengan Variasi <i>Biaxial</i> dan <i>Uniaxial Strain</i>	59
4.2.3. Analisis Struktur Pita, Rapat Keadaan (DOS), dan Energi Celah Pita TiO ₂ Anatase dengan Variasi <i>Biaxial</i> dan <i>Uniaxial</i> <i>Strain</i>	64
BAB V PENUTUP	71
5.1. Kesimpulan.....	71
5.2. Saran	72
DAFTAR PUSTAKA	73
LAMPIRAN.....	77

DAFTAR TABEL

Tabel 3.1 Spesifikasi HPC.....	32
Tabel 3.2 Sarana Perangkat Lunak yang digunakan	32
Tabel 3.3 Koordinat atom TiO ₂ anatase	34
Tabel 4.1 Data hasil optimasi konstanta kisi <i>a</i> dan <i>c</i>	42
Tabel 4.2 Jarak antar atom (<i>D1</i> dan <i>D2</i>) dan sudut ikatan (θ_1 , θ_2 , dan θ_3) TiO ₂ anatase dengan <i>biaxial strain</i>	46
Tabel 4.3 Jarak antar atom (<i>D1</i> dan <i>D2</i>) dan sudut ikatan (θ_1 , θ_2 , dan θ_3) TiO ₂ anatase dengan <i>uniaxial strain</i>	46
Tabel 4.4 Energi celah pita TiO ₂ anatase dengan <i>biaxial strain</i>	56
Tabel 4.5 Energi celah pita TiO ₂ anatase dengan <i>uniaxial strain</i>	56

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2.1	Struktur kristal TiO ₂ anatase (b) Vektor kisi TiO ₂ anatase.....	12
Gambar 2.2	Skema <i>Self Consistent Field</i>	25
Gambar 2.3	K-point pada zona Brillouin	28
Gambar 3.1	Diagram Alir Penelitian.....	33
Gambar 3.2	Ilustrasi pemberian strain (a) <i>Biaxial Strain</i> (b) <i>Uniaxial Strain</i>	38
Gambar 3.3	Rute Brillouin Zone pada TiO ₂ Anatase	39
Gambar 4.1	Grafik hasil optimasi kisi dengan metode <i>fitting</i> Birch-Murnaghan <i>Equation of State</i> (BMEOS <i>fitting</i>) dan polinomial orde 2 (polinomial <i>fitting</i>) (a) optimasi kisi <i>a</i> (b) optimasi kisi <i>c</i>	42
Gambar 4.2	Struktur kristal teroptimasi unit sel TiO ₂ anatase murni	43
Gambar 4.3	Struktur kristal teroptimasi unit sel TiO ₂ anatase dengan <i>biaxial strain</i> (a) -16%; (b) -12%; (c) -8%; (d) -4%; (e) 4%; (f) 8%; (g) 12%; (h) 16%.....	44
Gambar 4.4	Struktur kristal teroptimasi unit sel TiO ₂ anatase dengan <i>uniaxial strain</i> (a) -16%; (b) -12%; (c) -8%; (d) -4%; (e) 4%; (f) 8%; (g) 12%; (h) 16%.....	45
Gambar 4.5	Skema ikatan pada struktur kristal TiO ₂ anatase	45
Gambar 4.6	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase murni.....	47
Gambar 4.7	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> -16% (b) <i>uniaxial strain</i> -16%.....	48
Gambar 4.8	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> -12% (b) <i>uniaxial strain</i> -12%.....	49
Gambar 4.9	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> -8% (b) <i>uniaxial strain</i> -8%.....	50
Gambar 4.10	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> -4% (b) <i>uniaxial strain</i> -4%.....	51
Gambar 4.11	Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> 4% (b) <i>uniaxial strain</i> 4%	52

Gambar 4.12 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> 8% (b) <i>uniaxial strain</i> 8%	53
Gambar 4.13 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> 12% (b) <i>uniaxial strain</i> 12%	54
Gambar 4.14 Struktur pita dan rapat keadaan (DOS) TiO ₂ anatase dengan (a) <i>biaxial strain</i> 16% (b) <i>uniaxial strain</i> 16%	55
Gambar 4.15 Hasil konstruksi geometri unit sel TiO ₂ anatase.....	57
Gambar 4.16 CBM, VBM, dan energi celah pita pada struktur pita TiO ₂ anatase murni	65
Gambar 4.17 Contoh Puncak-Puncak DOS pada TiO ₂ anatase murni.....	69

BAB I

PENDAHULUAN

1.1. Latar Belakang

Pencemaran air telah menjadi salah satu masalah serius beberapa tahun belakangan ini. Menurut data Badan Pusat Statistik (BPS), sepanjang 2021 terdapat 10.683 desa/kelurahan di Indonesia yang mengalami pencemaran air, dengan Jawa Tengah sebagai provinsi penyumbang pencemaran air terbesar (Databoks, 2022). Di antara banyak jenis pencemaran air, limbah rumah tangga dan limbah industri merupakan sumber pencemaran air yang paling banyak ditemui. Menurut Kodoatie dan Sugiyanto (2002), rumah tangga menyumbang sekitar 60% terhadap pencemaran sungai. Contohnya adalah pencemaran air limbah rumah tangga yang terjadi di 3 sungai besar di Yogyakarta, yaitu Sungai Gajah Wong, Sungai Code, dan Sungai Winongo. Penelitian Widagda dkk (2020), menunjukkan bahwa pencemaran *E.Coli* pada ketiga sungai tersebut cenderung tinggi dan sudah jauh dari ambang batas yang telah ditetapkan. Selain mengancam kelangsungan hidup biota di sepanjang aliran sungai, limbah rumah tangga yang mencemari sungai juga sangat berbahaya bagi kesehatan manusia. Masyarakat yang kerap memanfaatkan sumber air tersebut berpotensi terjangkit berbagai macam penyakit, mulai dari penyakit kulit, hingga potensi penyakit kanker.

Berbagai metode telah dilakukan untuk mengatasi pencemaran limbah cair seperti elektro dialisis, filtrasi membran, presipitasi, adsorpsi pada karbon aktif, dan reduksi elektrokimia. Namun, kebanyakan metode tersebut membutuhkan energi dan biaya yang besar, serta memiliki proses yang rumit, sehingga dirasa kurang ekonomis (Ren dkk., 2021). Salah satu metode yang

dikenal ramah lingkungan dan juga terjangkau adalah degradasi fotokatalis. Kajian tentang fotokatalis mulai dikenal sejak 1972, ketika Akira Fujishima dan Kenichi Honda berhasil menemukan bahwa fotolisis elektrokimia pada air dapat terjadi ketika elektroda TiO_2 yang disinari dengan sinar ultraviolet, dihubungkan secara elektrik ke elektroda platina (Fujishima & Honda, 1972). Melalui penelitian ini, mereka menemukan metode untuk melakukan produksi hidrogen dari sumber yang bersih dan hemat biaya.

TiO_2 adalah salah satu oksida logam yang cukup menjanjikan untuk diaplikasikan pada degradasi limbah karena bersifat ramah lingkungan, memiliki stabilitas yang tinggi, kemampuannya yang baik sebagai pembawa muatan, serta memiliki struktur elektronik yang unik (Pedanekar dkk., 2020). Selain itu, TiO_2 merupakan semikonduktor yang cukup mudah ditemukan di alam karena jumlahnya yang melimpah, murah, serta bersifat *non-toxic*. Sintesis TiO_2 yang tergolong cukup terjangkau juga membuat material ini menguntungkan secara ekonomi, terutama jika dibandingkan dengan bahan yang memiliki sifat serupa, seperti SnO_2 , CeO_2 , CdS , dan WO_3 (Kavaliunas dkk., 2020).

Berdasarkan strukturnya, TiO_2 terbagi menjadi 3 fase, yaitu anatase, rutil dan brookite (Munirah dkk., 2018). Baik anatase dan rutil memiliki struktur tetragonal, sedangkan brookite memiliki struktur ortorombik. Secara termodinamika, rutil merupakan fase yang paling stabil. Namun, anatase merupakan fase yang paling banyak diaplikasikan sebagai fotokatalis. Berbagai riset yang telah dilakukan, menunjukkan bahwa anatase memiliki aktivitas

fotokatalis yang lebih baik dari rutil dan brookite. Seperti penelitian Scalfani dan Herrmann (1996), yang menunjukkan bahwa TiO₂ fase anatase dapat menyerap radikal bebas lebih baik dibandingkan fase rutil. Permukaan partikel anatase TiO₂ diketahui memiliki kemampuan penyerapan terhadap molekul organik yang cukup tinggi daripada dua fase TiO₂ lainnya (Kavaliunas dkk., 2020). Pada penelitian lain, ditemukan pula bahwa dalam ukuran besar atau *bulk*, anatase (001) menunjukkan sekitar dua kali lipat aktivitas dekomposisi fotokatalis pada molekul organik daripada rutil (101) dalam kondisi identik (Luttrell dkk., 2014). Hal tersebut menunjukkan bahwa TiO₂ anatase memiliki potensi yang besar untuk dikaji dan dikembangkan lebih jauh.

Sayangnya, aktivitas fotokatalis TiO₂ anatase murni masih kurang efisien. Aktivitas fotokatalis suatu material erat kaitannya dengan sifat elektronik dari material tersebut, seperti energi celah pita dan struktur pita. Mekanisme reaksi fotokatalis pada TiO₂ terjadi ketika material disinari dengan spektrum sinar UV dengan energi dari sinar ini (foton) dapat membuat elektron (e⁻) di keadaan dasar (pita valensi) tereksitasi ke tingkat energi yang lebih tinggi (pita konduksi) dan meninggalkan *hole* (h⁺) di pita valensi (Izzah, 2020). Supaya mekanisme tersebut dapat terjadi, energi foton yang datang harus lebih besar atau sama dengan energi celah pita dari material fotokatalis. TiO₂ anatase memiliki energi celah pita yang relatif besar, yaitu 3.2 eV yang hanya mampu bereaksi pada spektrum sinar UV dengan panjang gelombang 388 nm (Kumar & Pandey, 2017). Nilai celah pita yang relatif lebar ini menyebabkan penggunaan radiasi sinar matahari pada anatase TiO₂ tergolong masih sangat

minim (3–4%), sehingga berpengaruh terhadap kemampuan fotokatalis yang kurang efisien (Janczarek & Kowalska, 2021). Para peneliti telah melakukan banyak kajian untuk meningkatkan kinerja fotokatalis TiO₂ agar dapat bekerja dalam rentang sinar tampak (*visible light*), salah satunya adalah pemberian *strain effect*.

Pemberian *strain* atau regangan pada bahan semikonduktor diketahui dapat memengaruhi sifat fisis dan kinerja dari semikonduktor tersebut, seperti konduktivitas, reaktivitas, struktur elektronik, kemagnetan, dan sifat feroelektrik (Pang, 2020). Berbagai penelitian telah dilakukan untuk membuktikan bahwa *strain effect* dapat menyebabkan perubahan struktur elektronik dan energi celah pita dari bahan semikonduktor, seperti TiO₂. Penelitian yang dilakukan oleh Pandey (2022) menunjukkan bahwa penambahan regangan (*strain*) dapat membuat jarak celah pita energi berkurang pada sampel bubuk TiO₂, dan lebih berkurang lagi pada sampel pelet. Celah pita energi pada semikonduktor bergantung pada perubahan volume, yang dapat diinduksi oleh perubahan suhu atau adanya gaya eksternal. Pengurangan celah pita akibat pemberian *strain effect* ini diharapkan dapat meningkatkan efisiensi konversi matahari pada proses foto katalisis (Thulin & Guerra, 2008).

Selain dikaji secara eksperimen, TiO₂ juga dapat diteliti secara komputasi untuk dapat memprediksi sifat-sifat fisis dari material tersebut. *Density Functional Theory* (DFT) merupakan salah satu metode komputasi yang sering digunakan untuk memodelkan material termasuk menghitung struktur elektronik dari suatu material. DFT tergolong cukup efisien karena

biaya komputasi yang diperlukan relatif rendah, dan dapat dilakukan pada komputer yang relatif kecil. Selain itu, DFT juga mampu diaplikasikan pada hampir semua jenis sistem atom, mulai dari molekul hingga sistem material yang kompleks. Struktur elektronik (*band structure & DOS*) yang berhasil dihitung menggunakan DFT dapat memberikan informasi terkait energi celah pita dan karakteristik celah pita dari TiO₂ anatase.

Perhitungan struktur elektronik umumnya dilakukan dalam keadaan energi minimum (*ground state energy*). Hal tersebut karena struktur dengan energi minimum akan merepresentasikan konfigurasi geometri yang paling stabil dan mendekati keadaan alami material (Sholl & Steckel, 2009). Dalam DFT, keadaan energi minimum dapat tercapai dengan melakukan optimasi struktur kristal. Proses optimasi struktur melibatkan penyesuaian posisi atom dalam sistem untuk mencapai titik minimum dalam potensial energi. Optimasi struktur sangat penting dilakukan pada penelitian ini karena struktur yang tepat dapat memengaruhi sifat elektronik material yang dikaji, yaitu TiO₂ anatase.

Penelitian ini diharapkan dapat memperluas wawasan mengenai sifat elektronik TiO₂ anatase yang dipengaruhi oleh *strain*, karena pembahasan mengenai topik ini umumnya belum banyak dipelajari secara mendalam. Selain memaparkan pengaruh *strain* pada struktur elektronik, penelitian ini juga membahas mengenai pengaruh *strain* terhadap struktur geometri TiO₂ anatase yang masih jarang dilakukan pada penelitian-penelitian sebelumnya (Alfaruqi, 2021) (Thulin & Guerra, 2008). Kajian struktur geometri TiO₂ anatase pada

penelitian ini mencakup struktur kristal, jarak antar atom, dan sudut ikatan atom.

1.2. Rumusan Masalah

Dari latar belakang tersebut, dapat dirumuskan beberapa rumusan masalah berikut:

1. Bagaimana mengoptimasi struktur geometri TiO₂ anatase?
2. Bagaimana memodelkan struktur kristal teroptimasi TiO₂ anatase dengan variasi *biaxial* dan *uniaxial strain*?
3. Bagaimana menghitung struktur elektronik TiO₂ anatase dengan variasi *biaxial* dan *uniaxial strain*?

1.3. Tujuan Penelitian

Tujuan dari penelitian ini antara lain:

1. Melakukan optimasi geometri untuk mendapatkan struktur kristal TiO₂ anatase.
2. Menganalisis struktur kristal teroptimasi TiO₂ anatase dengan variasi *biaxial* dan *uniaxial strain*.
3. Melakukan perhitungan tingkat energi elektron untuk konstruksi struktur elektronik TiO₂ anatase dengan variasi *biaxial* dan *uniaxial strain*.

1.4. Batasan Masalah

Batasan masalah pada penelitian ini antara lain:

1. Penelitian ini fokus pada kajian komputasi struktur elektronik TiO₂ fase anatase.

2. Fungsi *exchange-correlation* yang digunakan adalah *generalized gradient approximation* (GGA) berbasis Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dengan tipe *pseudopotensial Ultrasoft*.
3. Perhitungan DFT dilakukan menggunakan basis set berupa gelombang bidang (*plane wave*) dengan energi *cutoff* sebesar 30 Ry dan *k-point* $4 \times 4 \times 4$.
4. Metode *fitting* yang digunakan dalam optimasi konstanta kisi adalah Birch Murnaghan *Equation of States* (BM-EOS).

1.5. Manfaat Penelitian

Manfaat yang akan didapat dari penelitian ini antara lain:

1. Penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi yang dibutuhkan dalam penelitian terkait material TiO₂ anatase
2. Hasil penelitian ini diharapkan dapat berkontribusi dalam kajian fotokatalis material berbasis TiO₂.

BAB V

PENUTUP

5.1. Kesimpulan

Berdasarkan hasil dan analisis yang dipaparkan pada Bab IV, diperoleh beberapa kesimpulan sebagai berikut.

1. Hasil optimasi geometri TiO₂ anatase berupa konstanta kisi a dan c optimum didapatkan sebesar 3.815 Å dan 9.593 Å.
2. Semua sistem dengan variasi *strain* kecuali *biaxial tensile strain* 16% diketahui memiliki struktur kristal teroptimasi yang hampir serupa dengan sistem murni. Sistem *biaxial tensile strain* 16%, menunjukkan jarak antara atom Ti dan O yang memanjang sehingga menyebabkan ada ikatan yang putus sehingga pemberian variasi ini akan mengganggu kestabilan geometri dari material dan tidak direkomendasikan untuk penelitian selanjutnya. Struktur kristal teroptimasi juga memberikan informasi *bond length* dan *bond angle* untuk sistem murni TiO₂ anatase, yaitu D_1 , D_2 , θ_1 , θ_2 dan θ_3 berturut-turut sebesar 1.9932 Å, 1.95 Å, 78.0119°, 101.9883°, dan 92.4729° serta perubahan nilai *bond length* dan *bond angle* tersebut yang bergantung pada variasi *strain* yang diberikan.
3. Perhitungan struktur elektronik berupa struktur pita, rapat keadaan (DOS), dan energi celah pita energi menunjukkan bahwa tidak ada variasi *biaxial strain* yang memiliki nilai energi celah pita yang lebih kecil dari sistem murni, sehingga pemberian *biaxial strain* dapat dikatakan tidak efektif diterapkan dalam peningkatan kemampuan fotokatalis material. Hasil berbeda ditunjukkan oleh sistem *uniaxial strain* khususnya jenis

compressive yang berpotensi lebih baik dalam meningkatkan sifat fotokatalis TiO₂ daripada *biaxial strain*. *Uniaxial compressive strain* variasi -16% memberikan penurunan energi celah pita paling signifikan dibandingkan variasi lainnya. Struktur pita dari semua sistem unit sel TiO₂ anatase pada penelitian ini menunjukkan karakteristik *indirect band gap* karena CBM dan VBM terletak pada *k-point* yang berbeda.

5.2. Saran

Penelitian ini menunjukkan bagaimana *strain* mempengaruhi struktur elektronik material TiO₂ anatase. Pengembangan penelitian tentang TiO₂ anatase perlu dilakukan untuk memahami lebih dalam terkait struktur elektronik material ini. Salah satu pengembangan yang dapat dilakukan adalah mengkaji terkait pengaruh impuritas terhadap struktur geometri dan struktur elektronik TiO₂ anatase.

DAFTAR PUSTAKA

- Alfaruqi, M. H. (2021). Studi Teoritis Sifat Struktur Dan Elektronik Material Titanium Dioksida Dengan Kalkulasi Teori Fungsional Kerapatan. *Hexagon Jurnal Teknik dan Sains*, 2(1), Art. 1. <https://doi.org/10.36761/hexagon.v2i1.876>
- Bagariang, H. S. (2020). *Formasi Sistem Silicon Carbide (3c-Sic) dengan Pengotor Strontium (Sr): Komputasi Berbasis DFT (Density Functional Theory)* [Universitas Gadjah Mada]. <http://etd.repository.ugm.ac.id/penelitian/detail/194258>
- Baghbadorani, M. K. (2015). *Theoretical Investigation of Luminescent Defects in Diamond*. University of Bremen.
- Birch, F. (1947). Finite Elastic Strain of Cubic Crystals. *Physical Review*, 71(11), 809–824. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.71.809>
- Callister, W. D., Jr., & Rethwisch, D. G. (2010). *Material Science and Engineering: An Introduction* (Eight Edition). John Wiley & Sons, Inc.
- Carp, O., Huisman, C. L., & Reller, A. (2004). Photoinduced reactivity of titanium dioxide. *Progress in Solid State Chemistry*, 32(1), 33–177. <https://doi.org/10.1016/j.progsolidstchem.2004.08.001>
- Databoks. (2022). *Pencemaran Air Terjadi di 10 Ribu Desa/Kelurahan Indonesia*. <https://databoks.katadata.co.id/datapublish/2022/03/24/pencemaran-air-terjadi-di-10-ribu-desakelurahan-indonesia>
- Dia, T. (2017). *Interaksi Stronsium (Sr) dengan Sic Berstruktur Honeycomb: Komputasi Berbasis Kuantum* [Universitas Gadjah Mada]. <http://etd.repository.ugm.ac.id/penelitian/detail/114376>
- Fujishima, A., & Honda, K. (1972). Electrochemical Photolysis of Water at a Semiconductor Electrode. *Nature*, 238(5358), Art. 5358. <https://doi.org/10.1038/238037a0>
- Hartree, D. R. (1928). The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field. Part I. Theory and Methods. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 24(1), 89–110. <https://doi.org/10.1017/S0305004100011919>

- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Elektron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864–B871. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Izzah, N. (2020). Siringmakar 28: “Pengaplikasian Material Fotokatalis pada Aspek Lingkungan, Prospek dan Tantangan.” *Warung Sains Teknologi*. <https://warstek.com/siringmakar-28-pengaplikasian-material-fotokatalis-pada-aspek-lingkungan-prospek-dan-tantangan/>
- Janczarek, M., & Kowalska, E. (2021). Defective Dopant-Free TiO₂ as an Efficient Visible Light-Active Photocatalyst. *Catalysts*, 11(8), Art. 8. <https://doi.org/10.3390/catal11080978>
- Kavaliunas, V., Krugly, E., Sriubas, M., Mimura, H., Laukaitis, G., & Hatanaka, Y. (2020). Influence of Mg, Cu, and Ni Dopants on Amorphous TiO₂ Thin Films Photocatalytic Activity. *Materials*, 13(4), Art. 4. <https://doi.org/10.3390/ma13040886>
- Kementerian Agama RI. (2011). *Al Qur'an dan Tafsirnya: Vol. Jilid 5*. Kementerian Agama.
- Kittel, C. (2005). *Infroduction to Solid State Physics* (Eight Edition). John Wiley & Sons, Inc.
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Physical Review*, 140(4A), A1133–A1138. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Kumar, A., & Pandey, G. (2017). A review on the factors affecting the photocatalytic degradation of hazardous materials. *Material Science & Engineering International Journal*, Volume 1(Issue 3). <https://doi.org/10.15406/mseij.2017.01.00018>
- Leckie, F. A., & Bello, D. J. D. (2009). Strain and Stress. Dalam D. J. Bello & F. A. Leckie (Ed.), *Strength and Stiffness of Engineering Systems* (hlm. 1–40). Springer US. https://doi.org/10.1007/978-0-387-49474-6_3
- Luttrell, T., Halpegamage, S., Tao, J., Kramer, A., Sutter, E., & Batzill, M. (2014). Why is anatase a better photocatalyst than rutile? - Model studies on epitaxial TiO₂ films. *Scientific Reports*, 4(1), Art. 1. <https://doi.org/10.1038/srep04043>
- Mehl, M. J., Hicks, D., Toher, C., Levy, O., Hanson, R. M., Hart, G., & Curtarolo, S. (2017). The AFLOW Library of Crystallographic Prototypes: Part 1.

Computational Materials Science, 136, S1–S828.
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2017.01.017>

- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13(12), 5188–5192.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Munirah, S., Rani, R. A., Asib, N. A. M., Robaiah, M., Khusaimi, Z., Abdullah, S., Hamzah, F., Alrokayan, S., Khan, H., & Rusop, M. (2018). A Study on the Atomic Topography of Nanostructured TiO₂ Thin Films: Effect of Annealing. *2018 IEEE International Conference on Semiconductor Electronics (ICSE)*, 160–163.
<https://doi.org/10.1109/SMELEC.2018.8481326>
- Muscat, J., Swamy, V., & Harrison, N. M. (2002). First-principles calculations of the phase stability of $\{\mathrm{TiO}\}_{2}$. *Physical Review B*, 65(22), 224112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.65.224112>
- Pandey, S., Shukla, A., & Tripathi, A. (2022). Effect of pressure on electrical and optical properties of metal doped TiO₂. *Optical Materials*, 133, 112875.
<https://doi.org/10.1016/j.optmat.2022.112875>
- Pang, C. L. (2020). Strain and stress effects on single crystal-supported titania and related nanostructures. *Semiconductor Science and Technology*, 35(11), 113001. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/ab9faa>
- Parr, R. G. (1980). Density Functional Theory of Atoms and Molecules. Dalam K. Fukui & B. Pullman (Ed.), *Horizons of Quantum Chemistry* (hlm. 5–15). Springer Netherlands. https://doi.org/10.1007/978-94-009-9027-2_2
- Pedanekar, R. S., Shaikh, S. K., & Rajpure, K. Y. (2020). Thin film photocatalysis for environmental remediation: A status review. *Current Applied Physics*, 20(8), 931–952. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2020.04.006>
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865–3868.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Rahman, I. A., & Purqon, A. (2015). Studi Density Functional Theory (DFT) dan Aplikasinya Pada Perhitungan Struktur Elektronik Monolayer MoS₂. *PROSIDING SKF 2015*, 497–503.

- Ren, G., Han, H., Wang, Y., Liu, S., Zhao, J., Meng, X., & Li, Z. (2021). Recent Advances of Photocatalytic Application in Water Treatment: A Review. *Nanomaterials*, *11*(7), Art. 7. <https://doi.org/10.3390/nano11071804>
- Sclafani, A., & Herrmann, J. M. (1996). Comparison of the Photoelektronic and Photocatalytic Activities of Various Anatase and Rutile Forms of Titania in Pure Liquid Organic Phases and in Aqueous Solutions. *The Journal of Physical Chemistry*, *100*(32), 13655–13661. <https://doi.org/10.1021/jp9533584>
- Sholihun. (2015). *First-principles Calculations of Vacancies in Semiconductors* [Kanazawa University]. <https://core.ac.uk/download/pdf/196734529.pdf>
- Sholihun, Saito, M., Ohno, T., & Yamasaki, T. (2015). Density-functional-theory-based calculations of formation energy and concentration of the silicon monovacancy. *Japanese Journal of Applied Physics*, *54*(4), 041301. <https://doi.org/10.7567/JJAP.54.041301>
- Sholl, D. S., & Steckel, J. A. (2009). *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. John Wiley & Sons, Inc.
- Thulin, L., & Guerra, J. (2008). Calculations of strain-modified anatase TiO₂ band structures. *Physical Review B*, *77*(19), 195112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.195112>
- Zettili, N. (2009). *Quantum Mechanics: Concepts and Applications* (2nd ed). Wiley.