

Perhitungan sifat-sifat optis TiO₂:Ta berbasis density functional theory (DFT) dengan memperhitungkan hubbard U dan persamaan bethe-salpeter = Density functional theory based calculation of optical properties of anatase TiO₂:Ta incorporating hubbard U and bethe-salpeter equation

Wardatu Auliya, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20456365&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Perhitungan Density Functional Theory DFT digunakan untuk menginvestigasi sifat-sifat elektronik TiO₂ pada fase anatase, baik yang murni maupun yang di dope dengan Ta. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa TiO₂ merupakan bahan semikonduktor non ferromagnetik. Interaksi elektron-elektron diikutsertakan melalui DFT U, sehingga hasil perhitungan lebih sesuai dengan data eksperimen. Sifat-sifat optis diteliti melalui perhitungan fungsi-fungsi dielektrik tanpa dan dengan melibatkan interaksi elektron-hole melalui persamaan Bethe Salpeter. Hasil perhitungan dengan DFT U dan DFT U BSE menunjukkan adanya eksiton pada TiO₂ murni. Penambahan Ta pada TiO₂ menguatkan spektrum optis pada sekitar energy 4,3 eV dan hasil perhitungan yang telah didapat, dapat dikatakan konsisten dengan paper rujukan [Z. Yong et al]. Kata Kunci: TiO₂, anatase, DFT, elektron, hole.

<hr>

ABSTRAK

The Density Functional Theory DFT calculation is used to investigate the electronic properties of TiO₂ in the anatase phase, either pure or dope with Ta. The results show that TiO₂ is a non ferromagnetic semiconductor material. The interactions of electrons are included through DFT U, so the results of the calculations are more in line with the experimental data. The optical properties are examined through the calculation of dielectric functions without and by involving electron hole interactions via the Bethe Salpeter equation. The results of calculations with DFT U and DFT U BSE indicate the existence of an exciton in TiO₂ pure. The addition of Ta to TiO₂ amplifies the optical spectrum around 4.3 eV of energy and the calculated results can be said to be consistent with the reference paper Z. Yong et al . Keywords TiO₂, anatase, DFT, electron, hole