

INVESTIGASI DFT FILM TIPIS SnO_2 DOPING INDIUM DAN ANTIMONI UNTUK DETEKSI ASETON SEBAGAI PENANDA DIABETES MELLITUS

AKTA HOMA PERTIWI



**DEPARTEMEN FISIKA
FAKULTAS MATEMATIKA DAN ILMU PENGETAHUAN ALAM
INSTITUT PERTANIAN BOGOR
BOGOR
2025**

- 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 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 "Investigasi DFT Film Tipis SnO₂ Doping Indium dan Antimoni untuk Deteksi Aseton sebagai Penanda Diabetes Mellitus" 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 2025

Akta Homa Pertiwi
G7401211015

- 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 menggunakan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.



@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

AKTA HOMA PERTIWI. Investigasi DFT Film Tipis SnO_2 Doping Indium dan Antimoni untuk Deteksi Aseton sebagai Penanda Diabetes Mellitus. Dibimbing oleh FAOZAN AHMAD dan ABD. DJAMIL HUSIN.

Diabetes umumnya didiagnosis melalui metode *invasive* yang berisiko menimbulkan rasa sakit serta infeksi. Sebagai alternatif, dikembangkan metode *non-invasive* dengan mendeteksi gas aseton (*volatile organic compound/VOC*) dalam napas sebagai biomarker penanda kadar glukosa darah yang dapat dideteksi dengan sensor gas berbasis material SnO_2 . Dalam penelitian ini, SnO_2 didoping dengan unsur indium dan antimoni untuk melihat pengaruhnya sebagai material sensor gas deteksi aseton. Metode DFT dan TDDFT digunakan untuk melihat perubahan sifat elektronik dan optik sistem setelah doping dan adsorpsi molekul aseton. Hasil perhitungan menunjukkan bahwa doping indium pada SnO_2 meningkatkan energi adsorpsi, transfer muatan, dan menggeser puncak orbital ke energi lebih rendah, yang menunjukkan interaksi secara kimia yang stabil. Sebaliknya doping antimoni menurunkan nilai energi adsorpsi, transfer muatan, dan hanya menghasilkan interaksi yang bersifat fisis. Ketiga sistem mengalami perubahan pada nilai *real* fungsi dielektrik setelah adsorpsi aseton, sementara perubahan nilai imajiner hanya terlihat pada energi di atas 5 eV (UV-B).

Kata kunci: Antimoni, Aseton, DFT, Indium, SnO_2 .

ABSTRACT

AKTA HOMA PERTIWI. DFT Investigation of Indium and Antimony-Doped SnO_2 Thin Films for Acetone Detection as a Biomarker of Diabetes Mellitus. Supervised by FAOZAN AHMAD and ABD. DJAMIL HUSIN.

Diabetes is generally diagnosed through invasive methods that risk causing pain and infection. As an alternative, a non-invasive method was developed by detecting acetone gas (*volatile organic compound/VOC*) in the breath as a biomarker of blood glucose levels that can be detected with a gas sensor based on SnO_2 material. In this study, SnO_2 was doped with indium and antimony elements to see its effect as a gas sensor material for acetone detection. DFT and TDDFT methods are used to see changes in the electronic and optical properties of the system after doping and adsorption of acetone molecules. The results show that indium doping of SnO_2 increases the adsorption energy, charge transfer, and shifts the orbital peaks to lower energies, indicating chemically stable interactions. In contrast, antimony doping decreases the value of adsorption energy, charge transfer, and only produces interactions that are physical. All three systems experience changes in the real value of the dielectric function after acetone adsorption, while changes in the imaginary value are only seen at energies above 5 eV (UV-B).

Keywords: Antimony, Acetone, DFT, Indium, SnO_2 .

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 2025
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.

INVESTIGASI DFT FILM TIPIS SnO_2 DOPING INDIUM DAN ANTIMONI UNTUK DETEKSI ASETON SEBAGAI PENANDA DIABETES MELLITUS

AKTA HOMA PERTIWI

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
2025**



@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 mengumunkan dan memperbanyak sebagian atau seluruh karya tulis ini dalam bentuk apapun tanpa izin IPB University.

Judul Skripsi : Investigasi DFT Film Tipis SnO₂ Doping Indium dan Antimoni untuk Deteksi Aseton sebagai Penanda Diabetes Mellitus

Nama : Akta Homa Pertiwi

NIM : G7401211015

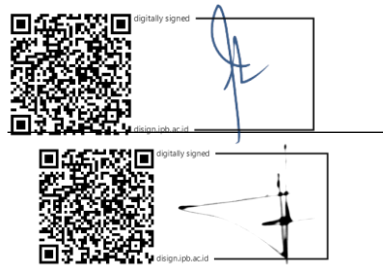
Disetujui oleh

Pembimbing 1:

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

Pembimbing 2:

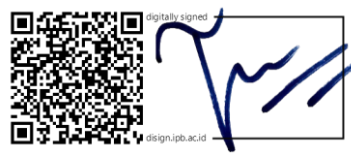
Abd. Djamil Husin, S.Si., M.Si.



Diketahui oleh

Ketua Departemen Fisika

Prof. Dr. R. Tony Ibnu Sumaryada, S.Si.,
M.Si. NIP. 197205191997021001



Tanggal Ujian: 4 Juli 2025

Tanggal Lulus:



PRAKATA

Puji dan syukur penulis panjatkan kepada Allah *subhanaahu wa ta'ala* atas segala karunia-Nya sehingga skripsi dengan judul “Investigasi DFT Film Tipis SnO₂ Doping Indium dan Antimoni untuk Deteksi Aseton sebagai Penanda Diabetes Mellitus” berhasil diselesaikan. Skripsi ini diajukan sebagai salah satu syarat untuk memperoleh gelar sarjana di Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Institut Pertanian Bogor.

Terima kasih penulis ucapkan kepada berbagai pihak yang banyak terlibat, mendukung, mendoakan, menasehati, membimbing, dan memotivasi sehingga skripsi ini dapat diselesaikan. Oleh karena itu, penulis ingin menyampaikan terimakasih kepada:

1. Keluarga penulis yang tercinta, Bapak Mizon Sinambela dan Ibu Nafsiah Nafsiah selaku orang tua, Jenuinfri Expriana.AN, Aman Sebong Biadedo, Isra Ila Iman selaku saudara penulis, yang selalu mendukung baik secara mental maupun materi, memberikan arahan, doa, dan kasih sayang kepada penulis.
2. Bapak Dr. Faozan, S.Si., M.Si. selaku dosen pembimbing pertama dan Bapak Abd. Djamil Husin, S.Si., M.Si. selaku dosen pembimbing kedua yang selalu membimbing, mendampingi, memotivasi, memberi saran serta arahan kepada penulis selama penulisan skripsi ini.
3. Ibu Dr. Sitti Yani, S.Si., M.Si. selaku penguji pertama dan Bapak Dr. Erus Rustami, S.Si., M.Si. selaku penguji kedua yang telah memberikan saran, kritik, dan arahan dalam penulisan skripsi penulis.
4. Seluruh dosen, staff, serta teknisi Departemen Fisika IPB yang telah memberikan ilmu, pengalaman yang bermanfaat, dan motivasi bagi penulis.
5. *The last one big appreciation for* diriku sendiri yang sudah sangat kuat dan berhasil sampai ditahap ini.

Dalam penyusunan skripsi ini, penulis mengalami banyak kesulitan dan penulis menyadari dalam penulisan skripsi ini masih jauh dari kesempurnaan. Oleh karena itu, penulis sangat mengharapkan kritik dan saran yang membangun untuk karya yang lebih baik. Semoga skripsi ini dapat memberikan manfaat bagi penulis khususnya dan pembaca umumnya, Aamiin.

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

Bogor, Juni 2025

Akta Homa Pertiwi

DAFTAR ISI

DAFTAR TABEL	xii
DAFTAR GAMBAR	xii
I PENDAHULUAN	1
1.1 Latar Belakang	1
1.2 Perumusan Masalah	2
1.3 Tujuan Penelitian	2
1.4 Manfaat Penelitian	3
1.5 Ruang Lingkup Penelitian	3
II TINJAUAN PUSTAKA	4
2.1 Sensor Gas Semikonduktor	4
2.2 Aseton	5
2.3 Material SnO ₂	5
2.4 Indium	6
2.5 Antimoni	6
2.7 TD-DFT	9
III METODE PENELITIAN	10
3.1 Waktu dan Tempat Penelitian	10
3.2 Alat dan Bahan Penelitian	10
3.3 Prosedur Penelitian	10
IV HASIL DAN PEMBAHASAN	13
4.1 Optimasi Geometri Struktur	13
4.2 Adsorpsi Aseton dan Transfer Muatan pada Permukaan Sistem	14
4.3 Sifat Elektronik Sistem	17
4.4 Sifat Optik Sistem	22
V SIMPULAN DAN SARAN	26
DAFTAR PUSTAKA	27

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 TABEL

1.	Perhitungan energi total struktur SnO ₂ murni, SnO ₂ terdoping indium dan SnO ₂ terdoping antimoni	14
2.	Hasil perhitungan untuk konfigurasi adsorpsi dan transfer muatan molekul adsorbat	15
3.	Nilai energi fermi sebelum dan sesudah adsorpsi aseton	18

DAFTAR GAMBAR

1.	Model struktur senyawa aseton	5
2.	Model struktur senyawa SnO ₂	6
3.	Model 3D struktur kristal senyawa SnO ₂	6
4.	Algoritma kalkulasi sifat elektronik	12
5.	Algoritma kalkulasi sifat optik	12
6.	Sistem SnO ₂ terisolasi dalam ruang vakum (a) sistem SnO ₂ dengan molekul aseton; (b) sistem SnO ₂ tanpa aseton	13
7.	Posisi molekul aseton pada sistem (a) sistem SnO ₂ murni tanpa doping; (b) sistem SnO ₂ doping indium; (c) sistem SnO ₂ doping antimoni	16
8.	Kurva Projected Density of State (PDOS) (a) sistem SnO ₂ murni tanpa doping; (b) sistem SnO ₂ doping indium; (c) sistem SnO ₂ doping antimoni	18
9.	Kurva Density of State (PDOS) (a) molekul bebas aseton; (b) aseton teradsorpsi pada SnO ₂ murni; (c) aseton teradsorpsi pada SnO ₂ doping indium; (d) aseton teradsorpsi pada SnO ₂ doping antimoni	20
10.	Kurva Projected Density of State (PDOS) setelah adsorpsi aseton (a) sistem SnO ₂ murni tanpa doping; (b) sistem SnO ₂ doping indium; (c) sistem SnO ₂ doping antimoni	22
11.	Grafik fungsi dielektrik (a) nilai real fungsi dielektrik; (b) nilai imajiner fungsi dielektrik	23