

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dengan menggunakan metode komputasi yang dilaksanakan dari Maret – Juli 2024. Pengerjaan komputasi dilaksanakan dengan menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang difasilitasi oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang terletak di Pusat Riset Komputasi, Cibinong Bogor. Pelaksanaan komputasi ini dilakukan secara *remote* menggunakan komputer penulis, yaitu dengan menggunakan *SSH remote command* sehingga dapat terhubung dengan HPC BRIN.

3.2 Spesifikasi Perangkat Keras dan Versi Perangkat Lunak

Penelitian ini menggunakan HPC milik BRIN, dengan durasi komputasi maksimal 96 jam untuk antrean *work* dan durasi 24 jam untuk antrean *cpu*. Karena HPC BRIN merupakan fasilitas bersama, penulis hanya mendapatkan akses 12-36 cores, dan akses yang paling sering diperoleh 30 cores. Ada pula spesifikasi dari komputer penulis yaitu Laptop dengan merk Lenovo, Windows 10 Pro, dengan RAM 16 GB dan memori internal 230 GB. Prosesor dari laptop tersebut berupa AMD A4-9125 RADEON R3, 4 COMPUTE CORES 2C+2G 2.30 GHz, dengan tipe sistem 64-bit. Untuk spesifikasi perangkat lunak yang digunakan ialah Quantum Espresso versi 7.0, BURAI versi 1.3.2, Visual Studio Code versi 1.86.2, dan OriginPro 2024 (Learning Edition).

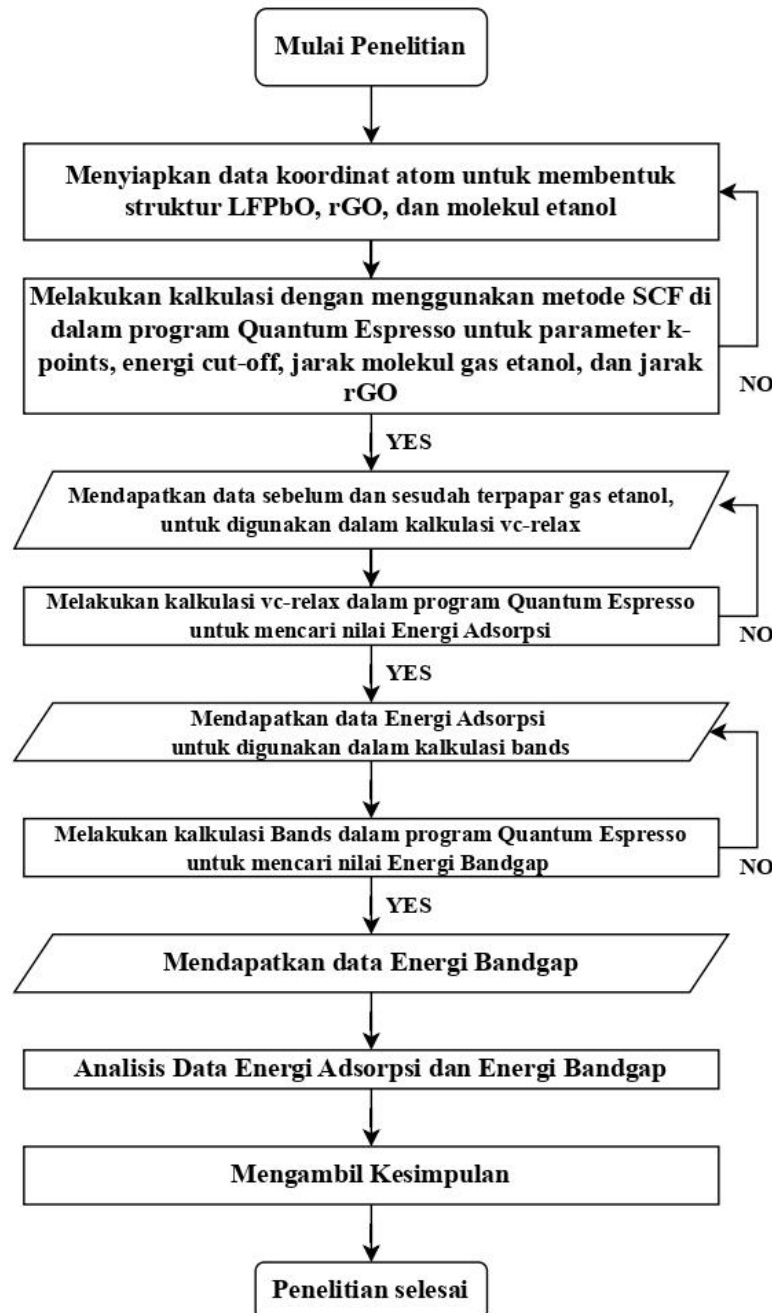
3.3 Prosedur Penelitian

Metode yang akan digunakan dalam melaksanakan penelitian ini ialah metode kuantitatif dengan menggunakan pemodelan komputasi. Untuk pemodelan struktur material uji akan dilaksanakan dengan menggunakan bantuan program BURAI yaitu GUI untuk Quantum Espresso. Untuk perhitungan komputasi pada energi adsorpsi dari material akan dilakukan dengan menggunakan Density Functional Theory yaitu dengan program Quantum Espresso. Proses perhitungan, yaitu untuk fungsi korelasi pertukaran yang digunakan dengan DFT (GGA) yang merupakan pendekatan yang dikembangkan oleh Perdew-Burke-Erzerhof yaitu

GGA-PBE. Untuk hasilnya, akan dikomputasikan dengan menggunakan Visual Studio Code, dan pembuatan grafik menggunakan OriginPro 2024 versi 10.1.5.132 (Learning Edition).

3.4 Diagram Alir Penelitian

Untuk Diagram Alir dari penelitian ini, dapat diilustrasikan pada Gambar 3.1 berikut.



Gambar 3. 1 Diagram alir penelitian

3.5 Tahapan Komputasi

Di dalam penelitian ini, tahapan komputasi terbagi menjadi lima tahap utama: 1) Menyusun struktur dari $LaFeO_3$ yang di-*doping* Pb tanpa lapisan rGO dan dengan lapisan rGO; 2) Menyusun struktur yang akan berinteraksi dengan molekul gas etanol; 3) Melakukan kalkulasi SCF untuk menentukan nilai konvergensi dan optimasi; 4) Melakukan kalkulasi untuk menentukan energi adsorpsi; dan 5) Melakukan kalkulasi untuk menentukan nilai dari energi *bandgap*.

3.5.1 Menyiapkan Struktur LFPbO, rGO, dan Etanol

Struktur LFO merupakan struktur ortorombik yang tersusun dari 20 atom dalam sel. LFO tersusun atas 4 atom Lantanum, 4 Atom Ferrum, dan 12 atom Oksigen. Untuk struktur dari LFO dapat dilihat pada Gambar 4.1(b). Selanjutnya untuk struktur LFO yang di-*doping* oleh Pb, dilakukan dengan mengganti sebagian atom Fe pada struktur LFO dengan atom Pb menggunakan fraksi 0.5. Sehingga struktur LFO berubah menjadi $LaFe_{0.5}Pb_{0.5}O_3$ (LFPO). Disajikan pada Gambar 4.1(c) yang merupakan struktur dari LFPbO dengan kisi $a = 5.60\text{\AA}$, $b = 5.66\text{\AA}$, $c = 7.94\text{\AA}$.

Kemudian untuk rGO yang digunakan dalam penelitian ini menggunakan single layer. Struktur dari *single layer* ini terdiri atas 19 atom Carbon, 5 cincin Hexagon atau sering disebut sarang lebah, dan 1 atom oksigen yang dapat dilihat pada Gambar 4.2(b). Pada setiap bagian ikatan bebas terakhir dalam *single layer* ini di saturasi dengan atom Hidrogen (H). Selanjutnya dalam pembentuk *single layer* rGO ini diperlukan satu atom Oksigen (O) yang ditempatkan pada ikatan Carbon C-C-C pada struktur rGO sehingga disebut sebagai permukaan atom oksigen.

Pada penelitian ini, struktur gas etanol yang digunakan penelitian ini dapat diperoleh dari *Crystallography Open Database*, struktur gas etanol karya Jönsson, 1976. Untuk struktur molekul gas etanol yang digunakan pada penelitian ini dapat dilihat pada Gambar 4.3(b) yang tersusun dari 2 atom C, 6 atom H dan 1 atom O.

3.5.2 Menentukan Konvergensi Struktur Dengan Kalkulasi SCF

Dalam menentukan konvergensi struktur termasuk mencari nilai konvergensi *k-points* dan nilai energi *cut-off*. Konvergensi ini dilakukan dengan cara melakukan variasi terhadap parameter yang kemudian akan dilakukan perhitungan secara SCF menggunakan Quantum Espresso. Perhitungan berbagai variasi *k-points* dan energi *cut-off* ini penting dilakukan agar mendapatkan nilai yang optimal untuk perhitungan selanjutnya.

Ketika telah ditemukan nilai energi total sistem dari berbagai variasi *k-points* dan energi *cut-off* nya, maka langkah selanjutnya yaitu mem-plot variasi harga *k-points* dan energi *cut-off* terhadap energi total sistem menggunakan OriginPro. Sehingga konvergensi dari nilai *k-points* dan energi *cut-off* dapat diperoleh dari plot yang telah dibuat.

3.5.3 Menentukan jarak Optimal Molekul Etanol dan rGO

Untuk jarak optimal molekul gas etanol terhadap adsorben dapat diperoleh dengan melakukan variasi terhadap jarak molekul gas etanol. Pada penelitian ini, Variasi jarak dimulai dari 1 Å hingga 4 Å, dengan selang 0.25Å. Perhitungan ini dilakukan dengan metode SCF. Hasil dari perhitungan ini akan diperoleh nilai dari total energi sistem yang nantinya akan dilakukan plot variasi jarak molekul gas etanol terhadap total energi sistem dengan menggunakan python. Dengan demikian berdasarkan plot yang telah dibuat, akan ditemukan nilai dari jarak optimal molekul gas etanol terhadap sistem.

Selanjutnya dalam menentukan jarak optimal rGO maka akan dilakukan prosedur yang sama seperti menentukan jarak optimal etanol. Nilai dari jarak optimal rGO ini didapat dari plot nilai variasi jarak rGO terhadap total energi sistem.

3.5.4 Menentukan Energi Adsorpsi

Dalam menentukan energi adsorpsi dilakukan menggunakan metode vc-relax, sebuah pendekatan yang mengoptimalkan struktur atom dan parameter kisi dari sistem yang dianalisis. Dengan metode vc-relax akan memperoleh energi total sistem yang paling stabil, yaitu energi yang terkait dengan konfigurasi struktur atom

dan parameter kisi yang telah teroptimasi. Untuk energi total yang dihitung mencakup semua interaksi antar atom dalam sistem, baik untuk adsorben, adsorbat, maupun sistem secara keseluruhan, setelah struktur mencapai kondisi relaksasi.

Proses ini dimulai dengan menyusun model sistem yang mencakup adsorben dan adsorbat. Selanjutnya, metode *vc-relax* digunakan untuk mengkalkulasikan energi total dari sistem serta keseluruhan sistem yang telah dilakukan optimasi atau terelaksasi pada struktur atom dan parameter kisinya. Dengan energi total yang telah teroptimasi, selanjutnya menghitung energi adsorpsi menggunakan persamaan 2.1. Energi adsorpsi merupakan indikator penting dalam menentukan seberapa kuat interaksi antara molekul adsorbat dengan permukaan material.

3.5.5 Menentukan Energi BandGap

Penentuan nilai energi bandgap dimulai dengan memastikan bahwa struktur material, terutama posisi atom dan parameter kisinya, berada dalam kondisi keseimbangan. Kemudian saat struktur sudah dalam keadaan seimbang, langkah pertama yang dilakukan adalah perhitungan Self-Consistent Field (SCF) untuk menentukan kerapatan elektron dalam material. Perhitungan SCF ini merupakan dasar bagi perhitungan berikutnya dan memastikan bahwa interaksi antar elektron dalam material telah diperhitungkan secara konsisten.

Setelah perhitungan SCF selesai, tahap kedua melibatkan perhitungan *bands* untuk mendapatkan struktur pita (*bands structure*) dan energi bandgap dari material. Tahap terakhir adalah *post-processing* data menggunakan ``bands.x``, yang merupakan bagian dalam Quantum Espresso, untuk menyusun data menjadi format yang lebih mudah dibaca dan divisualisasikan. Hasil dari *post-processing* ini kemudian dapat divisualisasikan dengan menggunakan perangkat lunak seperti OriginPro, yang mendukung pembuatan grafik dan memungkinkan analisis lebih mendalam dari data yang dihasilkan.