

Karakterisasi sifat optis dan aktivitas fotokatalisis nanopartikel Zn_{1-x}Ti_xO beserta kalkulasi struktur elektroniknya berdasarkan density functional theory = Optical property and photocatalytic activity characterization of Zn_{1-x}Ti_xO nanoparticle and its electronic structure calculation within density functional theory

Iwan Darmadi, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20345241&lokasi=lokal>

Abstrak

Nanopartikel Zn_(1-x)Ti_(x)O telah disintesis menggunakan metode kopresipitasi. Karakterisasi telah dilakukan untuk mengamati efek doping Ti dengan variasi konsentrasi x=5, 8, 17, dan 25% terhadap struktur, sifat optis, dan aktifitas fotokatalisis. Struktur kristal diamati menggunakan X-Ray Diffraction (XRD) menunjukkan seluruh sampel berada dalam keadaan fase tunggal yaitu wurtzite. Pergeseran puncak spektrum XRD mengindikasikan parameter kisi a dan c tersebar masing-masing di antara 3,242-3,252 angstrom dan 5,199-5,213 angstrom. Metode Debye-Scherrer menunjukkan ukuran bulir kristal meningkat monoton dari ~14-16 nm seiring bertambahnya konsentrasi dopan. Lebar celah energi nanopartikel ditentukan melalui spektrum Diffuse Reflectance Spectrum (DRS) dalam rentang UV-vis menunjukkan bahwa lebar celah energi E_g adalah 3,29; 3,36; 3,34; dan 3,32 eV masing-masing untuk sampel dengan x = 5, 8, 17, dan 25% . Aktivitas fotokatalisis diukur dibawah penyinaran sinar UV selama 60 menit menunjukkan laju fotokatalisis lebih tinggi pada sampel yang mengandung konsentrasi dopan lebih tinggi. Kalkulasi struktur elektronik dalam kerangka Density Functional Theory (DFT) juga dilakukan pada sistem Zn_(1-x)Ti_(x)O dengan variasi konsentrasi dopan x = 4%, 8%, dan 12,5%. Kalkulasi menunjukkan Zn_(1-x)Ti_(x)O bersifat metalik dengan celah energi yang meningkat monoton seiring peningkatan nilai x. Dengan demikian, kalkulasi DFT tidak menunjukkan sifat optis yang sama dengan hasil eksperimen sehingga tidak dapat menjelaskan aktivitas fotokatalisis.

.....Ti-doped ZnO nanoparticles was synthesized with coprecipitation method. Charaterization with Energy-Dispersive X-Ray spectroscopy confirmed that the four samples contains Ti as dopant with concentration 5, 8, 17, and 25%. The crystal structure of all samples are hexagonal wurtzite. Lattice parameter of the hexagonal wurtzite, a and c, varies from 3,242 to 3,525 angstrom and 5,199 to 5,213 angstrom respectively. Crystallite diameter determined with Debye-Scherrer method varies from approximately 14 to 16 nm. Furthermore, band gap of samples 5, 8, 17, and 25% are 3,29; 3,36; 3,34; and 3,32 respectively which confirm that the nanoparticles are visible light active. Photocatalytic activity investigation under UV light for 60 minutes showed that the sample 25% Ti exhibit the highest rate of photocatalytic activity, followed by sample 17, 8, and 5%. Electronic structure was calculated within Density Functional Theory (DFT). We used three models with dopant variations 4%, 8%, and 12,5%. Calculation results showed that all models are metallic. Band gap trend is blueshift as the concentration increased. Therefore, optical property calculated with DFT could not support the results of optical property in this experiment and photocatalytic activity indirectly.