

RINGKASAN

Hidrogen sulfida (H_2S) dan sulfur dioksida (SO_2) adalah gas beracun yang berdampak serius pada kesehatan manusia dan lingkungan, sehingga memerlukan deteksi yang cepat, sensitif, dan selektif. Grafena memiliki konduktivitas listrik tinggi dan stabilitas mekanik yang baik, namun interaksinya dengan molekul gas relatif lemah, membatasi performa sensornya. Untuk mengatasinya, heterostruktur grafena/heksagonal boron nitrida (G/h-BN) dikembangkan karena kestabilan mekanik dan sifat elektronik yang lebih baik. Penelitian ini memanfaatkan metode komputasi Density Functional Theory (DFT) untuk mengevaluasi kemampuan G/h-BN, baik murni maupun dengan modifikasi cacat atom boron (B) dan nitrogen (N), dalam mendeteksi H_2S dan SO_2 .

Penelitian dilakukan secara komputasi menggunakan perangkat lunak Quantum ESPRESSO dengan basis plane wave dan pseudopotential. Sistem yang dimodelkan meliputi grafena murni, G/h-BN murni, serta G/h-BN dengan cacat atom B dan N. Simulasi mencakup optimasi struktur, perhitungan energi adsorpsi, analisis kerapatan keadaan elektron (*Density of States*), fungsi kerja (*work function*), dan estimasi waktu pemulihan adsorpsi gas. Molekul H_2S dan SO_2 dimodelkan dalam berbagai orientasi adsorpsi untuk menentukan konfigurasi paling stabil. Data hasil perhitungan kemudian dianalisis untuk menilai pengaruh keberadaan lapisan h-BN dan cacat kristal terhadap sifat mekanik, elektronik, dan kinerja sensor gas.

Hasil simulasi menunjukkan bahwa G/h-BN memiliki interaksi antarlapisan yang stabil dengan energi $-0,75$ eV dan fungsi kerja meningkat dari $4,42$ eV menjadi $4,59$ eV. Lapisan h-BN sedikit meningkatkan energi adsorpsi ($\sim 0,01$ eV) dan secara signifikan mempercepat waktu pemulihan ($0,3$ fs untuk H_2S dan $0,001$ fs untuk SO_2), meskipun menurunkan kekuatan mekanik. Cacat atom B meningkatkan kekuatan mekanik dan kemampuan adsorpsi terhadap H_2S , sedangkan cacat atom N lebih selektif terhadap SO_2 namun menurunkan ketahanan mekanik. Perubahan pada kerapatan keadaan elektron akibat cacat ini menunjukkan bahwa rekayasa struktur dapat meningkatkan sensitivitas dan selektivitas sensor. Secara keseluruhan, G/h-BN dengan rekayasa cacat atomik menawarkan platform sensor gas yang efisien dan berpotensi tinggi untuk deteksi H_2S dan SO_2 .