

**INVESTIGASI PENGARUH UNSUR NONLOGAM SEBAGAI DOPAN PADA
SIFAT FOTOKATALITIK ZrTiO₄ DENGAN METODE *DENSITY
FUNCTIONAL THEORY***

**HERALDA FAWRIN
19/448753/PPA/05836**

INTISARI

Telah dilakukan investigasi pengaruh unsur nonlogam sebagai dopan pada sifat fotokatalitik ZrTiO₄. Aktivasi katalis ZrTiO₄ murni hanya dapat dilakukan dengan penyinaran UV karena energi celah pita (E_g) masih cukup lebar yaitu 3,65 eV. Doping ZrTiO₄ oleh atom nonlogam dapat mengurangi E_g sehingga material dapat menyerap foton dengan panjang gelombang yang lebih panjang (cahaya tampak). Pengaruh dopan nonlogam terhadap sifat fotokatalitik ZrTiO₄ dapat dideteksi menggunakan metode *Density Functional Theory* (DFT) dengan menggunakan koreksi *Hubbard* yang disingkat sebagai DFT+ U . Penerapan $U^{Ti3d} = 5,0$ eV dan $U^{O2p} = 2,5$ eV ke ZrTiO₄ menghasilkan sel satuan ortorombik dengan parameter kisi $a = 4,804$ Å, $b = 5,509$ Å, dan $c = 5,041$ Å. Nilai energi celah pita yang dihitung untuk ZrTiO₄ murni dengan PBEsol+ U adalah 3,60 eV. Substitusi dopan lebih mungkin terbentuk di situs O daripada di situs Zr atau Ti dalam model ZrTiO₄. Substitusi F dengan atom O dan substitusi Si dengan atom Ti atau Zr secara termodinamika lebih stabil dibandingkan yang lainnya. Panjang ikatan Ti-X dan Zr-X lebih panjang daripada panjang ikatan Ti-O saat atom dopan menggantikan salah satu atom O. Atom nonlogam dapat menurunkan E_g pada ZrTiO₄ menjadi 3,48 eV hingga 1,35 eV. Penggantian atom S di situs O, Se di situs Ti, atau S/Se di situs Zr pada ZrTiO₄ menghasilkan fotokatalis yang berpotensi untuk pemisahan air, reduksi CO₂, dan fiksasi N₂ di wilayah cahaya tampak.

Kata kunci: fotokatalis ZrTiO₄, dopan atom nonlogam, metode DFT, energi celah pita

INVESTIGATIONS OF THE INFLUENCE OF NONMETAL DOPANTS ON THE PHOTOCATALYTIC PROPERTIES OF ZrTiO₄ BY DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

HERALDA FAWRIN
19/448753/PPA/05836

ABSTRACT

An investigation has been carried out on the effect of nonmetal atoms as dopant on the photocatalytic properties of ZrTiO₄. The pristine ZrTiO₄ catalyst activation can only be carried out by UV irradiation because the band gap energy (E_g) is still quite wide that is 3.65 eV. ZrTiO₄ doping by non-metal atoms, in general, can reduce the band gap energy so that material can absorb photons with longer wavelengths (visible light). The effect of nonmetal dopant on the photocatalytic properties of ZrTiO₄ can be detected using the Density Functional Theory (DFT) method using Hubbard's correction which is abbreviated as DFT+ U . Applying $U^{Ti3d} = 5.0$ eV and $U^{O2p} = 2.5$ eV to bulk ZrTiO₄ yields an orthorhombic unit cell with the lattice parameter $a = 4.804$ Å, $b = 5.509$ Å, and $c = 5.041$ Å. The calculated bandgap for pristine ZrTiO₄ with PBEsol+ U is 3.60 eV. Substitution of dopant is more likely to form at the O site than at the Zr or Ti site in the X-doped ZrTiO₄ model. F substitution at O atom and Si substitution at Ti or Zr atom are thermodynamically favorable. Ti-X and Zr-X bond lengths are longer than Ti-O bond lengths when the dopant atom replaces one of the O atoms. Nonmetal atoms can reduce bandgap in ZrTiO₄ to 1.35-3.48 eV. Replacing S at the O site, S at the Ti site, or S/Se at the Zr site in ZrTiO₄ produce potential photocatalysts for splitting water, CO₂ reduction, and N₂ fixation in the visible light region.

Keywords: photocatalyst ZrTiO₄, nonmetal dopants, DFT method, bandgap