

PERBANDINGAN PENDEKATAN FUNGSI GAUSS DAN FUNGSI LORENTZ PADA DEKOMPOSISI POLA XRD OKSIDA GRAFENA DAN OKSIDA GRAFENA TEREDUKSI

VINNY RAMADIANITA NUR SAFIRA¹, MUHAMMAD BAYU PERKASA¹, FITRILAWATI², NORMAN SYAKIR^{2*},

¹Program Studi Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Padjadjaran, Jl. Raya Bandung-Sumedang Km 21, Jatinangor 45363, Sumedang, Jawa Barat, Telp. 022-7796014

²Departemen Fisika, Fakultas Matematika dan Ilmu Pengetahuan Alam, Universitas Padjadjaran, Jl. Raya Bandung-Sumedang Km 21, Jatinangor 45363, Sumedang, Jawa Barat, Telp. 022-7796014

Abstrak. Dekomposisi terhadap data *X-ray Diffraction* (XRD) menjadi penting untuk dilakukan ketika pola difraktogram yang dihasilkan pada suatu bahan memiliki karakteristik yang melebar atau tidak simetris. Dibandingkan dengan identifikasi pola XRD yang standar, identifikasi melalui dekomposisi data XRD dapat memberikan informasi yang lebih tepat. Ada beberapa parameter yang dapat diperoleh melalui dekomposisi pola XRD antara lain: posisi puncak, nilai *full width at half maximum* (FWHM), dan nilai intensitas dari tiap puncak. Dalam penelitian ini dilakukan dekomposisi data XRD bahan *graphene oxide* (GO) dan *reduced graphene oxide* (rGO) dengan menggunakan dua pendekatan fungsi, yakni fungsi Gauss dan fungsi Lorentz. Dekomposisi menggunakan *scientific graphic software* menunjukkan data XRD GO menghasilkan nilai *R-square* yang lebih tinggi ketika digunakan pendekatan fungsi Lorentz, sedangkan data XRD rGO menghasilkan nilai *R-square* yang lebih tinggi ketika digunakan pendekatan fungsi Gauss. Dekomposisi data XRD GO menghasilkan sebuah puncak dengan nilai $2\theta=10,781^\circ$ yang bersesuaian dengan jarak antar lapisan $d=8,2 \text{ \AA}$. Dekomposisi data XRD rGO menghasilkan empat puncak yang diindikasikan sebagai satu fase GO dan tiga fase rGO yang berbeda-beda. Masing-masing puncak 2θ pada hasil dekomposisi data rGO tersebut berkaitan dengan jarak antar lapisan tiap fase secara berurutan adalah $7,34 \text{ \AA}$; $4,30 \text{ \AA}$; $3,67 \text{ \AA}$; dan $3,38 \text{ \AA}$.

Kata kunci: pola XRD, dekomposisi, fungsi Gauss, fungsi Lorentz, oksida grafena

Abstract. Decomposition of *X-ray Diffraction* (XRD) data is important when the obtained diffractogram pattern in a material has dilated or asymmetrical characteristics. In comparison to the standard XRD pattern identification, identification through XRD data decomposition can provide more precise information. There are several parameters that can be extracted through the decomposition of the XRD pattern, such as a peak position, a full width at half maximum (FWHM) value, and an intensity of each peak. In this study, decompositions of XRD data of *graphene oxide* (GO) and *reduced graphene oxide* (rGO) materials were carried out by approaching two functions, namely the Gauss function and the Lorentz function. By using *scientific graphic software*, it is found that decomposition of GO XRD data produces a higher *R-square* value when the Lorentz function approach is used, while rGO XRD data produces a higher *R-square* value when the Gauss function approach is used. Decomposition of GO XRD data results in a peak with a value of $2\theta=10.781^\circ$ that corresponding to a distance between layers $d=8.2 \text{ \AA}$. Decomposition of rGO XRD data results in four peaks that indicated as one GO phase and three different rGO phases. Each 2θ peak in the rGO data decomposition results corresponds to the distance between layers of each phase sequentially as $7.34 \text{ \AA}$; $4.30 \text{ \AA}$; $3.67 \text{ \AA}$; and $3.38 \text{ \AA}$.

Keywords: XRD pattern, decomposition, Gauss function, Lorentz function, graphene oxide

1. Pendahuluan

Karakterisasi menggunakan *X-Ray Diffraction* (XRD) menghasilkan pola difraksi atau yang disebut dengan difraktogram. Setiap material memiliki pola difraktogram yang berbeda-beda, sehingga pola difraktogram sering disebut sebagai “sidik jari” dari suatu material. Difraktogram merupakan suatu grafik dua dimensi berupa susunan garis atau puncak yang memberikan informasi berupa nilai

* Email: n.sjakir@phys.unpad.ac.id

intensitas pada sumbu vertikal dan nilai sudut difraksi (2θ) pada sumbu horizontal. Setiap bahan memiliki nilai intensitas dan sudut difraksi yang berbeda-beda dan spesifik untuk setiap material [1].

Ketika melakukan analisis karakteristik XRD, biasanya dilakukan pencocokan setiap puncak difraktogram yang terbentuk pada sudut 2θ dengan data standar difraksi yang dikeluarkan oleh *International Centre for Diffraction Data* (ICDD). Dari analisis tersebut, dapat diperoleh informasi lebih lanjut mengenai kecocokan sampel dengan suatu material standar. Pada data XRD dengan puncak yang tajam atau yang membentuk garis lurus, posisi sudut 2θ dan nilai intensitas dapat langsung ditentukan. Intensitas dapat ditentukan dari luas daerah di bawah puncak XRD yang memiliki nilai yang sama atau hampir sama dengan tinggi puncak. Namun, dapat muncul permasalahan ketika pola difraktogram memiliki bentuk dengan puncak yang melebar atau tidak simetris karena luasan daerah di bawah puncak XRD harus dihitung. Puncak pola XRD yang lebar diindikasikan sebagai superposisi dari beberapa puncak, sehingga penentuan puncak tunggal dari puncak difraksi yang lebar tidaklah tepat. Oleh karena itu diperlukan metode tertentu untuk mengolah hasil karakterisasi XRD yang memiliki pola lebar agar mendapatkan hasil analisis yang lebih tepat.

Salah satu metode yang dapat digunakan untuk melakukan analisis karakteristik XRD adalah dengan melakukan dekomposisi data XRD. Dalam proses dekomposisi tersebut dapat digunakan pendekatan fungsi Lorentz atau pendekatan fungsi Gauss. Dekomposisi data tersebut digunakan untuk memisahkan kontribusi dari masing-masing puncak yang saling tumpang tindih. Tiap puncak memiliki fase dengan karakteristik kristalografi yang berbeda terkait dengan pola XRD yang kompleks. Dengan menggunakan teknik dekomposisi, informasi mengenai puncak tersembunyi (*hidden peak*) dapat diekstrak [2]. Dekomposisi dapat diartikan sebagai penguraian sebuah puncak yang merupakan hasil superposisi dua gelombang atau lebih yang saling berdekatan. Kurva hasil superposisi tersebut pada umumnya memiliki puncak yang melebar dan tidak simetris. Dekomposisi terhadap data XRD dengan puncak yang melebar dan tidak simetris sangat bermanfaat, karena dapat memberikan informasi yang lebih tepat dibandingkan cara identifikasi pola XRD standar. Informasi yang dapat diperoleh melalui dekomposisi pola XRD adalah posisi puncak, nilai *full width at half maximum* (FWHM), dan nilai intensitas dari tiap puncak. Pada studi ini dilakukan dekomposisi pola XRD bahan *graphene oxide* (GO) dan *reduced graphene oxide* (rGO) yang memiliki puncak difraksi yang melebar dan tidak simetris. Dalam proses dekomposisi tersebut dibandingkan pendekatan fungsi Lorentz dan pendekatan fungsi Gauss, hasil yang lebih tepat adalah hasil *fitting* yang memiliki koefisien regresi yang paling besar

2. Eksperimen

Untuk mengekstrak informasi dari puncak XRD yang diindikasikan sebagai hasil superposisi dari beberapa puncak, digunakan metode *peak fitting* dengan bantuan perangkat lunak seperti *scientific graphic software*. Pada proses *peak fitting* dipilih beberapa titik yang diindikasikan sebagai puncak dari kurva, lalu disesuaikan dengan fungsi puncaknya. Pada metode *peak fitting*, fungsi yang dapat digunakan adalah fungsi Gauss dan fungsi Lorentz yang secara matematis berturut-turut dituliskan sebagai persamaan (1) dan persamaan (2) [2, 3].

$$y = y_0 + \frac{A}{w \sqrt{\frac{\pi}{2}}} e^{-2 \frac{(x-x_c)^2}{w^2}} \quad \dots \dots \dots (1)$$

$$y = y_0 + \frac{2A}{\pi} \frac{w}{4(x - x_c)^2 + w^2} \quad \dots \dots \dots (2)$$

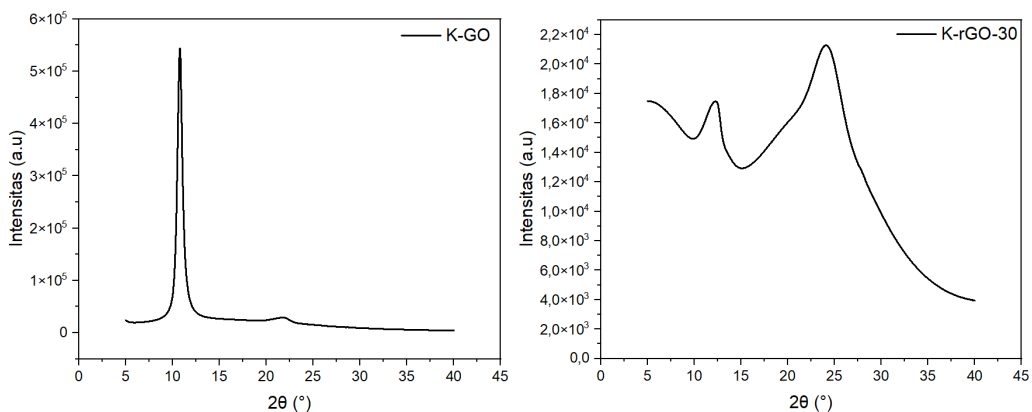
Pada persamaan tersebut, y adalah intensitas dari titik data, y_0 adalah intensitas awal dari titik data, A adalah luas dari setiap puncak dengan satuan *arbitrary unit* (a.u.), w adalah lebar dari setengah tinggi tiap puncak (FWHM) dengan satuan derajat ($^\circ$), x adalah nilai 2θ dari titik data, dan x_c adalah letak dari puncak yang terbentuk dan merupakan nilai dari 2θ yang memiliki satuan derajat ($^\circ$).

Jika hukum Bragg diterapkan terhadap nilai 2θ yang merupakan sudut difraksi, maka dapat diperoleh nilai jarak antar lapisan. Persamaan dari Hukum Bragg dituliskan pada persamaan (3) dengan nilai n adalah orde refleksi yang dapat berupa bilangan bulat apa saja (1, 2, 3, ...) yang konsisten dengan $\sin \theta$ tidak melebihi satu, λ adalah panjang gelombang sinar-X, d adalah jarak antar lapisan, dan θ adalah sudut antara bidang dengan sinar datang.

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad \dots \dots \dots (3)$$

2.1 Data XRD

Data XRD yang akan didekomposisi dalam penelitian ini adalah data XRD GO komersial produksi Graphenea dan data XRD rGO yang diperoleh melalui reduksi termal GO selama 30 menit pada suhu 250°C . Pengukuran XRD menggunakan *SmartLab X-Ray Diffractometer* dengan rentang sudut 2θ dari 5° hingga 40° (*step size* sebesar $0,01^\circ$) dan lambda sinar-X $1,5406 \text{ \AA}$. Data-data XRD tersebut diperlihatkan pada Gambar 1.



Gambar 1 (a) Data XRD GO komersial produksi Graphenea dan (b) data XRD rGO yang diperoleh melalui reduksi termal GO (Graphenea) selama 30 menit pada suhu 250°C

2.2 Dekomposisi Kurva Data XRD

Dekomposisi data XRD GO dan rGO yang menggunakan *scientific graphic software* tersebut dilakukan melalui beberapa tahapan. Tahapan dekomposisi data XRD adalah *import* (memasukkan) data, pembuatan grafik, pembuatan *baseline* kurva, proses *peak fitting* kurva data XRD, dan proses dekomposisi. Sebelum proses dekomposisi dilakukan, data XRD tersebut terlebih dahulu dibuat menjadi grafik, lalu dilakukan pembentukan *baseline* untuk meratakan nilai paling rendah dari setiap puncak. Selanjutnya, kurva data XRD hasil koreksi *baseline* diidentifikasi puncak-puncaknya untuk

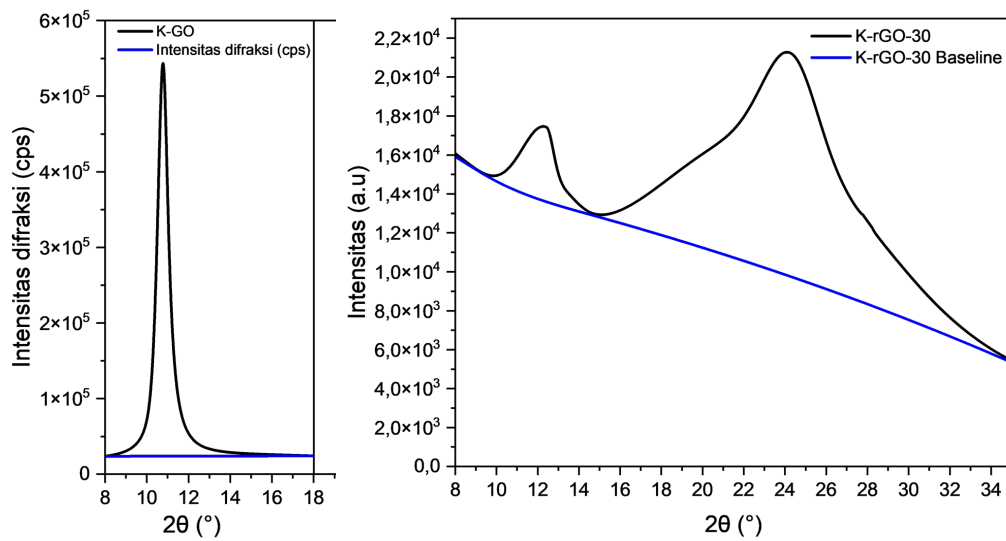
kebutuhan dekomposisi. Identifikasi puncak tersebut dapat dilakukan dengan cara melihat kesimetrisan maupun lebar dari puncak yang terbentuk.

Proses dekomposisi kurva data XRD diawali dengan pemilihan titik yang dimungkinkan sebagai letak dari puncak-puncak tunggal dan penggunaan fungsi menggunakan *scientific graphic software*. Jumlah puncak yang dipilih disesuaikan dengan kurva data XRD yang didekomposisi dan dilakukan dengan metode “*trial and error*” dengan patokan memperoleh nilai *R-square* yang terbaik atau *error* yang terkecil. Pada penelitian ini digunakan dua jenis fungsi, yakni fungsi Gauss dan fungsi Lorentz yang memiliki karakteristik yang berbeda. Fungsi Gauss lebih tepat untuk digunakan pada kurva data yang memiliki puncak lebih melebar, sedangkan fungsi Lorentz lebih tepat untuk digunakan pada kurva data yang memiliki puncak tinggi dan tajam. Dalam penelitian ini, kedua fungsi tersebut digunakan pada dekomposisi kurva data XRD GO yang secara visual memiliki puncak yang tajam dan tinggi, dan pada kurva data XRD rGO yang secara visual memiliki puncak yang melebar. Dekomposisi kurva XRD menggunakan fungsi Gauss dan fungsi Lorentz dilakukan secara terpisah melalui tahapan yang sama. Jumlah puncak-puncak tunggal yang dipilih pada saat *fitting*, dilakukan mulai dari kemungkinan yang paling kecil.

Pada kurva data XRD GO yang memiliki puncak yang tajam dan tinggi, hanya dipilih satu puncak sehingga tidak dilakukan dekomposisi, melainkan hanya *fitting*. Pada kurva data XRD rGO yang memiliki puncak yang melebar, dilakukan metode “*trial and error*” dalam pemilihan puncak agar diperoleh nilai *R-square* yang tinggi dengan intensitas puncak-puncak tunggal yang setara. Setelah pemilihan puncak dilakukan, langkah selanjutnya dengan penyesuaian nilai parameter yang digunakan. Jika data XRD yang digunakan tidak memiliki *noise*, maka nilai dari variabel y_0 dibuat bernilai 0 untuk menghasilkan puncak hasil dekomposisi yang dimulai dari titik 0. Namun, y_0 tidak diatur menjadi 0 ketika data XRD yang digunakan masih memiliki *noise*. Hal tersebut dilakukan untuk membuat program mengambil nilai rata-rata dari data.

3. Hasil dan Diskusi

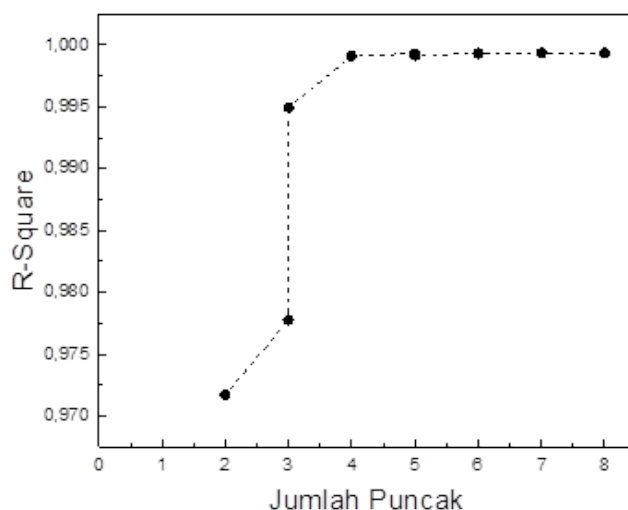
Pembentukan *baseline* untuk data XRD GO dilakukan pada rentang 2θ sebesar $8^\circ - 18^\circ$ dan untuk data rGO pada rentang 2θ sebesar $8^\circ - 35^\circ$, seperti yang terlihat pada Error! Reference source not found.(a) dan Error! Reference source not found.(b). Pembuatan *baseline* tersebut dilakukan dengan cara menghubungkan setiap kaki puncak, supaya kemiringan dari pola difraktogram dapat hilang dan setiap puncak memiliki nilai terendah yang setara. Melalui grafik yang terlihat pada Error! Reference source not found.(a), dapat terlihat bahwa difraktogram GO hanya terdiri dari satu puncak saja. Meskipun puncak yang terbentuk pada difraktogram tersebut memiliki karakteristik yang cukup runcing, namun proses *fitting* dapat tetap dilakukan untuk mengetahui nilai 2θ dan nilai intensitas yang dimiliki oleh puncak. Sedangkan pada difraktogram rGO (Error! Reference source not found.(b)) terdapat dua puncak yang salah satunya (puncak kedua) memiliki sifat melebar, sehingga dapat diindikasikan bahwa puncak tersebut merupakan hasil superposisi dari beberapa puncak.



Gambar 2. Penentuan baseline pada data XRD GO (a) dan rGO (b)

Ketika dilakukan proses dekomposisi terhadap data XRD, jumlah puncak yang dipilih dari proses *fitting* disesuaikan dengan jumlah puncak yang teridentifikasi sebagai puncak-puncak tunggal. Pada data XRD GO hanya dipilih satu puncak, karena difraktogram GO dianggap hanya memiliki sebuah puncak dan bukan merupakan hasil superposisi. Pada difraktogram rGO, pada proses dekomposisi dilakukan pemilihan jumlah puncak dengan metode “*trial and error*” dengan patokan memilih jumlah puncak menghasilkan nilai *R-square* (R^2) yang tertinggi. Jumlah puncak tersebut berkaitan dengan jumlah fungsi yang dipergunakan pada dekomposisi kurva data XRD. Pada Error! Reference source not found. diperlihatkan nilai *R-square* sebagai fungsi jumlah puncak dekomposisi. Tampak bahwa ketika jumlah puncak yang diperhitungkan dalam dekomposisi hanya dua, nilai *R-square* yang dihasilkan sekitar 0,97. Ketika jumlah puncak yang diperhitungkan pada dekomposisi ditambah, maka *R-square* nilai meningkat. Namun ketika jumlah puncak diperbesar lebih dari empat buah, seperti yang diperlihatkan pada Error! Reference source not found., tidak ada perubahan nilai *R-square* yang signifikan. Dengan demikian untuk pemilihan jumlah puncak pada proses dekomposisi kurva data XRD rGO dipergunakan jumlah puncak sebanyak 4 buah.

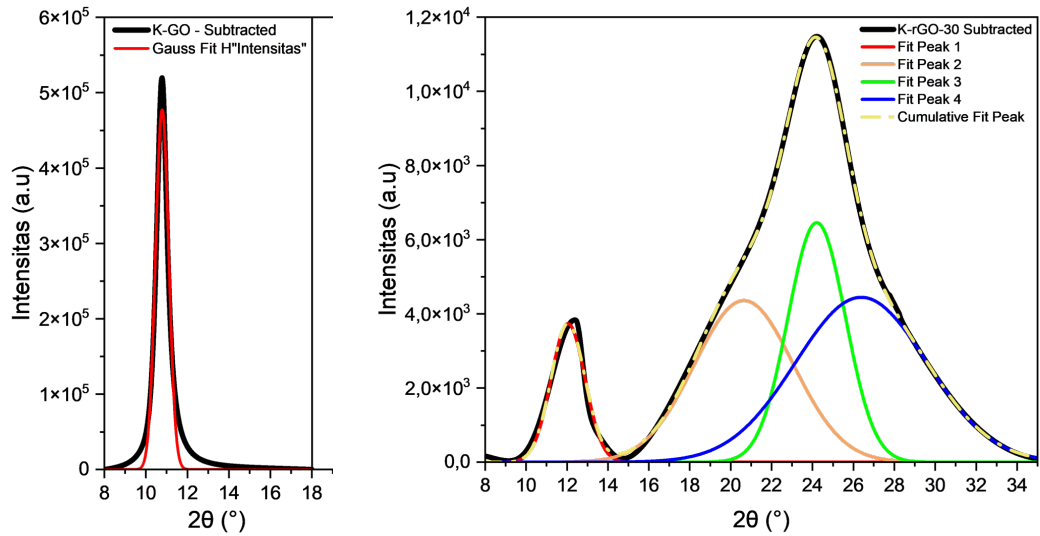
Ketika pemilihan puncak telah dilakukan, maka selanjutnya dilakukan penyesuaian parameter y_0 atau nilai awal yang digunakan saat pembentukan kurva dekomposisi. Nilai y_0 pada proses dekomposisi kedua kurva data XRD dibuat menjadi bernilai 0, karena data XRD tersebut sudah tidak memiliki *noise* sehingga tidak perlu mengambil nilai rata-rata. Dari dekomposisi yang dilakukan pada kurva data XRD GO dan rGO diperoleh kurva hasil dekomposisi pada Error! Reference source not found. yang menggunakan pendekatan fungsi Gauss. Selanjutnya, pada Error! Reference source not found.5 diperlihatkan kurva hasil dekomposisi kurva data XRD GO dan rGO yang menggunakan pendekatan fungsi Lorentz. Parameter yang diperoleh dari dekomposisi pola difraksi GO dan rGO, yang menggunakan pendekatan fungsi Gauss dan fungsi Lorentz, berturut-turut diperlihatkan pada Error! Reference source not found. dan Tabel 1.



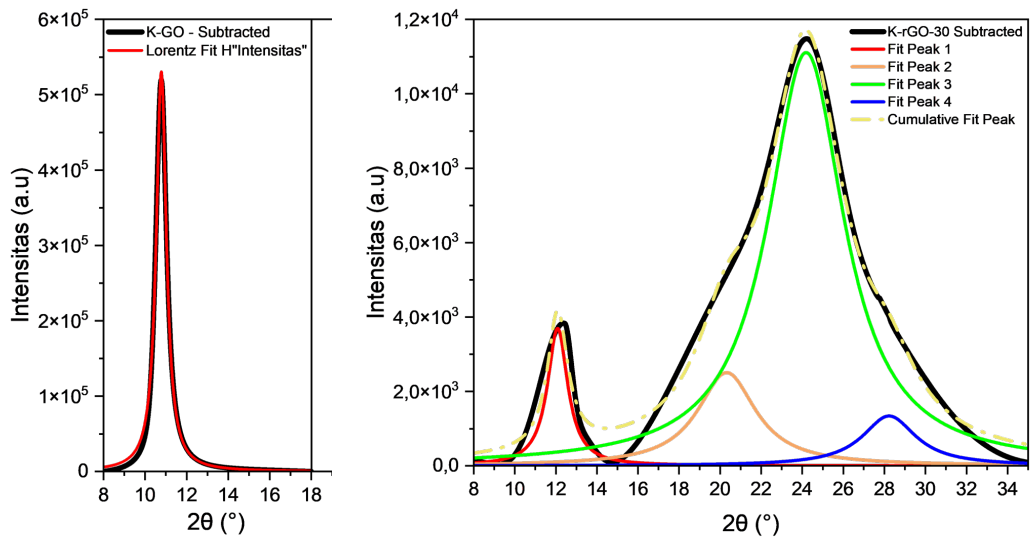
Gambar 3. Perubahan nilai R-square terhadap jumlah fungsi yang digunakan dalam dekomposisi

Hasil dekomposisi data XRD GO yang menggunakan pendekatan fungsi Gauss memiliki nilai $R^2 = 0,977$ dan yang menggunakan pendekatan fungsi Lorentz memiliki nilai $R^2 = 0,997$. Nilai *R-square* tersebut menunjukkan bahwa dekomposisi kurva data XRD GO dengan pendekatan fungsi Lorentz merupakan pendekatan yang lebih tepat dibandingkan dengan yang menggunakan pendekatan fungsi Gauss. Hal ini juga terlihat secara visual, bahwa fungsi Lorentz menghasilkan puncak kurva yang lebih runcing dibandingkan fungsi Gauss, sehingga sesuai dengan karakteristik yang dimiliki oleh pola data XRD GO.

Hasil dekomposisi data XRD rGO yang menggunakan pendekatan fungsi Gauss memiliki nilai $R^2 = 0,999$ dan yang menggunakan pendekatan fungsi Lorentz memiliki nilai $R^2 = 0,989$. Nilai *R-square* tersebut menunjukkan hal yang berbalikan dengan hasil dekomposisi data XRD GO. Pada dekomposisi data rGO nilai *R-square* dengan pendekatan fungsi Gauss memiliki nilai yang lebih tinggi dibandingkan nilai *R-square* dengan pendekatan fungsi Lorentz. Dengan demikian, dekomposisi data XRD rGO lebih tepat untuk menggunakan pendekatan fungsi Gauss. Secara visual terlihat bahwa fungsi Gauss membentuk puncak yang lebih landai dibandingkan fungsi Lorentz, hal tersebut bersesuaian dengan puncak difraktogram rGO yang melebar, terutama pada puncak kedua yang merupakan hasil superposisi dari tiga puncak.



Gambar 2. Hasil dekomposisi data XRD GO (a) dan rGO (b) dengan pendekatan fungsi Gauss



Gambar 3 Hasil dekomposisi data XRD GO (a) dan rGO (b) dengan pendekatan fungsi Lorentz

Parameter 2θ hasil dekomposisi data XRD GO menggunakan pendekatan fungsi Lorentz menghasilkan $2\theta = 10,781^\circ$. Dalam beberapa referensi dilaporkan bahwa karakterisasi GO menggunakan XRD menghasilkan nilai 2θ sebesar $9,7^\circ$ [4], $10,9^\circ$ [5], $11,1^\circ$ [6], dan $11,8^\circ$ [7], sehingga dapat dikatakan bahwa nilai 2θ GO berada di rentang $9,5^\circ - 12,5^\circ$. Oleh karena itu, setiap puncak tunggal hasil dekomposisi yang memiliki nilai 2θ berada pada rentang $9,5^\circ - 12,5^\circ$ dapat didefinisikan sebagai material GO.

Xiabiobin Chen *et al.* mengestimasi jarak antar lapisan dari grafit melalui pendekatan nilai energi dan mendapatkan jarak antar lapisan grafit adalah $d = 3,231 \text{ \AA}$ [8]. Nilai tersebut dapat dijadikan sebagai acuan nilai terendah dari jarak antar lapisan. Dengan menggunakan pendekatan Hukum Bragg pada **persamaan (3)** didapatkan jarak tersebut berkaitan dengan posisi 2θ sebesar $27,6^\circ$. Setiap *peak* hasil dekomposisi kurva data XRD dapat didefinisikan sebagai fase suatu material dengan mencocokkan nilai 2θ hasil pengukuran XRD terhadap nilai 2θ referensi.

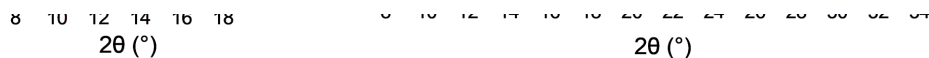
Tabel 1. Parameter hasil dekomposisi kurva data XRD GO dengan pendekatan fungsi Gauss dan fungsi Lorentz

Fungsi	Parameter		xc	w	A	d (Å)	R-square
	Keterangan		2θ (°)	β (°)	I (a.u)		R²
Gauss	Peak	GO fase 1	10,783	0,632	377925,839	8,197	0,977
Lorentz	Peak	GO fase 1	10,781	0,587	489355,550	8,199	0,997

Tabel 1. Parameter hasil dekomposisi kurva data XRD rGO dengan pendekatan fungsi Gauss dan fungsi Lorentz

Fungsi	Parameter		xc	w	A	d (Å)	R-square
	Keterangan		2θ (°)	β (°)	I (a.u)		R²
Gauss	Peak 1	GO fase 2	12,051	1,656	7750,216	7,338	0,999
	Peak 2	rGO fase 1	20,648	4,828	26378,464	4,298	
	Peak 3	rGO fase 2	24,209	2,805	22705,287	3,673	
	Peak 4	rGO fase 3	26,382	6,406	35694,839	3,375	
Lorentz	Peak 1	rGO fase 1	12,086	1,201	6966,703	7,316	0,989
	Peak 2	rGO fase 2	20,321	3,449	13580,030	4,366	
	Peak 3	rGO fase 3	24,188	4,518	78827,344	3,676	
	Peak 4	(-)	28,230	3,175	6687,471	3,158	

Dengan membandingkan puncak difraksi 2θ GO pada



Gambar 3(a) dan **Error! Reference source not found.** dengan puncak difraksi 2θ GO referensi, maka dapat dikatakan bahwa puncak difraksi $2\theta = 10,781^\circ$ merupakan puncak difraksi dari GO. Dengan menggunakan persamaan Hukum Bragg, diperoleh nilai jarak antar lapisan $8,199\text{\AA}$. Hasil analisis tersebut menghasilkan nilai FWHM dari puncak GO sebesar $w = 0,587^\circ$ dengan intensitas sebesar $A = 489355,550 \text{ a.u.}$ Pada Tabel 1 dan **Gambar 2(b)** diperlihatkan hasil dekomposisi data XRD rGO dengan pendekatan fungsi Gauss yang terdiri dari empat puncak tunggal. Pemilihan jumlah puncak tersebut berdasarkan nilai *R-square* yang paling optimum seperti yang sudah dijelaskan sebelumnya pada **Error! Reference source not found.** Pada Tabel 1 diperlihatkan ada empat buah puncak hasil dekomposisi yaitu $2\theta = 12,051^\circ$; $20,648^\circ$; $24,209^\circ$; dan $26,382^\circ$, yang masing-masing berkaitan dengan intensitas $7750,216 \text{ a.u.}$; $26378,464 \text{ a.u.}$; $22705,287 \text{ a.u.}$; dan $35694,839 \text{ a.u.}$ Dengan menggunakan persamaan Hukum Bragg, diperoleh nilai jarak antar lapisan untuk setiap puncak adalah $7,338\text{\AA}$; $4,298\text{\AA}$; $3,673\text{\AA}$; dan $3,375\text{\AA}$.

Puncak pertama (*peak 1*) memiliki nilai $2\theta = 12,05^\circ$ dan berada pada rentang 2θ GO referensi. Oleh sebab itu, puncak 1 dapat dikategorikan sebagai GO fase 2, yaitu GO yang tersisa pada sampel setelah proses reduksi termal dilakukan. Alasan *peak 1* didefinisikan sebagai GO fase 2 karena posisi 2θ sampel GO telah dijadikan sebagai acuan dari proses reduksi dan dinamakan sebagai GO fase 1. Puncak yang kedua (*peak 2*) hingga puncak keempat (*peak 4*) memiliki nilai 2θ di antara 2θ GO referensi dan 2θ grafit referensi sehingga puncak tersebut dikategorikan sebagai rGO fase 1 hingga rGO fase 3. Terbentuk 3 buah fase rGO dikarenakan nilai 2θ yang dimiliki bukanlah kelipatan orde rGO yang sama, sehingga setiap *peak* didefinisikan sebagai fase rGO yang berbeda. Adanya beberapa fase rGO yang dihasilkan pada proses reduksi termal selama 30 menit menunjukkan proses reduksi tersebut berlangsung secara tidak homogen. Nilai 2θ dari rGO fase 3 merupakan nilai yang paling dekat dengan 2θ grafit referensi, sehingga karakteristiknya yang paling menyerupai grafena. Hasil-hasil yang sudah diuraikan di atas memperlihatkan pola difraksi rGO memiliki gabungan puncak GO dan puncak rGO sehingga dapat dikatakan bahwa proses reduksi termal pada suhu 250°C selama 30 menit belum dapat mereduksi fase GO secara menyeluruh.

4. Kesimpulan

Telah dilakukan dekomposisi data XRD GO dan data XRD rGO, hasil reduksi termal selama 30 menit, dengan menggunakan pendekatan fungsi Gauss dan fungsi Lorentz. Hasil dekomposisi, yang berpatokan dengan nilai *R-square* yang lebih tinggi, menunjukkan data XRD GO lebih tepat jika menggunakan pendekatan fungsi Lorentz, sedangkan data XRD rGO lebih tepat jika menggunakan pendekatan fungsi Gauss. Dekomposisi data XRD GO menghasilkan sebuah puncak dengan nilai $2\theta = 10,781^\circ$ yang berkaitan dengan jarak antar lapisan $d = 8,2 \text{\AA}$. Dekomposisi data XRD rGO menghasilkan empat puncak yang dikategorikan sebagai GO fase 2 untuk puncak pertama dan rGO fase 1 hingga fase 3 untuk puncak kedua hingga puncak keempat. Fase rGO yang diperoleh memiliki tingkat homogen yang rendah, karena memiliki nilai 2θ yang beragam. Hal tersebut menunjukkan reduksi pada suhu 250°C selama 30 menit belum dapat mereduksi GO secara menyeluruh.

5. Ucapan Terima Kasih

Penelitian ini didanai oleh Hibah Penelitian Dasar Unggulan Perguruan Tinggi (PDUPT) nomor kontrak 2064/UN6.3.1/PT.00/2022 tanggal 17 Maret 2022.

Daftar Pustaka

- [1] Masruroh, A. B. Manggara, T. Papilaka, and R. T. T. (2013). *Penentuan ukuran Kristal (crystallite size) lapisan tipis PZT dengan metode XRD melalui pendekatan persamaan Debye Scherrer*. *Erud. J. Educ. Innov.*, vol. 1, no. 2, pp. 24-29.
- [2] B. Lanson. (1997). *Decomposition of Experimental X-Ray Diffraction Patterns (Profile Fitting): A Convenient Way to Study Clay Minerals*. *Clays Clay Miner.*, vol. 45, no. 2, pp. 132-146.
- [3] B. L. Najati. (2021). *Sintesis dan Karakterisasi Reduced Graphene Oxide dari Arang Tempurung Kelapa Menggunakan Metode Solid State*. Skripsi Sarjana. Fisika FMIPA Unpad.
- [4] C. Li et al. (2021). *Effect of long-term ageing on graphene oxide: structure and thermal decomposition*. *R. Soc. Open Sci.*, vol. 8, no. 202309, pp. 1-13.
- [5] K. Bansal, J. Singh, and A. S. Dhaliwal. (2022). *Synthesis and characterization of Graphene Oxide and its reduction with different reducing agents*. *IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng.*, vol. 1225, no. 012050, pp. 1-8.
- [6] A. Taratayko, E. Kolobova, and G. Mamontov. (2022). *Graphene Oxide Decorated with Ag and CeO₂ Nanoparticles as a Catalyst for Room-Temperature 4-Nitrophenol Reduction*. *Catalysts*, vol. 12, no. 1393, pp. 1-23.
- [7] A. Alkhouzaam et al. (2022). *Spectral and Structural Properties of High-Quality Reduced Graphene Oxide Produced via a Simple Approach Using Tetraethylenepentamine*. *Nanomaterials*, vol. 12, no. 8, pp. 1240.
- [8] X. Chen, F. Tian, C. Persson, W. Duan, and N. Chen. (2013). *Interlayer Interactions in Graphites*. *Sci. Rep.*, vol. 3, no. 3046, pp. 1-5.