

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dengan komputasi dilakukan pada September 2022 – Mei 2023. Komputasi dilakukan menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang dimiliki oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang berlokasi di Pusat Riset Komputasi, Cibinong, Bogor. Penelitian dilakukan secara *online* dengan menggunakan *SSH remote command*, sehingga penelitian dengan menggunakan terminal HPC ini bisa dilakukan menggunakan komputer pribadi penulis.

3.2 Desain Penelitian

Metode dalam penelitian ini menggunakan metode kuantitatif dengan pemodelan komputasi. Pemodelan struktur material uji dilakukan dengan menggunakan Quantum Espresso sebagai *Graphical User Interface* untuk program Burai. Sedangkan, untuk komputasi energi adsorpsi material menggunakan Teori Fungsi Kerapatan atau DFT melalui Quantum Espresso.

Dalam proses kalkulasinya, penelitian ini menggunakan metode pendekatan gradien umum atau *Generalized Gradient Approximation Perdew – Burke – Ernzerhof* (GGA – PBE). Tujuan dari pendekatan ini adalah untuk menentukan nilai energi adsorpsi.

3.3 Spesifikasi Perangkat Keras dan Perangkat Lunak

Penelitian ini menggunakan HPC (*High Performance Computer*) yang dimiliki oleh BRIN. Komputasi dalam HPC ini menggunakan tipe antrean *work* dengan durasi penggunaan komputasi maksimal 96 jam. HPC pada penelitian ini memiliki 2 *nodes*, dengan masing – masing *node* memiliki 36 *cores* dengan spesifikasi Intel Xeon Gold 6140 2.3 GHz dan 384 GB RAM untuk setiap *node* nya. Sehingga, total yang dimiliki HPC adalah 2 *nodes* dengan 72 *cores* dan 768 GB RAM. Namun, dalam penggunaan HPC penulis hanya bisa mengakses maksimal 36 *cores* dengan rata-rata *cores* yang digunakan oleh penulis sekitar 20 *cores*. Dikarenakan layanan HPC ini merupakan layanan umum sehingga dapat diakses oleh semua orang.

Kemudian untuk perangkat lunak yang digunakan oleh penulis pada penelitian ini ialah Quantum Espresso 7.0 dan BURAI versi 1.3.

3.4 Prosedur Penelitian

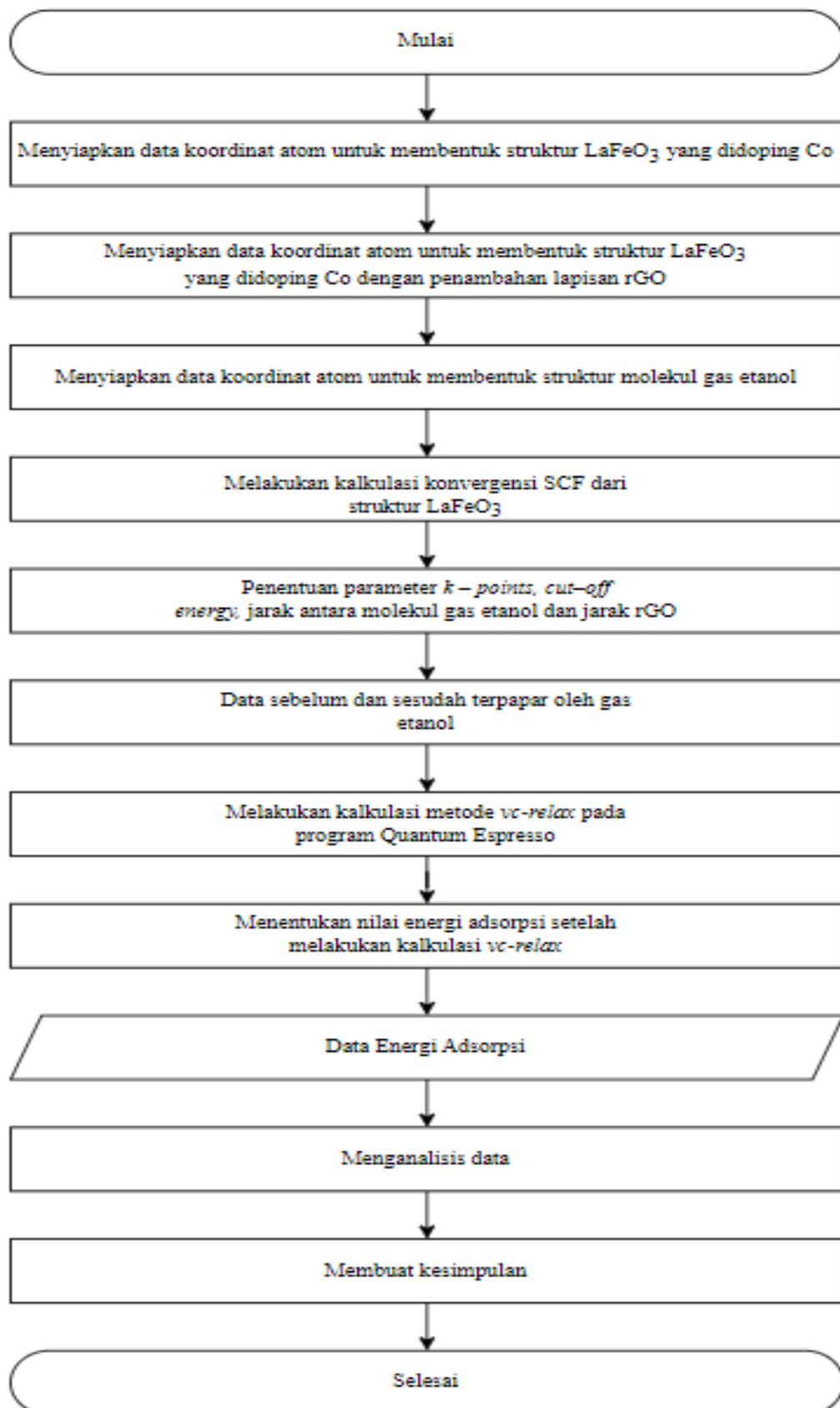
Metode yang digunakan dalam penelitian ini ialah menggunakan metode studi literatur, yang kemudian dilakukannya perhitungan secara numerik menggunakan program Burai sebagai GUI untuk Quantum Espresso. Quantum Espresso digunakan untuk melakukan komputasi energi adsorpsi material dengan menggunakan DFT. Dalam program ini menggunakan DFT dengan *generalized gradient approximation* dari *Perdew – Burke – Ernzerhof* (GGA-PBE) sebagai pertukaran korelasinya. Tujuan digunakan ini adalah untuk menentukan energi adsorpsi material.

DFT diselesaikan secara iteratif, dimana set basisnya menggunakan *plane-wave Self Consistent Field* (SCF). Set basis ini untuk mencapai *Self Consistent* mengimplementasikan pendekatan iteratif dengan teknik diagonalisasi iteratif dalam *Framework* dari metode pseudopotensial *plane-wave*.

Material LaFeO_3 dalam perhitungan ini, digunakan dalam bentuk data koordinat atom sebagai pembentuk strukturnya. Data koordinat atom LaFeO_3 didapatkan dari *database materials project* (Jain dkk., 2013). Pada simulasi ini, perhitungan SCF dilakukan untuk memberikan struktur dan geometri yang optimum dari LaFeO_3 .

3.5 Diagram Alir Penelitian

Langkah-langkah penelitian yang dilakukan dapat ditunjukkan pada gambar 3.1 dibawah ini.



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.6 Tahapan Komputasi

Pada penelitian ini tahapan komputasinya dibagi menjadi tiga tahapan utama, yaitu (1) Menyusun struktur LFCO dengan lapisan rGO dan tanpa lapisan rGO, (2) menyusun struktur yang berinteraksi dengan molekul dari gas etanol, dan (3) perhitungan atau kalkulasi *vc-relax* untuk menentukan energi adsorpsi.

3.7 Menyiapkan Struktur LFCO, rGO, dan Etanol

Struktur LFO didapatkan melalui Materials Project dan LFO tersebut terdiri dari 4 atom La, 4 atom Fe, dan 12 atom O. Struktur atom LFO dapat dilihat pada Gambar 4.1 Ilustrasi struktur (a) LFO, (b) LFO doping Co. Untuk mendapatkan struktur LFO yang di-*doping* Co, dapat melakukannya dengan cara mengubah atau mengganti setengah bagian atom Fe dalam struktur LFO dengan atom Co. Pada struktur LFO ini parameter kisi yang digunakan yaitu, untuk parameter kisi $a = 10.5 \text{ \AA}$, parameter kisi $b = 13.5 \text{ \AA}$, parameter kisi $c = 13.2 \text{ \AA}$.

Kemudian untuk struktur *reduce graphene oxide* atau rGO didesain sebagai *single layer*. Struktur rGO pada penelitian ini didapatkan pada struktur *single layer* dari *graphene* yang memiliki 15 atom karbon (C) dengan 4 cincin (heksagon) berbentuk sarang lebah. Dengan setiap ikatan bebas terakhir dari atom karbon pada struktur *graphene* diatas di saturasi dengan atom hidrogen (H). Dalam pembentukan sebuah rGO, diperlukan satu atom oksigen (O) yang dimasukkan ke dalam struktur *graphene*. Atom oksigen (O) yang terletak pada ikatan karbon C-C- C dari struktur rGO disebut sebagai permukaan atom oksigen. Penelitian dengan menggunakan struktur rGO ini sudah banyak dilakukan sebelumnya.

Pada penelitian ini, struktur gas etanol yang digunakan dapat diperoleh melalui Crystallography Open Database. Struktur ini tersusun oleh 2 atom C, 6 atom H, dan 1 atom O yang dapat di lihat pada gambar 4.3.

3.8 Penentuan Konvergensi Parameter Komputasi dengan Kalkulasi SCF

Kalkulasi SCF dilakukan setelah melakukan konvergensi struktur. Konvergensi struktur disini meliputi konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* yaitu dengan memvariasikan parameter dari harga *k-points* dan energi *cut-off*. Kalkulasi SCF dilakukan menggunakan program QE. Setelah mendapatkan nilai dari energi total sistem pada tiap variasi harga *k-points* dan energi *cut-off*, nilai – nilai tersebut di plot. Sehingga konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* dapat diketahui.

Untuk mendapatkan jarak optimal molekul gas etanol terhadap adsorben, dapat dilakukan dengan memvariasikan jarak dari molekul gas etanol ke adsorben. Pada penelitian ini variasi dilakukan dari jarak 1 Å sampai dengan 2.75 Å dengan selang 0.25 Å. Kalkulasi yang dilakukan ialah kalkulasi SCF sehingga akan maenghasilkan total energi sistem. Setelah itu, mem-plot kan variasi jarak molekul gas etanol dengan total energi sistem.

Sama halnya dengan menentukan jarak optimal molekul gas etanol, prosedur menentukan jarak optimal rGO juga dilakukan dengan memvariasikan jarak dan setelah itu membuat plot untuk mendapatkan jarak optimalnya.

3.9 Menentukan Nilai Energi Adsorpsi

Untuk mendapatkan nilai energi adsorpsi dilakukan kalkulasi energi total sistem untuk adsorbat, adsorben, dan sistem secara menyeluruh. Namun, untuk menentukan nilai energi adsorpsi metode yang digunakan berbeda dengan yang sebelumnya, dimana sebelumnya menggunakan kalkulasi SCF. Metode yang digunakan untuk mendapatkan nilai energi adsorpsi yaitu metode kalkulasi *vc-relax*. Setelah itu energi adsorpsi dapat diperoleh dengan menggunakan persamaan 2.10.