

**SIMULASI ENERGI ADSORPSI DAN ENERGI BANDGAP PADA LaFeO_3
DOPING Pb DILAPISI rGO SEBAGAI SENSOR GAS ETANOL
MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY***

SKRIPSI

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains
Program Studi Fisika Kelompok Bidang Kajian Material



Sri Widaningsih

2003331

**PROGRAM STUDI FISIKA
FAKULTAS PENDIDIKAN MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
UNIVERSITAS PENDIDIKAN INDONESIA
2024**

SIMULASI ENERGI ADSORPSI DAN ENERGI BANDGAP PADA $LaFeO_3$
DOPING Pb DILAPISI rGO SEBAGAI SENSOR GAS ETANOL
MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Oleh

Sri Widaningsih

Diajukan untuk memenuhi salah satu syarat untuk memperoleh gelar Sarjana Sains

Program Studi Fisika

Konsentrasi Fisika Material

FPMIPA UPI

© Sri Widaningsih

Universitas Pendidikan Indonesia

September 2024

Hak cipta dilindungi Undang-Undang

Skripsi ini tidak boleh diperbanyak seluruhnya atau sebagian, dengan dicetak

Ulang, difotokopi atau cara lainnya tanpa izin dari penulis.

LEMBAR PENGESAHAN

Sri Widaningsih

SIMULASI ENERGI ADSORPSI DAN ENERGI BANDGAP PADA $LaFeO_3$
DOPING Pb DILAPISI rGO SEBAGAI SENSOR GAS ETANOL
MENGUNAKAN *DENSITY FUNCTIONAL THEORY*

Disetujui dan disahkan oleh:

Pembimbing I



Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si.

NIP. 197905012003121001

Pembimbing II



Dr. Dadi Rusdiana, M.Si.

NIP. 196810151994031002

Mengetahui,

Ketua Program Studi Fisika



Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si.

NIP. 197905012003121001

PERNYATAAN

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Simulasi Energi Adsorpsi Dan Energi Bandgap Pada $LaFeO_3$ Doping Pb dilapisi rGO Sebagai Sensor Gas Etanol Menggunakan *Density Functional Theory*” ini beserta seluruh isinya adalah benar-benar karya saya sendiri. Saya tidak melakukan penjiplakan atau pengutipan dengan cara-cara yang tidak sesuai dengan etika ilmu yang berlaku dalam masyarakat keilmuan. Atas pernyataan ini, saya siap menanggung risiko apabila di kemudian hari ditemukan adanya pelanggaran etika keilmuan atau ada klaim dari pihak lain terhadap karya saya ini.

Bandung, Juli 2024

Yang membuat pernyataan

Sri Widaningsih

NIM. 2003331

KATA PENGANTAR

Puji syukur kepada Tuhan Yang Maha Esa yang telah memberikan kesehatan dan hidayah-Nya, sehingga penulis dapat menyelesaikan skripsi dengan judul “Simulasi Energi Adsorpsi Dan Energi Bandgap Pada $LaFeO_3$ Doping Pb dilapisi rGO Sebagai Sensor Gas Etanol Menggunakan *Density Functional Theory*”.

Skripsi ini disusun untuk memenuhi syarat untuk melanjutkan penelitian dan menulis skripsi yang nantinya digunakan untuk meraih gelar sebagai Sarjana Sains di Departemen Pendidikan Fisika, Program Studi Fisika. Penulis menyadari bahwa skripsi ini masih belum sempurna. Oleh karena itu, penulis menerima dengan baik saran dan kritik yang membangun agar penulis dapat menjadi lebih baik di masa depan. Demikianlah skripsi ini disampaikan dengan harapan bahwa skripsi yang penulis buat dapat memberikan manfaat, dan penulis mengucapkan terima kasih.

Bandung, 22 Februari 2024

Sri Widaningsih
NIM. 2003331

UCAPAN TERIMA KASIH

Sejak dimulainya penelitian hingga proses penulisan skripsi, penulis telah mendapatkan banyak dukungan, motivasi, dan bimbingan dari berbagai pihak baik secara langsung ataupun tidak langsung. Pada kesempatan kali ini, penulis ingin mengucapkan rasa terimakasih kepada pihak yang terkait, khususnya kepada:

1. Bapak Prof. Dr. Endi Suhendi, M.Si., selaku Dosen Pembimbing I dan Ketua Program Studi Fisika, yang telah memberikan dukungan, motivasi, masukan, serta bimbingan semenjak awal proses penelitian hingga selesainya penulisan skripsi ini.
2. Bapak Dr. Dadi Rusdiana, M.Si., selaku Dosen Pembimbing II, yang telah memberikan motivasi, bimbingan, dan saran yang membangun dalam menyelesaikan penulisan skripsi ini.
3. Ibu Prof. Dr. Lilik Hasanah, M.Si., selaku Pembimbing Akademik penulis, yang senantiasa memberikan bimbingan, motivasi dan arahan selama masa perkuliahan, serta memberikan motivasi dalam menyelesaikan penulisan skripsi.
4. Badan Riset Inovasi dan Nasional (BRIN), selaku penyedia fasilitas layanan komputasi dengan menggunakan komputer berkinerja tinggi yang digunakan selama proses komputasi.
5. Sobat Sensor Gas (SSG), yaitu teman-teman saya, Rumaissy Az-Zahra, Vania Wirnawati, Siti Intan Cahya Kemuning dan M. Putra Kusumah, yang telah memberikan masukan dan arahan selama penyusunan skripsi ini.
6. Rekan-rekan Fisika Material yang selalu memberikan motivasi dan dukungan selama perkuliahan.
7. Kedua Orangtua, serta keluarga penulis yang selalu senantiasa memberikan dukungan dari awal perkuliahan hingga sampai tahap skripsi ini.
8. Teman terdekat saya, Fajar Rhomadon yang telah memberikan dukungan selama penulisan skripsi.
9. Teman-teman Fisika C 2020 yang telah berjuan bersama sejak awal perkuliahan hingga selesai perkuliahan.

10. Seluruh pihak yang telah membantu dalam menyelesaikan skripsi ini baik secara langsung maupun tidak langsung, yang tidak dapat penulis sebutkan satu persatu.

ABSTRAK

$LaFeO_3$ (LFO) telah banyak digunakan sebagai material penyusun sensor gas. Namun, LFO sebagai material penyusun gas sensor masih belum optimal karena sensitivitas dan selektivitasnya yang rendah. Penambahan doping pada LFO untuk meningkatkan selektivitas dan sensitivitas sensor gas. Penambahan lapisan rGO untuk meningkatkan respon sensor dalam *sensing*. Penelitian ini dilakukan metode komputasi *Density Functional Theory* (DFT) untuk analisis energi adsorpsi dan energi bandgap pada $LaFeO_3$ yang di-doping Pb (LFPbO) yang diberi lapisan reduce graphene oxide (rGO) terhadap molekul etanol sebagai material sensor gas etanol. Berdasarkan penelitian ini, diperoleh bahwa dengan adanya doping Pb dan lapisan rGO dapat meningkatkan energi adsorpsi dan juga memperkecil energi *bandgap*. Energi adsorpsi untuk LFPbO tanpa lapisan rGO bernilai -3.06 eV, dan LFPbO dan dilapisi rGO bernilai -3.86 eV; hal ini menunjukkan adanya eskalasi energi sekitar 26.14%. Energi *bandgap* sistem LFPbO tanpa dilapisi rGO yang tidak terpapar dan terpapar etanol sebesar 4.138 eV dan 1.221 eV, sistem LFPbO dilapisi rGO yang tidak terpapar dan terpapar etanol sebesar 0.259 eV dan 0.173 eV; hal ini menunjukkan adanya penurunan energi *bandgap* saat sistem diberikan lapisan rGO. Dengan terjadinya peningkatan energi adsorpsi memungkinkan proses adsorpsi sistem LFPbO dan dilapisi rGO terhadap molekul etanol menjadi semakin kuat. Dengan adanya penurunan energi *bandgap* pada sistem LFPbO dilapisi rGO memungkinkan peningkatan respon sensor dalam melakukan *sensing* terhadap molekul etanol, sehingga memiliki potensi untuk dijadikan material sensor gas etanol.

Kata Kunci: $LaFeO_3$, Plumbum, reduced graphene oxide, etanol, density functional theory, sensor gas.

ABSTRACT

LaFeO₃ (LFO) has been widely used as a material for gas sensors. However, LFO as a gas sensor material is still not optimal due to its low sensitivity and selectivity. The addition of doping to LFO aims to improve the selectivity and sensitivity of gas sensors. The addition of an rGO layer aims to enhance the sensor's response in sensing. This research employs computational Density Functional Theory (DFT) to analyze the adsorption energy and bandgap energy of Pb-doped *LaFeO₃* (LFPbO) with a reduced graphene oxide (rGO) layer for ethanol molecules as a gas sensor material. Based on this study, it was found that the addition of Pb doping and an rGO layer can increase the adsorption energy and decrease the bandgap energy. The adsorption energy for LFPbO without the rGO layer is -3.06 eV, while LFPbO with the rGO layer is -3.86 eV; this indicates an energy escalation of approximately 26.14%. The bandgap energy of the LFPbO system without the rGO layer, when not exposed to and exposed to ethanol, is 4.138 eV and 1.221 eV, respectively. The bandgap energy of the LFPbO system with the rGO layer, when not exposed to and exposed to ethanol, is 0.259 eV and 0.173 eV, respectively; this indicates a decrease in bandgap energy when the system is given an rGO layer. The increase in adsorption energy allows the adsorption process of the LFPbO system with the rGO layer to become stronger towards ethanol molecules. The decrease in bandgap energy in the LFPbO system with the rGO layer enables an enhanced sensor response in sensing ethanol molecules, making it a potential material for ethanol gas sensors.

Keywords: *LaFeO₃*, Plumbum, reduced graphene oxide, ethanol, density functional theory, gas sensor.

DAFTAR ISI

LEMBAR PENGESAHAN.....	ii
PERNYATAAN.....	iii
KATA PENGANTAR.....	iv
UCAPAN TERIMA KASIH.....	v
ABSTRAK.....	vii
ABSTRACT.....	viii
DAFTAR ISI.....	ix
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR TABEL.....	xiii
DAFTAR LAMPIRAN.....	xiv
BAB I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang.....	1
1.2 Rumusan Masalah	6
1.3 Tujuan Penelitian	7
1.4 Manfaat Penelitian.....	7
1.5 Struktur Organisasi Skripsi.....	7
BAB II KAJIAN PUSTAKA	9
2.1 Sensor Gas	9
2.2 Etanol.....	10
2.3 Material Perovskit LaFeO₃ sebagai Sensor Gas.....	11
2.4 Doping Pb.....	12
2.5 Lapisan rGO	13
2.6 Energi Adsorpsi	14
2.7 Mekanisme Adsorpsi	16
2.8 Energi Bandgap	16

2.9	Density Functional Theory (DFT)	17
2.9.1	Generalized-gradient Approximation (GGA)	19
2.9.2	GGA+U	19
2.9.3	Potensial Semu	20
2.9.4	Self-Consistent Field (SCF)	20
2.9.5	Variabel Cell Relaxation (VC-Relax)	21
2.9.6	Bands Calculation	21
BAB III METODE PENELITIAN		23
3.1	Waktu dan Tempat Penelitian	23
3.2	Spesifikasi Perangkat Keras dan Versi Perangkat Lunak	23
3.3	Prosedur Penelitian	23
3.4	Diagram Alir Penelitian	24
3.5	Tahapan Komputasi	25
3.5.1	Menyiapkan Struktur LFPbO, rGO, dan Etanol	25
3.5.2	Menentukan Konvergensi Struktur Dengan Kalkulasi SCF	26
3.5.3	Menentukan jarak Optimal Molekul Etanol dan rGO	26
3.5.4	Menentukan Energi Adsorpsi	26
3.5.5	Menentukan Energi BandGap	27
BAB IV HASIL DAN PEMBAHASAN		28
4.1	Energi Adsorpsi	28
4.1.1	Koordinat Atom Pembentuk Struktur LFPbO, rGO, dan Etanol	28
4.1.2	Hasil Uji Konvergensi	30
4.1.3	Jarak Optimal Molekul Etanol dan Lapisan rGO terhadap LFPbO	32
4.1.4	Hasil Kalkulasi Vc-Relax	34
4.1.5	Analisis Energi Adsorpsi LFPbO dan LFPbO @ rGO	36
4.2	Energi Bandgap	38
4.2.1	Hasil Kalkulasi Bands	38
4.2.2	Analisis Energi Bandgap LFPbO sebelum dan sesudah terpapar etanol	41
4.2.3	Analisis Energi Bandgap LFPbO @ rGO sebelum dan sesudah terpapar etanol	42

BAB V SIMPULAN, IMPLIKASI, DAN REKOMENDASI	44
5.1 Simpulan	44
5.2 Implikasi	44
5.3 Rekomendasi	45
DAFTAR PUSTAKA	46
LAMPIRAN.....	53

DAFTAR GAMBAR

Gambar 2. 1 Struktur dan Preparation pada GO dan rGO (Majhi dkk, 2021)	13
Gambar 2. 2 Proses Adsorpsi melibatkan oksigen (a) Hole di LaFeO_3 belum menyerap oksigen; (b) Saat Hole di LaFeO_3 menyerap oksigen di permukaan; (c) Saat LaFeO_3 terkena gas etanol; dan (d) Molekul etanol teroksidasi oleh oksigen yang terionisasi dan teradsorpsi (Haryadi dkk., 2022).....	15
Gambar 3. 1 Diagram alir penelitian	24
Gambar 4. 1 (a) Visualisasi koordinat atom LFPbO pada dokumen .cif, (b) Visualisasi struktur LFO, dan (c) Visualisasi struktur LFPbO	29
Gambar 4. 2 (a) Visualisasi koordinat atom rGO pada dokumen .cif, (b) Visualisasi struktur rGO	30
Gambar 4. 3 (a) Visualisasi koordinat atom molekul Etanol pada dokumen .cif, (b) Visualisasi struktur Molekul Etanol	30
Gambar 4. 4 Plot Konvergensi Harga K-points	32
Gambar 4. 5 Plot Konvergensi Nilai Energi Cut-off.....	32
Gambar 4. 6 Plot variasi jarak molekul etanol dengan energi total	33
Gambar 4. 7 Plot variasi jarak lapisan rGO dengan energi total.....	34
Gambar 4. 8 Ilustrasi grafis struktur (a) Adsorben LFPbO dengan adsorbat molekul etanol, (b) Adsorben LFPbO @ rGO dengan adsorbat molekul etanol	34
Gambar 4. 9 (a) Struktur Bandgap sistem LFPbO , (b) Struktur Bandgap sistem LFPbO terhadap molekul Etanol, (c) Struktur Bandgap LFPbO @ rGO, dan (d) Struktur Bandgap LFPbO @ rGO terhadap molekul Etanol.....	40

DAFTAR TABEL

Tabel 4. 1 Energi Adsorpsi LFPbO dalam berbagai keadaan	35
Tabel 4. 2 Energi adsorpsi berbagai material terhadap molekul gas tertentu	36
Tabel 4. 3 Energi Bandgap dari berbagai keadaan LFPbO	41

DAFTAR LAMPIRAN

Lampiran 1 Input File Quantum Espresso untuk Konvergensi k-points.....	53
Lampiran 2 Input File Quantum Espresso untuk Konvergensi cut-off.....	55
Lampiran 3 Input File Quantum Espresso untuk menentukan jarak optimal etanol	57
Lampiran 4 Input File Quantum Espresso untuk menentukan jarak optimal lapisan rGO.....	60
Lampiran 5 Input File Quantum Espresso untuk menentukan energi total adsorben LFPbO.....	65
Lampiran 6 Input File Quantum Espresso untuk menentukan energi total adsorbat molekul etanol.....	67
Lampiran 7 Input File Quantum Espresso untuk menentukan energi total adsorben LFPbO dengan molekul etanol.....	69
Lampiran 8 Input File Quantum Espresso untuk menentukan energi total adsorben LFPbO yang dilapisi rGO	72
Lampiran 9 Input File Quantum Espresso untuk menentukan energi total adsorben LFPbO yang dilapisi rGO dengan molekul etanol.....	76
Lampiran 10 Input File Quantum Espresso (scf) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO.....	80
Lampiran 11 Input File Quantum Espresso (bands) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO	82
Lampiran 12 Input File Quantum Espresso (post-processing) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO.....	84
Lampiran 13 Input File Quantum Espresso (scf) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dengan etanol.....	85
Lampiran 14 Input File Quantum Espresso (bands) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dengan etanol.....	87
Lampiran 15 Input File Quantum Espresso (post-processing) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dengan etanol	89

Lampiran 16 Input File Quantum Espresso (scf) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi Rgo	90
Lampiran 17 Input File Quantum Espresso (bands) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi Rgo	93
Lampiran 18 Input File Quantum Espresso (post-processing) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi Rgo	96
Lampiran 19 Input File Quantum Espresso (scf) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi rGO dengan etanol.....	97
Lampiran 20 Input File Quantum Espresso (bands) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi rGO dengan etanol.....	100
Lampiran 21 Input File Quantum Espresso (post-processing) dalam menentukan bandgap pada struktur LFO dilapisi rGO dengan etanol.....	104

DAFTAR PUSTAKA

- Anugrah, A. R., Setiawan, A., Tayubi, Y. R., Hasanah, L., Sahari, S. K., Suhendi, E., Fisika, S., & Indonesia, U. P. (2023). *PENGARUH PENAMBAHAN rGO PADA LaFeO₃ YANG DIDOPING Co TERHADAP ENERGI ADSORPSI MOLEKUL ETANOL MENGGUNAKAN DENSITY FUNCTIONAL THEORY UNTUK SENSOR GAS*. 8(2), 107–118.
- Aranthady, C., Jangid, T., Gupta, K., Mishra, A. K., Kaushik, S. D., Siruguri, V., Rao, G. M., Shanbhag, G. V., & Sundaram, N. G. (2021). Selective SO₂ detection at low concentration by Ca substituted LaFeO₃ chemiresistive gas sensor: A comparative study of LaFeO₃ pellet vs thin film. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 329(November 2020), 129211. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2020.129211>
- Bahamon, D., Khalil, M., Belabbes, A., Alwahedi, Y., Vega, L. F., & Polychronopoulou, K. (2021). A DFT study of the adsorption energy and electronic interactions of the SO₂ molecule on a CoP hydrotreating catalyst. *RSC Advances*, 11(5), 2947–2957. <https://doi.org/10.1039/c9ra10634k>
- Beladona, S. U. M., Purwanto, F., Jumiati, Simanjuntak, E. R., Simarmata, S. N., Kumalasari, M. R., & Iqbal, R. M. (2022). Sifat Perovskit sebagai Material Elektroda untuk Baterai Lithium-Ion (LIB): Review. *BOHR: Jurnal Cendekia Kimia*, 01(01), 13–21. <https://e-journal.upr.ac.id/index.php/bohr/13%7C>
- Bulemo, P. M., & Kim, I. D. (2020). Recent advances in ABO₃ perovskites: their gas-sensing performance as resistive-type gas sensors. *Journal of the Korean Ceramic Society*, 57(1), 24–39. <https://doi.org/10.1007/s43207-019-00003-1>
- Chen, J., Xu, L., Li, W., & Gou, X. (2005). α -Fe₂O₃ nanotubes in gas sensor and lithium-ion battery applications. *Advanced Materials*, 17(5), 582–586. <https://doi.org/10.1002/adma.200401101>
- Choudhary, K., & Tavazza, F. (2019). Convergence and machine learning predictions of Monkhorst-Pack k-points and plane-wave cut-off in high-throughput DFT calculations. *Computational Materials Science*, 161(January), 300–308. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.02.006>

- Dąbrowski, A. (2001). Adsorption - From theory to practice. *Advances in Colloid and Interface Science*, 93(1–3), 135–224. [https://doi.org/10.1016/S0001-8686\(00\)00082-8](https://doi.org/10.1016/S0001-8686(00)00082-8)
- Dai, Z., Lee, C. S., Kim, B. Y., Kwak, C. H., Yoon, J. W., Jeong, H. M., & Lee, J. H. (2014). Honeycomb-like periodic porous LaFeO₃ thin film chemiresistors with enhanced gas-sensing performances. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 6(18), 16217–16226. <https://doi.org/10.1021/am504386q>
- Dey, A. (2018). Semiconductor metal oxide gas sensors: A review. *Materials Science and Engineering: B*, 229(December 2017), 206–217. <https://doi.org/10.1016/j.mseb.2017.12.036>
- Doroftei, C., Popa, P. D., & Iacomi, F. (2012). Synthesis of nanocrystalline La-Pb-Fe-O perovskite and methanol-sensing characteristics. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 161(1), 977–981. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2011.11.078>
- Doroftei, C., Popa, P. D., & Iacomi, F. (2013). Selectivity between methanol and ethanol gas of La-Pb-Fe-O perovskite synthesized by novel method. *Sensors and Actuators, A: Physical*, 190, 176–180. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2012.11.018>
- Gao, R., Gao, L., Zhang, X., Gao, S., Xu, Y., Cheng, X., Guo, G., Ye, Q., Zhou, X., Major, Z., & Huo, L. (2021). The controllable assembly of the heterojunction interface of the ZnO@rGO for enhancing the sensing performance of NO₂ at room temperature and sensing mechanism. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 342(April), 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2021.130073>
- Geddes, C. C., Nieves, I. U., & Ingram, L. O. (2011). Advances in ethanol production. *Current Opinion in Biotechnology*, 22(3), 312–319. <https://doi.org/10.1016/j.copbio.2011.04.012>
- Gupta Chatterjee, S., Chatterjee, S., Ray, A. K., & Chakraborty, A. K. (2015). Graphene-metal oxide nanohybrids for toxic gas sensor: A review. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 221, 1170–1181. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2015.07.070>
- Haryadi, H., Suprayoga, E., & Suhendi, E. (2022). An Analysis of Electronic Properties of LaFeO₃ using Density Functional Theory with Generalized Gradient Approximation-Perdew-Burke-Ernzerhof Method for Ethanol Gas

- Sensors. *Materials Research*, 25. <https://doi.org/10.1590/1980-5373-MR-2021-0554>
- Jia, Z., Gao, Z., Kou, K., Feng, A., Zhang, C., Xu, B., & Wu, G. (2020). Facile synthesis of hierarchical A-site cation deficiency perovskite $\text{La}_x\text{FeO}_{3-y}/\text{RGO}$ for high efficiency microwave absorption. *Composites Communications*, 20. <https://doi.org/10.1016/j.coco.2020.04.010>
- Kim, Y., Choi, Y. S., Park, S. Y., Kim, T., Hong, S. P., Lee, T. H., Moon, C. W., Lee, J. H., Lee, D., Hong, B. H., & Jang, H. W. (2019). Au decoration of a graphene microchannel for self-activated chemoresistive flexible gas sensors with substantially enhanced response to hydrogen. *Nanoscale*, 11(6), 2966–2973. <https://doi.org/10.1039/c8nr09076a>
- Kizaki, H., & Kusakabe, K. (2012). DFT-GGA study of NO adsorption on the LaO (001) surface of LaFeO_3 . *Surface Science*, 606(3–4), 337–343. <https://doi.org/10.1016/j.susc.2011.10.016>
- Korotcenkov, G. (2014). Handbook of Gas Sensor Materials - Volume 2: New Trends and Technologies. Dalam *Springer* (Vol. 2). <http://link.springer.com/10.1007/978-1-4614-7388-6>
- Li, M., Zhu, H., Wei, G., He, A., & Liu, Y. (2019a). DFT calculation and analysis of the gas sensing mechanism of methoxy propanol on Ag decorated SnO_2 (110) surface. *RSC Advances*, 9(61), 35862–35871. <https://doi.org/10.1039/c9ra02958c>
- Li, M., Zhu, H., Wei, G., He, A., & Liu, Y. (2019b). DFT calculation and analysis of the gas sensing mechanism of methoxy propanol on Ag decorated SnO_2 (110) surface. *RSC Advances*, 9(61), 35862–35871. <https://doi.org/10.1039/c9ra02958c>
- Li, X., Yu, J., Wageh, S., Al-Ghamdi, A. A., & Xie, J. (2016). Graphene in Photocatalysis: A Review. *Small*, 12(48), 6640–6696. <https://doi.org/10.1002/smll.201600382>
- Liu, X., Cheng, B., Hu, J., & Qin, H. (2012). Study on adsorption of O_2 on $\text{LaFe}_{1-x}\text{Mg}_x\text{O}_{3(0\ 1\ 0)}$ surface by density function theory calculation. *Applied Surface Science*, 258(22), 8678–8682. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.05.073>

- Liu, X., Hu, J., Cheng, B., Qin, H., Zhao, M., & Yang, C. (2009). First-principles study of O₂ adsorption on the LaFeO₃ (0 1 0) surface. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 139(2), 520–526. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2009.03.052>
- Mahmood Aljamali, N., Abdul Baqi Aldujaili, D., & Obaid Alfatlawi, I. (2021). Physical and Chemical Adsorption and its Applications. *International Journal*, 7(2), 1–8. <https://doi.org/10.37628/IJTCK>
- Majhi, S. M., Mirzaei, A., Kim, H. W., & Kim, S. S. (2021). Reduced graphene oxide (Rgo)-loaded metal-oxide nanofiber gas sensors: An overview. *Sensors (Switzerland)*, 21(4), 1–19. <https://doi.org/10.3390/s21041352>
- Malik, R., Tomer, V. K., Mishra, Y. K., & Lin, L. (2020). Functional gas sensing nanomaterials: A panoramic view. *Applied Physics Reviews*, 7(2). <https://doi.org/10.1063/1.5123479>
- Muktadir, M. G., Alam, A., Piya, A. A., & Shamim, S. U. D. (2022). Exploring the adsorption ability with sensitivity and reactivity of C12-B6N6, C12-Al6N6, and B6N6-Al6N6 heteronanocages towards the cisplatin drug: a DFT, AIM, and COSMO analysis. *RSC Advances*, 12(45), 29569–29584. <https://doi.org/10.1039/d2ra04011e>
- Nadeau, V., Lamoureux, D., Beuter, A., Charbonneau, M., & Tardif, R. (2003). Neuromotor effects of acute ethanol inhalation exposure in humans: A preliminary study. *Journal of Occupational Health*, 45(4), 215–222. <https://doi.org/10.1539/joh.45.215>
- Orio, M., Pantazis, D. A., & Neese, F. (2009). Density functional theory. *Photosynthesis Research*, 102(2), 443–453. <https://doi.org/10.1007/s11120-009-9404-8>
- Palimar, S., Kaushik, S. D., Siruguri, V., Swain, D., Viegas, A. E., Narayana, C., & Sundaram, N. G. (2016). Investigation of Ca substitution on the gas sensing potential of LaFeO₃ nanoparticles towards low concentration SO₂ gas. *Dalton Transactions*, 45(34), 13547–13555. <https://doi.org/10.1039/c6dt01819j>
- Perry, R.H., and Green, D. (2019). Perry's Chemical Engineers' Handbook 9 Ed. New York. Hal 2-112

- Prihandana, R., Noerwijati, K., Adinurani, P. G., Setyaningsih, D., Setiadi, S., & Hendroko, R. (2008). *Bioetanol Ubi Kayu Sebagai Bahan Bakar Masa Depan*. PT. Agromedia Pustaka.
- Qin, J., Cui, Z., Yang, X., Zhu, S., Li, Z., & Liang, Y. (2015). Synthesis of three-dimensionally ordered macroporous LaFeO_3 with enhanced methanol gas sensing properties. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 209, 706–713. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2014.12.046>
- Rahm, M., Hoffmann, R., & Ashcroft, N. W. (2016). Atomic and Ionic Radii of Elements 1–96. *Chemistry - A European Journal*, 22(41), 14625–14632. <https://doi.org/10.1002/chem.201602949>
- Rahmanian Koshkaki, S. (2015). An overview of Density-Functional-Theory (DFT) for students. *ResearchGate*, December 2015. <https://www.researchgate.net/publication/308235526>
- Rao, C. N. R., Sood, A. K., Subrahmanyam, K. S., & Govindaraj, A. (2009). Graphene: The new two-dimensional nanomaterial. *Angewandte Chemie - International Edition*, 48(42), 7752–7777. <https://doi.org/10.1002/anie.200901678>
- Reine, M. B. (2005). SEMICONDUCTOR MATERIALS | Mercury Cadmium Telluride. Dalam *Encyclopedia of Modern Optics* (hlm. 392–402). Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B0-12-369395-0/00639-4>
- Scafetta, M. D., Xie, Y. J., Torres, M., Spanier, J. E., & May, S. J. (2013). Optical absorption in epitaxial $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ thin films. *Applied Physics Letters*, 102(8), 0–5. <https://doi.org/10.1063/1.4794145>
- Schedin, F., Geim, A. K., Morozov, S. V., Hill, E. W., Blake, P., Katsnelson, M. I., & Novoselov, K. S. (2007). Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. *Nature Materials*, 6(9), 652–655. <https://doi.org/10.1038/nmat1967>
- Sharma, N., Kushwaha, H. S., Sharma, S. K., & Sachdev, K. (2020). Fabrication of LaFeO_3 and rGO- LaFeO_3 microspheres based gas sensors for detection of NO_2 and CO. *RSC Advances*, 10(3), 1297–1308. <https://doi.org/10.1039/c9ra09460a>

- Song, P., Qin, H., Zhang, L., An, K., Lin, Z., Hu, J., & Jiang, M. (2005). The structure, electrical and ethanol-sensing properties of $\text{La}_{1-x}\text{Pb}_x\text{FeO}_3$ perovskite ceramics with $x \leq 0.3$. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 104(2), 312–316. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2004.05.023>
- Souri, M., & Amoli, H. S. (2023). Gas sensing mechanisms in ABO_3 perovskite materials at room temperature: A review. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 156, 107271
- Thirumalairajan, S., Girija, K., Mastelaro, V. R., & Subramanian, K. S. (2020). Enhanced ultrasensitive detection of ozone gas using reduced graphene oxide-incorporated LaFeO_3 nanospheres for environmental remediation process. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 31(11), 8933–8945. <https://doi.org/10.1007/s10854-020-03428-1>
- Toan, N. N., Saukko, S., & Lantto, V. (2003). Gas sensing with semiconducting perovskite oxide LaFeO_3 . *Physica B: Condensed Matter*, 327(2–4), 279–282. [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(02\)01764-7](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(02)01764-7)
- Vainshtein, B. K., Fridkin, V. M., & Indenbom, V. L. (1995). *Modern Crystallography 2 Springer*.
- Vijayaraghavan, T., Althaf, R., Babu, P., Parida, K. M., Vadivel, S., & Ashok, A. M. (2021). Visible light active LaFeO_3 nano perovskite-RGO-NiO composite for efficient H_2 evolution by photocatalytic water splitting and textile dye degradation. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(1), 104675. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2020.104675>
- Wahyu Ramadhani, P. R. (2016). *Pengaruh Variasi Konsentrasi Terhadap Konstanta Sellmeier Etanol*.
- Wang, X., Yong, Y., Yang, W., Zhang, A., Xie, X., Zhu, P., & Kuang, Y. (2021). Adsorption, Gas-Sensing, and Optical Properties of Molecules on a Diazine Monolayer: A First-Principles Study. *ACS Omega*, 6(17), 11418–11426. <https://doi.org/10.1021/acsomega.1c00432>
- Widodo, S., & Wiranto, G. (2015). Perancangan Dan Pembuatan Divais Sensor Gas Co Berbasis Indium Timah Oksida (Ito) Dengan Teknologi Lapisan Tipis. *Jurnal Kimia Terapan Indonesia*, 17(1), 39–47. <https://doi.org/10.14203/jkti.v17i1.21>

- Wusiman, M., & Taghipour, F. (2022). Methods and mechanisms of gas sensor selectivity. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 47(3), 416–435
- Xiao, H., Xue, C., Song, P., Li, J., & Wang, Q. (2015). Preparation of porous LaFeO₃ microspheres and their gas-sensing property. *Applied Surface Science*, 337(3), 65–71. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.02.064>
- Yasuda, S., Yu, L., Kim, J., & Murakoshi, K. (2013). Selective nitrogen doping in graphene for oxygen reduction reactions. *Chemical Communications*, 49(83), 9627. <https://doi.org/10.1039/c3cc45641b>
- Yunusa, Z., Hamidon, M. N., Kaiser, A., & Awang, Z. (2014). Gas Sensors: A Review. *Sensors & Transducers*, 168(4), 61–75. <http://www.sensorsportal.com>
- Zhang, L., Hu, J., Song, P., Qin, H., & Jiang, M. (2006). Electrical properties and ethanol-sensing characteristics of perovskite La_{1-x}Pb_xFeO₃. *Sensors and Actuators, B: Chemical*, 114(2), 836–840. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2005.08.002>
- Zhang, Z., Zou, X., Xu, L., Liao, L., Liu, W., Ho, J., Xiao, X., Jiang, C., & Li, J. (2015). Hydrogen gas sensor based on metal oxide nanoparticles decorated graphene transistor. *Nanoscale*, 7(22), 10078–10084. <https://doi.org/10.1039/C5NR01924A>
- Zhou, Y., Lü, Z., Li, J., Xu, S., Xu, D., & Wei, B. (2021). The electronic properties and structural stability of LaFeO₃ oxide by niobium doping: A density functional theory study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 46(13), 9193–9198. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.12.202>