

BAB III

METODE PENELITIAN

3.1 Waktu dan Tempat Penelitian

Penelitian dengan komputasi dilakukan pada September-Desember 2022. Komputasi dilakukan dengan menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang difasilitasi oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN) yang terletak di Pusat Riset Komputasi, Cibinong, Bogor. Penelitian dilakukan secara virtual dengan menggunakan SSH *remote command*, sehingga terminal HPC dapat digunakan dari komputer penulis.

3.2 Spesifikasi perangkat keras dan versi perangkat lunak

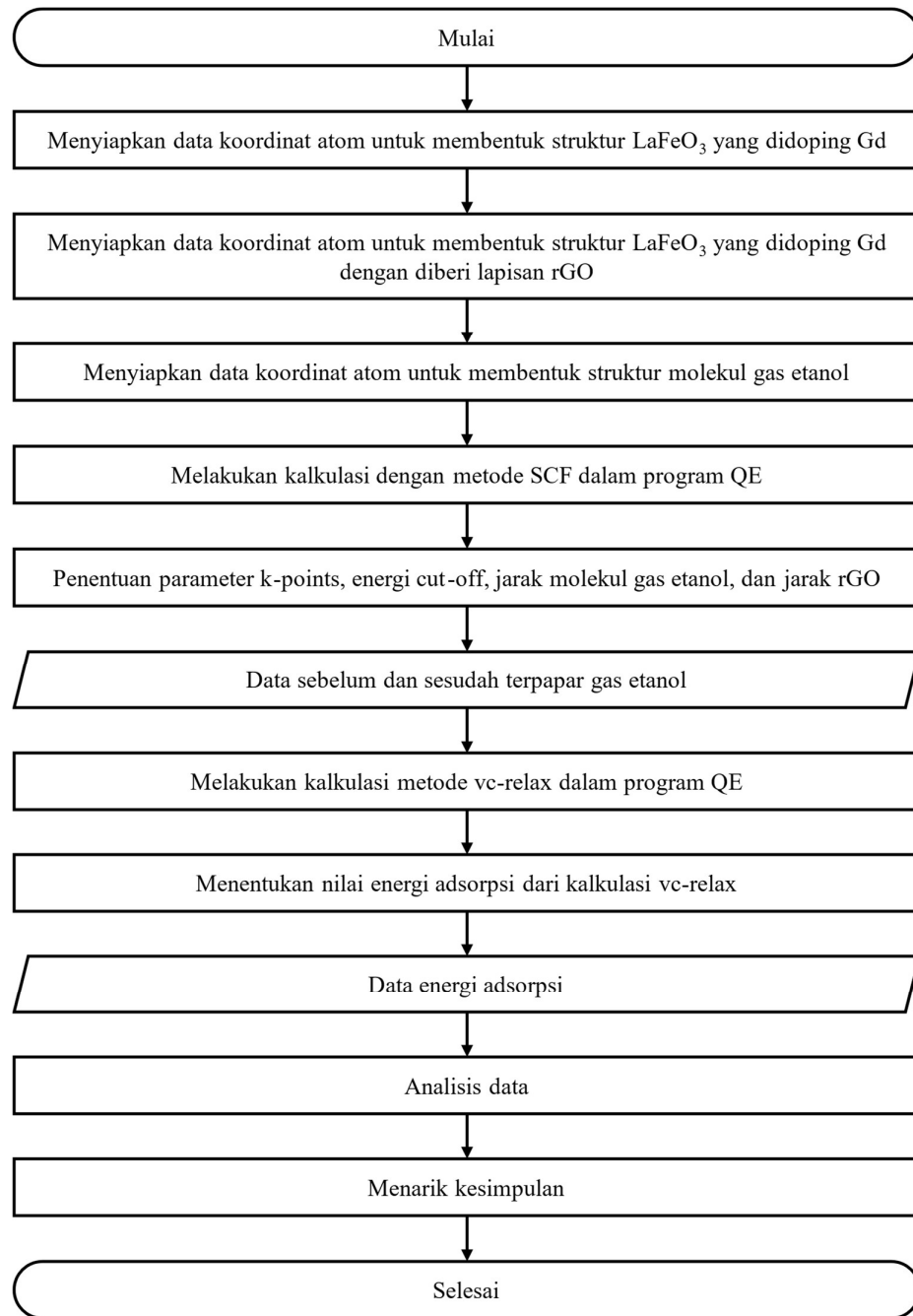
Dalam penelitian ini digunakan HPC milik BRIN untuk komputasi umum dengan tipe antrean *work* dengan durasi komputasi maksimal 96 jam. HPC untuk komputasi ini memiliki 2 *nodes*, 72 *cores* (Intel Xeon Gold 6140 2.3 GHz) atau 36 *cores* untuk tiap *node*, dengan 384 GB RAM untuk tiap *node* atau total 768 GB RAM. Namun, dalam praktiknya HPC tersebut merupakan layanan komputasi umum yang digunakan bersama. Oleh karena itu, penulis hanya mendapat akses 12-36 *cores* dengan akses yang paling sering diperoleh 18 *cores*. Terdapat pula HPC dengan tipe antrean *cpu* dengan durasi komputasi maksimal 24 jam. HPC untuk komputasi ini memiliki 28 *nodes*, 1008 *cores* (Intel Xeon CPU 2.1 GHz) atau 36 *cores* untuk tiap *node*, dengan total 3.5 TB RAM. Sedangkan, perangkat lunak yang digunakan dalam penelitian ini terdiri dari Quantum Espresso versi 7.0, BURAI versi 1.3, dan Python versi 3.10.7.

3.3 Prosedur Penelitian

Metode yang digunakan dalam penelitian ini adalah metode kuantitatif dengan menggunakan pemodelan komputasi. Pemodelan struktur material uji dilakukan dengan menggunakan bantuan program Burai (GUI untuk Quantum Espresso). Sedangkan, komputasi energi adsorpsi material dilakukan dengan menggunakan *Density Functional Theory* melalui program Quantum Espresso (QE). Dalam proses kalkulasi, fungsi korelasi pertukaran yang digunakan adalah DFT dengan GGA yang dikembangkan oleh Perdew-Burke-Erzerhof (GGA-PBE). Kemudian, hasil komputasi diolah dengan menggunakan Python.

3.4 Diagram Alir Penelitian

Diagram alir penelitian ini dapat diilustrasikan pada Gambar 3.1.



Gambar 3.1 Diagram Alir Penelitian

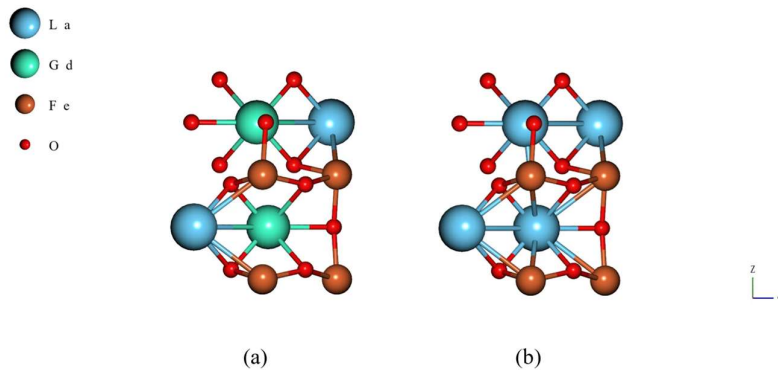
3.5 Tahapan Komputasi

Komputasi dalam penelitian ini terbagi menjadi tiga utama, yaitu (1) menyusun struktur LaFeO₃ yang di-*doping* Gd tanpa lapisan rGO dan dengan

lapisan rGO, (2) menyusun struktur yang berinteraksi dengan molekul gas etanol, dan (3) kalkulasi SCF untuk menentukan konvergensi dan optimasi, (4) kalkulasi *vc-relax* untuk menentukan energi adsorpsi.

3.5.1 Menyiapkan struktur LGFO

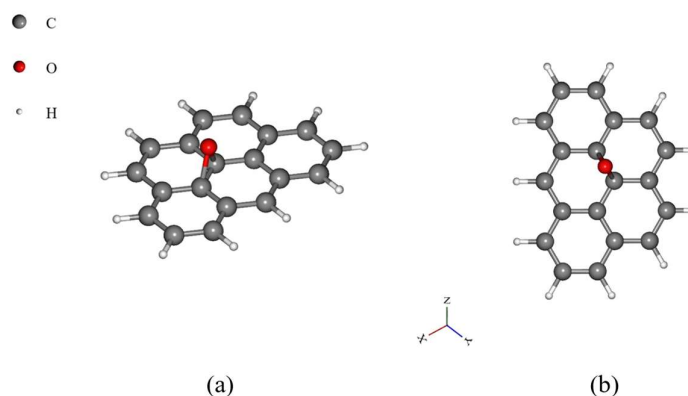
LFO dapat ditemukan dalam struktur ortorombik yang tersusun dari 20 atom dalam selnya (The Materials Project, 2014). LFO tersebut tersusun dari 4 atom La, 4 atom Fe, dan 12 atom O. Struktur LFO yang diperoleh dari Materials Project dapat dilihat pada Gambar 4.1 Ilustrasi grafis struktur (a) LGFO, (b) LFO. Untuk memperoleh struktur LFO yang di-*doping* Gd, dapat dilakukan dengan cara mengganti sebagian atom La pada struktur LFO dengan atom Gd menggunakan fraksi 0.5. Sehingga struktur LFO berubah menjadi $\text{La}_{0.50}\text{Gd}_{0.50}\text{FeO}_3$ (LGFO) seperti pada Gambar 3.2. Struktur LGFO tersebut memiliki parameter kisi $a = 5.60 \text{ \AA}$, $b = 5.66 \text{ \AA}$, dan $c = 7.94 \text{ \AA}$



Gambar 3.2 Ilustrasi grafis struktur (a) LGFO, (b) LFO

3.5.2 Menyiapkan struktur Reduce Graphene Oxide (rGO)

Graphene, *graphene oxide*, maupun *reduce graphene oxide* dapat secara eksperimen disintesis sebagai *monolayer*. Dalam penelitian ini struktur rGO didesain sebagai *single layer* seperti pada Gambar 3.1.



Gambar 3.3 Ilustrasi grafis struktur *reduce graphene oxide* (a) tampak dari samping atas, (b) tampak dari atas

Struktur rGO pada penelitian ini diperoleh dari *single layer* struktur *graphene* yang memiliki 19 atom karbon (C) dengan 5 cincin (*hexagon*) sarang lebah. Dengan ikatan bebas terakhir dari atom karbon pada struktur *graphene* tersebut disaturasi dengan atom hidrogen (H). Untuk membentuk struktur rGO, satu atom oksigen (O) dimasukkan ke dalam struktur *graphene*. Atom O tersebut disebut sebagai permukaan atom oksigen, yang terletak pada ikatan atom karbon C-C dari struktur rGO. Struktur rGO yang digunakan pada penelitian ini sudah banyak digunakan dan dimodelkan di beberapa penelitian (Fellah, 2021; Guo dkk., 2018; Kandasamy dkk., 2020; Rondiya dkk., 2020; Yao dkk., 2017; S. Yu dkk., 2016; W. Zhang dkk., 2016; Zhao dkk., 2018)

3.5.3 Menyiapkan struktur gas etanol

Struktur gas etanol yang digunakan dalam penelitian ini diperoleh dari penelitian sebelumnya yang meneliti struktur molekul gas etanol (Jönsson, 1976), struktur molekul gas etanol tersebut dapat diakses melalui Crystallography Open Database. Struktur molekul gas etanol dapat dilihat pada Gambar 4.3, dengan tersusun dari 2 atom C, 6 atom H, dan 1 atom O.

3.5.4 Menentukan konvergensi struktur dengan kalkulasi SCF

Konvergensi struktur yang dilakukan meliputi konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off*. Konvergensi dilakukan dengan memvariasikan parameter tersebut kemudian dilakukan kalkulasi dengan SCF yang tersedia dalam program QE. Setelah diperoleh energi total sistem pada tiap variasi harga *k-points* dan nilai

energi *cut-off*. Langkah berikutnya adalah mem-*plot* variasi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* terhadap energi total sistem yang dihasilkan dengan menggunakan Python. Konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* dapat diketahui dari *plot* yang diperoleh.

3.5.5 Menentukan jarak optimal molekul gas etanol

Jarak optimal molekul gas etanol terhadap adsorben ditentukan dengan cara memvariasikan jarak molekul gas etanol, dalam penelitian ini variasi dimulai dari dengan 1 Å hingga 3.5 Å dengan selang 0.25 Å. Kalkulasi yang dilakukan pada tiap variasi jarak adalah SCF. Dengan kalkulasi SCF maka akan diperoleh total energi sistem. Setelah itu, dilakukan *plot* variasi jarak molekul gas etanol terhadap total energi sistem dengan menggunakan Python. Jarak optimal diperoleh dengan menentukan total energi sistem yang paling signifikan dibandingkan variasi jarak lainnya.

3.5.6 Menentukan jarak optimal rGO

Dalam menentukan jarak optimal rGO, prosedur yang sama dilakukan seperti penentuan jarak optimal molekul gas etanol.

3.5.7 Menentukan energi adsorpsi

Nilai energi adsorpsi diperoleh dengan cara mengalkulasi energi total sistem untuk adsorben, adsorbat, dan sistem secara keseluruhan. Namun, metode yang digunakan berbeda dengan kalkulasi sebelumnya yang menggunakan SCF. Dalam menentukan energi adsorpsi, metode yang digunakan adalah *vc-relax*. *vc-relax*. Metode *vc-relax* digunakan karena energi total pada sistem yang dihasilkan merupakan energi sistem yang telah dioptimasi (terelaksasi) pada struktur atom dan parameter kisinya. Sedangkan energi adsorpsi dapat diperoleh dengan menggunakan persamaan 2.1.