

PENGARUH TEMPERATUR KALSINASI TERHADAP MIKROSTRUKTUR DAN STRUKTUR ELEKTRONIK ZnO SECARA EKSPERIMEN DAN TEORITIS

THE EFFECT OF CALCINATION TEMPERATURE ON THE MICROSTRUCTURE AND ELECTRONIC STRUCTURE OF ZnO EXPERIMENTALLY AND THEORETICALLY

Dwi Nur Kholifah*, Hari Sutrisno

Departemen Pendidikan Kimia, Universitas Negeri Yogyakarta, Jalan Colombo No 1, Karang Malang, Caturtunggal, Depok, Sleman, Yogyakarta, Indonesia, 55281

*Korespondensi: dwinurkholifah673@gmail.com

Abstrak

Penelitian ini bertujuan untuk mengetahui pengaruh temperatur kalsinasi terhadap fasa dan mikrostruktur ZnO, serta untuk mengetahui pengaruh temperature kalsinasi terhadap energi *bandgap* ZnO secara eksperimen dan teoritis. ZnO yang dianalisis diperoleh dari sintesis yang dilakukan dengan metode presipitasi sederhana menggunakan ZnSO₄, selanjutnya diaduk dan dipanaskan selama 2 jam pada temperatur 50 – 60°C. Sampel yang terbentuk dikeringkan dengan oven pada temperatur 60 °C selama 8 jam, kemudian dikalsinasi pada variasi temperatur 100 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C, dan 500 °C masing-masing selama 1 jam. Hasil sintesis dikarakterisasi dengan spektrofotometri Uv-Vis DRS dan XRD. Selanjutnya dilakukan penentuan parameter kisi ZnO menggunakan aplikasi U_FIT yang digunakan untuk menggambar struktur dan perhitungan menggunakan CASTEP Material Studio 2020. Aplikasi CASTEP digunakan dalam perhitungan untuk menentukan energi celah pita dan *Density of State* (DOS). Hasil penelitian menunjukkan bahwa temperatur kalsinasi mempengaruhi terhadap fasa dan mikrostruktur kristal yaitu pada suhu 100 °C, 200 °C, dan 300 °C terdapat dua fasa campuran ZnO dan Zn(OH)₂ sedangkan pada suhu 400 °C dan 500 °C hanya terdapat satu fasa yaitu ZnO. Adapun terhadap mikrostruktur kristal menunjukkan semakin tinggi temperatur nilai parameter kisinya rata-rata semakin tinggi juga. Energi celah pita yang diperoleh secara eksperimen sebesar 3,1272 eV – 3,2380 eV serta energi celah pita secara teoritis sebesar 3,20 eV – 3,32 eV.

Kata kunci: ZnO, Mikrostruktur, Energi celah pita, DOS

Abstract

This research aims to determine the effect of calcination temperature on the phase and microstructure of ZnO, as well as to determine the effect of calcination temperature on ZnO bandgap energy experimentally and theoretically. The analyzed ZnO was obtained from a synthesis carried out using a simple precipitation method using ZnSO₄, then stirred and heated for 2 hours at a temperature of 50 – 60 °C. The samples formed were dried in an oven at a

temperature of 60 °C for 8 hours, then calcined at varying temperatures of 100 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C and 500 °C for 1 hour each. The synthesis results were characterized using Uv-Vis DRS and XRD spectrophotometry. Next, the ZnO lattice parameters were determined using the U_FIT application which was used to draw the structure and calculations using CASTEP Material Studio 2020. The CASTEP application was used in calculations to determine the band gap energy and Density of State (DOS). The results of the research show that the calcination temperature influences the crystal phase and microstructure, namely at temperatures of 100 °C, 200 °C, 300 °C there are two mixed phases of ZnO and Zn(OH)₂, while at temperatures of 400 °C and 500 °C there is only one phase, namely ZnO. As for the crystal microstructure, it shows that the higher the temperature, the higher the average value of the lattice parameters. The band gap energy obtained experimentally is 3.1272 eV – 3.2380 eV and the theoretical band gap energy is 3.20 eV – 3.32 eV.

Keywords: ZnO, microstructure, Band gap Energy, DOS

Pendahuluan

Energi fosil yang digunakan sebagai sumber bahan bakar dalam kehidupan manusia harus sudah mulai diperhatikan karena penggunaan energi fosil semakin menipis dari waktu ke waktu dengan penggunaan sehari-hari yang tinggi. Tingkat eksplorasi minyak yang tinggi sangat kontras dengan pembentuka bahan baku energi fosil di dalam perut bumi membutuhkan waktu ribuan tahun sehingga tidak proporsional dengan output [1]. Oleh karena itu memanfaatkan energi selain bahan bakar fosil adalah solusi yang lebih baik karena bahan yang melimpah dibandingkan potensi yang sangat besar penggunaan bahan bakar fosil. Salah satunya adalah pemanfaatan energi dengan membuat material baru yang dapat menghasilkan energi. Material baru dapat diciptakan dengan menggunakan teknologi rekayasa genetika material [2].

Penelitian tentang teknologi rekayasa genetika material saat ini banyak dikembangkan yang salah satunya adalah mengenai bahan-bahan material yang mempunyai struktur nanokristal. Salah satu jenis nanokristal yang telah banyak digunakan dan teliti dari golongan metal oksida dan bersifat semikonduktor. Material semikonduktor yang sering digunakan adalah metal oksid (keramik) seperti TiO₂, SnO₂, dan ZnO, salah satu bahan yang sering digunakan dalam aplikasi semikonduktor adalah seng oksida (ZnO). Prinsip aplikasi pada nanopartikel ZnO sangat bergantung pada sifat dasar material tersebut, baik dari segi fisik maupun sifat kimianya.

ZnO telah digunakan dalam berbagai keperluan, baik sebagai katalis maupun pendukung katalis dalam produksi biodiesel, dan sebagai semikonduktor. ZnO merupakan material yang memiliki karakteristik yang unik. Beberapa keunikan yang dimilikinya termasuk memiliki energi gap sebesar 3,37 eV, kemampuan senyawa kimianya untuk berpadu dengan senyawa lain dan ZnO merupakan material semikonduktor tipe-n [3]. Keberhasilan aplikasi ZnO sangat dipengaruhi oleh faktor mikrostruktur seperti kristalinitas dan ukuran partikel [4]. Faktor tersebut tergantung pada metode analisis yang digunakan. Salah satu metodenya adalah menggunakan analisis XRD yang sederhana, ekonomis dan cocok untuk produksi skala besar. Namun, metode analisis XRD membutuhkan suhu kalsinasi yang tinggi dan waktu yang lama untuk membentuk nanopartikel. Nanopartikel kristalin ZnO dapat diperoleh dengan melakukan kalsinasi pada suhu 450 °C, 500 °C, dan 600 °C selama 4 jam [5]. Penggunaan suhu tinggi

dalam analisis XRD dapat mengalami perubahan struktul kristal ZnO, sehingga struktur kristal ZnO yang diinginkan dapat diperoleh dengan melakukan kalsinasi pada suhu yang lebih rendah [6]. Oleh karena itu pada penelitian ini menggunakan kalsinasi pada suhu 100 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C, dan 500 °C.

ZnO memiliki struktur elektronik band yang terdiri dari band valensi dan band konduksi. Elektron pada band valensi tidak dapat bergerak dengan bebas, sedangkan elektron pada band konduksi dapat bergerak dengan bebas dan menyebabkan konduktivitas listrik pada material. Energi celah pita ZnO diperkirakan sekitar 3,2-3,4 eV, tergantung pada metode perhitungan yang digunakan. Defek elektronik, ZnO dapat mengandung defek elektronik seperti vakansi oksigen, interstitial seng, atau cacat kristal. Defek elektronik ini dapat memengaruhi sifat optik dan elektrik dari material. Misalnya, defek vakansi oksigen dapat menyebabkan munculnya level energi dalam celah pita, sehingga mempengaruhi sifat optik dan kelistrikan ZnO. Energi celah pita permukaan ZnO dapat berbeda dari ZnO di dalam material, tergantung pada pengaruh lingkungan permukaan seperti kelembaban dan temperatur [7]. Dalam penelitian yang dilakukan oleh, temperatur yang digunakan untuk menginvestigasi pengaruh terhadap energi celah pita ZnO adalah rentang suhu dari 25 °C hingga 200 °C. Penelitian ini melibatkan pengukuran spektrum UV-Vis-NIR ZnO pada berbagai suhu dalam rentang tersebut. Hasil penelitian menunjukkan bahwa terdapat penurunan energi celah pita ZnO seiring dengan peningkatan temperatur.

Penelitian ini akan dilakukan dengan menggunakan teknik analisis fasa dan mikrostruktur serta energi celah pita untuk mempelajari sifat-sifat material ZnO. Karakterisasi mikrostruktur dari ZnO akan dilakukan menggunakan teknik difraksi sinar-X (XRD), sedangkan karakterisasi struktur elektroniknya akan dilakukan menggunakan teknik spektroskopi UV-Vis dan program simulasi mekanika kuantum, seperti Fullprof, U_FIT, CASTEP, dan GGA+PBE. Data hasil analisis tersebut akan digunakan untuk memahami hubungan antara mikrostruktur, struktur elektronik, dan sifat-sifat material ZnO.

Metode

Preparasi sampel (Sintesis ZnO)

ZnO yang dianalisis diperoleh dari hasil sintesis menggunakan metode presipitasi sederhana yaitu dengan menimbang 2,9386 gram ZnSO₄, kemudian dimasukkan ke dalam gelas kimia dan dilarutkan dalam 100 mL akuades. Dimasukkan 50 mL akuades ke dalam gelas kimia yang sudah berisi 25 ml ZnSO₄ terlarut untuk membuat larutan induk. Kemudian 25 mL NH₄OH dengan kecepatan kira-kira 5 mL/menit diteteskan perlahan ke dalam larutan induk. Diaduk menggunakan magnet stirrer dan dipanaskan pada suhu sekitar 50-60 °C. Setelah itu, disaring dan dibilas dengan air mendidih sebanyak tiga kali. Endapan yang dihasilkan dimasukkan ke dalam cawan krus kemudian dioven pada suhu 60 °C selama 8 jam. Selanjutnya, dimasukkan cawan krus berisi ZnO ke dalam *furnace* yang telah berada pada 100 °C untuk dilakukan kalsinasi selama 1 jam. Setelah 1 jam, cawan dikeluarkan dari *furnance*. Kemudian dimasukkan ke dalam desikator untuk didinginkan. Selesai didinginkan, serbuk ZnO ditempatkan ke dalam botol flakon 35 untuk disimpan didesikator sebelum dikarakterisasi. Melakukan kembali langkah sebelumnya untuk temperatur selanjutnya yaitu 200 °C, 300 °C, 400 °C, dan 500 °C secara berurutan. Setelah proses kalsinasi, serbuk kristal ZnO yang

dihasilkan dikarakterisasi menggunakan difraksi sinar-X (XRD) dan spektrofotometer Uv-Vis DRS.

Analisis data dari Spektrofotometer Uv-Vis DRS

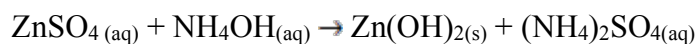
Metode UV-Vis DRS karakterisasinya cahaya yang dipantulkan oleh material. Informasi yang diperoleh dari karakteristik UV-Vis DRS yaitu spektrum panjang gelombang terhadap reflektansi R (%), sedangkan energi celah pita diperoleh melalui perubahan besaran R (%) ke dalam faktor Kubelka Munk $F(R)$ yang merupakan instrumentasi spectrometer-difusi menggunakan metode sederhana menurut teori Kubelka-Munk. Hasil perhitungan energi celah pita menggunakan metode sederhana menurut teori Kubelka-Munk tersebut merupakan hasil perhitungan secara eksperimen.

Analisis data dari XRD

Data hasil karakterisasi difraksi sinar-X (XRD) diolah untuk dilakukan perhitungan energi band gap secara teoritis dan menentukan struktur ZnO. Data diolah menggunakan program kristalografi yaitu U_FIT, untuk menentukan parameter kisi dan space group ZnO. Hasil yang didapatkan sebelumnya diolah menggunakan CASTEP untuk menghitung energi band gap ZnO secara teoritis dan Density of state (DOS). Struktur ZnO dapat divisualisasikan bentuknya dari hasil data difraksi 36 sinar-x (XRD) menggunakan CASTEP.

Hasil dan Pembahasan

ZnO merupakan nanopartikel yang disintesis menggunakan metode presipitasi sederhana. Metode presipitasi merupakan salah satu metode sintesis kimia basah yang melibatkan reaksi kimia antara dua atau lebih larutan sehingga menghasilkan endapan atau presipitat. ZnO nanopartikel dibuat menggunakan metode *bottom up* dengan Teknik presipitasi dari prekursor $ZnSO_4$ yang telah dilarutkan dalam akuades kemudian ditambahkan basa lemah yaitu NH_4OH . Adapun reaksi yang terjadi dalam sintesis nanopartikel ZnO adalah sebagai berikut:



Dalam reaksi tersebut $ZnSO_4$ dan NH_4OH berperan sebagai prekursor yang ketika dicampurkan akan menghasilkan endapan putih yang berupa $Zn(OH)_2$. Setelah $Zn(OH)_2$ terbentuk dilakukan pengeringan dan kalsinasi untuk mendapatkan ZnO seperti yang ditunjukkan pada reaksi berikut ini:

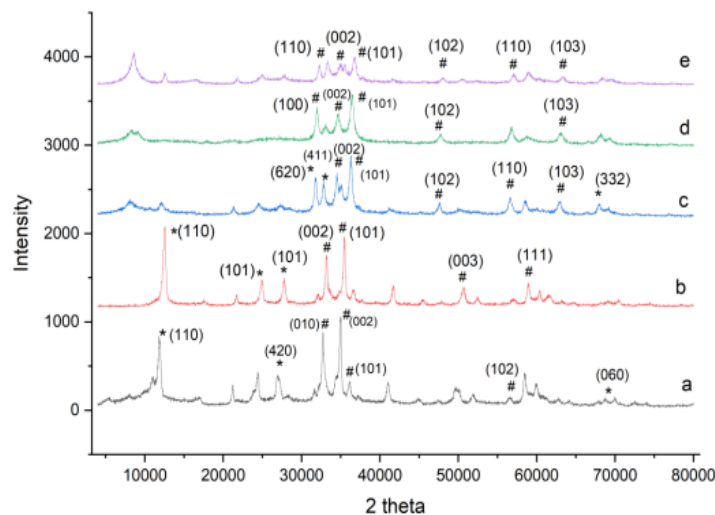


Dalam penelitian ini pada suhu 100 °C, 200 °C, 300 °C dihasilkan fasa campuran yaitu ZnO dan $Zn(OH)_2$, hal ini berarti pada suhu 100– 300 °C kandungan $(OH)_2$ masih ada dan belum hilang saat proses pengeringan dan kalsinasi. Sedangkan pada suhu 400 °C dan 500 °C sudah dihasilkan satu fasa yaitu ZnO murni, hal ini berarti pada suhu tersebut sudah bisa dihasilkan ZnO. Hal tersebut menunjukkan bahwa temperature kalsinasi mempengaruhi terbentuknya ZnO.

Setelah disintesis dan dikalsinasi kemudian ZnO dianalisis menggunakan XRD dan UV-Vis. Analisis struktur kristal dengan XRD dilakukan untuk mengetahui struktur kristal yang terbentuk pada ZnO. Dari analisis menggunakan XRD diperoleh data berupa grafik hubungan

antara sudut hamburan (2θ) dengan intensitas (I) puncak spektrum yang disebut difraktogram. Spektrum XRD yang dihasilkan dari sampel penelitian kemudian dibandingkan dengan data COD (*Crystallography Open Database*) sehingga diperoleh indeks Miller pada puncak difraksi yang diperoleh kemudian dapat menunjukkan parameter kisi dari ZnO dan diperoleh nilainya menggunakan aplikasi U_FIT. Dengan membandingkan hasil karakterisasi XRD dengan data standar COD (*Crystallography Open Database*) maka akan diketahui nilai-nilai indeks miler (hkl) dari kristal. Selain membandingkan nilai sudut difraksi dan intensitas pada aplikasi U_FIT juga membandingkan indeks millernya, oleh karena itu setelah dibandingkan dapat diperoleh parameter kisi setiap kristal untuk melanjutkan perhitungan pada aplikasi CASTEP. Hasil parameter kisi yang digunakan pada aplikasi CASTEP ditunjukkan pada Tabel 1. Sebelum dimasukkan ke CASTEP nilai parameter kisi ZnO hasil sintesis dicocokkan dengan parameter kisi di COD (*Crystallography Open Database*).

Nilai parameter kisi berdasarkan U_FIT dan COD hampir sama, hal ini dikarenakan pergeseran sudut difraksi kelima sampel yang cukup kecil, sehingga perbedaan parameter kisinya juga kecil. Berdasarkan nilai parameter kisi kristal dan nilai intensitas kristal yang telah diperoleh, maka kristal ZnO 300 °C lebih baik dibandingkan kristal ZnO 100 °C, 200 °C, 300 °C, 400 °C, dan 500 °C karena nilai parameter kisinya yang lebih mendekati dari acuan COD nilai intensitas maksimumnya pada hasil data karakterisasi XRD.



Keterangan:

* = Zn(OH)₂

= ZnO

Gambar 1. Difraktogram variasi temperature ZnO (a) 100°C; (b) 200°C; (c) 300°C; (d) 400°C dan (e) 500°C

Selain menghasilkan ZnO murni dalam peneletian ini menghasilkan 2 fasa campuran dari hasil sintesis yaitu ZnO dan Zn(OH)₂ pada suhu 100 °C, 200 °C dan 300 °C hal ini dibuktikan dari analisis data hasil XRD menggunakan U_FIT yang ditunjukkan Gambar 1 yang memperlihatkan intensitas yang mengandung Zn(OH)₂. Ditunjukkan pada Tabel 1 nilai parameter kisi berdasarkan U_FIT dan COD hampir sama, hal ini dikarenakan pergeseran sudut difraksi ketiga sampel yang cukup kecil, sehingga perbedaan parameter kisinya juga kecil. Berdasarkan nilai parameter kisi kristal dan nilai intensitas kristal yang telah diperoleh, maka

kristal Zn(OH)₂ 300 °C lebih baik dibandingkan kristal Zn(OH)₂ 100 °C dan 200 °C karena nilai parameter kisinya yang lebih mendekati dari acuan COD nilai intensitas maksimumnya pada hasil data karakterisasi XRD.

Dalam penelitian ini, dilakukan karakterisasi menggunakan X-Ray Diffraction untuk mengetahui bagaimana variasi temperature ZnO mempengaruhi parameter kisi semikonduktor. Parameter kisi (a, b, atau c) merupakan panjang sisi pada struktur kristal heksagonal dari bahan semikonduktor tersebut. Berdasarkan tabel 1 dan 2, ditemukan perbedaan temperatur ZnO menyebabkan perubahan pada nilai parameter kisi. Dari hasil pembahasan ini, dapat diketahui bahwa variasi temperature mempengaruhi nilai parameter kisi dan fasa bahan semikonduktor ZnO.

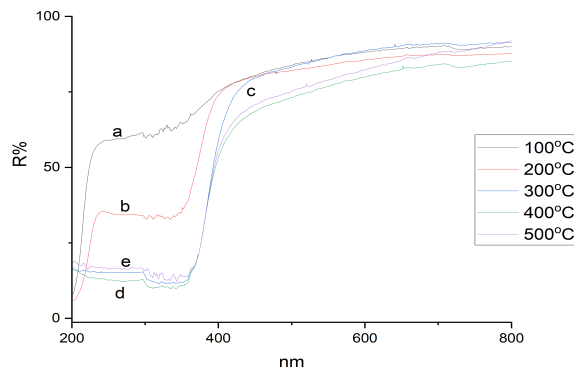
Analisis menggunakan UV-Vis DRS memiliki dasar pengukuran UV-Vis yang direfleksikan oleh sampel. Ketika terjadi penyinaran material oleh gelombang elektromagnetik maka cahaya akan mengalami penyerapan oleh elektron dalam material, ketika material terkena cahaya maka akan menyebabkan terjadinya penyerapan, pemantulan, dan transmisi. Metode UV-Vis DRS karakterisasinya cahaya yang dipantulkan oleh material. Informasi yang diperoleh dari karakteristik UV-Vis DRS yaitu spektrum panjang gelombang terhadap reflektansi R (%), sedangkan energi celah pita diperoleh melalui pengubahan besaran R (%) ke dalam faktor Kubelka-Munk F(R) yang merupakan instrumentasi spectrometer-difusi menggunakan metode sederhana menurut teori Kubelka-Munk [8] dan metode metode Tauc Plot [9]. Sampel disiapkan dengan menambahkan BaSO₄ yang digunakan sebagai material standar kemudian dipadatkan pada tempat yang telah disediakan, selanjutnya dilakukan pengukuran reflektansi R (%) dengan panjang gelombang 200-800 nm seperti yang ditunjukkan oleh gambar 2.

Tabel 1. Nilai Parameter Kisi Kristal ZnO Pada Variasi Temperatur

No.	Temperatur	a = b (Å)	c (Å)
1.	ZnO 100 °C	3,190903	4,865684
2.	ZnO 200 °C	3,259424	5,364299
3.	ZnO 300 °C	3,255012	5,209528
4.	ZnO 400 °C	3,246959	5,212747
5.	ZnO 500 °C	3,286131	5,264248

Tabel 2. Nilai Parameter Kisi Kristal Zn(OH)₂ Pada Variasi Temperatur

No.	Temperatur	a (Å)	b (Å)	c (Å)
1.	Zn(OH) ₂ 100 °C	23,06380	8,03607	3,37752
2.	Zn(OH) ₂ 200 °C	23,02245	7,95142	3,22702
3.	Zn(OH) ₂ 300 °C	22,98088	8,05721	3,30697
4.	Zn(OH) ₂ COD	23,07000	8,04000	3,30000

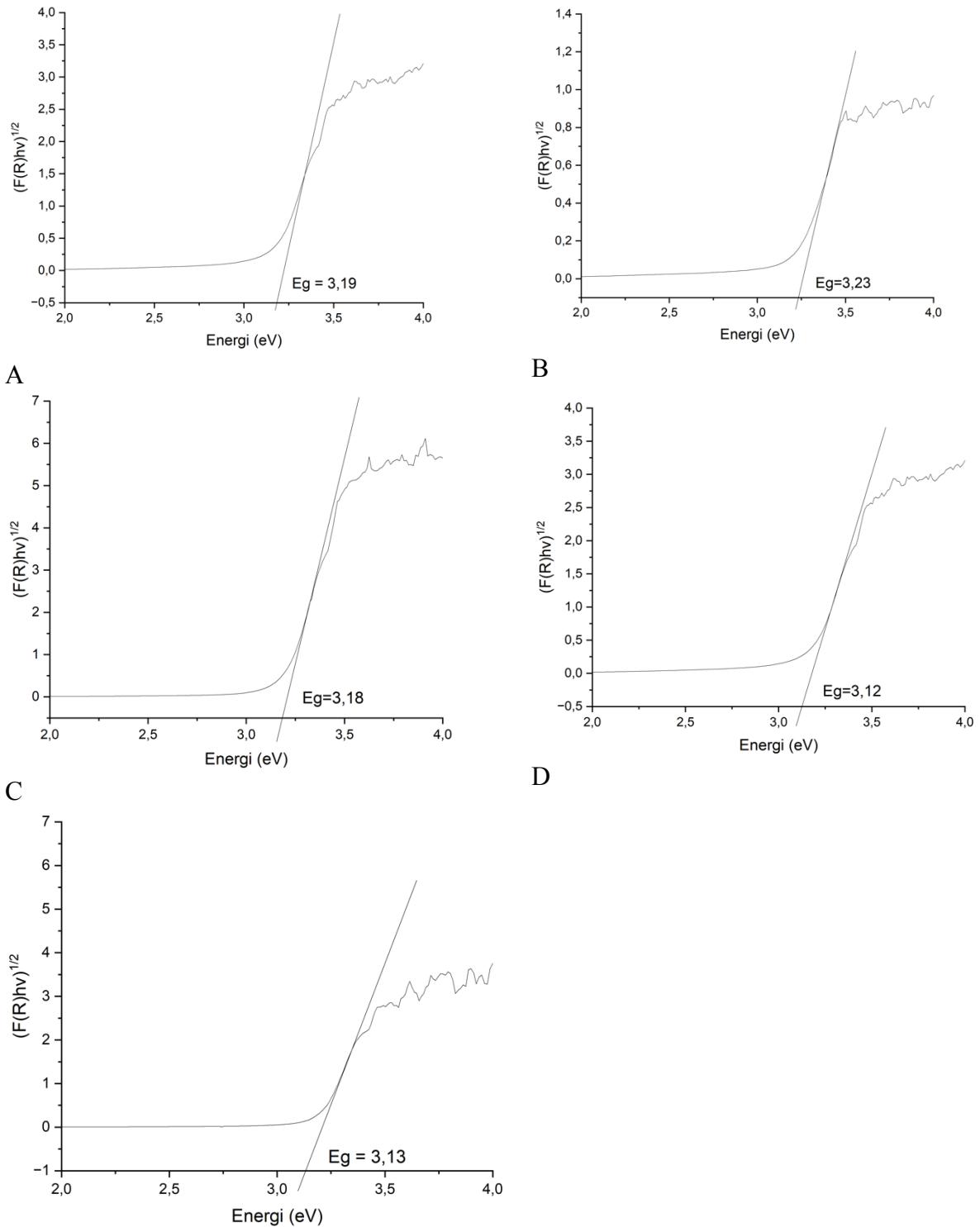


Gambar 2. Hasil Spektra UV-Vis DRS ZnO temperatur (a) 100 °C; (b) 200 °C; (c) 300 °C; (d) 400 °C dan (e) 500 °C

Perolehan grafik menunjukkan bahwa pada sampel hasil sintesis ZnO memiliki bandgap 1. Hal ini dapat terlihat dari garis menurun milik ZnO yang tidak terlihat adanya belokan atau patahan lain. Untuk membuktikan lebih lanjut diperlukan perhitungan menggunakan metode Kubelka-Munk dan Tauc-Plot. Penentuan band gap menggunakan perhitungan indirect dengan titik absis adalah energi/hv (eV) dan titik ordinat adalah hasil perhitungan $(F(R)hv)^{1/2}$. Berikut adalah hasil grafik perhitungan *band gap* ZnO ditunjukkan pada gambar 3 A-D.

Melalui gambar diatas ditunjukkan grafik plot antara $(F(R)hv)^{1/2}$ dengan hv, dengan perpotongan grafik dan sumbu datar menunjukkan lebar celah pita energi. Energi celah pita merupakan energi yang terdapat diantara pita valensi dan pita konduksi, energi tersebut adalah energi terendah atau minimum untuk melakukan perpindahan elektron dari pita valensi ke pita konduksi agar berada dalam keadaan tereksitasi. Pita valensi yaitu pita yang terisi secara penuh oleh elektron yang berada pada energi teratas sedangkan pita konduksi adalah pita yang hanya terisi sebagian oleh elektron atau tidak sama sekali terisi oleh elektron, pita konduksi berada diatas pita valensi [10]. Terdapat lebar celah yang posisinya berada diantara pita valensi dan pita konduksi yang disebut sebagai daerah larangan (*forbidden region*) serta tidak ada sama sekali elektron. Pita larangan adalah daerah penentu besarnya energi celah pita (E_g). Pada penelitian ini yang dikarakterisasi menggunakan UV-Vis DRS memperoleh band gap ZnO pada kisaran 3,12 eV – 3,23 eV. Hal ini menunjukkan bahwa penelitian ini sesuai dengan literatur yang ada. ZnO merupakan senyawa yang memiliki lebar celah pita sebesar 3,1 – 3,33 eV yang mempunyai sifat listrik dan optic sehingga banyak digunakan sebagai fotokonduktor dan sensor terintegrasi [11]. Lebar energi celah pita (E_g) semakin kecil seiring bertambahnya temperature yang semakin tinggi sehingga menyebabkan laju reaksi semakin cepat dan nilai absorpsi akan semakin rendah.

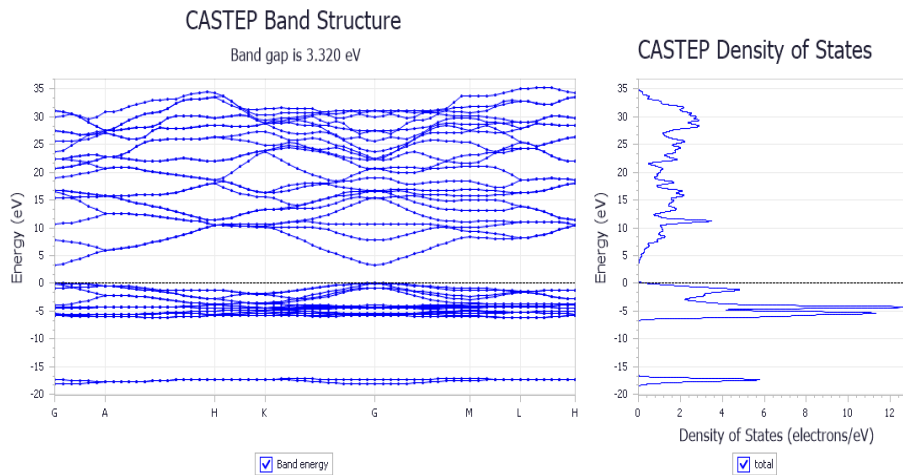
Pengaruh Temperatur Kalsinasi



E
Gambar 3. Band Gab ZnO Pada Berbagai Variasi: (A) 100 °C, (B) 200 °C, (C) 300 °C, (D) 400 °C, dan (E) 500 °C

Setelah memperoleh *band gap* ZnO secara teoritis menggunakan data UV-Vis DRS, kemudian menghitung *band gap* ZnO secara eksperimen dengan CASTEP menggunakan data XRD yang sudah diolah menggunakan U_FIT dari data parameter kisi Tabel 1. Program CASTEP merupakan program yang berdasar pada mekanika kuantum yang dirancang dengan

spesifik untuk ilmu material dalam keadaan padat. CASTEP menggunakan density functional theory plane wave pseudopotential method, yang bisa digunakan untuk melakukan prinsip pertama perhitungan mekanika kuantum yang memperoleh sifat dari kristalin dan permukaan material seperti semikonduktor, keramik, besi, zeolite, dan mineral. Penerapan khas untuk penggunaan program CASTEP melibatkan riset terkait, sifat struktur, kimia, permukaan, sifat optik, struktur pita (*band structure*), dan *density of states* [12]. Berikut data *band gap* dan *density of states* pada temperatur 100 °C yang diajikan pada gambar 7.



Gambar 7. CASTEP *Band Structure* ZnO 100°C

Berdasarkan Gambar 7 dapat diketahui bahwa nilai bandgap dari ZnO 100°C adalah 3,32 eV. Hal ini sesuai dengan penelitian yang dilakukan oleh [13] yang memperoleh energi bandgap 3,37 eV. Energi celah pita atau biasa disebut dengan bandgap terdapat 2 jenis yaitu *direct* dan *indirect*. Hal ini akan mempengaruhi pada metode perhitungan yang yang dipilih. Dari Gambar 7 dapat diketahui bahwa titik tertinggi dari pita valensi tidak sejajar dengan titik terendah pita konduksi. Pita valensi dari ZnO heksagonal memiliki pita tertinggi pada zona Brillouin pada pertengahan L dan H, sedangkan pita konduksi ZnO heksagonal terdapat pada zona Brillouin antara A dan H. *Band gap* yang mempunyai titik tertinggi dan terendah yang tidak sejajar langsung satu sama lain adalah *indirect band gap* [14]. Hasil perhitungan *band gap* secara eksperimen ditunjukkan pada Tabel 3.

Tabel 3. Nilai energi celah pita ZnO secara eksperimen dan teoritis

No	Sampel	Nilai energi celah pita (eV)	
		Percobaan	Teoritis
1.	ZnO 100°C	3,32	3,19
2.	ZnO 200°C	3,29	3,23
3.	ZnO 300°C	3,27	3,18
4.	ZnO 400°C	3,22	3,12
5.	ZnO 500°C	3,20	3,13

Kesimpulan

Berdasarkan hasil data XRD dan perhitungan U_FIT, temperature kalsinasi mempengaruhi terhadap mikrostruktur kristal yaitu semakin tinggi temperatur maka nilai parameter kisi bahan ZnO juga semakin tinggi, parameter kisi pada suhu 100 – 500 °C yang diperoleh yaitu a=b 3,19 Å – 3,28 Å dan c sebesar 4,86 Å – 5,26 Å. Pada temperature 100 – 300 °C terdapat fasa campuran yaitu Zn(OH)₂ dan ZnO sedangkan pada temperatur 400 – 500 °C hanya terdapat satu fasa yaitu ZnO. Hasil perhitungan energi celah pita ZnO menunjukkan bahwa temperature kalsinasi berpengaruh terhadap energi celah pita ZnO secara eksperimen. Energi celah pita yang diperoleh semakin rendah pada temperature kalsinasi yang semakin tinggi dan pada penelitian diperoleh energi celah pita secara eksperimen sebesar 3,12 eV – 3,23 eV. Hasil perhitungan energi celah pita ZnO secara teoritis juga menunjukkan bahwa temperature kalsinasi berpengaruh terhadap energi celah pita ZnO. Energi celah pita yang diperoleh semakin rendah pada temperature kalsinasi yang semakin tinggi dan pada penelitian diperoleh energi celah pita secara teoritis sebesar 3,20 eV – 3,32 eV.

Daftar Pustaka

- [1]. ESDM, (2016). *Outlook Energi Indonesia 2016*. Dewan Energi Nasional. ISSN 25273000.
- [2]. Apelian, D. (2007). *Looking Beyond the Last 50 Years: the Future of Material Science and Enginnering*. Overview. JOM.
- [3]. Umar, A., Kumar, R., Kumar, G., Algarni, H., Kim, SH. (2015). Effect of annealing temperature on the properties and photocatalytic efficiencies of ZnO nanoparticles. *J. Alloys Compd.*, 648, 46-52
- [4]. Yulianti, C.H. (2012). Sintesis dan Karakterisasi Kristal Nano ZnO. *Jurnal Teknika*, 4(2), 2–6.
- [5]. Anandan, M., Dinesh, S., Krishnakumar, N., Balamurugan. (2017). Tuning the crystalline size of template free hexagonal ZnO nanoparticles via precipitation synthesis towards enhanced photocatalytic performane. *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* 28, 2574- 2585.
- [6]. Efendi, A.F., Nurhasanah, I. (2015). UV-Light Absorption and Photocatalytic Properties of Zn-doped CeO₂ Nanopowders Prepared byUltrasound Irradiation, *Materials Science Forum*, 827, 56-61.
- [7]. Swargiary, K., Metem, P., Kulatumyotin, C., Thaneerat, S., Ajchareeyasontorn, N., Jitpratak, P., Bora, T., Mohammed, W. S., Dutta, J., Viphavakit, C. (2022). ZnO Nanorods Coated Single-Mode–Multimode–Single-Mode Optical Fiber Sensor for VOC Biomarker Detection. *Sensors*, 22(16), 1–14.
- [8]. Kang, X., Kang, Y., Hong, X., Hong, X. (2018). Improving the photocatalytic activity of graphitic carbon nitride by thermal in a high-pressure hydrogen atmosphere. *Prog. Nat. Sci.: Mater. Int.*, 28(2), 183-188.
- [9]. Jumardin, J., Maddu, A., Santoso, K. (2021). Synthesis of carbon dots (Cds) and determination of optikal gap energy with tauc plot metode. *Jambura Physics J.*, 3(2), 73-86.
- [10]. Triwardiati, D., Ermawati, I. R. (2018). Analisis Bnadgap Karbon Nanodots (C-Dots) Kulit Bawang Merah Menggunakan Teknik Microwave. *Prosiding Seminar Nasional Teknoka*, 3, E25-E30.

- [11]. Miller, G.L. (1959). Use of Dinitrosalicylic Acid Reagent for Determination of Reducing Sugar. *Anal. Chem.*, 31, 426-428.
- [12]. Clark, S.J., Segall, M.D., Pickard, C.J., Hasnip, P.J., Probert, M.I.J., aRefson, K., (2005). First Principles Methods Using CASTEP. *Z. Kristallogr. Crys. Mater.*, 220, 567–570.
- [13]. Shamhari, N., Siong, W. B., Chin, S., Kok, K. Y. (2018). Synthesis and Characterization of Zinc Oxide Nanoparticles with Small Particle Size Distribution. *Acta Chim. Slov.*, 65(3), 578-585.
- [14]. Gu, L., Scot, V., Sigle, W., Koch, C., Van Aken, P., Scholz, F., Thapa, S. B., Kirchner, C., Jetter, M., Ruhle, M. (2007) Band-gap measurements of direct and indirect semiconductors using monochromated electron. *Phy. Rev. Condens. Matter*, 75(19), 1-8.

