A. JUDUL PENELITIAN

Analisis Energi Celah Pita dan Struktur Elektronik Perovskit Layer $NaLnTiO_4$ (Ln = Eu, Y, La, Nd) dengan Metode Pendekatan *Density Functional Theory* sebagai Kandidat Material Sel Surya dan Anti-Bakteri

B. ABSTRAK

Pemanfaatan energi matahari dalam pengembangan energi terbarukan dan antibakteri menghadapi beberapa tantangan yaitu untuk meningkatkan efisiensi dan mengurangi biaya produksi. Atas dasar hal tersebut, maka sangatlah penting pengembangan material yang berkaitan dengan pemanfaatan sinar matahari untuk diaplikasikan dalam sel surya dan antibakter tersebut. Berdasarkan hal tersebut di atas, pada penelitian ini melakukan analisis pada material perovskite layer $NaLnTiO_4$ dan turunannya $NaLnTiO_{4-x}N_x$ (Ln = Eu, Y, La, Nd) yang dinyatakan dalam tujuan berikut: (1). mengetahui pengaruh jenis atom lantanida (Ln), (2). mengetahui pengaruh penerapan berbagai metode perhitungan, dan mengetahui pengaruh pendadah (*doping*) atom nitrogen (N) terhadap energi celah pita dan struktur elektronik atau *density of state* (DOS) pada perovskite layer $NaLnTiO_4$ dan turunannya $NaLnTiO_{4-x}N_x$ berbasis perhitungan awal melalui pendekatan *Density Fungsional* Theory (DFT). Implementasi perhitungan energi celah pita dan struktur elektronik menggunakan kode CASTEP. Data yang diperoleh melalui pendekatan *density functional theory* (DFT) dengan *local density approximation* (LDA) dan *generalized gradient approximation* dari Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA+PBE) sebagai fungsi korelasi perubahan berupa plot grafik dari struktur pita $NaLnTiO_4$ dan turunannya $NaLnTiO_{4-x}N_x$. Grafik tersebut diolah lebih lanjut untuk memperoleh informasi tentang besarnya energi celah pita (Eg) dan *density of states* (DOS) dari material tersebut. Hasil penelitian diharapkan dari material perovskite layer $NaLnTiO_4$ dan turunannya $NaLnTiO_{4-x}N_x$ yang memeiliki energi celah pita yang aktif pada sinar tambpak, sehingga dapat diaplikasikan sebagai bahan sel surya dan antibakteri.