

## Studi Komputasi Sifat Elektronik dan Sifat Optik Fotoelektroda Titanium Dioksida ( $\text{TiO}_2$ ) pada Fasa Anatase dan Rutile

Elvan Yuniarti<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup>Program Studi Fisika, Fakultas Sains dan Teknologi, Universitas Islam Negeri Syarif Hidayatullah Jakarta, Jalan. Ir. H. Djuanda No.95, Cempaka Putih, Ciputat, Kota Tangerang Selatan, Banten 15412, Indonesia

<sup>†</sup>[elvan.yuniarti@uinjkt.ac.id](mailto:elvan.yuniarti@uinjkt.ac.id)

**Abstrak.** Penelitian ini menitikberatkan pada fotoelektroda Titanium Dioxide ( $\text{TiO}_2$ ) sebagai piranti pada *Dye Sensitized Solar Cell (DSSC)*. Penelitian ini bertujuan mengetahui perbedaan karakteristik fasa anatase dan rutile. Beberapa hal yang diteliti antara lain: struktur kristal, struktur pita, densitas keadaan, sifat optik fotoelektroda  $\text{TiO}_2$ . Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah komputasi dengan menggunakan teori DFT dan software quantum espresso. Hasil yang diperoleh struktur geometri  $\text{TiO}_2$  unit sel  $\text{TiO}_2$  memiliki bentuk optimal untuk model  $\text{TiO}_2$  antase murni memiliki parameter  $a=b$  3.785 amstrong,  $c=9.514$  amstrong,  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 1.966 amstrong. Fasa ini memiliki tipe kisi triklinik dengan space group P1(1) memiliki unit volume 136,2991  $\text{A}^3$ . Fasa rutile memiliki parameter  $a=b=4.5593$  amstrong dengan  $c=2.958$  amstrong dengan  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 2.77 amstrong. Fasa ini memiliki tipe kisi Triklinik dengan space group P1(1) dengan unit volume 52.4233  $\text{A}^3$ . Pada  $\text{TiO}_2$  fasa anatase memiliki sifat tidak langsung yaitu kordinat M dan  $\Gamma$ . Berdasarkan perhitungan besar bandgab yang diperoleh sebesar 3.2 eV. Hal ini sesuai dengan data eksperimen. Bandgap fotoelektroda harus lebih besar dibandingkan energi minimum yang diperlukan untuk reaksi redoks dari dye. Sedangkan karakteristik bandgap mempengaruhi nilai koefisien absorpsi terhadap cahaya dan laju rekombinasi elektron-hole. Bahan dengan celah pita langsung memiliki koefisien absorpsi yang tinggi tetapi dengan laju rekombinasi yang tinggi Hal ini sangat mempengaruhi nilai efisiensi DSSC. Sedangkan  $\text{TiO}_2$  fasa Rutile memiliki sifat langsung memiliki band gab perhitungan sebesar 3.5 eV untuk energi potensial hubard  $U+7$ . Nilai ini mendekati data eksperimen.

**Kata Kunci:** Anatase, DFT energi gap, rutile, titanium oksida

**Abstract.** This research focuses on photoelectric Titanium Dioxide ( $\text{TiO}_2$ ) as a tool for Sensitive Solar Cell Dyes (DSSC). Anatase and rutile phase. some of the things studied were: crystal structure, band structure, structural structure, photoelectric optical properties of  $\text{TiO}_2$ . The method used in this study is a calculation using the DFT theory and quantum espresso software. The  $\text{TiO}_2$  cell unit has the optimal shape for the pure antase  $\text{TiO}_2$  model which has a parameter  $a = b$  3.785 units,  $c = 9.514$  units,  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . The average T-O bond length is 1,966 barrels. This phase has a triclinic lattice type with group space P1 (1) which has a volume unit of 136.2991  $\text{A}^3$ . The Rutile phase has a parameter  $a = b = 4.5593$  with  $c = 2,958$  stars with  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ . The average T-O bond length is 2.77 barrels. This phase has a Triclinic lattice type with a space group P1 (1) with a volume unit of 52.44233  $\text{A}^3$ . The anatase phase of  $\text{TiO}_2$  has indirect characteristics, namely M and  $\Gamma$ . coordinate. Based on the calculation of the large bandgap obtained at 3.2 eV. This is in accordance with the data experiment. The energy of the band tape must be greater than the minimum energy needed for the redox reaction in the dye. While the characteristics of the ribbon emphasize the value of the absorption coefficient in light and the rate of electron recombination. Materials with direct band gab have high combination coefficients but with high combination levels. This greatly influences the DSSC efficiency value.  $\text{TiO}_2$  Rutile phase has a direct property of 3.5 eV for potential Hubbard energy  $U + 7$ . This value is closed to the experiment result.

**Keywords:** Anatase, DFT energy gab, rutile, titanium oxide

### PENDAHULUAN

Penelitian tentang fotoelektroda sebagai salah satu komponen piranti dari Dye Sensitizer Solar cell (DSSC) sangat penting dilakukan guna meningkatkan nilai efisiensi solar sel. Penelitian ini mengkaji fotoelektroda Titanium Dioksida ( $\text{TiO}_2$ ) secara komputasi. Penelitian ini bertujuan untuk mmengetahui sifat elektronik dan sifat optik, karakteristik struktur Kristal fotoelektroda

TiO<sub>2</sub> untuk fasa berbeda: Fasa rutil dan fasa anatase. Mengukur *band structure* ,*density of state* dan sifat-sifat optik pada fotoelektroda TiO<sub>2</sub> untuk fasa rutil dan fasa anatase. Setelah itu dibandingkan dengan hasil eksperimen. Penelitian ini memiliki perbedaan dari penelitian sebelumnya adalah perhitungan energi gab menggunakan metode koreksi menggunakan faktor Hubbard yang belum banyak dikerjakan..Hasil eksperimen yang telah dikaji adalah sebagai berikut:

### Fotoelektroda Titanium Dioksida (TiO<sub>2</sub>)

Penelitian ini memakai bahan semikonduktor TiO<sub>2</sub> sebagai fotoelektroda. Adapun fasa yang akan digunakan adalah fasa anatase dan fasa rutil. Analisis hasil XRD untuk fasa rutil dan anatase menunjukkan bahwa fasa anatase berada pada puncak-puncak pada bidang hkl : 101, 004, 112, 200, 211, 204, 301. Sedangkan fasa rutil berada di puncak bidang hkl :110 dan 200[1].

### Fasa- Fasa yang Terbentuk Pada Lapisan TiO<sub>2</sub>

Material TiO<sub>2</sub> banyak digunakan sebagai bahan solar sel memiliki tiga fasa yaitu anatase, rutil dan brokit. Material ini memiliki daya oksidatif yang tinggi terhadap fotokorosi, murah, mudah didapat dan tidak beracun. Material TiO<sub>2</sub> yang diharapkan memiliki permukaan yang luas agar dapat menyerap dye sehingga dapat meningkatkan arus keluaran sel surya. Permukaan yang luas diperoleh dengan membentuk bahan dalam bentuk lapisan tipis. Metode Pembuatan dapat dengan cara dip coating dan electrodeposisi. Metode dip coating berhasil membuat fasa anatase yang dipanaskan pada suhu 100°C, 300°C dan 500°C.

Pada eksperimen untuk electrodeposisi lapisan tipis TiO<sub>2</sub> diatas substrat ITO (indium Tin Oxide) dengan menggunakan elektrolit TiCl<sub>4</sub> (Titanium IV) klorida) dan katalis H<sub>3</sub>BO<sub>3</sub> berada pada fasa rutil dan Anatase. Pengujian dengan spektroskopi UV Vis diperoleh data band gap lapisan TiO<sub>2</sub> secara eksperimen. Besar band gab untuk fasa anatase 3.25 eV dan untuk fasa rutil memiliki energi band gab sebesar 3.70 eV [2].

### Teori Fungsional Kerapatan

Teori Fungsional Kerapatan (DFT) merupakan metode untuk memecahkan persamaan Schrodinger sistem yang kompleks. DFT dikembangkan berdasarkan teorema Hohenberg-Kohn dan persamaan Kohn-Sham (Hohenberg dan Kohn, 1964, Kohn dan Sham, 1965). Persamaan Schrodinger untuk sistem elektron banyak yang saling berinteraksi dinyatakan oleh persamaan (2.1) berikut:

$$\hat{H}\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N) = E\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N). \quad (1)$$

Dengan E adalah energi sistem, dan  $\Psi(r_1\sigma_1, r_2\sigma_2, \dots, r_N\sigma_N)$  adalah fungsi gelombang elektron dengan  $r_i$  dan  $\sigma_i$  masing-masing adalah koordinat ruang dan spin untuk elektron ke-i. Dalam pendekatan Born-Openheimer, Hamiltonian sistem didefinisikan oleh persamaan (2) berikut:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} + \sum_i v(\mathbf{r}_i). \quad (2)$$

### DFT+U

Salah satu model yang digunakan untuk menjelaskan sistem dengan korelasi kuat adalah model Hubbard. Hamiltonian model Hubbard dalam bentuk kuantisasi kedua dinyatakan sebagai berikut:

$$H_{\text{hub}} = t \sum_{i,j,\sigma} (c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma} + hc) + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \quad (3)$$

Dengan indeks i dan j menyatakan situs atom, sedangkan  $c_{i,\sigma}^+$ ,  $c_{j,\sigma}$  dan  $n_{i,\sigma}$  masing-masing adalah operator kreasi elektron pada situs i dengan spin  $\sigma$ , operator anihilasi elektron pada situs j dengan spin  $\sigma$ , dan operator jumlah (number operator) elektron i dengan spin  $\sigma$ . DFT+U adalah

metode untuk melakukan koreksi terhadap akurasi DFT dalam mendeskripsikan keadaan ground state sistem berkorelasi kuat dengan penambahan suku Hubbard [3].

## METODE PENELITIAN

### Alat dan Bahan

Alat yang digunakan dalam penelitian ini adalah *personal computer*, *software avogadro* dan *software quantum espresso*

### Metode Komputasi

Tahapan penelitian ini dilakukan dengan mendesain model struktur geometri TiO simulasi menggunakan teori fungsional Kerapatan (DFT). Metode perhitungan dengan teori DFT dapat memperoleh gambaran *band structure*, *densitas of state* (DOS) serta sifat optik dari fotoelektroda TiO<sub>2</sub> untuk dua fasa anatase dan rutile. Pada penelitian ini akan dikaji sifat dasar fotoelektroda TiO<sub>2</sub> meliputi sifat elektronik dan optik dari struktur bulk (padatan) dan permukaan TiO<sub>2</sub> secara ab initio. Model geometri TiO<sub>2</sub> terdiri atas unit sel TiO<sub>2</sub> triklinik. Unit sel triklinik terdiri atas 4 satuan rumus (*formula unit*) TiO<sub>2</sub> dengan parameter kisi  $a = b$  dan  $c$  yang berbeda. Dengan  $\alpha\beta\gamma=90^\circ$  Unit sel modifikasi adalah unit sel yang dibuat untuk mendapatkan orientasi bidang bujur sangkar TiO<sub>2</sub> pada kristal TiO agar cenderung sejajar dengan bidang xy dari supercell seperti ditunjukkan pada gambar. Unit sel modifikasi ini digunakan untuk mendapatkan DOS parsial dari orbital-orbital atom Ti dan O dengan orientasi yang tepat pada koordinat xyz cluster TiO<sub>2</sub>. Metode perhitungan DOS, PDOS, LDOS, Struktur Pita dengan metode DFT.

## HASIL DAN PEMBAHASAN

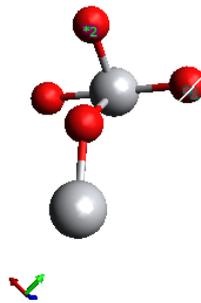
### Analisis Geometri Fasa Anatase dan Rutile pada TiO<sub>2</sub>

Anatase memiliki struktur kristal tetragonal dengan space group  $I_{411}$  and (141)[4]. Hasil yang diperoleh dapat dilihat pada **Gambar 1** yang menunjukkan setiap unit sel TiO<sub>2</sub> memiliki bentuk optimal untuk TiO<sub>2</sub> fasa anastase murni. Berdasarkan model TiO<sub>2</sub> antase murni memiliki parameter  $a=b$  3.785 amstrong dengan  $c=9.514$  amstrong dengan  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 1.966 amstrong. Memiliki tipe kisi Triklinik dengan space group P1(1) dengan unit volume 136,2991 A<sup>3</sup>.



**Gambar 1.** Unit Sel TiO<sub>2</sub> Fasa Anatase

Hasil yang diperoleh untuk struktur geometri TiO<sub>2</sub> fasa rutile dapat dilihat pada **Gambar 2**. Setiap unit sel TiO<sub>2</sub> fasa rutil pada model TiO<sub>2</sub> rutile murni memiliki parameter  $a=b=$  4.5593 amstrong dengan  $c=2.958$  amstrong dengan  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 2.77 amstrong. Memiliki tipe kisi Triklinik dengan space group P1(1) dengan unit volume 52.4233 A<sup>3</sup>.



**Gambar 2.** Unit Sel  $\text{TiO}_2$  Fasa Rutile

### Sifat Elektronik DOS Pada $\text{TiO}_2$ Fasa Anatase dan Fasa Rutile

Hasil perhitungan energi celah pita dengan menggunakan DOS pada  $\text{TiO}_2$  fasa Anatase dapat dilihat pada **Tabel 1**. Hasilnya memiliki nilai yang mendekati data eksperimen pada energi potensial Hubbard  $U+3\text{eV}$  sebesar  $3.07\text{eV}$  pada celah pita atom O dan untuk atom Ti pada energi potensial Hubbard  $U+7$   $2.97\text{eV}$ . Nilai tersebut masih terlalu kecil untuk celah pita  $\text{TiO}_2$  fasa anatase eksperimen sebesar  $3.2\text{ eV}$ .

**Tabel 1.** Hasil Perhitungan celah pita Ti dan O pada  $\text{TiO}_2$  Fasa Anatase

Energi Potensial Hubbard	Ti (Energi Celah Pita eV)	O (Energi Celah Pita eV)	Energi Fermi
U 0eV	2.27	3.06	7.3391
U+3 eV	2.36	3.07	7.5338
U+5 eV	2.52	3.42	7.6782
U+7 eV	2.97	3.77	7.8298

Dari **Tabel 2** dibawah ini menentukan energi celah pita pada fasa rutile untuk atom-atom Ti dan O untuk orbital d dan p diperoleh hasil bahwa nilai energi celah pita yang paling tinggi berdasarkan DOS sebesar  $2.8\text{ eV}$  untuk  $U+7$  pada atom Ti. Nilai ini lebih kecil dari eksperimen. Sedangkan celah pita pada atom O sebesar  $3.3\text{ eV}$  nilainya mendekati nilai eksperimen yang telah dilakukan[5].

**Tabel 2.** Hasil DOS untuk celah pita Ti dan O pada  $\text{TiO}_2$  Fasa Rutile

Energi Potensial Hubbard	Ti (Energi Celah Pita eV)	O (energi Celah Pita eV)	Energi Fermi
U 0eV	1.96	2.36	8.94
U+3 eV	2.551	2.66	9.14
U+5 eV	2.5113	2.913	9.29
U+7 eV	2.88	3.37	9.42

### Analisis Sifat Elektronik untuk Struktur Pita pada $\text{TiO}_2$ Fasa Anatase dan Fasa Rutile

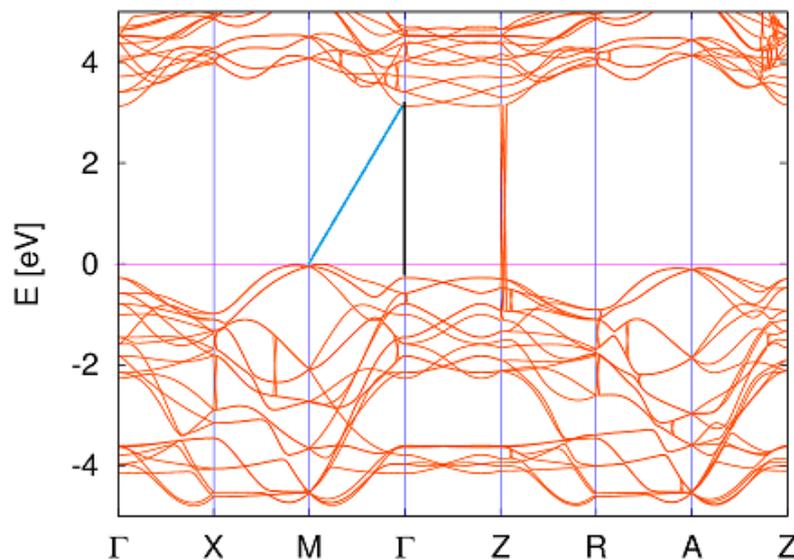
#### Analisis Struktur Pita pada $\text{TiO}_2$ Fasa Anatase

Pada perhitungan DFT+U diperoleh celah pita  $\text{TiO}_2$  fasa anatase bersifat tak-langsung (*indirect bandgap*). Terlihat pada **Tabel 3** di bawah ini menunjukkan celah pita terpendek terbentuk antara koordinat M dan  $\Gamma$  dengan besar celah sebesar  $2\text{ eV}$ . Nilai bandgap dan karakteristik bandgap akan mempengaruhi kinerja  $\text{TiO}_2$  sebagai fotokatalis. Pada  $\text{TiO}_2$  fasa anatase sifat langsung (*direct bandgap*) dapat dilihat besar celah terpendek antara satu kordinat yaitu ordinat M. Besar celah langsung sebesar  $2.1\text{ eV}$ . Nilai celah langsung lebih besar dari celah tak langsung. Hal tersebut menunjukkan  $\text{TiO}_2$  fasa anatase untuk nilai Hubart  $U\text{ 0eV}$  bersifat tak langsung. Bandgap fotokatalis harus lebih besar dibandingkan energi minimum yang diperlukan untuk reaksi redoks dari dye. Sedangkan karakteristik bandgap mempengaruhi nilai koefisien absorpsi terhadap cahaya dan laju rekombinasi elektron-hole. Bahan dengan celah pita langsung

memiliki koefisien absorpsi yang tinggi tetapi dengan laju rekombinasi yang tinggi, sedangkan bahan dengan celah pita tak langsung umumnya memiliki koefisien absorpsi yang lebih rendah dengan nilai laju rekombinasi yang rendah pula. Energi Struktur celah pita pada fasa  $\text{TiO}_2$  sebesar 3.2 eV. Hal ini sesuai dengan hasil [6].

**Tabel 3.** Energi Struktur Celah Pita Pada  $\text{TiO}_2$  Fasa Anatase

	Sifat	koordinat	Energi struktur pita
<b>U0eV</b>	Tidak Langsung	M dan $\Gamma$	<b>2.0 eV</b>
<b>U+3eV</b>	Tidak Langsung	M dan $\Gamma$	<b>2.5 eV</b>
<b>U+5eV</b>	Tidak Langsung	M dan $\Gamma$	<b>2.7 eV</b>
<b>U+7eV</b>	Tidak Langsung	M dan $\Gamma$	<b>3.2 eV</b>



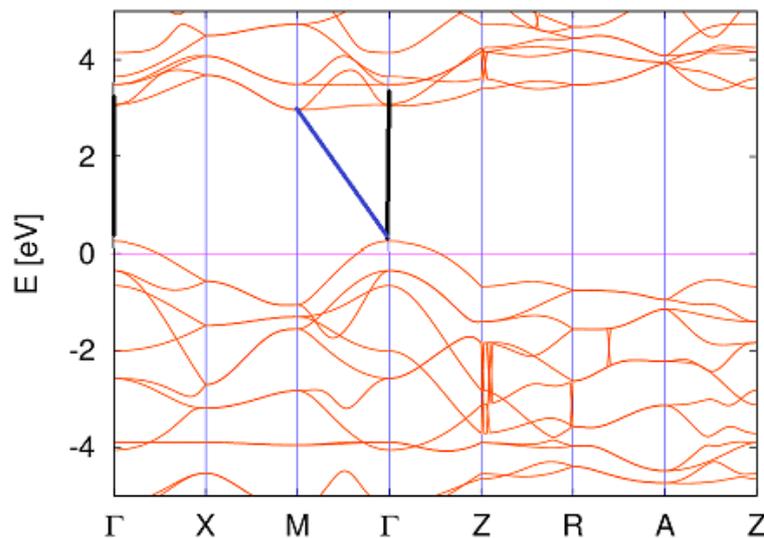
**Gambar 3.** Struktur Pita Elektronik  $\text{TiO}_2$  Fasa Anatase U+7eV

### Struktur Pita pada $\text{TiO}_2$ Fasa Rutile

Pada perhitungan DFT+U diperoleh celah pita  $\text{TiO}_2$  fasa rutile bersifat tak-langsung (*indirect bandgap*). Terlihat pada **Tabel 4** di bawah ini menunjukkan celah pita terpendek terbentuk antara koordinat X dan  $\Gamma$  dengan besar celah antara -0.5 eV dengan 2 eV. Nilai bandgap dan karakteristik bandgap akan mempengaruhi kinerja  $\text{TiO}_2$  sebagai fotokatalis. Pada  $\text{TiO}_2$  fasa rutile sifat langsung (*direct bandgap*) dapat dilihat besar celah terpendek antara satu kordinat yaitu kordinat  $\Gamma$  dengan kordinat  $\Gamma$ . Besar celah langsung antara 0.3 eV dengan 2 eV. Nilai celah tidak langsung lebih besar dari celah langsung. Hal tersebut menunjukkan  $\text{TiO}_2$  fasa rutil untuk nilai Hubart U 0eV bersifat langsung. Bandgap fotokatalis harus lebih besar dibandingkan energi minimum yang diperlukan untuk reaksi redoks dari dye. Sedangkan karakteristik bandgap mempengaruhi nilai koefisien absorpsi terhadap cahaya dan laju rekombinasi elektron-hole. Bahan dengan celah pita tak langsung memiliki koefisien absorpsi yang tinggi tetapi dengan laju rekombinasi yang tinggi, sedangkan bahan dengan celah pita langsung umumnya memiliki koefisien absorpsi yang lebih rendah dengan nilai laju rekombinasi yang rendah pula.

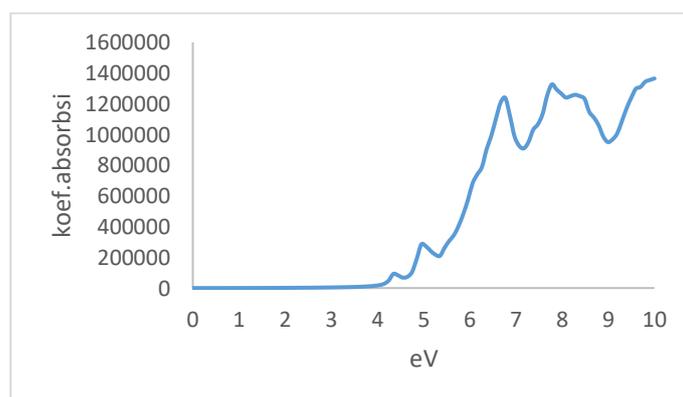
**Tabel 4.** Energi struktur celah pita pada TiO<sub>2</sub> fasa rutile

	Sifat	Koordinat	Energi Struktur Pita
U+0eV	Langsung	$\Gamma$ dan $\Gamma$	1.8 eV
U+3eV	Langsung	$\Gamma$ dan $\Gamma$	2.0 eV
U+5eV	Langsung	$\Gamma$ dan $\Gamma$	2.8 eV
U+6eV	Langsung	$\Gamma$ dan $\Gamma$	2.9 eV
U+7eV	Langsung	$\Gamma$ dan $\Gamma$	3.5 eV

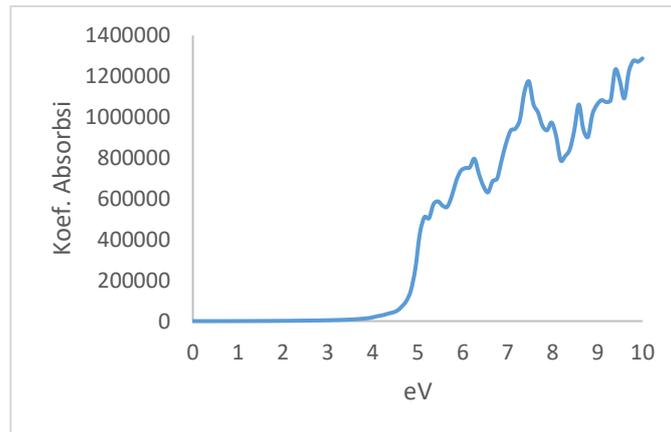
**Gambar 4.** Struktur Pita pada TiO<sub>2</sub> dengan Fasa Rutile untuk U+7eV

#### Analisis Sifat Optik TiO<sub>2</sub> untuk Fasa Anastase dan Fasa Rutile Nilai Koefisien Absorpsi TiO<sub>2</sub> Fasa Anatase dan Fasa Rutil

Hasil perhitungan koefisien absorpsi TiO<sub>2</sub> sebagai fungsi energy dapat dilihat pada **Gambar 5**. Koefisien absorpsi menunjukkan jumlah foton yang diserap bahan per cm kedalaman absorpsi, sedangkan kedalaman absorpsi menunjukkan jarak absorpsi cahaya dalam bahan sehingga 64% dari intensitas cahaya yang masuk diserap. Koefisien absorpsi meningkat untuk energi foton lebih besar dari 4.1 eV Koefisien absorpsi terletak pada 7.17 eV dan 8.99 eV yang memiliki koefisien absorpsi sebesar 909546 dan 950280.

**Gambar 5** Hubungan Energi Band Gap dengan Koefisien Absorpsi TiO<sub>2</sub> Fasa Anatase

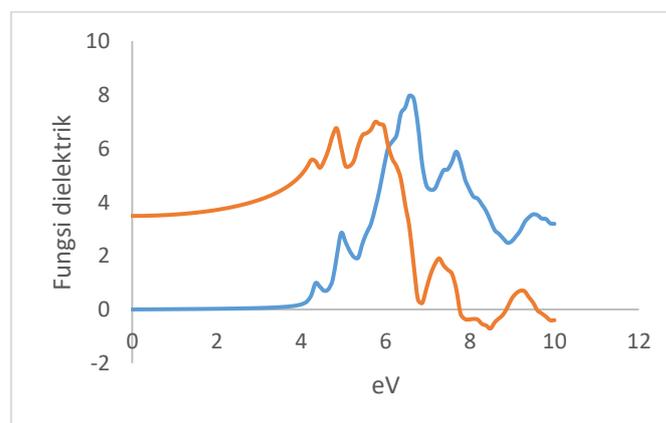
Koefisien absorpsi meningkat untuk energi foton lebih besar dari 4.1 eV. Pada TiO<sub>2</sub> fasa rutil koefisien absorpsi maksimum terletak pada 6.56 eV dan 8.18 eV yang memiliki koefisien absorpsi sebesar 631549 dan 787925 dapat dilihat pada **Gambar 6**.



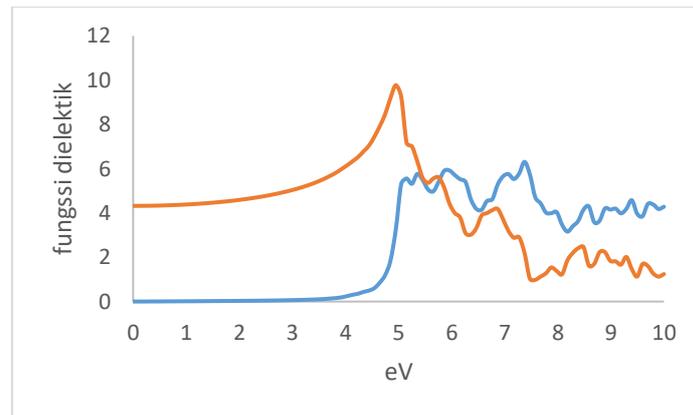
**Gambar 6.** Hubungan Energi Band Gap dengan Koefisien Absorpsi TiO<sub>2</sub> Fasa Rutile

### Fungsi Dielektrik TiO<sub>2</sub> untuk Fasa Anatase dan Fasa Rutile

Perhitungan fungsi dielektrik yang terdiri atas suku dispersive  $\epsilon_1(\omega)$  (suku riil) dan suku absorptive  $\epsilon_2(\omega)$  (suku imajiner), dihitung nilai index bias (n) and koefisien ekstingsi (k) dari TiO<sub>2</sub> fasa anatase maupun fasa rutile. TiO<sub>2</sub> fasa anatase untuk suku real terlihat pada **Gambar 7** dan **Gambar 8** di bawah ini yang berwarna merah, Sedangkan warna biru menunjukkan hasil perhitungan suku imajiner fungsi dielektrik ( $\epsilon_2(\omega)$ ). Dari data tersebut terlihat bahwa untuk suku real atau kemampuan dispersif TiO<sub>2</sub> fasa anatase dan rutile memiliki perbedaan. Fasa anatase memiliki nilai dispersif maksimum pada energi 5,1 eV dan 6.86 eV. TiO<sub>2</sub> fasa anatase memiliki kemampuan absorpsi di energi 5,1 eV, 7.3 eV dan 8.9 eV terlihat pada kurva imajiner. Sedangkan TiO<sub>2</sub> Fasa rutile memiliki fungsi dielektrik riil menunjukkan kemampuan dispersif pada energi 5.5 eV, 6.3 eV dan 7.3eV. Sedangkan fungsi dielektrik imajiner menentukan kemampuan penyerapan pada energi 6.5eV, 8.1 eV dan 8.5 eV.

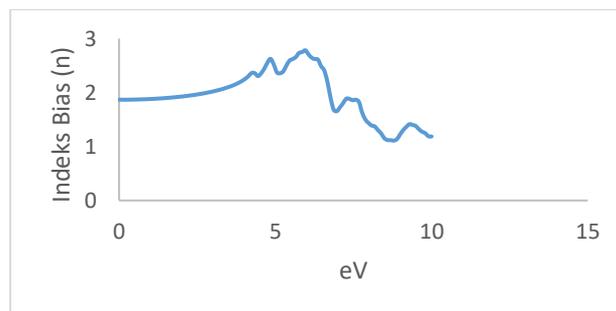


**Gambar 7.** Hubungan Energi Band Gap dengan Fungsi dielektrik TiO<sub>2</sub> Fasa Anatase

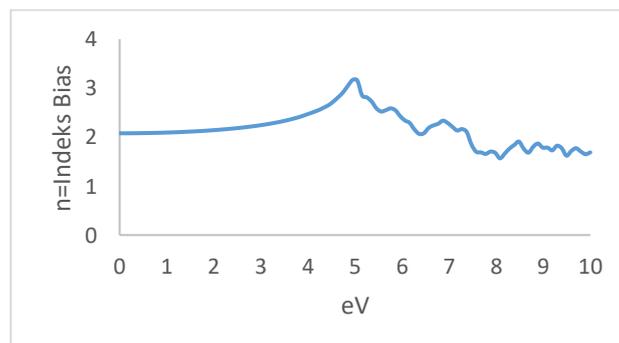


**Gambar 8.** Hubungan Energi Band Gap dengan Fungsi Dielektrik TiO<sub>2</sub> Fasa Rutile Indeks Bias TiO<sub>2</sub> untuk Fasa Anatase dan Rutile

Indeks bias maksimum pada TiO<sub>2</sub> fasa anatase diperoleh untuk puncak sebesar 2.78 pada energi 5.8eV sedangkan Indeks bias maksimum pada TiO<sub>2</sub> fasa rutile sebesar 3.1 eV dan energinya sebesar 5.1 eV dapat dilihat pada **Gambar 9** dan **Gambar 10**.



**Gambar 9.** Hubungan Energi dengan Indeks Bias TiO<sub>2</sub> Fasa Anatase



**Gambar 10.** Hubungan Energi dengan Indeks Bias TiO<sub>2</sub> Fasa Rutile

## KESIMPULAN

- 1) Karakterisasi Struktur kristal TiO<sub>2</sub> fasa anatase TiO<sub>2</sub> anatase murni memiliki parameter  $a=b=3.785$  amstrong dengan  $c=9.514$  amstrong dengan  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 1.966 amstrong. Memiliki tipe kisi Triklinik dengan space group P1(1) dengan unit volume  $136,2991 \text{ \AA}^3$ . Hasil yang diperoleh untuk struktur geometri TiO<sub>2</sub> fasa rutile dapat dilihat pada gambar dibawah ini. Setiap unit sel TiO<sub>2</sub> fasa rutile pada model TiO<sub>2</sub> rutile murni memiliki parameter  $a=b=4.5593$  amstrong dengan  $c=2.958$  amstrong dengan  $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ . Rata-rata panjang ikatan T-O sebesar 2.77 amstrong. Memiliki tipe kisi Triklinik dengan space group P1(1) dengan unit volume  $52.4233 \text{ \AA}^3$ .

- 2) Hasil perhitungan energi celah pita dengan menggunakan DOS pada  $\text{TiO}_2$  fasa Anatase memiliki nilai yang mendekati data eksperimen pada energi potensial Hubbard  $U+3\text{eV}$  sebesar  $3.07\text{eV}$  pada celah pita atom O dan untuk atom Ti pada energi potensial Hubbard  $U+7$   $2.97\text{eV}$ . Nilai tersebut masih terlalu kecil untuk celah pita  $\text{TiO}_2$  fasa anatase eksperimen sebesar  $3.2\text{ eV}$ . Sedangkan Nilai energi celah pita yang paling tinggi berdasarkan DOS sebesar  $2.8\text{ eV}$  untuk  $U+7$  pada atom Ti. Nilai ini lebih kecil dari eksperimen. Sedangkan celah pita pada atom O sebesar  $3.3\text{ eV}$  nilainya mendekati nilai eksperimen yang telah dilakukan sebesar  $3.7\text{eV}$ .
- 3) Pada  $\text{TiO}_2$  fasa anatase memiliki sifat tidak langsung yaitu kordinat M dan  $\Gamma$  dengan besar bandgap perhitungan sebesar  $3.2$  hal ini sesuai dengan data eksperimen. Bandgap fotokatalis harus lebih besar dibandingkan energi minimum yang diperlukan untuk reaksi redoks dari dye. Sedangkan karakteristik bandgap mempengaruhi nilai koefisien absorpsi terhadap cahaya dan laju rekombinasi elektron-hole. Bahan dengan celah pita langsung memiliki koefisien absorpsi yang tinggi tetapi dengan laju rekombinasi yang tinggi Hal ini sangat mempengaruhi nilai efisiensi DSSC. Sedangkan  $\text{TiO}_2$  fasa Rutile memiliki sifat langsung memiliki band gap perhitungan sebesar  $3.5\text{ eV}$  untuk energi potensial hubard  $U+7$ . Nilai ini mendekati data eksperimen.

## REFERENSI

- [1] Jyoti Divya, Mohan Davendra dan Singh, 2014, *A Performance Comparison of Dye Sensitized Solar Cells Based on Mesoporous and Nanostructured Photoanodes*, International Journal of Enhanced Research in Science Technology & Engineering, ISSN:23197463Vol. 3Issue 2, Impact Factor: 1.252, Available online at: [www.erpublications.com](http://www.erpublications.com).
- [2] Agustini S, dkk., 2013, *Fabrikasi Dye Sensitized Solar Cell(DSSC) Berdasarkan Fraksi Volume  $\text{TiO}_2$  Anatase-Rutile dengan *Garcinia mangostana* dan *Rhoeo Spathacea* sebagai Dye Fotosensitizer*, JURNAL TEKNIK POMITS Vol. 2, No. 2, ISSN: 2337-3539.
- [3] Kohn, W and Sam, L.J 1965, Self Consisten equations including exchange and correlation effect. Phys. Rev, 140(4A0:A113)
- [4] Jer Jeng Ming, Wung Yi-Lun, Be Chang Liann dan Chow Lee, 2013, *Dye-Sensitized Solar Cells with Anatase  $\text{TiO}$  Nanorods Prepared by Hydrothermal Method*, Hindawi Publishing Corporation International Journal of Photoenergy Volume, Article ID 280253, 8 pages <http://dx.doi.org/10.1155/2013/280253>.
- [5] Efendi M., 2012, *Analisis Sifat Optik Lapisan Tipis  $\text{TiO}_2$  Doping Nitrogen yang disiapkan dengan Metode Spin Coating*, Prosiding Pertemuan Ilmiah XXVI HFI Jateng dan DIY, Purworejo 14 April 2012 ISSN:0853-0823.
- [6] Mulyani O, dkk., 2014, *Sintesis Sel Surya Tersensitasi Pewarna (SSTP) Eksak Antosianin Buah Delima (*Punica Granatum*) dengan metode Sol Gel Spin Coating*, Jurnal Fisika Unand Vol.3, No.2, April 2014 ISSN 2302.