

Perhitungan sifat-sifat optis SRNBO3 dan SRNBO3.5 berbasis density functional theory DFT = Density functional theory DFT study optical properties of SRNBO3 dan SRNBO3.5

Aslamic Adika Futra, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20465734&lokasi=lokal>

Abstrak

ABSTRAK

Keluarga perovskite SrNbO₃ merupakan photocatalyst yang baik. Dengan penambahan oksigen yang bervariasi menyebabkan sifat-sifat optis dan transportnya berubah. Sejauh informasi yang diperoleh, belum ada penelitian yang menjelaskan sifat-sifat optis berupa grafik dalam daerah energi foton. Oleh sebab itu kami ingin memberikan perhitungan berupa grafik kurva dielektrik beserta sifat transportnya. Karena itu kami termotivasi mempelajari sifat optik dari keluarga material SrNbO₃, yaitu SrNbO₃ dan SrNbO_{3.5} dengan metode Density Functional Theory DFT. Penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa SrNbO₃ dan SrNbO_{3.5} adalah material dengan korelasi yang lemah. Dari perhitungan yang didapat, energi fermi SrNbO₃ berada di daerah conduction band yang mengindikasikan bahwa material ini bersifat metal, begitu juga pada kurva dielektrik menunjukkan sifat metal. Sementara SrNbO_{3.5} adalah material yang memiliki energi fermi berada di daerah band gapnya, dari kurva dielektriknya material SrNbO_{3.5} bersifat insulator.

<hr>

<i>ABSTRACT</i>

The perovskite family of SrNbO is a good photocatalyst. With the addition of oxygen varies causing optical properties and transport changes. As far as the information obtained, there has been no research that explains the optical properties of graphs in range of photon energy. Therefore we want to give a calculation in the form of dielectric curve graph and its transport properties. We are therefore motivated to study the optical properties of the SrNbO₃ material family, ie SrNbO₃ and SrNbO_{3.5} with the Density Functional Theory DFT method. Previous research has shown that SrNbO₃ and SrNbO_{3.5} are materials with weak correlations. From the calculations obtained, the fermi energy SrNbO₃ is in the conduction band area indicating that this material is metal. While SrNbO_{3.5} is a material that has fermi energy in the band gap region, from its dielectric curve SrNbO_{3.5} is an insulator.