

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Etanol merupakan sejenis senyawa organik yang mudah menguap, juga telah banyak digunakan dalam bidang kimia, pertanian, biomedis, industri makanan dan minuman (An dkk., 2015). Selain itu, etanol memiliki beberapa efek samping termasuk iritasi kulit, karsinogenesis, toksisitas, bahkan kecelakaan mengemudi jika dalam keadaan tidak sadarkan diri (Wu dkk., 2021). Karena mudahnya volatilitas dan mudah terbakar pada suhu tinggi, pengembangan sensor dengan selektivitas tinggi, sensitivitas serta stabilitas untuk mendeteksi gas etanol sangat diperlukan. Hingga saat ini, banyak sensor gas semikonduktor oksida yang dikembangkan untuk deteksi uap etanol secara kuantitatif pada tingkat ppm tertentu (Bai dkk., 2010; C. Zhang dkk., 2019; D. Zhang dkk., 2015).

Sensor gas semikonduktor berbahan oksida logam digunakan untuk mendeteksi kualitas udara yang dapat mengindikasikan keberadaan gas beracun atau mudah terbakar di atmosfer dengan konsentrasi yang sangat rendah di bawah batas penginderaan manusia (Bodade dkk., 2010). Maka penggunaan sensor gas diperlukan sebagai pendeteksi keberadaan gas berbahaya seperti C_2H_6O untuk menjaga keselamatan manusia dan lingkungan. Mekanisme penginderaan gas dipengaruhi oleh perubahan sifat listrik (konduktansi atau resistansi) berdasarkan reaksi antara molekul gas dan molekul permukaan oksida logam (Lin dkk., 2019). Dalam sensor gas, kecenderungan melekatnya oksigen pada semikonduktor dapat ditentukan oleh energi adsorpsi yang terhitung (Haryadi dkk., 2022). Adapun metal oksida pada sensor gas digunakan sebagai lapisan penginderaan yang sinyalnya terukur akan berubah setelah mengalami interaksi dengan molekul gas. Ketika adsorpsi oksigen diubah menjadi molekul ionik dengan menarik elektron dari oksida logam, maka kerapatan pembawa muatan *hole* pada permukaan oksida logam akan berubah karena terjadinya interaksi antara gas pereduksi dan ion oksigen teradsorpsi yang melepaskan elektron ke material sensor (Bejaoui dkk., 2013). Peristiwa ini dapat dianalisis berdasarkan lebar celah pita energinya akibat interaksi molekul gas dengan material sensor yang membuat pergerakan elektron

dari pita valensi menuju pita konduksi berubah dari parameter fisis sebelumnya (tanpa berinteraksi dengan molekul gas). Perubahan tersebut dijadikan sebagai sinyal deteksi gas yang terukur besarnya (Zheng & Wang, 2019). Maka, Bahan penginderaan harus memiliki luas permukaan yang besar agar dapat berinteraksi dengan sekumpulan molekul gas, di mana situs aktif berfungsi untuk mengikat molekul-molekul ini dan kemampuan untuk mentransduksi secara efektif dari peristiwa adsorpsi ini menjadi sinyal yang dapat dideteksi (Nikolic dkk., 2020). Secara umum, terdapat beberapa kriteria dasar untuk sistem pendeteksian gas yang efisien dan unggul: (i) sensitivitas dan selektivitas tinggi; (ii) waktu respon dan pemulihan yang cepat; (iii) stabilitas kinerja; (iv) suhu operasi rendah (Renitta & Vijayalakshmi, 2017).

Semikonduktor oksida logam dengan struktur *perovskite* ABO_3 memiliki sifat penginderaan yang lebih stabil. Material *perovskite* ini dapat dimodifikasi secara tepat dengan mengganti atom pada situs A atau B; oleh karena itu, memungkinkan distribusi pada elektron valensi dapat mempengaruhi kinerja *gas sensing* (Y. Yin dkk., 2020). *Perovskite* memiliki stabilitas oksida-logam yang stabil (L. Sun dkk., 2011). Diantara berbagai bahan tipe *perovskite*, $LaFeO_3$ telah biasa digunakan karena sifat fisisnya yang baik, membuatnya memiliki potensi sebagai material penyusun sensor gas.

$LaFeO_3$ merupakan salah satu jenis *perovskite* memiliki rumus umum ABO_3 , dengan A dan B sebagai kation dengan O sebagai oksigen (Iervolino dkk., 2016). $LaFeO_3$ memiliki sifat konduktivitas yang baik membuatnya banyak diaplikasikan dalam pengembangan teknologi. Material ini telah diselidiki dari penelitian sebelumnya sebagai bahan *gas sensing* yang baik untuk mendeteksi gas pereduksi dan gas yang mudah terbakar (J. Zhang dkk., 2013). Etanol menjadi salah satu jenis gas yang dapat dideteksi dengan material $LaFeO_3$.

Namun, resistansi pada material $LaFeO_3$ masih sangat tinggi serta nilai sensitivitas dan selektivitas yang rendah (F. Li dkk., 2021). Maka dari itu, semikonduktor ini harus di-*doping* oleh suatu unsur dengan kation bervalensi rendah agar dapat mengurangi resistansi, meningkatkan respon penginderaan, sensitivitas dan selektivitas terhadap gas pereduksi (Fan dkk., 2013). Salah satu *doping* yang dapat meningkatkan performa sensor gas yaitu ion Mangan (Mn).

Unsur ini dapat dijadikan sebagai *doping* karena memiliki sifat elektrokimia dan stabilitas yang baik (Jia dkk., 2019). Kinerja katalitik dari sampel LaFeO_3 yang di-*doping* Mn menunjukkan resistansi transfer muatan yang rendah dan senyawa ion oksigen yang melimpah pada permukaan material untuk meningkatkan kinerja katalitiknya (Pidburtnyi dkk., 2021). Oleh karena itu, penelitian ini akan menggunakan material LaFeO_3 yang di-*doping* Mn.

Film oksida logam berstruktur nano memiliki sifat fisis yang unik. Adapun penambahan nanomaterial digunakan dengan tujuan untuk mendapatkan kepekaan mendeteksi gas yang lebih baik, kinerja respon yang cepat, dan memiliki potensi untuk meningkatkan beberapa fungsi dari sifat material seperti optik, magnetik dan parameter listrik (X.-T. Yin dkk., 2019). Nanomaterial memiliki luas permukaan spesifik yang tinggi, rasio permukaan terhadap volume yang besar dan banyak situs aktif yang terdapat pada permukaan adsorben (Chava dkk., 2019; Korotcenkov, 2008). Sifat fisik ini berhubungan dengan peningkatan sensitivitas dan selektivitas karena luas permukaan spesifik serta rasio permukaan terhadap volume meningkat secara signifikan ketika ukuran material berkurang (Dey, 2018). Oleh karena itu penggunaan bahan dasar nanomaterial seperti *graphene* akan digunakan sebagai material tambahan untuk melihat pengaruh performanya dalam mendeteksi sensor gas.

Material *graphene* merupakan *monolayer* dua dimensi yang terdiri dari atom karbon terikat dengan mobilitas elektron yang tinggi pada suhu ruangan (Geim & Novoselov, 2007). Struktur dua dimensi pada *graphene* ini membuat setiap atom karbon menjadi atom permukaan yang membuat transpor elektron melalui *graphene* sangat sensitif terhadap proses adsorpsi (Kang dkk., 2012; Schedin dkk., 2007). *Graphene* beserta derivatif-nya dapat diaplikasikan untuk keperluan sensor gas karena bahan ini memiliki luas permukaan yang sangat tinggi (Toda dkk., 2015). Akan tetapi, *graphene* tidak memiliki *band gap* atau gugus fungsi, yang membatasi aplikasinya sebagai sensor gas (Majhi dkk., 2021). Oleh karena itu, penambahan lapisan rGO akan digunakan terhadap material LaFeO_3 dalam penelitian ini. Keberadaan rGO sebagai derivatif dari *graphene* memiliki beberapa kesamaan karakteristik, seperti konsentrasi dan mobilitas pembawa muatan yang sangat tinggi, luas permukaan spesifik yang besar dan sifat *gas sensing*

yang baik (Z. Su dkk., 2018). Selain itu, rGO digunakan untuk aplikasi gas sensor karena memiliki bentuk permukaan yang dapat di-*tuning* dan meningkatkan kinerja sensitivitas dan selektivitas sensor (J. Wang dkk., 2014). Berdasarkan temuan-temuan yang telah diperoleh, pada penelitian ini akan dianalisis pengaruh penambahan lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Mn untuk meningkatkan kinerja sensor gas. Dengan demikian dapat diketahui bagaimana pengaruh rGO untuk aplikasi sensor gas.

Dalam praktiknya, penelitian ini akan dilakukan melalui pemodelan simulasi kontak material dengan molekul gas etanol menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Pemodelan menggunakan DFT dilakukan untuk mengetahui pengaruh penambahan lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Mn. Dengan pemodelan komputasi tentunya perhitungan dapat dilakukan secara repetitif untuk meminimalisir potensi kegagalan dalam eksperimen.

1.2 Rumusan Masalah Penelitian

Berdasarkan uraian latar belakang yang telah dijelaskan di atas, peneliti merumuskan permasalahan dalam penelitian ini adalah “Bagaimana pengaruh lapisan rGO terhadap energi adsorpsi dan proses adsorpsi pada LaFeO_3 yang di-*doping* Mn sebagai sensor gas etanol?”. Sehingga, pertanyaan-pertanyaan dari rumusan masalah penelitian ini dapat dituliskan sebagai berikut:

1. Bagaimana perbandingan energi adsorpsi dari LaFeO_3 yang di-*doping* Mn terhadap molekul gas etanol tanpa lapisan rGO dan ditambahkan lapisan rGO menggunakan program Quantum Espresso?
2. Bagaimana proses adsorpsi yang terjadi antara molekul gas etanol terhadap LaFeO_3 yang di-*doping* Mn tanpa lapisan rGO dan ditambahkan lapisan rGO?
3. Bagaimana pengaruh lapisan rGO terhadap energi adsorpsi molekul etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Mn?

1.3 Batasan Masalah Penelitian

Untuk memfokuskan permasalahan, maka batasan masalah dapat dituliskan sebagai berikut:

1. Perhitungan pada parameter makroskopis setiap struktur yang digunakan, seperti tekanan, suhu, lebar, tebal, dan volume dapat diabaikan.
2. Pemodelan *monolayer* rGO diperoleh dari struktur *graphene* dengan disisipkannya satu atom oksigen di antara atom karbon dan atom hidrogen disaturasi dengan ikatan bebas terakhir dari atom karbon.
3. Perhitungan komputasi dilakukan dengan metode DFT menggunakan *script* Quantum Espresso.

1.4 Tujuan Penelitian

1. Mengetahui perbandingan energi adsorpsi dari LaFeO₃ yang di-*doping* Mn terhadap molekul gas etanol tanpa lapisan rGO dan ditambahkan lapisan rGO menggunakan program Quantum Espresso.
2. Mengetahui proses adsorpsi yang terjadi antara molekul gas etanol terhadap LaFeO₃ yang di-*doping* Mn dan ditambahkan lapisan rGO.
3. Mengetahui pengaruh lapisan rGO terhadap energi adsorpsi molekul etanol pada LaFeO₃ yang di-*doping* Mn.

1.5 Manfaat Penelitian

Dengan dilakukannya penelitian ini diharapkan memberikan informasi mengenai pengaruh dari penambahan lapisan rGO pada LaFeO₃ yang di-*doping* Mn. Apabila hasil penambahan lapisan rGO dan *doping* Mn pada LaFeO₃ meningkatkan performa sensor gas etanol, maka dapat dimanfaatkan untuk beberapa kepentingan sebagai bahan rujukan.

1.6 Struktur Organisasi Skripsi

Sistematika penulisan skripsi ini disusun dalam lima bab, diantaranya yaitu: Bab I Pendahuluan, yang membahas latar belakang dilakukannya penelitian, rumusan masalah, batasan masalah, tujuan penelitian, manfaat penelitian dan struktur organisasi skripsi. Bab II Kajian Pustaka, membahas mengenai sensor gas, etanol, material *perovskite* LaFeO₃ sebagai sensor gas, *doping* Mn, rGO sebagai *functional layer* untuk LaFeO₃, *Density Functional Theory*, Energi Adsorpsi. Bab

III Metodologi Penelitian, yang tersusun atas waktu dan tempat penelitian, spesifikasi perangkat keras dan perangkat lunak, prosedur penelitian, diagram alir penelitian, dan tahapan komputasi. Bab IV Hasil dan Pembahasan, yaitu memuat penjelasan terkait hasil analisis pengaruh lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Mn, yang membahas mengenai pembentukan struktur LaFeO_3 , molekul gas etanol dan lapisan rGO, uji konvergensi struktur LaFeO_3 dengan kalkulasi SCF, optimasi jarak molekul gas etanol terhadap LFMO, optimasi jarak rGO terhadap LFMO, energi adsorpsi sistem LFMO dan LFMO @ rGO terhadap molekul gas etanol. Analisis data berdasarkan hasil energi adsorpsi. Bab V Simpulan, Implikasi dan Rekomendasi, menyajikan simpulan dari hasil analisis data, serta implikasi dan rekomendasi untuk penelitian selanjutnya mengenai sensor gas etanol.