

BAB I

PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Etanol merupakan golongan alkohol dengan sifat yang mudah menguap, tidak berwarna, mudah terbakar, dan memiliki sensasi rasa manis ketika dicampur dengan air. Senyawa ini sangat masif digunakan dalam industri untuk pelbagai aplikasi. Etanol diaplikasikan dalam industri obat-obatan, parfum, kosmetik, hingga produk minuman tertentu.

Sebagai implikasi dari masifnya penggunaan etanol dalam pelbagai industri, keselamatan kerja dalam penggunaannya mesti ditingkatkan. Mengingat etanol mudah menguap menjadi gas, sedangkan gas etanol memiliki potensi yang membahayakan manusia. Beberapa dampak ketika manusia menghirup gas etanol dalam konsentrasi tertentu adalah pening, lemah, tidak sadarkan diri, bahkan hingga kematian (Strohm, 2014). Selain itu, aplikasi etanol dalam produk minuman tertentu dapat menyebabkan kesadaran diri yang berkurang dan dapat membahayakan. Oleh karena itu, diperlukan suatu komponen yang dapat mengindera keberadaan gas etanol.

Komponen untuk mengindera keberadaan gas tertentu disebut sebagai sensor gas. Kontemporer, semikonduktor menjadi material yang paling banyak digunakan dalam pembuatan sensor gas. Populernya semikonduktor menjadi material sensor gas karena potensi pengembangannya yang variatif dan biaya yang relatif terjangkau. Sehingga, sensor gas yang berkembang saat ini umumnya dikembangkan dari material semikonduktor.

Sensor gas semikonduktor dapat mendeteksi keberadaan gas tertentu karena ketika terpapar molekul gas, parameter fisis material semikonduktor mengalami perubahan. Perubahan yang terjadi seperti konduktivitas dan fungsi kerjanya, di mana perubahan fisis tersebut dapat menjadi indikator untuk deteksi gas tertentu. Sedangkan, parameter fisis suatu material dapat dianalisis dari lebar celah pita energinya. Ketika terjadi perubahan celah pita energi akibat interaksi material semikonduktor dengan molekul gas dapat menyebabkan perubahan struktur pita

dari semikonduktor. Perubahan tersebut dapat dikalkulasi dan menjadi sinyal deteksi gas.

Ada pula selektivitas yang merupakan salah satu indikator penting potensi material sebagai sensor gas. Selektivitas merupakan suatu kemampuan untuk membedakan target dari molekul interferensi dan menampilkan respons terhadap target spesifik (Wusiman & Taghipour, 2022). Hal tersebut menjadi sangat krusial untuk sensor gas yang diaplikasikan untuk mendeteksi suatu gas berbahaya secara *real time*, dalam hal ini gas etanol. Selektivitas yang baik pada suatu material dapat memastikan bahwa sensor gas yang difabrikasi dapat memberikan informasi dengan akurasi yang tinggi terkait keberadaan suatu molekul gas.

Material semikonduktor yang biasa digunakan untuk sensor gas adalah semikonduktor oksida, seperti SnO_2 , TiO_2 , dan Fe_2O_3 . Lebih khusus lagi, terdapat material *perovskite* ABX_3 dengan A dan B sebagai kation dengan X sebagai oksigen. Material *perovskite* populer sebagai material penyusun sensor gas, salah satu contohnya adalah LaFeO_3 . Material *perovskite* LaFeO_3 biasa digunakan untuk mendeteksi molekul gas yang penyusunnya terdapat oksigen. Hal tersebut dikarenakan material *perovskite* memiliki defisiensi oksigen (Jia dkk., 2020). Sehingga, material ini sensitif terhadap molekul gas yang salah satu penyusunnya adalah oksigen. Salah satu gas yang dapat dideteksi dengan material ini adalah gas etanol (Fergus, 2007; Suhendi, Amanda, dkk., 2021; Yamazoe, 1991). Material LaFeO_3 dipilih dalam penelitian sebagai material potensial sebagai sensor gas etanol karena merupakan material dengan besi oksida paling stabil dalam kondisi *ambient*, yang sangat penting dalam segi pengembangan teknologi (Rong dkk., 2018). Selain itu, LaFeO_3 juga memiliki resistansi yang tinggi terhadap korosi, konduktivitas listrik yang tinggi, dan luas permukaan spesifik yang tinggi material ini menjadi potensial sensor gas karena akan sensitif terhadap gas di lingkungannya (Chen dkk., 2005). Namun, sensitivitas dari LaFeO_3 sebagai material potensial sensor gas masih dapat dioptimalkan dengan menambahkan *doping*.

Meskipun LaFeO_3 dapat menjadi material potensial untuk pembuatan sensor gas, tetapi rentang deteksi dan performanya belum optimal. Oleh karena itu, material semikonduktor ini harus diberi *doping* untuk meningkatkan rentang deteksi dan performanya. Pemberian *doping* merupakan proses mengganti salah satu atom

dari material LaFeO_3 dengan tujuan meningkatkan sifat fisisnya. Salah satu *doping* yang dapat meningkatkan performa sensor gas dan meningkatkan rentang deteksinya adalah ion Gadolinium (Gd). Penggunaan Gd sebagai *doping* untuk aplikasi sensor dapat mengoptimalkan selektivitas dan stabilitas sensor gas (Çolak & Karaköse, 2022; Zahmouli dkk., 2020). *Doping* Gd juga dapat meningkatkan selektivitas sensor gas (Renganathan dkk., 2022). *Doping* Gd dapat mengoptimalkan selektivitas sensor gas karena penambahan Gd dapat meningkatkan sifat magnetik suatu material, selain itu, Gd memiliki momen magnetik yang besar. Sehingga, banyak penelitian yang meneliti material potensial sensor gas dengan menambahkan *doping* Gd. Oleh karena itu, penelitian ini akan menggunakan material LaFeO_3 yang di-*doping* dengan Gd.

Selain itu, terdapat beberapa penelitian yang melaporkan bahwa *graphene* dapat meningkatkan proses adsorpsi karena *graphene* memiliki luas permukaan yang sangat tinggi. *Graphene* juga dapat mengalami perubahan resistansi listrik yang signifikan ketika mengalami adsorpsi. Oleh karena itu, *graphene* dapat menjadi material pendukung sensor gas. Salah satu material berbasis *graphene* yang digunakan untuk aplikasi sensor gas adalah *reduced graphene oxide* (rGO). Material ini relatif terjangkau dan memiliki sensitivitas yang tinggi. Penelitian sebelumnya melaporkan bahwa penggunaan *graphene* meningkatkan performa sensor gas (Ghosh dkk., 2013; J. Yu dkk., 2022). Selain itu, rGO memiliki mobilitas pembawa muatan yang baik, sehingga menarik banyak peneliti untuk mengembangkan sensor elektronik dengan menggunakan rGO (Dua dkk., 2010; Schedin dkk., 2007). Dengan keunggulan yang sama dengan *graphene*, rGO menarik banyak peneliti untuk memanfaatkannya sebagai sensor gas karena secara fabrikasi rGO akan lebih terjangkau dibandingkan *graphene*. Selain itu, rGO dapat lebih mudah dimodifikasi atau di-*tuning* untuk mencapai suatu karakteristik yang diharapkan. Berdasarkan temuan-temuan tersebut, pada penelitian ini akan menganalisis pengaruh penambahan lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd untuk peningkatan performa sensor gas. Sehingga, dapat diketahui bagaimana efektivitas dan pengaruh rGO untuk aplikasi sensor gas yang diberi *doping* Gd.

Dalam praktiknya, penelitian ini akan dilakukan dengan pemodelan komputasi menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Pemodelan

menggunakan DFT dilakukan untuk mengetahui pengaruh penambahan lapisan rGO untuk aplikasi sensor gas LaFeO_3 yang di-*doping* Gd. Pemodelan dilakukan untuk meminimalisir potensi kegagalan dalam eksperimen. Oleh karena itu, pemodelan komputasi dipilih dalam penelitian ini. Kemudian, eksperimen dapat dilakukan ketika hasil pemodelan komputasi bersifat positif. Sehingga, penelitian secara umum akan lebih efisien dan potensi keberhasilan akan lebih besar. Selain itu, pemodelan komputasi dapat dilakukan secara repetitif untuk memastikan hasil yang optimal.

Untuk pemodelan komputasi dengan DFT akan menggunakan program Quantum Espresso yang terdapat pada *High Performance Computer* (HPC) yang disediakan oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN). HPC diperlukan untuk komputasi ini dikarenakan atom yang terlibat dalam sistem ini berjumlah cukup banyak. Di mana komputer konvensional tidak cukup kompeten untuk melakukan komputasi ini.

1.2 Rumusan Masalah

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

1. Bagaimana menentukan energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd tanpa diberi lapisan rGO dan dengan ditambahkan lapisan rGO program Quantum Espresso?
2. Bagaimana energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd?
3. Bagaimana energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd dan ditambahkan lapisan rGO?

1.3 Batasan Masalah Penelitian

Dalam penelitian ini lapisan rGO didefinisikan sebagai struktur mikroskopis, sehingga parameter makroskopisnya, seperti tebal dan lebar diabaikan. Lapisan rGO dalam penelitian ini merupakan *single layer* yang dibentuk dari struktur *graphene* yang disaturasi dengan atom hidrogen dan ditambahkan satu atom oksigen.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan rumusan masalah yang telah dirumuskan, maka tujuan penelitian ini adalah sebagai berikut.

1. Mengetahui energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd tanpa diberi lapisan rGO dan dengan diberi lapisan rGO menggunakan program Quantum Espresso.
2. Mengetahui energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd.
3. Mengetahui pengaruh penambahan lapisan rGO terhadap energi adsorpsi dari molekul gas etanol pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd.

1.5 Manfaat Penelitian

Penelitian ini diharapkan dapat memberikan informasi terkait pengaruh penambahan lapisan rGO pada LaFeO_3 yang di-*doping* Gd. Hal tersebut juga diharapkan dapat memberikan manfaat untuk mengisi celah dari penelitian sebelumnya. Jika penambahan lapisan rGO berpotensi meningkatkan performa sensor gas dari segi selektivitas deteksi gas etanol.

1.6 Struktur Organisasi Skripsi

Secara umum, skripsi ini akan disusun ke dalam lima bab, yaitu Pendahuluan, Kajian Pustaka, Metodologi Penelitian, Temuan dan Pembahasan, serta Simpulan, Implikasi, dan Rekomendasi. Di mana tiap bab akan memiliki subbab pembahasan tersendiri, dengan rincian sebagai berikut. Bab 1 Pendahuluan memiliki subbab yang tersusun dari latar belakang penelitian, rumusan masalah penelitian, tujuan penelitian, manfaat penelitian, dan struktur organisasi skripsi. Bab 2 Kajian Pustaka memiliki subbab yang tersusun dari kajian literatur terkait sensor gas, etanol, material *perovskite* LaFeO_3 , *doping* Gd, lapisan rGO, *Density Functional Theory*, Energi Adsorpsi, dan Mekanisme Adsorpsi. Bab 3 Metodologi Penelitian memiliki subbab yang tersusun dari waktu dan tempat penelitian, spesifikasi perangkat keras dan versi perangkat lunak, prosedur penelitian, diagram alir penelitian, dan tahapan komputasi. Bab 4 Temuan dan Pembahasan yang membahas konvergensi harga *k-points*, konvergensi nilai energi *cut off*, jarak optimal molekul gas etanol, jarak optimal rGO, energi adsorpsi LGFO dan LGFO @ rGO terhadap molekul gas etanol, analisis data berdasarkan nilai energi adsorpsi.

Bab 5 Simpulan, Implikasi, dan Rekomendasi akan berisi simpulan komprehensif terkait inti penelitian, implikasi dari hasil penelitian, dan rekomendasi bagi peneliti berikutnya yang berminat melakukan penelitian lanjutan.