

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Indonesia merupakan negara dengan ketersediaan sumber energi yang melimpah. Sumber energi tersebut dapat dimanfaatkan sebagai energi alternatif terbarukan dengan meningkatkan ilmu pengetahuan dan teknologi secara signifikan. Salah satu sumber energi terbarukan yang sering dijumpai adalah etanol. Etanol atau etil alkohol merupakan alkohol rantai tunggal berbentuk cairan yang mudah menguap, mudah terbakar, tidak berwarna, dan memiliki bau khas yang kuat (Silveira dkk., 2009). Senyawa ini banyak digunakan dalam dunia industri. Etanol diaplikasikan sebagai bahan bakar alternatif, industri kimia, bahan medis, hingga produk kecantikan.

Selain berdampak positif dalam dunia industri, tentunya etanol memberikan dampak negatif pula. Etanol dapat berdampak pada gangguan metabolisme dan kekurangan nutrisi apabila dikonsumsi secara berlebihan (Wilson & Matschinsky, 2020). Tidak hanya itu, mengingat etanol bersifat mudah menguap menjadi gas yang apabila dihirup manusia secara berkala akan menyebabkan iritasi sistem pernapasan (Ahmed, 2001). Berdasarkan bahaya tersebut, dibutuhkan suatu komponen yang dapat mengindera keberadaan gas etanol.

Sensor gas adalah komponen atau perangkat elektronik yang dirancang untuk mendeteksi keberadaan dan konsentrasi suatu gas di udara atau lingkungan. Sensor gas tentunya memiliki parameter yang menentukan material tersebut layak atau tidak, diantaranya sensitivitas, stabilitas dan selektivitas, di mana sensor gas harus dapat mendeteksi jenis gas tertentu diantara beberapa campuran gas (Widodo, 2020). Pemenuhan parameter tersebut dapat memastikan bahwa sensor gas akan memberikan informasi pemindaian suatu molekul gas dengan akurasi tinggi. Untuk saat ini, semikonduktor merupakan material yang paling umum digunakan dan diteliti dalam pembuatan sensor gas (Dey, 2018). Hal ini disebabkan oleh berbagai potensi pengembangan yang tersedia dengan harga yang relatif terjangkau.

Sensor gas semikonduktor yang paling umum digunakan adalah bahan logam oksida, seperti SnO_2 , TiO_2 , dan $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$. Hal ini dikarenakan logam oksida

Vania Wirnawati, 2024

PENGARUH PENAMBAHAN LAPISAN rGO TERHADAP ENERGI ADSORPSI DAN BANDGAP Sr-LaFeO₃ SEBAGAI SENSOR GAS ETANOL MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY

Universitas Pendidikan Indonesia | repository.upi.edu | perpustakaan.upi.edu

memiliki karakteristik yang tepat untuk digunakan sebagai sensor gas (Nikolic dkk., 2020). Secara spesifik, terdapat material *perovskite* ABX_3 dengan A ditempati oleh kation dengan berbagai ukuran dan muatan, B ditempati kation logam, dan X ditempati oksigen. Salah satu material *perovskite* adalah $LaFeO_3$ yang memiliki peluang besar dalam pembuatan sensor gas karena selektivitasnya yang baik dan memiliki respon yang tinggi. Material *perovskite* $LaFeO_3$ digunakan untuk mendeteksi molekul gas yang memiliki oksigen dalam penyusunnya. Hal ini dikarenakan material *perovskite* mengalami jumlah oksigen yang kurang dari normal (Jia dkk., 2020). Akibatnya, material ini memiliki tingkat kepekaan yang tinggi terhadap oksigen. Gas yang dapat diidentifikasi oleh material *perovskite* diantaranya adalah gas etanol. Material $LaFeO_3$ dikembangkan sebagai material sensor gas etanol karena $LaFeO_3$ termasuk material sensitif dalam mendeteksi berbagai gas beracun, mudah terbakar, dan polutan (Cao dkk., 2018). $LaFeO_3$ juga merupakan material besi oksida yang paling stabil, memiliki ketahanan bahan yang tinggi terhadap korosi, dan konduktivitas listrik tinggi (Chen dkk., 2005).

Walaupun $LaFeO_3$ merupakan material yang potensial untuk pembuatan sensor gas, rentang deteksi dan kinerjanya belum optimal sehingga diperlukan pemberian *doping*. Mengganti salah satu atom dari material $LaFeO_3$ dengan tujuan meningkatkan sifat fisisnya dikenal sebagai *doping*. Dilakukannya *doping* pada bahan tertentu dapat meningkatkan kinerja sensor gas melalui pengendalian *donor density*, mengubah sifat asam-basa, dan penginderaan sifat elektronik sehingga terjadi interaksi antara gas di sekitar sensor dan lapisan penginderaan (Shirage dkk., 2016). Kinerja sensor gas tersebut dapat dioptimalkan dengan pemberian doping dengan unsur seperti Ca, Co, Sr, Ag, Pb, dan Pd (Pecchi dkk., 2011).

Pada penelitian ini Sr dipilih sebagai unsur untuk *doping* $LaFeO_3$ dengan alasan Sr memiliki elektron valensi yang sedikit sehingga dapat meningkatkan sensitivitas sensor gas (Zhang dkk., 2020) hal tersebut dikarenakan Sr berperan sebagai katalis dan membantu konsentrasi oksigen meningkat. Pemberian Sr dapat meningkatkan transfer muatan dan mempercepat respon sensor (Huang dkk., 2020), juga dapat memodulasi sifat elektronik material sensor, sehingga dapat memperluas rentang konsentrasi gas yang dapat dideteksi. Selain itu, *doping* strontium dapat meningkatkan selektivitas sensor gas terhadap gas target. Hal ini disebabkan karena

strontium dapat meningkatkan interaksi antara gas target dan permukaan sensor, sehingga sinyal yang dihasilkan oleh gas target lebih kuat dibandingkan dengan sinyal yang dihasilkan oleh gas lain (Jiang dkk., 2015). Penggunaan *doping* Sr pada material juga menghasilkan konduktivitas dan transmisi yang lebih tinggi dibandingkan dengan *doping* logam lainnya (Vijayan dkk., 2008).

Selain *doping*, penambahan *graphene* dan turunannya seperti *graphene oxide* (GO) dan *reduced graphene oxide* (rGO) memiliki sifat penginderaan gas yang baik karena menunjukkan luas permukaan spesifik yang besar, konduktivitas yang sangat baik, dan permukaannya dapat dengan mudah dimodifikasi oleh gugus fungsi (Tian dkk., 2018). Pada penelitian lainnya disebutkan bahwa *graphene* memiliki gangguan listrik yang rendah, stabilitas termal yang baik, nilai energi adsorpsi yang baik, dan mobilitas pembawa tinggi pada suhu kamar (Du dkk., 2019). rGO termasuk semikonduktor yang memiliki sifat elektronik yang baik dengan *gap* terendah dan mobilitas elektron yang tinggi (Geim & Novoselov, 2009), serta memiliki rapat daya tinggi, dan sifat mekaniknya yang kuat. Namun, sensor gas dengan rGO murni memiliki waktu respon dan pemulihan yang lama, sehingga menggabungkan rGO dengan logam oksida dapat meningkatkan penginderaan dan kemampuan sensor gas dengan baik (Majhi dkk., 2021).

Energi adsorpsi pada *graphene* mengacu pada energi yang dilepas ketika molekul menempel pada permukaan *graphene*. Energi adsorpsi menentukan kekuatan antara adsorbat dengan *graphene*. Untuk menghitung nilai energi adsorpsi, diperlukannya informasi mengenai energi total atom yang terisolasi dengan menggunakan perhitungan atom tunggal (Hu dkk., 2010). Ketika mencari energi adsorpsi, jenis adsorbat memengaruhi besarnya nilai. Hal ini dikarenakan adsorbat yang polaritasnya tinggi memiliki nilai energi adsorpsi yang tinggi pula (Gao dkk., 2020). Selain pengaruh jenis adsorbat, struktur *graphene* yang memiliki *doping* atau cacat pada permukaan akan menghasilkan energi adsorpsi yang lebih kuat dibandingkan dengan *graphene* murni (Kong dkk., 2014). Besar nilai energi adsorpsi ini dapat diketahui melalui metode perhitungan *Density Functional Theory* (DFT).

Energi *bandgap* dalam sensor gas merupakan energi minimum yang dibutuhkan elektron untuk berpindah. Ketika molekul gas teradsorpsi pada

permukaan sensor, maka terjadi perpindahan elektron dari pita valensi semikonduktor. Hal ini akan menghasilkan peningkatan konduktivitas sensor (Haryadi dkk., 2022). Apabila energi ikat molekul lebih kecil dari energi *bandgap* maka elektron akan berpindah dari pita valensi ke pita konduksi, pada kondisi ini sensor dapat mendeteksi gas tersebut. Lebar energi *bandgap* akan mempengaruhi proses eksitasi elektron dari pita valensi ke pita konduksi, oleh karena itu penggunaan dopan pada material mampu menurunkan energi *bandgap* (Rokhmawati, 2019).

Dalam pelaksanaannya, penelitian ini dilakukan dengan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). DFT merupakan metode perhitungan secara komputasi di mana metode ini dapat menghitung suatu senyawa kompleks dengan sederhana dan cepat (Pongajow dkk., 2017). DFT juga bertujuan untuk mengidentifikasi konfigurasi molekul yang teradsorpsi sehingga memunculkan besaran energi adsorpsi (Lazar dkk., 2013). Digunakannya DFT pada penelitian ini supaya diketahui pengaruh *doping* Sr pada lapisan rGO untuk energi adsorpsi dan *bandgap* material sensor gas LaFeO_3 . Metode DFT menjadi sarana untuk meminimalisir kegagalan eksperimen dengan hasil yang menjanjikan.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang yang telah dipaparkan, diperoleh rumusan masalah pada penelitian ini sebagai berikut:

1. Bagaimana energi adsorpsi Sr- LaFeO_3 yang terpapar molekul etanol tanpa dan dengan adanya lapisan rGO sebagai sensor gas menggunakan *Density Functional Theory*?
2. Bagaimana energi *bandgap* Sr- LaFeO_3 tanpa dan dengan adanya lapisan rGO sebelum dan sesudah terpapar molekul gas etanol sebagai sensor gas menggunakan *Density Functional Theory*?

1.3 Batasan Masalah Penelitian

Lapisan rGO dideskripsikan sebagai struktur mikroskopis sehingga parameter makroskopis seperti ketebalan dan lebar diabaikan. Selain itu, pada penelitian ini molekul etanol yang digunakan berupa satu struktur etanol inti.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah yang telah dirumuskan, adapun tujuan dari penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Mengetahui energi adsorpsi Sr-LaFeO₃ yang terpapar molekul etanol tanpa dan dengan adanya lapisan rGO sebagai sensor gas menggunakan *Density Functional Theory*.
2. Mengetahui energi *bandgap* Sr-LaFeO₃ tanpa dan dengan adanya lapisan rGO sebelum dan sesudah terpapar molekul gas etanol sebagai sensor gas menggunakan *Density Functional Theory*.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil-hasil penelitian ini diharapkan dapat memperkaya hasil-hasil penelitian sebelumnya terkait material sensor gas yang nantinya dapat digunakan sebagai bahan pembanding, pendukung, ataupun rujukan oleh para peneliti lain dalam bidang sejenis.

1.6 Sistematika Penulisan

Secara umum laporan penelitian ini terdiri dari lima bab, yaitu Pendahuluan, Tinjauan Pustaka, Metodologi Penelitian, Temuan dan Pembahasan, serta Simpulan, Implikasi, dan Rekomendasi. Tiap bab akan memiliki subbab pembahasan yang berbeda dengan rincian sebagai berikut. Bab 1 Pendahuluan meliputi latar belakang, rumusan masalah, tujuan, manfaat, dan sistematika penulisan. Bab 2 Tinjauan Pustaka membahas kajian literatur yang berhubungan dengan penelitian. Bab 3 Metodologi Penelitian berisikan metode-metode yang diterapkan pada penelitian. Bab 4 Temuan dan Pembahasan hasil serta analisis dari penelitian yang dilakukan. Bab 5 Kesimpulan, Implikasi, dan Rekomendasi berisikan kesimpulan yang didapatkan terkait penelitian, implikasi dari penelitian, dan rekomendasi bagi peneliti selanjutnya.