

**PENGARUH PENAMBAHAN rGO PADA LaFeO<sub>3</sub> YANG DIDOPING Co  
TERHADAP ENERGI ADSORPSI MOLEKUL ETANOL MENGGUNAKAN  
DENSITY FUNCTIONAL THEORY UNTUK SENSOR GAS**

**Alta Ridho Anugrah<sup>1</sup>, Andhy Setiawan<sup>1</sup>, Yuyu Rachmat Tayubi<sup>1</sup>, Ahmad  
Aminudin<sup>1</sup>, Lilik Hasanah<sup>1</sup>, Siti Kudnie Sahari<sup>2</sup>, Endi Suhendi<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>*Program Studi Fisika, Universitas Pendidikan Indonesia, Jl. Dr. Setiabudhi 229  
Bandung 40154, Indonesia*

<sup>2</sup>*Faculty of Engineering, Universiti Malaysia Sarawak, 94300 UNMAS, Kota  
Samarahan, Sarawak, Malaysia*

**Abstract**

*LaFeO<sub>3</sub> (LFO) material has been widely used as a gas sensor construction material. Although LFO has been widely applied to gas sensors, the selectivity and sensitivity as well as the working temperature of gas sensors are still not optimal. In this study, the LFO was Co-doped and coated with single layer rGO to analyze its sensitivity and selectivity based on adsorption energy using Density Functional Theory (DFT). Based on this research, it was found that the presence of Co doping and rGO coating could increase the adsorption energy on the LFO. The addition of the rGO layer to the LFO increased the adsorption energy by 23.58% from -2.38 eV for Co-doped LFO to -2.93 eV when rGO was added. This shows the potential of adding rGO layers to LFO materials for sensor materials.*

**Keyword** : LaFeO<sub>3</sub>, Cobalt, gas sensor, ethanol, reduce graphene oxide, density functional theory,

**Abstrak**

Material LaFeO<sub>3</sub> (LFO) telah banyak digunakan sebagai material pembuatan sensor gas. Meskipun LFO sudah banyak diaplikasikan sebagai bahan pembuatan sensor gas, namun selektivitas dan sensitivitas serta temperatur kerja sensor gas masih belum optimal. Pada penelitian ini, LFO didoping dengan Co dan dilapisi *single layer* rGO

untuk menganalisis sensitivitas dan selektivitasnya berdasarkan energi adsorpsi dengan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT). Berdasarkan hasil penelitian didapatkan bahwa dengan adanya doping Co dan lapisan rGO dapat meningkatkan energi adsorpsi pada LFO. Penambahan lapisan rGO pada LFO membuat peningkatan energi adsorpsi sebesar 23.58 % dari -2.38 eV untuk LFO doping Co menjadi -2.93 eV ketika ditambahkan rGO. Hal tersebut menunjukkan potensi dari penambahan lapisan rGO pada material LFO untuk material sensor.

**Kata kunci** : LaFeO<sub>3</sub>, Cobalt, sensor gas, gas etanol, *reduce graphene oxide*, *density functional theory*

## 1. Pendahuluan

Teknologi semikonduktor telah memberikan kontribusi yang besar bagi kehidupan manusia. Salah satu aplikasi yang banyak digunakan adalah sensor gas. Sensor gas adalah sensor yang dirancang untuk mendeteksi dan mengidentifikasi keberadaan gas di suatu area. Sensor gas merupakan sebuah divais elektronik yang dapat menghasilkan sinyal listrik karena adanya respon reaksi kimia antara molekul bahan [1]. Permintaan terhadap material sensor gas masih sangat tinggi, khususnya sensor gas etanol. Hal ini berkaitan dengan penggunaannya yang dapat diaplikasikan dalam uji kandungan etanol dalam ruangan, dalam tubuh manusia melalui tes alkohol dibagian mulut untuk memonitor supir kendaraan, uji kemasan dalam makanan [2], dan uji fermentasi. Etanol merupakan jenis

alkohol yang mudah menguap, mudah terbakar, tidak berwarna dan merupakan alkohol yang sering digunakan dalam kehidupan sehari – hari. C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O merupakan rumus kimia dari etanol, yang diharapkan dari unsur oksigen pada etanol dapat mempengaruhi konduktivitas material pada sensor gas.

Pada umumnya, jenis material yang dimanfaatkan dalam pembuatan sensor gas, adalah metal oksida dan semikonduktor oksida. Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, SnO<sub>2</sub>, TiO<sub>2</sub>, adalah beberapa contoh material yang digunakan dalam pembuatan sensor gas [3]. Terdapat beberapa klasifikasi yang lebih spesifik untuk suatu material dapat dijadikan sebagai material penyusun sensor gas. Salah satunya adalah material perovskite. LaFeO<sub>3</sub> adalah salah satu dari material perovskite yang banyak diteliti penggunaannya untuk sensor gas [4]. LaFeO<sub>3</sub> adalah salah

satu jenis perovskite oksida yang dapat digunakan dalam berbagai aplikasi seperti, sensor gas, elektroda SOFC (*Solid Oxide Fuel Cell*), katalis dll. Penelitian  $\text{LaFeO}_3$  sebagai sensor gas etanol dilakukan karena  $\text{LaFeO}_3$  memiliki respon yang baik terhadap keberadaan gas etanol [2], [5], [6]. Selain itu,  $\text{LaFeO}_3$  yang diaplikasikan dengan sensor gas memiliki temperatur kerja yang relatif lebih rendah jika dibandingkan dengan sensor gas  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  [5], [6].

Pada penelitian ini  $\text{LaFeO}_3$  akan di-*doping* dengan semikonduktor logam transisi kobalt (Co). Logam transisi yang digunakan sebagai *doping* dapat mengikat molekul hidrogen melalui donor elektron. *Doping* kobalt meningkatkan respons gas melalui peningkatan reseptor serta fungsi transduser [7]. *Doping* kobalt juga memberikan peningkatan sensitivitas, waktu respon dan dapat menurunkan temperatur operasi [8]. Sehingga menjadikan logam transisi kobalt (Co) adalah salah satu dopan yang paling efektif untuk meningkatkan sifat optik dan sifat elektronik struktur  $\text{LaFeO}_3$ .

Selain itu, beberapa penelitian menunjukkan bahwa *graphene* telah terbukti menjadi bahan pendeteksi gas yang menjanjikan karena memiliki luas

permukaan yang besar [9], [10]. *Graphene* adalah molekul yang terdiri dari atom karbon murni yang saling terkait satu sama lain membentuk pola heksagonal dua dimensi menyerupai sarang lebah. *Graphene* berpotensi dapat mendeteksi spesies gas hingga ke tingkat molekul tunggal [10]. *Reduced Graphene Oxide* (rGO) merupakan salah satu material berbasis *graphene* yang digunakan dalam sensor gas. Material ini memiliki sensitivitas yang tinggi dan relatif terjangkau sehingga mudah untuk mendapatkannya. Berdasarkan penelitian – penelitian tersebut, penelitian ini akan menganalisis efek dari penambahan lapisan rGO pada sensor gas berbasis  $\text{LaFeO}_3$  yang di-*doping* Co (LFCO).

Analisis efek yang terjadi ketika ditambahkan lapisan rGO akan menggunakan perhitungan berdasarkan energi adsorpsi. Energi adsorpsi pada suatu material dengan sebuah gas dapat menjadi acuan terhadap tingkat sensitivitas dan selektivitas material tersebut dengan sebuah gas tertentu [11]. Dan juga semakin negatif energi adsorpsi suatu material akan semakin stabil konfigurasi dan adsorpsi eksotermiknya [12].

Pada penelitian ini perhitungan dilakukan menggunakan *Density Functional Theory* (DFT) dengan metode

pendekatan gradien atau *Generalized Gradient Approximation of Perdew-Burke-Enzerhof* (GGA-PBE). Perhitungan komputasi dengan DFT akan menggunakan program Quantum Espresso dalam *High Performance Computer* (HPC) yang disediakan oleh BRIN (Badan Riset dan Inovasi Nasional).

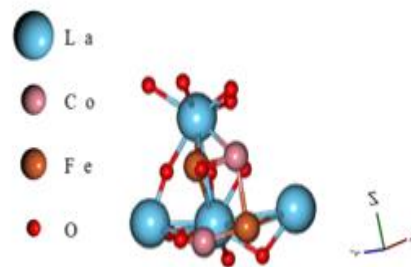
## 2. Bahan dan Metode

Penelitian ini dilakukan dengan metode kuantitatif dengan pemodelan komputasi menggunakan *High Performance Computer* (HPC) yang dimiliki oleh Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN). Pemodelan struktur material uji dilakukan dengan menggunakan Quantum Espresso sebagai *Graphical User Interface* untuk program Burai. Sedangkan, untuk komputasi energi adsorpsi material menggunakan Teori Fungsi Kerapatan atau DFT melalui Quantum Espresso. Dalam proses kalkulasinya, penelitian ini menggunakan metode pendekatan gradien umum atau *Generalized Gradient Approximation Perdew – Burke – Ernzerhof* (GGA – PBE). Tujuan dari pendekatan ini adalah untuk menentukan nilai energi adsorpsi.

### 2.1 Struktur Material

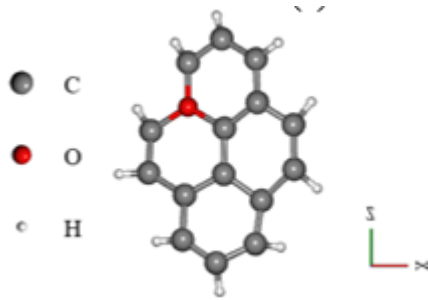
Struktur material yang digunakan yaitu  $\text{LaFeO}_3$  yang didoping oleh atom Co (Cobalt) yang molekulnya terdiri dari 4

atom La, 4 atom La, 2 atom Fe, 2 atom Co dan 12 atom O, dengan catatan Co mengganti 2 atom Fe yang seharusnya terdiri dari 4 atom Fe. Visualisasi material tersebut dapat dilihat pada Gambar 1.



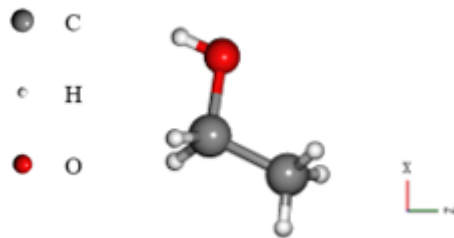
Gambar 1 Visualisasi Struktur Material  $\text{LaFeO}_3$  yang di doping Co

Kemudian untuk struktur *reduce graphene oxide* atau rGO didesain sebagai *single layer*. Struktur rGO pada penelitian ini didapatkan pada struktur *single layer* dari *graphene* yang memiliki 15 atom karbon (C) dengan 4 cincin (heksagon) berbentuk sarang lebah. Dengan setiap ikatan bebas terakhir dari atom karbon pada struktur *graphene* diatas di saturasi dengan atom hidrogen (H). Dalam pembentukan sebuah rGO, diperlukan satu atom oksigen (O) yang dimasukkan ke dalam struktur *graphene*. Atom oksigen (O) yang terletak pada ikatan karbon C-C dari struktur rGO disebut sebagai permukaan atom oksigen. Visualisasi material tersebut dapat dilihat pada Gambar 2.



Gambar 2 Visualisasi Struktur Material rGO

Lalu, untuk struktur gas etanol didapatkan melalui *Crystallography Open Database*. Struktur ini tersusun oleh 2 atom C, 6 atom H, dan 1 atom O yang dapat di lihat pada Gambar 3.



Gambar 3 Visualisasi Struktur Molekul Gas Etanol

## 2.2 Konvergensi Parameter

### Perhitungan dengan Kalkulasi SCF

#### (Self-Consistent Field)

Kalkulasi SCF dilakukan setelah melakukan konvergensi struktur. Konvergensi struktur disini meliputi konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* yaitu dengan memvariasikan parameter dari harga *k-points* dan energi *cut-off*. Kalkulasi SCF dilakukan menggunakan program QE.

Setelah mendapatkan nilai dari energi total sistem pada tiap variasi harga *k-points* dan energi *cut-off*, nilai – nilai tersebut di plot. Sehingga konvergensi harga *k-points* dan nilai energi *cut-off* dapat diketahui.

Untuk mendapatkan jarak optimal molekul gas etanol terhadap adsorben, dapat dilakukan dengan memvariasikan jarak dari molekul gas etanol ke adsorben. Pada penelitian ini variasi dilakukan dari jarak 1 Å sampai dengan 2.75 Å dengan selang 0.25 Å. Kalkulasi yang dilakukan ialah kalkulasi SCF sehingga akan menghasilkan total energi sistem. Setelah itu, mem-plot kan variasi jarak molekul gas etanol dengan total energi sistem. Sama halnya dengan menentukan jarak optimal molekul gas etanol, prosedur menentukan jarak optimal rGO juga dilakukan dengan memvariasikan jarak dan setelah itu membuat plot untuk mendapatkan jarak optimalnya.

## 2.3 Menentukan Nilai Energi Adsorpsi

Untuk mendapatkan nilai energi adsorpsi dilakukan kalkulasi energi total sistem untuk adsorbat, adsorben, dan sistem secara menyeluruh. Namun, untuk menentukan nilai energi adsorpsi metode yang digunakan berbeda dengan yang sebelumnya, dimana sebelumnya menggunakan kalkulasi SCF. Metode

yang digunakan untuk mendapatkan nilai energi adsorpsi yaitu metode kalkulasi *vc-relax*. Setelah itu energi adsorpsi dapat diperoleh dengan menggunakan persamaan 1.

$$E_{adsorpsi} = (E_{adsorben} + E_{adsorbat}) - E_{sistem} \quad (1)$$

### 3. HASIL DAN PEMBAHASAN

#### 3.1 Koordinat atom Pembentuk struktur

*LaFeO<sub>3</sub>* yang didoping Co, rGO, dan Etanol

Data koordinat atom yang didapatkan dari *database Material Project* dan *crystallography* adalah data file dengan format *.cif*. *cif* adalah singkatan dari *crystallographic information file* yang mana isi dari format file ini adalah informasi berupa koordinat atom dari suatu sistem. Berikut merupakan visualisasi dokumen *.cif*.

La	2.458503	6.241721	5.115626
La	4.622862	4.529713	4.380304
La	4.517779	4.096473	8.352639
La	7.550564	2.361303	3.974393
Co	4.595303	2.122073	6.709575
Fe	3.121476	3.130602	6.824239
Co	3.045213	3.607634	4.042884
Fe	4.345720	2.065125	4.120972
O	5.761018	3.112624	5.998832
O	2.960616	2.682600	6.734111
O	6.180025	5.943586	2.761776
O	3.379623	5.513562	9.971167
O	3.379623	5.513562	6.734111
O	6.180025	5.943586	5.998832
O	2.960616	2.682600	9.971167
O	5.761018	3.112624	2.761776
O	2.252259	4.190031	4.380304
O	5.149793	2.166187	9.088506
O	4.087979	7.020993	4.380304
O	6.888382	4.436155	8.352639

Gambar 4 Visualisasi dokumen *.cif* untuk struktur LFCO

Hasil dari koordinat di atas dapat dilihat pada Gambar 1.. Kemudian untuk koordinat yang dihasilkan dari struktur rGO dan molekul gas etanol dapat dilihat pada Gambar 5 dan Gambar 6. Pada koordinat di bawah ini dapat dilihat visualisasi hasil dari kordinat tersebut pada Gambar 2 dan Gambar 3.

C	4.583225	8.729710	6.341210
H	2.445712	8.494568	2.778597
C	3.260425	8.418244	2.826720
C	6.761254	8.081999	6.449388
C	5.621232	8.241871	7.150991
C	2.264417	9.538022	6.257750
H	6.355267	8.371564	2.595859
C	3.329767	8.752226	4.228199
C	6.780596	8.168018	5.047910
C	2.189995	9.233310	4.934037
H	7.323087	8.350527	7.167289
C	3.438376	9.379662	8.405650
C	4.563691	8.647903	4.892138
C	5.557553	8.214852	2.699831
C	4.499823	8.968376	9.154198
C	5.576893	8.356701	8.518899
H	6.277728	8.020993	9.029453
H	3.024764	9.720129	9.031071
H	1.832658	9.943995	6.938679
H	4.335283	9.263228	9.877750
H	1.260776	9.205159	4.893518

Gambar 5 Visualisasi dokumen *.cif* untuk koordinat sistem atom rGO

C	4.655056	12.352586	4.522776
C	3.986962	12.504690	5.855782
H	6.350329	11.903159	4.016846
H	4.214945	11.744862	3.920018
H	4.612872	13.114479	3.920018
H	4.402688	13.210834	6.332663
H	3.996309	11.662272	6.421422
H	3.074900	12.694647	5.783967
O	6.023726	11.989190	4.730957

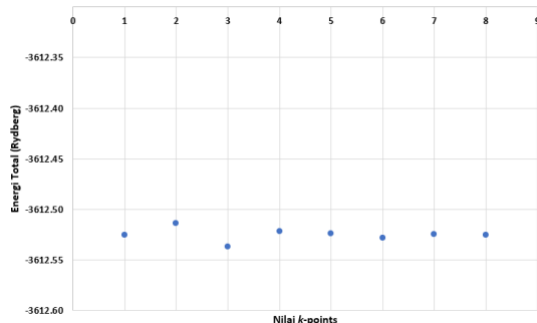
Gambar 6 Visualisasi dokumen *.cif* untuk koordinat sistem atom gas etanol

#### 3.2 Konvergensi Parameter dengan Metode SCF

Konvergensi yang dilakukan ini memiliki tujuan untuk menentukan besar nilai k-points dan nilai energi cut-off yang ideal.

Dalam menentukan hasil optimisasi dari plot konvergensi, ada beberapa parameter perhitungan yang perlu dicari dalam penelitian ini. Dalam setiap perhitungan menggunakan *Self-Consistent Field* untuk mencari nilai dari setiap *k-points*, energi *cut-off* dan jarak optimal, hasil yang digunakan ialah berupa total energi. Dan dari hasil total energi masing-masing parameter dibuat plot grafik yang disebut plot konvergensi.

Peneliti memberikan variasi nilai *k-points* dari  $1 \times 1 \times 1$  sampai  $8 \times 8 \times 8$  dengan energi *cut-off* dibuat menjadi variabel tetap dalam perhitungan ini dengan nilai energi *cut-off* sebesar 15 Ry. Berikut merupakan hasil dari plot konvergensi pada variasi nilai *k-points* terhadap total energi.

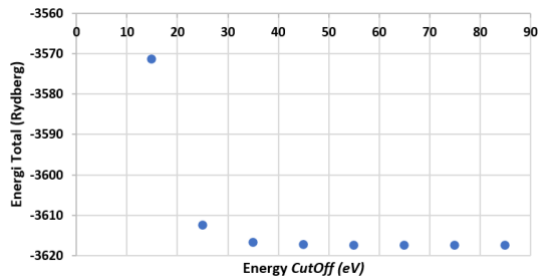


Gambar 7 Plot Konvergensi Nilai *k-points* terhadap Energi Total

Plot di atas, dapat seperti demikian karena bentuk analitik pita energi di zona Brillouin tidak diketahui, sehingga diperlukannya penyelesaian integral secara numerik. Oleh karena itu,

*Sampling* dilakukan dengan angka terbatas. Terdapat nilai total energi yang rendah dan juga terdapat nilai total energi yang tinggi, ini dikarenakan beberapa nilai *k-points* mengabaikan fungsional integral. Namun besar nilai total energi tidak akan berubah seiring dengan bertambahnya nilai dari *k-points* dan ketika nilai total energi tidak berubah lagi dapat dikatakan bahwa sudah mencapai konvergen. Sehingga berdasarkan pertimbangan peneliti, nilai *k-points* yang digunakan ialah *k-points*  $4 \times 4 \times 4$ .

Kemudian untuk energi *cut-off* peneliti memberikan variasi dari 15 Ry sampai dengan 85 Ry dengan selang 10 Ry. Untuk nilai *k-points*, digunakan dengan nilai yang sama berdasarkan hasil sebelumnya, yaitu  $4 \times 4 \times 4$ . Hasil perhitungan menggunakan *Self-Consistent Field* untuk mencari nilai energi *cut-off* ialah berupa nilai total energi yang dibuat plot grafik untuk setiap nilai energi *cut-off*. Berikut merupakan hasil plot konvergensi variasi nilai *k-points* terhadap total energi.

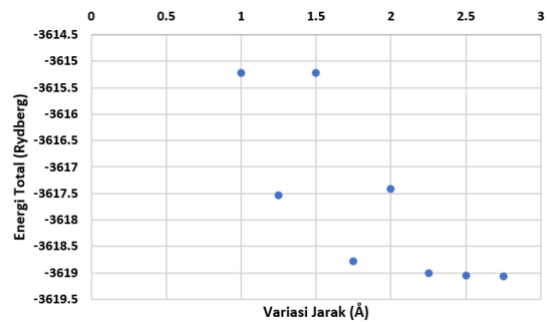


Gambar 8 Plot Konvergensi Nilai Energi *cut-off*

Pada plot nilai energi *cut-off*, tidak terdapat bentuk analitik untuk penyelesaian integralnya, sama seperti *k-points*. Sehingga, dilakukannya *sampling* pada rentang angka tertentu. Dari plot yang dihasilkan diatas, dapat dinyatakan bahwa hasil perhitungan sudah konvergen dan dapat ditentukan nilai energi *cut-off* yang akan digunakan pada perhitungan selanjutnya. Berdasarkan hasil pertimbangan peneliti, nilai energi *cut-off* yang akan digunakan ialah 45.

Kemudian untuk jarak yang akan diberikan antara molekul gas etanol dengan LFCO diberikan variasi dari 1 – 2.75 Å dengan selang 0.25 Å. Dengan menggunakan nilai *k-points* dan nilai energi *cut-off* yang sudah ditentukan pada perhitungan sebelumnya, untuk hasil perhitungan ini menggunakan *Self-Consistent Field* yang akan menghasilkan total energi, dimana dari hasil tersebut dibuat plot grafik untuk setiap jarak molekul. Berikut merupakan hasil plot konvergensi variasi jarak antara

molekul gas etanol dan LaFeO<sub>3</sub> terhadap total energi.

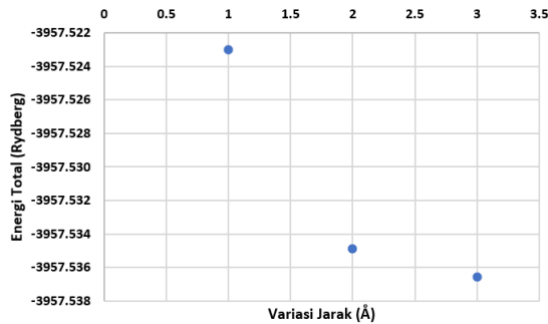


Gambar 9 Plot Variasi Jarak Molekul Etanol Terhadap Energi Total

Berdasarkan Plot di atas, dapat dinyatakan bahwa hasil perhitungan yang memberikan pengaruh signifikan pada LFCO ketika terpapar molekul gas etanol adalah ketika molekul gas berada pada jarak 1 Å. Pada plot ini terdapat titik yang berada di posisi hampir sama yaitu pada 1 Å dan 1.5 Å. Namun, yang dipilih peneliti adalah jarak terdekat dikarenakan apabila semakin dekat akan semakin terlihat perubahannya.

Hasil di atas merupakan jarak antara molekul gas etanol dengan LFCO, dimana jarak yang dipilih adalah jarak 1 Å. Kemudian jarak yang dicari lagi ialah jarak antara LFCO dengan rGO, dimana proses yang dilakukan sama seperti mencari jarak antara molekul gas etanol dengan LFCO sehingga didapatkan plot grafik seperti pada Gambar 10.





Gambar 10 Plot Variasi Jarak rGO Terhadap Energi Total

Perhitungan ini dilakukan untuk mendapatkan nilai yang dapat memberikan pengaruh yang signifikan ketika melakukan perhitungan energi adsorpsi LaFeO<sub>3</sub> yang dilapisi dengan rGO saat dipaparkan molekul gas etanol. Hal ini bertujuan untuk mempersingkat waktu perhitungan serta membuat penelitian ini efektif, berhubung satu perhitungan memakan waktu yang cukup lama. Berdasarkan *plot* konvergensi diatas, dapat diketahui bahwa energi total yang paling signifikan terhadap jarak adalah 1 Å.

### 3.3 Energi Adsorpsi Molekul Gas Etanol terhadap LFCO dan LFCO @ rGO

Untuk memperoleh energi adsorpsi dari molekul gas etanol, dapat dilakukan dengan menggunakan perhitungan atau kalkulasi vc-relax. Kalkulasi vc-relax akan menghasilkan energi total untuk setiap sistem yang selanjutnya akan di substitusikan ke dalam persamaan energi adsorpsi yang terdapat di persamaan 1.

Sehingga molekul gas etanol memiliki nilai energi adsorpsi dalam satuan Rydberg. Kemudian diperlukan konversi satuan Rydberg menjadi *electron volt* (eV), yaitu dengan mengalikan nilai energi adsorpsi dalam satuan Rydberg dengan 13.6057. Sehingga energi adsorpsi molekul gas etanol pada LFCO menjadi -2.38 eV. Kemudian untuk energi adsorpsi molekul gas etanol dengan LFCO @ rGO dengan menerapkan cara yang sama untuk mendapatkan nilai energi adsorpsi yaitu menjadi -2.93 eV.

Energi adsorpsi yang dihasilkan dari 2 data di atas semuanya bernilai negatif, dimana ini menunjukkan bahwa reaksi yang dihasilkan yaitu reaksi yang bersifat eksotermik yang berarti pelepasan energi akan terjadi Ketika proses adsorpsi sedang terjadi. Dalam hasil tersebut juga sesuai dengan penelitian-penelitian yang telah dilakukan sebelumnya dalam menganalisis material untuk sensor gas, seperti pada Tabel 1.

Tabel 1 Tabel Penelitian terhadap LaFeO<sub>3</sub> dengan gas lain

Material	Molekul gas	$E_{adsorpsi}$ (eV)	Referensi
LaFeO <sub>3</sub> doping Co (LFCO)	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	-2.38	Penelitian ini
LFCO @ rGO	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> O	-2.93	Penelitian ini

LaFeO <sub>3</sub>	H <sub>2</sub>	-2.27	[13]
LaFe <sub>0.75</sub> Nb <sub>0.25</sub> O <sub>3</sub> (LFNO)	H <sub>2</sub>	-2.37	[13]
ZnO	NO <sub>2</sub>	-2.02	[14]
ZnO @ rGO	NO <sub>2</sub>	-2.46	[14]

Dalam penelitian ini, rGO yang melapisi LFCO akan mengalami peningkatan energi adsorpsinya sehingga menunjukkan bahwa semakin kuatnya adsorpsi. Pada dasarnya, semakin negatif energi adsorpsi akan semakin kuat adsorpsinya [15]. Berdasarkan tabel 4.1 penambahan lapisan rGO mempengaruhi nilai energi adsorpsi setiap material. Dapat dilihat dalam penelitian material ZnO @rGO [14] terdapat peningkatan nilai energi adsorpsi ketika diberi lapisan rGO. Sehingga dapat diartikan bahwa penambahan lapisan rGO dapat meningkatkan adsorpsi material.

#### 4. Simpulan

Energi adsorpsi didapatkan dengan menggunakan kalkulasi vc-relax terhadap struktur adsorbat, adsorben dan sistem secara menyeluruh. Didapatkan energi total melalui kalkulasi vc-relax yang kemudian di substitusi kedalam persamaan 1. Sehingga, mendapatkan nilai energi adsorpsi molekul gas etanol dengan LFO doping Co sebesar -2.38 eV dan LFO doping Co @ rGO sebesar -2.93 eV. Nilai energi adsorpsi molekul

gas etanol dengan LFO doping Co @ rGO didapatkan sebesar -2.93 eV. Nilai tersebut setelah dimutlakan lebih besar dibandingkan dengan tanpa rGO sebesar 23,58 %. Peningkatan nilai energi adsorpsi tersebut menunjukkan peningkatan selektivitas material LFO doping Co @ rGO terhadap molekul gas etanol. Sehingga membuat LFO doping Co @ rGO menjadi potensial untuk diaplikasikan kedalam sensor gas etanol.

#### Ucapan Terima Kasih

Kami mengucapkan terimakasih atas support dana “Penelitian Pengembangan Kelompok Bidang Keilmuan” Universitas Pendidikan Indonesia dengan nomor kontrak 449/UN40.LP/PT.01.03/2023. Kami juga mengucapkan terimakasih atas penggunaan fasilitas *High Performance Computing* (HPC) yang tersedia di Badan Riset dan Inovasi Nasional (BRIN).

#### 5. Referensi

1. A. Yadav, R. Singh, P. S.-S. and actuators B. Chemical, dan U. 2016, “Fabrication of lanthanum ferrite based liquefied petroleum gas sensor,” *Elsevier*, 2016, Diakses: Okt 06, 2022. [Daring]. Tersedia pada: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925400516300673>.
2. W. Haron, A. Wisitorsaat, dan S.

- Wongnawa, “Nanostructured perovskite oxides – LaMO<sub>3</sub> (M=Al, Co, Fe) prepared by co-precipitation method and their ethanol-sensing characteristics,” *Ceram. Int.*, vol. 43, no. 6, hal. 5032–5040, Apr 2017, doi: 10.1016/J.CERAMINT.2017.01.013 .
3. . Cosandey, G. Skandan, A. S.- JOM-e, dan undefined 2000, “Materials and processing issues in nanostructured semiconductor gas sensors,” *tms.org*, Okt 2000, Diakses: Okt 06, 2022. [Daring]. Tersedia pada: <https://www.tms.org/pubs/journals/jom/0010/cosandey/cosandey-0010.html>.
  4. M. Johnsson, P. L. preprint cond-mat/0506606, dan undefined 2005, “Crystallography and chemistry of perovskites,” *arxiv.org*, 2005, Diakses: Okt 06, 2022. [Daring]. Tersedia pada: <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0506606>.
  5. E. Suhendi, Witra, L. Hasanah, dan D. G. Syarif, “Characteristics of a thick film ethanol gas sensor made of mechanically treated LaFeO<sub>3</sub> powder,” *AIP Conf. Proc.*, vol. 1848, no. 1, hal. 050008, Mei 2017, doi: 10.1063/1.4983964.
  6. H. T. Fan, X. J. Xu, X. K. Ma, dan T. Zhang, “Preparation of LaFeO<sub>3</sub> nanofibers by electrospinning for gas sensors with fast response and recovery,” *Nanotechnology*, vol. 22, no. 11, Mar 2011, doi: 10.1088/0957-4484/22/11/115502.
  7. V. Kumar, S. K. Srivastava, dan K. Jain, “Cobalt Doped SnO<sub>2</sub> Thick Film Gas Sensors: Conductance and Gas Response Characteristics for LPG and CNG Gas,” *Sensors Transducers J.*, vol. 101, hal. 60–72, 2009, Diakses: Okt 07, 2022. [Daring]. Tersedia pada: <http://www.sensorsportal.com>.
  8. Y. Luo dkk., “Role of cobalt in Co-ZnO nanoflower gas sensors for the detection of low concentration of VOCs,” *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 360, Jun 2022, doi: 10.1016/J.SNB.2022.131674.
  9. J. T. Robinson, F. K. Perkins, E. S. Snow, Z. Wei, dan P. E. Sheehan, “Reduced graphene oxide molecular sensors,” *Nano Lett.*, vol. 8, no. 10, hal. 3137–3140, Okt 2008, doi: 10.1021/NL8013007/ASSET/IMAGE/S/MEDIUM/NL-2008-013007\_0005.GIF.
  10. F. Schedin dkk., “Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene,” *Nat. Mater.*, vol. 6, no. 9, hal. 652–655, Sep 2007, doi: 10.1038/NMAT1967.

11. M. F. Fellah, "The reduced graphene oxide/WO<sub>3</sub>: Sensing properties for NO<sub>2</sub> gas detection at room temperature," *Diam. Relat. Mater.*, vol. 119, hal. 108593, Nov 2021, doi: 10.1016/J.DIAMOND.2021.108593.
12. D. Farmanzadeh dan S. Ghazanfary, "The effect of electric field on the interaction of glycine with (6,0) single-walled boron nitride nanotubes," *J. Serbian Chem. Soc.*, vol. 78, no. 1, hal. 75–83, 2013, doi: 10.2298/JSC120419046F.
13. Y. Zhou, Z. Lü, J. Li, S. Xu, D. Xu, dan B. Wei, "The electronic properties and structural stability of LaFeO<sub>3</sub> oxide by niobium doping: A density functional theory study," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 46, no. 13, hal. 9193–9198, Feb 2021, doi: 10.1016/J.IJHYDENE.2020.12.202.
14. R. Gao *dkk.*, "The controllable assembly of the heterojunction interface of the ZnO@rGO for enhancing the sensing performance of NO<sub>2</sub> at room temperature and sensing mechanism," *Sensors Actuators B Chem.*, vol. 342, hal. 130073, Sep 2021, doi: 10.1016/J.SNB.2021.130073.
15. D. Bahamon, M. Khalil, A. Belabbes, Y. Alwahedi, L. F. Vega, dan K. Polychronopoulou, "A DFT study of the adsorption energy and electronic interactions of the SO<sub>2</sub> molecule on a CoP hydrotreating catalyst," *RSC Adv.*, vol. 11, no. 5, hal. 2947–2957, Jan 2021, doi: 10.1039/C9RA10634K.