

INTISARI

Oleh

DAVID BANDHASO

23/512130/PPA/06498

Penelitian ini mengkaji pengaruh ketebalan permukaan terhadap sifat struktural, elektronik, dan optik Titanium dioksida fase rutil berorientasi (001) menggunakan model *slab* dengan ketebalan 5, 7, dan 9 lapisan atom. Hasil optimasi geometri menunjukkan terjadinya relaksasi struktur pada permukaan yang ditandai oleh pemendekan panjang ikatan Ti–O dibandingkan struktur *bulk*, dengan geometri permukaan yang relatif stabil terhadap variasi ketebalan *slab*. Peningkatan ketebalan *slab* menyebabkan penurunan celah pita *indirect* yang semakin mendekati nilai *bulk* serta perubahan profil potensial satu dimensi berupa sumur potensial yang semakin lebar dan dalam, mencerminkan melemahnya efek konfinemen kuantum. Selain itu, sifat optik mengalami penguatan seiring bertambahnya ketebalan lapisan, yang ditunjukkan oleh peningkatan konduktivitas optik dan fungsi dielektrik, dengan puncak respon optik berada pada rentang energi mendekati daerah ultraviolet.

Kata Kunci : *Dielektrik, Optik, Slab, Titanium dioksida*

ABSTRACT

By

DAVID BANDHASO

23/512130/PPA/06498

This study investigates the effect of surface thickness on the structural, electronic, and optical properties of rutile-phase titanium dioxide oriented along the (001) direction using slab models with thicknesses of 5, 7, and 9 atomic layers. The geometry optimization results indicate surface structural relaxation characterized by a shortening of Ti–O bond lengths compared to the bulk structure, with the surface geometry remaining relatively stable against variations in slab thickness. Increasing slab thickness leads to a reduction in the indirect band gap toward the bulk value, as well as modifications in the one-dimensional potential profile in the form of deeper and wider potential wells, reflecting a weakening of quantum confinement effects. In addition, the optical properties are enhanced with increasing slab thickness, as evidenced by increased optical conductivity and dielectric function responses, with the optical response peaks located in the energy range close to the ultraviolet region.

Keywords: Dielectric, Optical, Slab, Titanium Dioxide



UNIVERSITAS
GADJAH MADA

Kajian Komputasional Struktur Elektronik dan Optik pada Sistem TiO₂ (001) Surface dengan Pendekatan

Density Functional Theory (DFT)

David Bandhaso, Moh. Adhib Uli Absor, S.Si., M.Sc., Ph.D.; Prof. Solihun, S.Si., M.Sc., Ph.D.Sc.

Universitas Gadjah Mada, 2025 | Diunduh dari <http://etd.repository.ugm.ac.id/>