

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang Penelitian

Gas merupakan bentuk materi yang paling sering ditemui di lingkungan sehari-hari yang muncul dari proses alami seperti penguapan cairan maupun dari hasil reaksi kimia di berbagai industri. Gas dengan berbagai sifat dan jenisnya, menyimpan potensi yang berbahaya seperti mudah terbakar, mudah meledak, beracun jika dihirup, dan sebagainya. Pengawasan terhadap gas sulit dilakukan karena wujudnya tidak dapat dilihat langsung oleh mata. Selain itu, sebagian gas yang berbahaya memiliki sifat tidak berbau dan tidak berwarna. Berdasarkan hal tersebut, maka sangat penting untuk membuat suatu piranti yang dapat mendeteksi keberadaan suatu gas tertentu.

Perkembangan teknologi khususnya pada bidang semikonduktor menuntun para peneliti untuk menjawab tantangan tersebut. Sejak tahun 1970 mulailah dikenal sensor gas semikonduktor yang memiliki kemampuan untuk mengubah sinyal yang disebabkan oleh interaksi kimia menjadi sinyal listrik (Yamazoe, 2005). Walaupun sudah dikembangkan sejak lama, tantangan untuk menciptakan sensor gas yang memiliki respon yang cepat, selektivitas dan sensitivitas yang tinggi masih menjadi tantangan saat ini (Ali dkk., 2021).

Seiring dengan berkembangnya industri, kebutuhan akan sensor gas pun meningkat. Salah satu sensor gas yang banyak digunakan adalah sensor gas etanol yang diaplikasikan untuk mengontrol proses fermentasi makanan dan uji kesadaran pada pengendara (Zhan dkk., 2013). Lebih lanjut, etanol merupakan salah satu senyawa organik volatil (VOCs) dimana senyawa ini mudah menguap dan mempengaruhi polusi udara maupun kesehatan manusia (Cao dkk., 2019). Dengan alasan tersebut, perlu adanya pengembangan lebih lanjut untuk meningkatkan performa sensor gas etanol.

Kemajuan penelitian tentang material semikonduktor dan material dua dimensi telah membuka peluang baru bagi pengembangan sensor gas. Material *Metal Oxide Semiconductor* (MOS) menjadi fokus para peneliti saat ini karena potensinya yang baik dalam aplikasi teknologi, terutama di industri untuk

memantau keamanan (Ge dkk., 2019). Material seperti SnO_2 , ZnO , dan TiO_2 adalah contoh sensor gas berbasis MOS yang umum dipelajari. Perubahan variabel seperti struktur kristal, metode sintesis dan penambahan doping pada material tersebut telah dibuktikan dapat meningkatkan performa sensor gas. Namun, hal tersebut tidak selalu mudah untuk dilakukan dan diterapkan pada material tersebut (Krishna dkk., 2022).

LaFeO_3 menjadi material yang masif digunakan dalam aplikasi sensor gas khususnya etanol karena memiliki stabilitas yang baik di berbagai kondisi lingkungan, struktur kristal yang mudah dikontrol, dan mampu berinteraksi dengan gas-gas yang bersifat oksidasi atau reduksi, seperti etanol (Suhendi dkk., 2022; Zhao dkk., 2000). Salah satu yang menjadi tantangan dalam mengembangkan LaFeO_3 sebagai sensor gas adalah sifatnya yang memiliki resistansi yang tinggi sehingga perlu adanya doping untuk mengatasi masalah tersebut (Benali dkk., 2014). Doping dapat meningkatkan performa sensor gas dari MOS melalui salah satu dari beberapa faktor, seperti mengubah mikrostruktur atau morfologi, membentuk larutan padat stoikiometri, mengubah energi aktivasi, membentuk cacat oksigen, atau mengubah struktur elektronik atau *band gap* (Dey, 2018). Doping dalam konteks rekayasa material merujuk pada proses penambahan atom asing ke dalam struktur material yang bertujuan untuk mengatur sifat fisis maupun kimia dari substrat tersebut (Mateti dkk., 2019).

Penelitian tentang doping LaFeO_3 tentunya sudah banyak dilakukan dengan berbagai macam unsur seperti Ag (Wei dkk., 2017; Y. Zhang dkk., 2018), Ba, Sr, Br (Bidrawn dkk., 2008; Sun dkk., 2011) maupun senyawa seperti ZnO (Suhendi dkk., 2022; H. Zhang dkk., 2023). Ag- LaFeO_3 (ALFO) memiliki potensial besar sebagai sensor gas karena memiliki kombinasi sifat-sifat yang mendukung, seperti luas permukaan yang besar, struktur yang mudah dimodifikasi, dan kinerja yang stabil terhadap perubahan suhu (Rong dkk., 2017). Lebih lanjut, menurut (Navale dkk., 2021) penambahan Ag sebagai doping pada sensor gas berbasis semikonduktor merupakan strategi yang menarik mengingat Ag sebagai salah satu logam mulia sehingga memiliki stabilitas kimia yang baik dan dapat bertindak sebagai katalis.

Di samping itu, kemunculan material *graphene* akhir-akhir ini menarik banyak perhatian para peneliti karena sifatnya yang unik. *Graphene*, dengan struktur atom karbon yang terdiri dari satu lapisan atom, menonjol karena konduktivitas listriknya yang sangat tinggi, luas permukaan yang besar, dan kekuatan mekanik yang luar biasa. Penggunaan *graphene* telah dikembangkan dalam banyak aplikasi tidak terkecuali pada bidang sensor gas. Pengaruh material *graphene* dan turunannya telah dibuktikan secara teoritis dan eksperimental dapat meningkatkan performa sensor gas (Tian dkk., 2018).

Reduced Graphene Oxide (rGO), sebagai salah satu turunan *graphene*, menjadi material yang sesuai untuk aplikasi sensor gas. Material rGO memiliki cacat struktur yang memungkinkan adsorpsi dan aktivitas katalitik yang lebih baik, dapat diproduksi dengan metode yang lebih sederhana dan dapat diintegrasikan ke dalam berbagai aplikasi dengan lebih mudah dibandingkan dengan *graphene* yang murni (Drewniak dkk., 2020). Cacat struktur dan kehadiran gugus oksigen pada rGO memungkinkan pembukaan situs aktif lebih banyak yang berperan sebagai tempat reaksi dan tempat ikatan dengan hidrogen pada molekul gas sehingga dapat memfasilitasi proses adsorpsi dengan lebih efisien (X. Xiao dkk., 2023). Penambahan lapisan rGO pada permukaan material menjadi strategi yang menarik mengingat rGO dengan cacat strukturnya memiliki mobilitas pembawa muatan yang tinggi. Hal tersebut akan menyebabkan perubahan struktural dan perubahan konduktivitas yang mempengaruhi distribusi pita energi pada material tersebut (Dua dkk., 2010). Selaras dengan hal tersebut, dalam penelitian L. Zhang dkk., (2019) kombinasi material Ag dengan rGO secara sinergis dapat meningkatkan kemampuan sensor untuk mendeteksi NH₃ sebagai gas volatil.

Dengan merujuk pada hasil temuan diatas, penelitian ini akan menganalisis efek kombinasi doping Ag dan penambahan lapisan rGO pada sensor gas LaFeO₃. Analisis akan didasarkan pada energi adsorpsi material sensor gas terhadap molekul etanol dan energi celah pitanya menggunakan metode komputasi. Energi adsorpsi menjadi parameter kunci yang menunjukkan kuatnya interaksi antara material sensor dengan molekul gas (Mazumder & Jha, 2023). Semakin besar energi adsorpsi umumnya semakin baik pula sensitivitas dan selektivitas dari sensor gas tersebut (X. Wang dkk., 2021). Perhitungan energi celah pita digunakan untuk

mengukur perubahan konduktivitas elektron ketika sebelum dan sesudah adsorpsi (J.-H. Li dkk., 2021). Adsorpsi molekul gas dapat mengubah struktur pita energi suatu material, seperti dalam penelitian Shahriar dkk., (2022) melaporkan bahwa adsorpsi molekul NO pada lapisan tipis GaAs menyebabkan penurunan yang signifikan pada energi celah pita dari 1,0 eV menjadi 0,64 eV.

Pemodelan struktur material dan perhitungan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) dilakukan untuk menentukan energi adsorpsi dan energi celah pita. DFT dapat memberikan prediksi yang sangat akurat tentang sifat elektronik material, seperti energi total sistem dan energi celah pita. Disisi lain, metode komputasi dipilih karena dapat memberikan hasil yang lebih cepat dengan kontrol variabel yang lebih mudah diterapkan. Dalam prakteknya, pemodelan material akan menggunakan *software* BURAI dan kalkulasi DFT akan dijalankan menggunakan *software* Quantum ESPRESSO dengan bantuan *High Performance Computer* (HPC). Melalui analisa data komputasi tersebut diharapkan material Ag-LaFeO₃ yang dilapisi dengan rGO menunjukkan karakteristik sebagai sensor gas etanol yang menjanjikan.

1.2 Rumusan Masalah Penelitian

Dalam upaya merancang material sensor gas dengan performa yang baik dan memahami secara mendalam tentang interaksi material tersebut, rumusan masalah penelitian ini dapat diidentifikasi sebagai berikut:

1. Bagaimana nilai energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada material Ag-LaFeO₃ sebelum dan sesudah ditambahkan lapisan rGO?
2. Bagaimana nilai energi celah pita material Ag-LaFeO₃ dengan dan tanpa lapisan rGO sebelum dan saat terpapar molekul gas etanol?

1.3 Tujuan Penelitian

Untuk mencapai pemecahan terhadap permasalahan yang telah diidentifikasi, penelitian ini mengarahkan tujuannya pada beberapa poin utama sebagai berikut:

1. Mengetahui nilai energi adsorpsi molekul gas etanol pada material Ag-LaFeO₃ sebelum dan sesudah ditambahkan lapisan rGO.
2. Mengetahui nilai energi celah pita energi material Ag-LaFeO₃ dengan dan tanpa lapisan rGO sebelum dan saat terpapar molekul gas etanol.

1.4 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat memberikan wawasan baru terkait pengaruh sensor gas Ag-LaFeO₃ yang ditambahkan lapisan rGO. Hal tersebut diharapkan membuka potensi bagi pengembangan material baru dalam aplikasi sensor gas etanol dengan performa yang baik untuk pemantauan lingkungan dan industri.

1.5 Sistematika Penulisan

Skripsi akan disusun secara terstruktur dalam lima bab, dimulai dengan Bab 1 Pendahuluan, membahas latar belakang penelitian, rumusan masalah, tujuan penelitian, Batasan masalah dan manfaat penelitian. Bab 2 Kajian Pustaka akan membahas kajian literatur terkait yang akan dibagi ke dalam tiga subbab yakni sub bab sensor gas yang akan membahas mengenai material yang berinteraksi dalam penelitian sensor gas ini yakni LaFeO₃ sebagai MOS, doping Ag, lapisan rGO, dan gas target etanol. Sub bab tentang energi adsorpsi dan mekanismenya, dan sub bab terakhir tentang DFT dan bagian-bagian komputasi. Bab 3 Metodologi Penelitian memuat subbab yang tersusun dari waktu dan tempat penelitian, desain penelitian, pemodelan struktur kristal dan tahapan komputasi untuk menentukan energi adsorpsi dan energi celah pita. Bab 4 Hasil dan Pembahasan memuat hasil komputasi dan analisisnya untuk menjawab rumusan masalah. Bab 5 Simpulan, Implikasi, dan Rekomendasi akan berisi simpulan terkait inti penelitian, implikasi dari hasil penelitian, dan rekomendasi bagi peneliti berikutnya yang berminat melakukan penelitian lanjutan.