

STUDI DFT ADSORPSI ETILENA PADA BIOCHAR HASIL PIROLISIS DENGAN MODIFIKASI GUGUS FUNGSI DAN DOPING METAL

MUHAMMAD RAFI ADANTA



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

PERNYATAAN MENGENAI SKRIPSI DAN SUMBER INFORMASI SERTA PELIMPAHAN HAK CIPTA

Dengan ini saya menyatakan bahwa skripsi dengan judul “Studi DFT Adsorpsi Etilena pada Biochar Hasil Pirolisis dengan Modifikasi Gugus Fungsi dan Doping Metal” adalah karya saya dengan arahan dari dosen pembimbing dan belum diajukan dalam bentuk apa pun kepada perguruan tinggi mana pun. Sumber informasi yang berasal atau dikutip dari karya yang diterbitkan maupun tidak diterbitkan dari penulis lain telah disebutkan dalam teks dan dicantumkan dalam Daftar Pustaka di bagian akhir skripsi ini.

Dengan ini saya melimpahkan hak cipta dari karya tulis saya kepada Institut Pertanian Bogor.

Bogor, Juni 2026

Muhammad Rafi Adanta
G7401221097



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

ABSTRAK

MUHAMMAD RAFI ADANTA. Studi DFT Adsorpsi Etilena pada Biochar Hasil Pirolisis dengan Modifikasi Gugus Fungsi dan Doping Metal. Dibimbing oleh FAOZAN dan HENDRADI HARDHIENATA.

Etilena mempercepat pematangan dan pembusukan produk hortikultura, sehingga diperlukan adsorben efektif untuk mengendalikan konsentrasinya dan memperpanjang umur simpan. Penelitian ini mengevaluasi kemampuan adsorpsi etilena pada *pyrochar* yang dimodifikasi dengan gugus karbonil, karboksil, amina, serta doping logam Mn dan Cu menggunakan pendekatan Density Functional Theory (DFT). Hasil menunjukkan bahwa modifikasi gugus fungsi hanya meningkatkan adsorpsi secara terbatas dengan energi adsorpsi antara $-0,159$ hingga $-0,271$ eV, sedangkan doping logam memberikan peningkatan yang signifikan, yaitu $-1,726$ eV pada Mn dan $-1,313$ eV pada Cu. Analisis RDG dan QTAIM menunjukkan bahwa adsorpsi pada *pyrochar* murni dan termodifikasi gugus fungsi didominasi interaksi non-kovalen, sementara doping logam menghasilkan kontribusi kovalen parsial yang lebih kuat.

Kata kunci: adsorpsi etilena, density functional theory, pyrochar, QTAIM

ABSTRACT

MUHAMMAD RAFI ADANTA. DFT Study of Ethylene Adsorption on Pyrolysis-Derived Biochar with Functional Group Modification and Metal Doping. Supervised by FAOZAN and HENDRADI HARDHIENATA.

Ethylene accelerates the ripening and spoilage of horticultural products, making effective adsorbents essential for controlling its concentration and extending shelf life. This study evaluates the adsorption performance of ethylene on pyrochar modified with carbonyl, carboxyl, and amine functional groups, as well as Mn and Cu metal dopants, using the Density Functional Theory (DFT) approach. The results show that functional group modification provides only a limited improvement in adsorption, with adsorption energies ranging from -0.159 to -0.271 eV, whereas metal doping leads to a significant enhancement, reaching -1.726 eV for Mn and -1.313 eV for Cu. Reduced Density Gradient (RDG) and Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM) analyses reveal that adsorption on pristine and functionalized pyrochar is dominated by non-covalent interactions, while metal doping introduces stronger partially covalent interactions.

Keywords: Density Functional Theory, ethylene adsorption, pyrochar, Quantum Theory of Atoms in Molecules.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University



Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

© Hak Cipta milik IPB, tahun 20XX¹
Hak Cipta dilindungi Undang-Undang

Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan atau menyebutkan sumbernya. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik, atau tinjauan suatu masalah, dan pengutipan tersebut tidak merugikan kepentingan IPB.

Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apa pun tanpa izin IPB.

STUDI DFT ADSORPSI ETILENA PADA BIOCHAR HASIL PIROLISIS DENGAN MODIFIKASI GUGUS FUNGSI DAN DOPING METAL

MUHAMMAD RAFI ADANTA

Skripsi
sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar
Sarjana pada
Program Studi Fisika

**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2026**



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Tim Penguji pada Ujian Skripsi:

1. Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada Wijaya Puspita, S.Si., M.Si.
2. Dr. Heriyanto Syafutra, S.Si., M.Si.



@Hak cipta milik IPB University

IPB University

Judul Skripsi : Studi DFT Adsorpsi Etilena pada Biochar Hasil Pirolisis dengan
Modifikasi Gugus Fungsi dan Doping Metal

Nama : Muhammad Rafi Adanta

NIM : G7401221097

Disetujui oleh

Pembimbing 1:

Dr. Faozan, S.Si., M.Si.

NIP 197909232007011001

Pembimbing 2:

Dr. rer. nat Hendradi Hardhienata, S.Si., M.Si.

NIP. 197106041998021001

Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika:

Dr. Ir. Irmansyah, M.Si.

NIP. 196809161994031001



Tanggal Ujian:
30 Juli 2026

Tanggal Lulus:



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah subhanaahu wa ta'ala atas segala karunia-Nya sehingga karya ilmiah ini berhasil diselesaikan. Tema yang dipilih dalam penelitian yang dilaksanakan sejak bulan September 2025 sampai bulan Mei 2026 ini ialah Studi DFT Adsorpsi Gas, dengan judul “Studi DFT Adsorpsi Etilena pada Biochar Hasil Pirolisis dengan Modifikasi Gugus Fungsi dan Doping Metal”.

Terima kasih penulis ucapkan kepada para pembimbing, Dr. Faozan, S.Si., M.Si. dan Dr. rer. nat Hendradi Hardhienata, S.Si., M.Si. yang telah membimbing dan banyak memberi saran. Ucapan terima kasih juga disampaikan kepada pembimbing akademik, moderator seminar, dan penguji luar komisi pembimbing.

Terima kasih yang tak terhingga penulis sampaikan kepada Ayah dan Ibu. Terima kasih atas doa yang tidak pernah putus, atas setiap kesempatan yang diberikan, dan atas keyakinan bahwa penulis selalu mampu melangkah lebih jauh dari yang dibayangkan.

Penulis juga mengucapkan terima kasih kepada diri sendiri karena tidak pernah berhenti bertanya, sekalipun semakin banyak belajar sering kali berarti semakin menyadari betapa banyak hal yang belum dipahami. *“The opposite of a profound truth may well be another profound truth.”* – Niels Bohr.

Semoga karya ilmiah ini bermanfaat bagi pihak yang membutuhkan dan bagi kemajuan ilmu pengetahuan.

Bogor, Juni 2026

Muhammad Rafi Adanta



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



DAFTAR ISI

ABSTRAK	iii
ABSTRACT	iii
DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xii
DAFTAR LAMPIRAN	xiii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Rumusan Masalah	2
1.3 Tujuan	2
1.4 Manfaat	2
1.5 Ruang Lingkup	2
1.6 Hipotesis	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Etilena	4
2.2 <i>Pyrochar</i>	4
2.3 Modifikasi Biochar	6
2.4 <i>Density Functional Theory</i>	7
2.5 Energi Adsorpsi	11
2.6 Quantum Theory of Atoms in Molecules (QTAIM)	11
III METODE	13
3.1 Waktu dan Tempat	13
3.2 Alat dan Bahan	13
3.3 Prosedur Kerja	13
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	20
4.1 Karakteristik Permukaan <i>Pyrochar</i>	20
4.2 Adsorpsi Etilena pada Permukaan <i>Pyrochar</i>	25
4.3 Analisis Struktur Elektronik	27
4.4 Karakterisasi Interaksi Adsorpsi	33
4.5 Mekanisme Adsorpsi Etilena	38
V SIMPULAN DAN SARAN	39
5.1 Simpulan	39
5.2 Saran	39
DAFTAR PUSTAKA	40
LAMPIRAN	43
RIWAYAT HIDUP	61



DAFTAR TABEL

1	Karakteristik polaritas biochar berdasarkan suhu pirolisis dan jenis biomassa	5
2	Studi adsorpsi gas pada material karbon termodifikasi	7
3	Interpretasi parameter analisis QTAIM (Kumar <i>et al.</i> 2021)	18
4	Nilai ESP situs uji <i>pyrochar</i>	22
5	Situs maksimum representatif pada permukaan termodifikasi	23
6	Situs maksimum representatif pada model terdoping logam	24
7	Ringkasan parameter adsorpsi etilena pada seluruh model <i>pyrochar</i>	25
8	Ringkasan parameter adsorpsi etilena pada seluruh model <i>pyrochar</i>	28
9	Data QTAIM	37

DAFTAR GAMBAR

1	Model etilena	4
2	Model <i>pyrochar</i> (Masrura <i>et al.</i> 2023)	5
3	Interpretasi scatter plot RDG terhadap $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ untuk identifikasi jenis interaksi (Maleki <i>et al.</i> 2025)	16
4	Skala warna NCI berdasarkan nilai $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ (Kumar <i>et al.</i> 2021)	17
5	Geometri teroptimasi permukaan <i>pyrochar</i> (a) murni, (b) termodifikasi gugus fungsi, terdoping Mn, dan (d) terdoping Cu	20
6	Distribusi situs potensial elektrostatik (a) positif, (b) negatif, dan (c) gabungan dengan isosurface permukaan <i>pyrochar</i> murni	22
7	Distribusi situs potensial elektrostatik (a) positif dan (b) gabungan dengan isosurface permukaan <i>pyrochar</i> termodifikasi	23
8	Distribusi situs potensial elektrostatik positif dan gabungan dengan isosurface permukaan <i>pyrochar</i> (a) terdoping Mn dan (b) terdoping Cu	24
9	Distribusi orbital molekul HOMO-LUMO pada <i>pyrochar</i> -Cu dengan etilena	27
10	Grafik PDOS <i>pyrochar</i> -3 sebelum dan setelah interaksi	29
11	Grafik PDOS <i>pyrochar</i> termodifikasi (a) sebelum dan sesudah interaksi menjadi (b) <i>pyrochar</i> -COOH, (c) <i>pyrochar</i> -NH ₂ , dan (d) <i>pyrochar</i> -CO	31
12	Grafik PDOS <i>pyrochar</i> -Mn sebelum dan sesudah adsorpsi	32
13	Grafik PDOS <i>pyrochar</i> -Cu sebelum dan sesudah adsorpsi	32
14	Scatter plot RDG terhadap $\text{sign}(\lambda_2)\rho$ pada seluruh adsorpsi etilena model <i>pyrochar</i> -3, (b) <i>pyrochar</i> -COOH, (c) <i>pyrochar</i> -CO, (d) <i>pyrochar</i> -NH ₂ , (e) <i>pyrochar</i> -Mn, dan (f) <i>pyrochar</i> -Cu	34
15	Visualisasi NCI interaksi etilena terhadap (a) <i>pyrochar</i> -3, (b) <i>pyrochar</i> -COOH, (c) <i>pyrochar</i> -NH ₂ , dan (d) <i>pyrochar</i> -CO	35
16	Visualisasi NCI interaksi etilena terhadap (a) <i>pyrochar</i> -Mn dan (b) <i>pyrochar</i> -Cu	36



DAFTAR LAMPIRAN

1	Perhitungan energi adsorpsi	44
2	Perhitungan transfer muatan <i>pyrochar-3</i>	45
3	Perhitungan transfer muatan <i>pyrochar-COOH</i>	46
4	Perhitungan transfer muatan <i>pyrochar-Mn</i>	47
5	Tabel BCP QTAIM	48
6	NCI <i>pyrochar-14</i> dan <i>pyrochar-1</i>	49
7	Jarak C=C etilena	50
8	Grafik DOS etilena	51
9	Parameter perhitungan ORCA DFT	52
10	Nilai ESP permukaan <i>pyrochar</i>	53
11	Nilai ESP permukaan <i>pyrochar</i> termodifikasi	55
12	Nilai ESP permukaan <i>pyrochar-Mn</i> dan <i>pyrochar-Cu</i>	57



@Hak cipta milik IPB University

Hak Cipta Dilindungi Undang-undang

1. Dilarang mengutip sebagian atau seluruh karya tulis ini tanpa mencantumkan dan menyebutkan sumber :
 - a. Pengutipan hanya untuk kepentingan pendidikan, penelitian, penulisan karya ilmiah, penyusunan laporan, penulisan kritik atau tinjauan suatu masalah
 - b. Pengutipan tidak merugikan kepentingan yang wajar IPB University.
2. Dilarang mengumumkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.