

BAB III

METODOLOGI PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian ini dilaksanakan pada Maret-Juni 2024 dengan komputasi menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang difasilitasi oleh Program Studi Fisika Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam Universitas Pendidikan Indonesia serta Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang terletak di Pusat Riset Komputasi, Cibinong, Bogor. Penelitian dilakukan secara luring di Laboratorium Fisika Material Universitas Pendidikan Indonesia dan secara daring dengan menggunakan SSH *remote command* untuk penggunaan terminal HPC dari BRIN sehingga dapat diakses melalui komputer penulis.

3.2 Spesifikasi perangkat

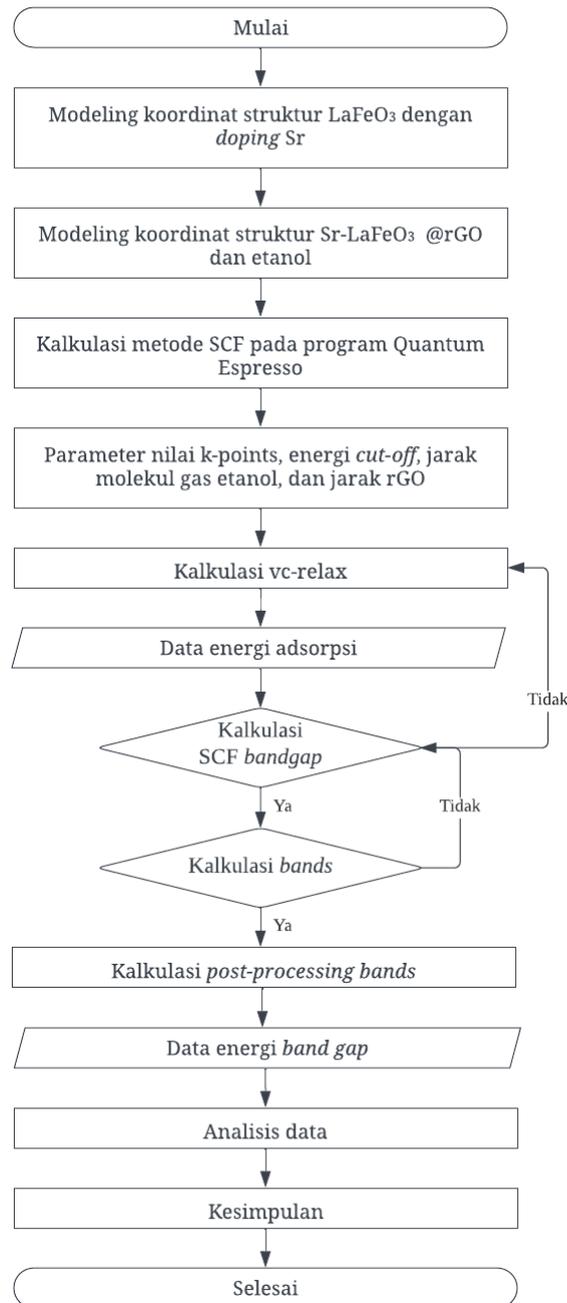
Pada penelitian ini digunakan 2 HPC, yaitu milik Program Studi Fisika Universitas Pendidikan Indonesia dan milik BRIN. Untuk HPC milik Program Studi Fisika memiliki 1 nodes, 24 cores, dengan 32 GB RAM. Namun, dalam praktiknya maksimal cores yang digunakan dalam satu kali *running* komputasi adalah 22 cores. Untuk HPC BRIN memiliki 1 nodes, 36 cores, dengan 384 GB RAM. Pada praktiknya, penulis hanya menggunakan 24-30 cores dengan akses yang paling sering digunakan adalah 28 cores. Perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini terdiri dari Quantum Espresso versi 7.0, BURAI versi 1.3.2, dan OriginLab.

3.3 Prosedur Penelitian

Penelitian ini menggunakan metode kuantitatif dengan pemodelan komputasi. Pemodelan struktur material menggunakan aplikasi BURAI. Untuk komputasi energi adsorpsi dan energi *bandgap* menggunakan *Density Functional Theory* melalui program Quantum Espresso.

3.4 Alir Penelitian

Alir penelitian ditunjukkan melalui Gambar 3.1.



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

3.5 Tahapan Komputasi

Komputasi pada penelitian ini dibagi menjadi lima bagian, yaitu (1) menyusun struktur LaFeO_3 dengan *doping* Sr, struktur rGO, dan molekul gas etanol, (2) variasi *k-grids* dan energi *cut-off* untuk menentukan nilai ideal *k-points* dan energi *cut-off*, (3) variasi jarak rGO dan molekul gas etanol terhadap struktur SrLaFeO₃, (4) kalkulasi *vc-relax* untuk menentukan nilai ardsorpsi, dan (5) kalukalasi *bands* untuk menentukan besar energi *bandgap*.

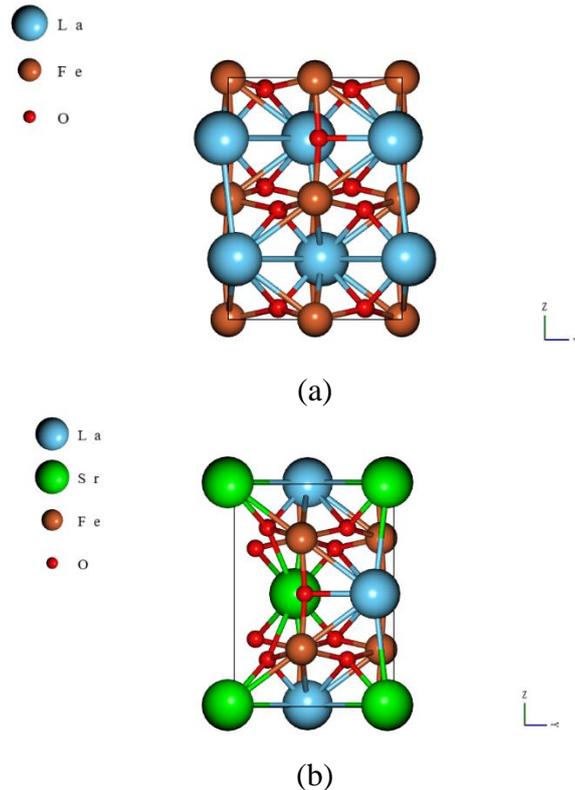
Vania Wirnawati, 2024

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

3.5.1 Menyiapkan struktur SrLaFeO₃

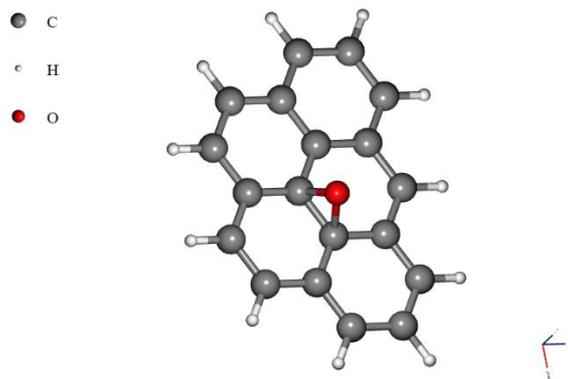
LaFeO₃ tersusun atas 4 atom La, 4 atom Fe, dan 12 atom O. Ilustrasi struktur dapat dilihat pada Gambar 3.2 (a). Untuk mendapatkan struktur LaFeO₃ dengan *doping* Sr dapat dilakukan dengan mengganti sebagian atom La dengan atom Sr menggunakan fraksi 0.5. Maka struktur LaFeO₃ menjadi La_{0.5}Sr_{0.5}FeO₃ seperti pada Gambar 3.2 (b) memiliki parameter kisi A = 5.60 Å, B = 5.66 Å, dan C = 7.94 Å.



Gambar 3.2 Ilustrasi struktur (a) LaFeO₃ (b) SrLaFeO₃

3.5.2 Menyiapkan Struktur *Reduce Graphene Oxide* (rGO)

Reduce graphene oxide dapat disintesis sebagai lapisan tunggal. Struktur rGO diperoleh berdasarkan lapisan tunggal struktur *graphene* yang terdiri dari 19 atom karbon (C) dan 5 *hexagon*. Ikatan bebas terakhir dari atom karbon disaturasi dengan atom hydrogen (H). Satu atom oksigen ditambahkan ke dalam struktur *graphene* sehingga terbentuk struktur rGO. Pada penelitian ini struktur rGO didesain sebagai lapisan tunggal seperti pada Gambar 3.3.



Gambar 3.3 Ilustrasi Struktur Lapisan Tunggal rGO

3.5.3 Menyiapkan struktur gas etanol

Struktur gas etanol yang digunakan dalam penelitian ini diperoleh melalui website *Crystallography Open Database*. Struktur tersebut tersusun atas 2 atom C, 6 atom H, dan 1 atom O, dapat dilihat pada Gambar 2.1. Data struktur dari website tersebut digunakan sebagai pemodelan dan diolah menggunakan aplikasi BURAI. File struktur yang diperoleh memuat informasi mengenai koordinat dan *cell parameter* yang menjadi dasar pemodelan penelitian ini. Input file struktur gas etanol ini yang kemudian dikombinasi dengan struktur SrLaFeO₃ maupun rGO.

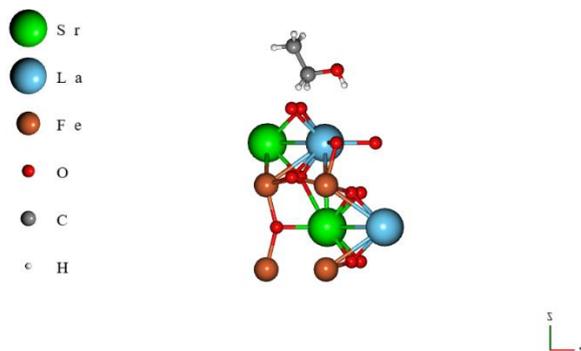
3.5.4 Menentukan nilai konvergensi struktur dengan kalkulasi SCF

Nilai konvergensi yang ditentukan meliputi nilai konvergensi harga k-points dan nilai energi *cut-off*. Nilai konvergensi ditentukan dengan memvariasi parameter dan dilakukan kalkulasi dengan SCF yang tersedia dalam program Quantum Espresso. Setelah didapatkan energi total sistem pada tiap variasi nilai k-points dan nilai energi *cut-off*, selanjutnya dilakukan *plotting* variasi nilai k-points dan nilai energi *cut-off* terhadap energi total sistem dengan menggunakan OriginLab. Nilai konvergensi dari harga k-points dan energi *cut-off* diketahui melalui plot yang diperoleh.

3.5.5 Menentukan nilai jarak ideal molekul gas etanol

Untuk menentukan jarak ideal antara molekul gas etanol dengan adsorben, dilakukan variasi jarak molekul etanol. Ilustrasi struktur SrLaFeO₃ sebagai adsorben dan gas etanol sebagai adsorbat ditunjukkan pada Gambar 3.4. Untuk menghitung total energi sistem, rumus SCF digunakan dalam tahapan ini. Selanjutnya dengan menggunakan OriginLab, plot variasi jarak molekul gas

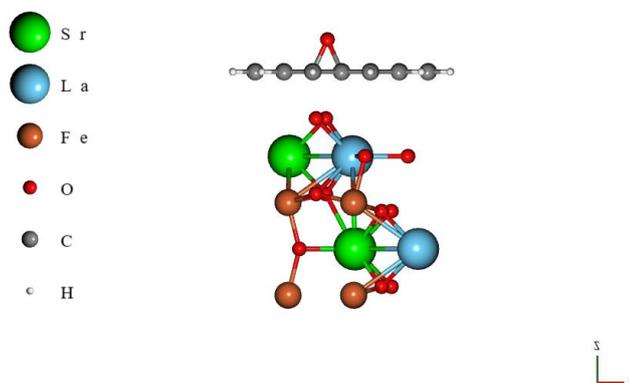
terhadap total energi sistem. Hasilnya jarak optimal diperoleh melalui total energi sistem dengan nilai tertinggi dibandingkan jarak lainnya.



Gambar 3.4 Ilustrasi SrLaFeO₃ dengan molekul etanol

3.5.6 Menentukan nilai jarak ideal rGO

Struktur rGO yang sudah dibuat sebelumnya digabungkan dengan struktur SrLaFeO₃ dengan memasukkan koordinat rGO pada *input file* SrLaFeO₃. Jarak optimal rGO terhadap adsorben dilakukan dengan memberikan variasi jarak 1Å hingga 3Å dengan rentang 0,25Å. Metode SCF tetap digunakan dalam proses ini untuk mendapatkan energi total sistem. Selanjutnya, plot variasi jarak rGO terhadap total energi sistem menggunakan OriginLab. Adapun ilustrasi struktur SrLaFeO₃ terhadap rGO ditunjukkan pada Gambar 3.5.



Gambar 3.5 Ilustrasi SrLaFeO₃ dengan penambahan rGO

3.5.7 Menentukan nilai energi adsorpsi

Nilai energi adsorpsi dapat ditentukan dengan melakukan perhitungan antara energi adsorben, adsorbat, dan sistem keseluruhan. Pada tahapan ini, metode yang digunakan adalah metode *vc-relax*. Di mana metode ini digunakan untuk menghitung energi adsorpsi karena energi sistem yang dihasilkan telah terelaksasi

berdasarkan struktur atom dan parameter kisi. Persamaan yang digunakan untuk menghitung energi adsorpsi terdapat pada persamaan (2.1).

3.5.8 Menentukan nilai energi *bandgap*

Penentuan nilai energi *bandgap* dapat dilakukan dengan metode SCF untuk menentukan kerapatan elektron yang konsisten dan dilanjutkan menggunakan *bands* untuk menghitung struktur pita material yang digunakan. *Software* DFT yang digunakan untuk perhitungan adalah Quantum Espresso SeeK-path. Setelah dilakukan perhitungan struktur pita, dilakukan perhitungan *post-processing bands* untuk memperoleh data struktur pita yang lebih mudah dibaca dan divisualisasikan dalam bentuk *plot* kurva fungsi energi. *Post-processing bands* dilakukan dengan perintah “bands.x” pada terminal HPC yang digunakan.