

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Etanol dengan rumus empiris C_2H_6O merupakan cairan tidak berwarna yang mudah menguap dengan aroma dari hasil fermentasi gula. Etanol termasuk ke dalam jenis alkohol yang dapat diaplikasikan ke dalam beberapa keperluan seperti bahan bakar, desinfektan, pelarut, pengawet, serta bahan utama dalam pembuatan minuman alkohol (Onyekwelu, 2019). Mudah-mudahan penguapan etanol memiliki dampak negatif pada berbagai bidang seperti kesehatan dan lingkungan. Paparan uap etanol dapat menyebabkan polusi udara yang signifikan sehingga menimbulkan risiko terhadap keanekaragaman hayati serta berdampak buruk pada fungsi *neurobehavioral* manusia (Kodak, 2017). Etanol dapat meningkatkan sisi neurologis seperti pusing, mengantuk, serta kesulitan konsentrasi (Ratner dkk., 2020).

Berdasarkan dampak negatif gas etanol maka diperlukan suatu pengembangan komponen yang dapat mengindera keberadaan gas etanol yaitu sensor gas. Sensor gas merupakan alat yang dapat mendeteksi bahan mudah terbakar dengan konsentrasi rendah, gas beracun, serta dapat memantau pencemaran lingkungan (Nikolic, 2020). Dalam pembuatan sensor, bahan semikonduktor organik banyak digunakan karena bersifat sensitif terhadap uap etanol (Aleksanyan dkk., 2022; Ali, Gupta, dan Shafiei, 2021; Nasri dkk., 2021). Selain itu, penggunaan semikonduktor pada sensor memiliki kelebihan lainnya yaitu memiliki biaya bahan dan pembuatan yang relatif terjangkau dibandingkan bahan lain (Melia dan Elvaswer 2022).

Keberadaan gas pada sensor dapat dideteksi berdasarkan perubahan sifat elektronik material saat berinteraksi dengan molekul gas. konduktivitas listrik suatu material berubah seiring dengan perubahan *density* (kepadatan) pembawa muatan *hole* ketika terkena molekul gas. Hal itu karena molekul gas memiliki muatan untuk setiap atomnya sehingga akan mempengaruhi mobilisasi pembawa muatan dalam suatu bahan / material (Suhendi, Haryadi, dan Suprayoga, 2022). Molekul gas mempunyai muatan sehingga akan mengganggu struktur pita material sensor. Oleh

karena itu, akibat terganggunya struktur pita maka akan terjadi pergeseran atau perubahan struktur pita yang menyebabkan pergerakan elektron atau hole dari pita valensi dan pita konduksi. Perubahan tersebut dapat dikalkulasikan untuk digunakan sebagai sinyal untuk sensor gas.

Material yang banyak digunakan untuk pembuatan sensor gas yaitu LaFeO_3 . LaFeO_3 merupakan material perovskite yang berpotensi peka terhadap gas karena tingginya sifat penginderaan gas dan stabilitas termal (Rong dkk., 2018). Material LaFeO_3 biasa digunakan untuk mendeteksi molekul gas yang terdapat oksigen karena sifat defisiensi oksigennya yang mana berperan penting dalam sifat adsorpsi dan perilaku katalitik (Sharma dkk., 2020). LaFeO_3 juga termasuk oksida perovskite dengan struktur ABO_3 yang memiliki karakteristik redoks yang baik pada rentang temperature yang luas serta aktivitas katalitik yang sangat tinggi.

Gas LaFeO_3 sering dipelajari karena uniknya struktur kristal dan kinerjanya yang baik (Meng dkk., 2024). Pada penjelasan interaksi redoks dengan gas target pengoksidasi dan pereduksi yaitu kation La^{3+} menjadi stabil saat anion O^{2-} bertindak sebagai tempat adsorpsi molekul asam. Kation Fe^{3+} dapat mengubah sebagian bilangan oksidasi, mengendalikan adsorpsi-desorpsi antara anion oksigen kisi, dan oksigen fase gas (Chumakova dkk., 2023). Akan tetapi, LaFeO_3 sebagai penginderaan gas memiliki respon rendah serta batas deteksinya tidak cukup rendah untuk penggunaan skala besar di bidang sensor gas (H. Zhang dkk., 2022).

LaFeO_3 memiliki beberapa kekurangan lainnya yaitu resistansi terlalu tinggi, sensitivitas gas yang rendah, dan suhu pengoperasian sensor yang terlalu tinggi (Gu dkk., 2021). Dalam parameter tersebut, sensitivitas dan selektivitas termasuk ke dalam indikator krusial yang mempengaruhi prinsip kerja dari sensor gas. Sensitivitas merupakan persentase perubahan ketahanan lapisan tipis terhadap banyak atau sedikitnya gas. Kemudian, selektivitas didefinisikan sebagai kemampuan pengidentifikasian gas tertentu pada campuran gas yang mana oksida logam lebih sensitif terhadap jenis gas kimia di udara (Dayekh dan Hussain, 2022). Oleh karena itu, dari kekurangan material LaFeO_3 dibutuhkan *doping* untuk mengoptimalkan deteksi dan performa seperti selektivitas dan selektivitasnya.

Paladium (Pd) merupakan salah satu material yang potensial untuk dijadikan *doping* LaFeO_3 . Material Pd mengoptimalkan sensor gas dengan

menunjukkan selektivitas dan sensitivitas yang baik untuk sensor (X. Wang dkk., 2016). Kemudian Pd dikembangkan untuk aplikasi gas sensor karena aktivitas katalik yang baik dan sifat uniknya dalam membentuk hibrida. Lalu, Pd memiliki luas permukaan yang tinggi dan konduktivitas listrik yang baik (Kumar dkk., 2022). LaFeO_3 yang di-*doping* Pd dapat meningkatkan aktivasi oksidasi. Kemudian, luas permukaan yang tinggi memungkinkan untuk mensintesis katalis LaFeO_3 dan *doping* tersebut menunjukkan aktivitas reduksi yang luar biasa karena kapasitas penyimpanan oksigennya (Basahel dkk., 2022). Dari penjelasan tersebut, dapat diketahui bahwa *doping* Pd dapat mengoptimalkan sensor gas. Dengan demikian, penelitian ini akan menggunakan *doping* Pd untuk material LaFeO_3 .

Material lainnya yang dapat mendukung pembuatan sensor gas yaitu *graphene*. *Graphene* memiliki karakteristik bahan yang baik dengan luas permukaan spesifik yang besar dan mobilitas yang baik dengan kerapatan pembawa yang baik menjadikan bahan yang menarik dalam penginderaan gas (Rattan dkk., 2022). Atom permukaan yang berada dalam *graphene* dapat menyerap molekul gas sehingga memberikan area yang cukup besar untuk penginderaan gas serta daya tarik antar bahan menjadi ikatan kovalen stabil (Balram dkk., 2024). Dari hal tersebut, penggunaan komposit *graphene* dapat menjadi skema yang menjanjikan untuk meningkatkan kinerja sensor.

Perovskite oxide dan *reduced graphene oxide* (rGO) merupakan salah satu kandidat untuk digunakan sebagai bahan penginderaan yang mana rGO adalah bahan penginderaan gas sensitif serta *PO* (ABO_3) memberikan kemampuan hebat untuk menyesuaikan formulasinya dengan mengubah elemen situs A/B dan *doping* sehingga rGO dan LaFeO_3 akan meningkatkan penginderaan gas (Sharma dkk., 2020). rGO juga memiliki kelebihan lainnya yaitu rasio permukaan terhadap volume yang tinggi, konduktivitas yang baik, serta lebih kuat dari baja secara mekanis (Waghmare dkk., 2024). Dari banyaknya keunggulan, rGO sering dimanfaatkan oleh para peneliti untuk diaplikasikan ke pembuatan sensor karena fabrikasinya lebih terjangkau dibandingkan *graphene*. Dengan demikian untuk memanfaatkan potensi dari rGO tersebut, dalam penelitian ini akan ditambahkan lapisan rGO pada material LaFeO_3 dengan *doping* Pd untuk meningkatkan penginderaan gas.

Pada penelitian ini akan dilakukan simulasi komputasi menggunakan Teknik *Density Functional Theory* (DFT) dengan material LaFeO_3 yang di-*doping* Paladium dan rGO. Metode DFT merupakan pendekatan *ab initio* yang diperlukan untuk besarnya sistem kristal (Rostika dkk., 2022). Teori DFT memiliki keunggulan salah satunya fleksibel untuk diterapkan diberbagai bidang seperti ilmu material dan dapat digunakan untuk menghitung sifat celah pita (Heryanto dkk., 2024). Kemudian DFT memiliki kemampuan untuk memodelkan sistem kompleks (Surendra, 2021).

Pemodelan simulasi DFT dilakukan dalam penelitian untuk mengidentifikasi dan melihat potensi sensor gas tanpa melakukan eksperimen sehingga meminimalisir biaya dan kegagalan. Pendekatan metode DFT ini akan menghitung struktur pita dan energi celah pita setelah diperolehnya struktur pita. Kemudian akan dilanjutkan dengan analisa energi adsorpsinya untuk mengetahui pengaruh dari diberi lapisan rGO dan tidak diberi rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Pd untuk sensor gas. Penelitian ini akan dilakukan dengan menggunakan *High Performance Computer* (HPC). Pemodelan komputasi dilakukan dengan menggunakan program seperti Quantum Espresso.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan penjelasan latar belakang, rumusan masalah pada penelitian ini sebagai berikut.

1. Bagaimana energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 dengan *doping* Pd?
2. Bagaimana energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 dengan *doping* Pd dan ditambahkan lapisan rGO?
3. Bagaimana *band gap energy* (energi celah pita) material LaFeO_3 dengan *doping* Pd dengan lapisan rGO dan tanpa lapisan rGO sebelum terpapar gas etanol serta saat terpapar gas etanol?

1.3 Batasan Masalah Penelitian

Pada penelitian ini lapisan rGO merupakan struktur mikroskopis sehingga parameter makroskopis tebal maupun lebarnya dapat diabaikan. Lapisan rGO di

penelitian ini berbentuk single layer yang dikombinasi dengan atom hidrogen serta ditambahkan satu atom oksigen

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah maka tujuan penelitian sebagai berikut.

1. Mengetahui energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 dengan *doping* Pd
2. Mengetahui energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 dengan *doping* Pd dan ditambahkan lapisan rGO.
3. Mengetahui *band gap energy* (energi celah pita) dari suatu material LaFeO_3 dengan *doping* Pd dengan lapisan rGO dan tanpa diberi lapisan rGO sebelum terpapar etanol dan saat terpapar etanol.

1.5 Manfaat Penelitian

Penelitian skripsi yang dilakukan diharapkan dapat memberikan wawasan baru bagi pembaca terkait efek penambahan lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Pd. Kemudian, diharapkan tulisan ini menjadi manfaat untuk para peneliti yang akan meriset di bidang ini untuk menemukan sebuah temuan yang baru di masa depan. Selain itu, penelitian ini dilakukan untuk meningkatkan efisiensi penginderaan gas secara pengerjaan dengan metode pemodelan.

1.6 Struktur Organisasi Skripsi

Struktur skripsi ini tersusun ke dalam beberapa bab dimana setiap bab terdapat beberapa subbab pembahasan tersendiri dengan rincian sebagai berikut. Bab 1 Pendahuluan tersusun dari latar belakang, rumusan masalah, tujuan penelitian, manfaat, dan struktur organisasi skripsi. Bab 2 Kajian Pustaka tersusun dari kajian literatur terkait sensor gas, etanol, material perovskite LaFeO_3 , *doping* Pd, lapisan rGO, *Density Functional Theory* (DFT), Energi Adsorpsi, dan Mekanisme Adsorpsi. Bab 3 Metodologi Penelitian memiliki subbab yang terdiri dari waktu dan tempat penelitian, spesifikasi perangkat keras dan versi perangkat lunak, prosedur penelitian, diagram alir penelitian, dan tahapan komputasi. Bab 4 Hasil dan Pembahasan yang membahas konvergensi harga k-points, konvergensi

nilai energi cut off, jarak optimal molekul gas etanol, jarak optimal rGO, energi adsorpsi Pd-LaFeO₃, dan Pd- LaFeO₃ @ rGO terhadap molekul gas etanol, analisis data berdasarkan nilai energi adsorpsi. Bab 5 Simpulan, Implikasi, dan Rekomendasi berisikan simpulan komprehensif terkait inti penelitian, implikasi dari hasil penelitian, serta rekomendasi bagi para peneliti selanjutnya yang akan melakukan penelitian lanjutan.