

## BAB III METODE PENELITIAN

### 3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dilakukan dari Februari 2023 dengan metode komputasi menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang disediakan oleh Program Studi Fisika di Laboratorium Fisika Material di Gedung A Fakultas Pendidikan Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam (FPMIPA). Selain itu, penelitian juga akan dilakukan dengan menggunakan fasilitas dari Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang terletak di Pusat Riset Komputasi, Cibinong, Bogor. Penelitian dilakukan secara jarak jauh (Virtual) menggunakan SSH *remote command*, sehingga terminal HPC dapat digunakan dari laptop penulis.

### 3.2 Spesifikasi perangkat keras dan perangkat lunak

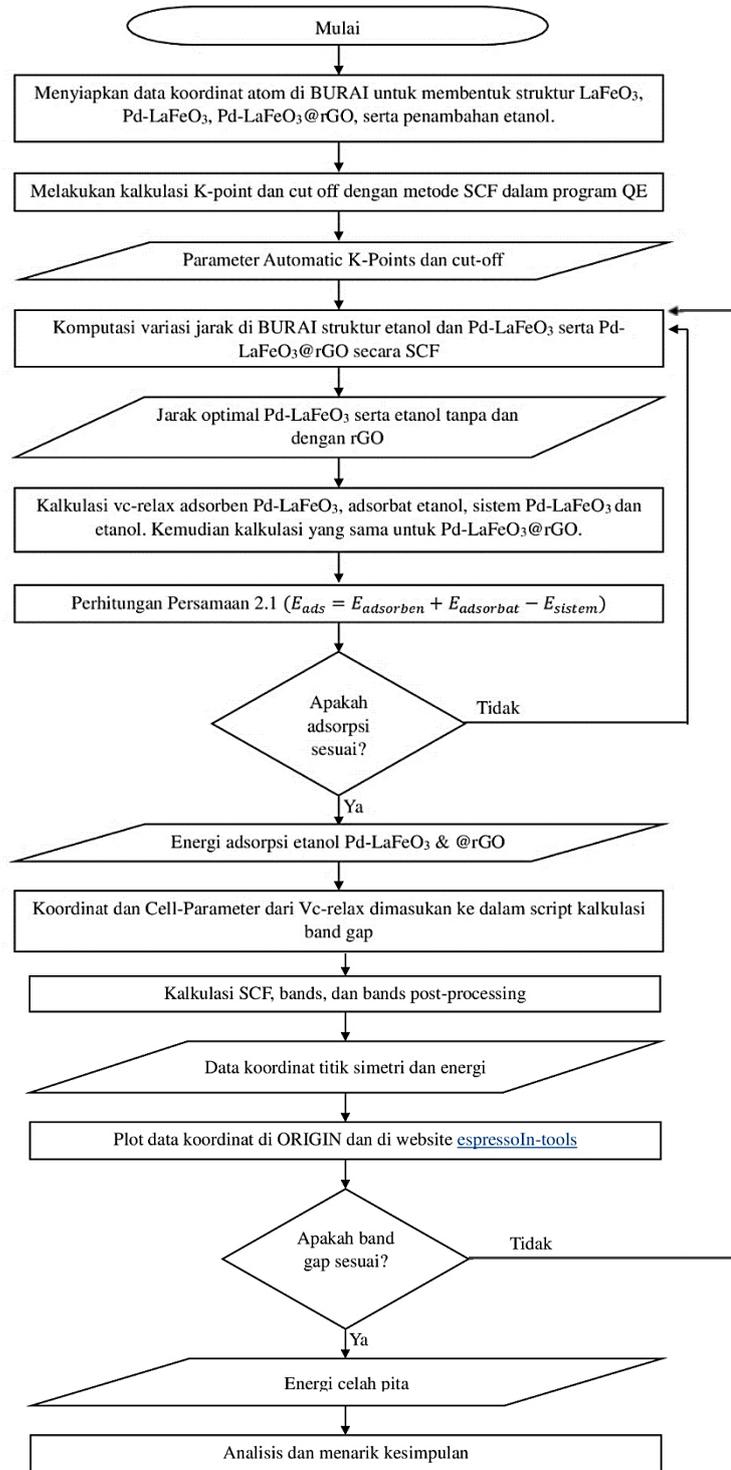
Pada penelitian ini digunakan HPC yang berada di gedung FPMIPA A terletak di Laboratorium Fisika Material dengan 24 *cores*. Pada pengerjaan penelitian ini, digunakan akses 22 *cores* untuk meminimalisir *error* dan meningkatkan keberhasilan running komputasi. Kemudian, HPC BRIN sebagai layanan komputasi umum memiliki spesifikasi maksimal hingga 64 *cores*, dengan 384 GB RAM untuk tiap *node*. Dalam pengerjaannya, proses komputasi paling sering digunakan 32-60 *cores* untuk setiap komputasi. Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian antara lain adalah Quantum Espresso Versi 7.0, BURAI Versi 1.3, Visual Studio Code, serta Origin.

### 3.3 Prosedur Penelitian

Penelitian ini menggunakan metode kuantitatif dengan pemodelan komputasi menggunakan HPC. Pemodelan struktur material yang akan uji menggunakan software BURAI (GUI untuk Quantum Espresso). Kemudian, untuk komputasi energi adsorpsi material dilakukan dengan DFT (*Density Functional Theory*) melalui program Quantum Espresso (QE). Pada proses kalkulasi, fungsi korelasi digunakan dengan pertukaran DFT dan GGA. Hasil komputasi yang telah diperoleh selanjutnya akan diolah menggunakan origin.

### 3.4 Diagram Alir Penelitian

Penelitian yang dilakukan dari awal hingga akhir diilustrasikan menggunakan diagram alir pada Gambar 3.1.



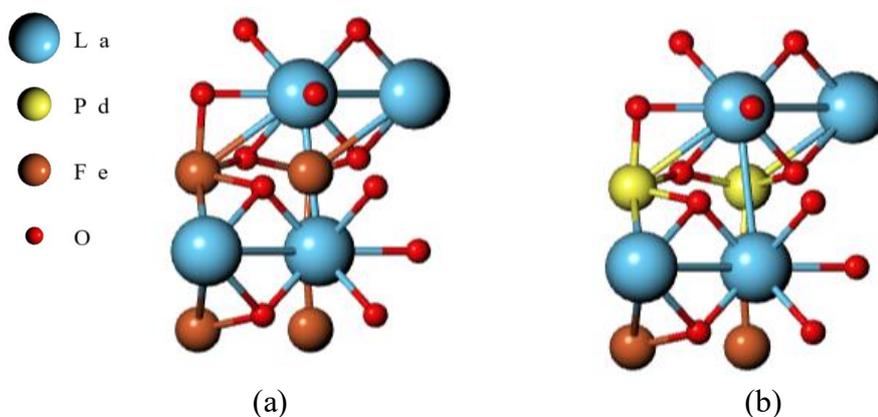
Gambar 3. 1 Diagram Alir Penelitian

### 3.5 Tahapan Komputasi

Tahapan komputasi terbagi menjadi beberapa tahapan yaitu menyusun struktur LFO dengan doping Pd yang tanpa lapisan rGO dan yang diberi lapisan rGO. Kemudian menyusun struktur dengan interaksi molekul gas etanol. Selanjutnya, melakukan kalkulasi SCF untuk menentukan konvergensi dan optimasi, kalkulasi vc-relax untuk menentukan energi adsorpsi, serta kalkulasi *band* untuk memprediksikan nilai celah pita.

#### 3.5.1 Menyiapkan Struktur Pd- LaFeO<sub>3</sub>

LFO mengkristal dalam struktur orthorombik dan bahan antiferromagnetik (Gordon dkk., 2023). LFO mengandung 20 atom dalam selnya (Zhou dkk., 2021). Dari 20 atom tersebut, LFO tersusun atas 4 atom La, 4 atom Fe, dan 12 atom O. Struktur LFO dan LFO dengan doping Pd diperoleh dari pemodelan di BURAI dapat dilihat pada Gambar 3.2. Dalam memperoleh struktur LFO doping Pd, dilakukan dengan mengganti sebagian atom Fe pada struktur LFO dengan atom Pd. Gambar 3.2 memiliki parameter kisi sebesar  $A = 5.60 \text{ \AA}$ ,  $B = 5.66 \text{ \AA}$ ,  $C = 7.94 \text{ \AA}$



Gambar 3. 2 Ilustrasi grafis struktur (a) LaFeO<sub>3</sub> (b) Pd-LaFeO<sub>3</sub>

#### 3.5.2 Menyiapkan rGO

rGO dapat sintesis secara monolayer. Pada penelitian ini didesain *single layer* seperti ilustrasi pada Gambar 3.3.



Gambar 3. 3 Ilustrasi grafis struktur rGO

Struktur rGO pada penelitian ini diperoleh dengan struktur *graphene* yang memiliki 19 atom karbon (C) dengan 5 cincin (*hexagon*). Pada pemodelan ini, ikatan bebas terakhir dari atom karbon disaturasi dengan atom hidrogen (H). Dalam membentuk struktur rGO, satu atom oksigen akan dimasukkan ke dalam struktur *graphene*. Atom O berperan sebagai permukaan atom oksigen yang terletak pada ikatan karbon C-C dari struktur rGO.

### 3.5.3 Menyiapkan Struktur Gas Etanol

Pada penelitian ini struktur molekul gas yang digunakan yaitu struktur molekul etanol. Struktur tersebut dapat diakses di website Crystallography Open Database. Informasi dari website tersebut penting untuk digunakannya file struktur kristal gas etanol dalam simulasi Quantum Espresso. Data mengenai struktur molekul penting untuk menjadi dasar simulasi di BURAI dan komputasi dengan Quantum Espresso. Struktur etanol terdiri dari 2 atom C, 6 atom H, dan 1 atom O.

Data struktur gas etanol dilakukan pemodelan dengan menggunakan BURAI. Pemodelan dilakukan sesuai dengan file struktur yang diperoleh dari website dengan koordinat dan cell parameter yang sama. Dari pemodelan tersebut, dilakukan kombinasi antara struktur etanol dengan Pd-LaFeO<sub>3</sub>.

### 3.5.4 Menentukan Konvergensi Struktur dengan Kalkulasi SCF

Konvergensi struktur dilakukan dengan memvariasikan parameter untuk penemuan nilai konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off*. Setelah

divariasikan, dilakukan proses kalkulasi SCF dengan program Quantum Espresso (QE). Energi total sistem pada variasi harga *k-points* dan energi *cut off* yang diperoleh selanjutnya diplot terhadap energi total sistem dengan menggunakan software Origin. Hasil plot yang diperoleh akan menentukan konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off*.

Konvergensi *k-points* dan energi *cut-off* ditentukan berdasarkan nilai total energi yang mulai stabil di angka tertentu. Penentuan nilai tersebut dilakukan untuk penggunaan nilai *k-points* dan energi *cut-off* yang sesuai dengan percobaan dikalkulasi selanjutnya. Kalkulasi SCF, *bands*, dan *vc-relax* menggunakan nilai *k-points* dan energi *cut-off* yang tetap sesuai hasil penelitian.

### 3.5.5 Menentukan Jarak Optimal Molekul Gas Etanol

Pemvariasian jarak molekul gas etanol dapat menentukan jarak optimal molekul gas etanol. Variasi dalam penelitian ini dimulai dari 1 Å hingga 3.5 Å dengan selang 0,25 Å. Kalkulasi yang dilakukan pada tiap variasi jarak merupakan SCF. Dari kalkulasi SCF akan diperoleh total energi sistem. Kemudian, akan dilakukan plot variasi jarak molekul gas etanol terhadap total energi sistem dengan menggunakan Origin.

Jarak optimal didapatkan dari menentukan total energi sistem yang paling besar dibandingkan dengan variasi jarak lainnya. Jarak optimal tersebut selanjutnya akan digunakan dengan angka yang tetap dalam script kalkulasi *vc-relax* terhadap molekul etanol. Kemudian, jarak tersebut juga digunakan untuk pemodelan menggunakan BURAI antara Pd-LaFeO<sub>3</sub> dengan etanol.

### 3.5.6 Menentukan Jarak Optimal rGO

Dalam penentuan jarak optimal rGO prosedurnya sama dengan penentuan jarak optimal molekul gas yaitu akan dilakukan dengan memvariasikan jarak molekul gas rGO. Namun, pada variasi jaraknya berbeda dimulai dari 1 Å hingga 4 Å. Kemudian dikalkulasikan pada tiap jarak sehingga akan diperoleh total energi sistem. Selanjutnya, dilakukan plot variasi jarak rGO terhadap total energi sistem serta jarak optimal diperoleh dengan penentuan total energi sistem yang substansial dibanding variasi jarak lainnya.

Jarak optimal rGO diperoleh dari total energi sistem yang paling besar dibandingkan dengan variasi jarak lainnya. Jarak optimal tersebut selanjutnya akan digunakan dengan angka yang tetap dalam script kalkulasi vc-relax terhadap molekul rGO. Kemudian, jarak optimal digunakan untuk pemodelan menggunakan BURAI antara Pd-LaFeO<sub>3</sub> dengan rGO. Selain itu, jarak optimal molekul etanol juga ditambahkan dalam permodelan dengan rGO.

### 3.5.7 Menentukan Energi Adsorpsi

Nilai k-points, energi cut-off, dan jarak optimal digunakan dengan angka yang tetap pada proses ini. Proses penentuan energi adsorpsi dilakukan dengan cara pengkalkulasian energi total sistem untuk adsorben, adsorbat, dan sistem secara keseluruhan. Energi adsorpsi digunakan dengan metode vc-relax. Metode vc-relax digunakan karena diperolehnya energi total pada sistem merupakan energi sistem yang telah dioptimasi pada struktur atom dan parameter kisinya.

Penentuan energi adsorpsi dilakukan 5 percobaan vc-relax yaitu pada energi total untuk adsorben Pd-LaFeO<sub>3</sub> dan Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO. Kemudian energi total untuk adsorbat pada molekul etanol. Terakhir, energi sistem secara keseluruhan antara Pd-LaFeO<sub>3</sub> dan Pd-LaFeO<sub>3</sub>@rGO serta molekul etanol. Nilai energi total dari vc-relax tersebut dihitung menggunakan persamaan 2.1 sehingga diperoleh energi adsorpsi tanpa dan dengan rGO.

### 3.5.8 Menentukan Celah Pita (Band Gap)

Berdasarkan hasil dari komputasi vc-relax sebelumnya untuk pencarian energi adsorpsi diperoleh nilai koordinat dan *cell parameter*. Nilai koordinat dan *cell parameter* tersebut otomatis diperoleh ketika kalkulasi vc-relax telah selesai dilakukan dan dapat dilihat dibagian akhir setelah *final enthalpy* ditemukan. Hasil dari komputasi vc-relax yang digunakan pada penentuan band gap dapat dilihat pada Gambar 3.4.

```

End of BFGS Geometry Optimization

Final enthalpy          =  -3462.1369109987 Ry

File ./out/pd_lgfo.bfgs deleted, as requested
Begin final coordinates
new unit-cell volume =  1651.02954 a.u.^3 (  244.65734 Ang^3 )
density =              7.27686 g/cm^3

CELL_PARAMETERS (alat= 10.58397808)
 0.980557288  0.000000000  0.000000000
 0.000000000  1.018231858  0.000000000
 0.000000000  0.000000000  1.394724392

ATOMIC_POSITIONS (angstrom)
La      5.2794753296      10.3995988246      11.3767340855
La      8.0254305465      8.1792902361      7.4210779464
La      7.8803117858      7.5481460063      11.3767283680
La      10.6262694799     5.3278358617      7.4210821214
Pd      7.9528687640      5.0122584254      9.3989035517

```

Gambar 3. 4 Koordinat dan *Cell Parameter* yang dihasilkan dari Vc-relax

Informasi koordinat dan *cell parameter* yang sudah di relaksasi digunakan untuk kalkulasi selanjutnya. Komputasi untuk menentukan celah pita antara lain yaitu proses SCF, kalkulasi bands dan post-processing kalkulasi bands. Pada proses bands dilakukan pengunggahan struktur material yang sudah di relaksasi dari file BURAI ke [See K-path](#) sehingga akan di peroleh k-point otomatis yang digunakan dalam script. Kemudian setelah semua proses kalkulasi dilakukan akan terdapat output berupa file .dat.gnu yang mana berisikan data koordinat titik simetri tinggi dan energi.

Selanjutnya data koordinat tersebut dapat divisualisasikan ke dalam ORIGIN dan [espressoIn-tools](#) untuk mengetahui nilai celah pita secara otomatis. Kemudian dapat dilakukan juga perhitungan manual di ORIGIN dan dibandingkan dengan website [espressoIn-tools](#). Dengan demikian hasil plot struktur pita dan besaran *band gap* diperoleh.